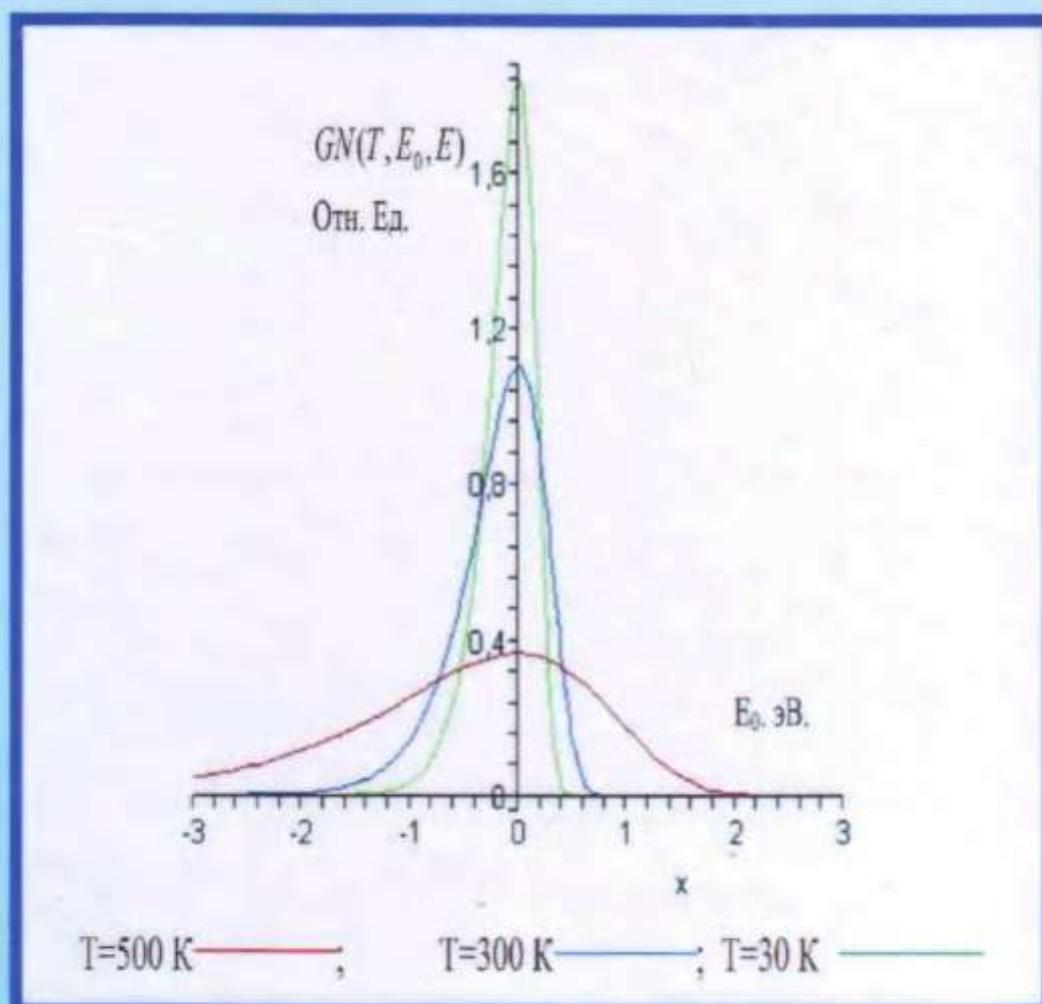


Г. Гулямов Н. Ю. Шармбаев
У. И. ЭРКАБОВЕВ

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ



Г.ГУЛЯМОВ Н.Ю.ШАРИБАЕВ У.И.ЭРКАБОВ

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ
ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Издательство «Наманган»
2015

УДК 621.315.592

84(2Рус)6

Г-76

Плотность энергетических состояний полупроводников является одной из основных характеристик материала, которая определяет как электрические, так и оптические свойства материала. Настоящая монография посвящена исследованию температурной зависимости плотности поверхностных и объёмных состояний, температурной зависимости ширины запрещенной зоны полупроводника. Рассмотрена температурная зависимость плотности состояний в сильных квантующих магнитных полях. Предлагаются новые методы определения плотности энергетических состояний с помощью математического моделирования процессов перезарядки дискретных состояний в запрещённой зоне полупроводника.

Для специалистов в области физики полупроводников и полупроводниковых приборов, научных работников, преподавателей и студентов высших учебных заведений.

Табл. 5 Рис. 104 Библ.245.

Рецензенты:

Доктор ф.- м.н., профессор

Кандидат ф.- м.н., доцент

А.Ю.Лейдерман,

Х.О.Кучкаров

ISBN 978-9943-4501-7-2

© Г.Гулямов Н.Ю.Шарибаев

У.И.Эркабоев

©Издательство «Наманган», 2015 г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	8
ГЛАВА 1. Плотность поверхностных состояний и термические переходы в МДП-структурах.....	11
1.1 Термогенерация носителей заряда с поверхностных состояний границы раздела $Si-SiO_2$	11
1.2. Плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик в МДП-структуре.....	24
1.3. Определение плотности поверхностных состояний в приборах с зарядовой связью	29
ГЛАВА 2. Вероятность опустошения поверхностных состояний $\rho(t,E)$ и математическая модель процесса определения плотности поверхностных состояний	35
2.1. Вероятность генерации захваченных носителей зарядов $\rho(t,E)$ и её связь со ступенчатой функцией ...	36
2.2. Производная по энергии от вероятности опустошения энергетического состояния $G_N(t,E)$ и её связь с дельта-функцией Ферми-Дирака	40
2.3. Математическая модель процесса определения плотности поверхностных состояний на границе раздела диэлектрик-полупроводник	48
ГЛАВА 3. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si	50
3.1. Исследование температурной зависимости плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si $N_{ss}(E,T)$ с помощью модели	51
3.2. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si	55

3.3. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2 - Si и SiO_2 - $n-Si<Ni>$	59
3.4. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2 - Si облученного γ – лучами	65
Глава 4. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны	71
4.1. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны в полупроводниках и объяснение эффекта с помощью математической модели	71
4.2. Температурная зависимость плотности поверхностных состояний и ширины запрещённой зоны полупроводника	76
ГЛАВА 5. Энергетический спектр свободных электронов в полупроводниках в квантующем магнитном поле	84
5.1. Методы определения температурной зависимости эффективной плотности состояний и ширины запрещённой зоны в полупроводниках	85
5.2. Электронные состояния с квадратичным законом дисперсии.....	92
5.3. Идеальный газ электронов в квантующем магнитном поле.....	97
ГЛАВА 6. Исследование температурной зависимости эффективной массы плотности состояний.....	106
6.1. Расчёт влияния эффективной массы электронов на температурную зависимость ширины запрещённой зоны в твёрдых растворах $p-Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$	108
6.2. Математическое моделирование температурной зависимости ширины запрещённой зоны и сравнение теории с экспериментом.....	115

ГЛАВА 7. Определение уровня Ландау в квантующем магнитном поле.....	120
7.1. Производная по энергии от функции заполнения энергетических уровней дискретных состояний	120
7.2. Влияние температуры на термодинамическую плотность состояний в квантующем магнитном поле	124
7.3. Моделирование температурной зависимости плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле.....	129
7.4. Циклотронная эффективная масса и температурная зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле.....	133
ГЛАВА 8. Исследование осцилляционных явлений в квантующем магнитном поле с помощью математической модели.....	139
8.1. Обработка экспериментальных результатов с помощью предложенной модели.....	140
8.2. Исследование температурной зависимости осцилляции магнитной восприимчивости полупроводников.....	144
8.3. Эффект де Гааза-ван Альфена при высоких температурах и слабых магнитных полях в полупроводниках.....	149
ГЛАВА 9. Температурная зависимость коэффициента поглощения света в полупроводниках	154
9.1. Температурная зависимость термодинамической плотности состояний и правило Урбаха	154
9.2. Длинноволновый край фундаментального поглощения и термодинамическая плотность состояний	161
Приложение.....	167
ЛИТЕРАТУРА.....	183

Список условных обозначений, единиц, символов и терминов

МДП-металл-диэлектрик-полупроводник.

ОС -объединённый слой.

ПЗС-прибор с зарядовой связью.

ППС-плотность поверхностных состояний.

ПС-плотность состояния.

ЗП-зона проводимости.

ВЗ-валентная зона.

ЗЗ-запрещённая зона.

ШЗЗ-ширина запрещённой зоны.

E_g – энергетическая ширина запрещённой зоны.

E_{g0} – энергетическая ширина запрещённой зоны при $T=0$.

E_c – энергетическая граница зоны проводимости.

E_v – энергетическая граница валентной зоны.

$\tau(t, T)$ - время генерации на уровне с энергией E при температуре T .

$E_0(t, T)$ – энергия электрона, которая освободилась из состояния за время t при температуре T .

$\rho(t, E)$ - функция вероятности опустошения на уровне энергии с E .

$GN(E)$ - производная по энергии от функции вероятности опустошения.

$\delta(E_0 - E)$ - дельта-функция Дирака

β -коэффициент температурной зависимости ширины запрещённой зоны.

n_{cr} -критическая концентрация состояний на границе между запрещённой и разрешённой

дГвА- де Гааза-ван Альфена.

ШдГ- Шубникова- де Газа.

m^* -эффективная масса.

ВВЕДЕНИЕ

Подавляющее большинство современных микроэлектронных устройств содержит в себе структуры, использующие свойства контакта металл-диэлектрик-полупроводник (МДП). Зависимость характеристик таких полупроводниковых приборов от электронных процессов на границе раздела диэлектрик-полупроводник является основной причиной появления нестабильности в их работе и необратимых изменений их параметров, приводящих к полевой деградации и преждевременному выходу приборов из строя. В настоящее время отсутствуют исчерпывающие модели границы раздела диэлектрик-полупроводник. Исследование в этой области при экстремальных условиях очень сложно (проведение эксперимента при низкой температуре). Создание таких моделей в теоретическом плане даёт возможность дальнейшего развития представлений о физических процессах, протекающих на границе раздела, а в практическом плане позволяет существенным образом улучшить параметры приборов, созданных на базе таких структур. В связи с этим математическое моделирование (определение плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si), изучение характеристик границы раздела диэлектрик-полупроводник (характера и распределения дефектов в окисле и на поверхности

полупроводника), являются актуальной научной и практической задачей.

В работе [1] изучена временная зависимость генерационно-рекомбинационных процессов на границе раздела полупроводник диэлектрик, обусловленная тепловыми переходами, где показана возможность определения плотности поверхностных состояний с помощью прибора с зарядовой связью (ПЗС) на кремниевой основе и предложена связь энергии состояния со временем генерации электрона с этого уровня. Определены спектры плотности поверхностных состояний на границе раздела в МДП структурах на базе SiO_2-Si . В.В. Пospelовым и Р.А. Сурисом [2], ёмкостными и релаксационными методами определены плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si , которые при температуре выше жидкого азота рассматриваются как сплошной спектр. Природа поверхностных уровней является дискретной, а дискретный спектр плотности поверхностных состояний МДП-структуры на базе SiO_2-Si из-за термического уширения энергетических состояний не определён, поэтому они с ростом температуры возрастают. Следовательно, температура жидкого азота недостаточна для определения дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si . Дальнейшее понижение температуры приведет к

сильному замедлению электронно-дырочных процессов и усложняет проведение эксперимента. Поэтому наиболее предпочтительным для исследования плотности поверхностных состояний является метод математического моделирования.

Монография представляет собой обобщение работ, выполненных авторами за последние десять лет.

Предисловие, введение и главы 1-4, 9 написаны Г. Гулямовым и Н. Ю. Шарипбаевым, главы 5-8 и приложения совместно Г. Гулямовым и У. И. Эркабоевым.

ГЛАВА 1. ПЛОТНОСТЬ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ И ТЕРМИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В МДП-СТРУКТУРАХ

Нестабильность приповерхностных ловушек на границе раздела $Si-SiO_2$ является одним из основных факторов, ограничивающих надёжное функционирование приборов МОП-технологии, в частности МОП-транзисторов. Плотности состояний могут изменяться в результате внешних воздействий. Для определения плотности поверхностных состояний используются методы, включающие эффект термогенерации (например НЧ $C-V$ метод, ВЧ $C-V$ метод, метод DLTS и др.).

В этой главе приведены результаты изучения термогенерации носителей заряда с поверхностных состояний границы раздела полупроводник-диэлектрик МДП-структур. Предложен метод определения плотности поверхностных состояний на границе раздела $Si-SiO_2$ с помощью ПЗС.

1.1. Термогенерация носителей заряда с поверхностных состояний границы раздела $Si-SiO_2$

Рассмотрим МДП-структуры с обеднённым слоем (ОС). После приложения импульса напряжения на металлический электрод, зарядовый пакет в потенциальной яме с течением времени изменяется, так

как к нему добавляются носители, термически генерированные в ОС и на поверхности, а также диффундирующие из объёма полупроводника.

Рассмотрим компоненты этого темнового тока более подробно. Термогенерируемые в ОС электронно-дырочные пары разделяются электрическим полем. В n -канальной МДП-структуре под действием поля ОС, дырки выбрасываются в нейтральный объём полупроводника, а электроны уходят к поверхности и добавляются к зарядовому пакету, локализованному в узком инверсном слое. Процессы термогенерации в ОС МДП-структуры и обратно смещенного p - n - перехода примерно одинаковы. Отличие состоит в том, что ширина p - n - перехода определяется только приложенным напряжением и не зависит от времени, а в МДП-структуре термогенерируемые заряды увеличивают степень заполнения потенциальной ямы, что приводит к уменьшению поверхностного потенциала и, как следствие, уменьшению ширины обеднённого слоя. Наиболее интенсивно термогенерация идет через уровни, расположенные вблизи середины запрещённой зоны E_i . Рассмотрим одиночный уровень E_t , расположенный вблизи E_i . Пусть концентрация состояний (центров, ловушек) с уровнем E_t равна N_t .

Для анализа воспользуемся общими выражениями, описывающими по Шокли и Риду процессы генерации-

рекомбинации через одиночные примесные уровни (центры) [3-4]. Вероятность перехода электрона из валентной зоны на уровень E_t пропорциональна числу свободных уровней $\beta_p N_t (1-f)$, где f – степень заполнения центров электронами; β_p – коэффициент пропорциональности. Вероятность перехода электрона с уровня E_t в валентную зону пропорциональна числу заполненных уровней и концентрации дырок в валентной зоне $\gamma_p p N_t f$, где коэффициент $\gamma_p = \sigma_p v_T$, σ_p – сечение захвата дырки данным центром; v_T – тепловая скорость. Таким образом, скорость изменения концентрации подвижных дырок, как следствие этого процесса, равна [5-6]:

$$\left(\frac{dp}{dt}\right)_r = \beta_p N_t f \quad (1.1)$$

Если полупроводник находится в состоянии термодинамического равновесия, то $\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_r = 0$, концентрация дырок равна равновесной $p-p_0$, а степень заполнения центров описывается равновесной функцией распределения [5,6]

$$f_0 = \left[\exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1}$$

где E_F – уровень Ферми. Используя это условие, определяем коэффициент β_p [5,6]:

$$\beta_p N_t = \left(1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) + 1} \right) - \gamma_p n_i \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right) N_t \frac{1}{\exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) + 1} = 0$$

Отсюда

$$\beta_p = \gamma_p n_i \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right) = \gamma_p p_i \quad (1.2)$$

где $p_i = n_i \exp\left(-\frac{E_t - E_F}{kT}\right)$ и имеет следующий физический смысл: p_i – есть равновесная концентрация дырок в таком полупроводнике, у которого $E_F = E_T$. Рассматривая аналогично захват электронов из зоны проводимости на центры с уровнем E_t и их обратную эмиссию, определим скорость изменения концентрации электронов под действием генерации-рекомбинации [3]:

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_r = -\gamma_n N_t [n(1-f) - n_i f] \quad (1.3)$$

где $\gamma_n = \sigma_n v_T$; σ_n – сечение захвата электронов; $n_i = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right)$. Суммарное изменение числа электронов на центрах с учётом их обмена с зоной проводимости и с валентной зоной равно [5,6]:

$$N_t \frac{dn}{dt} = -\left(\frac{dn}{dt}\right)_r + \left(\frac{dp}{dt}\right)_r$$

Применим теперь общее выражение (1.3) к Расчёту процесса термогенерации в ОС МДП-структуры. Пусть первоначально структура находилась в состоянии термодинамического равновесия при $U_g = 0$. В некоторый

момент времени на затвор поступает прямоугольный положительный перепад, вызывающий практически мгновенное образование ОС (время ухода дырок – основных носителей от поверхности не превышает 10^{-12} с). Концентрации электронов и дырок в ОС равны нулю, $n=p=0$, так как образующиеся электронно-дырочные пары разделяются электрическим полем, и дырки уходят в объём полупроводника, а электроны – к поверхности; по этой же причине в ОС $\frac{dp}{dt} = \frac{dn}{dt} = 0$. Уравнение (1.3) переписывается так,

$$\frac{df}{dt} = -(\gamma_n n_1 + \gamma_p p_1) f + \gamma_p p_1 \quad (1.4)$$

Уравнение (1.4) описывает процесс изменения степени заполнения центров E_b , т.е. относительного количества электронов на центрах. Начальным условием является равновесная функция распределения [5,6]:

$$f(t=0) = f_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) + 1}$$

Решение (1.4) экспоненциально во времени [5,6]:

$$f(t) = b(1 - \exp(-t/\tau)) + f_0 \exp(-t/\tau) = b \left[1 - \left(1 - \frac{f_0}{b}\right) \exp(-t/\tau) \right], \quad (1.5)$$

Где $\tau = 1/(\gamma_n n_1 + \gamma_p p_1)$; $b = \gamma_p p_1 \tau$. С течением времени степень заполнения центров электронами увеличивается и, следовательно, увеличивается скорость генерации электронов с уровня E_t в зону проводимости. Используя

(1.3) и (1.5), получаем выражение для числа носителей, генерируемых в единице объёма ОС: [5,6]

$$g = \left(\frac{dn}{dt} \right) = \gamma_n n_1 N_n f(t) = \gamma_n n_1 N_n b \left[1 - \left(1 - \frac{f_0}{b} \right) \exp(-t/\tau) \right] \quad (1.6)$$

$$n(t) = \gamma_n n_1 N_n b \left[1 - \left(1 - \frac{f_0}{b} \right) \tau (1 - \exp(-t/\tau)) \right] \quad (1.7)$$

Вид зависимостей (1.6), (1.7) показан на рис. 1.1. Если считать, что $\sigma_n = \sigma_p = \sigma$ центры генерации расположены точно в середине запрещённой зоны $E_t = E_b$ подложка p -типа, и поэтому уровень Ферми лежит на несколько kT ниже E_t ($E_t - E_F > kT$), то $\gamma_n = \gamma_p = \sigma v_t$, $n_1 = p_1 = n_t$, $f_0 \approx 0$ и (1.6) и (1.7) упрощаются:

$$g = \frac{1}{2} \sigma v_t n_t N_t (1 - \exp(-t/\tau)); \quad (1.8)$$

$$n(t) = \frac{N_t}{4} \left(\frac{t}{\tau} + \exp(-t/\tau) - 1 \right), \quad (1.9)$$

где $\tau = \frac{1}{2} \sigma v_t n_t$. Для типовых значений $\sigma = 5 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$; $v_T = 10^7 \text{ см/с}$; $n_t = 1,2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ постоянные времени $\tau \approx 8$ -мс. Таким образом, при приложении к МДП-структуре прямоугольного импульса напряжения скорость генерации в ОС нарастает постепенно и достигает своего максимального значения через время $(2 \div 3) \tau \approx 15 \div 25$ мс. Если не учитывать зависимость скорости генераций от времени, то из (1.8) получается обычно используемое приближённое выражение: $g = 1/2 \sigma v_t n_t N_t$. Из (1.9) следует,

что для принятых исходных допущений $n=p=0$ количество термогенерированных в ОС электронов монотонно увеличивается со временем. Если ОС в МДП-структуре поддерживается в неизменном состоянии (как в $p-n$ -переходе) благодаря удалению генерированных электронов в соседние элементы, то выражение (1.9) будет справедливо при достаточно больших t . Если же генерированные электроны накапливаются в инверсионном слое данной МДП-структуры, то со временем наступает равновесное состояние, при котором поверхностный потенциал понижается до потенциала инверсии $\varphi_0 \approx 2\varphi_F$, ОС становится узким, концентрациями подвижных электронов и дырок в ОС пренебрегать нельзя ($n \neq 0, p \neq 0$), и генерация уравнивается рекомбинацией. Естественно, в этом случае формула (1.9) становится неприменимой, и для описания процессов следует использовать полную систему кинетических уравнений Шокли-Рида-Холла.

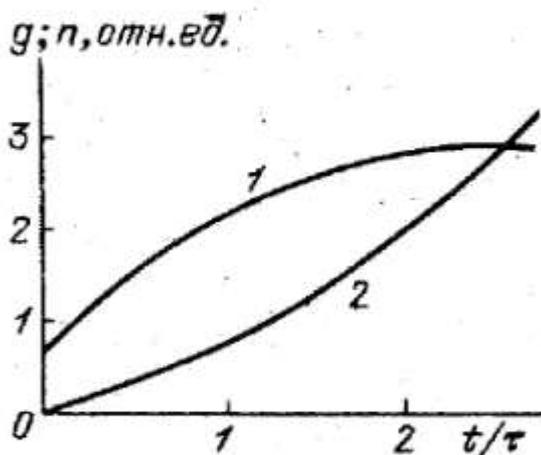


Рис. 1.1. Временные зависимости скорости генерации g (1) и числа генерируемых в ОС носителей n (2) [6]

(1.1), (1.3), (1.4). Рассмотрим поверхностную генерацию носителей в МДП-структуре и различные её стадии. Известно, что на поверхности имеются уровни двух типов: медленные – расположены на границе с окислом и имеющие времена релаксации больше 10^{-3} с, и быстрые – расположенные в приповерхностном слое кремния со временами релаксации порядка 10^{-8} - 10^{-7} с [3,4]. При анализе результатов измерений рассмотрим только быстрые уровни и будем следовать работе [9] применительно к тем режимам, которые свойственны ПЗС. Кинетика изменения объёмных концентраций дырок (p_s) и электронов (n_s) на поверхности полупроводника и степени заполнения центров (ловушек) описывается уравнениями, аналогичными (1.1), (1.2), (1.3), которые мы использовали для анализа генерации в ОС: (1.9) [5,6]

$$\frac{dn_s}{dt} = \gamma_n n_1 N_{ts} \lambda^{-1} f - \gamma_n n_s N_{ts} \lambda^{-1} (1-f) \quad (1.10)$$

$$N_{ts} \frac{df}{dt} = \lambda \left(\frac{dp_s}{dt} - \frac{dn_s}{dt} \right) = \gamma_p p_1 N_{ts} \lambda^{-1} (1-f) - \gamma_p p_s N_{ts} \lambda^{-1} f - \gamma_n n_1 N_{ts} \lambda^{-1} f - \gamma_n n_s N_{ts} \lambda^{-1} (1-f)$$

где N_{ts} - концентрация поверхностных ловушек, см^{-2} ; λ – геометрический параметр, определяющий эффективную толщину области, в которой расположены поверхностные ловушки, так что $N_{ts} \lambda^{-1}$ и $f N_{ts} \lambda^{-1}$ являются эффективными объёмными концентрациями ловушек и электронов на них. В уравнениях (1.9) ÷ (1.11) коэффициенты захвата u_p и u_n относятся к поверхностным ловушкам; их значения могут отличаться от значений коэффициентов объёмных.

Для отдельной оценки влияния генерации на поверхности и в ОС в этих уравнениях не учитывается поток электронов к поверхности, обусловленной генерацией в ОС.

Рассмотрим сначала переключение МДП-структуры в режим инверсии. В исходном состоянии, из-за наличия положительного заряда $Q_{нов}$ на границе раздела диэлектрик-полупроводник, поверхность будет обеднена основными носителями – дырками. Мы этого учитывать не будем, считая, что начальные концентрации носителей у поверхности равны равновесным объёмным, и степень заполнения ловушек равна f_0 . После приложения ступенчатого положительного напряжения дырки практически мгновенно оттесняются от поверхности и $p_s = 0$. Исходная система упрощается до двух уравнений: [5-6]

$$\lambda \frac{dn_s}{dt} = \gamma_n n_1 N_{tr} \lambda^{-1} f - \gamma_n n_s N_{tr} f (1-f) \quad (1.11)$$

$$\frac{df}{dt} = \gamma_p p_1 N_{tr} (1-f) - \gamma_n n_1 f + \gamma_n n_s (1-f) \quad (1.12)$$

В начальной стадии переходного процесса $n_s < n_1$ и членами, содержащими n_s в (1.11), (1.12), можно пренебречь. Уравнение (1.12) имеет вид:

$$\frac{df}{dt} = \frac{b_s}{\tau_s} \left(1 - \frac{f}{b_s} \right), \quad (1.13)$$

где поверхностные параметры $\tau_s = 1/(\gamma_p p_1 + \gamma_n n_1)$ $b_s = \gamma_p p_1 \tau_s$. (1.13) имеет тот же вид, что и (1.5), полученное для ОС.

Начальное условие будет таким же: $f(t = 0) = f_0$, поэтому решение записывается в виде (1.19) [5-6]:

$$f(t) = b_s \left[1 - \left(1 - \frac{f_0}{b_s} \right) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right].$$

(1.14)

Подставляя (1.14) в (1.9) и интегрируя, получаем

$$n(t) = \gamma_n n_1 N_{ts} b_s \left[t - \left(1 - \frac{f_0}{b_s} \right) \tau_s \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_s}\right) \right) \right] + n_0$$

(1.15)

Итак, на начальной стадии число электронов на ловушках увеличивается, и степень заполнения ловушек возрастает от f_0 до $b_s < 1$. Если для поверхностных ловушек $\gamma_n \approx \gamma_p$, $E_{ts} \approx E_t$ и $E_t - E_F \gg kT$, то f возрастает от 0 до 0,5. При этом скорость генерации также возрастает. Затем перезарядка ловушек замедляется, и генерация электронов продолжается с постоянной скоростью равной $\gamma_n n_1 N_{ts} \lambda^{-1} b_s$. Определим ход зависимости $N_{ts} df/dn_s$ во времени. Если разделить (1.12) на (1.11) и учесть, что $n_s \ll n_1$, то получим:

$$\lambda^{-1} N_{ts} \frac{df}{dn_s} = \frac{b_s - f}{\gamma_n n_1 \tau_s f}. \quad (1.16)$$

Из (1.16) видно, что в конце начальной стадии $f \rightarrow b_s$. Поэтому правая часть (1.16) стремится к нулю, т.е. выполняется условие

$$\left| \lambda^{-1} N_{ts} \frac{df}{dn_s} \right| \ll 1 \quad (1.17)$$

Условие (1.17) говорит о том, что степень заполнения ловушек к концу начальной стадии по мере увеличения числа электронов, накапливающихся в потенциальной яме, изменяется очень слабо. В [9] показано, что (1.17) позволяет решать систему (1.11) и (1.12) при $n_s \gg n_l$ квазистационарной стадии процесса. С учётом (1.17) правая часть уравнения (1.12) близка к нулю. Приравняв правую часть к нулю, получая f и подставляя в (1.11), находим: [5,6]

$$\lambda \frac{dn_s}{\tau_s} = \frac{1-b_s}{\tau_s} \frac{N_{ts} b_s}{(1 + \tau_s \gamma_n n_s)}. \quad (1.18)$$

Пренебрегая незначительным количеством электронов, накапливаемых к концу начальной стадии, и перенося начало отсчёта времени в начало квазистационарной стадии, получаем:

$$n_s(t) = \left[\frac{2b_s(1-b_s)N_{ts}t}{\gamma_n \tau_s^2 \lambda} + \frac{1}{\gamma_n^2 \tau_s^2} \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{\gamma_n \tau_s} \quad (1.19)$$

Для времен $t \gg \lambda/2N_{ts}\gamma_n b_s(1-b_s)$ кинетика генерации электронов описывается законом степени 1/2:

$$n_s(t) \approx \left[\frac{2b_s(1-b_s)N_{ts}t}{\tau_s^2 \gamma_n \lambda} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.20)$$

При этом степень заполнения электронами ловушек изменяется, от b_s до стационарного

значения, определяемого из (1.12) при $n_s = n_{s0}$ и $df/dt = 0$. Стационарное значение $f = (\gamma_p p_1 + \gamma_n n_{s0}) / (\gamma_p p_1 + \gamma_n n_1 + \gamma_n n_{s0})$. Если $\gamma_n \approx \gamma_p$, $E_{ts} \approx E_i$ то $p_1 = n_1 - n_b$, $n_{s0} \gg n_i$ и на квазистационарной стадии f изменяется от 0,5 до 1. В конце переходного процесса, когда n_s приближается к равновесной концентрации n_{s0} , уже нельзя пренебрегать потоком электронов с ловушек в валентную зону, где они рекомбинируют с дырками. Концентрацию дырок в этом случае не учитывать также нельзя, так как поверхностный потенциал близок к равновесному значению и отталкивающее поле дырки в полупроводнике мало. Однако, как показано в [9], вклад этой заключительной стадии мал, т.е. можно считать, что практически весь заряд инверсионного слоя (около 99%) генерируется на первых двух стадиях переходного процесса, главным образом на квазистационарной стадии, когда справедливо условие (1.17). В ПЗС режим работы МДП-структуры отличается от рассмотренного выше. После прихода на затвор МДП-структуры тактового импульса, например Φ_3 , на спаде предыдущего импульса Φ_2 (см. рис. 1.2, 1.3) из элемента фазы Φ_2 зарядовый пакет переходит в элемент фазы Φ_1 . Время передачи примерно равно времени спада импульса и составляет 20÷50 нс. По отношению к процессам термогенерации это время мало и можно считать, что

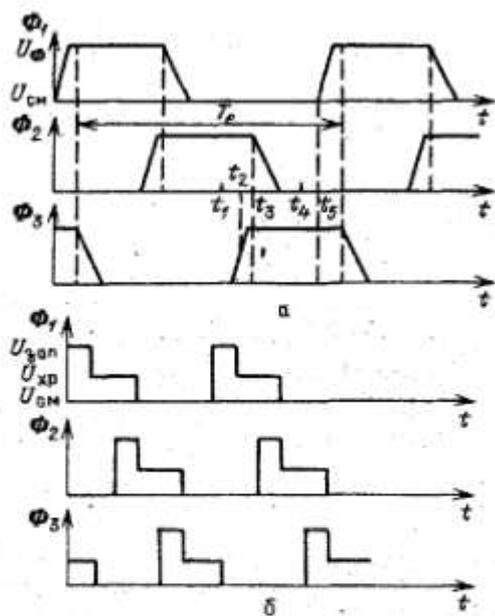


Рис 1.2.
 Временная диаграмма
 трапецидальных (а) и
 двухступенчатых (в) импульсов
 для трёхтактного ПЗС. [6]

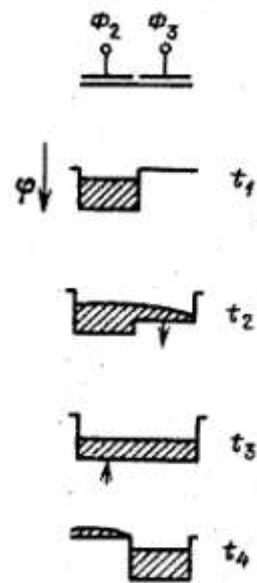


Рис 1.3.
 Распределение
 поверхностного потенциала
 и заряда в различные
 моменты передачи. [6]

заряд поступает в МДП-структуру мгновенно. Поверхностные ловушки практически мгновенно заполняются [10-11]. Постоянного времени захвата на ловушки можно оценить из (1.1.26). Пусть в исходном состоянии МДП-структура находилась в термодинамическом равновесии, и степень заполнения ловушек была равна f_0 . Если полупроводник p -типа, а ловушки имеют уровни в середине запрещённой зоны, то $E_c - E_F \gg kT$ и $f_0 \approx 0$. Будем считать, что зарядовый пакет поверхностной плотностью Q поступает в МДП-структуру одновременно с приходом на её затвор обедняющего

импульса. Для типового значения $Q-10^{-3}$ пК/мкм² и глубине инверсного слоя, в котором локализируются электроны, $x_k \approx 10$ нм, концентрация электронов у поверхности $n_s = Q/(qx_k) \approx 10^{18}$ см⁻³. Концентрации $n_1 \approx p_1 \approx 10^{10}-10^{11}$ см⁻³. Уравнение (1.10) переписывается в виде [5,6]:

$$\frac{df}{dt} = 1 - \gamma_n n_s (1 - f) \quad f(0) \approx 0. \quad (1.21)$$

Решение имеет вид [5,6]:

$$f = 1 - \exp\left[-\frac{t}{1/(\gamma_n n_s)}\right] \quad (1.22)$$

1.2 Плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик в МДП структуре

Особенно большой интерес представляет термическая генерация электронов с поверхностных состояний. Обычно генерационные и рекомбинационные токи определяются как параметром рекомбинационных центров, так и их плотностью состояний. Параметры, описывающие характеристики полупроводника, должны быть, с одной стороны, достаточно общими, чтобы было применимо к любой системе частиц и, с другой стороны, достаточно простыми, чтобы их можно было применить эффективно.

Одно из таких понятий – плотность состояний [12].
Определив каким-либо способом плотность состояний как функцию энергии, мы получаем довольно полную информацию о термодинамических и кинетических характеристиках вещества.

В настоящей работе определяется плотность поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик в приборах с зарядовой связью на основе материалов SiO_2-Si математическим моделированием этого процесса. Следует особо отметить, что плотности поверхностных состояний, определённые из различных экспериментов по разной методике могут различаться. Понятие плотность состояний настолько общая, что ею можно пользоваться даже в случае, когда нельзя пользоваться понятием зона Бриллюэна [12].

В задаче с аддитивным гамильтонианом плотность состояний есть «чисто механическая» величина: согласно [12]

$$\rho(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}).$$

Она определяется дискретным энергетическим спектром системы. При наличии взаимодействия между частицами функция $\rho(E)$ зависит, вообще говоря, от параметров T и F .

Плотности состояний, определённые методом проводимости, и плотности состояний, определённые C -

I -методами в общем случае различаются, как различаются эффективная масса плотности состояний и эффективная масса электропроводимости [13]. Комбинированные плотности состояний могут существенно отличаться от плотности состояний определённых релаксационными методами или методами проводимости.

В работе [2] предложен новый способ измерений малых интегральных плотностей поверхностных состояний на границе между полупроводником и диэлектриком. Оценки показывают, что этот метод позволяет измерять при комнатных температурах плотности состояний вплоть до 10^4 см^{-2} , а при температурах жидкого азота до $1-10 \text{ см}^{-2}$. Но надо учесть, что для этого понадобятся десятки часов времени. Приведены результаты экспериментальной проверки метода на структурах с плотностью состояний порядка 10^{10} см^{-2} .

Результаты экспериментов определения плотности поверхностных состояний вышеуказанными методами получаются в виде сплошного спектра. Причиной этого является тепловое уширение энергетических состояний, вклад которых существенен даже при температуре жидкого азота.

В работах [16÷28] для исследования полупроводников с различными типами дефектов применена упрощенная статистическая модель Шокли-Рида-Холла. В настоящей

работе природа дефектов не учитывается и рассмотрен общий случай. Термическая генерация электронов с поверхностных и объёмных состояний из валентной зоны в зону проводимости и рекомбинация описываются статистикой Шокли-Рида-Холла [11]. Термическая генерация электронов с поверхностных и объёмных состояний $N_{ss}(E)$ после ухода электронов над поверхностными состояниями описываются функцией $\rho(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau(E)}\right)$, здесь $\tau(E)$ время генерации из поверхностного состояния с энергией E . Для конкретного значения t , когда $\tau(E) = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right)$, зависимость $\rho(t, E)$ от E имеет ступенчатый вид, а производная от $\rho(t, E)$ по энергии $GN(E)$ для конкретного $\tau(E)$ имеет U-образный вид. Используя эту особенность $GN(E)$ -функции, можно определить плотность поверхностных состояний.

Во многих ёмкостных методах исследования вероятность опустошения $\rho(t, E)$ заменяется ступенчатой функцией энергии. Выясним, с какой процентной ошибкой можно $\rho(t, E)$ заменять на ступенчатую функцию? Насколько будет отличие плотности поверхностных состояний $N_{ss}(E)$, найденные при $T = 0$ от $T = 300$, т.е. $N_{ss}(E, 0)$ и $N_{ss}(E, 300)$.

Рассмотрим, прежде всего, простейшую ситуацию, когда случайное поле практически отсутствует. При этом, как известно, хвосты плотности состояний не возникают, и, следовательно, в спектре поглощения должна наблюдаться четкая красная граница при $\omega = E_{g,op} / \hbar$. Будем также пренебрегать экситонными эффектами. В этом случае плотность состояний [3]

$$\rho = \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda}) .$$

В случае, когда E_{λ} образует дискретную совокупность, правая часть представляет собой дельтообразные слагаемые типа [12].

$$\rho(E) = N_i \delta(E - E_i)$$

Определив каким-либо способом плотность состояний как функцию энергии, мы получаем довольно полную информацию о термодинамических и кинетических характеристиках вещества [12]. Как оказывается, большая часть кинетических и термодинамических характеристик полупроводника выражена через энергетическую плотность поверхностных состояний. Поэтому, может быть поставлена и разрешена обратная задача – задача определения энергетической плотности поверхностных состояний по экспериментальным данным, касающаяся различных макроскопических характеристик образца. Для выполнения этой работы изложение строится так, чтобы охватить те свойства, которые существенно связаны с

характером энергетической плотности поверхностных и объёмных состояний, излучательных и безызлучательных переходов между энергетическими состояниями, и могут служить методами для его определения. [14, 15]

1.3 Определение плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник – диэлектрик в приборах с зарядовой связью

При пропускании заряда через прибор с зарядовой связью (ПЗС) с поверхностным каналом часть заряда теряется, и эта потеря определяется поверхностными состояниями на границе раздела полупроводник-диэлектрик [1,2,29÷34]. Ясно, что заряд Q_n , оставшийся после $t=nt_0$ времени, где t_0 частота переключений в ПЗС, n – число нулей (холостых переносов), окажется равным, $Q_n = Q_0 - eN(nt_0)$ где Q_0 -начальный заряд, N – количество электронов, генерированных за время nt_0 . Следовательно, N_s – количество электронов на единицу площади можно найти из формулы [1]

$$N_s(t) = \frac{Q_0 - Q_n}{ent_0 S} \quad (1.23)$$

где e – заряд электрона, S – общая площадь электродов в ПЗС.

Это обстоятельство может быть использовано для определения поверхностных состояний на границе

раздела полупроводник-диэлектрик. В работе [1] даётся методика приближённого определения плотности поверхностных состояний с помощью ПЗС.

Для определения плотности поверхностных состояний на границе раздела диэлектрик-полупроводник воспользуемся тем, что скорость эмиссии носителей из поверхностных уровней зависит от энергии состояния следующим образом [1]

$$e_{em} = \sigma v_T N_c \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.24)$$

Экспоненциальная зависимость скорости генерации от энергии позволяет провести резкую границу по энергии между свободными и заполненными поверхностными состояниями. Если все поверхности состояния в момент времени $t=0$ полностью заполнены, то за время t после ухода из поверхности свободных зарядов, ловушки с энергией больше E , в основном, опустошаются, а состояние с меньшей энергией, в основном, полностью заполнены. Граница энергии, разделяющая заполненные и опустошённые состояния, с течением времени сдвигается вглубь запрещённой зоны. Энергия состояния и время генерации связаны соотношением

$$t = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \quad \text{где} \quad \tau^{-1} = \sigma v_T N_c. \quad (1.25)$$

Плотность поверхностных состояний по определению равна [1]

$$N_{ss}(E) = \frac{N_s(E + \Delta E) - N_s(E)}{\Delta E} \quad (1.26)$$

здесь $N_s(E)$ – полное число поверхностных состояний, расположенных ниже энергии E . Используя соотношение (1.25), плотность поверхностных состояний может быть представлена в виде [1]

$$N_{ss}(E(t)) = \frac{t}{kT} \frac{N_s(t + \Delta t) - N_s(t)}{\Delta t} \quad (1.27)$$

Изменение интервала времени можно осуществлять, пропустив через линейный регистр последовательность сигналов нулей и единиц. В этом случае из первой единицы, которая следует после n нулей, на ловушках захватываются электроны, равные пустым ловушкам, которые освободились за время следования нулей. Пусть число электронов, захваченных поверхностными ловушками из первой единицы $N(nt_0)$, здесь n – число нулей, t_0 – период импульсов. За время nt_0 освобождаются почти все уровни, расположенные выше энергии

$E = kT \ln\left(\frac{nt_0}{\tau_0}\right)$. Изменение числа нулей на Δn приведет к дополнительному освобождению электронов, и граница между пустыми и заполненными состояниями сдвинется на ΔE . В этом случае плотность поверхностных состояний и потеря заряда на поверхностных уровнях связаны следующим соотношением [1]

$$N_{ss}(E) = \frac{n}{kT} \frac{N((n + \Delta n)t_0) - N(nt_0)}{\Delta n} \quad (1.28)$$

Здесь $N(nt_0)$ определяется уменьшением высоты первой единицы следующего после n нулей. Если $n \gg \Delta n$, то последнее выражение можно записать в виде [1]

$$N_{ss}(E) = \frac{1}{kT} \frac{dN(nt_0)}{d(\ln(n))} \quad (1.29)$$

В работе [1] приведена зависимость потери заряда в первой "единице" от числа предшествующих нулей. Для применения приведённых формул определения $N_{ss}(E)$ воспользуемся этим графиком, воспроизведённым на рисунке 1.4. На рис. 1.5 приведена плотность поверхностных состояний, вычисленных по данным рис. 1.4. Эти экспериментальные результаты дали возможность определить $N_{ss}(E)$ при комнатной температуре в энергетическом интервале от 0,3 до 0,5 эВ от края ближайшей зоны. Как видно из рисунка 1.5, в указанном интервале $N_{ss}(E)$ меняется больше, чем в четыре раза. Изменяя температуру измерения при заданной частоте, можно определить $N_{ss}(E)$ и в других участках запрещённой зоны. Например, уменьшение температуры образца только в два раза позволяют определить $N_{ss}(E)$ в интервале энергий от 0,15 до 0,25 эВ. Отклонение от линейности экспериментальной зависимости между N и $\ln(n)$ авторы [7] связывают с изменением площади под электродами, которые заняты зарядами первой единицы.

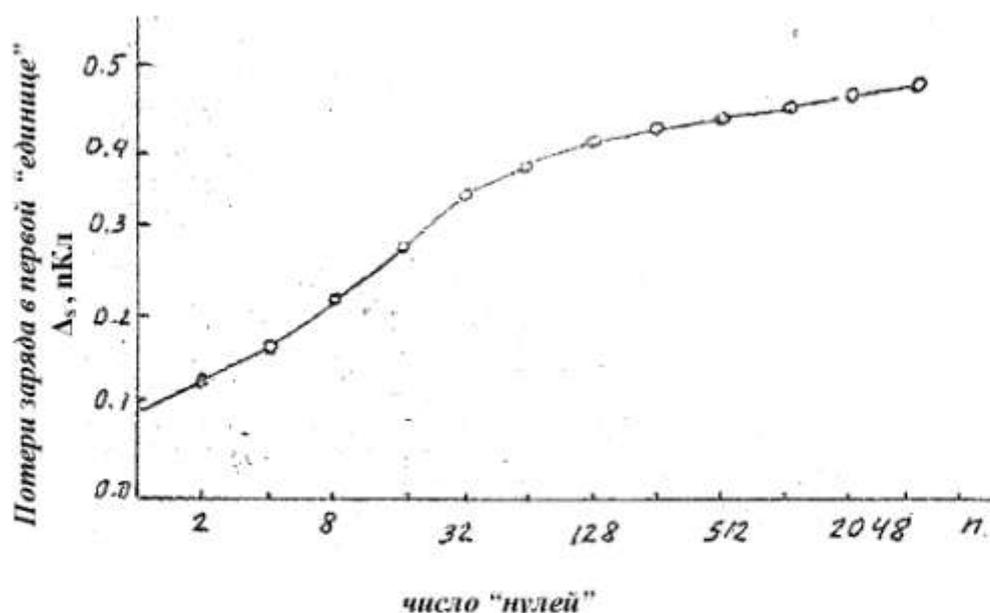


Рис. 1.4. Зависимость потерь заряда в первой "единице" от числа предшествующих "нулей" [1]

Однако, на наш взгляд, причина отклонения от линейности графика рис. 1.4. обусловлена сильной зависимостью плотности поверхностных состояний от энергии. Так, на границе раздела $Si-SiO_2$ плотность поверхностных состояний внутри запрещённой зоны Si может измениться больше, чем на один порядок [15]. Поэтому сильное отклонение графика от линейности нельзя объяснить изменением площади под электродами и другими краевыми эффектами. Определить плотность поверхностных состояний $N_{ss}(E)$ можно и из температурной зависимости потерь заряда на поверхностных состояниях. Для этого, не меняя количество пустых нулей, необходимо снять зависимость потери заряда на первой единице от температуры. Связь энергии с температурой определяется формулой

$E = kT \ln\left(\frac{nt_0}{\tau_0}\right)$. В этом случае, для $N_{ss}(E)$, получим следующую формулу [1]:

$$N_{ss}(E)_{m_0} = \frac{1}{k[2 + \ln(nt_0/T_0)]} \frac{dNnt_0}{dT} \quad (1.30)$$

С помощью этой формулы, изменяя число нулей, можно во всём диапазоне энергий состояний определить плотность поверхностных состояний. Сравнение $N_{ss}(E)_T$, найденное изменением числа нулей n при постоянной температуре и $N_{ss}(E)_{m_0}$, полученное изменением температуры при заданном числе нулей, позволяет более точно определить $N_{ss}(E)$. При правильном измерении и обработке экспериментальных результатов величины $N_{ss}(E)_T$ и $N_{ss}(E)_{m_0}$ должны совпадать.

