

GaAs elektrooptinių parametru įvertinimo skaitmeniniai modeliai

Albertas PINCEVIČIUS, Rimantas-Jonas RAKAUSKAS,
 Svajonė VOŠTERIENĖ (KA)

el. paštas: pincev@takas.lt, rimantas.rakauskas@tmk.lka.lt

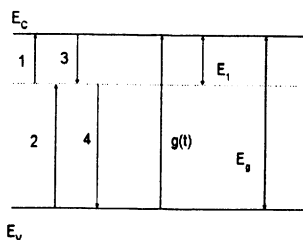
1. Uždavinio formulavimas

Darbe nagrinėjama metodika, leidžianti nustatyti kai kuriuos didelės varžos puslaidininkių elektrooptinius parametrus. Tokie puslaidininkiniai kristalai gaunami liekamųjų priemaišų bei savųjų defektų kompensavimo būdu ir plačiai naudojami mikroelektronikoje. Priemaišos ir struktūriniai defektai puslaidininkinės medžiagos draudžiamąjoje juostoje suskuria lygmenys (energijos būsenas elektronams), kurie žymia dalimi apsprendžia gaminamų prietaisų elektrines ir optines savybes.

Sprendžiant uždavinį reikalingi konkretus medžiagos parametrai, todėl toliau kalbėsime apie galio arsenidą. Priemaišos ir struktūriniai defektai (*Ga* ar *As* atomai atsitiktinai atsiradę kristalinės gardelės tarpmazgiuose ar susikeitę vietomis) sukuria skirtingas aktyvacijos energijas E_i ir elektrono pagavimo koeficientus γ_i turinčius lygmenis. Elektronųkaitą puslaidininkio zonose ir diskretiniuose lygmenyse aprašo metodus pagrįstas tolydaus laiko Markovo grandinėmis su baigtine būsenų aibe. Vieno gilaus lygmens, kurį gali sukurti taškinis defektas, elektronų kaitos schema parodyta 1 pav. Rodyklėmis nurodyti elektronų perėjimai paprastai užrašomi taip [1]:

$$\begin{array}{ll} 1 & \gamma_n N_{CM}(m_0 + m), & 2 & \gamma_n (M - m_0 - m)(n_0 + n), \\ 3 & \gamma_p P_{VM}(M - m_0 - m), & 4 & \gamma_p (m_0 + m)(p_0 + p), \end{array}$$

čia M – kažkurių priemaišų lygmenų koncentracija, m_0 , m – tų lygmenų užpildymas elektronais esant termodinaminei pusiausvyrai (tuo atveju 1 ir 3, bei 2 ir 4 srautai tarpu-



1 pav. E_v – valentinė zona, E_c – laidumo zona, E_1 – elektrono, esančio priemaišiniame lygmenyje, aktyvacijos energija, E_g – draudžiamųjų energijų zona, rodyklėmis 1, 2, 3, 4 parodyti galimi elektronų šuoliai į priemaišinių lygmenį ir valentinę bei laidumo zonas, $g(t)$ – lazerio impulsu iš valentinės į laidumo zoną perkeliama (generuojami) elektronai.

savyje lygūs) ir esant jų generacijai šviesa (m atitinka pokytį Δm), γ_n ir γ_p pagavimo koeficientai elektrono iš laidumo zonos ir skylutės (elektrono trūkumo) iš valentinės zonos, N_{CM} ir P_{VM} – statistikiniai faktoriai, t.y., konstantos, kurių dydį apsprendžia priemaišinio lygmens atstumas nuo laidumo zonos E_i ir temperatūra eksperimento metu T , n_0 , n ir p_0 , p – elektronų ir skylučių koncentracijos esant termodinaminei pusiausvyrai ir jų pokytis apšvietus puslaidininkį lazeriu.

