

**ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ НА  
ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В  
ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$**

**Г. Гулямов, Н.Ю. Шарибаев, У.И. Эркабоев**

*Наманганский инженерно-педагогический институт (Наманган)*

*Узбекистан*

Поступила в редакцию 29.03.2013

Исследовано влияние изменения эффективной массы носителей зарядов на температурную зависимость ширины запрещенной зоны в полупроводниках. С помощью численных экспериментов, с использованием экспериментальных результатов получены графики температурной зависимости ширины запрещенной зоны.

**Ключевые слова:** ширина запрещенной зоны, эффективная масса плотности состояний, энергетический спектр, численный эксперимент и моделирование.

**ВПЛИВ ЕФЕКТИВНОЇ МАСИ ГУСТИНИ СТАНІВ НА ТЕМПЕРАТУРНУ  
ЗАЛЕЖНІСТЬ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ**

$p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$

**М. Гулямов, Н.Ю. Шарибаев, У.И. Эркабоев**

Досліджено вплив зміни ефективної маси носіїв зарядів на температурну залежність ширини забороненої зони в напівпровідниках. За допомогою чисельних експериментів, з використанням експериментальних результатів отримані графіки температурної залежності ширини забороненої зони.

**Ключові слова:** ширина забороненої зони, ефективна маса густин станів, енергетичний спектр, чисельний експеримент і моделювання.

**INFLUENCE EFFECTIVE MASS DENSITY OF STATES AT TEMPERATURE  
DEPENDENCE OF BAND GAP IN SOLID SOLUTIONS  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$**

**G. Gulyamov, N.Yu. Sharibayev, U.I. Erkaboyev**

It is investigated influences of change of effective mass of carriers of charges on temperature dependence of width of the band gaps in semiconductors. By means of numerical experiments, with use of experimental results of a temperature drawing of temperature dependence of width of the band gaps.

**Keywords:** band gap, effective mass density of state, power a spectrum, numerical experiment and modelling.

**ВВЕДЕНИЕ**

Температурная зависимость энергетического спектра полупроводников хорошо объясняется термическим уширением дискретных энергетических уровней [1 – 4]. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны рассматривается как уширение энергетических состояний зоны проводимости и валентной зоны. В этих работах предполагалось, что эффективная масса плотности состояний не зависит от температуры. Однако как показали эксперименты [5 – 6] эффективная масса плотности состояний зависит от температуры. Эти изменения эффективной массы меняют температурную зависимость ширины запрещенной зоны.

Целью настоящей работы является исследование влияния изменения эффективной массы плотности состояний на температурную зависимость ширины запрещенной зоны в полупроводниках.

**ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ  
ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ**

При определении ширины запрещенной зоны, значения плотности состояний, соответствующей энергии краев запрещенной 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  $GN(E, E, T)$ -функциям производной вероятности ионизации дискре-

тных состояний по энергии. Разложение имеет следующий вид: [1 – 4]

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

оно, получено в свою очередь из интегрального выражения:

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

где  $N(E_0)$  – число электронов, генерированных с квантовых состояний с энергией меньше  $E_0$ , при непрерывном распределении уровней по энергиям. Применим этот метод разложения для исследования плотности состояний в зоне проводимости полупроводника. Для квадратичного закона дисперсии плотности состояний для зоны проводимости равно [7]

$$N(E) = N_{n0} \sqrt{E - E_c},$$

$$N_{n0} = 4\pi (2m_n^* / h^2)^{3/2}. \quad (3)$$

Аналогично для валентной зоны

$$N(E) = N_{p0} \sqrt{E_p - E},$$

$$N_{p0} = 4\pi (2m_p^* / h^2)^{3/2}. \quad (4)$$

Как и в теории некристаллических полупроводников [8, 9] для определения разрешенных и запрещенных энергетических зон, будем пользоваться понятием плотности состояний. Подстановкой (3) и (4) в (2) получим модель, которая описывает температурную зависимость плотности энергетических состояний вблизи краев зон.

