

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И ДЕФОРМАЦИЯ АТОМНОЙ СЕТКИ СПЛАВОВ α -SiN_x:H, ОБОГАЩЕННЫХ КРЕМНИЕМ

© Б.Г.Будагян, А.А.Айвазов, Д.А.Стряхилев

Московский институт электронной техники,
103498 Москва, Россия

(Получена 31 июля 1995 г. Принята к печати 3 октября 1995 г.)

Пленки SiN_x:H ($x = 0.0-0.72$) были получены разложением смеси SiH₄ + H₂ + NH₃ в плазме тлеющего разряда. Состав пленок и концентрации химических связей в них определялись по данным ИК поглощения. Ширина запрещенной зоны и оптические константы (показатель преломления в пределе слабого поглощения и спектры поглощения для межзонных переходов) определялись по спектрам оптического пропускания. Плотность состояний хвоста валентной зоны была получена из спектров поглощения, измеренных для энергий фотонов, меньших ширины запрещенной зоны, методом постоянного фототока. Средняя энергия деформации связи Si-Si определялась по спектрам комбинационного рассеяния. Последняя величина сопоставлялась с характеристической энергией распределения состояний хвоста валентной зоны. Сделан вывод о том, что угловой беспорядок в неоднородной структуре с кластеризованными связями SiH определяет плотность состояний хвоста валентной зоны, в то время как приближение однородного сплава не является корректным.

1. Введение

Энергетическое распределение состояний в запрещенной зоне α -Si:H и родственных ему сплавов является важнейшей характеристикой таких материалов, определяющей их использование в оптоэлектронных приборах, и зависит от состава и способа получения пленок. В ряде работ [1-4] отмечается корреляция между формой распределения плотности локализованных состояний хвоста валентной зоны и элементами структуры ближнего порядка. Расчеты, проведенные различными методами для модельных структур аморфного кремния, показали, что при формировании плотности состояний вблизи края валентной зоны решающую роль играет угловой беспорядок, который присущ всем аморфным материалам [5-7]. Этот вывод подтверждается также экспериментально наблюдаемой корреляцией между параметром Урбаха, E_0 , и среднеквадратичным отклонением угла связи, $\Delta\bar{\theta}$, в α -Si:H [8,9].

В данной работе рассматривается взаимосвязь между угловым беспорядком и плотностью локализованных состояний в сплавах $a\text{-SiN}_x\text{:H}$. Актуальность такого анализа для указанных тройных сплавов определяется их широким применением в оптоэлектронных устройствах и, соответственно, необходимостью прогнозируемого изменения плотности локализованных состояний за счет вариации условий получения пленок и концентраций азота. Как известно из уже опубликованных работ, увеличение концентрации азота в $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ приводит как к увеличению деформации атомной сетки [10], так и к расширению хвоста валентной зоны [11–14]. В то же время природа структурной разупорядоченности в такого рода сплавах и ее влияние на плотность локализованных состояний однозначно не определены.

В настоящей работе плотность состояний вблизи краев зон и в запрещенной зоне сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ рассчитывалась по данным оптического поглощения. Среднеквадратичное отклонение углов связей, $\Delta\theta$, от их идеального значения в тетраэдрической структуре (109.5°) оценивалось по спектрам комбинационного рассеяния. Как известно [15], ширина пика рассеяния на поперечных оптических фононах дает прямую оценку $\Delta\theta$ в $a\text{-Si}$ и $a\text{-Ge}$.

2. Эксперимент

Пленки $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ ($x = 0\text{--}0.72$) были получены высокочастотным разложением смеси ($10\%\text{SiH}_4 + 90\%\text{H}_2$) + NH_3 в реакторе емкостного типа. В качестве подложек использовались стекло (Corning 7059) и монокристаллический Si (КДБ-10). Температура подложки, давление в реакционной камере и мощность разряда составляли в процессе осаждения 220°C , 50 Па и 0.3 Вт/см^2 соответственно. Парциальное давление NH_3 изменялось от процесса к процессу от 0 до 4 Па .

Состав пленок определялся по ИК спектрам, которые были измерены на двухлучевом приборе UR-20. В качестве образцов использовались пленки толщиной $\sim 1.0\text{ мкм}$ на кристаллической ($c\text{-Si}$) подложке. Концентрация азота в пленках (отношение концентраций азота и кремния $x = [\text{N}]/[\text{Si}]$) определялась по интегральному поглощению в полосе 850 см^{-1} [16].

Спектры оптического пропускания пленок $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ на прозрачной (стекляной) подложке измерялись в диапазоне $350\text{--}900\text{ нм}$ ($1.4\text{--}3.5\text{ эВ}$) на двухлучевом спектрометре Spexord-M40. Для определения показателя преломления n и толщины пленок использовались значения длин волн и коэффициентов пропускания, соответствующие интерференционными пикам [17]. Значения коэффициентов поглощения α рассчитывались по данным пропускания для энергий $2.2\text{--}3.5\text{ эВ}$. Подгонка спектра $\alpha(h\nu)$ к зависимости

$$\sqrt{\alpha h\nu} = B(h\nu - E_G), \quad (1)$$

где $h\nu$ — энергия фотона позволила определить оптическую ширину запрещенной зоны, E_G и параметр B , который непосредственно связан с плотностью состояний на краях зон [18].

