

## **OBRAZOWANIE STRUKTURY DEFECTOWEJ KRYSTAŁÓW PÓLIZOLUJĄCEGO GaAs POPRAZ ANALIZĘ RELAKSACYJNYCH PRZEBIEGÓW FOTOPRAŁDU Z ZASTOSOWANIEM ODWROTNEGO PRZEKSZTAŁCENIA LAPLACE'A**

Michał Pawłowski<sup>1,2</sup>, Paweł Kamiński<sup>1</sup>, Roman Kozłowski<sup>1</sup>, Michał Kozubal<sup>1</sup>,  
Jarosław Źelazko<sup>1</sup>

Metodę niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej z wykorzystaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a (ILT PITS) zastosowano do obrazowania struktury defektowej monokryształów półizolującego GaAs. Zoptymalizowano oprogramowanie umożliwiające trójwymiarową wizualizację temperaturowych zmian stałych czasowych niestacjonarnych przebiegów fotoprądu. Do wyznaczania parametrów centrów defektowych na podstawie przebiegu linii grzbietowych fałd odpowiadających termicznej emisji nośników ładunku zastosowano aproksymację neuronową. Zobrazowanie struktury defektowej otrzymano w wyniku nałożenia obrazu właściwości centrów defektowych uzyskanego za pomocą odwrotnego przekształcenia Laplace'a na obraz prążków widmowych uzyskany metodą korelacyjną.

### **1. WPROWADZENIE**

W celu obrazowania struktury defektowej materiałów półizolujących metodą niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej (PITS), zaimplementowanej w rozwijanym w ITME unikalnym systemie pomiarowym, realizowane są dwa procesy: proces rejestracji niestacjonarnych przebiegów fotoprądu w szerokim zakresie temperatur (akwizycja danych pomiarowych) oraz proces przetwarzania tych przebiegów w postać obrazu struktury defektowej.

Algorytmem najszerzej stosowanym obecnie do przetwarzania relaksacyjnych przebiegów fotoprądu w postać widmową jest procedura korelacyjna [1]. W wyniku jej działania relaksacyjne przebiegi fotoprądu zarejestrowane w różnych temperatu-

---

<sup>1</sup> Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych, ul. Wólczyńska 133, 01-919 Warszawa,  
e-mail: Pawel.Kaminski@itme.edu.pl

<sup>2</sup> Wojskowa Akademia Techniczna, ul. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa

rach, przekształcane są w widma dwuwymiarowe w postaci powierzchni złożonej z wielu widm jednowymiarowych dla różnych wartości okien szybkości emisji. W widmach dwuwymiarowych termiczna emisja nośników ładunku z centrów defektowych widoczna jest w postaci podłużnych fałd. Rzuty ich linii grzbietowych na płaszczyznę wyznaczoną osiami temperatury, szybkości emisji określają temperaturowe zależności szybkości emisji nośników ładunku opisywane równaniem Arrheniusa [2] w postaci:

$$e_{Tk}(T) = A_k T^2 \exp\left(-\frac{E_{ak}}{k_B T}\right) \quad (1)$$

Parametry tego równania: stała  $A_k = \gamma \sigma_k$  ( $\sigma_k$  - przekrój czynny na wychwyty,  $\gamma$  - stała materiałowa) i energia aktywacji  $E_{ak}$ , określają właściwości  $k$ -tego rodzaju centrów defektowych, współczynnik  $k_B$  jest stałą Boltzmana.

Zgodnie z procedurą korelacyjną niestacjonarne przebiegi fotoprądu  $i(t, T)$  zarejestrowane po wyłączeniu oświetlenia próbki w różnych temperaturach  $T$ , przekształcane są w zbiór  $G$  jednowymiarowych widm  $S_{Kg}(T)$ , dla ustalonych wartości okien szybkości emisji  $e_{Tg}$ ,  $g = 1..G$ , zgodnie z równaniem:

$$S_{Kg}(T) = [i(t_{2g}, T) - i(t_{1g}, T)] / I_0(T) \quad (2)$$

gdzie:  $I_0(T)$  jest wartością fotoprądu w momencie wyłączenia oświetlenia, zaś wartości  $t_{1g}$  i  $t_{2g}$  są punktami czasowymi, w których próbkowane są relaksacyjne przebiegi fotoprądu. Punkty  $t_{1g}$  i  $t_{2g}$  określają okno szybkości emisji  $e_{Tg}$ , dla którego wyznaczane jest jednowymiarowe widmo korelacyjne  $S_{Kg}(T)$ .

Wartość temperatury, dla której okno szybkości emisji  $e_{Tg}$  równe jest szybkości emisji  $e_T$  nośników ładunku z centrów defektowych, wyznaczana jest z warunku determinującego maksimum widma  $dS_K / dT = (dS_K / de_T)(de_T / dT) = 0$ . Najczęściej przyjmowany jest stosunek  $t_{2g} / t_{1g} = 3$  i okno szybkości emisji wynosi wówczas  $e_{Tg} = 1.23 / t_{1g} = 3.69 / t_{2g}$ . Widma jednowymiarowe  $S_{Kg}(T)$  są następnie składane w formę dwuwymiarową  $S_K(T, e_T)$ .

Główną wadą procedury korelacyjnej jest jej niska rozdzielczość, w szczególności w przypadku występowania wielu centrów defektowych o zbliżonych właściwościach. Zaletą jej jest natomiast mała czułość na szumy występujące w zarejestrowanych zanikach fotoprądu.

Nowy algorytm, służący do przetwarzania relaksacyjnych przebiegów fotoprądu w postać widmową, wykorzystuje odwrotne przekształcenie Laplace'a do rozkładu relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, zmierzonych w określonym zakresie temperatur, na składowe wykładnicze związane z termiczną emisją nośników ładunku z poszczególnych centrów defektowych. W wyniku tego przekształcenia powstaje jednowymiarowe widmo Laplace'a, w którym występują ostre maksima określające

stałe czasowe poszczególnych składowych wykładniczych. Zgodnie z przyjętym modelem [2] odwrotności tych stałych czasowych równe są szybkości emisji nośników ładunku z wykrytych centrów defektowych. Podobnie jak w przypadku dwuwymiarowego widma korelacyjnego, można utworzyć dwuwymiarowe widmo Laplace'a, składając je z widm jednowymiarowych. W dwuwymiarowych widmach Laplace'a termiczna emisja nośników ładunku z centrów defektowych manifestuje się w postaci bardzo wąskich fałd, które wizualizowane są w postaci prążków widmowych otrzymywanych w wyniku ich rzutowania na płaszczyznę określoną współrzędnymi: temperatura i szybkość emisji. Analiza widmowa relaksacyjnych przebiegów fotoprądu realizowana jest praktycznie za pomocą oprogramowania CONTIN opracowanego i udostępnionego przez S.W. Provenchera [3-4].

Do wyznaczenia parametrów równania Arrheniusa, opisującego przebieg linii grzbietowej fałdy, zastosowano sieć neuronową [2]. W wyniku dopasowania dwuwymiarowego modelu neuronowego do kształtu fałdy na powierzchni widmowej, parametry te wyznaczone są bezpośrednio na podstawie wartości wag sieci [2].

W ramach niniejszej pracy przedstawiono nowy algorytm wykorzystujący odwrotne przekształcenie Laplace'a do analizy niestacjonarnych przebiegów fotoprądu, a także właściwości sieci neuronowej zastosowanej do aproksymacji fałd na powierzchni widmowej. Opracowany algorytm zastosowano następnie do badania centrów defektowych w kryształach półizolującego (SI) GaAs. Parametry centrów defektowych wyznaczano na podstawie wartości wag sieci neuronowej dopasowywanej do kolejnych fałd w dwuwymiarowych widmach Laplace'a. Wyniki badań znacznie rozszerzają dotychczasową wiedzę na temat centrów defektowych w kryształach SI GaAs.

## 2. OPIS ALGORYTMU WYKORZYSTUJĄCEGO ODWROTNE PRZEKSZTAŁCENIE LAPLACE'A DO ANALIZY NIESTACJONARNYCH PRZEBIEGÓW FOTOPRĄDU

Model matematyczny opisujący relaksacyjny przebieg fotoprądu  $i(t)$  za pomocą transformaty Laplace'a ma postać równania całkowego:

$$i(t) = \int_0^{\infty} S_L(e_T) \exp(-e_T t) de_T \quad (3)$$

gdzie:  $S_L(e_T)$  jest jednowymiarową funkcją gęstości widma dla ustalonej temperatury  $T$ . Transformata ta umożliwia określenie funkcji gęstości widma  $S_L(e_T)$  na podstawie pomiaru relaksacyjnego przebiegu fotoprądu  $i(t)$  za pomocą odpowiednich algorytmów numerycznych [4-7]. W przypadku idealnym, dla funkcji  $i(t)$  złożonej z wielu funkcji wykładniczych, istnieje jednoznaczne rozwiązanie równania (2). W przypadku

danych eksperymentalnych, zawierających zakłócenia i nieznaną poziom odniesienia, liczba funkcji widmowych  $S_L(e_r)$  spełniających zadane kryterium dokładności może być bardzo duża, a także funkcje te mogą się znacznie różnić.

