

WOJSKOWA AKADEMIA TECHNICZNA
im. Jarosława Dąbrowskiego



ROZPRAWA DOKTORSKA

mgr inż. Olga Markowska

**Mechanizmy generacyjno-rekombinacyjne
generowanych optycznie nadmiarowych nośników
w heterostrukturach z tellurku kadmowo-rtęciowego**

Promotor:

prof. dr hab. inż. Krzysztof Józwiowski

Warszawa 2021

*Serdeczne dziękuję za nieocenioną pomoc
Panu prof. dr hab. inż. Krzysztofowi Józwickowskiemu,
za przekazaną wiedzę, determinację i wsparcie w rozwiązywaniu skomplikowanych
zagadnień podjętych w pracy.*

*A przede wszystkim za życzliwość, mobilizację
i zarażanie swoim entuzjazmem i zapalem do pracy,
oraz doskonały przykład zaangażowania w swoją życiową pasję.*

*Dziękuję wszystkim pracownikom Zakładu Fizyki Ciała Stałego za przekazaną wiedzę
i pomoc merytoryczną, nie tylko w czasie studiów doktoranckich, ale wsparcie od początku
mojej ścieżki naukowej.*

*Dziękuję rodzinie i bliskim
za okazane wsparcie i motywację do ciągłego rozwoju, ponieważ:*

*„Z życiem jest jak z jazdą na rowerze . Aby utrzymać balans, musisz zmierzać do
przodu.”*

A. Einstein

Praca została zrealizowana w ramach projektów:

2016/23/B/ST7/03958 oraz 2016/23/N/ST7/03618
finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki

Spis treści

Lista akronimów i symboli	5
Streszczenie.....	13
Summary	15
1. Wprowadzenie	17
1.1 Cele i tezy rozprawy.....	21
2. Metoda numeryczna i rezultaty obliczeń	22
2.1 Przykładowe rezultaty symulacji numerycznych dla nierównowagowych fotodiod z HgCdTe typu P ⁺ vN ⁺ oraz w konstrukcji z komplementarnymi barierami P ⁺ BvBN, pracujące w zakresie MWIR	24
2.2 Przykładowe rezultaty symulacji numerycznych dla nierównowagowych fotodiod z HgCdTe typu P ⁺ vN ⁺ oraz w konstrukcji z komplementarnymi barierami P ⁺ BvBN, pracujące w zakresie LWIR	36
3. Mechanizmy G-R w HgCdTe	41
3.1 Podział mechanizmów G-R.....	41
3.2 Czas życia elektronów i dziur	46
3.3 Rekombinacja przez centra SRH związane z lukami rtęci.....	48
3.4 Kinetyka procesów G-R związanych z lukami rtęci	49
3.5 Procesy G-R dla elektronów przy udziale atomów donorowych	55
3.5.1 Rekombinacja promienista.....	56
3.5.2 Rekombinacja fononowa.....	58
3.5.3 Rekombinacja Augera	59
3.5.4 Efekt wypadkowy.....	61
3.6 Procesy G-R dla elektronów walencyjnych atomów akceptorowych.....	62
3.6.1 Rekombinacja promienista.....	62
3.6.2 Rekombinacja fononowa.....	64
3.6.3 Rekombinacja Augera.....	65
3.6.4 Efekt wypadkowy.....	66
3.7 Procesy międzypasmowe	68
3.7.1 Proces generacji i rekombinacji promienistej	68
3.7.2 Międzypasmowe procesy Augera	71
4. Wypadkowe czasy życia elektronów i dziur	75
4.1 Materiał typu p.....	77
4.2 Materiał typu n.....	84
5. Dyslokacje niedopasowania	90
5.1 Dyslokacje niedopasowania w heterostrukturach HgCdTe i metoda obliczania ich gęstości.....	90
5.2 Rezultaty obliczeń i dyskusja.....	92

5.3	Dyslokacje jako dodatkowy kanał generacyjno-rekombinacyjny	100
5.4	Zmodyfikowany model dyslokacji jako obszarów o zwiększonej rekombinacji powierzchniowej	101
5.5	Nowe podejście do zagadnienia kinetyki procesów SRH zachodzących z udziałem poziomów energetycznych związanych z dyslokacjami	109
5.6	Równowagowa funkcja rozkładu bez uwzględnienia elektrycznego oddziaływania pomiędzy liniami dyslokacji	117
5.7	Równowagowa funkcja rozkładu po uwzględnieniu oddziaływania elektrycznego pomiędzy liniami dyslokacji	124
6.	Procesy rekombinacji powierzchniowej.....	132
6.1	Wprowadzenie	132
6.2	Model rekombinacji powierzchniowej.....	133
6.3	Wyniki eksperymentalne.....	140
	Podsumowanie	148
	Dodatek A Struktura energetyczna HgCdTe, masa efektywna w paśmie przewodnictwa, element macierzowy pędu i stosunek czasów życia $A7/A1$	151
	Dodatek B Energia elektryczna dyslokacji	152
	Literatura.....	158
	Spis Rysunków.....	164

Lista akronimów i symboli

a	stała sieci
A1	procesy generacyjno-rekombinacyjne Auger 1
A7	procesy generacyjno-rekombinacyjne Auger 7
σ_{AN_A}	przekrój czynny dla jonizacji zderzeniowej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
σ_{AN_D}	przekrój czynny dla jonizacji zderzeniowej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
AlAsSb	Antymonek arsenu glinu
AlGaSb	Antymonek galu glinu
B	bariera
b	wektor Burgersa
b	średnia prędkość fononów
BTBT	mechanizmy tunelowe międzypasmowe (ang. band to band tunneling)
BLIP	graniczna wykrywalność znormalizowana
c	prędkość światła
c	stała sieci
c_{nDIS}	współczynnik wychwytu dla elektronów
c_{pDIS}	współczynnik wychwytu dla dziur
Cv	ciepło właściwe
CdTe	tellurek kadmu
D	współczynnik dyfuzji
D*	znormalizowana wykrywalność
D_n	współczynniki dyfuzji dla elektronów

D_p	współczynniki dyfuzji dla dziur
DLTS	spektroskopia poziomów energetycznych (od ang. deep-level transient spectroscopy)
e	ładunek elementarny, ładunek elektronu
E	natężenie pola elektrycznego
E_A	energia jonizacji poziomu akceptorowego
E_C	pasmo przewodnictwa
E_D	energia jonizacji poziomu donorowego
E_{DIS}	średnia energia jonizacji pasma dyslokacyjnego
E_g	szerokość przerwy energetycznej
E_k	energia kinetyczna elektronu
e_{nDIS}	uśredniony współczynnik emisji pojedynczego elektronu z poziomu energetycznego w paśmie dyslokacyjnym
e_{pDIS}	uśredniony współczynnik emisji pojedynczej dziury z poziomu energetycznego w paśmie dyslokacyjnym
E_T	energia jonizacji poziomu pułapkowego
E_v	pasmo walencyjne
\bar{E}_q	średnia energia fotonów luminescencyjnych
e-h	para elektron-dziura
f	częstotliwość
f	nierównowagowa funkcja rozkładu
f^0	równowagowa funkcja rozkładu
f_{DIS}^0	równowagowa funkcją rozkładu określającą prawdopodobieństwo obsadzenia stanu w paśmie dyslokacyjnym przez elektron, w warunkach równowagi termicznej

f_T	prawdopodobieństwo obsadzenia poziomu pułapkowego
G	szybkość generacji
g	gęstość materiału
G_{ANA}	współczynnik rekombinacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
G_{AND}	współczynnik rekombinacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
g_{ANA}	szybkość generacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
g_{AND}	szybkość generacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
G_{DIS}	gęstość dyslokacji (ilość jamek trawienia na jednostkę powierzchni)
G_{ee}	Współczynnik szybkości emisji pojedynczej pary elektron dziura w procesie Auger 1
G_{hh}	Współczynniki szybkości emisji pojedynczej pary elektron dziura w procesie odpowiednie Auger 7
G_{pNA}	współczynnik rekombinacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
G_{pND}	współczynnik rekombinacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
g_{pNA}	szybkość generacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
g_{pND}	szybkość generacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
g_{RNA}	współczynnik rekombinacji promienistej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
g_{RND}	współczynnik rekombinacji promienistej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
$G-R$	mechanizmy generacyjno-rekombinacyjne
$GaAs$	arsenek galu

h	oznaczenie dziury
h	stała Plancka
\hbar	stała Plancka podzielona przez wartość 2π
HgCdTe (ang. MCT)	tellurek kadmowo-rtęciowy (ang. mercury cadmium telluride)
HgTe	tellurek rtęci
HOT	warunki pracy dla detektorów bez konieczności chłodzenia kriogenicznego (ang. higher operation temperature)
InAsSb	antymonek arsenu indu
I(V)	charakterystyka prądowo-napięciowa
IR	podczerwień
J	gęstość prądu (ang. current density)
J_{bulk}	gęstość prądu objętościowego
J_{surf}	gęstość prądu powierzchniowego
j_q	gęstość prądu fotonów
k	wektor falowy
LPE	metoda epitaksji z fazy ciekłej (ang. liquid-phase epitaxy)
LWIR	daleka podczerwień (ang. long wavelength infrared radiation)
M	masa atomu domieszki
m[*]	masa efektywna
m_e	masa efektywna elektronu
m_h	masa efektywna dziury
m_{hh}[*]	masa efektywna dziur ciężkich
m_{lh}[*]	masa efektywna dziur lekkich
MBE	metoda epitaksji z wiązek molekularnych (ang. molecular beam epitaxy)

MOCVD	metoda epitaksji związków metaloorganicznych z fazy gazowej (ang. metallo-organic chemical vapour deposition)
MWIR	średnia podczerwień (ang. middle wavelength infrared radiation)
n	obszar o przewodnictwie typu n – elektronowym (ang. negative)
N	obszar typu n o rozszerzonej przerwie energetycznej
n	nierównowagowa koncentracja elektronów
n₀	równowagowa koncentracja elektronów
N_A	koncentracja domieszek akceptorowych
N_A⁻	koncentracja zjonizowanych domieszek akceptorowych
N_D	koncentracja domieszek donorowych
N_D⁺	koncentracja zjonizowanych domieszek donorowych
N_T	koncentracja luk powstałych na skutek migracji atomów metali
P	proces radiacyjny
P	obszar o przewodnictwie typu p - dziurowym
p	nierównowagowa koncentracja dziur
p	średnia odległości między dyslokacjami
p₀	równowagowa koncentracja dziur
PR	efekt reabsorpcji fotonów
q	nierównowagowa koncentracja fotonów
q₀	równowagowa koncentracja fotonów
R	szybkość rekombinacji
R,r	promień
Γ_{ANA}	szybkość rekombinacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych

r_{AN_D}	szybkość rekombinacji Augera dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
r_B	promień atomu Bohra
R_d	znormalizowana rezystancja dynamiczna
R_{DIS}	szybkość rekombinacji termicznej SRH netto
R_i	czułość prądowa detektora
RF	zjawisko resorpcji fotonów
r_{RNA}	szybkość rekombinacji promienistej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
r_{RN_D}	szybkość rekombinacji promienistej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
r_{pNA}	szybkość rekombinacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
r_{pN_D}	szybkość rekombinacji fononowej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
$R (PR)$	zjawisko wtórnej absorpcji fotonów
S_{DIS}	szybkość rekombinacji powierzchniowej
SRH	centra pułapkowe, rekombinacja Shockley'a-Reada-Halla
T	temperatura
t	czas
TAT	tunelowanie przez poziomy pułapkowe (ang. trap assisted tunneling)
U	napięcie
VPE	epitaksja z fazy pary
VRS	metoda Van Roosbroecka i Shockley'a na wyznaczenie szybkości rekombinacji promienistej
X	powinowactwo elektronowe
x	zmienna składu molowego w mieszaninie $Hg_{x-1}Cd_xTe$

α	współczynnik absorpcji
γ	współczynnik załamania światła
∇	oznaczenie gradientu
ϵ_0	przenikalność elektryczna próżni
ϵ_r	względna przenikalność elektryczna
ζ	współczynnik przewodności cieplnej
λ	długość fali
λ_{co}	długość fali odcięcia
μ_{hh}	ruchliwość dziur ciężkich
μ_{lh}	ruchliwość dziur lekkich
μ_n	ruchliwość elektronów
μ_p	ruchliwość dziur
v	obszar typu n o niskiej koncentracji nośników większościowych
π	obszar typu p o niskiej koncentracji nośników większościowych
ρ_s	gęstość entropii
σ_{AN_A}	przekrój czynny dla jonizacji zderzeniowej dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
σ_{AN_D}	przekrój czynny dla jonizacji zderzeniowej dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
σ_{RN_A}	przekrój czynny na zderzenie elektronu ze zjonizowanym donorem dla płytkich stanów domieszkowych akceptorowych
σ_{RN_D}	przekrój czynny na zderzenie elektronu ze zjonizowanym donorem dla płytkich stanów domieszkowych donorowych
τ_{A1}	czas życia nośników ładunku zdeterminowany przez procesy międzypasmowe: Augera 1

τ_{A7}	czas życia nośników ładunku zdeterminowany przez procesy międzypasmowe: Augera 7
$\tau_A(N_A)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji Augera z udziałem zjonizowanych akceptorów
$\tau_A(N_D)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji Augera z udziałem zjonizowanych donorów
τ_n	czas życia elektronów
τ_p	czas życia dziur
$\tau_{PH}(N_A)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji fononowej z udziałem zjonizowanych akceptorów
$\tau_{PH}(N_D)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji fononowej z udziałem zjonizowanych donorów
τ_{RAD}	czas życia nośników ładunku zdeterminowany przez procesy międzypasmowe: rekombinację promienistą
$\tau_{RAD}(N_A)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji promienistej z udziałem zjonizowanych akceptorów
$\tau_{RAD}(N_D)$	czas życia nośników ładunku przy uwzględnieniu rekombinacji promienistej z udziałem zjonizowanych donorów
τ_{SRH}	czas życia nośników ładunku zdeterminowany przez mechanizmy pułapkowe Shockley'a-Reada-Halla
Φ	poziom Fermiego
Φ_n	quazi poziom Fermiego dla elektronów
Φ_p	quazi poziom Fermiego dla dziur
Ψ	potencjał elektryczny
Ω_A	wielki potencjał termodynamiczny
„+”	obszar wysoko domieszkowany, N^+ lub P^+

Streszczenie

Tytuł rozprawy: Mechanizmy generacyjno-rekombinacyjne generowanych optycznie nadmiarowych nośników w heterostrukturach z tellurku kadmowo-rtęciowego

Kluczowe słowa: *detektory podczerwieni, heterostruktury HgCdTe, procesy generacyjno-rekombinacyjne, detektory barierowe, detektory z komplementarnymi barierami, czasy życia nośników ładunku elektrycznego, dyslokacje niedopasowania, stany powierzchniowe, rekombinacja powierzchniowa, pasywacja*

Głównym celem rozprawy była analiza, na podstawie przeglądu literatury, różnych mechanizmów generacyjno- rekombinacyjnych (G-R), oraz teoretyczne wyznaczenie czasów życia nośników generowanych optycznie w nierównowagowych warunkach pracy detektorów z tellurku kadmowo-rtęciowego (HgCdTe).

W pracy analizowano parametry nierównowagowych detektorów fotowoltaicznych optymalizowanych na zakres średniej podczerwieni (MWIR) wykazując możliwość osiągnięcia granicznej wykrywalności znormalizowanej (BLIP). Jest to możliwe dzięki zdławieniu generacji i rekombinacji termicznej spowodowanej przez zjawisko ekskluzji i ekstrakcji nośników ładunku po polaryzacji struktury w kierunku zaporowym. Analizując udział różnych mechanizmów G-R można zauważyć, że zjawisko ekskluzji i ekstrakcji nie wpływa na szybkość generacji zdeterminowanej procesami Shockley'a-Reada-Halla (SRH). Stąd motywacja do przeanalizowania tych procesów w ramach pracy doktorskiej. Drugim ważnym problemem jest poprawne, teoretyczne określenie czasów życia nośników ładunku w sytuacji, gdy parametry fizyczne struktury znacznie odbiegają od ich wartości w stanach bliskich równowadze termicznej. Problem ten został rozwiązany w niniejszej rozprawie. W pracach poświęconych analizie mechanizmów G-R w HgCdTe pomija się udział mechanizmów związanych z płytkimi stanami domieszkowymi. W pracy wyprowadzono wyrażenia na szybkość generacji i rekombinacji nośników nadmiarowych z udziałem donorów i akceptorów w HgCdTe. Przeprowadzono wyliczenia czasów życia nadmiarowych elektronów i dziur w materiałach stosowanych do detekcji długofalowej podczerwieni (LWIR) w szerokim zakresie domieszkowania i temperatur. Uzyskano bardzo dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi dostępnymi w literaturze. Wykazano, że aby uzyskać dobre dopasowanie do wyników eksperymentalnych konieczne jest uwzględnienie procesów rekombinacji związanych z domieszkami. Obliczenia przeprowadzono dla materiałów typu p oraz n. Licząc czas życia pokazano udział poszczególnych mechanizmów w funkcji koncentracji domieszek oraz temperatury.

Zrezygnowano z powszechnie stosowanego przybliżenia równości koncentracji nadmiarowych elektronów i dziur, a zastosowano zasadę zachowania ładunku, co uzależniło wzajemnie od siebie zmiany koncentracji wszystkich cząstek posiadających ładunek elektryczny po oświetleniu struktury impulsem świetlnym. Korzystając z powyższego warunku przeprowadzono modyfikację stosowanych dotychczas modeli dyslokacji niedopasowania jako dodatkowego kanału G-R. Wyprowadzono wzory na współczynniki wychwytu nośników przez pasma dyslokacyjne uzyskując bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi. Obliczono gęstość dyslokacji niedopasowania w heterostrukturze HgCdTe osadzonej na podłożu z arsenku galu (GaAs). Największa gęstość dyslokacji występuje na granicy między GaAs, a warstwą buforową – z tellurku kadmu (CdTe). Mając obliczoną gęstość dyslokacji można określić szybkość procesów G-R z udziałem stanów pasma dyslokacyjnego. Aby to skutecznie wykonać konieczne było wyznaczenie funkcji rozkładu elektronów w paśmie dyslokacyjnym. W pracy pokazano, że o wartości funkcji rozkładu decyduje nie tylko energia elektryczna zgromadzona w polu elektrycznym wokół dyslokacji, ale również energia wzajemnego oddziaływania elektrycznego naładowanych linii dyslokacji. Równowagowe funkcje rozkładu wyliczono dla materiału o składzie molowym $x=0,2$ oraz $x=0,3$ w funkcji domieszkowania i w różnych temperaturach. Wyprowadzono również wyrażenia na szybkość rekombinacji powierzchniowej oraz określono przekroje czynne na wychwyt elektronu i dziury przez stany powierzchniowe. Zaproponowano numeryczną metodę obliczania prądów upływności powierzchniowej. Przeprowadzono pomiary charakterystyk prądowo- napięciowych $I(V)$ dla cylindrycznych fotodiod typu „mesa” o różnych średnicach, gdzie powierzchnia boczna nie była pasywowana oraz gdy była pasywowana poprzez anodyzację lub napyłanie CdTe techniką sputtering. Wyniki pomiarów świadczą o tym, że po procesie pasywacji mogą tworzyć się dyslokacje niedopasowania na powierzchni struktury, w wyniku czego parametry elektryczne detektorów ulegają pogorszeniu. Wszystkie teoretyczne rezultaty uzyskane w pracy zostały wykorzystane do modyfikacji oraz rozwoju autorskiego programu komputerowego rozwijanego przez promotora niniejszej rozprawy.

.....
/podpis autora/

Summary

The title of the dissertation: *Generation and recombination mechanisms of optically generated excess carriers in cadmium-mercury telluride heterostructures*

Key words: *infrared detectors, HgCdTe heterostructures, generation and recombination processes, barrier detectors, complementary barrier infrared detectors, carrier lifetime, mismatch dislocations, surface states, surface recombination, passivation*

The main aim of this dissertation was to review and analyse various generation-recombination (G-R) mechanisms to find expressions for the theoretical calculation of the lifetime of optically generated carriers under non-equilibrium operating conditions of cadmium-mercury telluride (HgCdTe) detectors.

This work analyses the parameters of non-equilibrium photovoltaic detectors optimized for the mid-infrared (MWIR) range, demonstrating the possibility of achieving limit normalized detection (BLIP). This is possible due to the suppression of generation and thermal recombination caused by the phenomenon of carriers' exclusion and extraction after the polarization of the structure in the reverse direction. When analysing the contribution of various G-R mechanisms, the phenomenon of exclusion and extraction does not affect the generation rate determined by Shockley-Read-Hall (SRH) processes. Hence the motivation to analyse these processes as part of a PhD dissertation. The second important problem is the correct theoretical determination of the charge lifetime in a situation where the physical parameters of the structure differ significantly from their values in states close to thermal equilibrium. This problem as well has been solved in this dissertation. In the commonly known G-R mechanisms described in the literature, the contribution of mechanisms related to shallow doping states is neglected. The work presents the expressions for the rate of generation and recombination of excess carriers with the participation of donors and acceptors in HgCdTe. Calculations were made of the lifetime of excess electrons and holes in materials used for long-wave infrared (LWIR) detection in a wide range of doping and temperatures. Very good compliance of calculation results was obtained with the experimental results available in the literature. It has been shown that to obtain a good fit with the experimental results, it is necessary to consider the recombination processes related to the dopants. The calculations were performed for p and n type materials. When counting the lifetime, the contribution of different mechanisms in the function of doping concentration and temperature was shown. The commonly used approximation of the equality of the

concentration of excess carriers was abandoned, and the principle of charge conservation was applied, which interdependent changes in the concentration of all particles with an electric charge after illuminating the structure with a light pulse. Using the above condition, the previously used models of mismatch dislocation as an additional G-R channel were modified. The formulas for the carrier uptake coefficients by dislocation bands were derived, obtaining a very good compliance with the experimental data. The mismatch dislocation density in the HgCdTe heterostructure on the gallium arsenide (GaAs) substrate was calculated. The highest dislocation density occurs at the border between GaAs and the buffer layer - cadmium telluride (CdTe). Having the dislocation density calculated, it is possible to determine the speed of G-R processes involving the states of the dislocation band. To prepare this effectively, it was necessary to determine the electron distribution function in the dislocation band. The work shows that the value of the distribution function is determined not only by the electric energy accumulated in the electric field around the dislocation, but also by the electric interaction energy of the charged dislocation lines. Equilibrium distribution functions were calculated for the material with molar composition $x=0.2$ and $x=0.3$ as a function of doping and at different temperatures. The expressions for the rate of surface recombination were also derived, and the cross-sections for electron and hole capture by surface states were determined. A numerical method of calculating surface leakage currents has been proposed. The current-voltage characteristics $I(V)$ were measured for mesa-type cylindrical photodiodes of various diameters, where the side surface was not passivated and was passivated by anodization or CdTe sputtering. The results of the measurements show that after the passivation process, mismatch dislocations may form on the surface of the structure, because of which the electrical parameters of the detectors deteriorate. All the theoretical results obtained in the work were used to modify and develop the computer program created by the dissertation supervisor.

.....
/ author's signature/

1. Wprowadzenie

Tellurek kadmowo-rtęciowy (HgCdTe) będący mieszaniną HgTe i CdTe, jako materiał półprzewodnikowy został odkryty w latach 50-tych ubiegłego wieku [1]. Od tamtego czasu nastąpił rozwój technologii otrzymywania cienkich warstw z HgCdTe przy użyciu technik epitaksjalnych LPE (od ang. liquid-phase epitaxy) – epitaksja z fazy ciekłej, MOCVD (od ang. metalorganic chemical vapour deposition) – epitaksja związków metaloorganicznych w formie pary i MBE (od ang. molecular beam epitaxy) – epitaksja z wiązek molekularnych. Od tego momentu powstał szereg prac dotyczących zarówno technologii otrzymywania HgCdTe, jak i analizy teoretycznej fizycznych zjawisk prowadzących do wykorzystania tego materiału w konstrukcji detektorów promieniowania (np. prace cytowane w przeglądowym artykule prof., Rogalskiego [2]). Unikatowe właściwości tego materiału przydatne do konstrukcji detektorów podczerwieni są następstwem stosunkowo niskiej stałej dielektrycznej oraz możliwości zmiany przerwy energetycznej poprzez dobór składu molowego, od około 1,5eV dla CdTe, aż do przerwy ujemnej w półmetal, jakim jest tellurek rtęci HgTe. Stosunkowo wysoki współczynnik absorpcji umożliwia osiągnięcie znacznych wydajności kwantowych. Ponadto mała różnica w stałej sieci pomiędzy CdTe, a HgTe umożliwia wzrost heterostruktur o stosunkowo małej gęstości dyslokacji niedopasowania. Wykorzystywanie heterostruktur umożliwia poprawę parametrów technicznych detektorów poprzez ograniczenie wpływu prądów generacyjno-rekombinacyjnych (G-R) powstających w obszarze kontaktów i przy powierzchni struktur.

HgCdTe jest powszechnie stosowanym materiałem w fotodetektorach spektrometrów w podczerwieni, z wykorzystaniem transformacji Fouriera. Wynika to z szerokiego zakresu widmowego detektorów HgCdTe, a także wysokiej wydajności kwantowej. Wykorzystywany jest również w wojsku, teledetekcji i badaniach astronomicznych w podczerwieni. Zastosowania wojskowe polegają na wykorzystaniu detektorów z HgCdTe do widzenia w nocy. W szczególności siły powietrzne USA szeroko wykorzystują detektory z HgCdTe w samolotach i wyposażają lotnictwo w inteligentne bomby sterowane przy pomocy detektorów HgCdTe. Wiele pocisków namierzających cele wytwarzające ciepło jest również wyposażonych w takie detektory. Matryce detektorów HgCdTe można również znaleźć w większości głównych teleskopów badawczych oraz w satelitach. Głównym ograniczeniem detektorów z HgCdTe, szczególnie tych pracujących w obszarze dalekiej podczerwieni jest wymóg stałego chłodzenia do temperatur zbliżonych do ciekłego

azotu (77 K). Stosuje się chłodzenie, aby zredukować szum powodowany przez nośniki prądu wzbudzone termicznie (szum generacyjno-rekombinacyjny). Natomiast detektory optymalizowane na zakres średniej podczerwieni mogą pracować w temperaturach otrzymywanych w chłodziarkach termoelektrycznych, osiągając zadowalającą czułość prądową (R_i) i wykrywalność znormalizowaną (D^*). Mimo rozwoju technologii alternatywnych materiałów, głównie opartych na związkach A_{III}-B_V (tj. InAsSb, AlAsSb, AlGaSb, itd.), detektory z HgCdTe zapewniają znacznie większą szybkość wykrywania sygnału i są znacznie bardziej czułe, niż ich konkurenci. Pomijając aspekt związany z ekologią i toksycznością związków rtęci i telluru, głównym problemem technicznym dla tych detektorów pozostaje konieczność stosowania chłodzenia kriogenicznego. Dlatego szukane są rozwiązania alternatywne w postaci nierównowagowych warunków pracy detektorów, wykorzystania heterostruktur i detektorów barierowych. Prace te są szeroko rozwijane w wielu wiodących firmach i instytutach badawczych.

Już w latach 70 ubiegłego wieku, prof. Józef Piotrowski prowadził w Wojskowej Akademii Technicznej prace eksperymentalne dotyczące detektorów podczerwieni z HgCdTe pracujących w wysokich temperaturach. Wytwarzano wtedy fotorezystory, oraz detektory foto-magneto-elektryczne. Cienkie warstwy otrzymywano metodą epitaksji z fazy pary poprzez wygrzewanie warstw CdTe w kwarcowych ampułach w atmosferze rtęci i HgTe. Struktury te cechowały się bardzo dużą szybkością odpowiedzi, ale stosunkowo niskimi czułościami. Jednak na tyle dużymi, aby można je było wykorzystać do detekcji promieniowania np. lasera CO₂ lub analizy zjawisk termicznych przy badaniu fizyki plazmy. Profesor Piotrowski jest obecnie wiodącą postacią w firmie Vigo System S.A., która wytwarza detektory podczerwieni na skalę przemysłową [3]. Wysokie parametry otrzymywanych obecnie w Vigo System S.A. detektorów są pochodną zarówno dużego doświadczenia technologicznego pracującego tam zespołu, jak i wynikiem badań teoretycznych i analiz eksperymentalnych parametrów fizycznych struktur prowadzonych w Wojskowej Akademii Technicznej, współpracującej z firmą Vigo System S.A.

W ostatnich latach można zaobserwować bardzo duży rozwój prac w kierunku uzyskania detektorów niewymagających kriogenicznego chłodzenia [4]–[6]. Duże koncentracje nośników ładunku w wysokich temperaturach są przyczyną wysokiego poziomu szumów G-R ograniczających wykrywalność tego typu detektorów. Celem badań jest uzyskanie struktur o zmniejszonej koncentracji nośników, czego skutkiem powinno być zmniejszenie

generacji termicznej, zdeterminowanej głównie procesami Augera. Jednym ze skutecznych sposobów, zaproponowanych po raz pierwszy przez badaczy brytyjskich w latach 80 ubiegłego wieku, jest wykorzystanie warunków nierównowagowych pracy detektora, gdzie efekt zmniejszenia generacji termicznej uzyskuje się wykorzystując zjawisko ekskluzji i ekstrakcji nośników ładunku po polaryzacji odpowiednio skonstruowanej niejednorodnej struktury detekcyjnej [7]–[9].

Korzystanym rozwiązaniem w tym przypadku jest otoczenie obszaru absorbującego wykrywane promieniowanie (absorbera) silnie domieszkowanymi warstwami o szerszej przerwie energetycznej (warstwy kontaktowe), co znacząco zwiększa efekt ekskluzji i ekstrakcji nośników poprzez zmniejszenie prądów dyfuzyjnych generowanych w tych obszarach. Następuje zmniejszenie szybkości procesów generacji termicznej w materiałach o szerszej przerwie energetycznej. Kolejnym skutecznym rozwiązaniem jest zmiana architektury detektora, zastosowanie dodatkowych barier energetycznych poprzez wprowadzenie wąskich obszarów o maksymalnie dużej szerokości przerwy energetycznej bariery [10]. Mimo zdławienia generacji Augera w tego typu detektorach granicą staje się poziom generacji termicznej zdeterminowanej mechanizmami Schockleya-Reada-Halla (SRH). O ile nierównowagowe warunki pracy detektora prowadzące do zdławienia generacji Augera są w stanie zmniejszyć szumy G-R, to barierą ich skutecznego zmniejszania okazują się mechanizmy SRH, które w nieznacznym stopniu zależą od koncentracji nośników. Co więcej, w przypadku występowania wbudowanych pól elektrycznych mogą nawet wzrastać na skutek takich efektów, jak efekt Frankla-Poole, albo tunelowanie z udziałem poziomów pułapkowych. Teoretyczna ocena wpływu rekombinacji SRH wynikająca z istnienia różnych stanów pułapkowych, takich jak luki metali, dyslokacje, stany powierzchniowe, granice ziaren itp., ma kluczowe znaczenie dla teoretycznej analizy parametrów detekcyjnych konstruowanych przyrządów.

O ile mechanizmy Augera i międzypasmowy mechanizm promienisty są stosunkowo dobrze zbadane teoretycznie i eksperymentalnie, to analiza mechanizmów SRH daje jeszcze szerokie pole do teoretycznych analiz. Aczkolwiek w przypadku procesów Augera kontrowersje wzbudzają arbitralnie przyjmowane wartości całek przekrycia periodycznych części funkcji Blocha i arbitralnie przyjmowany stosunek czasu życia Auger⁷ (A_7) do Auger¹ (A_1) w materiałach samoistnych.

W niniejszej rozprawie skupiono się głównie na teoretycznej analizie szerokiego spektrum mechanizmów G-R i opracowaniu ich modeli, użytecznych dla numerycznej analizy zjawisk transportu w heterostrukturach z HgCdTe. Procesy SRH zajmują w tej analizie szczególnie ważne miejsce. Jest to bardzo ważny problem, z uwagi na fakt, że heterostruktury wytwarzane we wspólnym laboratorium WAT i Vigo System S.A. wykazują dużą liczbę defektów strukturalnych, które mają silny wpływ na termiczne procesy G-R i mogą decydować o czasach życia nośników nierównowagowych.

Wartym podkreślenia jest oryginalny charakter pracy wynikający z podjęcia problemu teoretycznej analizy procesów G-R z udziałem płytkich stanów domieszkowych. Procesy te do tej pory nie zostały uwzględniane w literaturze przy teoretycznym wyliczaniu czasu życia nośników w HgCdTe. Przeprowadzone analizy wykazały jednak, że mają one znaczący wpływ na czas życia nadmiarowych nośników i wyjaśniają przebieg zależności temperaturowych czasów życia nośników mniejszościowych i większościowych.

W pracy zaproponowano metodę obliczania czasów życia namiarowych elektronów i dziur w warunkach nierównowagowych z uwzględnieniem wzajemnej korelacji pomiędzy koncentracjami elektronów, dziur, zjonizowanych domieszek i stanów pułapkowych.

Te dwa ostatnie punkty wnoszą niewątpliwie ważny wkład w rozwój dyscypliny naukowej i umożliwiają lepsze poznanie roli poszczególnych mechanizmów G-R w transporcie foto-prądów w heterostrukturach półprzewodnikowych.

W pracy wyznaczono gęstość dyslokacji niedopasowania w heterostrukturze z HgCdTe osadzonej na podłożu z arsenku galu (GaAs). Udowodniono, że o gęstości dyslokacji w poszczególnych interfejsach decyduje warunek minimum energii sprężystej heterostruktury. Energia elektryczna dyslokacji jest znacznie mniejsza od energii sprężystej i nie wpływa praktycznie na gęstość generowanych dyslokacji. Opracowano model dyslokacji umożliwiający określenie szybkości rekombinacji i generacji termicznej nośników poprzez mechanizm SRH z udziałem pasma dyslokacyjnego. Wyprowadzono równowagowe funkcje rozkładu dla elektronów w paśmie dyslokacyjnym, uwzględniając energię elektryczną zgromadzoną zarówno w polu elektrycznym wokół dyslokacji, jak i energię potencjalną będącą wynikiem wzajemnego oddziaływania naładowanych elektrycznie linii dyslokacji.

1.1 Cele i tezy rozprawy

Zasadniczym celem rozprawy była analiza, na podstawie przeglądu literatury, różnych mechanizmów generacyjno- rekombinacyjnych (G-R), oraz teoretyczne wyznaczenie czasów życia nośników generowanych optycznie w nierównowagowych warunkach pracy detektorów z tellurku kadmowo-rtęciowego (HgCdTe).

Ponadto ważnym celem było opracowanie modelu zjawisk G-R z udziałem płytkich stanów domieszkowych i ocena ich wpływu na czas życia elektronów i dziur w detektorach długofalowych.

Celem było też opracowanie modeli zjawisk G-R określonych mechanizmami SRH związanych z lukami rtęci i dyslokacjami, z uwzględnieniem zasady zachowania ładunku dla generowanych optycznie nośników nadmiarowych.

Głównymi tezami rozprawy są stwierdzenia, że:

1. Rekombinacja z udziałem płytkich stanów domieszkowych ma znaczący wpływ na czas życia nośników mniejszościowych i determinuje czas życia nośników większościowych.
2. Obliczanie czasu życia elektronów i dziur musi uwzględniać wzajemną korelację między koncentracjami nośników ładunku wynikającą z warunku neutralności elektrycznej.
3. Oddziaływanie elektryczne nośników występujących w dyslokacjach niedopasowania wpływa na funkcje rozkładu zgromadzonych tam nośników, ale ma bardzo niewielki wpływ na ilość wygenerowanych dyslokacji w obszarach zmiany składu molowego heterostruktur.

Głównym zadaniem było wykorzystanie opracowanych modeli w programie komputerowym opracowanym przez promotora i stosowanym do modelowania zjawisk fotoelektrycznych w strukturach półprzewodnikowych. Przyczyniło się to do rozszerzenia możliwości obliczeniowych tego programu.

2. Metoda numeryczna i rezultaty obliczeń

Ten rozdział ma na celu pokazać, jak doskonałym narzędziem badawczym jest numeryczne modelowanie, zarówno przyrządów półprzewodnikowych, jak i zjawisk fizycznych towarzyszących zjawiskom transportu ładunku elektrycznego i energii. Zawarta jest w nim wiedza i doświadczenie zdobywane przez ponad trzydzieści lat pracy nad rozwojem programu komputerowego, której efektem są zaawansowane symulacje zjawisk fizycznych w heterostrukturach półprzewodnikowych i w konsekwencji projektowanie optymalnych detektorów podczerwieni. W programach komputerowych opracowanych przez promotora prof. Krzysztofa Jóźwikowskiego, które zostały wykorzystane i rozwinięte w niniejszej pracy doktorskiej do wykonywania obliczeń i analiz numerycznych wykorzystywany jest poniższy układ czterech równań:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla j_n + (G - R)_{NR} - q_0 \frac{\bar{\alpha}}{\gamma} c \frac{np}{n_0 p_0} + q \bar{\alpha} \frac{c}{\gamma} \quad (1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla j_p + (G - R)_{NR} - q_0 \frac{\bar{\alpha}}{\gamma} c \frac{np}{n_0 p_0} + q \bar{\alpha} \frac{c}{\gamma} \quad (2)$$

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} (N_D^+ - N_A^- + p - n) - \frac{1}{\epsilon} \nabla \Psi \nabla \epsilon \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = C_V \frac{\partial T}{\partial t} = & -\nabla(\zeta \nabla T) - \nabla \left(T \rho_{s_p} \mu_p \nabla \Phi_p \right) - \nabla \left(T \rho_{s_n} \mu_n \nabla \Phi_n \right) - \nabla(\Phi_n j_e) + \\ & \nabla(\Phi_p j_p) + \left(q_0 \frac{\bar{\alpha}}{\gamma} c \frac{np}{n_0 p_0} - q \bar{\alpha} \frac{c}{\gamma} \right) \bar{E}_q \end{aligned} \quad (4)$$

Aby rozwiązać problem zjawisk transportu nośników i wtórnej absorpcji fotonów fotoluminescencyjnych, należało dodać dodatkowe równanie (5) do standardowego zestawu równań transportu nośników. Równanie to, zwane równaniem transportu fotonów, zostało szerzej opisane w następujących pracach: [11]–[13]. Cytowane artykuły zawierają szczegółowy opis tych równań. Równanie transportu fotonów luminescencyjnych jest powiązane z równaniami transportu nośników za pośrednictwem międzypasmowego mechanizmu promienistego (dwa ostatnie wyrazy w równaniach (1) i (2)) i równania bilansu energii (ostatni wyraz w równaniu (4)). Równanie bilansu energii jest gruntownie zmodyfikowane i rozszerzone, aby uwzględnić udział fotonów. Równanie transportu obejmujące interakcję nośników z fotonami wygląda następująco:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = q_0 \frac{\bar{\alpha}}{\gamma} c \frac{np}{n_0 p_0} - q \bar{\alpha} \frac{c}{\gamma} - \nabla j_q \quad (5)$$

Gdzie gęstość prądu fotonów wynosi $j_q = qc/4\gamma^3$, natomiast q oznacza koncentrację fotonów, dalej indeks p oznacza odpowiednio koncentrację dziur, indeks n koncentrację elektronów, a indeks 0 równowagę termiczną. Natomiast zmienna n oznacza koncentrację elektronów, a zmienna p koncentrację dziur, c jest prędkością światła, γ współczynnikiem załamania światła, ∇ oznacza gradient. $\bar{E}_q = \frac{1}{q_0} \int_{E_g}^{\infty} \frac{\partial q_0(v)}{\partial v} h v dv$ jest to średnia energia fotonów luminescencyjnych, $\frac{\partial q_0(v)}{\partial v}$ to funkcja rozkładu Plancka. Równowagowa koncentracja fotonów oznaczona jest zmienną $q_0 = \int_{E_g}^{\infty} \frac{\partial q_0(v)}{\partial v} dv$, e jest ładunkiem elementarnym, C_v ciepłem właściwym, a ζ jest współczynnikiem przewodności cieplnej. $(G - R)_{NR}$ jest całkowitą nieradiacyjną generacją termiczną netto, określoną przez procesy generacyjno-rekombinacyjne Augera 1 (A1), Augera 7 (A7) i SRH, ρ_s oznacza gęstość entropii, μ to ruchliwość, a j oznacza gęstość prądu.

Rozwiązując układ równań transportu (1) - (5) za pomocą metod iteracyjnych, uzyskano przestrzenny rozkład energii quasi poziomów Fermiego Φ_n i Φ_p , potencjału elektrycznego Ψ , temperatury T i gęstości fotonów q . Korzystając z tych danych, można obliczyć wszystkie wielkości fizyczne występujące w procesach transportu ładunku i energii.

Dzięki współpracy z promotorem oraz możliwości skorzystania i rozwoju autorskich programów do obliczeń numerycznych, w pracy podjęto tematy związane z procesami G-R poprzez poziomy SRH związane z lukami rtęci, dyslokacjami oraz płytkimi poziomami domieszek. Przeanalizowano efekt ekskluzji i ekstrakcji nośników prądu w heterostrukturach z CdHgTe pracujących w temperaturach 230 K i 300 K przeznaczonych do wykrywania promieniowania w zakresie średniej oraz dalekiej podczerwieni. Dla struktur przyjęto architekturę typu „mesa” o cylindrycznym kształcie. Umożliwia to trójwymiarową analizę parametrów detektora jako elementy objętości, przedstawione w postaci współśrodkowych pierścieni. Jako przykład wykorzystania możliwości obliczeniowych autorskiego programu, przedstawiono w kolejnym podrozdziale numeryczne symulacje przeprowadzone dla parametrów detektora typu P^+vN^+ zbudowanego z HgCdTe, oraz jako porównanie, konstrukcję z dwiema komplementarnymi barierami, tworzącymi strukturę P^+BvBN^+ , której schemat przedstawia Rys. 1.

Dodatkowo w pracy podjęto jeden z wiodących tematów badawczych w zakresie fotonowych detektorów podczerwieni, jakim są detektory pracujące w temperaturach 200-

300 K. Są to warunki pracy dla detektorów bez konieczności chłodzenia kriogenicznego (z ang. Higher Operation Temperature - HOT). Wybrane do symulacji detektory mogą być przeznaczone do detekcji zarówno długofalowego promieniowania podczerwonego (LWIR), jak i średniofalowego promieniowania podczerwonego (MWIR) [4]–[10], [14]–[23]. Główne problemy, które należy rozwiązać na etapie projektowania są związane z bardzo wysoką koncentracją samoistną nośników, która powoduje:

- a) skrócenie długość dyfuzji nośników mniejszościowych,
- b) niską wydajność kwantową,
- c) wysoką generację termiczną i rekombinację, co jest przyczyną wysokiego szumu generacyjno-rekombinacyjnego (G-R).

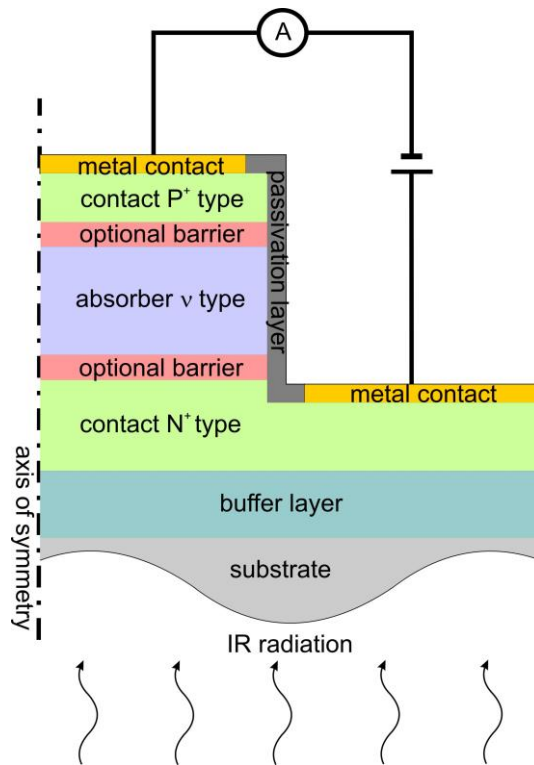
Są to główne powody, przez które wydajność konwencjonalnych złączy p-n, zarówno detektorów fotowoltaicznych LWIR, jak i MWIR, pracujących w temperaturach zbliżonych do pokojowej, jest bardzo niska. Jednak detektory te mogą osiągnąć dość wysoką czułość i wykrywalność, co pozwala na ich stosowanie bez konieczności chłodzenia kriogenicznego, jeśli są odpowiednio zaprojektowane. Problem wysokiej koncentracji samoistnej można rozwiązać wykorzystując zjawisko ekstrakcji i ekskluzji nośników ładunku w obszarze absorbera [7]–[9]. Można to osiągnąć przykładając napięcie do struktury typu P^+vN^+ i polaryzując ją w kierunku zaporowym. Konieczne jest przeprowadzenie zaawansowanych symulacji numerycznych uwzględniających szerokie spektrum zjawisk fizycznych związanych z transportem nośników ładunku i energii oraz pochłanianiem promieniowania. Przykład można znaleźć w pracy [10], gdzie korzystając z autorskich programów komputerowych prof. Józwickowskiego, wykonano takie numeryczne symulacje zjawisk fotoelektrycznych i fluktuacyjnych w strukturach typu „mesa” z HgCdTe, pracujących w LWIR.

2.1 Przykładowe rezultaty symulacji numerycznych dla nierównowagowych fotodiod z HgCdTe typu P^+vN^+ oraz w konstrukcji z komplementarnymi barierami P^+BvBN^+ , pracujące w zakresie MWIR

W tym podrozdziale przeprowadzono symulacje numeryczne dla heterostruktur typu „mesa” P^+vN^+ oraz z dwiema komplementarnymi barierami (struktury typu P^+BvBN^+). Struktury o cylindrycznym przekroju były optymalizowane do detekcji promieniowania

o długości fali 5 μm , czyli w zakresie MWIR oraz przyjęto warunki pracy w temperaturach 230 K i 300 K. Architektura połówkowego przekroju struktury typu P^+BvBN^+ z komplementarnymi barierami usytuowanymi na granicy absorbera przedstawiono na Rys. 1. Warstwa absorbera jest typu v z niską koncentracją domieszek. Następnie za absorberem znajdują się silnie domieszkowane warstwy kontaktowe typu N^+ i P^+ z poszerzoną przerwą energetyczną. Zabieg ten zapewnia szereg korzyści. Po pierwsze, z uwagi na szerszą przerwę energetyczną w tych obszarach, szybkość termicznych procesów G-R jest ograniczona. Po drugie, po zasileniu struktury, uzyskuje się niską rezystancję spowodowaną silnym domieszkowaniem. Powoduje to, że pole elektryczne powstaje głównie w absorberze, wywołując pożądany efekt w postaci zmniejszenia koncentracji nośników, czyli w skrócie - efekt ekskluzji.

Jednak różnice między stałą sieciową absorbera, a otaczającymi warstwami powodują powstanie dyslokacji niedopasowania na powierzchniach granicznych [24]. Dyslokacje są dodatkowym kanałem dla procesów G-R SRH i w wielu przypadkach mają decydujący wpływ na wielkość procesów G-R, jak wykazano w przypadku detektorów LWIR [10]. Korzystnym zjawiskiem jest rozszerzenie przerwy energetycznej na granicy absorbera, co prowadzi do obniżenia szybkości procesów G-R i wprowadza bariery dla przepływu nośników mniejszościowych z kontaktów elektrycznych. W niniejszej pracy dodatkowo uwzględniono wpływ wbudowanego pola elektrycznego na kinetykę procesów SRH (tunelowanie przez centra pułapkowe i efekt Frenkla-Pole) oraz tunelowanie międzypasmowe (BTBT). Procesy SRH są powodowane przez luki rtęci, a także przez stany energetyczne w obszarze dyslokacji. Dodatkowo rozważono wpływ mechanizmów Auger (A_1 , A_7) oraz międzypasmowych mechanizmów radiacyjnych G-R na parametry projektowanych fotodiod. Dodatkowo uwzględniono efekt reabsorpcji fotonów (PR) [12], [13], który znacząco ogranicza proces radiacyjny (R). Podobnie jak w pracy [10], zbadano optymalny skład molowy i domieszkowanie w obszarach barierowych oraz w obszarach N^+ i P^+ , aby osiągnąć maksymalny efekt wyciągnięcia nośników ładunku z obszaru absorbera, przy najniższym możliwym napięciu polaryzacyjnym. Parametry fotodiod bez barier i z komplementarnymi barierami obliczono w celu dobrania optymalnych parametrów struktury. Zastosowanie komplementarnych detektorów barierowych wzmacnia efekt ekskluzji i ekstrakcji nośników z obszaru absorbera. Podobnie jak w artykule [10], zbadano udział poszczególnych mechanizmów G-R w generacji i rekombinacji nośników oraz wpływ dyslokacji na te procesy.

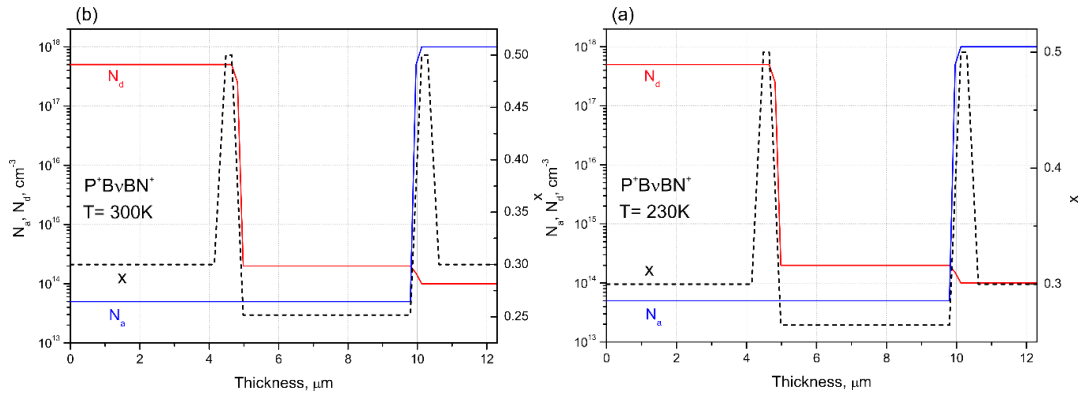


Rys. 1 Architektura półprzekroju cylindrycznej struktury typu „mesa” P^+BvBN^+ MWIR (z dwiema komplementarnymi barierami).

Wszystkie wyniki obliczeń w funkcji grubości warstwy przedstawiono wzdłuż osi symetrii struktury typu „mesa” pokazanej na Rys. 1. Górna powierzchnia „mesy” wynosi $1000 \mu\text{m}^2$. Skład molowy $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}_x$ w absorberze dobrano tak, aby uzyskać długość fali odcięcia λ_{co} równą $5,5 \mu\text{m}$.

Zakładany rozkład przestrzenny ułamka molowego x , koncentracji donorów N_D i koncentracji akceptorów N_A w strukturach P^+BvBN^+ pracujących w 230 K i 300 K przedstawia odpowiednio Rys. 2a i 2b. Koncentracja luk powstałych na skutek migracji atomów metali (N_T) jest zmienną technologiczną silnie zależną od warunków wygrzewania, a jej eksperymentalne wyznaczenie jest możliwe tylko metodami pośrednimi, np. poprzez pomiar czasu życia nośników. Przyjeliśmy dla wszystkich struktur, że koncentracja N_T w obszarze P^+ jest równa 10^{16}cm^{-3} i $5 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ w pozostałych warstwach. Wszystkie rozważane struktury mają identyczny skład molowy (x), koncentrację domieszek i te same grubości obszarów N^+ i P^+ otaczających absorber. Jediną różnicą jest inny skład molowy $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ w obszarze absorbera. W strukturze P^+BvBN^+ na granicach absorbera znajdują się cienkie warstwy z rozszerzoną przerwą energetyczną, które pełnią rolę barier

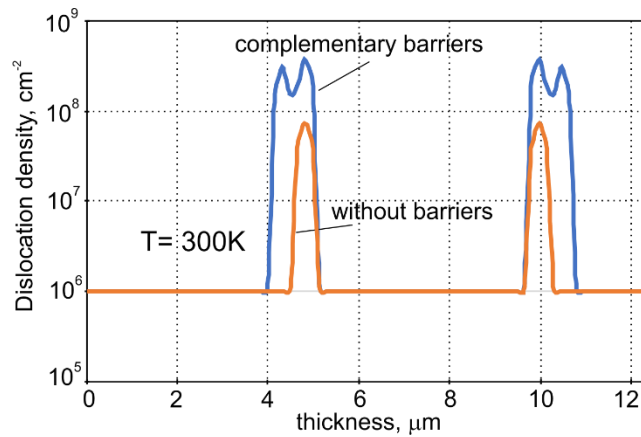
energetycznych dla dziur i elektronów (Rys. 2a i Rys. 2b). Warstwy te muszą być silnie domieszkowane, aby spełniały swoją rolę, to samo dotyczy obszarów N^+ i P^+ otaczających absorber oraz mają widoczne na wykresie charakterystyczne piki ułamka molowego x .



Rys. 2 Przestrzenny rozkład ułamka molowego x , stężenia donorów N_D i akceptorów N_A w detektorze z komplementarnymi barierami (P^+BvBN^+) pracującym w temperaturze 230 K (Rys. 2a) i 300 K (Rys. 2b).

Warstwa absorbera jest typu v z niską koncentracją donorów $N_D = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ i rezystywnością znacznie wyższą niż rezystywność otaczających obszarów, w tym barier w strukturze P^+BvBN^+ . Zastosowanie komplementarnych barier poprawia parametry detektorów. Przeprowadzone symulacje wskazują, że bariery te należy osadzić na granicy absorbera, aby uzyskać poprawę parametrów detekcyjnych.

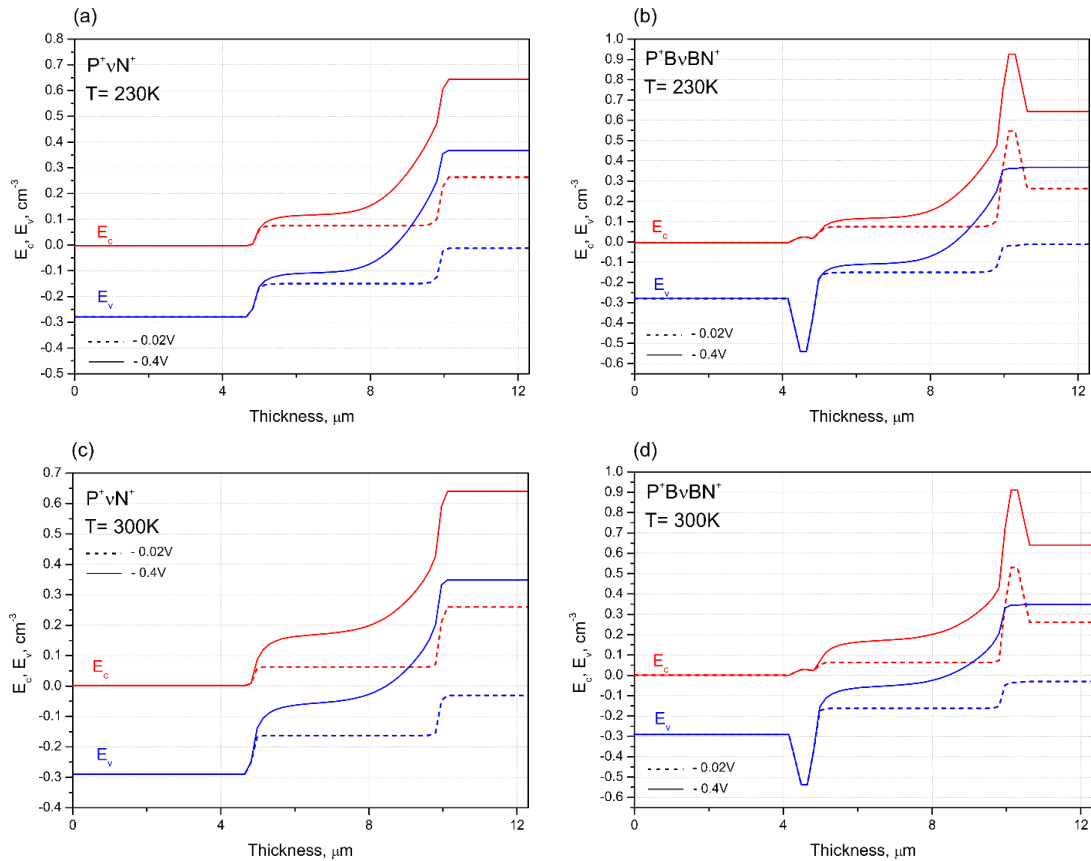
Występowanie gradientu składu molowego x jest bezpośrednią przyczyną powstawania dyslokacji niedopasowania. We wszystkich rozważanych strukturach przyjęto, że dyslokacje niedopasowania występują w obszarach, w których zmiana ulega gradient molowy x . Gęstość dyslokacji w tych obszarach jest obliczana na podstawie zależności zaproponowanej przez Yamamoto i in. [25]. W pracy poddano analizie dwa przypadki. W pierwszym przyjęto, że na obszarach o stałym ułamku molowym x nie występują dyslokacje, natomiast w drugim przypadku przyjęto gęstość dyslokacji w tych obszarach równą 10^6 cm^{-2} . Wyniki przedstawiono dla struktury P^+BvBN^+ z barierami, jak również dla struktury P^+vN^+ bez barier. Większość wyników obliczeń przedstawionych w tej pracy dotyczy struktur z rozkładem gęstości dyslokacji takim jak został przedstawiony na Rys. 3.



Rys. 3 Przestrzenny rozkład gęstości dyslokacji w niechłodzonych detektorach P^+BvBN^+ oraz P^+vN^+ .

