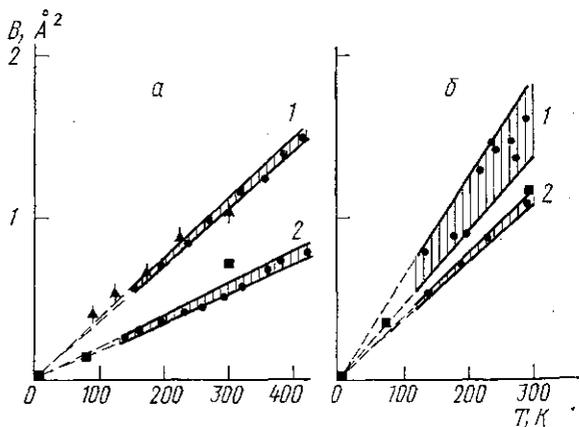


(220) в сурьме и (333) и (112) в висмуте (индексы даны в ромбоэдрической системе) в диапазоне температур 150—450 К. Значения величины среднеквадратичных смещений атомов вдоль оси [111] и в перпендикулярном направлении для Sb и Bi ( $B$ -факторы) представлены на рисунке. Результаты обработаны методом наименьших квадратов. Штриховкой выделены доверительные интервалы в пределах уровня значимости 0,95. Для Bi при  $T > 300$  К наблюдается ангармонизм, приводящий к отклонению температурной зависимости  $B$ -фактора от прямой линии.

Наши данные согласуются с приведенными на рисунке, а результатами прямых мёссбауэровских измерений на изотопе  $^{119}\text{Sn}$ , внедренном в монокристалл Sb [3],

которые не подвержены влиянию ТДР. Значения  $B_{\parallel}$ , определенные по данным рентгеновской дифракции для Sb [4] и Bi [5], также представленные на рисунке, отличаются от наших результатов, что связано с отсутствием корректного учета ТДР даже в прецизионных рентгенодифракционных измерениях. Значения  $B$ -фактора, определенные из нейтронодифракционных данных для

Анизотропные  $B$ -факторы для Sb (а) и Bi (б): 1 —  $B_{\parallel}$ ; 2 —  $B_{\perp}$ ; ▲ —  $B_{\parallel}$ , мёссбауэровские измерения [3]; ■ —  $B_{\parallel}$ , рентгеновские измерения [4] (а) и [5] (б)



поликристаллов [6], отличны от наших и рентгеновских [4, 5] результатов. Это вызвано тем, что в кристаллах Sb и Bi скорости нейтронов близки к скорости звука, что делает значительным вклад ТДР в интенсивность упругого рассеяния.

Следует отметить, что использование наших значений  $B$ -фактора в расчетах по дебаевской модели дает величины дебаевской температуры  $\theta_{\text{Sb}} = 195$  К и  $\theta_{\text{Bi}} = 125$  К, совпадающие с результатами, полученными из данных по ультразвуковым измерениям [6, 7].

В заключение авторы хотят поблагодарить И. В. Телегину за консультации.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Алексеевский Н. Е., Кирьянов А. П., Нижанковский В. И., Самарский Ю. А. // Письма в ЖЭТФ. 1965. 2. С. 269—274. [2] Киселев А. А., Опаленко А. А. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. 1985. 26, № 3. С. 89—90. [3] Avenarius I. A., Kuzmin R. N. // Proc. Int. Conf. on Mössbauer Spectroscopy. Cracow, Poland. 1975. 1A. P. 33—34. [4] Barrett C. S., Cucka P., Haefner K. // Acta Cryst. 1963. 16. N 6. P. 451—453. [5] Cucka P., Barrett C. S. // Ibid. 1962. 15. N 9. P. 865—872. [6] Fischer P., Sosnowska I., Schymanski M. // J. Phys. C: Solid State Physics. 1978. 11, N 6. P. 1043—1051. [7] Lichnovsky A. J., Saunders G. A. // J. Phys. C: Solid State Physics. 1976. 9, N 6. P. 927—938.

Поступила в редакцию  
04.11.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 5

УДК 621.315.592

#### ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПРИГРАНИЧНЫХ ОБЛАСТЕЙ АМОРФНОГО ГИДРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

Ю. А. Зарифьянц, В. О. Абрамов, Ю. Л. Гальченко, А. С. Авилов, Г. М. Чукичева

(кафедра общей физики для химического факультета)

Эффективность работы приборов на основе аморфного гидрированного кремния ( $\alpha\text{-Si:H}$ ) и особенно солнечных батарей в значительной степени лимитируется ре-

комбинацией неравновесных носителей в областях, примыкающих к контактам. Между тем подавляющее большинство исследованных электрофизических свойств пленок  $\alpha$ -Si:H относится к объемным, так как измерения были сделаны на образцах с толщинами, существенно превышающими характеристические длины этого материала (диффузионную длину, дебаевскую длину экранирования). Лишь в отдельных работах обращалось внимание на возможную роль приконтактных областей в явлениях переноса носителей [1-3].

