



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 73 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Королева О.Н., Мажукин А.В.**

Теплофизические  
характеристики  
электронного газа кремния в  
области фазовых  
превращений

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Королева О.Н., Мажукин А.В.  
Теплофизические характеристики электронного газа кремния в области фазовых превращений  
// Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 73. 27 с. doi:[10.20948/prepr-2018-73](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-73)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-73>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**О.Н. Королева, А.В. Мажукин**

**Теплофизические характеристики  
электронного газа кремния  
в области фазовых превращений**

**Москва — 2018**

***Королева О.Н., Мажукин А.В.***

**Теплофизические характеристики электронного газа кремния в области фазовых превращений**

Представлены результаты моделирования равновесных теплофизических характеристик электронного газа кремния в области плавления. Ввиду ограниченных возможностей экспериментального подхода в данной работе используется теоретический подход и возможности математического моделирования. Характеристики электронной подсистемы кремния с собственной проводимостью рассчитываются из термодинамических и кинетических представлений с использованием техники интегралов Ферми–Дирака в произвольном диапазоне вырождения, в диапазоне температур от 300 К до 2000 К. При моделировании учитывалось влияние сужения запрещенной зоны. Результаты вычислений сравниваются с данными экспериментов.

***Ключевые слова:*** кремний, концентрация носителей, квантовая и классическая статистики, сужение запрещенной зоны, теплофизические свойства

***Olga Nikolaevna Koroleva, Alexander Vladimirovich Mazhukin.***

**Thermophysical characteristics of an electron gas of silicon in the region of phase transformations**

The results of modeling the equilibrium thermophysical characteristics of an electron gas of silicon in the melting region are presented. In view of the limited possibilities of the experimental approach, the present paper uses the theoretical approach and the possibilities of mathematical modeling. The characteristics of the electron subsystem of silicon with intrinsic conductivity are calculated from thermodynamic and kinetic representations using the Fermi-Dirac integral method in an arbitrary degeneracy interval determined in the temperature range from 300 K to 2000 K. The effect of narrowing of the band gap is used during the simulation. The results of the calculations are compared with the experimental data.

***Key words:*** silicon, carrier concentration, quantum and classical statistics, narrowing of the band gap, thermophysical properties

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-07-00263.

## 1. Введение

Уникальные свойства выделяют кремний из всех материалов, что обуславливает расширение области его использования в технологиях, в том числе связанных с лазерной обработкой короткими импульсами. С этим направлением связаны такие быстро развивающиеся технологии, как генерация наночастиц и наноструктур [1], [2], создание метаматериалов [3], модифицирование лазерными импульсами поверхности полупроводников [4]. В связи с этим уделялось и уделяется в настоящее время большое внимание исследованиям фундаментальных механизмов, лежащих в основе плавления и фазовых трансформаций кремния, а также его свойств в широком диапазоне давлений и температур, включая жидкую фазу.

Лазерный нагрев полупроводников (кремния), так же как и металлов, является неравновесным и протекает с большим отрывом температур носителей тока от решетки [5] - [7]. В случае металлов энергия первоначально выделяется в электронном газе (Ферми-газ), а затем посредством электрон-фононных столкновений передается решетке. В случае неравновесного нагрева теплофизические характеристики фононного и электронного Ферми-газа (теплоемкость, теплопроводность и константа обмена энергией) сложным образом зависят от двух температур. При нормальных условиях полупроводник (кристаллический кремний) является диэлектриком, слабо поглощающим или полностью прозрачным для лазерного излучения. По мере нагрева плотность свободных электронов возрастает, возрастает и коэффициент поглощения лазерного излучения. В расплавленном состоянии кремний вначале приобретает свойства полуметалла, а затем и металла. Процессы нагрева и фазовых трансформаций в задачах лазерного воздействия на полупроводники рассматриваются как объект, состоящий из двух взаимодействующих подсистем – электронной и фононной, в силу их неравновесного характера. При этом для каждой из подсистем необходимо определять теплофизические, оптические и термодинамические характеристики, изменяющиеся в широком диапазоне параметров (температуры, давления). Современное описание процессов нагрева и фазовых трансформаций в полупроводниках, так же как и в металлах, осуществляется в рамках двух классов моделей: континуальных и атомистических.

В основе континуального моделирования свойств электронной подсистемы кремния использование квантовой статистики, т.е. применения функции распределения и интегралов Ферми–Дирака (Ф-Д) [7] - [9]. Особый интерес представляют изменяющиеся скачком свойства кремния в системе твердое тело–жидкость в окрестности температуры плавления. Многочисленные эксперименты [10] - [12] показали, что в процессе плавления в кремнии происходит разрушение ковалентных связей с изменением ближнего порядка, сопровождающееся резким увеличением концентрации электронов проводимости и приводящее к переходу кремния в металлическое состояние.

Базовой характеристикой для описания свойств электронной подсистемы является температурная зависимость носителей  $N(T)$  в широком диапазоне вырождения электронного газа. Важнейшей характеристикой фазового перехода является фундаментальная характеристика кремния – ширина запрещенной зоны. В условиях повышения температуры ширина запрещенной зоны  $E_g(T)$  сужается, оказывая существенное влияние на увеличение концентрации носителей, достигающей высоких значений  $N(T) \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и выше, что подтверждается экспериментальными исследованиями [10] - [12].

Ввиду ограниченных возможностей экспериментального подхода в определении свойств электронного газа кремния в данной работе предлагается использовать теоретический подход и возможности математического моделирования. Характеристики электронной подсистемы получаются из термодинамических и кинетических представлений с использованием техники интегралов Ф-Д [6] - [9].

## **2. Моделирование свойств электронной подсистемы кремния**

Для любого полупроводника наиболее важной характеристикой, которая необходима для определения таких свойств электронного газа, как подвижность носителей, электропроводность, коэффициент амбиполярной диффузии, теплопроводность, теплоемкость носителей, является концентрация электронов  $N_e$  в зоне проводимости или дырок  $N_h$  в валентной зоне. В свою очередь, концентрация носителей зависит от фундаментальной характеристики кремния – ширины запрещенной зоны, зависящей сложным образом от температуры, концентрации носителей в зоне проводимости, от энергии уровня Ферми, также зависящей от температуры и концентрации носителей. Определение всех характеристик электронной подсистемы кремния в данной работе осуществлялось с использованием квантовой статистики электронного газа. При таком подходе базовым является знание закона распределения носителей по энергетическим состояниям.

### **2.1. Закон распределения носителей**

В основе континуального моделирования свойств электронной подсистемы кремния лежит использование статистики электронного газа. Центральное место при таком подходе занимает закон распределения носителей заряда по энергетическим состояниям. Электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне кремния можно рассматривать как идеальный Ферми-газ. Для идеального Ферми-газа вероятность заполнения электроном состояния  $k$  с энергией  $E$  при температуре  $T$  находится с помощью распределения Ферми-Дирака

$$f(E, T) = \frac{1}{\left(1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)\right)}, \quad (1)$$

где  $k_B$  – константа Больцмана,  $E_F$  – энергетический уровень Ферми. Для электронного газа значение энергии Ферми определяется как величина энергии, необходимая для изменения числа частиц в системе на единицу объема, и совпадает со значением химического потенциала при  $T=0$  К.

При энергии меньше, чем энергия Ферми  $E < E_F$ , функция Ф–Д равна 1 ( $f(E, T)=1$ ) и все квантовые состояния заполнены электронами. Если же  $E > E_F$ , то функция Ф–Д равна 0 ( $f(E, T)=0$ ) и соответствующие квантовые состояния не заполнены (рис.1). В полупроводниках при низких температурах энергетический уровень Ферми находится между валентной зоной ( $E_V$ ) и зоной проводимости ( $E_C$ ), на несколько  $k_B T$  ниже уровня зоны проводимости

$$E_C - E_F > k_B T, \quad (2)$$

при этом электронный газ является невырожденным и функцию распределения (1) можно аппроксимировать функцией распределения Максвелла–Больцмана (М-Б)

$$f(E, T) \approx \exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right). \quad (3)$$

Ввиду важности расположения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, особенно в неравновесном случае, функцию распределения Ферми–Дирака (1) представляют в виде [1]

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon - \eta_c)} \Big|_{c=e,h}, \quad (4)$$

где  $\varepsilon = E - E_C/k_B T$  – приведенный уровень электрона (расстояние до дна зоны проводимости),  $\eta_e = E_F - E_C/k_B T$  – приведенный уровень Ферми для электронов. Для дырок приведенный уровень Ферми определяется аналогично  $\eta_h = E_V - E_F/k_B T$ .

Приведенные уровни Ферми являются показателями вырождения электронного и дырочного газа полупроводника. При положительных значениях  $\eta_e > 0$ ,  $\eta_h > 0$  электронный или дырочный газ является вырожденным. На рисунке 1 показаны графики функций распределения Ф-Д и М-Б для энергетических уровней зон проводимости и валентной.

