

Долговременные структурные релаксации и фотоиндуцированная деградация в α -Si:H

© К.В. Коугия, А.Б. Певцов*

Санкт-Петербургская государственная педиатрическая медицинская академия,
194100 Санкт-Петербург, Россия

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 20 января 1998 г. Принята к печати 3 апреля 1998 г.)

Проведено исследование влияния циклов прогрев–засветка на электрофизические свойства аморфного кремния, полученного ВЧ разложением силана. На основе сравнения экспериментальных и теоретических результатов сделан вывод о том, что фотоиндуцированная деградация α -Si:H (эффект Стаблера–Вронского) может быть связана с долговременными релаксациями структурных образований, вызванных предварительным отжигом материала.

1. При исследовании фотоиндуцированной деградации в α -Si:H (эффекта Стаблера–Вронского — ЭСВ [1]) общепринятыми являются два момента: 1) практически во всех экспериментах перед измерениями образец подвергается прогреву при $T_A \sim 500$ К, а затем охлаждается до температуры T_0 , при которой будет производиться измерения, причем по умолчанию предполагается, что это отожженное состояние (состояние А) и есть основное состояние вещества, обладающее наименьшей внутренней энергией; 2) несмотря на многообразие предлагаемых интерпретаций ЭСВ, все они в общих чертах могут быть сведены к феноменологической модели, согласно которой существует набор центров дефектообразования, каждый из которых может находиться в двух устойчивых состояниях, разделенных потенциальным барьером. Модель такого центра может быть схематически изображена в виде двухъямного потенциала с флуктуирующими случайным образом параметрами U и ΔE [2] (рис. 1).

В настоящей работе мы анализируем поведение ансамбля случайных двухъямных потенциалов при термической обработке, принятой при исследовании эффекта Стаблера–Вронского, сравниваем результаты расчетов с экспериментальными данными и делаем вывод о возможном механизме эффекта.

2. Исследованные образцы были приготовлены методом высокочастотного разложения силансодержащих газовых смесей в системе с емкостной связью. Для измерений темновой проводимости и фотопроводимости они снабжались напыленными контактами в копланарной конфигурации.

3. На рис. 2, а приведены температурные зависимости электропроводности, измеренной до (1) и после (3) освещения 100 мВт/см^2 в течение 2 ч при 293 К. Как это принято, измерения проводились после предварительного "отжига" при 500 К. Точка (2) соответствует электропроводности материала после ~ 7 лет выдержки в темноте.

Если допустить, что наблюдаемые изменения электропроводности связаны с переходами центров дефектообразования из одного устойчивого состояния в другое, то эти

изменения должны коррелировать с вариацией заселенностей ям двухъямных потенциалов, моделирующих эти центры. Рассчитаем температурную зависимость среднего коэффициента заполнения верхних ям для ансамбля, состоящего из 50 двухъямных потенциалов, с параметрами барьера (U_i) и асимметрии (ΔE_i), распределенными по нормальному закону вокруг средних значений U и ΔE со среднеквадратичными отклонениями δU_i и $\delta \Delta E_i$. Заполнение каждого из потенциалов рассчитывалось из уравнения

$$dn_i/dt = -n_i p_{\downarrow} + (1 - n_i) p_{\uparrow}, \quad (1)$$

где n_i — коэффициент заполнения i -й верхней ямы, а p_{\downarrow} и p_{\uparrow} — скорости переходов из верхней ямы в нижнюю и наоборот:

$$p_{\downarrow} = \nu \exp((U_i - \Delta E_i)/kT) \quad \text{и} \quad p_{\uparrow} = \nu \exp(U_i/kT), \quad (2)$$

где $\nu = 10^{12}$ Гц — фонная частота. За начальные условия принимались условия равновесия при $T = 500$ К:

$$n_i(500 \text{ К}) = p_{\uparrow}(500 \text{ К}) / (p_{\uparrow}(500 \text{ К}) + p_{\downarrow}(500 \text{ К})). \quad (3)$$