В данной работе для изучения рекомбинационных процессов в этих областях мы применили фотолуминесценцию (ФЛ) как весьма чувствительный метод. Измерение спектрального распределения рекомбинационного излучения проводили при температуре образца 85 К. Для возбуждения ФЛ использовали He-Gd и He-Ne-лазеры, излучение которых поглощалось на глубине 0,05 и 1,1 мкм соответственно. Образцы пленок  $\alpha$ -Si:H толщиной 0,3-0,8 мкм изготавливали по стандартной методике: разложением моносилана в тлеющем ВЧ-разряде при температуре подложек 550 К.

На рис. 1 приведены кривые спектрального распределения ФЛ пленок  $\alpha$ -Si:H на различных подложках, полученных в одном процессе в максимально идентичных

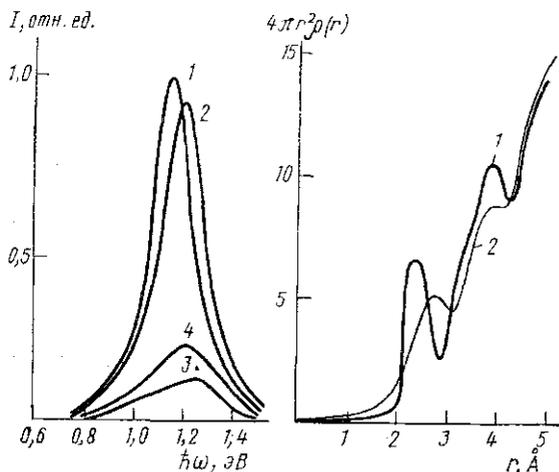


Рис. 1. Спектры фотолуминесценции пленок  $\alpha$ -Si:H, нанесенных на кристаллический кремний (1), сапфир (2), вольфрам (3) и на сапфир после напыления слоя палладия (4). Спектры нормированы по максимуму кривой 1

Рис. 2. Радиальные функции распределения атомов Si в пленках  $\alpha$ -Si:H на кристаллическом кремнии (1) и вольфраме (2)

условиях. Интенсивность нормирована по максимуму ФЛ пленки на кремнии. Наиболее узкий сигнал как при объемном, так и при поверхностном возбуждении наблюдается от пленки на кремниевой подложке (это отмечено и в [4]). На металлических подложках (W, Ni, Cr, NiCr) интенсивность ФЛ всегда была в 3-5 раз ниже, а ширина полосы увеличивалась по сравнению с образцами на кремнии и сапфире и достигала  $\sim 0,3$  эВ. Интересно отметить, что к снижению интенсивности приводило напыление металлических электродов на образец на сапфире с зазором 2 мм (в этом случае возбуждалась приповерхностная область между контактами), а также сплошное напыление тонкого слоя металла с прозрачностью 90%. Следовательно, в пограничной с металлом области происходит возрастание темпа безызлучательной рекомбинации, а на границе с металлической подложкой, кроме того, и увеличение структурной неоднородности, вызывающей дополнительное уширение линии ФЛ  $\Delta_d$ . Последнее можно оценить из приближенного соотношения  $\Delta^2 = \Delta^2_{ph} + \Delta^2_d$ , где  $\Delta$  — экспериментальная ширина,  $\Delta_{ph}$  — уширение, вызванное электрон-фононным взаимодействием [5]. Из сравнения кривых 1 и 3 получаем величину  $\Delta_d = 0,24$  эВ.

Эти закономерности в спектрах ФЛ не противоречат и результатам исследования фазового состава областей  $\alpha$ -Si:H, примыкающих к контактам [2, 3]. Так, в [3] методом оже-электронной спектроскопии было установлено, что приэлектродные участки имеют неомогенный состав: на глубине  $\sim 600$  Å находятся продиффундировавшие атомы металла, часть которых химически связана с атомами Si. В принципе это дает некоторое основание предполагать изменения в ближнем порядке атомов в граничащих с металлом областях  $\alpha$ -Si:H, однако прямые доказательства могут дать только структурные исследования.

