

## تعيين طيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل غير المتبلورة

الدكتور حسن عبد الكريم سليمان\*

(تاريخ الإيداع 1 / 7 / 2007. قُبِلَ للنشر في 27/12/2007)

### □ الملخص □

يهدف هذا البحث إلى تحليل مساوي طريقة حساب أطيف توزع كثافة الحالات المستخدمة على نطاق واسع استناداً إلى معطيات التيار الضوئي الثابت، ثم اقتراح طريقة رياضية جديدة تأسيساً على خوارزمية تنظيم تيجانوف لحساب طيف توزع كثافة الحالات المتوضعة في الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل غير المتبلورة من النوع a-Si:H (السيكون غير المتبلور المهدرج) و a-SiC:H (كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج) التي لا تتطلب افتراضات مسبقاً حول سلوك الأطيف المحسوبة.

ثم عرضنا في هذا البحث الأطيف التجريبية لكثافة الحالات تأسيساً على الطريقة الجديدة المقترحة عند دراسة عينات محضرة بطريقة التذرية في حالة التواترات العالية في جو بلازمي يحتوي غازي الهيدروجين والأرغون. إن تفسير النتائج الحاصلة يرتبط بتغير تركيز "الأعمدة" في الأفلام الرقيقة المدروسة عند تغير شروط تكثيف a-Si:H و a-SiC:H.

كلمات مفتاحية:

أطيف كثافة الحالات - الفجوة الطاقية - أنصاف النواقل غير المتبلورة - السيلكون غير المتبلور

\* أستاذ مساعد - قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة تشرين - اللاذقية، سورية.

## Determination of the Spectrum of the Density of States in the Energy Gap of Amorphous Semiconductors

Dr. Hasan Abdulkarim Souleman\*

(Received 1 / 7 / 2007. Accepted 27/12/2007)

### □ ABSTRACT □

The aim of this search is to analyze disadvantage of the approach used in the distribution spectra calculation of density of states localized in the energy gap [ $N(E)$ ]. We suggest a new approach of the distribution spectra calculation of  $N(E)$  of amorphous semiconductors; amorphous hydrogenated silicon (a-Si:H) and amorphous hydrogenated silicon-carbide (a-SiC:H). In this research, experimental spectra  $N(E)$  based on the new suggested approach are presented for the investigated samples, prepared by sputtering in Ar/H plasma atmosphere. Interpretation of the obtained results depends on the change of column concentration, when the condensation conditions of a-Si:H and a-SiC:H are changed.

#### Key Words:

spectra of the density of states, energy gap, amorphous semiconductors, amorphous hydrogenated silicon, amorphous hydrogenated silicon carbide, constant photocurrent.

---

\*Associate Professor, Department of Physics,, Faculty of Sciences,, Tishreen University,, Lattakia,, Syria.

## مقدمة:

تتجلى أهمية المسألة المطروحة في هذا البحث، المتعلقة بتعيين طيف كثافة الحالات  $N(E)$  في الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل غير المتبلورة Amorphous Semiconductors، في الارتباط الوثيق بين طيف كثافة الحالات والخصائص الكهربائية الأساسية للمادة، والتناقض بين النتائج التي تم التوصل إليها حتى تاريخه. فمثلاً، عند دراسة الأفلام الرقيقة الدقيقة (الأقل من  $1 \mu m$ ) والسميكة (الأكثر من  $1 \mu m$ )، بطريقة التيار الضوئي الثابت Constant Photocurrent Method (CPM) [3,2,1]، المصنوعة من السيلكون غير المتبلور المهدرج Amorphous Hydrogenated Silicon (a-Si:H) بطريقة تفكك السيلان الأحادي  $SiH_4$  (Monosilane Dissociation) المستحصل عليه بالتفريغ التوهجي (Glow Discharge) تم الحصول على طيفي كثافة حالات  $N(E)$ . وتبين أن الأول يمتلك قمة واحدة [4] والآخر قمتين [5]. وتأرجحت توضعاتها الطاقية بالنسبة لقع عصابة الناقلية ( $E_c$ ) بين القيمتين  $0.9 eV$  و  $1.4 eV$ .

يعتمد مبدأ عمل طريقة التفريغ التوهجي للحصول على الأفلام الرقيقة من السيلكون غير المتبلور المهدرج على قذف جزيئات السيلان  $SiH_4$  في حجرة مخلاة جيداً (عادةً ما يبلغ ضغط التخلية أجزاء عشرية من المليمتر الزئبقي) بحزمة إلكترونية بطاقة معينة (تتأرجح قيمتها بين  $20 eV$  و  $40 eV$  إذا كانت طاقة التفريغ حوالي  $400 W$ ) فتنتج مركبات متشردة أساسها السيلكون؛ مثل  $SiH$ ، و  $SiH_2$ ، وغيرها. وبما أن المركبات الأخيرة تكون متأينة فإنها تتسارع تحت تأثير الحقل الكهربائي المطبق باتجاه الركيزة لتكوّن الفيلم الرقيق المطلوب. وللحصول على الأفلام الرقيقة من كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج، تُقذف جزيئات السيلان  $SiH_4$  والميثان  $CH_4$  بحزمة إلكترونية بآن واحد. تتميز طريقة التفريغ التوهجي المستخدمة للحصول على الأفلام الرقيقة a-Si:H و a-SiC:H عن غيرها من الطرائق كون كثافة الحالات المتوضعة في الفجوة الطاقية قليلة نسبياً مقارنةً مع طريقة التذرية في جو بلازمي من الأرجون والهيدروجين. ونظراً لثقل ذرات وأيونات الأرجون مقارنةً مع بقية المركبات الموجودة في البلازما فإنها تقوم بدور الناقل إلى الركيزة. وقد أكد باحثون آخرون [6] وجود قمتين أيضاً في طيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية لطبقات السيلكون غير المتبلور المهدرج تأرجحت مواضعها الطاقية بين القيمتين  $1 eV$  و  $1.2 eV$ .