На рисунке 1 видно, что при невысоких температурах функция распределения Ф-Д для валентной зоны  $f(E_V, T)=1$ , то есть все энергетические уровни валентной зоны заняты электронами, дырочный газ является вырожденным, в то же время для зоны проводимости  $f(E_C, T)=0$ , это означает, что в зоне проводимости носители отсутствуют, электронный газ является

невыврожденным и  $f(E_C, T)$  можно аппроксимировать функцией распределения М-Б. С повышением температуры ситуация меняется. Функция распределения Ф-Д для зоны проводимости растет, а для валентной зоны уменьшается, вырождается электронный газ, а в дырочном – вырождение снимается и функцию распределения Ф-Д для валентной зоны можно аппроксимировать функцией распределения М-Б. Заметим, что в любом случае аппроксимация возможна в сравнительно небольших температурных диапазонах. По этой причине моделирование свойств электронного и дырочного газа в широком диапазоне температур с учетом вырождения требует использования квантовой статистики и функции распределения Ф-Д.

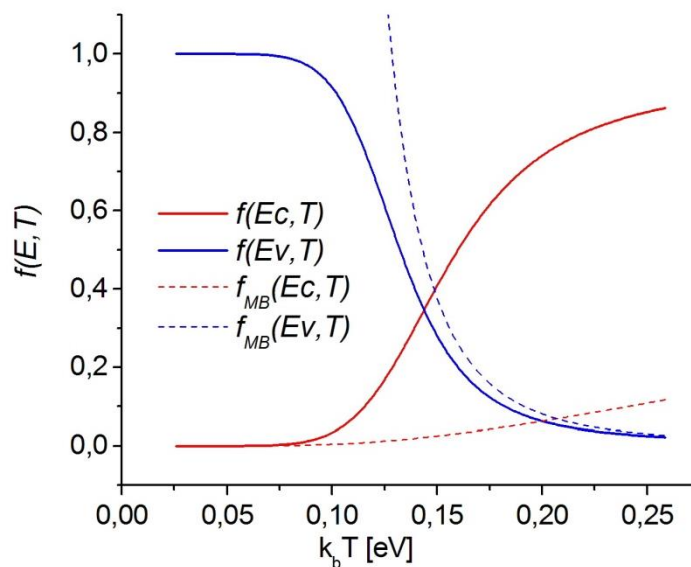


Рис. 1. Функции распределения Ферми–Дирака и Максвелла–Больцмана для энергетических уровней зон проводимости и валентной

## 2.2. Запрещенная зона

Понятие запрещенной зоны возникло в рамках квантовой теории [7] - [9] в связи с необходимостью объяснения различий физических свойств металлов и полупроводников в физике твердого тела. Важнейшим свойством как металлов, так и полупроводников является электропроводность и ее характеристика – концентрация носителей. В определении концентрации носителей, необходимой для описания всех свойств полупроводников, ширина (энергия) запрещенной зоны  $E_g$  имеет большое значение, так как является важнейшей характеристикой энергетической структуры полупроводников. Для использования в математическом моделировании ширину запрещенной зоны необходимо представлять в виде температурной  $E_g(T)$  (или барической  $E_g(P)$ ) зависимости. Согласно представлениям квантовой теории, при образовании кристалла из отдельных атомов вследствие уменьшения межатомных

расстояний и вследствие действия принципа Паули возникают разрешенные зоны, в которых могут располагаться электроны. Разрешенные зоны характеризуются плотностью электронных состояний. Самые «глубокие» разрешенные зоны, т.е. энергетические зоны, образованные электронами глубоколежащих оболочек, одинаковы для всех веществ. Самая верхняя из них – валентная зона  $E_v$  – в полупроводниках полностью заполнена электронами при нулевой абсолютной температуре ( $T=0\text{K}$ ). Следующая за ней разрешенная зона не заполнена электронами при той же температуре. Эту зону называют зоной проводимости  $E_c$ . Разрешенные зоны кристалла разделяются запрещенными зонами, плотность электронных состояний в которых равна нулю. В значительной степени природу химической связи в материале определяет запрещенная зона  $E_g$ . Для характеристики заполнения электронных зон вводится понятие энергии (уровня) Ферми  $E_F$ , отделяющей на шкале энергий заполненные электронные состояния кристалла от свободных при нулевой абсолютной температуре (рис. 2б). В зависимости от положения уровня Ферми, разрешенные зоны кристалла могут заполняться электронами полностью, частично, либо оставаться незаполненными. Расположение уровня Ферми  $E_F$  относительно краев указанных зон определяет электронную природу и физические свойства кристалла. Действительно, валентные электроны кристалла, находящиеся в заполненных зонах, являются связанными и не участвуют в проводимости. Электроны могут участвовать в электронной проводимости, став свободными, только в том случае, если они находятся в незаполненной зоне [9]. Соответственно, вещества, в которых валентная зона заполнена частично либо зона проводимости и валентная зоны перекрываются, являются металлами. У металлов ширина запрещенной зоны равна нулю  $E_g=0$  (рис. 2а).

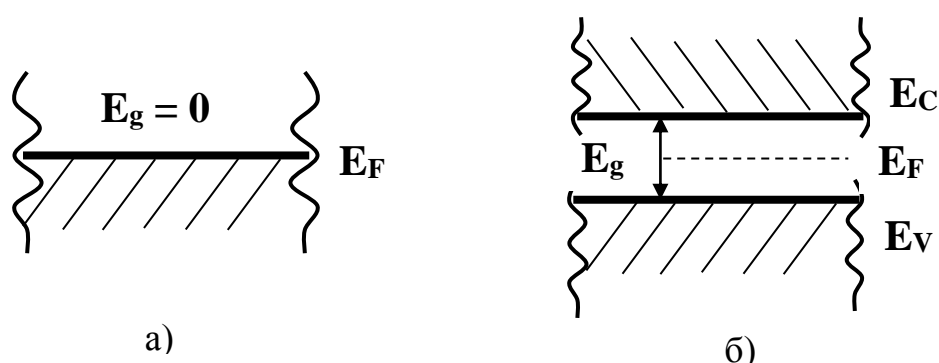


Рис.2. Схема энергетических уровней металлов (а), диэлектриков и полупроводников (б)

Вещества, в которых при нулевой абсолютной температуре ( $T=0\text{K}$ ) валентная зона и зона проводимости не перекрываются, являются полупроводниками или диэлектрикам. Полупроводники и диэлектрики различаются величиной  $E_g$ . Условно вещества с  $E_g > 2-3$  эВ относят к классу



диэлектриков, вещества с  $E_g < 2-3$  эВ – к классу полупроводников. По ширине запрещенной зоны различают широкозонные ( $0.5 \text{ eV} < E_g < 2-3$  эВ) и узкозонные полупроводники ( $0.1 < E_g < 0.5$  эВ), вещества с  $E_g \leq 0$  (небольшое перекрытие зон) относятся к классу полуметаллов. Схематически энергетические уровни металлов, диэлектриков и полупроводников показаны на рисунке 2.

Ширина запрещенной зоны кремния  $E_g$ , как и других полупроводников, зависит от внешних параметров, таких как температура, давление, электрические, магнитные, гравитационные поля, и других [7] - [9]. С ростом температуры и увеличением концентрации носителей заряда энергия запрещенной зоны имеет тенденцию к уменьшению [7] - [10], [14] - [19].

Сужение ширины запрещенной зоны для широкозонных полупроводников изучалось оптическими методами [10] и методами фотолюминесцентной спектроскопии [20]. Данные экспериментов дают представление о сужении запрещенной зоны в диапазоне концентраций носителей  $4 \times 10^{18} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  и температур 20–300 К [14], [18], [19]. В работе [12] было высказано предположение, что ширина запрещенной зоны при температуре плавления  $T_m$  скачком становится равной нулю.

В данной работе интерес представляет исследование влияния ширины запрещенной зоны кремния на процессы, связанные с фазовым переходом и в области более высоких температур. Известно, что при плавлении кремний приобретает металлические свойства, поэтому ширина запрещенной зоны в окрестности температуры плавления должна стать близкой или равной нулю. Эти рассуждения лежат в основе нашего предположения о соблюдении при равновесной температуре плавления условия

$$E_g(T_m) \approx 0, \text{ при } T_m = 1687 \text{ К} . \quad (5)$$

Рассмотрим основные механизмы, влияющие на температурную зависимость ширины запрещенной зоны.

Первый механизм связан с расширением решетки при повышении температуры, вызывающим смещение относительного положения зоны проводимости и валентной зоны. Второй механизм связан с усилением электронно-решеточного взаимодействия, при повышении температуры [21] - [24]. В области низких температур эти эффекты дают значительный вклад в изменение энергии запрещенной зоны. Температурная зависимость ширины запрещенной зоны при низкой температуре имеет нелинейный характер. В области высоких температур по оценкам, сделанным в [23], вклад перечисленных механизмов составляет примерно 20-25% от общего изменения энергии запрещенной зоны, а температурная зависимость является линейной

$$T \ll \theta, \quad \Delta E_g \propto T^2; \quad T \gg \theta, \quad \Delta E_g \propto T \quad (6)$$

где  $\theta$  – температура Дебая (для Si  $\theta = 640$  К).