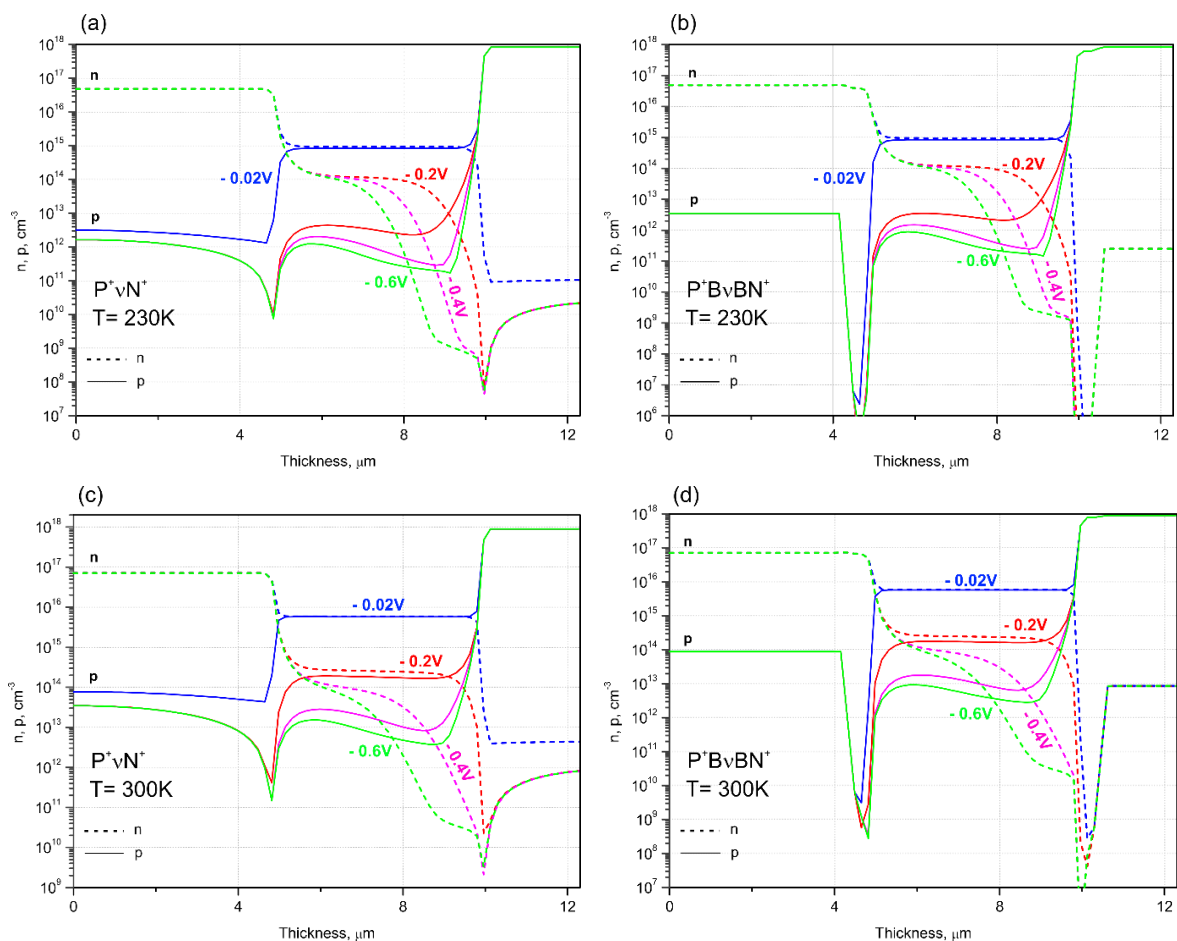
Na Rys. 4 przedstawiono rozkład przestrzenny krawędzi pasm energii w czterech analizowanych fotodiodach po polaryzacji napięciem wstecznym o wartości $-0,4$ V (linie ciągłe) oraz bliskim zeru, niskim napięciu $-0,02$ V (linia przerywana). Struktury P^+BvBN^+ można uznać za wolne od przesunięcia pasmowego, tak zwanego offsetu. W obu strukturach P^+vN^+ i P^+BvBN^+ przyłożone napięcie odkłada się w obszarze absorbera. Wraz ze wzrostem napięcia polaryzacji wzrost natężenia pola elektrycznego występuje prawie wyłącznie w absorberze. Jest to bardzo korzystne zjawisko, które powoduje ekskluzję i ekstrakcję nośników ładunku elektrycznego z obszaru absorbera.

Polaryzacja struktur w kierunku zaporowym prowadzi do silnego spadku koncentracji elektronów i dziur, jak pokazano na Rys. 5. Poprzez zwiększenie polaryzacji detektora przy wyższym napięciu, koncentracja elektronów w obu strukturach P^+vN^+ i P^+BvBN^+ znacznie maleje. Dla polaryzacji $-0,4$ V przy 230 K koncentracja elektronów w obszarze absorbera graniczącym z warstwą kontaktową N^+ zmniejsza się o rząd wielkości i o dwa rzędy wielkości przy 300 K w stosunku do koncentracji przy polaryzacji $-0,02$ V. W części graniczącej z obszarem P^+ ekstrakcja zmniejsza koncentrację elektronów o rzędy wielkości. Koncentracja dziur zmniejsza się w obu temperaturach o prawie trzy rzędy wielkości.



Rys. 4 Przestrzenny rozkład struktury pasmowej z polaryzacją w kierunku zaporowym $-0,02\text{ V}$ i $-0,4\text{ V}$ przy temperaturze pracy 230 K (rys. 4a i 4b) i przy 300 K (rys. 4c i 4d) w strukturach $\text{P}^+ \text{vN}^+$ (rys. 4a, i Rys. 4c) $\text{P}^+ \text{BvBN}^+$ (Rys. 4b i Rys. 4d).

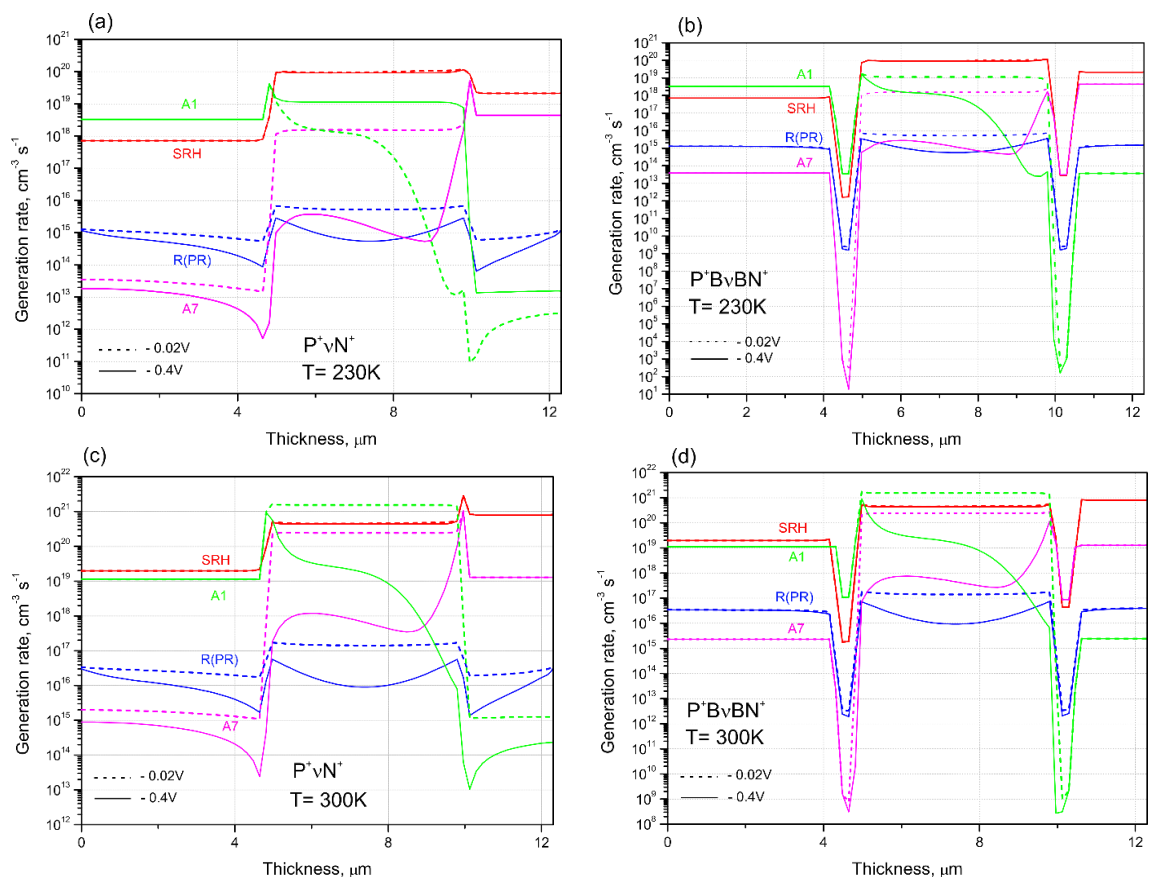
Występowanie barier w strukturze $\text{P}^+ \text{BvBN}^+$ nie wpływa na skuteczność zjawiska ekskluzji i ekstrakcji w absorberze, co łatwo zauważyć porównując koncentrację nośników w strukturze $\text{P}^+ \text{vN}^+$. Z Rys. 5 wynika, że w obu strukturach, $\text{P}^+ \text{vN}^+$ i $\text{P}^+ \text{BvBN}^+$, największa koncentracja elektronów w absorberze występuje w obszarze granicznym z warstwą N^+ . Ekskluzja nośników z tego obszaru jest dużo mniej efektywna niż ekstrakcja na granicy z obszarem P^+ . Dlatego koncentracja nośników na granicy z obszarem P^+ jest znacznie mniejsza niż na granicy z obszarem N^+ . Koncentracja elektronów i dziur ma bardzo silny wpływ na szybkość generacji i rekombinacji termicznej. Jest to wynikiem zachodzących mechanizmów międzypasmowych A1 i A7 oraz międzypasmowej rekombinacji promienistej z uwzględnieniem zjawiska wtórnej absorpcji fotonów R (PR).



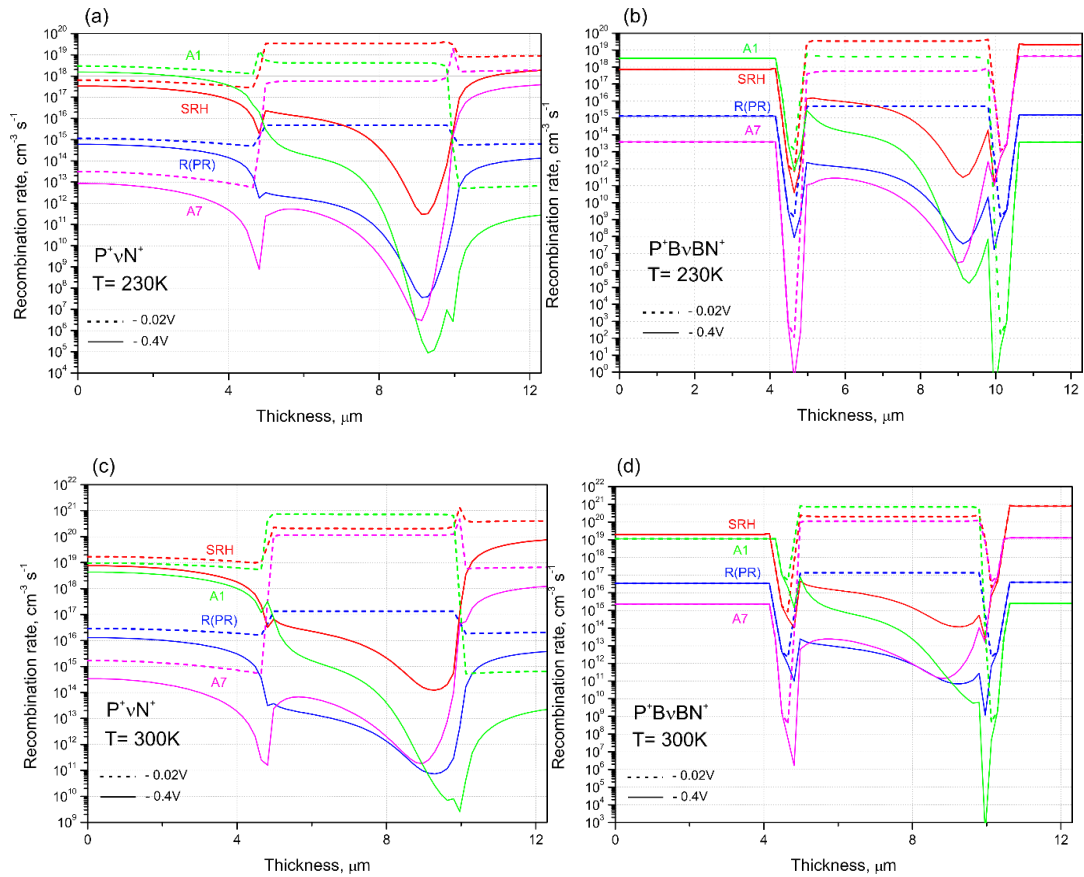
Rys. 5 Przestrzenny rozkład koncentracji elektronów n i dziur p w analizowanych strukturach po polaryzacji z zaznaczonymi na krzywych wartościami napięcia wstecznego.

Szybkość rekombinacji silniej zależy od koncentracji nośników ładunku niż szybkość generacji. Na Rys. 6 przedstawiono przestrzenny rozkład szybkości generacji termicznej wywołanej różnymi mechanizmami G-R w temperaturze 230 K i 300 K dla detektorów P^+vN^+ (odpowiednio Rys. 6a i Rys. 6c) oraz w P^+BvBN^+ (Rys. 6b i Rys. 6d). Rys. 7 przedstawia mechanizmy rekombinacji w tych strukturach. Zmniejszenie koncentracji elektronów i dziur, co widać na Rys. 5, zmniejsza szybkość generacji dla wszystkich mechanizmów z wyjątkiem mechanizmu SRH. Generacja SRH odbywa się za pośrednictwem centrów pułpkowych związanych z lukami metali (głównie lukami rtęci) i dyslokacjami. Przy założonej gęstości dyslokacji 10^6 cm^{-2} w absorberze i gęstości luk metali 10^{14} cm^{-3} , generacja termiczna wyznaczona przez mechanizm SRH dominuje przy 230 K. Na jej szybkość prawie nie mają wpływu zjawiska ekсклюzji i ekstrakcji elektronów i dziur obserwowane na Rys. 5. Zmniejszenie koncentracji nośników w obszarze absorbera

powoduje jednak zmniejszenie szybkości rekombinacji termicznej spowodowanej przez wszystkie rozważane mechanizmy, w tym także mechanizm SRH. W tym przypadku spodziewane jest zmniejszenie się szumu G-R o połowę. Kluczem do poprawy działania detektorów pracujących w 230 K jest ograniczenie procesów SRH poprzez eliminację dyslokacji i luk metali w obszarze absorbera. Szczegółowy opis zależności szybkości generacji i rekombinacji od koncentracji nośników można znaleźć w pracach [12], [20], [21]. Spektakularne zmniejszenie generacji A1 i A7 obserwuje się w analizowanych strukturach przy temperaturze pracy 300 K. W detektorach zasilanych niskim napięciem polaryzacji ($-0,02V$) dominuje mechanizm A1. Przy polaryzacji $-0,4V$ generacja i rekombinacja są zdominowane przez mechanizmy SRH. Polaryzując struktury, możemy kilkakrotnie ograniczyć szybkość generacji, a rekombinację o wiele rzędów wielkości. Zdławienie rekombinacji (Rys. 7) jest znacznie silniejsze niż zdławienie generacji termicznej pokazanej na Rys. 6.



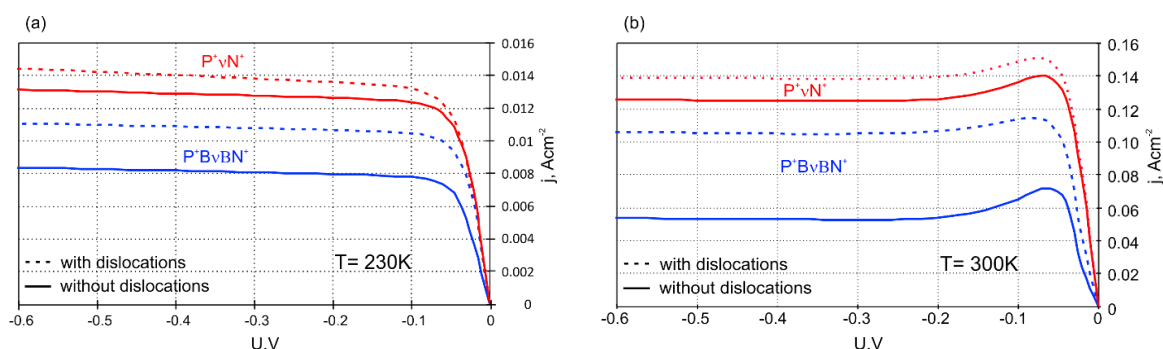
Rys. 6 Rozkład szybkości generacji wywołany mechanizmami A1, A7, SRH (wywołany lukami rtęci i dyslokacjami), generacja promienista R uwzględniająca zjawisko reabsorpcji fotonów przy 230 K w strukturze P^+vN^+ (rys. 6a) i P^+BvBN^+ (rys. 6b), przy 300 K w P^+vN^+ (rys. 6c) i P^+BvBN^+ (rys. 6d).



Rys. 7 Rozkład szybkości rekombinacji wywołanej mechanizmami A1, A7, SRH (z udziałem luk rtęci i dyslokacji), rekombinacja promienista R uwzględniająca zjawisko reabsorpcji fotonów przy 230 K w strukturze P^+vN^+ (rys. 7a) i P^+BvBN^+ (rys. 7b), przy 300 K w P^+vN^+ (rys. 7c) i P^+BvBN^+ (rys. 7d).

Na Rys. 8 przedstawiono charakterystyki prądowo-napięciowe w funkcji napięcia polaryzacji dla znormalizowanej do 1cm^2 powierzchni mesy, przy polaryzacji w kierunku zaporowym dla detektorów P^+vN^+ i P^+BvBN^+ pracujących w temperaturze 230 K (Rys. 8a) i w 300 K (Rys. 8b). Gęstości prądów przy 300 K są o rząd wielkości większe niż przy 230 K. W detektorach P^+vN^+ występują wyższe wartości prądów niż w detektorach P^+BvBN^+ . Detektor oznaczony jako bez dyslokacji na Rys. 8 oznacza, że nie ma dyslokacji w obszarach, w których nie ma gradientu składu molowego x (pierwszy przypadek). Gdyby nie było dyslokacji w tych obszarach, gęstość prądu byłaby mniejsza o około 15%. Zastosowanie dwóch barier powoduje prawie dwukrotne zmniejszenie gęstości prądu. Przy założonych gęstościach dyslokacji w tych obszarach (10^6cm^{-2}) gęstość prądu w detektorach z barierami komplementarnymi wzrasta o około 30% w 230 K i prawie 50% w 300 K. Przy 230 K, we wszystkich czterech rozważanych wariantach, gęstość prądu gwałtownie rośnie

wraz ze wzrostem napięcia polaryzacji. W przypadku napięć większych niż 0,1 V w kierunku zaporowym wzrost prądu jest znacznie mniejszy. Przy temperaturze 230 K rezystancja dynamiczna rośnie wraz ze wzrostem napięcia polaryzacji.

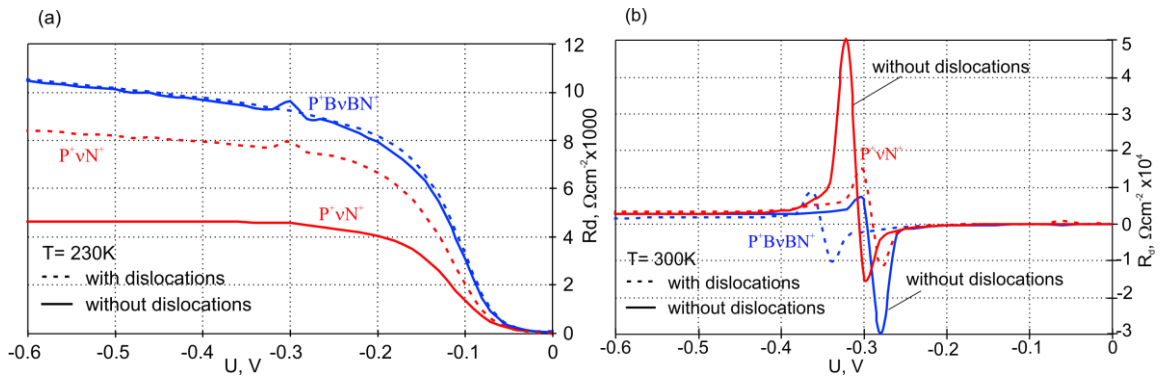


Rys. 8 Wykresy charakterystyk prądowo-napięciowych znormalizowane do pola powierzchni mesy równego 1cm^2 , w funkcji napięcia wstecznej polaryzacji dla 4 struktur pracujących przy 230 K (Rys. 8a) i 300 K Rys. 8b).

Wpływ dyslokacji w obszarze absorbera na wartości rezystancji dynamicznej (R_d) w detektorze P^+BvBN^+ jest niewielki. Natomiast w przypadku P^+vN^+ można zaobserwować jej dwukrotny spadek, gdy gęstość dyslokacji w obszarze absorbera wynosi 10^6 cm^{-2} . We wszystkich analizowanych, niechłodzonych detektorach prądy początkowo szybko rosną i szybko osiągają maksymalne wartości dla napięć nieco poniżej 0,1 V.

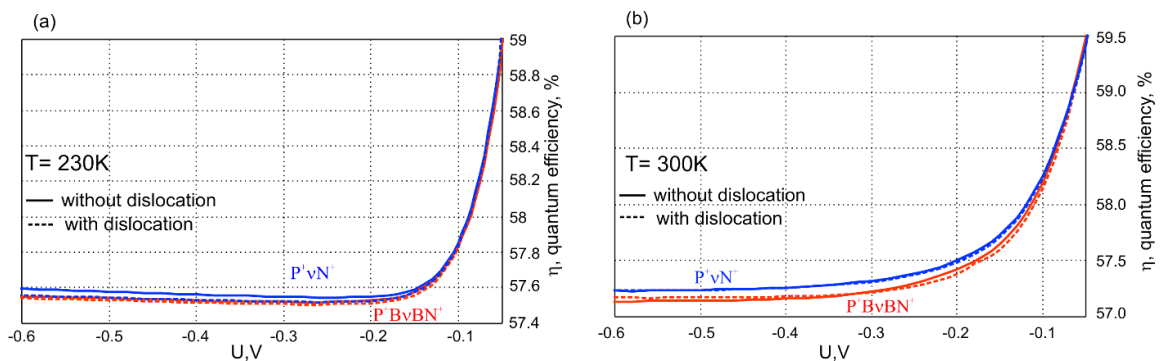
Na Rys. 9 przedstawiono R_d w funkcji napięcia polaryzacji w kierunku zaporowym. Wzrost rezystancji spowodowany spadkiem koncentracji nośników przyczynia się do zmniejszenia gęstości prądu, mimo wzrostu napięcia. R_d w tym przypadku przyjmuje wartości ujemne. Przy 300 K, R_d przyjmuje niższe wartości, niż przy 230 K. Natomiast przy 300 K w zakresie napięć od $-0,2\text{ V}$ do $-0,4\text{ V}$ występują ekstremalne wartości R_d (zarówno ujemne, jak i dodatnie). Można zaobserwować obszar względnej stabilności R_d dla napięć większych niż 0,4 V w kierunku zaporowym.

Na Rys. 10 przedstawiono zależność wydajności kwantowej promieniowania o długości fali $\lambda = 5,5\ \mu\text{m}$ od napięcia polaryzacji. We wszystkich rozpatrywanych detektorach przy 230 K i 300 K wydajność kwantowa ma podobny trend. Najpierw maleje wraz z napięciem, a następnie dla napięć powyżej 0,2 V przy polaryzacji w kierunku zaporowym, wydajność kwantowa jest bardzo słabo zależna od napięcia zasilania i osiąga wartość około 57%.



Rys. 9 Znormalizowana do powierzchni kontaktu rezystancja dynamiczna w funkcji odwrotnego napięcia polaryzacji dla detektorów P^+vN^+ i P^+BvBN^+ pracujących przy 230 K (rys. 9a) i 300 K (rys. 9b).

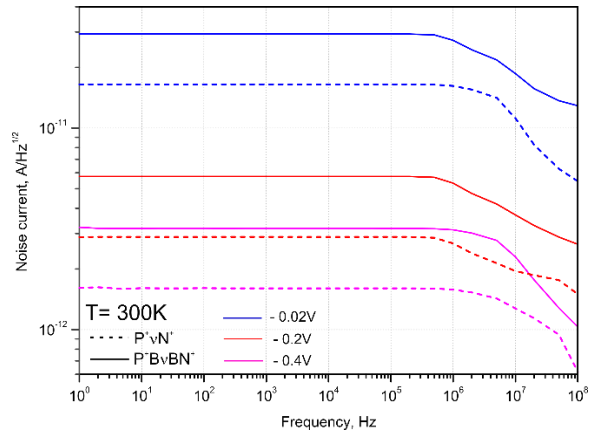
Obliczenie współczynnika pochłaniania opiera się na pracy Andersson'a [26], podobne podejście stosowano już we wcześniejszych pracach z wykorzystaniem tego modelu obliczeń [27]. W pracy rozważono również absorpcję Urbacha przy użyciu modelu Finkmana i Nemirovsky [28]. Obliczając wydajność kwantową wzięto pod uwagę całkowite odbicie promieniowania z górnego kontaktu. Obecność dyslokacji praktycznie nie wpływa na wydajność kwantową zarówno przy 220 K, jak i 300 K.



Rys. 10 Wydajność kwantowa dla promieniowania o długości fali $5,5 \mu\text{m}$ w detektorach P^+vN^+ i P^+BvBN^+ w 230 K (rys. 10a) i 300 K (rys. 10b).

Na Rys. 11 przedstawiono zależność prądu szumowego (przeliczonego na jednostkowy przedział częstotliwości $\Delta f = 1 \text{ Hz}$) w funkcji częstotliwości dla detektorów P^+vN^+ oraz P^+BvBN^+ w 300 K. Zaobserwowano ponad 20-krotną redukcję prądu szumów po polaryzacji detektorów napięciem 0.4 V. Jest to spektakularny wynik uzyskany dla nierównowagowego trybu pracy detektorów. Podobne rezultaty redukcji szumów można uzyskać jedynie

zabiegiem znacznego obniżenia temperatury pracy. W strukturze P^+vN^+ prąd szumów jest nieco mniejszy niż w strukturze P^+BvBN^+ , więc wykrywalność jest nieco mniejsza niż w detektorze P^+vN^+ . W prezentowanym modelu nie uwzględniono powierzchniowych prądów upływności, które z założenia powinny być znacznie ograniczone przez komplementarne bariery heterostruktur.



Rys. 11 Obliczony prąd szumów przy $\Delta f = 1$ Hz jako funkcja częstotliwości dla detektora P^+BvBN^+ w 300 K dla wybranego napięcia polaryzacji.

Rys. 11 przedstawia obliczone prądy szumowe przy $\Delta f = 1$ Hz w detektorach pracujących w 300 K jako funkcje częstotliwości. W tej temperaturze dominuje szum G-R. Wzrost napięcia polaryzacji w kierunku zaporowym zmniejsza szybkość generacji i rekombinacji oraz gęstość widmową tego szumu, która jest proporcjonalna do sumy szybkości generacji i rekombinacji nośników. Prądy szumowe są wyprowadzane przez numeryczne rozwiązanie układu równań transportu dla fluktuacji. Te równania i odpowiednie procedury zostały opisane w pracach [29], [30]. Tłumienie szybkości generacji i rekombinacji pozwala na znaczny wzrost znormalizowanej wykrywalności D^* . Uwzględniając szum G-R i szum Johnsona (obliczenia wykazały, że wpływ szumu $1/f$ jest pomijalnie mały), wyznaczono znormalizowaną wykrywalność dla detektorów P^+BvBN^+ . Przy 230 K wynosi ona $1.44 \times 10^{12} \text{ cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$, a przy $4.11 \times 10^{11} \text{ cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$ (dla długości fali $\lambda = 5 \text{ }\mu\text{m}$). Zatem w obu temperaturach wartości wykrywalności są większe niż wynikają z granicy wykrywalności określonej przez szum z fluktuacji tła 300 K, zwanej fotodetekcją w podczerwieni z ograniczeniem szumu fotonowego tła (BLIP) i wynoszą około 2×10^{11} jones [17]. Pozwala to na techniczne wykorzystanie tych detektorów bez konieczności chłodzenia kriogenicznego.

Podsumowując, w podrozdziale wykazano, że heterostrukтуры w konfiguracjach P^+vN^+ i P^+BvBN^+ wykorzystywane do konstrukcji nierównowagowych fotodiod MWIR uzyskują wartości D^* umożliwiające ich techniczne zastosowanie bez konieczności chłodzenia kriogenicznego. Wydajność kwantowa wszystkich rozważanych detektorów przekracza 57%. Wyniki obliczeń wskazują, że optymalny zakres napięć polaryzujących to około 0,4 V w kierunku zaporowym. Ekskluzja i ekstrakcja nośników wywołanych tymi napięciami skutecznie tłumi generację i rekombinację termiczną, powodując redukcję prądów szumowych G-R o około rząd wielkości przy temperaturze pracy 300 K. Obliczenia pokazują, że szybkość generacji i rekombinacji termicznej w temperaturach bliskich 200 K silnie zależy od gęstości dyslokacji. Gdyby je wyeliminowano, wielkość prądu ciemnego można zmniejszyć dwukrotnie. Znacznie mniejszy wpływ dyslokacji występuje przy 300 K. Obliczona wartość D^* dla detektorów z komplementarnymi barierami przy 300 K przekracza wartość $4 \times 10^{11} \text{ cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$. Powyższe rozważania potwierdzają tezę, że wykorzystując bariery w heterostrukturze P^+BvBN^+ można skutecznie zredukować prądy ciemne. Wyniki zamieszczone w tym punkcie rozprawy były prezentowane na sesji plakatowej konferencji NUSOD 2019 w Ottawie [14].

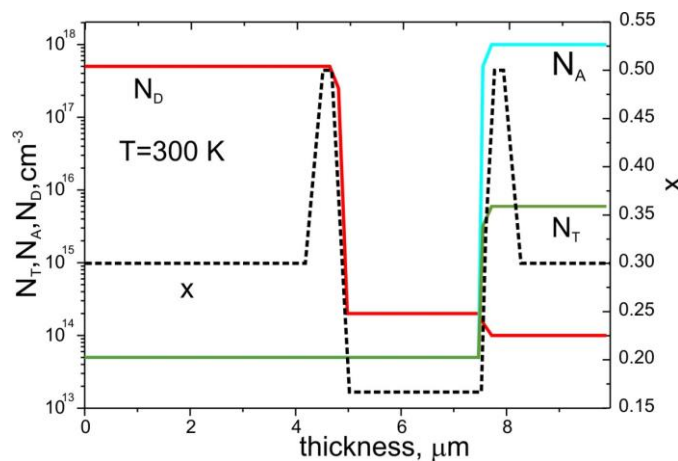
2.2 Przykładowe rezultaty symulacji numerycznych dla nierównowagowych fotodiod z HgCdTe typu P^+vN^+ oraz w konstrukcji z komplementarnymi barierami P^+BvBN^+ , pracujące w zakresie LWIR

W tym podrozdziale do symulacji numerycznych zostały wybrane długofalowe detektory typu mesa P^+vN^+ z komplementarnymi barierami tworząc struktury typu P^+BvBN^+ , optymalizowane na wysokotemperaturowe warunki pracy (HOT) w 300 K. Schemat przekroju takiej cylindrycznej struktury przedstawia również Rys. 1. Jest ona identyczna jak dla fotodiody analizowanej w poprzednim podrozdziale na średnią długość fali. Różnicą jest tylko inny skład molowym w obszarze absorbera. Co więcej, wszystkie późniejsze obliczenia czasu życia w rozprawie przeprowadzono bazując na strukturze z Rys. 1. Struktura cylindryczna mesy ma powierzchnię $100 \mu\text{m}^2$. Warto podkreślić, że informacja o rozmiarach mesy jest bardzo istotna, ponieważ wtórna absorpcja fotonów luminescencyjnych powstających w wyniku rekombinacji promienistej jest funkcją geometrii struktury. Przy tak małym rozmiarze mesy zjawisko wtórnej absorpcji odgrywa

nieznaczną rolę, ale w przypadku zmiany parametrów, należy uwzględnić zawsze uwzględnić je, licząc czas życia zdeterminowany rekombinacją promienistą.

Wyniki obliczeń z wykorzystaniem autorskiego programu opracowanego przez promotora zostały przeprowadzone dla struktury, dla której rozkład przestrzenny składu molowego x , koncentracji donorów N_D , koncentracji akceptorów N_A oraz koncentracji centrów pułapkowych, generowanych najczęściej lukami rtęci - N_T , w funkcji grubości warstwy jest pokazany na Rys. 12.

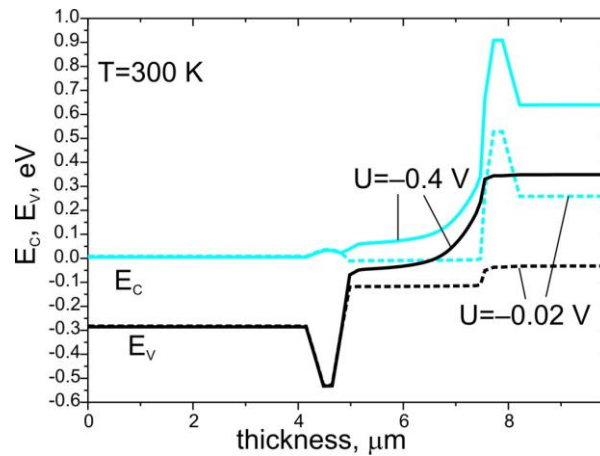
Przeprowadzono symulacje numeryczne, aby pokazać polepszenie się parametrów detektorów po zaimplementowaniu komplementarnych barier i wykorzystaniu nierównowagowych warunków pracy. Na granicach absorbera znajdują się cienkie warstwy z szeroką przerwą energetyczną, które pełnią funkcję barier energetycznych dla nośników większościowych. Warstwy te, podobnie jak dla detektorów MWIR, muszą być silnie domieszkowane, aby spełniały swoją rolę, tak samo jak obszary kontaktowe: N^+ i P^+ . Absorber jest typu v z koncentracją donorów $N_D = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ i ma rezystywność znacznie wyższą niż rezystywność otaczających go warstw barierowych. Zastosowanie komplementarnych barier poprawia parametry detektorów, które przedstawiają poniższe wykresy.



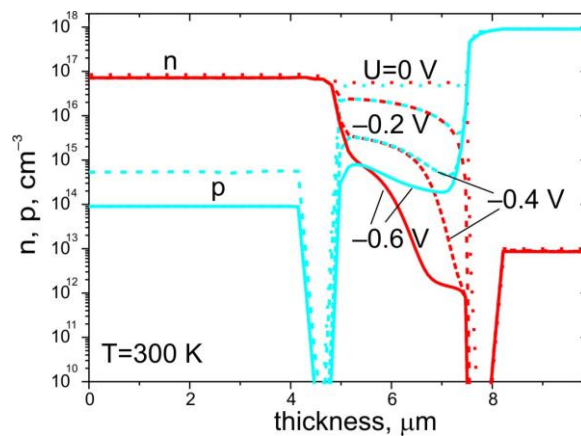
Rys. 12 Przestrzenny rozkład składu molowego x , koncentracji donorów N_D , koncentracji akceptorów N_A oraz koncentracji centrów pułapkowych wywołanych lukami rtęci - N_T , w funkcji grubości warstwy dla detektora pracującego w temperaturze 300K.

Na Rys. 13 przedstawiono wzdłuż osi symetrii, przestrzenny rozkład krawędzi pasma przewodnictwa E_C i pasma walencyjnego E_V w analizowanej fotodiodzie, po polaryzacji

napięciem w kierunku zaporowym o wartości 0,4 V (linie ciągłe) i niskim napięciem 0,02 V (linie przerywane). Można zauważyć, że w analizowanej strukturze przyłożone napięcie odkłada się w obszarze absorbera. Dodatkowo po polaryzacji napięciem 0,4 V pojawia się efekt tunelowania międzypasmowego ze względu na przekrywanie się pasma E_c i E_v .



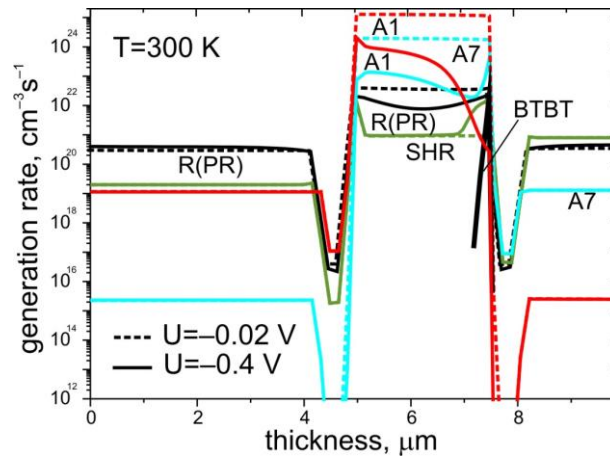
Rys. 13 Przestrzenny rozkład krawędzi energii struktury pasmowej dla wybranych napięć polaryzacji (0.4 i 0.02V).



Rys. 14 Przestrzenny rozkład koncentracji elektronów (czerwone linie) i dziur (linie niebieskie) dla struktury P^+vN^+ z dwoma komplementarymi barierami, w równowadze termicznej i po polaryzacji napięciem $-0,2 V$, $-0,4 V$ i $-0,6 V$.

Rys. 14 pokazuje, że na skutek ekskluzji i ekstrakcji nośników ładunku wywołanych wbudowanym polem elektrycznym w obszarze absorbera (po polaryzacji struktury) zarówno koncentracje elektronów jak i dziur zmniejsza się o rzędy wielkości. Po polaryzacji największe koncentracje nośników ładunku występują w obszarze przy granicy z warstwą N^+ , a najmniejsze na granicy z obszarem P^+ . Ekskluzja nośników na granicy z obszarem N^+

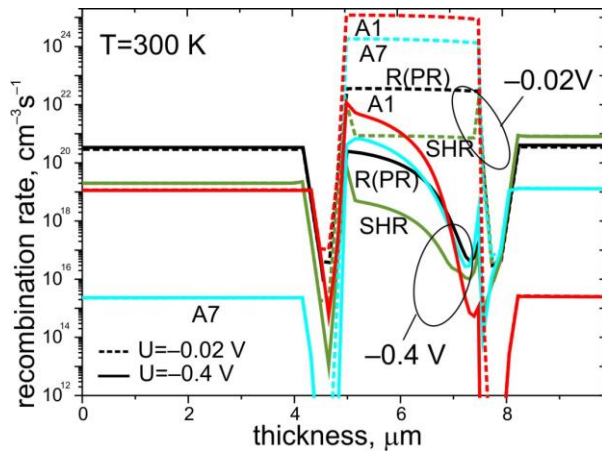
jest mniej efektywna niż ekstrakcja na granicy z obszarem P^+ . Jest to analogiczna sytuacja jak w przypadku struktury MWIR. Szybkość rekombinacji i generacji termicznej jest silnie zależna od koncentracji nośników ładunku. Na Rys. 15 przedstawiono przestrzenny rozkład szybkości generacji termicznej wywołanej różnymi mechanizmami G-R w temperaturze 300 K.



Rys. 15 Rozkład szybkości generacji nośników z podziałem na różne typy mechanizmów G-R dla detektora pracującego w temperaturze 300 K.

Rys. 16 przedstawia szybkość rekombinacji termicznej. Przyłożone napięcie polaryzacji w kierunku zaporowym powoduje ekskluzję i ekstrakcję nośników ładunku i jest przyczyną tłumienia generacji termicznej nośników ładunku wywołanej przez mechanizmy A1, A7 i R (linie ciągłe). W przypadku generacji SRH wyższa polaryzacja detektora nieznacznie zwiększa jej szybkość. Znaczące zmniejszenie szybkości generacji A1 i A7 w wyniku ekstrakcji nośników można zaobserwować w obszarze absorbera, na granicy z warstwą P^+ . W pobliżu granicy z warstwą N^+ , w analizowanej strukturze mamy do czynienia ze zmniejszeniem szybkości generacji mechanizmu A1 o rząd wielkości po polaryzacji napięciem $-0,4$ V. Podobne wyniki można zaobserwować dla szybkości rekombinacji. Polaryzacja w kierunku zaporowym znacznie silniej zdławia rekombinację niż generację.

Analizując rysunki przedstawiające wpływ efektu ekskluzji i ekstrakcji na szybkość generacji i rekombinacji poszczególnych mechanizmów G-R można zauważyć, że polaryzacja napięciem zaporowym 0.4 V wprowadza stan silnej nierównowagi. Odstępstwa od wartości równowagowych zarówno koncentracji nośników, jak i szybkości generacji i rekombinacji są znaczące.



Rys. 16 Rozkład szybkości rekombinacji z podziałem na różne typy mechanizmów G-R dla detektora pracującego w temperaturze 300 K.

Mimo, że rozwiązanie równań (1)-(6) umożliwia wyznaczenie zarówno charakterystyk prądowo-napięciowych, czułości prądowej i wydajności kwantowej [27], co opisano w punkcie 2. rozprawy, to otwartą sprawą pozostaje problem obliczenia czasów życia elektronów i dziur w oparciu o definicje, które dotyczą przypadków bliskich stanowi równowagi [31]. Jak pokazano na Rys. 15 generacja wywołana mechanizmem SRH prawie nie ulega zmianie po polaryzacji struktury i to ona właśnie decyduje w praktyce o parametrach detekcyjnych struktury. Stąd zainteresowanie w zbadaniu mechanizmów SRH stanowiącymi przeszkodę w skutecznym wykorzystaniu nierównowagowych warunków pracy detektorów jako alternatywy dla kriogenicznego chłodzenia.

Te dwa problemy stały się główną motywacją do podjęcia próby ich rozwiązania w ramach przygotowanej rozprawy.

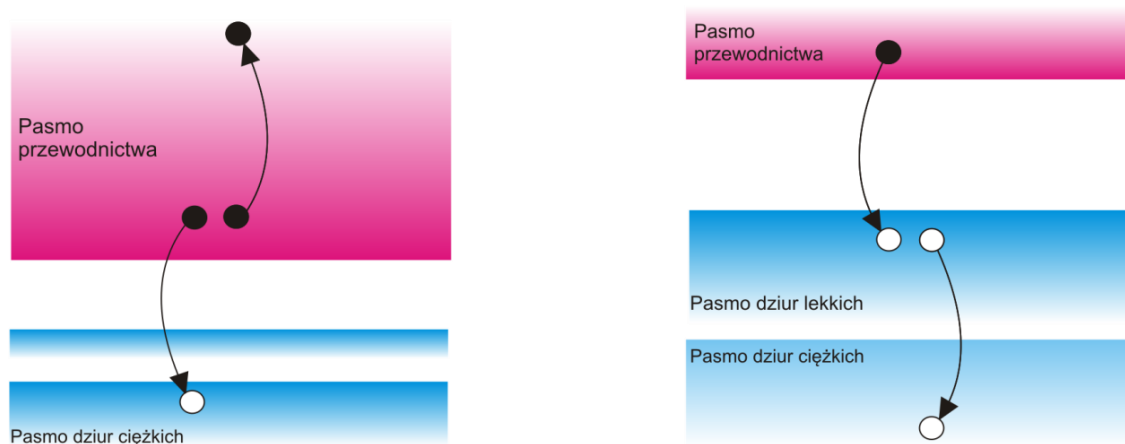
W związku z powyższym, następny rozdział poświęcimy został zdefiniowaniu i analizie różnych mechanizmów G-R i znalezienia nowej definicji dla czasów życia elektronów i dziur, która byłaby odpowiednia dla sytuacji nierównowagowej przedstawionej w tym punkcie rozprawy.

3. Mechanizmy G-R w HgCdTe

3.1 Podział mechanizmów G-R

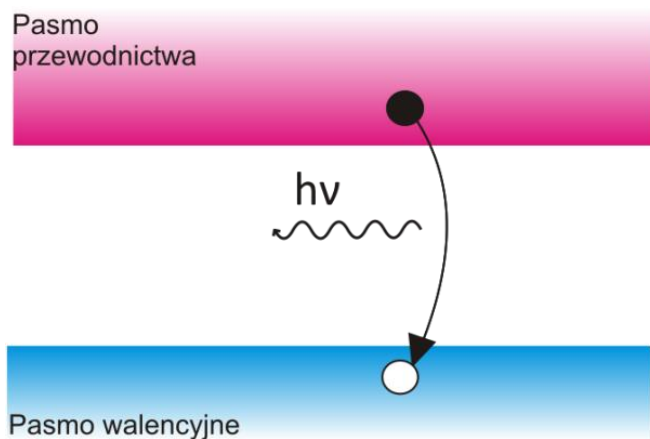
W HgCdTe występuje szerokie spektrum mechanizmów generacyjno-rekombinacyjnych. Związane z nimi nośniki ładunku oraz inne cząstki kwantowe, takie jak fotony czy fonony muszą spełniać zasadę zachowania energii, pędu i momentu pędu. Ogranicza to w istotny sposób ilość możliwych przejść energetycznych nośników, z uwagi na wielkość energii progowej, od której prawdopodobieństwo zajścia tych procesów maleje wykładniczo. Dla procesów międzypasmowych jest ona zazwyczaj równa w przybliżeniu szerokości przerwy energetycznej. Dla dwustopniowych procesów SRH wyróżniamy: energię progową na wychwyt elektronu i energię progową na wychwyt dziury. Ponadto występują różnice we współczynnikach wychwyty dla elektronów i dziur wynikające z różnic mas efektywnych elektronów i dziur ciężkich. To powoduje, że czas życia elektronów i dziur w tym procesie może się różnić.

Proces zderzeniowy Augera zachodzi, gdy zderzające się dwa elektrony zmieniają swoje stany energetyczne. Jeden zwiększa swoją energię, a drugi ją traci i jest wychwycony przez zerwane wiązanie sieci krystalicznej. W procesie tym para elektron -dziura (e-h) ulega anihilacji. Jest to proces Auger 1 (A1) przedstawiony na Rys. 17a. Podobny proces zachodzi w przypadku zderzenia dwóch dziur w paśmie walencyjnym. Jedna z nich uzyskuje energię, która pochodzi z aktu anihilacji pary e-h. Proces ten otrzymał nazwę Auger 7 (A7) i przedstawia go Rys. 17b. Warty podkreślenia jest fakt, że w procesach Augera uczestniczą trzy nośniki ładunku. Dlatego procesy te silnie zależą od koncentracji nośników. Proces odwrotny do rekombinacji Augera nazywany jest generacją zderzeniową.



Rys. 17 Mechanizmy międzypasmowej rekombinacji Auger 1 (a) i Auger 7 (b).

Oprócz mechanizmów zderzeniowych Augera, do mechanizmów podstawowych zalicza się międzypasmowy mechanizm promienisty (Rys. 18), który jest odpowiedzialny za rekombinację pary e-h z emisją fotonu, lub generację pary e-h na skutek absorpcji fotonu. Uprzywilejowane są przejścia proste, ponieważ pęd fotonu jest zanedbywalnie mały w porównaniu z quasi pędami nośników ładunku.

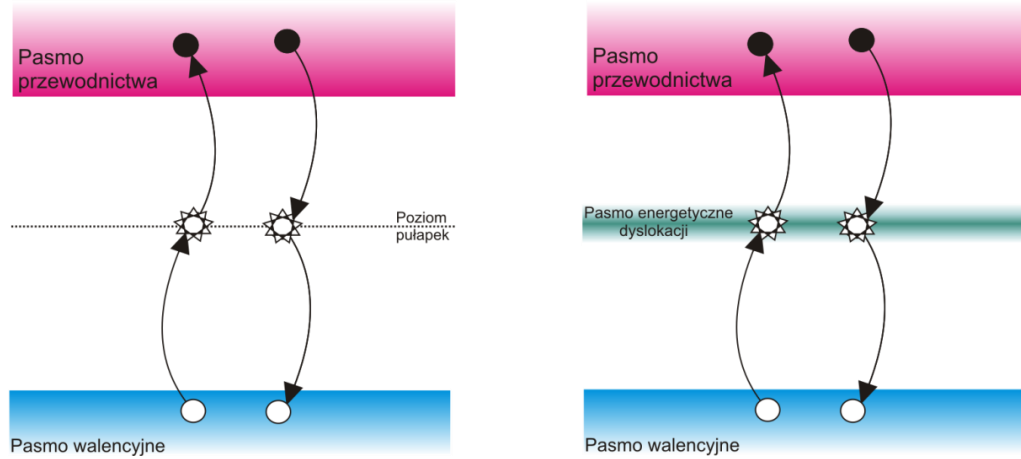


Rys. 18 Mechanizm rekombinacji promienistej.

W pewnych sytuacjach, gdy występuje znacząca absorpcja wtórna fotonów fotoluminescencyjnych, szybkość wtórnej generacji promienistej zwiększa się, przez co efektywny czas życia w procesie promienistym również ulega zwiększeniu. Duży wpływ ma na to geometria przyrządów, ich wymiary oraz rodzaj i właściwości materiałów pokrywających ich powierzchnię.

Kolejnymi mechanizmami są dwustopniowe procesy SRH (Rys. 19). Związane są ze stanami pułpkowymi towarzyszącymi zerwanym wiązaniom, które są wynikiem defektów strukturalnych (luk metali, dyslokacji, granic ziaren i atomów powierzchniowych). W tym procesie najpierw elektron lub dziura jest wychwycona przez stan pułpkowy. Następnie zachodzi wychwycenie nośnika o ładunku przeciwnego znaku. Proces ten w konsekwencji prowadzi do anihilacji pary e-h. Możliwy jest też proces odwrotny prowadzący do generacji pary e-h. W HgCdTe luki rtęci wprowadzają stany pułpkowe leżące w około $\frac{1}{4}$ szerokości przerwy energetycznej poniżej krawędzi pasma przewodnictwa [32]. Najbardziej wiarygodne wyniki, w przypadku dyslokacji, uzyskano, gdy średnia energia pasma dyslokacyjnego była powyżej krawędzi pasma walencyjnego w około $0,32 E_g$ [33].

W obliczeniach dla pasma związanego ze stanami powierzchniowymi przyjęto w pracy, że jest ono zlokalizowane w środku przerwy energetycznej.



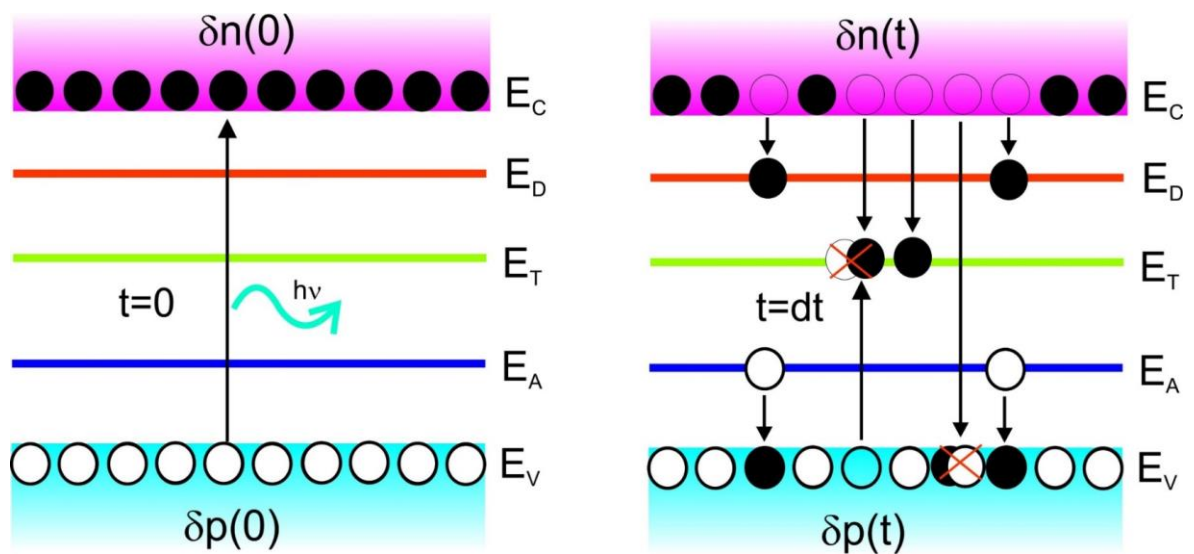
Rys. 19 Schemat mechanizmów Shockley'a-Reada-Halla zachodzących poprzez stany pułapkowe związane z lukami metali, czyli centra punktowe (a) oraz związane z dyslokacjami lub stanami powierzchniowymi – tworzy się wąskie pasmo energetyczne (b).

Procesy SRH wymagają znajomości 4 parametrów: koncentracji pułapek, ich energii oraz przekrojów czynnych na wychwyty elektronu i dziury. Zmieniając je można łatwo dopasować się do wyników eksperymentalnych. Niestety jest to powszechne zjawiskiem stosowane przez badaczy. Gdy np. pomiary czasu, życia są poniżej wyników obliczeń uwzględniających procesy Augera i międzypasmową rekombinację promienistą, dopasowanie uzyskuje się zakładając, że istnieją procesy SRH i dobiera się odpowiednio te cztery parametry. Gęstość centrów pułapkowych trudno jest zweryfikować doświadczalnie. Energię można zmierzyć np. metodami fotoluminescencji lub spektroskopią poziomów energetycznych (DLTS). Natomiast przekroje czynne dają otwartą przestrzeń do rozważań. Tak więc obserwuje się w literaturze ogromny rozrzut tych wartości, co wydaje się rzeczą mało precyzyjną dającą szerokie pole do spekulacji.

Nawiązując do wcześniejszego akapitu, czas życia elektronów i dziur w procesach SRH nie jest taki sam i należy go również odróżnić od czasu życia pary e-h.

Autorzy opisujący czas życia w HgCdTe nie uwzględniają i pomijają procesy G-R, które mogą zachodzić z udziałem płytkich stanów energetycznych związanych z domieszkami donorowymi i akceptorowymi. Zakłada się powszechnie, że donory

i akceptory są całkowicie zjonizowane co wpływa na stałość ich parametrów. W dotychczasowych rozważaniach literaturowych został pominięty fakt, który zobrazują poniższe Rys. 20a i Rys. 20b. Pokazano na nich, że są możliwe akty wychwytu nadmiarowych elektronów i dziur przez zjonizowane domieszki, tym bardziej z uwagi na fakt, że energia progowa równa energii jonizacji domieszek jest bardzo mała, a więc prawdopodobieństwo tych procesów jest bardzo duże.

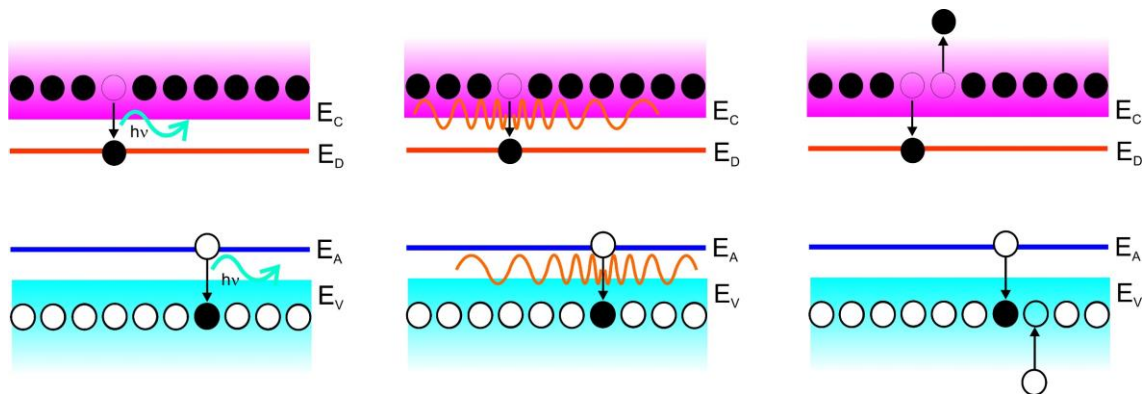


Rys. 20a. Na skutek absorpcji promieniowania wygenerowane zostały dodatkowe elektrony i dziury przez co doszło do zmiany koncentracji odpowiednio o Δn i Δp . Rys. 20b. Rekombinacja elektronów zachodzi poprzez następujące kanały: wychwyt przez zjonizowany donor, wychwyt przez centrum pułapkowe i przejście do pasma walencyjnego. Rekombinacja dziur zachodzi przez wychwycenie dziury przez zjonizowany akceptor i centrum pułapkowe, oraz w procesach międzypasmowych prowadzących się finalnie do wychwycenia elektronu przez zerwane wiązanie.

Procesy te mogą być mało znaczące w sytuacji, gdy w struktura ma wysoką koncentrację samoistną. Wtedy, co jest istotne w wyższych temperaturach, procesy międzypasmowe mogą zdecydowanie dominować. Natomiast w niższych temperaturach, zjonizowane domieszki mogą stanowić podstawowe źródło dla rekombinacji nośników nierównowagowych. Dzieje się to również w warunkach występowania silnej ekсклюzji i ekstrakcji nośników. Dlatego bardzo ważnym zagadnieniem podjętym w rozprawie było znalezienie przekrojów czynnych dla rekombinacji nośników poprzez poziomy płytkich domieszek oraz ustalenie jaki poziom domieszek ma wpływ na czas życia nośników nierównowagowych.

Z Rys. 20 wynika, że gdy sygnał optyczny zostanie wyłączony następuje zmniejszenie koncentracji nadmiarowych elektronów i dziur na skutek działania różnych mechanizmów rekombinacyjnych. Szybkość rekombinacji jest różna dla elektronów i dziur, dlatego $\Delta n(t) \neq \Delta p(t)$. Przyczyniają się do tego mechanizmy z udziałem zjonizowanych domieszek i centrów pułpkowych (E_T), dla których przekroje czynne i energie progowe na wychwyty elektronu i dziury różnią się. Jednak zachowany jest warunek neutralności elektrycznej dla nadmiarowych elektronów, dziur, zjonizowanych domieszek i centrów pułpkowych.

