

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ УКРАИНЫ

Одесский государственный университет им. И. И. Мечникова

# ФОТО ЭЛЕКТРОНИКА

МЕЖВЕДОМСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ СБОРНИК

Основан в 1986 г.

ВЫПУСК 8

Одесса  
"Астропринт"  
1999

Наукова бібліотека О.І.Менші. Мечникова

В сборнике приведены результаты теоретических и экспериментальных исследований по вопросам оптоэлектроники, солнечной энергетики и полупроводникового материаловедения фотопроводящих материалов. Рассмотрены перспективные направления развития фотозлектроники.

Для преподавателей, научных работников, аспирантов, студентов.

У збірнику наведені результати теоретичних і експериментальних досліджень з питань оптоелектроніки, сонячної енергетики і напівпровідникового матеріалознавства фотопровідних матеріалів. Розглянуто перспективні напрямки розвитку фотоелектроніки.

Для викладачів, наукових працівників, аспірантів, студентів.

**Редакционная коллегия:**

**В. А. СМЫНТЫНА** (отв. редактор) — академик ВШ Украины, **М. И. КУТАЛОВА** (отв. секр.), **В. Т. МАК** — д-р физ.-мат. наук, **И. М. ВИКУЛИН** — д-р физ.-мат. наук, проф., **А. Е. КИВ** — д-р физ.-мат. наук, проф., **Г. Г. ЧЕМЕРЕСЮК** — проф., **М. К. ШЕЙНКМАН** — член-корреспондент АН Украины.

**Адрес редакционной коллегии:**

270100, Одесса, ул. Пастера, 42,  
Одесский государственный университет, тел. 23-34-61.

## РАСЧЕТ ОДНОРОДНОГО УШИРЕНИЯ БЕСФОНОННЫХ ЛИНИЙ В ПРИМЕСНЫХ СПЕКТРАХ АМОРФНЫХ ВЕЩЕСТВ

Е. П. Никонова, В. Н. Соловьев

Криворожский государственный педагогический институт

Проведен расчет температурной зависимости однородно уширенных бесфононных линий в примесных центрах аморфных структур. Низкотемпературная зависимость полуширины линии  $\gamma(T)$  определяется явлением спектральной диффузии. При высоких температурах доминирует рамановское рассеяние на избыточных квазилокальных возбуждениях.

### 1. Введение

Построение теории формы однородной полосы примесных центров в аморфных материалах далеко от завершения. Это связано в первую очередь с неизученностью в этих средах спектра низкочастотных колебательных возбуждений. Хорошо известно, что для аморфных систем характерно наличие так называемых двухуровневых систем (ДУС). Последние возникают в силу геометрического беспорядка в расположении атомов. Ввиду этого существуют атомы или группы атомов, которые могут находиться в двух устойчивых положениях равновесия, разделенных барьером. При низких температурах этот барьер преодолевается путем квантовомеханического туннелирования. Два самых низких уровня энергии в таком потенциале и образуют ДУС (рис. 1).

Предполагается, что плотность ДУС постоянна и при низких энергиях  $E/k < 1\text{К}$  ( $k$  — постоянная Больцмана, в дальнейшем  $k = 1$ ) превышает плотность состояний фононов. С ростом энергии  $E > (1-10)\text{К}$  существенный вклад в плотность состояний дают низкочастотные квазилокальные возбуждения (КВ), реализующиеся в одноямных потенциалах. Влияние ДУС и КВ на некоторые термодинамические и кинетические свойства аморфных сред описано в [1]. Очевидно, что из-за взаимодействия с примесными центрами указанные возбуждения играют существенную роль в однородном уширении примесных бесфононных линий. Разные энергетические зависимости плотности ДУС и КВ должны определять и различные температурные зависимости полуширины  $\gamma(T)$  бесфононных линий.

В настоящее время экспериментально установлено что в большинстве материалов в области температур  $0,01 < T < 20\text{К}$   $\gamma(T) \propto T^{1,3}$ , а при  $20 < T < 400\text{К}$   $\gamma(T) \propto T^2$  [1].