При линейно зависящем от времени изменении температуры T , решение уравнений (1) возможно только численно. Температурная зависимость каждого коэффициента

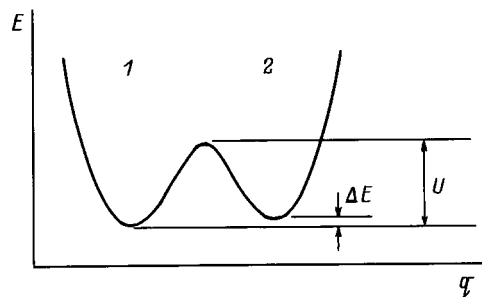


Рис. 1. Схематическое изображение модели двух состояний центра дефектообразования. E — энергия центра, q — конфигурационная координата.

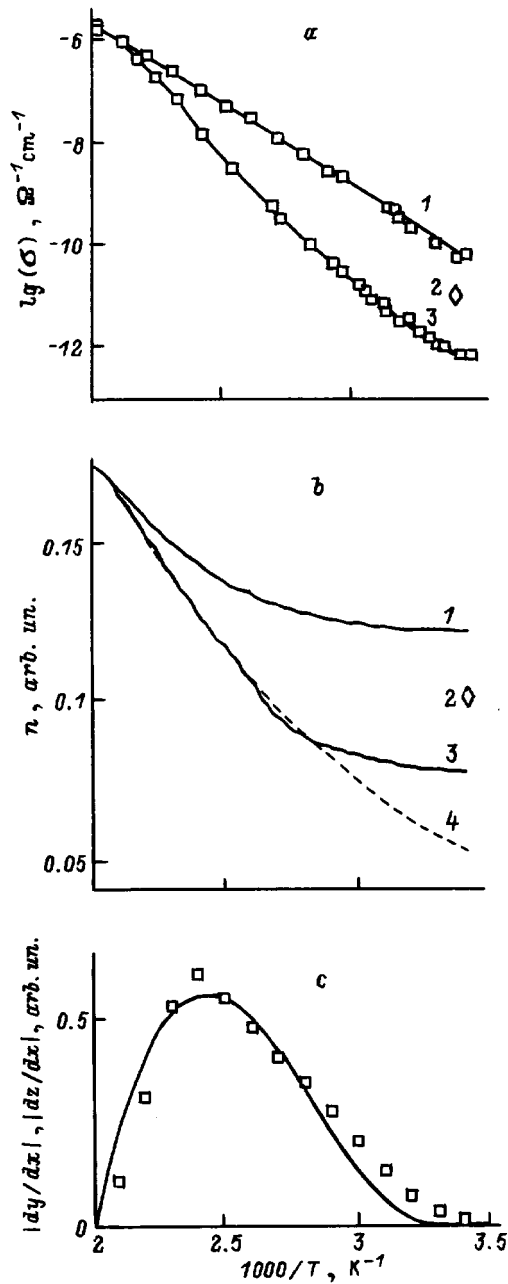


Рис. 2. *a* — температурные зависимости электропроводности *a*-Si:H отожженного и необлученного (1) и подвергнутого освещению AM1 в течение 1 ч (3). Точка (2) соответствует электропроводности отожженного и необлученного *a*-Si:H при комнатной температуре после 7-летней выдержки в темноте. *b* — температурные зависимости средней заселенности верхних ям ансамбля двухъямных потенциалов (n) при охлаждении от 500 К (1) и нагреве после вынужденной релаксации замороженной заселенности (3). Точка (2) — средняя заселенность при комнатной температуре после предварительного отжига и семилетней выдержки. Кривая (4) соответствует равновесной заселенности в отсутствие эффектов замораживания. *c* — сравнение экспериментальных (точки) и расчетных (сплошная линия) результатов. Процедура сравнения описана в тексте статьи. Обозначения: $y = \sigma_3(T)/\sigma_1(T)$; $z = y = n_3(T)/n_1(T)$; $x = 100/T$.

