

УДК.621.315.592

Д.Л. Кардашев

## Густина електронних станів і рівні нейтральної вакансії в аморфних ковалентних напівпровідниках

*Одеська державна морська академія, 65029, Одеса, вул. Дідріхсона, 8*

Локальна густина електронних станів в ковалентних напівпровідниках обчислена методом функцій Гріна, в якому використан напівемпіричний гамільтоніан сильного зв'язку. Аморфний напівпровідник моделювався ґраткою Бете. Отримано аналітичний вираз для діагональних елементів функції Гріна. Методом вилучених орбіталей зроблена оцінка енергетичної структури нейтральної вакансії.

**Ключові слова:** функція Гріна, густина електронних станів, вакансія, аморфний, ґратка Бете.

*Стаття поступила до редакції 22.05.2001; прийнята до друку 28.09.2001*

Густина електронних станів відіграє важливу роль при експериментальних та теоретичних дослідженнях електрофізичних процесів в неупорядкованих конденсованих середовищах [1]. Для її розрахунку в аморфних С, Si і Ge було застосовано метод функцій Гріна. Функція Гріна  $G$  в матричному поданні може бути введена як резольвента виразом

$$G = (E \cdot I - H)^{-1}, \quad (1)$$

де  $H$  – матриця одноелектронного гамільтоніану сильного зв'язку, розмірність якої визначається добутком кількості атомів складаючих систему на кількість атомоподібних орбіталей, які належать кожному атому;  $E$  – енергія системи;  $I$  – одинична матриця. Але з практичної точки зору, вираз (1) зручно замінити на нескінченний ланцюг пов'язаних рівнянь (рівняння Дайсона), де квадратні матриці

мають розмірність, дорівнюючу кількості хвильових функцій, які належать одному атому:

$$EG_{0k}(E) = I\delta_{0k} + \sum_{k'} H_{0k'} G_{k'k}. \quad (2)$$

Тут індексом 0 помічено атом, локальна густина електронних станів якого розраховується, а індекс  $k$  пробігає по всім найближчим сусідам. Система рівнянь (2) може бути розв'язана, якщо до обірваних зв'язків 0-го атому приєднати ґратку Бете (нескінченну сітку зв'язаних атомів без кілець із зв'язків). Методика виконання такої процедури добре обґрунтована в роботах [2,3]. Як тільки функція Гріна знайдена, то локальна густина електронних станів 0-го атома визначається простим відділенням уявної частини від суми її діагональних елементів:

$$N_0(E) = -\frac{1}{\pi} \text{ImSp}G_0(E), \quad (3)$$

Ми використали напівемпіричний одноелектронний гамільтоніан сильного

зв'язку, матричними елементами якого є параметри Слетера – Костера :  $E_s$  ,  $E_p$  – енергії s- і p- станів атома відповідно;  $U=s_0 s_1 \sigma$ ;  $V=p_0 p_1 \sigma$ ;  $X=s_0 p_1 \sigma$ ;  $W=p_0 p_1 \pi$  – параметри взаємодії між s- і p- орбіталями сусідніх атомів.

Структура аморфних напівпровідникових матеріалів моделювалася

граткою Бете. Ми розглянули випадок, коли дієдральний кут дорівнює  $\theta = 60^\circ$  (транс-конфігурація триад зв'язків). Валентні кути та довжини зв'язків вважалися незмінними. Для даного випадку було отримано парціальні функції Грина 0-го атома s- і p- станів в аналітичному, хоча і досить складному, вигляді:

$$G_s(E) = \frac{-e_s + \sqrt{4 \cdot e_s^2 - 3 \cdot \lambda_s - \psi(E) \cdot \chi_s(E)}}{\chi_s} \quad (4)$$

$$G_p(E) = \frac{e_p + \sqrt{4 \cdot e_p^2 - \lambda_p - \psi(E) \cdot \chi_p(E)}}{\chi_p} \quad (5)$$

де

$$\psi(E) = \gamma^2 \cdot \frac{2 \cdot e_s^2 \cdot e_p^2 + \kappa(E) + 2 \cdot e_s e_p \cdot \sqrt{(4 \cdot e_p^2 - \lambda_p) \cdot (4 \cdot e_s^2 - 3 \cdot \lambda_s) + \gamma^2}}{\kappa(E)^2 - 4 \cdot \chi_s \cdot \chi_p \cdot e_s^2 \cdot e_p^2} \quad (6)$$

Тут

$$\begin{aligned} \kappa(E) &= \chi_p \cdot e_s^2 + \chi_s \cdot e_p^2 + \gamma^2; & \chi_s(E) &= 3 \cdot (e_s^2 - \lambda_s); & \chi_p(E) &= 3 \cdot e_p^2 - \lambda_p; \\ \gamma &= 16 \cdot X \cdot (3 \cdot V - U); & \lambda_s &= 16 \cdot (U^2 + 3 \cdot X^2); & \lambda_p &= 16 \cdot (V^2 + 2 \cdot W^2 - X^2); \\ e_s &= E - E_s; & e_p &= E - E_p. \end{aligned}$$

Результати розрахунків локальної густини електронних станів за формулами (4), (5) і (3) для аморфних Si і Ge непогано узгоджуються із даними рентгенівської фотоемісійної спектроскопії [1,4]. Як приклад, на рисунку 1 показана локальна густина електронних станів для аморфного кремнію (суцільною кривою відображені результати наших розрахунків, пунктиром – данні роботи [4]). Гострі піки і більш різка

поведінка модельної густини по краях дозволених зон пов'язані з тим, що ми не враховували можливий розбіг дієдрального та валентного кутів.