Имеющиеся теоретические модели интерпретируют зависимость  $T^{1,3}$  путем постулирования сла-

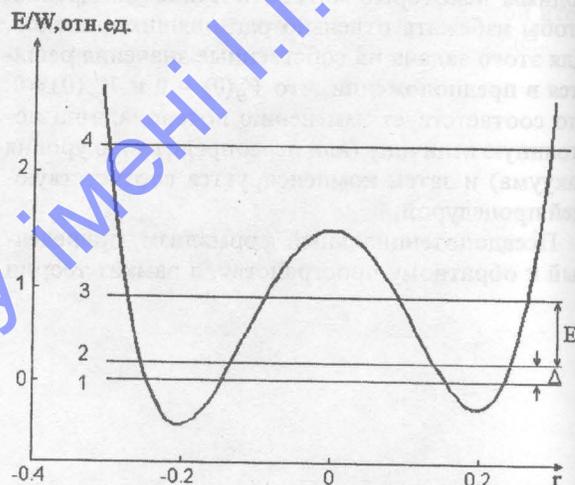


Рис. 1. Расположение первых четырех уровней в двухъямном потенциале при  $\eta = -0,08$ ,  $t = 0,01$ ,  $r$  — конфигурационная координата

бой энергетической зависимости плотности ДУС:  $n(E) \propto E^\delta$ , где  $\delta = 0,3$  [1]. Однако, это противоречит модели ДУС, где  $n(E) = \text{const}$  [2]. Природа квадратичной зависимости  $\gamma(T)$  при высоких температурах остается неясной.

В настоящей работе в приближении модели мягких атомных потенциалов (МАП) рассчитана плотность колебательных возбуждений в широком температурном интервале от сверхнизких температур до температур порядка температуры Дебая. Показано, что найденная плотность состояний позволяет удовлетворительно описать как низкотемпературную, так и высокотемпературную зависимости  $\gamma(T)$ .

### 2. Расчет плотности состояний низкоэнергетических квазилокальных возбуждений в модели МАП

Модель мягких атомных потенциалов, пред-

ложенная В. Г. Карповым, сводится к утверждению, что квазилокальные низкочастотные моды в аморфных материалах описываются гамильтонианом ангармонического осциллятора

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (1)$$

Потенциал  $V(x)$  имеет вид одномодового разложения

$$V(x) = \varepsilon_0 [\eta(x/a)^2 + t(x/a)^3 + ((x/a)^4)]. \quad (2)$$

В (1)–(2)  $M$  — эффективная масса осциллятора;  $a$ ,  $\varepsilon_0$  — характерные атомный размер и энергия;  $\eta$ ,  $t$  — случайные величины, пропорциональные соответственно второй и третьей производным в точке экстремума [2].

При  $\eta$ ,  $t \ll 0$  модель МАП приводит к ДУС с расстоянием между наименьшими уровнями  $E \gg W$  и высотой межъямного барьера  $V_b = W/4(\eta/\eta_L)^2$ . Величины  $W$ ,  $\eta_L$  — характерные параметры модели.  $W$  равно расстоянию между вторым и третьим уровнями энергии в двухъямном потенциале (см. рис. 1), а  $\eta_L$  — определяет масштаб безразмерной величины  $\eta$ . Случай  $E \gg W$  отвечает квазилокальным возбуждениям в одноямных потенциалах.

Численное решение уравнения Шредингера проводилось для ангармонического осциллятора (1). Были определены положения 20 квантовых уравнений в потенциале (2) для  $10^4$  точек на плоскости  $\eta$ ,  $t$  с учетом функций распределения этих величин [2]. На рис. 2 приведена плотность состояний для возбуждений в энергетическом интервале, соответствующем температурам  $0,01 < T < 400\text{K}$ .

Важной для дальнейшего обсуждения является энергетическая зависимость плотности ДУС  $n(E) \propto E^{0.3}$ . Рост плотности состояний КВ пропорционален  $E^4$  и, начиная с некоторых энергий, их нельзя считать независимыми. Наша расчетная схема не учитывает такого взаимодействия. Последнее можно учесть, например, в рамках метода когерентного потенциала.

На рис. 3 представлена найденная методом когерентного потенциала плотность состояний. Для сравнения приведены экспериментальные данные для некоторых аморфных веществ. Видно удовлетворительное согласие расчетных и опытных данных.

