

- [7] Parada N. J., Pratt G. W. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. N 5. P. 180—182.  
 [8] Прозоровский В. Д., Решидова И. Ю., Браташевский Ю. А., Пырегов Б. П. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 7. С. 1325—1327.  
 [9] Богородицкий Н. П., Волокобинский Ю. М., Воробьев А. А., Тареев Б. М. Теория диэлектриков. М.—Л., 1965. 344 с.

Донецкий физико-технический институт  
АН УССР

Получено 15.12.1988  
Принято к печати 10.01.1989

ФТП, том 23, вып. 5, 1989

## О РАЗМЕРАХ УПОРЯДОЧЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ В НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОМ КРЕМНИИ

Сванбаев Е. А., Таурбаев Т. И.

Экспериментальные исследования последних лет показали, что некристаллический сплав кремния с водородом можно получить в виде аморфного или микрокристаллического гидрогенизированного кремния, обозначаемых как  $a\text{-Si} : \text{H}$  и  $mk\text{-Si} : \text{H}$  соответственно. Спектры дифракционного отражения «качественного»  $a\text{-Si} : \text{H}$  хорошо описываются моделью непрерывной случайной сетки Полка, модифицированной включением 20 % неустойчивых тетраэдрических конфигураций. Интерпретация свойств  $mk\text{-Si} : \text{H}$  обычно ведется на основе двухфазной модели, по которой микрокристаллы (МК) окружены межгранулярным неупорядоченным материалом (НМ). Подробные результаты исследования этих материалов приведены в [1-3].

В данной работе рассмотрена возможность описания структур  $a\text{-Si} : \text{H}$  и  $mk\text{-Si} : \text{H}$  в рамках однофазного микрокристаллитного представления.

На рис. 1, а схематически показана двухфазная модель структуры  $mk\text{-Si} : \text{H}$ . Микрокристаллы (заштрихованные области) со средним размером  $\delta$  разделены НМ толщиной  $2a$ . Доля объема с упорядоченным расположением атомов составляет  $x = V / (V + V_1)$ , где  $V$  — объем среднего по размеру МК,  $V_1$  — объем НМ, приходящегося на один МК. Конкретизируя форму усредненного по размеру МК, можно оценить среднюю толщину неупорядоченного материала, покрывающего микрокристалл.

Согласно экспериментальным данным [1], для  $mk\text{-Si} : \text{H}$ , легированного бором,  $x = 0.5$  и  $\delta = 6$  нм, отсюда следует  $a \approx 0.8$  нм. Для качественного  $mk\text{-Si} : \text{H}$  [2]  $x = 0.65 \div 0.97$  и  $\delta \approx 4 \div 6$  нм, что приводит к значению  $a$  в интервале  $0.3 \div 0.04$  нм порядка межатомного расстояния  $a_0$ . Следовательно, НМ не может присутствовать в виде отдельной фазы, а представляет собой часть поверхностных атомов микрокристаллов.

Далее рассмотрим однофазную модель структуры  $mk\text{-Si} : \text{H}$ , представленную схематически на рис. 1, б, где штрихами отмечен монослой атомов на поверхности МК. Из-за хаотической ориентации микрокристаллов друг относительно друга на их границах возникают области с неупорядоченным расположением атомов толщиной порядка двух моноатомных слоев. На такой малой толщине не может локализоваться деформация, что говорит о существовании механизма, эффективно снижающего межкристаллитные напряжения. В  $mk\text{-Si} : \text{H}$  эти напряжения могут быть значительно снижены за счет замены деформированных  $\text{Si}-\text{Si}$ -связей на  $\text{Si}-\text{H}$ -связи. Поэтому концентрация водорода в качественном некристаллическом гидрогенизированном кремнии должна быть больше, чем требуется для пассивации оборванных связей.