В настоящее время для описания температурных изменений ширины запрещенной зоны  $E_g(T)$  используются эмпирические и полуэмпирические

зависимости [21] - [24]. В них обычно используют линейные коэффициенты (например, температурный [23] –  $\alpha_T = -\frac{\partial E_g}{\partial T}$  и барический [24] –  $\alpha_P \approx -\frac{\partial E_g}{\partial P}$ , здесь  $T$  и  $P$  – абсолютная температура и гидростатическое давление). Самой распространенной является аппроксимация Варшни [23], хорошо описывающая первые два механизма сужения запрещенной зоны

$$E_g(T) = E_{g,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}, \quad (7)$$

где  $E_{g,0}$  – ширина запрещенной зоны при температуре 0 К,  $\alpha$  и  $\beta$  – константы, которые были оценены экспериментальным путем и для кремния составляют:  $\alpha = 7.021 \times 10^{-4}$  эВ/К,  $\beta = 1108$  К. Константа  $\beta$  сравнима с температурой Дебая с коэффициентом  $\approx 2.5$  для кремния. При высоких температурах  $T \gg \beta$ , из (7) следует, что  $\alpha \approx -\frac{\partial E_g}{\partial T}$ , то есть является температурным коэффициентом ширины запрещенной зоны.

Третий механизм сужения запрещенной зоны связан с эффектами коллективных взаимодействий и действует при достаточно высоких концентрациях носителей и вырождения электронного газа. Наиболее существенный вклад в сужение ширины запрещенной зоны связан с обменным взаимодействием, что приводит к эмпирической зависимости вида  $\Delta E_g \sim \gamma \times N(T)^{1/3}$ , где  $\gamma$  – параметр, имеющий характер подгоночного к данным экспериментов. В работах [25] - [29] параметр  $\gamma$  определен в диапазоне  $1 \times 10^{-8} \div 7.3 \times 10^{-8}$  эВ×см.

Тепловые и квантовые механизмы учтены в соотношении из [6], которое представляет модификацию (7)

$$E_g(T, N) = E_{g,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} - \gamma \cdot N^{1/3}(T), \quad (8)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$  – константы, совпадающие с соответствующими константами из (7), константа  $\gamma = 1.5 \times 10^{-8}$  эВ×см,  $N(T)$  – концентрация носителей заряда в зоне проводимости,  $T$  – температура. В данной работе значение подгоночного параметра  $\gamma = 8.35 \times 10^{-8}$  эВ×см было выбрано из условия равенства нулю ширины запрещенной зоны  $E_g(T_m) = 0$  при равновесной температуре плавления.

### 2.3. Концентрация носителей и энергия уровня Ферми

В металлах концентрация носителей постоянна и может быть охарактеризована определенным значением электрохимического потенциала (энергией Ферми), значение которого можно получить из экспериментальных данных [1]. В полуметаллах, имеющих ширину запрещенной зоны  $E_g \leq 0$ , уровень Ферми расположен в зоне проводимости либо в валентной зоне, а концентрация носителей  $\approx 10^{18} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , на несколько порядков ниже типичной

для металлов  $10^{22}$  см<sup>-3</sup>. С ростом температуры количество носителей в полуметаллах увеличивается, а электропроводность растет [9].

В полупроводниках, в отличие от металлов, число носителей заряда и их подвижность зависят от температуры, дефектов и наличия примесей. При низких температурах в полупроводниках валентная зона полностью занята (рис. 1, 2) и, согласно принципу Паули, перемещение внутри валентной зоны невозможно. В связи с этим при низких температурах в полупроводниках электронный газ является невырожденным, а концентрация электронов проводимости так мала, что они ведут себя как газ невзаимодействующих частиц, поэтому можно использовать классическую статистику Максвелла–Больцмана. С ростом температуры горячие электроны отдают энергию решетке, ширина запрещенной зоны уменьшается, а энергия уровня Ферми  $E_F$  увеличивается. При этом концентрация свободных носителей заряда в зоне проводимости растет, определяемая процессами генерации и рекомбинации электронов из зоны проводимости и дырок из валентной зоны, которые происходят непрерывно и параллельно. В такой ситуации электронный газ вырождается и подчиняется статистике Ферми-Дирака. В расплавленном состоянии полупроводники приобретают металлические свойства. Таким образом, вырождение электронного газа в полупроводниках в зависимости от интенсивности внешнего воздействия может наступать раньше, чем вещество расплавится.

Концентрации электронов  $N_e(T)$  и дырок  $N_h(T)$  при температуре  $T$  в зоне проводимости в условиях термодинамического равновесия определяются

$$N_e(T) = \int_{E_c}^{\infty} N_C f(E) dE, \quad N_h(T) = \int_{-\infty}^{E_v} N_V f(E) dE, \quad (9)$$

где  $N_C = 2 \left( \frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$ ,  $N_V = 2 \left( \frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$  – эффективные плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m_e = M^{2/3} (m_l \cdot m_t^2)^{1/3}$  – эффективная масса плотности состояний электронов в зоне проводимости с учетом числа эквивалентных минимумов энергии  $M$  (для кремния  $M = 6$ ) [7],  $m_l$ ,  $m_t$  – соответственно продольная и поперечная массы,  $m_h$  – эффективная масса плотности состояний дырок в валентной зоне,  $f(E)$  – функция распределения Ферми-Дирака (1). Для собственного полупроводника, не содержащего примесей, соблюдается равенство концентраций

$$N_e(T) = N_h(T) = N(T). \quad (10)$$

Интегралы в (9) можно представить в виде

$$N_e(T) = N_C \cdot \mathcal{F}_{1/2}(\eta_e), \quad N_h(T) = N_V \cdot \mathcal{F}_{1/2}(\eta_h), \quad (11)$$

где  $\mathcal{F}_{1/2}(x)$  – интеграл Ферми–Дирака порядка  $j=1/2$ , представитель семейства интегралов, играющих значительную роль в определении свойств полупроводников

$$\mathcal{F}_j(\eta_c) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^j}{1 + \exp(\varepsilon - \eta_c)} d\varepsilon, \quad (12)$$

где  $\Gamma(x)$  – Гамма-функция,  $j$  – индекс (порядок) интеграла Ферми–Дирака,  $c=e$  для электронов и  $c=h$  для дырок.

При низких температурах в полупроводниках концентрация электронов проводимости так мала, что они ведут себя как газ невзаимодействующих частиц, электронный газ является невырожденным. В этом случае функция распределения Ферми–Дирака (1) легко сводится к классической функции распределения Максвелла–Больцмана (3), а вычисление концентрации носителей (11) сведется к

$$N_e(T) = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right), \quad N_h(T) = N_v \exp\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right).$$

С учетом собственной проводимости

$$N_e(T) = N_h(T) = N(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right).$$

В вычислительном плане определение концентраций носителей в этом случае не будет представлять трудностей. С ростом температуры ситуация меняется. Горячие электроны отдают энергию решетке, при этом ширина запрещенной зоны уменьшается, а концентрация свободных носителей заряда в зоне проводимости растет. Уровень Ферми проникает либо в зону проводимости ( $E_F - E_C > 0$ ), либо в валентную зону ( $E_V - E_F > 0$ ), электронный газ вырождается, и классическая статистика становится несправедливой, а (13) недействительным. Поэтому возникает необходимость использования квантовой статистики и выражений (11) для концентраций носителей. Это сразу приводит к вычислительным сложностям, так как интеграл (12), за исключением интеграла с порядком  $j=0$ , не может быть вычислен аналитически. Вычислительные сложности, связанные с использованием интегралов Ферми–Дирака, возникают не только при определении концентраций носителей, но и при определении таких свойств электронного газа, как электропроводность, подвижность носителей, коэффициент амбиполярной диффузии и других, где используются интегралы Ферми–Дирака с целыми и полуцелыми индексами, как правило не высокими  $-1/2 \leq j \leq 7/2$  и  $-1 \leq j \leq 3$ . В работах [30], [31] для интегралов Ферми–Дирака порядков  $j=-1/2, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3$  и  $7/2$  были получены непрерывные аналитические выражения, единые для каждого порядка в широком диапазоне вырождения,

которые в данной работе использовались для вычисления свойств электронного газа.

На рис. 3 представлены зависимости функции Ферми-Дирака целых  $j$  и полуцелых  $j/2$  порядков, при различных значениях  $\eta$ . Пунктирными линиями на рисунке показаны высокотемпературный и низкотемпературный пределы вырождения электронного газа. Видно, что использование аппроксимирующих функций позволяет осуществить плавный, непрерывный переход из области невырожденности в область вырождения, что очень важно для получения гладких функциональных зависимостей свойств электронного газа кремния.

