مجلة جامعة تشرين للدراسات والبحوث العلمية – سلسلة العلوم الأساسية المجلد /16/ العدد /3/ 1414 هـ 1994م.

تأثير التسخين على الفجوة الضوئية في مادة السيليكون الأمورف الهيدروجيني a - si:H

د. عدنان حافظ ميني*

□ ملخص □

تبحث هذه الدراسة عن علاقة كل من معامل الامتصاص الضوئي α، وعرض الفجوة الضوئية E_0 بدرجة حرارة التسخين T_A لعينات a - si:H المحضرة بطريقة الرش SPUTTERING من أجل سرعات توضع مختلفة في المجال $(\nu = 20 - 120 A^{\circ} / \min)$ ومن أجل درجات حرارة توضع Ts مختلفة. لقد تمّ الحصول على تراكيز الهيدروجين لمختلف الأمكنة (Sites) من منحنيات الامتصاص للأشعة تحت الحمراء من أجل عينات مختلفة. باختيار نموذج مناسب يرتبط بموجبه الهيدروجين مع العيوب البنيوية للسيليكون. ويتعلق فيه E_0 بنشوء ماتريس السيليكون، استطعنا التوسع في هذا النموذج ليفسر النتائج التجريبية.

لقد استطعنا أن نثبت تجريبياً بأنّ تركيز الهيدروجين يتعلق بعدد وحجم عيوب ماتريس السيليكون. ولتفسير هذه النتائج على عينات (بكر) ومسخنة اقترحنا نموذجاً تتعلق فيه الفجوة الضوئية بعيوب قليلة العمق مدخلة بواسطة روابط ممطوطة si - si تمتد كزيوق تابعة لعيوب أكبر.

* الدكتور عدنان حافظ ميني أستاذ مساعد في قسم الفيزياء بكلية العلوم – جامعة تشرين – اللاذقية – سورية.

أولاً: المقدمة:

على الرغم من أنه كان معروفاً منذ عام 1976 بأن الهيدرجين يُدخل تحسينات على الخصائص الالكترونية لعينات السيليكون اللامتبلور، ولكن الآلية نفسها تبقى غير واضحة. يظهر كل من التفاعل النووي وتحليل نفوذية الأشعة تحت الحمراء، بأنَّ تركيز السبينات الحرة (EPR) يتراوح بين $5\times10^{19}-2\times10^{20}$ سبين في الـa - si:H ، يُزال هذا التركيز بوساطة ارتباط الهيدروجين في مادة الـa - si:H. إن تواجد الهيدروجين يُشبع الروابط الحرة(dangling bonds) ، وبالتالي يبدل ماتريس السيلسيوم. ويسلك السيليكون اللامتبلور الهيدروجيني سلوك خليطة عندما يكون تركيز الهيدروجين بنفس مرتبة تركيز السيليكون، ويُمكن أن يكون أقرب إلى الحالة المثلى للخليطة بتحكم انتقائي لتركيز الهيدروجين على الأماكن المتنوعة.

ونظراً للأهمية التي يلعبها تركيز الهيدروجين في المادة، فإنَّ اختيار نماذج الخليطة كانت مفضلة حتى الآن، أي أنَّ علاقة الواحد لواحد (one -to- one) كانت قائمة بين الخصائص الالكترونية (الفجوة الضوئية، وطاقة التنشيط) للمواد المحضرة بطريقة الوميض (16) أو بين نسبة تركيز الهيدروجين على مختلف الأمكنة في المواد المصنعة بطريقة الرش (13).

سوف نبحث في هذه الدراسة عن المنشأ الفيزيائي لضبط تراكيز الهيدروجين الكلي وعن أثر الهيدروجين على الفجوة الضوئية. توسع نماذج (23) من أجل العينات البكر والذي يصلح هنا بشكل جيد من أجل هذه النتائج التجريبية الجديدة التي حصلنا عليها.

ثانياً: الأجهزة وطرق التحضير:

نستعمل لتحضير العينات المدروسة من الـ a - si:H طريقة الرش من مصدر السيليكون في مزيج غازي منشط 80٪أرغون و 20٪هيدروجين في ضغط من مرتبة $10^{-3}\,TORR$ كانت كل من درجات حرارة التوضع $T_s\,(150^\circ C,190^\circ C,250^\circ C)$ وسرعة التوضع v في المجال $v\approx 20-120^\circ A^\circ/\min$ هي المعاملات الرئيسية المتغيرة للتحضير.

إنَّ الصفائح الرقيقة التي تتوضع فوقها مادة الـ (a - si:H) في هذه الدراسة هي عبارة عن رقائق من السيليكا المنصهرة من أجل القياسات الضوئية، ومن السيليكون البلوري (c - Si)من أجل قياسات محتوى الهيدروجين وتوزعه. تراوحت سماكات العينات بين $0.85\mu-1$ لقد تمَّ حساب الفجوة الضوئية من استقراء (extrapolation) للمنحنيات $(\alpha h\nu)$ المرسومة بدلالة الفوتون $h\nu$ في مجال الطاقة العالية. كما يُحسب

معامل الامتصاص الضوئي من منحني النفوذية للعينة، مقاساً بوساطة جهاز بيكمان 5240 ذي مقياس طيفي ضوئي بحزمة مزدوجة- Beckman 5240 double beam Spectrophotometre.