### 3. Температурное уширение бесфононных линий

Низкотемпературная зависимость  $\gamma(T)$  естественно следует из энергетической зависимости плотности ДУС. Предполагается, что в этой области температур зависимость  $\gamma(T)$  определяется явлением спектральной диффузии. Суть его в том, что система ДУС, окружающая примесь, поглощая и испуская фононы, создает флуктуирующее во времени поле упругих напряжений, спадающее

$n(E/W)$ , отн.ед.

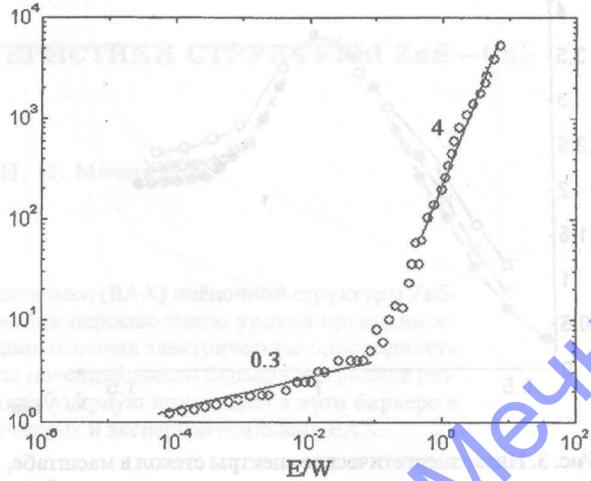


Рис. 2. Плотность состояний низкоэнергетических возбужденных состояний. Цифры указывают наклон прямых, т. е. показатель степени в выражении  $n(E) \propto E^\delta$

обратно пропорционально кубу расстояния до примеси. В свою очередь энергия ДУС также меняется при деформации. Усреднение по энергиям ДУС и их расстояниям до примеси позволяет получить

$$\gamma(T) \propto T^{1+\delta}, \quad (3)$$

$\delta$  — показатель степени в энергетической зависимости плотности ДУС ( $\delta = 0,3$ ).

В области высоких температур рассмотренное диполь-дипольное взаимодействие не обеспечивает наблюдаемой экспериментально квадратичной зависимости. Отмечена возможность учета рамановского (двухфононного) рассеяния, а также избыточной (по сравнению с дебаевской) плотности колебательных состояний (см. рис. 3).

Согласно [9] рамановский вклад дается интегралом

$$\gamma(T) = C \int_0^1 [g(v)]^2 \frac{1}{v^2} \frac{\exp(v/T)}{[\exp(v/T) - 1]^2} dv, \quad (4)$$

здесь  $C$  — константа.

График зависимости  $\gamma(T)$  согласно (4) с плотностью состояний  $g(v)$ , полученной методом когерентного потенциала, приведен на рис. 4.

### 4. Выводы

Проведенные расчеты свидетельствуют о том, что наблюдаемая температурная зависимость полуширины бесфононных линий в примесных центрах определяется спектром низкочастотных колебательных возбуждений в аморфных структурах. В области низких температур взаимодействие двухуровневых систем с примесью приводит к явлению спектральной диффузии. Слабая энергетическая зависимость плотности ДУС  $n(E) \propto E^{\delta}$  обеспечивает наблюдаемую зависимость  $\gamma(T) \propto T^{1+\delta}$ .

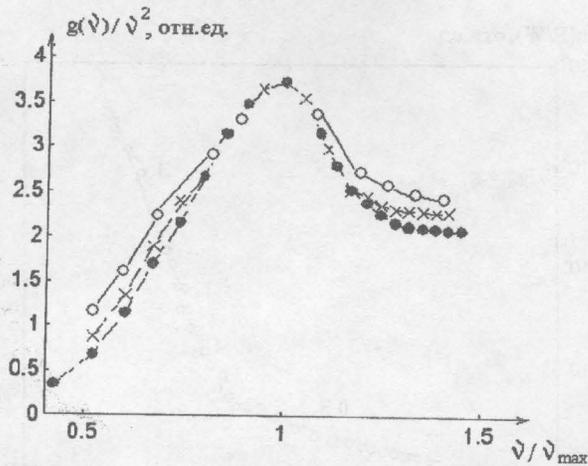


Рис. 3. Низкоэнергетические спектры стекол в масштабе, нормированном на частоту максимума  $\nu_{\max}^0$  —  $\alpha$ - $\text{SiO}_2$ ,  $\times$  —  $\alpha$ - $\text{Ge}$ ,  $\bullet$  — расчет методом когерентного потенциала

При повышении температуры основными возбуждениями становятся квазилокальные гармонические осцилляторы с быстро растущей энергией плотности возбуждений, значительно превышающей дебаевскую. Рамановское рассеяние на этих возбуждениях и определяет температурную зависимость  $\gamma(T)$ .

