

Модель квантовых ям и край оптического поглощения в структурно-неоднородных сплавах на основе $a\text{-Si:H}$

© Б.Г. Будагян, А.А. Айвазов, Д.А. Стряхилев, Е.М. Соколов

Московский институт электронной техники,
103498 Москва, Россия

(Получена 10 июня 1997 г. Принята к печати 2 октября 1997 г.)

Мы исследовали микроструктуру и край оптического поглощения пленок $a\text{-Si:H}$ и сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ ($x = 0.0\text{--}0.72$, полученных разложением в высокочастотном тлеющем разряде разбавленных водородом моносилана и смеси $\text{SiH}_4 + \text{NH}_3$ соответственно). Структурно-неоднородные пленки с оптоэлектронными характеристиками "приборного качества" были получены при повышенных скоростях роста (до $8 \text{ \AA}/\text{с}$). Как установлено методами атомной силовой микроскопии и спектроскопии ИК поглощения, характерным элементом их микроструктуры являются островки диаметром $\sim 500 \text{ \AA}$, границы которых образованы скоплениями атомов водорода (в случае $a\text{-Si:H}$) или водорода и азота (в случае $a\text{-SiN}_x\text{:H}$). При этом оптическая ширина запрещенной зоны $a\text{-Si:H}$ ($a\text{-SiN}_x\text{:H}$) определяются концентрациями связей SiH (SiN) в объеме островков и не чувствительна к изменению содержания водорода (азота) на границах островков. Этот результат находит свое объяснение в рамках модели квантовых ям, учитывающей характерные размеры микроструктуры, образованной атомами водорода либо азота.

1. Введение

Поскольку гидрированный аморфный кремний ($a\text{-Si:H}$) и сплавы на его основе являются весьма привлекательными материалами для создания целого ряда электронных устройств (солнечных элементов, тонкопленочных полевых транзисторов, фотоприемников, светоизлучающих приборов и др.), их физические свойства были предметом многочисленных исследований. Особое внимание исследователей уделялось взаимосвязи между структурными особенностями и распределением электронных состояний. Это объясняется как стремлением сформировать наиболее подробное описание ("оптимального материала" для важнейших практических приложений (солнечные элементы, тонкопленочные полевые транзисторы, различные фотоприемные устройства), так и тем обстоятельством, что $a\text{-Si:H}$ вследствие его доступности и возможности управления свойствами материала в процессе получения является чрезвычайно удобным объектом для изучения закономерностей формирования электронного спектра в аморфных полупроводниках.

Как было установлено в ряде работ [1–4], существует несколько факторов, которые влияют на положение и форму края оптического поглощения в $a\text{-Si:H}$. Наиболее важные из них — структурный беспорядок [1,2], проявляющий себя в искажении длин и углов связей в аморфной кремниевой сетке по сравнению с идеальной алмазоподобной структурой, и влияние атомов другого сорта, таких как водород, углерод, азот и др. [3,4]. Однако, как было установлено, зависимость формы края оптического поглощения от этих обусловленных структурой факторов все же не в состоянии описать все многообразие существующих экспериментальных данных.

Наиболее простая качественная модель, позволяющая воспроизвести основные особенности электронного спектра $a\text{-Si:H}$ исходя из композиционной неоднородно-

сти материала, — модель квантовых ям, предложенная Х. Бродски [5]. Количественные расчеты, сделанные на основе этой модели [6,7], позволили получить хорошее согласие параметров распределения электронных состояний вблизи краев зон и в запрещенной зоне с экспериментальными результатами, однако они не учитывали возможность существования в $a\text{-Si:H}$ и родственных сплавах различных видов микроструктуры, образованной такими атомами, как водород, углерод, азот и т. д.

В настоящей работе мы исследовали взаимосвязь между величиной оптической ширины запрещенной зоны и микроструктурой $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ и привели описание результатов в рамках модели квантовых ям, модифицированной для того, чтобы учесть характерные размеры микроструктуры, образованной атомами водорода и азота.

2. Эксперимент

Пленки $a\text{-Si:H}$ были получены высокочастотным (ВЧ) разложением моносилана, разбавленного водородом в соотношении $10\%\text{SiH}_4 + 90\%\text{H}_2$. Частота, на которой возбуждался тлеющий разряд, составляла 13.56 МГц .

