

# ВЗАИМОСВЯЗЬ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ И СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПЛЕНКАХ НА ОСНОВЕ a-Si:H

Вишняков Н.В., Юлкин А.В., Уточкин И.Г.

Рязанская государственная радиотехническая академия

e-mail: mel@rgrta.ryazan.ru

Гидрированный аморфный кремний (a-Si:H) и сплавы на его основе являются весьма привлекательным материалом для создания целого ряда электронных устройств, среди которых солнечные элементы, матрицы тонкопленочных транзисторов, фотоприемники и т.п.. Ввиду того, что данный материал является структурно-неоднородным, то особое внимание исследователей уделялось взаимосвязи между структурными особенностями и распределением электронных состояний, наиболее простой способ изучения которых состоит в измерении спектра оптического поглощения.

В данной работе исследовалась микроструктура и оптическое поглощение пленок a-Si:H, полученных в плазме НЧ разряда. Как было установлено методами атомно-силовой микроскопии, характерным элементом микроструктуры поверхности данных пленок являются кластеры диаметром 20-50 нм. Измеренные спектры оптического поглощения имели характерные топологические особенности в виде пика в низкоэнергетической части спектра, амплитуда которого достигала  $10^3 \text{ см}^{-1}$ .

Для объяснения полученных результатов было выдвинуто предположение, что в объеме материала, так же как и на поверхности, присутствуют структурные неоднородности в виде кластеров. При этом кластер, по аналогии с моделью квантовых ям М.Х.Бродски [1], представляет собой квантовую точку, которая образована практически “чистым” a-Si, а широкозонная – областями с повышенным содержанием водорода.

Тогда для материала, содержащего произвольно расположенные включения в виде кластеров, его диэлектрическую функцию  $\epsilon^*$  можно связать с поляризуемостью кластеров  $a^*$  уравнением Максвелл-Гарнетта

$$\frac{\epsilon^* - \epsilon_h}{\epsilon^* + 2 \cdot \epsilon_h} = \frac{4}{3} \cdot p \cdot N \cdot a^*, \quad (1)$$

где  $\epsilon_h$  - диэлектрическая функция областей с повышенным содержанием водорода,  $N$  – концентрация кластеров. Приняв  $a^*$  равной обычной поляризуемости сферы радиусом  $R$ :

$$a^*(R) = \frac{\epsilon_s - \epsilon_h}{\epsilon_s + 2 \cdot \epsilon_h} \cdot R^3, \quad (2)$$

где  $\epsilon_s$  - диэлектрическая функция областей образованных практически “чистым” a-Si, найдем оптическое поглощение по известной формуле:

$$a(E) = \frac{2 \cdot c}{\mathbf{h} \cdot E} \sqrt{\frac{|\epsilon^*|^2 - \text{Re}(\epsilon^*)^2}{2}}. \quad (3)$$

Расчет линейного оптического поглощения по формуле (3) теперь сводится к нахождению диэлектрических функций  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_h$ . Согласно [2], диэлектрическую функцию определим как

$$\epsilon(E) = 1 + \frac{e^2 \cdot \mathbf{h}^2}{p^2 \cdot m_c} \cdot \sum_{n,c} \int \frac{f_{cn}^{(e)}(k) dk}{(E_{ck} - E_{nk})^2 - E^2}, \quad (4)$$

$$f_{cn}^{(e)}(k) = \frac{2 \cdot |\hat{e} \cdot M_{cn}(k)|^2}{m_c \cdot (E_{ck} - E_{nk})}, \quad (5)$$

где  $n = n, c$  - номера заполненных и свободных электронных состояний;  $m_c$  - эффективная масса электрона;  $M_{ij}(k)$  - матричный элемент оператора импульса;  $\hat{e}$  - вектор поляризации световой волны; значения для уровней размерного квантования в

квантовой точке для зоны проводимости и валентной находили из решения уравнения Шредингера.

Результаты теоретического расчета произведенного нами, согласуются со спектрами оптического поглощения полученными в ходе эксперимента. При этом четко прослеживается взаимосвязь между размерами кластеров в пленке a-Si:H и видом спектра поглощения.

1. М.Н.Бродский Sol.St.Comm., **36**, 55 (1980)
2. Р.Уиллардс, А.Бир Оптические свойства полупроводников. М.:Мир, 1970.  
376с.