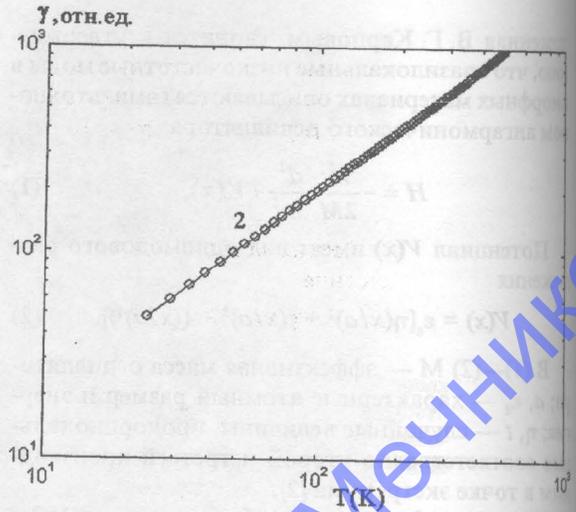


Рис. 4. Результирующая температурная зависимость  $\gamma(T)$

#### Литература

1. Паршин Д. А. Модель мягких потенциалов и универсальные свойства стекол // ФТТ, 1994. — Т. 36. — С. 1809.
2. Соловьев В. Н. О природе туннельных состояний в аморфных тетраэдрических полупроводниках. // ФТП, 1996. — Т. 30. — С. 278.

