

УДК 621.315.592

©1995

**ФОНОННЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И ЭФФЕКТ
ПСЕВДОЛЕГИРОВАНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ
АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ.
III. ОПТИЧЕСКОЕ И ТЕРМИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ
НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА С УЧЕТОМ ФЛУКТУАЦИЙ
ФОНОННЫХ ПОЛЕЙ**

В.А.Лизгачев

Московский энергетический институт,
111250, Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 26 июля 1994 г.
В окончательной редакции 4 мая 1995 г.)

Показано применение количественного соотношения, определяющего зависимость вероятности обнаружения состояния фононной системы от ее полной энергии и размеров области пространственной когерентности фононов, для анализа взаимосвязи между оптическими и электрическими параметрами неоднородных полупроводниковых материалов.

Модель, описанная в первых двух частях настоящей работы (ссылки на их текст и формулы в дальнейшем будут сопровождаться обозначениями Ч. I и Ч. II), является одним из возможных вариантов обобщения модели Скеттрапа, созданной для анализа взаимосвязи между фононными флуктуациями и оптическими электронными переходами в материале. Во второй части настоящей статьи было получено расчетное соотношение (21) (Ч. II), определяющее зависимость вероятности обнаружения состояний фононной системы в пределах области пространственной когерентности от ее суммарной энергии. Теперь мы воспользуемся им для количественного анализа зависимости оптических и электрических параметров неоднородных аморфных полупроводниковых материалов от характерных размеров неоднородностей.

Начнем с анализа оптических параметров материала. Рассмотрим возбуждение электрона с локального электронного состояния валентной зоны $E_v^{loc}(T)$ на локальное состояние зоны проводимости $E_c^{loc}(T)$, происходящее за счет поглощения фотона с энергией

$$E = E_c(0) - E_c^{loc}(T) + E_v^{loc}(T) - E_v(0). \quad (1)$$

Напомним, что $E_c(0)$ и $E_v(0)$ — положения краев подвижности зоны проводимости и валентной зоны материала при температуре $T = 0$.

Для вычисления зависящего от энергии фотонов коэффициента оптического «междузонного» поглощения $\alpha^{\text{loc}}(E, T)$ необходимо рассчитать вероятность одновременного появления локальных значений $E_c^{\text{loc}}(T)$ и $E_v^{\text{loc}}(T)$ в объеме области пространственной когерентности фононов. Ясно, что вероятность такого события должна определяться произведением вероятностей независимого появления значений $E_c^{\text{loc}}(T)$ и $E_v^{\text{loc}}(T)$ в указанном объеме, а в качестве соотношения для расчета последних может быть использована формула (21) (Ч. II). Опустив тривиальные промежуточные выкладки, запишем соотношение для $\alpha^{\text{loc}}(E, T)$

$$\alpha^{\text{loc}}(E, T) = \alpha_0 S(E) \exp \left[-\frac{E_g(0) - E}{k_B T} \right], \quad (2)$$

в котором α_0 — предэкспоненциальный множитель, зависящий только от параметров электронных волновых функций [1], $S(E)$ — функция, определяемая статистическими характеристиками фононов, $E_g(0)$ — оптическая ширина запрещенной зоны материала при $T = 0$, Q — число атомов в выделенной ячейке. Поскольку α_0 не зависит от параметров тепловых колебаний, то изменение размеров области пространственной когерентности фононов не повлияет на численное значение α_0 , что дает нам возможность в дальнейшем при всех модельных расчетах считать его величиной постоянной. Сопоставляя соотношения (2) и (21) (Ч. II), видим, что численное значение $S(E)$ (точнее, значение функции $S(Q, E)$) может быть выражено через сумму произведений двух введенных во второй части статьи интегралов вида $\int S_\nu(E_\nu) d\nu$. Один из них определяет зависимость числа микросостояний фононной подсистемы, взаимодействующей с электронами в валентной зоне, от суммарной энергии фононов, а второй — аналогичную зависимость для подсистемы, взаимодействующей с электронами зоны проводимости. Поскольку общая энергия фононов, участвующих в пределах выделенной ячейки в электрон-фононном взаимодействии, складывается из энергии двух таких подсистем, то для определения характера $S(E)$ в формуле (2) мы можем повторить выкладки, во многом аналогичные использованным во второй части статьи при выводе соотношения $\int S_\nu(E_\nu) d\nu$. Напомним, что численное значение каждой из подынтегральных функций $S_\nu(E_\nu)$ выражается произведением одночастичных сомножителей $S(\hbar\omega)$ вида (15) (Ч. II), при этом величину суммарной энергии системы E_ν мы считали заданной. Теперь мы вновь имеем систему из N фононов в ячейке, часть из которых взаимодействует с электронами валентной зоны, а часть — с электронами зоны проводимости. При определенных условиях¹ вид одночастичных функций $S(\hbar\omega)$ не должен зависеть от того, в каких именно взаимодействиях участвуют фононы, поэтому каждое из слагаемых, определяющих численное значение функции $S(Q, E)$, вновь можно представить произведением N одночастичных сомножителей вида (15) (Ч. II). Если учесть принцип неразличимости