Для вычисления интегралов с порядком  $j=1/2$  используется аппроксимирующая функция

$$\mathcal{F}_{1/2}(\eta_e) = \exp\left(\sum_{i=0}^7 a_i \eta_e^i\right), \quad \mathcal{F}_{1/2}(\eta_h) = \exp\left(\sum_{i=0}^7 a_i \eta_h^i\right). \quad (13)$$

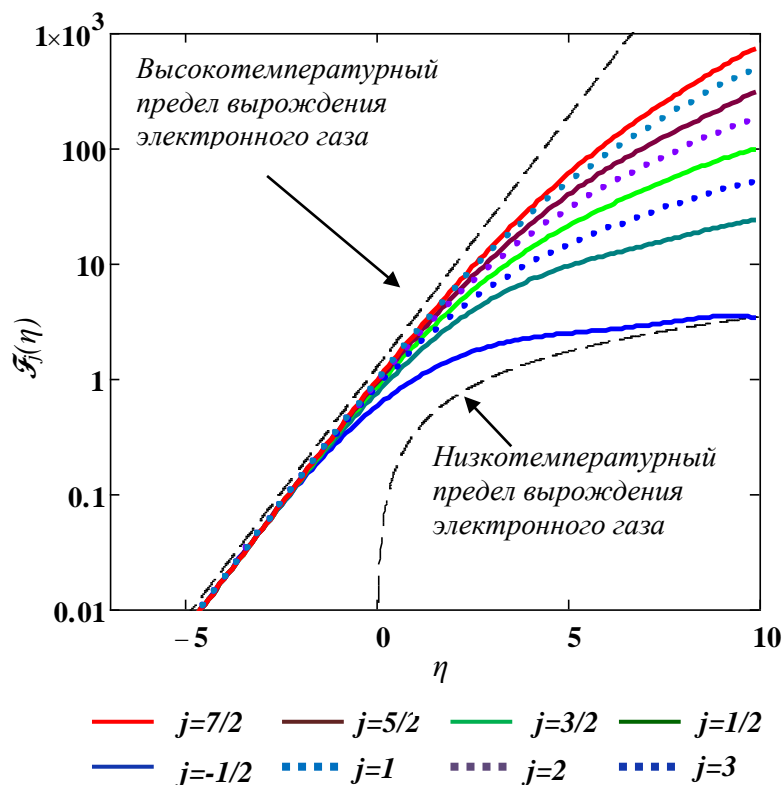


Рис. 3. Аппроксимирующие функции интегралов Ферми–Дирака  $\mathcal{F}_j(\eta)$  порядка  $j$

Поскольку при термодинамическом равновесии вероятность заполнения всех электронных состояний с любыми энергиями можно выразить с помощью единственного параметра нормировки – уровня Ферми  $E_F$ , то для определения концентрации носителей и других свойств кремния необходима температурная зависимость  $E_F(T)$ .

Из условия электронейтральности можно найти температурную зависимость энергии Ферми  $E_F(T)$ , используя (11) и (13), получим

$$N_C \cdot \exp\left(\sum_{i=0}^7 a_i \eta_e^i\right) = N_V \cdot \exp\left(\sum_{i=0}^7 a_i \eta_h^i\right). \quad (14)$$

Сформулированные уравнения (8)–(14) представляют математическое описание меняющихся с температурой взаимосвязанных величин  $E_F(T)$ ,  $N(T)$ ,  $E_g(T, N)$ , получение которых в данной работе осуществлялось из численного решения уравнений с помощью вычислительной процедуры, состоящей из двух вложенных итерационных циклов. На одном шаге по температуре  $[T_i, T_{i+1}]$  последовательность вычислений выглядит следующим образом. Во внутреннем цикле из условия электронейтральности (14) собственного полупроводника с помощью итерационного метода Ньютона [32] определяется энергия уровня Ферми  $E_F(T_{i+1})$ . Во внешнем цикле с учетом нового значения  $E_F(T_{i+1})$  методом простой итерации определяются величины  $N_{i+1}$ ,  $E_{F,i+1}$ ,  $E_{g,i+1}$ ,  $E_{\tilde{N},i+1}$ ,  $E_{V,i+1}$ . Процедура повторяется до полной сходимости.

### 3. Результаты моделирования

#### 3.1. Запрещенная зона и концентрация носителей

На рисунке 4 показаны температурные зависимости ширины запрещенной зоны, рассчитанные для распределения Ферми–Дирака (1) со значением параметра  $\gamma$ , соответствующим условию (5) (рис. 4, кривая 1), и для распределения Максвелла–Больцмана (кривая 2). В диапазоне температур от 300 К до  $\theta$ , где влияние квантовых механизмов слабое, ширина запрещенной зоны одинаково хорошо аппроксимируется представленными зависимостями и полностью совпадает с экспериментом [17]. Выше температуры Дебая становится заметным вклад механизмов коллективного взаимодействия в ширину запрещенной зоны, что отражается на поведении зависимостей. Ширина запрещенной зоны, вычисленная со статистикой Максвелла–Больцмана (кривая 2), зависящая только от температуры, дольше остается положительной. Условие  $E_g(T) = 0$  для этой зависимости выполняется при  $T = 2410$  °К, а при температуре плавления –  $E_g(T_m) = 0,5$  эВ. Зависимость, рассчитанная со статистикой Ферми–Дирака (кривая 1), учитывающая влияние температуры и концентрации носителей, сужается сильнее и становится отрицательной при температуре  $T > T_m$ .

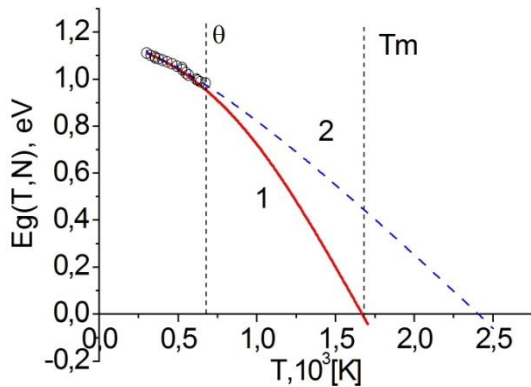


Рис.4. Температурные зависимости ширины запрещенной зоны с учетом: (1) тепловых и квантовых эффектов; (2) тепловых эффектов. Маркерами показаны данные эксперимента [17]

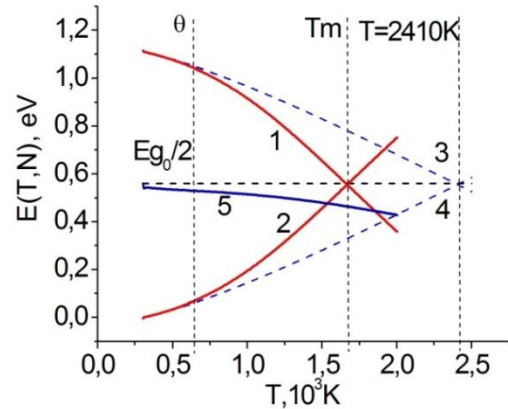


Рис. 5. Температурные зависимости краев зон проводимости и валентной с учетом: (1), (2) тепловых и квантовых эффектов; (3), (4) тепловых эффектов; (5) энергии Ферми  $E_F(T, N)$

Рисунок 5 дает наглядное представление о форме и скорости сужении запрещенной зоны  $E_g(T, N)$  относительно краев зон валентной  $E_V(T)$  и проводимости  $E_C(T)$ , вычисленных с квантовой статистикой (кривые 1, 2) и статистикой Максвелла–Больцмана (кривые 3, 4). На рисунке 5 показано также положение уровня энергии Ферми  $E_F(T)$  (кривая 5) и собственного уровня Ферми, находящегося в середине запрещенной зоны. С ростом температуры энергия Ферми  $E_F(T)$  отклоняется от собственного уровня в сторону края валентной зоны  $E_V(T)$ , что определяется меньшей эффективной массой плотности состояний валентной зоны. Для кремния соотношение эффективных масс состояний электронов и дырок составляет  $m_{de}/m_{dh}=1,89$ . Из-за чего вырождение дырочного газа ( $\eta_h = 0$ ) наступает раньше, чем вырождение электронного газа ( $\eta_e = 0$ ) (рис. 6).

Начиная с  $T=1000$  °К концентрация носителей (рис. 7) и ширина запрещенной зоны (рис. 4-5), рассчитанные с квантовой и классической статистикой, начинают различаться: для Ферми–Дирака  $N(T)=1.5 \times 10^{18}$  см<sup>-3</sup>,  $E_g(T, N)=0.73$  эВ, для Максвелла–Больцмана  $N(T)=9.1 \times 10^{17}$  см<sup>-3</sup>,  $E_g(T, N)=0.81$  эВ. Полученные данные соответствуют возникновению слабого вырождения, которому соответствуют значения  $\eta_h \approx -4$  (рис. 6).

Область сильного вырождения возникает при пересечении кривых  $E_F(T)$  и  $E_V(T)$  (рис. 5), что соответствует  $\eta_h=0$  и значениям  $T=1600$  °К,  $N(T)=1.1 \times 10^{20}$  см<sup>-3</sup> (рис.7),  $E_g(T, N)=0.083$  эВ для распределения Ферми–Дирака и  $N_{M-B}(T)=3.8 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup> (рис. 7),  $E_g(T)=0.48$  эВ для Максвелла–Больцмана.