Для измерения малых значений коэффициента поглощения в спектральной области, где поглощение определяется переходами с участием локализованных состояний ($\alpha \leq 10^3 \text{ см}^{-1}$, $h\nu < E_G$), использовался метод постоянного фототока [19]. По данным поглощения рассчитывался спектр плотности состояний в запрещенной зоне материала $N(E)$ и оценивался параметр E_{0V} , определяющий протяженность экспоненциального хвоста валентной зоны:

$$N_t(E) = N_0^V \exp(-E/E_{0V}). \quad (2)$$

Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ измерялись для оценки степени структурного разупорядочения пленок. Измерения проводились на специализированном приборе RAMANOOR-1000. В качестве образцов использовались пленки на стеклянной подложке.

3. Результаты

Зависимости ширины запрещенной зоны E_G и показателя преломления n , от состава x , а также зависимость $n \sim E_G$ представлены на рис. 1. Здесь же показаны опубликованные ранее результаты исследований пленок $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, полученных в других лабораториях как в тлеющем разряде [11, 20–22], так и при помощи магнетронного распыления [14].

В ряде работ предлагалось эмпирические соотношения, которые однозначно связывали величины n [23] и E_G [24] с содержанием азота в пленке. Как видно из рис. 1, a, b , эти величины действительно в сильной степени зависят от x , однако наблюдается существенный разброс значений n и E_G для пленок, полученных разными способами при различных условиях осаждения. Данные настоящей работы хорошо согласуются с параметрами пленок, полученных в тлеющем разряде при оптимальных условиях авторами [11], и несколько отличаются от данных работы [20], авторы которой для получения пленок различного состава изменяли не только парциальное давление (расход) NH_3 , но также мощность разряда и давление в реакторе.

Пленки, полученные при помощи магнетронного распыления [14], характеризуются более слабой зависимостью E_G от содержания азота и меньшими значениями показателя преломления, что скорее всего связано с более развитой микроструктурой сплавов, полученных таким способом [18].

Те же данные, а также результаты, взятые из работ [21, 22], показаны на рис. 1, c в координатах $n \sim E_G$. Как видно из этого рисунка, на участке $E_G < 2.2\text{--}2.3 \text{ эВ}$, что соответствует $x < 0.5\text{--}0.6$ для пленок, осажденных в тлеющем разряде (рис. 1, a), наблюдается резкое уменьшение значений показателя преломления с увеличением E_G . При этом параметры пленок, взятые из различных работ, выглядят хорошо согласованными независимо от состава и способа получения материала. Подгонка к линейной зависимости на этом участке дает соотношение

$$n = 7.55 - 2.45 E_G (\text{эВ}).$$

При дальнейшем увеличении E_G сначала возрастает рассогласование данных ($2.3 < E_G < 3.3$), а затем для пленок, обогащенных азотом

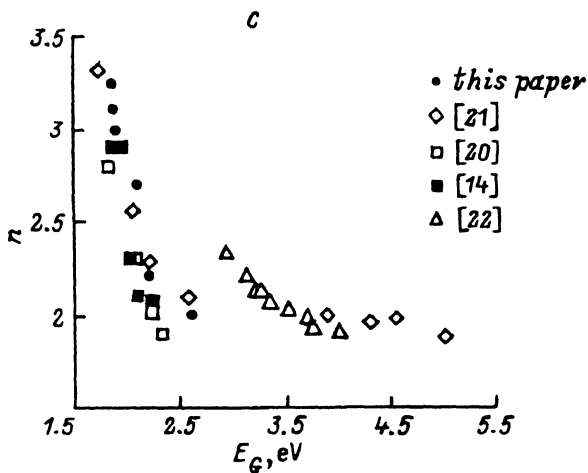
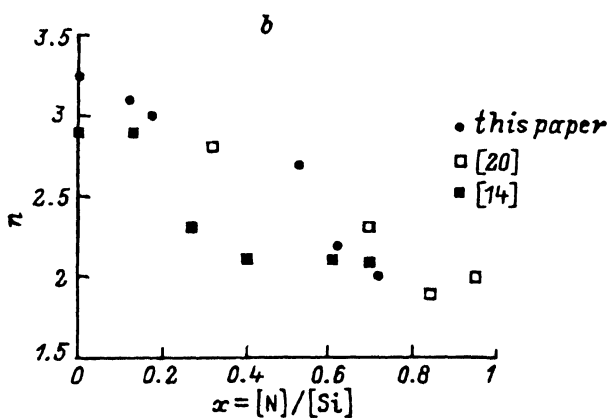
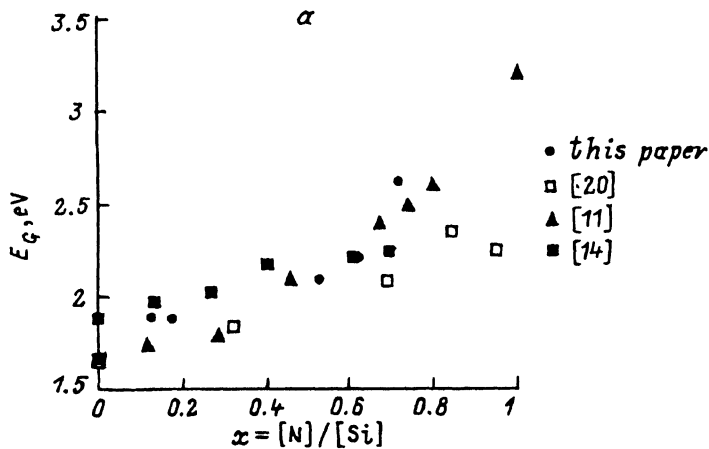