¹ Речь идет прежде всего о равенстве констант, определяющих интенсивность электрон-фононного взаимодействия с участием электронов валентной зоны и зоны проводимости. В рамках данной статьи разницу констант взаимодействия мы принимать в расчет не будем.

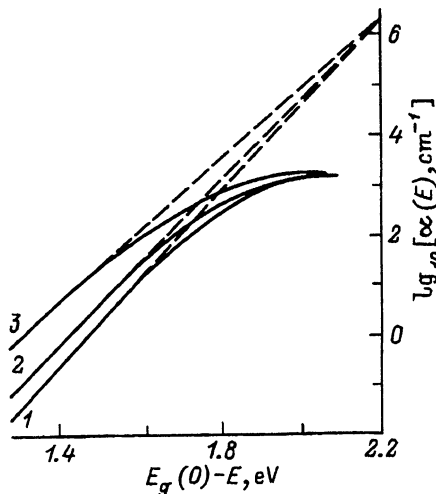


Рис. 1. Рассчитанные в соответствии с формулами (2), (3) спектральные зависимости коэффициента оптического поглощения материала при различных значениях поперечных размеров области пространственной когерентности.

L (μm): 1 — 0.3, 2 — 0.2, 3 — 0.1. Значения $L_z = 10.0 \mu\text{m}$, $r = 1.600$, $c_s = 5 \cdot 10^5 \text{ cm} \cdot \text{c}^{-1}$, $D = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ приняты одинаковыми во всех трех случаях. Штриховыми линиями показана экстраполяция экспоненциальных участков зависимости. $T = 300 \text{ K}$.

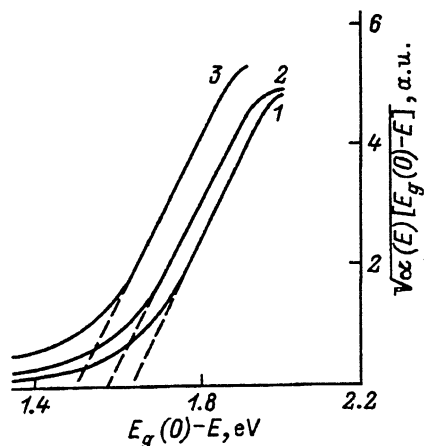


Рис. 2. Рассчитанные при значениях параметров, перечисленных в пояснении к рис. 1, зависимости коэффициента оптического поглощения в координатах Тауца.

Температура принята равной 300 К.

частиц и привести суммарную энергию фононной системы к одному атому, то для $S(E)$ получим соотношение

$$S(E) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\frac{\pi^2 L_z L E^2 Q^2}{8(N \hbar c_s) r} \right]^N, \quad (3)$$

правую часть которого (с заменой QE на E_ν) мы уже встречали в виде составной части формулы (21) в Ч. II. Численное значение нижнего индекса суммирования N_0 будет теперь определяться целой частью дроби $QE/k_B \theta_D$.

На рис. 1 приведены полученные с использованием соотношений (2), (3) результаты модельных расчетов спектральных зависимостей коэффициента оптического поглощения для пленок аморфного гидрогенизированного кремния ($\alpha\text{-Si:H}$). Положение спектров на шкале энергий и величина предэкспоненциального множителя в (2) получены путем «привязки» расчетных кривых к экспериментальным данным работы [2]. С формальной точки зрения «привязка» энергетической шкалы модельных кривых к аналогичной шкале экспериментальных данных сводится, в частности, к соблюдению условия $E_g(0) = 2.20 \text{ eV}$. Геометрические размеры ячеек (областей пространственной когерентности фононов) рассчитаны по данным электронно-микроскопических исследований морфологии пленок $\alpha\text{-Si:H}$, полученных методом ВЧ-ионно-плазменного распыления [3]. Скорость звука c_s и атомная плотность