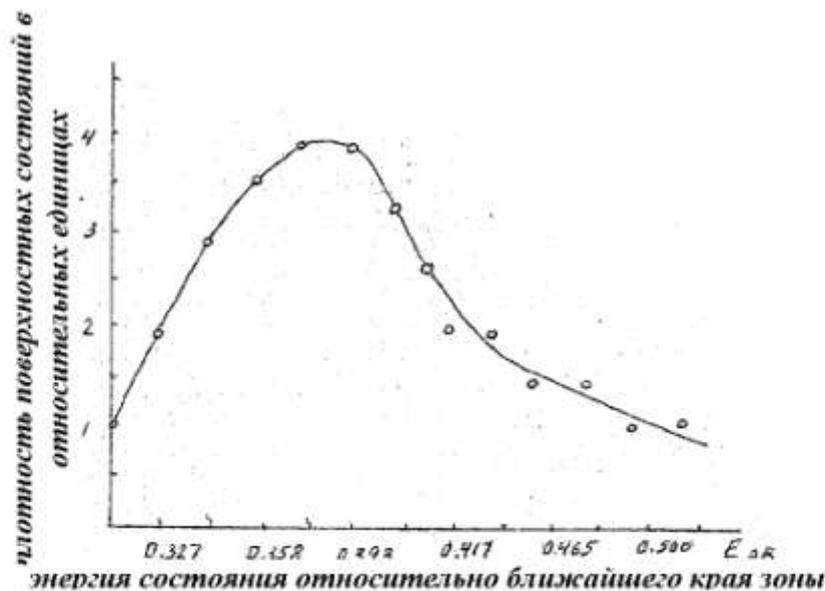


Рис. 1.5. Плотность поверхностных состояний вычисленные из данных рис. 1.4. [1].

Это должно служить доказательством правильности определения $N_{ss}(E)$. Предлагаемая методика позволяет с большой точностью определить $N_{ss}(E)$, а энергия состояний определяется с точностью тепловых разбросов: $\Delta E = \pm kT$. Следует подчеркнуть, что вычисления с помощью формул, приведённых здесь, намного проще по сравнению с трудоёмкими вычислениями обработки экспериментальных C-V-характеристик и метода DLTS [36-40]. В данной работе развивается более общая методика определения N_{ss} , пригодная не только для ПЗС, но также и для других релаксационных методов нестационарной ёмкостной спектроскопии поверхностных состояний.

ГЛАВА 2. ВЕРОЯТНОСТЬ ОПУСТОШЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ $\rho(t, E)$ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Вероятности опустошения поверхностных состояний зависят от времени после ухода информационного заряда и от природы самого центра. Для определения плотности поверхностных состояний приводится сравнение функции вероятности опустошения энергетического уровня $\rho(t, E, T)$ со ступенчатой функцией Ферми-Дирака.

Исследуется производная от функции $\rho(t, E, T)$ по энергии, и сравнивается с дельта-функцией Дирака.

Показано, что производная от вероятности опустошения энергетического уровня по энергии $GN(E_0, E, T)$ при низких температурах превращается в дельта-функцию Дирака. Использование этого факта дало возможность предложить математическую модель определения плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик в приборах с зарядовой связью ПЗС.

2.1. Вероятность генерации захваченных носителей зарядов. Доля освобождённых уровней $\rho(t, E)$ и её связь со ступенчатой функцией

В идеализированной модели утверждается, что за время генерации $\tau = \tau(E)$, где $E = E_c - E$, из-за тепловой генерации все состояния с энергиями между E_c и E полностью освобождаются. И считается, что состояния с энергией ниже E полностью заполнены электронами. Вероятность опустошения уровня с энергией E имеет следующий вид [6]:

$$\rho(E) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau(E)}\right) \quad (2.1)$$

Здесь $\tau(E)$ определяется квантовыми процессами перехода между локализованными поверхностными состояниями и

зоной проводимости. В общем случае, она является достаточно сложной функцией энергии и температуры, которая определяется природой исследуемого центра. Расчёт $\tau(E)$ требует довольно сложных вычислений [28]. Однако, известно, что $\tau(E)$ сильно зависит от энергии E и температуры kT . Как будет видно из дальнейшего, точное знание зависимости $\tau(E)$ несущественно, существенно то, чтобы $\tau(E)$ сильно возрастало с ростом энергии. Это требование необходимо для того, чтобы функция $GN(E)$ – производная от функции вероятности опустошения энергетических состояний, при $T \rightarrow 0$ описала δ -функцию Дирака. Обычно для $\tau(E)$ используется следующая функция [3-4]:

$$\tau(E, T, t) = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \quad (2.2) \quad \text{где} \quad \tau_0 = \frac{1}{\gamma_n N_c}.$$

Из (2.1) и (2.2) получим следующее выражение для вероятности опустошения уровня с энергией E :

$$\rho(E, T, t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)\right)$$

После введения новой переменной E_0 , получим следующую формулу для вероятности опустошения

$$\rho(E, T, E_0(t)) = 1 - \exp\left(-\exp\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)\right) \quad (2.3)$$

$$\text{где} \quad E_0(t) = kT \ln\left(\frac{t}{\tau_0}\right) \quad (2.4)$$

Эти выражения связывают вероятности опустошения уровня E электронов с поверхностных состояний с температурой и временем.

На рис. 2.1. а приведены графики вероятности опустошения, зависящие от температуры. Из сравнений графиков видно, что при исследовании генерации из глубоких уровней при высоких температурах, отклонение от модели увеличивается. На рис. 2.1. б приведены графики вероятности опустошения, зависящие от времени и функции Ферми-Дирака. Из сравнений графиков видно, что при генерации из глубоких уровней отклонение от идеальной модели одинаковые (отклонение уменьшается при низких температурах, но в этом случае для опустошения состояния понадобится большой временной отрезок). Так как в измерениях релаксационными методами в основном используется термическая зависимость измеряемых величин, можно сделать вывод, что при генерации из глубоких уровней результаты могут различаться от истинной. Тем не менее, в литературе почти во всех ёмкостных спектроскопических исследованиях используются приведённые утверждения [6,10,37].

Исследуем степень достоверности утверждения того, что за время $\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right)$ все состояния с энергией выше E полностью опустошаются, а состояние ниже E

полностью заполнены. Для этого построены графики $\rho(t, E) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau(E)}\right)$ для различных постоянных значений времени $t = nT_0$ и для значений температур T_1, T_2 . Результаты Расчётов приведены на графиках рис. 2.1. Для того, чтобы методика определения была корректной, необходимо выполнение следующего утверждения:

Для достаточно быстро возрастающей функции τ от энергии E функция $\rho(t, E) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau(E)}\right)$ при постоянной t является ступенчатой функцией от энергии. Справедливость этого утверждения проверим графически, и сравним её с функцией распределения Ферми-Дирака. На рис. 2.1 для различных температур приведены графики функции $\rho(t, E)$ и функции Ферми-Дирака. Из графиков видно, что $\rho(t, E)$ зависит от температуры. Для температур $T_1=30\text{К}$, $T_2=100\text{К}$, $T_3=300\text{К}$, $T_4=400\text{К}$ из приведённых графиков видно, что для высоких температур функция $\rho(t, E)$ заметно отличается от ступенчатой функции (рис. 2.1, $T_3=300\text{ К}$ и $T_4=400\text{ К}$). С другой стороны ступенька достаточно резкая, и с понижением температуры переходная область сужается, для температур $T_1=30\text{ К}$ и $T_2=100\text{ К}$ ступенька довольно резкая. На этих же рисунках для сравнения приведён график ступенчатой функции Ферми-Дирака при соответствующих температурах. Следует отметить, что

функция Ферми-Дирака считается хорошей ступенчатой функцией. На основе приведённых графиков можно сделать вывод о том, что функцию $\rho(t, E, \lambda)$ для достаточно широкой области температур можно считать ступенчатой функцией энергии электронов с фронтом ступеньки, которые со временем двигаются в сторону больших значений энергии. Из графиков хорошо видно, что функция $\rho(t, E)$ более резко меняется в окрестности энергии $E = kT \ln\left(\frac{nT_0}{\tau_0}\right)$, чем общепринятая функция Ферми-Дирака.

2.2. Производная по энергии от вероятности опустошения энергетического состояния $GN(t, E)$ и её связь с дельта-функцией Ферми-Дирака

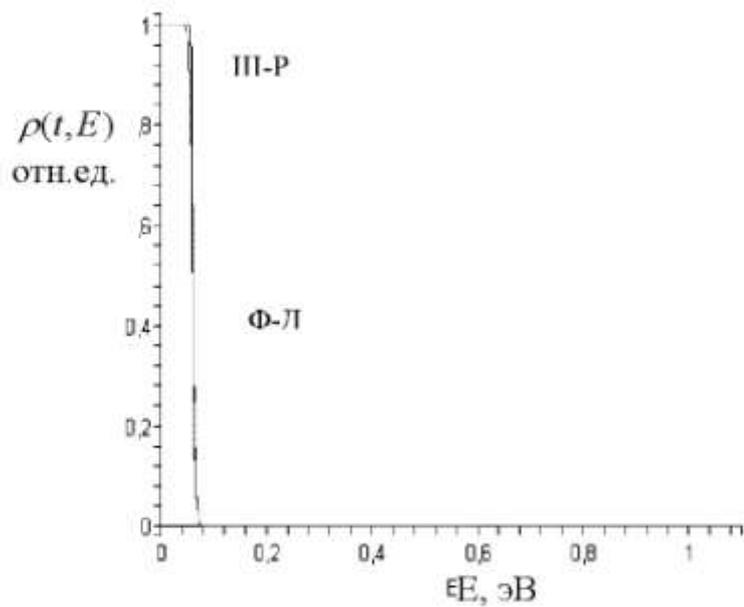
Рассмотрим функции $\rho(t, E)$ и $\frac{\partial \rho}{\partial E}(t, E)$ с конкретным видом времени тепловой генерации $\tau(E)$. Возьмем интегральную функцию, зависящую от параметров

$$N(t) = \int_0^{E_c} N_{ss} \rho(t, T, P, E) dE \quad (2.5)$$

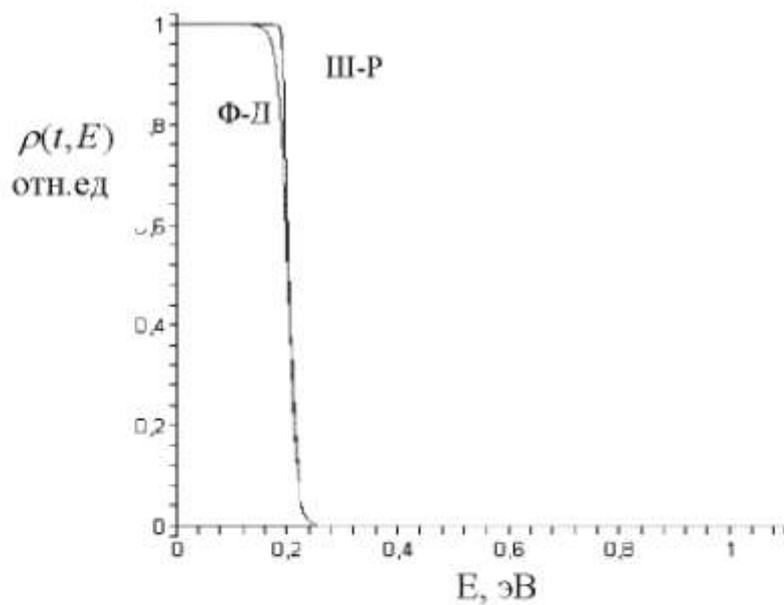
$$N_{T, \tau, P}(nT_0) = \int_0^{E_c} N_{ss} \rho(nT_0, \tau, P, E) dE \quad (2.6)$$

Продифференцируем (2.6) по параметру $t = nT_0$

$$\frac{\partial N}{\partial nT_0} = \int_0^{E_c} N_{ss}(E) \frac{\partial \rho}{\partial nT_0} dE \quad (2.7)$$

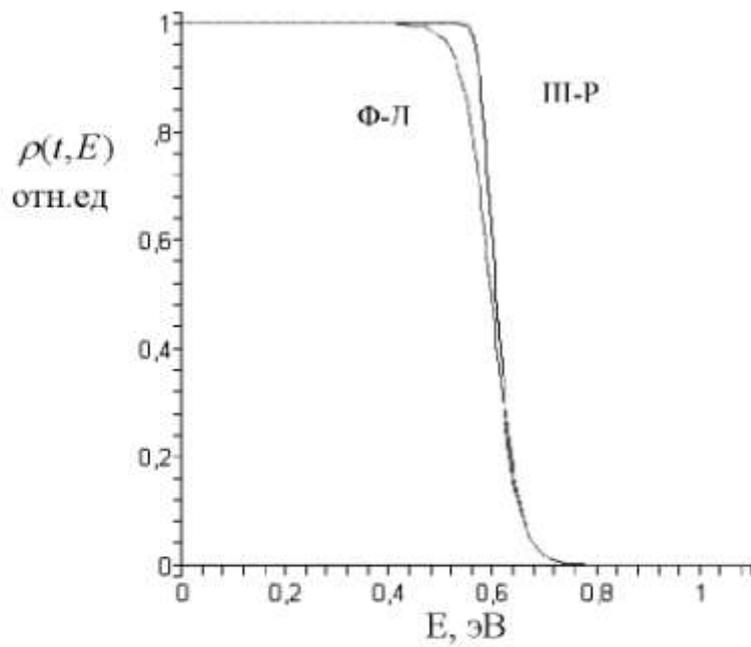


а) $T_1 = 30$ К

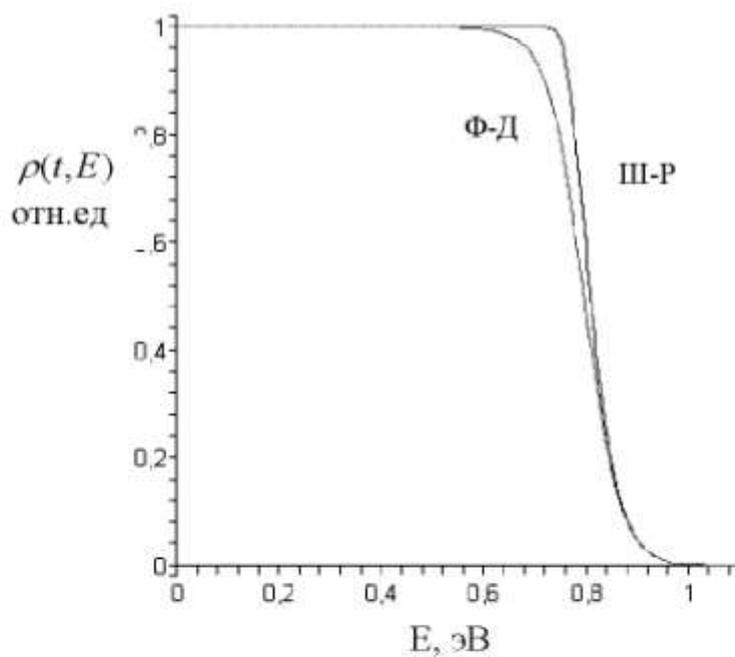


б) $T_2 = 100$ К

Рис. 2.1. Графики функций $\rho(t, E)$ – вероятности опустошения состояний с использованием статистики Шокли-Рида-Холла (Ш-Р) и функции Ферми-Дирака (Ф-Д) для различных температур.



в) $T_1 = 300$ К.



г) $T_2 = 500$ К.

Рис. 2.1. Графики функции $\rho(t, E)$ – вероятность опустошения состояний с использованием статистики Шокли-Рида-Холла (Ш-Р) и функции Ферми-Дирака (Ф-Д) для различных температур.

С математической точки зрения изменение функции является менее чувствительным по сравнению с изменением её производного при изменении параметров. Другими словами, производная от функции сильно выделяет незначительные изменения самой функции. Поэтому мы будем исследовать изменения $\Delta N(nT_0, \lambda)$ при малых изменениях параметров λ , т.е. производные от $N(\lambda)$ по параметру λ . Берём производную $N(t, \lambda)$ по λ

$$\frac{\partial N(t, \lambda)}{\partial \lambda} = \int_0^{\epsilon} N_{ss}(E) \frac{\partial \rho(\lambda, t, E)}{\partial \lambda} dE \quad (2.8)$$

Для того чтобы анализировать этот интеграл, рассмотрим подынтегральное выражение. Для простоты предположим, что плотность поверхностных состояний $N_{ss}(E)$ не зависит от параметра λ (из физических соображений следует, что $N_{ss}(E)$ очень слабо зависит от параметров T, P, ϵ , и т.д.). Будем анализировать только $\frac{\partial \rho(\lambda, t)}{\partial \lambda}$ как функцию от энергии. В качестве λ можем выбрать любую из переменных E_0, T, n, T_0 .

Рассмотрим простейший случай, когда τ и $\rho(\lambda, E)$ имеют следующий вид:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \quad (2.9)$$

$$\rho(\lambda, E) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.10).$$

Будем считать $t = nT_0$ константой, где n и T_0 константы, тогда

$$\rho(\lambda, E) = 1 - \exp\left(-\frac{nT_0}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)\right) = 1 - \exp\left(-\exp\left(\frac{kT \ln\left(\frac{nT_0}{\tau_0}\right) - E}{kT}\right)\right) \quad (2.11)$$

Если $E_0 = kT \ln\left(\frac{nT_0}{\tau_0}\right)$ (2.12)

то $\rho(E_0, E) = 1 - \exp\left(-\exp\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)\right)$ (2.13)

Находим $\frac{\partial \rho}{\partial E_0}$ и обозначим её как функцию $GN(T, E_0, E)$

$$GN(T, E_0, E) = \frac{\partial \rho}{\partial E_0} = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E_0 - E) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E_0 - E)\right)\right) \quad (2.14)$$

Функция вида $\varphi(x) = n \exp(nx - \exp(nx))$ удовлетворяет всем условиям, необходимым для получения дельта-функции, приведённой в приложении 2 (рис. 2.2 [41]).

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} n \exp(nx - \exp(nx)) \quad (2.15)$$

Отсюда следует, что функция $GN(T, E_0, E)$, при $T \rightarrow 0$ и $\frac{1}{kT} \rightarrow \infty$ $GN(T, E_0, E) = \delta(E_0 - E)$ (2.16)

является дельта-функцией Дирака. Теперь рассмотрим графическую зависимость $GN(T, E_0, E)$. На рисунке 2.2 показано зависимость $GN(T, E_0, E)$ от энергии при различных температурах $T_1=500$ К, $T_2=300$ К, $T_3=30$ К. Как и следовало ожидать, с понижением температуры функция $GN(T, E_0, E)$ приближается к δ -функции Дирака, т.е. с понижением T высота “колокола” увеличивается, а её “ширина” уменьшается. Это происходит из-за того, что

площадь под “колоколом” остаётся постоянной. При низких температурах $T=1\text{К}$ “колокол” превращается в идеальную “иглу” с большой высотой. Там же приведён для сравнения график функции, который является производной от функции Ферми-Дирака, т.е. известной ступенчатой функцией. Хорошо известно, что производная по энергии от функции Ферми-Дирака является δ -функцией Дирака при стремлении к нулевой температуре.

Проанализируем графики $GN(T, E_0, E)$ функций рис 2.3. Графики функций $GN(T, E_0, E)$ от энергии обозначены через SR и производной функции для различных температур.

Из рисунка видно, что ширина $GN(T, E_0, E)$ функции меньше, а высота выше, чем высота производной от функции Ферми-Дирака. Как будет видно в дальнейшем, точное его значение зависимости $\tau(E)$ несущественно, существенно то, что $\tau(E)$ сильно возрастает с ростом энергии.

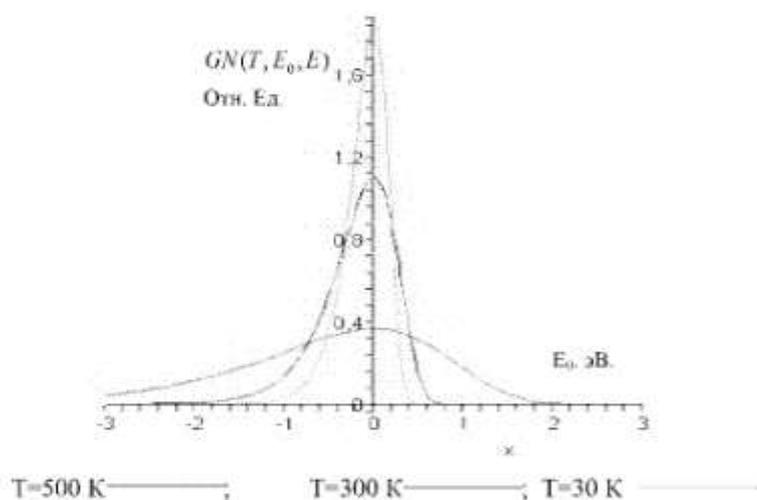


Рис .2.2. График функции $GN(T, E_0, E)$ для различных температур. $E=0$.

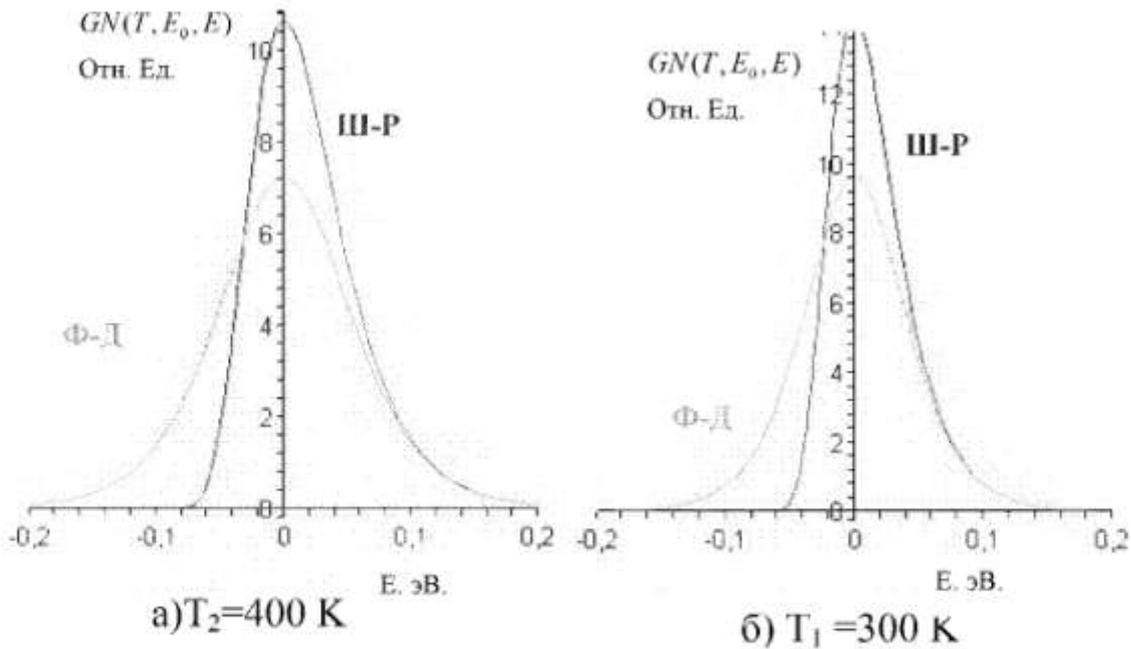


Рис. 2.3. Графики функций $GN(T, E_0, E)$ от энергии Ш-Р и производной функции Ферми-Дирака, от энергии Ф-Д при различных температурах. $E_0=0$.

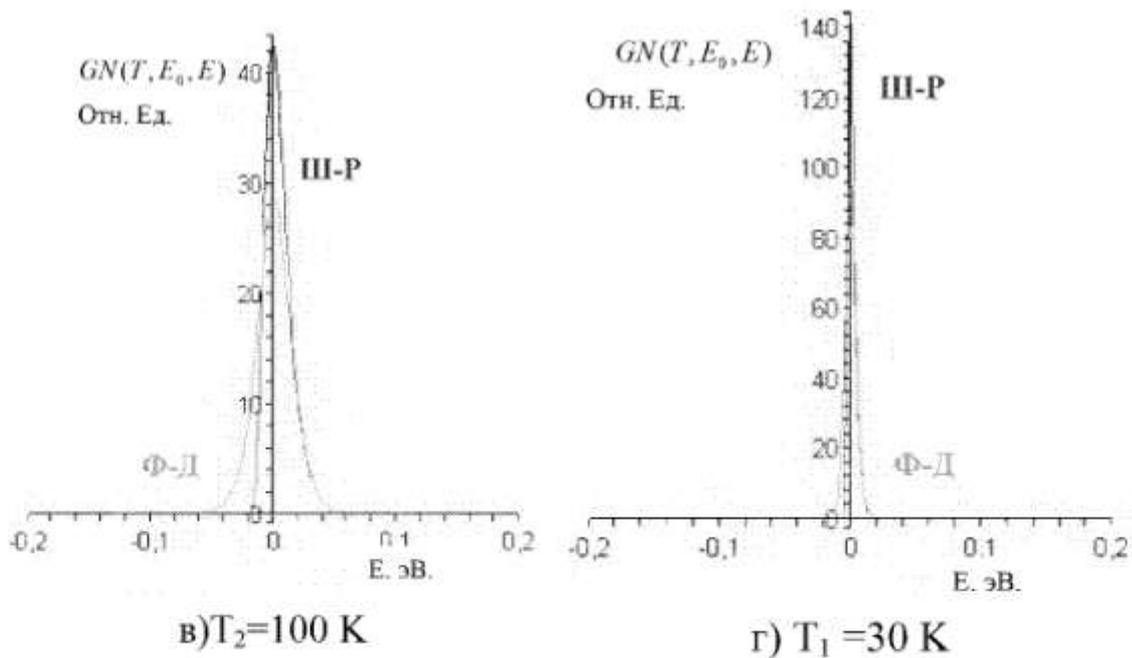


Рис. 2.3. Графики функций $GN(T, E_0, E)$ от энергии Ш-Р и производной функции Ферми-Дирака, от энергии Ф-Д при различных температурах. $E_0=0$

Это требование необходимо для того, чтобы функция $GN(x)$ (производная вероятности опустошения энергетических состояний), при $T \rightarrow 0$, описала δ - функцию Дирака. Это важный результат, свидетельствующий о том, что функция $GN(T, E_0, E)$ гораздо эффективнее и более быстро стремится к идеальной δ -функции Дирака, чем производная функции Ферми-Дирака. Следовательно, можно утверждать, что функция $GN(T, E_0, E)$ при $T \rightarrow 0$ является δ -функцией Дирака. Требования, предъявляемые для δ -функции выполняются с большим запасом по сравнению общепринятой δ -функцией Дирака, полученной производным по энергии от функции Ферми-Дирака. Здесь следует отметить, что ρ и GN функции зависят от величины E_0 , которая в свою очередь зависит от нескольких параметров. Мы можем определить разными способами энергетическое состояние в запрещённой зоне полупроводника. По крайней мере, это можно сделать следующими способами:

1. изменением числа нулей n .
2. изменением периодов тактовых импульсов T_0 .
3. изменением температуры T .
4. изменением τ .

2.3 Математическая модель процесса определения ПС на границе раздела диэлектрик-полупроводник

Число электронов $N(t)$, генерированных с поверхностных состояний за время t , при непрерывном распределении уровней по энергиям определяется следующим выражением [6, 12-13]:

$$N(t) = \int_{E_v}^{E_c} N_{ss}(E) \rho(E) dE \quad (2.17),$$

где $\rho(E)$ вероятность опустошения уровня с энергией E (2.1).

Если t заменим переменной $E_0(t)$ из (2.2) получим [A1-A3]

$$N(E_0) = \int_{E_v}^{E_c} N_{ss}(E) \rho(E_0, E, T) dE \quad (2.18)$$

Продифференцировав выражения (2.18) по E_0 , получим

$$\frac{\partial N_s(E)}{\partial E_0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ss}(E) \frac{\partial \rho}{\partial E_0} dE \quad (2.19)$$

где
$$\frac{\partial \rho}{\partial E_0} = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_0) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_0)\right)\right) \quad (2.20)$$

из (2.13) и (2.15) при $T \rightarrow 0$ получаем

$$\frac{\partial N_s(E)}{\partial E_0} = \int_{E_v}^{E_c} N_{ss}(E) \delta(E - E_0) dE = N_{ss}(E_0) \quad (2.21)$$

Количество электронов, покинувших дискретные поверхностные состояния, определяется следующим выражением

$$N(t) = \sum_i N_{ss}(E_i) \rho(E_i, T, t) \quad (2.22)$$

Продифференцировав выражение (2.22) по E_0 , получим

$$N_{ss}(E_0) = \sum_{i=1}^n N_{ss_i}(E_i) \frac{\partial \rho_i}{\partial E_0} \quad (2.23) [1-3]$$

Из (2.13) выражение (2.4.7) имеет вид

$$N_{ss}(E_0) = \sum_{i=1}^n N_{ss_i}(E_i) GN(E_0(t), E_i, T) \quad (2.24)$$

$$\text{где } GN(E_0(t), E_i, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0)\right)\right).$$

Это выражение удобно для обработки экспериментальных данных энергетической плотности поверхностных состояний.

Исходным данным обработки с помощью модели является экспериментально определённый сплошной спектр плотности поверхностных состояний при температуре эксперимента T_0 . С помощью подбора находим значения N_{ss_i} для каждого E_i при температуре T_0 так, чтобы значения $N_{ss}(E, T)$, построенные согласно математической модели и эксперименту, максимально приблизились между собою. После этого вместо температуры T_0 подставляются, по возможности, низкие температуры T_1 и вычисляется дискретный спектр плотности поверхностных состояний.

ГЛАВА. 3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ПЛОТНОСТИ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА SiO_2-Si

Существующие релаксационные методы определения плотности поверхностных состояний на границе полупроводник-диэлектрик пригодны только при высоких температурах. Их слабой стороной является непригодность при низких температурах. Это связано с резким замедлением термической генерации электронов с поверхностных состояний при низких температурах. Уже при температуре жидкого азота термогенерация электронов замедляется настолько, что определение плотности поверхностных состояний с помощью нестационарных методов становится затруднительным. При этом вклад термического уширения весьма существенен. Таким методом можно определить плотность поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик при низких температурах, где термическое уширение незначительно.

В данной главе экспериментальные спектры анализируются с помощью математической модели, использующей разложение спектра плотности поверхностных состояний по функциям $GN(E_0, E, T)$. Показано, что сплошной спектр плотности поверхностных состояний, полученный при конечной температуре, при низких температурах превращается в дискретный спектр

плотности поверхностных состояний. Это обусловлено тем, что при низкой T $GN(E_0, E, T)$ превращается в дельта-функцию Дирака. Вышеуказанным методом исследованы сплошные спектры плотности поверхностных состояний в структурах SiO_2-Si , $Al-SiO_2-n-Si<Ni>$, облученные γ -лучами SiO_2-Si , облученные нейтронами $Al-SiO_2-Si$ и анализированы их дискретные спектры плотности поверхностных состояний.

3.1. Исследование температурной зависимости плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si $Nss(E, T)$ с помощью математической модели

Для обработки экспериментальных данных энергетической плотности поверхностных состояний воспользуемся разложением $Nss(E, T)$ по $GN(E_0, E, T)$ функциям, полученным в (2.24)

$$Nss(E_0) = \sum_{i=1}^n Nss_i(E_i)GN(E_0, E, T) \quad (3.1)$$

$$\text{где } GN(E_0, E_i, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0)\right)\right)$$

Для лучшего понимания влияния температуры на плотность поверхностных состояний рассмотрим пример. Пусть в запрещённой зоне полупроводника имеются десять дискретных уровней. На рис. 3.1 приведены плотности поверхностных состояний этих уровней для трёх разных температур. Как видно из рисунка, при

низких температурах ($T=30\text{K}$) на графике все уровни чётко различаются. С ростом температуры $GN(E_0, E, T)$ функция расширяется так, что на графике $N_{ss}(E, T)$ при $T=77\text{K}$ эти уровни размазываются. Дальнейшее повышение температуры увеличивает размазывание и при $T=300\text{K}$ даёт сплошной спектр. Таким образом, энергетический спектр, определённый релаксационными методами, сильно зависит от температуры измерения. Отсюда можно сделать вывод о том, что для обнаружения дискретных уровней нужны низкотемпературные измерения плотности поверхностных состояний.

Когда дискретные уровни в запрещённой зоне расположены достаточно близко, плотность состояний $N_{ss}(E, T) = \sum N_{ss} GN(E_i)$ в средней части спектра не зависит от температуры, только её края расширяются при нагревании образца. С ростом температуры $GN(E)$ функция расширяется таким образом, что площадь под $GN(E)$ функции остаётся постоянной. Плотность состояний, определённая таким способом, вообще говоря, отличается от комбинированной плотности состояний, определённых из спектральной зависимости коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$. Коэффициент поглощения, $N_{ss}(E)$ определённый оптическим методом, может отличаться от N_{ss} , найденной релаксационным методом.

Однако, при низких температурах прямое измерение $N_{ss}(E_0, T)$ затруднено из-за уменьшения вероятности

освобождения электронов с поверхностных ловушек. Это обстоятельство не позволяет на эксперименте прямым измерением получить дискретный спектр поверхностных состояний.

В работах [42-64] обсуждаются методы определения энергетических уровней в запрещённой зоне и усовершенствование метода DLTS. Рассуждения показывают, что плотность состояний при высокой температуре отличается от истинной плотности состояний $N_{ss}(E)$. Для определения $N_{ss}(E)$ при низких температурах можно поступить следующим образом. Разделим весь исследуемый интервал энергии, например, в ширину запрещённой зоны, на большое число малых интервалов. Задавая значение $N_{ss}(E)$ на каждом выделенном интервале энергии, с помощью формулы (3.1) при определённой температуре измерения, построим подгоночный график зависимости $N'_{ss}(E, T)$ (модель), которая максимально приближается к экспериментальному графику $N_{ss}(E, T)$. После этого, для получения низкотемпературного графика $N'_{ss}(E, T)$, в (3.1) $GN(E_0, E, T)$ подставляются значения соответствующих низких температур. По мере понижения температуры T $GN(E_0, E, T)$ - функция всё более приближается к дельта-функции Дирака, а сплошной спектр постепенно превращается в дискретный спектр $N_{ss}(E)$ поверхностных состояний. С уменьшением

температуры на графике $N'_{ss}(E,T)$ появляются отдельные пики и постепенно первоначальный экспериментальный сплошной спектр распадается на отдельные энергетические полосы (см. рис. 3.1)

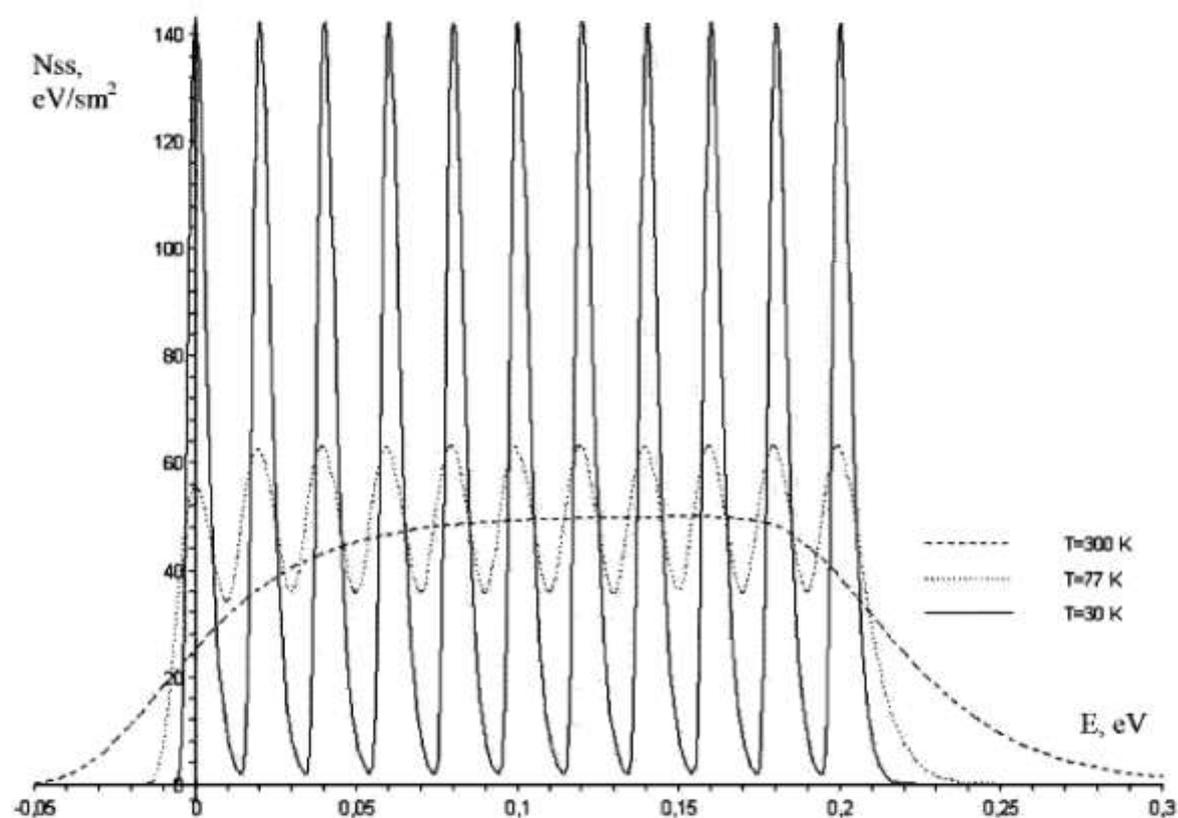


Рис. 3.1. Зависимость $N_{ss}(E,T)$ от температуры для десяти дискретных уровней. С ростом температуры дискретный спектр превращается в сплошной [65].

3.2. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si

Переходим к обработке высокотемпературной плотности поверхностных состояний. На рис. 3.2 а приведёна плотность поверхностных состояний из работы [66] На рис. 3.2б показана теоретическая подгоночная плотность состояний $N'_{ss}(E,T)$, полученная разложением экспериментального графика рис. 3.2.а в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям.

Сравнение рис. 3.2а и 3.2.б показывает, что экспериментальный график при $T=300K$ $N_{ss}(E,T)$ легко разлагается в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям. На рис. 3.2в и 3.2г показаны графики модельной плотности состояний, полученные соответственно для $T=77K$ и $T=5K$. Из этих рисунков видно, что уже при температуре жидкого азота на графике четко выделяются отдельные пики (рис. 3.2в). При стремлении температуры к нулю эти пики превращаются в дискретные уровни, а непрерывная линия $N'_{ss}(E,T)$ в дискретный энергетический спектр (рис. 3.2г). Эти изменения $N'_{ss}(E,T)$ обусловлены тем, что при понижении температуры, за счёт уменьшения теплового уширения энергетических уровней, $GN(E_0, E, T)$ приближается к дельта-функции Дирака $\delta(E - E_0)$.

На основе проведенного исследования кинетики нестационарного процесса перезарядки электронов, с поверхностных состояний границы раздела полупроводник-диэлектрик, можно сделать вывод о том, что экспериментальный сплошной спектр плотности поверхностных состояний $N_{ss}^i(E, T)$, определённый при высоких температурах с помощью

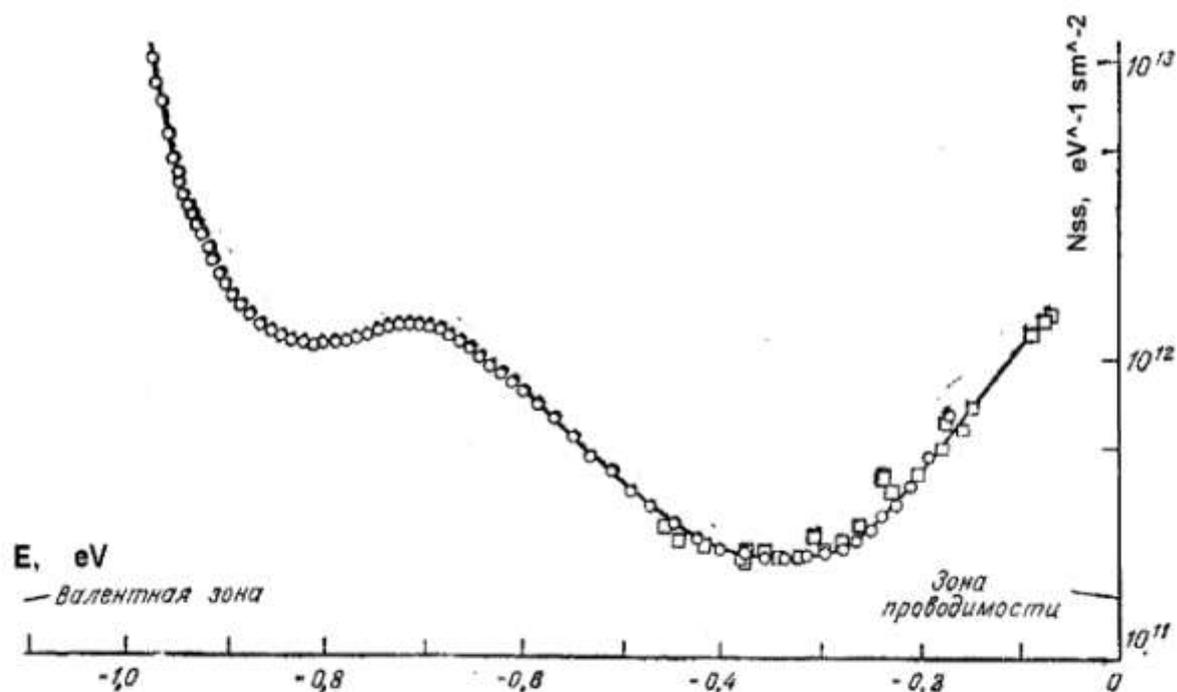


Рис. 3.2 а. Спектр плотности поверхностных состояний-эксперимент [66].

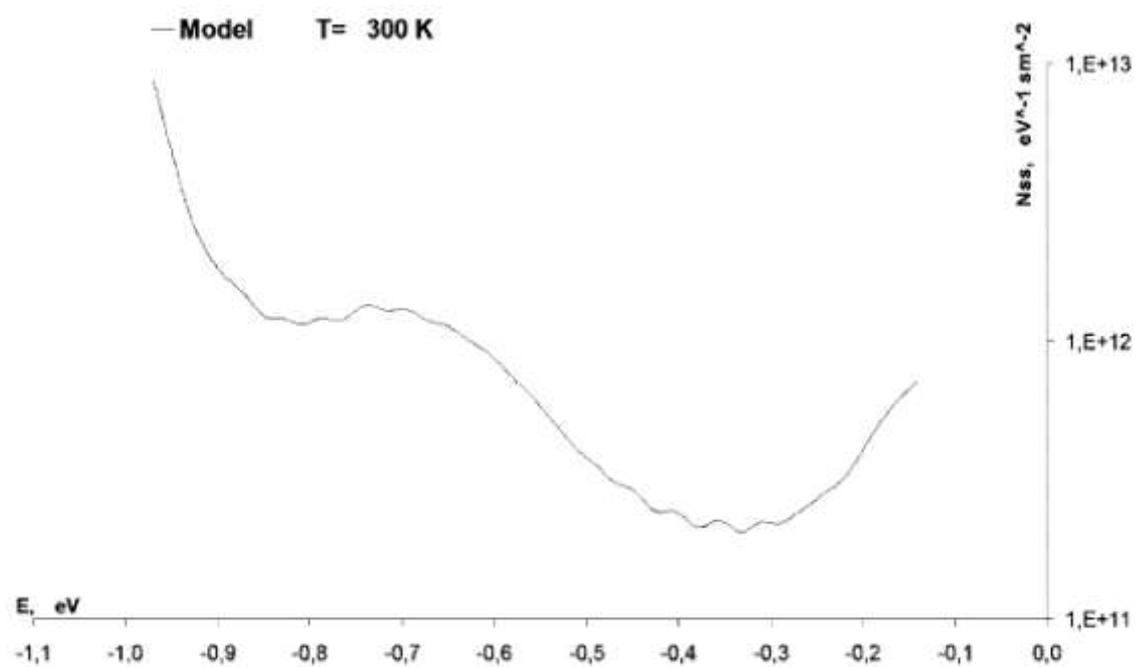


Рис. 3.2 б. Спектр плотности поверхностных состояний-модель при $T=300$ К. [65].

