

к измерительному току), компенсирующие некий не известный нам процесс в объеме образца, т. е. образец ведет себя как многослойная система.

В этой ситуации из исследованных нами свойств эффекта наиболее трудно объяснима линейность ВАХ. По-видимому, объемный процесс, не будучи омическим сопротивлением, прямо пропорционален величине измерительного тока. Таким процессом могло бы быть, например, излучение фононов, возникающих в эффекте Пельтье на токовых контактах, и увлечение фононами тяжелых дырок в условиях, когда электронная компонента проводимости подавлена магнитным полем. В этой ситуации на поверхности может возникнуть встречный ток, компенсирующий термоэдс увлечения и приводящий к аномальному «отрицательному сопротивлению». Возможны, конечно, и иные механизмы. Вопрос остается открытым, он требует дальнейшего изучения.

Авторы выражают признательность Ю. М. Гальперину и Р. В. Парфеньеву за обсуждение.

Институт физики

Дагестанского филиала АН СССР

Махачкала

Физико-технический институт

им. А. Ф. Иоффе АН СССР

Ленинград

Получено 29.01.1990

Принято к печати 31.01.1990

ФТП, том 24, вып. 6, 1990

СТРУКТУРНАЯ УПОРЯДОЧЕННОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМОРФНОГО КРЕМНИЯ

Соколов А. П., Шебанин А. П.

Изучению влияния структурной разупорядоченности на оптические свойства аморфного кремния посвящено большое число работ. В широком ряде образцов α -Si и α -Si : H проанализированы корреляции между изменениями оптической ширины запрещенной зоны $E_{\text{опт}}$ и полуширины основной моды $\Delta\omega_{\text{то}}$ в спектре комбинационного рассеяния света (КРС) [1-3]. На основе этого анализа были сделаны выводы о влиянии дисперсии углов связей на $E_{\text{опт}}$. Эксперименты показали, что в зависимости от условий приготовления и термической обработки образцов в спектрах КРС наблюдаются не только изменения $\Delta\omega_{\text{то}}$, но и значительные изменения амплитуды низкочастотной, так называемой ТА-моды. Однако до настоящего времени эти изменения подробно не изучались.

В данной работе впервые обнаружены корреляции между изменениями амплитуды ТА-пика в спектре КРС и $E_{\text{опт}}$ в образцах α -Si и α -Si : H. Анализ полученных результатов позволил сделать вывод о влиянии степени упорядоченности структуры на масштабах $\geq 4-5 \text{ \AA}$ на ширину запрещенной зоны аморфного кремния.

Для измерений использовались образцы α -Si, изготовленные методом ионно-плазменного распыления, и образцы α -Si : H, полученные методом ВЧ разложения силаносодержащей газовой смеси при $T_S=320 \text{ }^\circ\text{C}$. В дальнейшем образцы подвергались термическому отжигу в вакууме при $T=200-500 \text{ }^\circ\text{C}$, что приводило к изменению их структуры и оптических свойств. Спектры КРС измерялись на приборе «U-1000» при спектральной ширине щелей 4 см^{-1} и возбуждающем излучении $\lambda=514 \text{ нм}$. Вектор поля возбуждающего света находился в плоскости рассеяния. Коэффициент оптического поглощения α вычислялся по спектрам пропускания и отражения на основе выражений, учитывающих интерференционные эффекты. Значение $E_{\text{опт}}$ определялось по квадратичной аппроксимации межзонного поглощения

$$(\alpha \hbar \omega)^{1/2} \propto (\hbar \omega - E_{\text{опт}}). \quad (1)$$

Все измерения проводились при комнатной температуре.

На рис. 1 приведены спектры $\alpha(\hbar\omega)$ и КРС образцов $a\text{-Si}$ и $a\text{-Si}:\text{H}$. Последние имеют большую величину $E_{\text{опт}}$, меньшее отношение интенсивностей I_{TA}/I_{TO} -мод I_{TA}/I_{TO} и меньшее значение $\Delta\omega_{TA}$. Сравнение I_{TA}/I_{TO} и $E_{\text{опт}}$ обнаруживает корреляцию их изменений как в $a\text{-Si}$, так и в $a\text{-Si}:\text{H}$ (в последнем случае наблюдается значительный разброс данных, связанный, по-видимому, с легирующим влиянием H на $E_{\text{опт}}$). Что означают эти корреляции? Согласно [4, 5], оптическую ширину запрещенной зоны в аморфных полупроводниках можно представить в виде

$$E_{\text{опт}} = E_0(0) - D(\langle u^2 \rangle_x + \langle u^2 \rangle_z), \quad (2)$$

где $E_0(0)$ — оптическая ширина запрещенной зоны $a\text{-Si}$ в отсутствие структурной разупорядоченности при $T=0$ К, D — деформационный потенциал, $\langle u^2 \rangle$ — усредненное по ансамблю смещение атомов, обусловленное термическим движением ($\langle u^2 \rangle_x$) либо структурным беспорядком ($\langle u^2 \rangle_z$).

