

## ВЛИЯНИЕ ТРЕХЦЕНТРОВЫХ СВЯЗЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА АМОРФНОГО ГИДРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

Голикова О. А., Грехов А. М., Сальков Т. Е.

Строение структурной сетки аморфного гидрированного кремния ( $a\text{-Si} : \text{H}$ ) сложно: помимо таких известных конфигураций, как  $\text{Si}-\text{Si}$ -оборванная связь (ОС),  $\text{SiH}$ ,  $\text{SiH}_2$ ,  $\text{SiH}_3$  и  $(\text{SiH}_2)_n$ , рассматривались модели и других конфигураций, в частности  $\text{Si}-\text{H}-\text{Si}$  (трехцентровая связь, ТЦС). Предполагалось, что именно за счет разрыва ТЦС происходит низкотемпературная ( $t \geq 350^\circ\text{C}$ ) экзодиффузия водорода [1], что образование ТЦС при длительной засветке обуславливает эффект Стаблера-Вронского [2], что уменьшение числа ТЦС в частично фторированном материале снижает величину плотности состояний в щели подвижности  $g(\epsilon)$  [3]. В [4], где проведены расчеты методом ЛКАО, было показано, что ТЦС действительно дают вклад в  $g(\epsilon)$ . С помощью модифицированной модели ТЦС был объяснен ряд спин-чувствительных свойств  $a\text{-Si} : \text{H}$  [5].

В настоящей работе модель ТЦС впервые используется для объяснения экспериментально установленных изменений положения уровня Ферми  $\epsilon_F$   $a\text{-Si} : \text{H}$ .

В настоящей работе модель ТЦС впервые используется для объяснения экспериментально установленных изменений положения уровня Ферми  $\epsilon_F$   $a\text{-Si} : \text{H}$ .

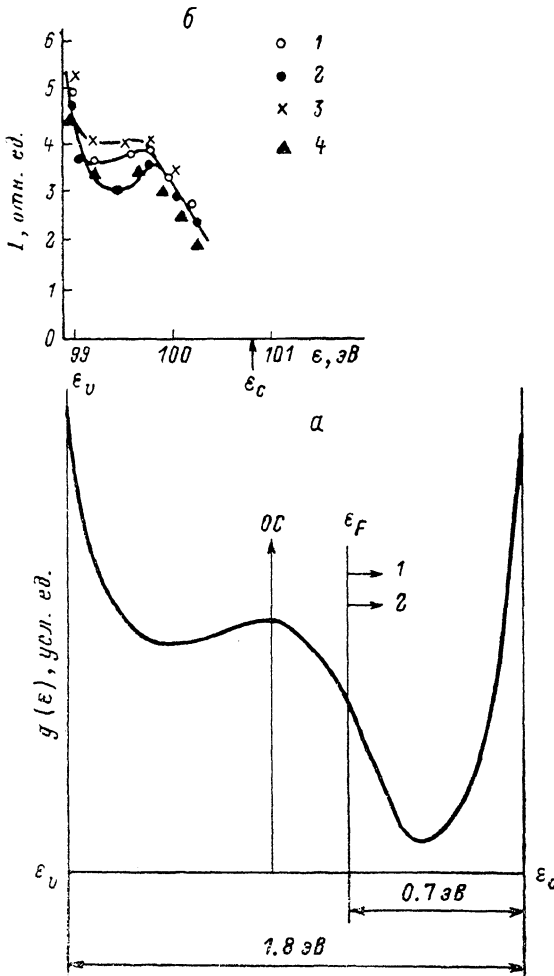


Рис. 1. Схематическое представление  $g(\epsilon)$  в щели подвижности  $a\text{-Si} : \text{H}$  (а).

$\epsilon_F$  — уровень Ферми нелегированного  $a\text{-Si} : \text{H}$ ; ОС — уровень нейтральных оборванных связей; сдвиги  $\epsilon_F$ : 1 — повышение

$T_s$  ( $v, r = \text{const}$ ), 2 — понижение  $r$  ( $T_s, v = \text{const}$ ). Стрелкой показано изменение  $g(\epsilon)$  на уровне ОС при увеличении  $r$  и при облучении ионами  $\text{Ar}^+$  ( $\epsilon_F = \text{const}$ ).

б) рентгеновские эмиссионные спектры Si  $L_{2,3}$ , отражающие локальную частичную плотность состояний [10]: 1 — пленка, осажденная при  $T_s = 250^\circ\text{C}$ ; 2, 3, 4 — та же пленка, отожженная в вакууме при  $T_a = 350, 390, 420^\circ\text{C}$  соответственно (время отжига 1 ч).

без стандартного легирования примесями элементов III и V групп: эти изменения могут происходить только за счет трансформаций  $g(\epsilon)$ . Было проведено кластерное моделирование структурной сетки  $a\text{-Si} : \text{H}$  и рассчитана электронная структура при наличии ТЦС; результаты сопоставлены с экспериментальными данными.