заполнения n_i рассчитывалась отдельно и затем проводилось суммирование с усреднением по всем потенциалам ансамбля.

Параметры расчеты были выбраны исходя из наилучшего согласия расчета и эксперимента, согласно процедуре, описанной далее в тексте:

$$U = 1.22 \text{ эВ} \quad \delta U = 0.14 \text{ эВ},$$

$$\Delta E = 0.08 \text{ эВ} \quad \delta \Delta E = 0.02 \text{ эВ}. \quad (4)$$

Результаты расчета приведены на рис. 2, *b*. Кривая 1 соответствует первоначальному охлаждению ансамбля от равновесного состояния, достигнутого при $T = 500$ К. Наблюдаемая при $T < 300$ К "полка" говорит о том, что произошло замораживание избыточной заселенности верхних ям, так как в условиях равновесия заселенность должна была бы соответствовать кривой 4. Релаксация замороженной заселенности при комнатных температурах может происходить как под действием температуры, так и других факторов. Расчеты показывают, что при вышеупомянутых параметрах ансамбля чисто термическая релаксация затруднена, что и иллюстрирует точка 2 на рис. 2, *b*, соответствующая временному промежутку в 7 лет. Как видно, даже после столь продолжительной выдержки система еще далека от состояния равновесия.

Предположим, однако, что мы нашли способ стимулировать релаксацию системы и понизили замороженную заселенность в 100 раз. В таком случае кривая 3 (рис. 2, *b*) опишет температурную зависимость средней заселенности при нагреве системы. Обратимся теперь к проблеме оптимального выбора параметров модели. Они выбирались исходя из наилучшего согласия расчета и эксперимента следующим образом. Поскольку проводимость в *a*-Si:H осуществляется по делокализованным состояниям,

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-(E_c - \mu)/kT), \quad (5)$$

где $E_c - \mu$ — расстояние от порога подвижности зоны проводимости до уровня Ферми, и поэтому особенности температурной зависимости $\sigma(T)$ могут быть связаны со смещением уровня Ферми при структурных перестройках. Полагая, что смещение уровня Ферми прямо пропорционально изменению заполнения ям потенциалов, т. е.

$$|\Delta\mu| \propto |\Delta n|, \quad (6)$$

где $\Delta\mu$ — смещение уровня Ферми, а Δn — изменение коэффициента заполнения и, сопоставляя (4) и (5), можно сделать вывод о том, что в достаточно ограниченном температурном интервале производные по температуре (или ее функции) от n и $\ln(\sigma)$ будут отличаться не более, чем на постоянный множитель, причем нормировка на некоторые "реперные" зависимости $\sigma(T)$ и $n(T)$ позволит избавиться и от этого множителя. Пример такой процедуры приведен на рис. 2, *c*, где сравниваются $\sigma(T)$ и $n(T)$, продифференцированные по обратной температуре и нормированные на зависимости $\sigma(T)$ и $n(T)$,

полученные при первоначальном охлаждении образца (кривые 1, на рис. 2, *a* и *b*). Следует отметить, что выбор иных реперных зависимостей приводит к изменению формы результирующих кривых на рис. 2, *c*, но сами оптимальные величины параметров расчета остаются неизменными и совпадают с теми, что были приведены ранее.

Обратимся далее к вопросу о механизме релаксации замороженной заселенности (переход от кривой 1 к 3). Как мы уже видели, эту роль может играть тепловое возбуждение (точка 2), но недостаточно эффективно. Поэтому, на наш взгляд, наиболее вероятным является другой механизм, также связанный с возбуждением колебаний решетки, а именно, безызлучательная рекомбинация неравновесных носителей. В пользу такого механизма свидетельствуют результаты экспериментов по изменению параметров материала при пропускании тока через диодные структуры, в которых было показано, что деградация минимальна при инжекции только электронов, несколько ускоряется при инжекции одних дырок и многократно возрастает при наличии носителей двух знаков, т.е. при появлении рекомбинации [3]. Отсутствие порога в спектральной зависимости эффект Стаблера–Вронского в образцах $a\text{-Si:H}$ "приборного" качества также говорит о том, что невозможно прямое возбуждение центров дефектообразования и существует промежуточный механизм передачи энергии от квантов света к образующимся дефектам, каковым и может выступать рекомбинация неравновесных носителей [4].

