

$$\eta_+ = \left\{ 1 + \frac{g_+}{g_+} \exp\left(\frac{E_f - E_g + e_0\varphi_d(f)}{kT}\right) + \frac{g_-}{g_+} \exp\left(\frac{2E_f - E_g - E_a + 2e_0\varphi_d(f)}{kT}\right) \right\}^{-1},$$

$$\eta_- = \eta_+ \frac{g_0}{g_+} \exp\left(\frac{E_f - E_g + e_0\varphi_d(f)}{kT}\right), \quad \eta_- = \eta_+ \frac{g_-}{g_+} \exp\left(\frac{2E_f - E_g - E_a + 2e_0\varphi_d(f)}{kT}\right),$$

где g_i — кратность вырождения состояния. При вычислениях считалось, что $g_0=2$, $g_+=1$, $g_-=1$.

На рисунке представлена зависимость полной энергии взаимодействия $W=W_{\text{упр}}+W_{\text{эл}}+W_{\text{о}}$ от E_f и T . Видно, что, изменяя положение уровня Ферми, можно существенно изменить величину энергии взаимодействия. Это позволяет управлять процессами на дислокациях путем контролируемого изменения положения уровня Ферми. При низких температурах на зависимости $W(E_f)$ видны изломы, возникающие в тех случаях, когда уровень Ферми пересекает донорный или акцепторный уровень примеси и появляется дополнительный член в энергии электронного взаимодействия. Поэтому появление таких изломов в опытах, в которых проявляется взаимодействие дислокации с примесями, например, при определении предела текучести, может служить новым методом определения положения примесных уровней на дислокациях.

Авторы глубоко благодарны Б. М. Даринскому и Э. И. Рашбе за полезное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Фридель Ж. Дислокации. М., 1967. 644 с.
- [2] Матаре Г. Электроника дефектов в полупроводниках. М., 1974. 464 с.
- [3] Sumino K. // Defect and Properties of Semiconductors: Defect Engineering. KTK Scientific Publishers. Tokyo, 1987. P. 227—259.
- [4] Kechechyan K. O., Kirakossyan A. A. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 87. N 2. K125—K126.
- [5] Велявский В. И., Даринский Б. М., Шалимов В. В. // Изв. вузов СССР. Физика. 1981. № 9. С. 73—78.
- [6] Молоцкий М. И. // ЖТФ. 1988. Т. 58. В. 9. С. 1811—1813.
- [7] Heggie M. I., Jones R., Lister G. M. S., Umerski A. // Proc. 6 Int. Symp. on the Structure and Properties of Dislocations in Semiconductors. Oxford, 1989. P. 4.
- [8] Гольдфарб М. В., Молоцкий М. И. // Тез. докл. XIV Всес. (Пекаровского) совещ. по теории полупроводников. Донецк, 1989. С. 53.
- [9] Weber E., Alexander H. // Sol. St. Commun. 1980. V. 37. N 5. P. 371—373.
- [10] Omling P., Weber E. R., Montelius L., Alexander H., Michel J. // Phys. Rev. 1985. V. B32. N 10. P. 6571—6581.

Воронежский государственный университет
им. Ленинского комсомола

Получено 7.12.1989
Принято к печати 17.03.1990

УСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В АМОРФНОМ ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОМ КРЕМНИИ

Маслюк В. Т.

Известны сложности в интерпретации эффекта Стеблера—Вронского [1], состоящего в изменении проводимости полупроводников на основе аморфного гидрогенизированного кремния ($a\text{-Si:H}$) при длительном освещении. Ранее аналогичные эффекты, названные фотоструктурными превращениями, были обнаружены в халькогенидных стеклах (ХС) [2]. В случае ХС имеется ряд теоретических методов, позволяющих, например, описать концентрационную зависимость ряда физико-химических параметров при фотоиндуцированных прев-

ращениях (см. [3, 4]). В нашей работе показано, что данный подход можно применить и для аморфных полупроводников (АП) на основе α -Si : H.

С этой целью мы рассмотрим кластер из N атомов, процентное соотношение компонент которого соответствует химической формуле АП. Исследуется кластер, моделирующий АП сложного состава $\text{Si}_\alpha\text{C}_\beta\text{H}_{1-\alpha-\beta}$. Принимаются следующие предположения: как и в случае ХС, роль внешних факторов состоит в переключении гомо- и гетеросвязей между атомами, причем возможны все указанные переключения для каждого набора $\{\alpha, \beta\}$; энергия разрыва химических связей $i-j$ (E_{i-j}), $i, j = \text{Si}, \text{C}, \text{H}$ одинакова в пределах всего кластера; валентности атомов Si, C(H) равны соответственно 4 (1) и не изменяются в процессе структурных превращений. Обозначим через x_i ($i=1, 6$) число химических связей соответственно Si—Si, Si—H, H—H, Si—C, C—C, C—H, а через y_1 и y_2 — число «оборванных» связей Si и C. Если пренебречь топологическими особенностями структуры АП, то устойчивые состояния определяются совокупностью чисел $\{x_i, y_j\}$ ($i=1, 6, j=1, 2$). Будем исходить из условия, что число химических связей в кластере постоянно, т. е.

$$\sum_{i=1}^6 x_i + \sum_{j=1}^2 y_j / 2 = N(1 + \alpha + \beta).$$

$$2x_1 + x_2 + x_4 + y_1 = 4N\alpha,$$

$$2x_5 + x_4 + x_6 + y_2 = 4N\beta, \quad (1)$$

$$2x_3 + x_2 + x_6 = N(1 - \alpha - \beta).$$

Система уравнений (1) позволяет определить все наборы $\{x_i, y_j\}$ для данного соотношения компонент АП. Следует ожидать прямой зависимости между величиной энергии, которая может аккумулироваться при структурных превращениях, и амплитудой изменения физико-химических параметров АП [4].