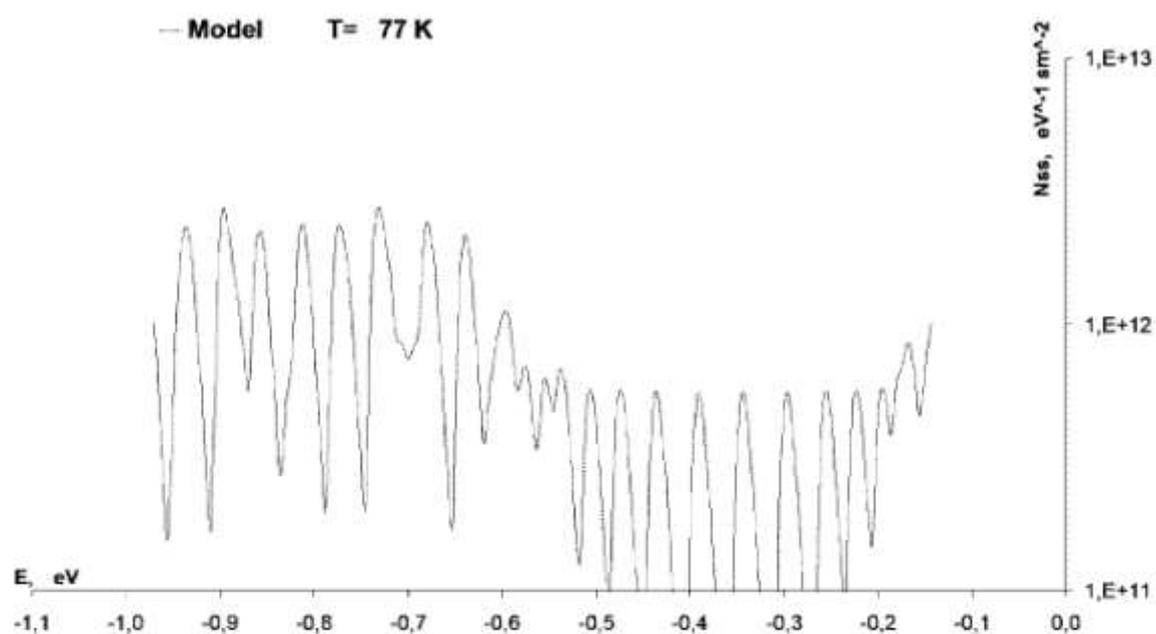


Рис. 3.2 в. Спектр плотности поверхностных состояний-модель при $T=77$ К. [65].

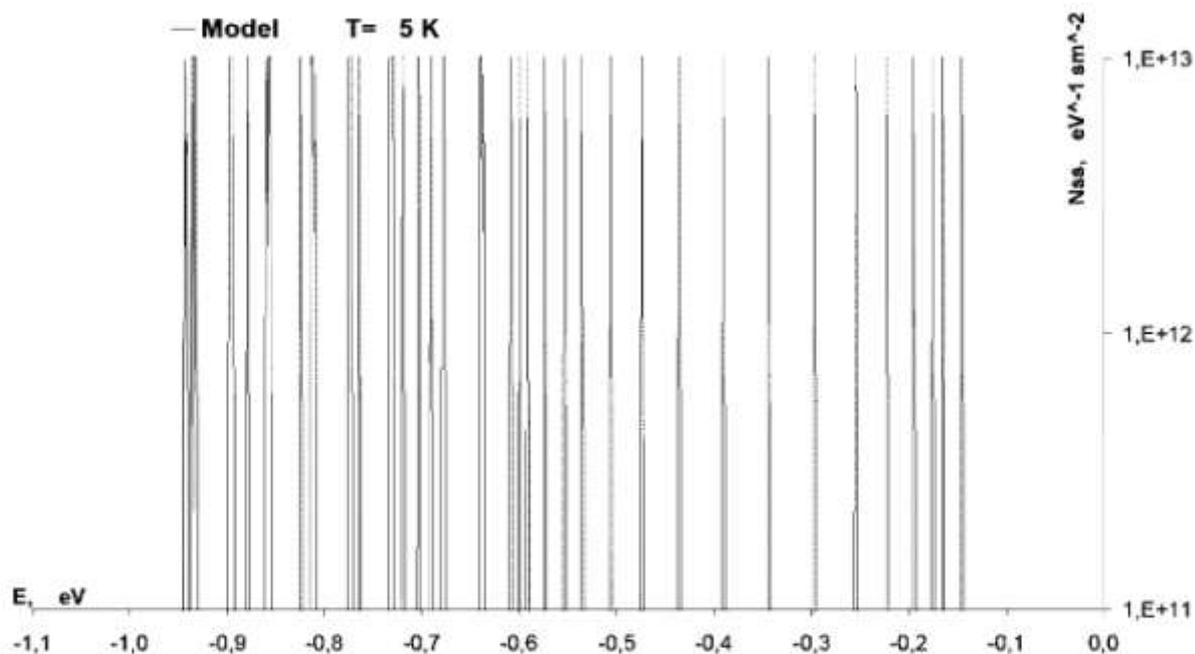


Рис. 3.2 г. Спектр плотности поверхностных состояний модель при $T=5$ К. [65].

релаксационным методом, при низких температурах превращается в дискретный энергетический спектр. Такая сильная температурная зависимость плотности поверхностных состояний обусловлена тем, что производная от функции, описывающая вероятность опустошения поверхностных состояний, при низких температурах превращается в дельта-функцию Дирака.

Приведённая методика определения низкотемпературной плотности поверхностных состояний увеличивает разрешающую способность нестационарной спектроскопии поверхностных уровней и релаксационных методов, которые применяют для измерения энергетического спектра плотности состояний.

3.3 Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$ и $\text{SiO}_2\text{-n-Si}\langle\text{Ni}\rangle$

Исходным данным для применения модели является экспериментальная плотность поверхностных состояний при конкретной температуре T_0 (температура эксперимента). Для обработки экспериментального результата сначала требуется разложение плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям. Для этого необходимо задавать последовательность значений $N_{ss}(E)$ для каждого E_i в рассматриваемом интервале энергий при температуре измерения T_0 так, чтобы значения плотности поверхностных состояний, полученные согласно модели и $N_{ss}(E, T)$ из эксперимента максимально сближались между собой. После этого, в модельное выражение вместо начальной температуры T_0 , подставляются возможно низкие температуры T_1 , и на ЭВМ графически строится дискретный спектр плотности поверхностных состояний. Разложение экспериментальный ППС в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям позволяет со сплошного спектра $N_{ss}(E, T)$, определённого при высоких температурах, вычислить дискретный спектр ППС с помощью замены T_0 на возможно низкие значения температуры.

Экспериментально определённый сплошной спектр ППС разложим в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям. При этом $GN(E_0, E, T)$ функция берется при температуре измерения плотности поверхностных состояний. Следующим этапом построения теоретической плотности поверхностных состояний является разбиение исследуемого интервала энергии на конечное число мелких ячеек и подбор подходящих значений $N_{ss}(E_i)$. Всю запрещённую зону можно разбить на 10^3 равных интервалов. В этом случае точность определения энергии будет $\pm 10^{-3}$ эВ. В типичных экспериментах по ёмкостной спектроскопии точность определения энергии порядка $\pm 2 \cdot 10^{-2}$ эВ., т.е. ошибка составляет 2%, в нашей предлагаемой модели эта ошибка составляет 0,1%, а это в 20 раз точнее измерений эксперимента. После этого, на каждой ячейке рассматриваемого интервала энергий $1 \leq i \leq 10^3$ задаются численные значения N_{ssi} . Полная совокупность значений N_{ssi} подбирается таким образом, что теоретическая плотность поверхностных состояний максимально приближается к экспериментальной кривой. Подгоночная и теоретическая плотность поверхностных состояний, построенная указанным способом, для МДП-структур на основе $Al-SiO_2-Si$ без примеси никеля [67] приведены на рис. 3.3 а в $T=300K$. На рис. 3.3 б приведёна $N_{ss}(E)$ на основе модели при $T=77K$ и на рис. 3.3 в) приведёна $N_{ss}(E)$ модель при $T=5K$. Как видно из рисунка, при $T=300K$

$N_{ss}(E,T)$ имеет типичный U -образный сплошной спектр. По вычислениям согласно математической модели при $T=77$ К на спектре $N_{ss}(E,T)$ выделяются несколько пиков и в $T=5$ К видны конкретные дискретные уровни плотности поверхностных состояний.

Далее рассмотрено влияние примесей Ni на плотности поверхностных состояний $N_{ss}(E)$. Анализ проводится таким же образом.

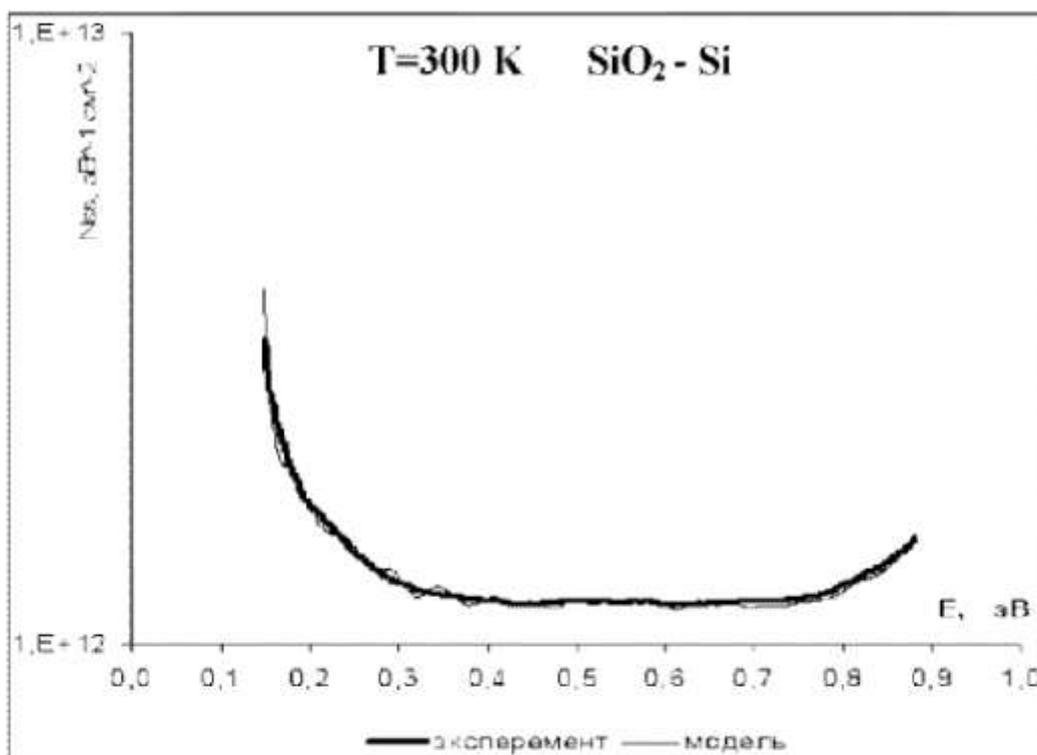


Рис. 3.3 а. Плотности поверхностных состояний на границе раздела n-Si-SiO₂ без примеси, эксперимент и модель при $T=300$ К. [67-68].

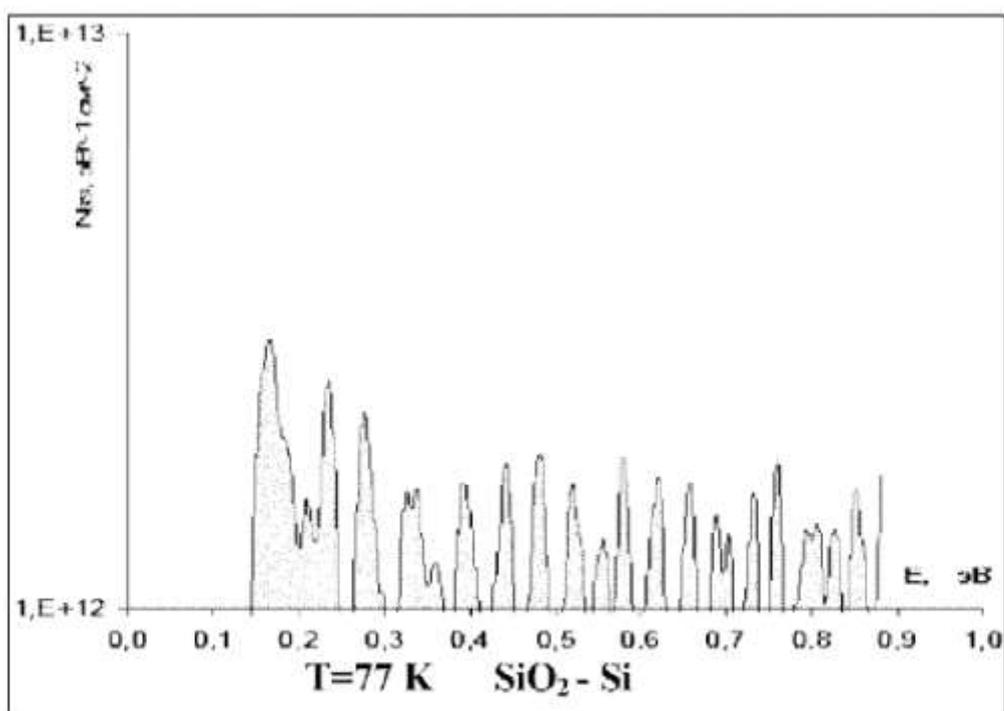


Рис. 3.36. Плотности поверхностных состояний на границе раздела n-Si-SiO₂ без примеси, модель при T=77K. [67].

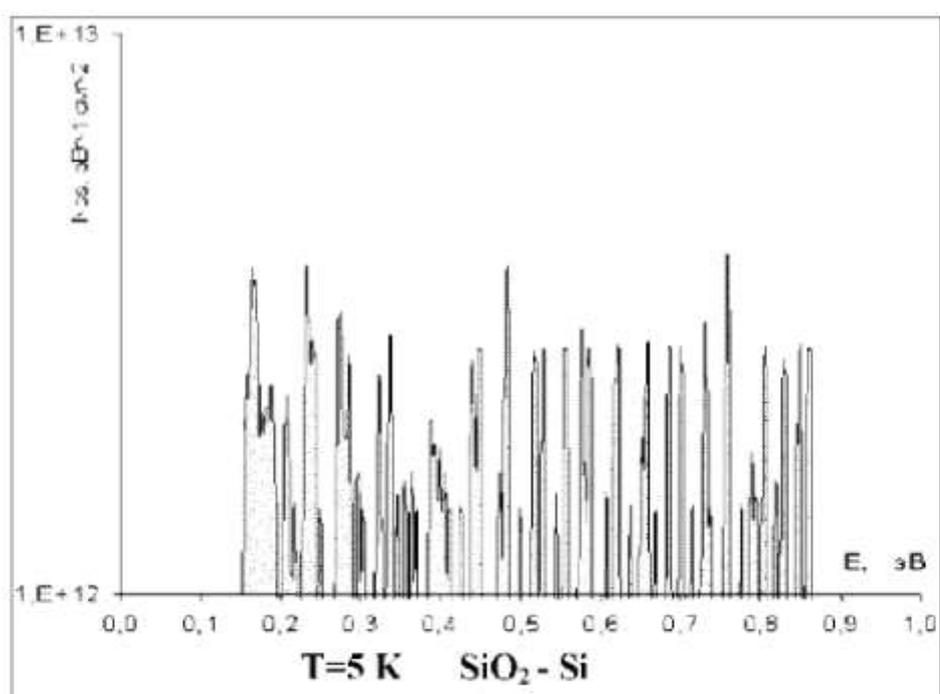


Рис. 3.3в. Плотности поверхностных состояний на границе раздела n-Si-SiO₂ без примеси, модель при T=5 K. [68].

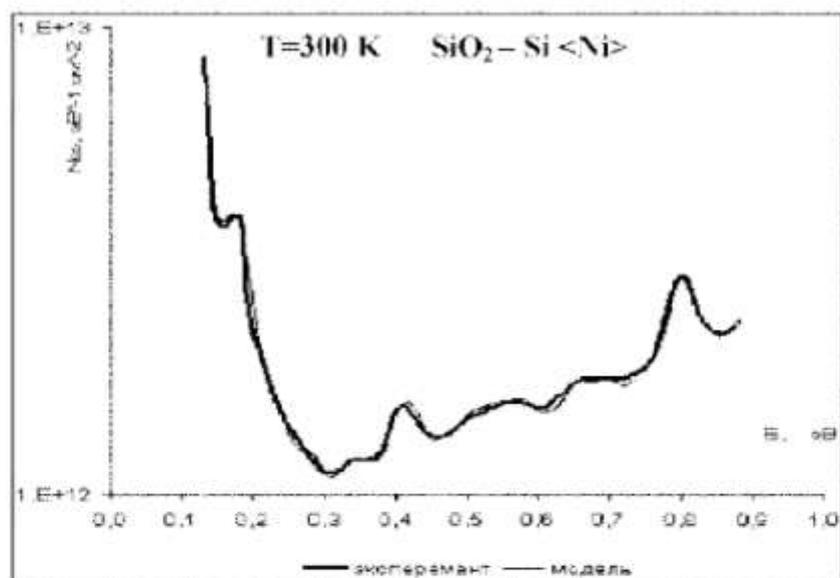


Рис. 3.4 а. Спектр плотности поверхностных состояний на границе раздела $\text{SiO}_2\text{-Si} \langle \text{Ni} \rangle$ полупроводниковая подложка, легированные примесями никеля. Эксперимент и модель при $T=300\text{K}$. [68].

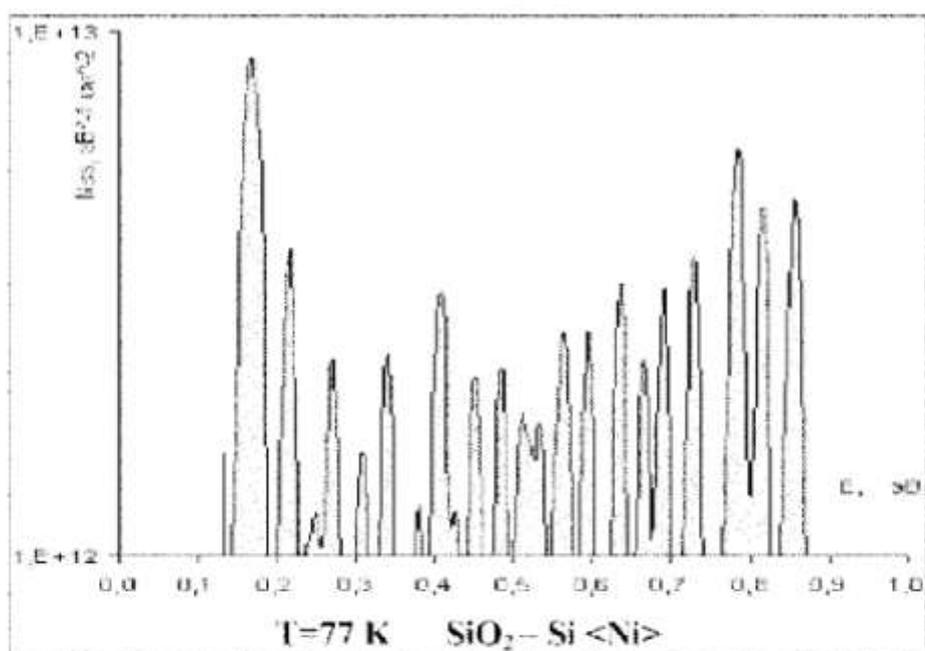


Рис. 3.4 б. Спектр плотности поверхностных состояний на границе раздела $\text{SiO}_2\text{-Si} \langle \text{Ni} \rangle$, полученная с помощью предложенной модели при $T=77\text{K}$. [68].

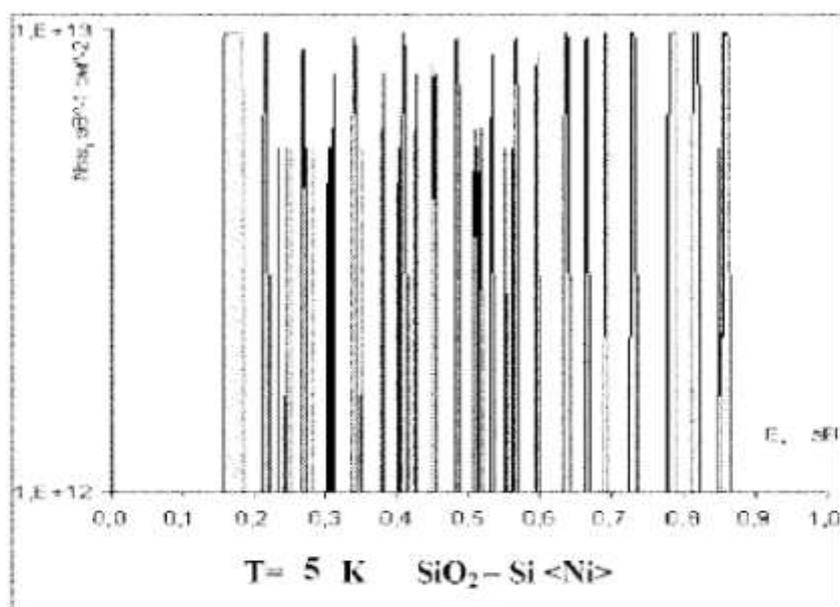
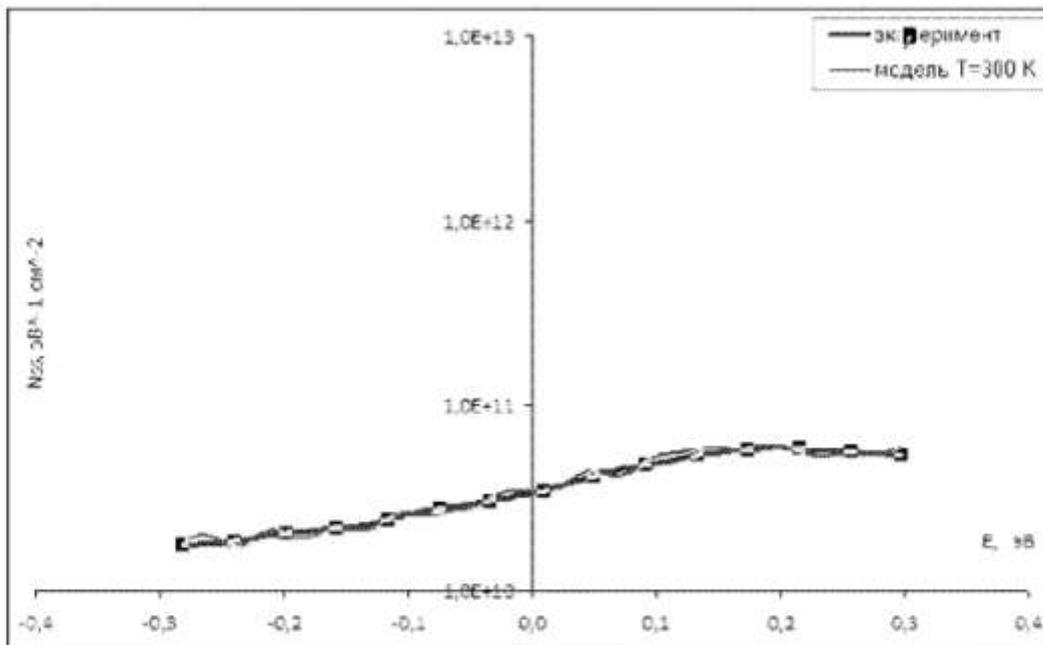


Рис. 3.4 в. Спектр плотности поверхностных состояний на границе раздела $SiO_2-Si <Ni>$, полученный с помощью предположной модели при $T=5K$. Полупроводниковая подложка легирована примесями никеля. [68].

На рис. 3.4 а добавлением на кремний примеси никеля типа $Al-SiO_2-n-Si <Ni>$ при $T=300K$ [67], рис. 3.4 б приведёна $N_s(E)$ модель при $T=77K$ и рис. 3.4 в приведён $N_s(E)$ по модели при $T=5K$. Как видно из рисунков, наличие примеси никеля приводит к изменению в спектре и образованию явно выраженных пиков вблизи энергий $E_c-0.17$ eV, $E_c-0.34$ eV, $E_c-0.39$ eV. По Расчётам согласно модели, при $T=5$ К видны конкретные дискретные уровни, где явно видны появления дополнительных уровней в основном вблизи энергий со значениями $E_c-0.17$ eV, $E_c-0.34$ eV, $E_c-0.39$ eV. В [69-76] обсуждается процессы дефектообразования в кремнии легированном различными примесями, которые можно исследовать предложенным методом.

3.4. Определение дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si , облученного γ -лучами

Рассмотрим применения предложенного метода для анализа экспериментальных результатов [77-78]. На рис. 3.5 приведена плотность поверхностных состояний, определённая из комбинации ВЧ и НЧ $C-V$ -характеристик для МОП-структур на основе $Al-SiO_2-Si$, полученной термическим окислением кремния в атмосфере O_2 при температуре 1000К. Как видно из рисунка при комнатной температуре плотность поверхностных состояний имеет гладкий сплошной спектр. Затем тот же образец облучался γ -источником Co^{60} . При воздействии ионизирующего излучения на МДП-системы типа $Al-SiO_2-Si$ с дозой ниже 10^6 рад (Si) в основном изменится плотность поверхностных состояний в середине запрещённой зоны. В этом смысле γ -облучение самое подходящее средство для изменения $N_{ss}(E,T)$ на границе раздела полупроводник-диэлектрик МДП-системы. Поэтому с помощью γ -облучения специально изменялись $N_{ss}(E,T)$ на границе раздела полупроводник-диэлектрик.



«Эксперимент» - экспериментальная плотности поверхностных состояний, «Модель» - теоретическая подгоночная плотности поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной в ряд при температуре $T=300\text{K}$.

Рис. 3.5а. Плотности поверхностных состояний на границе раздела $\text{SiO}_2\text{-Si}$, необлученного образца МОП структуры $\text{Al-SiO}_2\text{-Si}$, измеренная при температуре 300K . [77-79].

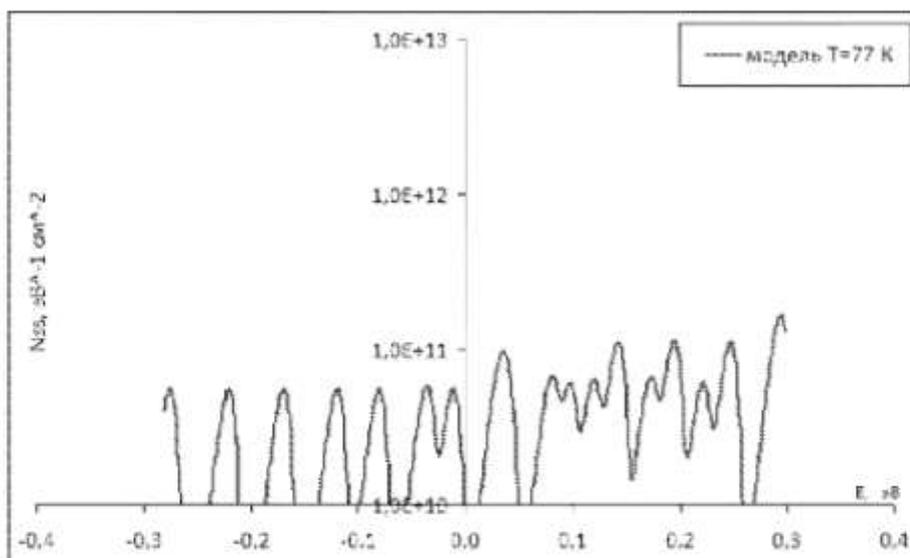


Рис. 3.5б. «Модель» – теоретическая подгоночная плотность поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной плотности поверхностных состояний в ряд при температуре $T=77\text{K}$. [77].

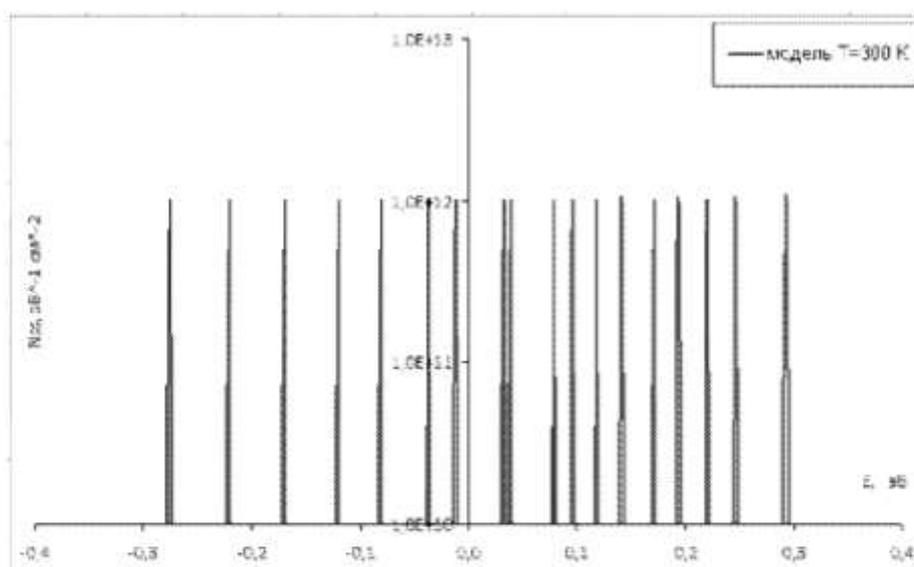
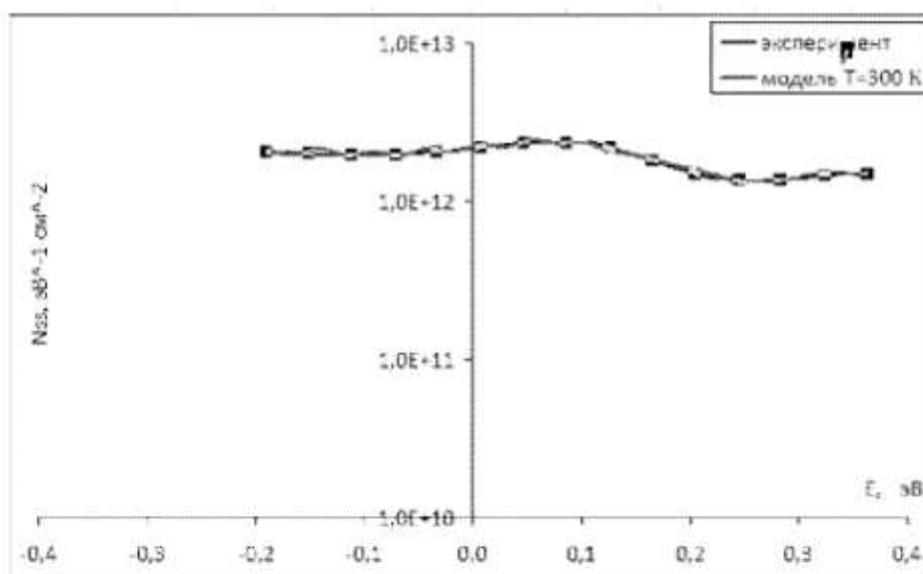


Рис. 3.5в. «Модель»- теоретическая подгоночная плотность поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной плотности поверхностных состояний в ряд при температуре $T=5K$. [A2].



«Эксперимент» - плотность поверхностных состояний, определённая при температуре 300К, «Модель» - подгоночная плотность поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям при температуре $T=300K$.

Рис. 3.6а. Плотность поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si , облученного γ -лучами образца МОП структуры $Al-SiO_2-Si$, полученная при температуре 300К. [77-79].

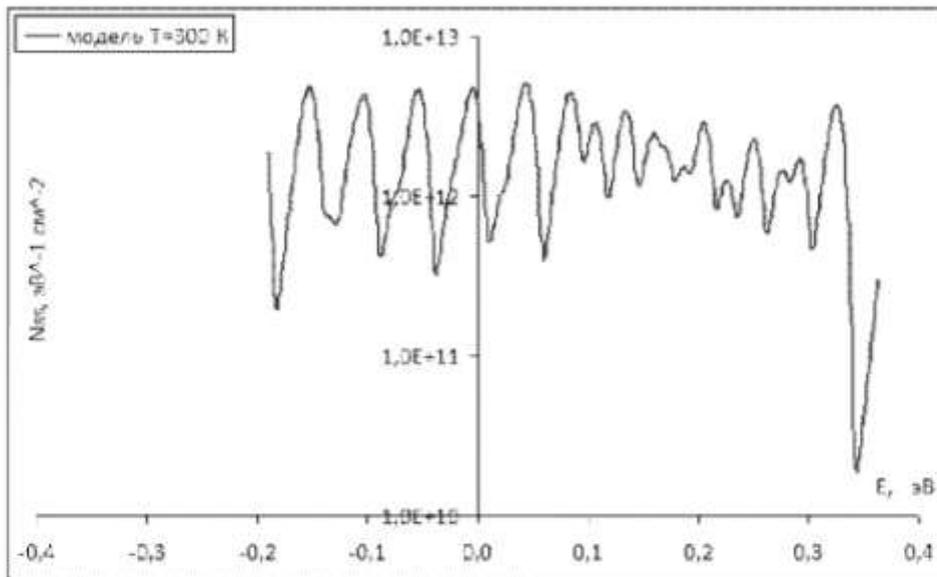


Рис. 3.6б. «Модель» - теоретическая подгоночная плотность поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям при температуре $T=77\text{K}$. [77].

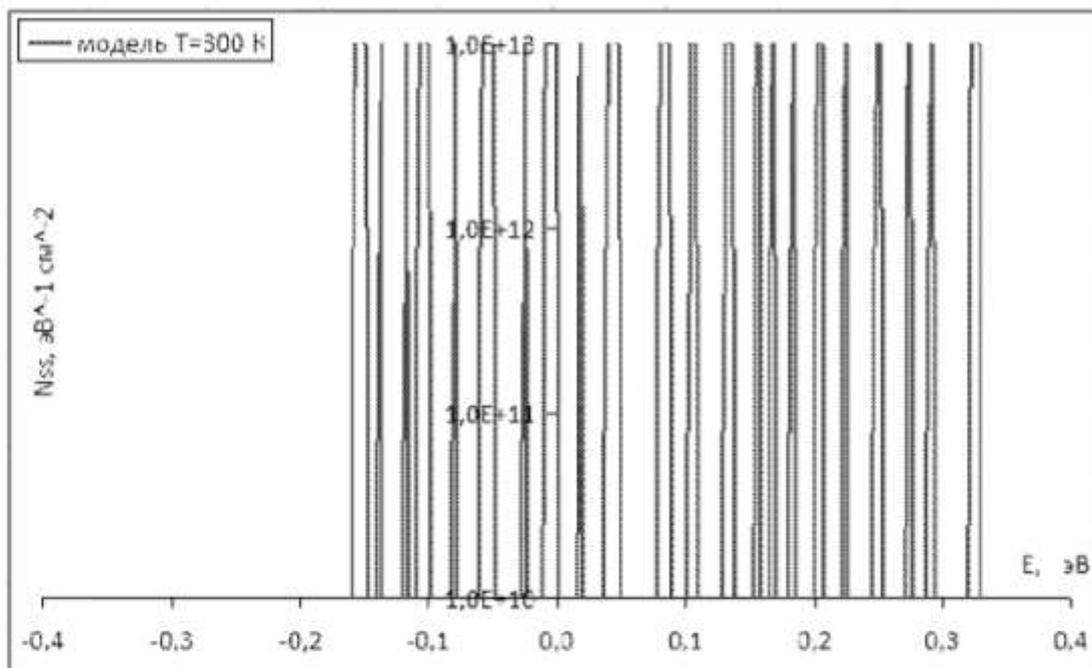


Рис. 3.6в. « «Модель» – теоретическая плотность поверхностных состояний, полученная разложением экспериментальной плотности поверхностных состояний в ряд при температуре $T=5\text{K}$. [77].

После различных доз облучения каждый раз заново по ВЧ и НЧ S - V -характеристикам рассчитывались $N_{ss}(E, T)$, на рис. 3.6 приведены графики экспериментальной плотности поверхностных состояний и модельной плотности поверхностных состояний для МДП структур. Этот спектр разложим в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям согласно формуле (10). При этом $GN(E_0, E, T)$ функция (11) берётся при температуре измерения плотности поверхностных состояний. Следующим этапом построения теоретической плотности поверхностных состояний является разбиение исследуемого интервала энергии на конечное число мелких ячеек и подбор подходящих значений $N_{ss}(E_i)$. Например, всю запрещённую зону можно разбить на 10^3 равных интервалов. После этого на каждой ячейке $1 \leq i \leq 10^3$ задаются численные значения N_{ssi} . Полная совокупность значений N_{ssi} подбирается таким образом, что теоретическая плотность поверхностных состояний максимально приближается к экспериментальной кривой. На рис. 3.5 а и рис. 3.6 а приведены подгоночные теоретические плотности поверхностных состояний, построенные указанным способом. Как видно из рисунков, при комнатной температуре из конечного числа $GN(E_0, E, T)$ функций можно легко построить сплошной спектр плотности поверхностных состояний, который с требуемой точностью совпадает с экспериментальной кривой. После

этого можно легко вычислить $N_{\Sigma}(E)$ и получить графики теоретической плотности поверхностных состояний при низких температурах. Для этого в теоретическую формулу плотности поверхностных состояний (3.1) подставляются численные значения низких температур и на компьютере по формуле (3.1) вычисляются $N_{\Sigma}(E)$ и строятся графики. Графики плотности поверхностных состояний при различных температурах, полученные таким путем, приведены на рисунках 1б и 2б,в. Из этих рисунков хорошо видно, что с понижением температуры образца сначала на графике плотности поверхностных состояний появляются отдельные пики. При дальнейшем понижении температуры эти пики отдаляются друг от друга, и сплошной спектр плотности поверхностных состояний превращается в полосатый. При низкой температуре плотность поверхностных состояний превращается в дискретный спектр. Таким образом, с понижением температуры сплошной спектр плотности поверхностных состояний превращается в дискретный.

Влияние γ -облучения на характеристики границы раздела полупроводник-диэлектрик исследованные в работах [80-98], также может быть исследовано предложенным методом разложения плотности поверхностных состояний по GN- функциям.

ГЛАВА 4. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЫ

Ширина запрещённой зоны в полупроводниках чувствительна к различным внешним воздействиям (деформация, давление, температура). В предыдущих главах показано, что спектр плотности поверхностных состояний (ППС) сильно зависит от температуры. Это связано с термическим уширением энергетических состояний в запрещённой зоне полупроводника. Используя результаты исследований предыдущих глав, можно исследовать эффект термической зависимости ширины запрещённой зоны в полупроводниках.

Четвёртая глава посвящена исследованию температурной зависимости ширины запрещённой зоны с помощью разработанной математической модели. Температурная зависимость плотности поверхностных состояний $N_{ss}(E,T)$ может быть использована для исследования температурной зависимости ширины запрещённой зоны полупроводника $E_g(T)$.

4.1. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны в полупроводниках и объяснение эффекта с помощью математической модели

Температурная зависимость плотности поверхностных состояний $N_{ss}(E,T)$ может быть

использована для исследования температурной зависимости ширины запрещённой зоны полупроводника $E_g(T)$. Плотность поверхностных состояний полупроводника, включая зону проводимости и валентной зоны, разложим в ряд по формуле (3.1). Графически рассмотрим температурную зависимость $N_{ss}(E, T)$, для этого приведём графики плотности поверхностных состояний при различных температурах. Для простоты предположим, что зона проводимости и валентная зона состоят из густо расположенных дискретных энергетических уровней. Плотность поверхностных состояний в зонах постоянна $N_{ss} = 10^{15} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-2}$, а в запрещённой зоне в интервале энергий $E \in [E_v, E_c]$ энергетические уровни отсутствуют (возможно, что имеется энергетическое состояние с концентрацией, например, $N_{ss} = 10^{12} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-2}$ на крае запрещённой зоны $N_{ss}(E)$, которое скачком меняется с $10^{12} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-2}$ на три-четыре порядка). На рис. 4.1 приведены графики плотности поверхностных состояний для трёх различных температур. При низкой температуре график плотности поверхностных состояний имеет чёткую границу и ширину запрещённой зоны $E_g = 1.1 \text{ эВ}$. Повышение температуры изменяет $N_{ss}(E, T)$. При $T = 300 \text{ K}$ края зон размываются и резкого перехода из разрешенных зон в запрещённую не наблюдается. В этом случае за счёт расширения GN -функции с увеличением температуры

края расширенных зон смещаются вглубь запрещенной зоны. В результате ширина запрещенной зоны E_g с ростом температуры уменьшается.

При увеличении температуры в интервале $10 \div 300\text{K}$ ширина запрещенной зоны E_g уменьшается с 1.1эВ до 1.0эВ . экспериментальное уменьшение ширины запрещенной зоны приближенно описывают следующим выражением $E_g(T) = E_g(0) - \beta T$ (4.1)

Численное значение β , для различных полупроводников меняется в интервале $4 \cdot 10^{-4} - 5 \cdot 10^{-4}$ эВ/К. Оценим численное значение коэффициента β используя результаты графика на рис. 4.1 по следующей формуле:

$$\beta = \frac{E_g(T_0) - E_g(T_1)}{T_1 - T_0} \quad (4.2)$$

и для разных интервалов температур

$$T_0 = 10\text{ K} \quad T_1 = 300\text{ K} \quad \beta_{300} = 3.380 \cdot 10^{-4}$$

$$T_0 = 10\text{ K} \quad T_1 = 500\text{ K} \quad \beta_{500} = 3.5837 \cdot 10^{-4}$$

Материал	$\beta, 10^{-4}$ эВ/К	Материал	$\beta, 10^{-4}$ эВ/К
Si	-4.00	As ₂ Se ₂	-10.00
Ge	-4.00	AsSe ₂ Te	-9.80
B	-3.50	As ₂ SeTe ₂	-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 ₂ As ₂	-5.80	GaP	-5.5
CdSb	-5.60	AlSb	-3.5

Таблица 1

Коэффициент
термической
зависимости ширины
энергетической

ширину запрещённой зоны $E_g(T)$ определим следующим образом. На рис. 4.1 а,б значение E соответствующие пересечению $N_{ss}(E,T)$ с линией n_{cr} , определяющей края щели для различных полупроводников [99-108] запрещённой зоны. Будем считать краями зон E_c и E_v . Длина отрезка $E_c(T) - E_v(T) = E_g(T)$ является ширина запрещённой зоны. При низких значениях n_{cr} с ростом температуры ширина запрещённой зоны уменьшается. Изменения ширины запрещённой зоны при различных температурах происходит по-разному. Это приведёт к тому, что коэффициент β меняется с изменением температуры. Температурная зависимость β наблюдается на экспериментах.

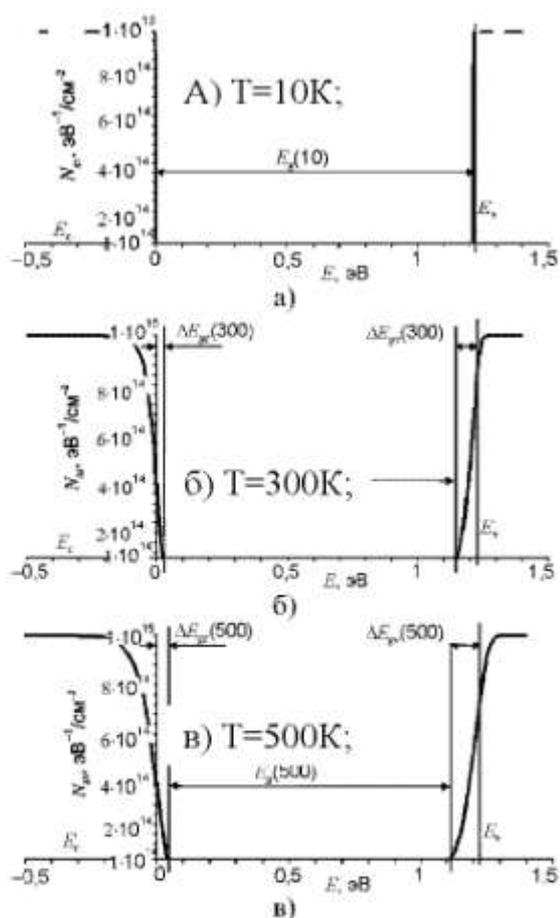


Рис. 4.1 Зонная картина полупроводника для различных температур [109]

Оценки численных значений, полученных из графиков рис. 4.1 для β дают величины порядка $(1-5) \cdot 10^{-4}$ эВ/К, т.е. значения β имеют одинаковый порядок с экспериментальными данными [110-122], что серьезно меняет положение дел и существенно влияет на существующие взгляды о механизмах температурной зависимости ширины запрещенной зоны.

Следует особо подчеркнуть, что предложенный механизм изменения ширины запрещенной зоны с температурой является совершенно общим, и основывается на статистике Шокли-Рида-Холла и следует из общих принципов статистической физики.

Отсюда следует, что этот механизм изменения ширины запрещенной зоны с температурой проявляется во всех случаях независимо от материала полупроводника, и коэффициент β имеет примерно одинаковую величину для всех материалов. Точное численное значение β зависит от формы плотности состояний в валентной зоне и в зоне проводимости. Отсюда возникает связь между плотностью энергетических уровней в разрешенных зонах и термическая зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника. Существующие теории изменения ширины запрещенной зоны с ростом температуры основаны на конкретных механизмах [28]. Различные

механизмы изменения ширины запрещённой зоны дают независимый вклад в результирующий эффект.

Таким образом, предложенная здесь теория не противоречит существующим теориям, а наоборот, удачно дополняет их, причём результирующая величина изменения ширины запрещённой зоны должна быть суммой вкладов всех механизмов.

4.2. Температурная зависимость плотности состояний и ширины запрещённой зоны полупроводника

Плотность состояний в общем случае определяется энергетическим спектром образца и зависит от температуры и химического потенциала системы [12]. Температурная зависимость плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si может быть исследована с помощью разложения плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E, E, T)$ – функциям (производной по энергии вероятности опустошения поверхностных состояний). Применим этот метод разложения для исследования плотности объёмных состояний. Как и в теории некристаллических полупроводников [12], для определения разрешенных и запрещённых энергетических зон будем пользоваться понятием плотности состояний.

Для исследования температурной зависимости ширины запрещённой зоны рассмотрим простую модель.

Плотность состояний в зоне проводимости равно N_c , в валентной зоне N_v и в запрещённой зоне равна нулю.