Для того чтобы получить пленки с различным содержанием водорода и различной микроструктурой, мы проводили осаждение при разных сочетаниях мощности разряда, давления и расхода газа, которые изменялись в следующих пределах: удельная мощность ВЧ разряда, $W = 0.10 \div 0.18 \text{ Вт}/\text{см}^2$; давление, $P = 1 \div 2.5 \text{ мм.рт.ст.}$; расход газа, $Q = 30 \div 100 \text{ см}^3/\text{мин}$. Температура подложки поддерживалась на постоянном уровне 300°C .

Эти технологические режимы обеспечивали осаждение пленок толщиной $0.8\text{--}1.4 \text{ мкм}$ при скорости роста $3.3\text{--}7.3 \text{ \AA}/\text{с}$.

Образцы $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ были получены разложением смеси ($10\%\text{SiH}_4 + 90\%\text{H}_2 + \text{NH}_3$). Величины температуры подложки, давления и удельной мощности ВЧ

(13.56 МГц) разряда составляли 220°C, 0.38 мм.рт.ст. и 0.3 Вт/см² соответственно. Осаждение проводилось при различных значениях парциального давления аммиака (0–0.03 мм.рт.ст.), что обеспечивало получение пленок $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ состава ($x = 0\text{--}0.72$).

В качестве подложек использовались пластины из стекла и монокристаллического Si (КДБ-10).

Морфология поверхности пленок изучалась с использованием атомного силового микроскопа (АСМ) производства фирмы NT-MDT (Россия). Кантилевер микроскопа с радиусом кривизны острия 20 нм был изготовлен из нитрида кремния. Измерения проводились в контактном режиме с разрешением 8–25 Å и скоростью сканирования 100000–300000 Å/с [8].

Состав пленок и локальные конфигурации, образованные атомами водорода и азота, определялись методом инфракрасной (ИК) спектроскопии. ИК спектры пленок на монокристаллических кремниевых подложках измерялись на двухлучевом спектрометре SPECORD-M80. Расчет состава пленок проводился согласно методике, предложенной в работе [9]. Полоса поглощения с центром 630 см⁻¹ использовалась для оценки концентрации связанного водорода, а разложение полосы с главным пиком при 2000 см⁻¹ на два пика с частотой 2000 и 2100 см⁻¹ позволило оценить так называемый микроструктурный параметр $R = I_{2100}/(I_{2000} + I_{2100})$, где I_{2000} и I_{2100} обозначают интегралы поглощения, взятые по соответствующим пикам. Значения концентрации водорода в форме одиночных и кластерированных связей SiH были рассчитаны исходя из общего содержания водорода и величины микроструктурного параметра R [10].

ИК спектры сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ согласно идентификации, приведенной в работах [11,12], содержали особенности, соответствующие связям SiH, SiN и NH. Для определения общей концентрации азота в пленках использовались интенсивности пиков при 850 и 3350 см⁻¹ [13].

Спектры оптического пропускания пленок $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ были измерены на двухлучевом спектрофотометре SPECORD-M40 в диапазоне длин волн 300–900 нм. По этим данным рассчитывались спектры поглощения образцов, соответствующие межзонным переходам, и методом Тауца оценивались значения оптической ширины запрещенной зоны.

3. Результаты

Пленки $a\text{-Si:H}$. Типичное изображение поверхности пленки $a\text{-Si:H}$ полученное в атомном силовом микроскопе, показано на рис. 1. Ясно видно, что пленка имеет неоднородную структуру, в которой можно различить островки и межостровковые границы. Характерные размеры этих островков составляют от 300 до нескольких тысяч Å.

Зависимости оптической ширины запрещенной зоны, E_G , от общего содержания водорода, [H], а также зависимости E_G от концентраций одиночных ([SiH]) и

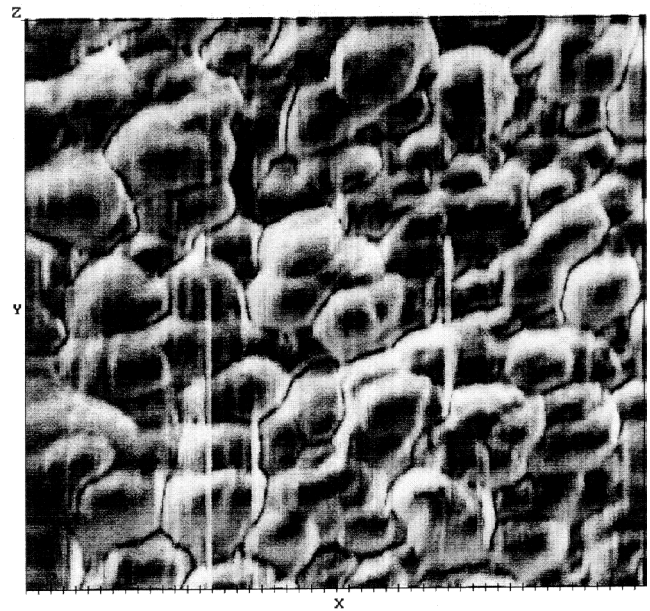


Рис. 1. Типичное изображение поверхности пленки $a\text{-Si:H}$, полученное методом атомной силовой микроскопии.

