

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  $\alpha$ -GeSi:H

М.Я. БАКИРОВ, М.А. МАМЕДОВ

Сектор Радиационных Исследований АН Азербайджана

370143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 31а

Исследовалось влияние водорода на оптические свойства  $\alpha$ -GeSi:H. Показано, что при введении водорода в  $\alpha$ -GeSi:H ширина запрещенной зоны увеличивается, а число парамагнитных центров уменьшается. Установлено, что с ростом содержания кремния ширина запрещенной зоны увеличивается от 1,15 эВ до 1,86 эВ, что позволяет выбрать оптимальный состав для изготовления солнечных элементов.

В последние годы интерес к аморфным полупроводникам, которые используются для изготовления солнечных элементов, возрос. Одним из перспективных материалов для этой цели является аморфная пленка твердого раствора германий-кремний. Гидрогенизированные аморфные твердые растворы германий-кремний ( $\alpha$ -GeSi:H) обладают высокой проводимостью и коэффициентом поглощения в видимой области спектра, а также, по сравнению с другими аморфными полупроводниками, являются термодинамически стабильными и радиационно стойкими.

В литературе имеется ряд работ [1-4], посвященных исследованиям оптических свойств  $\alpha$ -GeSi:H. Однако, влияние водорода и состава сплава на оптическую ширину запрещенной зоны изучено недостаточно.

Цель настоящей работы заключалась в исследовании оптических свойств пленок  $\alpha$ -GeSi:H. Основное внимание было обращено на получение информации об оптической ширине запрещенной зоны и влияние состава на  $E_g$ .

Пленки  $\alpha$ -GeSi:H были получены распылением германиево-кремниевой мишени в атмосфере газовой смеси аргона и водорода. Состав пленки варьировался путем изменения площади компонентов, а концентрация водорода - изменением состава газовой смеси. В качестве подложки использовался плавленый кварц. При распылении подложка была нагрета до 200 °С, и скорость осаждения менялась от 15 до 20 Å/сек. Толщина полученных пленок составляла 1-3 мкм. При изучении влияния водорода на край оптического поглощения и ширину запрещенной зоны, пленки имели постоянный состав -  $\text{Ge}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ , а при изучении влияния состава - концентрация водорода составляла 20 ат. %.

На рис. 1 показаны кривые поглощения  $\alpha$ - $\text{Ge}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ :H. Видно, что с увеличением содержания водорода в растворе, край поглощения смещается в сторону более высокой энергии фотона, и, для всех исследованных образцов, оптическое поглощение удовлетворительно описывается соотношением

$$\alpha h\nu = B (h\nu - E_g)^2,$$

где  $B$  - коэффициент пропорциональности,  $E_g$  - ширина запрещенной зоны,  $\alpha$  - коэффициент поглощения,  $h\nu$  - энергия фотона.

Установлено, что оптическая ширина запрещенной зоны с увеличением содержания водорода в растворе сначала растет линейно, а затем стремится к насыщению (рис. 2, кривая 1). Исходя из этого, в дальнейшем содержание водорода в  $\alpha$ -GeSi поддерживалось постоянным около 20 %.

В соответствии с общепринятым утверждением, смещение края оптического поглощения и увеличение ширины запрещенной зоны с ростом содержания водорода в аморфных пленках обусловлены нейтрализацией оборванных связей в неупорядоченной сетке. Полагается, что атомы германия и кремния в процессе конденсации на подложку формируют преимущественно четырехкоординатную тетраэдрическую сетку, подобно структурной сетке аморфного германия и аморфного кремния. Валентные углы и длины связей на каждом углу структурной сетки деформированы, что является неперемным условием аморфной структуры.