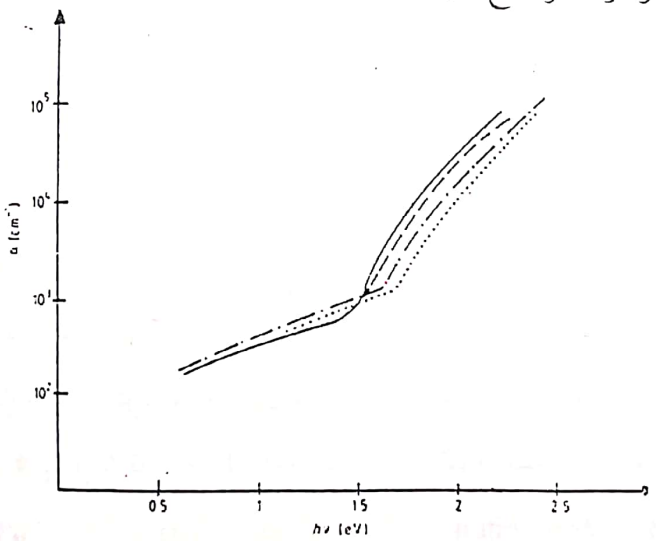
أما كمية الهيدروجين الكلية فقد تمَّ قياسها من عدد جسيمات α المنبعثة من المفاعل النووي التجاوبي Resonant nucleair reaction لذرات الهيدروجين مع اليور.

$$H' + B'' \rightarrow \alpha_1 + \overset{8}{B}e$$

ثالثاً: النتائج:

1-4 $\alpha(h\nu)$ من أجل كل عيناتنا البكر، أوجدنا الشكل العام للمنحني $\alpha(h\nu)$ الذي يمثل تغيرات α بدلالة $h\nu$، كما أوجدنا المنحني المنحني الذي يُمثل تغيرات الفجوة الضوئية E_o بتغير معاملات التحضير كدرجة حرارة التوضع (23) T_s وسرعة توضع العينة v فمن أجل سرعة توضع $\nu(20 - A^{\circ}/\min$ وجدنا أنَّ الفجوة الضوئية E_o تكون غالباً مستقلة عن درجة حرارة التوضع T_s ، وأنها تتناقص بازدياد سرعة التوضع v . وأنه من أجل $\nu>30\,A^{\circ}/\min$ فإنَّ E_o تتناقص بتزايد كل من سرعة التوضع v ودرجة حرارة التوضع T_s.

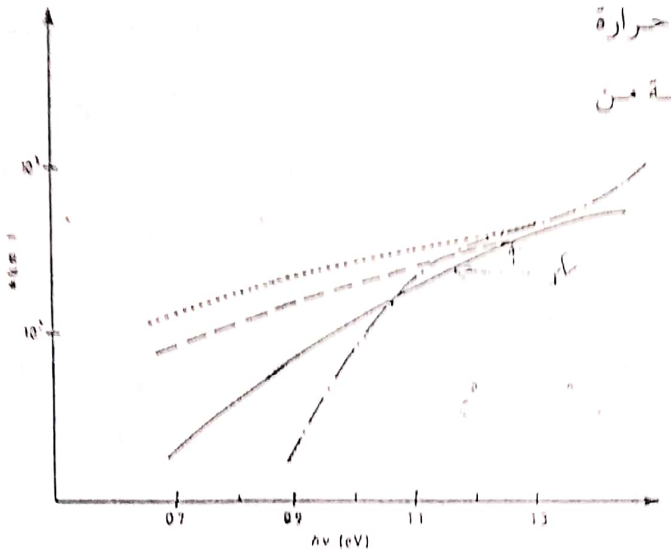
يبين الشكل (1) تغير معامل الامتصاص الضوئي α بتابعية طاقة الفوتون $h\nu$ لعينات بكر ذات سرع توضع مختلفة v ودرجة حرارة توضع واحدة. $T_s = 190^{\circ}C$ نلاحظ أنه يوجد بعد مجال طاقة عالية، مجال آخر ذو تغير أسي (ذيل يورباك Urbacg) Tail، ويوجد أيضاً ذيل امتصاص منخفض الطاقة يمتد حتى حوالي 0.6-0.7ev يوافق معامل امتصاص $10^2 cm^{-1} \langle \alpha \langle 10^3 cm^{-1}$



شكل (1): معامل الامتصاص الضوئي α بتابعية طاقة الفوتون $h\nu$ من أجل $(-)\nu = 150A^{\circ}/\min$ ، $(---)73A^{\circ}/\min$ ، $(-.-)49A^{\circ}/\min$ ، $(....)20A^{\circ}/\min$ عند $T_s = 190^{\circ}C$.

كما نلاحظ على الشكل نفسه انزياحاً طفيفاً جداً لذيل الامتصاص منخفض الطاقة بتغير سرعة التوضعv ، بينما ينزاح ذيل يورباك بشكل ملحوظ وواضح باتجاه الطاقة المتزايدة وذلك عندما تتناقص سرعة التوضع v.