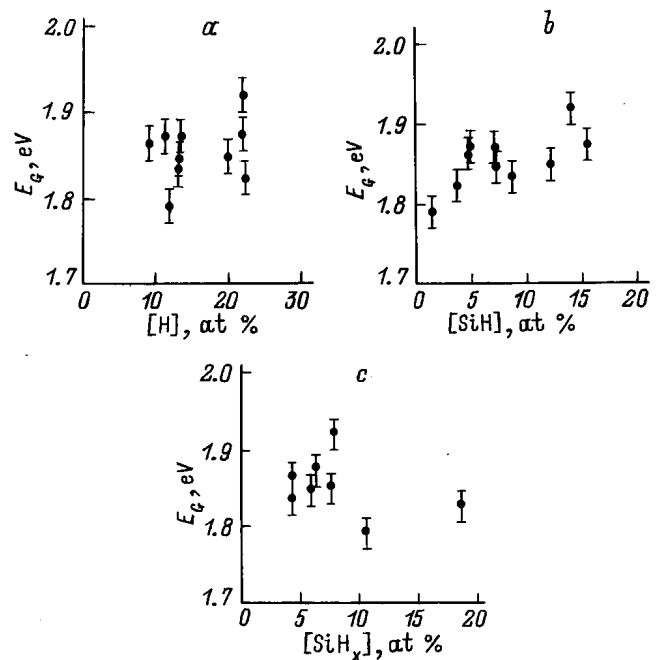


Рис. 2. Зависимости оптической ширины запрещенной зоны, E_G , от общего содержания водорода [H] (a), а также концентраций одиночных (b) и кластерированных (c) связей SiH.

кластерированных ([SiH_x]) связей SiH приведены на рис. 2. Как видно, монотонная зависимость наблюдается только на рис. 2, b, где E_G показана как функция [SiH]. В то время как на рис. 2, a, так и на рис. 2, c, где приведены зависимости E_G от [H] и [SiH_x], корреляция между сопоставляемыми величинами отсутствует.

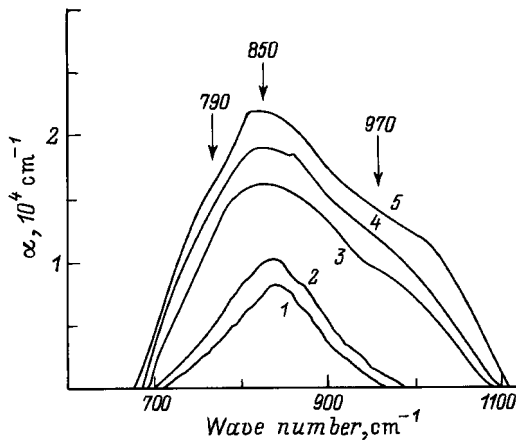


Рис. 3. Полосы ИК поглощения, обусловленные продольными колебаниями связей SiN в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ с различным содержанием азота. $[N]/[Si]$: 1 — 0.13, 2 — 0.17, 3 — 0.53, 4 — 0.62, 5 — 0.72.

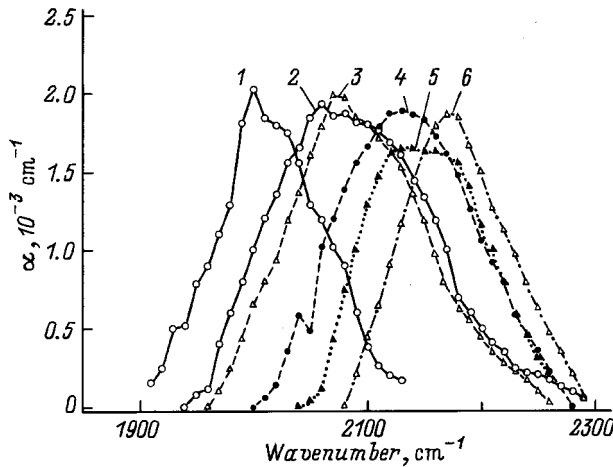


Рис. 4. Полосы ИК поглощения, обусловленные продольными колебаниями связей SiH в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ с различным содержанием азота. $[N]/[Si]$: 1 — 0, 2 — 0.13, 3 — 0.17, 4 — 0.53, 5 — 0.62, 6 — 0.72.