Рис. 1. Зависимость оптической ширины запрещенной зоны, E_G (a), и показателя преломления n (b) от состава сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$; зависимость $n \sim E_G$ (c).

($E_G > 3.3-3.5$), величина показателя преломления становится слабо чувствительной к изменениям E_G .

Параметры E_{0V} и B характеризуют электронный беспорядок в материале, т.е. степень «размытия» края валентной зоны. Зависимости этих величин от состава и ширины запрещенной зоны показаны на рис. 2 и 3. Здесь же приведены данные из других работ [11-14]. Как видно из рис. 2, на участке $x = 0-0.8 E_{0V}$ возрастает, а B убывает с увеличением x . В то же время для каждого набора данных эти величины практически линейно зависят от E_G (рис. 3). Заметно также, что данные, взятые из различных работ для пленок, осажденных в тлеющем разряде, выглядят более согласованными на графике $E_{0V} \sim E_G$ (рис. 3, а), чем на зависимости E_{0V} от $x = [N]/[Si]$ (рис. 2, а). Это обстоятельство отражает тот факт, что зависимости n , E_G и E_{0V} от содержания азота в пленке не учитывают влияния концентрации водорода и характера его распределения в пленке, к которым чувствительны эти характеристики [18,25]. В то же время значения B в большей степени определяются содержанием азота в пленке независимо от условий ее получения (рис. 2, б).

Для оценки среднеквадратичного отклонения углов связей $\Delta\bar{\theta}$ в Si-сетке использовалось значение полуширины $\Gamma/2$ пика рассеяния на поперечных оптических (ТО) фонах (480 см^{-1}) в спектрах комбинационного рассеяния света (КРС), измеренное со стороны высоких частот [15]. Зависимость величины Γ от состава пленки x показана на рис. 4. Рост значений Γ (а вместе с ним и $\Delta\bar{\theta}$) с концентрацией азота в пленке означает увеличение разупорядочения в углах связей.

На рис. 4, б приведена зависимость частоты пика ω_{TO} , наблюдаемого вблизи 480 см^{-1} в спектрах КРС сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, от содержания азота в пленке $x = [N]/[Si]$. Обращает на себя внимание тот факт, что увеличение x вызывает рост как Γ , так и ω_{TO} , в то время как для $a\text{-Si}$ и $a\text{-Si:H}$ было установлено [26], что увеличение углового беспорядка в таких материалах вызывает уменьшение частоты пика ТО в спектрах КРС при увеличении его ширины. Это отличие спектров КРС сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ от спектров $a\text{-Si}$ и $a\text{-Si:H}$ может объясняться как изменением собственных частот матрицы Si, вызванным присутствием атомов азота, так и перекрытием ТО-пика с полосой, которую должна давать мода $\text{Si}_3\text{N-breathing}$ ($492-493 \text{ см}^{-1}$ согласно расчетам [27]). В последнем случае перекрытие полос должно вносить погрешность в оценку величины $\Delta\bar{\theta}$. К сожалению, в уже опубликованных работах не уделялось достаточно внимания обсуждению особенностей спектров КРС сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ (в отличие от $a\text{-Si}$ и $a\text{-Si:H}$), а более подробное рассмотрение этого вопроса выходит за рамки этой работы.

Для того чтобы сопоставить данные по угловому беспорядку и распределение состояний хвоста валентной зоны (параметр E_{0V}), необходимо определить энергетическую характеристику, связанную с деформацией атомной сетки. В качестве такой характеристики обычно выступает угловая составляющая деформационного потенциала связи Si-Si, рассчитанного тем или иным способом [9,13].