إن هذا التناقض الحاصل في حساب طيف كثافة الحالات  $N(E)$  من وجهة النظر المبينة أعلاه ناتج بصورة أساسية من غياب نموذج عام قادر على تفسير المعطيات التجريبية ونتائجها التي تم الحصول عليها باستخدام هذه الطريقة أو غيرها. علاوةً على ذلك، فإن معظم الطرائق المعاصرة المستخدمة في تعيين طيف كثافة الحالات  $N(E)$  تجريبياً تقودنا، وإن من حيث الشكل، إلى معضلة حل معادلات تكاملية خطية. فمسألة استنباط كثافة الحالات وفقاً لمعطيات مفعول الحقل [7]، والتيارات الناجمة عن الشحنة الحجمية [8]، ومطيافية السعة غير المستقرة والمتساوية درجة الحرارة [9,10] تقودنا إلى حل معادلة تكاملية خطية من الدرجة الأولى تدعى بمعادلة فريدولم's Fredholm's Equation. كما أنه عند استخدامنا طرائق المطيافية الضوئية-الصوتية [11]، والامتصاص الضوئي [12]، والناقلية الضوئية غير المستقرة [13] لإيجاد  $N(E)$ ، بالمعنى الذي ذكرناه، ينتهي بنا المطاف إلى حل معادلة تكاملية خطية من الدرجة الأولى تدعى بمعادلة ولتر Wolterr's Equation. وفي كلتا الحالتين السابقتين يمكننا متابعة سرد الطرائق التي تقودنا إلى المعضلة ذاتها.

عندما نحسب طيف كثافة الحالات  $N(E)$  فإننا نتعامل مع معادلات أحد طرفيها يتعين تجريبياً بخطأ محدود، وبالتالي لا يعدُّ حل مثل هذه المعادلات دقيقاً بالمعنى التقليدي للمسألة (وفقاً لأدامارو) [14]، وتسمى المسألة الرياضية

المدرسة عندها بالمسألة غير الدقيقة  $Not\ accurate\ Problem$ ؛ فأية أخطاء، مهما صغرت (بحدود الخطأ التجريبي)، تُرتكب في تعيين الطرف الأيمن للمعادلات التكاملية المدرسة تؤدي إلى ترجحات كبيرة - تصل لعشرات الأضعاف - في تعيين طيف كثافة الحالات  $N(E)$ . إن عدم دقة المسألة التي تحصل في معظم الحالات تجعلنا نرفض الحل المباشر للمعادلة التكاملية الموافقة لها، وتدفعنا بالتالي إلى استخدام طريقة "تمذجة Modelization" كثافة الحالات  $N(E)$  حيث يتم اختيار شكل التابع المجهول - المطلوب من قبلنا - مسبقاً، وتُحسب وسائطه الكمية من خلال مقارنتها مع المعطيات التجريبية الناتجة. ويمكننا في الواقع باستخدام هذه الطريقة الحصول - من خلال التجربة - على أي سلوك معطى مسبقاً لتغير طيف كثافة الحالات  $N(E)$ .

### أهمية البحث وأهدافه:

تكمُن أهمية هذا البحث في المساهمة النظرية الفعالة لدراسة طريقة حساب طيف توزيع كثافة الحالات في الفجوة الطاقية بطريقة التيار الضوئي الثابت للمواد نصف الناقلة غير المتبلورة لاسيما تلك التي تمتلك توزيعاً هرمياً لذراتها؛ كالسيلكون غير المتبلور المهدرج (a-Si:H)، والجرمانيوم غير المتبلور المهدرج (a-Ge:H)، وكربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج (a-SiC:H)، وذلك تأسيساً على خوارزمية تنظيم تيخانوف [14] Tekhanoff's Regularization Method، وأثرها على دراسة الخواص الكهربائية والضوئية لتلك المركبات. لأن هذه الخواص ترتبط بشكل وثيق بطيف كثافة الحالات المشار إليه هنا، والذي يتعلق بدوره بشروط تحضير العينات المدرسة. تتجلى الأهمية التطبيقية للبحث في إمكانية استخدام أنصاف النواقل غير المتبلورة في مجالات الصناعة المختلفة، لاسيما الصناعة الإلكترونية حيث يمكن أن تستخدم طبقات السيلكون غير المتبلور المهدرج في صناعة الخلايا الشمسية Solar Cells المختلفة، والترانزستورات الحقلية Field Effect Transistors من النوع معدن - عازل - نصف ناقل. كما تستخدم طبقات كربيد السيلكون بمثابة ناقلات ببنية للمعلومات؛ كطبقات التصوير الكهروضوئي Electro-photography Layers.