Пленки $a\text{-SiN}_x\text{:H}$. Как было установлено в [12], в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ возможны несколько вариантов локального окружения связей SiN с различными частотами продольных колебаний. Соответствующие полосы ИК поглощения приведены на рис. 3. В спектрах всех образцов доминирует сильный симметричный пик с волновым числом 850 см^{-1} . В спектрах двух образцов с минимальным содержанием азота ($x = 0.13$ и $x = 0.17$) этот пик является единственной особенностью, наблюдаемой в диапазоне $700\text{--}1000\text{ см}^{-1}$. Увеличение концентрации азота сопровождается появлением особенностей при 790 и 970 см^{-1} , соответствующих атому азота в окружении трех атомов Si и кластерам Si_4N_9 , что приводит к изменению формы полосы и делает ее асимметричной.

Для сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ наблюдается также увеличение частоты главного пика полосы продольных колебаний

связей SiH с увеличением содержания азота (рис. 4). Этот факт вместе с присутствием сильного пика при 850 см^{-1} (рис. 3) означает, что для исследованных пленок $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ характерна такая локальная структура, где атомы азота и водорода связаны с одним и тем же атомом кремния [12].

Зависимость оптической ширины запрещенной зоны от содержания азота в пленках $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ приведена на рис. 5. Для сравнительно небольшой концентрации азота ($x \leq 0.17$) оптическая ширина запрещенной зоны в пределах погрешности ее определения не отличается от величины, соответствующей пленке $a\text{-Si:H}$, полученной при тех же значениях мощности разряда, давления и температуры подложки ($1.87 \pm 0.02\text{ эВ}$). В то же время для $x = 0.53\text{--}0.72$ E_G увеличивается от 2.11 до 2.72 эВ .

Микроструктура пленок $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, полученных в аналогичных технологических условиях, уже была исследована нами ранее с использованием метода просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Описание методики эксперимента и сами изображения, полученные методом ПЭМ, приведены в работе [14]. Как для пленок $a\text{-Si:H}$, так и для $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ наблюдается неоднородная структура с отчетливо оформленными "островками". При этом характерные размеры ($400\text{--}500\text{ \AA}$) и форма островков подобны тем, что наблюдаются на изображении поверхности, полученном методом АСМ (рис. 1). Как было установлено, островки имеют более высокую плотность и образованы преимущественно связями Si-Si, в то время как водород концентрируется преимущественно по границам этих островков, где образует полигидридные конфигурации и кластерированные связи SiH. Таким образом, в случае $a\text{-Si:H}$ величина $[\text{SiH}]$ дает концентрацию связанного водорода в объеме островков, в то время как $[\text{SiH}_x]$ должна быть приписана водороду на внутренних границах.

Модификация микроструктуры в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ промежуточного состава ($x = 0.13; 0.17$) была связана прежде всего с уменьшением содержания водорода на

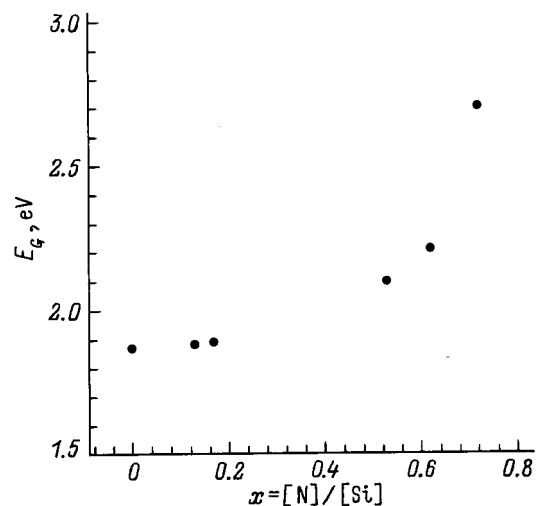


Рис. 5. Зависимость оптической ширины запрещенной зоны от содержания азота в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$.

внутренних границах. Принимая во внимание пространственную корреляцию между связями SiH и SiN, а также упомянутые выше результаты ПЭМ, мы должны приписать полосу ИК поглощения с частотой 850 см^{-1} (продольные колебания связей SiN) и сдвинутый в сторону высоких частот пик, соответствующий продольным колебаниям связей SiH, атомам N и H, находящимся вблизи внутренних границ. В то же время за поглощение при 790 и 970 см^{-1} ответственны атомы азота, расположенные в объеме островков. Таким образом, связи SiN в сплавах с невысоким содержанием азота ($x = 0.13$ и 0.17) расположены преимущественно по границам зерен, в то время как в сплавах с более высоким содержанием азота связи SiN появляются также и в объеме материала.