Ze względu na dyskretny charakter danych tworzących relaksacyjny przebieg fotoprądu, w obliczeniach numerycznych całkowanie w równaniu (3) zastępuje się sumowaniem:

$$i(t) = \sum_{m=1}^M c_m S_L(e_{T_m}) \exp(-e_{T_m} t) \quad (4)$$

gdzie:  $c_m$  są współczynnikami kwadraturowymi wynikającymi z numerycznego całkowania,  $M$  jest liczbą punktów w zbiorze wartości szybkości emisji  $e_r$  o granicznych wartościach równych  $e_{T1} = e_{Tmin}$  i  $e_{TM} = e_{Tmax}$ . Powyższy wzór można zapisać w postaci macierzowej jako:

$$i = K \cdot S_L \quad (5)$$

gdzie  $i = (i_1, i_2, \dots, i_R)$  jest kolumnowym wektorem danych pomiarowych o  $R$  elementach reprezentujących relaksacyjny przebieg fotoprądu w postaci:

$$i_r = \sum_{m=1}^M c_m S_L(e_{T_m}) \exp(-e_{T_m} t_r) + \varepsilon_r \quad (6)$$

zaś  $S_L = (S_{L1}, S_{L2}, \dots, S_{LM})$  jest poszukiwanym kolumnowym wektorem wartości funkcji gęstości widma o  $M$  elementach oraz  $\varepsilon_r$  stanowi składową losową zawartą w danych pomiarowych. Macierz  $K$  o rozmiarach  $R \times M$  o elementach, która reprezentuje operator całkowy Laplace'a, jest zdefiniowana jako  $\alpha_{rm} = \exp(-e_{T_m} t_r)$ , którą reprezentuje operator całkowy Laplace'a, jest zdefiniowana jako:

$$K = [\exp(-e_{T_m} t_r)]_{m=1..M}^{r=1..R} \quad (7)$$

Należy dodać, że w celu ograniczenia rozwiązań procedura matematyczna pozwalająca na wyznaczenie widma  $S_L$  wykorzystuje regularyzację Tichonowa [4,7]. W procedurze tej widmo  $S_L$  otrzymywane jest poprzez kompromis pomiędzy dwoma zadanymi wymaganiami: wartość normy kwadratowej  $\|K \cdot S_L - i\|^2$  musi być minimalna, aby jak najlepiej spełniony został warunek (5) oraz postać widma  $S_L$  musi być „najprostsza” z możliwych, tzn. funkcja  $S_L$  musi być gładka i zawierać minimalną liczbę ostrych maksimum [4]. Formalną miarą braku gładkości, a zarazem regularizatorem procesu obliczeniowego jest wyrażenie:

$$\|\Omega S_L\|^2 = \int_{e_{Tmin}}^{e_{Tmax}} \left( \frac{d^2 S_L}{de_T^2} \right)^2 de_T \quad (8)$$

w którym  $\Omega$  jest operatorem regularyzacji. Przyjęcie przez to wyrażenie minimalnej wartości zapewnia, że widmo  $S_L$  nie zawiera istotnych artefaktów. Oba powyższe wymagania oznaczają, że widmo  $S_L$  otrzymywane jest poprzez minimalizację wartości wyrażenia:

$$\Psi = \|\mathbf{K} \cdot \mathbf{S}_L - \mathbf{i}\|^2 + \alpha^2 \cdot \|\Omega \mathbf{S}_L\|^2 \quad (9)$$

w którym  $\alpha$  jest parametrem regularyzacji [7] i decyduje o stopniu regularyzacji. Jeśli wartości  $\alpha$  są zbyt małe, występuje brak gładkości widma  $\mathbf{S}_L$ , które może posiadać składowe nie związane z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych, a ponadto otrzymywane rozwiązania mogą być niestabilne przy małej zmienności  $\mathbf{i}(t)$ . Jeśli z kolei  $\alpha$  jest zbyt duże, wówczas otrzymamy stabilne rozwiązania dające w wyniku zbyt gładkie widmo obniżające rozdzielczość analizy. Równanie (5) nie jest wówczas zadowalająco spełnione i pewna część informacji o centrach defektowych może być stracona. Opracowano szereg metod optymalnego doboru parametru  $\alpha$  bazujących głównie na wiedzy wstępnej (*a priori*) [4,8]. Metody te bazują na założeniu, że funkcja widmowa  $\mathbf{S}_L$  otrzymywana w wyniku przekształcenia relaksacyjnych przebiegów fotoprądu przyjmuje wartości nieujemne. Zastosowanie odwrotnego przekształcenia Laplace'a do obrazowania struktury defektowej materiałów półizolujących wymaga więc wiedzy eksperckiej, umożliwiającej filtrację artefaktów zawartych w funkcji widmowej wskutek zakłóceń danych pomiarowych.

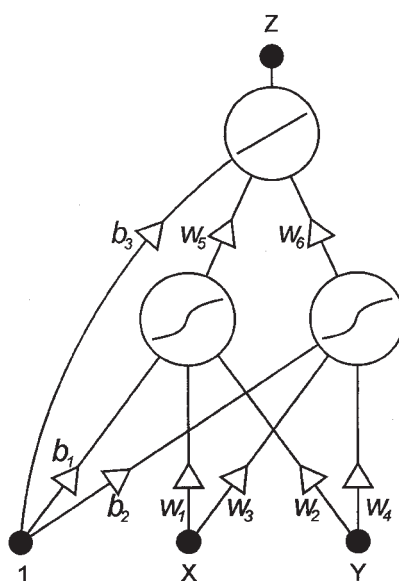
### 3. ZASTOSOWANIE SIECI NEURONOWEJ DO WYZNACZANIA PARAMETRÓW CENTRÓW DEFECTOWYCH NA PODSTAWIE DWUWYMIAROWYCH WIDM LAPLACE'A

Do aproksymacji fałd w dwuwymiarowych widmach otrzymanych w wyniku zastosowania odwrotnej transformaty Laplace'a, a także fałd występujących w widmach korelacyjnych, wybrano sieć neuronową typu perceptron dwuwarstwowy [2]. Wybrana struktura sieci neuronowej posiada następujące zalety:

- perceptron dwuwarstwowy jest uniwersalnym aproksymatorem dowolnej, nieliniowej funkcji ograniczonej, określonej w obszarze domkniętym;
- zastosowanie sigmoidalnych funkcji aktywacji neuronów ukrytych umożliwia bardzo dobre dopasowanie morfologiczne modelu formalnego do kształtu fałd, otrzymanych w wyniku odwrotnego przekształcenia Laplace'a, reprezentujących temperaturowe zmiany stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu;
- w wyniku dopasowania modelu neuronowego do kształtu fałd występujących w idmie Laplace'a rzuty ich linii grzbietowych na płaszczyznę wyznaczoną osiami temperatura - szybkość emisji określają temperaturowe zależności szybkości

emisji nośników ładunku z centrów defektowych, zaś parametry tych centrów otrzymywane są bezpośrednio na podstawie wartości wag sieci;

- istnieją dobrze znane, efektywne algorytmy uczenia sieci.
- Zastosowaną sieć neuronową w postaci perceptronu dwuwarstwowego ilustruje Rys. 1. Widoczne są wejścia w postaci  $X = 1000/T$  oraz  $Y = \ln(T^2/e_T)$ , wyjście  $Z$  oraz



**Rys. 1.** Schemat perceptronu dwuwarstwowego zastosowanego do wyznaczania parametrów centrów defektowych.

**Fig. 1.** Schematic of two-layer perceptron used for determination of defect centre parameters.

specjalne wejście obciążenia, na które podawana jest stała wartość równa 1. Wyjście sieci neuronowej określone jest zależnością

$$Z(X, Y, w) = w_5 \cdot h_1 + w_6 \cdot h_2 + b_3 \quad (10)$$

w której

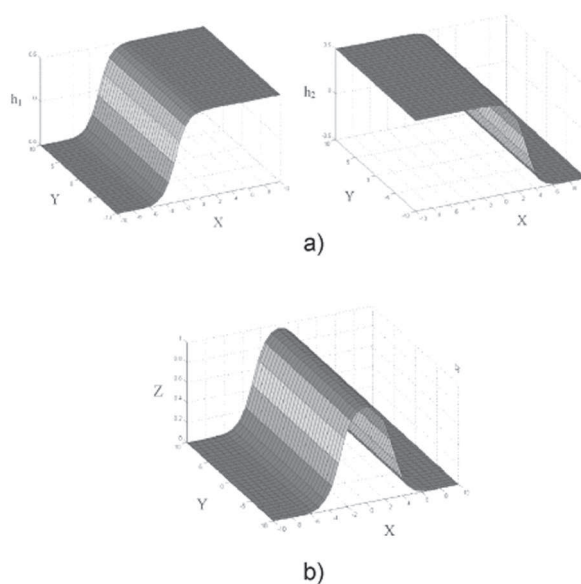
$$h_1 = \text{tgh}(w_1 \cdot X + w_2 \cdot Y + b_1) \quad \text{i} \quad h_2 = \text{tgh}(w_3 \cdot X + w_4 \cdot Y + b_2) \quad (11)$$

stanowią wartości wyjściowe neuronów ukrytych, a wektor wag

$$\mathbf{w} = \{w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, b_1, b_2, b_3\} \quad (12)$$

określa parametry aproksymatora.

Każdy z neuronów ukrytych modeluje jedno zbocze fałdy przedstawione na Rys. 2a. Rys. 2b ilustruje wynik sumowania obu zboczy, i powstawanie powierzchni do aproksymacji fałdy występującej w dwuwymiarowym widmie Laplace'a.



**Rys. 2.** Ilustracja powierzchni tworzonych przez sieć neuronową. (a) Powierzchnie boczne tworzone przez neurony ukryte. (b) Powierzchnia utworzona w wyniku sumowania wartości wyjściowych neuronów ukrytych aproksymująca dwuwymiarowe widmo korelacyjne.

**Fig. 2.** Examples of surfaces formed by neural network. (a) Lateral surfaces formed by the hidden neurons; (b) The surface formed as a result of summation of the hidden neurons output values used for approximation of a two-dimensional correlation spectrum.