Значения энергии разрыва единичных химических связей (в эВ), полученные на основе работ [5, 6] (в скобках приведены соответствующие значения электроотрицательностей химических элементов)

	Si (1.8)	C (2.5)	H (2.1)
Si (1.8)	1.9	3.2	3.23
C (2.5)	3.2	3.5	4.09
H (2.1)	3.23	4.09	4.4

В таблице приведены значения энергии разрыва химических связей для выбранного состава АП. Энергия разрыва гетеросвязей оценивалась по формуле Полинга [5]. Поскольку разность электроотрицательностей химических элементов меньше единицы, точность определения энергии разрыва гетеросвязей не хуже 10%. Из таблицы видно, что наибольшая величина избыточной энергии может аккумулироваться при насыщении гетеросвязей Si—C. Несколько меньше энергоёмкость химических связей Si—H, C—H. Поэтому далее отдельно анализируются два случая.

1) В результате фотоструктурных превращений наиболее вероятными являются насыщение и распад гетеросвязей Si—C, C—H. Из (1) следует, что экстремальные составы АП, в которых амплитуда индуцированных изменений параметров максимальна, можно записать в виде формулы $\text{Si}_{\alpha_{\text{ex}}}\text{C}_{\beta_{\text{ex}}}\text{H}_{1-\alpha_{\text{ex}}-\beta_{\text{ex}}}$, где параметры α_{ex} , β_{ex} связаны соотношением

$$5\beta_{\text{ex}} - 3\alpha_{\text{ex}} - 4(\beta_{\text{ex}}\tau_2 - \alpha_{\text{ex}}\tau_1) = 1, \quad (2)$$

τ_1, τ_2 — относительные числа оборванных связей атомов Si и C соответственно.

2) Если указанные превращения испытывают гетеросвязи Si—C, Si—H, то вместо (2) для α_{ex} , β_{ex} справедливо иное уравнение:

$$5\alpha_{ex} - 3\beta_{ex} - 4(\alpha_{ex}^{-1} - \beta_{ex}^{-2}) = 1. \quad (3)$$

Пренебрегая наличием оборванных связей и предполагая $\beta \rightarrow 0$, из (3) можно получить, что для АП a -Si : H экстремальный состав содержит 20 ат% водорода. Наличие же оборванных химических связей в a -Si : H приводит к значению $\alpha_{ex} > 0.2$. Из (1) можно определить число структурных состояний N_a , которое может реализоваться в a -Si : H. Согласно определению, N_a представляет собой совокупность наборов $\{x_i, y_j\}$ и равно

$$0 \leq N_a \leq \begin{cases} 4aN, & \alpha \leq 0.2, \\ (1-a)N, & \alpha \geq 0.2. \end{cases}$$

Видно, что в составе $\alpha = \alpha_{ex}$ реализуется также наибольшее число структурных состояний АП. Поскольку индуцированное переключение гомо- и гетеросвязей изменяет степень ионности и энергию связи структурной сетки АП, возможна аккумуляция энергии [7]. Из таблицы видно, что значение избыточной энергии, которая может аккумулироваться на одну связь, составляет 0.1—0.5 эВ. Другими словами, если предположить возможность реализации всех переключений гомо- и гетеросвязей, то энергоёмкость состава $Si_{\alpha_{ex}}C_{\beta_{ex}}H_{1-\alpha_{ex}-\beta_{ex}}$ будет равна 1—10 кДж/см³. Анализ показывает, что наиболее перспективным для этой цели является a -C : H, содержащий 20 ат% водорода.

Таким образом, предлагаемый подход позволяет определить экстремальные составы АП, степень изменения параметров в котором максимальна.

Интересно сопоставить расчетные и экспериментальные данные, полученные для a -Si : H. В работе [8] отмечается, что в a -Si : H, содержащем 20 ат% водорода, действительно наблюдается минимальная фотопроводимость. Это может быть обусловлено упрочнением структурной сетки АП вследствие насыщения гетеросвязей Si—H.

Дальнейшее уточнение расчета предполагает учет топологического вырождения структуры a -Si : H и вероятности переключения гомо- и гетеросвязей. Представляет интерес постановка прямых экспериментов по исследованию, например, концентрационной зависимости эффекта Стеблера—Вронского, а также эффекта аккумуляции энергии при структурных превращениях в АП на основе a -Si : H.

Список литературы

- [1] Staebler D. L., Wronski C. R. // J. Appl. Phys. 1980. V. 51. P. 3262.
- [2] Любин В. М. // Чтения памяти А. Ф. Иоффе. Л., 1984—1986. С. 41—52.
- [3] Nang T. T., Okuda M., Matavshita T. // Phys. Rev. 1979. V. B19. P. 947.
- [4] Маслюк В. Т. // Препринт ИЯИ АН УССР. Киев, 1987. № 23.
- [5] Полинг Л. Общая химия. М., 1974. 819 с.
- [6] Пинментл Т., Сиратли Р. Как квантовая механика объясняет химическую связь. М., 1973. 331 с.
- [7] Маслюк В. Т., Дойников Л. И. // ДАН УССР. Сер. А. 1986. № 8. С. 60—63.
- [8] Дпмова В., Кранчева А., Иванова П., Недялкова Л. // Матер. конф. «Некристаллические полупроводники-89». Ужгород, 1989. С. 186—188.

Институт ядерных исследований
АН УССР
Ужгородское отделение

Получено 18.01.1990
Принято к печати 19.03.1990