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

для зоны проводимости:

$$N_{sn}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{n0} \sqrt{E_i - E_c} GN(E_i, E, T) \Delta E \quad (5)$$

при  $E > E_c$ ;

для валентной зоны:

$$N_{sp}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{p0} \sqrt{E_p - E_i} GN(E_i, E, T) \Delta E \quad (6)$$

при  $E > E_v$ ;

для запрещенной зоны:

$$N_{ss}(E) = 0 \text{ при } E > E_c > E_v, \quad (7)$$

где  $\Delta E = 1/n$ .

Здесь, при математическом моделировании процесса изменения ширины запрещенной зоны с температурой, мы воспользуемся понятием ширины запрещенной зоны [8, 9]. Значения плотности состояний, соответствующей энергии краев запрещенной зоны  $E_c$  и  $E_v$  обозначим через  $N_k$ . Тогда энергетическое положение краев запрещенной зоны определяются решением следующих трансцендентных уравнений

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

$$\sum_{i=1}^n N_{sp}(E_i) GN(E_i, E, T) \Delta E = N_k, \quad (8)$$

где  $\Delta E = 1/n$ .

Решение уравнения (8) при заданной  $N_k$  определяет значения границы запрещенной зоны  $E_c(T)$  и  $E_v(T)$ , как функции температуры  $T$ .  $N_k$  – является параметром задачи и определяется из эксперимента. Тогда ширины запрещенной зоны  $E_g(T)$  при заданной температуре определяется как разница значений  $E_c(T)$  и  $E_v(T)$

$$E_g(T) = E_c(T) - E_v(T). \quad (9)$$

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

### ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

В работе [6] установлено что, в твердых 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. 1 приве-

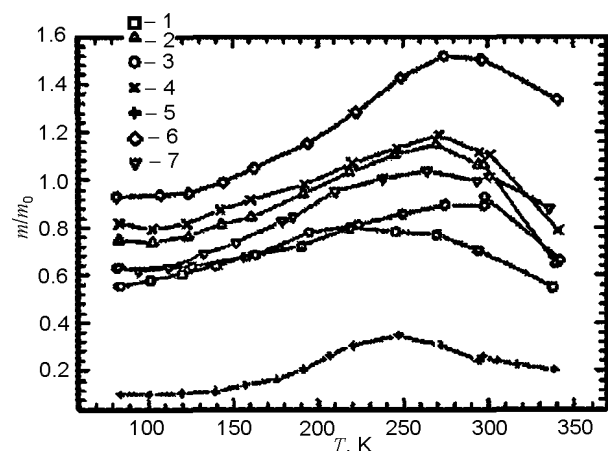


Рис. 1. Температурные зависимости эффективной массы плотности состояний  $m/m_0$  в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . 1 –  $x=1, y=0.06$ ; 2 –  $x=1.1, y=0.06$ ; 3 –  $x=1.2, y=0.06$ ; 4 –  $x=1.2, y=0.09$ ; 5 –  $x=1.3, y=0.09$ ; 6 –  $x=1.3, y=0.07$ ; 7 –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

дена температурная зависимость эффективной массы плотности состояний  $m/m_0$  в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  из работы [6].

Используя данные рис. 1 с помощью модели вычислены изменения ширины запрещенной зоны в зависимости от температуры.

На рис. 2 приведены графики плотности состояний при температурах  $T = 100$  К и  $T = 300$  К.

Из рис. 2 учет изменения эффективной массы плотности состояний существенно влияет на плотность состояний вблизи валентной зоны. На рис. 3 приведены графики температурной зависимости ширины запрещенной зоны для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  с учетом изменения эффективной массы плотности состояний взятой из рис. 3 [6].