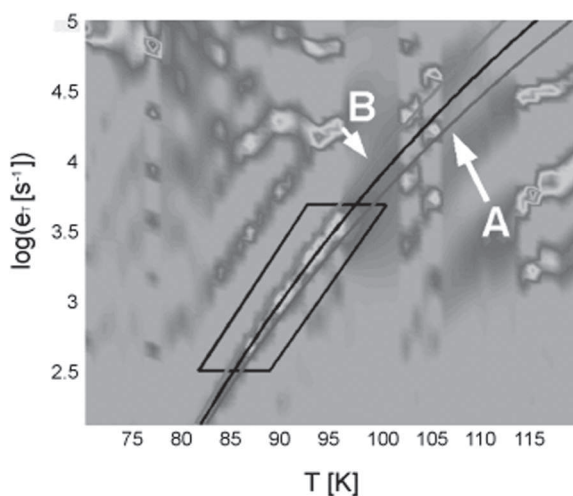
W celu realizacji aproksymacji wybranej fałdy przeprowadza się uczenie sieci neuronowej, czyli proces doboru parametrów  $w$ , minimalizujący średniokwadratowy błąd  $\varepsilon$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \left\{ S_{Lj} \left[ \frac{1000}{T_j}, \ln \frac{(T_j)^2}{e_{Tj}} \right] - Z \left[ \frac{1000}{T_j}, \ln \frac{(T_j)^2}{e_{Tj}}, w \right] \right\}^2 \quad (13)$$

morfolożicznego dopasowania modelu  $Z(X, Y, w)$  do fałdy  $S_L(T, e_p)$  powstałej w wyniku przetworzenia danych pomiarowych. W równaniu (13)  $j$  jest numerem punktu zbioru wszystkich  $J$  aproksymowanych punktów widma.

Przedstawiony powyżej algorytm zaimplementowany został w programie komputerowym **Span** służącym do wizualizacji i analizy widm Laplace'a [9].

W pierwszym kroku po uruchomieniu procedury analizy neuronowej należy wybrać prążek widmowy związany z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych. Następnie, na wybranym prążku, rysując czworokąt przy użyciu myszy, zaznaczamy obszar danych poddawanych analizie. W procesie uczenia sieci wartości wag są tak dobierane, aby błąd średniokwadratowy  $\varepsilon$  przyjmował wartość minimalną. Po zaznaczeniu obszaru danych sieć neuronowa automatycznie realizuje proces aproksymacji. Przykładowy prążek widmowy Laplace'a dla centrów EL15 w kryształach SI GaAs, wraz z zaznaczonym obszarem analizowanych danych oraz liniami otrzymanymi w wyniku aproksymacji neuronowej, przedstawiony jest na Rys. 3. W wyniku obliczeń otrzymujemy przebiegi linii wyznaczających kierunki obu powierzchni bocznych, modelowanych osobno przez oba neurony (oznaczone na Rys. 3 literami A i B), oraz linię grzbietową o współczynniku kierunkowym obliczanym jako wartość średnia współczynników kierunkowych linii obu zboczy (linia czarna). Linia grzbietowa określa temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku dla danego rodzaju centrów defektowych i automatycznie wyświetlane są parametry tych centrów, tzn. energia aktywacji  $E_a$  i współczynnik  $A$  występujący przed wyrażeniem wykładniczym w równaniu Arrheniusa. Dla centrów EL15 parametry te odpowiednio wynoszą  $E_a = 0,153$  eV i  $A = 3,9 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>.



**Rys. 3.** Przykładowy prążek widmowy dla centrów defektowych w kryształach SI GaAs z zaznaczonymi liniami otrzymanymi w wyniku aproksymacji neuronowej fałdy występującej w widmie Laplace'a. Linie A i B pokazują kierunki powierzchni bocznych modelowanych przez neurony ukryte. Linia czarna wyznacza przebieg linii grzbietowej fałdy.

**Fig. 3.** A spectral fringe for defect centres in a SI GaAs crystal with the lines obtained as a result of the neural approximation of a fold in the Laplace spectrum. The lines A and B show the directions of lateral surfaces modelled by the hidden neurones. The black line is the projection of the fold ridgeline on the plane given by the axes for temperature and emission rate.



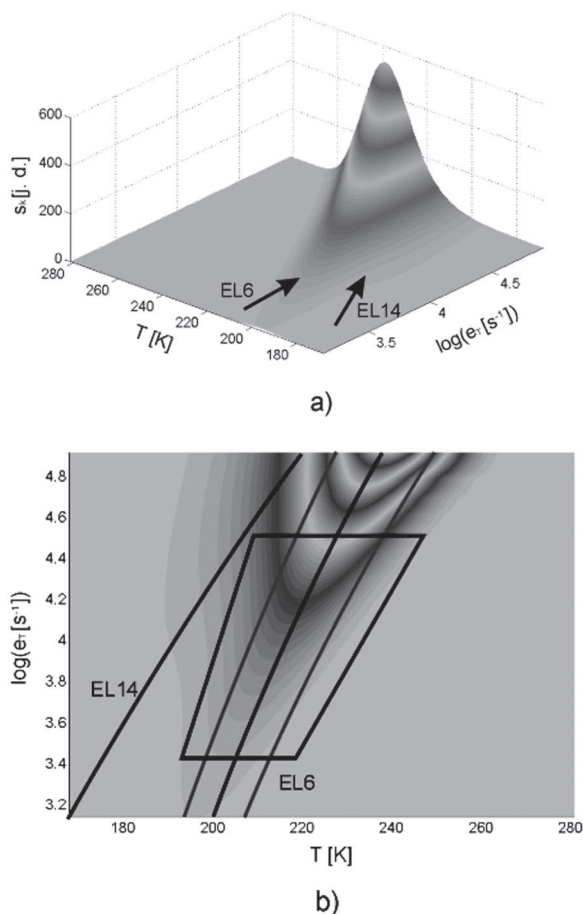
#### 4. PORÓWNANIE ROZDZIELCZOŚCI PROCEDURY KORELACYJNEJ I PROCEDURY WYKORZYSTUJĄCEJ ODWROTNE PRZEKSZTAŁCENIE LAPLACE'A NA PODSTAWIE ANALIZY SYMULOWANYCH ZANIKÓW FOTOPRĄDU

Jakość wyników otrzymywanych za pomocą odwrotnego przekształcenie Laplace'a jest silnie zależna od poziomu zakłóceń w zarejestrowanych relaksacyjnych przebiegach fotoprądu. W przypadku dużej składowej szumowej w danych pomiarowych zadanie polegające na wyodrębnieniu wielu składowych wykładniczych jest zadaniem źle postawionym (*ill posed problem*). Otrzymujemy bowiem wiele rozwiązań równania (3), których wyniki zawierają się w granicach błędu eksperymentalnego. W tym przypadku interpretacja widm Laplace'a jest więc znacznie utrudniona i nie pozwala na jednoznaczną identyfikację centrów defektowych.

Badanie centrów defektowych rozpoczęto od zastosowania odwrotnego przekształcenia Laplace'a do przetworzenia w postać widmową relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wyznaczonych poprzez symulację dla zadanych centrów defektowych. Celem tych badań było porównanie kształtu fałdy związanej z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych w widmie korelacyjnym z kształtem fałdy w widmie Laplace'a przy założeniu idealnych warunków pomiarowych. W tych warunkach bowiem możliwe jest zademonstrowanie znacznie większej rozdzielczości widm Laplace'a w porównaniu do widm korelacyjnych.

W celu porównania rozdzielczości widma korelacyjnego z rozdzielczością widma Laplace'a wygenerowano komputerowo relaksacyjne przebiegi fotoprądu przy założeniu występowania w półizolującym GaAs dwóch typowych rodzajów pułapek EL6 ( $E_a = 0,35$  eV;  $A = 3,42 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>) i EL14 ( $E_a = 0,215$  eV;  $A = 1,186 \times 10^5$  K<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>), których koncentracja wynosiła odpowiednio  $N_T = 5 \times 10^{15}$  cm<sup>-3</sup> oraz  $N_T = 5 \times 10^{14}$  cm<sup>-3</sup>. Na Rys. 4a przedstawiono obraz otrzymanej dla tych przebiegów widmowej powierzchni korelacyjnej, zaś na Rys. 4b zilustrowano rzut tej powierzchni na płaszczyznę wyznaczoną osiami: temperatura - szybkość emisji.

Szeroka fałda widoczna na Rys. 4a jest wynikiem złożenia dwóch fałd związanych z termiczną emisją ładunków z centrów EL6 (0,35 eV) i EL14 (0,215 eV). Ze względu na znacznie większą koncentrację centrów EL6 (0,35 eV) udział tych centrów w kształtowaniu fałdy jest dominujący. Udział centrów EL6 (0,35 eV) i EL14 (0,215 eV) w termicznej emisji nośników ładunku manifestuje się również poprzez poszerzenie korelacyjnego prążka widmowego przedstawionego na Rys. 4b. Linie ciągłe ilustrują temperaturowe zależności szybkości emisji dla pułapek EL6 i EL14 wyznaczone zgodnie z równaniem Arrheniusa dla przyjętych wartości energii aktywacji  $E_a$  i współczynnika  $A$ . Zastosowanie sieci neuronowej możliwe jest wyłącznie do wyznaczenia parametrów dominujących pułapek EL6. Linia ciągła



**Rys. 4.** Wyniki analizy metodą korelacyjną symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu w kryształach SI GaAs zawierającym pułapki EL6 i EL14. (a) Fałda widmowa. (b) Korelacyjny prążek widmowy powstały w wyniku rzutowania fałdy na płaszczyznę wyznaczoną osiami: temperatura, szybkość emisji. Linie ciągłe ilustrują temperaturowe zależności szybkości emisji dla pułapek EL6 i EL14. Widoczny czworokąt ilustruje obszar danych wykorzystanych do aproksymacji neuronowej części fałdy związanej z pułapkami EL6.