Плотность состояний при конечной температуре $N_s(E, T)$ разложим в ряд по $GN(E_i, E, T)$ -функциям.

$$N_s(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{s_i}(E_i) GN(E_i, E, T) \quad (4.3)$$

Здесь $N_{s_i}(E_i)$ – плотность состояний при $T \rightarrow 0$. $GN(E_i, E, T)$ – производная по энергии от вероятности опустошения состояния с энергией E . Ранее было показано, что $GN(E_i, E, T)$ – функция при $T \rightarrow 0$ стремится к дельта-функции Дирака.

Для $N_{s_i}(E_i)$ выберем следующее распределение.

$$\begin{aligned} N_{s_i}(E_i) &= N_c && \text{при } E > E_c \\ N_{s_i}(E_i) &= 0 && \text{при } E_c > E > E_v \\ N_{s_i}(E_i) &= N_v && \text{при } E < E_v \end{aligned} \quad (4.4)$$

В выражение (4.3) подставляем $GN(E_i, E, T)$ в следующем виде

$$GN(E_i, E, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i)\right)\right) \quad (4.5)$$

Подставляя (4.4) и (4.5) в (4.3), получим график плотности состояний при различных температурах. На рис. 4.1 показаны графики плотности состояний при температурах $T=10\text{К}$, 300К , 500К . Из этих графиков хорошо видно, как с ростом температуры уменьшается ширина запрещённой зоны. Такое уменьшение ширины запрещённой зоны появляется с температурным

уширением энергетических уровней зоны проводимости и валентной зоны.

Графики плотности состояний при температурах $T=300\text{K}$, 500K по своей форме напоминают плотности состояний неупорядоченных полупроводников [12]. Концепция плотности электронных состояний для некристаллических материалов остается справедливой в той же мере, что и для кристаллических. Особенно важным является вопрос о состояниях в запрещённой зоне. В этой модели было введено понятие “краёв подвижности” при энергиях в хвостах зон. Эти края подвижности совпадают с введёнными ранее Моттом критическими энергиями, отделяющими локализованные состояния от нелокализованных. Разность между энергиями краёв подвижности в зоне проводимости и валентной зоне называют “запрещённой зоной по подвижности” [12]. Здесь, при математическом моделировании процесса изменения ширины запрещённой зоны с температурой, мы воспользуемся понятием “ширина запрещённой зоны”. Значение плотности состояний, соответствующее энергии краёв запрещённой зоны E_c и E_v , обозначим через N_c . Тогда энергетическое положение краёв запрещённой зоны определяется решением следующего трансцендентного уравнения

$$N_s(E_c) = N_c \quad (4.6) \quad \text{или} \quad \sum_{i=1}^n N_{s_i}(E_c) GN(E_c, E, T) = N_c \quad (4.7)$$

При заданной N_k решение уравнения (4.7) при известной $N_{\infty}(E_i)$ определяет значения границы запрещённой зоны $E_c(T)$ и $E_v(T)$, как функции температуры T . Тогда ширина запрещённой зоны при заданной температуре $E_g(T)$ определяется как разница значений $E_c(T)$ и $E_v(T)$

$$E_g(T) = E_c(T) - E_v(T) \quad (4.8)$$

Изменение ширина запрещённой зоны возникает за счёт изменения краёв запрещённой зоны и определяется следующим выражением

$$\delta E_g(T) = \delta E_c(T) - \delta E_v(T). \quad (4.9)$$

Проведем численное моделирование процесса изменения ширины запрещённой зоны. На рис. 4.2 (пунктирная линия) показана температурная зависимость изменения ШЗЗ от температуры в интервале температур 10К-500К. Из приведённого рисунка хорошо видно, что ширина запрещённой зоны линейно уменьшается с ростом температуры образца. Коэффициент температурного изменения ширина запрещённой зоны $\beta = \partial E_g(T) / \partial T$, определённый из этих графиков, как функция температуры, приведён на рис. 4.4 (пунктирная линия). Из этого рисунка видно, что когда $N_x(E_i)$ имеет прямоугольную форму, и в запрещённой зоне нет дискретных уровней, β почти не зависит от температуры.

На рис. 4.4 приведёна экспериментальная температурная зависимость изменения ширины

запрещённой зоны, взятая из работы [110]. Как видно из этого рисунка, теоретические Расчёты температурного изменения ширины запрещённой зоны удовлетворительно описывают экспериментальные результаты изменения ширины запрещённой зоны, определённые оптическими измерениями. Отклонение результатов эксперимента и численного моделирования процесса термического изменения ширины запрещённой зоны может быть обусловлено многими причинами. Ясно, что существует возможность одновременного действия еще других нескольких механизмов температурного изменения ширины запрещённой зоны [28,110]. Однако, для упрощения задачи другими механизмами будем пренебрегать и рассмотрим только температурное уширение энергетических уровней.

Рассмотрим вопрос о том, как будет влиять присутствие дискретных уровней в запрещённой зоне на температурную зависимость ширины запрещённой зоны. Будем исследовать простой случай, когда в запрещённой 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 (4.4).

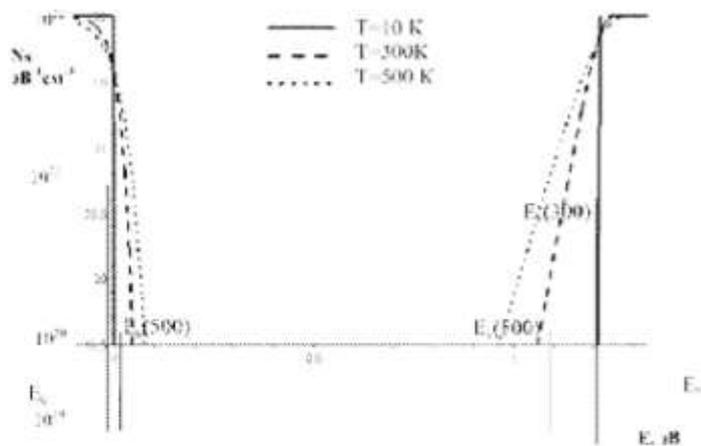
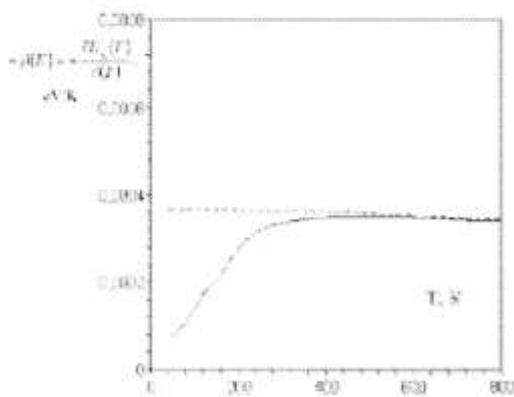


Рис 4.2.

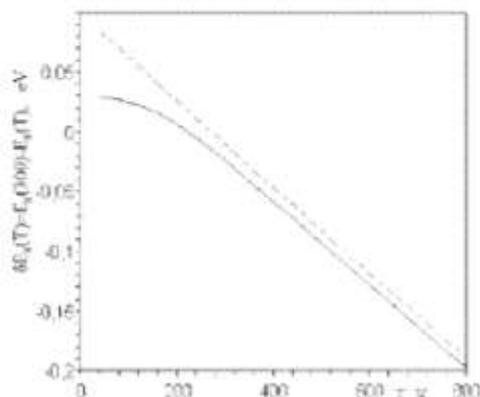
Графики плотности состояний по (4.3) при температурах $T=10\text{K}$, 300K , 500K .



..... В запрещенной зоне нет дискретных уровней.
 — В запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон 6 дискретных уровней

Рис 4.5.

Температурная зависимость ширины запрещенной зоны при $T=50\text{K}-300\text{K}$ из работы [110]



..... В запрещенной зоне нет дискретных уровней.
 — В запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон 6 дискретных уровней

Рис 4.6.

Температурная зависимость ширины запрещенной зоны при $T=100\text{K}-800\text{K}$ из работы [110]

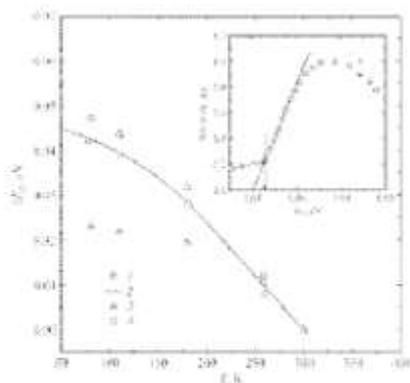


Рис.4.3.

Температурная зависимость изменения ширины запрещенной зоны по (4.9)

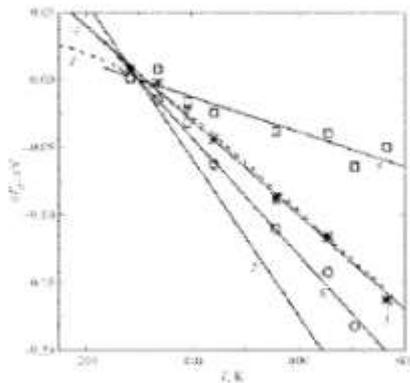


Рис.4.4.

$\beta(T)$ – Коэффициент температурного изменения ширины запрещенной зоны по (4.2)

Зависимость изменения ширины запрещённой зоны от температуры в этом случае определяется так же как в предыдущем случае, решением системы уравнений (4.4)-(4.5). Точно таким же образом, ширина запрещённой зоны при заданной температуре $E_g(T)$ определяется выражением (4.8), а её изменение $\delta E_g(T)$ выражением (4.9). На рис. 4.3 (непрерывная линия) приведён график зависимости $\delta E_g(T)$ от температуры. Как видно из этого рисунка, при низких температурах график зависимости $\delta E_g(T)$ от температуры отклоняется от линейности. Это отклонение появляется после того, как мы введём в запрещённой зоны 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 краёв запрещённой зоны полупроводника. На рис. 4.2 (непрерывная линия) приведён график зависимости $\beta = \delta E_g(T) / \delta T$ от температуры T . Как видно из этого рисунка, при низких температурах β начинает постепенно уменьшаться. Это уменьшение также обусловлено дискретными энергетическими уровнями у краёв запрещённой зоны полупроводника. На рис. 4.4 и рис. 4.5 приведены графики температурной зависимости ширины запрещённой зоны для полупроводника, полученные при оптических измерениях [110]. Как отмечено в этой работе, полученные экспериментальные

значения $E_g(T)$ зависят от методики её определения. Если учесть, что ширина запрещённой зоны, определённые по температурной зависимости электропроводности и по измерениям спектральных зависимостей поглощения света, могут различаться, то при сравнении теории и эксперимента необходимо учитывать это обстоятельство. Как видно из рисунков, между экспериментальными и теоретическими результатами имеется хорошее согласие. Сравнение теории с экспериментами других работ [110] также дают хорошие результаты. При сравнении теории и эксперимента следует обратить особое внимание на низкотемпературный участок зависимости ширины запрещённой зоны от температуры. В нашем случае низкотемпературный изгиб $E_g(T)$ обусловлен присутствием дополнительных уровней в запрещённой зоне. В общем случае величина и форма изгиба $E_g(T)$ зависят от формы вида плотности состояний $N_s(E_i)$ как в разрешенных зонах, так и в запрещённой зоны. Ясно, что причиной отступления экспериментальной зависимости изменения ширины запрещённой зоне от теоретической является то, что истинная плотность состояний отличается от плотности состояний модели.

ГЛАВА 5. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Закон дисперсии, как известно, полностью определяет как динамику ($v(p)=\nabla\varepsilon(p)$), так и статистику зонных носителей заряда. Простейший квадратичный закон дисперсии, характеризуемый единственным параметром – эффективной массой, играет особую роль в физике полупроводников. Одним из наиболее часто употребляемых понятий такого рода, является эффективная масса, вводимая для описания плотности состояний. Последняя является, пожалуй, наиболее важным понятием физики конденсированных сред, поскольку определяет такие важнейшие их характеристики, как концентрация носителей, их распределение по энергетическим состояниям, плотность состояний на уровне Ферми, играющую решающую роль в металлах, вырожденных полупроводниках и, особенно, в квантовых гетероструктурах. Эти же характеристики, в свою очередь, необходимы для описания любых явлений в кристалле, будь то кинетические, магнитные, оптические или другие свойства. Удобство введения и использования эффективной массы для описания плотности состояний обусловлено в первую очередь тем, что плотность

состояний является скалярной величиной, и характеризующая её масса даже в случае анизотропного закона дисперсии выражается через простые скалярные комбинации компонента тензора обратной эффективной массы.

В этой главе изучены методы определения энергетического спектра свободных электронов в полупроводниках в отсутствие в квантующем магнитном поле.

5.1. Методы определения температурной зависимости эффективной плотности состояний и ширины запрещённой зоны в полупроводниках

Рассмотрим стационарные состояния электрона в периодическом поле кристалла $k\mathcal{P}$ -методом [122]:

$$\left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\mathcal{P}_{nn'}^\alpha(k_0) \mathcal{P}_{nn'}^\beta(k_0)}{\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)} \quad (5.1)$$

Как следует из выражения (5.1), отклонение величины эффективной массы m от массы свободного электрона m_0 полностью определяется $k\mathcal{P}$ -членом гамильтониана. Второе слагаемое в правой части (5.1) показывает, что отличие эффективной массы в n -й энергетической зоне m_n от массы m_0 обусловлено существованием других зон. Условно можно говорить, что отличие m_n от m_0 вызывается «взаимодействием»

между зонами. Это «взаимодействие» определяется матричными элементами оператора импульса $\hat{p}_{mn}(k_0)$ и энергетическими зазорами между зонами $\varepsilon_n(k_0) - \varepsilon_{n'}(k_0)$ в точке k_0 .

Эффективная масса электронов проводимости может зависеть от температуры и всестороннего давления. Это следует непосредственно из выражения (5.1): как энергетические разности $\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}$, так и матричные элементы \hat{p}_{nn} могут изменяться с температурой и давлением.

Насколько можно судить по имеющимся экспериментальным данным, энергетические зазоры значительно сильнее изменяются с температурой и давлением, чем матричные элементы, и изменение эффективных масс определяется главным образом изменением $\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}$.

Изменение энергетических зазоров (в частности, ширины запрещённой зоны ε_g) и эффективных масс m с давлением связано, очевидно, только с сокращением размеров кристалла. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны и эффективной массы определяется двумя причинами: тепловым расширением кристалла, т.е. изменением периода решётки и взаимодействием носителей заряда с колебаниями решётки. Производную $\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T}$ можно представить в виде суммы

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} = \left(\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} \right)_P + \left(\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} \right)_\Omega$$

где $\left(\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} \right)_P$ – изменение ширины запрещённой зоны, вызванное тепловым расширением в отсутствие колебания решётки (это эквивалентно изменению ε_g с температурой при фиксированном давлении P); $\left(\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial T} \right)_\Omega$ – изменение ε_g , обусловленное взаимодействием носителей заряда с тепловыми колебаниями (изменение ε_g при фиксированном объёме кристалла Ω).

Эренрайх [123] и Равич [124] исследовали температурную зависимость эффективной массы, обусловленную как тепловым расширением решётки, так и взаимодействием носителей заряда с колебаниями решётки. Рассматривая линейный по смещениям атомов член в потенциале во втором порядке теории возмущений, Эренрайх показал, что электрон-фононное взаимодействие вносит пренебрежимо малый вклад в температурный коэффициент эффективной массы. Следовательно, вся зависимость эффективной массы от температуры обусловлена тепловым расширением.

В работах [125-138] исследовано влияние температуры на эффективную массу плотности состояний в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$. На рис. 5.1 эффективная масса $\frac{m}{m_0}$ представлена в зависимости от температуры и концентрации носителей в виде

трёхмерной поверхности. Как следует из рис. 5.1, эффективная масса $\frac{m}{m_0}$ возрастает с увеличением температуры и концентрации носителей заряда всех исследованных составов, что указывает на не параболичность валентной зоны твёрдых растворов $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$.

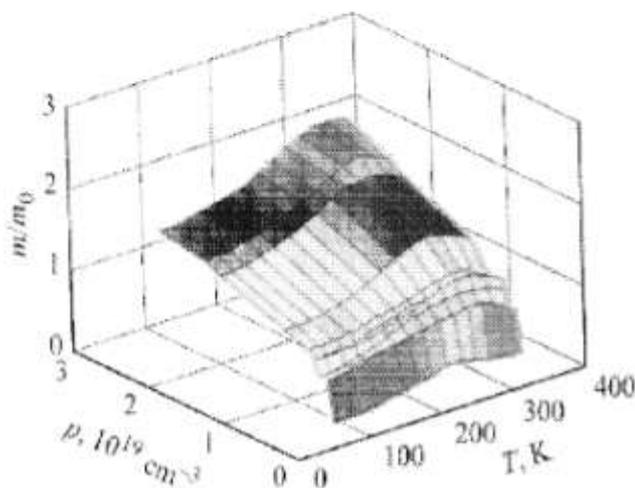


Рис. 5.1.
Зависимость эффективной массы плотности состояний m/m_0 от температуры и концентрации носителей в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ при $x=1-1.5$, $y=0.06-0.09$ [130]

Как и в $n\text{-BiTe}_{3-y}\text{Se}_y$ [139], зависимость $\frac{m}{m_0}$ от T в $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ не может быть представлена в виде степенной функции m^s [7] в широком температурном

Угловые коэффициенты температурных зависимостей коэффициента термоэдс $\alpha(s_1)$, эффективной массы плотности состояний $m/m_0(s_2, s_3)$ и подвижности $\mu_0(s_4, s_5)$ в твёрдых растворах $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$

Номер образца на рисунках	x	y	s_1	s_2	s_3	$[s_2]$	$[s_3]$	$\rho \cdot 10^{-19}, \text{cm}^{-3}$
			($T < 150 \text{ K}$)	($T < 150 \text{ K}$)	($T > 150 \text{ K}$)	($T < 150 \text{ K}$)	($T > 150 \text{ K}$)	
1	1	0.06	0.89	0.25	0.35	1.45	2.15	0.4
2	1.1	0.06	0.76	0.05	0.65	1.85	2.2	0.5
3	1.2	0.06	0.76	0.15	0.5	1.85	2.2	0.4
4	1.2	0.09	0.74	0.1	0.5	1.7	2.15	0.7
		0.09	0.76	0.05	0.5	1.7	2.1	0.8
		0.09	0.79	0.15	0.45	1.15	2.3	2
5	1.3	0.09	0.72	0.15	0.8	1.6	2.15	0.3
		0.06	0.61	0.1	0.75	1.7	2.4	0.5
		0.07	0.78	0.05	0.8	1.8	2.45	0.7
6	1.3	0.07	0.80	0.1	0.65	1.7	2.3	0.9
		0.09	0.81	0.05	0.5	1.7	2.4	1.8
7	1.5	0.09	0.81	0.2	0.8	1.6	1.7	0.5

интервале, так как величина s изменяется с температурой (см. таблицу).

В работе [140] выполнено сравнение соотношений, используемых для описания температурной зависимости ширины запрещённой зоны в кристаллах. Показано, что при $kT \gg \hbar\omega$ известное соотношение Варшни может быть получено из неэмпирического выражения Фэна, в явном виде учитывающего статистику фононов. В диапазоне, где высокотемпературное условие не соблюдается, для ряда материалов рассчитаны величины температурного коэффициента β ширины запрещённой зоны. Установлено, что соотношение Варшни дает завышенные значения β , тогда как результаты Расчёта по выражению Фэна согласуются с экспериментом.

Важной характеристикой энергетической структуры полупроводников является температурный коэффициент β ширины запрещённой зоны E_g , который для большинства материалов имеет отрицательное значение [141]. Величину $\beta = dE_g/dT$ определяют обычно по наклону линейной части температурной зависимости $E_g(T)$, которая, однако, в области низких температур носит существенно нелинейный характер [142]. В настоящее время для описания $E_g(T)$ распространены различные эмпирические и полуэмпирические методы, которые на качественном уровне удовлетворительно воспроизводят форму наблюдаемых зависимостей [143-146]. Как

правило, подобные Расчёты не несут количественной информации о физических величинах, например, энергии фононов, хотя не вызывает сомнений, что электронно-колебательные взаимодействия в значительной степени влияют на $E_g(T)$.

Линейно-квадратичное соотношение, предложенное Варшни [145] и получившее широкое распространение для описания зависимостей $E_g(T)$ имеет вид

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha_1 T^2}{\alpha_2 + T}$$

где $E_g(0)$ – ширина запрещённой зоны при нулевой температуре, α_1 и α_2 – эмпирические параметры, не имеющие конкретного физического смысла.

Вместе с тем, в рамках однофононного приближения и теории возмущения второго порядка температурная зависимость ширины запрещённой зоны может быть представлена как [147-149]

$$E_g(T) = E_g(0) - A(\langle n \rangle + const)$$

здесь A – параметр Фэна, зависящий от микроскопических свойств материала [150]; $\langle n \rangle = [\exp(\hbar\omega / kT) - 1]^{-1}$ – фактор Бозе-Эйнштейна для фононов с энергией $\hbar\omega$; $const$ – постоянная, влияющая на величину E_g при нулевой температуре. Микроскопическое выражение для параметра Фэна было записано в работе [150]

$$A = \frac{e^2}{\sqrt{2}\hbar} (m_0 \hbar \omega)^{1/2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left[\left(\frac{m_c}{m_0} \right)^{1/2} + \left(\frac{m_h}{m_0} \right)^{1/2} \right]$$

здесь e – заряд электрона, ϵ – диэлектрическая постоянная; ϵ_0 и ϵ_∞ – соответственно статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости; m_0 – масса свободного электрона; m_e и m_h – эффективные массы электрона и дырки соответственно.

Температурная зависимость термодинамической плотности состояний $N_s(E, T)$ может быть использована для исследования температурной зависимости ширины запрещённой зоны полупроводника $E_g(T)$. В работах [151-153] рассмотрена температурная зависимость плотности энергетических состояний определённая методом релаксационной спектроскопии энергетических уровней в полупроводниках. В главе 3 показано, что плотность поверхностных состояний зависит от температуры. Предложена методика определения плотности поверхностных состояний. Показано, что за счёт температурного уширения уровней, дискретный спектр с повышением температуры превращается в сплошной энергетический спектр. С помощью разложения энергетического спектра плотности состояний по GN функциям производная по энергии от вероятности опустошения энергетического уровня было показано, что величина энергетических щелей зависит от температуры. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны определяется температурной зависимостью плотности энергетического состояния зоны проводимости и

валентной зоны полупроводника. За счёт термического уширения плотности состояний вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны уменьшается ширина запрещённой зоны. При расчёте температурной зависимости ширины запрещённой зоны для простоты предполагалось, что плотность состояний в зонах постоянная, края зоны проводимости и валентной зоны резкие и имеют ступенчатую форму. В этих работах предполагалось, что эффективная масса плотности состояний не зависит от температуры. Однако, как показали эксперименты [130], эффективная масса плотности состояний зависит от температуры. Это изменение эффективной массы меняет температурную зависимость ширины запрещённой зоны. Это может привести дополнительно к изменению температурной зависимости плотности состояний а также внести дополнительный вклад в температурную зависимость ширины запрещённой зоны. Этот вопрос ранее в литературе не обсуждался.

5.2. Электронные системы с квадратичным законом дисперсии

Распределение электронных состояний по энергии является одной из наиболее важных характеристик электронного энергетического спектра. Для того, чтобы

описать это распределение, введём понятие плотности состояний. Пусть $N(E)$ обозначает число состояний с энергией меньшей или равной E (не нормировано на объём V). Дифференциал $dN(E)$ даёт число состояний в интервале энергий от E до $E+dE$.

Плотность энергетических состояний называется функция $N_s(E)$, равная отношению $dN(E)/V=dn$ к ширине интервала dE :

$$N_s(E)=dn(E)/dE \quad (5.2)$$

Это функция тесным образом связана с законом дисперсии электронов $E=E(p)$.

Нетрудно получить аналогичные выражения для плотности состояний квазичастиц в решётке, которые описываются квадратичным законом дисперсии. Рассмотрим системы квазичастиц различной размерности: трёхмерные, двумерные и одномерные.

В трёхмерной системе квазичастиц объём фазового пространства, приходящийся на одно состояние, равен $(2\pi\hbar)^3/V$.

Переходя с помощью закона дисперсии $E=p^2/(2m^*)$ от переменной p к переменной E , получим

$$dN^{\text{III}}(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi V(m^*)^{3/2}\sqrt{E}dE}{(2\pi\hbar)^3}$$

или
$$dn^{\text{III}}(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi(m^*)^{3/2}\sqrt{E}dE}{(2\pi\hbar)^3}$$

откуда
$$N_s^{\text{III}}(E) = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}\sqrt{E}}{2\pi^2\hbar^3} \quad (5.3)$$

Выражение для плотности состояний трёхмерной системы квазичастиц с квадратичным изотропным законом дисперсии (5.3) совпадает с аналогичным выражением для свободных электронов, если заменить эффективную массу m^* на массу свободного электрона m_0 .

Выражение (5.3) нетрудно обобщить на случай квадратичного анизотропного закона дисперсии

$$E = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{p_z^2}{2m_z} \quad (5.4)$$

которому соответствуют эллипсоидальные изоэнергетические поверхности. Число электронных состояний внутри такого эллипсоида:

$$n^{III}(E) = \frac{\Delta(E)^2}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{16\sqrt{2}\pi\sqrt{m_x m_y m_z} E^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3} \quad (5.5)$$

Дифференцируя по E , находим плотность электронных состояний $\nu^{III}(E)$ для эллипсоидальных изоэнергетических поверхностей

$$N_s^{III}(E) = \frac{\sqrt{2}\sqrt{m_x m_y m_z} E^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (5.6)$$

Величина размерности массы, равная кубическому корню из произведения диагональных компонент тензора эффективных масс $(m_x m_y m_z)^{1/3}$, которая определяет величину $\nu^{III}(E)$, получила название эффективной массы плотности состояний и обозначается m_d

$$m_d = \sqrt[3]{m_x m_y m_z} \quad (5.7)$$

Для двумерной кристаллической решётки на одно электронное состояние приходится площадь фазового пространства величиной $(2\pi\hbar)^2/S$, где S – площадь кристалла. В случае изотропного закона дисперсии $E=p^2/(2m^*)$ изоэнергетические кривые являются концентрическими окружностями.

При этом число электронных состояний в колечке шириной dp , заключённом между окружностями с радиусами p и $p+dp$, составляет

$$dN_p'' = \frac{4\pi S p dp}{(2\pi\hbar)^2} \quad (5.8)$$

Переходя с помощью закона дисперсии от переменной p к переменной E , получим

$$dN_p'' = \frac{4\pi S m^* dE}{(2\pi\hbar)^2} \quad (5.9)$$

$$\text{или } dn_p'' = \frac{4\pi m^* dE}{(2\pi\hbar)^2} \quad (5.10)$$

Выражение для спектральной плотности состояний имеет вид

$$N_s''(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \quad (5.11)$$

Основной особенностью спектральной плотности состояний для двумерной системы является то, что она не зависит от энергии и определяется только величиной эффективной массы электронов.

В принципе, эффективная масса может зависеть от энергии и тогда двумерная плотность состояний будет также зависеть от энергии [154].

Для одномерного «кристалла» длиной L число электронов dN_p^1 в элементе dp фазового пространства равно

$$dN_{sp}^1 = \frac{2Ldp}{2\pi\hbar} \quad (5.12)$$

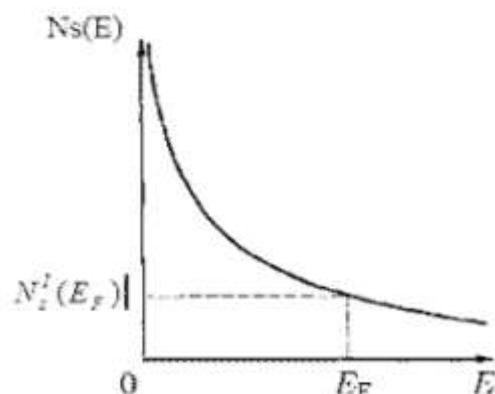
или
$$dn_p^1 = \frac{2dp}{2\pi\hbar} \quad (5.13)$$

Используя закон дисперсии $E=p^2/(2m^*)$, для плотности энергетических состояний $v^1(E)$ получим

$$N_s^1(E) = \frac{L\sqrt{m^*}}{\sqrt{2\pi\hbar}\sqrt{E}} \quad (5.14)$$

В одномерном случае эффективная масса плотности состояний m_d просто совпадает с эффективной массой m^* электронов. Функция $N_s^1(E)$ (рис. 5.2.) возрастает при уменьшении E , и имеет бесконечную интегрируемую особенность при $E=0$. Эта характерная черта плотности состояний одномерной системы играет принципиальную роль при распределении электронов по уровням энергии в квантующем магнитном поле.

Рис. 5.2.
Плотность состояний в одномерном случае.



5.3 Идеальный газ электронов в квантующем магнитном поле

Рассмотрим вначале идеальный газ электронов, заключённых в прямоугольный потенциальный ящик размерами L_x , L_y и L_z вдоль осей x , y и z . В идеальном газе электроны не взаимодействуют между собой, и поэтому энергетический спектр всей системы можно построить в одноэлектронном приближении, т.е. анализируя движение только одного электрона. Как уже отмечалось, компоненты импульса электрона, заключённого в потенциальный ящик, становятся квазинепрерывными величинами. Энергия электрона становится квазинепрерывной функцией импульса, хотя и описывается той же формулой, что и энергия свободной частицы [33]:

$$E = E(p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2}{2m_0} + \frac{p_y^2}{2m_0} + \frac{p_z^2}{2m_0}$$

Разделим энергию электрона на две составляющие, связанные с движением электрона в плоскости x y и вдоль направления оси z :

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_0} + \frac{p_z^2}{2m_0} = E_{\perp} + E_{\parallel} \quad (5.15)$$

Движение электрона в плоскости xy эквивалентно движению частицы в пространстве двух измерений. Как было показано выше, плотность состояний $N_s(E)$ свободных электронов в двумерном пространстве является постоянной величиной, которая определяется

формулой (5.8). В таком случае разрешённые значения энергии электрона образуют систему эквидистантных квазинепрерывных уровней энергии (левая часть рис. 5.3).

Каждый энергетический уровень системы сильно вырожден: одно и то же значение энергии соответствует большему числу электронных состояний. Однако это не означает, что принцип Паули не выполнен, так как в состоянии с заданной энергией находятся электроны с различными значениями компонент p_x и p_y импульса (сумма квадратов которых равна постоянной величине $2m_0E_{\perp}$), т.е. различными квантовыми числами n_x и n_y .

Поместим теперь систему электронов в постоянное однородное магнитное поле B , направленное вдоль оси z .

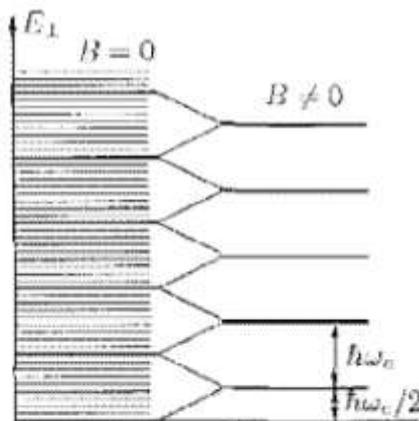


Рис. 5.3.
Квантование энергии
в магнитном поле B

Магнитное поле не меняет продольную составляющую движения электрона. Связанная с ней энергия E_{\parallel} электрона, как и при $B=0$, будет равна $p_z^2 / (2m_0)$.

В плоскости, перпендикулярной B , электроны начинают прецессировать по окружности радиуса

$r_B = m_0 v_{\perp} / |e|B$ (v_{\perp} – компонента скорости электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю) с циклотронной частотой $\omega_c = |e|B/m_0$. Энергия всякого периодического движения (например, движения электрона по атомных орбитах) квантуется. Если не рассматривать пока собственный магнитный момент электрона, связанный со спином, и использовать известное из квантовой механики выражение (1.37) представить в виде [33]

$$E = E_{\perp} + E_{\parallel} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_x^2}{2m_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.16)$$

Выражение (5.16) для энергии E электрона в магнитном поле с учётом спинового расщепления уровней энергии приобретает вид

$$E = E(n, s, k_z) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + s\mu_B B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} \quad (5.17) \text{ где}$$

s – спиновое квантовое число, принимающее значения ± 1 .

Таким образом, энергетический спектр электрона в магнитном поле определяется главным квантовым числом n , спиновым квантовым числом s и величиной проекции p_z его импульса на направление магнитного поля, которое определяется квантовым числом n_z .

Обратим внимание на то, что для свободного электрона в магнитном поле величина спинового расщепления уровней, равная $2\mu_B B$, совпадает с расстоянием $\hbar\omega_c$ между уровнями Ландау, построенными

без учёта спина электрона (поскольку образование уровней Ландау связано с движением электрона по орбите, расстояние $\hbar\omega_c$ между уровнями Ландау иногда называют орбитальным расщеплением).

Возникает своеобразная ситуация: спиновое расщепление снимет вырождение уровней Ландау с одним и тем же значением n , однако при этом возникает вырождение уровней, соответствующих квантовым числам $(n, s=+1)$ и $(n+1, s=-1)$. Переход от системы уровней Ландау без учёта спина к системе уровней с учётом спинового расщепления иллюстрирует рис. 5.4а. Видно, что вырождение, связанное со спином, отсутствует только на уровне 0^- .

Спектр разрешённых значений энергии электрона в магнитном поле представляет собой совокупность парабол $p_z^2/(2m_0)$, сдвинутых относительно друг друга по оси энергии на расстояние, равное $\hbar\omega_c$ (рис. 5.4б). Как и уровни Ландау, каждое состояние на параболе сильно вырождено. Подчеркнём одно, весьма важное, обстоятельство. Энергия электрона в магнитном поле непрерывно зависит только от одной координаты p_z -импульса. Вследствие система электронов в магнитном поле имеет многие черты одномерной системы.

Энергия электрона на каждой параболе зависит только от одной компоненты импульса p подобно тому, как это имеет место в одномерной электронной системе. В связи с этим для описания плотности электронных состояний на параболе можно воспользоваться выражением (5.14). При этом необходимо учесть, что энергия электронов на параболе отсчитывается не от $E=0$, а от величины $E=\hbar\omega_c(n+1/2)$, которая соответствует низшему состоянию с $p_z=0$. Это значит, что в качестве аргумента в формуле (5.14) следует рассматривать разность $E-\hbar\omega_c(n+1/2)$. Кроме того, необходимо учесть, что в магнитном поле каждое состояние по p_z имеет кратность вырождение $L_x L_y |e|B/(\pi\hbar)$.

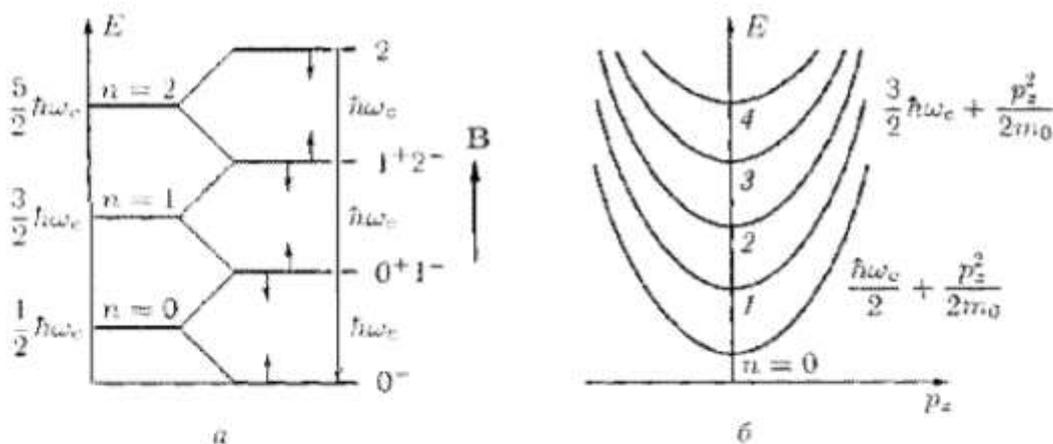


Рис. 5.4.

а) Спиновое расщепление уровней Ландау; б) зависимость энергии от импульса p_z в квантующем магнитном поле.

Принимая во внимание сделанные замечания, формулу для плотности $N_s(E)$ состояний на n -й параболе Ландау для кристалла единичных размеров ($L_x=L_y=L_z=1$) можно записать в виде

$$N_{sn}(E) = \frac{|e|B}{\pi\hbar} \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{E - \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})}} \quad (5.18)$$

Очевидно, чтобы получить полную плотность состояний $N(E)$ электронной системы в магнитном поле для данного значения энергии E , достаточно просуммировать выражения для $N_{sn}(E)$ по всем параболам, для которых аргумент $E - \hbar\omega_c(n + 1/2)$ является положительной величиной. Полная плотность состояний $N_B(E)$ в магнитном поле у электронной системы с квадратичным изотропным законом дисперсии без учёта спинового расщепления уровней Ландау может быть записана в виде

$$N_{sn}(E) = \frac{m^{3/2} \hbar \omega_c}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sum_{n=0}^{n_E} \left[E - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2} \quad (5.19)$$

Плотность состояний $N_n(E)$ на n -й параболе имеет бесконечную особенность при $p_z=0$ или, иначе, при $E = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. Функции $N_n(E)$ для $n=0, 1, 2, \dots$ показаны на рис 5.5а. Полная плотность состояний $v_B(E)$ показана на рис 5.5б. На этом же рисунке пунктиром изображена зависимость зонной плотности состояний $N_s(E)$ от энергии при $B=0$. При уменьшении магнитного поля B плотность парабол Ландау увеличивается. Очевидно, что в пределе при $B \rightarrow 0$ мы должны от дискретных парабол Ландау вновь перейти к квазинепрерывному спектру трёхмерной системы $E = E(p_x, p_y, p_z)$. Плотность состояний такой системы описывается формулой (5.6).

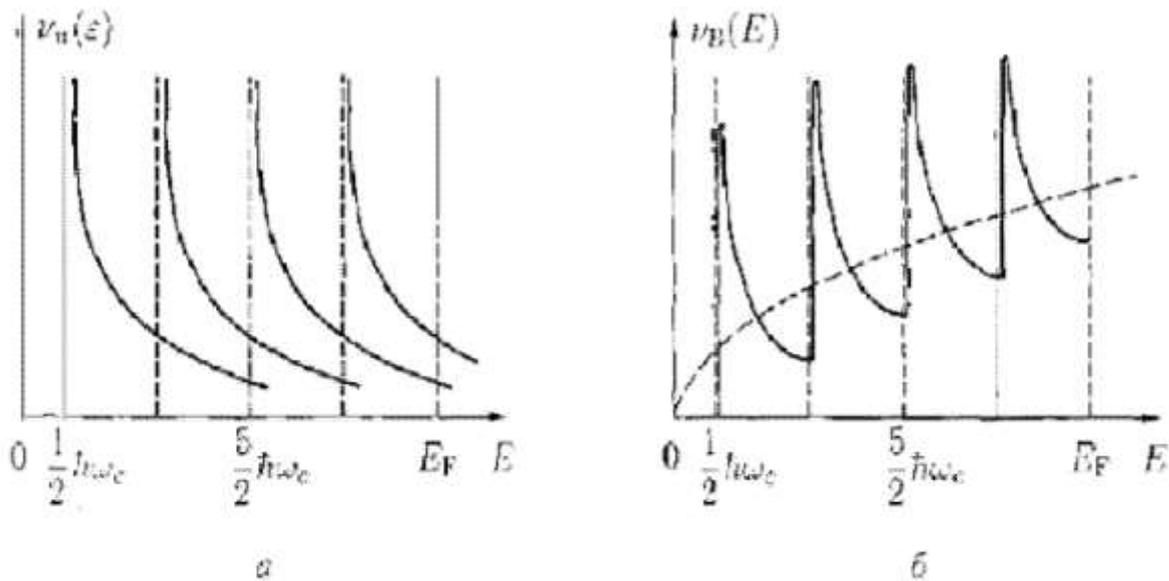


Рис. 5.5.

а) Плотность состояний на уровнях Ландау; б) Полная плотность состояний трёхмерного полупроводника в квантующем магнитном поле.

В работе [1] изучена временная зависимость генерационно-рекомбинационных процессов на границе раздела полупроводник диэлектрик, обусловленная тепловыми переходами, где показана возможность определения плотности поверхностных состояний с помощью прибора с зарядовой связью (ПЗС) на кремниевой основе. Определены энергетические спектры плотности поверхностных состояний на границе раздела в МДП структурах на базе SiO_2-Si . В.В. Поспеловым и Р.А. Сурисом [2], ёмкостными и релаксационными методами определены плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si , которые при температурах выше температуры жидкого азота рассматриваются как сплошной спектр. Природа поверхностных уровней является дискретной, а дискретный спектр плотности

поверхностных состояний МДП-структуры на базе SiO_2-Si из-за термического уширения энергетических состояний не определен. Следовательно, температура жидкого азота недостаточна для определения дискретного спектра плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si . Дальнейшее понижение температуры приведёт к сильному замедлению электронно-дырочных процессов и усложнит проведение эксперимента. Поэтому наиболее предпочтительным для исследования плотности поверхностных состояний является метод математического моделирования.

В работах [17-28,157] для исследования полупроводников с различными типами дефектов применена упрощенная статистическая модель Шокли-Рида-Холла. В настоящей работе природа дефектов не учитывается, и рассмотрен общий случай. Термическая генерация электронов с поверхностных и объёмных состояний из валентной зоны в зону проводимости и рекомбинация описываются статистикой Шокли-Рида-Холла [169]. Термическая генерация электронов с поверхностных и объёмных состояний $N_{ss}(E)$ после ухода информационного заряда свободных электронов над поверхностными состояниями описываются функцией $\rho(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau(E)}\right)$, здесь $\tau(E)$ время генерации из поверхностного состояния с энергией E . Для конкретного

значения t , когда $\tau(E) = \tau_0 \exp\left(\frac{E}{kT}\right)$, зависимость $\rho(t, E)$ от E имеет ступенчатый вид, а производная от $\rho(t, E)$ по энергии $GN(E)$ для конкретного $\tau(E)$ имеет δ -образный вид.

Если $E_0 = kT \ln(nT_0 / \tau_0)$, где время генерации определяется числом пропущенных нулей n и периодом переключений электродов прибора с зарядовой связью T_0 , то функция вероятности опустошений энергетических состояний $\rho(E_0(t), E, T) = 1 - \exp\left(-\exp\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)\right)$ является ступенчатой функцией, её производная по энергии (1.16) при низких температурах описывает дельта-функцию Дирака. Построена модель процесса определения плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si разложением спектра плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям. Исследована тепловая генерация электронов с поверхностных состояний на границе раздела полупроводник-диэлектрик. Показано, что сплошной спектр плотности поверхностных состояний, измеренный при комнатной температуре, при низких температурах превращается в дискретный энергетический спектр. Однако, в данной работе не рассмотрено влияние температуры на термодинамическую плотность состояний в квантующем магнитном поле.

ГЛАВА 6. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКА И ЕЁ СВЯЗЬ ОТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Плотность энергетических состояний определяет тепловые, оптические, электрические, магнитные и другие физические свойства полупроводников. Изменение энергетических щелей с ростом температуры можно объяснить влиянием колебаний решётки на энергетические уровни в кристаллах. Статистическое рассмотрение задачи проводится с помощью исследования свободной энергии кристалла как суммы энергий электронного газа, колебаний решётки и электронно-фононного взаимодействия [175]. С другой стороны следует учесть термическое уширение энергетических уровней излучательных переходов [175]. В работах [176-178] рассмотрена температурная зависимость плотности энергетических состояний, определённая методом релаксационной спектроскопии энергетических уровней в полупроводниках. Показано, что плотность поверхностных состояний зависит от температуры. Предложена методика определения плотности поверхностных состояний. Показано, что за

счёт температурного уширения уровней дискретный спектр с повышением температуры превращается в сплошной энергетический спектр. С помощью разложения энергетического спектра плотности состояний по GN функциям производная по энергии от вероятности заполнения энергетического уровня, было показано, что величина энергетических щелей будет зависит от температуры. Температурная зависимость ширины запрещённой зоны определяется температурной зависимостью плотности энергетического состояния зоны проводимости и валентной зоны полупроводника. За счёт термического уширения плотности состояния вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны уменьшается ширина запрещённой зоны. При Расчёте температурной зависимости ширины запрещённой для простоты предполагалось, что плотность состояния в зонах постоянная, края зоны проводимости и валентной зоны резкие и имеют ступенчатую форму. В этих работах предполагалось, что эффективная масса плотности состояний не зависит от температуры. Однако, как показали эксперименты [176-177], эффективная масса плотности состояний зависит от температуры. Эти изменения эффективной массы меняют температурную зависимость ширины запрещённой зоны. Но в реальном полупроводнике плотность состояния не является ступенчатой функцией энергии и определяется зонной

структурой образца. Более того, плотность состояния является настолько общей, что она может быть использована даже когда отсутствует зона Бриллюэна и резкие границы разрешенных и запрещённых зон [121,180].

Целью настоящей главы является исследование температурной зависимости ширины запрещённой зоны полупроводника с учётом зонной структуры и температурной зависимости эффективной массы носителей зарядов и сравнение теории с экспериментом.