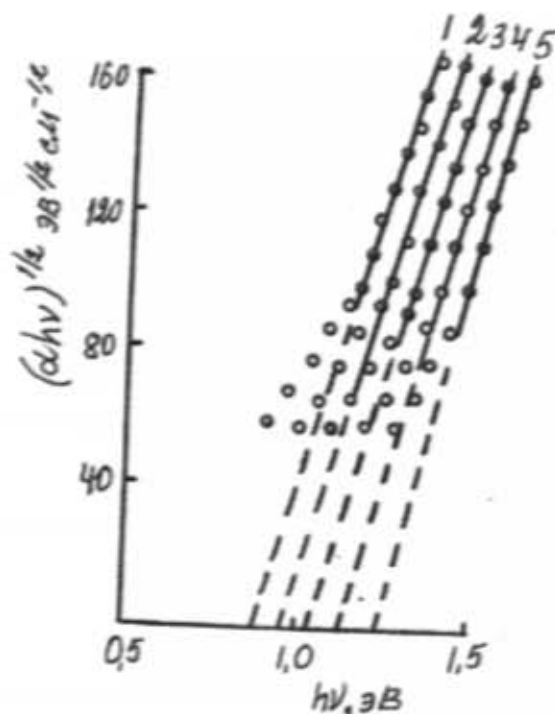


Рис. 1. Край оптического поглощения  $\alpha$ - $\text{Ge}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ :H  
X<sub>H</sub> ат. %: 1-1,5; 2-5; 3-9; 4-14; 5-23.

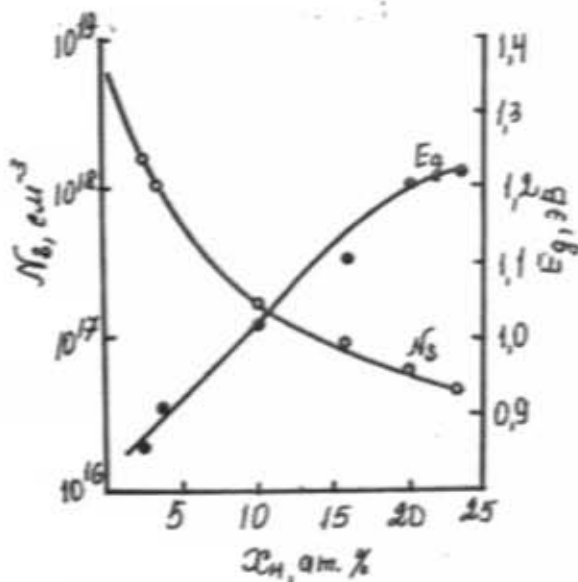


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны и концентрации парамагнитных центров в  $\alpha\text{-Ge}_{0.9}\text{Si}_{0.1}\text{H}_x$  от  $\text{H}_x$ : 1- $E_g$ , 2- $N_s$ .

ЭПР измерения показали, что структурная сетка  $\alpha\text{-GeSi}$  имеет деформированные узлы, которые содержат в своем ближайшем окружении лишь три атома. Требуемый для построения тетраэдрического ближнего порядка четвертый атом, в силу структурных флуктуаций в аморфной фазе, оказывается пространственно удаленным и в химическую связь не вступает. Таким образом, на деформированном узле образуются дефекты, которые создают локальные уровни в щели подвижности. При введении водорода увеличивается сила связи в сетке вследствие того, что энергия связей Ge-H и Si-H примерно на 0,5-0,6 эВ больше, чем энергия связей Ge-Ge, Si-Si и Si-Ge. Атомы водорода, будучи одновалентными, насыщают оборванные связи и пассивизируют их, и это неизбежно находит свое отражение в крае оптического поглощения и величине ширины запрещенной зоны.

Предполагается, что в негидрогенизированных пленках, вследствие малой протяженности волновой функции, на единичном локализованном уровне в щели подвижности находится только один электрон, и поэтому центр является парамагнитным. При наличии второго электрона (от атома водорода) возникает уровень, который лежит вне щели подвижности. Поэтому, при введении водорода ширина запрещенной зоны увеличивается, а концентрация парамагнитных центров уменьшается, что было доказано экспериментально (рис. 2, кривая 2). Найдено, что в образцах без водорода  $N_s = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , а в образцах с 20 ат. % водорода  $N_s = 8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Несмотря на избыток водорода в структурной сетке, определенная часть обор-

ванных связей остается некомпенсированной. По данным ЭПР исследований плотность таких связей снижается до  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Однако и этого достаточно, чтобы на фоне собственных уровней решетки был заметен эффект внедрения примеси.

Одной из специфических особенностей твердого раствора GeSi является изменение ширины запрещенной зоны с составом, что позволяет выбрать материал с оптимальной шириной запрещенной зоны для изготовления эффективных солнечных элементов.