**Fig. 4.** Results obtained by means of the correlation procedure used for the analysis of the photocurrent transients in a SI GaAs crystal with traps EL6 and EL14. (a) The fold in the two-dimensional spectrum. (b) Correlation spectral fringe obtained by the projection of the fold on the plane given by the axes: temperature, emission rate. The solid lines illustrate the temperature dependences of the emission rate for the traps EL6 and EL14. The tetragon marks the region of data used for the neural approximation of the part of the fold attributed to the traps EL6.

przechodząca przez środek obszaru (Rys. 4b) ilustruje temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku dla centrów EL6 wyznaczoną metodą aproksy-

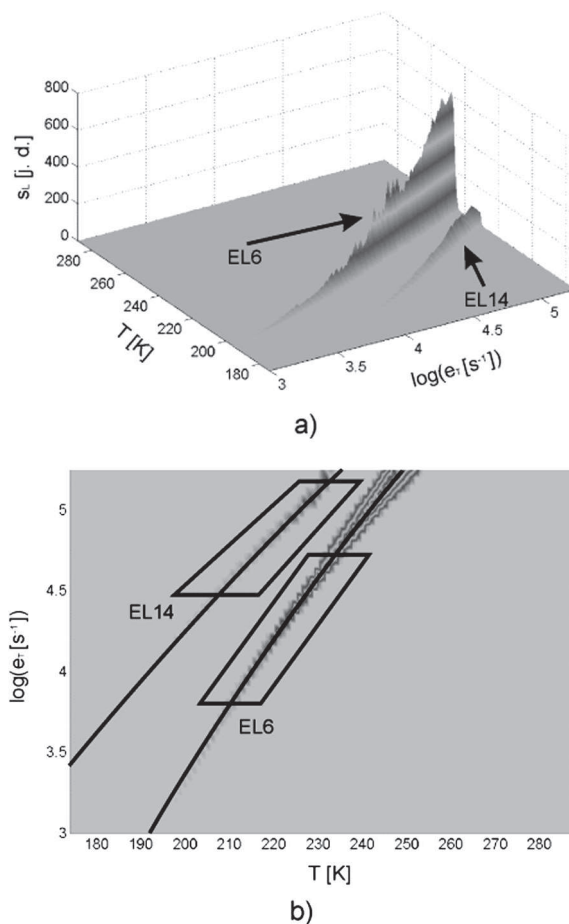
macji neuronowej. Otrzymane w wyniku aproksymacji fałdy wartości parametrów tych centrów wynoszą  $E_a = 0,36$  eV,  $A = 4,64 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> i w niewielkim stopniu różnią się od wartości zadanych, równych  $E_a = 0,35$  eV,  $A = 3,42 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>. Tak więc, w przypadku udziału dwóch rodzajów centrów defektowych w powstawaniu fałdy w widmie korelacyjnym, metoda aproksymacji neuronowej pozwala na poprawne wyznaczenie wartości parametrów dominujących centrów defektowych, o ile koncentracja tych centrów jest o rząd wielkości większa od koncentracji drugiego rodzaju centrów defektowych.

Na Rys. 5 zilustrowano wyniki przetworzenia symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu za pomocą procedury wykorzystującej odwrotne przekształcenie Laplace'a. Powyższe rezultaty dotyczą przypadku idealnego, bez wpływu składowej szumowej w relaksacyjnych przebiegach fotoprądu. Zostały one otrzymane za pomocą programu CONTIN z zastosowaniem typowych wartości parametrów sterujących procesem obliczeniowym. Widoczna jest duża rozdzielczość procedury wykorzystującej odwrotne przekształcenie Laplace'a do analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Jak wskazuje Rys. 5a otrzymano dwie wąskie, wyraźnie rozdzielone fałdy związane z pułapkami EL6 i EL14. Odseparowane są również prążki widmowe, pokazane na Rys. 5b, będące rzutami tych fałd na płaszczyznę wyznaczoną osiami: temperatura – szybkość emisji. Fałdy te dobrze poddają się aproksymacji neuronowej, której wyniki zilustrowano na Rys. 5b. Otrzymane w wyniku aproksymacji fałd wartości parametrów centrów EL6 i EL14 wynoszą odpowiednio ( $E_a = 0,35$  eV,  $A = 3,29 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>) oraz ( $E_a = 0,22$  eV,  $A = 1,53 \times 10^5$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>) i są bardzo bliskie wartościom zadany, równym odpowiednio ( $E_a = 0,35$  eV,  $A = 3,42 \times 10^7$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>) i ( $E_a = 0,215$  eV;  $A = 1,186 \times 10^5$  K<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>). Procedura wykorzystująca odwrotne przekształcenie Laplace'a umożliwia więc otrzymywanie widm o dużej rozdzielczości. Intensywność otrzymywanych w wyniku zastosowania tej procedury prążków widmowych zależy od koncentracji centrów defektowych. Należy zauważyć, że nieregularny grzbiet fałdy odpowiadającej centrom EL6 (Rys. 5a) spowodowany jest zbyt dużym krokiem kwantyzacji parametru regularyzacji  $\alpha$  założonym w programie CONTIN.

Dla zademonstrowania wpływu zakłóceń na widmo Laplace'a przygotowano również zestaw symulowanych przebiegów wykładniczych o jednakowej stałej czasowej  $\tau = 3$  ms ( $e_{\tau} = 1/\tau = 330$  ms), lecz o różnej amplitudzie składowej losowej. Do opisu tych przebiegów przyjęto równanie:

$$i(t) = \exp(-e_{\tau}t) + E(T)\varepsilon(t) \quad (14)$$

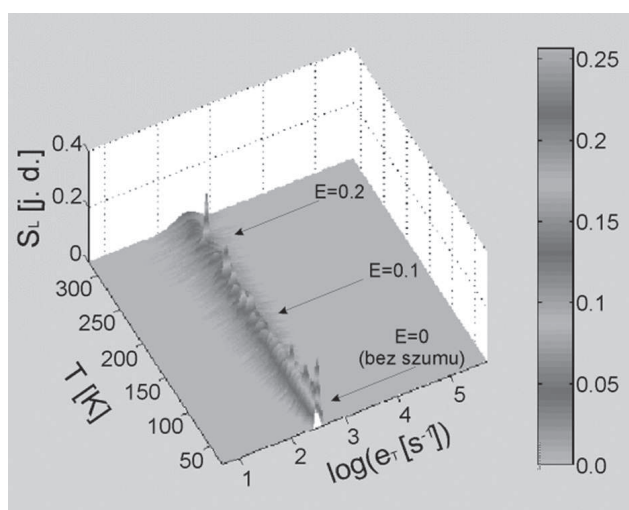
w którym:  $E(T)$  jest liniową funkcją temperatury, zaś rozkład amplitudy losowego przebiegu  $\varepsilon(t)$  jest rozkładem normalnym o zerowej wartości średniej i jednostkowej wariancji. Przebiegi te oraz powstałe na ich podstawie widmo Laplace'a zapisane zostały w plikach o takim samym formacie jak dane pomiarowe.



**Rys. 5.** Wyniki analizy z zastosowaniem odwrotnego przekształcenia Laplace’a dla symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu w kryształ SI GaAs zawierającym pułapki EL6 i EL14. (a) Wizualizacja trójwymiarowa widm Laplace’a. (b) Prążki widmowe. Linie ciągłe ilustrują temperaturowe zależności szybkości emisji dla pułapek EL6 i EL14. Widoczne czworokąty ilustrują obszary danych wykorzystanych do aproksymacji neuronowej fałd związanych z pułapkami EL6 i EL14.

**Fig. 5.** Results obtained with implementation of the inverse Laplace transformation to the analysis of the photocurrent relaxation waveforms in SI GaAs crystal with traps EL6 and EL14. (a) The folds in the two-dimensional Laplace spectrum. (b) Spectral fringes obtained by the projection of the folds on the plane given by the axes: temperature, emission rate. The solid lines illustrate the temperature dependences of the emission rate for the traps EL6 and EL14. The tetragons mark the regions of data used for the neural approximations of the folds attributed to the traps EL6 and EL14.

Wizualizację trójwymiarową widma Laplace'a dla symulowanych przebiegów wykładniczych zawierających zakłócenia, których poziom wzrasta wraz ze wzrostem temperatury przedstawiono na Rys. 6. Można zauważyć, że szerokość fałdy będącej powierzchnią widmową znacząco wzrasta wraz ze zwiększaniem amplitudy składowej szumowej w symulowanych przebiegach. Ze wzrostem składowej losowej widoczne są również obszary, w których amplituda fałdy gwałtownie wzrasta. Prezentowane widmo otrzymano za pomocą programu CONTIN przy typowych wartościach parametrów sterujących procesem obliczeniowym [3].



**Rys. 6.** Trójwymiarowa wizualizacja widma Laplace'a dla symulowanych relaksacyjnych przebiegów wykładniczych o stałej czasowej  $t = 3$  ms ( $1/t = 330$  s<sup>-1</sup>) zawierających zakłócenia, których poziom wzrasta wraz ze wzrostem temperatury.

**Fig. 6.** Three-dimensional visualisation of the Laplace spectrum for simulated relaxation current waveforms with a time constant  $t = 3$  ms ( $1/t = 330$  s<sup>-1</sup>) containing impairments whose level grows with the increase of temperature.

## 5. OBRAZ STRUKTURY DEFEKTOWEJ KRYSZTAŁU SI GaAs OTRZYMANY W WYNIKU ZASTOSOWANIA ODWROTNEGO PRZEKSZTAŁCENIA LAPLACE'A DO ANALIZY RELAKSACYJNYCH PRZEBIEGÓW FOTOPRĄDU

W celu zobrazowania struktury defektowej kryształu SI GaAs zrealizowano dwa procesy: proces rejestracji relaksacyjnych przebiegów fotoprądu dla wybranej próbki w szerokim zakresie temperatur (akwizycja danych pomiarowych) oraz proces przetwarzania tych przebiegów w postać widmową z wykorzystaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a, umożliwiającą określenie temperaturowej

zależności szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych metodą aproksymacji neuronowej i wyznaczenie energii aktywacji  $E_a$  i parametru  $A$  w równaniu Arrheniusa. Ze względu na znaczną składową szumową w relaksacyjnych przebiegach fotoprądu, niezbędne było także opracowanie procedury pozwalającej na filtrację artefaktów występujących w dwuwymiarowym widmie Laplace'a i wyeksponowanie tych fragmentów widma, które związane są z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych. Zobrazowanie właściwości centrów defektowych przeprowadzono dla próbki kryształu SI GaAs (AXT\_#1\_89e\_VGF) o właściwościach zestawionych w Tab. 1.

