

телях, а также связь кинетики инерционного рекомбинационного свечения с временами жизни свободных электронов и дырок.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Барышников В. И., Мартынович Е. Ф., Колесникова Т. А., Щепина Л. П. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1505—1507.
- [2] Кузнецов А. И., Намозов Б. Р., Мюрк В. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3030—3037.
- [3] Гаврилов В. В., Дейч Р. Г., Ситдинов А. М. // Изв. АН ЛатвССР, сер. физ. и техн. наук. 1987. № 5. С. 29—35.
- [4] Алукер Э. Д., Гаврилов В. В., Дейч Р. Г., Чернов С. А. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 2. С. 116—117.
- [5] Дейч Р. Г. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2542—2544.
- [6] Алукер Э. Д., Гаврилов В. В., Дейч Р. Г., Ситдинов А. М., Чернов С. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 5. С. 1470—1474.

Институт физики АН ЛатвССР  
Саласпилс

Поступило в Редакцию  
19 сентября 1988 г.

УДК 592.31

© Физика твердого тела, том 32, № 5, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, № 5, 1990

## МЕХАНИЗМ ВОЗНИКНОВЕНИЯ АНОМАЛЬНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В АМОРФНОМ КРЕМНИИ

*В. Н. Новиков, А. П. Соколов, О. А. Голикова,  
В. Х. Кудоярова, М. М. Мездрогина*

Известно [1], что в большинстве аморфных материалов коэффициент межзонного оптического поглощения  $\alpha$  изменяется по квадратическому закону

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/2} = \beta(\hbar\omega - E_{0,2}). \quad (1)$$

Однако для аморфного кремния спектральная зависимость  $\alpha$  лучше аппроксимируется кубической зависимостью [2, 3]

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/3} = \gamma(\hbar\omega - E_{0,3}). \quad (2)$$

Причина аномального поведения  $\alpha(\hbar\omega)$  до конца не выяснена. В данной работе проведено исследование  $\alpha$  образцов аморфного кремния. Обнаружена зависимость коэффициента  $\gamma$  от условий приготовления пленок и предложена модель, объясняющая возникновение зависимости (2).

Были исследованы две группы образцов — полученные методом понно-плазменного распыления при температуре подложки  $T_s = 30 \div 50^\circ\text{C}$  ( $a\text{-Si}$ ) и методом ВЧ-разложения силаносодержащей газовой смеси при  $T_s = 320^\circ\text{C}$  ( $a\text{-Si} : \text{H}$ ). В дальнейшем образцы подвергались термическому отжигу в вакууме при температурах 200—500  $^\circ\text{C}$ , что приводило к изменению их оптических свойств. Значения  $\alpha$  рассчитывались по измеренным спектрам пропускания и отражения.

На рис. 1 приведены спектры оптического поглощения образцов  $a\text{-Si}$  и  $a\text{-Si} : \text{H}$  в координатах  $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$  и  $(\alpha\hbar\omega)^{1/3}$ . Отжиг образцов  $a\text{-Si}$  приводит к их просветлению (увеличению  $E_g$ ), что связано с упорядочением структуры пленок, напыленных при низких  $T_s$ . Термическая обработка  $a\text{-Si} : \text{H}$ , наоборот, сопровождается потемнением образцов (уменьшением  $E_g$ ), что, по-видимому, обусловлено эффузией водорода. Анализ спектров в квадратичной аппроксимации (1) показывает, что для образцов, по-

лученных в указанных различных условиях, коэффициент  $\beta \approx 700 \pm 30$  (см·эВ) $^{-1/2}$ , а  $E_{02}$  изменяется от 1.44 до 1.74 эВ. Эти результаты согласуются с данными [4]. В то же время при аппроксимации (2) наблюдаются не только изменения  $E_{03}$  от  $\sim 1.1$  до  $\sim 1.6$  эВ, но и изменения коэффициента  $\gamma$  от  $\sim 60$  до  $\sim 80$  (эВ $^2$ ·см) $^{-1/3}$  (рис. 1).

Полученные результаты можно объяснить, предположив, что в каждом локальном участке образца выполняется характерная для аморфных

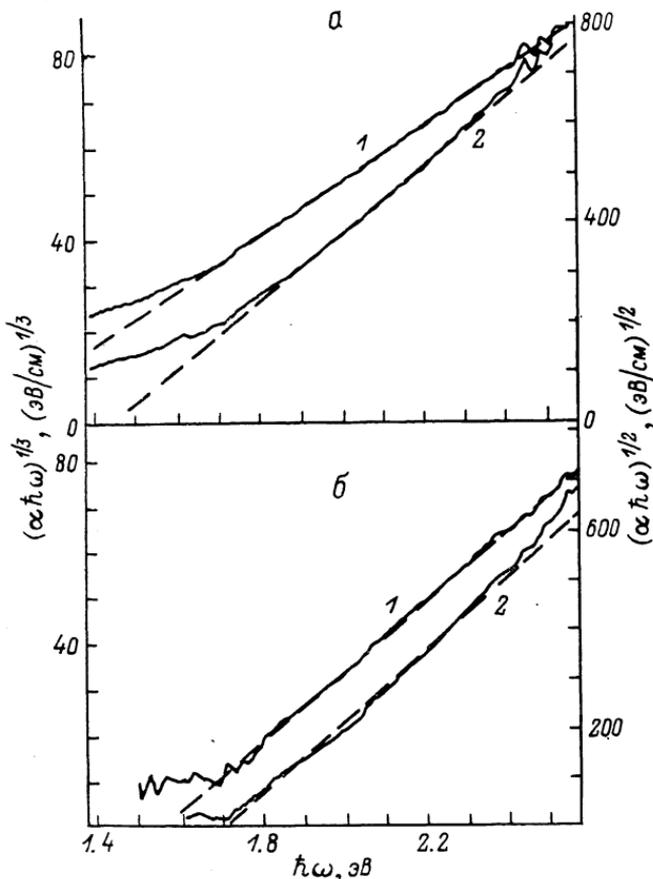


Рис. 1. Спектральная зависимость оптического поглощения в аппроксимации (2) (1) и (1) (2) в образцах  $a$ -Si (а) и  $a$ -Si : H (б).