С этой целью мы провели электронографические исследования на пленках  $\alpha$ -Si:H толщиной 200 Å, нанесенных на кремний и вольфрамовую фольгу в одном процессе. Измерения выполняли на электронографе ЭМР-100 в режиме «на отражение» с использованием фильтра для отсева неупруго рассеянных электронов. Учет основного фона рассеяния аморфных пленок и нормировка осуществлялись с по-

мощью предложенного в [6] прецизионного способа нормировки интерференционной функции, не зависящего от формы пиков. Ложные пики исключались при варьировании верхнего предела интегрирования (функции угла рассеяния). При расчете использовали значение плотности  $a\text{-Si:H}$ , равное  $2,2 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ .

Расчетанные таким образом радиальные функции распределения представлены на рис. 2. Анализ кривых приводит к следующим параметрам ближнего порядка пленок  $a\text{-Si:H}$ . Для образца  $a\text{-Si:H}$  на кремнии координационное число Si оказалось равным 3,4, радиус первой координационной сферы  $r_1=2,4 \text{ \AA}$ , второй —  $r_2=3,9 \text{ \AA}$ . Соответствующие значения для пленки  $a\text{-Si:H}$ , нанесенной на вольфрам, составили 3,15; 2,7 и 3,9 \text{ \AA}. Различия в параметрах превышают возможные погрешности метода, оцененные авторами [6], особенно по радиусам координационных сфер. Следует отметить, что для образца на кремниевой подложке параметры ближнего порядка хорошо коррелируют с данными [7], полученными для пленок  $a\text{-Si:H}$ , отдаленных от солевых подложек. Понижение координационного числа и увеличение  $r_1$  при нанесении  $a\text{-Si:H}$  на металл приводит к росту дефектности и плотности локализованных состояний, что согласуется с результатами, представленными на рис. 1.

Таким образом, электронографические исследования однозначно доказали зависимость параметра ближнего порядка  $a\text{-Si:H}$  от природы подложки, что в свою очередь определяет различия в фундаментальных характеристиках энергетического электронного спектра пленок и их фотоэлектрические свойства. Это обстоятельство имеет важное значение при поиске путей повышения эффективности солнечных батарей на основе  $a\text{-Si:H}$ .

Авторы выражают благодарность О. И. Васину за предоставленную программу расчетов для БЭСМ-6.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Tsai C. C., Nemanich R. J., Thomson M. J. // J. Vac. Sci. Technol. 1980. 21, N 3. P. 632—635. [2] Зарифьянц Ю. А., Абрамов В. О., Деметьев А. П. и др. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1984. № 11. С. 69—70. [3] Nemanich R. J., Tsai C. C., Sigmon T. W. // Phys. Rev. 1981. B23, N 5. P. 6328—6332. [4] Акимченко И. П., Каррыев А. И., Вавилов В. С., Гиппиус А. А. // Кр. сообщ. по физике ФИАН СССР. 1984. № 8. С. 16. [5] Alvarez F., Williams F. // J. Non-Cryst. Sol. 1982. 50. P. 139—148. [6] Васин О. И., Гладышева Г. И., Дагман Э. Е. // Кристаллография. 1983. 28, № 3. С. 446—451. [7] Cracusk J. B. // Phys. Stat. Sol. (a). 1979. 55, N 1, P. 231—234.

Поступила в редакцию  
16.12.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА, АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 5

УДК 537.226.33

## ИЗОСТРУКТУРНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ДЕКАГИДРАТЕ АЛЮМОМЕТИЛАММОНИЕВЫХ КВАСЦОВ

Н. Д. Гаврилова, Ю. П. Козлова

(кафедра физики кристаллов)

В полярной фазе сегнетоэлектриков со сложным химическим составом, содержащим различные слабосвязанные дипольные элементы структуры, могут наблюдаться аномалии электрических свойств при различных температурах, связанные с упорядочением разных дипольных групп. Такие упорядочения не обязательно должны сопровождаться изменением точечной группы симметрии кристалла, а могут происходить изоструктурно [1].

В литературе уже сообщалось об упорядочении в полярной фазе без изменения точечной симметрии в кристаллах прустита [2] и дикальцийстронцийпропионата [3]. Такое же явление, по-видимому, можно ожидать и в алюмометиламмониевых квасцах (МАСД)  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$ , в состав которых входят дипольные подсистемы  $\text{Al}(\text{SO}_4)_2$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3$  и слабосвязанные молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ .

Структурные исследования МАСД [4] показали, что ниже  $\sim 150 \text{ K}$  существует однородная орторомбическая фаза с симметрией  $Pca2_1$ , а выше этой температуры наблюдается та же фаза, но разбитая на области с различной ориентацией элементов симметрии; при  $177 \text{ K}$  кристалл переходит в кубическую фазу  $Pa3$  с потерей поляризации, т. е. имеет место сегнетоэлектрический фазовый переход. Свойства