**Tabela 1.** Właściwości kryształu SI GaAs (próbka AXT\_#1\_89e\_VGF) wybranego do badania centrów defektowych metodą niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej z zastosowaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a do analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu.

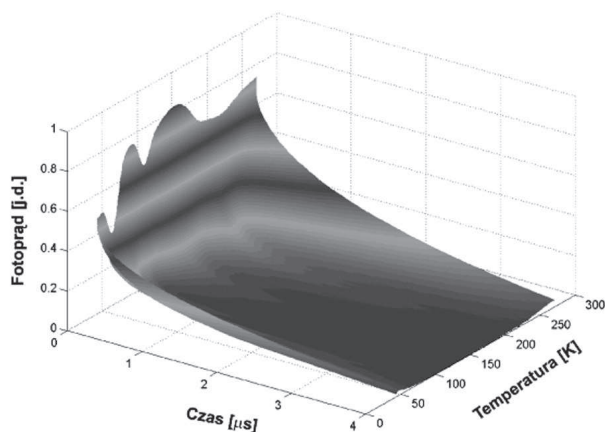
**Table 1.** The properties of SI GaAs (sample AXT\_#1\_89e\_VGF) used for investigation of defect centres by PITS technique with implementation of the inverse Laplace transformation to the analysis of the photocurrent relaxations.

Orientacja	<100>
Rezystywność (300 K)	$8,8 \times 10^7$ [ $\Omega\text{cm}$ ]
Ruchliwość hallowska (300 K)	5430 [ $\text{cm}^2/\text{Vs}$ ]
Gęstość dyslokacji	$<5,0 \times 10^3$ [ $\text{cm}^{-2}$ ]
Energia aktywacji określona z prądu ciemnego	0,72 [eV]
Metoda otrzymywania	Krystalizacja poprzez pionowy przesuw gradientu temperatury (VGF)

Powierzchnię utworzoną przez relaksacyjne przebiegi fotoprądu, zarejestrowane po wyłączeniu oświetlenia próbki w zakresie temperatur 43 - 270 K z krokiem temperatury równym 1 K, przedstawione są na Rys. 7. Próbkę oświetlano impulsowo za pomocą diody elektroluminescencyjnej emitującej światło o długości fali  $\sim 650$  nm. Szerokość impulsów generujących nadmiarowe nośniki ładunku wynosiła 30 ms, zaś okres ich powtarzania równy był 80 ms. Strumień fotonów wynosił  $\sim 4,2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Widoczne były zmiany stałych czasowych tych przebiegów w funkcji temperatury spowodowane termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych. Zarejestrowane przebiegi przekształcono zgodnie z zależnością (2) w zbiór jednowymiarowych widm korelacyjnych, a następnie z widm tych utworzono widmo dwuwymiarowe o współrzędnych temperatura i szybkość emisji. Otrzymane dwuwymiarowe widmo korelacyjne dla próbki kryształu SI GaAs (AXT\_#1\_89e\_VGF) przedstawiono na Rys. 8. W zakresie niskich temperatur 50 – 100 K można zauważyć występowanie wąskich fałd odpowiadających termicznej emisji nośników z osobnych rodzajów centrów defektowych oraz szerokich fałd występujących

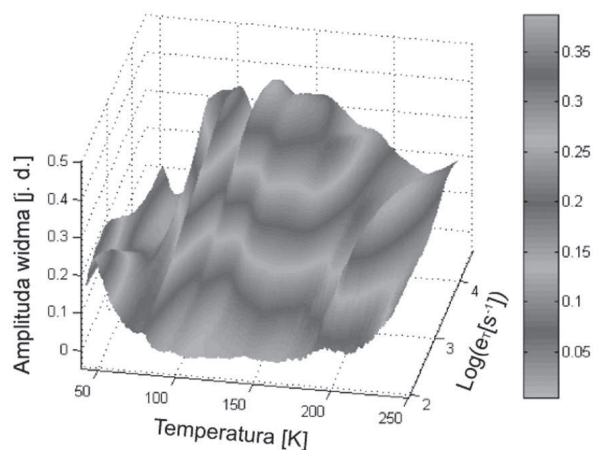
w zakresie 100 – 175 K spowodowanych oddziaływaniami kilku rodzajów centrów. Szerokie fałdy są trudne do analizy i w wielu przypadkach nie jest możliwe ich rozdzielenie na fałdy składowe.

Program CONTIN wykorzystuje zaawansowane procedury optymalizacyjne, bazujące na metodzie najmniejszej sumy kwadratów, wśród których zaimplementow-



**Rys. 7.** Relaksacyjne przebiegi fotoprądu zarejestrowane w zakresie temperatur 50 – 270 K z krokiem 1 K dla próbki kryształu SI GaAs.

**Fig. 7.** Photocurrent relaxations recorded in the 50 – 270 K temperature range with 1 K steps for a sample of SI GaAs crystal.



**Rys. 8.** Trójwymiarowa wizualizacja widma korelacyjnego dla relaksacyjnych przebiegów fotoprądu dla próbki SI GaAs zarejestrowanych w zakresie temperatur 50 – 250 K.

**Fig. 8.** Three-dimensional visualisation of the correlation spectrum for experimental photocurrent relaxations recorded in the 50 – 250 K for a sample SI GaAs crystal.

ane dedykowane procedury NNLS (*Non-Negative Least Squares*) i SVD (*Singular Value Decomposition*) [12], służące do rozwiązania macierzowego układu równań typu  $Ax=X=B$ , z ograniczeniem rozwiązania w postaci  $X \geq 0$ . Jeśli ograniczenie to nie zostanie uwzględnione przez operatora, w wyniku rozwiązania macierzowego układu równań generowane jest widmo ciągłe o wielu ekstremach zarówno dodatnich jak i ujemnych. Linie grzbietowe fałd nie mają wówczas sensu fizycznego, pomimo dobrego dopasowania modelu matematycznego do danych eksperymentalnych.

W ramach niniejszej pracy dokonano analizy działania programu CONTIN przy założeniu dodatnich amplitud relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Wnioski z tej analizy dotyczą następujących zagadnień:

- a) wpływu składowej stałej relaksacyjnych przebiegów fotoprądu,
- b) doboru punktów relaksacyjnego przebiegu fotoprądu poddawanych analizie,
- c) zakresu dopuszczalnych wartości szybkości emisji, a także skalowania zakresu szybkości emisji oraz liczby punktów przypadających na jednostkę skali,
- d) wartości parametru regularyzacji  $\alpha$ .

Ad a). Program CONTIN automatycznie identyfikuje składową stałą zawartą w relaksacyjnych przebiegach fotoprądu i wartościom ujemnym przypisuje wartości zerowe. W szczególnych przypadkach generowane są podłużne fałdy, równoległe do osi temperatury i położone w obszarze małych szybkości emisji. Tak więc do zarejestrowanych przebiegów należy dodać dobraną eksperymentalnie składową stałą o dodatniej amplitudzie. W praktyce widma obliczane są poprzez zwiększanie amplitudy składowej stałej do wartości powyżej której nie obserwowane są dalsze zmiany jakości widma.

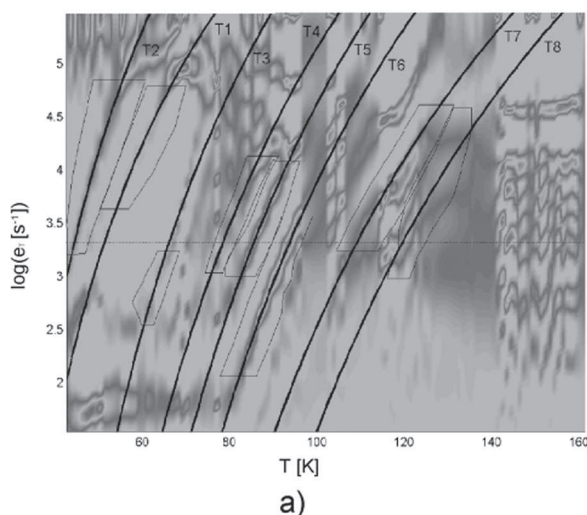
Ad b). Program CONTIN wymaga wstępnego zadeklarowania rozkładu gęstości punktów czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu [9]. Pierwszy punkt czasowy przebiegu powinien zostać wybrany w pewnym odstępnie od momentu wyłączenia oświetlenia. W przeciwnym razie w widmie pojawiają się fałdy związane z ograniczonym pasmem wzmacniacza prądowego, przebiegające równoległe do osi temperatury w obszarze dużych wartości szybkości emisji. Z drugiej strony wybranie zbyt krótkiego przebiegu powoduje, że procedura ma trudności z rozróżnieniem składowej stałej od składowej wykładniczej o długiej stałej czasowej.

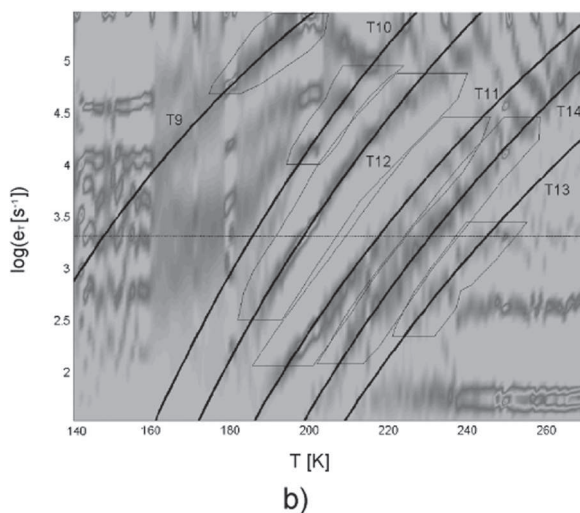
Ad c). Program CONTIN wymaga zadania minimalnej i maksymalnej wartości szybkości emisji, co oznacza, że w widmie będą występowały składowe tylko z podanego przedziału. Jeśli w relaksacyjnym przebiegu fotoprądu wystąpi stała czasowa, której odwrotność jest mniejsza lub większa od przyjętych wartości granicznych, w widmie uwypuklone będą odpowiednie składowe graniczne, a pozostała część widma może być zniekształcona. Zazwyczaj stosowana jest skala logarytmiczna osi szybkości emisji, z równomiernym rozkładem punktów. Jeśli przyjęta zostanie zbyt mała liczba punktów, to prążki stają się nieregularne. Od pewnej granicznej wartości liczby punktów wybranych na osi szybkości emisji regularność widma nie ulega zmianie.