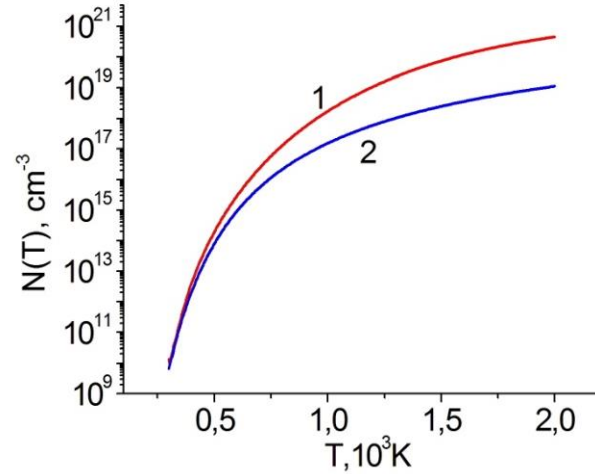
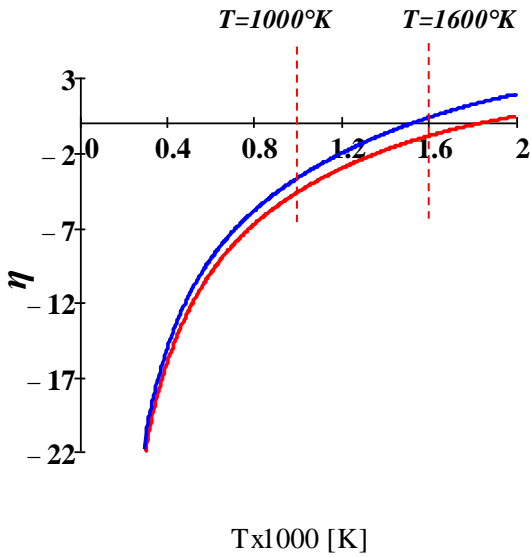


Рис. 6. Температурные зависимости электронного (1) и дырочного (2) приведенных уровней энергии Ферми

Рис. 7. Температурные зависимости концентраций носителей, рассчитанные с использованием статистик (1) Ферми–Дирака, (2) Максвелла–Больцмана,  $E_g = 1.12$  эВ

Такая же картина, с некоторым сдвигом в область более высоких температур, наблюдается с вырождением электронного газа. Слабое вырождение:  $\eta_e \approx -4$ ,  $T=1090$  °К (рис. 6),  $N(T)=4.5 \times 10^{18}$  см<sup>-3</sup>,  $E_g(T,N)=0.61$  эВ (рис. 4-7), сильное вырождение:  $\eta_e \approx 0$  (рис.6),  $T=1920$  °К,  $E_g(T,N)=-0.28$  эВ (рис. 4-7).

При равновесной температуре плавления  $T=T_m=1687$  К в варианте с квантовой статистикой и подгоночным параметром  $\gamma=8.35 \times 10^{-8}$  эВ×см ширина запрещенной зоны обращается в нуль  $E_g(T,N)=0$  с концентрацией носителей  $N(T)=1.7 \times 10^{20}$  см<sup>-3</sup>.

При дальнейшем нагреве до  $T=2000$  °К ширина запрещенной зоны становится отрицательной, а концентрация носителей продолжает расти, (рис. 4-7)  $N(T)=4.2 \times 10^{20}$  см<sup>-3</sup>,  $E_g(T,N)=-0.38$  эВ. С распределением Максвелла–Больцмана ширина запрещенной зоны всё ещё остается положительной, а концентрация значительно ниже, чем у статистики Ферми–Дирака:  $E_g(T)=0.24$  эВ,  $N_i = 1.4 \times 10^{20}$  см<sup>-3</sup>.

### 3.2 Подвижность носителей

Подвижность является важной транспортной характеристикой полупроводника. С использованием квантовой статистики подвижность носителей определяется следующим выражением



$$\mu_c(T, N) = \mu_c^0(T) \frac{\mathcal{F}_0(\eta_c)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_c)} \Big|_{c=e,h}, \quad (15)$$

где  $\mu_c^0(T)$  – подвижность носителей для невырожденного полупроводника,  $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_c)$ ,  $\mathcal{F}_0(\eta_c)$  ( $c=e,h$ ) – интегралы Ф-Д порядков  $j=1/2$  и  $j=0$ .

В работе [33] приведен способ вычисления подвижности невырожденных носителей заряда с учетом электронно-дырочного рассеяния, который использовался для вычисления  $\mu_c^0$ . В этом подходе предполагается, что подвижность электрона или дырки является функцией следующих трех компонентов: подвижности решетки, подвижности рассеяния примеси и подвижности электрон-дырочного рассеяния.

На рисунке 8 показаны температурные зависимости подвижностей электронов и дырок. С ростом температуры подвижность носителей падает, что связано с усилением электронно-решеточного взаимодействия и эффектов коллективных взаимодействий, действующих при достаточно высоких концентрациях носителей и вырождении электронного газа. На рисунке 8 представлены также справочные [34] и экспериментальные [35], [36] данные в диапазоне температур  $T=300 \div 600$  °К.

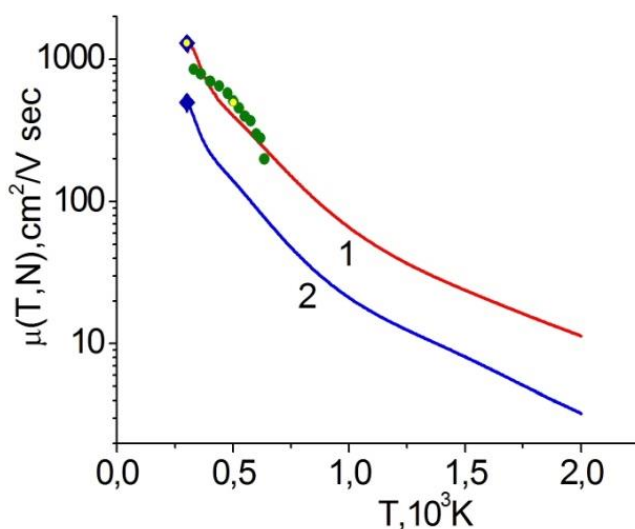


Рис. 8. Температурные зависимости подвижностей (1) электронов, (2) дырок, рассчитанных с квантовой статистикой, маркерами обозначены: справочные данные [34] – синие маркеры, экспериментальные данные: [35] – желтые, [36] – темно-зеленые маркеры.

В области невысоких температур  $T < 600$  °К, из рисунка 8 видно, что полученные температурные зависимости подвижностей носителей показывают хорошее совпадение со справочными и экспериментальными данными. В области высоких температур  $T > 600$  °К (вблизи температуры плавления) экспериментальные значения подвижности носителей отсутствуют.

### 3.3 Коэффициент амбиполярной диффузии

Как и подвижность носителей, коэффициент амбиполярной диффузии является важной транспортной характеристикой полупроводника. При лазерном воздействии на полупроводник в приповерхностном слое резко увеличивается концентрация свободных носителей, которые диффундируют вглубь образца. С ростом температуры концентрация носителей увеличивается, достигая при равновесной температуре плавления ( $T=T_m=1687$  °К) значения  $1,7 \times 10^{20}$  см<sup>-3</sup> (рис. 7), при этом скорость диффузии уменьшается из-за увеличения частоты электрон-электронных и электрон-фононных столкновений. Этот процесс характеризуется коэффициентом амбиполярной диффузии  $D_a(T,N)$ , который зависит как от температуры, так и от концентрации носителей. В произвольном диапазоне вырождения электронного газа с использованием квантовой статистики, согласно [37], коэффициент амбиполярной диффузии определяется выражением

$$D_a(T,N) = \frac{k_B T}{e} \frac{\mu_e(T,N)\mu_h(T,N)}{\mu_e(T,N) + \mu_h(T,N)} \left( \frac{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_e)}{\mathcal{F}_{-1/2}(\eta_e)} + \frac{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_h)}{\mathcal{F}_{-1/2}(\eta_h)} \right), \quad (16)$$

где  $\mu(T,N)$  – общая подвижность (14),  $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_c)$ ,  $\mathcal{F}_{-1/2}(\eta_c)$  ( $c=e,h$ ) – интегралы Ферми–Дирака порядков  $j=1/2$  и  $j=-1/2$ . При моделировании использовались аппроксимирующие функции для интегралов Ф-Д из [30], [31]. Видно, что  $D_a(T,N)$  зависит от концентрации носителей и температуры, подвижности электронов и дырок,  $\mu_e(T,N)$  и  $\mu_h(T,N)$ , степени вырождения электронного газа.