Для простейшей структуры, состоящей из 8 атомов Si (рис. 5), угловая составляющая деформационного потенциала связи $\text{Si}^{(1)}-\text{Si}^{(2)}$

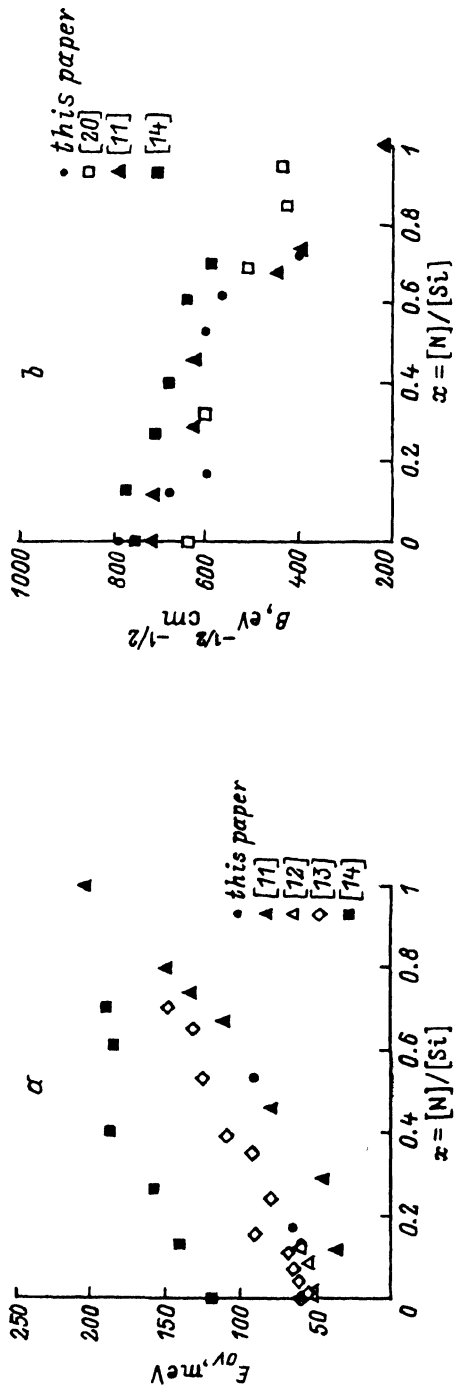


Рис. 2. Параметры E_{0V} (a) и B (b) для сплавов $a-SiN_x:H$ различного состава.

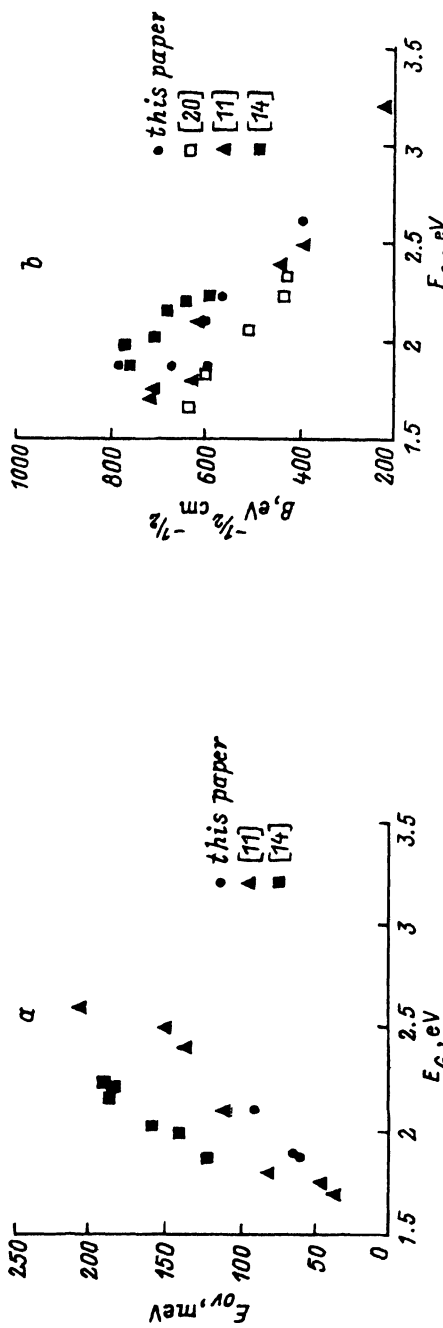


Рис. 3. Зависимость параметров E_{0V} (a) и B (b) от оптической ширины запрещенной зоны сплавов $a-SiN_x:H$.

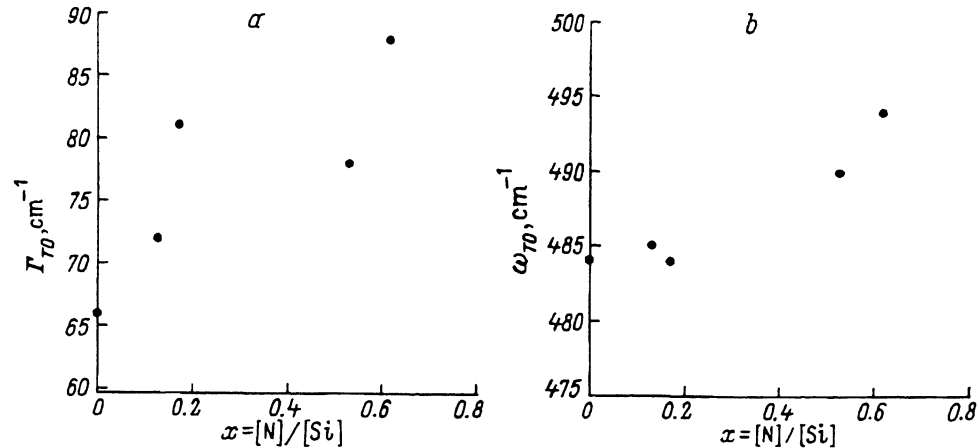


Рис. 4. Ширина (а) и частота (б) TO -пика в спектрах КРС сплавов $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ различного состава.