материалов спектральная зависимость  $\alpha = (\beta^2/\hbar\omega) (\hbar\omega - E_g)^2$ , но благодаря структурным флуктуациям  $E_g$  пространственно флуктуирует. Тогда коэффициент поглощения определяется выражением

$$\alpha = \frac{\beta^2}{\hbar\omega} \int_0^{\hbar\omega} (\hbar\omega - E_g)^2 P(E_g) dE_g, \quad (3)$$

где  $P(E_g)$  — распределение по  $E_g$ . Аппроксимируя для простоты  $P(E_g)$  ступенчатым распределением  $P(E_g) = 1/(E_{g_{\max}} - E_{g_{\min}}) \equiv 1/\Delta E_g$ , получаем кубическую зависимость (2)

$$\alpha = (\beta^2/3\hbar\omega\Delta E_g) (\hbar\omega - E_{g_{\min}})^3, \quad (4)$$

в которой  $E_{03}$  — минимальное значение  $E_g$ , а наклон зависимости (2) равен  $\gamma = (\beta^2/3\Delta E_g)^{1/3}$ . Для оценки  $\gamma$  необходимо знать амплитуду флуктуаций  $E_g$ .

Учитывая, что значение  $E_{02}$  соответствует некоторому среднему значению  $E_g$ , получим  $\Delta E_g \approx 2(E_{02} - E_{03})$ . В этом случае расчетная и эксперимен-

тальная зависимости  $\gamma$  от разности  $E_{02}-E_{03}$  хорошо согласуются между собой (рис. 2). Небольшое количественное расхождение может быть устранено, если предположить, что распределение  $P(E_g)$  имеет некоторые хвосты, составляющие  $\sim 10-15\%$  от всего объема (рис. 2). Подчеркнем, что спектральная зависимость (2) была обнаружена и в многокомпонентных халькогенидных стеклах [1]. По-видимому, из-за сложного химического состава в этих материалах возникают значительные флуктуации  $E_g$ , что и приводит к кубической зависимости  $\alpha(\hbar\omega)$ .

Таким образом, в рамках предложенной модели можно объяснить аномальную спектральную зависимость коэффициента межзонного оптического поглощения в  $a\text{-Si}$  и  $a\text{-Si:H}$ . Модель позволяет получить количественное согласие с экспериментом и из анализа спектров оценить амплитуду флуктуаций ширины запрещенной зоны. Последняя зависит от условий приготовления образцов — максимальная величина  $\sim 0.3$  эВ наблюдается в свеженапыленной пленке  $a\text{-Si}$ , последующий отжиг ко-

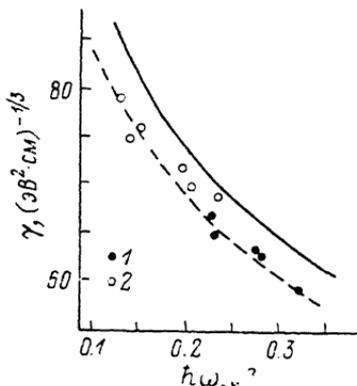


Рис. 2. Зависимость  $\gamma$  от разности  $E_{02}-E_{03}$  для образцов  $a\text{-Si}$  (1) и  $a\text{-Si:H}$  (2).

Сплошная линия — расчетная зависимость  $\gamma$ , штриховая — скорректированная расчетная зависимость  $\gamma$ .

торой приводит к понижению флуктуаций до  $\sim 0.2$  эВ; в свеженапыленной пленке  $a\text{-Si:H}$  наблюдается минимальная амплитуда флуктуаций  $\Delta E_g \approx 0.1$  эВ, которая возрастает при эффузии водорода.

#### Список литературы

- [1] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1982. Т. 1. 368 с.
- [2] Klazes R. H. e. a. // Phil. Mag. В. 1982. V. 45. N 4. P. 377—383.
- [3] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Ч. II / Под ред. Дж. Джоунупулоса и Дж. Люковски. М.: Мир, 1988. 447 с.
- [4] Cody G. D. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 20. P. 1480—1483.

Институт автоматизации и электрометрии  
СО АН СССР  
Новосибирск

Поступило в Редакцию  
27 сентября 1989 г.

## СПЕКТР ДИПОЛЬНО-АКТИВНЫХ ФОНОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$

А. В. Баженов

Вопрос о полном спектре оптических фононов в иттрий-бариевом купрате (123) до настоящего времени остается дискуссионным. Это обусловлено тем, что измерение спектра дипольно-активных фононов методом ИК спектроскопии проводилось на керамиках либо порошках, что не позволяет провести корректные исследования поляризационных особенностей оптических спектров, дающих информацию о симметрии колебаний. Результаты таких экспериментальных исследований [1-6] и выполненных на основе их обобщения теоретических расчетов [1, 7] приведены в таблице. Имеется удовлетворительное согласие между результатами различных ав-