6.1. Влияние эффективной массы электронов на температурную зависимость ширины запрещённой зоны в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$

При определении ширины запрещённой зоны значения плотности состояний соответствующей энергии краев запрещённой зоны E_c и E_v обозначим через W_k , температурная зависимость плотности состояний может быть исследована с помощью разложения плотности состояний в ряд по $GN(E_i, E, T)$ -функциям. Разложение имеет следующий вид [176-178]

$$N_{ss}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{ss_i}(E_i) GN(E_i, E, T), \quad (6.1)$$

которое получено в свою очередь из интегрального выражения:

$$N(E_0, T) = \int_{E_c}^{E_0} N(E) \rho(E_0, E, T) dE \quad (6.2)$$

$N(E_0)$ -число электронов, генерированных с квантовых состояний с энергией меньше E_0 , при произвольном распределении уровней по энергиям. Применим этот метод разложения для исследования плотности состояний в зоне проводимости полупроводника. Для квадратичного закона дисперсии плотность состояний для зоны проводимости равна [181]

$$N(E) = N_{n0} \sqrt{E - E_c} \quad N_{n0} = 4\pi(2m_n^*/h^2)^{3/2} \quad (6.3)$$

Аналогично для валентной зоны

$$N(E) = N_{p0} \sqrt{E_p - E} \quad N_{p0} = 4\pi(2m_p^*/h^2)^{3/2} \quad (6.4)$$

Как и в теории некристаллических полупроводников [121] для определения разрешенных и запрещенных энергетических зон будем пользоваться понятием плотности состояний. Подстановкой (6.3) и (6.4) в (6.2) получим модель, которая описывает температурную зависимость плотности энергетических состояний вблизи краёв зон.

Учитывая вышесказанное, разложим $N_s(E, T)$ в ряд по $GN(E_i, E, T)$ - функциям. в следующем виде:

для зоны проводимости:

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

$$N_{n0} = 4\pi(2m_n^*/h^2)^{3/2} \text{ при } E > E_c \quad (6.5)$$

для валентной зоны:

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

$$N_{p0} = 4\pi (2m_p^* / h^2)^{3/2} \quad \text{при} \quad E < E_v \quad (6.6)$$

для запрещённой зоны:

$$N_{ss}(E) = 0 \quad \text{при} \quad E_c > E > E_v \quad (6.7) \quad \text{где} \quad \Delta E = 1/n$$

Здесь, при математическом моделировании процесса изменения ширины запрещённой зоны с температурой, мы воспользуемся понятием ширины запрещённой зоны [121,180]. Значения плотности состояний, соответствующей энергии краев запрещённой зоны E_c и E_v , обозначим через N_k . Тогда энергетическое положение краев запрещённой зоны определяются решением следующих трансцендентных уравнений

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

$$\sum_{i=1}^n N_{sp}(E_i) GN(E_i, E, T) \Delta E = N_k \quad (6.8) \quad \text{где} \quad \Delta E = 1/n$$

Решение системы уравнений (6.7) и (6.8) при заданной N_k определяет значения границы запрещённой зоны $E_c(T)$ и $E_v(T)$, как функции температуры T . N_k является параметром задачи и определяется из эксперимента. Тогда ширина запрещённой зоны $E_g(T)$ при заданной температуре определяется как разница значений $E_c(T)$ и $E_v(T)$

$$E_g(T) = E_c(T) - E_v(T) \quad (6.9)$$

Здесь энергия $E_c(T)$ дна зоны проводимости, $E_v(T)$ – энергия потолка валентной зоны.

В работе [226] установлено, что в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ эффективная масса плотности состояний в валентной зоне сильно зависит от температуры. На рис 6.1 приведёна температурная зависимость эффективной массы плотности состояний $\frac{m}{m_0}$ в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ [226]. Используя данные рис. 6.1 вычислены с помощью модели вычислены изменения ширины запрещённой зоны в зависимости от температуры.

На рис 6.2 приведены графики плотности состояний при температурах $T=100\text{K}$ и $T=300\text{K}$. Как видно из рисунка 6.2 учёт изменения эффективной массы плотности состояний существенно влияет на плотность состояний вблизи валентной зоны. На рис 6.3 приведёны графики температурной зависимости ширины запрещённой зоны для твёрдых растворов $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ с учётом изменения эффективной массы плотности состояний взятой из рис 6.3 [226].

В таблице 1 приведены значения ширины запрещённой зоны для разных температур в интервале 100-300K с учётом и без учёта изменений эффективной массы плотности состояний валентной зоны.

Таблица 1.

T, K	p-Bi _{0,7} Sb _{1,3} Te _{2,93} Se _{0,07}	p-Bi _{0,7} Sb _{1,3} Te _{2,93} Se _{0,07}		p-Bi _{0,6} Sb _{1,2} Te _{2,91} Se _{0,09}		p-Bi _{0,5} Sb _{1,5} Te _{2,91} Se _{0,09}	
	$m_p^* = const$ Eg, эВ	$\frac{m}{m_0}$	Eg, эВ	$\frac{m}{m_0}$	Eg, эВ	$\frac{m}{m_0}$	Eg, эВ
100	0,213	0,93	0,214	0,80	0,216	0,64	0,217
120	0,209	0,94	0,210	0,81	0,213	0,64	0,214
140	0,205	0,98	0,205	0,86	0,208	0,66	0,210
160	0,200	1,03	0,200	0,91	0,202	0,69	0,206
180	0,196	1,10	0,193	0,96	0,197	0,74	0,200
200	0,191	1,18	0,186	1,01	0,191	0,79	0,195
220	0,186	1,27	0,179	1,07	0,184	0,81	0,190
240	0,181	1,37	0,171	1,12	0,178	0,85	0,184
260	0,176	1,46	0,163	1,16	0,171	0,88	0,178
280	0,172	1,52	0,156	1,17	0,166	0,90	0,173
300	0,167	1,52	0,150	1,12	0,162	0,91	0,168

Как видно из таблицы, изменение эффективной массы плотности состояний существенно влияет на значения ширины запрещённой зоны. Например, для твердого раствора p-Bi_{0,7}Sb_{1,3}Te_{2,93}Se_{0,07} изменение ширины запрещённой зоны за счёт изменения эффективной массы при температуре T=100К равна $\Delta Eg(100) = Eg(100, m_p^* = 0,93) - Eg(100, m_p^* = const) = 0,001 \text{ эВ}$. При увеличении температуры до T=300К изменение ширины запрещённой зоны за счёт изменения эффективной массы плотности состояний составляет

$$\Delta Eg(300) = |Eg(300, m_p^* = 1,35) - Eg(300, m_p^* = const)| = 0,0165 \text{ эВ}.$$

Отсюда видно, что уменьшение ширины запрещённой зоны за счёт изменения эффективной массы при увеличении температуры от 100К до 300К может расти больше чем на порядок. На рис. 6.3 приведены графики температурной зависимости ширины запрещённой зоны для твёрдых растворов $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ с учётом изменения эффективной массы плотности состояний, взято из рис. 6.1. Таким образом, изменения эффективной массы плотности состояний с температурой может сильно повлиять на температурную зависимость ширины запрещённой зоны.

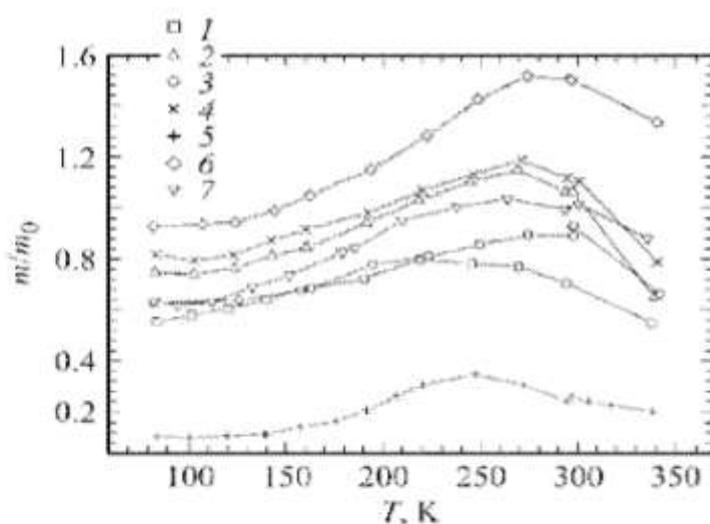


Рис. 6.1.

Температурные зависимости эффективной массы плотности состояний m/m_0 в твёрдых растворах $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$. 1- $x=1$, $y=0.06$, 2- $x=1.1$, $y=0.06$, 3- $x=1.2$, $y=0.06$, 4- $x=1.2$, $y=0.09$, 5- $x=1.3$, $y=0.09$, 6- $x=1.3$, $y=0.07$, 7- $x=1.5$, $y=0.09$ [126].

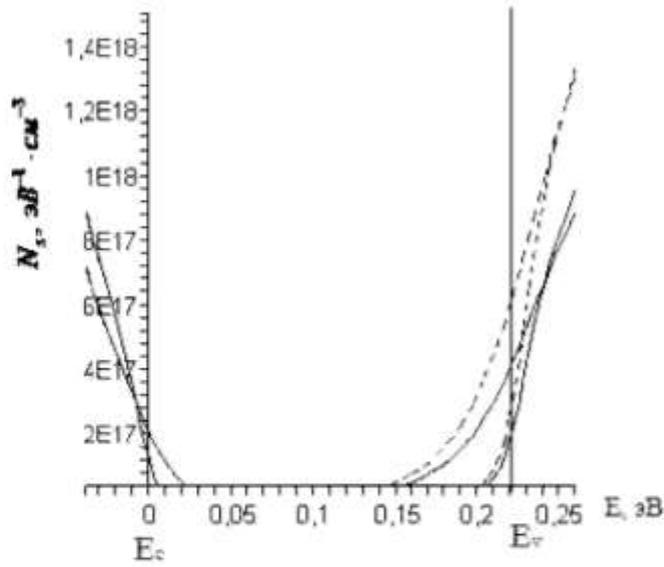


Рис 6.2.

Графики плотности состояний при температурах $T=100\text{K}$, 300K .

— $m_p^* = \text{const}$

- - - $m_p^* = m(T)$

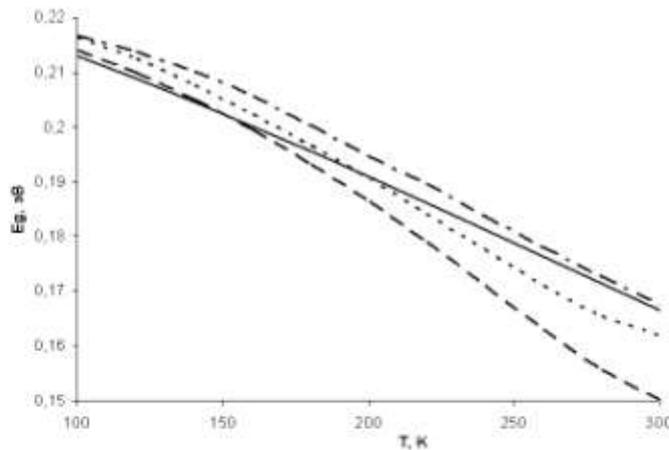


Рис. 6.3.

График $E_g(T)$ – температурной зависимости ширины запрещённой зоны.

— $m_p^* = \text{const}$

- - - $m_p^* = m(T)$ для $p\text{-Bi}_{0,7}\text{Sb}_{1,3}\text{Te}_{2,93}\text{Se}_{0,07}$

..... $m_p^* = m(T)$ для $p\text{-Bi}_{0,6}\text{Sb}_{1,2}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$

- - - - $m_p^* = m(T)$ для $p\text{-Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$

6.2. Математическое моделирование температурной зависимости ширины запрещённой зоны и сравнение теории с экспериментом

Данные экспериментов — как электрических, так и оптических измерений — указывают на то, что ширина запрещённой полосы полупроводников зависит от температуры. В работах [182-199] определена температурная зависимость ширины запрещённой зоны разными методами. Однако, в этих работах предполагалось, что эффективная масса плотности состояний не зависит от температуры.

В работе [200] установлено, что в Si эффективная масса плотности состояний зависит от температуры. На рис. 6.4 приведена температурная зависимость эффективной массы плотности состояний m/m_0 в Si [79]. Используя данные рис. 6.4 с помощью модели вычислены изменения ширины запрещённой зоны в зависимости от температуры. На рис. 6.5 приведены графики температурной зависимости ширины запрещённой зоны для Si с учётом изменения эффективной массы плотности состояний, взятой из рис. 6.4 [200]. Из рис. 6.5 видно, что учёт температурной зависимости эффективной массы существенно влияет на результаты Расчётов. На рис. 6.5 пунктирной линией представлены результаты Расчётов и учёт температурной зависимости эффективной массы электронов. На том же рисунке сплошной линией

приведена теоретическая температурная зависимость ширины запрещённой зоны, учитывающей изменение эффективной массы электронов и дырок в интервале температур 0К-500К. Экспериментальные результаты для кремния, взятые из работы [200] представлены точками. Как видно из рис. 6.5, учёт температурной зависимости эффективной массы электронов и дырок, правильно объясняет температурную зависимость ширины запрещённой зоны кремния в рассматриваемой интервале температур. Таким образом, изменения эффективной массы плотности состояний с температурой может сильно повлиять на температурную зависимость ширины запрещённой зоны. В рассматриваемом интервале температур (0К; 500К) математическое моделирование температурной зависимости ширины запрещённой зоны удовлетворительно описывается с помощью параболического закона дисперсии. Экспериментальные результаты изменения ширины запрещённой зоны для кремния [200] в пределах точности измерений совпадает с результатами теоретических Расчётов. Сравнение теории и экспериментов показывает, что термическое уширение энергетических уровней, описываемого с помощи GN-функции удовлетворительно описывает процесс температурной зависимости ширины запрещённой зоны в Si.

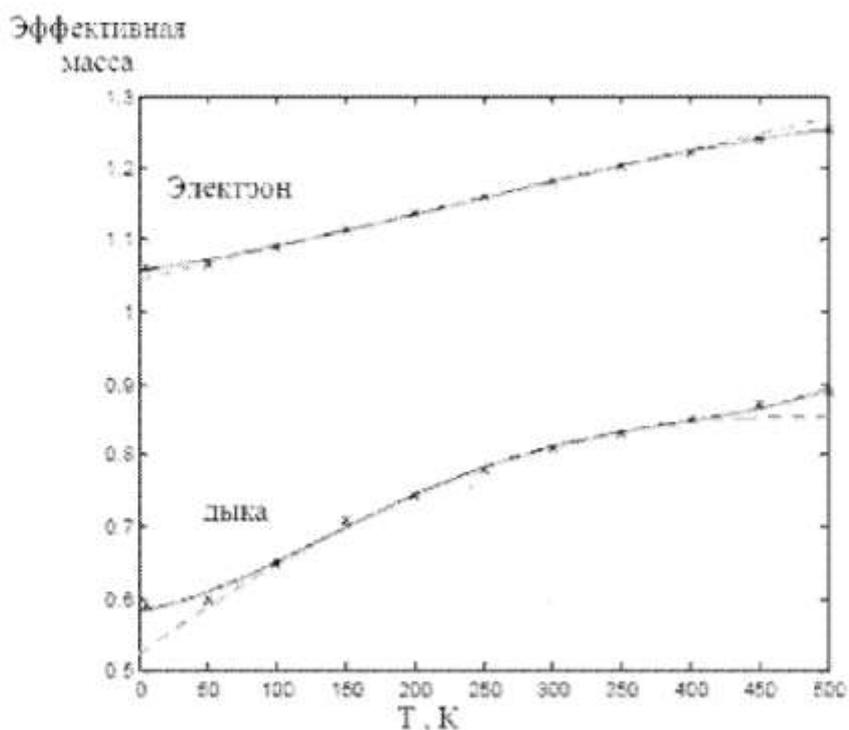


Рис. 6.4.

Температурные зависимости эффективной массы плотности состояний m/m_0 в Si. [200].

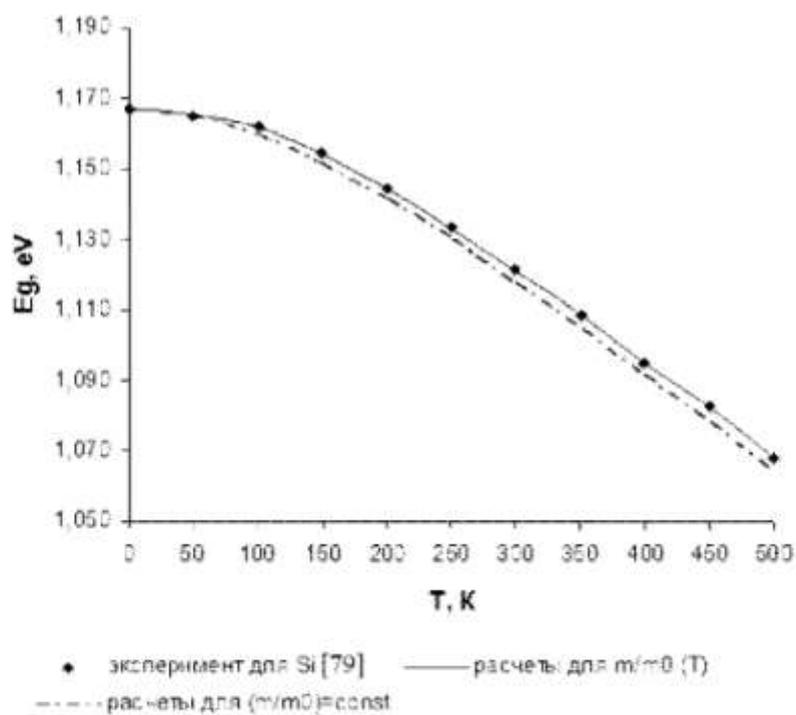


Рис. 6.5.

График $E_g(T)$ – температурной зависимости ширины запрещённой зоны для Si.

Температурная зависимость ширины энергетических щелей зависит от плотности энергетических состояний при абсолютной температуре. В модели, использованной в работах [176-178], температурная зависимость плотности состояний определяется температурной зависимостью GN-функции и зонной структурой разрешенных зон у дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. Анализ результатов численного моделирования изменения плотности состояний при изменении температуры показал, что величина плотности состояний вблизи краёв зон определяется числом состояний вблизи краёв зон на несколько десятков kT или порядка 0,1 мэВ. Плотность состояний в глубине разрешенных зон не влияет на ширину запрещённой зоны. Поскольку GN-функции из глубокой области зоны не проникает в область запрещённой зоной полупроводника, основной вклад к сдвигу края зон дают состояния, лежащие вблизи краёв разрешенных зон. Поэтому закон дисперсии вблизи потолка валентной зоны и дна зоны проводимости имеет решающее значение при определении температурной зависимости ширины запрещённой зоны $E_g(T)$. На рис. 6.6 и 6.7 приведены графики температурной зависимости ширины запрещённой зоны для Si [200] и для InAs [201]. Используя математическое моделирование температурной зависимости $E_g(T)$ для параболической зоны и для модели Кейна, получены графики зависимости ширины

запрещённой зоны от температуры. Как видно из рисунка, в исследуемом интервале температур параболический закон дисперсии и модель Кейна при использовании моделирования хорошо согласуется с экспериментальными данными для Si [200] и для InAs [201]. Теоретические Расчёты, приведённые для этих материалов, хорошо совпадают с экспериментальными данными. Отсюда следует, что температурная зависимость ширины запрещённой зоны удовлетворительно описывается математической моделью разложения плотности состояний в ряд по GN-функциям, которая описывает температурную зависимость термического уширения отдельных энергетических уровней в зонах и в запрещённой зоне.

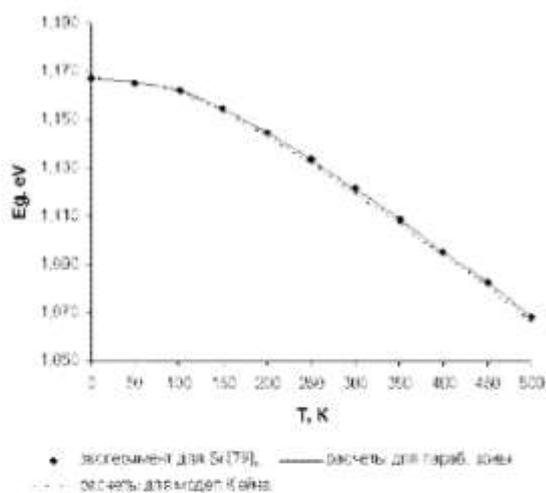


Рис. 6.6.
График $E_g(T)$ температурной зависимости ширины запрещённой зоны Si.

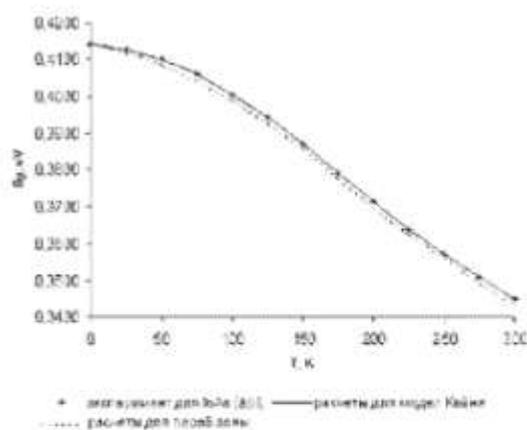


Рис. 6.7.
График $E_g(T)$ температурной зависимости ширины запрещённой зоны InAs.

ГЛАВА. 7. ОПРЕДЕЛЕНИЕ УРОВНЯ ЛАНДАУ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Квантование энергетических уровней в магнитном поле обуславливает вклад свободных носителей в диа- и парамагнитную восприимчивость кристаллов. Оно приводит также к существенному изменению вида плотности состояний как функции энергии [122]. В работах [176-178] экспериментальные спектры анализируются с помощью математической модели, использующей разложение спектра плотности поверхностных состояний по функциям $GN(E_0, E, T)$. Показано, что сплошной спектр плотности поверхностных состояний, полученный при конечной температуре, при низких температурах превращается в дискретный спектр плотности поверхностных состояний.

В данной главе определены уровни Ландау с помощью предложенной модели и рассмотрены влияния циклотронной эффективной массы на температурную зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле.

7.1. Производная по энергии от функции заполнения энергетических уровней дискретных состояний

Было показано, что температурная зависимость плотности состояний может быть описана разложением плотности состояний в ряд по GN-функциям (которое

определяется производной по энергии вероятности заполнения энергетического уровней [63,77,153]). Исследованием плотности состояний с помощью разложения в ряд по GN-функциям удалось объяснить температурную зависимость энергетических щелей в полупроводниках. В этой модели температурная зависимость ширины запрещённой зоны обусловлена термическим уширением квазидискретных уровней вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний обусловлена термическим уширением дискретных энергетических состояний [153]. Термическое уширение может быть описано температурной зависимостью вероятности заполнения энергетических уровней. Время термического выброса электронов из глубоких уровней E_i в разрешенную зону с энергией E определяется экспоненциальным множителем $\exp(\frac{E - E_i}{kT})$, и вероятность их опустошения глубоких заполненных уровней экспоненциально зависит от энергии состояния и температуры образца. Для поверхностных и объёмных состояний температурная зависимость термического уширения энергетических уровней описывается производной по энергии от вероятности опустошения дискретных энергетических

состояний $GN(E_0, E, T) = \frac{\partial \rho(E_0, E, T)}{\partial E_0}$ где ρ – вероятность

термического опустошения энергетического состояния с энергией E .

Для описания температурной зависимости плотности состояний будем считать, что плотность состояний при абсолютном нуле температуры известной функцией энергии $N_s(E_0)$. В частности, для свободного электронного газа в магнитном поле плотность состояний определяется следующим выражением [202]:

$$N_H(E, H) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} h\omega_H \sum_n \left\{ E - (n + \frac{1}{2}) h\omega_H \right\}^{-1/2} \quad (7.1)$$

Каждое состояние с энергией E_i с ростом температуры уширяется. Температурные уширения состояния с энергией E_i описываются статистикой Шокли-Рида-Холла. Значение уширения описывается производной по энергии от вероятности опустошения состояния с энергией E ($\frac{\partial \rho}{\partial E} = GN(E)$). Результирующая плотность состояний, учитывающая вклад термического уширения всех состояний, будет описываться суммой всех уширений в рассматриваемой области энергий. Математически это сводится к разложению в ряд плотности состояний $N_s(E, T)$ при температуре T , по GN-функциям. Причем, коэффициент разложения $N_0(E_i)$ является плотность энергетических состояний, которое не учитывает термическое уширение уровней. При

абсолютном нуле температуры GN-функция превратится в дельта-функцию Дирака [63,77,153] (Рис. 7.1). При стремлении температуры к абсолютному нулю плотность состояний превратится в коэффициент разложения в ряд по GN-функциям. Если известна плотность состояний при конечной температуре $N_s(E, T)$, то с помощью разложения в ряд по GN-функциям можно вычислить плотность состояний при абсолютном нуле температуры. Знание экспериментально определённой плотности состояний при определённой температуре даёт возможность с помощью разложения в ряд по GN-функциям найти плотность состояний при любой конечной температуре. В работе [63] было показано, что сплошной спектр, определённый при комнатной температуре, возникает за счёт термического уширения конечного числа дискретных уровней в запрещённой зоне

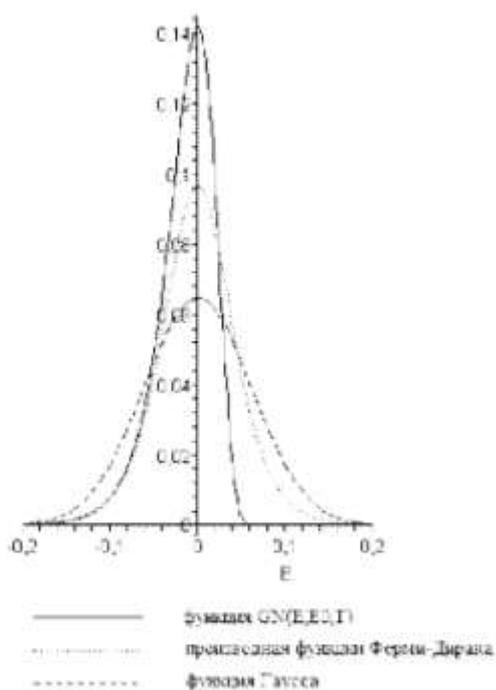


Рис. 7.1.
Вид функций GN, производная функции Ферми-Дирака и функция Гаусса при комнатной температуре.

Термическое уширение энергетических состояний зоны проводимости, запрещённой зоны и валентной зоны, объясняет температурную зависимость ширины запрещённой зоны полупроводника [178].

7.2. Влияние температуры на термодинамическую плотность состояний в квантующем магнитном поле

В квантующем магнитном поле энергетический спектр электронов сильно изменяется [202-209]. Движение электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, становится ограниченным. Энергия электронов по направлению плоскости, перпендикулярной магнитному полю, квантуется. Энергия свободных электронов принимает следующий вид [202, 203]:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (7.2)$$

Изменение энергетического спектра приводит к изменению плотности энергетического состояния. Полное число уровней, связанных с данным макроскопическим объёмом в \vec{k} -пространстве, остаётся в новой схеме тем же, что и прежде. Влияние магнитного поля сводится к тому, что оно вызывает квантование орбиты в \vec{k} -пространстве и заставляет свободные электроны конденсироваться на ближайших орбитах [203].

Для полной плотности энергетических состояний с энергией меньших ϵ имеем :

$$N_H(E, H) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \hbar\omega_H \sum_n \left\{ E - (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_H \right\}^{-1/2} \quad (7.3)$$

при $\omega_H \rightarrow 0$ это выражения переходит в

$$N_s(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (7.4)$$

В этом выражении не учитывается температурное уширение энергетических уровней. Чтобы учитывать температурную зависимость плотности состояний, разложим $N_s(E, T)$ в ряд по GN-функциям.

Термическое уширение уровней в магнитном поле приводит к сглаживанию дискретных уровней. Термическое уширение дискретных уровней будет учитываться с помощью GN-функцию. Термодинамическую плотность состояний, которая зависит от температуры [176-178], $N(E, T)$ разложим в ряд по GN-функциям

$$N_s(E, H, T) = \sum_{i=1}^n N_H(E_i, H) GN(E_i, E, T) \quad (7.5)$$

Здесь, H – напряженность магнитного поля, $\omega_c = \frac{eH}{m^*c}$ – циклотронная частота, m^* – циклотронная эффективная масса. $N_{si}(E_i, H, E)$ – плотность состояний в квантующем магнитном поле при абсолютном нуле температуры.

Рассматриваемый интервал энергии в разрешенных зонах и запрещённой зоне разделим на равные мелкие части значения энергий. Производя суммирование по

формуле (7.5) получим $N_s(E, T)$, зависящий от температуры. Это выражение при $T \rightarrow 0$ превращается в (7.1). В этом случае уровни Ландау проявляются резко. С ростом температуры резкие всплески начинают сглаживаться (рис. 7.2), и при $kT \sim \hbar\omega$ осцилляции плотности состояний постепенно исчезают при достаточно высоких температурах $kT > \hbar\omega$, $N_s(E, H, T)$ превращается в сплошную плотность состояний и не будет чувствоваться влияние магнитного поля. $N_s(E, H, T)$ превратится в плотность состояний в отсутствие магнитного поля. Это позволяет получить плотность состояний, которая зависит от температуры. На рис. 7.2 приведена плотность состояний в магнитном поле, когда $\hbar\omega_c = 0,01 \text{ эВ}$ при температуре $T = 0,4 \text{ К}$, $kT = 4 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}$, $\frac{\hbar\omega_c}{kT} = 0,25 \cdot 10^3 = 250$, $kT \ll \hbar\omega_c$. При таких низких температурах влияние термического уширения слабое, и плотность состояний не чувствует отклонения N_s от идеальной формы. На рис. 7.3 приведён $N_s(E, H)$ для температур 0,4, 10, 45, 77 К. Как видно из этих рисунков, с ростом температуры резкие пики уровней Ландау, обусловленные квантованием уровней энергии электронов в плоскости перпендикулярной магнитному полю, постепенно сглаживаются. Это приводит к тому, что при температуре $T = 45 \text{ К}$, $kT \approx \hbar\omega_c$ пики уровней Ландау становятся незаметными. При температуре 77 К пики

уровней Ландау практически незаметны, и $N_s(E, H)$ совпадает с плотностью состояний в отсутствие магнитного поля.

Изменение $\omega_c = \frac{eH}{m^*c}$ меняет энергетическое расстояние между пиками уровней Ландау. Таким образом, осцилляции плотности состояний наблюдаются при температурах $kT \ll \hbar\omega_c$. Начиная с температур порядка $0,5kT \sim \hbar\omega_c$, осцилляции плотности состояний, обусловленные квантованием Ландау, не наблюдается. В этом случае измерения дают сплошной спектр плотности состояний. Для обнаружения квантовых уровней необходимо решать обратную задачу. В этом случае надо находить дискретные уровни, обусловленные квантованием Ландау. Для этого необходимо измерить $N_s(E, T)$ при определённой температуре, затем на основе Расчётов получить $N_s(E, T)$ при низких температурах. Методика определения N_s может быть построена следующим образом. Определим экспериментально $N_s(E, H, T)$ для двух различных значений температур T_1 и T_2 $N_s(E, H, T_1)$, $N_s(E, H, T_2)$ таким образом, чтобы $N_s(E, H)$ было одинаково для обоих $N_s(T_1)$ и $N_s(T_2)$. То же самое можно проделать для нескольких значений напряженности магнитного поля H_1 и H_2 . Для повышения точности определения $N_s(E, H)$ можно использовать результаты экспериментально найденных $N_s(E, H, T)$ более трёх или

четырёх в разных температурах. Если результаты моделирования $N_s(E, H, T)$ для различных значений T и H совпадают, тогда нахождение плотности состояний можно считать завершённым, при этом измерении N_s при различных значениях T и H должны дополнить друг друга и это должно обеспечить достоверность полученных результатов. В этом случае $N_s(E, H)$, найденная при любой температуре по методу разложения $N_s(E, T)$ в ряд по GN-функциям должна получиться одинаковой.

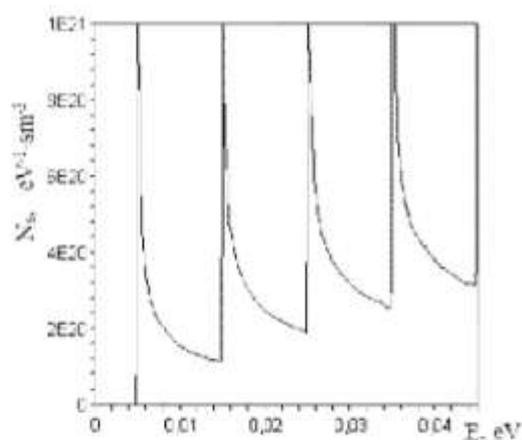


Рис. 7.2.

Плотность энергетических состояний в сильном магнитном поле $H=10\text{kOe}$ при температуре $T=0,4\text{K}$ вычисленной по формуле (3.5).

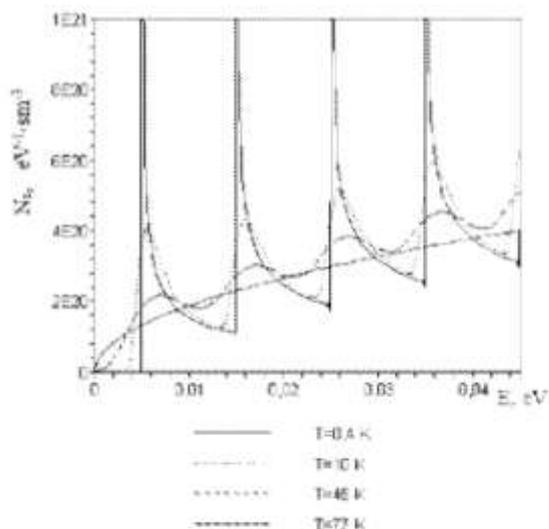


Рис. 7.3.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний в квантовом магнитном поле.

7.3. Моделирование температурной зависимости плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле

В сильном магнитном поле энергетический спектр электронов полупроводника или металла становится квантованным, вследствие чего плотность энергетических состояний как функция энергии приобретает осциллирующий характер. Именно это обстоятельство есть первопричина возникновения осцилляционных зависимостей от магнитного поля ряда равновесных и неравновесных величин, характеризующих состояние и поведение электронов кристалла в квантующем магнитном поле [122].

Зависимость энергии E электрона с квадратичным эллипсоидальным законом дисперсии в магнитном поле от главного квантового числа n , спинового квантового числа s и проекции p_z импульса на направление магнитного поля H принимает следующий вид [154]:

$$E(n, s, p_z) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}sg\mu_B\mu_0H + \frac{p_z^2}{2m_z^*} \quad (7.6)$$

Здесь, g -фактор определяется только ориентацией магнитного поля H и не зависит от величины проекции p_z импульса, μ_B —магнетон Бора, m_z^* —продольная эффективная масса.

Полная плотность энергетических состояний в магнитном поле у электронной системы с квадратичным

изотропным законом дисперсии без учёта спинного расщепления уровней Ландау может быть записана в виде [154]:

$$N_H(E, H) = \frac{m^{3/2} \hbar \omega_c}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sum_{n=0}^{n_*} \left[E - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2} \quad (7.7)$$

где, E – энергия свободного электрона, $n=0, 1, \dots$ – число уровней Ландау, m – циклотронная масса, $\omega_c = \frac{eH}{mc}$ – циклотронная частота.

При уменьшении магнитного поля H плотность парабол Ландау увеличивается. Очевидно, в пределе $H \rightarrow 0$ мы должны от дискретных парабол Ландау вновь перейти к квазинепрерывному спектру трёхмерной системы $E = E(p_x, p_y, p_z)$. Термические уширения уровней в магнитном поле приводят к сглаживанию дискретных уровней. Термическое уширение будет учитываться с помощью GN-функции. Как в работах [63, 77, 153], $N_s(E, H, T)$ разложим в ряд по GN-функциям

$$N_s(E, H, T) = \sum_{i=1}^n N_{s_i}(E_i, E, H) GN(E_i, E, T) \quad (7.8)$$

Здесь, $N_{s_i}(E_i, H, E)$ – плотность состояний в квантующем магнитном поле при абсолютном нуле температуры.

Рассматриваемый интервал энергий в разрешенных зонах и запрещённой зоне разделим на равные мелкие части. Производя суммирование по формуле (7.8) получим $N_s(E, H, T)$, которая зависит от температуры. Это

выражение, при $T \rightarrow 0$, превратится в (7.4). В этом случае уровни Ландау проявляются резко (на рис. 7.4).

С ростом температуры резкие всплески постепенно сглаживаются и при $kT \sim \hbar\omega$ осцилляции плотности состояний постепенно исчезают. При достаточно высоких температурах $kT > \hbar\omega$, $N_s(T, E, H)$ превращается в сплошную плотность состояний в отсутствие магнитного поля. На рис. 7.4 приведены плотности состояний в магнитном поле вычисленной разложением в ряд по GN-функциям, функциям по производной функции Ферми-Дирака и по функции Гаусса. Для, $\hbar\omega_c = 0,01 \text{ эВ}$ при температуре $T=0,4\text{К}$, $kT < \hbar\omega_c$ влияние термического уширения слабое и плотность состояний не чувствует отклонения N_s от идеальной формы, которая не учитывает влияние температуры.

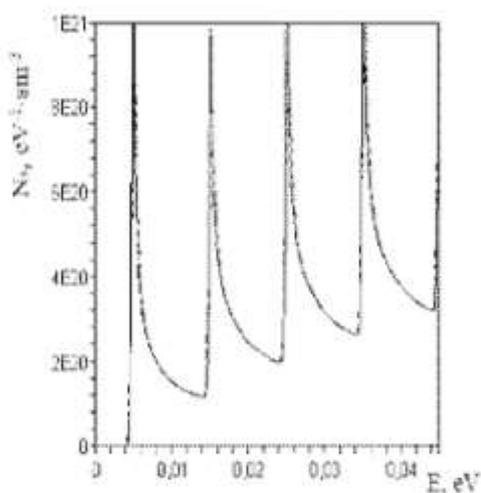


Рис. 7.4.

Плотность энергетических состояний, вычисленных при помощи разложения в ряд по функциям GN, функции производной Ферми-Дирака и функции Гаусса в сильном магнитном поле $H=10\text{кЭ}$ при $T=0,4\text{К}$.

— функция GN-производная от степени опустошения уровня по энергии,

..... производная от функции Ферми-Дирака по энергии,

- - Функция Гаусса.

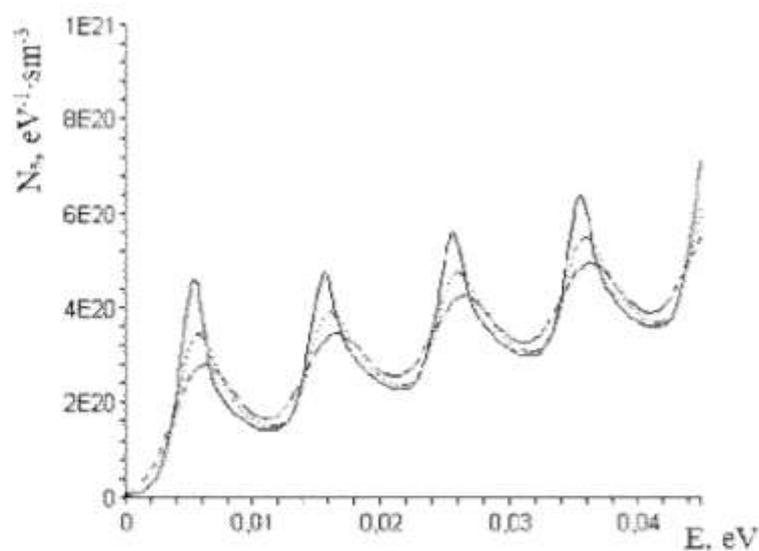


Рис. 7.5.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле ($H=10\text{кЭ}$) при температуре $T=10\text{К}$.

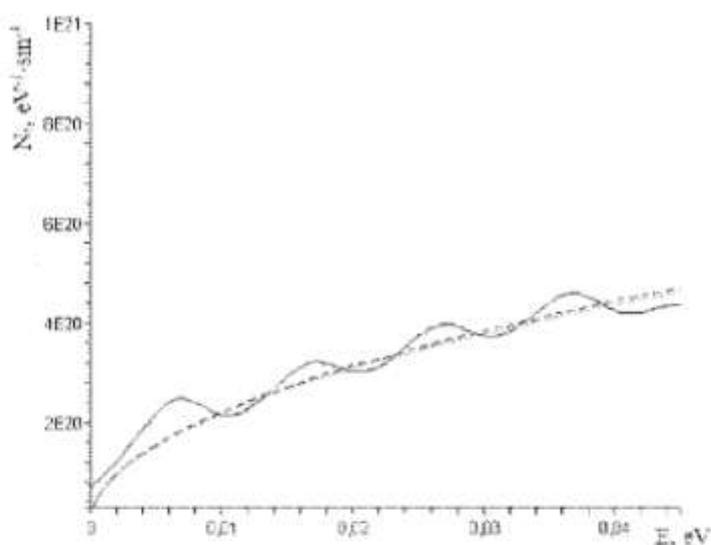


Рис. 7.6.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле ($H=10\text{кЭ}$) при температуре $T=35\text{К}$.
 — функция GN -производная от степени опустошения уровня по энергии,
 производная от функции Ферми-Дирака по энергии,
 - - Функция Гаусса.

На рис. 7.5 приведён $N_s(E, H)$ для температуры 10К. Как видно из этих рисунков, с ростом температуры резкие пики уровней Ландау постепенно сглаживаются. При температуре 35К пики уровней Ландау практически не заметны и $N_s(E, H)$ совпадает с плотностью состояний, разложенных в ряд по функции Гаусса и функции производной Ферми-Дирака (на рис. 7.6).

7.4. Влияние циклотронной эффективной массы на температурную зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле

В работах [176-178] рассмотрена температурная зависимость энергетического спектра плотности состояний в полупроводниках с учётом температурной зависимости эффективной массы плотности состояний. В этих работах не рассматривается влияние изменения циклотронной эффективной массы от энергии на температурную зависимость плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле. Однако, как показали эксперименты [210-212], эффективная масса зависит от энергии. Эти изменения циклотронной эффективной массы меняет зависимость плотности состояний от энергии в сильном квантующем магнитном поле.

Целью настоящей раздела является исследование влияния изменения циклотронной эффективной массы на температурную зависимость плотности энергетических состояний в сильном квантующем магнитном поле. Полная плотность энергетических состояний в магнитном поле электронной системы с квадратичным изотропным законом дисперсии без учёта спинного расщепления уровней Ландау может быть записана в виде [154]:

$$N_H(E, H) = \frac{m^{*3/2} \hbar \omega_c}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sum_{n=0}^{n_E} \left[E - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2} \quad (7.9)$$

где, E – энергия свободного электрона, $n=0, 1, \dots$ – число уровней Ландау, m^* – циклотронная эффективная масса, $\omega_c = \frac{eH}{m^* c}$ – циклотронная частота.

В частности, если энергетический спектр оператора чисто дискретный (точечный), то плотность энергетических состояний равна сумме δ -функций, сосредоточенных в точках спектра E_i , амплитуда которых $N_n = \psi_i^2(0) + \psi_i'^2(0)$, где E_i и $\psi_i(x)$ – нормированные на единицу собственные функции [213]:

$$N_z(E) = \sum_i N_n \delta(E - E_i) \quad (7.10)$$

Термическое уширение уровней в магнитном поле приводит к сглаживанию дискретных уровней. Термическое уширение будет учитываться с помощью GN-функции. Как в работах [176, 177], $N_z(E, H, T)$ разложим в ряд по GN-функциям

$$N_s(E, H, T) = \sum_{i=1}^n N_{si}(E_i, E, H) GN(E_i, E, T) \quad (7.11)$$

Здесь $N_{si}(E_i, H, E)$ – плотность состояний в квантующем магнитном поле при абсолютном нуле температуры.

Если же закон дисперсии неквадратичен, но изотропен, как, например, у электронов в соединениях III-V и II-VI, то эффективная масса, есть функция волнового числа или энергии. Это значит, что по мере заполнения энергетической зоны носителями заряда эффективная масса их будет изменяться. Например, для InSb при $k=0$ и $m_n = \frac{1}{70} m_0$ зависимость эффективной массы от энергии принимает простой вид [122]:

$$m(\xi) = m_n [1 + 2\xi - 2\nu\xi(2 + 3\xi)]$$

здесь, $\xi = \frac{E}{E_g}$, $\nu = \frac{m_n}{m_0}$.

Циклотронная частота имеет вид:

$$\omega_c = \frac{eH}{m(\xi)c} \quad (7.12)$$

Тогда можно записать плотность энергетических состояний в следующем виде:

$$N_s(E, H, m^*, T) = \sum_{i=1}^n N_{si}(E_i, E, H, m^*) GN(E_i, E, T) \quad (7.13)$$

Рассмотрим влияние изменения массы на плотность состояний в магнитном поле. Это может быть рассмотрено, как отклонение закона дисперсии электронов от параболичности.

В сильном магнитном поле сплошной спектр энергетических состояний сильно деформируется и превращается в осциллирующие линии. С повышением температуры дискретные уровни смываются, и плотности энергетических состояний превращаются в сплошной спектр. В эксперименте плотности состояний зависят от энергии, температуры, эффективной массы. Эффективная масса зависит от энергии, ω_c зависит от эффективной массы. Таким образом, с ростом энергии меняется расстояние между пиками.

При постоянной эффективной массе (параболическая зона) зависимость плотности состояний от энергии имеет вид $\rho \sim \sqrt{E - E_c}$. Если с ростом энергии электронов увеличивается эффективная масса электронов, уменьшается расстояние между уровнями Ландау. В этом случае кривая плотности состояний перемещается в сторону больших значений плотности состояний и перемещается вверх по оси плотности состояний. Наоборот, если $m(E)$ уменьшается с ростом энергии, то кривая плотности состояний перемещается вниз по энергии вдоль оси плотности состояний.

Таким образом, магнитное поле сдвигает плотность состояний в плоскости $N_s - E$ даже при температурах, когда уровни Ландау незаметны.