Wracając do rekombinacji z udziałem atomów domieszkowych. Wg. J. S. Blankemore [34] i Sclar'a wraz z Burstein'em [35] proces ten zachodzi poprzez trzy kanały: rekombinację promienistą, rekombinację z udziałem fononów i mechanizm Augera. Pokazuje to schematycznie Rys. 21.



Rys.21a

Rys. 21b.

Rys. 21c.

Rys. 21 Trzy dominujące kanały rekombinacji z udziałem zjonizowanych atomów domieszek.

Rys.21a rekombinacja promienista. Rys.21b. rekombinacja z udziałem fononów.

Rys. 21c rekombinacja Augera.

W rozważaniach podjętych w pracy doktorskiej uwzględniono rekombinację promienistą (Rys. 21a), polegającą na wychwyceniu elektronu z pasma przewodnictwa przez zjonizowany donor. Energia wydziela się w postaci fotonu. Podobny proces z udziałem fotonu ma miejsce, gdy zjonizowany akceptor traci elektron, który anihiluje z dziurą z pasma walencyjnego. Zupełnie podobne zjawisko może zachodzić w sytuacji, gdy wydzielająca się energia przekazana jest sieci krystalicznej w postaci wygenerowanego jednego lub kilku fononów (Rys. 21b). Kolejnym mechanizmem jest mechanizm Augera (Rys. 21c). Energia wydzielająca się w procesie rekombinacji jest przekazana elektronowi w paśmie przewodnictwa lub dziurze w paśmie walencyjnym.

W tym podrozdziale został przedstawiony i omówiony przegląd najważniejszych mechanizmów G-R w HgCdTe. W kolejnych podrozdziałach zostaną one dokładniej omówione oraz zaprezentowane wyprowadzenia wyrażań na czas życia elektronów i dziur z uwzględnieniem warunku neutralności elektrycznej, wiążącym wzajemnie powiązanie pomiędzy zmianami ilości wszystkich cząstek naładowanych elektrycznie w elemencie objętości półprzewodnika.

3.2 Czas życia elektronów i dziur

Równanie ciągłości elektronów i dziur (równania bilansu będące konsekwencją zasady zachowania ładunku) jako wynik generacji, rekombinacji i przepływu prądu można wyrazić przez poniższe równania.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{e} \nabla \cdot J_n \quad (6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \frac{1}{e} \nabla \cdot J_p \quad (7)$$

Ilustracją do tych równań mogą być przestrzenne rozkłady, wzdłuż osi symetrii, szybkości generacji i rekombinacji zdeterminowanej przez różne mechanizmy G-R (Rys. 6, Rys. 7, Rys. 15, Rys. 16). Widać, że szybkości generacji i rekombinacji w strukturze spolaryzowanej znacznie różnią się od ich wartości w równowadze termicznej. Ponadto występują również duże różnice pomiędzy szybkością generacji i szybkością rekombinacji zdeterminowanej przez dany proces G-R. Jak widać w tym przypadku klasyczne definicje czasu życia elektronów i dziur określone dla stanu bliskiego równowagi termicznej jako:

$$R_n - G_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (8)$$

$$R_p - G_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}, \quad (9)$$

gdzie $\Delta n = n - n_0$; $\Delta p = p - p_0$, nie mogą być stosowane.

W tej części pracy należy postawić pytanie, jaki rodzaj czasu życia jest szukany i jaki będzie miał wkład w późniejsze obliczenia parametrów detektorów. Aby odpowiedzieć na to pytanie należy przykładową strukturę z Rys. 1 będącą w stanie ustalonym i nierównowagowym oświetlić niewielkim sygnałem optycznym.

Gdy struktura zostanie oświetlona niewielkim sygnałem optycznym wpłynie to na nieznaczne zwiększenie szybkość generacji promienistej, w związku z czym równania (6) i (7) można wyrazić następująco:

$$\frac{\partial(n+\delta n)}{\partial t} = G_n - R_n - \delta R_n + G_n^{opt} + \frac{1}{e} \nabla \cdot (J_n + \delta J_n) \quad (6a)$$

$$\frac{\partial(p+\delta p)}{\partial t} = G_p - R_p - \delta R_p + G_p^{opt} - \frac{1}{e} \nabla \cdot (J_p + \delta J_p) \quad (7a)$$

W przypadku wyłączenia generacji optycznej i pominięcia niewielkich zmian prądów δJ_n i δJ_p . Z równań (6), (7), (6a) i (7a) otrzymano:

$$\frac{\partial(\delta n)}{\partial t} = -\delta R_n \quad (10)$$

$$\frac{\partial(\delta p)}{\partial t} = -\delta R_p \quad (11)$$

Zakładając, że centrami SRH są luki rtęci, a następnie analizując Rys. 21b, można stwierdzić, że zmiany koncentracji cząstek elektrycznych spowodowane oświetleniem, pozostają w relacji:

$$\delta n - \delta N_D^+ + \delta f_T N_T = \delta p - \delta N_A^- \quad \delta n + \delta N_A^- + \delta f_T N_T = \delta p + \delta N_D^+ \quad (12)$$

Równanie (12) jest konsekwencją zasady zachowania ładunku. N_T określa tu koncentrację luk rtęci natomiast f_T określa prawdopodobieństwo obsadzenia poziomego pułapkowego luki rtęciowej przez elektron. Równanie (12) pokazuje, że zmiany wszystkich wielkości w nim występujących są ze sobą wzajemnie powiązane i fakt ten należy uwzględnić w dalszych rozważaniach. I tak wracając do równania (10), można je przekształcić do postaci:

$$\frac{\partial(\delta n)}{\partial t} = -\frac{\partial R_n}{\partial n} \delta n \rightarrow \frac{d(\delta n)}{\delta n} = -\frac{\partial R_n}{\partial n} dt \rightarrow \delta n(t) = \delta n(0) \exp\left(-\frac{\partial R_n}{\partial n} t\right) = \delta n(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (13)$$

Gdzie stała τ , czasowego zaniku nadmiarowej, wygenerowanej optycznie, koncentracji elektronów, stanowi właściwą definicję ich czasu życia. Dodatkowo biorąc pod uwagę relację (12) należy δR_n zdefiniować jako:

$$\delta R_n = \frac{\partial R_n}{\partial n} \delta n + \frac{\partial R_n}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial n} \delta n + \frac{\partial R_n}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial n} \delta n + \frac{\partial R_n}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial n} \delta n + \frac{\partial R_n}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial n} \delta n - \frac{\partial G_{RAD}}{\partial n} \delta n \quad (14)$$

Stąd wynika, że czas życia elektronów można zdefiniować jako:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{\partial R_n}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial n} - \frac{\partial G_{RAD}}{\partial n} \quad (15)$$

Podobne rozumowanie przeprowadzone dla dziur pozwoli otrzymać zależność:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{\partial R_p}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial p} - \frac{\partial G_{RAD}}{\partial p} \quad (16)$$

Zależności (15) i (16) uwzględniają wpływ zjawiska wtórnej absorpcji fotonów luminescencyjnych uwzględniony w G_{RAD} .

Problem, który powstał teraz do rozwiązania to znalezienie wyrażeń na pochodne $\frac{\partial p}{\partial n}$, $\frac{\partial f_T}{\partial n}$, $\frac{\partial N_D^+}{\partial n}$, $\frac{\partial N_A^-}{\partial n}$, $\frac{\partial n}{\partial p}$, $\frac{\partial f_T}{\partial p}$, $\frac{\partial N_D^+}{\partial p}$ i $\frac{\partial N_A^-}{\partial p}$. Aby to zrobić należy dokładnie przeanalizować wszystkie mechanizmy G-R, które mają wpływ na koncentrację nośników w strukturze półprzewodnikowej.

3.3 Rekombinacja przez centra SRH związane z lukami rtęci

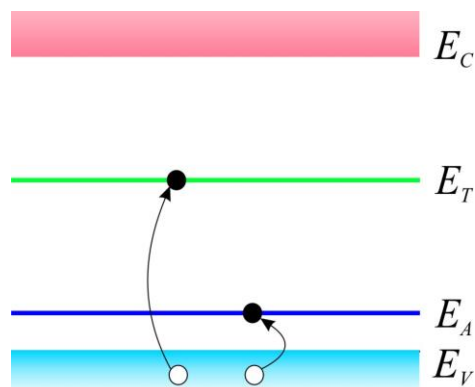
Do procesów SRH w HgCdTe zaliczają się mechanizmy G-R związane z lukami metali, dyslokacjami i stanami powierzchniowymi. Mechanizmy opisane Shockley'a i Read'a [36] są bardzo istotne z punktu widzenia możliwości wykorzystania procesów nierównowagowych jako alternatywnej, do kriogenicznego chłodzenia, metody zmniejszenia generacji i rekombinacji termicznej. Efekty te, jak pokazano w Rozdziale 2 (Rys. 6 i Rys. 7) nie dławią generacji termicznej, zdeterminowanej procesami SRH. Dlatego to one, a nie procesy międzypasmowe determinują parametry użytkowe detektorów podczerwieni pracujących w warunkach nierównowagowych. Stąd motywacja, aby w pracy poświęcić tym mechanizmom znaczącą uwagę i dokonać ich dokładnej analizy. Na początek zostanie określona kinetyka procesów SRH w HgCdTe dla centrów pułapkowych związanych z lukami rtęci. W kolejnym Rozdziale 5 wprowadzony zostanie, opracowany w pracy, model dyslokacji niedopasowania, jako dodatkowego kanału generacyjno-rekombinacyjnego. Model ten uwzględnia energię oddziaływania elektrycznego ładunków zgromadzonych w obszarze dyslokacji. Ma to znaczenie dla prawidłowego określenia, korzystając z warunku minimum energii swobodnej, funkcji rozkładu elektronów w paśmie

dyslokacyjnym, co ma wpływ na zachodzące tam procesy G-R. Pozwala to uwzględnić energię elektryczną zgromadzoną w paśmie dyslokacyjnym w całkowitym bilansie energii struktury, powiększonej o energię sprężystą. Wyznaczając minimum tej całkowitej energii, będzie można określić naprężenia występujące w heterostrukturze i wyznaczyć gęstość dyslokacji niedopasowania, relaksującą w znacznym stopniu powstałe naprężenia.

3.4 Kinetyka procesów G-R związanych z lukami rtęci

Rozpatrując lukę rtęciową można przedstawić ją analogicznie do znajdującego się w węźle sieci atomu o ładunku jądra $-2e$, a niewysyczone wiązania traktować jako dwie dziury o ładunku $+e$ każda. Te niewysyczone wiązania tworzą dwa poziomy energetyczne.

Pierwszy poziom energetyczny leżący blisko krawędzi pasma walencyjnego stanowi poziom akceptorowy o małej energii jonizacji E_A . Natomiast drugi, leżący głębiej w przerwie energetycznej to poziom pułpkowy o energii jonizacji E_T (Rys. 22). Jak wynika z literatury poświęconej procesom SRH w HgCdTe, E_T znajduje się powyżej środka przerwy zabronionej (zazwyczaj przyjmuje się położenie $0,25E_g$ poniżej dna pasma przewodnictwa E_C) [32].



Rys. 22 Luka rtęciowa zawiera dwa niewysyczone wiązania. Może potencjalnie przyłączyć dwa elektrony. Pierwszy poziom leżący w pobliżu krawędzi E_V jest poziomem akceptorowym E_A , który jest zajęty przez pierwszy elektron i poziom pułpkowy E_T zajęty przez drugi elektron. Poziom pułpkowy powstaje wtedy, gdy poziom akceptorowy jest już zajęty przez elektron.

Kolejnym punktem pracy jest określenie wielkiego potencjału termodynamicznego, który pozwala wyznaczyć równowagowe funkcje rozkładu, czyli prawdopodobieństwo obsadzenia stanu akceptorowego lub pułapkowego przez elektron. Jest to standardowa metoda wyznaczania równowagowych funkcji rozkładu.

Wielki potencjał termodynamiczny Ω_A w jednostce objętości dla luk rtęciowych z wychwyconym elektronem na poziomie E_A , powinien w warunkach równowagi przyjmować minimalną wartość i można go wyrazić równaniem:

$$\Omega_A = (E_C - E_g + E_A)N_T f_A - k_B T \ln W_A - F N_T f_A = \min, \quad (17)$$

gdzie N_T jest koncentracją luk rtęciowych, f_A funkcją rozkładu dla poziomu akceptorowego, natomiast W_A jest ilością sposobów realizacji stanu, w którym $N_T f_A$ poziomów akceptorowych jest zjonizowanych. W_A wyrażone jest zależnością:

$$W_A = \beta^{N_T f_A} \frac{N_T!}{(N_T f_A)! [N_T (1 - f_A)]!}, \quad (18)$$

gdzie β oznacza ilość sposobów dla konfiguracji elektronów walencyjnych w obszarze luki rtęciowej. Ponieważ w orbitalach wiążących p_x i p_y , w związku z brakiem atomu rtęci, brakuje dwóch elektronów do pełnego wysycenia wiązań. Orbitale p_x i p_y tworzą cztery możliwe stany do obsadzenia i dwa elektrony mogą obsadzić te stany na sześć sposobów. Stąd przyjęto $\beta = 6$.

Stosując wzór Stirlinga do wyrażenia (12) oraz warunek Eulera-Lagrange'a: $\frac{\partial \Omega_A}{\partial f_A} = 0$ dla minimum funkcjonału (17), uzyskano wyrażenie na równowagową funkcję rozkładu f_A^0 , określającą prawdopodobieństwo znalezienia elektronu na poziomie akceptorowym E_A luki rtęciowej:

$$f_A^0 = \frac{1}{1 + \frac{1}{\beta} \exp\left(\frac{E_C - E_g + E_A - F}{k_B T}\right)} \quad (19)$$

Dla luk rtęciowych z wychwyconym elektronem na poziomie pułapkowym E_T wielki potencjał termodynamiczny Ω_T w jednostce objętości powinien, w warunkach równowagi, również przyjmować minimalną wartość.

$$\Omega_T = (E_C - E_g + E_T - F)N_T f_T - k_B T \ln W_T = \min. \quad (20)$$

Co pozwala podobnie jak dla Ω_A otrzymać wyrażenie:

$$f_T^0 = \frac{1}{1 + \frac{1}{\alpha} \exp\left(\frac{E_C - E_g + E_T - F}{k_B T}\right)} \quad (21)$$

Jest to równowagowa funkcja rozkładu określająca prawdopodobieństwo znalezienia elektronu na poziomie pałpkowym E_T luki rtęciowej. Ponieważ pierwszy elektron obsadził już stan akceptorowy, to w orbitalach wiążących p_x i p_y , cztery stany mogą być obsadzone przez trzy elektrony na cztery sposoby. Dlatego założono, że $\alpha = 4$.

Dalej została wykorzystana zaproponowana przez Shockley'a [36] metoda, aby wyprowadzić wyrażenia na wypadkową szybkość pałpkowania elektronów i dziur. Szybkość, z jaką elektrony z pasma przewodnictwa są chwytane przez pałpki, wynosi:

$$R_c^n = c_n n (1 - f_T) N_T, \quad (22)$$

gdzie c_n jest szybkością pałpkowania pojedynczego elektronu. Przyjmując, że szybkość emisji elektronów z pałpek R_e^n jest proporcjonalna do f_T , można ją wyrazić zależnością:

$$R_e^n = e_n f_T N_T. \quad (23)$$

Z warunku, że $R_c^n = R_e^n$ w równowadze termicznej wyznaczono współczynnik emisji elektronów:

$$e_n = c_n n_0 \frac{1 - f_T^0}{f_T^0}. \quad (24)$$

Co po wykorzystaniu równania (21) pozwala uzyskać:

$$e_n = c_n \frac{1}{\alpha} n_1, \quad (25)$$

$$\text{gdzie: } n_1 = n_0 \exp\left(\frac{-X - e\psi - E_g + E_T - \Phi}{k_B T}\right)$$

Szybkość pałpkowania elektronów wynosi więc:

$$R_n = c_n N_T \left[n (1 - f_T) - \frac{1}{\alpha} n_1 f_T \right] \quad (26)$$

Szybkość wychwytu dziur przez pałpki wyrażono zależnością:

$$R_c^p = c_p p f_T N_T, \quad (27)$$

gdzie c_p jest średnią szybkością wychwyty pojedynczej dziury. Z kolei szybkość emisji R_e^p dziur z poziomów pułapek można przedstawić w postaci:

$$R_e^p = e_p(1 - f_T)N_T. \quad (28)$$

W równowadze $R_c^p = R_e^p$, stąd współczynnik emisji dziur wynosi:

$$e_p = c_p p_0 \frac{f_T^0}{1 - f_T^0}. \quad (29)$$

Dlatego:

$$e_p = c_p \alpha p_1, \quad (30)$$

$$\text{gdzie } p_1 = p_0 \exp\left(\frac{\Phi + X + e\Psi + E_g - E_T}{k_B T}\right).$$

Dziury są więc chwytane przez pułapki z szybkością:

$$R_p = c_p N_T [p f_T - p_1 \alpha (1 - f_T)]. \quad (31)$$

Stan ustalony implikuje sytuację, w której wychwyty (pułapkowanie) elektronów i dziur zachodzi ze stałą szybkością R_T , równą szybkości rekombinacji netto par e-h. Zatem $R_n = R_p = R_T$. Stąd otrzymamy wyrażenie na f_T dla stanu ustalonego.

$$\left[c_n n - c_n n f_T - c_n \frac{1}{\alpha} n_1 f_T \right] = c_p p f_T - c_p p_1 \alpha + c_p p_1 \alpha f_T \quad (32)$$

Co również ma miejsce w warunkach równowagi termicznej:

$$\left[c_n n_0 - c_n n_0 f_T^0 - c_n \frac{1}{\alpha} n_1 f_T^0 \right] = c_p p_0 f_T^0 - c_p p_1 \alpha + c_p p_1 \alpha f_T^0 \quad (33)$$

Z równania (32) uzyskano zależność:

$$f_T = \frac{c_n n + \alpha c_p p_1}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} \quad (34)$$

Zatem:

$$R_T = \frac{c_n c_p (np - n_1 p_1) N_T}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} \quad (35)$$

Wielkości c_n i c_p możemy uzależnić od koncentracji pułapek N_T , wprowadzając parametry τ_{n_0} i τ_{p_0} , i przedstawiając je odpowiednio w postaci:

$$c_n = \frac{1}{\tau_{n_0} f_T N_T}, \quad (36)$$

$$c_p = \frac{1}{\tau_{p_0} f_T N_T}. \quad (37)$$

Stąd wynika, że:

$$R_T = \frac{(np - n_1 p_1) N_T}{\tau_{p_0} f_T N_T \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} f_T N_T (p + \alpha p_1)} \quad (38)$$

Korzystając z powyższych równań oraz z równości $n_1 p_1 = n_0 p_0$ otrzymano:

$$R_T = \frac{np - n_0 p_0}{\tau_{p_0} \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} (p + \alpha p_1)} \quad (39)$$

Kolejnym punktem są rozważania nad sensem fizycznym współczynników τ_{p_0} i τ_{n_0}

Zakładając, że $\Delta n = \Delta p$, gdzie $\Delta n = n - n_0$, $\Delta p = p - p_0$ otrzymano wyrażenie:

$$R_T = \frac{n_0 \Delta p + p_0 \Delta p + (\Delta p)^2}{\tau_{p_0} \left(n_0 + \Delta p + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} (p_0 + \Delta p + \alpha p_1)} \quad (39a)$$

Ale zgodnie z klasyczną definicją $R_T = \frac{\Delta p}{\tau}$, stąd:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{n_0 + p_0 + \Delta p}{\tau_{p_0} \left(n_0 + \Delta p + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} (p_0 + \Delta p + \alpha p_1)} \quad (39b)$$

Gdy Δp jest małe, wtedy

$$R_T = \tau = \tau_{p_0} \frac{n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1}{n_0 + p_0} + \tau_{n_0} \frac{p_0 + \alpha p_1}{n_0 + p_0} \quad (40)$$

Powyższy wzór pozwala odpowiedzieć na pytanie jaki jest sens fizyczny parametrów τ_{p_0} i τ_{n_0} . Ze wzoru (40) widać, że τ_{p_0} jest czasem życia dziur w materiale typu n ($n_0 \gg p_0$), a τ_{n_0} jest czasem życia elektronów w materiale typu p ($p_0 \gg n_0$).

W silnie domieszkowanym materiale typu n lub p, τ_{p_0} i τ_{n_0} są stałe, to znaczy nie zmieniają wartości ze zmianą koncentracji. Dlatego też, można przyjąć, że czas życia nie zmienia się ze wzrostem koncentracji elektronów lub dziur. Inaczej jest w przypadku rekombinacji Augera i rekombinacji promienistej, gdzie czas życia zależy odwrotnie proporcjonalnie do koncentracji nośników, odpowiednio w potęgze drugiej i pierwszej. Powyższe rozważania są typowe i powszechnie stosowane w literaturze.

Wracając do równania (12), trudność pojawia się w przypadku wyznaczenia zależności pomiędzy zmianami koncentracji elektronów i dziur (δn i δp), a zmianami koncentracji elektronów na poziomach pułpkowych, donorowych i akceptorowych, (δf_T , δN_D^+ i δN_A^-). Wymaga to analizy mechanizmów G-R związanych z pułpkami, donorami i akceptorami. W niniejszej rozprawie skupiono się na dokładnej analizie tych mechanizmów, aby móc wykorzystać zależność (12) w celu dokładniejszego zdefiniowania i obliczenia czasów życia elektronów i dziur w przyrządach pracujących w warunkach nierównowagowych.

Dla rekombinacji SRH zazwyczaj czasy życia elektronów i dziur różnią się ($\tau_p \neq \tau_n$), ale słuszna pozostaje zależność:

$$R_T - G_T = \frac{\delta n}{\tau_n} = \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (41)$$

Po oświetleniu struktury powstaje nowy stan ustalony i w tej sytuacji wcześniejsze równanie (32) można przedstawić w postaci:

$$c_n \left[(n + \delta n)(1 - f_T - \delta f_T) - \frac{1}{\alpha} n_1 (f_T + \delta f_T) \right] = c_p \left[(p + \delta p)(f_T + \delta f_T) - p_1 \alpha (1 - f_T - \delta f_T) \right] \quad (42)$$

Odejmując stronami równanie (32) od (42), otrzymano zależność:

$$\delta f_T = \frac{c_n \delta n (1 - f_T) - c_p f_T \delta p}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} \quad \text{lub} \quad \delta f_T = \frac{\tau_{p_0} \delta n (1 - f_T) - \tau_{n_0} f_T \delta p}{\tau_{p_0} \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} (p + \alpha p_1)} \quad (43)$$

Wtedy zależność (12) przyjmuje postać:

$$\delta n + \delta N_A^- + \frac{c_n \delta n (1 - f_T) - c_p f_T \delta p}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T = \delta p + \delta N_D^+ \quad (44)$$

Po oświetleniu struktury będącej w warunkach równowagi termicznej, zależność (43) można wyrazić przez wartości równowagowe:

$$\delta f_T = \frac{c_n \delta n (1 - f_T^0) - c_p f_T^0 \delta p}{c_n \left(n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p_0 + \alpha p_1)} \quad \text{lub} \quad \delta f_T = \frac{\tau_{p_0} \delta n (1 - f_T^0) - \tau_{n_0} f_T^0 \delta p}{\tau_{p_0} \left(n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + \tau_{n_0} (p_0 + \alpha p_1)} \quad (43a)$$

Wtedy zależność (12) przyjmuje postać:

$$\delta n + \delta N_A^- + \frac{c_n \delta n (1 - f_T^0) - c_p f_T^0 \delta p}{c_n \left(n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p_0 + \alpha p_1)} N_T = \delta p + \delta N_D^+ \quad (44)$$

Stosując równanie (43) dokonano eliminacji δf_T . Dalsze rozważania dotyczyć będą powiązania δn z δN_D^+ i δp z δN_A^- . W tym celu należy przeanalizować procesy G-R z udziałem atomów domieszek tworzących płytkie poziomy donorowe i akceptorowe.

Prowadząc dalsze rozumowanie założono, że mechanizmy G-R z udziałem donorów dotyczyć będą elektronów, a z udziałem akceptorów - dziur. Uwarunkowane jest to bardzo małymi energiami jonizacji dla tych procesów, znacznie mniejszymi niż dla przejść elektronów pomiędzy stanem donorowym i akceptorowym. Ponadto przejście elektronu z pasma przewodnictwa na poziom akceptorowy jest mało prawdopodobne w sytuacji, gdy akceptory są zjonizowane. Podobne rozumowanie należy zastosować dla dziur, czyli przejście dziury z pasma walencyjnego na poziom donorowy jest prawie niemożliwe, gdy donory są w większości zjonizowane.

3.5 Procesy G-R dla elektronów przy udziale atomów donorowych

W przypadku HgCdTe, trudno znaleźć w literaturze pracę na temat procesów G-R zachodzących pomiędzy elektronami w paśmie przewodnictwa, a elektronami związanymi z domieszkami donorowymi. Podobnie w przypadku dziur: pomiędzy dziurami w paśmie walencyjnym, a elektronami związanymi z domieszkami akceptorowymi. Panuje pogląd, że dla tych przypadków przeważają procesy międzypasmowe, głównie z uwagi na wysoką koncentrację samoistną, będącą pochodną wąskiej przerwy energetycznej. Pogląd ten ma swoje uzasadnienie w sytuacji, gdy poziom domieszkowania jest niski. Z danych literaturowych wynika jednak, że nawet w przodujących technologicznie laboratoriach, rzadko udaje się uzyskać struktury, w których koncentracja domieszek jest mniejsza niż 10^{13} cm^{-3} . Z uwagi na bardzo niską energię progową dla procesów G-R, porównywalną z energią jonizacji, już przy tak niskiej koncentracji domieszek, ich udział może być

znaczący. Przyjmując całkowitą jonizację donorów i akceptorów w stanie równowagi ($N_D^+ = N_D, N_A^- = N_A$), można założyć, że sytuacja nie zmieni się w stanie ustalonym. Natomiast w sytuacji uwzględniającej dodatkową generację optyczną, to zjonizowane domieszki mogą w pierwszej kolejności wychwytywać nadmiarowe nośniki, stanowiąc jeden z istotnych kanałów ich rekombinacji. W tym przypadku nastąpi zmniejszenie koncentracji zjonizowanych domieszek ($\Delta N_D^+ < 0; \Delta N_A^- < 0$). W monografii Blakemore'a [34] rozpatrywane są trzy możliwe mechanizmy G-R związane z udziałem atomów domieszek donorowych, tzn. mechanizm promienisty, tzw. rekombinacja fononowa i mechanizm Augera. Jednak Blakemore w swojej monografii nie porusza zagadnienia związanego z poziomami akceptorowymi. Co więcej, rozważania te dotyczą wyłącznie krzemu i germanu. Przez analogię podobne mechanizmy można też zdefiniować dla procesów G-R z udziałem poziomów akceptorowych. W niniejszej pracy doktorskiej podjęto próbę wykorzystania rezultatów przedstawionych w monografii [34] oraz w źródłowych pracach w niej cytowanych. Poszerzono te rozważania dodatkowo o mechanizmy G-R związane z udziałem atomów domieszek akceptorowych i zaadoptowano je dla struktur z tellurku kadmowo-rtęciowego.

3.5.1 Rekombinacja promienista

Jako pierwszy przypadek rozpatrzono mechanizm rekombinacji promienistej dla przejść elektronów pasmo przewodnictwa (E_c) – poziom donorowy (E_d). W tym celu należy znać koncentrację zjonizowanych donorów - N_D^+ , oraz elektronów przewodnictwa - n . Szybkość rekombinacji promienistej r_{RN_D} (w $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) elektronów z pasma przewodnictwa na poziom donorowy jest proporcjonalna do iloczynu koncentracji elektronów i koncentracji zjonizowanych donorów

$$r_{RN_D} = G_{RN_D} n N_D^+ \quad (45)$$

Natomiast szybkość generacji promienistej g_{RN_D} (w $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) jest proporcjonalna do ilości elektronów na poziomach domieszki donorowej, a więc koncentracji niezjonizowanych donorów.

$$g_{RN_D} = \beta_{RN_D} (N_D - N_D^+) \quad (46)$$

W warunkach równowagi termicznej $r_R = g_R$, a więc:

$$G_{RN_D} n_0 N_D^{+0} = \beta_{RN_D} (N_D - N_D^{+0}) \quad (47)$$

Współczynnik σ_{RN_D} będący przekrojem czynnym na zderzenie elektronu ze zjonizowanym donorem, który zastał wyznaczony przez Sclar'a i Burstein'a [35], jest odwrotnie proporcjonalny do energii kinetycznej elektronu w paśmie przewodnictwa ($\sim k^{-2}$).

Równanie (7) w pracy [35] wyrażone w jednostkach układu CGS ma postać:

$$\sigma_{RN_D} = \frac{\eta^3 2^8 \pi^2 e^2 \hbar E_d}{3 \varepsilon (m_e^*)^2 c^3 E_k \exp(4)} \text{ w } cm^2, \quad (7b)$$

gdzie e jest ładunkiem elektronu, E_k energią kinetyczną elektronu, m_e^* masą efektywną elektronu, c prędkością światła, ε względną przenikalnością dielektryczną ośrodka. Ładunek elektronu e w układzie CGS wynosi $4,0 \cdot 10^{-10}$ j.es., $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} 10^7$ (w ergach). \hbar , k i m_e^* są wyrażone w jednostkach SI.

Natomiast stosując jednostki SI równanie (7b) można wyrazić następująco:

$$\sigma_{RN_D} = \frac{\eta^3 2^9 \pi^2 (4 \cdot 10^{-10})^2 E_d}{3 \varepsilon m_e^* c^3 10^5 \hbar k^2 \exp(4)} \quad (7c)$$

Ostatecznie:

$$\sigma_{RN_D} = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_d}{\varepsilon m_e^* c^3 \hbar k^2} \text{ w } cm^2, \quad (48)$$

gdzie E_d jest energią jonizacji wyrażoną w eV, e ładunkiem elektronu, \hbar stałą Plancka dzielona przez 2π , ε przenikalnością dielektryczną ośrodka, c prędkością światła, k wektorem falowym wyrażonym w m^{-1} .

Natomiast współczynnik rekombinacji promienistej $G_{RN_D} = \sigma_{RN_D} \frac{\hbar k}{m_e^*} 10^2$ jest iloczynem uśrednionej prędkości elektronów i przekroju czynnego wyrażonym w $cm^2 s^{-1}$. Dlatego aby znaleźć iloczyny $G_{RN_D} n_0$ i $G_{RN_D} n$ należy uwzględnić statystykę Fermiego-Diraca i uwzględnić nieparaboliczność pasma przewodnictwa w HgCdTe.

$$G_{RN_D} n_0 = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_d}{\varepsilon (m_e^*)^2 c^3} \int_{k_{min}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \frac{k dk}{1 + \exp\left(\frac{E_C(k) - F}{k_B T}\right)} 10^{-4} \text{ w } s^{-1} \quad (49)$$

Natomiast: $k_{min} = \frac{\sqrt{E_d e m_e^*}}{\hbar}$, k_{min} w m^{-1} , E_d w eV,

gdzie E_C jest energią elektronów w paśmie przewodnictwa (opis Dodatek A), F poziomem Fermiego, T temperaturą, a k_B stałą Boltzmanna.

Korzystając z równania (47) wyznaczono współczynnik β .

$$\beta = \frac{G_{RN_D} n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} \quad (50)$$

Ponieważ zarówno przekrój czynny, jak i masa efektywna zależą od wektora falowego k , więc masa efektywna elektronu występująca w wyrażeniu (49) jest liczona jako średnia masa efektywna w paśmie przewodnictwa (opis Dodatek A).

3.5.2 Rekombinacja fononowa

Obok rekombinacji promienistej, może zachodzić tzw. rekombinacja fononowa w sytuacji, gdy energia wydzielająca się podczas aktu rekombinacji elektronu nie jest wydzielana w postaci fotonu, ale w postaci jednego lub więcej fononów. Wyrażenia na szybkość generacji fononowej netto mają taką samą postać, jak wyrażenia na generację promienistą i wyprowadza się je w podobny sposób.

Szybkość rekombinacji fononowej wyraża się zależnością:

$$r_{pN_D} = G_{pN_D} n N_D^+ \quad (51)$$

A szybkość generacji fononowej:

$$g_{pN_D} = \frac{G_{pN_D} n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} (N_D - N_D^+) \quad (52)$$

Współczynnik rekombinacji fononowej otrzymany przez Gummel'a i Lax'a [37] można przedstawić w postaci:

$$G_{pN_D} = \frac{256 \cdot 10^6 \pi^{\frac{1}{2}} a^3 E_1^2}{M E_d r_B b} \frac{1}{\left(\frac{E_d r_B}{\hbar b}\right)^4} \left(\frac{\hbar^2}{2m_e^* r_B^2 k_B T}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ w } cm^3 s^{-1}, \quad (53)$$

gdzie r_B jest promieniem Bohra dla wodoropodobnego atomu domieszki.

$$r_B = 5.29 \cdot 10^{-11} \varepsilon \frac{m_0}{m_e^*} \text{ w m}$$

Natomiast E_1^2 wyznaczmy z poniższej zależności:

$$\mu_e = \frac{2(2\pi)^{\frac{1}{2}} e \hbar^4 c_{11}}{3(m_e^*)^{\frac{5}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} E_1^2}, \quad (54)$$

gdzie $b = \sqrt{\frac{c_{11}}{g}}$ jest średnią prędkością fononów, μ_e jest ruchliwością elektronów, $c_{11} = 5.38 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$ [38], g jest gęstością materiału, dla $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ $g(x) = 5.85x + 8.1(1-x)$ w g/cm^3 [39], [40], M oznacza masę atomu domieszki oraz a jest stałą sieci.

Dla indu używanego jako domieszka donorowa $M = 114,818 \cdot 10^{-3} / 6.02210^{23} \text{ kg}$. Wartości parametrów materiałowych HgCdTe użytych we wszystkich obliczeniach prezentowanych w rozprawie pochodzą z monografii Capper'a i wsp. [39], [40].

3.5.3 Rekombinacja Augera

Szybkość rekombinacji Augera jest proporcjonalna do kwadratu koncentracji elektronów w paśmie przewodnictwa i koncentracji zjonizowanych donorów:

$$r_{AN_D} = G_{AN_D} n^2 N_D^+ \quad (55)$$

Natomiast szybkość generacji Augera jest proporcjonalna do koncentracji elektronów w paśmie przewodnictwa i koncentracji niezjonizowanych donorów:

$$g_{AN_D} = \alpha_{AN_D} n (N_D - N_D^+) \quad (56)$$

W warunkach równowagi termicznej szybkość generacji równa się szybkości rekombinacji.

$$G_{AN_D} n_0^2 N_D^{+0} = \alpha_{AN_D} n_0 (N_D - N_D^{+0}) \rightarrow \alpha_{AN_D} = G_{AN_D} \frac{n_0 N_D^{+0}}{(N_D - N_D^{+0})} \quad (57)$$

Stąd:

$$G_{AN_D} = \alpha_{AN_D} \frac{(N_D - N_D^{+0})}{n_0 N_D^{+0}}, \quad (58)$$

gdzie $\alpha_{AN_D} = \sigma_{AN_D} v_e$ jest przekrojem czynnym dla jonizacji zderzeniowej pomnożonym przez prędkość v_e elektronu o wymiarze $cm^3 s^{-1}$. Przekrój czynny dla jonizacji centrum wodoropodobnego liczony przy użyciu aproksymacji Borna [41] został wyznaczony przez Mott'a i Massey'a [42] w jednostkach CGS:

$$\sigma_{AN_D} = 0.285 \frac{4\pi e^4}{\varepsilon E_d E_k} \ln\left(\frac{4\varepsilon E_k}{0.048 E_d}\right) \quad w \text{ cm}^2 \quad (59)$$

W układzie CGS jednostka ładunku elektrycznego ma wymiar $\text{dyna} \cdot \text{cm}^2$.

Wyrażenie (59) można również w układzie CGS przedstawić w inny sposób:

$$\sigma_{AN_D} = 1.9 \cdot 10^{-37} \frac{1}{\varepsilon E_d E_k} \ln\left(\frac{4\varepsilon E_k}{0.048 E_d}\right) \quad w \text{ cm}^2 \quad (59a)$$

Jeżeli E_d wyrażone jest w elektronowoltach, a E_k w J, wtedy:

$$\sigma_{AN_D} = 1.19 \cdot 10^{-32} \frac{1}{\varepsilon E_d E_k} \ln\left(\frac{h^2 k^2 \varepsilon}{0.096 E_d \pi^2 m_e^*}\right) \quad (59b)$$

Lub inaczej:

$$\sigma_{AN_D} = 1.19 \cdot 10^{-32} \frac{2m_e^*}{\varepsilon E_d \hbar^2 k^2} \ln\left(\frac{h^2 k^2 \varepsilon}{0.096 E_d \pi^2 m_e^*}\right) \quad w \text{ cm}^2 \quad (60)$$

Natomiast prędkość elektronów w cm s^{-1} wyrazi się zależnością:

$$v_e = \frac{\hbar k}{m_e^*} 10^2 \quad w \text{ cm/s}$$

Kolejnym etapem jest wyprowadzenie zależności na $\alpha_{AN_D} n_0$:

$$\alpha_{AN_D} n_0 = 225.6 \frac{1}{\varepsilon E_d} \int_{k_{min}}^{\infty} \frac{1}{\pi^2} k \ln\left(\frac{h^2 k^2 \varepsilon}{0.096 E_d e \pi^2 m_e^*}\right) \frac{dk}{1 + \exp\left(\frac{E_C(\vec{k}, \vec{r}) - F}{k_B T}\right)} 10^{-4} \quad w \text{ s}^{-1} \quad (61)$$

Wszystkie wielkości w zależności (61) zostały wyrażone w układzie SI, natomiast E_d w eV.

3.5.4 Efekt wypadkowy

Uwzględniając wszystkie trzy procesy rekombinacji z udziałem płytek poziomów donorowych, zarówno w równowadze termicznej jak i w warunkach ustalonych, można dojść do wniosku, że szybkość generacji elektronów z poziomów donorowych do pasma przewodnictwa jest równa szybkości ich rekombinacji (warunek równowagi szczegółowej).

W warunkach ustalonych relacja ta ma postać:

$$\frac{n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} (N_D - N_D^+) (G_{RN_D} + G_{PN_D} + n G_{AN_D}) = n N_D^+ (G_{RN_D} + G_{PN_D} + n G_{AN_D}) \quad (62)$$

Czyli:

$$\frac{n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} (N_D - N_D^+) = n N_D^+ \quad (63)$$

A po oświetleniu struktury niewielkim strumieniem przyjmuje postać:

$$\frac{n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} (N_D - N_D^+ - \delta N_D^+) = (n + \delta n) (N_D^+ + \delta N_D^+) \quad (64)$$

Po odjęciu stronami równania (59) od równania (58) otrzymano zależność:

$$-\frac{n_0 N_D^{+0}}{N_D - N_D^{+0}} \delta N_D^+ = \delta n N_D^+ + n \delta N_D^+ \quad (64a)$$

Stąd:

$$\delta N_D^+ = Z_{N_D^+} \delta n, \quad (65)$$

gdzie:

$$Z_{N_D^+} = -\frac{(N_D - N_D^{+0}) N_D^{+0}}{n_0 N_D^{+0} + n (N_D - N_D^{+0})} \quad (66)$$

Relacja (65) pozwala powiązać zmianę koncentracji zjonizowanych donorów ze zmianą koncentracji elektronów.

3.6 Procesy G-R dla elektronów walencyjnych atomów akceptorowych

W przypadku płytkich poziomów akceptorowych zastosowano analogiczne podejście, jak w przypadku procesów G-R pomiędzy pasmem przewodnictwa, a poziomami donorowymi. Z tą różnicą, że nośnikami, które będą rekombinowały są dziury. W materiale HgCdTe różnią się one od elektronów przede wszystkim masą efektywną i to ona będzie głównie decydowała o różnicach w średnich wartościach przekrojów czynnych, w porównaniu do analogicznych procesów rozpatrywanych dla elektronów. Podobnie jak to miało miejsce w przypadku elektronów i atomów donorowych, wyróżniono 3 podstawowe procesy G-R dla płytkich poziomów akceptorowych: mechanizm promienisty, rekombinację fononową i mechanizm Augera. Założono, że dominują przejścia dziurowe pomiędzy pasmem walencyjnym, a stanami akceptorowymi o energii jonizacji E_A . Koncentrację akceptorów i akceptorów zjonizowanych oznaczono odpowiednio jako: N_A i N_A^- .

3.6.1 Rekombinacja promienista

Szybkość rekombinacji promienistej jest proporcjonalna do iloczynu koncentracji dziur i zjonizowanych donorów:

$$r_{RNA} = G_{RNA} p N_A^- \quad (67)$$

Natomiast szybkość generacji promienistej jest proporcjonalna do koncentracji niezjonizowanych atomów akceptorowych:

$$g_{rNA} = \beta_{RNA} (N_A - N_A^-) \quad (68)$$

Stan równowagi pozwala wyznaczyć współczynnik β_{RNA} korzystając z zależności $r_R = g_r$.

$$\beta_{RNA} = G_{RNA} \frac{p_0 N_A^{0-}}{N_A - N_A^{0-}} \quad (69)$$

Analogiczne jak w (48) wyrażenie to można użyć dla określenia przekroju czynnego dla procesu promienistego. Jednak należy uwzględnić różnice mas dziur ciężkich i lekkich. Dla dziur ciężkich przyjmie ono postać:

$$\sigma_{RNA}^{hh} = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_a}{\varepsilon m_{hh}^* c^3 \hbar k^2}, \quad (70)$$

gdzie E_a jest energią jonizacji akceptora, a m_{hh}^* masą efektywną dziur ciężkich.

A dla dziur lekkich:

$$\sigma_{RNA}^{lh} = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_a}{\varepsilon m_{lh}^* c^3 \hbar k^2}, \quad (71)$$

gdzie m_{lh}^* jest masą efektywną dziur lekkich.

Koncentrację dziur ciężkich w 1 cm^3 wyznaczono z wyrażenia:

$$p_{hh} = \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \frac{k^2 dk}{1 + \exp\left(\frac{F - E_{hh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T}\right)} 10^{-6} \quad (70a)$$

A dziur lekkich:

$$p_{lh} = \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \frac{k^2 dk}{1 + \exp\left(\frac{F - E_{lh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T}\right)} 10^{-6} \quad (71a)$$

Współczynnik rekombinacji promienistej G_{RNA} jest iloczynem przekroju czynnego i prędkości dziur uśrednionej w paśmie dziur ciężkich i dziur lekkich. Uśrednienie jest bardzo ważne, gdyż od wartości wektora falowego zależy zarówno prędkość dziur ciężkich i lekkich wyrażona odpowiednio $v_{hh} = \frac{\hbar k}{m_{hh}^*} \cdot 10^2$ i $v_{lh} = \frac{\hbar k}{m_{lh}^*} \cdot 10^2$ (w cms^{-1}) oraz gęstość stanów i funkcja rozkładu. Współczynnik rekombinacji promienistej dla dziur ciężkich i lekkich oznaczono odpowiednio jako G_{RNA}^{hh} i G_{RNA}^{lh} i wyznaczono następująco:

$$G_{RNA}^{hh} p_{hh} = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_a}{\varepsilon (m_{hh}^*)^2 c^3} \int_{k_{min}^{hh}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{(m_{hh}^*)^2} \frac{k dk}{1 + \exp\left(\frac{F - E_{hh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T}\right)} 10^{-4} \quad (72a)$$

$$G_{RNA}^{lh} p_{lh} = 7.9 \cdot 10^{-42} \frac{\eta^3 E_a}{\varepsilon (m_{lh}^*)^2 c^3} \int_{k_{min}^{lh}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{(m_{lh}^*)^2} \frac{k dk}{1 + \exp\left(\frac{F - E_{lh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T}\right)} 10^{-4}, \quad (72b)$$

gdzie:

$$k_{min}^{hh} = \frac{\sqrt{2E_a \varepsilon m_{hh}^*}}{\hbar}, \quad k_{min}^{lh} = \frac{\sqrt{2E_a \varepsilon m_{lh}^*}}{\hbar} \quad (73)$$

W powyższych wyrażeniach energia jonizacji akceptorów wyrażona jest w eV.

Natomiast uśredniony współczynnik rekombinacji promienistej G_{RNA} uwzględniający udział dziur lekkich i ciężkich przedstawiono w postaci:

$$G_{RNA} = \frac{G_{RNA}^{hh} p_{hh} + G_{RNA}^{lh} p_{lh}}{p_{hh} + p_{lh}} \quad (74)$$

3.6.2 Rekombinacja fononowa

Podobnie jak w przypadku rekombinacji fononowej dla płytkich stanów donorowych, dla stanów akceptorowych szybkość rekombinacji opisuje zależność:

$$r_{pNA} = G_{pNA} p N_A^- \quad (75)$$

A szybkość generacji fononowej przyjmie postać:

$$g_{pNA} = G_{pNA} \frac{p_0 N_A^{0-}}{N_A - N_A^{0-}} (N_A - N_A^-) \quad (76)$$

Współczynnik rekombinacji fononowej otrzymany przez Gummel'a i Lax'a [37] dla elektronów można zaadaptować również dla dziur ciężkich i lekkich, odpowiednio w postaci:

$$G_{pNA}^{hh} = \frac{256 \cdot 10^6 \pi^{\frac{1}{2}} a^3 E_{1hh}^2}{M E_a r_{Bhh} b} \frac{1}{\left(\frac{E_a r_{Bhh}}{\hbar b}\right)^4} \left(\frac{\hbar^2}{2m_{hh}^* r_{Bhh}^2 k_B T}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ w } cm^3 s^{-1} \quad (77a)$$

$$G_{pNA}^{lh} = \frac{256 \cdot 10^6 \pi^{\frac{1}{2}} a^3 E_{1lh}^2}{M E_a r_{Blh} b} \frac{1}{\left(\frac{E_a r_{Blh}}{\hbar b}\right)^4} \left(\frac{\hbar^2}{2m_{lh}^* r_{Blh}^2 k_B T}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ w } cm^3 s^{-1}, \quad (77b)$$

gdzie r_B jest promieniem Bohra dla wodoropodobnego atomu domieszki akceptorowej. W modelu tym założono, że wokół zjonizowanego akceptora poruszają się dziury. Analogicznie do sytuacji, gdy elektrony poruszają się wokół zjonizowanego donora. Promień Bohra dla dziury ciężkiej i lekkiej wyraża się następująco: $r_{Bhh} = 5.29 \cdot 10^{-11} \varepsilon \frac{m_0}{m_{hh}^*}$ i $r_{Blh} = 5.29 \cdot 10^{-11} \varepsilon \frac{m_0}{m_{lh}^*}$ w m.

E_{1hh}^2 wyznaczono analogicznie, jak w przypadku donorów z poniższej zależności:

$$E_{1hh}^2 = \frac{2(2\pi)^{\frac{1}{2}} e \hbar^4 c_{11}}{3(m_{hh}^*)^{\frac{5}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \mu_{hh}} \quad (78a)$$

Natomiast E_{1lh}^2 jest równy:

$$E_{lh}^2 = \frac{2(2\pi)^{\frac{1}{2}} e \hbar^4 c_{11}}{3(m_{lh}^*)^{\frac{5}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \mu_{lh}}, \quad (78b)$$

gdzie μ_{hh} i μ_{lh} jest ruchliwością odpowiednio dziur ciężkich i lekkich.

Dla arsenu używanego jako domieszka akceptorowa, $M = 74,92 \cdot 10^{-3} / 6.02210^{23} \text{ kg}$.

Uśredniony współczynnik rekombinacji fononowej uwzględniający udział dziur lekkich i ciężkich wynosi:

$$G_{pN_A} = \frac{G_{pN_A}^{hh} p_{hh} + G_{pN_A}^{lh} p_{lh}}{p_{hh} + p_{lh}} \quad (79)$$

Ruchliwości dziur lekkich, ciężkich i elektronów są liczone w autorskim programie promotora dokładną metodą uwzględniającą statystykę nośników i dwa podstawowe mechanizmy rozpraszania: na zjonizowanych domieszkach i poprzecznych fononach optycznych [43].

3.6.3 Rekombinacja Augera

Szybkość rekombinacji Augera dla płytkich stanów domieszki akceptorowej jest proporcjonalna do kwadratu koncentracji dziur i koncentracji zjonizowanych akceptorów:

$$r_{AN_A} = G_{AN_A} p^2 N_A^- \quad (80)$$

Szybkość generacji Augera jest proporcjonalna do iloczynu koncentracji dziur i neutralnych akceptorów:

$$g_{AN_A} = \alpha_{AN_A} p (N_A - N_A^-) \quad (81)$$

Stąd współczynnik α_{AN_A} wyznaczony z warunków równowagi termicznej wynosi:

$$G_{AN_A} = \alpha_{AN_A} \frac{p_0 (N_A - N_A^{0-})}{p_0^2 N_A^{0-}}, \quad (82)$$

gdzie $\alpha_{AN_A} = \sigma_{AN_A}^{hh} v_{hh} + \sigma_{AN_A}^{lh} v_{lh}$ o wymiarze $cm^3 s^{-1}$ jest współczynnikiem jonizacji zderzeniowej uwzględniającym przekroje czynne dla dziur ciężkich i lekkich, pomnożone przez ich uśrednione prędkości. Zaadoptowano tu zależność (59), która przyjęła postać:

$$\sigma_{AN_A} = 0.285 \frac{4\pi e^4}{\varepsilon E_a E_k} \ln \left(\frac{4\varepsilon E_k}{0.048 E_a} \right) \quad \text{w } cm^2 \quad (83)$$

Prędkość dziur ciężkich i lekkich (w $cm s^{-1}$) wyrażono odpowiednio zależnościami: $v_{hh} = \frac{hk}{4\pi m_{hh}^*} 10^2$, $v_{lh} = \frac{hk}{4\pi m_{lh}^*} 10^2$, w $cm s^{-1}$.

Kolejny etap to wyznaczenie α_{AN_a} , uwzględniając udział dziur lekkich i ciężkich. Uśredniony współczynnik α dla dziur ciężkich oznaczono jako $\alpha_{AN_a}^{hh}$, a dla dziur lekkich $\alpha_{AN_a}^{lh}$.

Zależność $\alpha_{AN_a}^{hh} p_{hh}$ wyznaczono z zależności:

$$\alpha_{AN_a}^{hh} p_{hh} = 225.6 \frac{1}{\varepsilon E_d} \int_{k_{min}^{hh}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \ln \left(\frac{h^2 k^2 \varepsilon}{0.096 E_d e \pi^2 m_{hh}^*} \right) \frac{k dk}{1 + \exp \left(\frac{F - E_{hh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T} \right)} 10^{-4} \quad (83a)$$

Podobnie dla dziur lekkich:

$$\alpha_{AN_a}^{lh} p_{lh} = 225.6 \frac{1}{\varepsilon E_d} \int_{k_{min}^{lh}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\pi^2} \ln \left(\frac{h^2 k^2 \varepsilon}{0.096 E_d e \pi^2 m_{lh}^*} \right) \frac{k dk}{1 + \exp \left(\frac{F - E_{lh}(\vec{k}, \vec{r})}{k_B T} \right)} 10^{-4} \quad (83b)$$

I ostatecznie uśredniony współczynnik rekombinacji Augera dla płytkiego poziomu domieszek akceptorowych należy wyrazić wzorem:

$$\alpha_{AN_a} = \frac{\alpha_{AN_a}^{hh} p_{hh} + \alpha_{AN_a}^{lh} p_{lh}}{p_{hh} + p_{lh}}, \quad \text{w } s^{-1} \quad (84)$$

3.6.4 Efekt wypadkowy

Po uwzględnieniu wszystkich trzech procesów z udziałem atomów akceptorowych, zarówno w równowadze termicznej jak i w warunkach ustalonych, szybkość generacji dziur z poziomów akceptorowych do pasma walencyjnego jest równa szybkości ich rekombinacji (warunek równowagi szczegółowej).

W warunkach ustalonych relacja ta ma postać:

$$\frac{p_0 N_A^{0-}}{N_A - N_A^{0-}} (N_A - N_A^-) (G_{RN_A} + G_{PN_A} + n G_{AN_A}) = p N_A^- (G_{RN_A} + G_{PN_A} + n G_{AN_A}) \quad (85)$$

Czyli

$$\frac{p_0 N_A^{0-}}{N_A - N_A^{0-}} (N_A - N_A^-) = p N_A^- \quad (86)$$

Po oświetleniu struktury niewielkim strumieniem światła równanie (80) przyjmie postać:

$$\frac{p_0 N_A^{0-}}{N_A - N_A^{0-}} (N_A - N_A^- - \delta N_A^-) = (p + \delta p) (N_A^- + \delta N_A^-) \quad (87)$$

Odejmując stronami równanie (80) od równania (81) otrzymano zależność:

$$\delta N_A^- = Z_{N_A^-} \delta p, \quad (88)$$

gdzie:

$$Z_{N_A^-} = - \frac{(N_A - N_A^{0-}) N_A^{0-}}{p_0 N_A^{0-} + p (N_A - N_A^{0-})} \quad (89)$$

Wracając do zależności (12) $\delta n + \delta N_A^- + \delta f_T N_T = \delta p + \delta N_D^+$, można ją teraz przedstawić w następującej postaci:

$$\delta n - \frac{(N_A - N_A^{0-}) N_A^{0-}}{p_0 N_A^{0-} + p N_A - p N_A^{0-}} \delta p + \frac{c_n \delta n (1 - f_T) - c_p f_T \delta p}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T = \delta p - \delta n \frac{(N_D - N_D^{+0}) N_D^{+0}}{n_0 N_D^{+0} + n N_D - n N_D^{+0}}$$

Stąd:

$$\delta n \cdot Z1 = \delta p \cdot Z2 \quad (90)$$

Gdzie:

$$Z1 = 1 - Z_{N_A^-} + \frac{c_n (1 - f_T)}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T \quad (91a)$$

$$Z2 = 1 - Z_{N_D^+} + \frac{c_p f_T}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T \quad (91b)$$

Stąd:

$$\delta n = \frac{Z_2}{Z_1} \delta p; \delta p = \frac{Z_1}{Z_2} \delta n \quad (92)$$

W ten sposób otrzymano związek pomiędzy koncentracją nadmiarowych elektronów δn i dziur δp powstałych w wyniku działania niewielkiego wymuszenia optycznego. Dotyczy to sytuacji, gdy obok procesów międzypasmowych zachodzą procesy G-R z udziałem stanów pułapkowych o koncentracji N_T oraz donorów i akceptorów odpowiednio o koncentracjach N_D i N_A .

Wracając do wyrażenia $\delta f_T = \frac{c_n \delta n (1 - f_T^0) - c_p f_T^0 \delta p}{c_n (n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1) + c_p (p_0 + \alpha p_1)}$, teraz można wyrazić δf_T przez δn

lub δp w następujący sposób:

$$\delta f_T = Z_N \delta n = Z_P \delta p, \quad (93)$$

$$\text{gdzie } Z_N = \frac{c_n (1 - f_T^0) - c_p f_T^0 \frac{Z_1}{Z_2}}{c_n (n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1) + c_p (p_0 + \alpha p_1)}, \text{ a } Z_P = \frac{c_n (1 - f_T^0) \frac{Z_2}{Z_1} - c_p f_T^0}{c_n (n_0 + \frac{1}{\alpha} n_1) + c_p (p_0 + \alpha p_1)}.$$

Wyrażenie (93) będzie przez jeszcze użyte w dalszej części rozprawy przy definicji wypadkowego czasu życia elektronów i dziur.

3.7 Procesy międzypasmowe

3.7.1 Proces generacji i rekombinacji promienistej

Międzypasmowa rekombinacja promienista stanowi kolejny bardzo ważny mechanizm generacyjno-rekombinacyjny w HgCdTe. Zjawisko to pełni ważną rolę w optoelektronice, ponieważ odpowiada za luminescencję i działanie laserów półprzewodnikowych. W 1954 roku Van Roosbroeck i Shockley (VRS) wyznaczyli szybkość rekombinacji promienistej [44], zakładając równowagę termodynamiczną pomiędzy strumieniem fotonów wewnątrz półprzewodnika i swobodnymi nośnikami ładunku. Ich model nie uwzględniał jednak zjawiska wtórnej absorpcji fotonów (RF) oraz bilansu strumienia fotonów przemieszczających się pomiędzy półprzewodnikiem, a otoczeniem. Efekt RF ma duże znaczenie w HgCdTe, co ułatwia duży współczynnik załamania (wewnętrzne odbicie promieniowania) oraz geometria wytwarzanych struktur. RF powoduje wzrost efektywnego czasu życia nośników, znacznie powyżej wartości przewidzianych przez model VRS.

Zagadnienie jest trudne do rozwiązania, dlatego nie jest one uwzględniane w programach komercyjnych do symulacji parametrów struktur półprzewodnikowych. Co więcej, badacze analizujący czas życia nośników, nie uwzględniają zjawiska RF lub zakładają, że efekt ten pozwala pominąć wpływ rekombinacji promienistej.

Zgodnie z rozkładem Plancka gęstość widmowa fotonów w jednostce objętości półprzewodnika o współczynniku załamania η wynosi:

$$q(\nu) = \frac{8\pi\nu^2\eta^3}{c^3\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)}, \quad (94)$$

gdzie c jest prędkością światła w próżni, ν częstotliwością promieniowania, a h jest stałą Plancka. Szybkość generacji optycznej w jednostce objętości wywołanej przez te fotony wynosi natomiast:

$$G_{RAD} = \int_{E_g}^{\infty} \frac{q(\nu) \cdot \alpha(\nu) \cdot c}{\eta} d\nu, \quad (95)$$

gdzie α jest współczynnikiem absorpcji, a E_g szerokością przerwy energetycznej. Do obliczeń na potrzeby niniejszej pracy wykorzystano metodę zaproponowaną przez Humphreys'a [45], [46]. Humphreys' rozwijając model VRS, uwzględnił zjawisko RF powstających w wyniku generacji optycznej.