материала D были приняты равными значениям указанных параметров в кристаллическом кремнии [4]. Дебаевская температура материала $\theta_D = 590$ К, а температура «эксперимента» $T = 300$ К. Линейным преобразованием осей и зеркальным отражением кривых зависимости $\alpha(E)$ на рис. 1 могут быть совмещены с графиками зависимостей $W(E)$ на рис. 2 в Ч. II, поскольку соотношение (21) из Ч. II отличается от (2), (3), по существу, лишь предэкспоненциальным множителем α_0 . Поскольку на графиках $W(E)$ (рис. 2 в Ч. II) мы видели участки с различным характером зависимости, то и на графиках $\alpha(E)$ также можно выделить аналогичные участки. Из (2) видно, что появление экспоненциального участка обусловлено соответствующим множителем большего канонического распределения Гиббса (7) (Ч. I), а отклонение зависимостей $\alpha(E)$ от экспоненциального закона объясняется особенностями функции $S(E)$. На рис. 2 показаны построенные при указанных выше значениях параметров графики зависимости $\alpha(E)$ в координатах Тауца (ордината — $\{[E_g(0) - E]\alpha[E_g(0) - E]\}^{1/2}$, абсцисса — $E_g(0) - E$). Из этого рисунка видно, что все графики имеют в координатах Тауца линейные участки, что дает нам возможность определить численные значения ширины оптической запрещенной зоны материала при заданной температуре $E_g(T)$ путем экстраполяции линейных участков до пересечения с осью абсцисс. Наличие на кривых $\alpha(E)$ участков с разным характером зависимостей обычно связывают [2] с изменением характера спектра электронных состояний в неупорядоченных полупроводниковых материалах: при энергиях ниже порога поглощения (оптической ширины запрещенной зоны) плотность электронных состояний меняется по экспоненциальному закону, в то время как в области энергий, соответствующих фундаментальному поглощению, плотность электронных состояний изменяется по степенному закону. В рамках описанной выше модели наличие обоих участков зависимости $\alpha(E)$ объясняется характеристиками фононной подсистемы материала. При этом участок зависимости, линеаризующийся в координатах Тауца, определяет величину $E_g(T)$, а экспоненциальный участок — величину характеристической энергии края поглощения Урбаха. Авторы работы [2] при интерпретации результатов оптических измерений в α -Si : H использовали предположение о том, что величина E_U в аморфных полупроводниках определяется не только «температурным» разупорядочением атомной структуры материала, но и параметром X , описывающим «вмороженный» структурный беспорядок. При этом численное значение X должно быть при нулевой температуре пропорциональным среднеквадратичному пространственному смещению атомов аморфного вещества от их равновесного положения, соответствующего кристаллическому состоянию того же вещества. Иными словами, в [2] численное значение E_U аморфного вещества связывается с величиной пространственного параметра, изменяющегося в пределах от нуля (в кристалле) до среднего межатомного расстояния вещества, при этом с увеличением пространственного параметра численное значение X также возрастает [2]. В рассмотренной выше модели зависимость E_U от температуры в основном определяется экспоненциальным членом (2), а характерными пространственными параметрами являются геометрические размеры областей пространственной когерентности фононов; наличие «вмороженных» фононов в

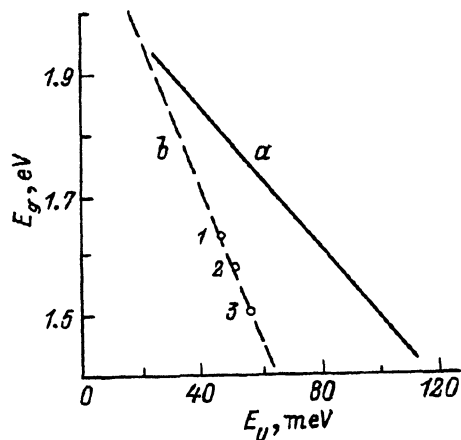


Рис. 3. Экспериментальная (а) и расчетная (б) зависимости оптической ширины запрещенной зоны от характеристической энергии края поглощения Урбаха.

Зависимость а — данные [2]. Точки 1, 2 и 3 соответствуют кривым с теми же номерами на двух предыдущих рисунках.