### طريقة البحث والوسائل المستخدمة:

طبقت طريقة تنظيم تيخانوف [14] لحل معادلة ولتر غير الدقيقة - بالمعنى التقليدي - التي تنشأ عند حساب أطيف كثافة الحالات بطريقة التيار الضوئي الثابت CPM، ثم استخدمت خصائص النفاذ التتابع Function Convolution بالنسبة لتحويلات لابلاس لتبسيط الحل المنظم الذي يمثل أطيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية لنصف ناقل غير متبلور. وتم بعد ذلك تطبيق الحل المنظم الناتج على أفلام رقيقة مصنوعة من التركيبيين a-Si:H و a-SiC:H للتحقق من صحة الطريقة الرياضية الجديدة المدرسة في هذا البحث، وإمكانية استخدامها، وتعميمها. حُضرت الأفلام الرقيقة المشار إليها هنا بطريقة التدريجية في حالة التواترات الراديوية العالية (13.56 MHz) في جو بلازمي مكوّن من الهيدروجين والأرغون [15,10]. بعد ذلك تم حساب أطيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل غير المتبلورة بحاسوب شخصي باستخدام برنامج CPMG، حيث اعتمدت نتائج قياس العينات المستخدمة في [15,10].

### النتائج والمناقشة:



إن آلية تعيين شدة هذه الأنماط - بهذا الشكل - لا تجعل استخدام طريقة التيار الضوئي الثابت CPM في تعيين قيمة معامل الامتصاص الضوئي للمادة المدروسة  $k_v(h\nu)$  دقيقاً في كل الحالات، ولكنها تُبسّط الصيغة الرياضية التي تصف طيف كثافة الحالات  $N(E)$ ، وتسهّل بالتالي تعيينه، بشكل حقيقي، لأن الانتقالات الضوئية الموافقة لنمط واحد من الأنماط المشار إليها أعلاه تساهم في قيمة معامل الامتصاص الضوئي  $k_v(h\nu)$  المعينة بالعلاقة التالية:

$$k_v(h\nu) = \frac{const.}{\Phi(h\nu)}, \quad (1)$$

حيث  $\Phi(h\nu)$  تدفق الفوتونات الذي يحافظ على ثبات التيار الضوئي في العينة المدروسة من أجل قيم مختلفة لطاقة الفوتونات  $h\nu$ .

وهكذا، يتعين التيار الضوئي بعمليات التهييج من النمط "a" بشكل صرف من أجل a-Si:H و a-SiC:H، و a-Ge:H [16,2,1]. ويمكن كتابة العلاقة التالية بالنسبة لمعامل امتصاص العينة المدروسة  $k_v(h\nu)$  في تقريب الإلكترون الواحد One Electron Approximation [4] الذي يعتبر أن المستويات الطاقية مشغولة بالإلكترون واحد فقط بالشكل:

$$\int N(E) f(E) g(E+h\nu) [1-f(E+h\nu)] dE = h\nu k_v(h\nu), \quad (2)$$

حيث  $f(E)$  تابع فيرمي ديراك الموافق للتوزع شبه المتوازن للإلكترونات: فمن المعروف أن الإلكترونات المتولدة نتيجة التهييج الضوئي تكون غير متوازنة وبالتالي يكون تابع التوزع الموافق غير متوازن ولذلك تُستبدل سوية فيرمي المتوازنة المعروفة لدينا بأخرى مشابهة لها من حيث الشكل وتقوم مقامها، ندعوها شبه سوية فيرمي *Quasi-Fermi level*. وتتحقق المساواة  $f(E)=1$  من أجل كل الحالات الطاقية  $E$  الواقعة تحت موضع شبه سوية فيرمي  $E_{fn}$ . وتتحقق المساواة  $f(E)=0$  من أجل كل الحالات الطاقية الواقعة فوقها، علماً أن  $g(E)$  كثافة الحالات الطاقية النهائية الموافقة لانتقالات النمط المدروس. وقد استخدمنا في الشكل (1) محوراً طاقياً  $\varepsilon$  مساعداً مما سمح لنا بإعادة كتابة العلاقة (2) بالشكل التالي:

$$\int N(\varepsilon) g(h\nu-\varepsilon) d\varepsilon = h\nu k_v(h\nu). \quad (3)$$

نعلم أنه في حالة العصابات الطاقية التي لها شكل قطع مكافئ يكون  $g(h\nu,\varepsilon) \sim (h\nu-\varepsilon)^{1/2}$  (حيث يساوي معامل التناسب مقدراً ثابتاً). والدليل على أن للعصابات الطاقية في السيلكون غير المتبلور المهدرج a-Si:H وكربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج a-SiC:H شكل قطع مكافئ هو علاقة المقدار  $(h\nu k_v)^{1/2}$  بطاقة الفوتونات  $h\nu$  في مجال حد الامتصاص الضوئي. ويتضح من الشكل (1) أنه في غياب التهييج المتعدد الفوتونات لا يمكن للحالات الطاقية الواقعة تحت السوية  $\varepsilon = h\nu$  أن تشارك في عمليات النمط "a"، لأن حاملات الشحنة المهيجة من تلك الحالات لا تبلغ قعر عصابة الناقلية. وبالتالي تنتج مباشرة مساواة الحد العلوي لإشارة التكامل في المعادلة (3) لطاقة فوتونات  $(h\nu)$  الإشعاع الوارد على العينة المدروسة. ونظراً لكون الحالات الواقعة فوق موضع شبه سوية فيرمي  $E_{fn}$  شاغرة [انظر الشكل (1)] فإنه يمكن اعتبار الحد السفلي للتكامل صفراً  $\varepsilon = 0$  بدلاً من شبه سوية فيرمي  $\varepsilon = E_{fn}$  لأن ذلك لن يؤثر على قيمة التكامل. وعليه يمكن كتابة المعادلة التالية:

$$\int_{E_{fn}}^{h\nu} N(\varepsilon)(h\nu - \varepsilon)^{1/2} d\varepsilon = \int_0^{h\nu} N(\varepsilon)(h\nu - \varepsilon)^{1/2} d\varepsilon. \quad (4)$$