Rozważania należy zacząć od koncentracji fotonów o energii większej od szerokości przerwy energetycznej, opisano to równaniem:

$$q_0 = \int_{E_g}^{\infty} q(\nu) d\nu, \quad (96)$$

Natomiast uśredniony współczynnik absorpcji wyrażono zależnością:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{q_0} \int_{E_g}^{\infty} q(\nu) \cdot \alpha(\nu) d\nu, \quad (97)$$

Wtedy, wyrażona wzorem (89) szybkość generacji promienistej G_{RAD} , przyjmuje postać:

$$G_{RAD} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \quad (98)$$

Szybkość rekombinacji promienistej jest proporcjonalna do iloczynu koncentracji elektronów i dziur $R_{RAD} = knp$ (np. Blakemore [34]). Według modelu VRS w warunkach równowagi termicznej, zakładając równowagę szczegółową pomiędzy koncentracją

nośników ładunku, a strumieniem fotonów wewnątrz półprzewodnika, otrzymano $R_{RAD} = kn_0p_0 = G_{RAD} \rightarrow k = \frac{G_{RAD}}{n_0p_0}$. Tutaj k jest współczynnikiem proporcjonalności, wyrażonym w $[\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}]$, a G_{RAD} opisane jest zależnością (92). Szybkość rekombinacji promienistej wynosi więc:

$$R_{RAD} = G_{RAD} \frac{np}{n_0p_0} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{np}{n_0p_0}, \quad (99)$$

Tak więc klasyczne równanie otrzymane przez VRS [27] ma postać:

$$R_{RAD} - G_{RAD} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{np}{n_0p_0} - q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta}. \quad (100)$$

W przypadku zmiany koncentracji fotonów spowodowanej przez akty generacji promienistej nośników i luminescencji ($q \neq q_0$), równanie (100) powinno ulec modyfikacji, gdyż w takich warunkach zmieni się szybkość generacji promienistej. Powinno przyjąć postać:

$$R_{RAD}^{RF} - G_{RAD}^{RF} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{np}{n_0p_0} - q \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \quad (101)$$

W stanie ustalonym szybkość rekombinacji promienistej i generacji promienistej są sobie równe, podobnie będzie, jeśli struktura osiągnie stan ustalony po oświetleniu niewielkim sygnałem optycznym, prowadzącym do zmiany koncentracji elektronów, dziur i fotonów:

$$q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{np}{n_0p_0} = q \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \quad (102)$$

$$q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{(n + \delta n)(p + \delta p)}{n_0p_0} = (q + \delta q) \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \quad (103)$$

Odejmując stronami powyższe równania można znaleźć związki pomiędzy zmianą koncentracji elektronów i dziur, a zmianą fotonów:

$$q_0 \frac{n\delta p + p\delta n}{n_0p_0} = \delta q \quad (104)$$

Lub korzystając z zależności (93):

$$\delta q = q_0 \frac{n \frac{Z1}{Z2} + p}{n_0p_0} \delta n = q_0 \frac{n + p \frac{Z2}{Z1}}{n_0p_0} \delta p \quad (105)$$

Wzór (101) opisuje sytuację nierównowagową. Dodatkowo, można zauważyć, że wyrażenie $q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta} \cdot \frac{np}{n_0 p_0}$ na szybkość rekombinacji we wzorze (101), będzie określało jednocześnie szybkość generacji fotonów, spowodowanej aktami rekombinacji promienistej. Natomiast wyrażenie $q \bar{\alpha} \frac{c}{\eta}$ będzie jednocześnie równe szybkości anihilacji fotonów, spowodowanej aktami ich absorpcji w materiale. Jeżeli w jakimś elemencie objętości półprzewodnika nastąpi zmiana gęstości fotonów, to w zależności od znaku wyrażenia (100), dany element objętości półprzewodnika będzie emitował, bądź absorbował netto część fotonów przez ograniczającą go powierzchnię. Problem ten został rozwiązany przez promotora pracy, prof. Jóźwikowskiego, dzięki wprowadzeniu dodatkowego równania bilansu dla fotonów fotoluminescencyjnych [11]–[13]. Równanie to w niniejszej pracy przedstawiono jako równanie (5).

3.7.2 Międzypasmowe procesy Augera

W HgCdTe można wyróżnić 10 różnych międzypasmowych mechanizmów Augera (opisanych po raz pierwszy przez Beattie'a i Landsberg'a [47]) obejmujących przejścia elektronów i dziur pomiędzy trzema pasmami: pasmem przewodnictwa, pasmem dziur ciężkich i pasmem dziur lekkich. Prawdopodobieństwo tych procesów jest różne i wynika głównie z wielkości energii progowej, która jest konsekwencją konieczności spełnienia zasady zachowania energii i pędu przez biorące w akcie generacji lub rekombinacji nośniki. W materiale HgCdTe kluczową rolę odgrywają dwa procesy: mechanizmy Auger 1 i Auger 7. Dla tych dwóch procesów energie progowe są najmniejsze i prawie równe szerokości przerwy energetycznej, dlatego procesy te są dominującymi. W literaturze można znaleźć bardzo szeroki przekrój prac i monografii dotycząca tych dwóch procesów [18], [48]–[53].

Szybkość rekombinacji Augera netto obejmującą procesy A1 i A7 można wyrazić korzystając z monografii Blakemore [34], w następujący sposób:

$$R_A - G_A = G_{ee} \left(\frac{n^2 p}{n_0^2 p_0} - \frac{n}{n_0} \right) + G_{hh} \left(\frac{p^2 n}{p_0^2 n_0} - \frac{p}{p_0} \right) \quad (106)$$

Pierwszy wyraz oznacza szybkość rekombinacji netto dla procesu A1, a drugi dla procesu A7. Współczynniki G_{ee} i G_{hh} oznaczają szybkość emisji pojedynczej pary elektron

dziura, w procesie odpowiednio A1 i A7. Można je wyrazić poprzez stosunek koncentracji nośników w stanie równowagi termicznej i czasu życia w materiale samoistnym.

$$G_{ee} = \frac{n_0}{\tau_{A_1}^i}, \quad (107)$$

gdzie $\tau_{A_1}^i$, czyli czas życia A1 w materiale samoistnym wyraża się zależnością [54]:

$$\tau_{A_1}^i = 3.8 \times 10^{-18} \varepsilon_\infty^2 \frac{m_0}{m_e^*} (1+\mu)^{1/2} (1+2\mu) \left(\frac{E_g}{k_B T} \right)^{3/2} |F_1 F_2|^{-2} \exp\left(\frac{1+2\mu}{1+\mu} \frac{E_g}{k_B T} \right), \quad (108)$$

gdzie $\mu = \frac{m_e^*}{m_{hh}^*}$ jest stosunkiem masy efektywnej elektronów do masy efektywnej dziur ciężkich. Wysokoczęstotliwościowa stała dielektryczna ε_∞ jest zależna od składu molowego:

$$\varepsilon_\infty = -12.5x + 15.2 \quad (109)$$

Całka przekrycia periodycznych części funkcji Blocha jest liczona teoretycznie, co stanowi zagadnienie o dużym stopniu trudności. Landsberg w swojej monografii [48] (str. 272) zaproponował użyteczny wzór na liczenie $|F_1 F_2|^2$.

$$|F_1 F_2|^2 = \frac{1+\mu}{1+2\mu} \left(\mu + \frac{m_e^*}{m_0} \right) \quad (110)$$

W wielu pracach można spotkać różne wartości parametru $|F_1 F_2|^2$, które autorzy przyjmują arbitralnie, aby dopasować wyniki obliczeń do wyników eksperymentalnych, zazwyczaj w przedziale wartości od 0.1 do 0.3.

Z kolei G_{hh} można przedstawić w postaci:

$$G_{hh} = \frac{p_0}{\tau_{A_7}^i} \quad (111)$$

Czas $\tau_{A_7}^i$ jest proporcjonalny do czasu $\tau_{A_1}^i$ i wyraża się zależnością:

$$\tau_{A_7}^i = \gamma \tau_{A_1}^i \quad (112)$$

Współczynnik γ traktowany jest jako stała służąca dopasowaniu do danych eksperymentalnych i zazwyczaj przyjmuje się wartości od 3 do 6. Korzystając z rezultatów Casselman'a i Petersen'a [55] współczynnik γ uzależniono w pracy od temperatury w następujący sposób:

$$\gamma = 3 + \frac{3(T - 50)}{250} \quad (113)$$

Wzór (113) ma zastosowanie dla $T > 50\text{K}$ i dla składów $0,1 < x < 0,4$.

Natomiast Chen i wsp. [56], przyjęli tam nienaturalnie wysoką wartość współczynnika $\gamma = 20$, aby uzyskać dopasowanie do wyników eksperymentu. W dalszej części rozprawy wykorzystano dane eksperymentalne czasu życia z wyżej wymienionej pracy [56], aby zweryfikować wyniki obliczeń opisanego w rozprawie programu numerycznego. Wyniki wskazują na to, że autorzy pracy [56] popełnili błąd przy wyznaczaniu koncentracji dziur, która w rzeczywistości zamiast $2,6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ powinna wynosić około $1,5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ w 77 K. Wtedy dopasowanie do eksperymentu, które zostało opisane w dalszej części rozprawy, uzyskano przy $\gamma \approx 3$, co mieści się w przedziale powszechnie szacowanych wartości. Autorzy nie podali niestety sposobu pomiaru koncentracji dziur, co utrudnia zadanie znalezienia ewentualnej pomyłki.

Pozostał problem przyjęcia właściwej wartości masy efektywnej elektronów i dziur lekkich, które są funkcją szerokości przerwy energetycznej. W przypadku liczenia czasów życia Augera powszechnym sposobem jest zastosowanie tzw. masy efektywnej przewodnictwa. Czyli we wzorach opracowanych przez Beattie'a i Landsberg'a [47] na czas życia Augera należy podawać uśrednioną po wszystkich stanach pasma przewodnictwa, masę efektywną elektronów. Podobnie można postąpić z masą dziur lekkich. Stosując to podejście można ponadto uwzględnić wpływ domieszkowania na uśrednioną masę efektywną. Domieszkowanie ma wpływ na wartość energii Fermiego, a więc też na statystykę obsadzeń stanów przez elektrony. Efektywną masę elektronów pasma przewodnictwa m_c policzono jako uśrednioną drugą pochodną krawędzi pasma przewodnictwa po wektorze falowym. Z równania dla procesów A1, wynika, że

$$\frac{\partial^2 E_c}{\partial k^2} = \frac{E_g}{4} \frac{16P^2}{3E_g^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{8k^2P^2}{3E_g^2}}} \left(1 - \frac{\frac{8kP^2}{3E_g^2}}{1 + \frac{8k^2P^2}{3E_g^2}} \right) + \frac{\hbar^2}{m_0} \quad (114)$$

Natomiast uśrednioną masę efektywną w paśmie przewodnictwa wyznaczono z zależności:

$$\frac{1}{\langle m_c \rangle} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\partial^2 E_c}{\partial k^2} \frac{dk}{1 + \exp((E_c - F)/k_B T)}}{\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{1 + \exp((E_c - F)/k_B T)}} \quad (115)$$

Podobnie należy podstąpić z uśrednioną po stanach pasma dziur lekkich, masą efektywną m_{lh} :

$$\frac{1}{\langle m_{lh} \rangle} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\partial^2 E_{lh}}{\partial k^2} \frac{dk}{1 + \exp((F - E_{lh})/k_B T)}}{\int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{1 + \exp((F - E_{lh})/k_B T)}} \quad (116)$$

Korzystając z zależności dla procesu A2, otrzymano:

$$\frac{\partial^2 E_{lh}}{\partial k^2} = -\frac{4E_g P^2}{3E_g^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}}} \left(1 - \frac{\frac{8kP^2}{3E_g^2}}{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right) - \frac{\hbar^2}{m_0} \quad (117)$$

Tak zdefiniowana masa efektywna m_{lh} jest liczbą ujemną, ale do obliczeń należy przyjąć jej wartość bezwzględną.

Ostatecznie, łączna szybkość rekombinacji dla mechanizmów A1 i A7 wynosi:

$$R_A = G_{ee} \frac{n^2 p}{n_0^2 p_0} + G_{nh} \frac{p^2 n}{p_0^2 n_0} \quad (118)$$

Natomiast szybkość generacji:

$$G_A = G_{ee} \frac{n}{n_0} + G_{nh} \frac{p}{p_0} \quad (119)$$

4. Wypadkowe czasy życia elektronów i dziur

Rozpoczynając rozważenia na temat czasów życia elektronów i dziur, należy cofnąć się do opisanych wcześniej wyrażeń (15) i (16). Dodatkowo w tym rozdziale zostaną wykorzystane wszystkie przedstawione w Rozdziale 3 wyrażenia na szybkości rekombinacji elektronów i dziur przez pryzmat opisanych wyżej mechanizmów G-R.

Korzystając z zależności (35), (92) i (93), można czas życia elektronów i dziur w procesie SRH zdefiniować następująco:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_n^{SHR}} &= \frac{\partial R_T}{\partial n} + \frac{\partial R_T}{\partial p} \frac{Z1}{Z2} + \frac{\partial R_T}{\partial f_T} Z_N = \frac{c_n c_p p N_T}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} - \frac{R_T c_n}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} \\ &+ \frac{c_n c_p p N_T}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} \frac{Z1}{Z2} - \frac{R_T c_p}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} \frac{Z1}{Z2} - \frac{R_T}{f_T} Z_n \end{aligned} \quad (120a)$$

Czyli

$$\frac{1}{\tau_n^{SHR}} = \frac{c_n c_p p N_T \left(1 + \frac{Z1}{Z2}\right) - R_T \left(c_n + c_p \frac{Z1}{Z2}\right)}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} - \frac{R_T}{f_T} Z_n \quad (120)$$

Natomiast czas życia dziur wyrazimy w postaci:

$$\frac{1}{\tau_p^{SHR}} = \frac{c_n c_p p N_T \left(1 + \frac{Z2}{Z1}\right) - R_T \left(c_p + c_n \frac{Z2}{Z1}\right)}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1\right) + c_p (p + \alpha p_1)} - \frac{R_T}{f_T} Z_p \quad (121)$$

Szybkość rekombinacji z udziałem poziomów donorowych, korzystając z relacji (62), wynosi:

$$r_{ND} = G_{RN_D} n N_D^+ + G_{pN_D} n N_D^+ + G_{AN_D} n^2 N_D^+ \quad (122a)$$

Natomiast czas życia elektronów korzystając z wyrażenia (60) wyraża się następująco:

$$\frac{1}{\tau_n^{ND}} = \frac{\partial r_{ND}}{\partial n} + \frac{\partial r_{ND}}{\partial N_D^+} Z_{N_D^+} \quad (122b)$$

Czyli:

$$\frac{1}{\tau_n^{ND}} = G_{RN_D} N_D^+ + G_{pN_D} N_D^+ + 2G_{AN_D} n N_D^+ + (G_{RN_D} n + G_{pN_D} n + G_{AN_D} n^2) Z_{N_D^+} \quad (122)$$

Z kolei szybkość rekombinacji z udziałem poziomów akceptorowych, korzystając z relacji (85), wynosi:

$$r_{N_A} = G_{RN_A} p N_A^- + G_{pN_A} p N_A^- + G_{AN_A} p^2 N_A^- \quad (123a)$$

Natomiast czas życia dziur korzystając z wyrażenia (82) zdefiniowano następująco:

$$\frac{1}{\tau_p^{N_A}} = \frac{\partial r_{N_A}}{\partial p} + \frac{\partial r_{N_A}}{\partial N_A^-} Z_{N_A^-} \quad (123b)$$

Czyli:

$$\frac{1}{\tau_p^{N_A}} = G_{RN_A} N_A^- + G_{pN_A} N_A^- + 2G_{AN_A} p N_A^- + (G_{RN_A} p + G_{pN_A} p + G_{AN_A} p^2) Z_{N_A^-} \quad (123)$$

Czas życia elektronów i dziur zdeterminowany międzypasmową rekombinacją promienistą, po uwzględnieniu zjawiska reabsorpcji można wyrazić zależnościami:

$$\frac{1}{\tau_n^{RAD}} = \frac{\partial R_{RAD}}{\partial n} + \frac{\partial R_{RAD}}{\partial p} \frac{Z1}{Z2} \quad (124a)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{RAD}} = \frac{\partial R_{RAD}}{\partial p} + \frac{\partial R_{RAD}}{\partial n} \frac{Z2}{Z1} \quad (124b)$$

Dodatkowo, korzystając z zależności (99) otrzymano:

$$\frac{1}{\tau_n^{RAD}} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta n_0 p_0} \left(p + n \frac{Z1}{Z2} \right) \quad \text{oraz} \quad \frac{1}{\tau_p^{RAD}} = q_0 \bar{\alpha} \frac{c}{\eta n_0 p_0} \left(n + p \frac{Z2}{Z1} \right) \quad (124)$$

Czasy życia elektronów i dziur ograniczony rekombinacją A1 i A7, przy zastosowaniu zależności (118) i (93) wyrażają się następująco:

$$\frac{1}{\tau_n^{A1}} = 2G_{ee} \frac{np}{n_0^2 p_0} + G_{ee} \frac{n^2}{n_0^2 p_0} \frac{Z1}{Z2} \quad (125)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{A1}} = 2G_{ee} \frac{np}{n_0^2 p_0} \frac{Z2}{Z1} + G_{ee} \frac{n^2}{n_0^2 p_0} \quad (126)$$

$$\frac{1}{\tau_n^{A7}} = G_{hh} \frac{p^2}{p_0^2 n_0} + 2G_{hh} \frac{pn}{p_0^2 n_0} \frac{Z1}{Z2} \quad (127)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{A7}} = 2G_{hh} \frac{pn}{p_0^2 n_0} + G_{hh} \frac{p^2}{p_0^2 n_0} \frac{Z2}{Z1} \quad (128)$$

Korzystając z zależności (120)-(128) można wyznaczyć wzór na obliczenie czasu życia nadmiarowych elektronów i dziur, z następujących wyrażeń:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_n^{SHR}} + \frac{1}{\tau_n^{ND}} + \frac{1}{\tau_n^{RAD}} + \frac{1}{\tau_n^{A1}} + \frac{1}{\tau_n^{A7}} \quad (129)$$

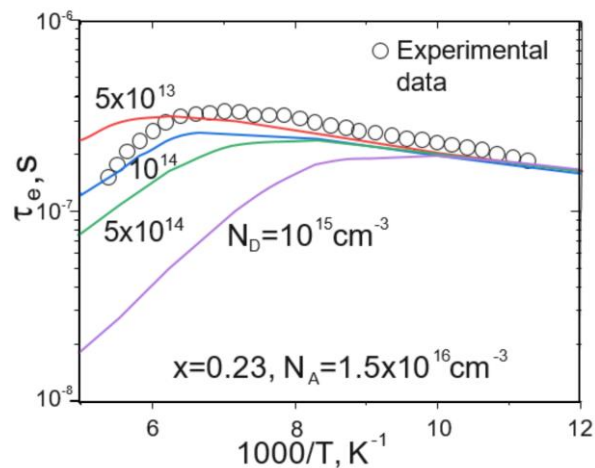
$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1}{\tau_p^{SHR}} + \frac{1}{\tau_p^{NA}} + \frac{1}{\tau_p^{RAD}} + \frac{1}{\tau_p^{A1}} + \frac{1}{\tau_p^{A7}} \quad (130)$$

Czasy życia elektronów i dziur określone zależnościami (129) i (130) mogą znacznie się różnić. Głównie jest to spowodowane przez składowe τ_n^{ND} i τ_p^{NA} oraz przez składową τ_n^{SHR} i τ_p^{SHR} . W materiałach domieszkowanych występują duże różnice pomiędzy czasem życia nośników mniejszościowych i większościowych. Odpowiedzi na pytanie, dlaczego tak się dzieje udzielają wyrażenia (129) i (130). W poniższym podrozdziale 4.1 oraz 4.1 zostały przedstawione obliczenia wykonane dla detektora HgCdTe o składzie molowym absorbera bliskim $x=0,2$, kolejno dla materiału typu p i typu n.

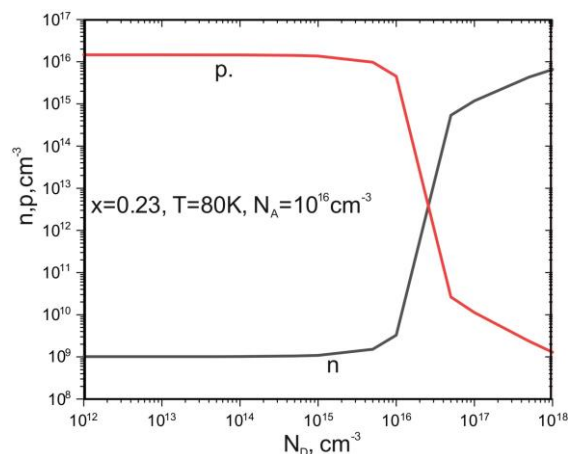
4.1 Materiał typu p

W materiale typu p nośnikami mniejszościowymi są elektrony i dokonywane pomiary czasu życia dotyczą czasu życia elektronów. W tym podrozdziale zestawiono dane eksperymentalne badaczy Qiu i wsp., dotyczące czasu życia elektronów w funkcji temperatury [57], z wyżej wyprowadzonymi obliczeniami, wykorzystanymi w autorskim programie do symulacji numerycznych. Dane eksperymentalne dotyczyły między innymi materiału o składzie $x=0.23$ i koncentracji domieszek (arsenu) równej $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Porównując do innych danych literaturowych, podana koncentracja domieszek miała stosunkowo wysoką wartość, a czasy życia w funkcji temperatury nie przekroczyły wartości 200-300 ns. W niniejszej pracy, założono, że koncentracja pułapek rtęciowych jest na poziomie 10^9 cm^{-3} . Aby pokazać doskonałą zgodność obliczeń teoretycznych czasu życia z eksperymentem, należy uwzględnić tylko rekombinację z udziałem zjonizowanych donorów i akceptorów wprowadzających stany energetyczne zlokalizowane blisko krawędzi pasm. Następnie należy obliczyć przekroje czynne dla trzech mechanizmów rekombinacyjnych przedstawionych wcześniej w Rozdziale 3 rozprawy. Znając przekroje czynne i energię jonizacji domieszek, wystarczy znać tylko jeden parametr, to znaczy

koncentrację domieszek, aby uzyskać dobrą zgodność z eksperymentem. Poniżej przedstawiono rezultaty obliczeń czasów życia w materiale typu p o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów równej $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Rys. 23 pokazuje, że rekombinacja poprzez płytkie stany donorowe, ma bardzo duży wpływ na czas życia elektronów (nośniki mniejszościowe) w zakresie temperatur powyżej 100 K. Jak widać na Rys. 24, dla koncentracji donorów poniżej 10^{16} cm^{-3} , koncentracja elektronów w niskich temperaturach pozostaje na tym samym poziomie około 10^9 cm^{-3} .



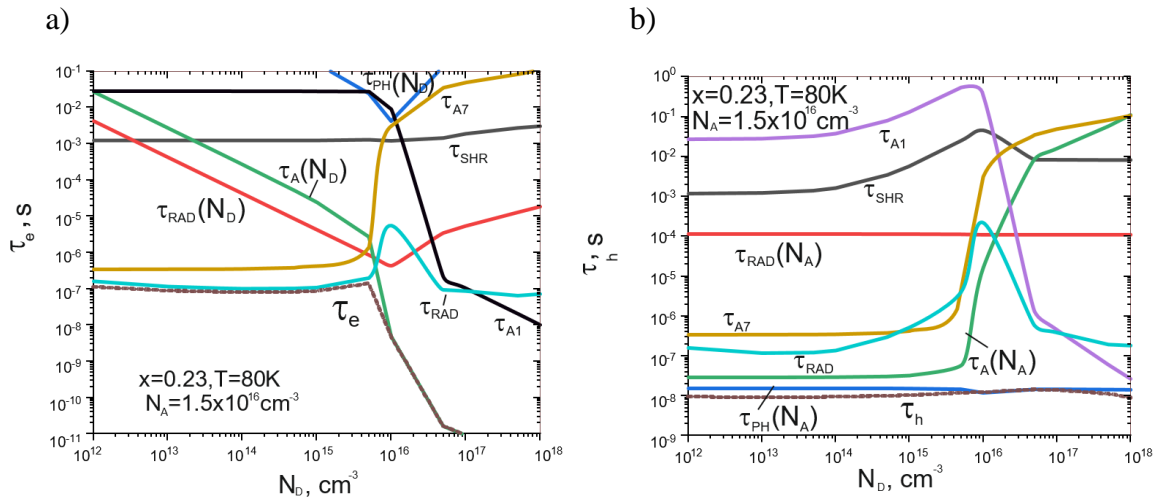
Rys. 23 Dane eksperymentalne czasu życia elektronów dla materiału typu p, o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$) – dane pochodzą z pracy [57]. Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) (linie ciągłe) dotyczą przypadków, gdy koncentracja donorów zmienia się od $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ do 10^{15} cm^{-3} .



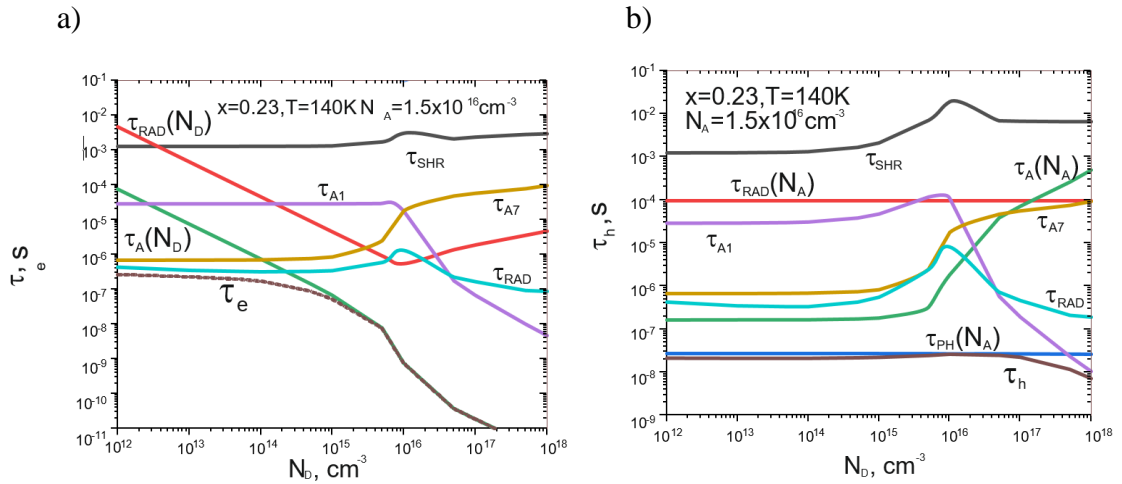
Rys. 24 Koncentracja elektronów i dziur w funkcji koncentracji donorów, w materiale o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów 10^{16} cm^{-3} .

Świadczy to również o tym, że koncentracja zjonizowanych donorów też pozostaje na stałym poziomie. Stąd wniosek, że szybkości rekombinacji z udziałem zjonizowanych donorów dla niskich temperatur nie powinna zależeć od koncentracji donorów. Aby to zjawisko dokładniej przeanalizować wykonano obliczenia dla poszczególnych składowych czasów życia τ_n i τ_p określonych zależnościami (114)-(123).

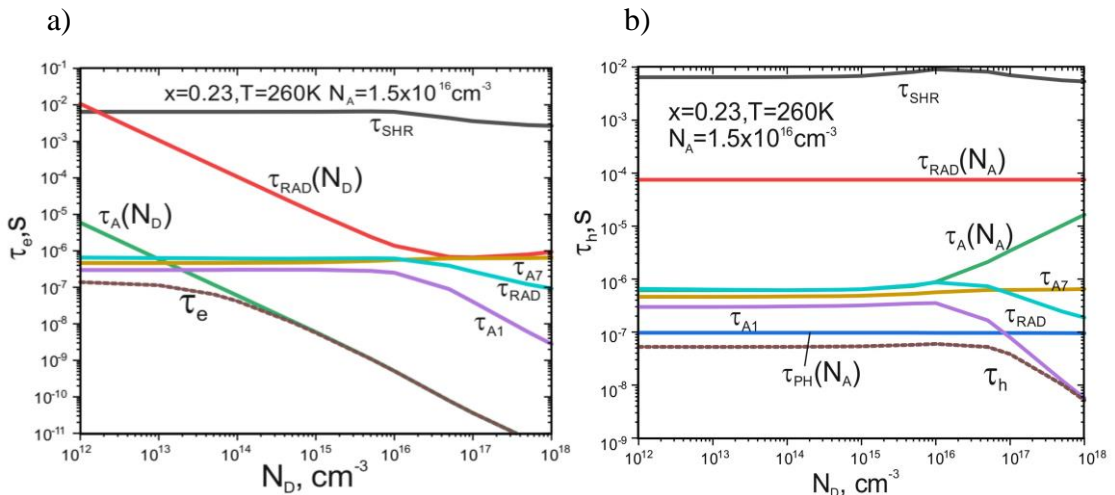
Na poniższych rysunkach przedstawiono wyniki obliczeń dla czasów życia elektronów i dziur zdeterminowanych przez różne mechanizmy G-R. Wyniki zostały przedstawione dla wybranych trzech temperatur: 80 K (Rys. 25), 140 K (Rys. 26) oraz 260 K (Rys. 27), w funkcji koncentracji donorów. Symbole τ_{RAD} , τ_{A1} , τ_{A7} oznaczają czas życia nośników ładunku zdeterminowany przez procesy międzypasmowe, odpowiednio: rekombinację promienistą, A1 i A7. Symbol τ_{SHR} oznacza czas życia zdeterminowany udziałem mechanizmu SRH i rekombinacji poprzez luki rtęci. Symbole $\tau_{PH}(N_D)$, $\tau_{RAD}(N_D)$ i $\tau_A(N_D)$ oznaczają czasy życia odpowiednio związane z: rekombinacją fononową, promienistą i Augera, z udziałem zjonizowanych donorów. Natomiast $\tau_{PH}(N_A)$, $\tau_{RAD}(N_A)$ i $\tau_A(N_A)$ dotyczą tych samych procesów, ale z udziałem zjonizowanych akceptorów. Analizując przedstawione wykresy, można zauważyć, że resztkowe domieszkowanie typu n, które zawsze występuje w strukturach HgCdTe, ma wpływ na czas życia elektronów (nośników mniejszościowych).



Rys. 25 Czas życia elektronów (Rys. 25a) i dziur (Rys. 25b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 80K.



Rys. 26 Czas życia elektronów (Rys. 26a) i dziur (Rys. 26b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 140K.

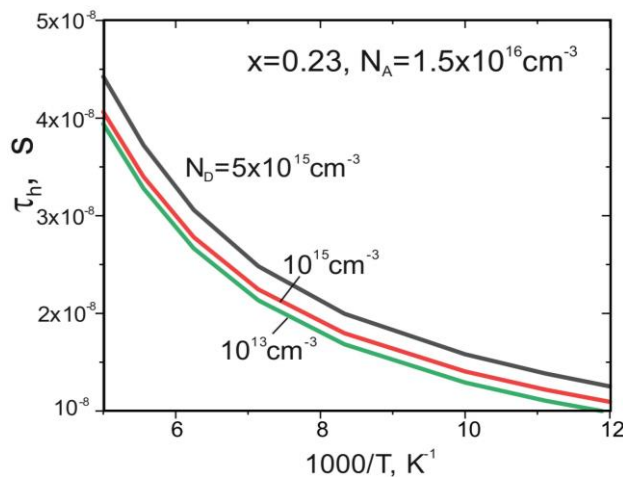


Rys. 27 Czas życia elektronów (Rys. 27a) i dziur (Rys. 27b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 260K.

W temperaturze 80 K i 140 K dla koncentracji donorów poniżej 10^{15} cm^{-3} , o czasie życia elektronów decydują procesy międzypasmowe, głównie A7 i rekombinacja promienista. Ale już w wyższych temperaturach (260 K) wzrasta udział mechanizmu A1 i procesów Augera z udziałem zjonizowanych donorów. Ten ostatni mechanizm jest dominujący, gdy koncentracja donorów przekracza wartość 10^{14} cm^{-3} . Udział mechanizmu SRH związanego z lukami rtęci jest pomijalnie mały. Widać na Rys. 23, bardzo dobrą zgodność z wynikami pomiarów uzyskano zakładając, że koncentracja donorów wynosi 10^{14} cm^{-3} , co jest bardzo prawdopodobne, i wynika z uwarunkowań technologicznych wytwarzania warstw

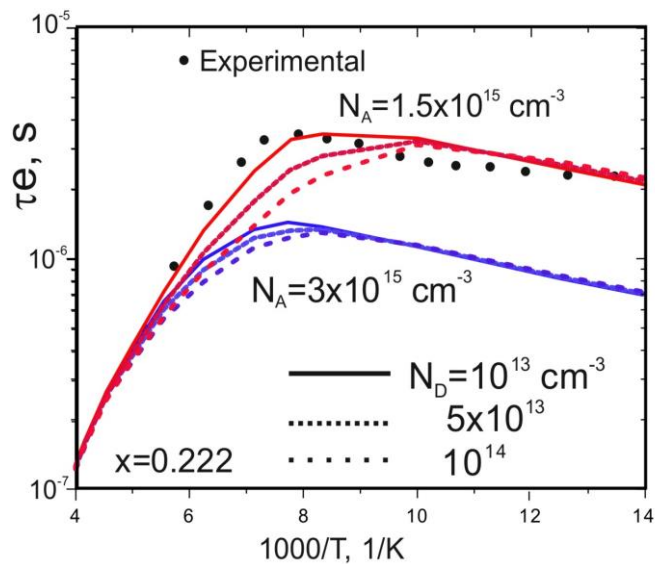
półprzewodnikowych z HgCdTe. Warto również wspomnieć o czasie nośników większościowych: zmiana koncentracji donorów nie ma wpływu na jego wartość, jeśli nie przekroczy ona poziomu $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Wtedy następuje zmiana typu przewodnictwa i dziury stają się nośnikami mniejszościowymi. Dla wszystkich trzech rozpatrywanych temperatur, o czasie życia większościowych dziur, decyduje mechanizm fononowy z udziałem zjonizowanych akceptorów. Mechanizm ten powoduje, że czas życia elektronów jest niemal dziesięciokrotnie dłuższy, niż czas życia dziur.

Rys. 28 potwierdza słabą zależność czasu życia dziur od koncentracji reszkowych domieszek donorowych. Zwiększenie koncentracji donorów tylko nieznacznie zwiększa czas życia dziur. Wzrost koncentracji donorów z poziomu 10^{13} cm^{-3} do poziomu $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ powoduje, że czas życia wzrasta około 1,5 krotnie. Czas, życia dziur zmniejsza się wraz ze zmniejszaniem temperatury. Zmniejszenie temperatury z 200 K do 80 K powoduje czterokrotne zmniejszenie czasu życia dziur.



Rys. 28 Czas życia dziur dla materiału typu p o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów na poziomie $1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$). Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (130) dotyczą trzech wybranych koncentracji donorów.

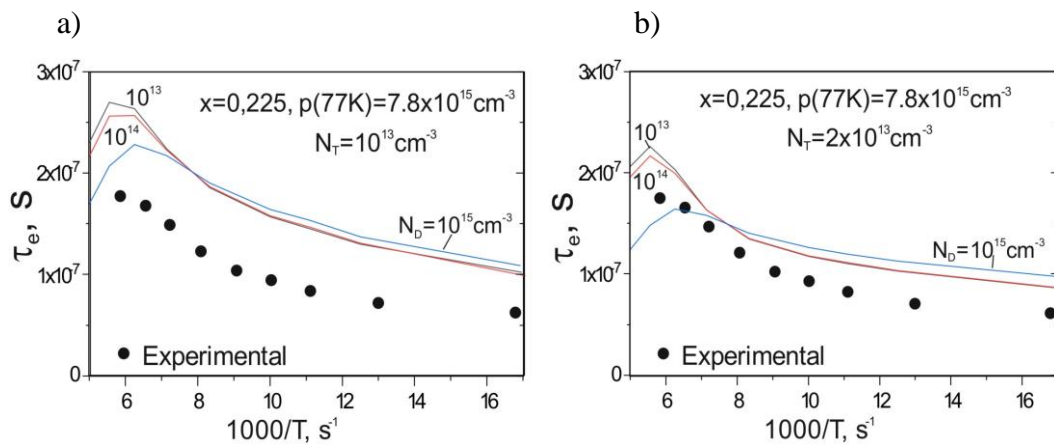
Chen i wsp. [56] przedstawili eksperymentalne pomiary czasu życia elektronów w materiale o składzie $x=0,222$ i koncentracji dziur (w 77 K) na poziomie $2,6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, a więc o rząd wielkości mniejszej, niż w strukturach prezentowanych przez badaczy Qiu i wsp. [57]. Przedstawia to Rys. 29.



Rys. 29 Dane eksperymentalne czasu życia elektronów dla materiału typu p o składzie $x=0,222$ i koncentracji akceptorów $2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$) pochodzą z pracy [56]. Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) dotyczą przypadku, gdy koncentracja akceptorów wynosi $1,5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (linie czerwone) i $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (linie niebieskie). Koncentracja donorów zmienia się od $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ do 10^{15} cm^{-3} . Obliczenia przeprowadzono dla trzech wybranych koncentracji reszkowych donorów.

Bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi uzyskano przy założeniu, że koncentracja akceptorów wynosi $1,5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Jest to wartość niższa, niż podają autorzy. Gdyby przyjąć w obliczeniach podaną przez nich koncentrację domieszek, wyniki obliczeń byłyby około 1,5 krotnie niższe. Ich dane dotyczące koncentracji akceptorów, mogą budzić pewne wątpliwości. Jak wcześniej wspomniano, aby uzyskać zgodność z eksperymentem czasu życia A7 badacze Qiu i wsp. [57] przyjęli wartość współczynnika γ , będącego stosunkiem czasu życia A7 do A1 w materiale samoistnym równą 20. Jest to wartość dużo wyższa, niż wartości przyjmowane przez innych autorów oraz wartości oszacowane przez Casselman'a i Petersen'a [55]. Gdyby przyjęta w eksperymencie koncentracja była na poziomie $1,5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, wtedy uzyskano by doskonałą zgodność z eksperymentem, bez zawyżania wartości współczynnika γ . W niniejszej pracy, obliczenia przeprowadzono zakładając, że koncentracja pułapek (luk rtęci) wynosi 10^{12} cm^{-3} i ma znikomy wpływ na wartość czasu życia nośników ładunku. Fastow i Nemirowsky [51] mierzyli czas życia nośników wzbudzonych optycznie w strukturach typu p, o składzie molowym $x=0,225$ i koncentracji dziur rzędu 10^{16} cm^{-3} , postulując, że oprócz poziomego pułapkowego związanego z lukami rtęci, rekombinacja może zachodzić poprzez inne stany zlokalizowane

w przerwie energetycznej. Aby dopasować się do wyników eksperymentalnych wyznaczyli poziom akceptorowy zlokalizowany w ok. 15 meV powyżej krawędzi pasma walencyjnego. Dobierając odpowiednią gęstość stanów i gęstość pułapek rtęciowych, w większości rozważnych przypadków, uzyskali dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi. Poniżej przedstawiono zestawienie literaturowych danych eksperymentalnych, dotyczące dwóch struktur, oraz autorskich obliczeń, przy założeniu, że elektrony rekombinują poprzez stany donorowe związane z resztkowymi domieszkami typu n (Rys. 30). Ważną rolę odgrywają tu luki rtęci, których wpływ na czas życia jest istotny, po przekroczeniu koncentracji 10^{13} cm^{-3} . Jednak poprawny kształt charakterystyk temperaturowych można uzyskać jedynie, przy wzięciu pod uwagę również rekombinacji poprzez resztkowe donory.

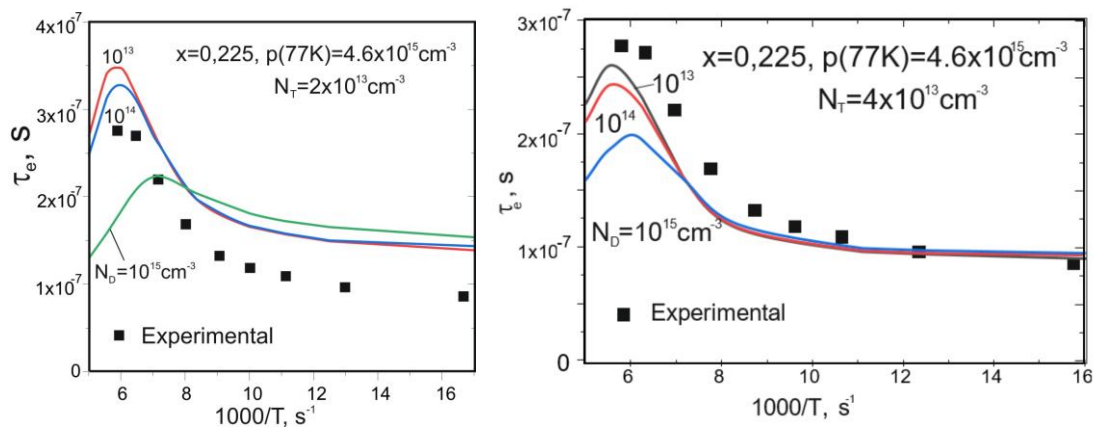


Rys. 30 Temperaturowa zależność czasu życia elektronów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [51]. Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dla wybranych koncentracji resztkowych donorów uzyskano z relacji (129).

Rys. 30 pokazuje temperaturową zależność czasu życia elektronów obliczoną przy pomocy zależności (129), dla materiału o koncentracji dziur (p), w $T=77 \text{ K}$, równej $7,8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, oraz koncentracji luk rtęci $N_T=10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (Rys. 30a) i $N_T=2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (Rys. 30b). Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dotyczą koncentracji resztkowych donorów $N_D=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, 10^{14} cm^{-3} i 10^{15} cm^{-3} . Bardzo dobrą zgodność z wynikami pomiarów uzyskano na Rys. 30b.

Rys. 31 pokazuje temperaturową zależność czasu życia elektronów obliczoną przy pomocy zależności (129) dla materiału o koncentracji dziur (p), w $T=77 \text{ K}$, równej $4,6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, oraz koncentracji luk rtęci $N_T=12 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (Rys. 31a) i $N_T=4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (Rys. 31b). Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dotyczą koncentracji resztkowych donorów

$N_D=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, 10^{14} cm^{-3} i 10^{15} cm^{-3} . Bardzo dobrą zgodność z wynikami pomiarów uzyskana na Rys. 31b. Czasy życia są nieco wyższe niż na wcześniejszych wykresach.



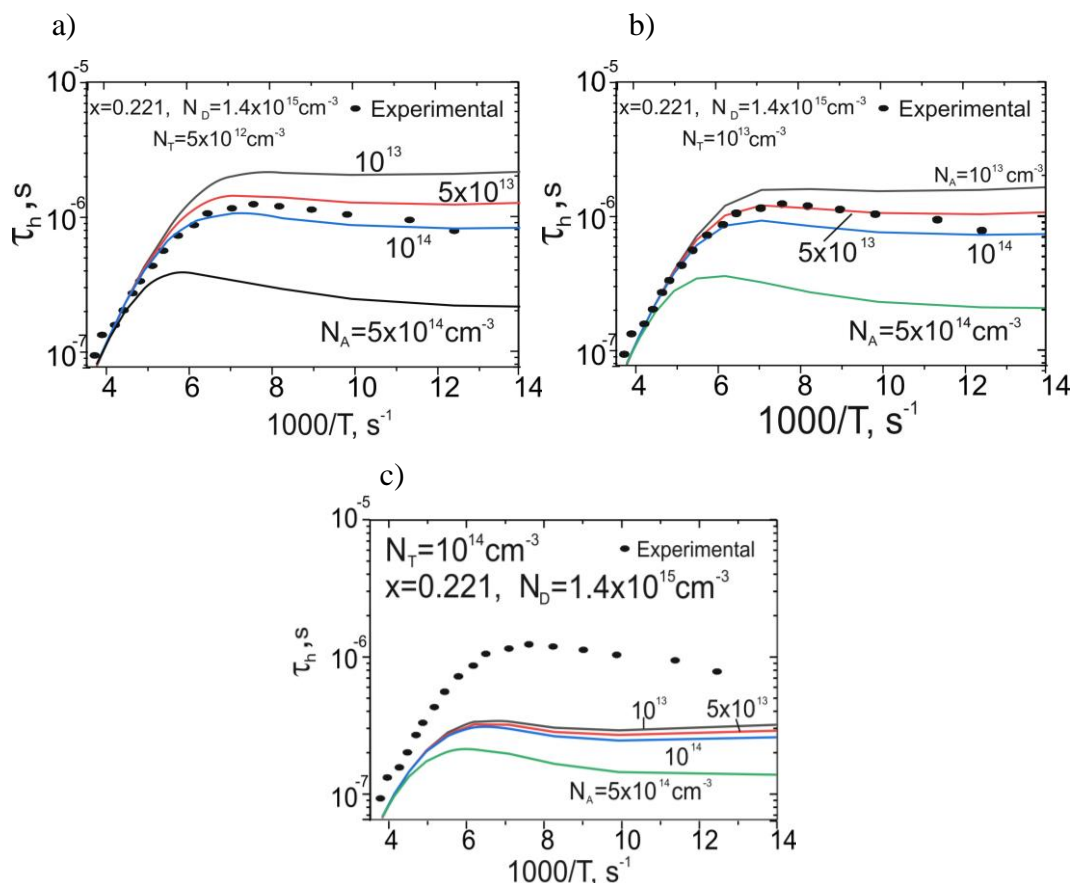
Rys. 31 Temperaturowa zależność czasu życia elektronów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [51]. Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dla wybranych koncentracji resztkowych donorów uzyskano z relacji (129).

Podsumowując, przyjęcie koncentracji luk rtęci na poziomie ok. 10^{14} cm^{-3} i koncentracji resztkowych donorów na poziomie wielokrotności 10^{14} cm^{-3} , pozwala otrzymać bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi dla materiału typu p.

4.2 Materiał typu n

W materiale typu n nośnikami mniejszościowymi są dziury i dokonywane pomiary czasu życia dotyczą czasu życia dziur. Wyniki obliczeń przedstawiono w konfrontacji z danymi eksperymentalnymi na Rys. 32. Analizując materiał typu n, optymalizowany na pracę w dalekiej podczerwieni, skorzystano z danych eksperymentalnych przedstawionych przez badaczy Wijewarnasuriya i wsp. [58]. W tellurku kadmowo-rtęciowym o składzie molowym $x=0,221$ i koncentracji donorów $1,4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, mierzono czas życia nośników mniejszościowych (dziur) w funkcji temperatury. Wyniki eksperymentalne tych pomiarów, przedstawione jako punkty na wykresie, pochodzą z pracy [58], a autorskie wyniki obliczeń w oparciu o zależność (130), przedstawiają linie ciągłe. Czas życia nośników determinuje koncentracja domieszek akceptorowych. Wraz ze zwiększaniem koncentracji akceptorów czas życia dziur silnie maleje, szczególnie w niższych temperaturach. W wyższych temperaturach, gdzie koncentracja samoistna (n_i) jest wysoka, dominują międzypasmowe

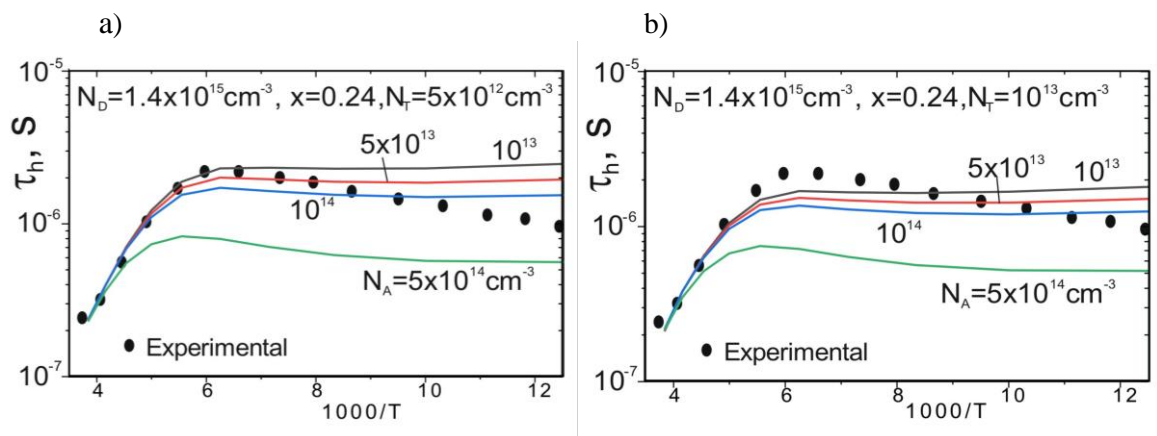
procesy Augera. Koncentracja domieszek akceptorowych, dla temperatur powyżej 200 K, wywiera niewielki wpływ na koncentrację nośników, dlatego czas życia prawie nie zależy od koncentracji akceptorów. Bardzo dobrą zgodność z eksperymentem uzyskano dla koncentracji akceptorów równej $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Można też zaobserwować na Rys. 32c, wpływ koncentracji luk rtęci na zmianę czasu życia, po przekroczeniu poziomu 10^{13} cm^{-3} . Z obliczeń numerycznych dla różnych kombinacji wyżej wymienionych parametrów, wynika, że najlepsze dopasowanie do danych eksperymentalnych można otrzymać, gdy $N_T=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, a $N_A=5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Różnice w dopasowaniu krzywych eksperymentalnych z przebiegami wyliczonymi numerycznie dla niskich temperatur, można interpretować tym, że w realnych strukturach występuje również rekombinacja powierzchniowa, której nie uwzględniono w tym modelu obliczeń. Wywiera ona różny wpływ na parametry przyrządu, w zależności od rodzaju powierzchni i sposobów jej obróbki chemicznej w celu ograniczenia rekombinacji powierzchniowej. Wijewarnasuriya i wsp. [58] w swojej publikacji, nie podają szczegółów dotyczących techniki pomiaru, wielkości struktur i parametrów powierzchni.



Rys. 32 Czas życia dziur w funkcji odwrotności temperatury dla wybranych koncentracji akceptorów N_A i pułapek (luk rtęci) N_T . Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [58].

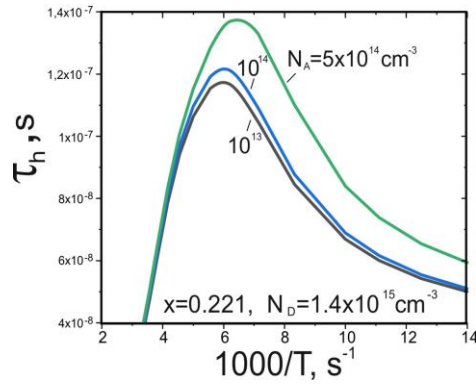
Rys. 32a $N_T=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, Rys. 32b $N_T=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, Rys. 32c $N_T=10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Rys. 33 przedstawia obliczenia dla materiału typu n, o innym składzie molowym $x=0,24$ i koncentracji donorów $1,4 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$. W tym przypadku dane eksperymentalne pochodzą z pracy Chang i wsp. [54]. Dobrą zgodność z eksperymentem uzyskano dla koncentracji resztkowych akceptorów w przedziale od 10^{14}cm^{-3} do $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$. Nachylenie charakterystyki eksperymentalnej w dół, wraz ze spadkiem temperatury, jest prawdopodobnie wynikiem wpływu rekombinacji powierzchniowej. Z uwagi na zwiększającą się długość drogi dyfuzji dziur wraz ze zmniejszaniem się temperatury, wpływ rekombinacji powierzchniowej na czas życia dziur znacząco wzrasta.

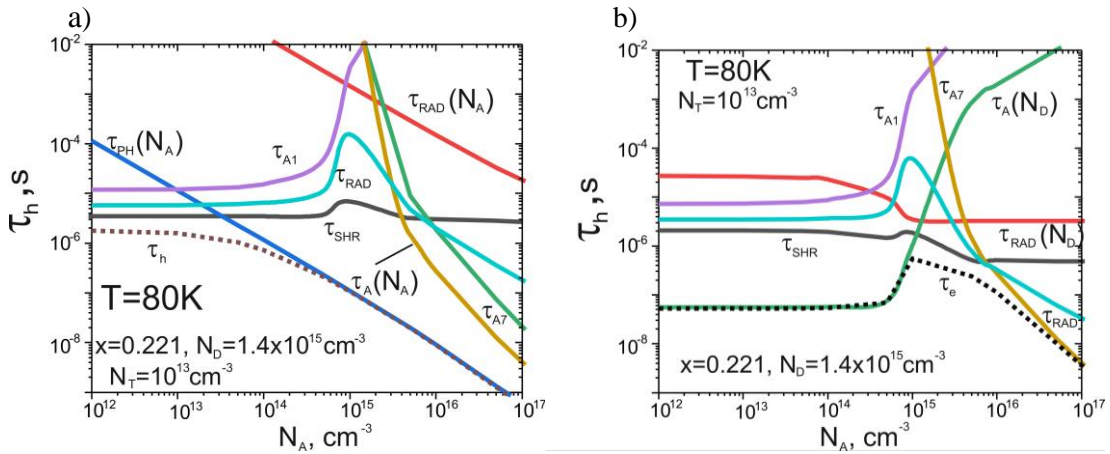


Rys. 33 Czas życia dziur w funkcji odwrotności temperatury dla wybranych koncentracji akceptorów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [54].

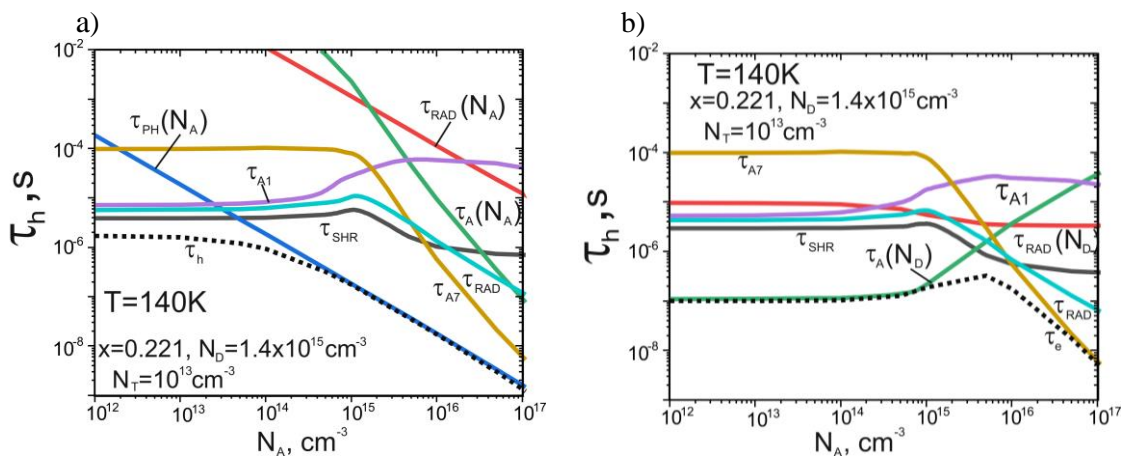
Rys. 34 przedstawia obliczone zależności temperaturowe czasu życia nośników większościowych (elektronów) w strukturze o składzie molowym $x=0,221$ i koncentracji donorów $1,4 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$, dla trzech wybranych wartości koncentracji resztkowych akceptorów. Wpływ koncentracji akceptorów na czas życia elektronów jest stosunkowo niewielki. Czas życia zmienia się z temperaturą i osiąga maksimum dla temperatur około 150-160 K. Można również zaobserwować ponad dwukrotne zmniejszenie czasu życia, gdy struktura jest schłodzona do temperatury ciekłego azotu. Natomiast zwiększanie temperatury powyżej 160 K powoduje szybki spadek wartości czasu życia, z uwagi na szybki wzrost rekombinacji Augera. Dobrym zobrazowaniem udziału poszczególnych mechanizmów G-R determinujących czas życia nośników mniejszościowych i większościowych w przekroju temperatur od 80 K do 260 K, są: Rys. 35 Rys. 36 i Rys. 37.



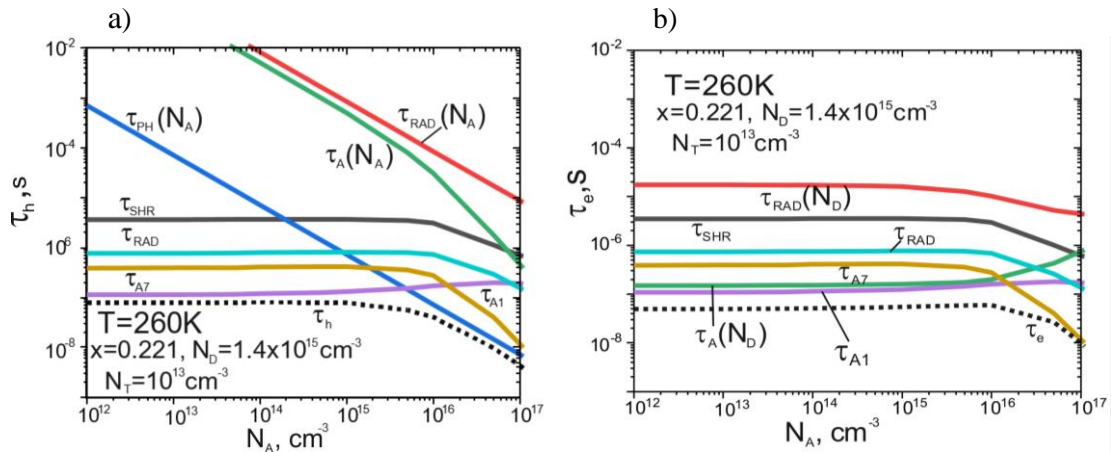
Rys. 34 Czas życia elektronów dla materiału typu n o składzie $x=0,221$ i koncentracji donorów $1,4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$). Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) dotyczą trzech wybranych koncentracji akceptorów.