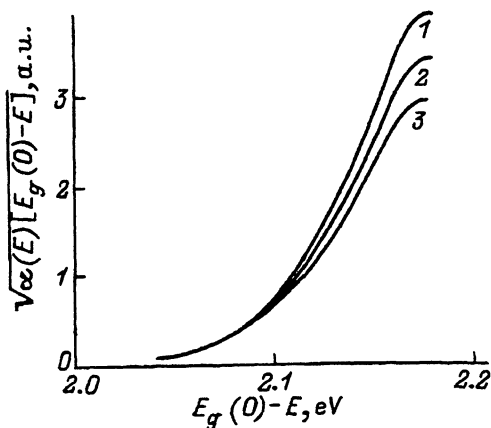


Рис. 4. Рассчитанные при значениях параметров, перечисленных в пояснении к рис. 1, зависимости коэффициента оптического поглощения в координатах Тауда.

Температура принята равной 100 К.

материале ячейки во внимание не принимается. Таким образом, обобщенная модель связывает численное значение E_U не с атомной структурой вещества, а с его морфологией. В этом смысле (с учетом сделанных выше оговорок) она оказывается в равной степени применимой как к аморфному, так и к кристаллическому состоянию вещества. В отличие от модели [2] здесь с увеличением значений пространственных параметров величина E_U все в большей степени определяется «температурным» разупорядочением структуры (рис. 1).

Изложенная выше модель позволяет воспроизвести ряд экспериментально установленных закономерностей изменения оптических параметров. Например, в [2] обнаружена корреляция между значением оптической ширины запрещенной зоны в пленках α -Si:H и характеристической энергией края поглощения Урбаха E_U , причем E_g уменьшается с ростом E_U , а зависимость между E_g и E_U близка к линейной. Из рис. 3 видно, что параметры E_g и E_U «модельных» зависимостей $\alpha(E)$ связаны между собой таким же образом: при увеличении значений E_U величина E_g , соответствующая тем же геометрическим параметрам, падает почти по линейному закону, правда, при этом наклон расчетной зависимости $E_g(E_U)$ существенно отличается от наклона аналогичной зависимости, полученной экспериментально (рис. 3). На рис. 1 штриховыми линиями показана экстраполяция экспоненциальных участков зависимостей $\alpha(E)$ до пересечения с вертикальной осью $E = 2.2$ eV. Видно, что все экспоненциальные участки сходятся в одной, «фокальной», точке. Впервые существование «фокальной» точки обнаружено при экспериментальных исследованиях пленок α -Si:H [2].

В то же время интерпретация некоторых экспериментальных результатов с точки зрения описанной выше модели приводит к определенным противоречиям с результатами выполненных ранее исследова-

дований. Взяв в качестве значений исходных параметров при модельных расчетах величины, приблизительно соответствующие параметрам пленок $\alpha\text{-Si:H}$, мы получили на рис. 2 значения E_g , близкие к экспериментально оцениваемым значениям разности между положением на шкале энергий порогов подвижности зоны проводимости и валентной зоны в этом материале при комнатной температуре [2]. Причем полученные численные значения для ширины щели подвижности не менее чем на 0.53 eV отличаются от определяемой исключительно электронными характеристиками материала величины $E_g(0)$. Поскольку в нашей модели характеристиками фононных полей определяются не только параметры края поглощения Урбаха, но и величина E_g , то с уменьшением температуры образца величина E_g (и энергетический зазор между краями подвижности E_c и E_v) должна увеличиваться, приближаясь к $E_g(0)$ при $T \rightarrow 0$. Эти качественные рассуждения подтверждаются и результатами модельных расчетов (рис. 4). Таким образом, при конечной (ненулевой) температуре материала положение краев подвижности должно заметно отличаться от их положения при низких (азотных и гелиевых) температурах. Однако выполненные с использованием метода вторичного фототока [5] экспериментальные исследования ширины щели подвижности при температурах 10–15 К дали значения ширины щели подвижности 1.75–1.80 eV, что практически совпадает с соответствующими значениями, измеряемыми при комнатной температуре. В [2] значения $E_g(0)$, измеренные при гелиевых температурах по стандартной методике, также не превысили порога в 1.80 eV. Таким образом, предсказания нашей модели противоречат экспериментальным результатам авторов работ [2,5]. В [6] получена другая оценка численного значения ширины щели подвижности при низких температурах ($E_g(0) = 2.3$ eV), однако многие считают ее величиной завышенной [5]. Обнаруженные противоречия могут быть объяснены тем, что в обобщенной модели существование «вмороженных» фононов в расчет не принимается. В [2] было показано, что с точки зрения влияния на оптические свойства аморфных полупроводников акустические «тепловые» и «вмороженные» фононы эквивалентны друг другу. При понижении температуры уменьшается влияние тепловых фононов на положение локальных электронных уровней. Влияние же «вмороженных» фононов остается неизменным, что не позволяет при низких температурах величинам $E_g(T)$ приблизиться к $E_g(0)$ в той мере, которая предсказывается изложенной выше моделью. Чтобы явным образом учесть влияние «вмороженных» фононов на оптические свойства материала, необходимо оценить их «энергию» и связать ее с морфологией материала. В принципе такие оценки могут быть сделаны на основе анализа параметров трехмерного преобразования Фурье от пространственного расположения ядер атомов неупорядоченных материалов при нулевой температуре. Однако в рамках данной работы мы не будем на этом останавливаться.