Полагая, что два монослоя на границах МК при структурных измерениях создают фон, характерный для неупорядоченного материала, оценим зависимость  $x$  от среднего размера МК из соотношения  $x = (V - V_0) / V$ . Здесь  $V -$

объем среднего по размерам МК, а  $V_0$  — объем поверхностного слоя атомов МК толщиной  $a_0$ . Задавая форму МК в виде кубиков или шаров, получим

$$x \approx \left(1 - \frac{2a_0}{\delta}\right)^3. \quad (1)$$

Рассчитанная по (1) зависимость  $x$  от среднего размера МК показана на рис. 2 (кривая  $a$ ). Как видно из рисунка, уменьшение  $\delta$  от 20 до 1 нм ведет к уменьшению  $x$  от 0.92 до 0.11, при этом размерам  $\delta < 3$  нм соответствует резкий спад доли объема с упорядоченным расположением атомов.

Поделив в выражении  $x = (V - V_0)/V$  числитель и знаменатель на объем одного атома, для микрокристалла произвольной формы получим  $x = (m - m_0)/m$ , где через  $m$  и  $m_0$  обозначено число атомов в МК и в его поверхностном монослое. Так, в микрокристалле, содержащем три заполненные координационные сферы атомов, упакованных в алмазоподобной решетке,  $m - m_0 = 5$ ,  $m = 41$  и  $x = 0.12$ , а диаметр эквивалентного по объему шара  $d = 1.16$  нм.

Считая водород в основном химически связанным на поверхности МК с  $n_s^*$  атомами кремния, можно оценить средний размер микрокристаллов. Со-

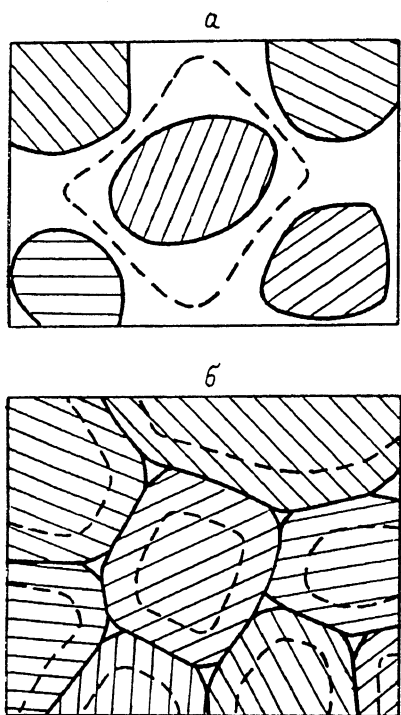


Рис. 1.

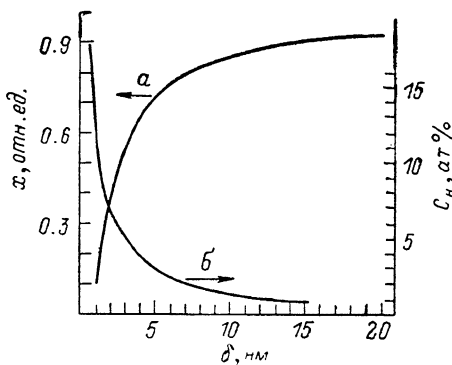


Рис. 2.

отношения, связывающие объем  $V$  и поверхность  $S$  среднего по размерам МК с объемной концентрацией водорода и плотностью мк-Si : H, запишутся в виде

$$S n_s N = n_{\text{SiH}} + \frac{1}{2} n_{\text{SiH}_2} + \frac{1}{3} n_{\text{SiH}_3}, \quad (2)$$

$$V \rho_k N = \rho, \quad (3)$$

где  $N$  — число МК в единице объема,  $n_{\text{SiH}}$ ,  $n_{\text{SiH}_2}$ ,  $n_{\text{SiH}_3}$  — концентрации водорода, связанного в моногидридной, дигидридной или тригидридной формах соответственно,  $\rho_k$  и  $\rho$  — плотности кристаллического и некристаллического кремния. Из соотношений (2) и (3) получается следующее выражение для среднего размера микрокристалла, имеющего форму кубика или шара:

