ными данными, было выбрано значение $n_s=1.5\cdot10^{14}$ см$^{-2}$. Найденная по (4) зависимость δ 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 δ 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 δ 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 δ в 2 или 3 раза соответственно. Для смешанных форм вхождения водорода и значений n_s, соответствующих конкретному материалу, оценку δ можно провести по формуле (4).

При размерах МК от 1 до 1.5 нм доля объема с упорядоченным расположением атомов составит лишь $0.1\div0.25$, 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 определяется сносом фононов электронами в условиях развитого увлечения в направлении, противоположном току. Частые фонон-фононные соударения формируют при этом в каждом сечении образца планковское распределение фононов по энергиям с тем большей температурой, чем больше фононов находится в данном сечении. Таким образом, температура фононов возрастает в направлении, противоположном току. В свою очередь, фононы взаимодействуют с электронами как энергетически, так и импульсно. Первое взаимодействие сводится к передаче энергии от фононов электронам, второе приводит к сортировке электронов по энергиям фононным увлечением [2] за счет потока тепла, возникшего в фононной подсистеме. Помимо этого электрон-фононное увлечение меняет и сам эффект Пельтье.

Вышеуказанный механизм, а также эффект Пельтье формируют градиенты электронной и фононной температур, знаки которых определяются многими параметрами. Поэтому представляет интерес изучить механизмы неоднородности температур электронов и фононов, вызванные эффектом Пельтье и электрон-фононным увлечением одновременно, а также вид соответствующих вольтамперных характеристик.

Рассмотрим бесконечную полупроводниковую пластину толщиной $2a$ $(-a \leqslant x \leqslant a)$, в которой вдоль оси X протекает электрический ток, определяемый выражением, записанным с учетом увлечения [3],

$$J = \sigma_0 (E - \alpha_e \nabla T_e - \alpha_p \nabla T_p), \tag{1}$$

где σ_0 — электропроводность, E — электрическое поле, $T_{e,p}$ — температуры электронов и фононов, $\alpha_{e,p}$ — коэффициенты дифференциальных электронной и фононной термоэдс, вычисленные с учетом электрон-фононного увлечения. Теплообмен с окружающей средой осуществляется только через стенки $X = \pm a$. Температуры электронов и фононов легко найти, решая соответствующие уравнения баланса энергии, ограничившись линейным по току приближением [2]:

$$\begin{gathered} \varkappa_e t_e'' + \varkappa_{ep} t_p'' = P (t_e - t_p), \\ -\varkappa_p t_p'' - \varkappa_{ep} t_p'' = P (t_e - t_p). \end{gathered} \tag{2}$$

Граничные условия имеют вид [4]

$$\begin{gathered} \Pi_e - \varkappa_e t_e' |_{\pm a} - \varkappa_{ep} t_p' |_{\pm a} = \pm \eta_e t_e |_{\pm a}, \\ \Pi_p - \varkappa_p t_p' |_{\pm a} - \varkappa_{ep} t_e' |_{\pm a} = \pm \eta_p t_p |_{\pm a}. \end{gathered} \tag{3}$$

Здесь $t_{e,p} = \frac{1}{J} (T_{e,p} - T_0)$, T_0 — температура окружающего образец термостата; P — параметр, характеризующий электрон-фононное энергетическое взаимодействие; $\Pi_e = \alpha_e T_0 - \lambda$, λ — поверхностный коэффициент Пельтье; $\Pi_p = \alpha_p T_0$; $\eta_{e,p}$ — скорости поверхностной релаксации энергии электронов и фононов. Электронная и фононная объемные теплопроводности $\varkappa_e$ и $\varkappa_p$ могут быть представлены в виде $\varkappa_e = \varkappa_e^0 + \varkappa_e^d$, $\varkappa_p = \varkappa_p^0 + \varkappa_p^d$ [3], где первые слагаемые вычислены без учета увлечения, а вторые описывают вклад увлечения. Коэффициент же $\varkappa_{ep}$ в отсутствие увлечения обращается в нуль [3]. Решение системы (2), (3) имеет вид