وبأخذ العلاقة (3) بعين الاعتبار يمكن كتابة المعادلة (4) بالشكل:

$$\int_0^{h\nu} N(\varepsilon)(h\nu - \varepsilon)^{1/2} d\varepsilon = h\nu k_\nu(h\nu). \quad (5)$$

بهذا الشكل نجد أن حساب طيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية  $N(E)$  حسب معطيات التيار الضوئي الثابت CPM يقودنا إلى معضلة حل معادلة ولتر التكاملية، التي طرفها الأيسر عبارة عن النفاذ التابعين  $N(E)$  و  $E^{1/2}$  بالنسبة لتحويلات لابلاس [18,17] وذلك بعد استعادة المحور الطاقى  $E$  المعاكس بالاتجاه للمحور الطاقى المساعد  $\varepsilon$  [انظر الشكل (1)]. والمعادلة الناتجة تكافئ المعادلة المستخدمة في [2] حيث يتحقق الانتقال من معادلة لأخرى باستبدال المتغيرات مع الأخذ بالحسبان المساواة (4). وسوف نطبق لاحقاً المعادلة (5)، لأنه بفضل خصائص النفاذ التوابع يمكن تبسيط خوارزمية حساب طيف كثافة الحالات  $N(E)$  بشكل حقيقي.

إذا فرضنا الآن أن التابع الذي يصف معامل امتصاص المادة المدروسة  $k_\nu(h\nu)$  يمتلك بين أية نقطتين متجاورتين  $h\nu_i$  و  $h\nu_{i+1}$  ( $1 < i < Q$ ) من الطيف قيمة ثابتة  $(a_i)$ ، عندئذٍ يمكن التعبير عن تحويلات لابلاس  $Y(p)$  [18,17]  $(p)$  متحول في فراغ الصورة) للطرف الأيمن من المعادلة (5) بالعلاقة التالية:

$$Y(p) = \frac{1}{p^3} \sum_{i=1}^Q a_i [e^{-h\nu_i \cdot p} - e^{-h\nu_{i+1} \cdot p}]. \quad (6)$$

وانسجماً مع ما طُرح في [14] يمكن تمثيل صورة الحل المنظم  $N(p)$  للمعادلة (5) بالشكل:

$$N(p) = \frac{Y(p)}{K(p) \cdot [1 + uM(p)]}, \quad (7)$$

حيث  $u \geq 0$  عامل التنظيم، و  $K(p)$  صورة نواة المعادلة (5)، والتابع  $M(p)$  يجب أن يحقق شروط تيخانوف [14]:  $M(p) = p^{-1}$ . وبعد إجراء تحويلات لابلاس ومن ثم التحويلات الجبرية نحصل على صورة طيف كثافة الحالات التالية:

$$N(p) = \frac{2}{\sqrt{\pi p} (p+u)} \sum_{i=1}^Q a_i [e^{-h\nu_i \cdot p} - e^{-h\nu_{i+1} \cdot p}]. \quad (8)$$

وبتطبيق تحويل لابلاس العكسي على العلاقة الأخيرة نجد:

$$N(E) = \frac{2}{\sqrt{-\pi u}} \sum_{i=1}^Q a_i [e^{-u h\nu_i} \operatorname{erf}(\sqrt{-u(E - h\nu_i)}) - e^{-u h\nu_{i+1}} \operatorname{erf}(\sqrt{u(E - h\nu_{i+1})})], \quad (9)$$

حيث:

$$\mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{\sqrt{p} (p+u)} \right] = \frac{1}{\sqrt{-u}} e^{-u(E-h\nu)} \operatorname{erf}(\sqrt{-u(E-h\nu)}),$$

تحويل لابلاس العكسي للمقدار  $\left[ \frac{1}{\sqrt{p}(p+u)} \right]$ ، علماً أن المقدار  $erf(u, hv)$  يرمز إلى تابع الخطأ

.Error Function

ويبدو واضحاً هنا، أنه لا يمكن استخدام العلاقة (9) مباشرة لحساب كثافة الحالات الطاقية  $N(E)$ . إذ لا بد

من نشر المقدار  $erf(u, hv)$ ، والذي يعطى بالعلاقة التالية [18]:

$$erf(\sqrt{-u(E-hv_i)}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{[\sqrt{-u(E-hv_i)}]^{2n+1}}{n!(2n+1)} \right\}.$$

نحصل بعد ذلك على معادلة طيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل غير المتبلورة بشكلها

النهائي التالي:

$$N(E) = \frac{4}{\pi} \sum_{i=1}^Q a_i \left\{ \begin{array}{l} e^{-u hv_i} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[u(E-hv_i)]^n}{n!(2n+1)} \right] (E-hv_i)^{1/2} - \\ e^{-u hv_{i+1}} \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[u(E-hv_{i+1})]^n}{n!(2n+1)} \right] (E-hv_{i+1})^{1/2} \end{array} \right\}, \quad (10)$$

حيث يتعين عامل التنظيم  $u$  بالمساواة المبينة في [15, 14]. ويمكن التأكد بسهولة من أن العبارة (10) تؤول

إلى الحل الدقيق (غير المنظم) للمعادلة (5) عندما  $u = 0$ .