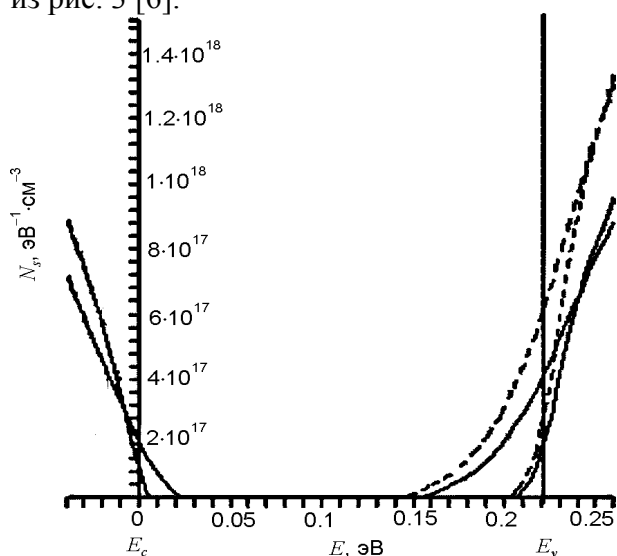


Рис. 2. Графики плотности состояний при температурах  $T = 100$  К,  $300$  К. —  $m_p^* = \text{const}$ , - - -  $m_p^* = m(T)$ .

В табл. 1 приведены значения ширины запрещенной зоны для разных температур в интервале  $100 - 300$  К с учетом и без учета изменения эффективной массы плотности состояний валентной зоны.

Как видно из табл. 1 изменение эффективной массы плотности состояний существенно влияет на значения ширины запрещенной зоны. Например, для твердого раствора  $p\text{-Bi}_{0,7}\text{Sb}_{1,3}\text{Te}_{2,93}\text{Se}_{0,07}$  изменение ширины запрещенной зоны за счет изменения эффективной массы при температуре  $T = 100$  К равна

$$\Delta E_g(100) = \Delta E_g(100, m_p^* = 0.93) - \Delta E_g(100, m_p^* = \text{const}) = 0.001 \text{ эВ.}$$

Таблица 1

$T, \text{ К}$	$p\text{-Bi}_{0,7}\text{Sb}_{1,3}\text{Te}_{2,93}\text{Se}_{0,07}$	$p\text{-Bi}_{0,7}\text{Sb}_{1,3}\text{Te}_{2,93}\text{Se}_{0,07}$	$p\text{-Bi}_{0,6}\text{Sb}_{1,2}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$	$p\text{-Bi}_{0,6}\text{Sb}_{1,2}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$	$p\text{-Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$	$p\text{-Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$	
	$m_p^* = \text{const}$ учун $E_g, \text{ эВ}$	$m/m_0$ $E_g, \text{ эВ}$	$m/m_0$ $E_g, \text{ эВ}$	$m/m_0$ $E_g, \text{ эВ}$	$m/m_0$ $E_g, \text{ эВ}$	$m/m_0$ $E_g, \text{ эВ}$	
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

При увеличении температуры до  $T = 300$  К изменяется ширина запрещенной зоны за счет изменения эффективной массы плотности состояний и составляет

$$\Delta E_g(300) = \Delta E_g(300, m_p^* = 1.35) - \Delta E_g(300, m_p^* = \text{const}) = 0.0165 \text{ эВ.}$$

Отсюда видно, что уменьшение ширины запрещенной зоны за счет изменения эффективной массы с увеличением температуры от  $100$  К до  $300$  К увеличивается больше чем на порядок. На рис. 3 приведены графики температурной зависимости ширины запрещенной зоны для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  с учетом изменения эффективной массы плотности состояний взятой из рис. 1. Таким образом, изменение эффективной массы плотности состояний с температурой может сильно повлиять на температурную зависимость ширины запрещенной зоны.