Rys. 35 Czas życia dziur (Rys. 35a) i elektronów (Rys. 35b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 80K.



Rys. 36 Czas życia dziur (Rys. 36a) i elektronów (Rys. 36b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 140K.

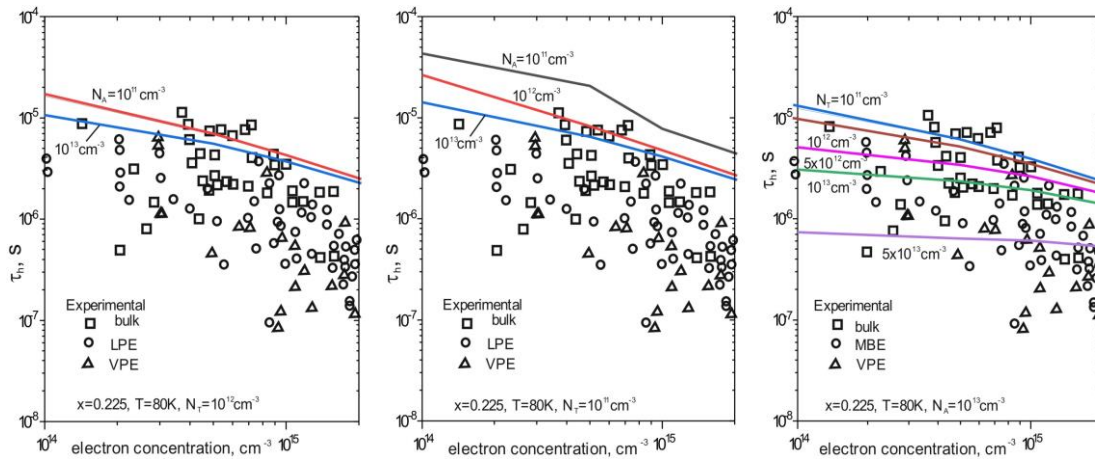


Rys. 37 Czas życia dziur (Rys. 37a) i elektronów (Rys. 37b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 260K.

Analizując powyższe wykresy można ocenić wpływ reszkowego domieszkowania typu p, na czas życia zarówno nośników mniejszościowych (dziur) jak i większościowych elektronów. W temperaturze 80 K i 140 K, dla koncentracji akceptorów powyżej 10^{14}cm^{-3} o czasie życia dziur decyduje rekombinacja fononowa z udziałem poziomów akceptorowych. Dla mniejszych koncentracji akceptorów znaczący jest udział mechanizmu SRH (luki rtęci) oraz rekombinacji Auger 1 i międzypasmowej rekombinacji promienistej. W temperaturze 260 K dla koncentracji akceptorów poniżej 10^{15}cm^{-3} przeważa mechanizm międzypasmowy A1, ale widać też znaczący udział rekombinacji Auger 7. Podobnie jak to miało miejsce w materiale typu p, udział mechanizmu SHR związanego z lukami rtęci jest pomijalnie mały. Ponadto mechanizm SRH silnie zależy od koncentracji pułapek N_T . Na czas życia nośników większościowych nie wpływa zmiana koncentracji akceptorów, o ile nie zmieni się w ten sposób typ przewodnictwa. W przypadku nośników większościowych, mechanizmem decydującym w niższych temperaturach jest rekombinacja Augera z udziałem zjonizowanych akceptorów, w wyższych znaczący jest udział międzypasmowego mechanizmu A1.

Ostatnim przykładem analizowanym w tym podrozdziale będzie wpływ koncentracji luk rtęci i koncentracji akceptorów na czas życia w materiale typu n o składzie $x=0,225$, w temperaturze 80K. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy Lopes'a i wsp. [59], gdzie zaprezentowane zostały struktury wysokiej jakości, o niskiej koncentracji domieszek donorowych. Koncentracja elektronów zmieniała się w przedziale od 10^{14}cm^{-3} do $2 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ (80 K). Na Rys. 38 widać, że na czas życia nośników ma silny wpływ koncentracja luk rtęci, jeśli przekroczy ona poziom 10^{12}cm^{-3} . Dla koncentracji poniżej

10^{12} cm^{-3} znaczącą rolę odgrywa wpływ koncentracji akceptorów (Rys. 38b). Najwyższe wartości czasu życia otrzymano dla koncentracji elektronów około $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (80 K), powyżej $10 \text{ } \mu\text{s}$. Zgodność obliczeń uzyskano dla koncentracji luk rtęci poniżej 10^{12} cm^{-3} i koncentracji akceptorów w przedziale od 10^{11} cm^{-3} do 10^{12} cm^{-3} . Otrzymane wyniki potwierdzają wcześniejsze wnioski dotyczące konieczności uwzględnienia koncentracji resztkowych domieszek, aby prawidłowo obliczyć czas życia nośników mniejszościowych.



Rys. 38 Zależność czasu życia dziur od koncentracji elektronów w strukturach o składzie molowym $x=0,225$, w temperaturze 80 K – wyniki dla wybranych wartości koncentracji luk rtęci N_T i akceptorów N_A . Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [59]. Linie ciągłe ilustrują wyniki obliczeń. Dane eksperymentalne: bulk-materiał otrzymywany metodą Bridgmana, MBE- epitaksja z wiązki molekularnej, VPE-epitaksja z fazy pary.

5. Dyslokacje niedopasowania

5.1 Dyslokacje niedopasowania w heterostrukturach HgCdTe i metoda obliczania ich gęstości

Dyslokacje niedopasowania są skutkiem naprężeń sieciowych, które powstają na styku dwóch warstw epitaksjalnych, głównie różniących się stałą sieciową zależną od składu molowego. W analizowanych strukturach zbudowanych z tellurku kadmowo-rtęciowego, osadzona na GaAs warstwa buforowa CdTe wywołuje naprężenia sieciowe, które są źródłem powstawania dyslokacji niedopasowania. Ich główną rolą jest relaksacja powstałych naprężeń. Hodowana na CdTe heterostruktura z HgCdTe posiada dyslokacje niedopasowania powstające głównie w obszarach zmiany składu molowego. Mimo, że niedopasowanie sieciowe w heterostrukturach z HgCdTe jest znacznie mniejsze niż np. w heterostrukturach z InAsSb, to w HgCdTe z uwagi na słabsze wiązania, niż w związkach III-V, dyslokacje generują się znacznie łatwiej. Z punktu widzenia procesów G-R, istniejące dyslokacje generują dodatkowy kanał dla rekombinacji SHR i przyczyniają się do redukcji czasu życia nośników ładunku. Dlatego możliwość teoretycznego oszacowania gęstości dyslokacji w danej heterostrukturze, a następnie obliczenie szybkości procesów G-R, jest kluczowym zagadnieniem na etapie wytwarzania detektorów podczerwieni. Program opracowany przez prof. Józwickowskiego posiada taką możliwość, co stanowi jego unikatowość, której nie posiadają komercyjne programy do modelowania przyrządów półprzewodnikowych.

Korzystając z tego programu, wyznaczono przestrzenny rozkład naprężeń w sieci krystalicznej heterostruktur zbudowanych z HgCdTe, wyhodowanych na podłożu GaAs [60]. Program oblicza również dodatkowo naprężenia powstałe w wyniku zginania struktur w wyniku niedopasowania sieci krystalicznej pomiędzy różnymi warstwami heterostruktury. Średnie odległości między liniami dyslokacji w poszczególnych interfejsach obliczono z warunku minimum energii sprężystej, tj. energii wynikającej z oddziaływania pól naprężeń i odkształceń spowodowanych niedopasowaniem i zginaniem sieci krystalicznej oraz obecnością dyslokacji.

Dotychczasowe badania nad HgCdTe koncentrowały się głównie na wzroście, domieszkowaniu i charakteryzacji struktur. Najlepszym materiałem na podłoża dla warstw epitaksjalnych był CdZnTe ze względu na dobre dopasowanie sieci krystalicznej. Jednak

jakość kryształu nie była jednolita w całej strukturze ze względu na zmieniającą się zawartość cynku. Inną ważną kwestią był wysoki koszt pozyskania podłoża CdZnTe, związany głównie z kontrolą zanieczyszczeń podczas wzrostu. Alternatywne podłoża (GaAs lub Si) wykazały szereg zalet w porównaniu do podłoży CdZnTe, np. z punktu widzenia wymiarów podłoża i niskiego kosztu produkcji. Jedynym nierozwiązanym problemem pozostało niedopasowanie sieciowe między GaAs, a warstwą epitaksjalną. Jednak naprężenia sieci krystalicznej wynikające z dużego niedopasowania sieciowego warstw, można skutecznie zredukować poprzez wprowadzenie warstwy buforowej i tworzące się tam dyslokacje. Zastosowanie warstwy buforowej z CdTe pozwala na izolację defektów powstających na styku podłoże – warstwa buforowa, od epitaksjalnej warstwy HgCdTe. Jako podłoża dla epitaksjalnych warstw HgCdTe często stosuje się GaAs o orientacji krystalograficznej (100) lub (111), co opisał Ponce i wsp. [61]. Rzadziej stosowane są również inne orientacje krystalograficzne, np. prezentowane w pracy Sidorov'a i wsp. [62] epitaksjalne warstwy HgCdTe na podłożach GaAs (013) i Si (013), natomiast warstwy buforowe ze wiązków ZnTe i CdTe, które umożliwiły zachowanie orientacji zbliżonej do orientacji warstwy HgCdTe, pomimo dużego niedopasowania parametrów sieci. Korzystając z transmisyjnej mikroskopii elektronowej, odkryli sieć dyslokacji niedopasowania na granicy podłoże-bufor i zmierzili kąty rotacji sieci w wyniku tworzenia się dyslokacji. Jest to prawdopodobnie jedna z przyczyn powstawania dyslokacji przeszywania w warstwie epitaksjalnej. Zgłębienie mechanizmu tego procesu stanowi duże wyzwanie do opracowania metody wyznaczania gęstości dyslokacji przeszywających z warunku minimalnej energii sprężystej.

W niniejszej pracy przedstawiono metodę numeryczną do oszacowania gęstości dyslokacji niedopasowania sieci. Użyte do eksperymentu heterostruktury HgCdTe były wytworzone we wspólnym laboratorium Wojskowej Akademii Technicznej i Vigo System S.A. przy użyciu metody osadzania z fazy gazowej metaloorganicznych związków chemicznych (MOCVD) [63] z użyciem podłoża GaAs, na warstwie buforowej CdTe. Silne niedopasowanie sieci krystalicznej między GaAs i CdTe jest przyczyną powstawania naprężeń, powodując deformację sieci krystalicznej zarówno podłoża, jak i CdTe. Znaczna relaksacja naprężeń następuje w wyniku powstania na granicy warstw, dyslokacji niedopasowania. Tworzą one sieci wzajemnie prostopadłych linii o jednakowych odstępach między liniami dyslokacji, leżącymi w płaszczyznach wzrostu. Jeśli na CdTe osadzimy strukturę $Hg_xCd_{1-x}Te$, to mimo, że niedopasowanie sieci krystalicznej poszczególnych

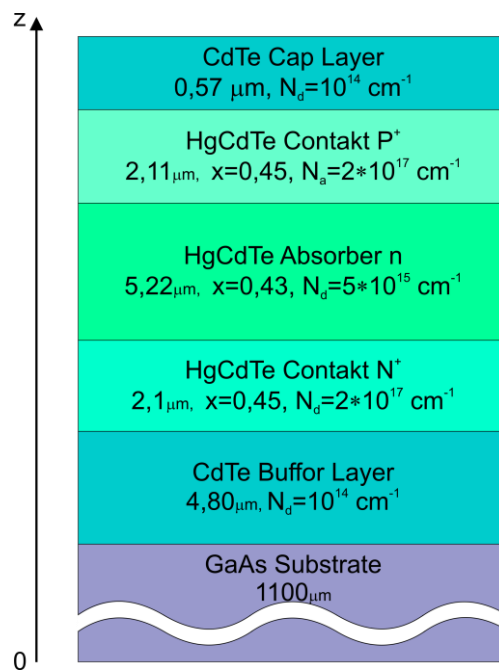
warstw heterostruktury jest stosunkowo niewielkie, to jednak dyslokacje niedopasowania występują. Dyslokacje te występują również w obszarach, w których następuje zmiana składu molowego x [25], [64]. Powyższe dyslokacje, razem z dyslokacjami przeszyca, wprowadzają dodatkowe stany energetyczne w przerwie energetycznej i tworzą dodatkowy kanał dla procesów generacji i rekombinacji opisanych przez mechanizm Shockley-Hall-Read (SRH) [24], [25], [65]–[67]. Tak więc, do przeprowadzenia symulacji numerycznych detektorów podczerwieni zbudowanych z opisanych wyżej heterostruktur, powinno się uwzględnić gęstość dyslokacji, aby poprawnie obliczyć szybkości generacji i rekombinacji nośników prądu. Na szybkość procesów SRH wpływa polaryzacja detektorów, głównie poprzez mechanizm tunelowania z udziałem pułapek (Trap Assisted Tunneling - TAT). Efekt ten jest doskonale widoczny na charakterystyce prądowo-napięciowej przyrządów, co potwierdza, że w wielu przypadkach gęstość dyslokacji determinuje parametry fotoelektryczne detektorów podczerwieni [20]. W pracach Jóźwikowska i wsp. [68], [69] przedstawiono sposób obliczania pseudomorficznego odkształcenia sieci w heterostrukturach InAsSb oraz opisano odkształcenia spowodowane zginaniem struktury. Ponadto określono, jak grubość podłoża i warstwy buforowej wpływa na wielkość odkształcenia sieci i gęstość generowanych dyslokacji. Jak dotąd, nie są znane żadne inne prace, w których teoretycznie określono gęstość dyslokacji niedopasowania sieci na wszystkich interfejsach wielowarstwowej heterostruktury. Ponadto wyniki obliczeń zweryfikowano danymi eksperymentalnymi z pracy Kim i Raseghi [70] oraz Xie i wsp.[71]. Dyslokacje niedopasowania sieci mają zarówno energię sprężystą, jak i energię elektryczną, ponieważ mają zdolność do gromadzenia ładunku elektrycznego. Uwzględniono ten fakt w pracy [60] oraz w niniejszej rozprawie. Motywacją do podjęcia tego tematu była potrzeba teoretycznego wyjaśnienia, dlaczego w heterostrukturach HgCdTe, osadzonych na podłożach GaAs, odkształcenia osiągają wartości minimalne, pomimo dużego niedopasowania sieci. Dodatkowo został określony wpływ energii elektrycznej dyslokacji na ich gęstość.

5.2 Rezultaty obliczeń i dyskusja

Dyslokacje niedopasowania powstają na skutek naprężeń sieciowych wywołanych różnicą pomiędzy stałymi sieci poszczególnych warstw heterostruktury. W przypadku

materiału $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ stała sieci jest liniową funkcją składu molowego x . W temperaturze 300 K wynosi ona dla HgTe (o składzie molowym $x=0$ w $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$), $a=6.489 \text{ \AA}$ (w przedziale temperatury od 0 do 300 K), a dla CdTe ($x=1$) $a=6.461 \text{ \AA}$ (od 1 K do 300 K). Stąd $a(x,300)=6.489 \text{ \AA}-0.02 \text{ \AA} x$. Z kolei współczynniki rozszerzalności cieplnej, zmieniające się liniowo ze składem molowym, wynoszą dla CdTe $4.9 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ i $4.0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ dla HgTe [38]–[40]. Tak więc można wyprowadzić poniższą zależność: $a(x,T)=(6.489 -0.02 x)[1+(4+0.9x)(T-300\text{K})10^{-6}\text{K}^{-1}]\text{\AA}$.

W pracy poddano analizie heterostrukturę HgCdTe w postaci warstw epitaksjalnych osadzonych na podłożu GaAs o orientacji (100). Model komputerowy tej struktury ma kształt walca o średnicy 300 μm . Parametry materiałowe przedstawiono na Rys. 39. Struktura została wytworzona we wspólnym laboratorium WAT-Vigo System S.A. i została wykorzystywana do konstrukcji detektora podczerwieni.



Rys. 39 Struktura detekcyjna P^+nN^+ zbudowana z HgCdTe osadzonego na podłożu z GaAs metodą MOCVD.

W rzeczywistych strukturach nie obserwuje się gwałtownych zmian parametrów w wyniku dyfuzji pierwiastków tworzących CdTe i $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, o różnym składzie molowym x . Interfejs GaAs-CdTe jest skokowy i ma największą gęstość dyslokacji niedopasowania. Można to teoretycznie obliczyć i wyznaczyć rozmiar odkształceń sieci

zrelaksowanych częściowo przez te dyslokacje. Jest to istotne przy projektowaniu detektorów podczerwieni, ponieważ dyslokacje mogą znacząco wpłynąć na czas życia nośników, a odkształcenia zmieniają położenie krawędzi pasma walencyjnego i przewodnictwa. Program komputerowy przy pomocy, którego obliczono odkształcenia sieci i wyznaczono gęstość dyslokacji niedopasowania, wyznacza najpierw odkształcenia pseudomorficzne. Dają one taką samą wartość stałej sieci α_{\parallel} w płaszczyźnie wzrostu warstw w całej strukturze. Następnie wyznaczane są parametry warstwy ulegającej zginaniu (promień krzywizny i położenie warstwy niezdeformowanej). Zginanie warstw, powoduje dodatkowe zmiany stałej sieci, ale jednocześnie nieco zmniejsza stan naprężeń sieciowych w strukturze. Pojawiające się odkształcenia sieci krystalicznej generują naprężenia, które osiągają mniejszą wartość, dzięki powstawaniu dyslokacji niedopasowania sieci, na powierzchniach międzyfazowych.

Jeśli warstwa epitaksjalna zawiera dyslokacje, o średniej odległości między dyslokacjami p , wówczas wyrażenie na odkształcenie przyjmuje postać [68]:

$$\epsilon_{\parallel}(z) = \frac{a_{\parallel} - a(z)}{a(z)} + \frac{z - h_b}{R} - \sum_{i=1}^n \delta(h_i) b_1(h_i) / p(h_i) \quad (131)$$

Pierwsza składowa opisuje odkształcenia wywołane przez pseudomorficzną stałą sieciową (α_{\parallel}), równoległą do płaszczyzn wzrostu warstwy, której wartość pozostaje taka sama w całym przekroju struktury. Natomiast $\alpha(z)$ oznacza stałą sieciową sieci zrelaksowanej. W tym wyrażeniu $b_1 = -b \sin \alpha \sin \beta$, b jest składową normalną wektora Burgersa do linii dyslokacji, h_i jest współrzędną i -tego interfejsu, $p(h_i)$ oznacza średnią odległość między liniami dyslokacji niedopasowania sieci w i -tym interfejsie.

Drugi człon równania określa odkształcenie spowodowane zginaniem. Zginanie umożliwia osiągnięcie równowagi momentów sił wewnętrznych na skutek pojawienia się dodatkowego naprężenia, które częściowo zmienia naprężenie odpowiedzialne za powstanie struktury pseudomorficzej. Niektóre warstwy są dodatkowo rozciągane, a niektóre dodatkowo ściskane. Tylko jedna warstwa zachowuje swój rozmiar pseudomorficzy.

Dyslokacje niedopasowania sieci generowane są w obszarach interfejsów przez co znacznie zmniejszają deformację sieci krystalicznej (trzecia składowa we wzorze (131)). W tym wyrażeniu $b_1 = -b \sin \alpha \sin \beta$, b jest składową normalną wektora Burgersa do linii dyslokacji, h_i jest współrzędną i -tego interfejsu, $p(h_i)$ oznacza średnią odległość między

liniami dyslokacji niedopasowania sieci w i-tym interfejsie. Dno heterostruktury ma krzywiznę o promieniu R. W pracy Józwickowska i wsp. [69] otrzymano wyrażenia:

$$\alpha_{\parallel} = \frac{\int_0^h \frac{G(z)}{a(z)} dz}{\int_0^h \frac{G(z)}{a^2(z)} dz}; \quad R \approx \frac{\int_0^h zG(z) \frac{a_{\parallel}}{a(z)} dz}{\int_0^h G(z) \left(1 - \frac{a_{\parallel}}{a(z)}\right) dz}; \quad h_b = \frac{\int_0^h G(z)(R+z)^2 \frac{a_{\parallel}}{a(z)} dz}{\int_0^h G(z)(R+z) dz} - R, \quad (132)$$

gdzie h to grubość warstwy, a G to moduł Younga.

Dla dyslokacji 60° typowej dla HgCdTe:

$$\alpha = \arctan \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta = \frac{\pi}{3}, \quad (133)$$

Wracając do równania (131), gdzie δ przyjmuje wartości 1 lub -1 , więc ϵ_{\parallel} przyjmuje zwykle mniejsze wartości niż wartości określone przez pierwsze dwie składowe wyrażenia. Wszystkie te wielkości w równaniu (131) zostały wyprowadzone w pracy Józwickowska i wsp. [69]. Energię sprężystą przypadającą na jednostkę powierzchni heterostruktury wyraża zależność [69], [72]–[74]:

$$E_{elst} = \frac{1}{2} \int_0^h B(z) \left(\frac{a_{\parallel} - a(z)}{a(z)} \right)^2 dz + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^5 \left(\frac{b_1(h_i)}{p(h_i)} \right)^2 \int_{h_i}^h B(z) dz + \sum_{i=1}^5 \frac{b_1(h_i)}{p(h_i)} \int_{h_i}^h B(z) \left(\frac{a_{\parallel} - a(z)}{a(z)} \right) dz + \sum_{i=1}^4 \frac{b_1(h_i)}{p(h_i)} \left(\sum_{j=i+1}^5 \frac{b_1(h_j)}{p(h_j)} \int_{h_j}^h B(z) dz \right) \quad (134)$$

Natomiast energia elektryczna dyslokacji niedopasowania sieci osadzonych w pięciu interfejsach heterostruktury, pokazanej na Rys. 39, w przeliczeniu na jednostkę powierzchni opisuje zależność:

$$E_{elctr} = 2\pi\epsilon_0 \sum_{i=1}^5 \frac{1}{p_i} \int_0^{r_{im}} \epsilon(r) \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial r} \right)^2 r dr, \quad (135)$$

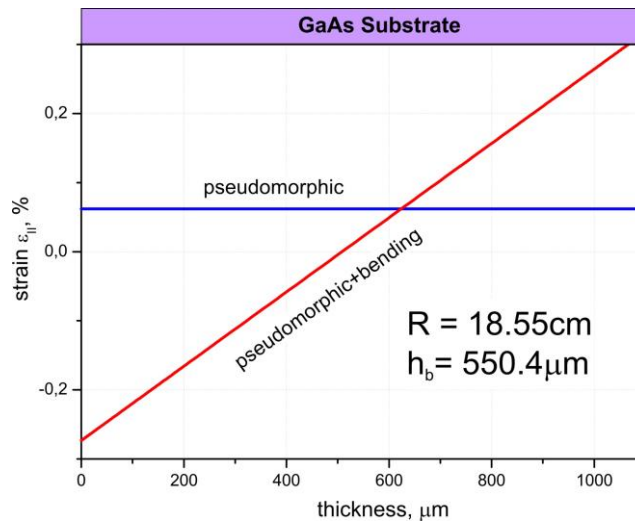
gdzie Ψ to potencjał elektryczny, ϵ_0 to przenikalność elektryczna próżni, a $\epsilon(r)$ to względna przenikalność elektryczna.

Licząc minimalną energię $E_{elst} + E_{elctr}$ jako funkcję $p(h_i)$, numerycznie określone są wartości $p(h_1)$, $p(h_2)$, $p(h_3)$, $p(h_4)$ i $p(h_5)$, a następnie używając wyrażenia (131) otrzymywane jest odkształcenie $\epsilon_{\parallel}(z)$, jako funkcja grubości. Wcześniej wykonano podobne obliczenia dla heterostruktur z InAsSb osadzonych na podłożu GaAs w dwóch artykułach Józwickowska i wsp. [68], [69]. W wymienionych pracach szczegółowo opisano metodę stosowaną do obliczania krawędzi pasm energii oraz odległości między niedopasowanymi

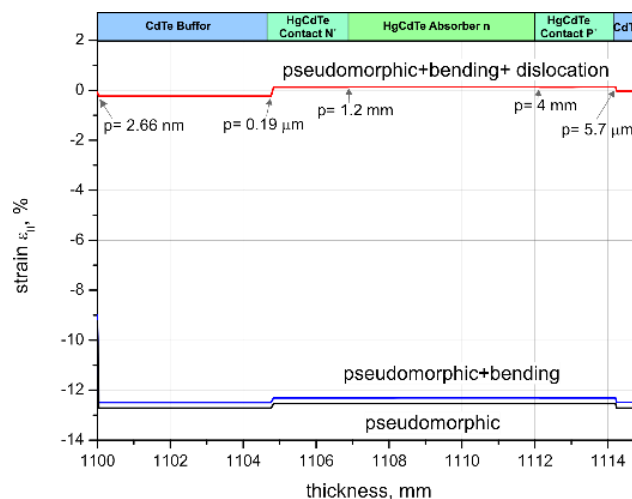
liniami dyslokacji w interfejsach. W niniejszej pracy dodatkowo oszacowano energię pola elektrycznego generowanego wokół dyslokacji niedopasowania sieci. W tym celu określono przestrzenny rozkład potencjału elektrycznego, rozwiązując równanie Poissona w obszarach cylindrycznych wokół rdzeni dyslokacji. Jednak ta dodatkowa energia jest niewielka w porównaniu z energią sprężystą i ma znikomy wpływ na gęstość generowanych dyslokacji. Wyznaczono również funkcję rozkładu dla elektronów w pasmach dyslokacyjnych. Wyznaczenie funkcji rozkładu jest bardzo ważne, aby móc rozważyć wpływ dyslokacji niedopasowania sieci na czas życia nośników.

Rys. 40 przedstawia rozkład przestrzenny odkształcenia sieci krystalicznej w podłożu GaAs. Odkształcenia pseudomorficzne są stałe i przyjmują wartości ϵ_{\parallel} nieco powyżej 0,05% - są to odkształcenia rozciągające. Natomiast zginanie struktury, niezbędne do osiągnięcia stanu równowagi momentów sił wewnętrznych, powoduje zmianę charakteru odkształcenia w dolnej warstwie podłoża, ściskając go. Podczas, gdy warstwa wierzchnia jest rozciągana (czerwona linia na Rys. 41). W odległości $h_b = 550,4 \mu\text{m}$ od interfejsu warstwa nie została zdeformowana przez zginanie. Promień krzywizny R wynosi 18,55 cm. Odkształcenia pseudomorficzne w warstwie epitaksjalnej są ściskające i stanowią ponad 12% stałej sieci. Wygięcie struktury epitaksjalnej nieznacznie zmniejsza odkształcenia, o ułamek procenta (niebieska linia na Rys. 41).

Wytworzone dyslokacje niedopasowania mają bardzo silny wpływ na relaksację naprężeń w sieci krystalicznej heterostruktury i redukcję odkształceń w poszczególnych jej warstwach. Rys. 41 przedstawia również parametr p , który jest średnią odległością między liniami dyslokacji w obszarach styku kolejnych interfejsów warstw epitaksjalnych. Bardzo gęsta siatka dyslokacji ($p = 2,66 \text{ nm}$) znajduje się na granicy bufor-podłoże. W pracy Ponce i wsp. [61] opisano strukturę interfejsu CdTe (100) / GaAs (100) uzyskaną przez hodowanie cienkich warstw CdTe na GaAs (100) metodą epitaksji z wiązki molekularnej (MBE). Korzystając z transmisyjnej mikroskopii elektronowej o wysokiej rozdzielczości, odkryli oni obecność dwuwymiarowej sieci dyslokacyjnej na granicy warstw. Dyslokacje przebiegają w kierunkach $\langle 110 \rangle$ w interfejsie z okresowością $p = 3,1 \text{ nm}$. Wynik obliczeń uzyskany w niniejszej pracy, przy pomocy programu komputerowego ($p = 2,66 \text{ nm}$) jest bardzo zbliżony do ich wyniku eksperymentalnego. W pozostałych analizowanych interfejsach heterostruktury, gęstość dyslokacji jest o rząd wielkości mniejsza.



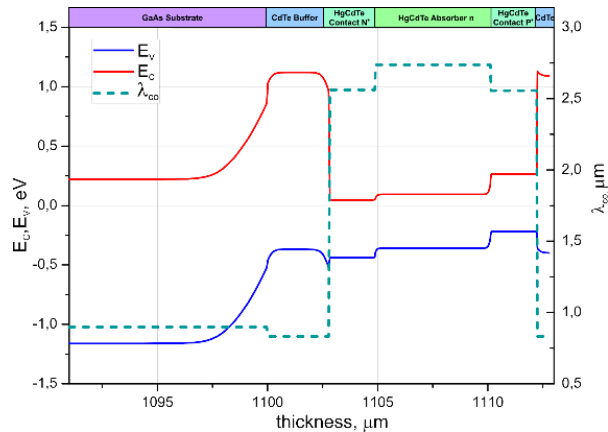
Rys. 40 Rozkład odkształceń $\varepsilon_{||}$ na podłożu GaAs o grubości 1100 μm . Niebieska linia oznacza odkształcenia pseudomorphyjne. Czerwona linia odkształcenia z dodatkowym wygięciem struktury.



Rys. 41 Przestrzenny rozkład odkształceń $\varepsilon_{||}$ przy warstwie epitaksjalnej HgCdTe, w temperaturze 300 K, osadzonej na podłożu z GaAs (100).

Na Rys. 42 przedstawiono przestrzenny rozkład pasm energetycznych oraz długość fali odcięcia $\lambda_{co} = 1.24/E_g$ w podłożu i warstwach epitaksjalnych, z uwzględnieniem wpływu odkształceń sieci na położenie krawędzi pasm. Obliczony rozkład ładunku elektrycznego rdzeni dyslokacji pozwala oszacować gęstość ładunku elektrycznego rzędu $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ w interfejsie GaAs-CdTe. Rdzenie dyslokacyjne są w dużym stopniu ekranowane przez wolne nośniki i zjonizowane domieszki, co powoduje znaczne zmniejszenie powstającego wypadkowego ładunku elektrycznego w obszarze interfejsu. Rys. 42 nie uwzględnia

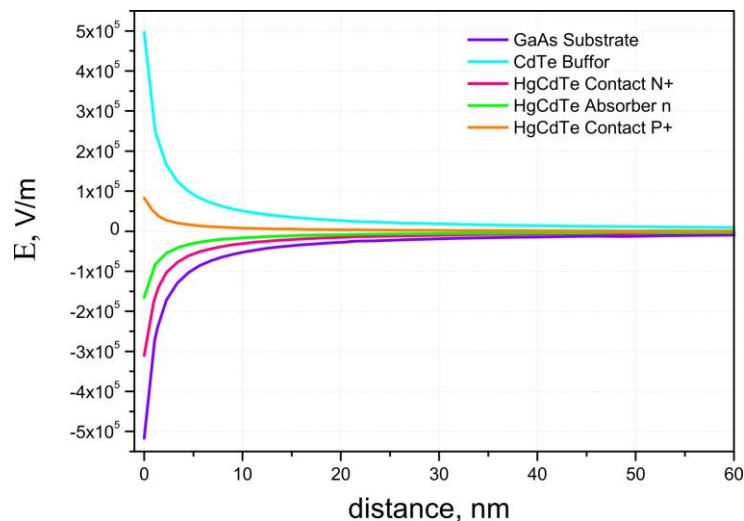
wpływu tego ładunku na przestrzenny rozkład potencjału elektrycznego heterostruktury. Oczekuje się, że całkowity ładunek będzie na tyle mały, że nie wpłynie znacząco na kształt otrzymanego wykresu. Nawet jeśli ten efekt zostałby uwzględniony w rozważaniach, mógłby zmienić rozkład krawędzi pasma jedynie w obszarze interfejsu GaAs-CdTe, co nie wpłynęłoby na kształt struktury pasmowej w innych warstwach heterostruktury, poza warstwą buforową.



Rys. 42 Wyliczona struktura pasmowa w funkcji grubości warstwy epitaksjalnej (linie ciągłe). Linia przerywana przedstawia rozkład przestrzenny granicznej długości fali λ_{co} .

Na Rys. 43 przedstawiono natężenie pola elektrycznego E w funkcji odległości od linii dyslokacji α . Obliczenia wykonano dla dyslokacji, które mogą występować w podłożu GaAs, oraz we wszystkich osadzonych warstwach pokazanych na Rys. 39. Sposób obliczenia natężenia pola elektrycznego wokół rdzenia dyslokacji przedstawiono w Dodatku B. Znając to, można obliczyć energię elektryczną na jednostkę powierzchni (równanie (B2) w Dodatku B). Przy czym założono, że średnia energia elektronów w pasmach dyslokacji w warstwach HgCdTe i buforze CdTe znajduje się powyżej wierzchołka pasma walencyjnego w odległości $E_{DIS} = 0,32E_g$. Po analizie pracy (Wosiński i Figielski [75]), można założyć, że E_{DIS} w podłożu GaAs leży 0,68eV poniżej pasma przewodnictwa.

Obliczone energie elektryczne dyslokacji na jednostkę powierzchni mieszczą się w zakresie $10^{-7} \div 10^{-5} \text{ Jcm}^{-2}$. Wartości te są o wiele rzędów wielkości mniejsze od energii sprężystej wyrażonej zależnością (134).



Rys. 43 Natężenie pola elektrycznego w funkcji odległości od linii dyslokacji leżących w poszczególnych warstwach heterostruktury pokazanej na Rys. 39.

W innej pracy, Ciura i wsp. [76], zbadali przy użyciu spektroskopii szumów o niskiej częstotliwości, poziomy pułapek w heterostrukturach HgCdTe, które były hodowane na podłożach GaAs (111) z buforem CdTe (100) w laboratoriach Vigo System S.A. Oprócz pułapek dziurowych znaleziono również trzy rodzaje elektronowych stanów pułapkowych. Ich poziomy energii są zgodne z liniami trendu $E_T = 0.75E_g$ i $E_T = 0.35E_g$. Pierwsza linia jest łatwa do zidentyfikowania, jako linia związana z lukami rtęci. Druga linia nie została przez autorów zidentyfikowana i jest prawdopodobnie związana z dyslokacjami. Ta linia trendu jest bardzo zbliżona do przyjętej w pracy wartości $E_{DIS} = 0.32E_g$. Korzystając z tej zależności, w niniejszej rozprawie, obliczono czas życia nośników i uzyskano dobre dopasowanie do eksperymentalnych charakterystyk prądowo-napięciowych fotodiod HgCdTe. Parametry fizyczne GaAs zastosowane w obliczeniach zaczerpnięto z pracy Vurgaftman i wsp. [77], a CdTe i HgCdTe z monografii Capper i wsp. [39], [40].

Uwzględnienie dyslokacji niedopasowania sieciowego w obliczeniach odkształceń pozwala oszacować rzeczywiste mechanizmy relaksacji sieci. Obliczając minimum energii, można numerycznie wyznaczyć wartości średnich odległości między liniami dyslokacji w interfejsach heterostruktur HgCdTe. Zastosowane tutaj metody obliczeniowe zostały szczegółowo opisane w dwóch wcześniejszych pracach [68], [69]. W rozprawie, jako nowość przedstawiono numeryczną metodę obliczania przestrzennego rozkładu potencjału elektrostatycznego wokół rdzenia dyslokacji oraz funkcji rozkładu dla elektronów w paśmie dyslokacji. Oszacowano również ilość energii elektrycznej w obszarze otaczającym rdzeń

dyslokacji α i β w HgCdTe. W pracy wyznaczono również całkowitą energię sprężystą związaną z naprężeniami sieciowymi oraz energię elektryczną zgromadzoną w polu elektrycznym wokół linii dyslokacji. Ich udział jest jednak znikomy i nie wpływa na gęstość dyslokacji niedopasowania sieciowego na powierzchniach interfejsów warstw rozpatrywanej struktury.

5.3 Dyslokacje jako dodatkowy kanał generacyjno-rekombinacyjny

W tej części rozprawy przedstawiono dwa modele dyslokacji traktowane jako kanały rekombinacji nośników. Pierwszy model został opracowany wiele lat temu przez promotora pracy [24] i następnie uległ modyfikacji w niniejszej pracy, poprzez wprowadzenie warunku lokalnej neutralności elektrycznej w obszarze wokół dyslokacji i nowych wyrażeń na czas życia nośników otrzymanych w Rozdziale 4 rozprawy. Model ten traktuje dyslokacje jako dodatkową cylindryczną powierzchnię wewnątrz struktury krystalicznej. Promień tej powierzchni jest równy stałej sieci krystalicznej. Parametrem wpływającym na czas życia w obszarze otaczającym dyslokację jest szybkość rekombinacji powierzchniowej. Parametr ten otrzymano porównując szybkość rekombinacji SRH netto przy udziale pasma dyslokacyjnego, z równoważnym procesem powierzchniowym, zdeterminowanym szybkością rekombinacji powierzchniowej.

Drugi model znacznie wygodniejszym do obliczeń, opracowanym w ramach niniejszej pracy, jest modelem typowo objętościowy. Zrezygnowano tu z dodatkowych powierzchni wokół rdzenia dyslokacji, a stany pasma dyslokacyjnego wprowadzono jako dodatkowe stany w przerwie zabronionej, ulokowane w lokalnym elemencie objętości. Tak więc obok mechanizmu SRH związanego z lukami rtęci pojawia się dodatkowy mechanizm SRH związany z dyslokacjami. Pasma dyslokacyjne może zaabsorbować elektrony oraz zaabsorbować dziury. Mechanizm ten, jako mechanizm objętościowy łatwo zamodelować stosując metodę Shockley'a [36]. Opracowując ten model powiązano ilość stanów w paśmie dyslokacyjnym, utworzonym przez sieci wzajemnie prostopadłych linii dyslokacji, z ilością jamek trawienia, powiązanych z dochodzącymi do powierzchni przełomu próbki liniami dyslokacji niedopasowania. Ważnym osiągnięciem jest wyprowadzenie wzoru na przekrój czynny i współczynniki wychwytu nośników przez pasmo dyslokacyjne.

5.4 Zmodyfikowany model dyslokacji jako obszarów o zwiększonej rekombinacji powierzchniowej

W tym podrozdziale opisano budowę modelu, umożliwiającego numeryczne zbadanie wpływu dyslokacji na czas życia nośników. W dużej mierze jest to powtórzenie analizy przeprowadzonej przez prof. Jóźwikowskiego [24], wzbogaconej o nowe elementy rozbudowujące program obliczeniowy. Podobnie jak w pracy [24] założono, że dyslokacje są lokalnie rozłożone równomiernie w postaci równoległych linii. Odległości pomiędzy liniami dyslokacji określono na podstawie jamek trawienia ujawnianych na powierzchniach przełomu struktury krystalicznej. Proponowany model zakłada, że w obszarze linii dyslokacji znajdują się centra rekombinacyjne typu SRH. Nośniki nadmiarowe generowane np. optycznie docierają tam z obszaru otaczającego linię i tam rekombinują. Tym sposobem pojawia się lokalnie dodatkowy mechanizm G-R, oprócz tych istniejących w obszarze otaczającym dyslokację. Ma to wpływ na efektywny czas życia elektronów i dziur w obszarze otaczającym. W ten sposób można określić ambipolarne równanie ciągłości w cylindrycznym obszarze otaczającym, wykorzystując otrzymane wcześniej związki pomiędzy nadmiarowymi elektronami i dziurami. Poniższe przykłady opierają się na przypadku jednowymiarowym.

Dla przypadku jednowymiarowego gęstości prądu elektronowego i dziurowego można wyrazić odpowiednio:

$$j_e = e\mu_n nE + eD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (136)$$

$$j_p = e\mu_p nE - eD_p \frac{\partial n}{\partial x} \quad (137)$$

A równania ciągłości mają postać:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_n \left(E \frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + G_n - R_n \quad (138)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p \left(E \frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x} \right) + G_p - R_p \quad (139)$$

E oznacza tu natężenie pola elektrycznego, D współczynnik dyfuzji, μ ruchliwość.

W stanie ustalonym $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$ i $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$, a więc $G_{n,p} = R_{n,p}$, $n = n_0$, $p = p_0$.

Stąd:

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} + \mu_n \left(E \frac{\partial \Delta n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \delta G_n - \delta R_n + G_n^{opt} \quad (140)$$

$$D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \mu_p \left(E \frac{\partial \Delta p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \delta G_p - \delta R_p + G_p^{opt} \quad (141)$$

Eliminując $\frac{\partial E}{\partial x}$, otrzymano:

$$D_n \mu_p p \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} + \mu_n \mu_p p \left(E \frac{\partial \Delta n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \left(G_n^{opt} - \frac{\Delta n}{\tau_n} \right) \mu_p p \quad (142)$$

$$D_p \mu_n n \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \mu_p \mu_n n \left(E \frac{\partial \Delta p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \left(G_p^{opt} - \frac{\Delta p}{\tau_p} \right) \mu_n n \quad (143)$$

Gdzie zgodnie z (15)

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{\partial R_n}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial n}$$

A zależność (16) pozwala napisać:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{\partial R_p}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial p}$$

Ale $\Delta n = \frac{Z2}{Z1} \Delta p$, więc dodając równania stronami otrzymano:

$$\begin{aligned} & \left(D_p \mu_n n + D_n \mu_p p \frac{Z2}{Z1} \right) \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} + \mu_n \mu_p \left(p \frac{Z2}{Z1} - n \right) E \frac{\partial \Delta p}{\partial x} + \mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt} - \\ & \left(\frac{1}{\tau_p} \mu_n n + \frac{Z2}{Z1} \mu_p p \frac{1}{\tau_n} \right) \Delta p = 0 \end{aligned} \quad (144)$$

Zakładając, że dotarcie nadmiarowych nośników do rdzenia dyslokacji jest procesem czysto dyfuzyjnym, możemy pominąć składową z wyrazem $\frac{\partial \Delta p}{\partial x} E$ co znacznie ułatwi znalezienie przybliżonego rozwiązania tego równania. Teraz przyjmie ono postać

$$\frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \frac{\Delta p}{D\tau} + \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\left(D_p \mu_n n + D_n \mu_p p \frac{Z2}{Z1} \right)} = 0 \quad (145)$$

Gdzie ambipolarny współczynnik dyfuzji wynosi:

$$D = \frac{(D_p \mu_n n + D_n \mu_p p \frac{Z2}{Z1})}{(\mu_p p + \mu_n n)} \quad (146)$$

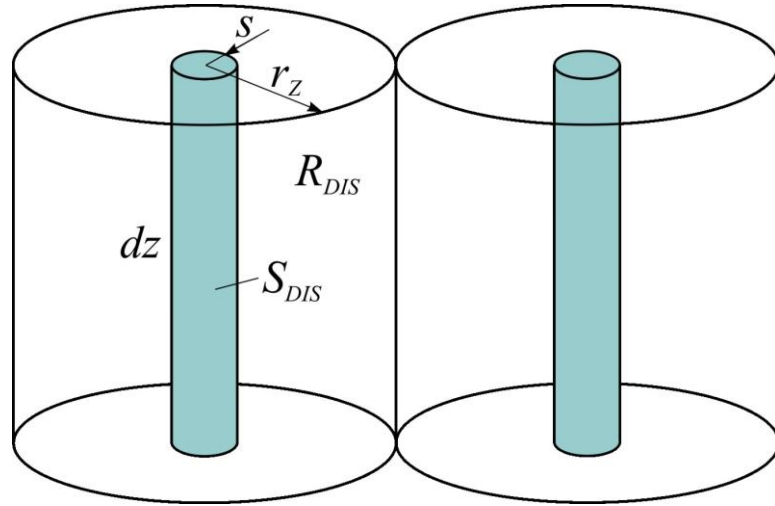
A ambipolarny czas życia:

$$\tau = \frac{\mu_p p + \mu_n n}{\frac{1}{\tau_p} \mu_n n + \frac{Z2}{Z1} \mu_p p \frac{1}{\tau_n}} \quad (147)$$

Ambipolarne równanie ciągłości (145) dla nośników nierównowagowych, w otoczce cylindrycznej wokół pojedynczej dyslokacji, we współrzędnych cylindrycznych przyjmuje teraz postać:

$$\frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\Delta p)}{\partial r} - \frac{1}{D\tau} \Delta p + \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{(D_p \mu_n n + D_n \mu_p p \frac{Z2}{Z1})} = 0 \quad (148)$$

Przedmiotem analizy jest teraz obszar pomiędzy powierzchniami cylindrycznymi o promieniach c i r_z wokół wybranej dyslokacji. r_z jest połową średniej odległości między dyslokacjami. Ze względu na małe wartości s i r_z , można założyć fizyczną jednorodność rozpatrywanego obszaru wokół rdzenia dyslokacji. Proces rekombinacji nośników nierównowagowych przez centra pułapkowe rdzenia dyslokacji można przedstawić jako proces objętościowy, który zachodzi z szybkością rekombinacji R_{DIS} , wyrażoną w $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. Ale w rozwijanym tu modelu konieczne jest wprowadzenie parametru powierzchniowego w postaci szybkości rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} , wyrażonej w $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. Parametr ten umożliwia rozwiązanie ambipolarnego równania ciągłości dla nośników nierównowagowych w obszarze cylindrycznym, wokół rdzenia dyslokacji. Związek pomiędzy parametrami S_{DIS} i R_{DIS} znaleziono porównując szybkość generacji nośników w obszarze cylindra o promieniu r_z i wysokości dz (Rys. 44).



Rys. 44 Ilustracja obrazująca proces rekombinacji nośników nierównowagowych przez stany energetyczne w paśmie dyslokacyjnym. Można ten proces przedstawić jako proces objętościowy zachodzący z szybkością R_{DIS} [$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$] w obszarze o promieniu r_z (połowa odległości między liniami dyslokacji) lub jako proces powierzchniowy zachodzący z szybkością rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} [cm s^{-1}] na powierzchni cylindra o promieniu c (stała sieci).

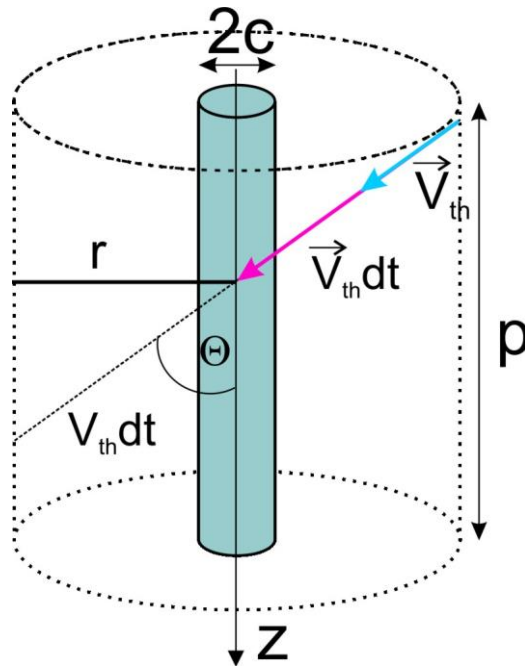
Według rezultatów uzyskanych w [24], w objętości $\pi dz r_z^2$ szybkość rekombinacji termicznej SRH netto przy udziale pasma dyslokacyjnego wynosi:

$$R_{DIS} = \pi r_z^2 2G_{DIS} \frac{dz}{s} \frac{(np - n_0 p_0)}{\frac{1}{\delta_n c_{nDIS}} \left(p + p_0 \frac{f_{DYS}^0}{1 - f_{DYS}^0} \right) + \frac{1}{\delta_p c_{pDIS}} \left(n + n_0 \frac{1 - f_{DYS}^0}{f_{DYS}^0} \right)}, \quad (149)$$

gdzie G_{DIS} jest ilością jamek trawienia przypadającą na jednostkę powierzchni. Można teraz zauważyć, że $G_{DIS} = 1/\pi r_z^2$. Symbole c_{nDIS} i c_{pDIS} są odpowiednio współczynnikiem wychwytu dla elektronów i dziur, natomiast parametry δ_n i δ_p uwzględniają zmianę tych współczynników pod wpływem pola elektrycznego (efekt Frenkel-Poole i tunelowanie z udziałem pasma dyslokacyjnego). Funkcja f_{DYS}^0 jest równowagową funkcją rozkładu określającą prawdopodobieństwo obsadzenia stanu w paśmie dyslokacyjnym przez elektron w warunkach równowagi termicznej.

Do przeprowadzenia dalszych rozważań kluczowe jest zdefiniowanie współczynników wychwytu c_{nDIS} i c_{pDIS} , które są iloczynami efektywnego przekroju czynnego σ i prędkości termicznej v_{th} odpowiednio elektronów i dziur; $c_n = \sigma_e (3k_B T / 2m_e)^{1/2}$, $c_{pDIS} = \sigma_h (3k_B T / 2m_{hh})^{1/2}$. Ponieważ prędkość termiczna dziur ciężkich jest znacznie mniejsza niż elektronów, współczynnik wychwytu dla elektronów jest znacznie większy, niż dla dziur.

Fizycznie ma on wymiar cm^3s^{-1} , a więc określa objętość, w jakiej nośnik powinien znaleźć się w jednostce czasu, aby miał szansę dotarcia do pojedynczego niewysyczonego wiązania znajdującego się w linii dyslokacji. Na Rys. 45 przedstawiono objętość, z której do odcinka dyslokacji o długości p mogą dotrzeć nośniki, których prędkość termiczna jest zorientowana do linii dyslokacji pod kątem θ . Efektywna objętość, w której nośnik musi się znaleźć, aby dotrzeć do odcinka dyslokacji p w czasie dt wynosi $2cpv_{th}\sin\theta dt$.



Rys. 45 Grafika obrazująca nośniki ładunku, które poruszają się z prędkością termiczną v_{th} pod kątem θ do kierunku linii dyslokacji. Następnie docierają do fragmentu linii dyslokacji o długości p w czasie dt z cylindrycznego elementu o objętości $\pi r^2 p$.

Prawdopodobieństwo, że nośnik posiada prędkość termiczną zorientowaną w zakresie kątów $\theta \div \theta + d\theta$ wynosi $\frac{1}{2}\sin\theta d\theta$. Poruszający się nośnik musi trafić w prostokątną powierzchnię o polu $2cp$, aby miał szansę zostać wychwycony przez niewysyczone wiązanie znajdujące się w obszarze dyslokacji. Dlatego efektywna objętość, w której musi się znaleźć, aby dotrzeć do dyslokacji wynosi $2cpv_{th}\sin\theta dt$. Uwzględniając różne kąty θ w zakresie od 0 do π i powyższe prawdopodobieństwo, efektywna uśredniona objętość przypadająca na jeden nośnik wynosi:

$$cpv_{th}dt \int_0^{\pi} \sin^2\theta d\theta = \frac{\pi}{2} cpv_{th}dt \quad (150)$$

Na odcinku o długości p znajduje się p/b zerwanych wiązań. Stąd:

$$c_{n_{DIS}} = \frac{\pi}{2} cbv_{th}^e = \sigma_e v_{th}^e; \quad c_{p_{DIS}} = \frac{\pi}{2} cbv_{th}^{hh} = \sigma_h v_{th}^{hh} \quad (151)$$

Ponieważ długość wektora Burgersa jest zbliżona do stałej sieci, to efektywny przekrój czynny $\sigma_e = \sigma_h$ wyprowadzony z powyższych rozważań wynosi około $5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$. Taką właśnie wartość przyjęto w pracy [24], aby dopasować się do eksperymentalnych charakterystyk I(V) fotodiod z HgCdTe, dla których mierzono gęstość dyslokacji. Potwierdza to słuszność powyższego rozumowania.

Mając wyznaczone przekroje czynne można teraz zastąpić proces objętościowy równoważnym procesem rekombinacji powierzchniowej na powierzchni wokół rdzenia dyslokacji, wprowadzając nowy parametr – szybkość rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} (o wymiarze cm^2s^{-1}). Ilość aktów rekombinacji na powierzchni rdzenia $2\pi sdz$, w jednostce czasu przy udziale pasma dyslokacyjnego przyjmie postać:

$$S_{DIS} 2\pi sdz \Delta p \quad (152)$$

Powyższy wzór pozwala porównać szybkość rekombinacji termicznej netto R_{DIS} jako efekt objętościowy, mający miejsce w elemencie objętości $\pi dz r_z^2$, z równoważnym mu efektem powierzchniowym na powierzchni πsdz wyrażonym poprzez szybkość rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} .

$$R_{DIS} \pi r_z^2 dz = S_{DIS} 2 \pi sdz \quad (153)$$

Stąd wynika następujące wyrażenie na szybkości rekombinacji powierzchniowej:

$$S_{DIS} = \frac{1}{\pi s^2} \frac{n_0 + p_0 \frac{Z^2}{Z_1}}{\frac{1}{\delta_n c_{n_{DIS}}} \left(p + p_0 \frac{f_{DYS}^0}{1 - f_{DYS}^0} \right) + \frac{1}{\delta_p c_{p_{DIS}}} \left(n + n_0 \frac{1 - f_{DYS}^0}{f_{DYS}^0} \right)} \quad (154)$$

Zazwyczaj czas życia nierównowagowych elektronów τ_n , różni się od czasu życia nierównowagowych dziur τ_p . Współczynniki dyfuzji D_n i D_p odpowiednio dla elektronów i dziur wyznaczono korzystając z relacji Einsteina: $D_n = \frac{k_B T \mu_n}{e}$; $D_p = \frac{k_B T \mu_p}{e}$.

Na bocznych powierzchniach otoczki cylindrycznej obowiązują następujące warunki brzegowe:

$$D \frac{\partial(\Delta p)}{\partial r} = S_{DIS} \Delta p \quad \text{dla} \quad r = s, \quad (155)$$

$$\frac{\partial(\Delta p)}{\partial r} = 0 \quad \text{dla} \quad r = r_Z \quad (156)$$

Teraz można cofnąć się do równania (148) i przekształcić je do następującej postaci korzystając z zależności (146):

$$\frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{\partial(\Delta p)}{\partial \zeta} - \Delta p + \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\mu_p p + \mu_n n} \tau = 0, \quad (157)$$

gdzie $\zeta = r/\sqrt{D\tau}$.

Rozwiązaniem równania (157) jest wyrażenie:

$$\Delta p(r) = \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\mu_p p + \mu_n n} \tau \{A I_0(\zeta) + B Y_0(\zeta) + 1\} = \quad (158)$$

$$\frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\mu_p p + \mu_n n} \tau \{A I_0(r/\sqrt{D\tau}) + B Y_0(r/\sqrt{D\tau}) + 1\},$$

gdzie stałe A i B wyznaczono z warunków brzegowych. $I_0(\zeta)$ i $Y_0(\zeta)$ są zmodyfikowanymi funkcjami Bessela [78].

Kolejnym wyznaczonym parametrem jest efektywny czas życia nośników nierównowagowych, uwzględniający istnienie dyslokacji jako cylindrycznych powierzchni o promieniu s i szybkości rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} . W tym celu przeanalizowano otoczkę cylindryczną o wysokości dz . Całkowita liczba par elektron-dziura generowanych z szybkością generacji G w otoczce wynosi:

$$\Delta P = 2\pi \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\mu_p p + \mu_n n} \tau \int_s^{r_Z} \Delta p(r) r dz dr. \quad (159)$$

W innym przypadku, jeśli przyjęto by model, w którym nie byłoby dyslokacji, to ta ilość nierównowagowych par istniałaby w otoczce. Wtedy efektywny czas życia nośników wynosiłby τ_{eff} , a rozwiązanie przyjęłoby postać:

$$\Delta P = \frac{\mu_p p G_n^{opt} + \mu_n n G_p^{opt}}{\mu_p p + \mu_n n} \pi r_Z^2 \tau_{eff} dz. \quad (160)$$

Przekształcając wyrażenia (158), (159) i (160) można otrzymać wyrażenie na efektywny czas życia nośników nierównowagowych po uwzględnieniu istnienia dyslokacji:

$$\tau_{eff} = A' \int_s^{r_z} r I_0' \left(\frac{r}{\sqrt{D\tau}} \right) dr + B' \int_s^{r_z} r K_0' \left(\frac{r}{\sqrt{D\tau}} \right) dr + \frac{2\tau}{r_z^2} \int_s^{r_z} r dr, \quad (161)$$

gdzie τ_{eff} umożliwia obliczenie szybkości rekombinacji termicznej netto z uwzględnieniem wpływu dyslokacji. Po kilku kolejnych przekształceniach wykonanych w pracy [24], wyrażenie (161) przyjmie postać:

$$\tau_{eff} = \tau \left\{ 1 - \frac{s^2}{r_z^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{S_{DIS}}{M} \right\}, \quad (162)$$

gdzie:

$$M = \frac{r_z^2 - s^2}{2\tau} + S_{DIS} \left\{ 1 + 0.25 \frac{s^2}{D\tau} - \frac{r_z^2}{2D\tau} \left[\gamma + \ln \left(\frac{s}{\sqrt{D\tau}} \right) \right] \right\}, \quad (163)$$

gdzie γ jest stałą Eulera i wynosi $\gamma \approx 0,5772...$

Podstawiając zmiennie do równania (162) wynika, że:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\left\{ 1 - \frac{s^2}{r_z^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{S_{DIS}}{M} \right\} \tau} = \frac{1}{\left\{ 1 - \frac{s^2}{r_z^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{S_{DIS}}{M} \right\} \frac{\frac{1}{\tau_p} \mu_n n + \frac{Z^2}{Z^1} \mu_p p \frac{1}{\tau_n}}{\mu_p p + \mu_n n}} \quad (164)$$

Zależności (164) można przedstawić w nieco prostszej postaci:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{\frac{1}{\tau_{p_{eff}}} \mu_n n + \frac{Z^2}{Z^1} \mu_p p \frac{1}{\tau_{n_{eff}}}}{\mu_p p + \mu_n n}, \quad (165)$$

gdzie:

$$\tau_{p_{eff}} = \left\{ 1 - \frac{s^2}{r_z^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{S_{DIS}}{M} \right\} \tau_p \quad (166)$$

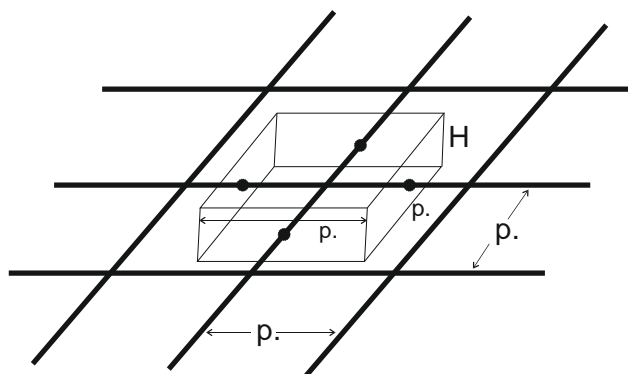
$$\tau_{n_{eff}} = \left\{ 1 - \frac{s^2}{r_z^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{S_{DIS}}{M} \right\} \tau_n \quad (167)$$

Wzory (166) i (167) odgrywają kluczową rolę, jeśli chodzi o badanie wpływu gęstości dyslokacji na czas życia elektronów i dziur. Najpierw obliczono czasy życia τ_p i τ_n , zakładając brak dyslokacji, a następnie, jeśli jest znana gęstość dyslokacji można wyznaczyć współczynniki S_{DIS} i r_z . To pozwala z kolei wyznaczyć efektywny czas życia elektronów i dziur w funkcji gęstości dyslokacji.