يبين الشكل (2) تأثير درجة حرارة التسخين T_A على ذيل الطاقة المنخفضة من أجل عينة متوضعة عند درجة حرارة $T_s = 250°C$ وسرعة توضعها مساوية $v = 38A° / min$ ، نلاحظ أنّ معامل الامتصاص للمادة العينة في الحالة البكر يتناقص بسرعة لأعلى قيمة $\alpha \approx 10^3 cm^{-1}$ عندما تتناقص $h\nu$ ضمن المجال (1.0Sev)



شكل (2): ذيل الطاقة المنخفضة $(h\nu)$ من أجل $T_s = 250°C$ و $v = 38A° / min$ عينة بكر (-)، مسخنة $T = 250°C$ (_ . _)، $T_A = 300°C$ (- - -)، $T_A = 400°C$ (- - -)، $T_A = 480°C$ (....).

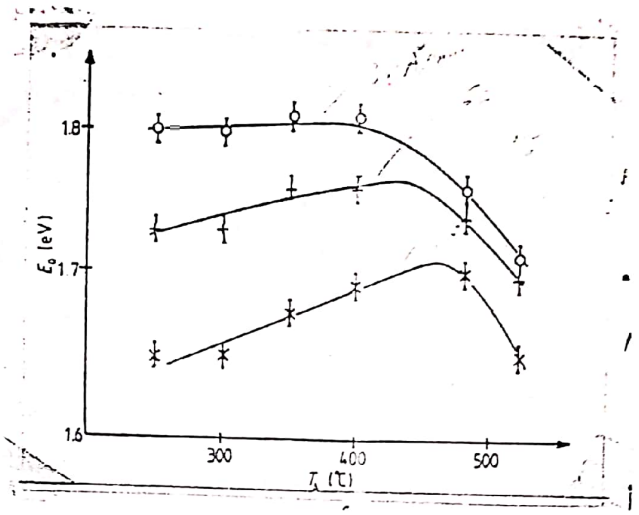
بازدياد درجة حرارة التسخين T_A ، فإنّ ذيل امتصاص الطاقة المنخفضة الموافق للمجال الأخفض من 1.2ev ينزاح مرتفعاً نحو الأعلى معطياً عند درجة حرارة تسخين $T_A = 480°C$ قيماً لـ α قريبة جداً من القيم المقاسة على عينات بكر متوضعة عند درجات حرارة $T_s = 150°C$ و $T_s = 190°C$ للمقارنة انظر الشكل (1).

2-4 الفجوة الضوئية:

نلاحظ في الشكل (3) بأن قيمة الفجوة الضوئية E_o ممثلة بيانياً بتابعية درجة حرارة التسخين T_A عند درجة حرارة توضع $T_s = 250°C$ من أجل سرع توضع مختلفة. نتبين أنه من أجل القيم الأخفض لسرعة التوضع v أي من أجل $v = 38A° / min$ فإنّ E_o تبقى ثابتة $(\approx 1.8ev)$ بازدياد T_A حتى $400°C$ ، ومن ثمّ تتناقص E_o ببطء حتى قيمة

$E_o = 1.7ev$ عند $T_A \approx 520°C$ من أجل قيم $\nu \approx 115A°/\min$ سرع التوضع الأعلى فإنَّ E_o تصل إلى قيمة عظمى

$E_o = 1.71ev$ عند درجة حرارة تسخين $T_A \sim 450°C$ ومن ثمَّ ينحدر الخط البياني بشكل سريع.

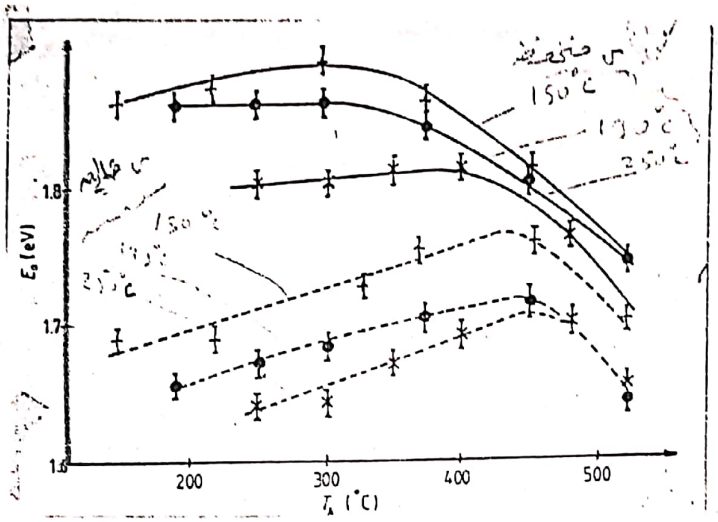


شكل (3): الفجوة الضوئية E0 بتابعية درجة حرارة التسخين T_A من أجل $T_s = 250 \circ C$ وعند $\nu = 38 \circ A°/\min$ ،(o) ،$66A°/\min$ (+) ،$115A°/\min$ (x).

لقد تمَّ إيجاد سلوك (23) مشابه لتغير E_o بدلالة T_A من أجل عينات متوضعة عند درجات حرارة $T_S = 150°C$ و $T_S = 190°C$.