В работе [212] определена эффективная масса электронов в полупроводниках n-InAs при энергиях, не

равных энергии Ферми, по температурной зависимости амплитуды осцилляций туннельной проводимости в сильном магнитном поле. На рис. 7.7 приведена зависимость эффективной массы в n-InAs от энергии [212]. Используя данные рис. 7.7 можно вычислять изменения эффективной массы на температурную зависимость плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле. На рис. 7.8 приведён график температурной зависимости плотности энергетических состояний для InAs с учётом изменения эффективной массы. Из рис. 7.8 видно, что изменения эффективной массы с энергией может сильно повлиять на температурную зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле.

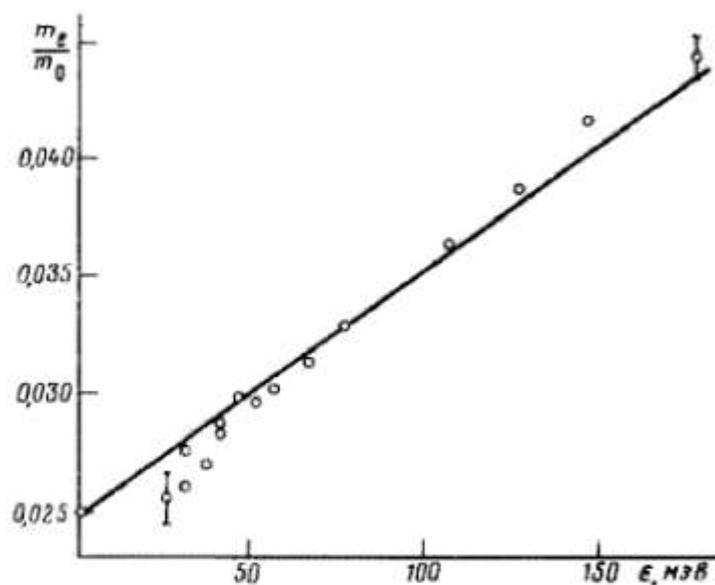
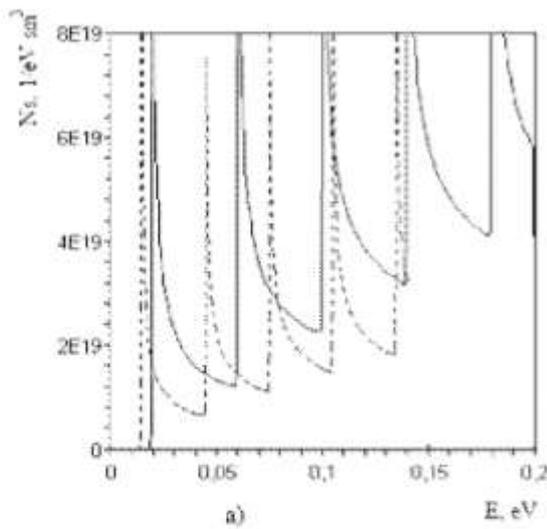
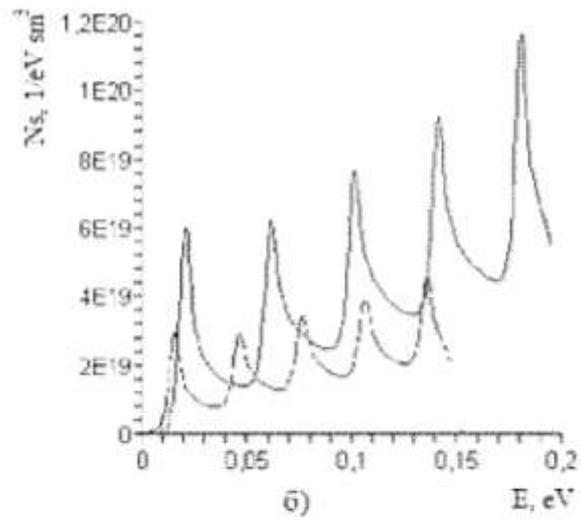


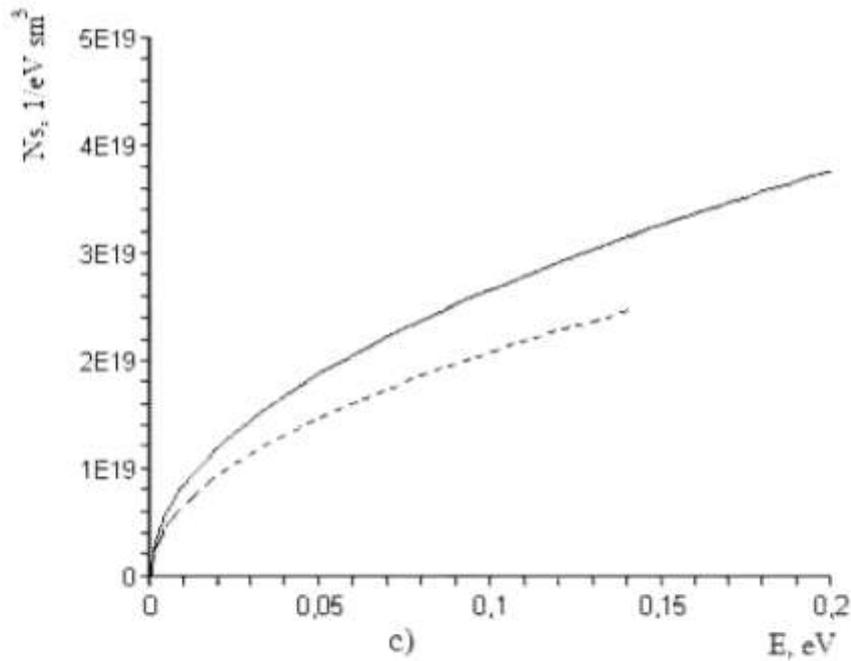
Рис. 7.7.
Зависимость
эффективной массы в
n-InAs от энергии
[212].



T=5K



T=50K



T=300K

Рис. 7.8.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле при $H=50\text{кЭ}$.

— для $m^* = \text{const}$,

- - - для $m^* = m(E)$.

ГЛАВА 8. ОСЦИЛЛЯЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Интерес к исследованиям осцилляционные эффекты Шубникова-де-Гааза (ШдГ) и де-Гааза-ван Альфена (дГвА) возрос после их обнаружения в низкоразмерных системах, например, в наноструктурах кремния и фторида кадмия в сверхпроводящих оболочках. В этом случае энергетические позиции уровней размерного квантования определяют спектр уровней Ландау [214-217]. В работах [218-226] были обнаружены и исследованы осцилляционные эффекты ШдГ и дГвА в зависимости от температуры низкоразмерных полупроводников. Все эффекты, зависящие от плотности состояний, могут при некоторых условиях осциллировать с периодом, определяемым интервалом между двумя последовательными совпадениями уровня Ландау. Это обстоятельство проявляется в том, что в выраженном электронном газе многие термодинамические, электрические и оптические величины, выражающиеся через плотность состояний, при определённых условиях осциллируют при изменении магнитной индукции и при низких температурах [227].

Восьмая глава посвящена анализу экспериментальных спектров с помощью математической модели. Математическое моделирование процессов с использованием экспериментальных значений сплошного

спектра плотности состояний даёт возможность рассчитать дискретные уровни Ландау. С помощью предложенной модели исследованы экспериментальные результаты, полученные для PbS. Из высокотемпературной N_s получены Расчёты плотности состояний при низких температурах.

8.1. Обработка экспериментальных результатов с помощью предложенной модели

Проанализируем плотность состояний конкретных полупроводников в квантующем магнитном поле. На рис. 8.1 а приведёна плотность состояний измеренная при температуре $T=77\text{K}$ и $H=30\text{кЭ}$ PbS [228, 229]. В пределах точности эксперимента плотность состояний непрерывная, монотонно растущая, гладкая функция энергии. На этом рисунке осцилляции плотности состояний не наблюдается. Это свидетельствует о том, что $\hbar\omega_c < kT$. Разложим это график плотности состояний в ряд по GN-функциям. При разложении исходной плотностью будем брать идеальный $N_s(E_0, H)$ по формуле (8.5) (рис. 8.1b). Однако в отличие от идеальной плотности состояний будем учитывать зависимость массы электронов от энергии. Пики $N_s(E)$ будем располагать в значениях энергии кратными на $\hbar\omega_c$, однако высоту пиков будем считать зависящей от энергии. Затем,

подбирая коэффициенты в сумме перед $N_s(E_0, H)$ подгоняем теоретический $N_s(E, H)$ к экспериментальному. Причем подгоночным параметром будут коэффициенты перед $N_s(E_0, H)$. Далее, в формуле (8.5) будем понижать температуру. Начиная с некоторой $T=20\text{K}$ гладкая кривая начинает осциллировать и выделяются уровни Ландау (рис. 8.1в). Таким образом, при температуре $kT \ll \hbar\omega_c$ уровни Ландау начинают резко выделяться как отдельные пики $N_s(E, T)$.

В сильном магнитном поле сплошной спектр энергетических состояний сильно деформируется и превращается в осциллирующие линии, с повышением температуры дискретные уровни смываются, и плотности энергетических состояний превращаются в сплошной спектр. В эксперименте плотности состояний зависят от энергии, температуры, от эффективной массы. Эффективная масса зависит от энергии. ω_c зависит от эффективной массы. Таким образом, с ростом энергии меняется расстояние между пиками.

При постоянной эффективной массе зависимость плотности состояний от энергии имеет вид $\rho \sim \sqrt{E - E_c}$. Если с ростом энергии электронов увеличивается эффективная масса электронов, уменьшается расстояние между уровнями Ландау, кривая плотности состояния перемещается в сторону больших значений плотности состояний и перемещается вверх по оси плотности

состояний. Наоборот, если $m(E)$ уменьшается с ростом энергии, кривая плотности состояний перемещается вниз по энергии вдоль оси плотности состояний.

Таким образом, магнитное поле сдвигает плотность состояний в плоскости $N_s - E$ даже при температурах, когда уровни Ландау не заметны и за счёт термического уширения.

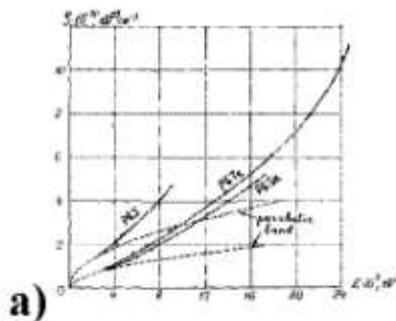
Рассмотрим влияние изменения массы на плотность состояний в магнитном поле. Это может быть рассмотрено как отклонение закона дисперсии электронов от параболичности.

Сравнение теории с экспериментом приведено на рис. 8.1 $N_s(E, H, T)$ при различных значениях магнитных полей. Как видно из рис. 8.1. с ростом напряженности $N_s(E, H)$ сжимается в сторону меньших энергий и поднимается в верх по оси N_s . Энергетический спектр и закон дисперсии может меняться в различных точках k -пространства. Это означает, что расстояние между уровнями Ландау в различных частях k -пространства будут разными.

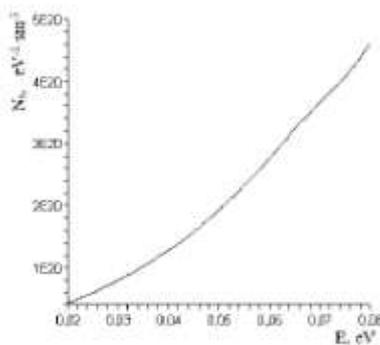
Таким образом, исследование плотности состояний в квантующих полях при различных температурах даёт возможность определить зависимость эффективной массы от энергии. Изменение наклона $N_s(E)$ в магнитном поле, сжатие и растяжение $N(E)$ в магнитном поле свидетельствуют о зависимости эффективной массы от энергии. Хотя, квантование энергии электронов и уровни

Ландау не проявляются, зато трансформация искривления плотности состояний свидетельствует о квантовании энергии в магнитном поле. Это происходит даже при смывании уровней Ландау в магнитном поле. При высоких температурах уровни Ландау неразличимо, однако за счёт сжатия или растяжения расстояния между уровнями Ландау кривая $N_s(E, H)$ меняет свои размеры и форму.

С понижением температуры сплошной спектр плотности энергетических состояний стягивается на уровни Ландау в магнитных полях.



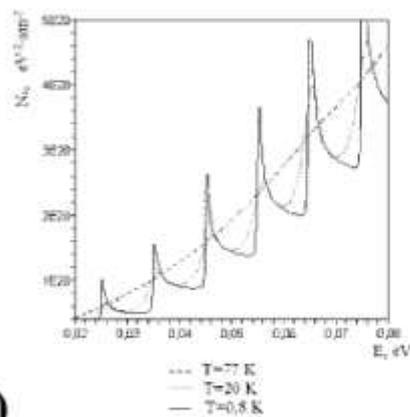
a)



b)

Рис. 8.1.

Изменение плотности энергетических состояний с понижением температуры в сильных магнитных полях. a) эксперимент для PbS в $H=32\text{кЭ}$ [228,229], б) модельный Расчёт для $T=77\text{К}$. c) плотность энергетических состояний в магнитном поле для трех разных значений температур.



c)

8.2. Исследование температурной зависимости осцилляции магнитной восприимчивости полупроводников

Эффект де Гааза-ван Альфена (дГвА) является универсальным и мощным инструментом для исследования энергетического спектра. Определение осцилляции магнитной восприимчивости экспериментально наблюдалось в кристаллах висмута при низких температурах и сильных магнитных полях [230].

Рассмотрим свободную энергию электронного газа. Согласно распределению Гиббса можно написать в виде [231, 232]

$$F = -kT \ln \sum_n \exp(-\varepsilon_n / kT) \quad (4.1)$$

Где, ε_n – уровни энергии системы.

Свободная энергия электронов в квантующем магнитном поле определяется по следующей формуле [181]:

$$F = n\xi + \frac{16m^{3/2}(\mu^*H)^{5/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_N \left(\frac{\varepsilon}{2\mu^*H} - (N + 1/2) \right)^{3/2} \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad (8.2)$$

Где $\mu^* = \left(\frac{m}{m^*}\right)\mu_B$, H – напряженность магнитного поля, N – число уровней Ландау,

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = - \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \xi}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon - \xi}{kT}\right) + 1\right)^2 kT} \quad (8.3)$$

Производная второго порядка от $F(H, T)$ по напряжённость магнитного поля, есть магнитная восприимчивость

$$\chi(H, T) = -\frac{\partial^2 F(H, T)}{\partial H^2} \quad (8.4)$$

На рис. 8.2 приведены графики осцилляций магнитной восприимчивости, вычисленные по формулам (8.2-8.4) в сильном магнитном поле, при температуре $T=5\text{K}$, $m^*/m_0=1$. При таких низких температурах влияние термического уширения слабое. На рис. 8.3 приведены осцилляции магнитной восприимчивости для разных температур. Как видно из этих рисунков, при температуре $T=80\text{K}$ пики осцилляции эффект дГВА, обусловленные квантованием Ландау, не наблюдается.

В работах [233-235] определение вероятности опустошений энергетических состояний показало, если $E_0 = kT \ln\left(\frac{nT_0}{\tau_0}\right)$ то функция вероятности опустошения энергетических состояний $\rho(E_0(t), E, T) = 1 - \exp\left(-\exp\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)\right)$

является ступенчатой функцией, её производная

$$\frac{\partial \rho}{\partial E} = GN(E_0(t), E, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E_i - E_0)\right)\right) \quad (8.5)$$

при низких температурах описывает дельта-функцию Дирака. Таким образом, для исследования температурной зависимости осцилляций магнитной восприимчивости в формуле (8.2) $\frac{\partial f_0(E)}{\partial E}$ заменим на $GN(E_0, E, T)$ -функцию. Тогда можно рассчитать температурную зависимость осцилляций магнитной восприимчивости, с помощью формул (8.2), (8.4) и (8.5). На рис. 8.4 приведена температурная зависимость осцилляций магнитной

восприимчивости вычисленная с помощью формул (8.4) и (8.5). Из рисунка 4.2 видно, что с ростом напряжённости магнитного поля амплитуда осцилляций магнитной восприимчивости $\chi(H, T)$ возрастает.

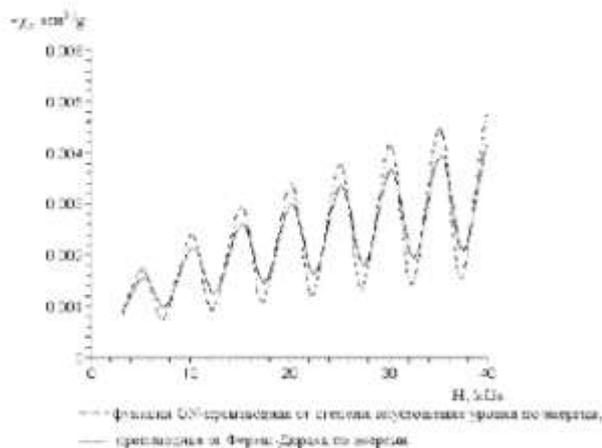


Рис. 8.2.

Зависимость осцилляций магнитной восприимчивости от напряженности магнитного поля.

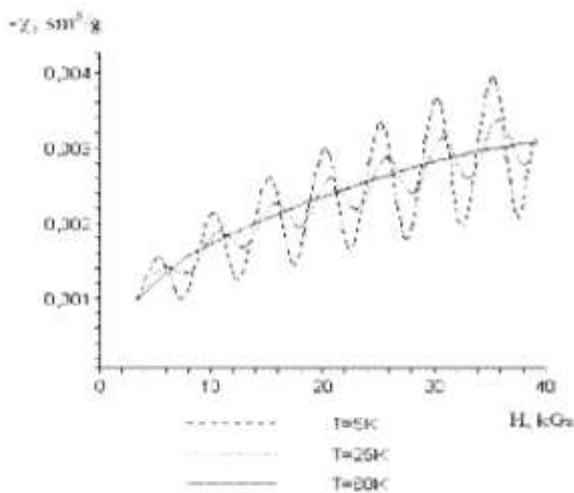


Рис. 8.3.

Изменение магнитной восприимчивости для разных температур в сильных магнитных полях, вычисленная формулами (4.3) и (4.4).

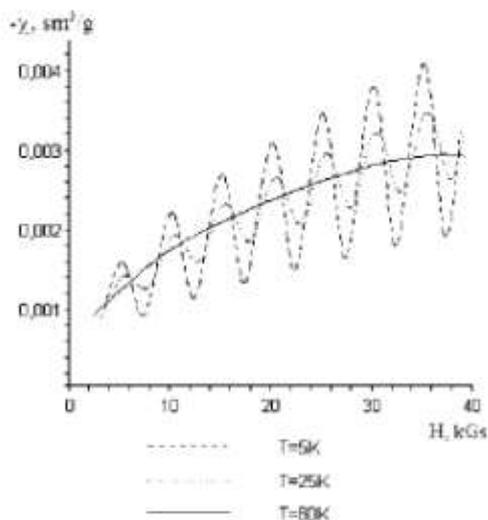


Рис. 8.4.

Изменения магнитной восприимчивости для разных температур в сильных магнитных полях, вычисленные с помощью формул (8.4) и (8.5).

В работе [230] эксперименты на висмуте были проведены в более сильных магнитных полях и низких температурах. Исходными данными для применения формул (8.4) и (8.5) является экспериментальная осцилляция магнитной восприимчивости при конкретной температуре T (температура эксперимента). На рис. 8.5а приведена осцилляция магнитной восприимчивости при температуре $T=14,2\text{К}$. Для обработки экспериментального результата сначала требуется разложение магнитной восприимчивости в ряд по $GN(E_0, E, T)$ функциям. На рис. 8.5б показана теоретическая подгоночная осцилляция магнитной восприимчивости, полученная разложением экспериментального графика рис. 8.5а в ряд по $GN(E_0, E, T)$ -функциям. Сравнение рис. 8.5а и рис 8.5б показывает, что осцилляции магнитной восприимчивости для висмута наблюдается при температуре эксперимента. Потому что, в этом эксперименте $h\omega_c \approx 0,08eV$ при температуре $T=14,2\text{К}$, $\frac{h\omega_c}{kT} \approx 41$, $kT \ll h\omega_c$. В этом случае уровни Ландау проявляются резко. С ростом температуры резкие всплески начинают сглаживаются и при достаточно высоких температурах $kT > h\omega_c$, $\chi(H, T)$ превращаются в сплошной спектр магнитной восприимчивости. На рис. 8.5б приведена $\chi(H, T)$ для разных температур в сильном магнитном поле. При температуре 100К для висмута

осцилляции магнитной восприимчивости не наблюдается. Теоретические Расчёты для этих материалов хорошо совпадают с экспериментальными данными.

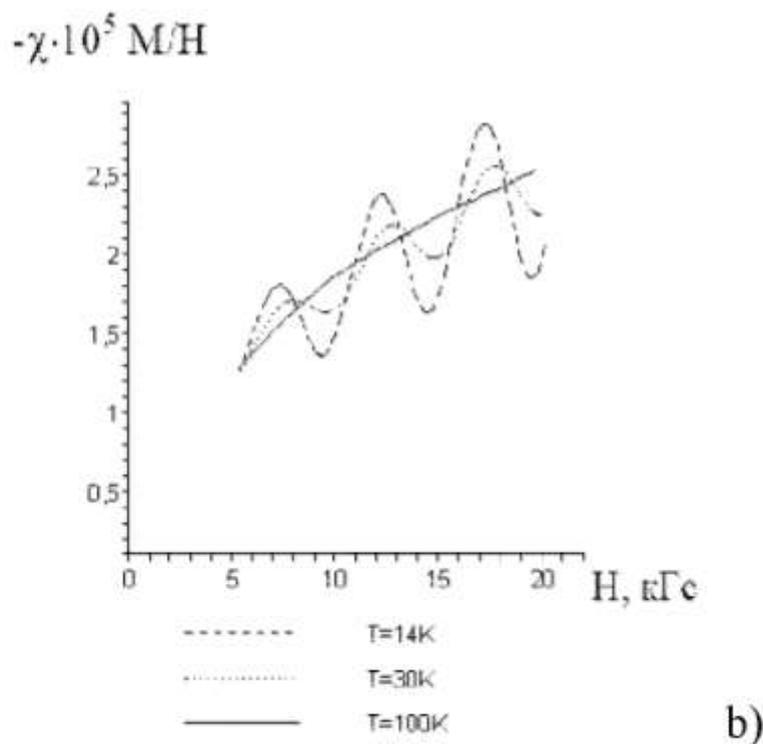
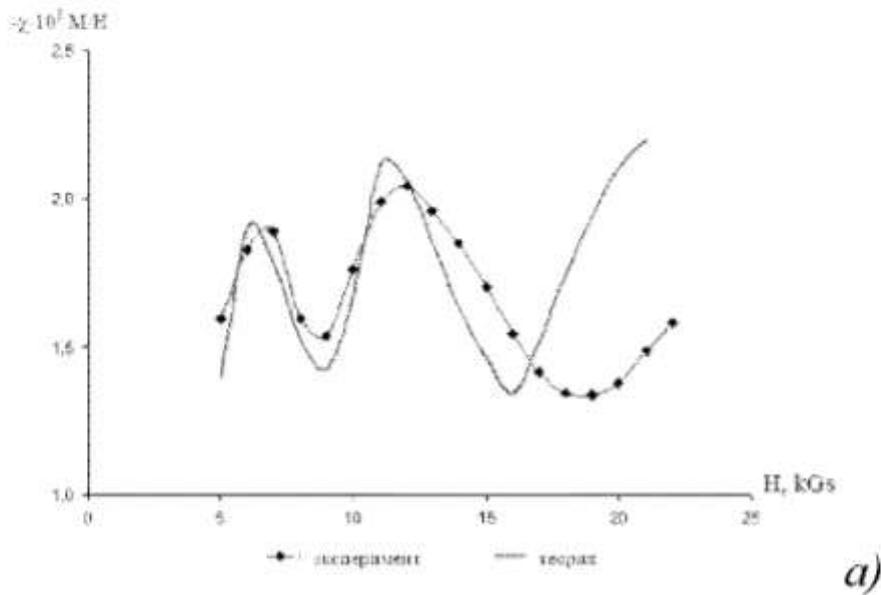


Рис. 8.5.

Изменение осцилляции магнитной восприимчивости в сильном квантующем магнитном поле. а)- эксперимент [230] и модельный Расчёт для висмута при $T=14,2\text{K}$, б)-осцилляции магнитной восприимчивости в сильном магнитном поле для трех разных значений температур.

8.3. Эффект де Гааза- ван Альфена при высоких температурах и слабых магнитных полях

Из всех осцилляционных эффектов наиболее известен и хорошо изучен эффект де Гааза–ван Альфена (дГВА). Он представляет собой периодические изменения с полем магнитной восприимчивости при низких температурах [236].

В дальнейшем эффекты Шубникова-де Гааза и дГВА развились в классические методы в физике твёрдого тела и физике полупроводников. Эффект дГВА стал мощным инструментом исследований поверхности Ферми, поскольку период осцилляций магнитного момента, рассматриваемый как функция I/H , непосредственно связан с площадью её максимального или минимального поперечного сечения плоскостью, перпендикулярной магнитному полю [216]. В последнее время интерес к исследованиям осцилляции дГВА возрос после их обнаружения в наноразмерных полупроводниках при высоких температурах и слабых магнитных полях [217, 218]. В этом случае энергетические позиции уровней размерного квантования определяют спектр уровней Ландау, который отражается в квантовании характеристик продольного транспорта двумерных носителей тока. Именно в подобных джозефсоновских сэндвич-наноструктурах было реализовано приближение сильного поля при высоких температурах и в слабых магнитных полях [216].

Осцилляции магнитной восприимчивости в сильном (эффект дГВА) обусловлены осцилляциями плотности энергетических состояний [228]. В этих работах определено пульсирующее магнитное поле напряженностью до 125 кЭ и при низких температурах. Осцилляции магнитной восприимчивости в сильном магнитном поле обусловлены осцилляциями плотности состояний. Из квантовой механики известно, что при наличии внешнего магнитного поля H магнитный момент электрона может быть направлен либо по полю, и тогда его энергия равна $\varepsilon - \mu_B H$, либо против поля, и тогда его энергия равна $\varepsilon + \mu_B H$, где ε – энергия электрона без поля.

Суммарный магнитный момент 1 см³ вещества, обусловленный электронами проводимости с моментами, направленными по магнитному полю, равен [181]

$$M_+ = \mu_B \int f_0(E - \mu_B H) N_s(E, H) dE$$

так как $N_s(E, H) dE$ – число квантовых состояний в интервале dE со спином одного направления в квантующем магнитном поле. $f_0(E - \mu_B H)$ – функция Ферми-Дирака, μ_B – магнетон Бора. Аналогично суммарный магнитный момент, обусловленный электронами с моментами, направленными против поля

$$M_- = \mu_B \int f_0(E + \mu_B H) N_s(E, H) dE$$

Таким образом, результирующий момент

$$M = M_+ - M_- = M_+ = \mu_B \int \{f_0(E - \mu_B H) - f_0(E + \mu_B H)\} N_H(E, H) dE$$

Для малых магнитных полей можно разложить $f_0(E \mp \mu_B H)$ в ряд по $\mu_B H$ и ограничиться членом первой степени; тогда

$$\chi = \frac{M}{H} = 2\mu_B^2 \int \left(-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E}\right) N_H(E, H) dE,$$

Для исследования температурной зависимости осцилляций магнитной восприимчивости $\frac{\partial f_0(E)}{\partial E}$ заменим на $GN(E_0, E, T)$ -функцию [231-235], тогда для магнитной восприимчивости получим следующее выражение:

$$\chi = -2\mu_B^2 \sum GN(E_0, E_i, T) N_i(E_i, H) \Delta E \quad (8.6)$$

Можно наблюдать температурную зависимость магнитной восприимчивости (эффект дГВА) в полупроводниках с помощью этой формулы. На рис. 8.6а приведён эффект осцилляции дГВА при высоких температурах и слабых магнитных полях.

С помощью численных экспериментов рассчитана осцилляция дГВА при различных температурах. На рис. 8.6б показано превращение сплошного спектра осцилляционного уровня с повышением температуры. (рис. 8.6а и 8.6б).

В работах [215,216] определена температурная зависимость осцилляции дГВА при высоких температурах в слабых магнитных полях в сэндвич-наноструктуре $CdV_xF_{2-x}/p-CdF_2-QW/CdV_xF_{2-x}$ на поверхности кристалла $n-CdF_2$ (Рис. 8.7а). На рис. 8.7б. приведёна осцилляция

дГвА в наноструктуре $\text{CdB}_x\text{F}_{2-x}/p\text{-CdF}_2\text{-QW}/\text{CdB}_x\text{F}_{2-x}$ на поверхности кристалла $n\text{-CdF}_2$.

В работе [203] определена типичная кривая зависимость магнитного момента от магнитного поля. У большинства металлов зависимость магнитного момента от магнитного поля не ограничивается одной гармоникой, а представляет из себя суперпозицию нескольких гармоник, причем, как правило, с резко различными периодами (на рис. 8.8).

На рис. 8.9 была показана зависимость магнитной восприимчивости и температуры от обратного магнитного поля в расширенном масштабе (в интервале значений $\frac{1}{B} = (0;10] \text{ Tл}^{-1}$), а также представлено возникновение дополнительных осцилляционных уровней, т.е. ярко выражено наблюдение эффекта дГВа.

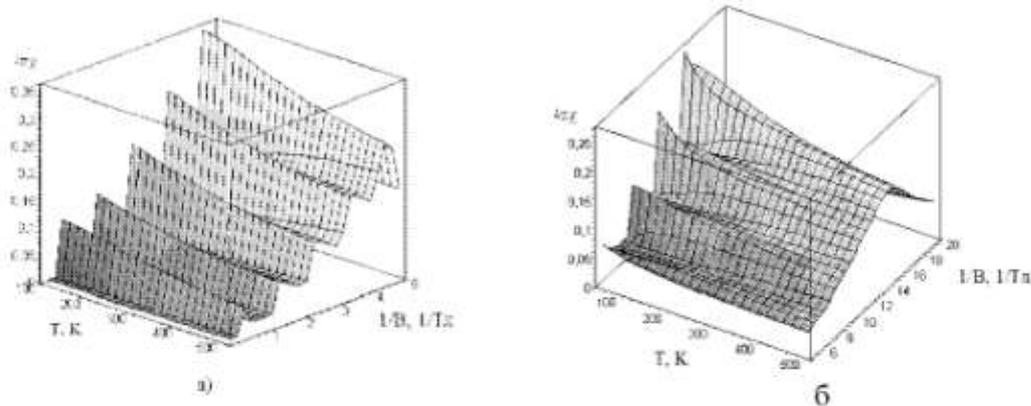


Рис. 8.6.

Магнитная восприимчивость полупроводника (Осцилляции де Гааза-ван Альфена) в слабых магнитных полях (а- $\frac{1}{H} = [0,1; 5] \text{ Tл}^{-1}$ и б- $\frac{1}{H} = [6; 20] \text{ Tл}^{-1}$) и высоких температурах.

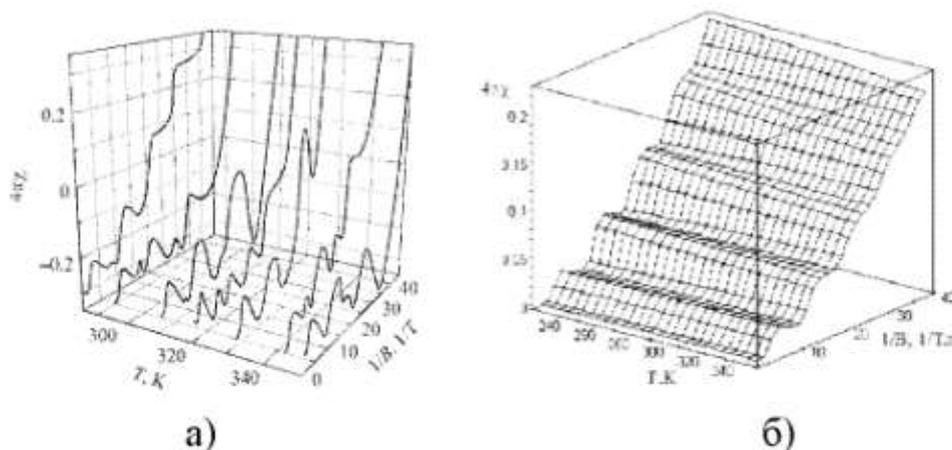


Рис. 8.7.

Осцилляции де Гааза-ван Альфена в полевых зависимостях статической магнитной восприимчивости, измеренные при различных температурах, в сэндвич-наноструктуре $\text{CdB}_x\text{F}_{2-x}/p\text{-CdF}_2\text{-QW}/\text{CdB}_x\text{F}_{2-x}$ на поверхности кристалла $n\text{-CdF}_2$

а) эксперимент [216], б) Расчёт с помощью предложенной модели.

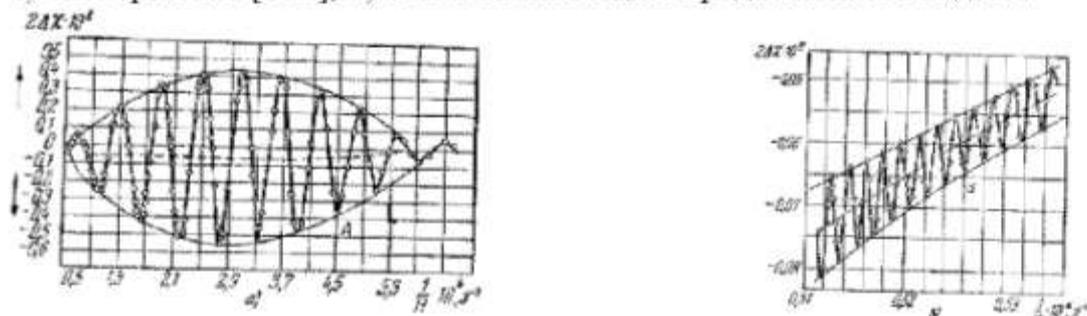


Рис. 8.8.

а) Типичная кривая зависимости $\chi(H)$ магнитной восприимчивости от обратного магнитного поля. б) Тонкая структура явления де Гааза-ван Альфена. Кривая *a* представляет собой растянутый по обеим координатным осям начальный участок кривой А (кристалл Zn, $T=4,2\text{ }^{\circ}\text{K}$) [203].

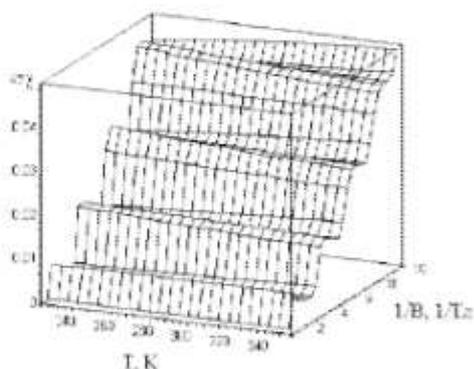


Рис. 8.9.

Осцилляции де Гааза-ван Альфена представляют собой растянутый по обеим координатным осям начальный участок кривой рис. 8.7б.

ГЛАВА 9. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ

Процессы поглощения света сопровождаются переходом электронов из одного участка энергетического спектра в другой. При этом одним из основных факторов определяющего коэффициент поглощения света, является плотность энергетических состояний в образцах. Температурная зависимость вероятности заполнения электронных состояний в полупроводнике сильно влияет на процесс поглощения света. В настоящей главе исследуется влияние температурной зависимости термодинамической плотности состояний на коэффициент поглощения света на длинноволновом краю фундаментального поглощения.

9.1. Температурная зависимость термодинамической плотности состояний и правило Урбаха

В работах [176-178] с помощью математического моделирования было показано, что экспериментально определённый сплошной спектр термодинамической плотности поверхностных состояний при низких температурах превратится в дискретный спектр поверхностных состояний. Изменение ширины запрещённой зоны с ростом температуры также объясняется тепловым уширением энергетических состояний зоны проводимости и валентной зоны

полупроводника [178]. Температурная зависимость плотности состояний в квантующих магнитных полях рассматривался как результат теплового уширения уровней Ландау [234].

Изменения термодинамической плотности состояний (ТПС) с температурой приводит к температурной зависимости коэффициента поглощения света. Коэффициент поглощения света особенно чувствителен к внешним воздействиям на частотах вблизи края фундаментального поглощения. Коэффициент поглощения света на длинноволновом краю фундаментального поглощения часто описывается по правилу Урбаха [13,121]

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\gamma \frac{h\nu - E_g}{E}\right) \quad (9.1)$$

Здесь α_0, γ – сравнительно медленно меняющаяся функции частоты ν , E_g – ширина запрещённой зоны, E – величина размерности энергии, которая при низких температурах постоянная а при высоких пропорциональна kT . Одним из основных предположений, используемого при анализе экспериментальных данных является то, что комбинированная плотность состояний $N_s(E, T)$ определяет коэффициент поглощения света в области запрещённой зоны полупроводника [13] $\alpha = BN_s(E, T)$ (9.2)

Здесь B – сравнительно медленно меняющаяся функция частоты и температуры.

Температурная зависимость $N_s(E, T)$ должна проявляться и в коэффициенте поглощения света в области запрещённой зоны полупроводника. Всякая модель, привлекаемая для объяснения экспоненциального края поглощения в полупроводниках, должна объяснить и его температурную зависимость.

Температурная зависимость термодинамической плотности состояний $N_s(E, T)$ удовлетворительно описывается разложением её в ряд по GN -функциям (GN – производная по энергии от степени термического опустошения дискретного уровня E_i за время t после ухода пакета заполняющих зарядов) [170]. Степень опустошения дискретных уровней определяется статистикой Шокли-Рида-Холла. Как показано в работах [170], $N_s(E, T)$ связано с плотностью состояний при абсолютном нуле температуры $N_s(E)$ следующим соотношением

$$N_s(E, T) = \sum_i N_s(E_i) GN_i(E_i, E, T) \quad (9.3)$$

Здесь $GN(E_i, E, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i)\right)\right)$ (9.4)

Для прямых переходов $N_s(E_i)$ выберем в следующем виде

$$\begin{aligned} N_s(E_i) &= N_c \sqrt{E - E_c} && \text{при } E > E_c \\ N_s(E_i) &= N_i \delta(E - E_i) && \text{при } E_c > E > E_v \\ N_s(E_i) &= N_v \sqrt{E_v - E} && \text{при } E < E_v \end{aligned} \quad (9.5)$$

Здесь E_c и E_v - края зоны проводимости и валентной зоны. Подставляя (9.4) и (9.5) в (9.3), получим графики плотности состояний $N_s(E,T)$ при различных температурах.

Проанализируем температурную зависимость $N_s(E,T)$ с помощью численных экспериментов. На рис. 9.1 приведены графики термодинамической плотности состояний $N_s(E,T)$ при различных температурах. Как видно из рисунка, при низких температурах край зоны проводимости и дискретные уровни отделены энергетической щелью (рис. 9.1 кривые 1 и 2). В этом случае тепловое уширение достаточно слабо и не влияет на спектр зоны проводимости и дискретные уровни E_1 и E_2 . С ростом температуры термодинамическая плотность состояний зоны проводимости за счёт термического уширения начинает проникать в глубину запрещённой зоны. Энергетические участки между отдельными дискретными уровнями в запрещённой зоне и сплошными уровнями зоны проводимости пополняются новыми уровнями, поступившими из зоны проводимости и из дискретных уровней E_1 и E_2 (рис. 9.1 кривые 3 и 4).

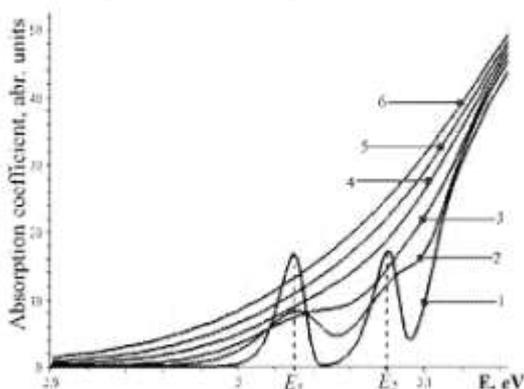


Рис. 9.1.

Температурная зависимость ТПС, вычисленная по формуле (4.3) (различных температурах линия 1 и 2 $T=77\text{K} \dots T=200$ 3 и 4 $T=273$ $T=300$. 5 и 6 $T=350\text{K}$ и 400K)

С ростом температуры термодинамическая плотность состояний зоны проводимости начинает размываться и интервалы между краем зоны проводимости и дискретными уровнями начинают заполняться новыми состояниями из этих уровней. Так же, хорошо видно, как при температуре $T=77\text{K}$ плотности сплошных состояний зоны проводимости и состояния дискретных уровней в запрещённой зоне сливаются (3-4). При этом полное число уровней после теплового размывания состояний зоны проводимости и дискретных уровней остается постоянной. При дальнейшем увеличении температуры доля состояний, поступивших из зоны проводимости, возрастают гораздо сильнее по сравнению с долей состояний, обусловленной расширением дискретных уровней. При этом дискретные уровни E_1 и E_2 размываются по всей запрещённой зоне и перемешиваются с состояниями, поступившими из зоны проводимости. С ростом температуры вклад дискретных состояний E_1 и E_2 в термодинамической плотности состояний становится незаметным и термодинамическая плотность состояний ниже дна зоны проводимости полностью определяется распределением плотности состояний внутри зоны проводимости

В результате полная термодинамическая плотность состояний определяется в основном квазидискретными уровнями, поступившими из зоны проводимости (линии 5,

б). При температуре $T=300\text{K}$, относительная доля локализованных состояний E_1 и E_2 , в ТПС, становится меньше 1%.

Отсюда следует, что плотность состояний в запрещённой зоне ниже дна зоны проводимости полностью определяется состояниями, поступившими из зоны проводимости. Эта произойдёт за счёт уширения огромного числа уровней разрешенной зоны.

Далее рассмотрим экспоненциальную зависимость (1) и зависимость ТПС (2) в области запрещённой зоны ниже дна зон проводимости. На рис. 9.3 приведены графики функции (1). Как видно из сравнения графиков при температурах больше $T_0=400\text{K}$ ТПС может быть описано экспоненциальной зависимостью (1). Правило Урбаха и ТПС при высоких температурах T больше $T_0=400\text{K}$ дают одинаковые графики.

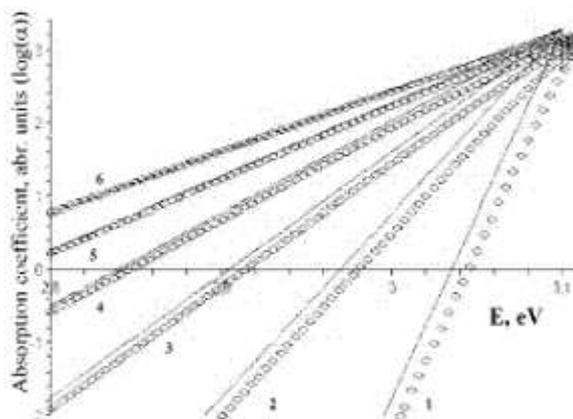


Рис. 9.2

Температурная зависимость ТПС, вычисленная по формуле (-) сплошная линия, правило Урбаха при различных температурах (◊) ромбики. линии $T_1=100\text{K}$, $T_2=200\text{K}$, $T_3=300\text{K}$, $T_4=400\text{K}$, $T_5=500\text{K}$, $T_6=600\text{K}$. Начиная с температур $T_4=400\text{K}$ ТПС и ПУ практически сливаются.

Отсюда следует, что одним из возможных механизмов приводящих к правилу Урбаха может быть термическое

уширение энергетических состояний в разрешенных и запрещенных зонах полупроводников. Полученные результаты сравним с экспериментальными данными [121].

На рис. 9.3 приведены графики коэффициента поглощения для аморфного и жидкого селена [121] измеренная при трех разных температурах -200°C , 100°C , 400°C и теоретическая плотность состояний полученная по формуле (9.2) - (9.3). Как видно из сравнения графиков в рассматриваемом интервале энергий экспериментальные результаты (9.1-9.3) удовлетворительно описывается теоретической (9.1-9.3) кривой, вычисленной по формуле(9.3).

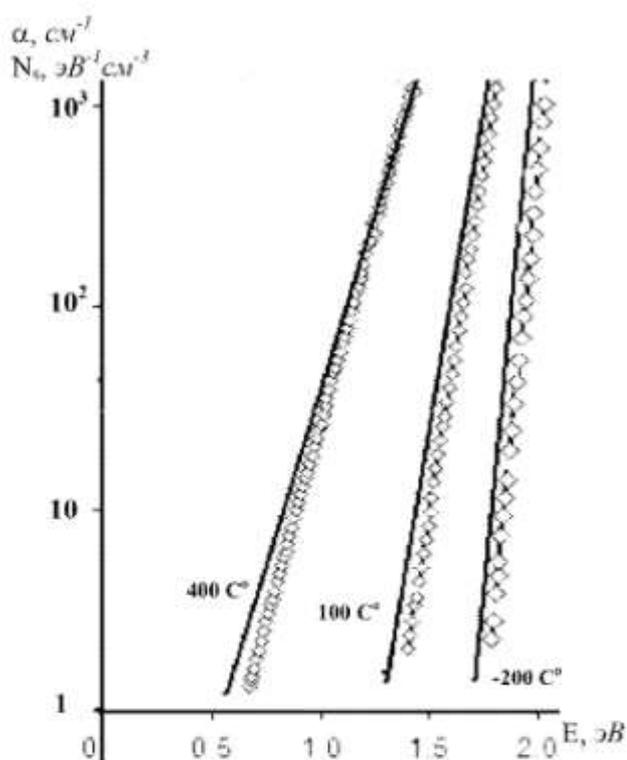


Рис. 9.3.

Частотная зависимость коэффициента поглощения при различных температурах. Сплошная линия рассчитано по формуле (9.3) ромбиками обозначены экспериментальные результаты из работы [121].