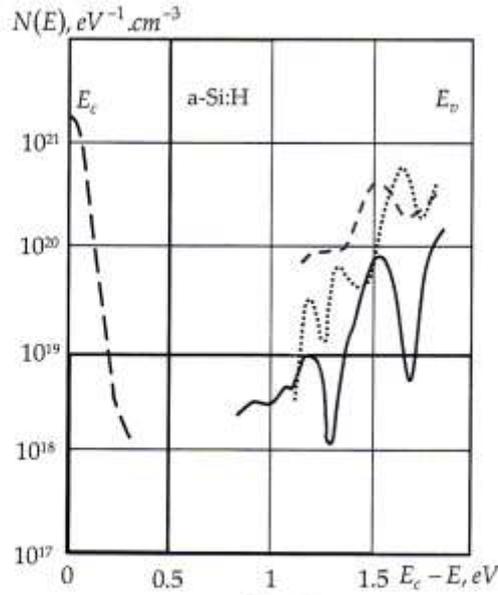
تم الحصول على عينات السيلكون غير المتبلور المهدرج a-Si:H بطريقة التذرية - في حالة التواترات الراديوية العالية - High Radio Frequency Sputtering (13.56 MHz) لهدف من السيلكون المتبلور في حجرة مخللة مسبقاً تحتوي غازي الهيدروجين H<sub>2</sub> والأرغون Ar بنسبة 10:1. بينما تم تحضير عينات a-SiC:H بطريقة التذرية المشتركة Co-sputtering لهدف مكون من السيلكون المتبلور وشرائح الكربون الموضوع على سطح قرص السيلكون بوجود الهيدروجين والأرغون بنسبة 7:1. ويمكن تغيير تركيز ذرات الكربون في الأفلام الرقيقة الناتجة من خلال التحكم، بمساحتي الهدف الذي يتعرض للتذرية، والمكون من قرص السيلكون، وشريحة الكربون؛ علماً أن نسبة مساحة شريحة الكربون إلى مساحة قرص السيلكون A. ولقد ثبتنا كل معاملات تقانة تحضير عينات السيلكون غير المتبلور المهدرج a-Si:H الذي تراوح بين  $P_H = (0.2 - 4.8) \text{ mTorr}$ ، بينما بقيت جميعها ثابتة عند تحضير عينات كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج a-SiC:H. وبلغت درجة حرارة الركيزة 400 °C وطاقة التفريغ 500 W والضغط الجزئي للهيدروجين 4 mTorr، وتأرجحت قيمة المتحول A بين 0.11 و 0.44. تأرجحت سماكة عينات a-Si:H بين القيمتين 0.4 μm و 0.5 μm وعينات a-SiC:H بين القيمتين 1 μm و 2 μm. إن آلية الحصول على الأفلام الرقيقة المدروسة وطريقة دراستها مبينة بشكل مفصل في [10]. وقد قيست الوسطاء الكهروضوئية بما فيها عامل الامتصاص الضوئي للأفلام الرقيقة ذات المساري المستوية والمصنوعة من مادة النيكل في حالة التيار المستمر DC. ولقد بين الباحثون في [20,19] أن القياسات التي تُجرى بطريقة التيار الضوئي الثابت في حالة التيار المستمر تعطي قيماً لعامل الامتصاص أكبر بعشر مرات تقريباً من تلك التي تؤمنها القياسات في حالة التيار المتناوب AC.

يعرض الشكلان (2) و (3) بعض أطيف كثافة الحالات  $N(E)$  في الفجوة الطاقية للأفلام الرقيقة المصنوعة من a-Si:H و a-SiC:H المحسوبة بالطريقة الموصوفة أعلاه. وتجدر الإشارة هنا إلى وجود اختلاف فيزيائي واضح بين أطيف كثافة الحالات للسيلكون المهدرج غير المتبلور a-Si:H، وكربيد السيلكون المهدرج غير المتبلور a-SiC:H يتمثل في اتساع عرض الفجوة الطاقية للأخير بسبب دخول ذرات الكربون إلى تركيبه، وعليه فإن الناقلية الكهربائية - في حالة الظلام - للمركب الثاني ستكون أصغر منها للمركب الأول.

وتتصف العينات، التي تم الحصول عليها في هذا البحث، بوجود قمتين في منحنيات أطيف كثافة الحالات  $N(E)$ ، مما يعتبر تبايناً أساسياً بينها وبين الأفلام الرقيقة a-Si:H و a-SiC:H التي تم الحصول عليها بطريقة تفكك السيلان الأحادي والميثان  $CH_4$  حيث تتميز أطيف كثافة الحالات فيها بوجود قمة واحدة فقط [21].