Наукова бібліотека ОНУ імені Ш. Мечникова

## СОДЕРЖАНИЕ

Ю. А. Вашпанов, В. А. Смынгына. Влияние парциального давления кислорода в технологической камере на электронные свойства и адсорбционную чувствительность к кислороду тонких слоев селенида кадмия .....	3
А. А. Птащенко, Ф. А. Птащенко. Тонкая структура углового распределения излучения полупроводниковых лазеров .....	6
Г. Г. Веревкин, И. В. Загинайло, Ю. В. Ковалев, Н. В. Чулкова. Фурье-контроль дефектности фотошаблонов интегральных схем .....	13
С. А. Гевелюк, И. К. Дойчо, Л. П. Прокопович, Д. П. Савин. Структурные и люминесцентные свойства пористого кремния, полученного методом лазерной абляции .....	18
А. Я. Бекшаев. Моменты интенсивности лазерного пучка, образованного суперпозицией эрмит-гауссовых мод .....	22
В. Н. Евтеев. К вопросу о применимости понятия “эффективная масса” при расчете электронного спектра полупроводниковых композитных материалов в электрическом поле .....	26
Н. П. Затовская, Ю. Н. Каракис, М. И. Куталова. Определение последовательного сопротивления фотоэлектрических преобразователей в рабочей области нагрузочной характеристики .....	29
Ю. А. Вашпанов. Электронные свойства и адсорбционная чувствительность к кислороду тонких пленок селенида кадмия, подвергнутых ионной имплантации атомами тяжелых металлов .....	31
И. С. Скитер. Влияние обработки полимерных пленок в коронном разряде на их электрические свойства .....	36
В. В. Ковальчук. Оптическая нелинейность полупроводниковых нанокластерных структур .....	39
А. Е. Сергеева, С. Н. Федосов, И. С. Скитер, М. В. Семкова. Переходные токи при облучении короноэлектретов на основе политетрафторэтилена .....	42
Ш. Д. Курмашев, А. А. Градобоев. Полевые транзисторы с инжекцией из истока на основе слоистого $Cd_xHg_{1-x}Te$ .....	45
Р. М. Балабай, Н. В. Грищенко. Комплекс программ для расчетов ab initio твердотельных структур .....	47
Е. П. Никонова, В. Н. Соловьев. Расчет однородного уширения бесфононных линий в примесных спектрах аморфных веществ .....	50
А. В. Родии, А. П. Чебаненко, Г. Г. Чемересюк. Расчёт вольт-амперной характеристики структуры $ZnS-CdS$ .....	53
В. В. Михо, Л. Н. Велинская, Е. Ю. Тимофеева, П. А. Чебаненко. ЭДС в пленке $CdS$ при контакте с электролитом .....	58
Е. Ю. Тимофеева. Люминесценция, возникающая при контакте органического полупроводника с электролитом .....	61
Ю. В. Робул. Действие гамма-излучения на люминесценцию оксида алюминия .....	63
Л. Н. Залюбинская, В. Н. Курков, Л. А. Нигрецкая, В. А. Смынгына, Дж. Паделетти. Исследование шероховатости, морфологии, элементного состава поверхности адсорбционно-чувствительных сенсоров на основе сульфида кадмия .....	65
И. М. Викулин, А. М. Дьяченко. Влияние поверхностных напряжений на фотолюминесценцию арсенида галлия .....	70
Ф. А. Птащенко. Влияние температуры на поляризацию излучения полупроводниковых лазеров .....	72
Ю. Ф. Ваксман, С. А. Игнатенко, Ю. Н. Пуртов, П. В. Шапкин. Люминесценция и электропроводность монокристаллов $ZnSe:In$ .....	77
В. Т. Мак. Фотолюминесценция полукристаллического тригалллату кадмию .....	80
Ю. Ф. Ваксман, Ю. Н. Пуртов, С. В. Зубрицкий. Получение и основные характеристики диодов, излучающих в голубой области спектра .....	85
В. А. Борщак, Н. П. Затовская, М. И. Куталова. Сенсор нового типа для регистрации оптического изображения .....	89
Ю. К. Марколенко, И. М. Викулин, П. Ю. Марколенко. Аналитическая модель переключения фототиристора .....	91
В. И. Борщ, В. И. Ирха, Г. В. Макаренко. Качественный регрессионный анализ параметров оптоэлектронных приборов .....	93
Т. И. Максимова. Компьютерное моделирование радиационно-стимулированной стабилизации (001) Si поверхности .....	96
Е. П. Никонова. Плотность колебательных состояний структурно-неупорядоченных материалов .....	99
Л. Ф. Викулина. Действие магнитного поля на характеристики тиристорной оптопары .....	102
Ю. К. Марколенко, И. М. Викулин, П. Ю. Марколенко. Пороговый базовый ток переключения p-n-p-структуры .....	104
В. Н. Кадченко, А. Е. Кив, З. Б. Поляк. Исследование основных параметров фоторезисторов $PbS$ с различными контактами .....	107
А. Н. Алешин, А. В. Бурлак, В. Е. Мандель, В. А. Пастернак, А. В. Тюрин, В. Г. Цукерман. Фотоэлектрические свойства слоев сульфида свинца, полученных методами химического осаждения и пульверизации .....	111
А. Н. Алешин, А. В. Бурлак, В. Е. Мандель, В. А. Пастернак, А. В. Тюрин, В. Г. Цукерман. Оптимизация фоточувствительности неохлаждаемых матричных фотоприемных устройств на основе халькогенидов свинца выбором теплового режима их работы .....	115
Я. И. Лепих, В. А. Смынгына, И. И. Сейфуллина, В. Д. Проничкин, Е. Э. Марцинко. Исследование оптических и электрических характеристик пленок комплексонов германия .....	119
Я. И. Лепих. Фотоуправляемый акустоэлектронный преобразователь .....	121

Наукова бібліотека ОНУ імені І. Мечникова

Здано до набору 30.03.99. Підписано до друку 04.06.99. Формат 60x84/8.

Папір офсетний. Гарнітура Таймс. Друк офсетний. Ум. друк. арк. 14,42.

Тираж 100 прим. Зам. № 286/а.

Видавництво і друкарня НВФ "Астропринт"

270026, м. Одеса, вул. Преображенська, 24.

Тел. (0482) 26-98-82, 26-96-82, 68-77-33.