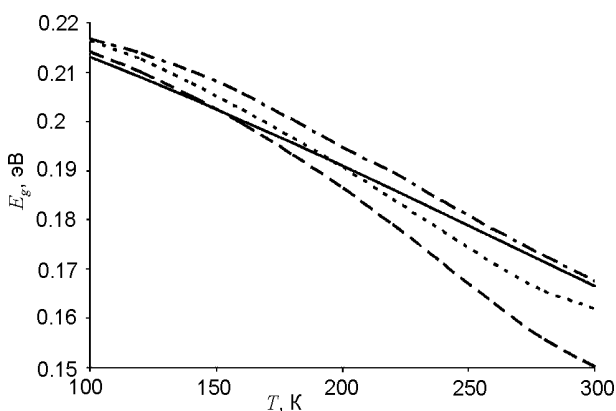


Рис. 3. График  $E_g(T)$  – температурной зависимости ширины запрещенной зоны. —  $m_p^* = \text{const}$ ; - - -  $m_p^* = m(T)$ . Для  $p\text{-Bi}_{0,7}\text{Sb}_{1,3}\text{Te}_{2,93}\text{Se}_{0,07}$ ; .....  $m_p^* = m(T)$ . Для  $p\text{-Bi}_{0,6}\text{Sb}_{1,2}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$  - · - ·  $m_p^* = m(T)$ , для  $p\text{-Bi}_{0,5}\text{Sb}_{1,5}\text{Te}_{2,91}\text{Se}_{0,09}$ .

**ВЫВОДЫ**

В результате исследований температурной зависимости энергетического спектра плотности состояний твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  с учетом температурной зависимости эффективной массы плотности состояний в валентной зоне с помощью численных экспериментов показано, что при температурах  $T > 120$  К изменение эффективной массы плотности состояний с увеличением  $T$  существенно влияет на температурную зависимость ширины запрещенной зоны.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//ФТП. – 2011. – Т. 45, Вып. 2. – С. 178-182.
2. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//Поверхность. – 2012. – № 9. – С. 13-17.
3. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю., Эркабоев У.И. //ФИП. – 2012. Т. 10, № 4. – С. 308-312.
4. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//ФИП. – 2012. Т. 10, № 2. – С. 4-8.
5. Кутасов В.А., Лукьянова Л.Н., Константинов П.П.//ФТП. – 2000. – Т. 34, Вып. 4. – С. 389-393.
6. Лукьянова Л.Н., Кутасов В.А., Константинов П.П.//ФТТ. – 2005. – Т. 47, Вып. 2. – С. 224-228.

7. Шалимова К.В. Физика полупроводников. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
8. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т. 1. – М.: Мир, 1982. – 664 с.
9. Бонч-Бруевич В.Б. и др. Электронная теория некристаллических полупроводников. – М.: Наука, 1981. – 384 с.

**LITERATURA**

1. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//FTP. – 2011. – Т. 45, Вып. 2. – С. 178-182.
2. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//Poverhnost'. – 2012. – № 9. – С. 13-17.
3. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu., 'Erkaboev U.I. //FIP. – 2012. – Т. 10, № 4. – С. 308-312.
4. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//FIP. – 2012. – Т. 10, № 2. – С. 4-8.
5. Kutasov V.A., Luk'yanova L.N., Konstantinov P.P.//FTP. – 2000. – Т. 34, Вып. 4. – С. 389-393.
6. Luk'yanova L.N., Kutasov V.A., Konstantinov P.P.//FTT. – 2005. – Т. 47, Вып. 2. – С. 224-228.
7. Shalimova K.V. Fizika poluprovodnikov. – М.: 'Energoatomizdat, 1985. – 392 s.
8. Mott N., Devis 'E. 'Elektronnyye processy v nekrystallicheskih veschestvah. Т. 1. – М.: Mir, 1982. – 664 s.
9. Bonch-Bruevich V.B. i dr. 'Elektronnaya teoriya nekrystallicheskih poluprovodnikov. – М.: Nauka, 1981. – 384 s.