На рис. 1, а показаны как результаты воздействия на  $\epsilon_F$  условий осаждения пленок, полученных ВЧ разложением смеси 25 %  $\text{SiH}_4 + 75\%$  He (температура и скорость осаждения —  $T_s, v$ , скорости прокачки газовой смеси —  $r$ ), так и результаты облучения пленок (доза  $10^{15}$  см $^{-2}$ , энергия 105 кэВ) ионами  $\text{Ar}^+$ .

Несмотря на увеличение числа ОС, достигаемое повышенными  $\nu$  или в результате облучения ионами  $\text{Ag}^+$ ,  $\epsilon_F$  не сдвигается. Поэтому сдвиг  $\epsilon_F$  в сторону  $\epsilon_c$  с ростом  $T_s$  или с уменьшением  $r$  не может быть обусловлен возможными изменениями числа ОС. Однако он не обусловлен и перестройкой связей Si—H, состоящей в изменении соотношения концентраций  $\text{SiH}_2$ - и SiH-конфигураций ( $\gamma\text{-SiH}_2/\text{SiH}$ ), поскольку с ростом  $T_s$  величина  $\gamma$  падает, а с уменьшением  $r$  — растет [6, 7].

Исходя из вышесказанного, для объяснения сдвигов  $\epsilon_F$  и привлекается модель ТЦС. Фрагмент структуры  $a\text{-Si} : \text{H}$  моделируется кластером  $[\text{Si}_5\text{H}_{12}]$ , как и ранее [8], где было показано, что при насыщении всех ОС кластера  $[\text{Si}_5]$  водородом (при переходе к кластеру  $[\text{Si}_5\text{H}_{12}]$ ) появляется не заполненный состояниями зазор («запрещенная зона»). Качественно это соответствует экспериментальному результату гидрирования, на порядок снижающего величину  $g(\epsilon)$  в щели подвижности аморфного кремния. Для простоты разброс длин связей  $b$  и валентных углов в кластере  $[\text{Si}_5\text{H}_{12}]$  не учитывался (сначала выбирались  $b_{\text{Si-Si}}=0.2352$  и  $b_{\text{Si-H}}=0.1480$  нм). Далее, путем введения атома Н6 образуется ТЦС (рис. 2, а).

Расчеты электронной структуры проводились с учетом оптимизации геометрических параметров кластеров с целью минимизации их полной энергии. На первом этапе оптимизировались все эти параметры для  $[\text{Si}_5\text{H}_{12}]$ , на втором (после образования ТЦС) — параметры атомов 1, 2, 6 (рис. 2, а).

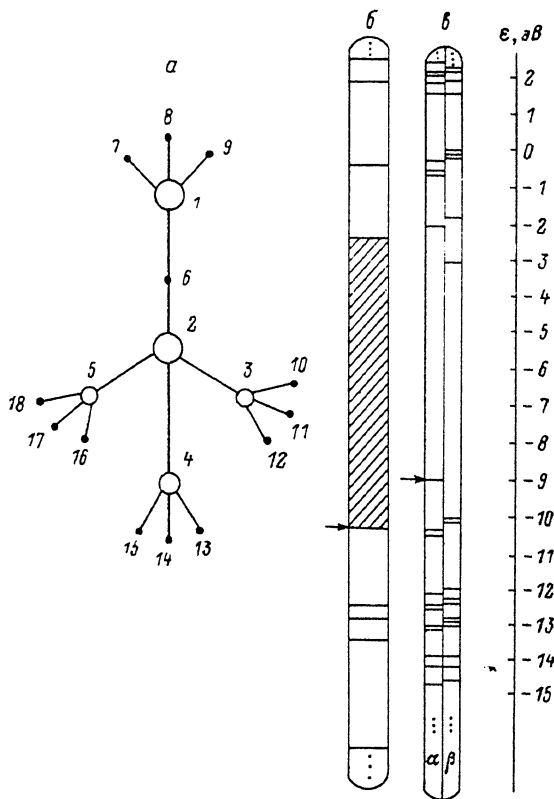


Рис. 2.

а) схематическое изображение положений атомов в кластере: 1—5 — атомы Si, 6—18 — атомы H в кластере; б) орбитальные энергии кластера  $[\text{Si}_5\text{H}_{12}]$ ; заштрихованная область — «запрещенная зона», стрелкой отмечена граница занятых состояний; в) орбитальные энергии кластера  $[\text{SiHSi}_4\text{H}_{12}]$ ; стрелкой отмечен уровень ТЦС в «запрещенной зоне» — границы занятых состояний;  $\alpha$  и  $\beta$  — проекции спинов при расчете энергетических состояний систем с открытыми оболочками.