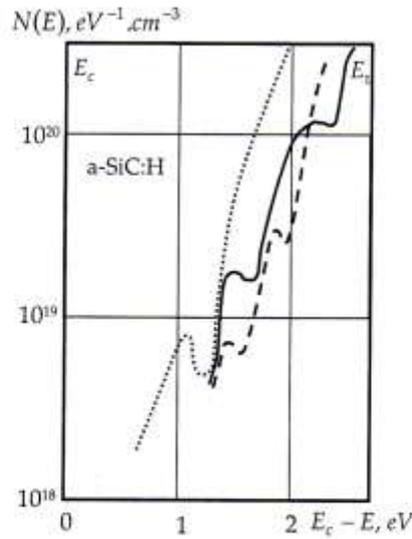
يرتبط تفسير الاختلافات المشار إليها في أطيف كثافة الحالات  $N(E)$  بخصائص تشكل *Morphology* الأفلام الرقيقة ذات التركيب العامودي "Column Structure"، الذي يعتبر شبكة الأفلام الرقيقة a-Si:H (وكذلك a-SiC:H) بمثابة "أعمدة" و"فواصل رابطة" تربط فيما بينها. ندعي هنا، أن القمة ذات النهاية العظمى الموافقة للطاقة  $E_c - E = (1.2 - 1.3) eV$  (انظر الشكل (2)) ناتجة عن الروابط المقطوعة المتمركزة بصورة رئيسية في الفواصل الرابطة بين "الأعمدة"، بينما القمة ذات النهاية العظمى الموافقة للطاقة  $E_c - E = (1.5 - 1.7) eV$  ناتجة عن الروابط المقطوعة والروابط الضعيفة المتمركزة داخل "الأعمدة" في كامل المجال المدروس للضغط الجزئي للهيدروجين  $P_H = (0.2 - 4.8) mTorr$ . يتناقص عدد الروابط المقطوعة المتمركزة في "الأعمدة"، في بنية الأغشية الرقيقة a-Si:H الأكثر ارتخاءً والمحضرة بطريقة تفكك السيلان الأحادي، بشكل حاد وتشكل الروابط الضعيفة حد يورباك Urback's Edge لكثافة الحالات  $N(E)$  عند أعلى عصابة التكافؤ (يعبر هذا الحد عن درجة عدم انتظام ترتيب الذرات الأصلية في المركبات المدروسة). وتم البرهان على هذا الادعاء بناءً على ارتباط مطال قمة طيف كثافة الحالات  $N(E)$  والتركيز السطحي "للأعمدة" ( $k$ ) في الأغشية الرقيقة a-Si:H المحضرة بطريقة التذرية. وتم الحصول على تابعة التركيز السطحي "للأعمدة"  $k$  للضغط الجزئي للهيدروجين  $k = f(P_H)$ ، [شكل (4)]، من دراسة سطح الأغشية الرقيقة بمجهر إلكتروني ماسح من النوع JMS-25 S الذي يتصف بقدرة تكبيرية تتراوح بين 10000 و 40000 مرة. وانطلاقاً من أن للأعمدة شكلاً أسطوانياً، فإنه يجب أن يتغير عدد الروابط المقطوعة في محيطها (وبالتالي مطال قمة طيف كثافة الحالات  $N(E)$  الموافقة للموضع الطاقى  $E_c - E = 1.2 - 1.3 eV$ ) عند تغير  $k$  وفقاً للعلاقة  $N = 2\sqrt{\pi k}$ . وتؤكد النتائج المعروضة في الشكل (5) صحة الفرضية المشار إليها أعلاه حول طبيعة قمة كثافة الحالات ذات النهاية العظمى الموافقة للطاقة  $E_c - E = (1.2 - 1.3) eV$ . كما يبين الشكل (5) ترابط القيم التجريبية لكثافة الحالات، وتلك المحسوبة في "النسيج الرابط"  $N(E = 1.2 - 1.3 eV)$ .

من المفيد جداً هنا الإشارة إلى أن انخفاض تركيز العيوب داخل "الأعمدة" الملحوظ عند ازدياد  $P_H$  مرتبط على ما يبدو بتخفيف قساوة بنية a-Si:H على حساب ازدياد محتوى ذرات الهيدروجين في الأفلام الرقيقة. أما بالنسبة لعينات كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج a-SiC:H، فإن دراسة أطيف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية  $N(E)$ ، عندما تأرجحت قيمة المتحول  $A$  بين القيمتين 0.11 و 0.44،



(2) الشكل

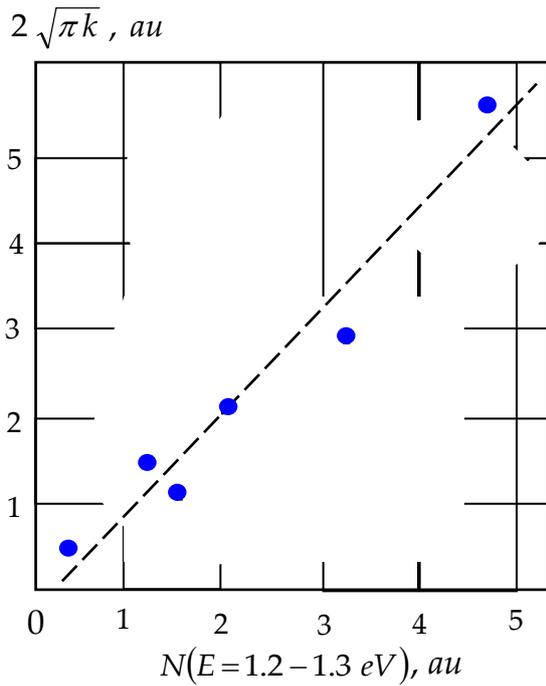
أطياف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية للعينات a-Si:H المحضرة بطريقة التذرية من أجل  $P_H = 0.2 \text{ Torr}$  (اللون الأزرق المستمر)،  $P_H = 0.4 \text{ Torr}$  (اللون الأسود المنقطع)، و  $P_H = 0.8 \text{ Torr}$  (اللون الأزرق المستمر).