$$t_{e,p} = \frac{\left\{\frac{\Pi_e}{\eta_e} [(\varkappa_e + \varkappa_p) \operatorname{th} ka + \varkappa_e k L_p - \varkappa_{ep} k L_2] + \frac{\Pi_p}{\eta_p} [(\varkappa_p + \varkappa_{ep}) \operatorname{th} ka + \varkappa_p k L_e - \varkappa_{ep} k L_1]\right\} X \mp (\varkappa_{p,e} + \varkappa_{ep}) \left\{\frac{\Pi_p}{\eta_p} (a + L_e + L_1) - \frac{\Pi_e}{\eta_e} (a + L_p + L_2)\right\} \frac{\operatorname{sh} kx}{\operatorname{ch} ka}}{(a + L_e + L_1) [(\varkappa_e + \varkappa_{ep}) \operatorname{th} ka + \varkappa_e k L_p - \varkappa_{ep} k L_2] + (a + L_p + L_2) [(\varkappa_p + \varkappa_{ep}) \operatorname{th} ka + \varkappa_p k L_e - \varkappa_{ep} k L_1]}, \tag{4}$$

где

$$L_{e,p} = \frac{\varkappa_{e,p}}{\eta_{e,p}}, \quad L_1 = \frac{\varkappa_{ep}}{\eta_e}, \quad L_2 = \frac{\varkappa_{ep}}{\eta_p}, \quad \beta = \frac{\varkappa_e + \varkappa_{ep}}{\varkappa_p + \varkappa_{ep}}, \quad k^2 = P \frac{\varkappa_e + \varkappa_p + 2\varkappa_{ep}}{\varkappa_e \varkappa_p - \varkappa_{ep}^2}.$$

Мы будем рассматривать случай развитого увлечения, когда выполняются неравенства [3]

$$\varkappa_e \ll |\varkappa_{ep}| \ll \varkappa_p, \quad \varkappa_e\varkappa_p \gg \varkappa_{ep}^2.$$

Тогда $\beta = \varkappa_{ep}/\varkappa_p$, $k=\sqrt{P/\varkappa_e}$, $L_e \ll L_1$, $L_p \gg L_2$, и ответ можно записать так:

$$t_{e,p} = \frac{\left\{\frac{\Pi_e}{\eta_e}(\beta \operatorname{th} ak + kL_0) + \frac{\Pi_p}{\eta_p}(\operatorname{th} ak + kL_e)\right\} X + \gamma_{e,p}\left\{\frac{\Pi_e}{\eta_e}(a+L_p) - \frac{\Pi_p}{\eta_p}(a+L_1)\right\}\frac{\operatorname{sh} kx}{\operatorname{ch} ka}}{(a+L_1)(\beta \operatorname{th} ak + kL_0) + (a+L_p)(\operatorname{th} ak + kL_e)}, \tag{5}$$

где $L_0 = \varkappa_e/\eta_p$, $\gamma_e = 1$, $\gamma_p = -\beta$. Отметим, что $t_{e,p}$ — нечетные функции X, т. е. если, например, при $X > 0$ частицы данного сорта греются, то при $X < 0$ они охлаждаются. Решение задачи в такой же постановке, но без учета увлечения легко получить, положив в (4) $\varkappa_{ep}=0$, $\Pi_p=0$. В этом случае $k=\sqrt{P/\varkappa_e^0}$, $\beta=\varkappa_e^0/\varkappa_p^0$. Отметим, что малый параметр β в случае развитого увлечения имеет большее значение, чем в отсутствие увлечения. Поэтому учет электрон-фононного увлечения приводит к росту нелинейных слагаемых в фононной температуре.

Как видно из выражения (5), электронная и фононная температуры состоят из двух слагаемых: общего линейного и различающихся нелинейных, отличных от нуля в погранслое толщиной k^{-1}. Каждое из них обусловлено как эффектом Пельтье, так и сносом фононов.

При выполнении неравенства

$$\frac{\Pi_e}{\eta_e}(\beta \operatorname{th} ka + kL_0) \gg \frac{\Pi_p}{\eta_p}(\operatorname{th} ak + kL_e) \tag{6}$$

линейное слагаемое определяется в основном эффектом Пельтье. В обратном же случае основной вклад в формирование линейного слагаемого вносит снос фононов.