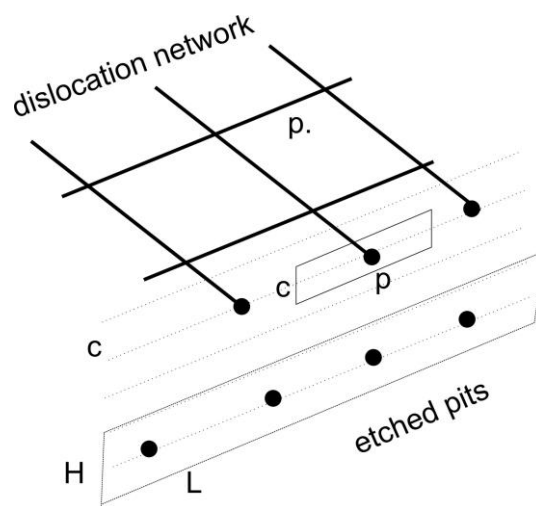
5.5 Nowe podejście do zagadnienia kinetyki procesów SRH zachodzących z udziałem poziomów energetycznych związanych z dyslokacjami

Metoda, którą zaprezentowano w tym podrozdziale jest analogiczna do metody zastosowanej przez Schockley'a dla centrów punktowych [36], ale uwzględnia dodatkowo specyfikę pasma dyslokacyjnego. Modyfikacja, której dokonano w niniejszej pracy zapewnia wyznaczenie ilości stanów elektronowych w paśmie dyslokacyjnym przypadających na jednostkę objętości. Ponadto uwzględniono rozkład dyslokacji niedopasowania, tworzących sieć wzajemnie prostopadłych linii leżących w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. W heterostrukturach pojawiają się naprężenia związane z niedopasowaniem sieciowym. Ma to miejsce we wszystkich interfejsach i obszarach, gdzie występuje gradient składu molowego. Powstające w ten sposób dyslokacje relaksują w znacznym stopniu naprężenia sieciowe.

Rys. 46 przedstawia sieć dyslokacji niedopasowania leżącą w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. Średnia odległość pomiędzy liniami dyslokacji wynosi p . W odległości równej stałej sieci leży następna warstwa atomowa. I tu również może pojawić się kolejna sieć dyslokacji niedopasowania o innym odstępnie niż p . Dyslokacje można ujawnić eksperymentalnie wykonując przełom prostopadły do płaszczyzny wzrostu, a następnie poprzez wytrawienie powierzchni ujawnić dyslokacje w postaci jamek trawienia. Pokazuje to schematycznie Rys. 47.



Rys. 46 Siatka dyslokacji niedopasowania w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. Schemat przedstawia fragment dwóch przecinających się linii otoczony prostopadłością o wysokości H i kwadratowej podstawie o boku o długości p , będącej średnią odległością pomiędzy liniami dyslokacji.



Rys. 47 Schemat obrazuje dochodzące do powierzchni przelomu linie dyslokacji, które mogą zostać ujawnione jako jamki, powstające w wyniku strawienia powierzchni. Lokalnie jedna jamka trawienia przypada na powierzchnię pH , będącą iloczynem wysokości H i odległości między liniami dyslokacji p .

Gęstość dyslokacji G_{DIS} definiowana jako ilość jamek trawienia przypadająca na jednostkę powierzchni, jest wygodną metodą określania gęstości dyslokacji. Istnieje również szereg innych metod dużo bardziej zaawansowanych (np. analizy obrazów uzyskanych z elektronowego mikroskopu transmisyjnego). W tym modelu obliczeń zrezygnowano z przedstawienia linii dyslokacji jako cylindrycznej powierzchni, charakteryzowanej poprzez promień równy stałej sieci, oraz przez szybkość rekombinacji powierzchniowej S_{DYS} . Otaczając linie dyslokacji niewielkim elementem objętości, można wyznaczyć lokalną koncentrację stanów pułapkowych w paśmie dyslokacyjnym i zastosować tą samą procedurę do określenia kinetyki procesów G-R, jaką stosuje się do wyznaczania pułapek punktowych, związanych z lukami metali. Linia dyslokacji zawiera zerwane wiązania (ang. dangling bonds), w ilości równej stosunkowi jej długości do długości wektora Burgersa. Ponieważ w tych warunkach tworzy się pasmo dyslokacyjne, to ze względu na degenerację spinową, stanów tych jest dwukrotnie więcej, niż zerwanych wiązań w linii dyslokacji.

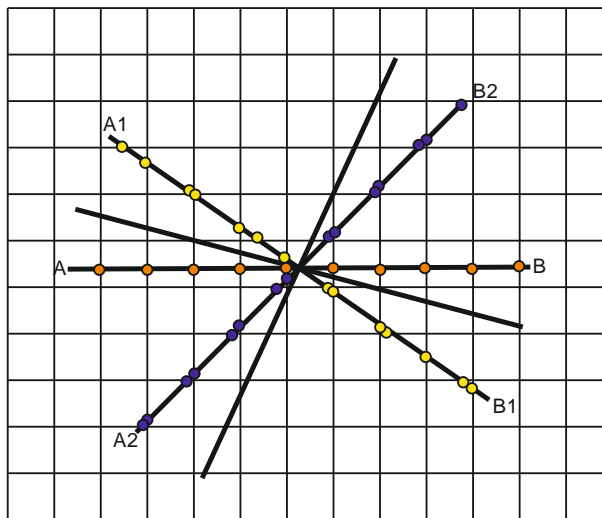
Ilość linii dyslokacji przecinających prostokąt o powierzchni HL wynosi:

$$N = L/p = G_{DIS}LH \quad (168)$$

Stąd:

$$H = \frac{1}{pG_{DIS}} \quad (169)$$

Przypadek przedstawiony na Rys. 47 odpowiada odcinkowi AB na Rys. 48. Jest to przypadek szczególny, kiedy płaszczyzna przełomu jest prostopadła do linii dyslokacji. Można mieć wątpliwości czy ilość ujawnionych jamek trawienia będzie istotnie różniła się, gdy płaszczyzna przełomu będzie zorientowana pod innym kątem. Rys. 48 pokazuje, że różnice te będą bardzo niewielkie. Porównując odcinki o jednakowej długości obrazującej przecięcie płaszczyzny przełomu z siatką dyslokacji widać, że ilość kółek obrazujących jamki trawienia jest niemal jednakowa w trzech przedstawionych przypadkach AB, A1B1, i A2B2. Gdy dwie jamki znajdują się bardzo blisko siebie, wytrawienie spowoduje powstanie pojedynczej jamki o większych rozmiarach. Dlatego do obliczeń można założyć, że płaszczyzna przełomu jest prostopadła do linii dyslokacji, bez obawy popełnienia dużego błędu w ocenie gęstości siatki dyslokacji niedopasowania. Ten zabieg wprowadza duże uproszczenie do analizy numerycznej tego zjawiska.



Rys. 48 Siatka dyslokacji niedopasowania w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. Odcinki równej długości przedstawiają płaszczyzny przełomu, na których ujawniają się jamki trawienia zaznaczone w postaci kolorowych kółek.

Jako pierwszy element w tym modelu należy określić lokalną koncentrację stanów energetycznych w paśmie dyslokacyjnym. W tym celu pomocne są Rys. 46 i Rys. 47. Rys. 46 przedstawia siatkę linii dyslokacji leżącą w płaszczyźnie wzrostu struktury krystalicznej. Zakładając, że jamki trawienia są lokalnie równomiernie rozłożone, należy dwie przecinające się linie dyslokacji otoczyć prostopadłościanem o wysokości H i kwadratowej

podstawie o boku p , który jest równy średniej odległości pomiędzy dyslokacjami. Jeśli gęstość dyslokacji (ilość jamek trawienia na jednostkę powierzchni) wynosi G_{DIS} , to można wykorzystać ten parametr do oceny gęstości stanów w paśmie dyslokacyjnym przypadających na jednostkę objętości. Jako przykład można posłużyć się prostopadłościanem przedstawionym na Rys. 46 o objętości Hp^2 , który zawiera $4p/b$ stanów w paśmie dyslokacyjnym. Na jednostkę objętości przypada więc ich $\frac{4p}{p^2Hb} = \frac{4G_{DIS}}{b}$. W elemencie objętości przedstawionym na Rys. 46, szybkość pułapkowania elektronów przez stany pasma dyslokacyjnego, w przeliczeniu na jednostkę objętości R_n^c , wyrażoną w $[\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}]$, można opisać zależnością:

$$R_n^c = c_{nDIS} n \frac{4G_{DIS}}{b} (1 - f_{DIS}), \quad (170)$$

gdzie c_{nDIS} jest uśrednionym współczynnikiem wychwytu pojedynczego elektronu przez pusty poziom energetyczny w paśmie dyslokacyjnym, $\frac{4G_{DIS}}{b} (1 - f_{DIS})$ jest efektywną liczbą pustych stanów w paśmie dyslokacyjnym w jednostce objętości. Natomiast szybkość emisji z pułapek R_n^e proporcjonalna jest do efektywnej liczby zajętych stanów pułapkowych:

$$R_n^e = e_{nDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} f_{DIS}, \quad (171)$$

gdzie e_{nDIS} jest uśrednionym współczynnikiem emisji pojedynczego elektronu z poziomu energetycznego w paśmie dyslokacyjnym. W równowadze termicznej $R_n^c = R_n^e$, więc:

$$e_n = c_{nDIS} n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0}, \quad (172)$$

gdzie f_{DIS}^0 jest równowagową funkcją rozkładu. Szybkość pułapkowania netto dla elektronów wynosi zatem:

$$\begin{aligned} R_n &= R_n^c - R_n^e = c_{nDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} n (1 - f_{DIS}) - c_{nDIS} n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \frac{4G_{DIS}}{b} f_{DIS} = \\ &= c_{nDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} \left[n (1 - f_{DIS}) - n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} f_{DIS} \right] \end{aligned} \quad (173)$$

Analogiczne rozważania dla chwypanych przez pasmo dyslokacyjne dziur prowadzą do następujących relacji na szybkość wychwyty i emisji dziur:

$$R_p^c = c_{pDIS} p \frac{4G_{DIS}}{b} f_{DIS}, \quad (174)$$

$$R_p^e = e_{pDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} (1 - f_{DIS}), \quad (175)$$

gdzie

$$e_{pDIS} = c_{pDIS} p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \quad (176)$$

Tutaj c_{pDIS} jest uśrednionym współczynnikiem wychwyty pojedynczej dziury przez zajęty przez elektron poziom energetyczny w paśmie dyslokacyjnym, e_{pDIS} jest współczynnikiem emisji dziury do pasma walencyjnego, co jest równoważne przejściu elektronu z pasma walencyjnego do pasma dyslokacyjnego. Wypadkową szybkość pułapkowania dla dziur wyrażono następującą relacją:

$$\begin{aligned} R_p &= R_p^c - R_p^e = c_{pDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} p f_{DIS} - c_{pDIS} p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \frac{4G_{DIS}}{b} (1 - f_{DIS}) = \\ &= c_{pDIS} \frac{4G_{DIS}}{b} \left[p f_{DIS} - p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} (1 - f_{DIS}) \right] \end{aligned} \quad (177)$$

W stanie ustalonym szybkość rekombinacji $R_n = R_p = R_{DYS}$, czyli:

$$c_{nDIS} \left[n(1 - f_{DIS}) - n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} f_{DIS} \right] = c_{pDIS} \left[p f_{DIS} - p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} (1 - f_{DIS}) \right] \quad (178)$$

Przekształcając powyższe równanie uzyskano następujące relacje:

$$f_{DIS} = \frac{c_{nDIS} n + c_{pDIS} p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0}}{c_{pDIS} \left(p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right) + c_{nDIS} \left(n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right)}, \quad (179)$$

Widać, że aby określić f_{DIS} należy wyznaczyć funkcję rozkładu w stanie równowagi f_{DIS}^0 , co jest bardzo istotnym punktem w modelu numerycznym dla tego zagadnienia. Natomiast prawdopodobieństwo, że stan jest pusty wynosi: $1 - f_{DIS} =$

$$\frac{c_{pDIS} p + c_{nDIS} n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0}}{c_{pDIS} \left(p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right) + c_{nDIS} \left(n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right)}.$$

W stanie ustalonym szybkość generacji $G_n = G_p = G_{DYS}$, czyli:

$$G_{DYS} = c_{nDIS} n_0 \frac{1-f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \frac{4G_{DIS}}{b} f_{DIS} = c_{pDIS} p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1-f_{DIS}^0} \frac{4G_{DIS}}{b} (1-f_{DIS}) \quad (180)$$

Przekształcając równanie (178) i (180), oraz podstawiając wartości f_{DIS} z równania (179), uzyskano wyrażenie na szybkość rekombinacji netto przez centra SRH związane z dyslokacjami:

$$R_{DYS} - G_{DYS} = \frac{4G_{DIS}}{b} \frac{c_{nDIS} c_{pDIS} (np - n_0 p_0)}{c_{pDIS} \left(p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1-f_{DIS}^0} \right) + c_{nDIS} \left(n + n_0 \frac{1-f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right)} \quad (181)$$

5.6 Wpływ pola elektrycznego na kinetykę procesów SRH związanych z dyslokacjami

W tym krótkim podrozdziale skupiono się na wpływie jaki wywiera pole elektryczne na uśrednione współczynniki emisji nośników ładunku (e_{nDIS} i e_{pDIS}), które silnie zależą odległości energetycznej pasma dyslokacyjnego od krawędzi pasma przewodnictwa i krawędzi pasma walencyjnego. Podobna zależność dotyczy również współczynników wychwytu (c_{nDIS} i c_{pDIS}), co wynika z równań (172) i (176). Podobnie jak to ma miejsce dla poziomów pułpkowych związanych z defektami punktowymi, pole elektryczne przyczynia się do zwiększenia współczynników emisji z poziomów pułpkowych związanych z dyslokacjami. W pracy [24] rozważano 3 mechanizmy: efekt Frenkel-Poole, tunelowanie z udziałem stanów pasma dyslokacyjnego i dodatkowo tunelowanie to zmodyfikowane przez udział fononów. Udział fononów jest mało znaczący i według przeprowadzonych symulacji numerycznych, tylko te dwa pierwsze mechanizmy mają istotne znaczenie.

W polu elektrycznym szybkość rekombinacji netto, po uwzględnieniu zmiany efektywnych współczynników wychwytu wyraża się zależnością:

$$R_{DIS} - G_{DIS} = \frac{4G_{DIS}}{b} \frac{c_{nDIS} c_{pDIS} (np - n_0 p_0)}{\frac{1}{\delta_n c_{nDIS}} \left(p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1-f_{DIS}^0} \right) + \frac{1}{\delta_p c_{pDIS}} \left(n + n_0 \frac{1-f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right)}. \quad (182)$$

Wielkości δ_n i δ_p określają względne zmiany współczynników wychwytu elektronów i dziur dla stanów pułpkowych pasma dyslokacyjnego i są opisane w pracy [24].

5.7 Warunek neutralności elektrycznej i czas życia po uwzględnieniu dyslokacji niedopasowania

Wyrażenia na funkcje rozkładu w równowadze termicznej f_{DIS}^0 były wyprowadzone w pracy [24] oraz we wcześniejszych podrozdziałach w niniejszej pracy oraz w takiej formie zostały wykorzystywane w autorskim programie komputerowym.

Jeśli linia dyslokacji utworzona jest z atomów metali, wtedy średnia liczba elektronów przypadająca na zerwane wiązanie, gwarantująca neutralność elektryczną linii dyslokacji wynosi $\xi = 0.75$ [25]. Gdy $f_{DIS} = \xi/2$, wtedy linia dyslokacji jest obojętna elektrycznie. W ramach rozprawy uwzględniono dodatkowo energię wzajemnego oddziaływania naładowanych elektrycznie linii dyslokacji niedopasowania, co znacząco wpływa na równowagową funkcję rozkładu. Jeżeli w rozważaniach zostaną uwzględnione dodatkowe ładunki zgromadzone w paśmie dyslokacyjnym, to lokalny warunek neutralności elektrycznej przyjmie następującą postać:

$$n + N_A^- + f_T N_T + \frac{4G_{DIS}}{b} \left(f_{DIS} - \frac{\xi}{2} \right) = p + N_D^+ \quad (183)$$

Zmiany tych wielkości powinny pozostawać w relacji:

$$\delta n + \delta N_A^- + \delta f_T N_T + \delta f_{DIS} \frac{4G_{DIS}}{b} = \delta p + \delta N_D^+ \quad (184)$$

W nowym stanie ustalonym, który osiągnięto po oświetleniu struktury niewielkim strumieniem światła, zachodzi równość $R_n = R_p$, a równanie (178) przyjmie postać:

$$\begin{aligned} c_n \left[(n + \delta n) [1 - (f_{DIS} + \delta f_{DIS})] - n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} (f_{DIS} + \delta f_{DIS}) \right] = \\ c_p \left[(p + \delta p) (f_{DIS} + \delta f_{DIS}) - p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} [1 - (f_{DIS} + \delta f_{DIS})] \right] \end{aligned} \quad (185)$$

Stąd odejmując stronami równanie (178) od równania (185) i pomijając dające marginalny wpływ na zmianę parametrów, otrzymano poniższą zależność:

$$\frac{\delta n c_n (1 - f_{DIS}) - \delta p c_p f_{DIS}}{c_p \left[p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right] + c_n \left[n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right]} = \delta f_{DIS} \quad (186)$$

Po tym zabiegu, rekombinacja zachodząca z udziałem pasma dyslokacyjnego, jest traktowana jako uśredniony proces objętościowy i czasy życia elektronów i dziur przyjmują teraz postać:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{\partial R_n}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial f_{DIS}} \frac{\partial f_{DIS}}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial n} + \frac{\partial R_n}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial n} \quad (187)$$

Podobne rozumowanie przeprowadzone dla dziur pozwoli otrzymać zależność:

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{\partial R_p}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial f_T} \frac{\partial f_T}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial f_{DIS}} \frac{\partial f_{DIS}}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_D^+} \frac{\partial N_D^+}{\partial p} + \frac{\partial R_p}{\partial N_A^-} \frac{\partial N_A^-}{\partial p} \quad (188)$$

Natomiast z warunku neutralności elektrycznej (184), korzystając z rezultatów otrzymanych we wcześniejszym rozdziale rozprawy, otrzymano następujący związek pomiędzy δn i δp :

$$\delta n - \frac{(N_A - N_A^0) N_A^0}{p_0 N_A^0 + p N_A - p N_A^0} \delta p + \frac{c_n \delta n (1 - f_T) - c_p f_T \delta p}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T + \frac{4G_{DIS}}{b} \frac{\delta n c_n (1 - f_{DIS}) - \delta p c_p f_{DIS}}{c_p \left[p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right] + c_n \left[n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right]} = \delta p - \delta n \frac{(N_D - N_D^0) N_D^0}{n_0 N_D^0 + n N_D - n N_D^0} \quad (189)$$

Stąd:

$$\delta n \cdot Z1 = \delta p \cdot Z2, \quad (190)$$

gdzie:

$$Z1 = 1 - Z_{N_{AD}} + \frac{c_n (1 - f_T)}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T + \frac{4G_{DIS}}{b} \frac{c_n (1 - f_{DIS})}{c_p \left[p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right] + c_n \left[n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right]} \quad (191a)$$

$$Z2 = 1 - Z_{N_D^+} + \frac{c_p f_T}{c_n \left(n + \frac{1}{\alpha} n_1 \right) + c_p (p + \alpha p_1)} N_T + \frac{4G_{DIS}}{b} \frac{c_p f_{DIS}}{c_p \left[p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} \right] + c_n \left[n + n_0 \frac{1 - f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right]} \quad (191b)$$

Stąd:

$$\delta n = \frac{Z2}{Z1} \delta p; \quad \delta p = \frac{Z1}{Z2} \delta n \quad (192)$$

W ten sposób otrzymano związek pomiędzy koncentracją nadmiarowych elektronów δn i dziur δp powstałych w wyniku działania niewielkiego wymuszenia optycznego. Ma to miejsce w sytuacji, gdy obok procesów międzypasmowych zachodzą procesy G-R z udziałem stanów pułpkowych: o koncentracji N_T , dyslokacji niedopasowania o gęstości

jamek trawienia G_{DIS} , wektorce Burgersa o długości b , oraz donorów i akceptorów odpowiednio o koncentracjach: N_D i N_A .

W układzie równań transportu przedstawionych w drugim rozdziale rozprawy, kluczową rolę odgrywa równanie Poissona, które po uwzględnieniu ładunku związanego z pasmem dyslokacyjnym przyjmie postać:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{\varepsilon \varepsilon_0} \left\{ n + N_A^- + f_T N_T + \frac{4G_{DIS}}{c} \left(f_{DIS} - \frac{\xi}{2} \right) - p - N_D^+ \right\} \quad (193)$$

W iteracyjnym rozwiązaniu równania Poissona wykorzystano metodę Newtona, gdzie np. w pierwszej iteracji uzyskane przyrosty wyrażono następująco:

$$\delta n = \frac{\partial n}{\partial \Psi} \delta \Psi; \delta N_A^- = \frac{\partial N_A^-}{\partial \Psi} \delta \Psi; \delta f_T = \frac{\partial f_T}{\partial \Psi} \delta \Psi; \delta p = \frac{\partial p}{\partial \Psi} \delta \Psi; \delta N_D^+ = \frac{\partial N_D^+}{\partial \Psi} \delta \Psi; \delta f_{DIS} = \frac{\partial f_{DIS}}{\partial \Psi} \delta \Psi, \quad (194)$$

gdzie δf_{DIS} można wyrazić również poprzez według zależności (186) δn i δp , jak poniżej:

$$\delta f_{DIS} = \frac{c_n(1-f_{DIS}^0) \frac{\partial n}{\partial \Psi} - c_p f_{DIS}^0 \frac{\partial p}{\partial \Psi}}{c_p \left[p + p_0 \frac{f_{DIS}^0}{1-f_{DIS}^0} \right] + c_n \left[n + n_0 \frac{1-f_{DIS}^0}{f_{DIS}^0} \right]} \delta \Psi \quad (195)$$

5.6 Równowagowa funkcja rozkładu bez uwzględnienia elektrycznego oddziaływania pomiędzy liniami dyslokacji

Ten podrozdział poświęcony jest wyznaczeniu równowagowej funkcji rozkładu f_{DIS}^0 . W dodatku B pokazano numeryczną metodę wyznaczania natężenia pola elektrycznego wokół dyslokacji, którą wykorzystuje się w programie promotora pracy. Licząc minimum energii swobodnej Helmholtza, wyznacza się ilość elektronów w paśmie dyslokacyjnym, a tym samym i równowagową funkcję rozkładu. Rys. 43 ilustruje wyniki przeprowadzonych obliczeń. Mając natężenie pola elektrycznego można oszacować numerycznie, energię elektryczną zgromadzoną w polu elektrycznym, wokół dyslokacji.

Jak można wywnioskować z wcześniejszych rozważań, wyznaczenie równowagowej funkcji rozkładu jest kluczowym problemem, którego rozwiązanie umożliwi obliczenie szybkości rekombinacji nośników z udziałem stanów pasma dyslokacyjnego.

Funkcję f_{DIS}^0 można wyznaczyć z warunku minimum energii swobodnej w sposób analityczny. Dostępne komercyjnie programy komputerowe do symulacji parametrów

struktur półprzewodnikowych nie mają w swojej bazie równowagowej funkcji rozkładu dla dyslokacji. Można ją natomiast wyliczyć znając parametry takie jak powinowactwo elektronowe X i potencjał elektryczny Ψ . Jako pierwsza zostanie wyznaczona energię swobodna elektronów zgromadzonych w paśmie dyslokacyjnym w elemencie objętości p^2H przedstawionym na Rys. 46. W przypadku, gdy tworzy się pasmo dyslokacyjne dla linii dyslokacji utworzonej z atomów metali (dyslokacja α), to w tym elemencie objętości powstanie $2(2p/b)$ stanów energetycznych.

Nieskompensowany ładunek elektryczny zgromadzony w paśmie dyslokacyjnym w tym elemencie objętości jest równy:

$$dq = -e2(2p/c) \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) \quad (196)$$

Energia swobodna Helmholtza dla dyslokacji zawartych w rozpatrywanym elemencie objętości Hp^2 , równa jest:

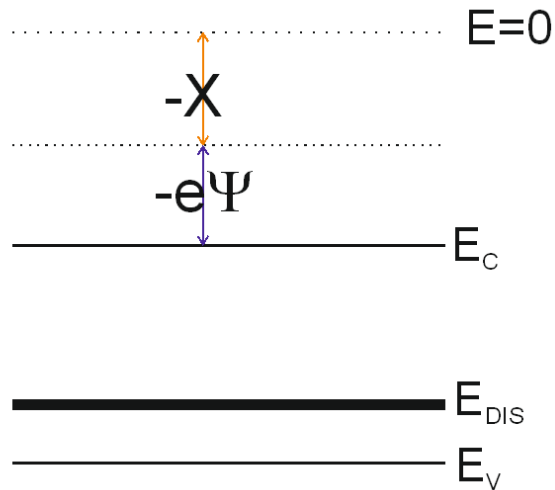
$$F = U - TS, \quad (197)$$

gdzie U jest energią dyslokacji, T temperaturą, a S entropią dyslokacji. Jeżeli w analizowanym elemencie objętości materiał półprzewodnikowy cechuje się powinowactwem elektronowym X , potencjał elektryczny równy jest Ψ , a średnia wartość energii w paśmie dyslokacyjnym leży poniżej krawędzi pasma przewodnictwa (Rys. 49) o wartość E_{DIS} , to energia swobodna wyrazi się zależnością:

$$F = (-X - e\Psi - E_{DIS}) 2(2p/c) \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) + \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r \int_V E^2 dV - k_B T 2(2p/c) \left[f_{DIS}^0 \ln f_{DIS}^0 + (1 - f_{DIS}^0) \ln (1 - f_{DIS}^0) \right], \quad (198)$$

gdzie E jest natężeniem pola elektrycznego, którego źródłem jest nieskompensowany ładunek zgromadzony w liniach dyslokacji.

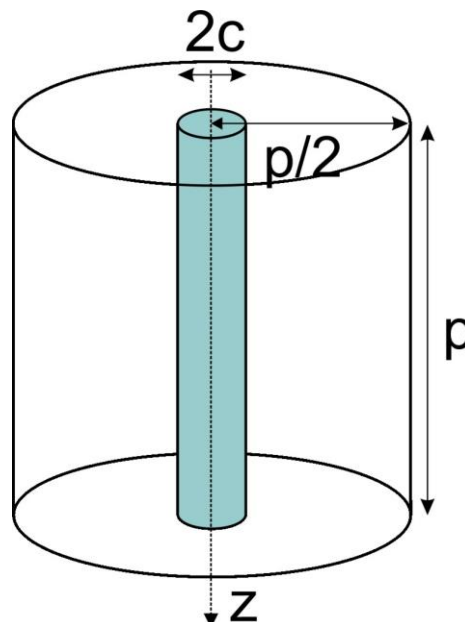
Przy założeniu, że ładunek w linii dyslokacji jest zdelokalizowany, prawo Gaussa zastosowane w cylindrycznym obszarze o wysokości p i średnicy $2c$ pozwala uzyskać wyrażenie na energię elektryczną fragmentu linii dyslokacji (Rys. 50). W analizowanym elemencie objętości są dwie takie linie wzajemnie prostopadłe.



Rys. 49 Schemat struktury pasmowej półprzewodnika. $E=0$ oznacza poziom próżni, X jest powinowactwem elektronowym, e ładunkiem elektronu, a Ψ potencjałem elektrycznym. E_C jest krawędzią pasma przewodnictwa, E_V pasma walencyjnego, a E_{DIS} jest średnią energią jonizacji pasma dyslokacyjnego.

Zakładając, że ładunek jest równomiernie rozłożony w linii dyslokacji w cylindrycznym obszarze o promieniu równym stałej sieci c (Rys. 50), gęstość ładunku wyniesie:

$$\frac{2e}{b\pi c^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) \quad (199)$$



Rys. 50 Schemat fragmentu linii dyslokacji o długości p , umieszczonej w analizowanym elemencie objętości. Energię elektryczną zgromadzoną jest w rdzeniu dyslokacji, który stanowi cylindryczny obszar o promieniu c , oraz w obszarze otaczającym rdzeń o średnicy p .

Prawo Gaussa w obszarze $0 \leq r \leq c$ można opisać następująco:

$$\frac{1}{\varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{2e}{b\pi c^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) \pi r^2 = E 2\pi r \quad (200)$$

Stąd:

$$\frac{1}{\varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e}{b\pi c^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) r = E \quad (201)$$

Energia zgromadzona wokół linii o długości p w cylindrze o promieniu c wynosi:

$$E_1 = \frac{1}{2} \varepsilon_s \varepsilon_0 p \int_0^c E^2 2\pi r dr = \frac{1}{\varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e^2 \pi p}{b^2 \pi^2 c^4} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \int_0^c r^3 dr = \frac{1}{4\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e^2 p}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \quad (202)$$

Dla $r \geq c$, prawo Gaussa ma postać

$$\frac{1}{\varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e}{b} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) = \pi r E \quad (203)$$

Stąd:

$$\frac{1}{\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e}{b} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) \frac{1}{r} = E \quad (204)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \varepsilon_s \varepsilon_0 p \int_c^R E^2 2\pi r dr = \frac{1}{\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e^2}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \int_c^R \frac{dr}{r} = \frac{1}{\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e^2 p}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \ln \frac{R}{c} \quad (205)$$

Tak więc całkowita energia elektryczna wytworzona przez ładunki zgromadzone w dyslokacjach w elemencie objętości $p^2 H$ wynosi:

$$E = 2E_1 + 2E_2 = \frac{2}{\pi \varepsilon_s \varepsilon_0} \frac{e^2 p}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right) \quad (206)$$

Promień R jest tu charakterystyczną maksymalną odległością, do której dociera pole elektryczne. W obliczeniach przyjęto tą odległość $R=1 \mu\text{m}$. O ile założenie długich linii dyslokacji nie stwarza problemów obliczeniowych, to wybór odległości R stwarza pewien problem, gdyż energia elektryczna rośnie wraz ze zwiększaniem R . Ale wzrost ten jest logarytmiczny i nawet znaczne zwiększenie R , nieznacznie zmienia wartość logarytmu $\ln \frac{R}{c}$.

Energia swobodna dla dwóch fragmentów o długości p , krzyżujących się linii dyslokacji wyrazi się zależnością:

$$F = (-X - e\Psi - E_g + E_{DIS}) 2(2p/b) \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) + \frac{2}{\pi \epsilon_s \epsilon_0} \frac{e^2 p}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right) - T k_B 2(2p/b) [f_{DIS}^0 \ln f_{DIS}^0 + (1 - f_{DIS}^0) \ln (1 - f_{DIS}^0)] \quad (207)$$

Natomiast w warunkach równowagi termicznej:

$$\frac{\partial F}{\partial f_{DIS}^0} = 0 \quad (208)$$

Czyli:

$$-X - e\Psi - E_g + E_{DIS} + \frac{e^2}{\pi \epsilon_s \epsilon_0 b} \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right) \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right) - k_B T \ln \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} = 0 \quad (209)$$

Numeryczne rozwiązanie powyższego równania pozwala wyznaczyć wartość f_{DIS}^0 .

W niższych temperaturach pierwsza składowa powinna być większa niż trzecia. Wtedy równanie (209) można uprościć i otrzymać przybliżoną zależność.

$$f_{DIS}^0 = \frac{\pi c \epsilon_0 (X + e\Psi + E_g - E_{DIS})}{e^2 \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right)} + \frac{\xi}{2} \quad (210)$$

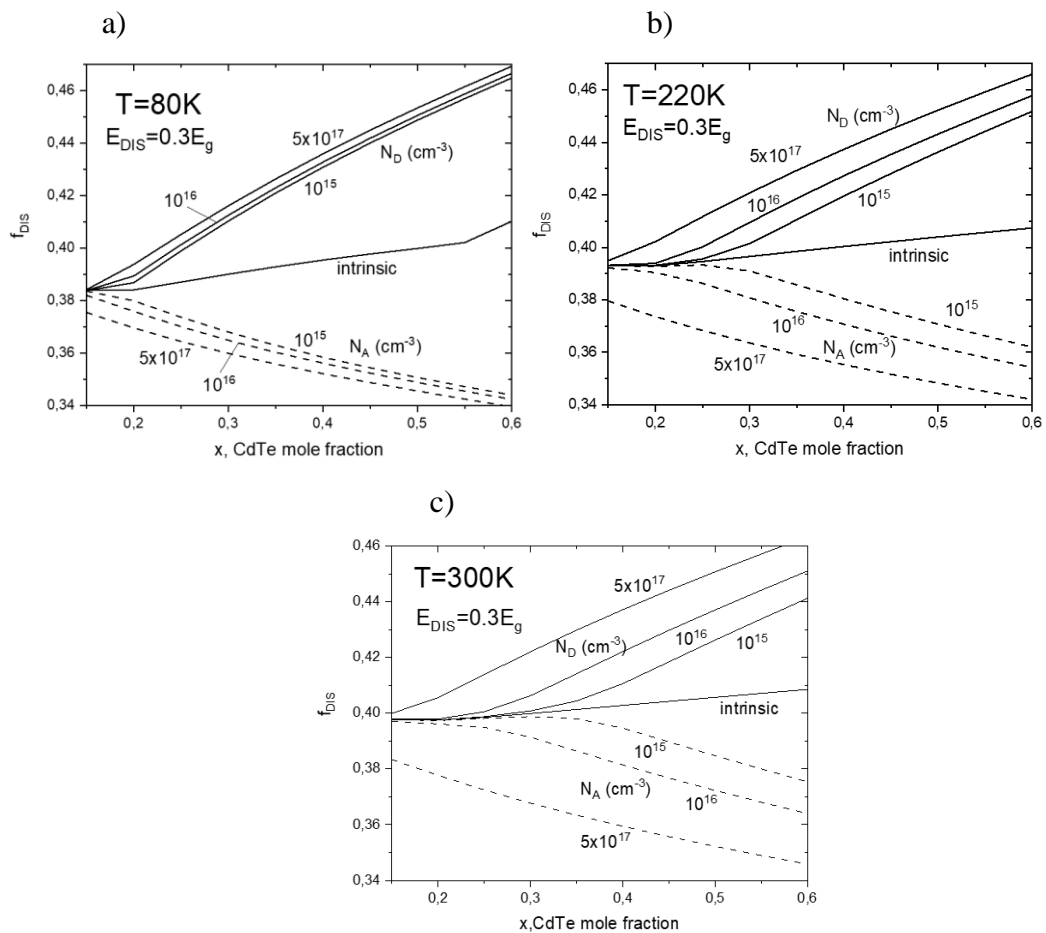
Widać, że f_{DIS}^0 niewiele różni się od $\xi/2$. W zależności od znaku wyrażenia $(X + e\Psi + E_{DIS})$ uwarunkowanego wielkością potencjału elektrycznego Ψ , linia dyslokacji może gromadzić dodatkowe elektrony ($f_{DIS}^0 > \frac{\xi}{2}$), albo wykazywać ładunek dodatni.

Poniższe rysunki przedstawiają wyliczone wartości równowagowej funkcji rozkładu f_{DIS}^0 dla wybranych temperatur i przy założeniu, że $R=1\mu\text{m}$.

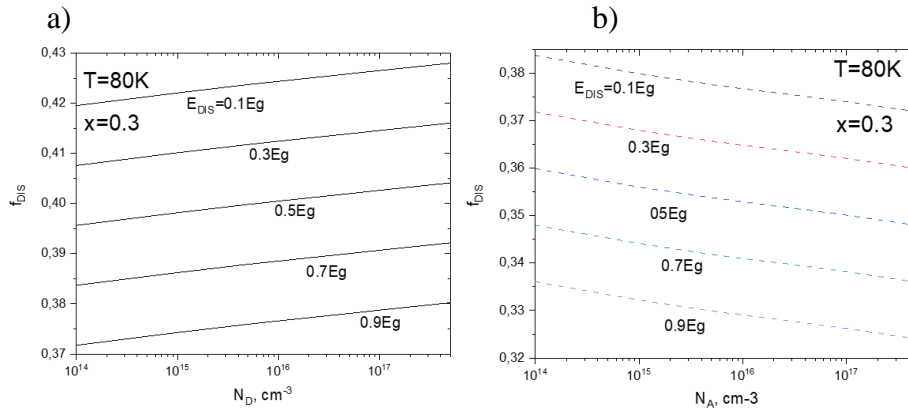
W obliczeniach przyjęto wartości $E_{DIS}=0.3E_g$, gdyż prowadzone wcześniej wyliczenia dla tej wartości dawały najlepszą zgodność z danymi eksperymentalnymi charakterystyk $I(V)$ fotodiod w funkcji gęstości dyslokacji niedopasowania [24]. Dla $f_{DIS}^0 = 0.375$ wypadkowy ładunek na linii dyslokacji wynosi 0. Na Rys. 51 widać, że wraz ze wzrostem koncentracji domieszek zmienia się funkcja rozkładu. Rośnie wraz ze wzrostem koncentracji donorów i maleje ze wzrostem koncentracji akceptorów. W temperaturze 80 K (Rys. 51a) wpływ koncentracji domieszek jest niewielki. Zwiększa się wraz ze wzrostem temperatury. Wraz ze wzrostem składu molowego rośnie wartość f_{DIS}^0 w materiale typu n, a maleje

w materiałach typu p. W materiale samoistnym wzrost ten jest nieznaczny, a wartości f_{DIS}^0 mieszczą się w przedziale 0.38-0.4.

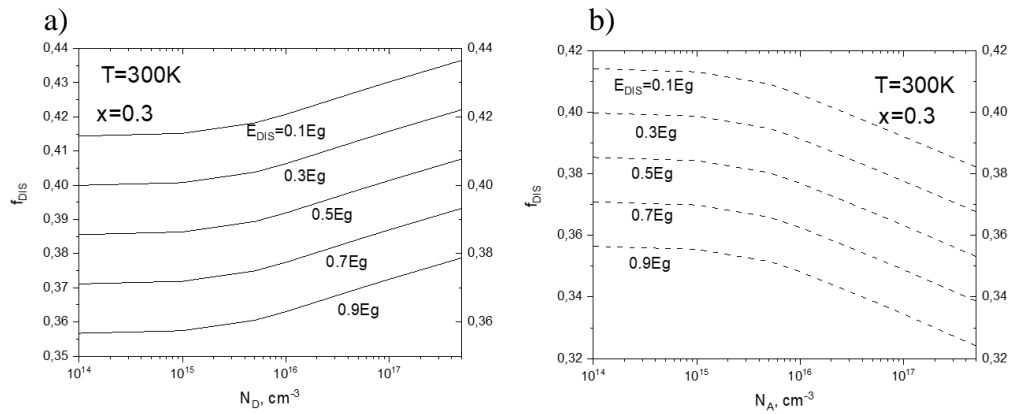
Poniżej na rysunkach Rys. 52, Rys. 53, Rys. 54 i Rys. 55 przedstawione są wyliczenia f_{DIS}^0 w funkcji koncentracji domieszek, dla temperatur 80 K i 300 K. Symulacje numeryczne dokonano dla składów molowych $x=0,2$ i $x=0,3$, czyli najczęściej wykorzystywanych do konstrukcji fotonowych detektorów podczerwieni. Obliczenia przeprowadzono dla różnych energii pasma dyslokacyjnego. Gdy energia E_{DIS} zbliża się do krawędzi pasma walencyjnego wtedy f_{DIS}^0 rośnie. Jednak dla wybranej wartości E_{DIS} (na przykład równej $0,3E_g$) zakres zmian w funkcji koncentracji domieszek jest na tyle mały, że w obliczeniach można przyjąć uśrednioną wartość f_{DIS}^0 wynikającą ze zilustrowanych obliczeń.



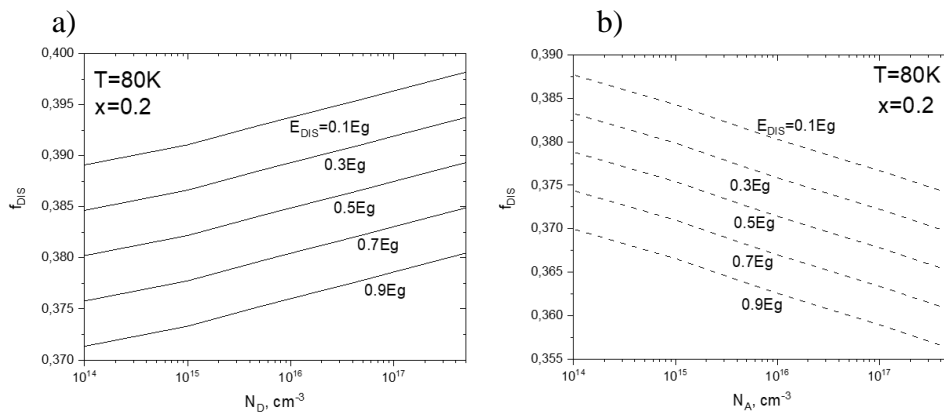
Rys. 51 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 w funkcji składu molowego x , w temperaturach odpowiednio 80 K (Rys. 51a), 220 K (Rys. 51b) i 300 K (Rys. 51c). Średnia energia pasma dyslokacyjnego leży $0,3 E_g$ powyżej krawędzi pasma walencyjnego. Krzywe ciągłe dotyczą materiałów typu n o podanej koncentracji donorów. Krzywe przerywane dotyczą materiałów typu p o podanej koncentracji elektronów.



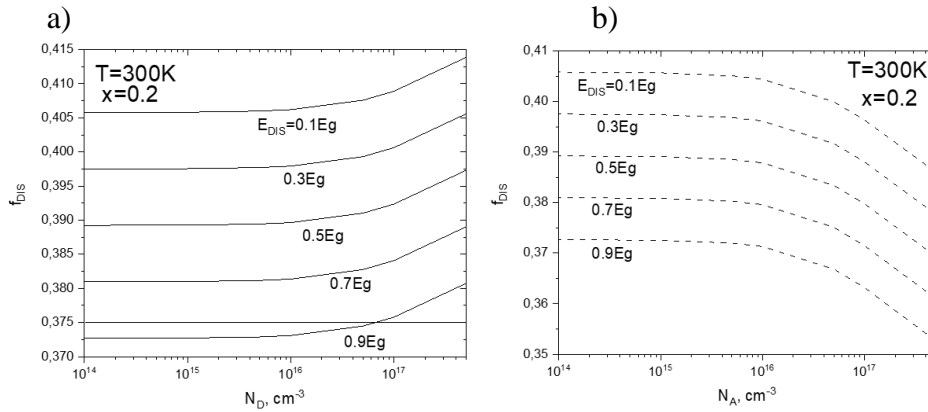
Rys. 52 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 dla materiału o składzie molowym $x=0,3$ w temperaturze 80 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 52a) i akceptorów (Rys. 52b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS} .



Rys. 53 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 dla materiału o składzie molowym $x=0,3$ w temperaturze 300 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 53a) i akceptorów (Rys. 53b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS} .



Rys. 54 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 dla materiału o składzie molowym $x=0,2$ w temperaturze 80 K w funkcji koncentracji donorów (Rys. 54a) i akceptorów (Rys. 54b) dla różnych założonych wartości energii E_{DIS} .



Rys. 55 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 dla materiału o składzie molowym $x=0,2$ w temperaturze 300 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 55a) i akceptorów (Rys. 55b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS} .

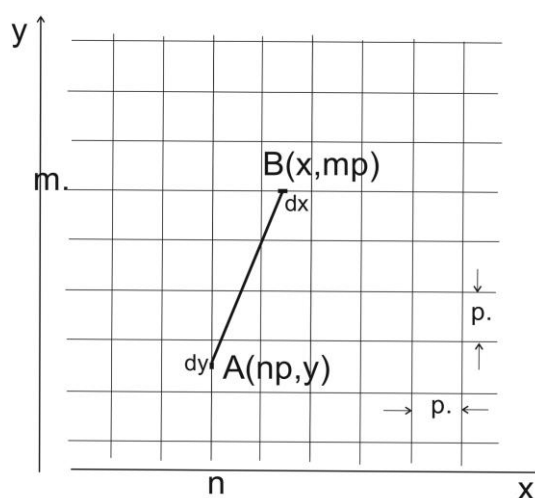
5.7 Równowagowa funkcja rozkładu po uwzględnieniu oddziaływania elektrycznego pomiędzy liniami dyslokacji

W rozważaniach we wcześniejszym podrozdziale szacowano energię elektryczną zgromadzoną w polu elektrycznym, wytwarzanym przez nieskompensowany ładunek zgromadzony w linii dyslokacji. W tym podrozdziale przeanalizowano energię elektryczną, będącą wynikiem wzajemnego oddziaływania elektrycznego linii dyslokacji niedopasowania gromadzących ładunek elektryczny i znajdujących się w obszarze wybranego interfejsu. Natomiast pominięta została energia oddziaływania elektrycznego pomiędzy dyslokacjami położonymi w różnych interfejsach. Ma to swoje uzasadnienie, ponieważ przy skokowej zmianie składu molowego odległości pomiędzy interfejsami są znacznie większe niż odległości pomiędzy liniami dyslokacji w danym interfejsie. Założono, że rozważane elementy są strukturami o powierzchniach kwadratowych, o boku o długości L . Odległość między liniami dyslokacji - p , jest wyznaczana numerycznie w programie opracowanym przez dr Jóźwikowską [60], [68] i wyznaczana z warunku minimum energii sprężystej, zgromadzonej w wyniku naprężeń i odkształceń mechanicznych spowodowanych różnicami stałej sieci poszczególnych warstw heterostruktury. Program dodatkowo w bilansie całkowitej energii sieci krystalicznej, uwzględnia energię elektryczną, zgromadzoną w polu elektrycznym wokół linii dyslokacji. Jednak, jak wcześniej wykazano w pracy, energia sprężysta jest przynajmniej o rząd wielkości większa niż energia elektryczna dyslokacji. Dlatego nie wpływa ona w sposób istotny na gęstość dyslokacji

niedopasowania. Stąd można z warunku minimum energii sprężystej, wyznaczyć w heterostrukturze gęstość linii dyslokacji niedopasowania w poszczególnych interfejsach. Z kolei dyslokacje te stanowią zbiór zerwanych wiązań, znajdujących się w odległościach określonych przez wektor Burgesa.

W tym punkcie należy traktować p jako arbitralnie przyjęte wartości i należy wyznaczyć minimum energii swobodnej dla elementu objętości Hp^2 rozważając różne wartości składu molowego x , energii E_{DIS} i domieszkowania struktur. Pozwoli to wyznaczyć równowagową funkcję rozkładu. Następnie do tak wyznaczonej energii, należy dodać potencjalną energię elektryczną, będącą rezultatem wzajemnego oddziaływania naładowanych elektrycznie linii dyslokacji.

Na początku należy obrać poziomą linię dyslokacji i oznaczyć ją np. numerem m , jak na Rys. 56. Następnie należy wybrać w jej obszarze niewielki element o długości dy . Dodatkowo, należy przyjąć, że zgromadzony ładunek w paśmie dyslokacyjnym na odcinku dx ma wartość $-epdx$. Gęstość liniowa wynosi $\rho = (2/b)(f_{DIS}^0 - \xi)$. Długość odcinka AB (Rys. 56) wynosi $\sqrt{(x - np)^2 + (y - mp)^2}$.



Rys. 56 Schemat siatki dyslokacji. Linie dyslokacji niedopasowania tworzą matrycę naładowanych ładunkiem elektrycznym linii rozmieszczonych ze stałym odstępem p . Element o długości dy w pionowej linii o numerze n oddziałuje z elementem o długości dx znajdującym się na poziomej linii o numerze m .

Energia potencjalna odcinka dx będąca wynikiem oddziaływania z ładunkiem zgromadzonym na odcinku dy wynosi:

$$dU_n = \frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \frac{dy}{\sqrt{(x-np)^2 + (y-mp)^2}} \quad (211)$$

Energia potencjalna spowodowana oddziaływaniem odcinka dx, z całą linią o numerze n wynosi:

$$U_n = \frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \int_0^L \frac{dy}{\sqrt{(x-np)^2 + (y-mp)^2}} \quad (212)$$

Rozwiązaniem jest wyrażenie:

$$U_n = \frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \ln \left(y-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (y-mp)^2} \right) \Big|_0^L =$$

$$\frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \left\{ \ln \left(L-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (L-mp)^2} \right) - \ln \left(-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (mp)^2} \right) \right\} \quad (213)$$

Energię oddziaływania całej linii n z całą linią m, wyraża się zależnością:

$$U_{n,m} = \frac{e^2 \rho^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \int_0^L \left\{ \frac{\ln \left(L-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (L-mp)^2} \right) - \ln \left(-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (mp)^2} \right)}{\ln \left(-mp + \sqrt{(x-np)^2 + (mp)^2} \right)} \right\} dx \quad (214)$$

Powyższą całkę łatwo obliczyć, gdyż:

$$\int \ln \left(a + \sqrt{x^2 + a^2} \right) dx = -x + x \ln \left(a + \sqrt{x^2 + a^2} \right) + a \ln \left[2 \left(x + \sqrt{x^2 + a^2} \right) \right]$$

Stąd:

$$U_{n,m} = \frac{e^2 \rho^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \left\{ \begin{aligned} & (L-np) \cdot \ln \frac{a + \sqrt{(L-np)^2 + a^2}}{g + \sqrt{(L-np)^2 + g^2}} + np \cdot \ln \frac{a + \sqrt{(np)^2 + a^2}}{g + \sqrt{(np)^2 + g^2}} + \\ & (L-np) \ln \frac{L-np + \sqrt{(L-np)^2 + (L-mp)^2}}{-np + \sqrt{(np)^2 + (L-mp)^2}} + mp \ln \frac{L-np + \sqrt{(L-np)^2 + (mp)^2}}{-np + \sqrt{(np)^2 + (L-mp)^2}} \end{aligned} \right\}, \quad (215)$$

gdzie $a = L - mp$ i $g = -mp$

Całkowita energia elektryczna będąca wynikiem oddziaływania pionowych linii dyslokacji, z poziomymi wynosi:

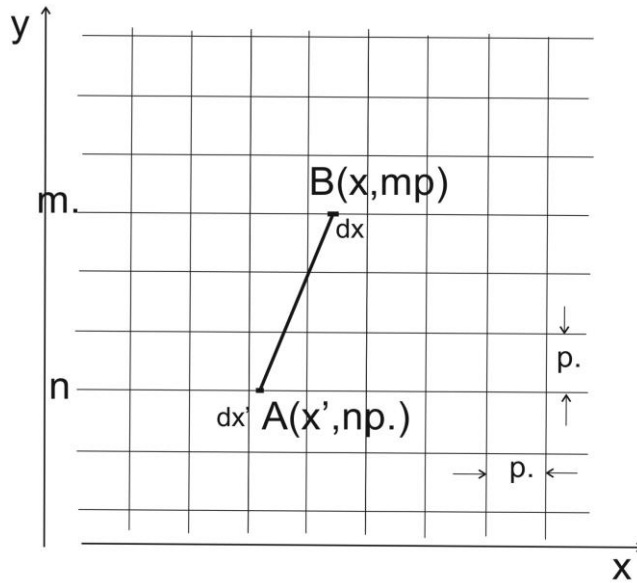
$$U_{\perp} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N U_{n,m} = \frac{e^2 (4/b^2) (f_{DIS}^0 - \xi)^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \check{U}_{n,m_{\perp}}, \quad (216)$$

gdzie:

$$\check{U}_{n,m_{\perp}} = \left\{ \begin{array}{l} (L-np) \cdot \ln \frac{a + \sqrt{(L-np)^2 + a^2}}{g + \sqrt{(L-np)^2 + g^2}} + np \cdot \ln \frac{a + \sqrt{(np)^2 + a^2}}{g + \sqrt{(np)^2 + g^2}} + \\ (L-np) \ln \frac{L-np + \sqrt{(L-np)^2 + (L-mp)^2}}{-np + \sqrt{(np)^2 + (L-mp)^2}} + mp \ln \frac{L-np + \sqrt{(L-np)^2 + (mp)^2}}{-np + \sqrt{(np)^2 + (L-mp)^2}} \end{array} \right\}, \quad (217)$$

W powyższych rozważaniach należy dodatkowo uwzględnić energię elektryczną będącą efektem oddziaływania linii równoległych zarówno poziomych jak i pionowych

Kolejne rozważania dotyczą przypadku poziomej linii dyslokacji, oznaczonej, jak na Rys. 57 numerem n . Analogicznie jak w przypadku pionowych linii, należy wybrać niewielki element o długości dx . Zgromadzony ładunek w paśmie dyslokacyjnym na odcinku dx wynosi $-e\rho dx$. Długość odcinka AB wynosi $\sqrt{(x-x')^2 + p^2(m-n)^2}$.



Rys. 57 Schemat siatki dyslokacji. Element o długości dx' w poziomej linii o numerze n oddziałuje z elementem o długości dx znajdującym się na poziomej linii o numerze m .

Energia potencjalna odcinka dx będąca wynikiem oddziaływania z ładunkiem zgromadzonym na odcinku dx' wynosi:

$$dU_n = \frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \frac{dx'}{\sqrt{(x-x')^2 + p^2(m-n)^2}} \quad (218)$$

Energia potencjalna elementu dx od n -tej linii ($m \neq n$) wynosi:

$$U_n = \frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \int_0^L \frac{dx'}{\sqrt{(x-x')^2 + p^2(m-n)^2}} = -\frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \ln \left[(x-x') + \sqrt{(x-x')^2 + p^2(m-n)^2} \right] \Big|_0^L =$$

$$\frac{e^2 \rho^2 dx}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \left\{ -\ln \left[x-L + \sqrt{(x-L)^2 + p^2(m-n)^2} \right] + \ln \left[x + \sqrt{x^2 + p^2(m-n)^2} \right] \right\} \quad (219)$$

Teraz można wyznaczyć energię potencjalną układu równoległych linii n i m .

W tym celu należy skorzystać z tożsamości:

$$\int \ln(x + \sqrt{x^2 + a^2}) dx = -x + x \ln(a + \sqrt{x^2 + a^2}) + a \ln[2(x + \sqrt{x^2 + a^2})]$$

$$U_{n,m} = \frac{e^2 \rho^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \int_0^L \left\{ \ln[x + \sqrt{x^2 + p^2(m-n)^2}] - \ln[x-L + \sqrt{(x-L)^2 + p^2(m-n)^2}] \right\} dx \quad (220a)$$

Energia potencjalna układu linia m -linia n wynosi ($m \neq n$):

$$U_{n,m} = \frac{e^2 \rho^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} 2 \left\{ a - \sqrt{a^2 + L^2} + L \ln \frac{L + \sqrt{a^2 + L^2}}{a} \right\}, \quad (220)$$

gdzie $a^2 = p^2(m-n)^2$

Ostatecznie, całkowita energia oddziaływań linii poziomych wynosi:

$$U_{\parallel} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1, m \neq n}^N U_{n,m} = \frac{e^2 (4/b^2) (f_{DIS}^0 - \xi)^2}{4\pi \epsilon_s \epsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1, m \neq n}^N \check{U}_{n,m_{\parallel}} \quad (221)$$

gdzie $\check{U}_{n,m_{\parallel}} = 2 \left\{ a - \sqrt{a^2 + L^2} + L \ln \frac{L + \sqrt{a^2 + L^2}}{a} \right\}$

Całkowita energia, po uwzględnieniu oddziaływań równoległych i pionowych linii:

$$U = U_{\perp} + 2U_{\parallel} \quad (222)$$

Ponieważ długość wszystkich linii dyslokacji wynosi $2NL$, to na jednostkę długości będzie przypadała energia równa:

$$\rho_E = \frac{U_{\perp} + 2U_{\parallel}}{2NL} \quad (223)$$

Natomiast w objętości $p^2 H$ energia ta wynosi:

$$E_{el} = \rho_E 2p \quad (224)$$

Natomiast energia swobodna Helmholtza w odniesieniu do objętości p^2H jeśli uwzględnimy energię elektryczną wzajemnego oddziaływania linii dyslokacji, wyrazi się zależnością:

$$F = (-X - e\Psi - E_{DIS}) 2(2p/b)(f_{DIS}^0 - \xi) + \frac{2}{\pi\epsilon_s\epsilon_0} \frac{e^2 p}{b^2} \left(f_{DIS}^0 - \frac{\xi}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right) + \frac{2p}{2NL} \frac{e^2 (4/b^2)(f_{DIS}^0 - \xi)^2}{4\pi\epsilon_s\epsilon_0} \left(\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \check{U}_{n,m_{\perp}} + \sum_{n=1}^N \sum_{m=1, m \neq n}^N \check{U}_{n,m_{\parallel}} \right) -$$

$$T k_B 2(2p/b) [f_{DIS}^0 \ln f_{DIS}^0 + (1 - f_{DIS}^0) \ln(1 - f_{DIS}^0)] \quad (225)$$

Z warunku $\frac{\partial F}{\partial f_{DIS}^0} = 0$ otrzymano równanie:

$$2(-X - e\Psi - E_{DIS}) + \frac{e^2}{\pi\epsilon_s\epsilon_0 b} (f_{DIS}^0 - \xi) \left(\frac{1}{4} + \ln \frac{R}{c} \right) + \frac{e^2}{NL} \frac{(f_{DIS}^0 - \xi)}{2\pi\epsilon_s\epsilon_0 b} \left(\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \check{U}_{n,m_{\perp}} + \sum_{n=1}^N \sum_{m=1, m \neq n}^N \check{U}_{n,m_{\parallel}} \right) -$$

$$2k_B T \ln \frac{f_{DIS}^0}{1 - f_{DIS}^0} = 0 \quad (226)$$

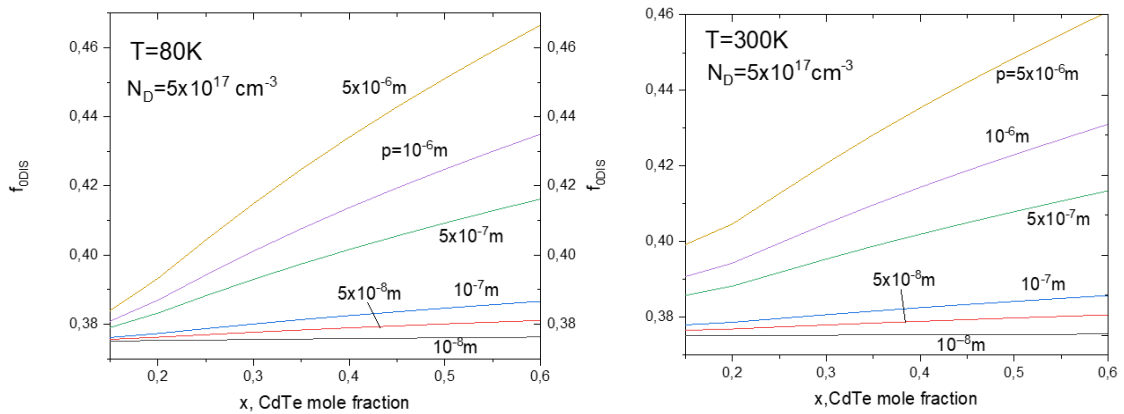
Z którego numerycznie można wyznaczyć: f_{DIS}^0 .