Ad d). Mechanizm regularyzacji wykorzystany w programie CONTIN automatycznie dobiera szerokości prążków widma ze względu na jakość dopasowania modelu do danych pomiarowych. Powoduje to w wielu przypadkach przyjmowanie jako wyniku końcowego jednego szerokiego pikę zamiast dwu wąskich pików położonych blisko siebie. Zastosowany w programie operator regularyzacji, określony równaniem (8), proporcjonalny jest do całki z drugiej pochodnej obliczanego widma. Gładki przebieg widma z szerokimi pikami odpowiada dużym wartościom operatora regularyzacji. Procedura obliczeniowa w pierwszym kroku testuje możliwości obliczeniowe komputera (np. długość słowa binarnego), a następnie przyjmuje minimalną wartość parametru regularyzacji  $\alpha$ , dopuszczalną ze względu na stabilność obliczeń numerycznych. Następnie wartości parametru regularyzacji  $\alpha$  są zwiększane, aż do osiągnięcia minimalnej wartości wyrażenia (9). Doświadczalnie stwierdzono, że położenia maksimum widma słabo zależą od wartości parametru regularyzacji i zmieniają się tylko w przypadku zmiany struktury widma, tzn. jeśli dwa sąsiednie piki łączone są w jedno szerokie maksimum. Zbadano działanie programu CONTIN dla różnych wartości parametru regularyzacji  $\alpha$ . Wyłączenie procesu regularyzacji lub wykonanie obliczeń widma dla małych wartości parametru  $\alpha$  powoduje otrzymanie wyraźnych, wąskich fałd. Pewnym ograniczeniem jest długość kroku zmian temperatury. Odstęp temperatury 1 K pomiędzy kolejnymi rejestracjami relaksacyjnych przebiegów fotoprądu może być zbyt duży i zamiast ciągłej fałdy otrzymywany jest wtedy szereg oddzielnych wysp układających się wzdłuż linii opisanej równaniem Arrheniusa.

Na Rys. 9 przedstawiono obrazy prążków widmowych Laplace'a otrzymane na podstawie temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu przedstawionych na Rys. 7. Do przetworzenia tych przebiegów na postać





**Rys. 9.** Eksperymentalne prążki widmowe dla centrów defektowych wykrytych w kryształach półprzewodzącego GaAs otrzymane w wyniku zastosowania odwrotnej transformacji Laplace'a do analizy temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu w zakresach temperatur: a) 40 - 162 K; b) 140 - 270 K. Powierzchnie widmowe otrzymano przy typowych wartościach parametrów sterujących analizą programu CONTIN. Linie ciągłe ilustrują wyznaczone za pomocą aproksymacji neuronowej temperaturowe zależności szybkości emisji nośników ładunku z wykrytych centrów defektowych. Zaznaczono obszary danych aproksymowanych przez sieć neuronową.

**Fig. 9.** Experimental spectral fringes for defect centres in SI GaAs crystal, obtained by using inverse Laplace transformation to the analysis of temperature dependences of the time constants in photocurrent relaxations recorded in the two temperature ranges: a) 40 - 162 K; b) 140 - 270 K. The folds in the Laplace spectrum were received at the default parameters of the CONTIN program. The solid lines illustrate the temperature dependences of the emission rate for detected centres. The polygons mark the regions of data used for the neural approximations of the folds attributed to the detected defects in the Laplace spectrum.

widmową zastosowano typowe wartości parametrów sterujących programem CONTIN. Przyjęto szeroki zakres wartości szybkości emisji od  $30 \text{ s}^{-1}$  do  $3,2 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ . Rys. 9a ilustruje prążki widmowe dla przebiegów zarejestrowanych w zakresie temperatur 40-162 K, zaś Rys. 9b przedstawia prążki widmowe otrzymane dla przebiegów zarejestrowanych w zakresie temperatur 140-270 K. W pierwszym zakresie temperatur wyodrębniono osiem prążków powstałych wskutek termicznej emisji nośników ładunku z ośmiu rodzajów centrów defektowych oznaczonych jako T1-T8. W drugim zakresie temperatur widocznych jest sześć prążków związanych z centrami defektowymi T9-T14. Wyodrębnione prążki widmowe widoczne są w sąsiedztwie artefaktów spowodowanych zarówno składowymi losowymi w relaksacyjnych

przebiegach fotoprądu, jak i czynnikami związanymi z nieoptymalnym doбором parametrów sterujących programem CONTIN. Należy dodać, że zarejestrowane relaksacyjne przebiegi fotoprądu zawierały znaczne składowe losowe pochodzące głównie od zewnętrznych zakłóceń sieciowych, prawdopodobnie generowanych przez urządzenia technologiczne znajdujące się w sąsiedztwie systemu pomiarowego. Tak więc w otoczeniu prążków widoczne są obszary, w których prążki zlewają się z artefaktami lub ulegają rozmyciu i fragmentaryzacji. W szczególności efekty rozmycia prążków wywołane są głównie działaniem zaimplementowanego w programie CONTIN algorytmu regularyzacji.

Występujące wśród prążków artefakty, będące rzutami wąskich, równoległych fałd występujących w zakresie małych szybkości emisji, w szczególności w zakresie temperatur 240 – 270 K, są wynikiem zbyt krótkiego czasu powtarzania impulsów świetlnych. Dla relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zarejestrowanych w takich warunkach, program CONTIN nie pozwala na rozróżnienie składowej stałej od składowej wykładniczej o bardzo długiej stałej czasowej. Analiza wykazała ponadto, że w znacznej części przebiegów występuje składowa stała o wartości ujemnej.

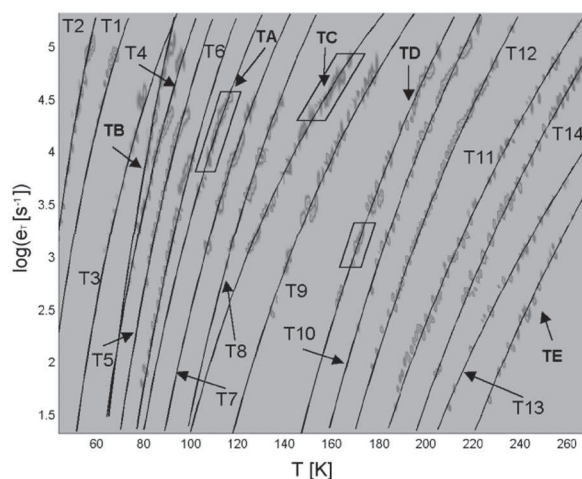
Typowe warunki analizy umożliwiają otrzymanie poprawnego rozwiązania wyłącznie dla dodatnich wartości amplitud przebiegów. Należy zauważyć, że w widmie pokazanym na Rys. 9 w zakresie temperatur 130 – 170 K występuje silne zagęszczenie danych eksperymentalnych. Na podstawie tych danych trudno jest jednak wyróżnić poszczególne prążki widmowe związane z centrami defektowymi. Zaobserwowano, że stałe czasowe relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zarejestrowane w tym zakresie temperatur są słabo zależne od temperatury. Ponadto, zniekształcenie dwóch prążków widmowych, występujące w zakresie temperatur 180 – 190 K spowodowane jest synchronicznymi zakłóceniami sieciowymi, widocznymi w zarejestrowanych przebiegach fotoprądu. Należy więc tak dobrać czas powtarzania impulsów świetlnych, aby w wyniku jego podzielenia przez okres sieci otrzymany iloraz był liczbą niewymierną.

W celu wyznaczenia temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku, fałdy których rzutami są prążki pokazane na Rys. 9, poddano aproksymacji neuronowej.

Rys. 10 ilustruje kształt prążków widmowych dla wybranej próbki kryształu SI GaAs, otrzymanych przy małej wartości parametru regularyzacji  $\alpha$  oraz takim doborze punktów czasowych, aby rozdzielczość prążków była maksymalna. Zachowano ograniczenie dotyczące nieujemności funkcji widmowej i dodano składową stałą o dodatniej amplitudzie. Dodanie składowej stałej wyeliminowało fałdy położone równoległe do osi temperatur w zakresie małych wartości szybkości emisji.

Obraz temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu przedstawiony na Rys. 10 uwidoczniony został po wyeliminowaniu niektórych artefaktów występujących w przypadku realizacji odwrotnego przekształcenia Laplace'a przy typowych wartościach parametrów sterujących programem CONTIN.

W celu filtracji artefaktów widocznych na Rys. 9 zastosowano podejście eksperckie, polegające na zaakceptowaniu parametrów centrów defektowych wyznaczonych na podstawie prążków widmowych oraz odrzuceniu fałd, których linie grzbietowe nie przebiegają w bezpośrednim sąsiedztwie temperaturowych zależności szybkości emisji dla wykrytych centrów defektowych. W szczególności usuwano fałdy których amplitudy były mniejsze od połowy średniej amplitudy wszystkich fałd występujących w widmie lub fałdy położone wzdłuż linii nie reprezentujących temperaturowych zmian szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych.



**Rys. 10.** Eksperymentalne prążki widmowe Laplace’a dla centrów defektowych wykrytych w kryształach półizolującego GaAs otrzymane po wyeliminowaniu artefaktów związanych z zakłóceniami relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Linie ciągłe ilustrują temperaturowe zależności szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych. Wielokąty ilustrują obszary danych aproksymowanych przez sieć neuronową w celu określenia parametrów centrów defektowych TA, TC i TD wykrytych po zoptymalizowaniu parametrów sterujących programem CONTIN.