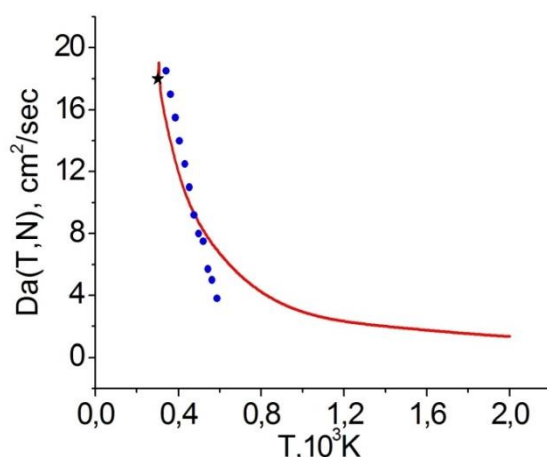


Рис. 9. Температурная зависимость коэффициента амбиполярной диффузии  $D_a(T,N)$  (сплошная линия), рассчитанного с квантовой статистикой. Маркерами черного цвета обозначены справочные данные [34], синего – экспериментальные [36].

На рисунке 9 приведена рассчитанная согласно уравнению (16) температурная зависимость коэффициента  $D_a(T,N)$ . Сравнение расчетных

данных с экспериментальными в диапазоне температуры  $300 \div 600$  °К [36] и справочным значением при температуре  $300$  °К [34] показало хорошее совпадение до температуры  $T = 500$  °К. В области более высоких температур  $T > 600$  °К сравнение не проводилось из-за отсутствия экспериментальных данных.

### 3.4 Электропроводность

В вычислениях температурной зависимости удельной электропроводности с учетом вырождения электронного газа также использовалась квантовая статистика (интегралы Ф-Д). Электронная и дырочная электропроводности определяются согласно [7] -[9]

$$\sigma_c(T, N) = qN_c(T)\mu_c(T, N), \quad c = e, h, \quad (17)$$

где  $\mu_c(T, N)$  – подвижность носителей (15).

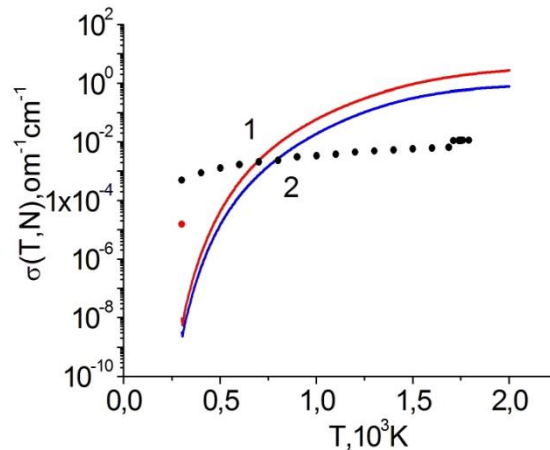


Рис. 10. Температурные зависимости электропроводности электронов (1), дырок (2), рассчитанные с квантовой статистикой. Данные экспериментов обозначены маркерами черного [38] цвета, красный маркер – справочное значение [34].

На рис. 10 показаны электронная и дырочная электропроводности кремния, рассчитанные с использованием квантовой статистики, маркерами показаны данные эксперимента и справочные значения.

В температурную зависимость электропроводности полупроводников основной вклад вносит концентрация носителей заряда  $N_e(T)$  и  $N_h(T)$ . Поэтому температурный ход электропроводности в основных чертах повторяет температурную зависимость концентрации носителей заряда (рис. 7) и качественно совпадает с экспериментальной зависимостью (рис. 10).

### 3.5 Теплопроводность электронного газа

Теплопроводность относится к важнейшим теплофизическим свойствам кремния. Для задач лазерного воздействия часто необходимы свойства электронной и фононной подсистем, а экспериментальные данные для теплопроводности, как правило, получены в условиях термодинамического

равновесия и дают значения полной теплопроводности кремния. Поэтому для определения теплопроводности электронов будем использовать теоретический подход.

Поскольку перенос тепловой энергии осуществляется свободными носителями заряда и фононами, полная теплопроводность  $\kappa$  определяется решеточной теплопроводностью  $\kappa_{lat}$  и теплопроводностью свободных носителей  $\kappa_e$  (электронов и дырок)

$$\kappa = \kappa_{lat} + \kappa_e \quad (18)$$

Теплопроводность твердотельных полупроводников, в отличие от металлов, определяется решеточной (фононной) теплопроводностью  $\kappa_{lat} > \kappa_e$ . Определение свойств фононной подсистемы является объектом молекулярно-динамического моделирования. Однако в рамках поставленной задачи для сравнения с данными эксперимента температурная зависимость  $\kappa_{lat}(T)$  (рис. 12) была оценена в соответствии с полуэмпирической зависимостью из [6]

$$\kappa_{lat} = 1585 \cdot T^{-1,23} \text{ Вт/смК}. \quad (19)$$

Теплопроводность электронов с учетом квантовой статистики определялась

$$\kappa_c = N(T) \mu_c(T, N) \frac{k_B^2 T}{e} \left[ 6 \frac{\mathcal{F}_2(\eta_c)}{\mathcal{F}_0(\eta_c)} - 4 \left( \frac{\mathcal{F}_1(\eta_c)}{\mathcal{F}_0(\eta_c)} \right)^2 \right]_{c=e,h}, \quad (20)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $N(T)$  – собственная концентрация носителей заряда (3),  $F_2(\eta_c)$ ,  $F_1(\eta_c)$ ,  $F_0(\eta_c)$ , – интегралы Ф-Д порядка  $j=0,1,2$  для электронов и дырок, для вычисления которых использовались аппроксимирующие функции из [30],

[31].  $\mu_c(T, N) = \mu_c^0(T) \frac{\mathcal{F}_0(\eta_c)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_c)} \Big|_{c=e,h}$  – подвижность носителей заряда (15), где  $\mu_c^0(T)$

– подвижность носителей для невырожденного полупроводника,  $F_{1/2}(\eta_c)$ , – интеграл Ф-Д порядка  $j=1/2$ .

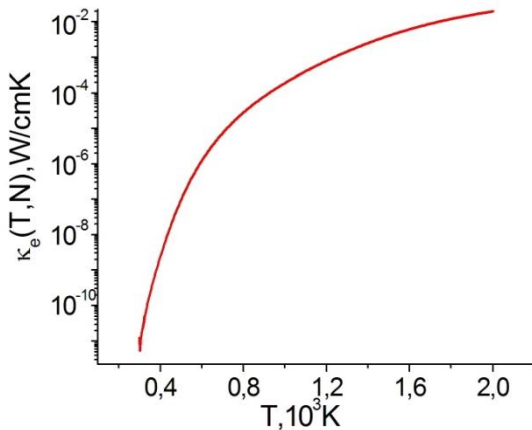


Рис. 11. Температурная зависимость теплопроводности электронов

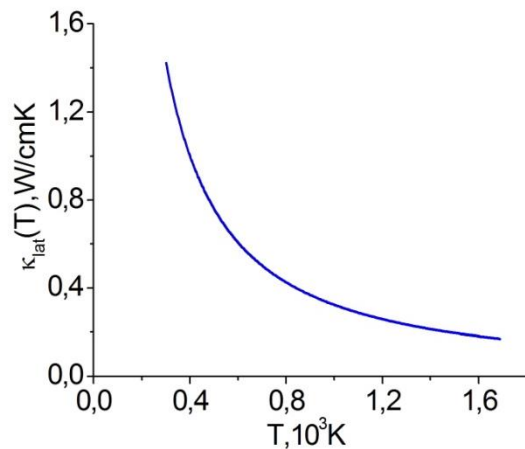


Рис. 12. Температурная зависимость фононной теплопроводности

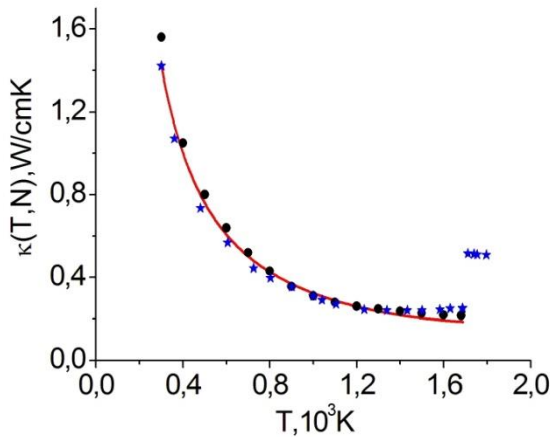


Рис. 13. Температурная зависимость полной теплопроводности (сплошная линия). Маркерами обозначены экспериментальные данные: синие [38], черные [12]

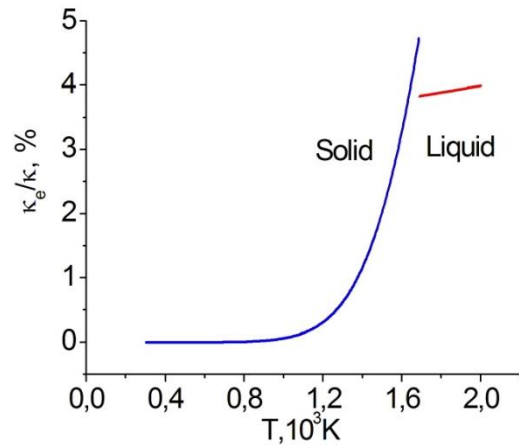


Рис. 14. Температурная зависимость процентного соотношения электронной и полной теплопроводностей

На рисунках 11-13 показаны температурные зависимости теплопроводности кремния: электронной (20) и фононной (19) подсистем и полной (18). На рис. 14 показана температурная зависимость электронного вклада в полную теплопроводность в процентном соотношении.