Poniższe rysunki ilustrują zależności f_{DIS}^0 od składu molowego i domieszkowania struktur oraz odległościami pomiędzy liniami dyslokacji z uwzględnieniem energii wzajemnego oddziaływania naładowanych elektrycznego linii dyslokacji, które gromadzą nie zrównoważony ładunek elektryczny. Rys. 58 i Rys. 59 przedstawiają zależności funkcji f_{DIS}^0 od składu molowego w silnie domieszkowanych materiałach typu p i n.

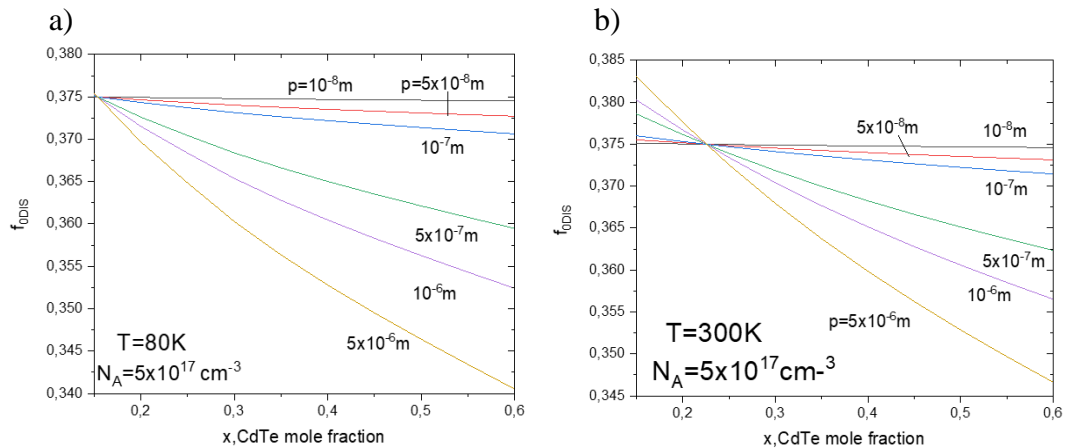
W materiałach silnie domieszkowanych typu p, gdy gęstość dyslokacji jest mała w temperaturze 80 K pasmo dyslokacyjne posiada niedobór elektronów i $f_{DIS}^0 < 0,375$. Naładowane dodatnio linie dyslokacji oddziałują ze sobą, zwiększając energię elektryczną. Ma to wpływ na wzrost energii Helmholtza i prowadzi do zmniejszenia nie zrównoważonego ładunku. Gdy $p < 10^{-7} m$, można założyć, że $f_{DIS}^0 \approx 0,375$.

a)

b)



Rys. 58 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 w funkcji składu molowego, w silnie domieszkowanych materiałach typu n ($N_D=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), w temperaturze 80 K (Rys. 58a) i 300 K (Rys. 58b). Parametr p przy krzywych oznacza średnią odległość między liniami dyslokacjami. Pasma dyslokacyjne znajduje się w odległości $0,3E_g$ od krawędzi pasma walencyjnego.



Rys. 59 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS}^0 w funkcji składu molowego, w silnie domieszkowanych materiałach typu p ($N_A=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), w temperaturze 80 K (Rys.59 a) i 300 K (Rys. 59b). Parametr p przy krzywych oznacza średnią odległość między liniami dyslokacjami. Pasma dyslokacyjne znajduje się w odległości $0,3E_g$ od krawędzi pasma walencyjnego.

Ten sam wniosek dotyczy struktur w temperaturze 300K. W tej temperaturze dla silnie domieszkowanych struktur typu n, o składach molowych $x < 0,25$ linie dyslokacji są naładowane ujemnie. Podobnie jak w materiałach typu p, gdy odległość pomiędzy liniami dyslokacji jest mniejsza niż 10^{-7} m , można założyć neutralność elektryczną i $f_{DIS}^0 \approx 0,375$. Zaprezentowane obliczenia dotyczą struktury o kwadratowej powierzchni o krawędzi $L=20 \mu\text{m}$.

Równowagową funkcję rozkładu dla dyslokacji możemy wyznaczyć z warunku minimum energii swobodnej Helmholtza. Aby tego dokonać należy uwzględnić energię elektryczną zgromadzoną w polu elektrycznym, wokół naładowanych linii dyslokacji oraz energię elektryczną wzajemnego oddziaływania elektrycznego linii dyslokacji. Gdy odstęp pomiędzy liniami dyslokacji jest mniejszy niż 10^{-7} m, wzrost energii elektrycznej powoduje, że dyslokacje dążą do neutralności elektrycznej, aby w ten sposób zmniejszyć energię swobodną. Można wtedy przyjąć, że $f_{DIS}^0 \approx 0,375$. Uwzględnienie wzajemnego oddziaływania elektrycznego linii dyslokacji umożliwiło bardziej realistyczne oszacowanie parametru f_{DIS}^0 . Wpływ dyslokacji na czas życia poprzez dodatkowy kanał G-R uwidacznia się na charakterystykach prądowo-napięciowych fotodiod z HgCdTe. W niniejszej rozprawie ilustruje to Rys. 8. Do wyliczeń przedstawionych na Rys. 8 wykorzystano zmodyfikowany program komputerowy promotora z zaimplementowanymi rezultatami uzyskanymi w tym rozdziale rozprawy.

6. Procesy rekombinacji powierzchniowej

6.1 Wprowadzenie

W tym rozdziale znajduje się odpowiedź na pytanie, jak ważne w kontekście mechanizmów G-R SRH są procesy rekombinacyjne odbywające się na powierzchni heterostruktur. Wraz z miniaturyzacją pojedynczych pikseli w matrycach detektorów podczerwieni uwidacznia się silny wpływ rekombinacji poprzez centra pułapkowe zlokalizowane przy ich powierzchni. Wiąże się to z faktem, że wraz z miniaturyzacją przyrządów stosunek objętości do powierzchni nieustannie maleje, powodując, że rola powierzchni nabiera dużego znaczenia i często stanowi duże wyzwanie technologiczne. Jako zabezpieczenie przed degradacją powierzchni przyrządu, stosuje się różne techniki pasywacji powierzchni polegające na osadzeniu na powierzchni przyrządu substancji, które mogą wysycić zerwane wiązania. Ważne jest, aby dobrany materiał miał właściwości izolujące i jednocześnie miał jak najbardziej zbliżoną stałą sieciową do materiału detektora.

Jednym z obiecujących sposobów pasywacji dla materiału HgCdTe jest osadzenie warstwy CdTe. CdTe ma właściwości izolatora, a małe różnice w stałej sieci pomiędzy warstwą pasywującą, a HgCdTe nie dają pola do generowania zbyt dużej ilości dyslokacji niedopasowania. Jednak wprowadzenie nowego materiału na powierzchni przyrządu, o innym składzie molowym powoduje, że dyslokacji nie da się całkowicie uniknąć. Ulokowanie dyslokacji w warstwie przypowierzchniowej wpływa bardzo niekorzystnie na właściwości przyrządu. Pasywacja jest korzystna patrząc długofalowo na właściwości detektora, bo ogranicza degradację powierzchni, ale wykonana bezpośrednio po wytrawieniu struktury detekcyjnej, najczęściej powoduje pogorszenie jej parametrów prądowo-napięciowych.

Ponadto występujące na granicy CdTe-HgCdTe wbudowane pola elektryczne są przyczyną tunelowania z udziałem pułapek, co intensyfikuje szybkość rekombinacji. Wszystko to sprzyja powstawaniu prądów upływności powierzchniowej, które degradują parametry użytkowe konstruowanych fotodiod. W pracy skupiono się na rekombinacji poprzez centra pułapkowe zlokalizowane na powierzchni struktury. Mechanizm tej jest bardzo zbliżony do objętościowego mechanizmu SRH związanego z lukami metali. Tu też występują zerwane wiązania. Przy powierzchni następuje jednak częściowa rekonstrukcja tych wiązań, związana z powstawaniem związków chemicznych na skutek absorpcji na powierzchni gazów atmosferycznych i różnych zanieczyszczeń występujących

w atmosferze. Dlatego chociaż nie stanowi większego problemu określenie ilości atomów struktury półprzewodnikowej przypadająca na jednostkę powierzchni, to trudno jest określić jaki jest ich procentowy udział w procesie rekombinacji SRH. Właśnie ten procentowy udział i efektywna uśredniona energia jonizacji są parametrami, które można wyznaczyć eksperymentalnie, porównując zmierzone charakterystyki $I(V)$ badanych przyrządów z wynikami symulacji numerycznych. W tym punkcie rozprawy zaprezentowano autorski sposób wyprowadzenia wyrażenia na szybkość rekombinacji par elektron-dziura poprzez centra SRH związane z atomami powierzchniowymi struktury, które mogłoby zastąpić powszechnie przyjęte wyrażenia na szybkość rekombinacji powierzchniowej. Pozwala to na bardziej poprawne, z fizycznego punktu widzenia sformułowanie warunków brzegowych dla bilansu równań transportu.

6.2 Model rekombinacji powierzchniowej.

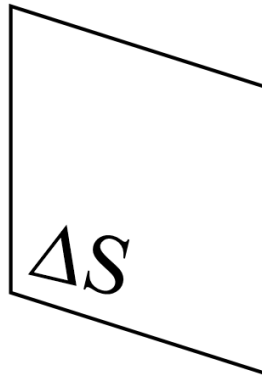
Zaczynając rozważania nad modelem rekombinacji powierzchniowej, należy wyjść od średniej prędkości termicznej elektronów i dziur. Można ją obliczyć przyrównując energię kinetyczną ze średnią energią termiczną.

$$\frac{1}{2} m_e v_e^2 = \frac{3}{2} kT, \text{ stąd} \quad v_e = \sqrt{\frac{3 kT}{m_e}} \quad (227)$$

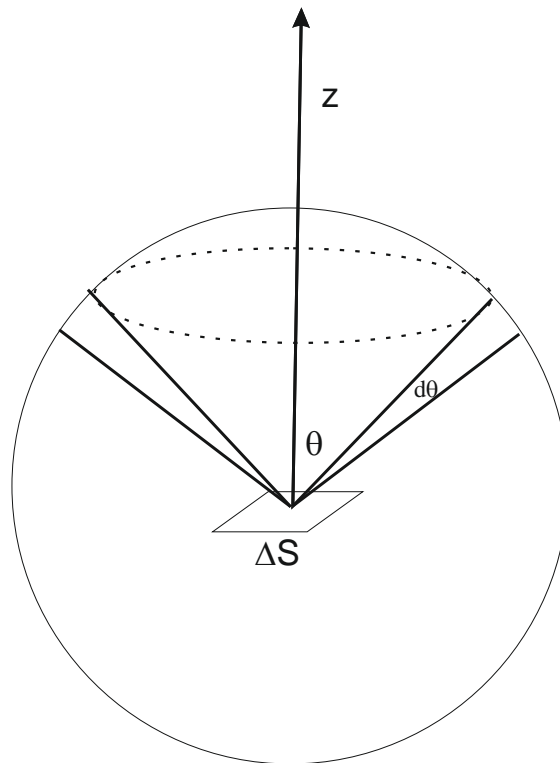
$$\frac{1}{2} m_{hh} V_n^2 = \frac{3}{2} kT, \text{ stąd} \quad V_{hh} = \sqrt{\frac{3kT}{m_{hh}}} \quad (228)$$

Ponieważ masa efektywna elektronu jest znacznie mniejsza od masy efektywnej dziur ciężkich, to prędkość termiczna elektronu jest dużo wyższa niż dziur ciężkich.

Rozważono fragment powierzchni struktury półprzewodnikowej o wielkości ΔS , na której jest rozmieszczonych \widetilde{N}_T atomów, z czego $\in \widetilde{N}_T$ atomów stanowi pułapkowe centra rekombinacyjne (Rys. 60). Następnie należy obrać kierunek z prostopadły do powierzchni ΔS (Rys. 61). Elektrony posiadają średnią prędkość termiczną v_e , która może być skierowana we wszystkich kierunkach. Bardzo ważne na tym etapie jest oszacowanie jaka jest ilość elektronów poruszających się od powierzchni, które tworzą z osią z kątem pomiędzy Θ a $\Theta + d\Theta$. W tym celu należy obliczyć kąt bryłowy pomiędzy stożkami o kątach $\Theta + d\Theta$ i Θ zbudowanych w oparciu o odcinek $v_e dt$.



Rys. 60 Obrany fragment powierzchni struktury półprzewodnikowej o wielkości ΔS , na której jest rozmieszczonych \tilde{N}_T atomów, z czego $\in \tilde{N}_T$ atomów stanowi pułapkowe centra rekombinacyjne.



Rys. 61 Schemat stosowanego modelu obliczeń do oszacowania, ile jest elektronów, które tworzą z osią z kąt pomiędzy θ a $\theta + d\theta$ poruszających się od powierzchni ΔS . Na schemacie zobrazowano kąt bryłowy pomiędzy stożkami o kątach $\theta + d\theta$ i θ .

Prawdopodobieństwo, że elektron znajduje się w kącie bryłowym pomiędzy dwoma stożkami o kątach θ i $d\theta$ (jak na Rys. 61) dla prędkości skierowanych od powierzchni ΔS wynosi:

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega} = \frac{(v_e dt)^2 2\pi \sin\theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2} \sin\theta d\theta \quad (229)$$

Takie samo prawdopodobieństwo jest, że prędkość skierowana jest do powierzchni ΔS .

Z pierścienia w przestrzeni prędkości, ustawionej do kierunku w zakresie kąta przestrzennego $\theta \div \theta + d\theta$, w czasie dt , dotrą do powierzchni ΔS elektrony w ilości:

$$dn = \frac{1}{2} v_e dt \Delta S n \sin\theta \cos\theta d\theta \quad (230)$$

Tylko elektrony, których prędkość tworzy kąt nie większy niż 90° z kierunkiem z mogą dotrzeć do powierzchni ΔS .

Jeżeli elektron znajduje się dostatecznie blisko centrum pułapkowego, które charakteryzuje się przekrojem czynnym σ_e na wychwyty elektronu, to efektywna powierzchnia wychwyty będzie mniejsza niż ΔS i wynosi $\in \widetilde{N}_T \sigma_e$

Założono, że przekrój czynny można przybliżyć następującym wyrażeniem:

$$\sigma_e = \pi \frac{c^2}{4}, \quad (231)$$

gdzie c jest stałą sieci.

Elektrony, które dotrą do powierzchni, mogą zostać wychwycone przez centrum rekombinacyjne w czasie dt , jeśli znajdują się w odpowiedniej odległości. Tak więc, będą to elektrony, które znajdują się w objętości:

$$\frac{1}{2} v_e dt \in \widetilde{N}_T \sigma_e \sin\theta \cos\theta d\theta \quad (232)$$

Dodatkowo centrum rekombinacyjne musi być puste. Jeśli f_T oznacza prawdopodobieństwo, że stan pułapkowy jest zajęty, to w czasie dt z rozpatrywanego stanu zostaną wychwycone elektrony w ilości:

$$dN(\theta) = \frac{1}{2} v_e dt \in \widetilde{N}_T \sigma_e n (1 - f_T) \sin\theta \cos\theta d\theta, \quad (233)$$

gdzie n oznacza koncentrację elektronów.

Po uwzględnieniu wszystkich elektronów o prędkościach w zakresie kąta $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$, otrzymano:

$$N = \frac{1}{4} n \int v_e dt \widetilde{N}_T (1 - f_T) \quad (234)$$

Ilość aktów wychwytu elektronów w jednostce czasu na jednostkę powierzchni wynosi:

$$R_c^n = \frac{1}{4} \int n v_e (1 - f_T) \in \widetilde{N}_T \quad (235)$$

Natomiast szybkość emisji elektronów z jednostki powierzchni wynosi:

$$R_e^n = e_n f_T \in \widetilde{N}_T \quad (236)$$

Tu \widetilde{N}_T oznacza gęstość powierzchniową atomów, a e_n współczynnik emisji.

W warunkach równowagi termicznej szybkość emisji powinna równać się szybkości pułapkowania:

$$R_c^n = R_e^n \quad (237)$$

Stąd:

$$e_n = \frac{1}{4} \int n_o v_e \frac{(1 - f_T^0)}{f_T^0}, \quad (238)$$

gdzie

$$f_T^0 = \frac{1}{1 + \frac{g_{0T}}{g_{1T}} \exp\left(\frac{-X - e\Psi + E_T^S - F}{k_B T}\right)} \quad (239)$$

Podstawiając do f_T^0 wyrażenie na e_n , otrzymano:

$$\frac{1}{4} \int n_o v_e (1 - f_T) \in \widetilde{N}_T = \frac{1}{4} \int v_e n_1 \quad (240)$$

$$e_n = \frac{1}{4} \int v_e n_1 \quad (241)$$

$$f_T^0 = \frac{1}{1 + \frac{g_{0T}}{g_{1T}} \exp\left(\frac{-X - e\Psi + E_T^S - F}{k_B T}\right)}, \quad (242)$$

$$\text{gdzie } n_1 = n_0 \frac{g_{0T}}{g_{1T}} \exp\left(\frac{-X - e\Psi + E_T^S - F}{k_B T}\right).$$

Stąd wypadkowa szybkość pułapkowania dla elektronów wynosi:

$$R_n = \frac{1}{4} \sigma v_e \in \widetilde{N}_T [n(1 - f_T) - n_1 f_T] \quad (243)$$

Jest to ilość aktów wychwytu na jednostkę powierzchni w jednostce czasu.

Wychwyty dziury (pułapkowanie dziur) następuje przez centra pułapkowe zajęte przez elektrony.

Zastosowanie analogicznego rozumowania w przypadku dziur, jak dla elektronów, pozwoli otrzymać następujące wyrażenia na szybkość pułapkowania dla dziur ciężkich:

$$R_c^p = \frac{1}{4} \sigma v_{hh} f_T \in \widetilde{N}_T p_o \quad (244)$$

Natomiast szybkość emisji dziur określa zależność:

$$R_e^p = e_p (1 - f_T) \in \widetilde{N}_T \quad (245)$$

Gdzie e_p jest współczynnikiem emisji dziury.

W warunkach równowagi termicznej ilość aktów wychwytu dziury jest równa ilości aktów emisji dziury, więc:

$$R_c^p = R_e^p \quad (246)$$

Stąd:

$$e_p = \frac{1}{4} \sigma v_{hh} p_o \frac{f_T^0}{1 - f_T^0} \quad (247)$$

Co można doprowadzić do postaci:

$$e_p = \frac{1}{4} \sigma v_{hh} p_1, \quad (248)$$

gdzie:

$$p_1 = p_0 \frac{g_{1T}}{g_{0T}} \exp\left(\frac{X + e\Psi - E_T^S + F}{k_B T}\right) \quad (249)$$

Stąd wypadkowa szybkość pułapkowania dziur wynosi:

$$R_c^p - R_e^p = \frac{1}{4} \bar{\sigma} v_{hh} \in \widetilde{N}_T [p f_T - p_1 (1 - f_T)] = R_p \quad (250)$$

W stanie ustalonym wypadkowe szybkości pułapkowania elektronów i dziur muszą być sobie równe.

$$R_e = R_p = R_T \quad (251)$$

$$\frac{1}{4} \bar{\sigma} v_e \in \widetilde{N}_T [n(1 - f_T) - n_1 f_T] = \frac{1}{4} \bar{\sigma} v_{hh} \in \widetilde{N}_T [p f_T - p_1 (1 - f_T)] \quad (252)$$

Stąd funkcja rozkładu dla elektronów wynosi:

$$f_T = \frac{v_e n + v_{hh} p_1}{v_e (n + n_1) + v_{hh} (p + p_1)} \quad (253)$$

Korzystając z powyższych zależności, w wyniku przekształceń otrzymano:

$$R_T = \frac{1}{4} \bar{\sigma} v_{hh} \in \widetilde{N}_T [p f_T - p_1 (1 - f_T)] \quad (254)$$

Prawdopodobieństwo, że stan pułpkowy jest nieobsadzony wynosi:

$$1 - f_T = \frac{v_e n_1 p_1 + v_{hh} p p_1}{v_e (n + n_1) + v_{hh} (p + p_1)} = \frac{v_e n p + v_{hh} p_1 p}{v_e (n + n_1) + v_{hh} (p + p_1)} \quad (255)$$

I ostatecznie otrzymano wyrażenie na szybkość rekombinacji netto:

$$R_T = \frac{1}{4} \bar{\sigma} v_e v_{hh} \in \widetilde{N}_T \left(\frac{np - n_0 p_0}{v_e (n + n_1) + v_{hh} (p + p_1)} \right) \quad (256)$$

Powyższy wzór określa szybkość rekombinacji par elektron dziura poprzez powierzchniowe stany pułpkowe, w przeliczeniu na jedną sekundę, w odniesieniu do jednostkowej powierzchni.

Zazwyczaj w obliczeniach stosuje się pojęcie szybkości rekombinacji powierzchniowej S i wprowadza warunki brzegowe w postaci:

$$j_e = n \mu_e \nabla \Phi_e = (n - n_0) S_e \quad (257a)$$

$$j_p = p\mu_h \nabla \Phi_h = (p - p_0)S_h \quad (257b)$$

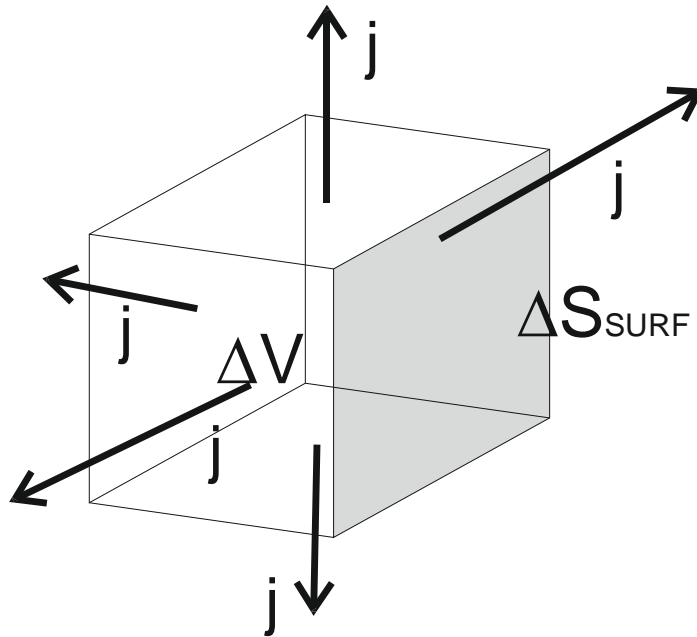
Można zauważyć, że w przypadku, gdyby $(n - n_0) = (p - p_0)$ i $S_e = S_h = S$ z zależności (256) można wyznaczyć:

$$S = \frac{1}{4} 6v_e v_{hh} \in \widetilde{N}_T \left(\frac{n_0 + p_0}{v_e(n + n_1) + v_{hh}(p + p_1)} \right) \quad (258)$$

Jednak wyrażenie (256) jest bardziej poprawne fizycznie niż przyjęcie parametru S . Pozwala to na sformułowanie następujących warunków brzegowych (Rys. 62) dla stanu ustalonego:

$$\frac{\partial n}{\partial t} \Delta V = 0 = \oint_S \vec{j}_e \cdot d\vec{S} + (G - R)\Delta V - R_T \Delta S_{SURF} \quad (259)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \Delta V = 0 = \oint_S \vec{j}_p \cdot d\vec{S} + (G - R)\Delta V - R_T \Delta S_{SURF} \quad (260)$$



Rys. 62 Schemat przypowierzchniowego elementu objętości wykorzystywanego w programie komputerowym do rozwiązywania równań transportu. Dodatkową szybkość rekombinacji netto $R_T \Delta S_{SURF}$ wprowadzają stany powierzchniowe. Prądy elektronów i dziur przepływają przez wszystkie powierzchnie prostopadłościanu z wyjątkiem powierzchni ΔS_{SURF} .

Sformułowanie warunków brzegowych w postaci równań bilansów (259) i (260) umożliwia bardziej realistyczne numeryczne modelowanie zjawisk transportu w obszarze przypowierzchniowym. Ponadto można zbadać wpływ wbudowanego pola elektrycznego przy powierzchni na procesy rekombinacji oraz określić dokładnie gęstości prądów upływności w obszarze przypowierzchniowym. Dzięki temu można określić wpływ takich parametrów jak: skład molowy, domieszkowanie, rodzaj i grubość materiału, użytego do pasywacji itp. Jest to jednak bardzo szeroki temat, który z pewnością będzie rozwijany w przyszłości przez promotora i jego współpracowników. Obecnie tworzony jest podprogram, gdzie wykorzystane jest wyprowadzone w niniejszej pracy wyrażenie (256).

6.3 Wyniki eksperymentalne

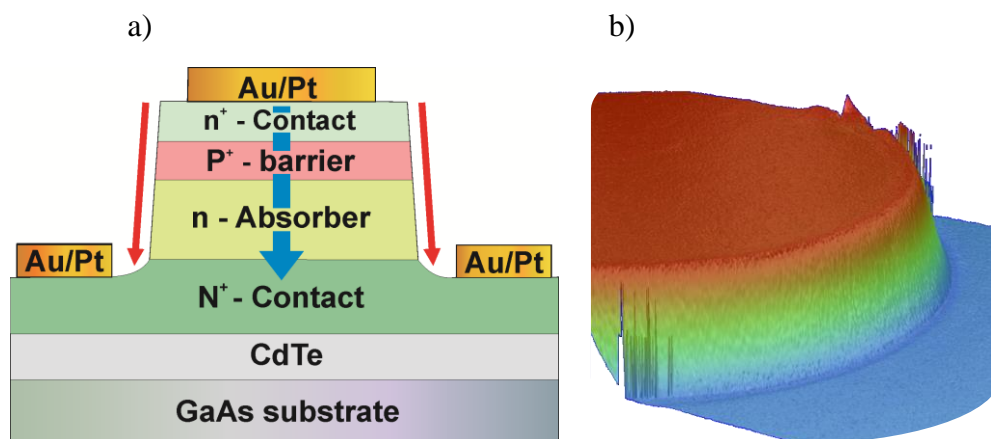
Większość detektorów podczerwieni HgCdTe wytwarzanych jest w geometrii typu „mesa” poprzez trawienia metodą chemiczną na mokro lub trawienia suche, jonowe. Proces trawienia w strukturach typu „mesa” powoduje powstawanie niepożądanych zmian we właściwościach powierzchni HgCdTe. W materiałach z wąskim pasmem wzbronionym te zmiany powierzchni mogą pogorszyć działanie przyrządu. Zerwane wiązania na zboczach warstwy aktywnej zwiększają prędkość rekombinacji, generują prąd upływności powierzchniowej, co jest poważnym problemem dotyczącym detektorów podczerwieni. Odpowiednia pasywacja jest niezbędna, aby zminimalizować skutki stanów powierzchniowych poprzez ich nasycenie [79].

Jak wspomniano we wcześniejszych rozdziałach pracy, fotodetektory o granicy czułości powyżej 3 μm należy schłodzić do temperatury poniżej 300 K, aby zredukować procesy termicznego generowania nośników. Detektory podczerwieni z wąską przerwą energetyczną wymagają chłodzenia kriogenicznego w celu zmniejszenia prądu ciemnego, który jest zwykle ograniczany przez procesy G-R. Konieczność chłodzenia kriogenicznego detektorów podczerwieni jest główną przeszkodą uniemożliwiającą ich szerokie zastosowanie. Rozwiązaniem jest koncepcja detektorów barierowych, opisana w Rozdziale 2. Detektor nBn został zaproponowany w 2006 r. przez Maimon'a i Wicks'a [80] dla związków półprzewodnikowych z grupy okresowej III-V, w celu tłumienia prądu ciemnego i podwyższenia temperatury pracy. Dzięki architekturze detektora nBn, eliminowany powinien być również prąd powierzchniowy i teoretycznie takie urządzenie nie wymaga

pasywacji. Proces pasywacji polega na pokryciu zboczy warstwy mesy materiału izolacyjnego przed warunkami zewnętrznymi.

Ze względu na to, że w temperaturze pokojowej przeważa generacja termiczna, prądy upływności powierzchniowej w 300 K, nie mają znaczącego udziału w prądzie ciemnym. Problem pojawia się w niskich temperaturach. Z tego powodu wykonano pomiary charakterystyk prądowo-napięciowych w szerokim zakresie temperatur za pomocą stacji sond z chłodzeniem kriogenicznym do 90 K. Zdjęcie struktur testowych w czasie pomiaru zostało zaprezentowane Rys. 64a.

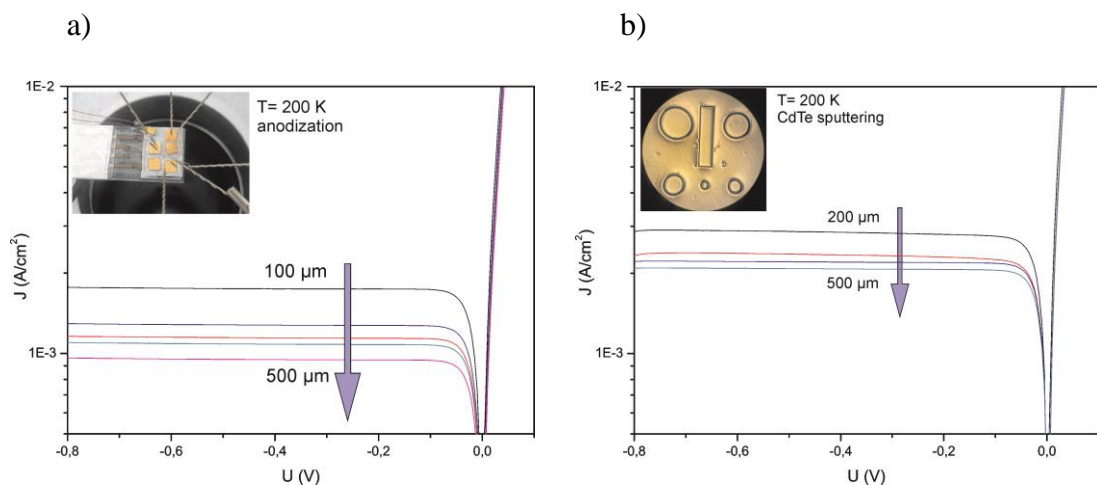
Analizowana struktura $n^+B_p n N^+$ (Rys. 63) składa się z czterech warstw HgCdTe wyhodowanych metodą MOCVD na podłożu GaAs we wspólnym laboratorium Vigo System S.A. i Wojskowej Akademii Technicznej. Za warstwą buforową z CdTe, osadzono warstwę kontaktową typu n, o wysokiej koncentracji domieszek jodu $N_D=2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ i szerszej od absorbera przerwie energetycznej ($x = x_{\text{ABS}} + 0,03$). Kolejna warstwa to niedomieszkowany (o stężeniu tła na poziomie $N_D=5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) absorber o grubości 4,4 μm i składzie $x_{\text{abs}}=0,3$. Dalej znajduje się szerokoprzerwowa ($x_B=0,4$) warstwa bariery (około 300 nm). Ostatnią warstwą jest silnie domieszkowana jodem ($N_A=2,5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), wąskoprzerwowa ($x_{\text{top}}=x_{\text{abs}}-1,7$), górna warstwa kontaktowa o grubości 1 μm [81].



Rys. 63 a) Architektura struktury $n^+B_p n N^+$ typu „mesa” z HgCdTe. Czerwona strzałka wskazuje prąd upływności powierzchniowej, a niebieska - prąd objętościowy, oraz b) trójwymiarowy obraz profilu „mesy” po wytrawieniu, uzyskany przy pomiarze profilometrem optycznym.

Detektory o okrągłej geometrii typu „mesa” o wymiarach 100-500 μm zdefiniowano za pomocą standardowej fotolitografii optycznej i mokrego trawienia chemicznego roztworem Br:HBr (1:100) do dolnej warstwy kontaktowej N^+ . Ostatnim etapem procesu technologicznego było uzyskanie warstwy pasywacyjnej dwiema metodami: anodyzacją i jonowo za pomocą techniki sputtering, materiału CdTe. Kontakty elektryczne Au/Ti wykonano na górnej i dolnej warstwie kontaktowej.

Analiza charakterystyk prądowo-napięciowych (Rys. 64) zmierzonych dla detektorów o różnej wielkości pozwala na oszacowanie wartości prądu objętościowego i powierzchniowego. Natężenie prądu w funkcji napięcia mierzono dla trzech struktur: z warstwą pasywującą CdTe uzyską metodą sputtering, z pasywacją metodą anodyzacji, oraz struktury bez pasywacji, bezpośrednio po wykonaniu przyrządu, aby zapobiec wpływowi degradacji powierzchni. W pierwszym przypadku, przy rozpylaniu wiązki jonów, może dojść do miejscowego nagrzewania się powierzchni, co pogarsza późniejsze parametry elektryczne przyrządu. Gęstości prądu po pasywacji przez anodowanie są znacznie niższe niż w przypadku rozpylania jonowego. Wskazuje to, że metoda anodowania jest lepsza dla detektora typu $\text{n}^+ \text{B}_p \text{nN}^+$.



Rys. 64 Gęstość prądu w funkcji napięcia, dla detektorów o średnicy 100- 500 μm w 200 K, a) struktury anodowane (w rogu zdjęcie z „zimnego palca” stacji pomiarowej, b) pasywacja metodą sputtering (w rogu zdjęcie zestawu „mes” pod mikroskopem optycznym).

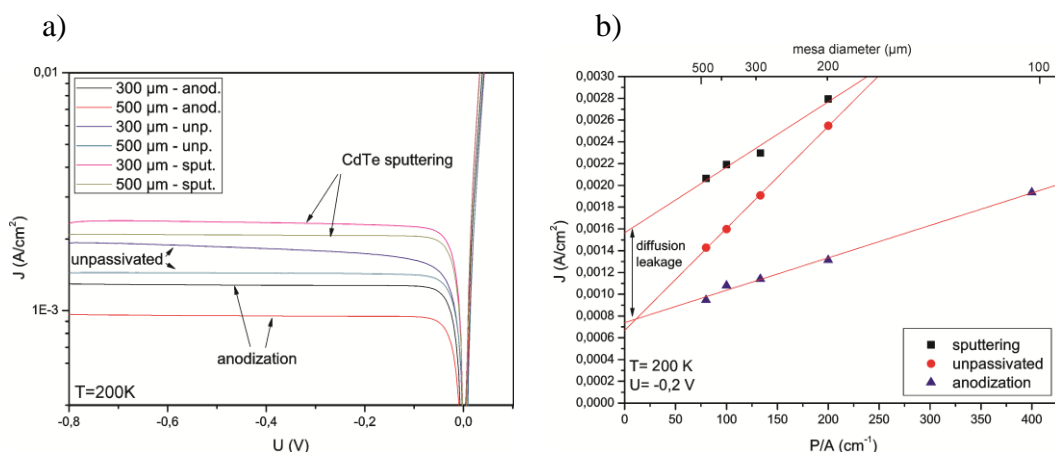
Prąd objętościowy (J_{bulk}) i prąd upływności powierzchniowej (J_{surf}) są składnikami prądu ciemnego. Głównym celem było oszacowanie stosunku prądu objętościowego do niekorzystnych prądów upływności - zwykle płynących po zboczu „mesy”. Analiza

charakterystyk $I(V)$ dla struktur o różnych rozmiarach, umożliwia określenie procentowego udziału parametrów prądowych J_{bulk} i J_{surf} :

$$J_{\text{dark}} = J_{\text{bulk}} + J_{\text{surf}} \cdot \frac{P}{A}, \quad (261)$$

gdzie J_{bulk} (A/cm^2), J_{surf} (A/cm), P oznacza obwód fotodiody, A jest powierzchnią kontaktu. Nachylenie funkcji określonej równaniem (261) jest wprost proporcjonalne do zależnego od powierzchni prądu upływności.

Jak pokazano na Rys. 65, dla struktury bez pasywacji wartość J_{bulk} (przy napięciu $-0,2 \text{ V}$ i w temperaturze 200 K) stanowi ok. 52 % prądu ciemnego dla struktur o średnicach $500 \mu\text{m}$. W przypadku detektorów o małych średnicach, prąd ciemny jest zdominowany przez prąd upływności. W przypadku detektora o średnicy $200 \mu\text{m}$, prąd objętościowy stanowi tylko 28% prądu ciemnego. Potwierdza to fakt, że wymagane są dodatkowe procesy pasywacji, aby w jak największym stopniu ograniczyć rekombinację na zerwanych wiązaniach sieci.

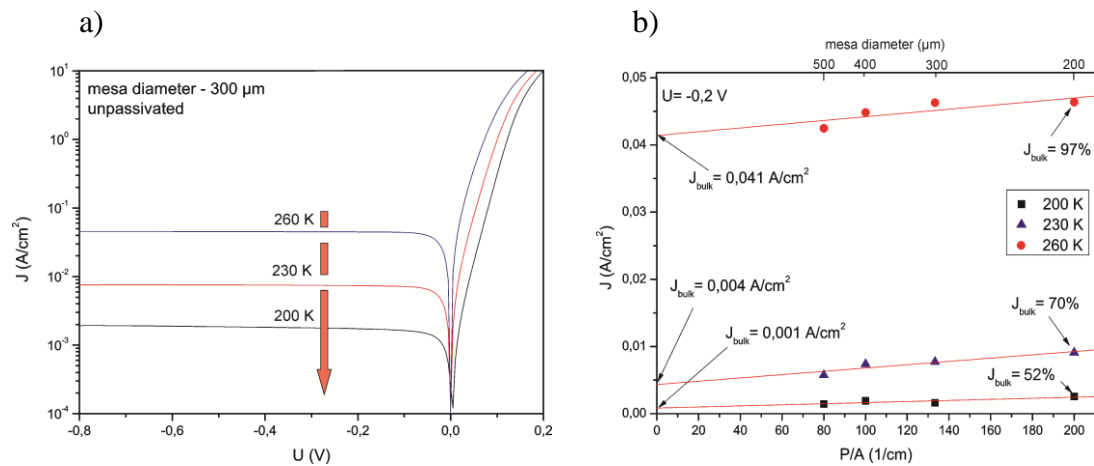


Rys. 65 a) Gęstość prądu w funkcji napięcia dla „mes” o średnicy $300 \mu\text{m}$ i $500 \mu\text{m}$ pasywowanych metodą sputtering, bez pasywacji i anodyzowanych. b) Gęstość prądu w funkcji stosunku obwodu fotodiody do powierzchni dla struktur o średnicach $100\text{-}500 \mu\text{m}$, pasywanych i bez pasywacji.

Po pasywacji metodą anodyzacji, udział prądu objętościowego wzrasta do 58% w przypadku małych średnic „mesy” ($200 \mu\text{m}$) i prawie 71% w przypadku największej średnicy. W przypadku pasywacji metodą sputtering rezultaty są zbliżone do anodyzacji. Niestety ilościowo, prąd objętościowy ma prawie dwukrotnie wyższą wartość niż w przypadku struktur anodyzowanych. Proces pasywacji z wykorzystaniem wiązki jonów,

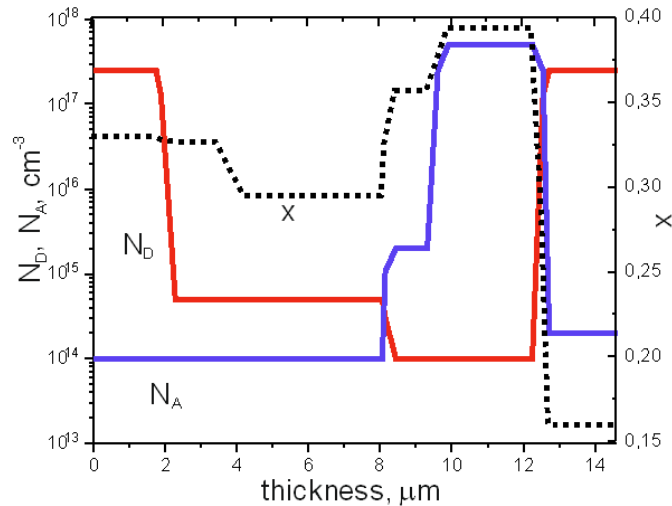
przy źle dobranych parametrach, może miejscowo doprowadzać do przegrzania struktury, a rtęć w wysokiej temperaturze ma predyspozycje do dyfundowania i tworzenia luk. Może w ten sposób dojść do zwiększenia prądu dyfuzyjnego zarówno objętościowego, jak i upływnościowego.

Rys. 66 przedstawia gęstości prądów dla struktury bez pasywacji. Prąd objętościowy w 230 K wzrósł do 44% dla małej średnicy mesy (200 μm) i do 70% dla największej średnicy (500 μm). Przy 260 K, ze względu na wysoką generację cieplną i wysoki prąd dyfuzyjny, upływność powierzchniowa ma mniejsze znaczenie. Dla najmniejszej średnicy (200 μm) prąd objętościowy wynosi 88% całkowitego prądu ciemnego, a dla największej średnicy - 97% (Rys. 66b).



Rys. 66 a) Gęstość prądu w funkcji natężenia dla struktur bez pasywacji w przedziale temperatur 200-260 K b) Gęstość prądu w funkcji stosunku obwodu fotodiody do powierzchni dla struktur o średnicach 200-500 μm .

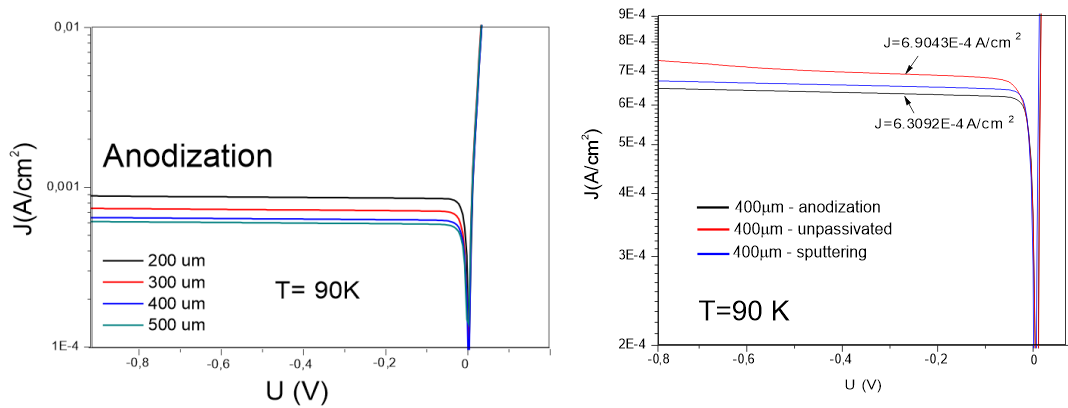
Poniżej zaprezentowano wyniki eksperymentalne pomiarów gęstości prądu fotodiod w funkcji napięcia polaryzacji w kierunku zaporowym. Fotodiody wykonano z warstwy wytworzonej epitaksjalnie techniką MOCVD, o numerze 3786 w Vigo System SA. Na Rys. 67. przedstawiono intencjonalny rozkład składu molowego i domieszek w strukturze 3786. Osadzona heterostruktura HgCdTe ma wysokość około 14,5 μm .



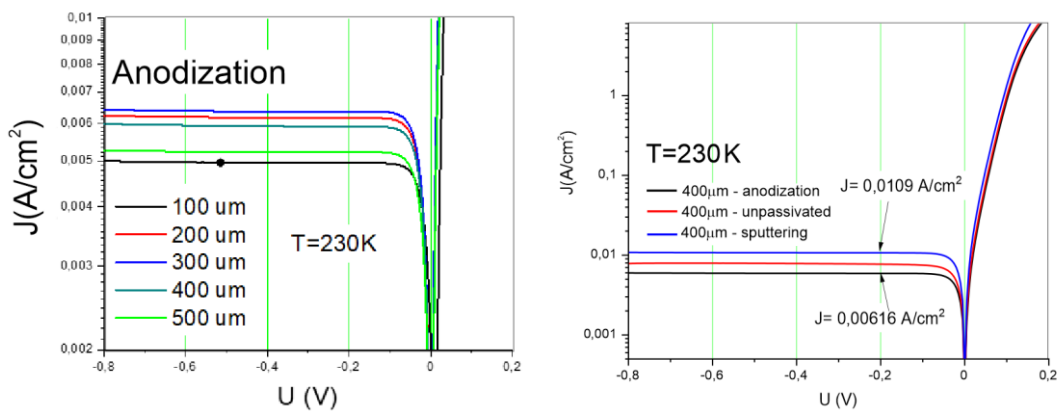
Rys. 67 Rozkład przestrzenny składu molowego x oraz koncentracji domieszek w warstwie epitaksjalnej struktury 3786. W fotodiodach dolny kontakt znajduje się w odległości około $1 \mu\text{m}$ od warstwy buforowej CdTe. Grubość warstwy wyliczono od granic z warstwą buforową.

Na rysunkach Rys. 68a, Rys. 69a i Rys. 70a przedstawiono charakterystyki $J(V)$ dla fotodiod anodyzowanych o różnych średnicach opisanych na wykresach. W temperaturach 90 K i 300 K gęstości prądu zwiększają się wraz ze zmniejszaniem się średnicy diod. Świadczy to o dużym udziale rekombinacji powierzchniowej w wypadkowej rekombinacji i ogranicza parametry fotodiod. Niejednoznaczne wyniki otrzymano w temperaturze 230 K, gdzie najmniejsza gęstość prądu występuje w diodzie o średnicy $100 \mu\text{m}$. Świadczy to o tym, że należałoby zbadać temperaturową zależność na szybkość rekombinacji ze wzoru (256) i wykorzystać równania (259) i (260) w programie komputerowym. Modyfikacja programu komputerowego w tym punkcie być może pozwoliłaby wyjaśnić przyczynę zaobserwowanego zjawiska. Wszystkie wielkości fizyczne występujące w równaniach transportu są ze sobą skorelowane poprzez lokalne warunki neutralności elektrycznej. A ponadto do rozwiązania ciągle jest problem oszacowania gęstości dyslokacji niedopasowania, jakie tworzą się w interfejsie pomiędzy powierzchnią półprzewodnika, a warstwą pasywacyjną. O tym, że takie dyslokacje występują mogą świadczyć Rys. 68a, Rys. 69a i Rys. 70a ilustrujące charakterystyki $J(V)$ dla fotodiod o średnicy $400 \mu\text{m}$ nie pasywowanych, anodyzowanych i pasywanych metodą sputtering. W temperaturze 90 K anodyzacja i sputtering zmniejszają prądy upływności, natomiast w temperaturze 230 K anodyzacja korzystnie wpływa na zmniejszenie prądu, ale sputtering, jak opisano wyżej,

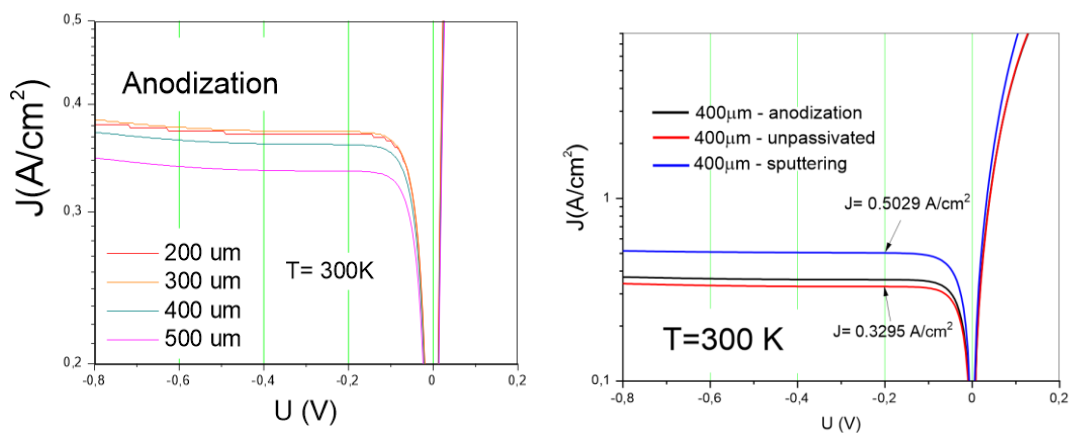
zwiększa jego wartość. W temperaturze pokojowej prądy wzrastają zarówno w warstwie anodyzowanej, jak i z osadzonym CdTe.



Rys. 68 Charakterystyki $J(V)$ fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 90K.



Rys. 69 Charakterystyki $j(V)$ fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 230K.



Rys. 70 Charakterystyki $j(V)$ fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 300K.

Prawdopodobnie obok stanów pułapkowych, towarzyszących zerwanym wiązaniom, których ilość powinna zmniejszyć się w wyniku wysycenia części wiązań przez atomy warstwy pasywującej, pojawiają się dwa niekorzystne zjawiska. Pierwsze to dyslokacje niedopasowania, drugie to wbudowane pole elektryczne. Dyslokacje, jak opisano w Rozdziale 4, są dodatkowym kanałem G-R, natomiast wbudowane pole elektryczne intensyfikuje procesy SRH poprzez tunelowanie i efekt Frenkel-Poole.

Podsumowanie

W niniejszej pracy udowodniono teoretycznie, oraz potwierdzono eksperymentem fakt, że rekombinacja z udziałem płytkich stanów domieszkowych ma znaczący wpływ na czas życia nośników mniejszościowych i determinuje czas życia nośników większościowych. Obliczanie czasu życia elektronów i dziur musi uwzględniać wzajemną korelację między koncentracjami nośników ładunku wynikającą z warunku neutralności elektrycznej.

Jak wynika z przeprowadzonych analiz i zaprezentowanych wyników obliczeń czasu życia nośników nierównowagowych w długofalowych strukturach HgCdTe, ważną rolę odgrywają reszkowe domieszki przeciwnego typu, niż domieszki intencjonalne. Występują one zawsze, nawet w najbardziej czystych materiałach. Trzy podstawowe mechanizmy G-R związane z domieszkami są uzależnione od koncentracji zjonizowanych domieszek oraz koncentracji nośników. Zastosowanie statystyki Fermiego-Diraca, uwzględnienie nieparaboliczności pasma przewodnictwa i dziur lekkich, oraz właściwy dobór parametrów materiałowych takich jak: stała dielektryczna, masy efektywne nośników i współczynnik załamania, dają gwarancję poprawnego oszacowania przekrojów czynnych na wychwyty nośników przez zjonizowaną domieszkę. Powoduje to, że jedyną wielkością konieczną do obliczenia szybkości rekombinacji, a tym samym zdeterminowanego przez nią czasu życia, jest koncentracja domieszek. Podejście zaprezentowane w rozprawie ogranicza powszechne w literaturze, przypisywanie zbyt dużego znaczenia procesom G-R związanym z lukami rtęci na determinację czasu życia nośników. Jak pokazują zaprezentowane obliczenia oraz wyniki przedstawione na wykresach, można ten wpływ zmarginalizować. Przy założeniu niskiej koncentracji pułapek i przyjęciu realistycznych przekrojów czynnych, o powierzchni rzędu stałej sieci, otrzymano wyniki, które dają bardzo dobre dopasowanie do wyników eksperymentalnych, mimo zmarginalizowanej roli procesów SHR związanych z lukami rtęci. Gdy rekombinacja zachodzi z udziałem zjonizowanych akceptorów, przewagę ma rekombinacja z udziałem fononów. Przyczyną jest duża, w porównaniu z masą efektywną elektronów, masa dziur ciężkich, a proces ten bardzo silnie zależy od masy efektywnej. Mechanizm ten determinuje czas życia dziur, gdy koncentracja akceptorów przekracza 10^{14} cm^{-3} . Uwzględnienie rekombinacji przez płytkie stany domieszkowe pozwala też wyjaśnić różnice pomiędzy długościami czasów życia nośników mniejszościowych i większościowych w materiałach domieszkowanych. Ponieważ domieszkowanie reszkowe przeciwnego typu jest mniejsze niż intencjonalne, w związku z tym szybkość związanej

z nim rekombinacji jest mniejsza, niż rekombinacji związanej z domieszkami intencjonalnymi. W materiale typu n czas życia elektronów ograniczany jest głównie przez mechanizm Augera z udziałem zjonizowanych donorów. Analiza mechanizmów G-R związanych z płytkimi stanami domieszkowymi pozwala wyjaśnić, dlaczego w materiałach skompensowanych czas życia nośników jest krótszy, niż w materiałach nieskompensowanych, o tej samej koncentracji nośników. Ponadto również obserwowany wzrost prądu szumów zarówno generacyjno-rekombinacyjnych jak i $1/f$ można uzasadnić występowaniem dodatkowego mechanizmu G-R. Godnym zwrócenia uwagi jest fakt, że zaprezentowana autorska metoda obliczeń oraz wyniki symulacji numerycznych prezentowane na wykresach, zostały zweryfikowane danymi eksperymentalnymi pochodzącymi z różnych, niezależnych ośrodków badawczych.

W pracy wykazano również, że oddziaływanie elektryczne nośników występujących w dyslokacjach niedopasowania wpływa na funkcje rozkładu zgromadzonych tam nośników, ale ma bardzo niewielki wpływ na ilość wygenerowanych dyslokacji w obszarach zmiany składu molowego heterostruktur. Wpływ dyslokacji na czas życia poprzez dodatkowy kanał G-R uwidacznia się na charakterystykach prądowo-napięciowych fotodiod z HgCdTe, co wykazano w Rozdziale 5 rozprawy. Dodatkowo uwzględnienie w obliczeniach wzajemnego oddziaływania elektrycznego linii dyslokacji, umożliwiło bardziej realistyczne oszacowanie parametru f_{DIS}^0 .

Ważną rolę w kontekście zjawiskach G-R odgrywa również fizyka powierzchni i jest tematem bardzo złożonym i wymagającym przeprowadzenia dużej serii pomiarów w różnych warunkach (temperatura, domieszkowanie, różne materiały pasywacyjne, oraz zastosowana technika pasywacji, ujawnienie dyslokacji itp.) Oprócz tego, należy zjawiska te zamodelować numerycznie, aby można było przeprowadzić analizę teoretyczną.

W Rozdziale 6 rozprawy zaproponowano model SRH rekombinacji powierzchniowej i wyprowadzono zależność na jej szybkość. Jedynym parametrem, który jest potrzebny do jej wyliczenia jest ilość niewysyconych wiązań atomów powierzchniowych. Opracowany model zaimplementowany do programu komputerowego umożliwia badanie prądów upływności powierzchniowej z uwzględnieniem szeregu czynników, takich jak wbudowane pole elektryczne i dyslokacje niedopasowania, które mają istotny wpływ na wielkość tych prądów. Jest to jednak skomplikowane zagadnienie, które jest obecnie rozwijane przez promotora i stanowi nowy otwarty temat do badań.

Dodatek A

Struktura energetyczna HgCdTe, masa efektywna w paśmie przewodnictwa, element macierzowy pędu i stosunek czasów życia A7/A1

Struktura energetyczna półprzewodników o wąskiej przerwie energetycznej wg modelu Kane [61] po uwzględnieniu przestrzennej zmiany krawędzi pasma przewodnictwa E_{c0} i przerwy energetycznej E_g przyjmuje postać:

$$E_c(\vec{k}, \vec{r}) = E_{c0}(\vec{r}) - \frac{E_g(\vec{r})}{2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{A1})$$

$$E_{lh}(\vec{k}, \vec{r}) = E_{c0}(\vec{r}) - \frac{E_g(\vec{r})}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right] - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (\text{A2})$$

$$E_{hh}(\vec{k}, \vec{r}) = E_{c0}(\vec{r}) - E_g(\vec{r}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, \quad (\text{A3})$$

gdzie P oznacza element macierzowy pędu, k wektor falowy, E_g szerokość przerwy energetycznej, m_0 masę spoczynkową elektronu, m_{hh} masę efektywną dziur ciężkich. Zależności (A1), (A2) i (A3) określają energię elektronów odpowiednio w paśmie przewodnictwa, paśmie dziur lekkich i paśmie dziur ciężkich. P jest związany z masą efektywną elektronu na dnie pasma przewodnictwa m_{c0} , którą można wyznaczyć za pomocą szeregu różnych pomiarów. Adachi [38] przedstawił zależność m_{c0} od szerokości przerwy energetycznej dla szeregu różnych półprzewodników, w tym HgTe i CdTe. Zależność ta wygląda następująco:

$$\frac{m_{c0}}{m_0} = 0,0505 E_g \quad (\text{A4})$$

Przerwa energetyczna E_g wyrażona jest w eV. Natomiast P^2 :

$$P^2 = \frac{3\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{c0}} + \frac{1}{m_0} \right) \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right)^{-1}, \quad (\text{A5})$$

gdzie m_0 jest spoczynkową masą elektronu, Δ jest energią pasma odzcpionego spin-orbita. CdHgTe $\Delta \gg E_g$ i drugi składnik w drugim nawiasie można pominąć.