**Fig. 10.** Experimental spectral fringes for defect centres in a SI GaAs crystal obtained by using the inverse Laplace transformation. They are shown without the artefacts related to the impairments in the photocurrent relaxations. The solid lines illustrate the temperature dependences of the emission rate for detected centres. The tetragons mark the regions of data used for the neural approximations of the folds attributed to the defect centres revealed due to optimisation of the CONTIN parameters.

W wyniku optymalizacji działania programu CONTIN oraz podejścia eksperckiego w obrazie temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu usunięto artefakty i pozostawiono wyłącznie prążki widmowe określające temperaturowe zależności szybkości emisji nośników ładunku dla wykry-

tych centrów defektowych. Usunięcie artefaktów umożliwiło zaobserwowanie pięciu dodatkowych centrów defektowych oznaczonych na Rys. 10 etykietami TA-TE. Widoczne na Rys. 10 linie ciągle są wynikiem aproksymacji prążków widmowych równaniem Arrheniusa dla wszystkich zaobserwowanych centrów defektowych. Ze względu na wyspowy charakter fałd tworzących prążki widmowe dla centrów defektowych TB, TD i TE, zastosowanie sieci neuronowej do wyznaczania ich linii grzbietowych nie było skuteczne. Stosowane bowiem obecnie oprogramowanie wykorzystuje algorytm zakładający ciągłość fałdy tworzącej prążek. Aproksymację prążków odpowiadających pułapkom TB, TD i TE równaniem Arrheniusa przeprowadzono więc w sposób bezpośredni poprzez wizualne dopasowanie linii określającej temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku do rzutów wyspowych fałd na płaszczyznę wyznaczoną osiami temperatura - szybkość emisji.

Parametry centrów defektowych wykrytych w próbce kryształu SI GaAs, wyznaczone na podstawie temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku przedstawionych na Rys. 10, zestawiono w Tab. 2. Podano również temperatury, w których szybkość emisji nośników ładunku z poszczególnych centrów defektowych wynosi  $2080 \text{ s}^{-1}$ , a także przypuszczalne konfiguracje atomowe defektów ustalone na podstawie informacji zawartych w posiadanej bazie wiedzy.

Zastosowanie odwrotnego przekształcenia Laplace'a do analizy niestacjonarnych przebiegów fotoprądu umożliwiło wykrycie w kryształach półizolującego GaAs dziewiętnastu rodzajów centrów defektowych charakteryzujących się energią aktywacji w zakresie 56 - 521 meV. Centra te są związane z defektami rodzimymi, kompleksami defektów rodzimych oraz atomami zanieczyszczeń. Otrzymane wyniki wskazują, że struktura defektowa półizolujących kryształów GaAs jest bardzo złożona i występujące w nich defekty punktowe są nie tylko rezultatem określonej stechiometrii, ale również wynikiem procesów generacji dyslokacji i powstawania mikrowydzień arsenowych [10].

Pułapki T1 (56 meV) są prawdopodobnie lukami arsenowymi  $V_{As}^{-0}$ . Luki te obserwowane były głównie w niskorezystywnym GaAs napromieniowanym neutronami lub elektronami. Energia aktywacji tych luk określona metodami: DLTS, hallowską i anihilacji pozytonów wynosi odpowiednio:  $E_c-41 \text{ meV}$ ,  $E_c-45 \text{ meV}$  i  $E_c-46 \text{ meV}$ . Pułapki T5 (138 meV) mogą być przypisane lukom arsenowym  $V_{As}^{0/+}$ . Energia aktywacji luk arsenowych  $V_{As}^{0/+}$  wyznaczona metodą DLTS w próbkach napromieniowanych neutronami, metodą hallowską w GaAs napromieniowanym elektronami i metodą anihilacji pozytonów w półizolującym GaAs wynosi  $E_c-140 \text{ meV}$ . Głównym czynnikiem powodującym powstawanie luk arsenowych w półizolujących kryształach GaAs jest deformacja plastyczna, w wyniku której generowane są dyslokacje. Zgodnie z modelem zaproponowanym przez Petroffa i Kimerlinga przesycenie kryształu lukami arsenowymi spowodowane jest ruchem dyslokacji w procesie studzenia [10]. Na podstawie obliczeń teoretycznych przed-

**Tabela 2.** Wartości parametrów centrów defektowych w próbce kryształu SI GaAs wyznaczone metodą niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej z zastosowaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a do analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Dla porównania zamieszczono również parametry pułapek wyznaczone poprzez analizę jednowymiarowych widm korelacyjnych oraz identyfikację pułapek przeprowadzoną na podstawie danych literaturowych.

**Table 2.** Summary of the parameters of defect centres in SI GaAs determined by means of the PITS technique with implementation of the inverse Laplace transformation to the analysis of the photocurrent waveforms. For comparison the parameters of traps determined by the analysis of the one-dimensional correlation spectra are given. A tentative identification of the defect centres was made using the reference data.

SI GaAs (próbka AXT_#1_89e_VGF)						
Symbol pułapki	Wyniki otrzymane z zastosowaniem procedury ILT			Wyniki referencyjne		Identyfikacja
	$T_e$ [K] dla $e_T = 2080 \text{ s}^{-1}$	$E_a$ [meV]	$A$ [ $\text{K}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]	$E_a$ [meV]	$A$ [ $\text{K}^{-2}\text{s}^{-1}$ ]	
T1	51	56	$2,4 \times 10^5$	50	$5,7 \times 10^4$	P6, $V_{As}^{-0}$ [11] $e^*$
T2	44	59	$5,1 \times 10^6$	50	-	$V_{Ga}$ [17] $e$
T3	67	78	$3,6 \times 10^5$	80	$5,1 \times 10^4$	P7, $Ga_{As}^{0/-}$ [11] $h$
T4	79	117	$1,1 \times 10^7$	90	$1,7 \times 10^6$	S1, $B_{As}^{0/-}$ [10] $h$
T5	86	138	$3,6 \times 10^7$	140	$6,8 \times 10^7$	P9, $V_{As}^{0/+}$ [10,11] $e$
TA	99	146	$5,5 \times 10^6$	130	$6,0 \times 10^6$	P10, $Cu^{0/-}$ [11,16] $h$
TB	76	151	$3,4 \times 10^9$	156	-	$Co^{0/-}$ [18] $h$ (?)
TC	130	152	$1,0 \times 10^5$	140	$2,3 \times 10^5$	EA7 [13] $e$
T6	94	153	$3,9 \times 10^7$	150	$1,3 \times 10^8$	EL15 [14] $e$
T7	109	168	$9,6 \times 10^6$	170	$2,1 \times 10^6$	EL11 [10,11] $e$
T8	120	196	$2,5 \times 10^7$	180	$1,7 \times 10^8$	P12, $B_{As}^{-2/-}$ [10,11] $h$
T9	148	211	$1,5 \times 10^6$	220	$2,8 \times 10^6$	EL14, $V_{Ga}^{-}V_{As}$ [10,14] $e$
TD	174	346	$7,4 \times 10^8$	350	$6,8 \times 10^8$	EL6, $As_{Ga}^{-}V_{As}$ [10,11] $e$
T10	186	400	$4,4 \times 10^9$	400	$3,7 \times 10^8$	HB5 [15] $h$
T11	218	420	$2,3 \times 10^8$	420	$2,1 \times 10^8$	EL5, $As_{Ga}^{-}V_{Ga}$ [10,11] $e$
T12	199	423	$2,8 \times 10^9$	430	$8,5 \times 10^9$	P18, $Cu^{-2/-}$ [11,16] $h$
T13	248	421	$1,2 \times 10^7$	410	$5,9 \times 10^7$	EB6 [14] $e$
T14	231	471	$7,4 \times 10^8$	480	$6,0 \times 10^7$	EB5 [13,14] $e$
TE	261	521	$3,6 \times 10^8$	520	$5,1 \times 10^8$	P21, $V_{Ga}^{2-/3-}$ [10,11] $h$

\*) –  $e$  lub  $h$  oznaczają odpowiednio pułapki elektronowe lub dziuowe

tawionych w pracy [17] pułapki T2 (59 meV) można przypisać lukom galowym  $V_{Ga}$  (50 meV). Pułapki T3 (78 meV) identyfikowane są z defektami antystrukturalnymi  $Ga_{As}^{0/-}$ . Energia aktywacji tych pułapek zgodna jest z poziomem energetycznym  $E_v + 78$  meV obserwowanym metodą hallowską, metodą DLTS oraz metodą fotoluminescencji dla centrów defektowych charakterystycznych dla kryształów GaAs z nadmiarem galu [18]. Pułapki T4 (117 meV) i T8 (196 meV) mogą być identyfikowane z parą defektów  $B_{As}^{0/-}$  i  $B_{As}^{-/-}$  [10]. Pułapki TA (146 meV) identyfikowane są z centrami akceptorowymi  $Cu^{0/-}$ . Z kolei pułapki T12 (423 meV) przypisane są podwójnie zjonizowanym akceptorom  $Cu^{-/-}$ . Jak wskazują wyniki przedstawione w pracy [10] wykresy Arrheniusa wyznaczone dla tych pułapek metodą HRPITS są zgodne z wykresami otrzymanymi metodą admitancyjną dla centrów  $Cu^{0/-}$  oraz metodą DLTS dla centrów  $Cu^{-/-}$ . Można przypuszczać, że źródłem zanieczyszczenia miedzią są materiały wyjściowe (arsen i gal) oraz odczynniki chemiczne używane w cyklu technologicznym syntezy i monokrystalizacji GaAs [10]. Pułapki TB (151 meV), charakteryzujące się bardzo dużym współczynnikiem  $A = 3,4 \times 10^9 \text{ K}^{-2} \text{ s}^{-1}$ , mogą być związane z podwójnie zjonizowanymi centrami akceptorowymi. Należy dodać, że w przypadku centrów TB (151 meV) współczynnik  $A$  jest około 50 razy większy niż dla dziurowych pułapek BH1 ( $140 \pm 15$  meV) występujących w warstwach epitaksjalnych GaAs osadzanych z wiązki molekularnej (MBE) [19]. Podwójnie zjonizowane akceptory charakteryzują się silnym przyciąganiem coulombowskim, a tym samym dużym przekrojem czynnym na wychwyt dziur. Przyjmując, że centra TB (151 meV) są pułapkami dziurowymi, ich przekrój czynny na wychwyt dziur wynosi  $2 \times 10^{-12} \text{ cm}^2$ . Wśród defektów rodzimych, podwójnie zjonizowanymi akceptorami są defekty antystrukturalne  $Ga_{As}^{-/-}$  [18]. Energia aktywacji tych centrów, zarówno wyznaczona eksperymentalnie jak i obliczona teoretycznie, wynosi  $\sim 200$  meV i jest znacząco większa od energii aktywacji centrów TB (151 meV). Z drugiej strony można zauważyć dobrą zgodność energii aktywacji centrów TB (151 meV) z energią aktywacji termicznej emisji dziur z centrów akceptorowych związanych z atomami kobaltu  $E_v + 156$  meV [20]. Emisja ta związana jest ze zmianą stanu ładunkowego atomów kobaltu  $Co^0 (3d^6) \rightarrow Co^- (3d^7)$ .