Сравнение этих кривых показывает, что температурная зависимость термодинамической плотности состояний может удовлетворительно объяснить частотную и температурную зависимости длинноволнового края фундаментального поглощения.

9.2. Длинноволновый край фундаментального поглощения и термодинамическая плотность состояний

Спектральная зависимость коэффициентов поглощения на длинноволновом краю фундаментального поглощения в полупроводниках часто удовлетворительно описывается формулой (9.1) [13,121,241].

Были предложены много механизмов для объяснения правила Урбаха. Причиной этому является то, что каждый предложенный механизм может быть применён к конкретному материалу и конкретному физическому условию. Одним из основных предположений, используемого в литературе при анализе экспериментальных данных является то, что плотность состояний определяет коэффициент поглощения света в области запрещённой зоны полупроводника [13,121,241]. В частности для прямых разрешенных переходов коэффициент поглощения прямо пропорционален термодинамической плотности состояний (ТПС). С другой стороны, несмотря на такое большое разнообразие

механизмов, экспоненциальная зависимость коэффициента поглощения от энергии фотонов и температуры наблюдается во многих экспериментах. Это обстоятельство наводит на мысль о возможном существовании какого-то общего механизма, пригодного для объяснения поведения коэффициента поглощения света, в длинноволновой области края фундаментального поглощения, которая не зависит от материала рассматриваемого полупроводника. В связи с неопределённостью природы экспоненциального края поглощения возникает вопрос: Можно ли из общих принципов статистической физики независимо от конкретного материала полупроводника статистическим образом определить температурную зависимость коэффициента поглощения? Всякая модель, привлекаемая для объяснения экспоненциального края поглощения в полупроводниках должна объяснить и его температурную зависимость. В качестве такого механизма может быть рассмотрена температурная зависимость термодинамической плотности состояний.

В работе [242] предложен статистический подход к объяснению формы и температурной зависимости спектров поглощения кристаллов. Весь кристалл представляется как квантовый ансамбль, состоящий из малых областей кристалла – элементов ансамбля. Тепловые флуктуации энергетических состояний

приводит к флюктуациям энергии оптических переходов. В рамках предложенной модели Расчёт длинноволнового спада коэффициента поглощения согласуется с правилом Урбаха. В работах [176-178] было показано, что экспериментально определённый сплошной спектр термодинамической плотности поверхностных состояний при низких температурах превратится в дискретный спектр поверхностных состояний. Изменение ширины запрещённой зоны с ростом температуры также объясняется тепловым уширением энергетических состояний зоны проводимости и валентной зоны полупроводника [35].

Изменения ТПС с температурой приводит к температурной зависимости коэффициента поглощения света. Коэффициент поглощения особенно чувствителен к внешним воздействиям при частотах вблизи края фундаментального поглощения света.

Температурная зависимость термодинамической плотности состояний $N_i(E,T)$ удовлетворительно описывается разложением её в ряд по G_N -функциям (G_N – производная по энергии от степени термического опустошения дискретного уровня E_i за время T после ухода пакета заполняющих зарядов). Степень опустошения определяется статистикой Шокли-Рида-Холла [35]. Как показано в работах [176-178] термодинамическая плотность состояний может быть

представлена с помощью плотности состояний $N_2(E)$ в следующем виде (9.3).

Рассмотрим изменения термодинамической плотности состояний при увеличении температуры. Используем модель, разработанную в работах [176-178]. Проанализируем температурную зависимость $N_1(E,T)$ с помощью численных экспериментов. Результаты полученных численных экспериментов изобразим графически. На рис. 9.1 приведены графики термодинамической плотности состояний $N_1(E,T)$ при различных температурах. Как видно из рисунка, при низких температурах край зоны проводимости и дискретные уровни отделены энергетической щелью (рис. 9.1 кривые 1 и 2). В этом случае тепловое уширение достаточно слабо и не влияет на сплошные уровни зоны проводимости и дискретные уровни E_1 и E_2 . С ростом температуры термодинамическая плотность состояний зоны проводимости за счёт термического уширения начинает расползаться ниже её края в глубину запрещённой зоны. Энергетические участки между отдельными дискретными уровнями в запрещённой зоне и сплошными уровнями зоны проводимости начинают обрастать новыми уровнями, поступившими из зоны проводимости и из дискретных уровней E_1 и E_2 (рис. 9.1 кривые 3 и 4).

Это происходит за счёт термического уширения состояний зоны проводимости и дискретных уровней. Из рис. 9.1 хорошо видно, как при температуре $T=600$ К плотности сплошных состояний зоны проводимости и состояния дискретных уровней в запрещённой зоне сливаются.

При дальнейшем увеличении температуры доля состояний, поступивших из зоны проводимости, возрастают гораздо сильнее по сравнению с долей состояний, обусловленной расширением дискретных уровней. Дискретные уровни E_1 и E_2 размываются по всей запрещённой зоне и перемешиваются сплошными состояниями, поступившими из зоны проводимости. В результате полная термодинамическая плотность состояний определяется в основном квазидискретными уровнями, поступившими из зоны проводимости. С ростом температуры вклад дискретных состояний в термодинамической плотности состояний становится незаметным и термодинамическая плотность состояний ниже дна зоны проводимости полностью определяется распределением плотности состояний внутри зоны проводимости. Результаты численных Расчётов приведены на рис. 4.4 (линии 4, 5, 6). Эти результаты можно использовать для анализа края коэффициента поглощения света.

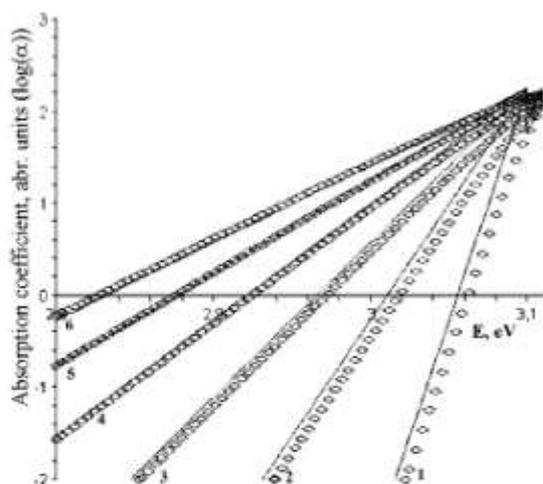


Рис. 9.4

Экспоненциальная зависимость (-) и зависимость ТПС (\diamond) в области запрещённой зоны у дна зон проводимости.

Далее рассмотрим экспоненциальную зависимость (9.1) и зависимость ТПС (2) в области запрещённой зоны ниже дна зон проводимости. На рис. 9.4 приведены графики функции (9.1) и зависимость ТПС (9.2). Как видно из сравнения графиков при температурах больше T_0 ТПС может быть описано экспоненциальной зависимостью (9.1). Правило Урбаха и ТПС при высоких температурах дают одинаковые графики. Отсюда следует, что одним из возможных механизмов, приводящих к объяснению правила Урбаха, может быть термическое уширение энергетических состояний.

Для проведения численного анализа использована математическая модель определение ППС и экспериментальные результаты из существующей литературы. Подбор коэффициентов осуществлялся таким образом, чтобы графики экспериментальных сплошных спектров ППС и графики, полученные согласно разработанной модели, максимально совпадали. В настоящей работе после подбора коэффициентов подсчитана относительная погрешность Δ по формуле

$$\Delta = \frac{\sum_{i=1}^n |\overline{N_{\text{э}}} - |N_{\text{э}}^i - N_{\text{э}}^*||}{n\overline{N_{\text{э}}}} \cdot 100\% \quad \text{где } \overline{N_{\text{э}}} - \text{среднее значение}$$

концентрации по всему спектру экспериментальной ППС, $N_{\text{э}}^i$ - значение концентрации для энергии, $E_i \in [E_v, E_c]$ полученное согласно модели при температуре эксперимента, $N_{\text{э}}^*$ - значение концентрации для энергии $E_i \in [E_v, E_c]$ по спектру экспериментальной ППС, n - количество разбиений ширины запрещённой зоны. В наших вычислениях берётся $n=1000$.

В работе после подбора коэффициентов значение Δ остается в пределах 95-96%, т.е. относительная погрешность составляет менее 5%, и это меньше допустимой погрешности эксперимента.

Построение дельта-функции Дирака

Методы построения дельта-функции Дирака, приведённые в [41] основном симметричны. Для построения асимметричной дельта-функции Дирака возьмём функцию $\varphi(x)$, от которой требуется только обращение в нуль при $x = \pm\infty$ и отличие от нуля интеграла $I = \int \varphi(x) dx$. Всегда можно сделать этот интеграл равным 1, умножая $\varphi(x)$ на соответствующую константу. Если это предположить, тогда $\int \varphi(x) dx = 1$. Для простоты рассмотрим такие $\varphi(x)$, которые имеют единственный максимум в $x \in (-\infty, \infty)$. И пусть этот максимум достигается в точке m_0 т.е. $\varphi(m_0) = \max_{x \in (-\infty, \infty)} \varphi(x)$. Для несимметричности функции $\varphi(x)$

достаточно добавить условия (1) $\int_{-\infty}^{m_0} \varphi(x) dx \neq \int_{m_0}^{\infty} \varphi(x) dx$, другими словами площадь $x \in (-\infty, m_0)$ не совпадает с площадью $x \in (m_0, \infty)$.

Из вышеуказанных условий попробуем построить функцию. Если $\varphi(x)$ имеет единственный максимум, значит $\varphi'(x) = 0$ имеет единственное решение. Для начала рассмотрим известную функцию $\varphi(x) = e^{-x^2}$. И анализ показывает, что $\varphi'(x) = 0$ имеет единственное решение при $x = 0$ т.е. $m_0 = 0$. Проверим дополнительное условие (1), так

как при $\int_{-m_0}^{m_0} e^{-x^2} dx = \int_{m_0}^{\infty} e^{-x^2} dx$ мы не можем точно сказать, что

функция $\varphi(x) = e^{-x^2}$ несимметрична. Чтобы выполнялось

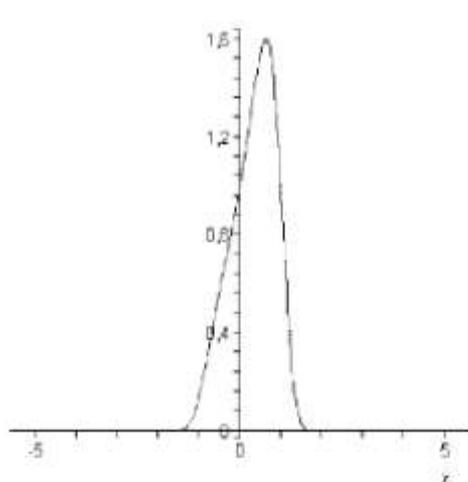
условие (1), будем искать функцию вида $\varphi(x) = e^{-x^{2k}+x}$ (где k целое и $k > 1$). И тогда $\varphi'(x) = 0$ имеет единственное решение

при $x = 2k \sqrt{\frac{1}{2k}}$ т.е. $m_0 = 2k \sqrt{\frac{1}{2k}}$ и действительно, если проверить

условия (1) $\int_{-m_0}^{m_0} \exp(-x^{2k}+x) dx = \int_{m_0}^{\infty} \exp(-x^{2k}+x) dx$ с помощью графиков

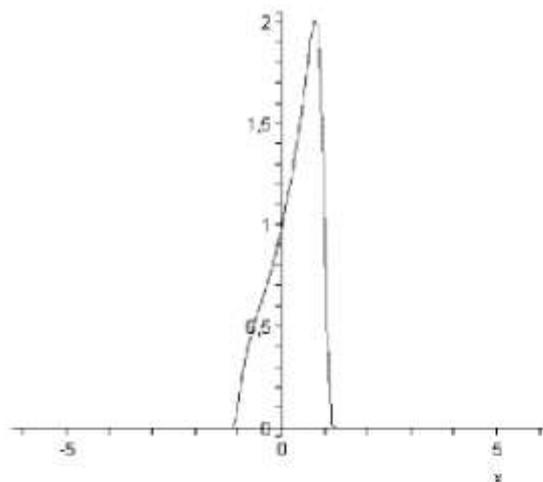
функций вида

$\varphi(x) = \exp(-x^{2k}+x)$ (где k целое и $k > 1$)



$k=2, S = 2.138695027$

$m_0 = 0.6299605250$



$k=5, S = 2.216994812,$

$m_0 = 0.8541314965$

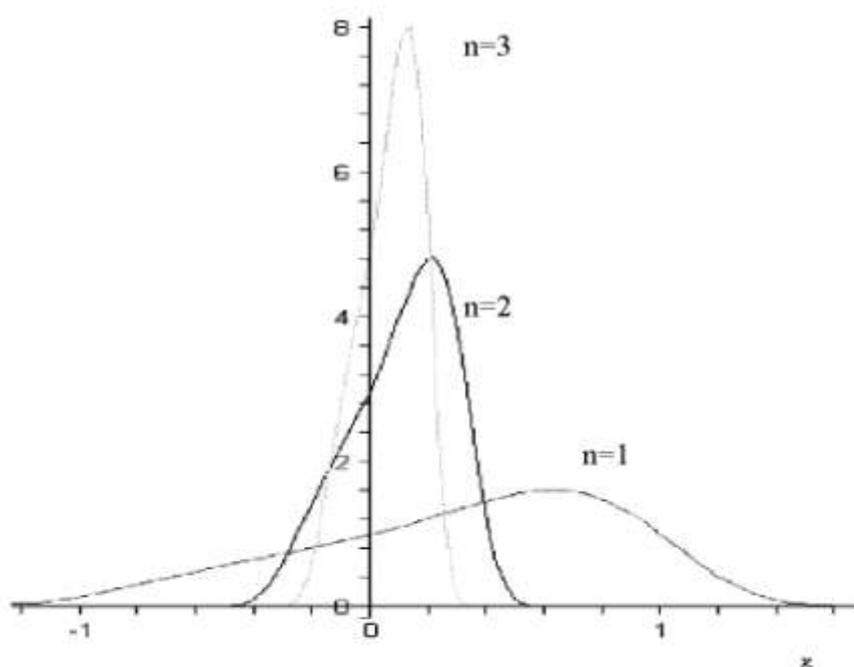
Таким образом, мы построили функцию вида $\varphi(x) = e^{-x^{2k}+x}$ (1) и она удовлетворяет вышеуказанным условиям. Теперь необходимо добавить параметр n и построить дельта-функцию

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} n \varphi(nx) \quad (2) \quad [41]$$

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} n e^{-(nx)^{2k}+nx} \quad (3)$$

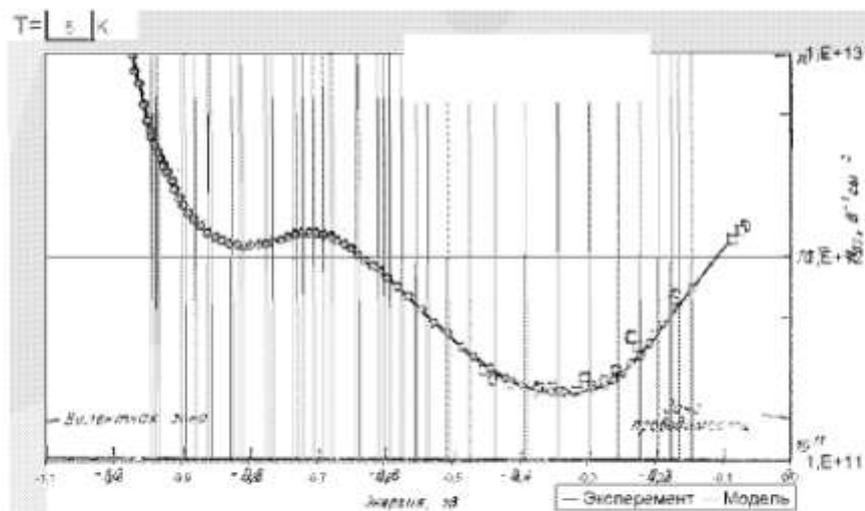
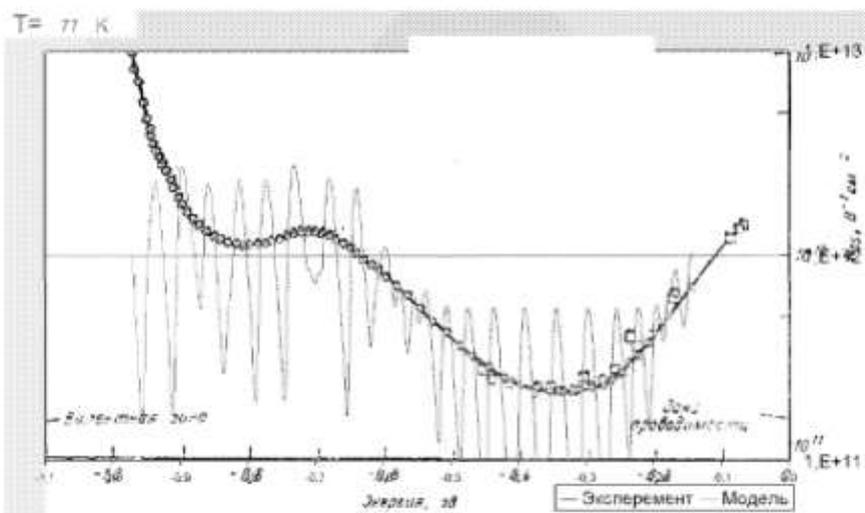
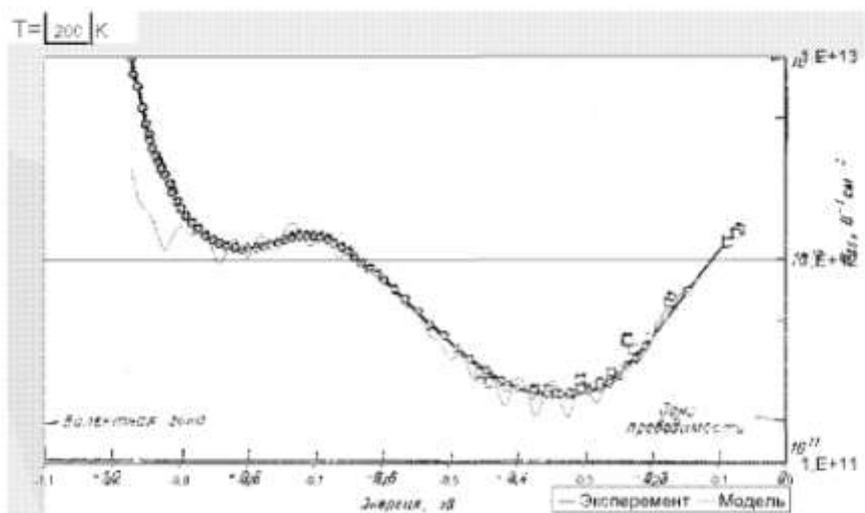
и это видно из следующих графиков.

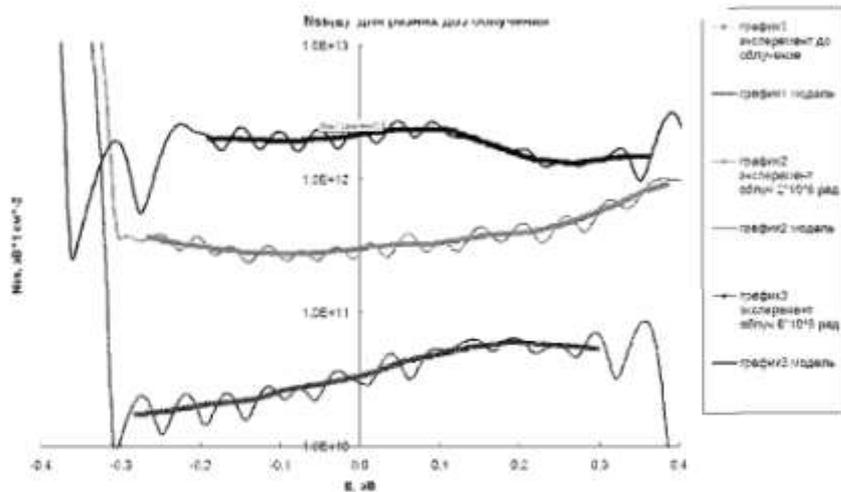
Если анализировать построение несимметричных дельта-функций, то нетрудно заметить, что в функцию $\varphi(x) = e^{-x^{2n}+x}$ вместо x^{2n} можно поставить другую функцию, потребовав положительность по всей числовой оси и более резкое возрастание относительно линейной функции. Например, показательную функцию с основанием больше единицы. Учитывая, что одной из часто используемых показательных функций является экспоненциальная функция e^x , можно построить несимметричную дельта-функцию виде $\varphi(x) = e^{-e^x+x}$ (4).



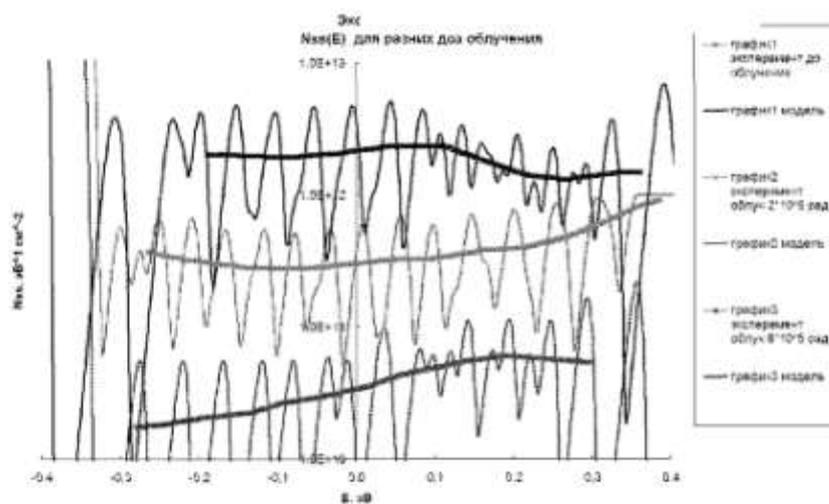
Полученная дельта-функции при различных n

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

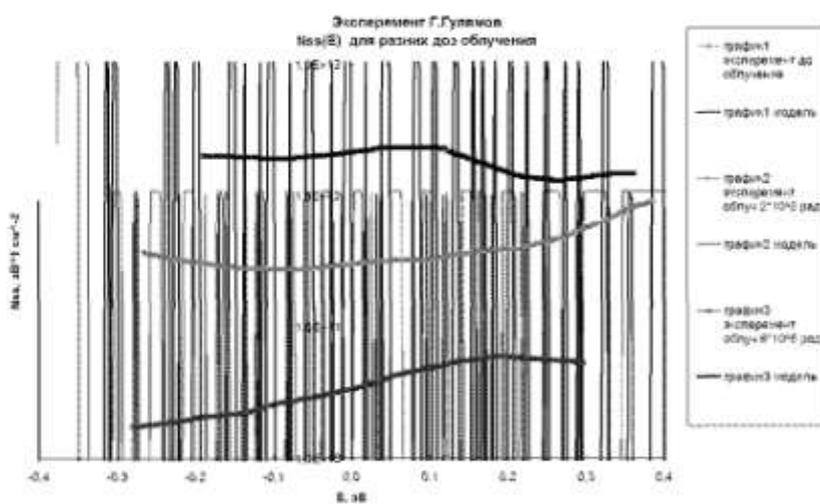




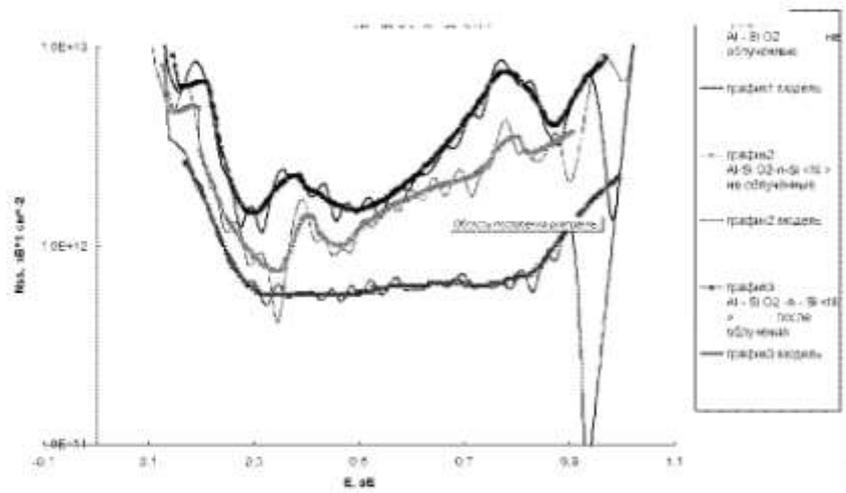
T=200K



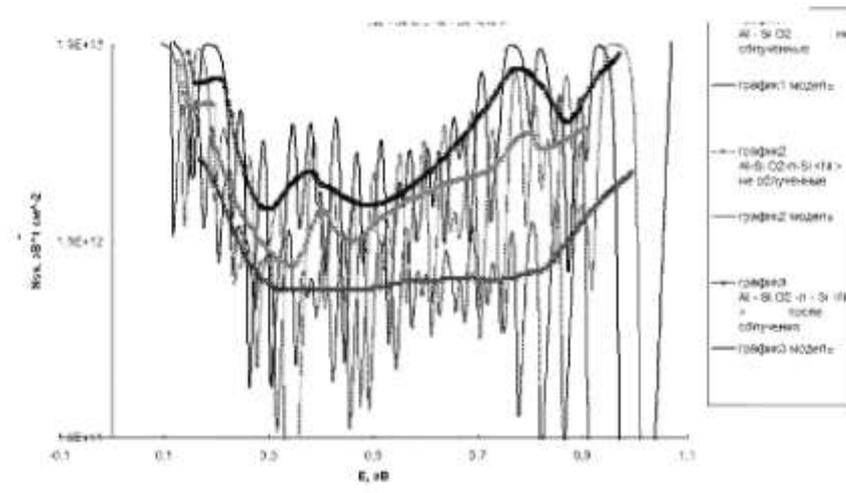
T=77K



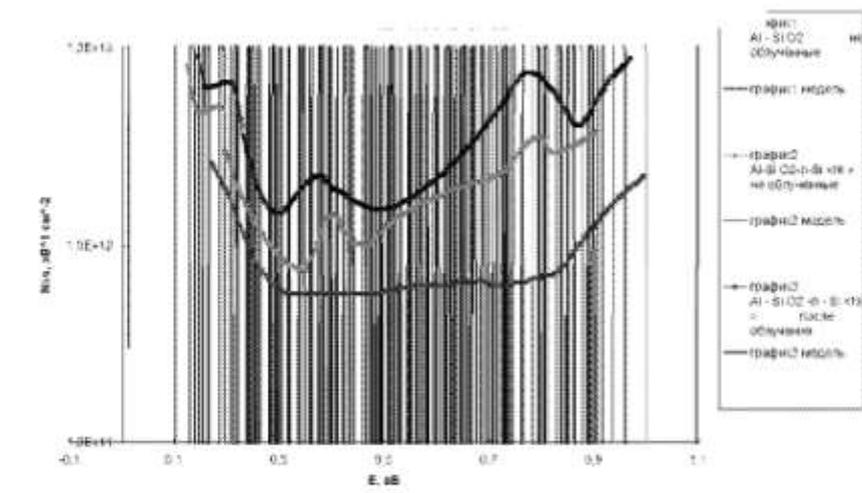
T=5K



T=200K



T=77K



T=5K

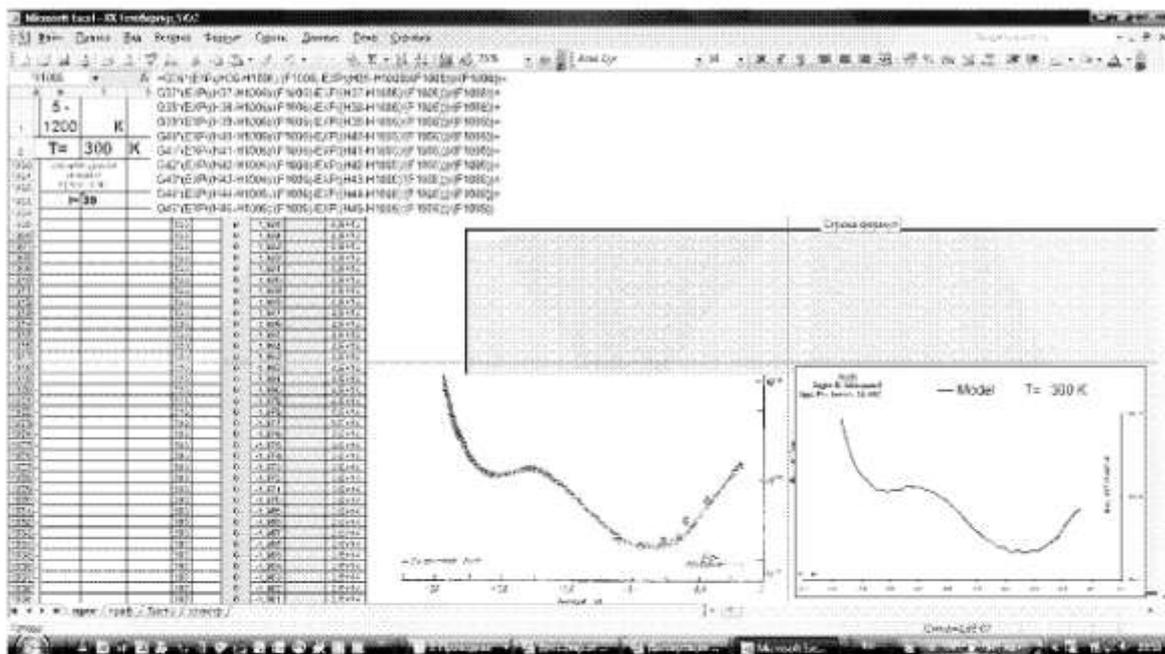
```

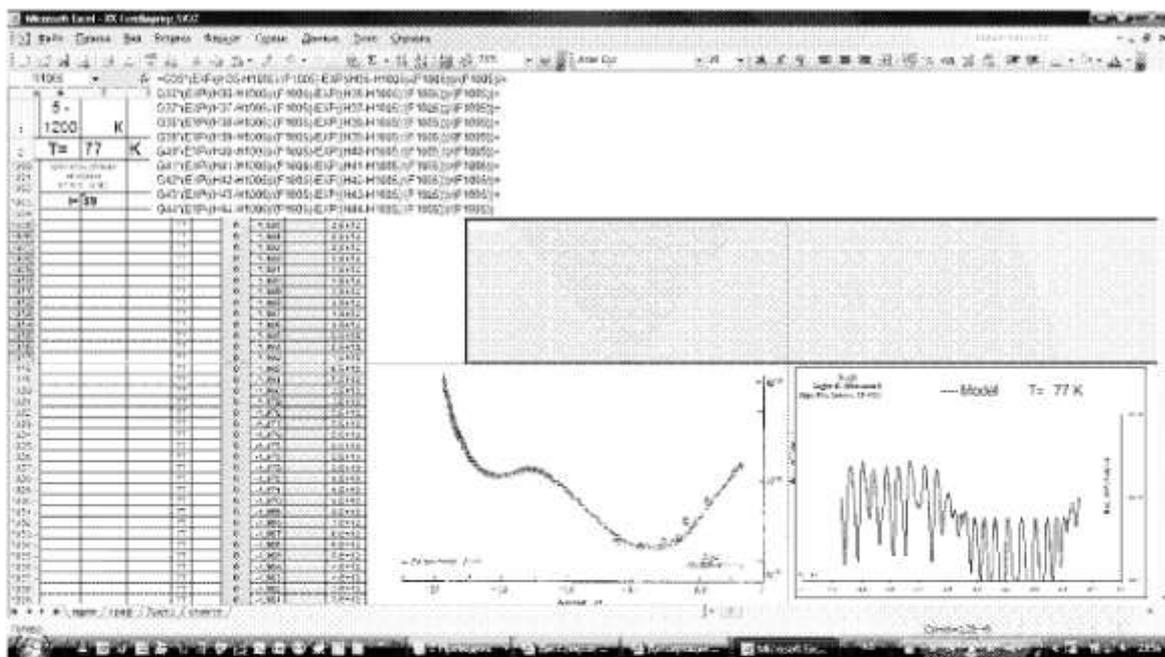
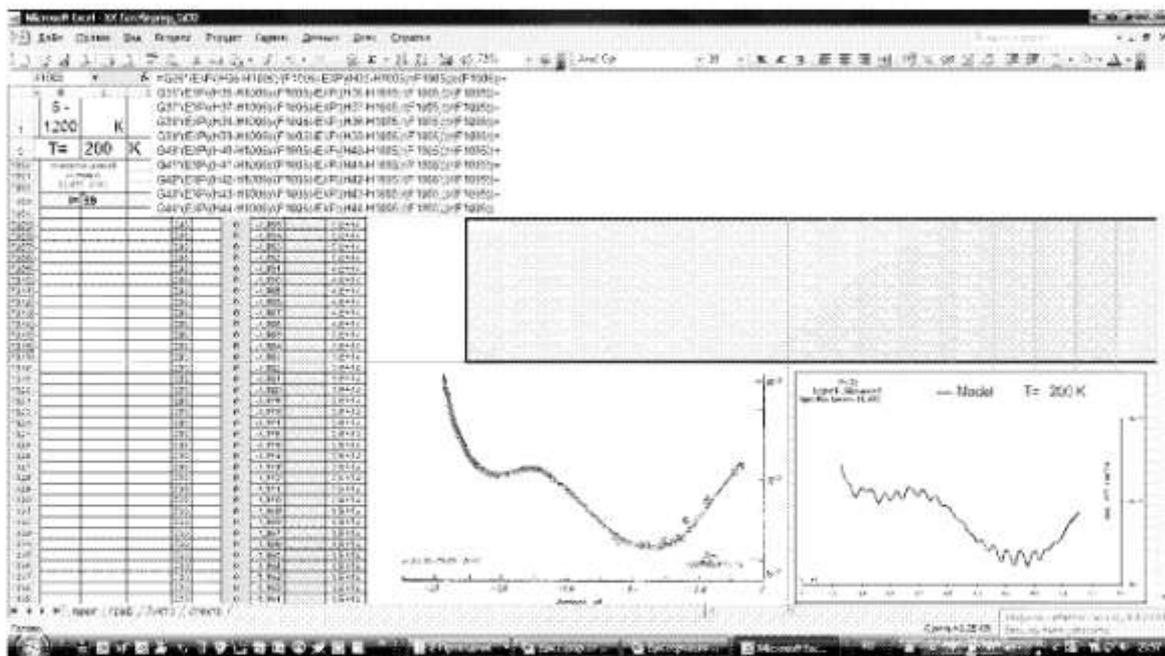
> restart:with(plots):Nss:=array[-200..n+200]:
k:=1.38e-23: e1:=1.6e-19:Nss0:=1e+10:n:=1000:
T:=300:
for a from -200 by 1 to 200+n do Nss[a]:=100 end do:
GN:=proc(E,E0,T)

$$\frac{Nss0 e^{\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)} e^{-\left(\frac{E_0 - E}{kT}\right)}}{kT}$$

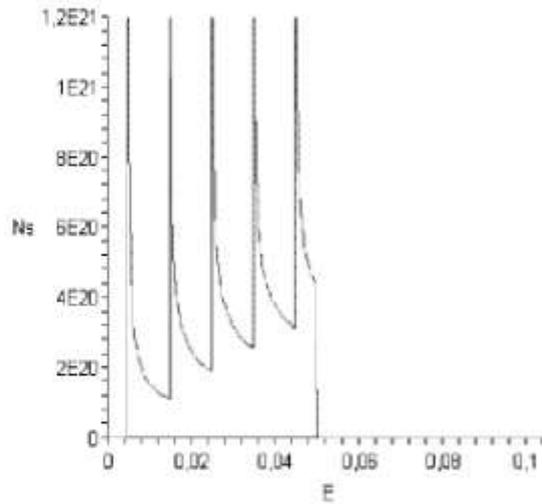
end proc:
NssE:=proc(T,Nss)
plot[E0, log10[sum_{j=-200}^{200+n} Nss_{n+200+j} GN(j/n, E0, T)], E0=-1.2..0.2, -1.1..0, 11..13.5]
end proc:

```

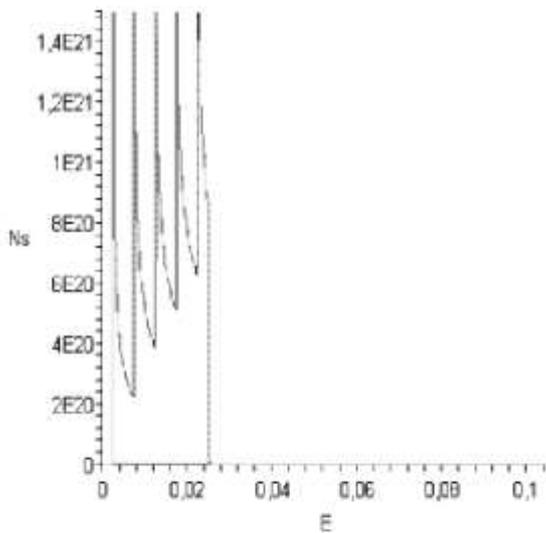




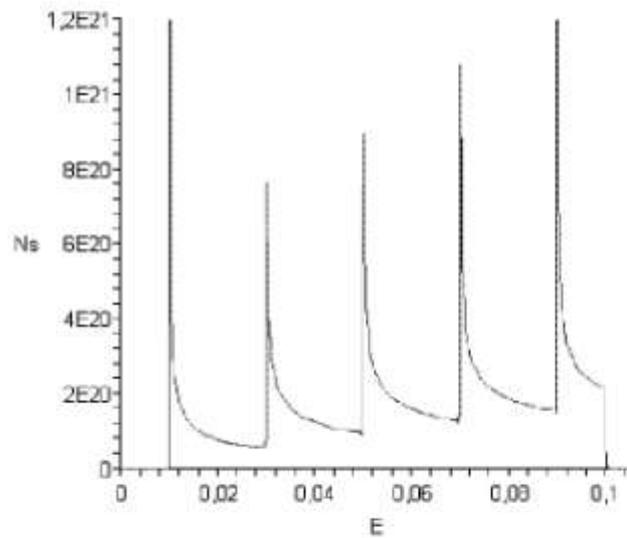
ПРИЛОЖЕНИЕ 4



a)



b)



v)

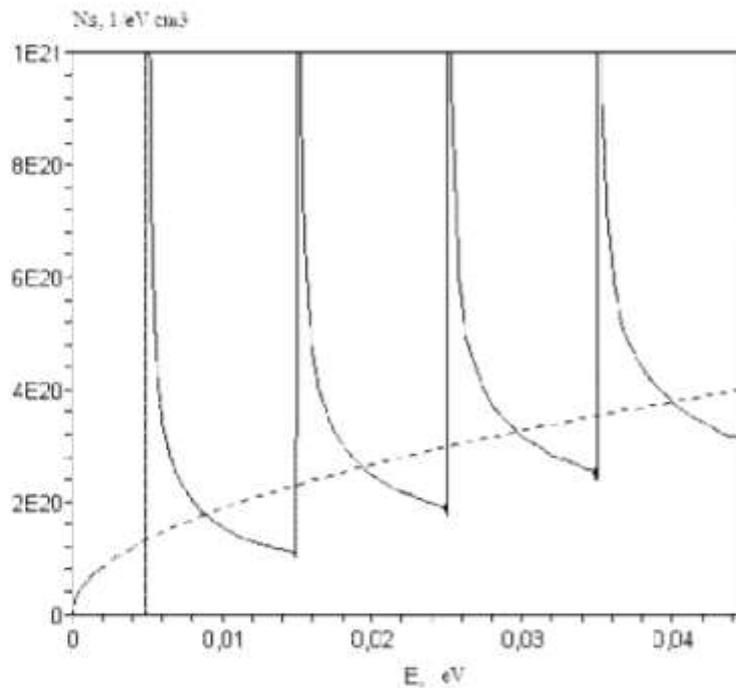
Зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле от циклотронной эффективной массы электронов при $T=0,4$ К.

a) $m_c = m_0$

b) $m_c = 2m_0$

v) $m_c = 0,5m_0$

где m_0 – масса свободного электрона.



С помощью предложенной модели исследовано влияние магнитного поля на плотность состояний свободного электрона.

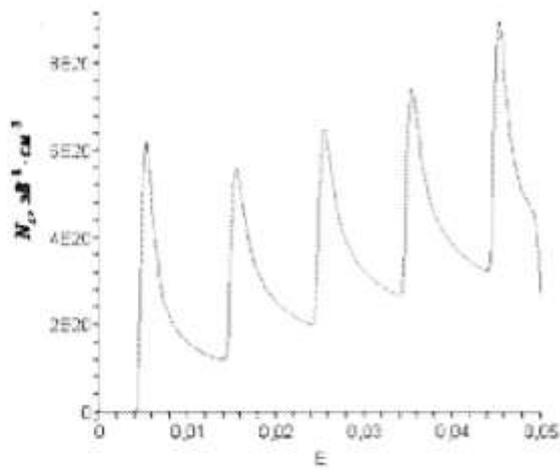
В сильном магнитном поле плотность состояний сильно осциллирующая функция энергия, при $H=10\text{кЭ}$, $T=0,4\text{К}$. (сплошная линия).

При уменьшении напряженности магнитного поля плотность состояний превращается в параболу и принимает форму N_s без магнитного поля.

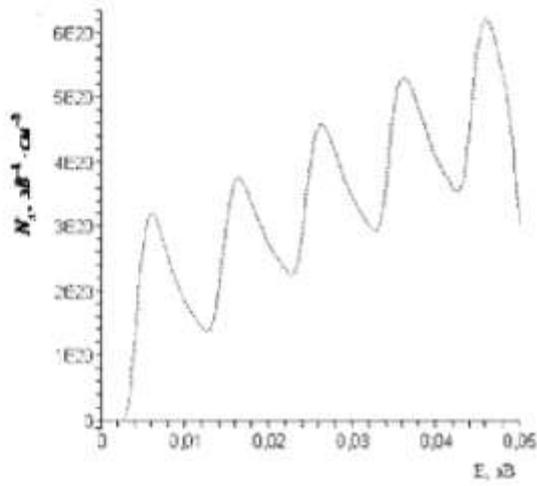
Зависимости плотности состояний от энергии,
вычисленные по формуле (6.6)

— Расчёты $N_s(E)$ для $H=10\text{ кЭ}$ и $T=77\text{ К}$

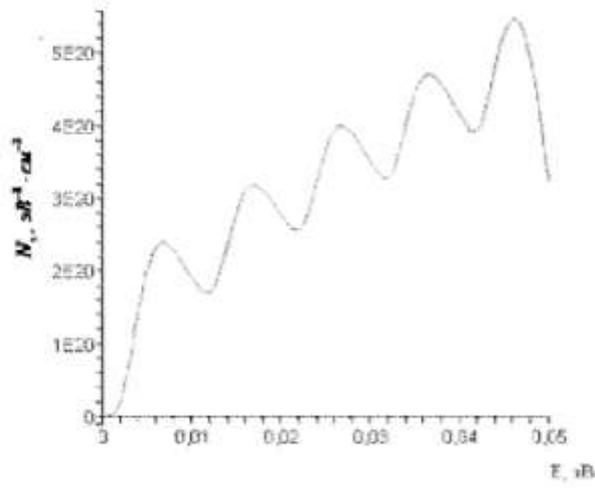
- - - Расчёты $N_s(E)$ для $H=0,1\text{ Э}$ и $T=0,4\text{ К}$



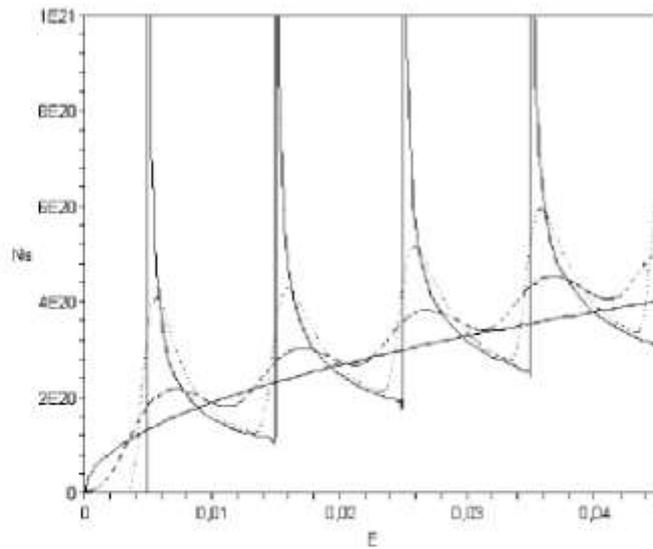
T=5 K



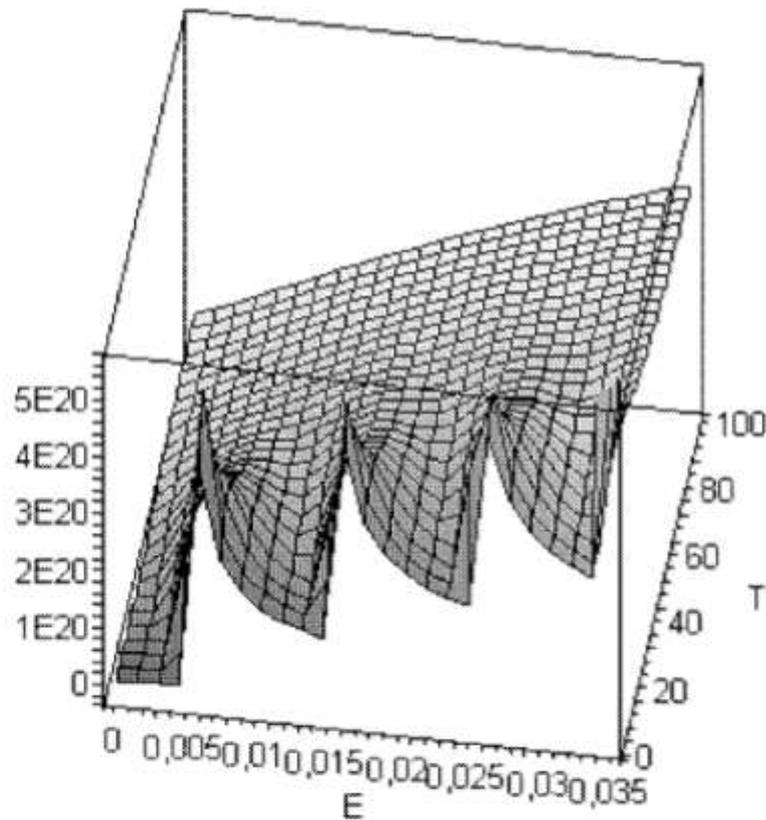
15 K



T=25 K



d). $T=0,4 \text{ K}, 10\text{K}, 45\text{K}$ ва 77K



e). Плотность состояний в трёхмерном пространстве N_s , E , T при $H=10 \text{ кЭ}$.