Аналогичные неравенства можно написать и для нелинейного слагаемого. Если

$$\frac{\Pi_e}{\eta_e}(a+L_p) \gg \frac{\Pi_p}{\eta_p}(a+L_1), \tag{7}$$

то оно определяется эффектом Пельтье, а при обратном соотношении — сносом фононов. Физический смысл указанных неравенств достаточно прозрачен. Понятно, что в зависимости от того, какая комбинация неравенств выполняется, возможны четыре вида распределений температур электронов и фононов. При выполнении неравенств (6), (7) выражение для температур приобретает вид

$$t_{e,p} = \frac{\frac{\Pi_e}{\eta_e}(\beta \operatorname{th} ak + kL_0)\; X + \gamma_{e,p}\frac{\Pi_e}{\eta_e}(a+L_p)\frac{\operatorname{sh} kx}{\operatorname{ch} ka}}{(a+L_1)(\beta \operatorname{th} ak + kL_0) + (a+L_p)(\operatorname{th} ak + kL_e)}. \tag{8}$$

Представляют интерес сравнение вкладов линейного и нелинейного слагаемых в формирование температур электронов и фононов, а также знак градиента этих температур на границе образца. В случае, когда $ak \ll 1$ (тонкие образцы), температуры на границе всегда определяются нелинейным слагаемым. Если же $ak \gg 1$ (толстые образцы), то нелинейное слагаемое является главным, когда

$$(\beta + kL_0)\, a \ll \gamma_{e,p}(a+L_p). \tag{9}$$

При этом градиент электронной температуры всегда положителен, а знак градиента фононной определяется знаком коэффициента $\varkappa_{ep}$.[1] Если $\varkappa_{ep} > 0$, то $\nabla t_p < 0$, а при $\varkappa_{ep} < 0$ градиент фононной температуры совпадает по знаку с градиентом электронной температуры.

Линейное слагаемое может быть определяющим только в толстых образцах ($ak \gg 1$) при выполнении неравенства, обратного (9). При выполнении условий $\varkappa_{ep} < 0$, $|\beta| \gg kL_0$ температуры $t_{e,p}(a)$ положительны, во всех остальных случаях они отрицательны.

[1] Отметим, что Π_e, $\Pi_p < 0$, а знаменатель в (5) всегда положителен.

Если выполняются неравенства, обратные (6), (7), то

$$t_{e,p}=\frac{\dfrac{\Pi_p}{\eta_p}(\operatorname{th}ak+kL_e)X-\gamma_{e,p}\dfrac{\Pi_p}{\eta_p}(a+L_1)\dfrac{\operatorname{sh}kx}{\operatorname{ch}ka}}{(a+L_1)(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)+(a+L_p)(\operatorname{th}ak+kL_e)}. \tag{10}$$

В этом случае электронная температура на границе образца определяется линейным слагаемым только в толстых образцах ($ak\gg 1$) при условии

$$(1+kL_e)a\gg a+L_1. \tag{11}$$

Фононная температура в толстых образцах всегда линейна, а в тонких линейна только при выполнении неравенства

$$a+L_e\gg\beta(a+L_1). \tag{12}$$

Знак же линейного члена в выражении (10) при $X>0$ всегда отрицателен. Знак нелинейного слагаемого в выражении для t_e отрицателен при $X>0$, только когда $\varkappa_{ep}<0$, $a\ll|L_1|$. При $\varkappa_{ep}<0$, $a\gg|L_1|$ знак $t_p\ (a)$ положителен, а в остальных случаях $t_p\ (a)<0$.

При выполнении неравенств (6) и обратного (7) выражение для температур электронов и фононов приобретает вид

$$t_{e,p}=\frac{\dfrac{\Pi_e}{\eta_e}(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)X-\gamma_{e,p}\dfrac{\Pi_p}{\eta_p}(a+L_1)\dfrac{\operatorname{sh}kx}{\operatorname{ch}ka}}{(a+L_1)(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)+(a+L_p)(\operatorname{th}ak+kL_e)}.$$

Температуры на границе определяются линейным слагаемым, когда

$$\frac{\Pi_e}{\eta_e}(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)a\gg\gamma_{e,p}\frac{\Pi_p}{\eta_p}(a+L_1)\operatorname{th}ak, \tag{13}$$

и их знак (при $X>0$) положителен, когда $\varkappa_{ep}<0$, $|\beta|\operatorname{th}\ ak>kL_0$. В остальных случаях $t_{e,p}\ (a)<0$. Температуры в этом случае записываются так: $t_{e,p}=\dfrac{\Pi_e}{\eta_e}\dfrac{X}{a+L_1}$. Если же выполняется неравенство, обратное (13), то основную роль играет нелинейное слагаемое

$$t_{e,p}=-\gamma_{e,p}\frac{\Pi_p}{\eta_p}\frac{\operatorname{sh}kx/\operatorname{ch}ka}{(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)}.$$

Температура электронов при этом в области $X>0$ отрицательна только в случае $\varkappa_{ep}<0$, $a\ll|L_1|$. Фононная же температура в той же области отрицательна всегда, за исключением случая $\varkappa_{ep}<0$, $a\gg|L_1|$.