С ростом температуры теплопроводность электронов растет (рис. 11), а решеточная – уменьшается (рис. 12). Полученная зависимость полной теплопроводности (18) в диапазоне температур  $300 \text{ K} < T < T_m$  показывает хорошее совпадение с данными экспериментов (рис. 13). Из-за малой электропроводности кремния электронная доля теплопроводности в твердом состоянии мала и перед плавлением не превышает 4,7% от общей теплопроводности (синяя линия на рис. 14). При температуре, превышающей температуру плавления, равновесная теплопроводность скачком увеличивается (рис. 13). Мы располагаем только экспериментальными данными о равновесной теплопроводности расплавленного кремния [38]. Доля электронной теплопроводности в экспериментальном значении теплопроводности при  $T = 2000 \text{ K}$  составляет 4%.

### 3.6 Теплоемкость электронного газа

Полная теплоемкость электронного газа определяется как количество энергии, необходимой для повышения температуры на один градус Кельвина в системе, на единицу объема. Поскольку перенос тепловой энергии в твердом теле осуществляется свободными носителями заряда и фононами, полная теплоемкость  $C(T, N)$ , как и теплопроводность, определяется теплоемкостью решетки  $C_{lat}(T)$  и теплоемкостью свободных носителей  $C_e(T, N)$  (электронов и дырок).

$$C(T, N) = C_{lat}(T) + C_e(T, N) \quad (21)$$

Определение фононной теплоемкости является объектом молекулярно-динамического моделирования, но для сравнения с данными эксперимента температурная зависимость  $C_{lat}(T)$  была оценена в соответствии с формулой теплоемкости Эйнштейна [39]

$$C_{lat}(T) = 3R \left( \frac{\theta}{T} \right)^2 e^{\frac{\theta}{T}} / \left( e^{\frac{\theta}{T}} - 1 \right)^2, \quad (22)$$

где  $\theta$  – температура Дебая (для кремния  $\theta=640$  °К),  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Теплоемкость электронного газа определялась как температурная производная плотности энергии электронно-дырочных пар в системе.

$$C_e(T, N) = \partial U(T, N) / \partial T \quad (23)$$

Полная плотность энергии  $U(T, N)$  электронно-дырочных пар состоит из кинетической энергии и энергии запрещенной зоны, отнесенной к единице объема [6]

$$U(T, N) = N(T)E_g(T, N) + \frac{3}{2}N(T)k_B T \left[ \frac{\mathcal{F}_{3/2}(\eta_e)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_e)} + \frac{\mathcal{F}_{3/2}(\eta_h)}{\mathcal{F}_{1/2}(\eta_h)} \right], \quad (24)$$

где  $E_g(T, N)$  – ширина запрещенной зоны (12),  $N(T)$  – собственная концентрация носителей заряда (3),  $\mathcal{F}_{3/2}(\eta_e)$ ,  $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_e)$ ,  $\mathcal{F}_{3/2}(\eta_h)$ ,  $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_h)$  – интегралы Ф-Д порядка  $j=1/2$  и  $j=3/2$  для электронов и дырок. При моделировании использовались аппроксимирующие функции для этих интегралов из [30], [31].

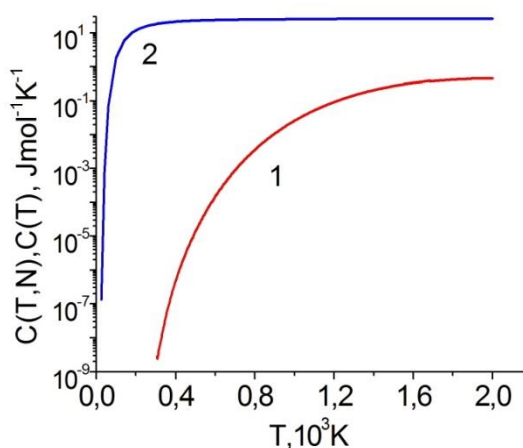


Рис. 15. Температурные зависимости теплоемкости электронов (1) и решетки (2)

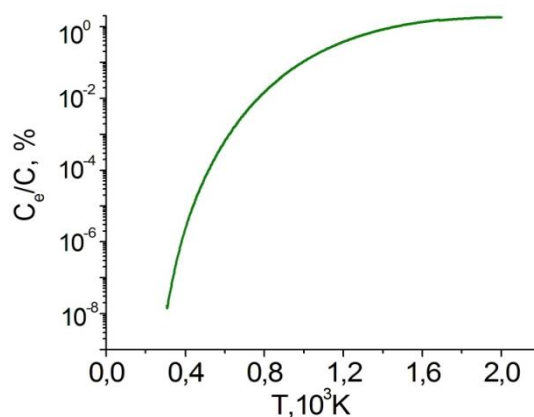


Рис. 16. Температурная зависимость процентного соотношения электронной и полной теплоемкости кремния

На рисунке 15 показаны температурные зависимости теплоемкости электронов (23) и решетки (22). Видно, что с ростом температуры электронная

составляющая теплоемкости приближается к фоновой, величина которой определяет полную теплоемкость кремния.

Вклад электронной составляющей в полную теплоемкость невелик, но с ростом температуры увеличивается и при температуре равновесного плавления составляет 1,4%, а при  $T=2000$  °К – 1,72% (рис. 16).

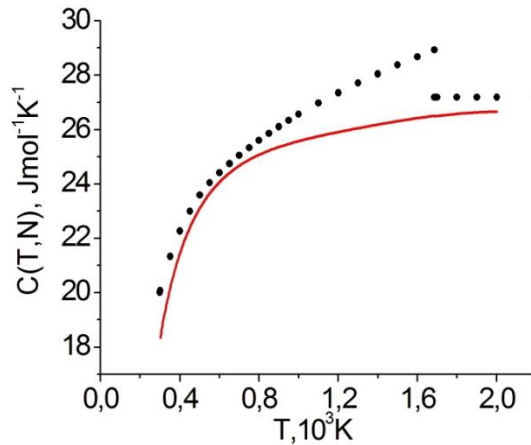


Рис. 17. Температурная зависимость полной теплоемкости (сплошная линия). Маркерами обозначены данные эксперимента [40].

На рисунке 17 показана температурная зависимость полной теплоемкости и данные эксперимента. Полученная температурная зависимость хорошо согласуется с экспериментальными данными в диапазонах температур  $300$  °К  $< T < 1000$  °К и  $T_m < T < 2000$  °К.

## 4. Заключение

Свойства электронной подсистемы кремния вычисляются в рамках континуального подхода, использующего квантовую статистику и интегралы Ферми–Дирака в произвольном диапазоне вырождения электронного газа при изменении температуры от 300 °К до 2000 °К. Вычислены такие характеристики электронной подсистемы кремния с собственной проводимостью, как концентрация и подвижность носителей, коэффициент амбиполярной диффузии, электропроводность, теплопроводность и теплоемкость. При моделировании свойств электронной подсистемы учитывается влияние сужения запрещенной зоны в условиях достаточно сильного нагрева собственного полупроводника и вырождения носителей. Получены следующие основные результаты.

1. Ширина запрещенной зоны и ее изменение является одной из наиболее важных фундаментальных характеристик кремния, влияющих существенным образом на концентрацию электронов и дырок и, тем самым, на все свойства и характеристики твердотельного полупроводника.

2. В условиях термодинамического равновесия вырождение носителей заряда в кремнии с собственной проводимостью начинается при температуре, которая значительно ниже равновесной температуры плавления. Это требует при определении свойств твердотельного кремния применения квантовой статистики и техники вычислений интегралов Ферми–Дирака.
3. Концентрации обоих видов носителей свидетельствуют об их сильном вырождении в температурном диапазоне  $T=1600\div 2000$  °К. Учет квантовых эффектов позволяет обратить ширину запрещенной зоны в нуль  $E_g(T, N) = 0$  в точке равновесной температуры плавления или её окрестности.
4. Значения концентраций находятся в интервале  $N(T) = 4.2 \times 10^{20} \div 10^{21}$  см<sup>-3</sup>, что на несколько порядков ниже значений, типичных для металлов  $10^{22} \div 10^{23}$  см<sup>-3</sup>, но являются типичными для полуметаллов с отрицательной шириной запрещенной зоны [9]. Таким образом, термодинамическое плавление собственного кристаллического кремния происходит в две стадии. Вначале расплав приобретает свойства полуметалла с растущей концентрацией носителей с ростом температуры, а затем при достижении определенной температуры  $T > T_m$  расплавленный кремний приобретает металлические свойства с постоянной концентрацией электронов и дырок.
5. Результаты вычислений сравниваются с результатами экспериментов. Сравнение расчетных данных с экспериментальными показало приемлемое количественное совпадение ширины запрещенной зоны, подвижностей электронов и дырок и коэффициента амбиполярной диффузии, теплопроводности, теплоемкости и качественное совпадение электропроводности.
6. Представлены численная и графическая информация о полученных свойствах и результаты сравнения с данными экспериментов.