4. Модель квантовых ям

Схема энергетических зон $a\text{-Si:H}$, соответствующая модели квантовых ям, показана на рис. 6. Согласно [5], материал состоит из широкозонной фазы, соответствующей областям с повышенным содержанием водорода ($a\text{-SiH}_x$), и узкозонной фазы, представляющей собой практически "чистый" аморфный кремний. Электроны с энергиями от $E_C(a\text{-Si})$ до $E_C(a\text{-Si}) + V_e$ и дырки с энергиями от $E_V(a\text{-Si}) - V_h$ до $E_V(a\text{-Si})$ локализованы, где V_e и V_h — значения соответствующих потенциальных барьеров.

Величины ΔE_C и ΔE_V обозначают энергии стационарных состояний электронов и дырок в потенциальных ямах и зависят от эффективных масс частиц, величин соответствующих потенциальных барьеров и размеров потенциальных ям. Согласно модели Бродски [5], край оптического поглощения определяется переходами между парами состояний с энергиями $E_V(a\text{-Si}) - V_h$ и $E_C(a\text{-Si}) + \Delta E_C$ или $E_V(a\text{-Si}) - \Delta E_V$ и $E_C(a\text{-Si}) + V_e$. Таким образом мы можем использовать величину энергии стационарного состояния, усредненной по ансамблю потенциальных ям, чтобы рассмотреть зависимость оптической ширины запрещенной зоны от содержания водорода

и характера его распределения. Поскольку положение края валентной зоны намного более чувствительно к содержанию водорода в $a\text{-Si}$, чем положение края зоны проводимости, мы ограничимся рассмотрением поведения среднего значения энергии стационарного состояния для дырок.

Чтобы рассмотреть зависимость оптической ширины запрещенной зоны от содержания водорода, необходимо рассчитать следующую величину:

$$\langle \Delta E_V \rangle(x) = \int_0^{\infty} \Delta E_V(V) f_v(V, x) dV, \quad (1)$$

где $\langle \Delta E_V(x) \rangle$ — энергия стационарного уровня дырок, усредненная по ансамблю потенциальных ям, $\Delta E_V(V)$ — энергия стационарного состояния, соответствующая объему V потенциальной ямы, $f_v(V, x)$ — плотность вероятности для распределения потенциальных ям, зависящая от концентрации водорода x . Уравнение (1) означает, что чувствительность оптической ширины запрещенной зоны к изменению содержания водорода в пленке задается распределением объемов квантовых ям. Используя результат работы [7], запишем выражение для функции $f_v(V, x)$ в случае однородного распределения водородных кластеров:

$$f_v(V, x) = \begin{cases} \lambda(x) \exp(-\lambda(x)V), & V \geq 0, \\ 0, & V < 0. \end{cases} \quad (2)$$

В формуле (2) $\lambda(x)$ — среднее число SiH-кластеров на единичный объем при данной концентрации водорода $x = [\text{H}]/[\text{Si}]$. Функция $\lambda(x)$ определяется размерами водородных кластеров и монотонно возрастает с увеличением x .

Средний объем потенциальной ямы для распределения (2) определяется $\lambda(x)$:

$$\langle V \rangle(x) = \frac{1}{\lambda(x)}. \quad (3)$$

Далее мы предлагаем некоторую модификацию подхода, предложенного в [15], чтобы учесть влияние размеров водородной микроструктуры. Соотношение (3) будет использовано, чтобы связать функцию $\lambda(x)$ с характерными размерами экспериментально наблюдаемой микроструктуры.