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_k} \cdot \frac{6n_s}{(n_{\text{SiH}} + \frac{1}{2}n_{\text{SiH}_2} + \frac{1}{3}n_{\text{SiH}_3})}. \quad (4)$$

Величина  $n_s^*$  определяется технологическими условиями приготовления гидрогенизированного некристаллического кремния и может изменяться в интервале от нуля до значения концентрации атомов на поверхности кристаллического кремния. Чтобы получить соответствие используемых в расчете параметров (размеров МК и концентрации водорода в мк-Si : H) с эксперименталь-

ными данными, было выбрано значение  $n_s = 1.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Найденная по (4) зависимость  $\delta$  от объемной концентрации водорода, входящего в моногидридной форме, показана на рис. 2 (кривая б). Как видно из рисунка, увеличение концентрации водорода от 1 до 8 ат% уменьшает  $\delta$  от 18 до 2 нм, что совпадает с известным диапазоном изменения размеров кристаллитов в мк-Si : H. Для концентраций водорода от 8 до 15 ат%, характерных для качественного a-Si : H, значения  $\delta$  уменьшаются от 2 до 1 нм, что сопоставимо с размерами МК, полученными в [4] из зависимости холловской подвижности от размеров кристаллитов. Вхождение водорода только в дигидридной или тригидридной форме увеличит значения  $\delta$  в 2 или 3 раза соответственно. Для смешанных форм вхождения водорода и значений  $n_s$ , соответствующих конкретному материалу, оценку  $\delta$  можно провести по формуле (4).

При размерах МК от 1 до 1.5 нм доля объема с упорядоченным расположением атомов составит лишь  $0.1 \div 0.25$ , что согласуется с принятым в модифицированной модели Полка [2]. Но тогда материал в целом для структурных измерений будет неупорядоченным, несмотря на сохранение периодичности в пределах каждого из МК. Отметим, что уменьшение концентрации водорода по сравнению с необходимой для полной замены деформированных межкристаллитных связей приведет к возрастанию деформационных напряжений и нарушению упорядоченности в МК, что должно соответствовать «некачественному» мк-Si : H или a-Si : H. Отсутствие водорода, например, в a-Si, видимо, приводит к структуре, подобной непрерывной случайной сетке.

Таким образом, на основе однофазной микрокристаллитной модели проведена оценка размеров и доли упорядоченных областей в «качественном» аморфном и микрокристаллическом гидрогенизированном кремнии.

Показано, что водород в этих материалах не только пассивирует оборванные связи, но и снижает деформационные напряжения на границах микрокристаллов.

#### Список литературы

- [1] Аморфные полупроводники и приборы на их основе / Под ред. Й. Хамакавы. М., 1986. 376 с.
- [2] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. В. 1. Структура, приготовление и приборы / Под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски. М., 1987. 368 с.
- [3] Физика гидрогенизированного аморфного кремния. В. 2. Электронные и колебательные свойства / Под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски. М., 1988. 448 с.
- [4] Spear W. E., Willeke G., LeComber P. G., Fitzgerald A. G. // J. Phys. 1981. V. 42. N C4. P. 257.

Казахский государственный университет  
им. С. М. Кирова  
Алма-Ата

Получено 27.06.1988  
Принято к печати 11.01.1989

ФТП, том 23, вып. 5, 1989

## ТОК ЧЕРЕЗ ПОЛУПРОВОДНИКОВУЮ ПЛАСТИНУ С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ФОНОНАМИ

Гредескул Т. С., Гуревич Ю. Г., Машкевич О. Л.

Как было показано в работе [1], при протекании электрического тока поперек тонкого полупроводникового слоя возникает неоднородность температур электронов и фононов в направлении протекающего тока, обусловленная выделением и поглощением тепла на границах образца (эффект Пельтье).

Учет электрон-фононного увлечения приводит к появлению принципиально нового механизма неоднородности температур электронов (также в направлении протекающего через образец электрического тока). Физика этого механизма