(3) الشكل

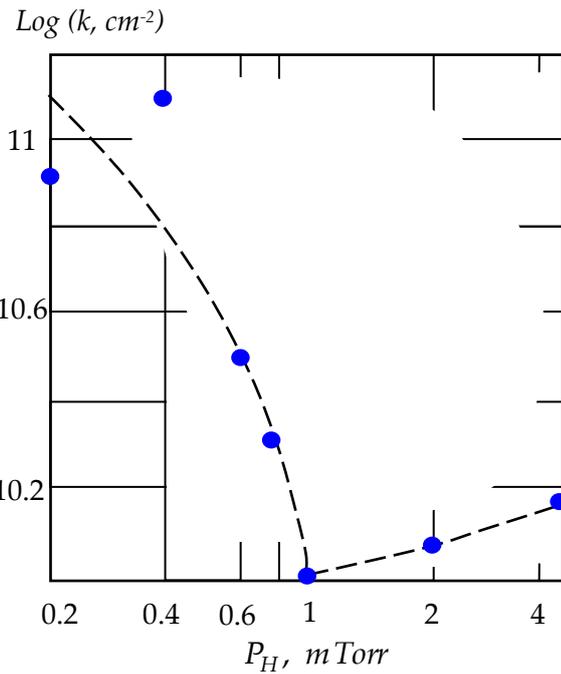
أطياف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية للعينات a-SiC:H المحضرة بطريقة التذرية المشتركة حيث  $A = 0.11$  (اللون الأزرق المستمر)،  $A = 0.24$  (اللون الأسود المنقطع)، و  $A = 0.44$  (اللون الأزرق المستمر).

دلت على تنامي الكثافة الإجمالية لهذه الحالات الطاقية، وتغير الموضع الطاقى لقمم كثافة الحالات بشكل حقيقي، (شكل 3). تجدر الإشارة هنا إلى أن إدخال ذرات الكربون إلى شبكة السيلكون غير المتبلور المهدرج، لا يؤدي إلى زيادة عرض الفجوة الطاقية وحسب، وإنما إلى انخفاض الناقلية المظلمة أيضاً، مما يسمح باستخدام الأفلام الرقيقة المصنوعة من كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج في تراكيب التصوير الضوئي المتعددة الطبقات.



الشكل (5)

الترابط بين قيمتي كثافة الحالات التجريبية والمحسوبة في "النسيج الرابط" للأفلام الرقيقة ذات التركيب العامودي.



الشكل (4)

أثر الضغط الجزئي للهيدروجين على التركيز السطحي للأعمدة" في الأفلام الرقيقة a-Si:H المدروسة.

## الاستنتاجات والتوصيات:

- 1- تم وضع مخطط طاقة لنصف ناقل غير متبلور تعرض لضوء وحيد اللون بطاقة  $h\nu$  وتضمّن ثلاثة أنماط للانتقالات الضوئية الممكنة تختلف فيما بينها بطبيعة الحالات الطاقية الأولية والنهائية.
- 2- تمت الدراسة النظرية والتحليلية لطريقة حساب طيف كثافة الحالات المتوضعة في الفجوة الطاقية  $N(E)$  لأنصاف النواقل غير المتبلورة؛ كالسليكون غير المتبلور المهدرج، وكربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج، بطريقة التيار الضوئي الثابت في حالة التيار المستمر في مجال طاقة واسع نسبياً تارجح بين  $0.5 \text{ eV}$  و  $2.5 \text{ eV}$  تقريباً.

3- تبين أن أطراف كثافة الحالات  $N(E)$  للسيلكون غير المتبلور المهدرج a-Si:H تمتلك قمتين الأولى توافق الطاقة  $E_c - E = 1.2 - 1.3 eV$ ، ناتجة عن الروابط المقطوعة الموجودة بصورة أساسية في "النسيج الرابط" بين "الأعمدة"، في حين توافق الثانية الطاقة  $E_c - E = 1.5 - 1.7 eV$ ، وناتجة عن الروابط المقطوعة والروابط الضعيفة المتمركزة في "الأعمدة".

4- تؤكد دراسة أطراف كثافة الحالات في الفجوة الطاقية  $N(E)$  للأفلام الرقيقة من كربيد السيلكون غير المتبلور المهدرج a-SiC:H المدروسة في هذا البحث، عندما تأرجحت قيمة المتحول  $A$  بين القيمتين 0.11 و 0.44، ازدياد الكثافة الإجمالية لهذه الحالات الطاقية، وتغير الموضع الطاقى لقمم كثافة الحالات بشكل جوهري. ثم أن أثر وجود ذرات الكربون في شبكة السيلكون غير المتبلور المهدرج تمثل في زيادة عرض فجوتها الطاقية وناقليتها المظلمة.

ونخلص في نهاية هذا البحث إلى التوصيات التالية:

1- متابعة إجراء مثل هذه البحوث النظرية بهدف تحسين حساب أطراف توزع كثافة الحالات المتوضعة في الفجوة الطاقية  $N(E)$  لأنصاف النواقل غير المتبلورة من النوع a-Si:H، و a-SiC:H نظراً لإمكانية استخدام a-Si:H في صناعة الخلايا الشمسية المتعددة الطبقات كونها تتصف بناقلية ضوئية مناسبة وتغطي جزءاً من الطيف المرئي للأشعة الكهرطيسية، والترانزيستورات أحادية القطبية من النوع معدن - عازل - نصف ناقل، واستخدام a-SiC:H في طبقات التصوير الكهروضوئي لأنها تتصف بمقاومة كهربائية عالية نسبياً.

2- تعميم هذه الدراسة على نترديد السيلكون غير المتبلور المهدرج a-SiN:H بغية تحسين ميزات هذه المواد المستخدمة على نطاق واسع في صناعة طبقات التصوير الكهروضوئي والتي تتطلب مواصفات صارمة تتعلق بمقاومتها النوعية العالية (من مرتبة  $10^{14} \Omega \cdot cm$  وما فوق).