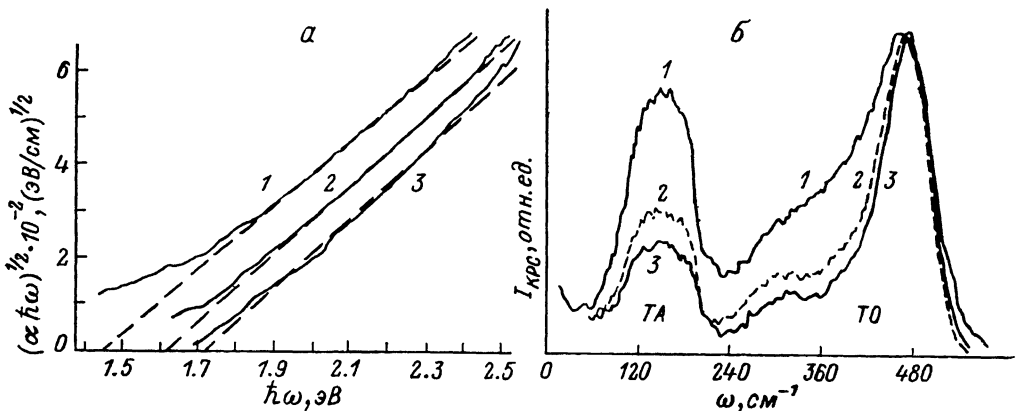


Рис. 1. Спектры образцов $a\text{-Si}$ (1) и $a\text{-Si}:\text{H}$ (2, 3) оптического поглощения (а), КРС (б). TA и TO — моды.

Однозначного описания TA -моды в колебательном спектре $a\text{-Si}$ в настоящее время нет. Показано лишь, что при рассмотрении этой области спектра необходимо учитывать корреляционные эффекты во второй и более далеких координационных сферах [6, 7]. В частности, авторы [7] для описания данных нейтронного рассеяния предложили модель изгибных колебаний связи, которая рассматривает движение группы из 8 атомов размером $\sim 4\text{--}5$ Å. Следовательно, TA -мода связана с колебаниями структурных фрагментов масштаба $\geq 4\text{--}5$ Å. Ее интенсивность в спектре КРС определяется произведением плотности колебательных состояний $g(\omega)$ на константу их взаимодействия со светом $c(\omega)$ [8]. В кристаллическом Si в этой области частот $c(\omega) = 0$, а в аморфных материалах она пропорциональна квадрату амплитуды флуктуаций упругих и упругооптических констант [9, 10]: $c(\omega) \propto \langle \delta p^2 \rangle$.

Таким образом, $E_{\text{опт}}$ и интенсивность TA -моды связаны между собой через амплитуду флуктуаций констант в неупорядоченной среде. Аппроксимируя наблюдаемые корреляции изменений $E_{\text{опт}}$ и I_{TA}/I_{TO} (рис. 2) линейной зависимостью, получаем значение $E_{\text{опт}} \approx 1.95 \pm 0.1$ эВ при $I_{TA} = 0$. Полученное значение должно соответствовать величине запрещенной зоны $a\text{-Si}$ при нулевой амплитуде флуктуаций. Учитывая термический вклад в изменение ширины запрещенной зоны ($dE_{\text{опт}}/dT \approx -4 \cdot 10^{-4}$ эВ/К [4]), можно из (2) оценить $E_0(0) \approx 1.95 + 0.12$ эВ ≈ 2.07 эВ. Эта величина совпадает с предпологаемым для «идеального» $a\text{-Si}$ значением $E_0(0) = 2.0\text{--}2.1$ эВ, полученным из анализа изменений наклона Urbachского края поглощения и $E_{\text{опт}}$ [4, 5]. Следовательно, при $I_{TA} \rightarrow 0$ $E_{\text{опт}}$ стремится к значению оптической ширины запрещенной зоны идеального $a\text{-Si}$.

Si. В этом случае идеальный α -Si обладает структурой с нулевой амплитудой флуктуаций констант на масштабах $\approx 4-5 \text{ \AA}$.