Таким образом, релаксация системы под действием освещения из верхнего замороженного состояния в нижнее может проявляться как эффект Стаблера–Вронского и возникает вопрос — насколько оправдана такая идентификация. Очевидно, что такой переход связан с понижением энергии системы, что согласуется с увеличением энергии активации темновой проводимости, а следовательно, понижением уровня Ферми в нелегированном $a\text{-Si:H}$. Повышение концентрации дефектов, наблюдаемое при эффекте Стаблера–Вронского, также согласуется с переходом $2 \rightarrow 1$ (рис. 1), так как, согласно результатам работы [2], именно замороженному состоянию системы соответствует пониженная концентрация дефектов.

В заключение обсудим полученные нами величины параметров модели. Величина $U = 1.22$ эВ, по-видимому, может быть ассоциирована с процессом диффузии водорода, так как она находится в разумном согласии с результатами других авторов о величине потенциального барьера для этого процесса в материале "приборного" качества [5]. Что касается величины $\Delta E = 0.08$ эВ, то ее интерпретация не столь очевидна, тем более, что мы использовали простейшее приближение неподвижных потенциальных ям. Если принять во внимание возможность смещения экстремумов двухъямного потенциала при вариации температуры, то можно только утверждать, что разница в энергиях состояний 1 и 2 (рис. 1) порядка сотых или максимум десятых долей эВ, что само

по себе является интересным результатом, поскольку вынуждает отказаться от идентификации состояний 1 и 2 (рис. 1) как состояний изолированной оборванной связи, насыщенной и ненасыщенной водородом, так как в этом случае разница энергий должна была бы быть, как минимум, на порядок больше. Поэтому одним из вероятных объяснений фотоиндуцированных эффектов следует рассматривать перестройку водородной подсистемы, которая проявляется на опыте в изменении ИК спектров, соответствующих коллективным колебаниям атомов водорода [6].

Список литературы

- [1] D.L. Staebler, C.R. Wronski. Appl. Phys. Lett., **31**, 292 (1977).
- [2] С.Б. Алдабергенова, В.Г. Карпов, К.В. Коугия, А.Б. Певцов, В.Н. Соловьев, Н.А. Феоктистов. ФТТ, **32**(12), 3599 (1990).
- [3] L. Xu, G. Winboume, M. Silver, V. Canella, T. McGill. Phil. Mag. B, **57**, 715 (1988).
- [4] С.Б. Алдабергенова, А.А. Андреев, А.Я. Виноградов, К.В. Коугия, Т.А. Сидорова. *Тр. Межд. конф. "Некристаллические полупроводники-89"* (Ужгород, 1988) с. 222.
- [5] R.A. Street, C.C. Tsai, J. Kakalious. Phil. Mag. B, **56**, 305 (1987).
- [6] G.L. Kong, D.L. Zhang, Y.P. Zhao, X.B. Liao. Sol. St. Phenomena, **44–46**, 677 (1995).

Редактор В.В. Чалдышев

Long-term relaxation of structure and photoinduced degradation in $a\text{-Si:H}$

K.V. Koughia and A.B. Pevtsov*

Pediatric Medical Academy,
194100 St. Petersburg, Russia

*A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The influence of heating illumination cycling on electrical properties of a glow discharge fabricated $a\text{-Si:H}$ has been investigated. The comparison of experimental and theoretical results has shown that photostimulated degradation of $a\text{-Si:H}$ (Staebler–Wronski effect) may occur due to long-term degradation of structural defects generated by the preliminary heating.