يبين الشكل (4) مقارنة لأثر درجة حرارة التسخين T_A على الفجوة الضوئية E_o من أجل عينات متوضعة عند قيم مختلفة لدرجات حرارة التوضع T_s ، وعند سرع توضع ν منخفضة أو عالية. من أجل قيم ν الأخفض نلاحظ بأنه مع ازدياد درجة حرارة التسخين حتى $T_A = 350°C$ فإنَّ E_o إما أن تزداد ببطء من أجل قيم T_s الأخفض وأن تبقى ثابتة من أجل قيم T_s الأعلى. ومن أجل درجات حرارة تسخين أعلى من $T_A = 300°C - 400°C$ فإنَّ كل المنحنيات البيانية لتغيرات قيم الفجوة الضوئية مع Ta تنحدر بسرعة بازدياد T_A.

من أجل القيم الأعلى لسرعة التوضع ν، يتناقص E_o في العينات البكر للـ a-si:H بتزايد درجة حرارة التوضع [23] وفي مراحل التسخين الأولى المتزايدة حتى $T_A = 475°C$ ، فإنَّ قيمة E_o زداد، ومن ثمَّ تنحدر بسرعة مع قيم T_A الأكبر.

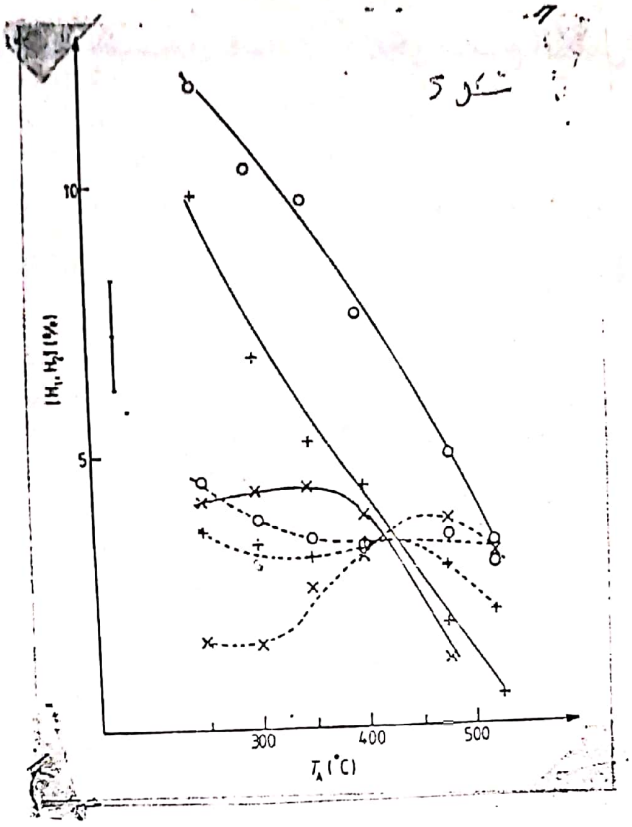


شكل (4): الفجوة الضوئية E_0 بتابعية درجة حرارة التسخين T_A من أجل $(20\ ,\ 150A^\circ/\min)190^\circ C(\bullet)$، $(26\ ,\ 128A^\circ/\min)T_s = 150^\circ C(+)$، $(38\ ,\ 150A^\circ/\min)250^\circ C(\times)$، الخطوة المستمرة: سرعة توضع منخفضة، الخط المنقط: سرعة توضع عالية

3-4- الفجـــوة الضوئيـــة وتراكـــيز الهيدروجين:

لقد تمت دراسة تغير كـل مـن كمية الهيدروجين الكلي [H] وتركيز الهيدروجين على الأمكنة SIH[H1] ، و $SIH_2[H_2]$ بتابعية كـل مـن درجـة حـرارة التوضع T_s ودرجة حرارة التسـخين T_A لعينات متوضعة على صفائح من السيليكون عالية المقاومة الكهربائية ، كمـا قـد تم مناقشة علاقة هذه الدراسة مع الفجوة الضوئية E_0 .

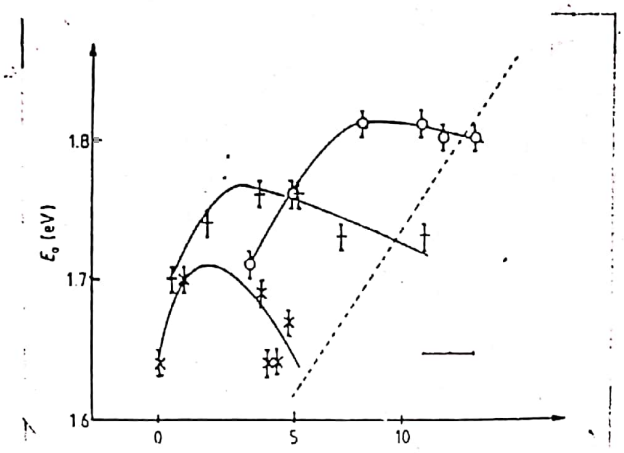
في العينـات البكـر: تتناقص كميات الهيدروجين [H] بشكل مطرد(23) وذلـك عندمـا تـزداد سـرعة التوضع ν مـع تشـتت ضعيف بتابعيـة درجة حـرارة التوضع T_s في المجال $(150^\circ C\langle T_s\langle 250^\circ C)$ وبعد التسـخين، يبقى على الأغلب تركـيز الهيدروجـين الكلـي ثابتاً عبر سماكة العينات. وهذا يقتضي على أنَّ تركيز الهيدروجين ليس محدوداً بمعامل انتشـار في ماتريس الـــa-si في هـذه العينـات. يوجـد عنـد كـل درجـة حـرارة تسخين T_A ، قيمـة إشـــباع "SATURATION VALUE" $[H_s]$ مـن أجـل قيمة [H] مستقلة عـن ν، وهكـذا فـإن ازديـــاد ســرع التوضـــع، فـــإن منحنيات [H] المختلفة بتابعيـة درجـة حـرارة التسـخين T_A تندمج (عنـد قيـم T_A الأعلـى عندمـا تـزداد ν) في منحـن وحيـــد $[H_s]$ بتابعية(23) T_A .