Для  $\alpha\text{-Ge}_{1-x}\text{Si}_x\text{H}$  различного состава ( $x_H \sim 20$  ат. %) изучены спектры оптического поглощения и установлено, что с увеличением концентрации кремния край поглощения смещается в сторону большей энергии фотона (рис. 3), что означает увеличение энергетического зазора между валентной зоной и зоной проводимости. Определено, что с ростом содержания кремния от 0 до 100 % в  $\alpha\text{-Ge}_{1-x}\text{Si}_x\text{H}$  ширина его запрещенной зоны линейно увеличивается от 1,15 эВ до 1,86 эВ, что можно описать выражением  $E_g = 1,15 + 0,71 C_{Si}$ , где  $C_{Si}$  изменяется в интервале от 0 до 1.

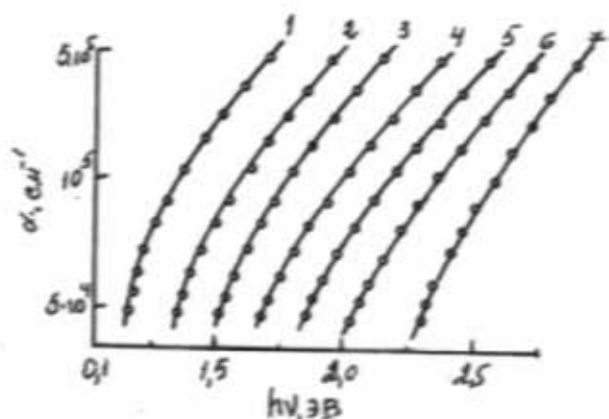


Рис. 3. Кривые поглощения в  $\alpha\text{-Ge}_{0.9}\text{Si}_{0.1}\text{H}_x$ .  $x_{Si}$  ат. %: 1-0; 2-0,1; 3-0,25; 4-0,5; 5-0,6; 6-0,75; 7-1,0.

Предполагается, что атомы кремния встраиваются в узлы неупорядоченной сетки  $\alpha\text{-Ge}$ . Это приводит к снятию механических напряжений в ней, к уменьшению длины связей и отклонению валентных углов, т.е. к такой атомной перестройке, которая способствует снижению концентрации оборванных связей и других дефектов. Это в свою очередь, приводит к уменьшению плотности локализованных состояний в щели подвижности, увеличению запрещенной зоны и уменьшению темновой проводимости.

Полученные результаты представляют интерес с точки зрения создания солнечных элементов на основе  $\alpha\text{-GeSiH}$ .

- [1] Saito, K. Aoki, H. Sannmiya, T. Yamaguchi. Thin Sol. Films 1984, v.115, p.253-262  
 [2] Хохлов, А.Е. Машин, А.И. Еришов, Ю.А. Мордовина, Н.И. Машин. ФТП, 1986, т.20, вып. 7, с.1288-1291  
 [3] Юкimoto. В кн. "Аморфные полупроводники и при-

- боры на их основе", М. Металлургия, 1986, 376 с.  
 [4] Nayafov, M. Ya. Bakirov, V.S. Mamedov, A.A. Andreev. Phys. Stat. Sol.(a), 1991, v.123, K67-K70  
 [5] Midda, De S.C. and Swafi Ray. J. Appl. Phys., 1993, v.79, № 9, p.4622-4629

$\alpha$ -GeSi:H BƏRK MƏHLULUNUN OPTİK XASSƏLƏRİ

Məqalədə  $\alpha$ -GeSi:H nazik lövhələrinin optik xassələrinə məhlul tərkibinin və hidrogenin təsiri araşdırılmışdır. Göstərilmişdir ki,  $\alpha$ -GeSi bərk məhluluna hidrogen daxil edildikdə qadağan olunmuş zonanın eni böyüyür, paramaqnit mərkəzlərin sayı isə azalır. Məşəyyən olunmuşdur ki, məhlulda silisiumun miqdarının artması ilə qadağan olunmuş zonanın eni 1,15 eV-dan 1,86 eV-ə qədər artır. Bu da güneş elementlərinin hazırlanması üçün optimal tərkibin seçilməsinə imkan verir.

M.Y. Bakirov, M.A. Mamedov

OPTICAL PROPERTIES  $\alpha$ -GeSi:H

The influence of hydrogen and alloy composition on optical properties of  $\alpha$ -GeSi:H has been studied. It's shown that at hydrogen introduction to  $\alpha$ -GeSi forbidden gap increases, and number of paramagnetic centers decreases. It is established that with growing content of Si forbidden gap increases from 1,15 eV to 1,86 eV what allows to choose an optimum composition for construction solar elements.

Дата поступления 14.05.96

Редактор: М.Г. Шахматовский