

# 关于氢气区熔硅单晶中两个强吸收峰 (2210、1946 $\text{cm}^{-1}$ )模型的价键力场计算

谢雷鸣 白国仁 施天生 祁明维

(中国科学院上海冶金研究所)

氢气区熔硅单晶在伸缩振动区域存在两个强吸收峰: 2210  $\text{cm}^{-1}$ 、1946  $\text{cm}^{-1}$ (10 K 时, 频率分别为 2223、1952  $\text{cm}^{-1}$ )。在纯氩气氛下前者位移到 1617  $\text{cm}^{-1}$ , 后者位移到(1421  $\text{cm}^{-1}$ )。在氩氢混合气氛下, 2223、1617  $\text{cm}^{-1}$  发生分裂, 在 2223  $\text{cm}^{-1}$  的高频方向出现 2224、2226、2237、2245  $\text{cm}^{-1}$ , 在 1617  $\text{cm}^{-1}$  附近出现 1615、1613  $\text{cm}^{-1}$  等新峰, 而 1952  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰则没有分裂。另文研究已证明上述分裂是由对应于 2223  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰的氢-缺陷复合体中的氢被不同数量的氩替代所引起的。并得出该氢-缺陷复合体具有  $T_d$  对称性的结论, 而 1952  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰所对应的氢-缺陷复合体具有 Si—H<sub>1</sub> 结构。在另文中, 根据上述特征, 及这两个峰的其他特征提出了这两个氢-缺陷复合体的模型。在这篇文章中, 我们将报道用自编的价键力场程序对模型进行理论计算的结果。

2223  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰对应的氢-缺陷复合体可能是空位加四个氢, 也可能是处在  $T_d$  间隙位置的间隙硅烷。我们对这两种模型均进行了计算。

关于空位加四个氢的模型, 我们计算了含有十六个硅四个氢的原子集团。对于间隙硅烷的模型, 我们计算了十一个硅原子加四个氢的原子集团。本文详细介绍了我们的计算结果, 并对所谓的力常数的合理性从物理上进行了分析讨论, 在此基础上对两个模型作了进一步的评价。

我们曾指出, 1952  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰所对应的氢-缺陷复合体具有 Si—H<sub>1</sub> 结构, 在弯曲摇摆振动区域存在两个不简并的吸收峰: 814、794  $\text{cm}^{-1}$ , 并提出, 该氢-缺陷复合体的模型为硅的  $\langle 100 \rangle$  劈裂间隙加两个氢原子。Ehomo 计算指出, 这种结构要发生弛豫, 使原来处在同一平面内的四个硅原子不再处于同一平面内。我们按弛豫后的构型用价键力场方法计算了含有共六个硅原子两个氢原子的集团。以 Lucovsky 计算非晶硅 S—H<sub>1</sub> 结构时所用的力常数为基础来拟合实验值。结果表明劈裂间隙加两个氢原子的模型是可取的。