Если предположить, что описанный выше подход к анализу оптических характеристик материала с некоторыми изменениями может быть применен и для количественного описания процессов термического возбуждения электронов с уровня Ферми на пространственные состояния в зоне проводимости (или с пространственных состояний в валентной зоне на состояния вблизи уровня Ферми), то становится

объяснимой согласованность поведения оптических и электрических параметров в неупорядоченных полупроводниковых материалах с доминирующей электропроводностью по распространённым состояниям. В самом деле, при изменении интенсивности флуктуаций чисел заполнения фононных мод меняются локальные положения краев подвижности, а значит, не только оптическая ширина запрещённой зоны, но и локальные значения энергии активации $E_a^{loc}(T)$ термического возбуждения носителей заряда на распространённые состояния. Численное значение $E_a^{loc}(T)$ может быть определено с помощью формул (аналогичных соотношениям (5) (Ч. I)) для локальных значений $E_v^{loc}(T)$ и $E_c^{loc}(T)$

$$Q [E_c^{loc}(T) - E_c(0)] = v \int \hbar\omega n_c(\hbar\omega) P(\hbar\omega) d\hbar\omega,$$

$$Q [E_f(0) - E_f^{loc}(T)] = v \int \hbar\omega n_f(\hbar\omega) P(\hbar\omega) d\hbar\omega,$$

$$E_a^{loc}(T) \equiv E_c^{loc}(T) - E_f^{loc}(T) \quad (\text{для электронов}). \quad (4)$$

Подобное соотношение нетрудно записать и для случая, когда основными носителями заряда в материале являются дырки. Таким образом, согласованное поведение некоторых оптических и электрических параметров плёнок неоднородных полупроводниковых материалов с формальной точки зрения обеспечивается тождественностью верхних строк формул (5) (Ч. I) и (4). Заметим, что использование соотношений типа (4) эквивалентно предположению, что уровень Ферми также определен в пределах области пространственной когерентности фононов. Если вновь принять условие равенства констант электрон-фононного взаимодействия с электронами на уровне Ферми и в зоне проводимости, то вероятность переходов будет зависеть лишь от общего числа фононов, участвующих в электрон-фононном взаимодействии в пределах области пространственной когерентности. При этом оказывается несущественным, локальное положение какого именно уровня (исходного или конечного) изменяется за счет электрон-фононного взаимодействия.

При более детальном рассмотрении аналогия, устанавливаемая с помощью соотношений (5) (Ч. I) и (4) между процессами оптического и термического возбуждения фононов, оказывается в известной степени формальной. В самом деле, в момент оптического возбуждения носителей заряда числа заполнения фононных мод в материале в силу принципа Франка-Кондона являются неизменным, в то время как термическое возбуждение носителей заряда неизбежно сопровождается поглощением фононов. Это обстоятельство вынуждает нас обратиться к сравнительному анализу квантово-механических описаний обоих процессов. Здесь возможно несколько подходов. Наиболее универсальными, по-видимому, являются подходы, основанные на использовании матрицы плотности и формулы Кубо, с единых позиций описывающие как бесфононные электронные переходы в неупорядоченных материалах, так и электронные переходы с участием фононов [7]. Это в принципе позволяет применять их при расчетах вероятности оптических переходов и электронной проводимости в постоянном и переменном электрических полях. Однако в рамках обоих указанных подходов

трансформация общих соотношений в формулы, допускающие количественные оценки, оказывается весьма непростой и возможна только после введения ряда существенных упрощений [7]. Если же мы заранее ограничимся сравнительным анализом квантово-механических описаний оптических бесфононных переходов электронов и процессами их термического возбуждения (последние определяют параметры проводимости материала в постоянном электрическом поле малой напряженности), то полуколичественные расчетные соотношения могут быть получены более простым способом, основанным на представлениях о так называемых «конфигурационных координатах» системы «электроны+фононы» [8].