### **Библиографический список**

- [1] Zywietz U., Evlyukhin A.B., Reinhardt C., Chichkov B.N. Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses // Nat. Commun., **5**, 3402 - 3405 (2014).
- [2] Menendez-Manjon A., Barcikowski S., Shafeev G.A., Mazhukin V.I., Chichkov B.N. Influence of beam intensity profile on the aerodynamic particle size distributions generated by femtosecond laser ablation // Laser and Particle Beams, **28**, 45–52 (2010).



- [3] Shi L., Tuzer T.U., Fenollosa R., Meseguer F. A new dielectric metamaterial building block with a strong magnetic response in the sub-1.5-micrometer region: silicon colloid nanocavities // *Adv. Mater.*, **24**, 5934–5938 (2012).
- [4] Mathis A., Courvoisier F., Froehly L., Furfaro L., Jacquot M., Lacourt P.A., Dudley J.M. Micromachining along a curve: Femtosecond laser micromachining of curved profiles in diamond and silicon using accelerating beams // *Appl. Phys. Lett.*, **101** (7), 071110 (2012).
- [5] Lietoila A., Gibbons J.F. Computer modeling of the temperature rise and carrier concentration induced in silicon by nanosecond laser pulses // *J. Appl. Phys.*, **53** (4), 3207-3213 (1982).
- [6] Van Driel H.M. Kinetics of high-density plasmas generated in Si by 1.06- and 0.53-mm picosecond laser pulses // *Phys. Rev. B*, **35**, 8166 – 8176 (1987).
- [7] S.M. Sze, K.Ng. Kwok. *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, (2007).
- [8] Blakemore J.S. *Solid State Physics*, 2nd ed., Cambridge University Press, New York, (1985).
- [9] Neil W., Ashcroft N., Mermin D. *Solid state physics* // Saunders College, Vol. 1, (1976).
- [10] Sokolowski-Tinten K., Von der Linde D. Generation of dense electron-hole plasmas in silicon // *Phys. Rev. B*, **61** (4), 2643-2650 (2000).
- [11] Nakamura S., Hibiya T. Thermophysical properties data on molten semiconductors // *International Journal of Thermophysics*, **13** (6), 1061–1084 (1992).
- [12] Glassbrenner C.J., Slack Glen A. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3K to the Melting Point // *Phys. Rev.*, **134** (4a), A1058-A1069 (1964).
- [13] Zhang Shi-Liang, Zhang Xin-Yu, Wang Lin-Min, Qi Li, Zhang Su-Hong, Zhu Yan, Liu Ri-Ping. Voronoi Structural Evolution of Bulk Silicon upon Melting Chin // *Phys. Lett.*, **28**, 067104 (2011).
- [14] Macfarlane G.G., McLean T.P., Quarrington J.E., Roberts V. Fine Structure in the Absorption-Edge Spectrum of Si // *Phys. Rev.*, 111 (5), 1245-1254 (1958).
- [15] Haynes J.R., Lax M., Flood W.F. Analysis of intrinsic recombination radiation from silicon and germanium // *J. Phys. Chem. Solids*, **8**, 392-396 (1959).
- [16] Емельянов А.М. Определение изменений ширины запрещенной зоны непрямозонных полупроводников по спектрам краевой люминесценции // *Письма в ЖТФ*, **35** (6), 9-16, (2009).
- [17] Alex V., Finkbeiner S., Weber J. Temperature dependence of the indirect energy gap in crystalline silicon // *J. Appl. Phys.*, **79** (9), 6943-6946 (1996).
- [18] Wagner Joachim, Del Alamo Jesus A. Band - gap narrowing in heavily doped silicon: A comparison of optical and electrical data // *J. Appl. Phys.*, **63** (2), 425-429 (1988).

- [19] Olego Diego, Cardona Manuel. Photoluminescence in heavily doped GaAs. I. Temperature and hole-concentration dependence // *Phys. Rev. B*, **22** (2), 886-893 (1980).
- [20] Borghs G., Bhattacharyya K., Denette K., Van Mieghem P., Mertens R. Band-gap narrowing in highly doped n and p-type GaAs studied by photoluminescence spectroscopy // *J. Appl. Phys.*, **66** (9), 4381-4386 (1989).
- [21] Bhosale J., Ramdas A.K., Burger A., Munoz A., Romero A.H., Cardona M., Lauck R., Kremer R.K. Temperature dependence of band gaps in semiconductor: electron-phonon interaction // *Phys. Rev. B*, **86**, 195208 (1-10) (2012).
- [22] Klenner M., Falter C., Ludwig W. Temperature dependence of band gaps in Si and Ge in the quasi-ion model // *Ann. Physik*, **1**, 34-38 (1992)
- [23] Varshni Y.P. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors // *Physica*, **34** (1), 149-154 (1967).
- [24] Goni A.R., Syassen K., Strossner K., Cardona M. Pressure dependence of the direct optical gap and refractive index of Ge and GaAs // *Semicond. Sci. Technol.*, **4**, 246-247 (1989).
- [25] Кононенко В.К., Луценко Е.В. Сужение ширины запрещенной зоны нитрида галлия // *Актуальные проблемы физики твердого тела, сб. докл. Междунар. научн. конф., Минск, (2009).*
- [26] Jain S.C., McGregor J.M., Roulston D.J. Band-gap narrowing in novel III-V semiconductors // *J. Appl. Phys.*, **68** (7), 3747-3749 (1990).
- [27] Jain S.C., Roulston D.J. A simple expression for band gap narrowing (BGN) in heavily doped Si, Ge, GaAs and Ge,Si,  $\alpha$ -x strained layers // *Solid-State Electronics*, **34** (5), 453-465 (1991).
- [28] Jain S.C., McGregor J.M., Roulston D.J., Balk P. Modified Simple Expression For Bandgap Narrowing in n-type GaAs // *Solid-State Electronics*, **35** (5), 639-642 (1992).
- [29] Lanyon H.D.P., Tuft R.A. Bandgap Narrowing in Moderately to Heavily Doped Silicon // *IEEE Transactions on Electron Devices*, **ED-26** (7), (1979).
- [30] Koroleva O.N., Mazhukin A.V., Mazhukin V.I., Breslavskiy P.V. Approximation of Fermi-Dirac integrals of different orders used to determine the thermal properties of metals and semiconductors // *Mathematica Montisnigri*, **35**, 37-53 (2016).
- [31] Koroleva O.N., Mazhukin A.V., Mazhukin V.I., Breslavskiy P.V. Analytical Approximation of the Fermi-Dirac Integrals of Half-Integer and Integer Orders, // *Mathematical Models and Computer Simulations*, **9**(3), 383–389 (2017).
- [32] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы, М.: Физматлит, (1989).
- [33] Berz F., Cooper R.W., Fagg S. Recombination in the end regions of pin diodes // *Solid-State Electronics*, **22**, 293-301 (1979).
- [34] Физические величины, Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова, М.: Энергоатомиздат, (1991).
- [35] Кардона Ю.П. Основы физики полупроводников, Физматлит, (2002)

- [36] Batista J., Mandelis A., Shaughnessy D. Temperature dependence of carrier mobility in Si wafers measured by infrared photocarrier radiometry // *Appl. Phys. Lett.*, **82** (23), 4077-4079 (2003).
- [37] Meyer J.R., Kruer M.R., Bartoli F.J. Optical heating in semiconductors: Laser damage in Ge, Si, InSb, and GaAs // *J. Appl. Phys.*, **51**, 5513-5522 (1980)
- [38] Магомедов Я.Б., Гаджиев Г.Г. Высокотемпературная теплопроводность кремния в твердом и жидком состояниях // *Теплофизика высоких температур*, **46** (3) (2008).
- [39] Стилбанс Л.С. Физика полупроводников, М.: Сов. радио, (1967)
- [40] Desai P.D. Thermodynamic properties of Iron and Silicon // *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **15**(3), 967-983 (1986).

## Оглавление

1. Введение.....	3
2. Моделирование свойств электронной подсистемы кремния. ....	4
2.1. Закон распределения носителей. ....	4
2.2. Запрещенная зона. ....	6
2.3. Концентрация носителей и энергия уровня Ферми.....	9
3. Результаты моделирования .....	13
3.1. Запрещенная зона и концентрация носителей. ....	13
3.2. Подвижность носителей .....	15
3.3. Коэффициент амбиполярной диффузии .....	17
3.4. Электропроводность .....	18
3.5. Теплопроводность электронного газа.....	18
3.6. Теплоемкость электронного газа.....	20
4. Заключение .....	22
Библиографический список.....	23