Енергетичний спектр нейтральної вакансії був визначений в наближенні вилучених орбіталей [5] по положенню нулів дійсної частини функції Грина. Ефектами локальної деформації гратки навколо вакансії нехтувалося. Результати

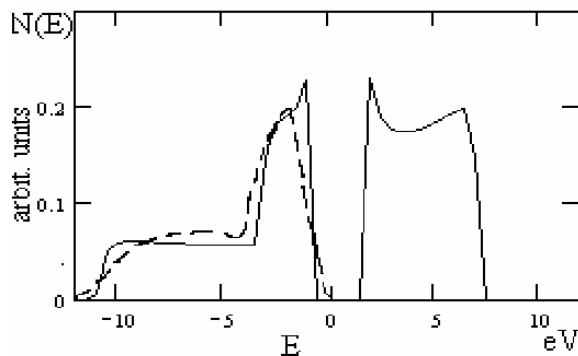


Рис. 1. Локальна густина електронних станів в а-Ge.

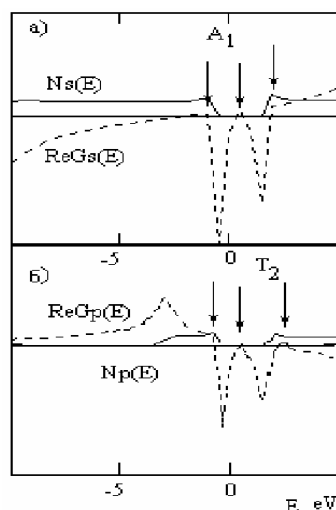


Рис. 2. Парціальні густини s- і p- станів та енергетична структура нейтральної вакансії в а-Ge.

розрахунку подані на рис. 2. Тут суцільними лініями показані парціальні густини електронних станів ( $N_s(E)$  і  $N_p(E)$  відповідно), а пунктиром – дійсні частини парціальних функцій Грина. На рис. 2а маємо вклад s-станів із симетрією  $A_1$  в енергетичний спектр нейтральної вакансії, а на рис. 2б – p- станів із симетрією  $T_2$ .

Треба визнати, що виникнення і положення енергетичних рівнів нейтральної вакансії, що відповідають зв'язаним та резонансним станам, дуже чутливе до вибору параметрів взаємодії і корелює з шириною енергетичного зазору в густині електронних станів. Наприклад, для ковалентних напівпровідників з шириною забороненої зони  $E_g > 2,5$  eV весь спектр містить тільки глибокі резонансні стани із симетрією  $A_1$  і  $T_2$  (аморфний C). При

зменшенні зазору ( $1 < E_g < 2,5$  eV) спочатку виникають ізольовані зв'язані стани (із симетрією  $A_1$ , а потім -  $T_2$ ), які розташовані в центрі зони, а далі вони розщеплюються на два симетричних відносно центра зони рівня. Подальше зменшення  $E_g$  приводить до симетричного руху цих рівнів в напрямку країв дозволених зон. При цьому рівні резонансних станів рухаються їм назустріч. В цьому приближенні неможливо надійно встановити, який випадок буде відповідати спектру нейтральної вакансії в аморфних Si і Ge тому, що зміна параметрів взаємодії на 5-10 % може привести до перебудови її енергетичної структури.

Використана методика придатна для аналізу електронної структури ізова-лентних твердих розчинів (наприклад, SiGe, SiC та ін.).

- [1] А. Меден, М. Шо. *Физика и применение аморфных полупроводников*, Мир, М. сс.195-330 (1991).
- [2] J.D. Joannopoulos. Theory of fluctuations and localized states in amorphous tetrahedrally bonded solids// *Phys. Rev. B* **16**(6), pp. 2764-2774 (1977).
- [3] Bal K. Agrawal. GeSi alloys: A study of short-range order// *Phys. Rev.*, **22**, p.6294 (1980).
- [4] L. Ley, S. Kowalczyk, R. Pollak, R. Shirley // *Phys. Rev. Lett.*, **29**, p. 1088 (1972).
- [5] V.K. Bashenov, D.L. Kardashev, D.I. Marvakov. Orbital Removal Method for the Neutral Vacansy in Semiconductors // *phys. stat. sol. (b)*, **139**, p.K31(1987).

Д.Л. Кардашев

D.L. Kardashev

**The Electron Density of States and Levels of a Neutral Vacancy  
in Amorphous Covalent Semiconductors**

*Odessa Sea State Academy, 65029, Odessa, 8, Didrikhsona St.*

The electron density of states in amorphous tetrahedrally bonded solids is calculated by the Green function technique using the one-electron tight binding Hamiltonian including all nearest-neighbor interactions. The structure of the amorphous silicon is approximated by the Bethe lattice. Electron states of the neutral vacancy are calculated by the orbital removal method.