в форме валентного силового поля, V_θ , записывается как

$$V_\theta = \frac{1}{2} K_\theta r_0^2 \sum_{i=1}^6 (\Delta\theta_i)^2, \quad (3)$$

где r_0 — длина связи Si-Si, K_θ — силовая постоянная изгиба, $\Delta\theta_i = \theta_1 - \theta_0$; $-\theta_0 = 109.5^\circ$. Можно показать, что если углы θ_i — независимые случайные величины, распределенные нормально с дисперсией $\Delta\bar{\theta}^2$ и математическим ожиданием $\bar{\theta}_0$, то плотность вероятности для V_θ определяется соотношением

$$f(V_\theta) = \frac{27}{2V_\theta^3 (\Delta\bar{\theta})} V_\theta^2 \exp\left(-\frac{V_\theta}{V_\theta^0}\right). \quad (4)$$

Характерными особенностями распределения (4) являются максимум и экспоненциальный хвост, протяженность которого определяется параметром V_θ^0 . При этом как положение максимума, V_θ^{max} , так и параметр V_θ^0 выражаются через $V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta})$:

$$V_\theta^{\text{max}} = \frac{2}{3} V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta}), \quad (5)$$

$$V_\theta^0 = \frac{1}{3} V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta}). \quad (6)$$

Таким образом геометрической переменной $\Delta\bar{\theta}$, которая характеризует угловой беспорядок в $a\text{-Si}$, ставится в соответствие энергия $V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta})$, которая однозначно определяет функцию плотности вероятности деформационного потенциала и может рассматриваться как энергетическая характеристика углового беспорядка. Как показано в работе [13], в случае тройных сплавов, таких, как $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, прямое сопоставление величин $V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta})$ и E_{0V} (либо $\Delta\bar{\theta}^2$ и E_{0V}) не является

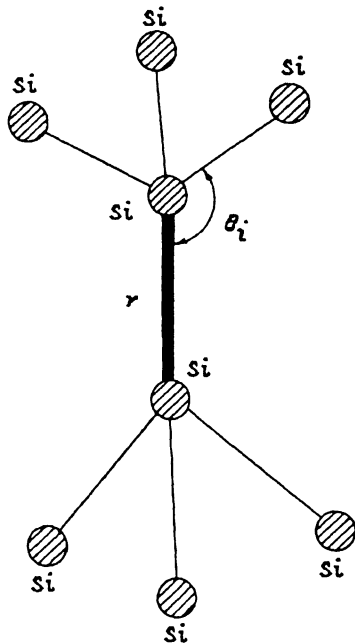


Рис. 5. К определению энергии деформации связи Si-Si.

корректным, так как присутствие атомов азота в ближайшем окружении связей Si-Si приводит к изменению силовых констант, от которых зависит энергия деформации связи. Поэтому вместо $V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta})$ мы рассчитывали «эффективный» потенциал V_θ^{eff} .

$$V_\theta^{\text{eff}}(x) = \sum p_i(x) V_\theta^{K_i}(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta}), \quad (7)$$

который представляет собой взвешенную сумму деформационных потенциалов Китинга связей Si-Si $V_\theta^{K_i}(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta})$ для тетраэдров Si-Si_{3-i}N_i ($i = 0, 1, 2, 3$) и зависит от состава, x . В качестве весовых коэффициентов, $p_i(x)$, в (7) использованы вероятности образования структур Si-Si_{3-i}N_i, определяемые в модели случайного связывания [28].

Диапазон составов, в который попадают наши образцы, и характер зависимостей оптических параметров от содержания азота в пленке (плавное увеличение E_G , E_{0V} и монотонное уменьшение B с ростом x) означают, что край валентной зоны таких сплавов должен быть образован связывающими состояниями Si-Si [29]. Таким образом, как и в случае α -Si:H, сопоставление величин E_{0V} и деформационного потенциала связи Si-Si позволяет оценить влияние углового беспорядка на плотность состояний хвоста валентной зоны.

На рис. 6, а показаны зависимости эффективного деформационного потенциала V_θ^{eff} и параметра E_{0V} от состава сплавов. Аналогичные результаты для α -SiN_x:H ($x = 0-0.8$) из работы [13] показаны на рис. 6, б.