شكل (5) تغيرات تركيز الهيدروجين على الأمكنة $[H_1]SiH$ (المنحنيات المتصلة) $[H_2]SiH_2$ المنحنيات المتكسرة بتابعية درجة التسخين T_s من أجل $T_s = 250°C$ و $(o)\nu = 38A/\min$ و $(+)\nu = 66A°/\min$ و $(x)\nu = 115A°/\min$. يبين مجال الخطأ المرتكب على المقياس الارتياب في تراكيز H_i.

نلاحظ نتيجة القياسات التي أجريناها على عينات بكر والمتوضعة بنفس سرعة التوضع أن تراكيز الهيدروجين على الأمكنة $[H_1]SiH$ و $[H_2]SiH_2$ تتناقص ببطء بازدياد درجة حرارة التوضع T_s. تبدي كل من $[H_1]$ و $[H_2]$ نهاية عظمى بتابعية سرعة التوضع ν حول القيمة $\nu = 20-30A°/\min$، وتكون التراكيز المرتبطة الكلية سواءً على شكل SiH و SiH_2، قريبة من كمية الهيدروجين الكلية وذلك من أجل سرعة توضع حوال القيمة $\nu = 20-30A°/\min$، وتكون أخفض بشكل ملحوظ عندما تزداد ν حتى تصل النسبة إلى $[H_1]+[H_2]/[H] \sim 50\%$ وذلك من أجل سرعات توضع، مشيرة لظهور مكان آخر للهيدروجين $[H']$ مختلف عن أمكنة SiH و SiH_2. نتوقع أن يكون الهيدروجين مرتبطاً بماتريس السيليكون بروابط أضعف على شكل $[H']$. عند كل درجة حرارة، نجد فقط تشتتاً ضعيفاً على قيم الـ $[H_1]$ و $[H_2]$ بدلالة T_s، والتي تكون متوقفة بشكل كبير على سرعة التوضع ν.

تكون هذه الخاصة باقية خلا لالتسخين كما يمكن استنتاج ذلك من الشكل (5).



شكل (6): تغيرات عرض الفجوة الضوئية E_0 بتابعية تركيز الهيدروجين الموجود على شكل روابط $SiH[H_1]$ من أجل $T_s = 250^\circ C$ وبتابعية سرع توضع مساوية إلى $\nu = 38A^\circ / \min$ (o)، $66A^\circ / \min$ (+) و $115A^\circ / \min$ (x) عندما ترتفع درجة حرارة التسخين. يبين مجال الخطأ المرتكب على مقياس الارتياب في تعيين تراكيز H_1 كما يبين المنحني المنقط تغيرات E_0 بتابعية $[H_1]$ في العينات البكر.

يبين الشكل (6) تغير عرض الفجوة الضوئية (Optical gap) مع تراكيز الهيدروجين المرتبط على شكل SiH من أجل درجات حرارة تسخين T_A مختلفة $(T_s = 250^\circ C)$، كما هو مستخرج من الشكلين (3) و (5)، عندما تزداد درجة حرارة التسخين T_A، تتناقص $[H_1]$ بشكل دائم (5) في حين أن قيمة E_0 إما أن تزداد أو أن تبقى ثابتة أو أن تتناقص بحسب مجال درجة التسخين T_A أو بحسب قيمة سرعة التوضع ν. إن العلاقة الخطية الغالبة بين E_0 و $[H_1]$ (الخط المنقط في الشكل 6) التي وصلنا إليها من أجل العينات البكر في المجالات المحددة لكل من E_0 و $[H_1]$ لا تصلح مطلقاً بعد التسخين. لقد تم في هذه الدراسة أيضا الحصول على نتائج مشابهة من أجل عينات متوضعة عند درجات حرارة توضع $T_s = 150^\circ C, 190^\circ C$.

لم نجد لا في العينات البكر ولا في العينات بعد التسخين العلاقة الخطية بين E_0 والنسبة $[H_1]+[H_2]/[H_2]$ التي وجدت في بعض العينات المحضرة بطريقة الرأس(4) (3).

نستنتج من ذلك بأنه لا توجد أية علاقة مباشرة بين E_o من جهة وبين $[H],[H_1],[H_2]$ أو أي من مركباتها.