Energetinių būsenų elektronams draudžiamoje juostoje skaičius būna 10^{12} – 10^{19} cm $^{-3}$, lazerio impulsu generuojama 10^{15} – 10^{19} cm $^{-3}$. Tokiu būdu sistemos būsenų skaičius yra labai didelis ir diferencialinės lygtys, aprašančios elektronų perėjimus iš priemaišinių lygmenų į zonas ir iš zonų į lygmenys, rašomos elektronų koncentracijų vidurkiams. Diferencialinių lygčių sistema, aprašanti elektronų rekombinaciją (mažėjimą) tolygiai apšviestame lazerio impulsu puslaidininkio tūryje ir pradinės sąlygos bus tokios:

$$\frac{dn}{dt} = \sum_{i=1}^4 \left[\gamma_n^i (n_0 + N_{CM}^i) m_i - \gamma_n^i (M - M_{0i} - m_i) n \right] + g(t), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{dm_i}{dt} = & -m_i \left[\gamma_p^i (p_0 + P_{VM}^i) + \gamma_n^i (n_0 + n + N_{CM}^i) \right] \\ & + \gamma_n^i (M_i - m_{0i}) n - \gamma_p^i (m_{0i} + m_i) p, \\ p = & n + \sum_{i=1}^4 m_i, \quad n(0) = 0, \quad p(0) = 0, \quad m_i(0) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Kiekvienu konkrečiu atveju lygčių sistema (1) užrašoma pasirinktam (reikšmingiausių) lygmenų skaičiui. Tada, iš eksperimentinių duomenų ar literatūros, žinoma šių lygmenų energetinė padėtis draudžiamoje zonoje E_i ir koncentracijos M_i . Pasirinkus temperatūrą, suskaičiuojamos konstantos N_{CM}^i , P_{VM}^i . Lygmenų koncentracijos M_i gali būti kažkiek skirtingos net kristaluose „augintuose“ tose pačiose sąlygose. Jei turime eksperimentinių rezultatų duomenys iš kurių galime surasti elektronų ir skilučių koncentracijas n_{0i} , p_{0i} esant keletui skirtingų temperatūrų, tai sprendami netiesinių algebrinių lygčių sistemą

$$p_{0i} + \frac{M_{d1} N_{CM}^{1i}}{n_{0i} + N_{CM}^{1i}} + \frac{M_{d2} N_{CM}^{2i}}{n_{0i} + N_{CM}^{2i}} = n_{0i} + \frac{M_{a1} P_{VM}^{1i}}{p_{0i} + P_{PM}^{1i}} + \frac{M_{a2} P_{VM}^{1i}}{p_{0i} + P_{PM}^{2i}}, \quad (3)$$

galime patikslinti M_{di} – donorų, M_{ai} – akceptorų koncentracijas. Šiuo konkrečiu atveju lygčių sistemoje (3) įskaitomi keturi reikšmingiausi lygmenys.

Lazerio impulsas aprašomas Gauso funkcija:

$$g(t) = \frac{\alpha \beta I_0}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}},$$

čia α – absorbcijos koeficientas, β – kvantinis našumas, I_0 – impulso srauto maksimali vertė, t – laikas, t_0 – laiko momentas, kai impulsas maksimalus, σ – dydis apsprendžiantis lazerio impulso formą (jo vertė priklauso nuo Δt – laiko intervalo, kurio pradžioje ir gale $I = \frac{I_0}{2}$).

1 lentelė
Uždavinio parametrai

M_i	E_i	γ_{ni}	γ_{pi}
$1,94 \cdot 10^{16}$	0,27	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-7}$
$7,3 \cdot 10^{12}$	0,47	$1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-9}$
$1,94 \cdot 10^{16}$	0,83	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-10}$
$1,52 \cdot 10^{10}$	1,2	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-6}$

2. Lygčių sistemų sprendimo ypatumai ir gaunami rezultatai

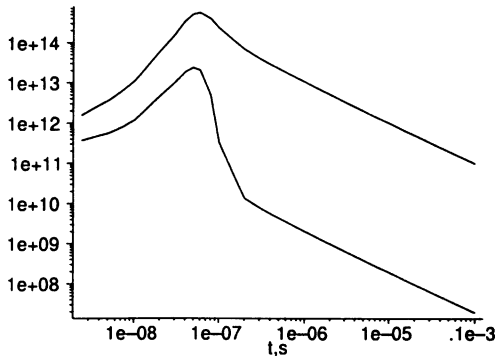
Algebrinių lygčių sistema (3) jautri pradinių duomenų paklaidų atžvilgiu, t.y., esant nedideliems parinktų koncentracijų n_{0i} , p_{0i} pokyčiams stipriai keičiasi suskaičiuojamos lygmenų draudžiamoje zonoje koncentracijos. Sistemą sprendėme padidintu tikslumu.