## المراجع:

- 1- CHANG, H.L.; SANG, S.K.; KEONG, S.L. *Numerical Modeling and Simulation of Constant Photocurrent Method on a-Si:H p-i-n Junction Structure*, Photovoltaic Specialists Conference, 2000, 963-939.
- 2- KURNIA, D.; BARCLAY, R.P.; BOUD, J.M. *Investigation of a-Si:H Thin Film Using The Constant Photocurrent Method*, Journal of Non-crystalline Solids, Vol. 137-138, 1991, 375-378.
- 3- MAIN, C.; RENOLDS, S.; ZRINSCAK, I.; MERAZGA, A. *Extension of Constant Photocurrent Method to Determine Densities of Occupied And Unoccupied Localized States*, Journal of Materials Science, Vol. 808, 2004, 103-108.
- 4- VANECEK, M.; ABRAHAM, A.; STIKA, O. *Gap States Density in a-Si:H Deduced From Subgap Optical Absorption Measurement on Shottky Solar Cells*, Phys. Stat. Solid (a), Vol. 83, 1984, 617-623.
- 5- БАЛАГУРОВ, Л. А.; КАРПОВА, Н. И.; ОМЕЛЬЯНВСКИЙ, Э. М.; ПИНСКЕР, Т. Н.; СТАРИКОВ, М. Н. *Энергетический Спектор Глубоких Состояний в Щели Подвижности a-Si:H*, ФТП, 1986, Т. 20, В. 4, 720-723.
- 6- FERREIRA, G. M.; CHEN, C.; KOVAL, R. J.; PEARCE, J. M.; WRONSKI, C. R.; COLLINS, R. W. *Optimization of Protocrystalline Silicon P-Type Layers For Amorphous Silicon n-i-p Solar Cells*, Journal of Non-crystalline Solids, Vol. 338-340, 2004, 694-697.
- 7- AUGELLI, V.; MURRI, R.; SCHIAVULLI, L. *The Density of States in The Mobility Gap of Amorphous-Silicon Films Computed By A New Analytical Method*, Journal: Nuovo cinemto, Vol. 10, N. 3, 1988, 237-246.
- 8- CECH, V.; STUCHLIK, J. *Determination of Density of Localized States in a-Si:H From The Time Relaxation of Space-Charge-Limited Conductivity*, Physica status solidi (a), Vol. 187, Issue 2, 2001, 487-491.
- 9- ОКУШИ, Х.; ОХЕДА, Х.; ТАНАКА *Спектроскопия Состояний в Запрещенной Зоне -Аморфные Полупроводники и Приборы На Их Основе*, Под Ред., ХАМАКВА, Й., Мир, 1986, 376.
- 10- سليمان، حسن عبد الكريم. *دراسة بعض خواص السيلكون المهذرج غير المتبلور (a-Si:H) بحساب طيف أزمنة الاسترخاء*، مجلة جامعة تشرين للدراسات والبحوث العلمية، سلسلة العلوم الأساسية، المجلد الثالث والعشرون، العدد العاشر، 2001، 47-62.
- 11- ЯМАСАКИ С. *Фотоакустическая Спектроскопия - Аморфные Полупроводники и Приборы На Их Основе*, Под Ред., ХАМАКВА, Й., Мир, 1986, 376.
- 12- KODOLBA, A. O.; OZCAN, O., *Comparison of The Methods Used to Calculate The Density of States From Measured Subgap Absorption in a-Si:H And Related Alloys*, Optical Materials, Vol. 20, Issue 2, 2002, 147-152.

- 13- MARSHALL, J. M., *Carrier Diffusion in Amorphous Semiconductors*, Rep. Pro. Phys., Vol. 46, 1983, 1235-1282.
- 14- ТИХАНОВ, А. Н.; АРСЕНИН, В. Я., *Методы Решения Некорректных Задач*, Мир, 1986, 288.
- 15- سليمان، حسن عبد الكريم، استخدام خوارزمية تنظيم من أجل حساب أطياف كثافة الحالات الطاقية في الفجوة الحركية لـ  $a\text{-Si:H}$  بطريقة التيار الضوئي الثابت، مجلة جامعة تشرين للدراسات والبحوث العلمية - سلسلة العلوم الأساسية، قبلت للنشر (176/ ص م ج تاريخ 2007/2/28).
- 16- SREET, R.A.; BIGELSEN, D.K., *The Spectroscopy of Localized States, The Phys. of Hydrogenated Amorphous Silicon*, Pt. II, Ed. JOANNOPOULOS, J.D.; LUCOVSKY, G., Berlin, Springer-Verlag, 1984.
- 17- ДЕЧ, Г., *Руководство к Практическому Применению Преобразования Лапласа и Z-Преобразования*, ФТП, Мир, 1971, 288.
- 18- البين، محمد وليد ؛ غشيم، محمد ؛ الصباغ، محمد خليل، الرياضيات (5)، منشورات جامعة حلب، 1998-400، 1997.
- 19- MAIN, C.; RENOLDS, S.; ZRINCAK, I.; MERAZGA, A., *The Influence of Generation and Transport in The Constant Photocurrent Method*, Journal of Materials Science, Vol. 14, 2003, 681-684.
- 20- MAIN, C.; RENOLDS, S.; ZRINCAK, I.; MERAZGA, A., *Comparison of AC And DC Constant Photocurrent Method For Determination of Defect Densities*, Journal of Non-Crystalline Solids, Vol. 338, 2004, 228-231.
- 21- AKIMORI, T.; YASUHARU, K.; YASUO, S.; TERUYOSHI, M., *Priorities of Hydrogenated Amorphous Silicon Carbide Films Prepared By A Separately Excited Plasma CVD Method*, Journal of App. Phys., Vol. 30, 1997, 194-201.