При выполнении неравенств (7) и обратного (6) температуры $t_{e,p}$ приобретают вид

$$t_{e,p}=\frac{\dfrac{\Pi_p}{\eta_p}(\operatorname{th}ak+kL_e)X+\gamma_{e,p}\dfrac{\Pi_e}{\eta_e}(a+L_p)\dfrac{\operatorname{sh}kx}{\operatorname{ch}ka}}{(a+L_1)(\beta\operatorname{th}ak+kL_0)+(a+L_p)(\operatorname{th}ak+kL_e)}.$$

В случае, когда

$$\frac{\Pi_p}{\eta_p}(\operatorname{th}ak+kL_e)a\gg\gamma_{e,p}\frac{\Pi_e}{\eta_e}(a+L_p)\operatorname{th}ak,$$

температуры на границе $X=a$ отрицательны, определяются линейным слагаемым и могут быть записаны в виде

$$t_{e,p}=\frac{\Pi_p}{\eta_p}\frac{X}{a+L_p}.$$

При выполнении обратного неравенства главным является нелинейное слагаемое

$$t_{e,p}=\gamma_{e,p}\frac{\Pi_e}{\eta_e}\frac{\operatorname{sh}kx/\operatorname{ch}ka}{\operatorname{th}ak+kL_e}.$$

Температура электронов в области $X > 0$ всегда отрицательна, а фононов — только при $\varkappa_{ep} < 0$.

Поскольку задача решалась в линейном по току приближении, вольтамперные характеристики, естественно, остаются линейными, а неоднородность $t_{e,p}$ приводит только к изменению проводимости образца.

Выражение для тока (1) при учете электрон-фононного увлечения удобно записать в виде

$$J = \sigma \mathbf{E},$$

где

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1+f}, \quad f = \frac{\sigma_0}{a}\left[\alpha_e t_e(a) + \alpha_p t_p(a)\right].$$

Поскольку $\alpha_{e,p} < 0$, в случае, когда оба градиента температур положительны, функция $f < 0$ и проводимость образца растет. Если оба градиента отрицательны, то и проводимость падает. Если градиенты по знаку различаются, то знак величины f определяется конкуренцией слагаемых с $t_e(a)$ и $t_p(a)$.

Список литературы

[1] Машкевич О. Л. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 10. С. 1853—1855.
[2] Бочков А. В., Гуревич Ю. Г., Машкевич О. Л. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 7. С. 281—284.
[3] Бочков А. В., Гуревич Ю. Г., Машкевич О. Л. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 3. С. 572—574.
[4] Басс Ф. Г., Бочков В. С., Гуревич Ю. Г. // Электроны и фононы в ограниченных полупроводниках. М., 1984. С. 287.

Харьковский государственный университет
им. А. М. Горького

Получено 9.11.1988
Принято к печати 11.01.1989

ФТП, том 23, вып. 5, 1989

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ЭФФЕКТА РАДИАЦИОННОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ

Пахаруков Ю. В.

Под действием малых доз облучения электронов происходит упорядочение сильно нарушенных полупроводниковых кристаллов. При аннигиляции свободных пар Френкеля в кристаллах Si выделяется энергия порядка нескольких электронвольт. При большом числе аннигилировавших пар кристалл должен нагреваться, однако в эксперименте [1] подъем температуры в неупорядоченном материале оказался значительно ниже. Так, при числе аннигиляций 10^{20} см$^{-3}$ увеличение температуры составляло 2.6 K, при этом на каждый акт аннигиляции приходится энергия 0.3 эВ, что на порядок ниже, чем в монокристалле. Причина этого эффекта, по мнению авторов статьи [1], состоит в расходовании части энергии в окрестности θ-вспышки на разрыв связей в ассоциациях дефектов.

Между тем снижение энергии аннигиляции может быть связано с размытием функции распределения энтальпии $f(\varphi)$ для однотипных атомных перестроек при переходе от монокристаллического полупроводника к неупорядоченному. В этом случае процесс упорядочения связан с вероятностью перестройки дефекта из (φ_1) в состояние с меньшей энтальпией φ_2, $(\varphi_1 - \varphi_2) > 0$, а отжиг — с вероятностью того, что дефект не может оказаться в конфигурации с потенциальной энергией ниже энергии монокристалла. Поскольку энтальпия начального состояния дефекта оказывается распределенной, при вычислении тепловыделения в результате рекомбинации дефектов в неупорядоченном полупроводнике ее необходимо усреднить по $f(\varphi)$.