Предположим, что

$$\lambda(x) = \gamma x \quad (4)$$

— линейная зависимость, где γ — коэффициент пропорциональности. Авторы [7], ссылаясь на известные результаты исследования ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [16], предположили, что преобладающей формой связывания водорода являются кластеры, состоящие из 6 связей SiH и занимающие объем, эквивалентный элементарной ячейке Si кристалла (160 \AA^3). Используя (3)

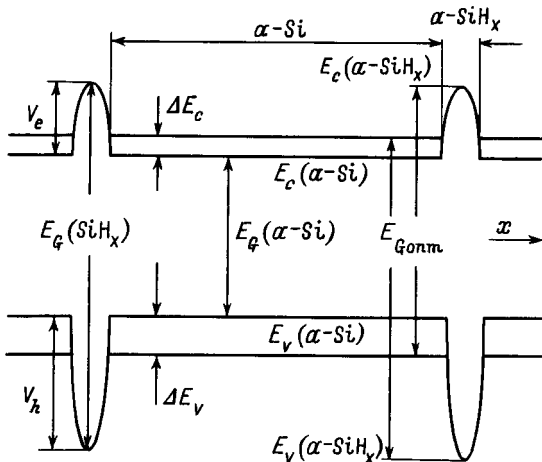


Рис. 6. Схема энергетических зон в модели квантовых ям Бродски.

и (4), мы определяем, что величина γ для этого случая составляет $\sim 10^{-3} \text{ \AA}^{-3}$ (для $x = [\text{SiH}]/[\text{Si}] \sim 0.1$, а средний диаметр потенциальной ямы равен примерно 10 \AA). С другой стороны, на наших пленках $a\text{-Si:H}$ мы наблюдали структуру с характерными размерами $\geq 300 \text{ \AA}$, что соответствует $\gamma \sim 10^{-7} - 10^{-8} \text{ \AA}^{-3}$ при той же концентрации водорода.

Среднее значение энергии стационарного состояния для ансамбля потенциальных ям одинаковой формы с одинаковой величиной потенциального барьера U_0 можно записать как

$$\langle \Delta E_V \rangle(x) = U_0 \left(1 - \exp(-V_{\text{crit}} \lambda(x)) \right) + \int_{V_{\text{crit}}}^{\infty} \Delta E_V(V) f_V(V) dV, \quad (5)$$

где "критический" объем V_{crit} — максимальный объем, когда стационарный уровень совпадает с границей непрерывного спектра, т.е. $\Delta E_V = V_h$.

Величина критического объема V_{crit} и зависимость энергии стационарного состояния от объема потенциальной ямы $\Delta E_V(V)$ определяются величиной энергетического барьера U_0 и эффективной массой частицы m^* (в данном случае дырки). Для сферических потенциальных ям [7,17]

$$V_{\text{crit}} = \frac{\pi^4}{6} \left(\frac{h^2}{2m^*U_0} \right)^{3/2} \quad (6)$$

и

$$k \cdot \text{ctg}(kL) = -\sqrt{\frac{2m^*U_0}{h^2} - k^2}, \quad (7)$$

где $k = \sqrt{2m^*(U_0 - |E'|)}$, $V = \frac{4}{3}\pi L^3$, $E' = U_0 - E$, E — энергия частицы, отсчитанная от дна потенциальной ямы.

Значение параметров модели выбирались из следующих соображений. Эффективная масса дырок в соответствии с работой [5] была принята равной $m_h^* = 0.5m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. Чтобы оценить высоту барьера для дырок, мы должны определить величины ширины запрещенной зоны для узкозонной и широкозонной фаз, а также величину энергетического барьера для электронов. В качестве первой мы взяли известное экстраполированное значение 1.6 эВ [1], соответствующее нулевой концентрации водорода. Согласно [5], величина энергетического барьера для электронов может быть оценена исходя из энергии активации дрейфовой подвижности. Эта величина для $a\text{-Si:H}$ обычно составляет около 0.1 эВ [15]. Оценивая значение ширины запрещенной зоны широкозонной фазы, мы следовали работам [5,7], где $E_G(a\text{-SiH}_x) \approx 2 \text{ эВ}$. Таким образом, значение высоты потенциального барьера для дырок $V_h = E_G(\text{SiH}_x) - E_G(a\text{-Si}) - V_e$ составляет 0.3 эВ .

Зависимости средней энергии стационарного состояния $\langle E_V \rangle = E_G(a\text{-Si:H}) - E_G(a\text{-Si})$ для различных значений γ от содержания водорода показаны на рис. 7.

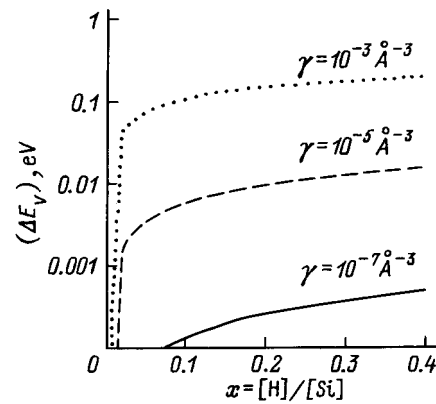


Рис. 7. Зависимости оптической ширины запрещенной зоны $a\text{-Si:H}$ от содержания водорода. Три кривые соответствуют трем различным способам распределения водорода, определяемым значением параметра γ .