5- المناقشة:

تظهر عينات الـa-si:H المدروسة ذيل امتصاص الطاقة المنخفضة في المجال $10^2 \langle \alpha \langle 10^3 cm^{-1}$ من أجل $h\nu \leq 1.4ev$، وهو امتصاص الكتروني تتبعها ناقلية ضوئية Photoconductivity في نفس مجال الطاقة هذا. يكون لمنحنيات الناقلية الضوئية بتابعية طاقة الفوتون تغيرات مشابهة، بشكل نوعي، إلى تغير منحنيات الامتصاص الضوئي بتابعية طاقة الفوتون الشكل (1) والشكل (2). إن ذيول امتصاص الطاقة المنخفضة قد وجدت أيضاً في المواد المحضرة بطريقة الوميض(2)(7). بالإضافة إلى ذلك فإن منحنيات الناقلية الضوئية بتابعية hv كانت قد عرفت في نفس مجال الطاقة بوساطة مواد صنعت بطريقة الوميض وكذلك بوساطة مواد أخرى حضرت بطريقة الرش الكاتودي(13). تكون النقطة الهامة في أن قيمة ذيل الامتصاص هذا تبقى في أكثر الأحيان ثابتة من أجل عينة ذات سماكة قرية من $(\approx 1\mu)$ بينما يولد كل من سرعة التوضع v ودرجة حرارة التوضع T_s تغيرات كبيرة في الفجوة الضوئية. تكون هذه القيم المنخفضة لـα معزوة إلى انتقالات ضوئية مستخدمة على الأقل سوية متوضعة (lo calised state) واحدة. لا تستطيع هذه السويات المتوضعة أن تتأتى فقط من الروابط الحرة (dangling bond) والتي تتغير كثافتها(7) من $10^{15} cm^{-3}$ من أجل $(\nu \approx 30 A^\circ / \min)$ إلى $10^{17} cm^{-3}$ من أجل $(\nu \approx 100 A^\circ / \min)$ بينما لا تظهر ذيول الامتصاص أي تغير هام. يجب أن تنشأ هذه السويات المتوضعة من عيوب في تراكيز توازنية، مستقلة تقريباً عن معاملات التحضير في دراستنا. سيكون للعينات المتوضعة عند درجة حرارة توضع $T_s = 250^\circ C$، وعند سرعة منخفضة بنية أفضل، ولكن التسخين سيقود كل العينات إلى البنية الرئيسية نفسها. تحوي كل العينات الخام المدروسة على 5% أرغون و 90% سيليكون، كما أن فيها سيطرة قوية لروابط SiH على روابط SiH_2، ولهذا لا يمكن أن نعزو الإختلافات في سلوك تسخين العينات إلى كثافات مختلفة جداً كما وجد فريق من الباحثين عينات محضرة بطريقة الوميض. نلاحظ التناقض نفسه لـE_o في المجال فوق درجة حرارة التسخين $T_A \approx 400^\circ C$ الذي لاحظه باحثون آخرون، غير أن تفسيرهم يعتمد كون E_o يتناقص عندما يأخذ انتشار الهيدروجين الخارجي مكانه، هذا التفسير لا يصلح في هذه المواد التي نقوم بدراستها لأنه في مجال درجة حرارة التسخين T_A الأخفض لا توجد علاقة يمكن

افتراضها بين $[H]$ أو $[H_1]$ و E_u شكل (4) وشكل (6).

من هذه الدراسة على عينات بكر، نقترح أن E_u يمكن أن يكون منظماً بوساطة تشوه ماتريس السيليكون a-Si:H، ومن الدراسة على العينات بعد التسخين يمكن أن نقترح وصفاً أفضل لمادة الـa-Si:H.

1-إن لماتريس السيليكون أصناف متعددة من العيوب بدءاً من العميقة منها (deep defects) مثال على ذلك الروابط الحرة (dangling bounds)(21) إلى العيوب الضحلة (shallow-defects) مثال على ذلك (الاختلافات بين تراتيب متعاقبة وتراتيب كسوفية). يتوقف تركيز العيوب الكلي بشكل رئيسي على درجة حرارة التوضع T_s وعلى درجة حرارة التسخين T_A كما تتوقف طبيعة هذه العيوب على ν, T_A, T_s.

2-تكون ذرة الهيدروجين تحت توازن ترموديناميكي مرتبطة مع عيب ماتريس السيليكون إن وجود الهيدروجين يخفض تشوه ماتريس السيليكون. فهو يغير(23) عيباً بنيوياً صرف للسيليكون إلى عيب أصغر متعلق بالهيدروجين. يلتصق الهيدرووجين أولاً على العيوب الأعمق (مثال الروابط الحرة)، ومن ثم على العيوب التي تكون أكثر فأكثر ضحالة.

3-تتوقف الفجوة الضوئية المعرفة، بالتحركية عند الأطراف بشكل لأساسي على حجم وتركيز بعض العيوب قليلة العمق للسيليكون، الصرف (والمستقلة عن الهيدروجين) والتي تبقى بسبب طبيعتها وربما بسبب نقص الهيدروجين.