Расчеты проводились полуэмпирическим методом МПДП [9] с учетом  $s$ - $p$ -орбиталей атомов Si и  $s$ -орбиталей атома H. Сравнение результатов, представленных на рис. 2, б и в, показывает, что образование ТЦС приводит к возникновению наполовину заполненного уровня [относительная глубина уровня  $\Delta=(\epsilon-\epsilon_n)/(\epsilon_c-\epsilon_n)\approx 0.2$  эВ]. В рамках рассматриваемой модели образование ТЦС означает сдвиг  $\epsilon_F$  в сторону  $\epsilon_c$ . Поэтому можно сделать предположение, что как при увеличении температуры осаждения пленки, так и при уменьшении прокачки газовой смеси в разрядной камере число ТЦС в структурной сетке  $a\text{-Si} : \text{H}$  увеличивается. Предположение о существенном влиянии ТЦС на  $g(\epsilon)$   $a\text{-Si} : \text{H}$ , на наш взгляд, подтверждается результатами исследований пленок, подвергнутых низкотемпературному отжигу (рис. 1, а). Действительно, при температурах отжига, соответствующих экзодиффузии «слабо связанного» водорода [1], форма кривой  $g(\epsilon)$  заметно изменяется.

Следует отметить, что прямых доказательств существования ТЦС в структурной сетке  $a\text{-Si} : \text{H}$  до последнего времени не было: в отличие от перечисленных выше конфигураций они не идентифицируются ни ЭПР, ни ИК-спектро-

скопией. Однако результаты недавних исследований сверхтонкого взаимодействия электронов на ОС с ядрами  $^{29}\text{Si}$  и  $^1\text{H}$  позволили сделать заключение об образовании в структурной сетке  $\alpha\text{-Si} : \text{H}$  ОС двух типов, имеющих рядом атом Si (обычная ОС) или атом H [11]. Вторая конфигурация, по-видимому, может рассматриваться как ТЦС.

#### Список литературы

- [1] Zellama K., German P., Squelard S., Bourdon B., Fontenil L., Danielson R. // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23. N 12. P. 6646—6667.
- [2] Mosley L. S. // *Phil. Mag.* 1985. V. 51. N 2. P. L27—L30. *Non-Cryst. Sol.* 1985. V. 77-78. Pt 1. P. 389—392.
- [3] Ovshinsky S. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1979. V. 32. N 1. P. 17—28.
- [4] Ching W. J., Lam D. J., Lin C. C. // *Phys. Rev. B*. 1980. V. 21. N 6. P. 2378—2387.
- [5] Дембовский С. А. // ДАН СССР. 1988. Т. 298. В. 6. С. 1408—1411.
- [6] Голикова О. А., Мездогрина М. М., Кудоярова В. Х., Серегин П. П. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 8. С. 1464—1466.
- [7] Голикова О. А., Домашевская Э. П., Казанин М. М., Кудоярова В. Х., Мездогрина М. М., Сорокина К. Л., Терехов В. А., Тростянский С. Н. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 3. С. 450—455.
- [8] Грехов А. М., Клапченко Г. М., Цяченко Ю. П. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 7. С. 1392—1396.
- [9] Dewar M. J. S., Thiel W. // *J. Amer. Chem. Soc.* 1977. V. 99. N 5. P. 4899—4907.
- [10] Terekhov V. A., Trostyanski S. N., Domashevskaya E. P., Golikova O. A., Mezdogrina M. M., Sorokina K. L., Kazanin M. M. // *Phys. St. Sol. (b)*. 1986. V. 138. N 2. P. 647—653.
- [11] Yokomichi H., Morigaki K. // *J. Non-Cryst. Sol.* 1987. V. 97/98. P. 67—70.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Получено 6.12.1988  
Принято к печати 9.06.1989

*ФТП, том 23, вып. 11, 1989*

## ОЧУВСТВЛЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ПРИ ПОВЕРХНОСТНЫМ ПОЛЕМ, ВОЗНИКАЮЩИМ ПРИ КОНТАКТЕ С ЭЛЕКТРОЛИТОМ

Арутюнян В. М., Варданян С. Х., Маргарян А. Л.

При экспериментальных исследованиях фотоэлектрических свойств некоторых полупроводниковых материалов часто возникают определенные трудности, связанные с малой величиной фотосигнала, что во многих случаях обусловлено большой скоростью поверхностной рекомбинации генерированных светом носителей заряда. Хотя в ряде случаев путем получения хорошо отполированной и протравленной поверхности удается значительно подавить поверхностную рекомбинацию, тем не менее в суммарное время жизни носителей заряда значительный вклад вносит составляющая, связанная с рекомбинацией на поверхности.

В настоящей работе исследовано влияние тонкого слоя водного электролита на фоточувствительность ряда полупроводников. Нами обнаружено, что фототклик от полупроводника существенно растет при нанесении на поверхность образца специально подобранного для каждого полупроводника водного электролита даже очень слабой концентрации. Для этого на хорошо отполированную и протравленную поверхность исследуемого полупроводника наносилась капля водного электролита, на которую накладывалась стеклянная пластина, прижимаемая силами поверхностного натяжения. Фотопроводимость регистрировалась на нагрузочном сопротивлении, подключенном между двумя омическими торцевыми контактами и источником тока, как это показано на вставке к рисунку.

Из проведенных нами исследований следует, что с увеличением концентрации электролита наблюдаются не только рост сигнала фотопроводимости,