Наибольшие изменения $\langle E_V \rangle$ с содержанием водорода (увеличение на $\sim 0.3 \text{ эВ}$ при увеличении x от 0.1 до 0.4) наблюдаются для $\gamma = 10^{-3} \text{ \AA}^{-3}$. При этом величина $d\langle \Delta E_V \rangle/d[\text{H}]$ (которая является оценкой производной $dE_G/d[\text{H}]$) составляет приблизительно 0.01 эВ/ат\% , что хорошо согласуется с данными работы [1]. С другой стороны, для $\gamma = 10^{-5} - 10^{-7} \text{ \AA}^{-3}$ величина $\langle \Delta E_V \rangle$ практически не зависит от содержания водорода.

Зависимости, показанные на рис. 7, позволяют в рамках рассматриваемой модели определить "растворенную" и "кластеризованную" формы связей SiH. Растворенная форма связей SiH ($\gamma \sim 10^{-3}$) включает в себя одиночные связи и сравнительно небольшие кластеры, образованные несколькими связями SiH и занимающие объем того же порядка, что и элементарная ячейки монокристалла кремния. Если такая форма связывания водорода является преобладающей, то средний размер "островков" (потенциальных ям) составляет $\sim 10 \text{ \AA}$, а оптическая ширина запрещенной зоны двухфазной системы в сильной степени зависит от содержания водорода.

Кластеризованная форма предполагает присутствие более крупных кластеров, которые образуют неоднородности (внутренние границы) с характерными размерами в несколько десятков нанометров ($\gamma \sim 10^{-5} - 10^{-7}$). Изменение содержания водорода в кластеризованной фазе практически не влияет на величину оптической ширины запрещенной зоны.

Данная модель может быть распространена и на случай сплавов Si с азотом, углеродом и другими элементами, энергия связи которых с Si выше, чем энергия связи Si-Si. Очевидно, что модель квантовых ям для таких сплавов будет отличаться прежде всего величинами энергетических барьеров V_e и V_h , что скажется на чувствительности оптической ширины запрещенной зоны к изменению состава при заданном значении γ , определяемом характерными размерами микроструктуры. В то же время качественные закономерности, определяющие зависимость E_G от этих характерных размеров (т.е. зависимость $\langle \Delta E_V \rangle$ от γ), останутся прежними.

Из экспериментальных данных, представленных в разд. 3 настоящей работы, следует, что оптическая ширина запрещенной зоны $a\text{-Si:H}$ и сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ определяется содержанием связей SiH (SiN) в объеме островков и не зависит от их концентрации вблизи внутренних границ. В рамках модифицированной нами модели квантовых ям случаем, когда одиночные атомы водорода (азота) или сравнительно небольшие кластеры находятся в объеме островков, соответствуют высокие значения γ ($\sim 10^{-3} \text{ \AA}^{-3}$) и, следовательно, высокая чувствительность E_G к изменению состава пленки (рис. 7). Если же атомы водорода либо азота образуют микроструктуру с характерными размерами \sim нескольких сот \AA (границы островков), то E_G практически не зависят от концентрации атомов водорода (азота). Таким образом, модифицированная нами модель квантовых ям качественно воспроизводит экспериментальные зависимости оптической ширины запрещенной зоны от состава пленок $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ и характерных размеров микроструктуры, образованной атомами водорода и азота.

Заключение

1. Мы исследовали микроструктуру и край оптического поглощения структурно-неоднородных сплавов $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, полученных разложением в ВЧ тлеющем разряде из силаносодержащих газовых смесей, разбавленных водородом. Как следует из данных АСМ, ПЭМ и ИК спектроскопии, основным элементом микроструктуры пленок являются островки, обогащенные Si, по границам которых концентрируется водород (в случае $a\text{-Si:H}$) либо водород и азот (в случае $a\text{-SiN}_x\text{:H}$). Характерный размер островков составляет $\sim 500 \text{ \AA}$.

2. Установлено, что величина оптической ширины запрещенной зоны пленок определяется содержанием водорода (в случае $a\text{-Si:H}$) либо азота (в случае $a\text{-SiN}_x\text{:H}$), содержащихся в объеме зерен, и не зависит от концентрации этих элементов в области межостровковых границ.