من المعلوم أن الخصائص الالكترونية للسيليكون تكون متوقفة بشكل كبير جداً على درجة حرارة التوضع T_s وعلى درجة حرارة التسخين T_A بالإضافة إلى توقفها على سرعة التوضع ν. إن التشوه الكبير المحرض بوساطة عيب(21) عميق (مثلاً رابط حرة dangling bond) يكون مخمداً أو مخففاً بشكل تدريجي بوساطة الماتريس على طول عدة مسافات بين ذرية تتبعها كثير من عيوب ماتريس السيليكون الأقل عمقاً حوله (عيوب مرافقة Satellite defects). هذا يظهر أيضاً على سطوح السيليكون البللوري النقي، حيث (حتى مع روابط السطح المعاد بناؤها)، فإن المسافات من السطح وحتى طبقات السيليكون الأولى، بالإضافة إلى المسافات بين طبقة السيليكون الأولى والثانية، تكون متغيرة(21) وكل من التسخين(19) واصطياد هيدروجين يقلل من حجم عيب ماتريس الـa-Si، تتناقص أيضاً عدد وحجم عيوبه المرافقة قليلة العمق.

بين الهدرجة المتأخرة (posthyrogenation) لمواد a-Si:H محضرة

بطريقة الـCVD بـأن الهيدروجين يزيل أولاً الروابط الحرة، ومن المتوقع أن يتبادل التأثير مع أصناف أخرى من العيوب. لقد أكد كل من Sakurai و Hagustrum بأن الهيدروجين يكسر الروابط Si-Si المشوهة على سطوح السيليكون البلوري (C-Si)، أو أن يكون محتجزاً بوساطة روابط ضعيفة(4). طالما أن تركيز الهيدروجين يزداد في ماتريس السيليكون فإنه سوف يعدل عيوب الماتريس الأصغر فالأصغر، حتى يتم الحصول على تركيز الاشباع. من أجل سرع توضع $\nu \geq 30A^{\circ}/\min$ فهناك عيوب صرفة لماتريس السيليكون تكون متروكة في العينات البكر.

إن التسخين عند درجات حرارة $T_A \rangle 400^{\circ}C$ والذي يتبعها تراكيز $[H] \rangle 13\%$، قد يفسر(19) بعملية استقرائية لتناقص واضح في كثافة العيوب ونمو تركيز صغير من الروابط الحرة ناشئة عن ضعف بعض روابط السيليكون-هيدروجين المكسورة لإقامة إعادة تشكيل الروابط Si-Si. وهذا سوف يدخل عيوباً جديدة قليلة العمق لماتريس السيليكون النقي. يمكن ملاحظة آثار مشابهة على سطوح السيليكون(14) البلوري C-Si.

من عتبة التحركية عليه أن تعرّف بوساطة اللاتوضع (delocalisation) المحدث فجأة المتأتي من التأثير المتبادل الكبير بين عيوب ضحلة جداً. إن الحالات المتوضعة الناشئة من روابط المط Si-Si (Stretched Si-Si bonds) ستظهر عند مسافة عن حافة عصابة التكافؤ، تكون هذه المسافة متزايدة مع التشوه (deformation). إن كلاً من الحجم المحدد للعيوب المرتبط بـH والطبيعية المختلفة للعيوب المرافقة (الزيلية) (Satellite defects) المعززة لاختلاطات مدار الهيدروجين تقودنا للتوقع بأن لهذه العيوب أثراً مباشراً ضعيفاً على تعريف قابلية الحركة داخل الفجوة (mobility gap) إذن ستكون هذه الفجوة معرفة بشكل أساسي بوساطة العيوب الضحلة جداً لماتريس السيليكون النقي (الرئيسية منها أو التابعة).

كل ما تقدم يمكن أن يشرح التغير التجريبي للفجوة الضوئية E_o مع سرعة ν في كل من العينات البكر والعينات المسخنة. ففي العينات البكر المدروسة، عندما تزداد سرعة التوضع ν، تتناقص كمية الهيدروجين المندمجة (يعني عدد عيوب ماتريس السيليكون المعدلة) بتابعية ν.

عندما نسخن عينة غير مشبعة بالهيدروجين من أجل $(\nu \rangle 30A^{\circ}/\min)$، فإن التسخين يقلل من حجم وعدد عيوب ماتريس السيليكون النقية، يتبع ذلك زيادة مقدار الفجوة الضوئية. وهذا يبرهن بشكل بعيد عن الغموض بأن عيوب ماتريس السيليكون النقية تبقى سبينات حرة في الـa-

Si:H $\left(\leq 10^{17} Cm^{-3}\right)$، حتى عندما يكون لتركيز الهيدروجين قيمة هامة $([H] \geq 13\%)$.

يقلل تسخين عينة مشبعة بالهيدروجين كل من عدد وحجم عيوب الماتريس، ويحول بعض العيوب المتعلقة بالهيدروجين إلى عيوب ماتريس صرفة. ولهذا السبب ستتواجد مناقشة بين خلق وتسخين عيوب ماتريس السيليكون الصرفة التي يمكن أن تقود إلى تزايد أو إلى ثبات قيمة الفجوة الضوئية في المرحلة الأولى لتحول الهيدروجين متوقفاً على عدد وحجم العيوب المستخدمة إن تناقص الفجوة الضوئية المقتضي ضمناً تحول الهيدروجين سيظهر عند درجة حرارة أعلى من درجة حرارةو بداية الانتشار الخارجي (exodiffesion) للهيدروجين تكون درجة حرارة التوضع T_s (شكل 4)، تكون هذه الدرجة أعلى من درجة الحرارة الموافقة لبداية تحول الهيدروجين

$v = 38A^\circ / \min$: $450 \circ C (250 \circ C)$, $v = 66A^\circ / \min$: $440^\circ C (320 \circ C)$, $v = 115A^\circ / \min$: $475 \circ C (400 \circ C)$

وتتوافق مع تناقص في خسارة الهيدروجين عندما تتناقص كمية الهيدروجين الكلية.