В соответствии с принципом Франка-Кондона оптические переходы, определяющие характеристическое значение энергии Урбаха и ширину запрещенной зоны материала, можно рассматривать как прямые переходы между локальными уровнями валентной зоны и зоны проводимости. Эффективное сечение захвата σ_d для прямых оптических переходов с заполненного электронного состояния (на уровне Ферми), нумерованного индексом j , на пустое состояние (в зоне проводимости) с индексом j' можно выразить произведением вероятности $W[E_a^{loc}(T)]$ нахождения локального электронного уровня зоны проводимости на заданном локальном «расстоянии» $E_a^{loc}(T)$ от уровня Ферми, квадрата соответствующего матричного элемента и дельта-функции, обеспечивающей выполнение закона сохранения энергии [8],

$$\sigma_d \propto W[E_a^{loc}(T)] | \langle j' | H_d | j \rangle |^2 \delta[E_{j'} - E_j - E_a^{loc}(T)], \quad (5)$$

где H_d — гамильтониан, определяющий вероятность прямых электронных переходов между исходными и конечными электронными состояниями. Для определения численного значения $W[E_a^{loc}(T)]$ мы вновь можем повторить выкладки, аналогичные предшествовавшим формуле (2), что позволяет записать соотношение

$$W[E_a^{loc}(T)] = S(E^*) \exp \left[-\frac{E_a(0) - E^*}{k_B T} \right], \quad (6)$$

где функция $S(E^*)$ задается формулой вида (3), $E_a(0)$ — «расстояние» на шкале энергий между исходными и конечными электронными уровнями при нулевой температуре, а под энергией E^* понимается суммарная энергия фононов, участвующих в электрон-фононных взаимодействиях с электронами на исходных и конечных состояниях (разницей констант взаимодействий мы вновь пренебрегаем).

При термическом возбуждении носителей зарядов в переходах между состояниями участвуют фононы, поэтому соотношение для эффективного сечения захвата должно быть изменено. Вместо волновых функций электронных состояний $|j\rangle$ и $|j'\rangle$ следует использовать волновые функции $|j, n\rangle$ и $|j', n'\rangle$, учитывающие изменения чисел заполнения фононной моды до (n) и после (n') перехода [8]. Весьма существенными здесь являются два обстоятельства. Во-первых, при термическом возбуждении электрон всегда увеличивает свою энергию за счет взаимодействия лишь с одной из фононных мод, сосредоточенных в пределах

области когерентности [9]. Это заметно упрощает дальнейший анализ, поскольку возможные изменения состояний всех остальных фононных мод за время перехода мы уже однажды учли, введя в (5) множитель $W[E_a^{loc}(T)]$, так что теперь можем следить только за изменением состояний выделенной фононной моды. Во-вторых, при комнатной температуре вещества характерное значение энергии его тепловых колебаний (фононов) имеет порядок $k_B T$ в расчете на один атом. Следовательно, среднее число фононов в пределах области пространственной когерентности по порядку величины близко к числу атомов в пределах указанной области (которое при приведенных выше значениях L , L_z и D можно приближенно оценить величиной 10^{10}). При термическом возбуждении одного электрона в среднем поглощается [8,9] не более 100 фононов, поэтому положение локальных электронных уровней ячейки до и после процесса термического возбуждения одиночного электрона можно считать неизменным. Все дальнейшие промежуточные выкладки могут быть выполнены в полном соответствии с процедурой, использованной в [8] для анализа оптических переходов с участием фононов. Мы не будем их здесь воспроизводить, а сразу запишем окончательное соотношение

$$\sigma [E_a^{loc}(T)] \propto S(E^*) \exp \left[-\frac{E_a(0) - E^*}{k_B T} \right] |\langle j' | H_d | j \rangle|^2 G [E_a^{loc}(T)], \quad (7)$$

в котором функция

$$G [E_a^{loc}(T)] = \text{Av} \sum_{n n'} |\langle n' | n \rangle|^2 \delta [E_{j'n'} - E_{jn} - E_a^{loc}(T)] \quad (8)$$

определяется вероятностью нахождения фононной системы в состоянии с заданной энергией и числами заполнения выделенной фононной моды [8], символы Av обозначают процедуру усреднения по всем начальным состояниям фононов рассматриваемой моды.