3. Предложена модификация известной "модели квантовых ям", где приняты во внимание характерные размеры микроструктуры, образованной атомами водорода, азота и др. Эта модифицированная модель удовлетворительно объясняет экспериментально наблюдаемые зависимости оптической ширины запрещенной зоны сплавов на основе $a\text{-Si:H}$ от их состава и микроструктуры.

Авторы выражают свою признательность В.Х. Кудряковой, а также компании NT-MDT в лице В. Быкова, А. Галоганова и С. Нестерова за содействие при проведении эксперимента и обсуждение результатов.

Исследования, результаты которых сообщаются в настоящей статье, проводились при финансовой поддержке программы INTAS (контракт № 94-4352).

Список литературы

- [1] G.D. Cody. *Semicond. Semimet.* **21B**, 11 (1984).
- [2] M.B. Schubert, H.-D. Mohring, E. Lotter, G.H. Bauer, *IEEE Trans.*, **36**, 2863 (1989).

- [3] A.P. Sokolov, A.P. Shebanin, O.A. Golikova, M.M. Mezdrogina. *J. Non-Cryst. Sol.*, **137/138**, 99 (1991).
- [4] J. Robertson. *Phil. Mag.*, **63**, 47 (1991).
- [5] M.H. Brodsky. *Sol. St. Commun.*, **36**, 55 (1980).
- [6] A.A. Klochikhin. *Phys. Rev. B*, **52**, 10, 979 (1995).
- [7] S.K. O'Leary, S. Zukotinsky, J.M. Pierz. *J. Appl. Phys.*, **78**, 4282 (1995).
- [8] B.G. Budaguan, A. Aivazov, A.Yu. Sazonov, A.A. Popov, A.E. Berdnikov. *Mater. Res. Soc. Spring Meeting* (San Francisco, USA, 1997).
- [9] A.A. Langford, M.L. Fleet, B.P. Nelson, W.A. Lanford, N. Maley. *Phys. Rev. B*, **45**, 13, 367 (1992).
- [10] S. Chattopadhyay, S.N. Sharma, R. Banarjee, D.M. Bhusari, S.T. Kshirsagar, Yan Chen, D.L. Williamson. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 5208 (1994).
- [11] J.W. Osenbach, W.R. Knolle. *J. Appl. Phys.*, **60**, 1408 (1986).
- [12] G. Lucovsky, J. Yang, S.S. Chao, J.E. Tyler, W. Czubatj. *Phys. Rev. B*, **28**, 3234 (1983).
- [13] E. Bustarret, M. Bensouda, M.C. Habrard, J.C. Bruyere, S. Poulain, S.C. Gujrathi. *Phys. Rev. B*, **38**, 8171 (1988).
- [14] B.G. Budaguan, A.A. Aivazov, A.Yu. Sazonov. *Physica B*, **193**, 195 (1994).
- [15] J.M. Marshall, R.A. Street, M.J. Thompson. *Phil. Mag.* **B**, **54**, 51 (1986).
- [16] J. Baum, K.K. Gleason, A. Pines, A.N. Garroway, J.A. Reimer. *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1377 (1986).
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., 1989).

Редактор В.В. Чалдышев

Quantum-well model and optical absorption edge in structure-inhomogeneous $a\text{-Si:H}$ -based alloys

G. Budaguan, A. Aivazov, A. Stryahilev, M. Sokolov

Moscow Institute of Electronic Technology,
103498 Moscow, Russia

Abstract In this paper we studied microstructure and optical absorption edge of $a\text{-Si:H}$ and silicon-rich $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ films prepared by *rf*-PECVD of hydrogen diluted both SiH_4 and $\text{SiH}_4 + \text{NH}_3$ mixtures, respectively. Films with device quality optoelectronic properties and developed microstructure were fabricated at enhanced deposition rates (up to 8 \AA/s).

Microstructure of films was studied by atomic force microscopy and infrared spectroscopy. Both $a\text{-Si:H}$ and $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ films possessed pronounced inhomogeneity in the scale of $\sim 500 \text{ \AA}$ and contained Si-rich islands with hydrogen (in $a\text{-Si:H}$) or hydrogen and nitrogen (in $a\text{-SiN}_x\text{:H}$) collected at their boundaries. It was found that different atomic configurations of N and H found from IR data should be attributed to islands bulk and boundaries.

It was established that the optical gap is determined by the concentration of hydrogen (in $a\text{-Si:H}$) or nitrogen (in $a\text{-SiN}_x\text{:H}$) in the bulk of islands while it is insensitive to variations of content of these alloy atoms at islands boundaries. These results are interpreted in terms of quantum well model modified in order to take into account alloy atoms related microstructure.