6- استنتاج:

نصل إلى مرحلة تؤيد نموذجاً بموجبه يكون الهيدروجين مرتبطاً، بالعيوب البنيوية للسيليكون، وتكون الفجوة الضوئية منظمة بتشوه ماتريس السيليكون بثلاث نقاط إضافية:

1- تتوقف طبيعة وكثافة عيوب ماتريس السيليكون على سرعة التوضع ودرجة حرارة التوضع T_s وعلى درجة حرارة التسخين.

2- يغير الهيدروجين العيب البنيوي للسيليكون النقي إلى عيب متوقف على الهيدروجين ويحول أولاً العيوب البنيوية الأكثر عمقاً.

3- تتوقف الفجوة الضوئية بالدرجة الأولى على العيوب البنيوية المتبقية للسيليكون.

في الحقيقة فإن النموذج المقترح من قبلنا والذي تكون فيه السيطرة لماتريس السيليكون على الهيدروجين يقترب إلى حد ما من النماذج المعتمدة على الأوصاف البنيوية للعالم Spear.

ABSTRACT

The Dependence on annealing temperature of the optical absorption coefficient and of the optical gap E_o of sputtered a - si:H at various deposition rates (20-120 A°/min) and substrate temperatures is reported. The hydrogen concentration on verious sites for idenlical films are reported. A previous model, according to which hydrogen links onto Si structral defects, and E_o depends on the deformation of the Silicon matrix is extended to interpret these experimental results. the hydrogen concentration appears to be controlled by the number and size of Si matrix defects, which explains the H saturation behaviour found experimentally. it is suggested that the optical gap, and hence the mobility gap, depend on very shallow defects introduced by stretched Si -Si bonds mainly as satellits of larger defects. this picture allows the interpretation of the experrmeulal results on both virgin and annealed films.

References

1- Currie J, Depelsenaire P., Deneuville, A., J. appl. physique lett. 1981.

2- Fish R, and licciardello D, 1978, phys. rev. lett. 41, 889.

3- Freeman E. and Paul W, phys. Rev. B 18, 4288.

4- Fritzsche H, Proc. 7th. Conf. on anodrphus and liquid Semiconductov ed. W.E. Spear (Edinburg CICL) P1. 1977.

5- Hamdi H., Deneville A, and Bruyer J.C, 1980, phys. lett. 41L. 483.

6- Himpsel F.J, Heiman P., Chiang T.C., and Eastman D, 1980, phys. Rev. lett. 45, 1112.

7- Loveland R.J., Spear W.E., and Al-Sharabaly A, 1973 J. non. Cryst. Solid. 13,55.

8- DENEUFVILL J.P, Moustakas T.D, and Ruppert, A.F. 1980, J. non. cryst. Solid, 35-36, 481.

9- Panedly K.C. 1978 IBM J. Res. Dev. 22,250.

10- Paul W. Lewis AJ, Connell G.A.N., and MousTakas TD 1976, Solid State Commun 20, 969.

11- Sakaurai T, and Hagustrum HD, 1976, phys. Rev. B14, 1593.

12- Sol N, and Kaplan D 1980, J. non Cryst Solids 35-36, 291.

13- Solomon I, Perrin J, and Boudron B, 1979, Proc. XIV Int. Conf. physcs of Semi-conductors, Edinburg.

14- Spear W. E, 1974 Proc. 5th conf. on amaphars and liquid Semi-conduct ed J. Stuke and W. Bering (London, Taylor and Francis) P1.

15- Tauc J, and Mernth A, 1972, J. non Cryst. Solids, 8,10, 569.

16- Theye M.L, 1974, Proc. 5th Conf. on amorphus and liquid Semiconductor ed. J. Stuke and W. Berring (London, Taylor and Francis) P. 479.

17- Tsai CC, Fritzche H, Tanielan MH, Gaczi P.H, Persans P.D, 1977 Proc. 7th. Int. Conf. on amorphous and liquid semiconductors ed. By Spear (Edinburg) CICL P. 339.

18-ZanZuchi P.J, Wronski R, and Cailson D.E, 1978, J. Appl. phys. 48, 5277.

19-Z.D. Kovalyuk, A.B. Yuritchuk, S.P. Voronyuk, Sav. phys. J. (U.S.A.) Vol. 33, no. 11, P. 449, 1990.

20-K. Zellama, H. labidi, P. Germain, D. Loriliigns, thin solid films (Suitzerland) Vol. 204, n°2, P. 358, 1991.

21-M.S. Brandt, M. Stulzman, International Meeting on stability of amophous silicon materials and solar cells, Denver Co. USA 1991.

22-M. H. Branz, R.S. Crandall, AIP Conf. Proc. USA, 1991, Int. meeting stability of amophous silicon materials and solar cells, Dencver Co. USA 1991.