В реальном α -Si всегда существуют конечная степень упорядоченности структуры и конечная амплитуда флуктуаций. Она может быть понижена за счет длительного термического отжига либо гидрогенизации образцов [мы рассматриваем ситуацию с низкой ($< 10\%$) концентрацией H, когда влияние легирования на свойства образца незначительно]. Следует подчеркнуть, что в образцах α -Si : H наблюдаются значительные ($\sim 25-40\%$) изменения I_{TA}/I_{TO} при слабых ($\sim 5-8\%$) изменениях $\Delta\omega_{TO}$ (рис. 1, б). Этот результат отмечался ранее в [11]. Общеизвестно, что полуширина TO -моды определяется дисперсией углов связей, т. е. флуктуациями в ближнем порядке [1-3]. Из анализа изменений спектров КРС можно сделать вывод, что водород, встраиваясь в структуру α -Si, слабо меняет кремниевые тетраэдры, но влияет на упорядоченность в их взаимном расположении. Этот вывод согласуется с приведенными в [12] данными дифракционных измерений, из которых следует, что введение водорода в α -Si меняет радиальную функцию распределения только на масштабах $\sim 4-6 \text{ \AA}$. Проведившиеся ранее исследования обнаружили кор-

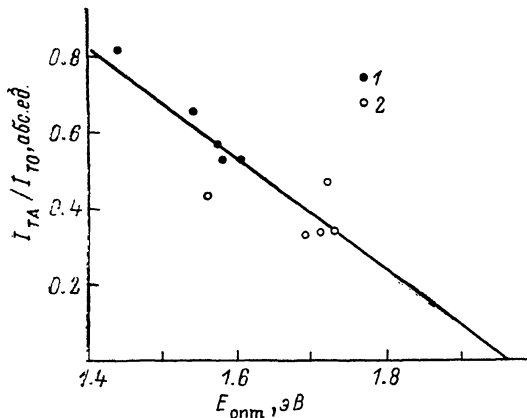


Рис. 2. Изменения $E_{\text{опт}}$ и I_{TA}/I_{TO} в образцах α -Si (1) и α -Si : H (2).

реляцию изменений $E_{\text{опт}}$ и $\Delta\omega_{TO}$ только в α -Si и α -Ge, но не обнаружили ее в α -Si : H. Последнее связано с отмеченными выше слабыми изменениями $\Delta\omega_{TO}$ в гидрогенизированных образцах. С другой стороны, полученные нами результаты обнаруживают корреляцию в изменениях $E_{\text{опт}}$ и I_{TA}/I_{TO} как в α -Si, так и в α -Si : H (рис. 2). Это позволяет сделать вывод, что $E_{\text{опт}}$ в большей мере зависит от степени упорядоченности структуры на масштабах $\approx 4-5 \text{ \AA}$, чем от дисперсии углов связей, как предполагали авторы [1-3].

В заключение отметим, что полученные результаты позволяют сделать вывод о важности анализа изменений TA -моды при исследовании структуры и свойств аморфного кремния. Это дает возможность анализировать степень структурной упорядоченности образцов на масштабах, больших масштаба ближнего порядка, и выявить ее влияние на свойства α -Si и α -Si : H.

Авторы выражают благодарность В. П. Королькову за предоставленные образцы α -Si, О. А. Голиковой и М. М. Мездрогинной за предоставленные образцы α -Si : H и В. Н. Новикову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Lannin J. S. et al. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 6. P. 3506-3509.
- [2] Maley N., Lannin J. S. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 2. P. 1146-1152.
- [3] Tsu R., Hernandez J. G., Pollak F. H. // J. Non-Cryst. Sol. 1984. V. 66. N 1. P. 109-115.
- [4] Физика гидрогенизированного аморфного кремния / Под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски. М., 1988. 448 с.
- [5] Cody G. D. et al. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 20. P. 1480-1483.
- [6] Maley N., Lannin J. S., Price D. L. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 16. P. 1720-1722.
- [7] Buchenau U. et al. // Europ. Lett. 1983. V. 6. N 8. P. 695-700.
- [8] Shuker R., Gammon R. W. // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 25. N 4. P. 222-225.
- [9] Martin A. J., Brenig W. // Phys. St. Sol. (b). 1974. V. 56. N 2. P. 227-236.
- [10] Malinovsky V. K., Sokolov A. P. // Sol. St. Commun. 1986. V. 57. N 9. P. 757-761.
- [11] Kshirsagar S. T., Lannin J. S. // Phys. Rev. B. 1982. N 4. P. 2916-2919.
- [12] Barna A. et al. // Phys. St. Sol. (a). 1977. V. 41. N 1. P. 81-84.