Как отмечается автором этой работы, зависимость $V_\theta^{\text{eff}}(x)$ с точностью до постоянного множителя (равного ≈ 2) повторяет зависимость

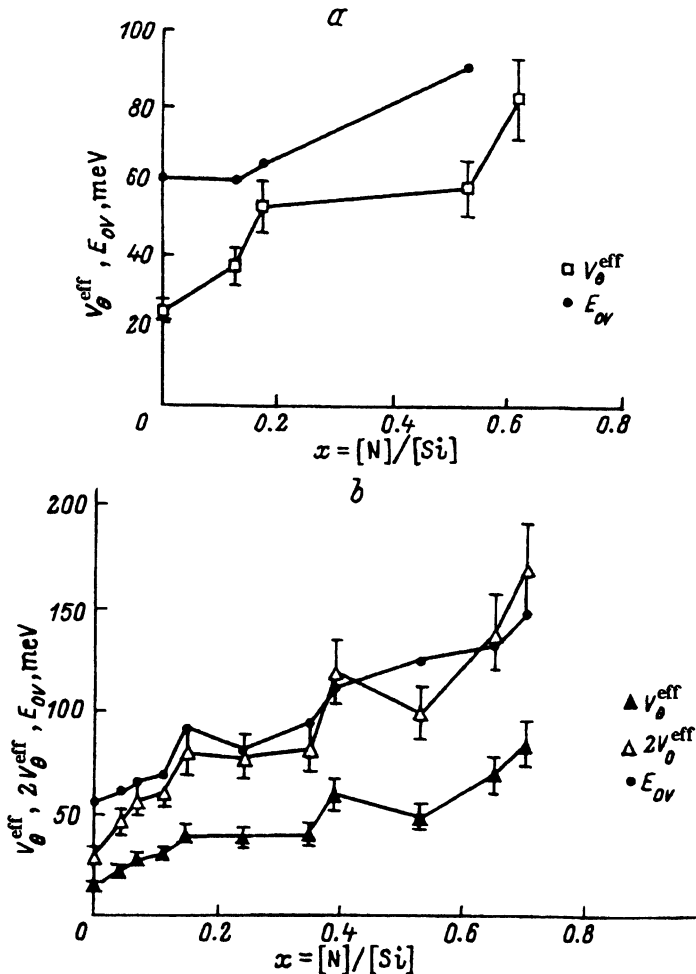


Рис. 6. Эффективный деформационный потенциал, V_{θ}^{eff} (a), и параметр E_{0V} (b) для сплавов a-SiN_x:H различного состава.

$E_{0V}(x)$ для $x \geq 0.2$ (рис. 6, b). Нас будет интересовать не точное совпадение величин V_{θ}^{eff} и E_{0V} , а лишь тенденции их изменения с составом.

Необходимо отметить, что при расчете величины V_{θ}^{eff} в работе [13] наряду с вкладом в деформационный потенциал тетраэдров, образованных атомами кремния и азота, учитывался вклад структур, содержащих атомы водорода, а вместо вероятностей $p_i(x)$ при расчете V_{θ}^{eff} использовались их аналоги для трехкомпонентного сплава [16,30]. Однако как на рис. 6, b, так и на рис. 6, a обращает на себя внимание то обстоятельство, что при увеличении концентрации азота в пленке в интервале $0 < x < 0.2$ величина V_{θ}^{eff} растет заметно быстрее, чем E_{0V} . Для объяснения такого расхождения в поведении величин V_{θ}^{eff} и E_{0V} в работе [13] предполагается, что заниженные значения V_{θ}^{eff} для $x < 0.2$ получаются вследствие ограничения, наложенного на геометрию SiH₂-групп (две связи Si-H и связь Si-Si образуют две взаимно

перпендикулярные плоскости, что соответствует минимальному вкладу таких конфигураций в эффективный деформационный потенциал).

Как показало исследование спектров инфракрасного (ИК) поглощения наших пленок $a\text{-SiN}_x\text{:H}$, приводит к резкому уменьшению концентрации атомов водорода, связанных с кремнием [31], по сравнению с $a\text{-Si:H}$ и, следовательно, локальные конфигурации, содержащие SiH_2 -группы (в любой пространственной ориентации), могут давать существенный вклад в деформацию кремниевой сетки только при условии сильно неоднородного распределения связей Si-H в пленке. В пользу этого предположения свидетельствует корреляция между параметрами Урбаха и интенсивностью полосы 2100 см^{-1} в колебательных спектрах $a\text{-Si:H}$, о которой сообщалось в работе [25]. Как известно [32], особенности ИК спектров $a\text{-Si:H}$ в диапазоне $2070\text{--}2100\text{ см}^{-1}$ связаны с SiH_2 - и кластеризованными SiH -группами на внутренних границах.

Таким образом, более быстрый рост деформационного потенциала по сравнению с параметром E_{0V} при увеличении концентрации азота в пленке от $x = 0$ до $x = 0.2$ характеризует уменьшение вклада микроструктуры в плотность состояний хвоста валентной зоны.