Температурная зависимости плотности энергетических состояний в сильном магнитном поле.

Maple 13 - 3D Plot of a function of three variables

```

restart with plot3d;
a1:=1.0e-10; a2:=1.0e-10; a3:=1.0e-10;
k:=10^6*(4/21)/(1+17^2);
dR:=proc(Rk,T)
options
^((exp((R-k)/(h*T/a1)))/(exp((R-k)/(h*T/a1))+1))^2;
end proc;
F:=(k*(R*(h*T))^(5/2)*tan((1/2)*arctan((2*a1*h*T)/(2*a1*h*T))^(5/2)-(1/21)*arctan((2*a1*h*T)/(2*a1*h*T))^(5/2))*dR+(0.009*Rk,T),R=0..10);
chi1:=dR(F,R);
chi1:=dR(chi1,R);

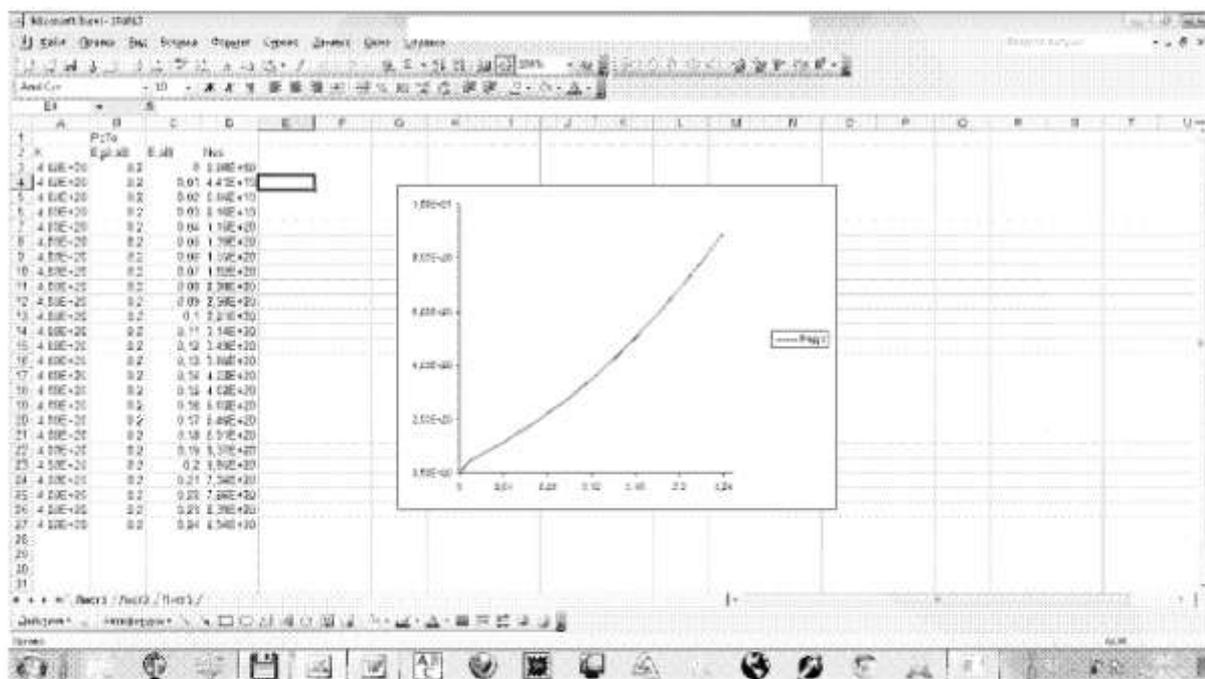
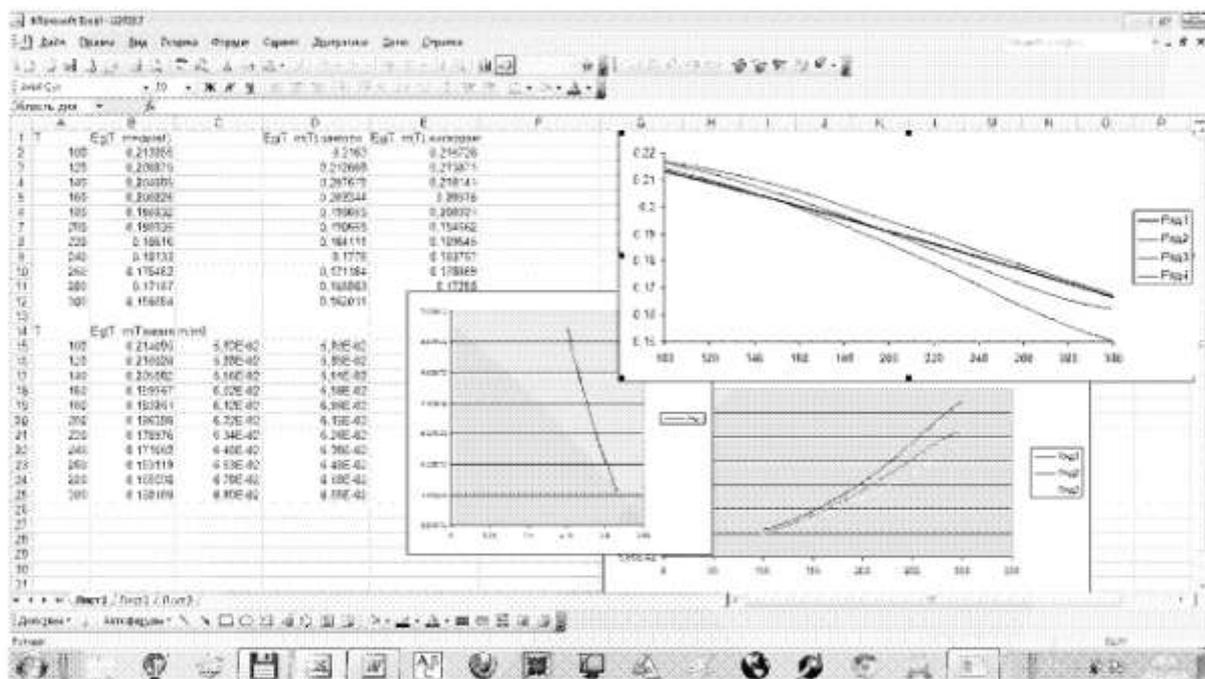
```

Maple 13 - 3D Plot of a function of three variables

```

restart with plot3d;
a1:=1.0e-10; a2:=1.0e-10; a3:=1.0e-10;
k:=10^6*(4/21)/(1+17^2);
dR:=proc(Rk,T)
options
^((exp((R-k)/(h*T/a1)))/(exp((R-k)/(h*T/a1))+1))^2;
end proc;
F:=(k*(R*(h*T))^(5/2)*tan((1/2)*arctan((2*a1*h*T)/(2*a1*h*T))^(5/2)-(1/21)*arctan((2*a1*h*T)/(2*a1*h*T))^(5/2))*dR+(0.009*Rk,T),R=0..10);
chi1:=dR(F,R);
chi1:=dR(chi1,R);

```



ЛИТЕРАТУРА

1. Гулямов Г., Кучкаров Х.О. Узб.Физ.Журн. 1994, N4, с.39- 41.
2. Поспелов В.В., Сурис Р.А., Фетисов Е.А., Фукс Б.И., Р.З.Хафизов. Письма в ЖЭТФ, –Ленинград, 1975. –Т. 21, –В. 7, –С. 448-451.
3. Пикус Г.Е. Основы теории полупроводниковых приборов. Москва: Наука. 1965. –448 с.
4. Ржанов А.В. Электронные процессы на поверхности полупроводников. Москва: Наука. 1972.-480 с.
5. Shokley W., Read W.T. Phys. Rev., –Washington,1952.– V.87, –N.5, P.–835–842
6. Носов Ю.Р., Шилин В.А. Основы физики приборов с зарядовой связью. Москва. Наука. 1986.-362 с.
7. Секен К., Томпсет М. Приборы с переносом заряда. Пер. с англ. Под ред. В.В. Поспелова, Р.А. Суриса. Москва. Мир. 1978-327 с.
8. Amelio G.F., Bertram W J., Tompsett M.F., Buckley R.R., McNamara W.J., Mikkelsen J.C., Sealer D.A. IEEE Trans, on Electron Devices, –Austin, 1971.V. ED–18, –P. 992–996.
9. Каплан Г.Д., Ногин В.М. // ФТП– Ленинград, 1978, –Т. 12, –№ 10, –С. 19–64.
10. Tompsett M. F. IEEE Trans. Electron Devices, –Austin, 1973. –V. ED–20, P. 45–55,
11. Зуев В.А., Саченко А.В., Толпыго К.Б. Неравновесные приповерхностные процессы в полупроводниках и полупроводниковых приборах. Москва. 1977. Сов. Радио.-256 с.
12. Бонч-Бруевич Л., Звьягин И.П., Кайпер Р., Миронов Г., Эндерлайн Р., Эссер Б. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. Москва.1981. Наука. 384 с.
13. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. Москва. 1977.Наука.-672 с.
14. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И., Электронная теория металлов. Москва. 1971. Наука.-418с.
15. Гетцбергер А. Полупроводниковые формирователи сигналов изображения. Москва. Мир.-979с.
16. А.Н. Яшин. ФТП, –Ленинград, 2005, –Т. 39, –В. 11, –С.1331–1335.
17. D. Macdonald, A. Cuevas. Phys. Rev. –Washington, 2003,–V. 67, –N.75 –P. 203-207.
18. S. Rein, T. Rehr, W. Warta, S.W. Glunz. J. Lifetime. Journal of Applied. Physics, –Austin, 2002. –V. 91, –N. 4, –P. 2059–2070

19. J. S. Blakemore, Semiconductor Statistics. Pergamon Press. Moscow. Mir. 1964, –p.392
20. H. Bleichner, P. Jonsson, N. Keskitalo, E. Nordlander. J. Appl.Phys, –Austin, 1996–V. 79. –P. 9142-9148
21. D.L. Meier, J.–M. Hwang, R.B. Campbell. IEEE Trans.Electron. Dev. –Austin. 1988. 35, –P. 70
22. S.Zh. Karazhanov. Semicond. Sci. Technol. –Suite, 2001, –V. 16, –P.276.
23. S.Zh. Karazhanov. Appl. Phys. –Austin, 2000, –V.88, –P.3941–3947.
24. S.C. Choo. Phys. Rev, –Washington, 1970., –V. 1, –P.687– 696.
25. H. Bleichner, P. Jonsson, N. Keskitalo, E. Nordlander. Appl. Phys.-Austin, 1996, –V. –79, –N.7. –P.9142–9151.
26. N. Keskitalo, P. Jonsson, K. Nordgren, H. Bleichner, E. Nordlander. J. Appl. Phys. –Austin,1998, –V. 83, –N.7.–P.4206–4211.
27. H.J. Schultze, A. Frohnmeyer, F.J. Niedernostheide, F. Hille, P.Tutto, T.Pavelka, G.Wachutka. J.Electrochem.Soc., –Pennington, 2001, –V.148, –P.655 –661.
28. Ридли Б.Квантовые процессы в полупроводниках. Москва. Мир. 1986.-304с.
29. E.H.Nicollian, A.Goetzberger. Appl. Phys. Lett. –Melville,1965.-Vol. 7.-P. 216.
30. P.V.Gray, D.M.Brown. Density of Si–SiO₂ interface states // Appl. Phys. Lett., –Melville 1966, v. 8, №2, p. 31.
31. G.F.Amelzo. A New Method of Measuring Interface State Densities in Mis Devices.// Surface Science.–Maryland Heights. 1972,– V. 29, –P.125–143
32. A.D.Lopez. Using the Quasistatic Method for MOS Measurements. Rev. Scient. Instrum. –Melville 1973, –V.44, –P.200–204.
33. W.S.Boyle, G.E.Smith. Charge–Coupled Semiconductor Devices // Bell. Syst. Techn.J. –New York 1970–V.49, –P.587–591
34. C.T.Sah, H.S.Fu. Phys. Stat. Sol. –Washington. 1972, –V.1 –B.1, –P. 297–301.
35. Н.Ю. Шармбаев. Автореферат диссертации (кандидат физ.мат.нук), Ташкент, 2011,23с.
36. А. Тешабоев, С. Зайнобиддинов, Э. А. Мусаев. Яримўтказгичлар ва яримўтказгичли асбоблар технологияси. Тошкент: “Хега-Принт” 2005. –392 с.
37. А. Teshaboyev, S. Zaynobiddinov, S. Vlasov, I. Rarimov, V. Abduazimov. Yarimo`tkazgichlar sirti fizikasi. Toshkent: “Ilm ziyo” 2010. –168 с.

38. А. Т. Мамадалимов, А. А. Лебедев, Е. В. Астрова. Спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Ташкент: «Университет». 1999. –164 с.
39. Гуртов В. А. Твердотельная электроника Москва: Техносфера. 2005.-408 с.
40. Бехштейн Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников. Москва: Мир. 1990.–484 с.
41. Зельдович Я.Б., Мышкис А. Д. Элементы прикладной математики. Москва: Наука. 1972. –592с.
42. Левин М. Н., Татаринцев А. В., Ахкубеков А. Э. ФТП.-Санкт-Петербург 2009. –Т. 43. –В. 5. –С. 613–616.
43. Левин М. Н, Бормонтов А.Е., Ахкубеков А. Э., Татохин Е. А. Конденсированные среды и межфазные границы. –Москва. 2010, –Т.12, –№2, –С.133–142.
44. Lang D. V. Deep-level transient spectroscopy// J. Appl. Phys. – Austin, 1974. –V. 45, –№ 7, –P. 3023 –3033
45. Берман Л. С., Лебедев А. А. Ёмкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. Ленинград: Наука. 1981. –176 с.
46. Nolte D. D., Haller E. E. J. Appl. Phys. –Austin 1987. –V. 62, –№ 3, –P. 900–906.
47. Dobaczewski L., Kaczor P., Hawkins I.D., Peaker A.R. Journal of Applied Physics.—Austin, 1994, –v, 76, –№ 1, –P. 194-198
48. Берман Л. С. ФТП.-Санкт-Петербург, 1998. –Т. 32. –В. 6. –С. 688–689.
49. Lawson C. L., Hanson R. J. Solving least squares problems. Prentice–Hall. –Englewood Cliffs. 1974. –340 p.
50. Hansen P.C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve // SIAM Review.-Vancouver, 1992. –V. 34, –P. 561-580.
51. Левин М. Н., Ахкубеков А. Э., Татаринцев А. В. Труды IX Международной научно-технической конференции «Кибернетика и высокие технологии XXI века» –Воронеж, 2008. –Т. 2. –С. 941–946.
52. Dobaczewski L., Peaker A.R, Bonde Nielsen K. Journal of Applied Physics. –Austin, 2004, –V. 96, –№. 9, –P. 4689-4729.
53. Provencher S.W. A constrained regularization method for inverting data represented by linear algebraic or integral equations // Computer Physics Communications.-Maryland Heights, 1982, –V. 27, –P. 213-227.
54. Тихонов А. П., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. Москва: Наука. 1979. –285 с.

55. Морозов В. А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. Москва: Наука. 1987. 240 с.
56. Каданцев А.И., Котов Г.И., Левин М.Н., Татаринцев А.В., Шлык Ю.К. Автоматизированная установка для ёмкостной спектроскопии полупроводников // ПТЭ.-Москва, 2004, –№ 6, – С. 138-139
57. Денисов А. А., Лактюшкин В. Н., Садофьев Ю. Г. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней // Обзоры по электронной технике. –Москва. 1985,–Т. 7, –В. 15, –С. 52–55
58. H. Stehfest, Numerical inversion of Laplace transforms algorithm 368, Commun. ACM –New York 1979,–V.13, B.1, P. 47–49.
59. G.P. Gaver Jr., Observing stochastic processes and approximate transform inversions, Operat. Res. –Montreuil. 1966 P.444–459.
60. L. Dobaczewski, P. Kaczor, I.D. Hawkins and A.R. Peaker. J. Appl. Phys.,–Austin, 1994. –V. 76, –№. 1, –P. 194–198
61. L. Dobaczewski, A. R. Peaker, K. Bonde. J. Appl. Phys. ,–Austin, 2004, –V. 96 –№9 –P.4689–4694
62. Provencher S.W. A constrained regularization method for inverting data represented by linear algebraic or integral equations // Computer Physics Communications.-Northern Ireland, 1982, –V. 27, –P. 213-227.
63. Блихер.А. Физика силовых биполярных и полевых транзисторов Ленинград: –Энергоатомиздат. 1986, –248с.
64. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев. Определение плотности поверхностных состояний границы раздела, полупроводник–диэлектрик, в МДП–структуре.// ФТП–Санкт Петербург, 2011.- Т.45. –№2.-С. 178–182
65. Ziegler K, Klausmann E. Appl. Phys.Letters.- Melville, 1975.-№26.- P. 400–403.
66. И.Н.Каримов. Основы оптимизации физических процессов на границе раздела полупроводник-диэлектрик дис... док, физ– мат наук–Ташкент. 1995.232 с.
67. Г.Гулямов, И.Н.Каримов, Н.Ю.Шарибаев, У.Эркабоев. Узбекский физический журнал.-Ташкент. 2010,–12(№3), – С.143–146
68. К.П. Абдурахманов, Ш.Б. Утамурадова, Х.С. Далиев, С.Г. Таджи–Аглаева, Р.М. Эргашев. ФТП, –Ленинград. 1998, –Т. 32, –№ 6, –С.676-678
69. Э.М. Омеляновский, В.И. Фистуль. Примеси переходных металлов в пол проводниках Москва. Металлургия. 1983. –191 с.

70. Бабицкий Ю.М., Горбачева Н.И., Гринштейн П.М. и др. ФТП– Ленинград, 1984.-Т.18, –В.7.-С. 1309-1311.
71. Дашевский М.Я., Корляков Д.Н., Никитин В.А. ФТП. - Ленинград, 1988. - Т. 22, –В. 6. - С. 1146 -1149.
72. К.П. Абдурахманов, Ш.Б. Утамурадова и др. ФТП.– Ленинград, 1985.- Т. 19,- С. 213–219
73. К.П. Абдурахманов, Р.Ф. Витман, Ш.Б. Утамурадова и др. ФТП.– Ленинград, 1989.- Т. 23,- С. 2227
74. К.П. Абдурахманов, АА. Лебедев и др. ФТП.– Ленинград, 1985.- Т.19,- С. 1158–1165
75. АА. Лебедев, К.П. Абдурахманов и др. В кн.: Свойства легированных пол проводниковых материалов. Москва. 1990. Наука. –256 с.
76. Гулямов Г. Дадамирзаев Г. Набиев Ш.И. Известия АН УзССР серия физ.–мат.наук. Ташкент, 1988, –N4, –С. 83–85
77. Зайнабидинов С., Гулямов Г., Далиев Х.С.,Каримов И.Н., Насиров А. Доклады АН УзССР серия физ.–мат. наук, – Ташкент, 1985, –№1, –С.31–33
78. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев. Физическая Инженерия Поверхности. –Харьков, 2011. –Т.9, –№1– С.4–7.
79. П.Б.Парчинский, С.И.Власов, А.А.Носиров. ФТП.– Санкт–Петербург, 2004. –Т.38, –В.11,–С.1345–1348
80. M. Shimbo, K. Furukava, K. Nanzava, K. Fukada. J. Silicon-to-silicon direct bonding method. //Electrochem. Soc. –Pennington, 1987.–V.134, –P.156–163
81. И.Г. Пичугин, Ю.М. Таиров. Технология полупроводниковых приборов. Москва: Высш. шк. 1984. –288 с.
82. В.С. Першенков, В.Д. Попов, А.В. Шальнов. Поверхностные радиационные эффекты в ИМС. М осква: Энергоатомиздат. 1988. –256 с.
83. В.С. Вавилов, Б.М. Горин, Н.С. Данилин, А.Е. Кив, Ю.А. Нуров, В.И. Шаховцев. Радиационные методы в твердотельной электронике. Москва: Радио и связь. 1990. –183 с.
84. П.Б. Парчинский. Письма ЖТФ,-Санкт–Петербург, 2002. –Т. 22, –С.17–22.
85. П.Б. Парчинский, С.И. Власов, С.З. Зайнабидинов, А.А. Насиров, В.А. Абдуазимов, Б.А. Бабаджанов. //Узб. Физ. журн., Ташкент. 2002 –№ 4, –С.20– 26.
86. С.И.Власов, П.Б.Парчинский, Б.А.Олматов. Электронная плотность поверхностных состояний на границе раздела между

- кремнием и свинцовым боросиликатным стеклом // Неорг. матер. – Москва, 2000, –Т.36, –С.608–612
87. С. Зи. Физика полупроводниковых приборов (М., Мир, 1984) т. 1. с. 320
 88. К.Н. Zaineger, F.P. Heiman. The C–V technique as an analytical tool // Sol. St. Technol. –Costa Mesa 1970, –V.13, –P. 49–55 .
 89. П.Б. Парчинский, С.И. Власов, А.А. Насиров, Т.П. Адиллов. Письма ЖТФ– Санкт–Петербург, 1996, , –Т. 22, –№2, –С.46–49.
 90. J.R. Brews. A simplified high–frequency MOS capacitance formula // Sol. St. Electron. . –Costa Mesa, 1977–V .20, –P. 607 –608.
 91. S.K. Lai. Two–carrier nature of interface–state generation in hole trapping and radiation damage// Appl. Phys. Lett. –Melville, 1981 – V.39, P.58–60
 92. T.P. Ma, G. Scogan, R. Leone. Appl. Phys. Lett. –Melville, 1975– V.27, –P.61–63
 93. T.P. Ma. Oxide thickness dependence of electron–induced surface states in MOS structures //Appl. Phys. Lett–Melville, 1975, –V.27, – P.615
 94. С.Н. Козлов, А.Н. Невзоров, Т.Г. Чайковская. Микроэлектроника, 15, 283 (1986).
 95. Г.Н. Галкин, Р.У. Абасова, Е.А. Боброва, В.С. Вавилов //ФТП,- Санкт–Петербург, –1982, –Т16, –С.2158–2164 .
 96. С.З. Зайнабидинов, С.И. Власов, Е.Г. Заугольникова, И.Н. Каримов, Г.А. Халиков. ФТП,-Санкт–Петербург 1985, –Т.19, – С.1191–1198.
 97. В.Я. Киблик, Р.О. Литвинов, В.Г. Литовченко, Н.М. Литовченко. Влияние γ -облучения на генерационно-рекомбинационные характеристики МДП-структур // Укр. физ., журн. –Киев, 1977. – В.22, –С.1097–1103
 98. Рода М. Полупроводниковые материалы. Пер. с франц. Москва. «Металлургия». 1971. –224 с.
 99. Химическая энциклопедия. Москва: 1990. Советская энциклопедия. — Т. 2. —671 с.
 100. Мосс Т. С. Оптические свойства полупроводников. Пер. с англ. Москва. Изд–во иностр. лит. 1961. –354 с.
 101. Жузе В. П. Полупроводниковые материалы. В. 17. Изд–во Ленинград. дома науч.–тех. пропаганды. 1957. –158 с.
 102. Коломиец Б. Т. и др. ФТТ– Санкт–Петербург, 1965–Т.7, –С. 25–34
 103. Смит Р. Полупроводники. Пер. с англ. М., Изд–во иностр. лит. 1962. –560 с.

104. Угай Я. А., Зюбина Т. А. Получение и исследование некоторых электрических свойств монокристаллов арсенидов цинка // Неорган. материалы. –Москва.1965, –Т.1, –790 с.
105. Материалы, используемые в полупроводниковых приборах. Под ред. К Хогарта. Пер. с англ. Москва. Мир. 1968. –348 с.
106. Edmond J.T., Electronic conduction in As_2Se_3 , As_2Se_2Te and similar materials // Br. J. appl. Phis. –Austin, 1966. –V17, –P.979–987
107. Баранский П.И., Клочков В.П., Потыкевич И.В., Полупроводниковая электроника справочник. Киев. Наукова думка. 1975, –704 с.
108. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев. Физическая Инженерия Поверхности. –Харьков, 2010. –Т.8, №1– С.53–68
109. А.М. Емельянов. Письма в ЖТФ,-Санкт-Петербург, 2009. –Т. 35, –В. 6 –С.9–16
110. Bludau W., Onton A., Heinke W. J. Temperature dependence of the band gap of silicon // Appl. Phys. –Austin, 1974. –V. 45. –P. 1846–1847.
111. Wang D., Nakashima H., Morioka J. et al. Appl. Phys. Lett. – Melville 2007. –V. 91, –P. 241918–1–241918–3
112. Л.М.Сорокин, Н.В.Веселов, М.П.Щеглов, А.Е.Калмыков, А.А.Ситникова, Н.А.Феоктистов, А.В.Осипов, С.А.Кукушкин. Письма в ЖТФ.-Санкт–Петербург, 2008. –Т. 34. –В. 22. –С. 88–94.
113. Haynes J.R., Lax M., Flood W.F. J. Phys. Chem. Sol. –Austin 1959. –V. 8. –P. 392–396.
114. Robbins D.J., Canham L.T., Barnet S.J. et al. J. Appl. Phys. –Austin, 1992. –V. 71, –P. 1407–1414.
115. Strel'chuk A.M., Lebedev A.A., Savkina N.S. et al. Materials Science Forum. –Stafa-Zurich. 2007, –V. 556–557,–P. 427–430.
116. Wai Lek Ng, Lourenco M.A., Wang A. et al. An efficient room-temperature silicon-based light-emitting diode // Nature. – Kadettenstrasse. 2001, –V. 410, –P. 192–194.
117. Емельянов А.М., Соболев Н.А., Мельникова Т.М., Н.В.Абросимов. ФТП.-Санкт–Петербург, 2005, –Т. 39,-С. 1170–1172.
118. Соболев Н.А., Емельянов А.М., Шек Е.И. и др. Эффективный SiGe светодиод на длину волны ~ 1.3 мкм, изготовленный методом ионной имплантации // Труды 16–го Международного совещания „Радиационная физика твердого тела“. Севастополь, 2006 г. С. 490–495.

119. Choyke W.J. // *Materials Research Bulletin*. –1969. –V. 4, –P. S141–S148.
120. Dalven R. *Phys. Chem. Solids*. –Maryland Heights. 1965, –V. 26, –P. 439–447.
121. Емельянов А.М. Письма в ЖТФ.-Санкт–Петербург, 2004. –Т. 30, –В. 22, –С. 7581
122. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в кристаллических веществах. Москва: изд 2 в 2–х томах. Мир.1982. –664 с.
123. И.М. Цидильковский. Электроны и дырки в полупроводниках. Москва: Наука. 1972 г. Стр. 193.
124. Ehrenreich H., PhD Thesis, Cornell University, 1955.
125. Ю.И.Равич. ФТТ 7, 1821, 1965
126. В.А.Кутасов, Л.Н.Лукьянова, П.П.Константинов. ФТТ, 41, 187, 1999
127. Л.Н.Лукьянова, В.А.Кутасов, П.П.Константинов. ФТТ, 47, 224, 2005
128. E. Müller, H.Süßmann. Proc. of the XVII Int.Conf.on Thermoelectrics. Nagoya, Japan (1998). P.85.
129. Б.М. Гольцман, В.А. Кудинов, И.А.Смирнов. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 . Наука, М. 1972. стр. 320
130. П.П.Константинов, Л.В.Прокофьева, М.И.Федоров, Д.А.Пшенай-Северин, Ю.И.Равич, В.В.Компаниец, В.А.Чистяков. ФТТ, 39, 1059, 2005
131. Л.Н.Лукьянова, В.А.Кутасов, П.П.Константинов, В.В.Попов. ФТТ, 52,1492, 2010
132. M.H. Ettenberg, W.A.Jesser, F.D.Rosi. Proc. of the XV Int. Conf. on thermoelectrics. Passadena, CA, USA (1996).P.52
133. L.P.Saywood, G.R.Miller. *Phys.Rev.B* 2, 8, 3210, 1970
134. А.Н.Вейс, Л.Н.Лукьянова, В.А.Кутасов. ФТТ, 54, 2051, 2012
135. A.Polian, M. Gauthier. *Phys.Rev. B* 83, 113,106, 2011.
136. Е.С.Ицкевич, Л.М.Каширская, В.Ф.Крайденов. ФТП 31, 335, 1997
137. С.В.Еремеев, Ю.М.Коротеев, Е.В.Чулков. Письмо в ЖЭТФ 91, 8, 419, 2010.
138. P.Pecher, G.Toussaint. *Phys.Lett.* 135, 223, 1989
139. Л.Н.Лукьянова, В.А.Кутасов, П.П.Константинов. ФТТ, 50,2143, 2008.
140. В.А.Кутасов, Л.Н.Лукьянова, П.П.Константинов. ФТТ, 42, 11, 1985, 2000.
141. И.А.Вайнштейн, А.Ф.Зацепин, В.С.Кортов. ФТТ, 41, 994, 1999.

142. Физические величины. Справочник / Под.ред. И.С.Григорьева, Е.З.Мейлихова. Энергоатомиздат, М. 1991, стр. 1232.
143. Н.Ашкрофт, Н.Мермин. Физика твердого тела. Т.2 Мир, М.(1979).с.422
144. Ж. Панков. Оптические процессы в полупроводниках. Мир, М. (1973). Стр. 257.
145. К.В.Шалимова. Физика полупроводников. Энергия, М. (1976). стр. 416.
146. Y.P.Varshni. Physica 34, 149, 1967
147. N.M.Ravindra, V.K.Srivastava. J.Phys. Chem. Solids 40, 791, 1979
148. H.Y.Fan. Phys. Rev.82, 6, 900, 1951.
149. A. Radkowsky. Phys.Rev. 73, 749, 1948
150. А.С.Давыдов. Теория поглощения света в молекулярных кристаллах. Изд-во АН УССР, Киев (1951). Стр. 320.
151. Г. Фэн. Фотон - электронное взаимодействие в кристаллах в отсутствие внешних полей. Мир, М. (1969), стр. 127.
152. Г.Гулямов, К.Б.Умаров. Влияние сильного поля на ВАХ диода. . ФТП, 1994,Т.28 в.4 с.686-691.
153. Г.Гулямов, С.Х.Шамирзаев. Термоздс горячих носителей зарядов в сильных СВЧ полях. ФТП, 1981, т.15, в.9, С.1858-18617.
154. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев. Поверхность, Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2012, №9, с.13-17
155. Н.Б. Брандт, В.А.Кульбачинский. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. Физматлит. М. 2007 стр. 254.
156. Гулямов Г. Влияние разогрева носителей тока и фононов на характеристики не однородных полупроводников и тепловые размерные эффекты дис... док, физ- мат наук-Ташкент. 1999, 230с.
157. Г.Гулямов Г.Дадамирзаев Импеданс п-н -перехода с горячими носителями . ФТП 1981 т.15.в.3 с.574-576.
158. А.Н. Яшин. ФТП, -Ленинград, 2005, -Т. 39, -В. 11, -С.1331-1335.
159. Г.Гулямов, Ю.Г.Гуревич, Н.Закиров. ФТП, 1994, т.28, в.3, с.558.
160. Г.Гулямов. ФТП, 1996,т.30, в.7, с.1279-1284.
161. Г.Гулямов. ФТП, 1995, т.29, в.2, с.258.
162. Г.Гулямов. ФТП, 1996, т.30, в.3, с.569-574.
163. Г.Гулямов, К.Б.Умаров. ФТП, 1995, т.29, в.1, с.33-38.
164. Г.Гулямов, Б.Хамидова. ФТП, 1996, т.30, в.5, с.769-777.
165. Г.Гулямов, И.В.Июффе. ФТТ, 1971, т.13, в.9, с.2826-2827.

166. Г.Гулямов, Н.Закиров, К.Б.Умаров. Известия ВУЗов, Физика, 1993, в.3, с. 30-34.
167. Г.Гулямов, Н.Закиров, Ш.Мирахмедов. Узб.Физ.Журн., 1994, в.1, с.35-40.
168. Г.Гулямов, Н.Закиров, В.Б.Юрченко. Украинский Физический Журнал, 1990, т.35, с.282-284.
169. Г.Гулямов, У.А.Шакиров. Известия АН Уз серия физ.-мат. Наук, 1981, в.5, с.51-54.
170. Зуев В.А., Саченко А.В., Толпыго К.Б. Неравновесные приповерхностные процессы в полупроводниках и полупроводниковых приборах. Москва. 1977. Сов. Радио.-256 с.
171. Н.Шарибоев. Математическое моделирование определения плотности поверхностных состояний на границе раздела SiO_2-Si в приборах с зарядовой связью. Дис...канд, физ-мат наук-Ташкент. 2011.
172. Носов Ю.Р., Шилин В.А. Основы физики приборов с зарядовой связью. Москва. Наука. 1986.-362 с.
173. Г.Гулямов, Г.Дадамйрзаев, Ш.И.Набиев. Экспрессный способ определения параметров МДП структуры с использованием производной ВЧ ёмкости по напряжению. Изв.АН Уз. Серия физ.-мат. Наук, 1988, в.4, с.85-87.
174. С.А.Азимов, С.Х.Шамирзаев, Г.Абдурахманов, Г.Гулямов. Динамические характеристики неоднородных диэлектрических и полупроводниковых структур. Ташкент, 1975, с. 3 -37.
175. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев. ФИП, Т.10, №2, 2012, стр.4-8.
176. Б. Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках. Мир, М. (1986).
177. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев, У.И.Эркабоев. ФИП. 2012г, Т.10, №4, vol. 10, стр.308-312.
178. Г.Гулямов, И.Н.Каримов, Н.Ю.Шарибаев, У.И.Эркабоев. Uzbek Journal of Physics. 2010, vol.12, №3. pp. 143-146.
179. Г.Гулямов, Н.Ю.Шарибаев, У.И.Эркабоев. ФИП, т. 11, № 2, с.195-198. 2013 г
180. Г.Гулямов, Р.А.Муминов, С.Х.Шамирзаев. Влияние зависимости подвижности носителей от напряженности поля на ВАХ диэлектрического диода без ловушек. Сб.Проблемы диэлектрической электроники. Ташкент, 1974, с.166-1710.
181. В.Б.Бонч-Бруевич, и др. Электронная теория некристаллических полупроводников. 384 с. Наука, М.(1981).
182. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978).

183. W.Z.Shen, H.F.Yang, L.F.Jiang, K.Wang, G.Yu, H.Z.Wu, P.J.McCann. Journal of applied physics. Vol.91, No.1, 2002, pp.192-198.
184. S.H.Gamal, T.S.Al-Harbi. Microelectronics journal. 32, 2001, pp.327-329.
185. Б.Г.Тагиев, У.Ф.Касумов, Н.Н.Мусаева, Р.Б.Джаббаров, А.С.Абушов. ФТП, Т.34, вып.10, стр.1170-1173.
186. Я.Партыка, П.В.Жуковский, П.Венгерэк, А.Родзик, Ю.В.Сидоренко, Ю.А.Шостак. ФТП, Т. 36, вып. 12, 2002, стр.1412-1417.
187. Moustafa El Kurdi, Guy Fishman, Sebastien Sauvage, Philippe Boucaud. Journal of applied physics. 107, 013710, 2010, pp. 1-7.
188. D.M.Riffe. J.Opt.Soc.Am.B/vol.19, No.5, 2002, pp. 1092-1100.
189. И.В.Боднарь, М.В.Якушев. ЖТФ, Т.74, вып.10, 2004, стр.55-57.
190. В.П.Кунец, Н.Р.Кулиш, Вас.П.Кунец, М.П.Лисица, Н.И.Мальш. ФТП, Т.36, вып. 2, 2002, стр. 227-231.
191. Т.Г.Керимова, Р.А.Гулиев. ФТП, Т.45, вып.3, 2011, стр.303-305.
192. И.В.Боднарь. ФТП, Т. 44, вып. 5, 2010, стр. 606-609.
193. И.В.Боднарь. ФТП, Т. 46, вып. 5, 2012, стр. 620-623.
194. П.В.Жуковский, Я.Партыка, П. Венгерэк, Ю.В.Сидоренко, Ю.А.Шостак, А.Родзик. ФТП, Т.35, вып.8, 2001, стр. 937-940.
195. Е.А.Багаев, К.С.Журавлев, Л.Л.Свешникова. ФТП, Т.40, вып.10, 2006, стр.1218-1223.
196. И.В.Боднарь, С.А.Павлюковец. ФТП, Т.45, вып.11, 2011, стр.1450-1453.
197. Roland Pässler. Physical Review. B 66, 085201, 2002, pp. 1-18.
198. Roland Pässler. Phys.stat.sol. (b) 236, No.3, 2003, pp.710-728.
199. Roland Pässler. Phys.stat.sol. (b) 216, 1999, pp.975-1007.
200. N. Nepal, J.Li, M.L.Nakarmi, J.Y.Lin, H.X.Jiang. Applied physics letters, 87, 242104, 2005, pp. 1-4.
201. A. Caiafa, X. Wang, J.L. Hudgins, E. Santi, and P.R. Palmer. IEEE. 2003, pp 1897-1903.
202. L.S.Rothman, D. Jacquemart, A. Barbe. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 96, 139-204 (2005)
203. Дж. Займан. *Принципы теории твердого тела*. (М., Мир, 1974) гл.9, с.349.
204. И.М.Лифшиц, М.Я.Азбель, М.И.Каганов. *Электронная теория металлов*. (М.Наука, 1971) част 2, с.119.
205. В.Н.Добровольский, В.Г.Литовченко. Перенос электронов и дырок у поверхности полупроводников. Киев, «Наукова Думка», 1985, с. 40

206. A.H.Wilson. The Theory of Metals. Cambridge University Press, Cambridge, 1953.
207. И.Ф.Гинзбург. Введение в физику твердого тела. Учеб. Пособ. «Новосибирск», 2003. Ч.1, г.9, стр. 142.
208. П.В.Павлов, А.Ф.Хохлов. Физика твердого тела. М. «Высшая школа», 2000, гл.10, стр.361.
209. И.В.Кукушкин, С.В.Мешков, В.Б. Тимофеев. УФН, Т.155, вып.2, 1988, стр. 219-264.
210. А.М.Дюгаев, П.Д.Григорьев, Ю.Н.Овчинников. Письмо в ЖЭТФ, Т.78, вып.3, 2003, стр. 180-183.
211. C. Y. Lin, S.T.Chang, C. W. Liu. Journal of applied physics. Vol.96, No.9, 2004, p. 5037-5041.
212. G.P.Chuiko, D.M.Stepanchikov. Physics and chemistry of solid state. Vol.9, No.2, 2008, p.312-318.
213. Л.П.Зверев, В.В.Кружаев, Г.М.Миньков, О.Э.Рут. Письма в ЖЭТФ. Т.31, вып. 3, 1980. с. 169-172.
214. И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., «Наука», 1982.-с. 162
215. Н.Т. Баграев, Л.Е. Клячкин, А.А. Кудрявцев, А.М. Маляренко, В.В. Романов. ФТП, 43, 1481 (2009).
216. Н.Т. Баграев, О.Н. Гимбицкая, Л.Е. Клячкин, А.А. Кудрявцев, А.М. Маляренко, В.В. Романов, А.И. Рыскин, А.С. Щеулин. ФТП, 44, 1372 (2010).
217. Н.Т.Баграев, Е.С.Брилинская, Э.Ю.Даниловский, Л.Е.Клячкин, А.М.Маляренко, В.В.Романов. ФТП, 46, 90 (2012).
218. Г.Г.Зегря. ФТП 33, 1144 (1999).
219. A.Carrington, J.D.Fletcher, J.R.Cooper, O.J.Taylor. Physical Review В 72, 060507(R) 2005, pp.1-4.
220. Я.М. Блантер, М.И.Каганов, Д.В. Посвянский. УФН, Т.165, №2, 1995, с.231-220.
221. В.П. Минеев, М.Г.Вавилов. УФН, Т.167, №10, 1997, с.1121-1123.
222. В.С.Егоров. ФТТ, Т.30, вып.4, 1988, стр.1253-1256.
223. В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили. ФТТ, Т.39, Вып.2, 1997, стр.204-210.
224. С.Т.Павлов, И.С.Пивоваров. ФТТ, Т.33, вып.5, 1991, стр.1615-1618.
225. И.Б.Воскобойников, С.В.Демишев, Р.Н.Любовская, В.В.Мошталков, Н.А.Самарин, Н.Е.Случанко. ФТТ, Т.44, вып.2, 2002, стр.203-208.

226. Р.Б.Любовский, С.И.Песоцкий, W. Viberacher, Е.И.Жиляева, О.А.Богданова, Р.Н.Любовская. ФТТ, Т.50, вып.8, 2008, стр.1501-1504.
227. Н.П.Степанов,В.Ю.Наливкин. ФТП, Т.48,вып3,2014,стр.297-301.
228. С.Х.Шамирзаев, Г.Гулямов, М.Г.Дадамирзаев, А.Г.Гулямов. ФТП, 2009, т.9, в.1, с.53-57.
229. Ю.И.Равич, Б.А. Ефимова, И.А.Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS* (М., Наука, 1968) гл.5, с.229.
230. Yu. I. Ravich. Journal de physique. 29, 114 (1968).
231. Д. Шенберг. *Магнитные осцилляции в металлах*. (М., Мир, 1986) гл.1, с.25.
232. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. *Статистическая физика*. (М.,Наука, 1976) ч.1, гл.3, с.109.
233. А.А.Абрикосов. *Основы теории металлов*. (М.,Наука, 1987) гл.10, с.156.
234. G.Gulyamov, N.Y.Sharibaev, U.I.Erkaboev. World Journal of Condensed Matter Physics, vol.3, No.4, 2013, pp. 216-220.
235. G. Gulyamov, U.I. Erkaboev, N.Y. Sharibaev. Journal of Modern Physics, vol.5, No.8, 2014, pp.680-685.
236. G. Gulyamov, U.I. Erkaboev, N.Y. Sharibaev. PSE, Vol 11, No.3, 2013, pp.289-292.
237. С.Х.Шамирзаев, Г.Гулямов, М.Г.Дадамирзаев, А.Г.Гулямов. Уз.Физ.Журн. 2009, т.11, в.2, с.122-127.
238. Э.Л.Нагаев. *Физика магнитных полупроводников*. (М., Наука, 1979)
239. С.В.Вонсовский. *Магнетизм*. (М.,Наука, 1971).
240. Коваленко М.С., Богатов Н.М. Программа Расчёта плотности электронных состояний в областях разупорядочения. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2009614755. Зарегистрировано: 3.09.2009 г.
241. Н.Б.Брандт, Е.А.Свистова. УФН, 1970, Т.101, вып.2, стр.249-272
242. Ю.И.Уханов .*Оптические свойства полупроводников*. М. Наука 1977.366с.
243. П.М.Валов.В.И.Лейман . // ФТТ.-Санкт Петербург, 2002,-Т.44.- №4.-С.694-699.
244. Т.П.Мяснокова, А.Э.Мясникова. ФТТ, 2007, Т.49, вып.10, стр. 1815-1817
245. В.Д.Попович, Р.Ротера, И.С.Вирт, М.Ф.Билык. ФТП, 2009, Т.43, вып. 6, стр.759-763.
246. В.Д.Окунев. ФТТ, 1992, Т.34, №4, стр.1263-1269.

Сдано в набор 15.12.2014 года. Разрешено в печать
15.01.2015 года. Бумага офсетная. Формат 60x84, 1/16.
Объем 12,5 усл.п.л. Тираж 100 шт. Заказ № 126.

Издательство «Наманган», г. Наманган, ул. Навои, 36.
Лицензия издательства АІ-156 от 14 августа 2009 года

Отпечатано в ЧП «Фазилаторгтехсервис»
(г. Наманган, ул. Навои, 72)

Гулямов Гафур. Родился 1949 году в районе Норин Наманганской области. 1971 году окончил Ташкентский Государственный Университет. Доктор физико-математических наук. Профессор кафедры "Физика" Наманганского инженерно-педагогического института. Ведет научное исследование в области «Физика полупроводников». Он является автором более 150 научных трудов.



Шарибаев Носир Юсупжонович. Родился 1969 году в городе Намангане. 1995 году окончил Московский Государственный Университет по специальности "Прикладная математика", кандидат физико-математических наук. Доцент кафедры "Высшая математика" Наманганского инженерно-технологического института. Ведет научное исследование в области «Физика полупроводников». Он является автором более 50 научных трудов.



Эркабоев Улугбек Иноятиллаевич. Родился 1983 году в районе Баликчи Андижанской области. 2008 году окончил магистратуру Андижанского Государственного Университета по специальности «Физика твердого тела». Старший преподаватель кафедры "Физика" Наманганского инженерно-педагогического института. Ведет научное исследование в области «Физика полупроводников». Он является автором более 20 научных трудов

