

УДК.621.315.592

Д.Л. Кардашев
**Вплив ізольованої домішки гідрогену на густину
електронних станів аморфних напівпровідникових
плівок Si і Ge**

Одеська державна морська академія, вул. Дідріхсона, 8, Одеса, 65029

Локальна густина електронних станів аморфних Si і Ge із домішкою гідрогену розрахована методом функцій Гріна. Напівемпіричний гамільтоніан сильного зв'язку враховує усі суттєві параметри взаємодії між найближчими сусідами. Структура гідрогенізованих напівпровідникових матеріалів моделювалася ґраткою Бете.

Ключові слова: функція Гріна, густина електронних станів, вакансія, аморфний, ґратка Бете.

Стаття постуила до редакції 14.05.2001; прийнята до друку 21.06.2001

Домішки гідрогену суттєво впливають на електричні та оптичні властивості напівпровідникових плівок Si і Ge [1]. Атоми гідрогену утворюють різноманітні комплекси із атомами кремнію і германію, але найбільш поширеними є моно- та дигідриди. В цій роботі розглянуто вплив ізольованої домішки Н на локальну густину електронних станів неупорядкованих ковалентних напівпровідників. Для його розрахунку в аморфних плівках було застосовано метод функцій Гріна.

Напівемпіричний одноелектронний гамільтоніан сильного зв'язку враховує всі суттєві двоцентрові параметри взаємодії між найближчими атомами.

Структура аморфних чистих напівпровідникових плівок моделювалася ґраткою Бете (безкінечною сіткою зв'язаних атомів без замкнутих циклів із зв'язків). Валентні кути та довжини зв'язків вважалися незмінними. Для даного випадку було отримано локальну густину

електронних станів в аналітичному вигляді [2].

Функція Гріна (ФГ) напівпровідника із домішкою гідрогену може бути визначена із рівняння:

$$G(E) = g(E) + G(E) \cdot U \cdot g(E), \quad (1)$$

де $g(E)$ – функція Гріна чистого напівпровідника, $G(E)$ – ФГ напівпровідника із домішкою Н. Збурюючий потенціал U атома гідрогену вважається короткодіючим (це наближення виправдано, оскільки впливу домішка Н майже не відчувають атоми напівпровідника, які є третіми сусідами для атома водню [3]).

Рівняння (1) має аналітичний розв'язок, якщо матриця потенціалу збурення враховує $u=ss\sigma$ - та $v=sp\sigma$ - параметри взаємодії між гідрогеном і атомом напівпровідника. Парціальні матричні елементи ФГ s - і p - станів гідрогенізованого напівпровідника мають вигляд:

$$G_s(E) = \frac{g_s(E)}{1 - u \cdot g_s(E) + 3 \cdot v^2 \cdot g_s(E) \cdot g_p(E)} \quad (2)$$

$$G_p(E) = g_p(E) \cdot \frac{1 - u \cdot g_s(E) + 2 \cdot v^2 \cdot g_s(E) \cdot g_p(E)}{1 - u \cdot g_s(E) + 3 \cdot v^2 \cdot g_s(E) \cdot g_p(E)} \quad (3)$$

Неважко побачити, що границі енергетичного спектра визначаються парціальними ФГ чистого напівпровідника, а вплив домішки гідрогену є цілком резонансним і веде лише до перерозподілу

густини станів.

Локальна густина електронних станів визначається уявною частиною від суми діагональних елементів ФГ:

$$N_0(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Sp}G(E). \quad (4)$$

На рис. 1, як приклад, показані локальні густини електронних станів чистого а-Ge (пунктирна лінія) і германію із домішкою Н (суцільна лінія). Бачимо, що ізольована домішка гідрогену знижує локальну густину електронних станів а-Ge поблизу країв забороненої зони, що узгоджується з емпіричними даними [1]. Зростання концентрації Н веде до збільшення ефективної ширини забороненої зони, тому придатними для використання вважаються напівпровідникові плівки, які містять не більше 10 % гідрогену.

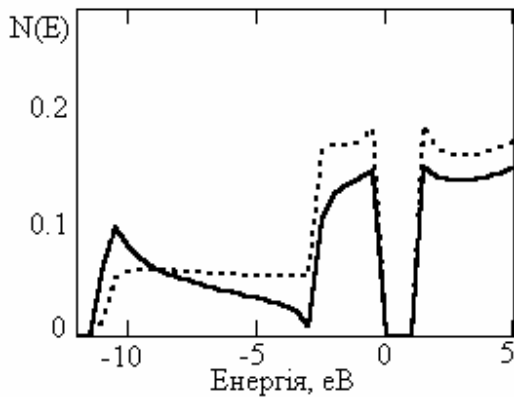


Рис. 1. Локальна густина електронних станів а-Ge:H.

- [1] А. Меден, М. Шо. *Физика и применение аморфных полупроводников*. Мир, Москва сс.195-330 (1991).
- [2] Д.Л. Кардашев. Плотность электронных состояний и уровни нейтральной вакансии в аморфном Si // *Наукові праці УДАЗ ім. О.С. Попова*, **1**, сс.18-20 (2000).
- [3] J.D. Joannopoulos. The use of Cayley trees to study excitations in disordered solids // *Jorn. of Non-Crystalline Solids*, **32**, pp.241-255 (1979).

D.L. Kardashev

Influence of the Isolated Impurity of Hydrogen on Density of Electronic States of Amorphous Semiconductor Si and Ge Films

Odessa Sea State Academy, 8, Didriksona Str., Odessa, 65029, Ukraine

The electron local densities of states for isolated mono-hydride in hydrogenated amorphous Si and Ge are calculated by the Green function technique using the one-electron tight binding Hamiltonian including all nearest-neighbour interactions. The structures of the hydrogenated amorphous solids are approximated by the Bethe lattice.