Дополнительную информацию о влиянии углового беспорядка на плотность локализованных состояний в $a\text{-SiH}_x\text{:H}$ можно получить, используя тот факт, что вероятности $P(V_\theta < V_\theta^{\max})$ и $P(V_\theta > V_\theta^{\max})$ для распределения (4) не зависят от $\Delta\bar{\theta}$. Действительно,

$$P(V_\theta < V_\theta^{\max}) = \int_0^{V_\theta^{\max}} f(V_\theta) dV_\theta \approx 0.823, \quad (8)$$

$$P(V_\theta > V_\theta^{\max}) = 1 - P(V_\theta < V_\theta^{\max}) \approx 0.177. \quad (9)$$

Если предположить, что энергия V_θ^{\max} соответствует краю валентной зоны, то вероятность $P(V_\theta > V_\theta^{\max})$ есть отношение $N_t/N_{\text{Si-Si}}$, где N_t — плотность состояний, образующих хвост валентной зоны; $N_{\text{Si-Si}}$ — концентрация связей Si-Si . Постоянство $P(V_\theta < V_\theta^{\max})$ и $P(V_\theta > V_\theta^{\max})$ означает, что изменение величины $\Delta\bar{\theta}(V_\theta(\Delta\theta_i = \Delta\bar{\theta}))$ не должно приводить к перераспределению состояний между валентной зоной и хвостом валентной зоны $a\text{-Si}$ в том случае, если плотность состояний хвоста валентной зоны определяется угловым беспорядком.

Концентрацию связей Si-Si можно определить при помощи методики, использующей данные ИК спектроскопии [16], а величину N_t — по данным оптического поглощения:

$$N_t \approx \int_{E_V}^{\infty} N_V^0 \exp(-E/E_{0V}) dE = N_V^0 E_{0V} \sim B\sqrt{n}E_{0V}. \quad (10)$$

Соотношение $N_V^0 \sim B\sqrt{n}$, использованное в (10), следует из формулы Тауда (1) при условии, что края зон имеют параболическую форму и показатель преломления не зависит от $h\nu$. Последнее условие вносит погрешность $\sim 20\%$ в оценку величины N_t .

На рис. 7 показано относительное значение $B\sqrt{n}E_{0V}/N_{\text{Si-Si}}$ как функции $x = [N]/[\text{Si}]$. Как видно, величина $B\sqrt{n}E_{0V}/N_{\text{Si-Si}}$ практически не зависит от состава (а значит, и от величины $\Delta\bar{\theta}$ — см. рис. 4) для $x \leq 0.17$. Это должно означать, что плотность состояний хвоста валентной зоны для таких сплавов определяется деформацией углов связей в Si-сетке. Увеличение $N_t/N_{\text{Si-Si}}$ для образца $x = 0.53$ примерно вдвое по сравнению с соответствующим значением для $\alpha\text{-Si}:\text{H}$ при одновременном увеличении E_G связано с тем, что с ростом концентрации азота в пленке состояния связей Si-Si вытесняются на край валентной зоны благодаря образованию более прочных связей Si-N^[29].

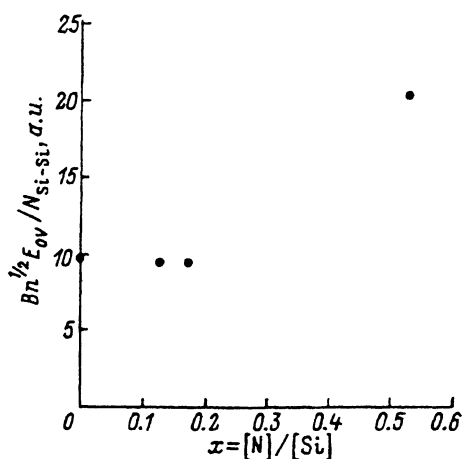


Рис. 7. Зависимость отношения $Bn^{1/2}E_{0V}/N_{\text{Si-Si}}$ от состава сплавов $\alpha\text{-SiN}_x:\text{H}$.

Заключение

1. Для оценки влияния микроструктуры на оптические характеристики сплавов $\alpha\text{-SiN}_x:\text{H}$ рассматривались зависимости показателя преломления и оптической ширины запрещенной зоны от состава и зависимость $n \sim E_G$ для пленок, полученных при различных условиях осаждения. Установлено, что линейная зависимость показателя преломления от ширины запрещенной зоны для сплавов, обогащенных Si ($x < 0.4-0.6$; $E_G < 2.2$), выполняется независимо от способа получения и состава пленок, в то время как на зависимостях n и E_G от содержания азота в пленке наблюдается значительный разброс. Сделан вывод о том, что более развитой микроструктуре, особенно присущей распыленным пленкам, соответствует меньшая чувствительность величин n и E_G к содержанию азота в пленке.

2. Для сопоставления углового беспорядка и распределения состояний хвоста валентной зоны рассчитывались средняя энергия деформации связи Si-Si (по данным комбинационного рассеяния света) и отношения плотности состояний хвоста валентной зоны к концентрации связей Si-Si. Сделан вывод о том, что угловой беспорядок в неоднородной структуре с кластеризованными связями SiH определяет форму плотности состояний хвоста валентной зоны, в то время как приближение однородного сплава со случайным связыванием не является корректным.