Итак, наличие в соотношениях (2) и (7) однотипных множителей $S(E)$ и $S(E^*)$ позволяет установить взаимосвязь (в ряде случаев количественную) между вероятностью оптических электронных переходов и вероятностью термического возбуждения электронов при условии, что оба эти процесса происходят в пределах одной области пространственной когерентности фононов. В конечном итоге это определяет зависимость между оптическими и электрическими параметрами материала, например между величиной темновой проводимости материала на постоянном токе, ее энергией активации и значением энергии Урбаха, шириной оптической запрещенной зоны. Нужно сказать, что из-за наличия в (7), (8) множителя $|\langle n' | n \rangle|^2$ количественный анализ спектра термических возбуждений электронов сложнее, чем анализ спектра оптических переходов. В общем случае определить вид этого множителя до сих пор не удалось, однако разработаны приближения [8,9], позволяющие находить значения $G[E_a^{loc}(T)]$ для случаев слабого и сильного электрон-фононного взаимодействия. Важную роль в этих приближениях играет параметр

$$\mathfrak{G} = \sum_k \chi_k (n_k + 1/2) \Delta_{k0}^2. \quad (9)$$

Суммирование в (9) ведется по всем допустимым значениям квазиволнового вектора фононов k, χ_k — зависящая от исходного числа фононов с заданным k осцилляторная волновая функция, Δ_{k0} — «конфигурационная координата» выделенной фононной моды. Если величина \mathcal{E} мала по сравнению с единицей, то доминируют нуль- и однофононные процессы; если же значение \mathcal{E} велико по сравнению с единицей, то преобладают многофононные процессы [8]. Более детальный анализ особенностей энергетического спектра процессов термического возбуждения электронов выходит за рамки настоящей работы.

Таким образом, в рамках рассмотренного выше подхода было показано, что спектры и оптического, и термического возбуждения носителей заряда существенно зависят от характеристик фононных полей, сосредоточенных в пределах областей пространственной когерентности фононных мод. При варьировании условий осаждения пленок меняются размеры неоднородностей [3] (и размеры областей пространственной когерентности фононов), это изменяет характеристики фононных полей материала, а значит, и параметры спектров оптических и термических переходов носителей заряда, определяющих в конечном итоге оптические и электрические свойства материала. Таким образом, для неоднородных материалов существование эффекта псевдолегирования (корреляции между их оптическими и электрическими параметрами при изменении технологических режимов формирования указанных материалов) становится не только объяснимым, но и естественным. В аморфных полупроводниковых материалах эффект псевдолегирования может проявляться более ярко, поскольку «вмороженные» фононы оказывают такое же влияние на положение локальных электронных уровней, как и обычные тепловые колебания. По-видимому, рост структурного совершенства материала до известных пределов увеличивает размеры областей пространственной когерентности фононов, однако добиться их неограниченной протяженности за счет упорядочения пространственного расположения атомов едва ли возможно. Косвенно об этом свидетельствует тот факт, что модель Скеттрапа впервые применена ее автором именно для анализа оптических характеристик кристаллических материалов, структурное совершенство которых несравненно выше, чем материалов аморфных.

Список литературы

- [1] Skettrup T. Phys. Rev. **B18**, 6, 2622 (1978).
- [2] Kody G.D., Tiedje V., Abeles B. Phys. Rev. Lett. **47**, 1480 (1981).
- [3] Лигачев В.А., Гордеев В.Н., Филиков В.А., Сулеман Х. ФТП **25**, 9, 1536 (1991).
- [4] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат (1991). 1232 с.
- [5] Vanesek M., Stuchlik J., Kocka J., Triska A. J. Non-Cryst. Sol. **77&78**, 299 (1985).
- [6] Jackson W.B. Phys. Rev. **B31**, 5187 (1985).
- [7] Звягин И.П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М. (1984). 192 с.
- [8] Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М. (1985). 184 с.
- [9] Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М. (1977). 672 с.