Netiesinių diferencialinių lygčių sistema (1) su pradinėmis sąlygomis (2) sprendžiama parinkus aštuonis parametrus γ_{ni} , γ_{pi} ($i = 1, 2, 3, 4$). Kai kurie iš jų jau nurodomi literatūroje, bet gali būti tikslinami. Suskaičiuotos nepusiausvyrinių elektronų ir skilučių koncentracijos (skaičius cm^{-3}), jų kitimas pateikiamas 2 pav.

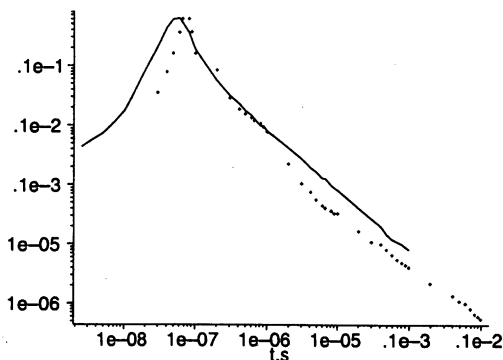
Prie realių ieškomų parametrų γ_{ni} , γ_{pi} reikšmių sistemos tikrinės vertės yra stipriai išsklaidytos, t.y., sistemą reikia spręsti naudojant standžių sistemų sprendimo metodus. Lygčių sistema buvo sprendžiama Giro [3] metodu keičiant žingsnį, nes teko spręsti uždavinį santykinai plačiame laikų diapazone ($0 - 10^{-4}$ s). Sprendimo rezultatai palyginti su eksperimentiniais duomenimis 3 pav. Rezultatai parodyti 2 pav. ir 3 pav. gauti sprendžiant lygčių sistemą (3) su parametrais, nurodytais 1 lentelėje.

Laidumas $\sigma = e\mu_n n + e\mu_p p$, čia e – elektrono krūvis ($1,6 \cdot 10^{-19}$ C), μ_n , μ_p – elektronų ir skilučių judrumas *GaAs*.

Eksperimento rezultatai ir skaičiavimai (3 pav.) kokybiškai sutampa. Galima pastebėti keletą ypatumų. Maksimumo padėtis nuo gilių lygmenų parametrų praktiškai nepriklauso, todėl derinant tektų keisti lazerio impulso formą ($\Delta t = 4 \cdot 10^{-8}$ s) ir maksimumo padėtį ($t_0 = 5 \cdot 10^{-8}$ s).



2 pav. Elektronų (apatinė kreivė) ir skilučių koncentracijų relaksacijos kreivės, t.y., sistemos (2) su pradinėmis sąlygomis (3) sprendiniai.



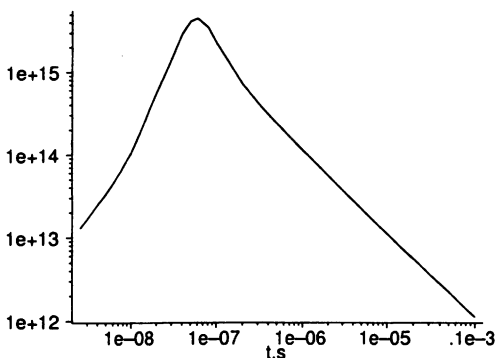
3 pav. Laidumo relaksacija bandinyje. Taškai – eksperimentas [1], kreivė – laidumas, paskaičiuotas su 2 pav. pavaizduotomis n ir p reikšmėmis.

4 pav. parodyta gilių lygmenų užpildymo elektronais kinetika. Šiuo atveju elektronų koncentracija aktyviuose lygmenyse keičiasi adekvačiai jų koncentracijos kitimams laidumo ir valentinėje zonoje. Tokie lygmenys vadinami rekombinaciniais. Pakeitus pagavimo koeficientų reikšmes mes gausime kitokį vaizdą. Jei pagavimo koeficientai smarkiai skiriasi, pavyzdžiui $\gamma_n \gg \gamma_p$, tai elektronai gali ilgesniam laikui likti priemaišiniame lygmenyje. Tada stebėsime padidintą puslaidininkinio bandinio jautrumą priemaišiniam sužaditimui, t.y., šviesai, kurios energija atitinka priemaišinio lygio energiją.