Список литературы

- [1] J.C. Dyre. Phys. Rev. Lett., **58**, 792 (1987).
- [2] S. Abe, Y. Toyozawa. J. Phys. Soc. Japan., **50**, 2185 (1981).
- [3] E.N. Economou, N. Bacalis, M.H. Cohen. J. Non-Cryst. Sol., **97/98**, 101 (1987).
- [4] Y. Bar-Yam, D. Adler, J.D. Joannopoulos. Phys. Rev. Lett., **57**, 467 (1986).
- [5] J. Singh. Phys. Rev., **23**, 4156 (1981).

- [6] K. Tanaka, R. Tsu. *Phys. Rev.*, **B**, **24**, 2038 (1981).
- [7] C.K. Wong, G. Lucovsky. *MRS Symp. Proc.*, **70**, 77 (1986).
- [8] N. Maley, D. Beeman, J.C. Lannin. *Phys. Rev.*, **B**, **38**, 10611 (1988).
- [9] Z. Smith, S. Aljishi, S. Wagner. *J. Non-Cryst. Sol.*, **97/98**, 775 (1987).
- [10] A. Morimoto et al. *Sol. St. Commun.*, **47**, 773 (1983).
- [11] S. Hasegawa, M. Matuura, Y. Kurata. *Appl. Phys. Lett.*, **58**, 741 (1991).
- [12] T. Shimizu, H. Kidon, A. Moramoto, M. Kumeda. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **28**, 586 (1989).
- [13] E. Bustarret. *J. Non-Cryst. Sol.*, **114**, 13 (1989).
- [14] R. Meadure, A. Mezhoudi. *Phil. Mag.* **B**, **50**, L63 (1984).
- [15] D. Beeman, R. Tsu, M.F. Thorpe. *Phys. Rev.* **B**, **32**, 874 (1984).
- [16] E. Bustarret, M. Bensouda, M.C. Habrard, J.C. Bruyere, S. Poulin, S.C. Gujrathi. *Phys. Rev.* **B**, **38**, 8171 (1988).
- [17] R. Swanepoel. *J. Phys. E: Sci. Instr.*, **16**, 1214 (1983).
- [18] Л. Лей. *Физика гидрогенизированного аморфного кремния* (М., Мир, 1988) вып. 2, с. 86.
- [19] M. Vanecek, A. Abraham, O. Stica, J. Stuchlik, J. Kocka. *Phys. St. Sol. (a)*, **83**, 617 (1984).
- [20] A.J. Lowe, M.J. Powell, S.R. Elliot. *J. Appl. Phys.*, **59**, 1251 (1986).
- [21] E. Bustarret, O. Poble, J.M. Quiroga, S. Banas, J.C. Bruyere. *Proc. 8th Int. School on Condensed Matter Physics* (1994) p. 146.
- [22] G.M. Samuelson, K.M. Mar. *J. Electrochem. Soc.*, **129**, 1773 (1982).
- [23] T. Makino. *J. Electrochem. Soc.*, **130**, 450 (1983).
- [24] J. Robertson. *Appl. Phys. Lett.*, **59**, 3425 (1991).
- [25] M.B. Shubert, H.-D. Mohring, G.H. Bauer. *J. Non-Cryst. Sol.*, **137/138**, 275 (1991).
- [26] R. Tsu, M.A. Paesler, D. Sayers. *J. Non-Cryst. Sol.*, **114**, 199 (1989).
- [27] G. Lucovsky, J. Yang, S.S. Chao, J.E. Tyler, W. Czubatyi. *Phys. Rev.* **B**, **28**, 3234 (1983).
- [28] S. Hasegawa, L. He, Y. Amano, T. Inokuma. *Phys. Rev.* **B**, **48**, 5315 (1993).
- [29] J. Robertson. *Phys. Mag.* **B**, **69**, 307 (1994).
- [30] E. Bustarret. *J. Non-Cryst. Sol.*, **114**, 753 (1989).
- [31] Б.Г. Будяган, А.А. Айвазов, Д.А. Стряхилев, В.Х. Кудоярова. *ФТП*, **28**, 781 (1994).
- [32] M. Cardona. *Phys. St. Sol. (b)*, **188**, 463 (1983).

Редактор В.В. Чалдышев

Optical properties, density of states and bond angle disorder in Si-rich α -SiN_x:H alloys

B.G. Budaguan, A.A. Aivazov, D.A. Stryahilev

Moscow Institute of Electronic Technology, Department of Microtechnology,
103498 Moscow K-498, Russia

Samples of α -SiN_x:H ($x = 0-0.72$) films were obtained by glow discharge decomposition of SiH₄ + H₂ + NH₃ mixture. The film composition and chemical bonding were determined from infrared absorption data. The bandgap value and optical constants (refractive index in the limit of weak absorption and absorption spectra for photon energies higher than bandgap value) were obtained from optical transmittance spectra. The density of valence band tail (VBT) states was deduced from subgap absorption spectra measured by the constant photocurrent method. Raman scattering was measured to estimate the average Si-Si bond deformation potential in α -SiN_x:H. This value was compared with characteristic energy of VBT states distribution. It was established that bond angle disorder in inhomogeneous structure with clustered SiH bonds determined the VBT states while the approximation of homogeneous alloy with random bonding was not correct.