W przypadku liczenia czasów życia Augera powinno się uwzględniać zmianę masy efektywnej elektronu wraz ze zmianą wektora falowego k . Zazwyczaj jednak autorzy tego nie robią, podając różne masy efektywne. Powinno się we wzorach opracowanych przez Beatie, Landsberga i Fröhlicha [47] podawać uśrednioną po wszystkich stanach pasma przewodnictwa masę efektywną elektronów. W tym przypadku można też uwzględnić wpływ domieszkowania na masę efektywną. Domieszkowanie wpływa na wartość energii Fermiego, a więc i na statystykę obsadzeń stanów przez elektrony. Efektywną masę elektronów pasma przewodnictwa m_c policzono, jako uśrednioną drugą pochodną krawędzi pasma przewodnictwa po wektorze falowym. Z równania (A1) wynika, że

$$\frac{\partial^2 E_C}{\partial k^2} = \frac{E_g}{4} \frac{16P^2}{3E_g^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}}} \left(1 - \frac{\frac{8kP^2}{3E_g^2}}{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right) + \frac{\hbar^2}{m_0} \quad (A6)$$

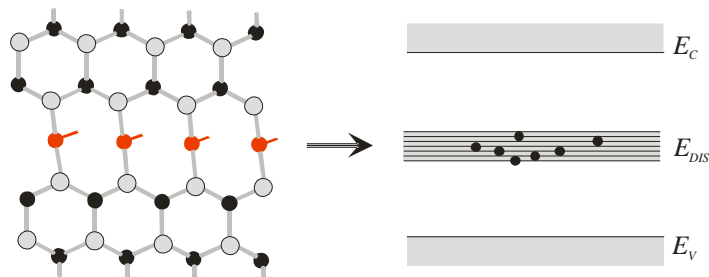
Natomiast uśrednioną masę efektywną w paśmie przewodnictwa wyliczono z zależności

$$\frac{1}{\langle m_c \rangle} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\int_0^{\pi/a} \frac{\partial^2 E_C}{\partial k^2} \frac{dk}{1 + \exp((E_C - F)/k_B T)}}{\int_0^{\pi/a} \frac{dk}{1 + \exp((E_C - F)/k_B T)}} \quad (A7)$$

Dodatek B

Energia elektryczna dyslokacji

Na Rys. B1 przedstawiono wykres pasma dyslokacji utworzonego przez stany energetyczne związane z niewysyconymi wiązaniami rdzenia dyslokacji.



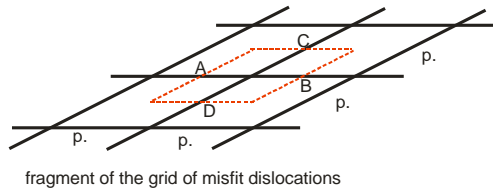
Rys. B1 Model pasma dyslokacyjnego utworzonego przez zerwane wiązania atomów znajdujących się w linii dyslokacji.

Przyjęto, że odległość między wiązaniami jest równa długości wektora Burgera b , co dla linii dyslokacji o długości l daje, na skutek degeneracji spinu, liczbę stanów w paśmie równą $2\frac{l}{b}$. Gdy rdzeń dyslokacyjny jest elektrycznie obojętny, część z tych poziomów energii jest wypełniona elektronami w ilości wynikającej z typu półprzewodnika i równej $\xi\frac{l}{b}$. I tak dla atomów z czwartej grupy układu okresowego $\xi = \frac{1}{2}$, dla dyslokacji α w związkach $A_{II}B_{VI}$ powinno się otrzymać $\xi = \frac{4}{6}$, a dla dyslokacji β $\xi = \frac{2}{6}$. Podobnie dla związków $A_{III}B_V$ $\xi = \frac{5}{8}$ dla α i $\xi = \frac{3}{8}$ dla β . Ze względu na rolę wiązania jonowego w związkach półprzewodnikowych parametr ξ może nieznacznie różnić się od podanych w niniejszym dodatku. Na przykład, zakładając taką samą jonowość wiązań dla wszystkich związków $A_{III}B_V$, Masut i wsp. [82] otrzymali $\xi_\alpha \cong 0.83$ i $\xi_\beta \cong 0.17$. Możliwe jest przechodzenie elektronów z obszarów otaczających linię dyslokacji do pasma dyslokacyjnego, jak również z pasma dyslokacyjnego do otaczającego obszaru. W modelu zamiast parametru ξ , użyto parametru n_{DIS} określającego liczbę elektronów w paśmie dyslokacji. Przyjęto, że średnia wartość energii pasma dyslokacji wynosi E_{DIS} powyżej wierzchołka pasma walencyjnego (Jóźwikowski i in. [24]) Energia zgromadzona w polu elektrycznym utworzonym przez rdzeń dyslokacyjny o długości l wyraża się zależnością:

$$E_{el} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 l \int_0^{r_m} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^2 \varepsilon_r 2\pi r dr \quad (B1)$$

Odcinki AB i CD (Rys. B2) wnoszą wkład do energii elektrycznej leżących w kwadratowym płaskim elemencie zaznaczonym linią przerywaną o boku $l = 2p$. Wielkość tej energii przypadająca na jednostkę powierzchni wynosi:

$$\check{E}_{el} = \frac{2\pi}{p} \varepsilon_0 \int_0^{r_m} \varepsilon(r) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^2 r dr \quad (B2)$$



Rys. B2 Potencjał elektryczny wokół dyslokacji jest liczony w cylindrze o promieniu r_m równym połowie odległości pomiędzy liniami dyslokacji.

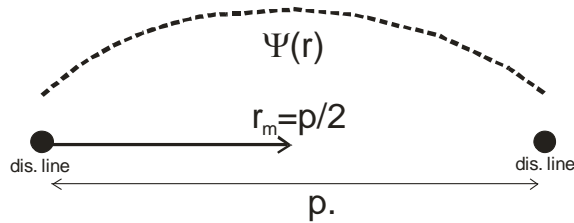
Energia swobodna Helmholtza $F = E - TS$ rdzenia dyslokacji przypadająca na jednostkę długości wynosi:

$$F = \left(\frac{n_{DIS}}{l} - \xi \frac{1}{b} \right) (E_V(0) - e\Psi(0) + E_{DIS} - \Phi) + \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varepsilon_r \int_0^{r_m} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^2 2\pi r dr - k_B T \left[\left(2 \frac{1}{b} \right)! - \left(\frac{n_{DIS}}{l} \right)! \left(2 \frac{1}{b} - \frac{n_{DIS}}{l} \right)! \right] \quad (B3)$$

Pierwsze dwa składowe w równaniu (B3) odnoszą się do energii elektronów, a trzecia to entropia S pomnożona przez temperaturę T . n_{DIS} to liczba zajętych stanów elektronowych w dyslokacji o długości l . Z warunku, że $\frac{\partial F}{\partial \left(\frac{n_{DIS}}{l} \right)} = 0$ i używając relacji Strirlinga $\frac{\ln}{n(n!)} = n \cdot \ln(n) - n$, uzyskano relację:

$$\frac{n_{DIS}}{l} = \frac{\frac{2}{b}}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_V(0) - e\Psi(0) + E_{DIS} - \Phi}{k_B T} \right) \right]}, \quad (B4)$$

gdzie E_V jest krawędzią pasma walencyjnego, Φ jest energią Fermiego, a b jest wektorem Burgera, przy założeniu, że jest równy stałej sieci a . Aby uzyskać $\frac{n_{DIS}}{l}$, należy obliczyć wartość potencjału elektrycznego $\Psi(0)$ w rdzeniu dyslokacji (Rys. B3).



Rys. B3 Fragment sieci utworzony przez dyslokacje niedopasowania

Aby to zrobić, trzeba rozwiązać równanie Poissona w obszarze otaczającym rdzeń dyslokacji i rozważyć znajdujący się tam ładunek elektryczny. Równanie Poissona jest rozwiązywane iteracyjnie metodą Newtona:

$$\Psi_{n+1}(r) = \Psi_n(r) + \delta\Psi_n(r), \quad (B5)$$

gdzie $\Psi_{n+1}(r)$ to wartość potencjału po n -tej iteracji, a $\delta\Psi_n(r)$ to n -ta iteracyjna poprawka. Kluczowe jest określenie początkowych wartości potencjału. Określamy je na podstawie lokalnego stanu neutralności elektrycznej w każdym punkcie siatki numerycznej.

Zależy to również od wartości energii Fermiego. W warunkach równowagi termicznej należy przyjąć wartość $\Phi = 0$. Neutralność elektryczna w rdzeniu dyslokacyjnym wystąpi, gdy:

$$\frac{n_{DIS}}{l} = \xi \frac{1}{b} = 2 \frac{1}{b} / \left[1 + \exp \left(\frac{E_V(0) - e\Psi(0) + E_{DIS} - \Phi}{k_B T} \right) \right] \quad (B6)$$

Stąd uzyskano początkową wartość potencjału w rdzeniu dyslokacji:

$$e\Psi_1(0) = E_V(0) + E_{DIS} - \Phi - \ln \left(\frac{2 - \xi}{b} \right) k_B T \quad (B7)$$

Natomiast w obszarze otaczającym linię dyslokacji potencjał początkowy określany jest numerycznie z warunku:

$$\rho(r) = p(\Psi_1(r)) - n(\Psi_1(r)) - N_T f_T(\Psi_1(r)) + N_D^+(\Psi_1(r)) - N_A^-(\Psi_1(r)) = 0, \quad (B8)$$

gdzie koncentracje elektronów, dziur, zjonizowanych donorów i zjonizowanych akceptorów jest wyrażone w następujący sposób:

$$p(\Psi_1(r)) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{BZ} 1 / \left[1 + \exp \left(\frac{\Phi - E_V(r) + e\Psi_1(r) + \varepsilon_V^k(\vec{k})}{k_B T} \right) \right] d^3 k \quad (B9)$$

$$n(\Psi_1(r)) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{BZ} 1 / \left[1 + \exp \left(\frac{E_V(r) + E_g(r) - e\Psi_1(r) + \varepsilon_C^k(\vec{k}) - \Phi}{k_B T} \right) \right] d^3 k \quad (B10)$$

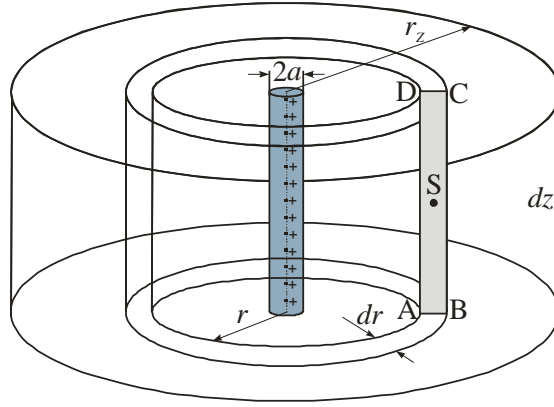
$$N_A^-(\Psi_1(r)) = N_A / \left[1 + \frac{g_{0A}}{g_{1A}} \exp \left(\frac{E_V(r) - e\Psi_1(r) + E_A(r) - \Phi}{k_B T} \right) \right] \quad (B11)$$

$$N_D^+(\Psi_1(r)) = N_D / \left[1 + \frac{g_{1D}}{g_{0D}} \exp \left(\frac{\Phi - E_V(r) - E_g(r) + e\Psi_1(r) + E_D(r)}{k_B T} \right) \right], \quad (B12)$$

gdzie k to wektor falowy, ε_V^k i ε_C^k to odpowiednio energia kinetyczna dziur i elektronów, E_g to szerokość przerwy energetycznej, T to temperatura, k_B to stała Boltzmanna, E_D i E_A to energia jonizacji odpowiednio donorów i akceptorów energię dawców i akceptorów, N_T to koncentracja luk rtęci a f_T funkcja rozkładu elektronów w paśmie dyslokacyjnym. BZ oznacza całkowanie w pierwszej strefie Brillouine'a, N_A i N_D to odpowiednio koncentracja akceptorów i donorów. Aby znaleźć współczynniki g_1 i g_0 , należy znać rodzaj orbitali występujących w analizowanym stanie domieszki. Dokładnej analizy degeneracji stanów domieszkowych dokonał D. Look w swojej książce [83].

W przyjętym modelu obszar wokół rdzenia dyslokacji podzielony jest na cylindryczne pierścienie o prostokątnych przekrojach. Przykład takiego pierścienia o przekroju

prostokątnym ABCD pokazano na Rys. B4. W tych pierścieniach numerycznie rozwiązywane jest równanie Poissona. Obszar zawierający sekcję rdzenia dyslokacji to cylinder o promieniu a (stała sieci) zawierający nieskompensowany ładunek elektryczny równy $-e \left(n_{DIS} - \xi \frac{l}{b} \right) \frac{dz}{l}$.



Rys. B4 Pierścienie wokół rdzenia dyslokacji o przekroju prostokątnym ABCD.

Potencjał obliczono numerycznie, rozwiązując równanie Poissona wyrażone równoważnym równaniem dyfuzji, jak u Józwickowskiej [84]:

$$\int_V \frac{\partial \Psi}{\partial t} dV = \varepsilon_0 \oint \varepsilon_r \nabla \Psi dA + e \int_V \rho dV, \quad (B13)$$

gdzie V oznacza objętość pierścienia w przekroju ABCD, A jest powierzchnią pierścienia, ρ jest gęstością ładunku elektrycznego, ∇ jest gradientem, a t jest pseudoczasem. Ze względu na małą objętość pierścienia, zamiast całkowania można pomnożyć $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ i ρ przez objętość V pierścienia. Podobnie $\varepsilon_r \nabla \Psi$ jest mnożone przez powierzchnię pierścienia. Równanie (B12) w walcu o promieniu wokół rdzenia dyslokacji przyjmuje postać

$$\frac{\partial \Psi(1)}{\partial t} \pi a^2 = \varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \Psi 2\pi a + e \left(\xi \frac{1}{b} - \frac{n_{DIS}}{l} \right) \quad (B14)$$

Ale w równaniu iteracyjnym można napisać:

$$\frac{\partial \Psi(1)}{\partial t} = \frac{\Psi_{n+1}(1) - \Psi_n(1)}{\tau} = \frac{\delta \Psi_n(1)}{\tau} = L(\Psi_{n+1}) \cong \frac{1}{2} L(\Psi_{n+1}) + \frac{1}{2} L(\Psi_n) =$$

$$L(\Psi_n) + \frac{1}{2} \frac{\partial L(\Psi_n)}{\partial \Psi_n} \delta \Psi_n, \quad (B15)$$

gdzie:

$$L(\Psi) = \frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{a} \nabla\Psi + \frac{e}{\pi a^2} \left(\xi \frac{1}{b} - \frac{n_{DIS}}{l_{DIS}} \right) \quad (B16)$$

Zatem równanie (B13) w postaci iteracyjnej zostanie wyrażone w następujący sposób:

$$\left\{ \frac{1}{\tau} + \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r(1)}{2a^2} + \frac{e}{\pi a^2} \frac{\partial \left(\frac{n_{DIS}}{l} \right)}{\partial \Psi_n} \right\} \delta\Psi_n(1) - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r(1)}{2a^2} \delta\Psi_n(2) = \frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(1)}{a} \frac{\Psi_n(2) - \Psi_n(1)}{2a} + \frac{e}{\pi a^2} \left(\xi \frac{1}{b} - \frac{n_{DIS}}{l} \right), \quad (B17)$$

który jest warunkiem brzegowym w punkcie $r = 0$. Potencjał Ψ został obliczony w centralnym punkcie S pokazanym na Rys. B4. Przykład pierścienia walcowego o przekroju prostokątnym ABCD wokół odcinka rdzenia dyslokacji o długości dz . Dla tych pierścieni schemat różnicowy wyrażony twierdzeniem Gaussa [84] został skonstruowany w celu rozwiązania równania (B12). Warunek brzegowy Neumanna dla $r = r_m$, przyjmuje postać:

$$\left. \frac{\partial \Psi(0)}{\partial r} \right|_{r=r_m} = 0. \quad (B18)$$

W obliczeniach uzyskano zbieżność metody iteracyjnej dla $\tau = 10^{-4}$.

Literatura

- [1] W. D. Lawson, S. Nielsen, E. H. Putley, i A. S. Young, „Preparation and properties of HgTe and mixed crystals of HgTe-CdTe”, *J. Phys. Chem. Solids*, t. 9, nr 3, s. 325–329, 1959, doi: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(59\)90110-6](https://doi.org/10.1016/0022-3697(59)90110-6).
- [2] A. Rogalski, „Mercury Cadmium Telluride Photodiodes at the Beginning of the Next Millennium (Review Paper)”, *Def. Sci. J.*, t. 51, nr 1, s. 5–34, sty. 2001, doi: 10.14429/dsj.51.2202.
- [3] „Vigo System S.A. historia firmy”. <https://vigo.com.pl/en/about-us/history/> (udostępniono maj 03, 3021).
- [4] P. Y. Emelie, J. Phillips, S. Velicu, i C. Grein, „Modeling and Design Considerations of HgCdTe Infrared Photodiodes under Nonequilibrium Operation”, *J. Electron. Mater.*, t. 36, s. 846–851, sie. 2007, doi: 10.1007/s11664-007-0107-7.
- [5] A. M. Itsuno, J. D. Phillips, i S. Velicu, „Predicted Performance Improvement of Auger-Suppressed HgCdTe Photodiodes and Heterojunction Detectors”, *IEEE Trans. Electron Devices*, t. 58, nr 2, s. 501–507, luty 2011, doi: 10.1109/TED.2010.2093577.
- [6] S. Velicu, C. H. Grein, P. Y. Emelie, A. Itsuno, J. D. Philips, i P. Wijewarnasuriya, „MWIR and LWIR HgCdTe Infrared Detectors Operated with Reduced Cooling Requirements”, *J. Electron. Mater.*, t. 39, nr 7, s. 873–881, lip. 2010, doi: 10.1007/s11664-010-1218-0.
- [7] C. T. Elliott, „Non-equilibrium modes of operation of narrow-gap semiconductor devices”, *Semicond. Sci. Technol.*, t. 5, nr 3S, s. S30–S37, mar. 1990, doi: 10.1088/0268-1242/5/3S/008.
- [8] T. Ashley i C. T. Elliott, „Nonequilibrium devices for infra-red detection”, *Electron. Lett.*, t. 21, nr 10, s. 451–452, maj 1985, doi: 10.1049/el:19850321.
- [9] A. M. White, „Generation-recombination processes and Auger suppression in small-bandgap detectors”, *J. Cryst. Growth*, t. 86, nr 1, s. 840–848, sty. 1988, doi: 10.1016/0022-0248(90)90813-Z.
- [10] K. Józwickowski i A. Józwickowska, „Enhanced Numerical Modeling of HgCdTe Long Wavelength Infrared Radiation High Operating Temperature Non-equilibrium P+v(π)N+ Photodiodes”, *J. Electron. Mater.*, t. 48, nr 10, s. 6030–6039, paź. 2019, doi: 10.1007/s11664-019-07264-w.
- [11] K. Jozwickowski, M. Kopytko, i A. Rogalski, „Numerical estimations of carrier generation-recombination processes and photon recycling effect in 3-μm n-on-p HgCdTe photodiodes”, *Opt. Eng.*, t. 50, nr 6, s. 061003, cze. 2011, doi: 10.1117/1.3572167.
- [12] K. Józwickowski, M. Kopytko, i A. Rogalski, „Numerical Estimations of Carrier Generation–Recombination Processes and the Photon Recycling Effect in HgCdTe Heterostructure Photodiodes”, *J. Electron. Mater.*, t. 41, nr 10, s. 2766–2774, paź. 2012, doi: 10.1007/s11664-012-2093-7.
- [13] A. Józwickowska i K. Józwickowski, „Numerical estimation of photon reabsorption process and optical crosstalk in arrays of HgCdTe photodiodes”, *Opt. Quantum Electron.*, t. 51, nr 3, s. 85, mar. 2019, doi: 10.1007/s11082-019-1781-4.
- [14] A. Józwickowska, R. Ciupa, O. Markowska, i K. Józwickowski, „Enhanced numerical design of HgCdTe MWIR HOT P+vN+ photodiodes”, w *2019 International Conference on Numerical*

Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD), lip. 2019, s. 85–86. doi: 10.1109/NUSOD.2019.8806961.

[15] J. Piotrowski, A. Józwickowska, K. Józwickowski, i R. Ciupa, „Numerical analysis of longwavelength extracted photodiodes”, *Infrared Phys.*, t. 34, nr 6, s. 565–572, grudz. 1993, doi: 10.1016/0020-0891(93)90112-K.

[16] J. Piotrowski i A. Rogalski, „Uncooled long wavelength infrared photon detectors”, *Infrared Phys. Technol.*, t. 46, nr 1, s. 115–131, grudz. 2004, doi: 10.1016/j.infrared.2004.03.016.

[17] A. Rogalski, „HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook”, *Rep. Prog. Phys.*, t. 68, nr 10, s. 2267–2336, sie. 2005, doi: 10.1088/0034-4885/68/10/R01.

[18] M. A. Kinch, F. Aqariden, D. Chandra, P.-K. Liao, H. F. Schaake, i H. D. Shih, „Minority carrier lifetime in p-HgCdTe”, *J. Electron. Mater.*, t. 34, nr 6, s. 880–884, cze. 2005, doi: 10.1007/s11664-005-0036-2.

[19] M. A. Kinch *i in.*, „High operating temperature MWIR detectors”, w *Infrared Technology and Applications XXXVI*, maj 2010, t. 7660, s. 76602V. doi: 10.1117/12.850965.

[20] K. Józwickowski, M. Kopytko, A. Rogalski, i A. Józwickowska, „Enhanced numerical analysis of current-voltage characteristics of long wavelength infrared n-on-p HgCdTe photodiodes”, *J. Appl. Phys.*, t. 108, nr 7, s. 074519, paź. 2010, doi: 10.1063/1.3483926.

[21] M. Kopytko i K. Józwickowski, „Generation-Recombination Effect in MWIR HgCdTe Barrier Detectors for High-Temperature Operation”, *IEEE Trans. Electron Devices*, t. 62, nr 7, s. 2278–2284, lip. 2015, doi: 10.1109/TED.2015.2430527.

[22] D. Lee *i in.*, „High-Operating Temperature HgCdTe: A Vision for the Near Future”, *J. Electron. Mater.*, t. 45, nr 9, s. 4587–4595, wrz. 2016, doi: 10.1007/s11664-016-4566-6.

[23] Y. Ozer i S. Kocaman, „Generation recombination suppression via depletion engineered heterojunction for alternative substrate MWIR HgCdTe infrared photodetectors”, *J. Appl. Phys.*, t. 122, nr 14, s. 143103, paź. 2017, doi: 10.1063/1.5000116.

[24] K. Józwickowski, A. Józwickowska, M. Kopytko, A. Rogalski, i L. R. Jaroszewicz, „Simplified model of dislocations as a SRH recombination channel in the HgCdTe heterostructures”, *Infrared Phys. Technol.*, t. 55, nr 1, s. 98–107, sty. 2012, doi: 10.1016/j.infrared.2011.10.003.

[25] T. Yamamoto, Y. Miyamoto, i K. Tanikawa, „Minority carrier lifetime in the region close to the interface between the anodic oxide and CdHgTe”, *J. Cryst. Growth*, t. 72, nr 1, s. 270–274, lip. 1985, doi: 10.1016/0022-0248(85)90156-3.

[26] W. W. Anderson, „Absorption constant of $Pb_{1-x}Sn_xTe$ and $Hg_{1-x}Cd_xTe$ alloys”, *Infrared Phys.*, t. 20, nr 6, s. 363–372, lis. 1980, doi: 10.1016/0020-0891(80)90053-6.

[27] K. Józwickowski i A. Józwickowska, „Enhanced Numerical Modeling of HgCdTe Long Wavelength Infrared Radiation High Operating Temperature Non-equilibrium $P+v(\pi)N+$ Photodiodes”, *J. Electron. Mater.*, t. 48, nr 10, s. 6030–6039, paź. 2019, doi: 10.1007/s11664-019-07264-w.

[28] E. Finkman i Y. Nemirovsky, „Infrared optical absorption of $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ”, *J. Appl. Phys.*, t. 50, nr 6, s. 4356–4361, cze. 1979, doi: 10.1063/1.326421.

- [29] K. Jóźwikowski, „Langevin-like method for modelling the noise currents in HgCdTe barrier LWIR detectors”, *Opt. Quantum Electron.*, t. 49, nr 3, s. 101, luty 2017, doi: 10.1007/s11082-017-0926-6.
- [30] K. Jóźwikowski, A. Jóźwikowska, i A. Martyniuk, „Dislocations as a Noise Source in LWIR HgCdTe Photodiodes”, *J. Electron. Mater.*, t. 45, nr 10, s. 4769–4781, paź. 2016, doi: 10.1007/s11664-016-4390-z.
- [31] S. Rein, *Lifetime Spectroscopy: A Method of Defect Characterization in Silicon for Photovoltaic Applications*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. doi: 10.1007/3-540-27922-9.
- [32] Y. Nemirovsky, R. Fastow, M. Meyassed, i A. Unikovsky, „Trapping effects in HgCdTe”, *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct. Process. Meas. Phenom.*, t. 9, nr 3, s. 1829–1839, maj 1991, doi: 10.1116/1.585808.
- [33] A. Jozwikowska i in., „Generation-recombination effects on dark currents in CdTe-passivated midwave infrared HgCdTe photodiodes”, *J. Appl. Phys.*, t. 98, nr 1, s. 014504, lip. 2005, doi: 10.1063/1.1946201.
- [34] J. S. Blakemore, *Semiconductor Statistics*. New York: Dover Pubns, 1987.
- [35] N. Sclar i E. Burstein, „Optical and Impact Recombination in Impurity Photoconductivity in Germanium and Silicon”, *Phys. Rev.*, t. 98, nr 6, s. 1757–1760, cze. 1955, doi: 10.1103/PhysRev.98.1757.
- [36] W. Shockley i W. T. Read, „Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons”, *Phys. Rev.*, t. 87, nr 5, s. 835–842, wrz. 1952, doi: 10.1103/PhysRev.87.835.
- [37] H. Gummel i M. Lax, „Thermal Ionization and Capture of Electrons Trapped in Semiconductors”, *Phys. Rev.*, t. 97, nr 6, s. 1469–1470, mar. 1955, doi: 10.1103/PhysRev.97.1469.
- [38] S. Adachi, *Properties of semiconductor alloys group-IV, III-V and II-VI semiconductors*. Chichester, West Sussex, U.K. ; Wiley, 2009.
- [39] P. Capper, *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds*. IET, 1994.
- [40] P. Capper, *Mercury cadmium telluride: growth, properties, and applications / Peter Capper and James Garland*. Hoboken, N.J., Hoboken, NJ: Wiley, 2011.
- [41] H. Bethe i in., *Quantentheorie*. Springer-Verlag, 2013.
- [42] H. S. W. Massey, „Theory of Atomic Collisions”, w *Atoms II / Atome II*, F. Hund, P. Gombás, i H. S. W. Massey, Red. Berlin, Heidelberg: Springer, 1956, s. 232–306. doi: 10.1007/978-3-642-85687-7_3.
- [43] K. Jóźwikowski, „Numerical modeling of fluctuation phenomena in semiconductor devices”, *J. Appl. Phys.*, t. 90, nr 3, s. 1318–1327, lip. 2001, doi: 10.1063/1.1379562.
- [44] W. van Roosbroeck i W. Shockley, „Photon-Radiative Recombination of Electrons and Holes in Germanium”, *Phys. Rev.*, t. 94, nr 6, s. 1558–1560, cze. 1954, doi: 10.1103/PhysRev.94.1558.
- [45] R. G. Humphreys, „Radiative lifetime in semiconductors for infrared detection”, *Infrared Phys.*, t. 23, nr 3, s. 171–175, maj 1983, doi: 10.1016/0020-0891(83)90031-3.
- [46] R. G. Humphreys, „Radiative lifetime in semiconductors for infrared detection”, *Infrared Phys.*, t. 26, nr 6, s. 337–342, lis. 1986, doi: 10.1016/0020-0891(86)90054-0.

- [47] A. R. Beattie, P. T. Landsberg, i H. Fröhlich, „Auger effect in semiconductors”, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.*, t. 249, nr 1256, s. 16–29, sty. 1959, doi: 10.1098/rspa.1959.0003.
- [48] P. T. Landsberg, *Recombination in Semiconductors*. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. doi: 10.1017/CBO9780511470769.
- [49] S. Krishnamurthy i T. N. Casselman, „A detailed calculation of the auger lifetime in p-type HgCdTe”, *J. Electron. Mater.*, t. 29, nr 6, s. 828–831, cze. 2000, doi: 10.1007/s11664-000-0232-z.
- [50] R. G. Pratt, J. Hewett, P. Capper, C. L. Jones, i N. Judd, „Minority-carrier lifetime in doped and undoped n-type $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ”, *J. Appl. Phys.*, t. 60, nr 7, s. 2377–2385, paź. 1986, doi: 10.1063/1.337149.
- [51] R. Fastow i Y. Nemirovsky, „The excess carrier lifetime in vacancy- and impurity-doped HgCdTe”, *J. Vac. Sci. Technol. A*, t. 8, nr 2, s. 1245–1250, mar. 1990, doi: 10.1116/1.576953.
- [52] K. Jóźwikowski, M. Kopytko, i A. Rogalski, „The bulk generation-recombination processes and the carrier lifetime in mid-wave infrared and long-wave infrared liquid nitrogen cooled HgCdTe alloys”, *J. Appl. Phys.*, t. 112, nr 3, s. 033718, sie. 2012, doi: 10.1063/1.4745872.
- [53] T. N. Casselman, „Calculation of the Auger lifetime in p-type $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ”, *J. Appl. Phys.*, t. 52, nr 2, s. 848–854, luty 1981, doi: 10.1063/1.328426.
- [54] Y. Chang *i in.*, „Carrier recombination lifetime characterization of molecular beam epitaxially grown HgCdTe”, *Appl. Phys. Lett.*, t. 93, nr 19, s. 192111, lis. 2008, doi: 10.1063/1.3001935.
- [55] T. N. Casselman i P. E. Petersen, „A comparison of the dominant Auger transitions in p-type (Hg,Cd)Te”, *Solid State Commun.*, t. 33, nr 6, s. 615–619, luty 1980, doi: 10.1016/0038-1098(80)90736-X.
- [56] M. C. Chen, L. Colombo, J. A. Dodge, i J. H. Tregilgas, „The minority carrier lifetime in doped and undoped p-type $\text{Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te}$ liquid phase epitaxy films”, *J. Electron. Mater.*, t. 24, nr 5, s. 539–544, maj 1995, doi: 10.1007/BF02657960.
- [57] G. Qiu, Y. Wei, Q. Sun, i J. Yang, „Minority carrier lifetimes in different doped LWIR HgCdTe grown by LPE”, w *6th International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing Technologies: Optoelectronic Materials and Devices for Sensing, Imaging, and Solar Energy*, paź. 2012, t. 8419, s. 84191J. doi: 10.1117/12.975827.
- [58] P. S. Wijewarnasuriya, M. D. Lange, S. Sivananthan, i J. P. Faurie, „Minority carrier lifetime in indium-doped HgCdTe(211)B epitaxial layers grown by molecular beam epitaxy”, *J. Electron. Mater.*, t. 24, nr 5, s. 545–549, maj 1995, doi: 10.1007/BF02657961.
- [59] V. C. Lopes, A. J. Syllaios, i M. C. Chen, „Minority carrier lifetime in mercury cadmium telluride”, *Semicond. Sci. Technol.*, t. 8, nr 6S, s. 824–841, cze. 1993, doi: 10.1088/0268-1242/8/6S/005.
- [60] A. Jóźwikowska, O. Markowska, i K. Jóźwikowski, „Numerical estimation of lattice strain, bending and generation of misfit dislocations in CdHgTe heterostructures grown on GaAs substrate”, *Opt. Quantum Electron.*, t. 52, nr 6, s. 294, maj 2020, doi: 10.1007/s11082-020-02391-9.
- [61] F. A. Ponce, G. B. Anderson, i J. M. Ballingall, „Interface structure in heteroepitaxial CdTe on GaAs(100)”, *Surf. Sci.*, t. 168, nr 1, s. 564–570, mar. 1986, doi: 10.1016/0039-6028(86)90887-3.

- [62] Yu. G. Sidorov *i in.*, „Density of dislocations in CdHgTe heteroepitaxial structures on GaAs(013) and Si(013) substrates”, *Phys. Solid State*, t. 57, nr 11, s. 2151–2158, lis. 2015, doi: 10.1134/S1063783415110311.
- [63] M. Kopytko *i in.*, „Status of HgCdTe Barrier Infrared Detectors Grown by MOCVD in Military University of Technology”, *J. Electron. Mater.*, t. 45, nr 9, s. 4563–4573, wrz. 2016, doi: 10.1007/s11664-016-4702-3.
- [64] A. Nouruzi-Khorasani, I. P. Jones, P. S. Dobson, D. J. Williams, i M. G. Astles, „Transmission electron microscopy of LPE grown CdHgTe”, *J. Cryst. Growth*, t. 96, nr 2, s. 348–356, cze. 1989, doi: 10.1016/0022-0248(89)90532-0.
- [65] B. Pelliciaro i G. Baret, „Role of dislocations in n-type annealed CdHgTe grown by liquid-phase epitaxy”, *J. Appl. Phys.*, t. 62, nr 9, s. 3986–3988, lis. 1987, doi: 10.1063/1.339200.
- [66] I. Virt, M. Bilyk, G. Khlyap, P. Shkumbatiuk, M. Kuzma, i L. Dumanski, „Photoelectric properties of dislocations in Hg/sub 1-x/Cd/sub x/Te crystals”, w *2001 International Symposium on Electron Devices for Microwave and Optoelectronic Applications. EDMO 2001 (Cat. No. 01TH8567)*, lis. 2001, s. 325–330. doi: 10.1109/EDMO.2001.974328.
- [67] V. Gopal i S. Gupta, „Effect of dislocations on minority carrier lifetime in HgCdTe”, *J. Appl. Phys.*, t. 95, nr 5, s. 2467–2472, luty 2004, doi: 10.1063/1.1644039.
- [68] A. Jóźwikowska, K. Jóźwikowski, R. Ciupa, i M. Suligowski, „Estimation of influence of lattice strain, bending and doping on the width of energy gap in InAsSb heterostructures”, *Infrared Phys. Technol.*, t. 99, s. 292–303, cze. 2019, doi: 10.1016/j.infrared.2019.04.020.
- [69] A. Jóźwikowska, M. Suligowski, i K. Jóźwikowski, „Enhanced numerical design of two-barrier infrared detectors with III–V compounds heterostructures considering the influence of lattice strain and misfit dislocations on the band gap”, *Opt. Quantum Electron.*, t. 51, nr 7, s. 247, lip. 2019, doi: 10.1007/s11082-019-1960-3.
- [70] J. D. Kim i M. Razeghi, „Investigation of InAsSb infrared photodetectors for near room temperature operation”, *Opto-Electron. Rev.*, t. 1998, nr 3, s. 217–230, sty. 1998.
- [71] C. Xie, V. Pusino, A. Khalid, A. P. Craig, A. Marshall, i D. R. S. Cumming, „Monolithically Integrated InAsSb-Based nBnBn Heterostructure on GaAs for Infrared Detection”, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, t. 24, nr 6, s. 1–6, lis. 2018, doi: 10.1109/JSTQE.2018.2828101.
- [72] T. J. Gosling, R. Bullough, S. C. Jain, i J. R. Willis, „Misfit dislocation distributions in capped (buried) strained semiconductor layers”, *J. Appl. Phys.*, t. 73, nr 12, s. 8267–8278, cze. 1993, doi: 10.1063/1.353445.
- [73] U. Jain *i in.*, „Calculation of critical-layer-thickness and strain relaxation in $GexSi_{1-x}$ strained layers with interacting 60 and 90° dislocations”, *Solid-State Electron.*, t. 36, nr 3, s. 331–337, mar. 1993, doi: 10.1016/0038-1101(93)90084-4.
- [74] S. C. Jain, M. Willander, K. Pinardi, i H. E. Maes, „A review of recent work on stresses and strains in semiconductor heterostructures”, *Phys. Scr.*, t. T69, s. 65–72, sty. 1997, doi: 10.1088/0031-8949/1997/T69/009.
- [75] T. Wosiński i T. Figielski, „Energy Levels and Electrical Activity of Dislocation Electron States in GaAs”, *Acta Phys. Pol. A*, t. 83, nr 1, s. 51–58, 1993, doi: 10.12693/APhysPolA.83.51.

- [76] L. Ciura *i in.*, „Investigation of trap levels in HgCdTe IR detectors through low frequency noise spectroscopy”, *Semicond. Sci. Technol.*, t. 31, nr 3, s. 035004, sty. 2016, doi: 10.1088/0268-1242/31/3/035004.
- [77] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, i L. R. Ram-Mohan, „Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys”, *J. Appl. Phys.*, t. 89, nr 11, s. 5815–5875, cze. 2001, doi: 10.1063/1.1368156.
- [78] H. Heinrich, „Jahnke-Emde-Lösche, Tafeln Höherer Funktionen. 6. Aufl. XII + 318 S. m. 189 Abb. Stuttgart 1960. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft. Preis geb. DM 58,80”, *ZAMM - J. Appl. Math. Mech. Z. Für Angew. Math. Mech.*, t. 41, nr 6, s. 270–270, 1961, doi: <https://doi.org/10.1002/zamm.19610410619>.
- [79] M. Kopytko *i in.*, „MOCVD grown HgCdTe p+BnN+ barrier detector for MWIR HOT operation”, w *Infrared Technology and Applications XLI*, cze. 2015, t. 9451, s. 945117. doi: 10.1117/12.2192152.
- [80] S. Maimon i G. W. Wicks, „nBn detector, an infrared detector with reduced dark current and higher operating temperature”, *Appl. Phys. Lett.*, t. 89, nr 15, s. 151109, paź. 2006, doi: 10.1063/1.2360235.
- [81] O. Markowska, M. Kopytko, J. Rutkowski, A. Kowalewski, i P. Martyniuk, „Experimental determination of leakage current occurring in HgCdTe infrared detectors operating in the mid-infrared”, w *12th Conference on Integrated Optics: Sensors, Sensing Structures, and Methods*, wrz. 2017, t. 10455, s. 104550V. doi: 10.1117/12.2282883.
- [82] R. Masut, C. M. Penchina, i J. L. Farvacque, „Occupation statistics of dislocation deep levels in III-V compounds”, *J. Appl. Phys.*, t. 53, nr 7, s. 4964–4969, lip. 1982, doi: 10.1063/1.331332.
- [83] D. Look, „Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices”, *Books Authored Wright State Fac.*, sty. 1989, [Online]. Dostępne na: <https://corescholar.libraries.wright.edu/books/32>
- [84] A. Józwickowska, „Numerical solution of the nonlinear Poisson equation for semiconductor devices by application of a diffusion-equation finite difference scheme”, *J. Appl. Phys.*, t. 104, nr 6, s. 063715, wrz. 2008, doi: 10.1063/1.2982275.

Spis Rysunków

Rys. 1 Architektura półprzekroju cylindrycznej struktury typu „mesa” P^+BvBN^+ MWIR (z dwiema komplementarnymi barierami).....	26
Rys. 2 Przestrzenny rozkład ułamka molowego x , stężenia donorów N_D i akceptorów N_A w detektorze z komplementarnymi barierami (P^+BvBN^+) pracującym w temperaturze 230 K (Rys. 2a) i 300 K (Rys. 2b).	27
Rys. 3 Przestrzenny rozkład gęstości dyslokacji w niechłodzonych detektorach P^+BvBN^+ oraz P^+vN^+	28
Rys. 4 Przestrzenny rozkład struktury pasmowej z polaryzacją w kierunku zaporowym $-0,02$ V i $-0,4$ V przy temperaturze pracy 230K (rys. 4a i 4b) i przy 300 K (rys. 4c i 4d) w strukturach P^+vN^+ (rys. 4a, i Rys. 4c) P^+BvBN^+ (Rys. 4b i Rys. 4d).....	29
Rys. 5 Przestrzenny rozkład koncentracji elektronów n i dziur p w analizowanych strukturach po polaryzacji z zaznaczonymi na krzywych wartościami napięcia wstecznego.	30
Rys. 6 Rozkład szybkości generacji wywołany mechanizmami A1, A7, SRH (wywołany lukami rtęci i dyslokacjami), generacja promienista R uwzględniająca zjawisko reabsorpcji fotonów przy 230 K w strukturze P^+vN^+ (rys. 6a) i P^+BvBN^+ (rys. 6b), przy 300 K w P^+vN^+ (rys. 6c) i P^+BvBN^+ (rys. 6d).	31
Rys. 7 Rozkład szybkości rekombinacji wywołanej mechanizmami A1, A7, SRH (z udziałem luk rtęci i dyslokacji), rekombinacja promienista R uwzględniająca zjawisko reabsorpcji fotonów przy 230 K w strukturze P^+vN^+ (rys. 7a) i P^+BvBN^+ (rys. 7b), przy 300 K w P^+vN^+ (rys. 7c) i P^+BvBN^+ (rys. 7d).	32
Rys. 8 Wykresy charakterystyk prądowo-napięciowych znormalizowane do pola powierzchni mesy równego 1cm^2 , w funkcji napięcia wstecznego polaryzacji dla 4 struktur pracujących przy 230 K (Rys. 8a) i 300 K Rys. 8b).	33
Rys. 9 Znormalizowana do powierzchni kontaktu rezystancja dynamiczna w funkcji odwrotnego napięcia polaryzacji dla detektorów P^+vN^+ i P^+BvBN^+ pracujących przy 230 K (rys. 9a) i 300 K (rys. 9b).	34
Rys. 10 Wydajność kwantowa dla promieniowania o długości fali $5,5\ \mu\text{m}$ w detektorach P^+vN^+ i P^+BvBN^+ w 230 K (rys. 10a) i 300 K (rys. 10b).....	34
Rys. 11 Obliczony prąd szumów przy $\Delta f = 1$ Hz jako funkcja częstotliwości dla detektora P^+BvBN^+ w 300 K dla wybranego napięcia polaryzacji.	35
Rys. 12 Przestrzenny rozkład składu molowego x , koncentracji donorów N_D , koncentracji akceptorów N_A oraz koncentracji centrów pułapkowych wywołanych lukami rtęci - N_T , w funkcji grubości warstwy dla detektora pracującego w temperaturze 300K.	37
Rys. 13 Przestrzenny rozkład krawędzi energii struktury pasmowej dla wybranych napięć polaryzacji (0,4 i 0,02V).	38
Rys. 14 Przestrzenny rozkład koncentracji elektronów (czerwone linie) i dziur (linie niebieskie) dla struktury P^+vN^+ z dwoma komplementarnymi barierami, w równowadze termicznej i po polaryzacji napięciem $-0,2$ V , $-0,4$ V i $-0,6$ V.....	38
Rys. 15 Rozkład szybkości generacji nośników z podziałem na różne typy mechanizmów G-R dla detektora pracującego w temperaturze 300 K.	39
Rys. 16 Rozkład szybkości rekombinacji z podziałem na różne typy mechanizmów G-R dla detektora pracującego w temperaturze 300 K.	40
Rys. 17 Mechanizmy międzypasmowej rekombinacji Auger 1 (a) i Auger 7 (b).....	41
Rys. 18 Mechanizm rekombinacji promienistej.....	42
Rys. 19 Schemat mechanizmów Shockley'a-Reada-Halla zachodzących poprzez stany pułapkowe związane z lukami metali, czyli centra punktowe (a) oraz związane z dyslokacjami lub stanami powierzchniowymi – tworzy się wąskie pasmo energetyczne (b).	43

Rys. 20a. Na skutek absorpcji promieniowania wygenerowane zostały dodatkowe elektrony i dziury przez co doszło do zmiany koncentracji odpowiednio o Δn i Δp . Rys.20b. Rekombinacja elektronów zachodzi poprzez następujące kanały: wychwyt przez zjonizowany donor, wychwyt przez centrum pułpkowe i przejście do pasma walencyjnego. Rekombinacja dziur zachodzi przez wychwycenie dziury przez zjonizowany akceptor i centrum pułpkowe, oraz w procesach międzypasmowych sprowadzających się finalnie do wychwycenia elektronu przez zerwane wiązanie.	44
Rys. 21 Trzy dominujące kanały rekombinacji z udziałem zjonizowanych atomów domieszek. Rys.21a rekombinacja promienista. Rys.21b. rekombinacja z udziałem fononów. Rys. 21c rekombinacja Augera.	45
Rys. 22 Luka rtęciowa zawiera dwa niewysyczone wiązania. Może potencjalnie przyłączyć dwa elektrony. Pierwszy poziom leżący w pobliżu krawędzi E_V jest poziomem akceptorowym E_A , który jest zajęty przez pierwszy elektron i poziom pułpkowy E_T zajęty przez drugi elektron. Poziom pułpkowy powstaje wtedy, gdy poziom akceptorowy jest już zajęty przez elektron.	49
Rys. 23 Dane eksperymentalne czasu życia elektronów dla materiału typu p, o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$) – dane pochodzą z pracy [57]. Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) (linie ciągłe) dotyczą przypadków, gdy koncentracja donorów zmienia się od $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ do 10^{15} cm^{-3}	78
Rys. 24 Koncentracja elektronów i dziur w funkcji koncentracji donorów, w materiale o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów 10^{16} cm^{-3}	78
Rys. 25 Czas życia elektronów (Rys. 25a) i dziur (Rys. 25b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 80K.	79
Rys. 26 Czas życia elektronów (Rys. 26a) i dziur (Rys. 26b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 140K.	80
Rys. 27 Czas życia elektronów (Rys. 27a) i dziur (Rys. 27b) w funkcji koncentracji donorów w temperaturze 260K.	80
Rys. 28 Czas życia dziur dla materiału typu p o składzie $x=0,23$ i koncentracji akceptorów na poziomie $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$). Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (130) dotyczą trzech wybranych koncentracji donorów.	81
Rys. 29 Dane eksperymentalne czasu życia elektronów dla materiału typu p o składzie $x=0,222$ i koncentracji akceptorów $2.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$) pochodzą z pracy [56]. Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) dotyczą przypadku, gdy koncentracja akceptorów wynosi $1,5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (linie czerwone) i $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (linie niebieskie). Koncentracja donorów zmienia się od $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ do 10^{15} cm^{-3} . Obliczenia przeprowadzono dla trzech wybranych koncentracji resztkowych donorów.	82
Rys. 30 Temperaturowa zależność czasu życia elektronów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [51]. Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dla wybranych koncentracji resztkowych donorów uzyskano z relacji (129).	83
Rys. 31 Temperaturowa zależność czasu życia elektronów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [51]. Wyniki obliczeń (linie ciągłe) dla wybranych koncentracji resztkowych donorów uzyskano z relacji (129).	84
Rys. 32 Czas życia dziur w funkcji odwrotności temperatury dla wybranych koncentracji akceptorów N_A i pułapek (luk rtęci) N_T . Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [58]. Rys. 32a $N_T=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, Rys. 32b $N_T=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, Rys. 32c $N_T=10^{14} \text{ cm}^{-3}$	85
Rys. 33 Czas życia dziur w funkcji odwrotności temperatury dla wybranych koncentracji akceptorów. Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [54].	86
Rys. 34 Czas życia elektronów dla materiału typu n o składzie $x=0,221$ i koncentracji donorów $1,4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ w funkcji odwrotności temperatury ($1000/T$). Obliczenia wykonane przy pomocy zależności (129) dotyczą trzech wybranych koncentracji akceptorów.	87

Rys. 35 Czas życia dziur (Rys. 35a) i elektronów (Rys. 35b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 80K.	87
Rys. 36 Czas życia dziur (Rys. 36a) i elektronów (Rys. 36b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 140K.	87
Rys. 37 Czas życia dziur (Rys. 37a) i elektronów (Rys. 37b) w funkcji koncentracji akceptorów w temperaturze 260K.	88
Rys. 38 Zależność czasu życia dziur od koncentracji elektronów w strukturach o składzie molowym $x=0,225$, w temperaturze 80 K – wyniki dla wybranych wartości koncentracji luk rtęci N_T i akceptorów N_A . Dane eksperymentalne pochodzą z pracy [59]. Linie ciągłe ilustrują wyniki obliczeń. Dane eksperymentalne: bulk-materiał otrzymywany metodą Bridgmana, MBE- epitaksja z wiązki molekularnej, VPE-epitaksja z fazy pary.	89
Rys. 39 Struktura detekcyjna P^+nN^+ zbudowana z HgCdTe osadzonego na podłożu z GaAs metodą MOCVD.	93
Rys. 40 Rozkład odkształceń $\epsilon_{ }$ na podłożu GaAs o grubości 1100 μm . Niebieska linia oznacza odkształcenia pseudomorficzne. Czerwona linia odkształcenia z dodatkowym wygięciem struktury.	97
Rys. 41 Przestrzenny rozkład odkształceń $\epsilon_{ }$ przy warstwie epitaksjalnej HgCdTe, w temperaturze 300 K, osadzonej na podłożu z GaAs (100).	97
Rys. 42 Wyliczona struktura pasmowa w funkcji grubości warstwy epitaksjalnej (linie ciągłe). Linia przerywana przedstawia rozkład przestrzenny granicznej długości fali λ_{co}	98
Rys. 43 Natężenie pola elektrycznego w funkcji odległości od linii dyslokacji leżących w poszczególnych warstwach heterostruktury pokazanej na Rys. 39.	99
Rys. 44 Ilustracja obrazująca proces rekombinacji nośników nierównowagowych przez stany energetyczne w paśmie dyslokacyjnym. Można ten proces przedstawić jako proces objętościowy zachodzący z szybkością R_{DIS} [$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$] w obszarze o promieniu r_z (połowa odległości między liniami dyslokacji) lub jako proces powierzchniowy zachodzący z szybkością rekombinacji powierzchniowej S_{DIS} [cm s^{-1}] na powierzchni cylindra o promieniu c (stała sieci).	104
Rys. 45 Grafika obrazująca nośniki ładunku, które poruszają się z prędkością termiczną v_{th} pod kątem θ do kierunku linii dyslokacji. Następnie docierają do fragmentu linii dyslokacji o długości p w czasie dt z cylindrycznego elementu o objętości $\pi r^2 p$	105
Rys. 46 Siatka dyslokacji niedopasowania w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. Schemat przedstawia fragment dwóch przecinających się linii otoczony prostopadłością o wysokości H i kwadratowej podstawie o boku o długości p , będącej średnią odległością pomiędzy liniami dyslokacji.	109
Rys. 47 Schemat obrazuje dochodzące do powierzchni przelomu linie dyslokacji, które mogą zostać ujawnione jako jamki, powstające w wyniku strawienia powierzchni. Lokalnie jedna jamka trawienia przypada na powierzchnię pH , będącą iloczynem wysokości H i odległości między liniami dyslokacji p	110
Rys. 48 Siatka dyslokacji niedopasowania w płaszczyźnie wzrostu heterostruktury. Odcinki równej długości przedstawiają płaszczyzny przelomu, na których ujawniają się jamki trawienia zaznaczone w postaci kolorowych kółek.	111
Rys. 49 Schemat struktury pasmowej półprzewodnika. $E=0$ oznacza poziom próżni, X jest powinowactwem elektronowym, e ładunkiem elektronu, a Ψ potencjałem elektrycznym. E_C jest krawędzią pasma przewodnictwa, E_V pasma walencyjnego, a E_{DIS} jest średnią energią jonizacji pasma dyslokacyjnego.	119
Rys. 50 Schemat fragmentu linii dyslokacji o długości p , umieszczonej w analizowanym elemencie objętości. Energię elektryczną zgromadzoną jest w rdzeniu dyslokacji, który stanowi cylindryczny obszar o promieniu c , oraz w obszarze otaczającym rdzeń o średnicy p	119
Rys. 51 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} w funkcji składu molowego x , w temperaturach odpowiednio 80 K (Rys. 51a), 220 K (Rys. 51b) i 300 K (Rys. 51c). Średnia energia pasma	

dyslokacyjnego leży $0,3 E_g$ powyżej krawędzi pasma walencyjnego. Krzywe ciągłe dotyczą materiałów typu n o podanej koncentracji donorów. Krzywe przerywane dotyczą materiałów typu p o podanej koncentracji elektronów.	122
Rys. 52 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} dla materiału o składzie molowym $x=0,3$ w temperaturze 80 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 52a) i akceptorów (Rys. 52b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS}	123
Rys. 53 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} dla materiału o składzie molowym $x=0,3$ w temperaturze 300 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 53a) i akceptorów (Rys. 53b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS}	123
Rys. 54 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} dla materiału o składzie molowym $x=0,2$ w temperaturze 80 K w funkcji koncentracji donorów (Rys. 54a) i akceptorów (Rys. 54b) dla różnych założonych wartości energii E_{DIS}	123
Rys. 55 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} dla materiału o składzie molowym $x=0,2$ w temperaturze 300 K, w funkcji koncentracji donorów (Rys. 55a) i akceptorów (Rys. 55b), dla różnych założonych wartości energii E_{DIS}	124
Rys. 56 Schemat siatki dyslokacji. Linie dyslokacji niedopasowania tworzą matrycę naładowanych ładunkiem elektrycznym linii rozmieszczonych ze stałym odstępem p . Element o długości dy w pionowej linii o numerze n oddziałuje z elementem o długości dx znajdującym się na poziomej linii o numerze m	125
Rys. 57 Schemat siatki dyslokacji. Element o długości dx' w poziomej linii o numerze n oddziałuje z elementem o długości dx znajdującym się na poziomej linii o numerze m	127
Rys. 58 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} w funkcji składu molowego, w silnie domieszkowanych materiałach typu n ($N_D=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), w temperaturze 80 K (Rys. 58a) i 300 K (Rys. 58b). Parametr p przy krzywych oznacza średnią odległość między liniami dyslokacjami. Pasma dyslokacyjne znajduje się w odległości $0,3 E_g$ od krawędzi pasma walencyjnego.	130
Rys. 59 Równowagowa funkcja rozkładu f_{DIS0} w funkcji składu molowego, w silnie domieszkowanych materiałach typu p ($N_A=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), w temperaturze 80 K (Rys. 59a) i 300 K (Rys. 59b). Parametr p przy krzywych oznacza średnią odległość między liniami dyslokacjami. Pasma dyslokacyjne znajduje się w odległości $0,3 E_g$ od krawędzi pasma walencyjnego.	130
Rys. 60 Obrany fragment powierzchni struktury półprzewodnikowej o wielkości ΔS , na której jest rozmieszczonych NT atomów, z czego $\in NT$ atomów stanowi pułapkowe centra rekombinacyjne.	134
Rys. 61 Schemat stosowanego modelu obliczeń do oszacowania, ile jest elektronów, które tworzą z osią z kątem pomiędzy θ a $\theta + d\theta$ poruszających się od powierzchni ΔS . Na schemacie zobrazowano kąt bryłowy pomiędzy stożkami o kątach $\theta + d\theta$ i θ	134
Rys. 62 Schemat przypowierzchniowego elementu objętości wykorzystywanego w programie komputerowym do rozwiązywania równań transportu. Dodatkową szybkość rekombinacji netto $RT\Delta SSURF$ wprowadzają stany powierzchniowe. Prądy elektronów i dziur przepływają przez wszystkie powierzchnie prostopadłościanu z wyjątkiem powierzchni $\Delta SSURF$	139
Rys. 63 a) Architektura struktury $n^+B_p n N^+$ typu „mesa” z HgCdTe. Czerwona strzałka wskazuje prąd upływności powierzchniowej, a niebieska - prąd objętościowy, oraz b) trójwymiarowy obraz profilu „mesy” po wytrawieniu, uzyskany przy pomiarze profilometrem optycznym.	141
Rys. 64 Gęstość prądu w funkcji napięcia, dla detektorów o średnicy 100- 500 μm w 200 K, a) struktury anodowane (w rogu zdjęcie z „zimnego palca” stacji pomiarowej, b) pasywacja metodą sputtering (w rogu zdjęcie zestawu „mes” pod mikroskopem optycznym).	142
Rys. 65 a) Gęstość prądu w funkcji napięcia dla „mes” o średnicy 300 μm i 500 μm pasywowanych metodą sputtering, bez pasywacji i anodyzowanych. b) Gęstość prądu w funkcji stosunku obwodu fotodiody do powierzchni dla struktur o średnicach 100-500 μm , pasywowanych i bez pasywacji.	143

Rys. 66 a) Gęstość prądu w funkcji natężenia dla struktur bez pasywacji w przedziale temperatur 200-260 K b) Gęstość prądu w funkcji stosunku obwodu fotodiody do powierzchni dla struktur o średnicach 200-500 μm	144
Rys. 67 Rozkład przestrzenny składu molowego x oraz koncentracji domieszek w warstwie epitaksjalnej struktury 3786. W fotodiodach dolny kontakt znajduje się w odległości około 1 μm od warstwy buforowej CdTe. Grubość warstwy wyliczono od granic z warstwą buforową.	145
Rys. 68 Charakterystyki J(V) fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 90K.....	146
Rys. 69 Charakterystyki j(V) fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 230K.	146
Rys. 70 Charakterystyki j(V) fotodiod wykonanych ze struktury 3786 w temperaturze 300K.	146