Kai šiluminė generacija maža (dydžiai N_{CM} , P_{VM} maži, palyginus su m ir M), pvz., greitajame kitimo intervale ($t = 0s - t = 5 \cdot 10^{-7}s$), lygčių sistemoje (1) dominuos atskiri nariai ir, įvertinus elektronų „gyvavimo trukmę“ τ_n , bus galima supaprastinti sistemos (1) pirmąją lygtį:

$$\tau_n = \frac{1}{\gamma_n(M - m_0 - m)}, \quad \frac{dn}{dt} = g(t) - \frac{n}{\tau_n}. \quad (4)$$

Nagrinėjant kinetikos kreives (2 pav.) ir supaprastintus sprendinius, juos palyginant lengviau parinkti atskirų lygmenų parametrus.



4 pav. Elektronų koncentracijos relaksacija ketvirtajame (M_4) lygmenyje.

Rezultatų aptarimas

Tokiu būdu pasiūlyta skaičiavimo metodika ir programa gali būti pritaikoma aiškinant eksperimentų rezultatus ir modeliuojant gaminamų prietaisų charakteristikas. Buvo aptartas uždavinys surandant puslaidininkinio kristalo gilių lygmenų elektrooptinius parametrus. Pasiūlyta metodika jautri parenkamų parametrų skaitinių verčių dydžiui, kas įgalina derinti skaičiavimus su eksperimentu ir patikimai įvertinti šiuos parametrus. Skaičiavimo metodika gali būti taikoma ir modeliuojant norimų savybių fotodetektorius. Pavyzdžiui, galima situacija kada puslaidininkinis kristalas žadinamas dviem impulsais, kurių vienas užpildo tam tikram laikui apibrėžtos sužadinimo energijos ΔE lygmenį, o toliau, generuojant elektronus iš pastarojo lygmens, keičiamas kristalo laidumas. Galima aukščiau minėtus uždavinius spręsti atvejui, kai puslaidininkinis kristalas sužadinamas trumpesniais lazerio impulsais – pikosekundiniu ($\Delta t = \text{const} \times 10^{-11}$ s) arba femtosekundinju ($\Delta t = \text{const} \times 10^{-14}$ s).

Literatūra

- [1] J. Vaitkus, J. Storasta, A. Pincevičius, M. Petrauskas, V. Kažukauskas, Dydžiaviržio *GaAs* gilių centrų parametrų nustatymas, panaudojant fotolaidumo relaksacijos sužadinus lazerio impulsu, rezultatus, *Lietuvos fizikos rinkinys*, T. XXVIII, 6, 744–751 (1988) (rusų kalba).
- [2] A. Pincevičius, J. Storasta, Gilių centrų parametrų nustatymas foto-jautriuose puslaidininkiuose, *IX Pasaulio lietuvių mokslo ir kūrybos simpoziumo tezės*, Vilnius, 86–87 (1995).
- [3] C.W. Gear, *Numerical Initial Value Problem in Ordinary Differential Equations*, Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall, (1971).

The numerical models of the estimation of the electrooptical parameters of *GaAs*

A. Pincevičius, R.-J. Rakauskas, S. Vošterienė

In this paper we offer method for estimation of the relaxation of a photoconductivity of high resistivity crystal, stimulate by laser impulse. The system of the six nonlinear ordinary differential equations is solved. The relaxation of electrons across four most influential deep levels is taken into account. Electron concentration changes on fifteen orders in a narrow boundary layer ($0 - 5 \cdot 10^{-8}$ s). In the sequent layers change of the electrons concentration is slower in the time interval up to 10^{-4} second. The system of the differential equations was solved by a method Gear with a modification of a step. The electro-optical parameters of the crystal we found out by the comparison of calculation and experiment outcomes. From the other side it is possible to use calculation for improvement of the characteristics of the devices.