Pułapki: TC (152 meV), T6 (153 meV), T7 (168 meV), T9 (211 meV), TD (346 meV), T10 (400 meV), T11 (420 meV), T13 (421 meV) i T14 (471 meV) zostały odpowiednio przypisane znanym pułapkom: EA7 (140 meV), EL15 (150 meV), EL11 (170 meV), EL14 (220 meV), EL6 (350 meV), HB5 (400 meV), EL5 (420 meV), EB6 (410 meV) i EB5 (480 meV) często obserwowanym w kryształach GaAs [10-11]. Pułapki EL14 mogą być identyfikowane z centrami o energii aktywacji  $E_c - 230$  meV, obserwowanymi w kryształach GaAs napromieniowanych elektronami. Mogą być one przypisane kompleksom złożonym z luk galowych i luk arsenowych ( $V_{Ga} - V_{As}$ ) [10,14]. W świetle wyników badań przeprowadzonych w ostatnich latach metodą DLTS i metodą anihilacji pozytonów centra EL6 (350 meV) można przypisać kompleksom złożonym z antystrukturalnych atomów arsenu i luk arsenowych ( $As_{Ga} - V_{As}$ )

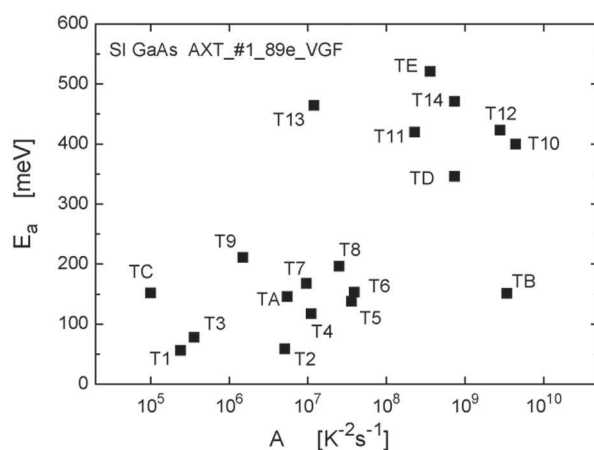
[10-11], natomiast centra EL5 (420 meV) są identyfikowane jako kompleksy złożone z antystrukturalnych atomów arsenu i luk galowych ( $As_{Ga}-V_{Ga}$ ). Należy dodać, że centra EL5 oraz centra EL6 są często występującymi wzrostowymi centrami defektowymi w kryształach GaAs, których skład jest odchyłony od stechiometrycznego w kierunku nadmiaru arsenu. Centra TE (520 meV) mogą być przypisane pułapkom dziurowym, które obserwowane były w płytkach GaAs poddanych wygrzewaniu w atmosferze par arsenu. Wartości energii aktywacji tych centrów zbliżone są do wyznaczonych teoretycznie wartości energii jonizacji luk galowych  $V_{Ga}^{2-/3-}$  [10-11].

Zależności przedstawione na Rys. 10 oraz dane zawarte w Tab. 2 ilustrują właściwości centrów defektowych wykrytych w typowym kryształe SI GaAs otrzymanym metodą VGF. Należy jednak dodać, że centra EL3 (580 meV) powstające wskutek zanieczyszczenia kryształu tlenem i identyfikowane jako kompleksy  $O_i - V_{As}$ , a także centra EL2 (760 meV), związane z antystrukturalnymi atomami arsenu  $As_{Ga}$ , nie zostały wykryte ze względu na ograniczenie zakresu temperatur do 270 K, w którym mierzone były relaksacyjne przebiegi fotoprądu poddane analizie z wykorzystaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a [11]. Należy zauważyć, że w otrzymanym obrazie właściwości centrów defektowych w SI GaAs możliwe jest rozróżnienie centrów defektowych o zbliżonych wartościach energii aktywacji, np. rozróżnienie centrów T1 (56 meV) i T2 (59 meV), TB (151 meV), TC (152 meV) i T6 (153 meV) oraz T11 (420 meV), T12 (423 meV) i T13 (421 meV). Rozróżnienia tego można dokonać dzięki znaczącym różnicom pomiędzy wartościami przekroju czynnego na wychwyt nośników ładunku, którymi charakteryzują się poszczególne centra defektowe. Większa wartość przekroju czynnego manifestuje się poprzez większą wartość parametru  $A$ , która powoduje że przy zbliżonej wartości energii aktywacji prążek Laplace'a ulega przesunięciu w kierunku niższych temperatur. Rysunek 11 stanowi ilustrację graficzną wartości parametrów wykrytych centrów defektowych na płaszczyźnie wyznaczonej osiami  $(A, E_a)$ , przy czym oś parametru  $A$  jest w skali logarytmicznej. Widoczna jest pewna zależność wskazująca, że większym wartościom parametru  $A$  odpowiadają większe wartości energii aktywacji centrów defektowych. Występują jednak odchylenia od tej zależności, których spektakularnym przykładem jest bardzo duża różnica pomiędzy wartościami parametru  $A$  w przypadku centrów TB (151 meV) i TC (152 meV), charakteryzujących się zbliżoną energią aktywacji. Zjawisko to spowodowane jest różnym rozkładem potencjału zależnym od stanu ładunkowego centrum defektowego. Na przykład pułapkami dziurowe związane z podwójnie zjonizowanymi centrami akceptorowymi będą charakteryzować się bardzo dużym przekrojem czynnym na wychwyt dziur, wskutek silnego przyciągania coulombowskiego. Tego rodzaju pułapkami są prawdopodobnie centra TB (151 meV). Z drugiej strony, pułapki elektronowe związane z podwójnie zjonizowanymi centrami akceptorowymi będą charakteryzować się bardzo małym przekrojem czynnym na wychwyt elektronów



wskutek silnego odpychania coulombowskiego. Tego rodzaju pułapkami są prawdopodobnie centra TC (152 meV). Duża rozdzielczość procedury wykorzystującej odwrotne przekształcenie Laplace'a do analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu pozwala na rozróżnienie centrów defektowych T1 i T3, T5 i T6, TA i T7 oraz T10 i T12, charakteryzujących się zbliżonymi wartościami energii aktywacji i parametru  $A$ .

Rys. 12 ilustruje obraz struktury defektowej kryształu SI GaAs otrzymany w wyniku nałożenia temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku, wyznaczonych za pomocą odwrotnego przekształcenia Laplace'a (Rys. 10), na korelacyjne prążki widmowe. Widoczna jest bardzo dobra zgodność

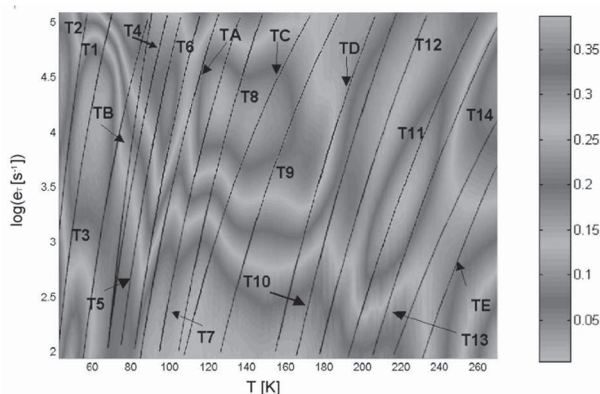


**Rys. 11.** Zestawienie parametrów – wartości energii aktywacji i współczynnika  $A$  zależnego od przekroju czynnego na wychwyt nośników ładunku – dla centrów defektowych wykrytych w kryształach SI GaAs w wyniku zastosowania odwrotnego przekształcenia Laplace'a do analizy temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, zarejestrowanych w zakresie temperatur 40 - 270 K.

**Fig. 11.** Illustration of parameters – values of the activation energy and pre-exponential factor  $A$  in the Arrhenius equation – for defect centres detected in SI GaAs crystal with implementation of the inverse Laplace transformation to the analysis of the temperature dependences of the time constants in the photocurrent relaxations recorded at the temperature range 40 - 270 K.

przebiegu linii reprezentujących te zależności z przebiegiem linii grzbietowych fałd w dwuwymiarowym widmie korelacyjnym. Należy jednak zwrócić uwagę, że większość fałd w widmie korelacyjnym powstała w wyniku termicznej emisji nośników ładunku z dwóch lub więcej rodzajów centrów defektowych. W szczególności należy wyróżnić dwie szerokie fałdy widoczne w zakresie temperatur 60-110 K oraz 110-200 K. Temperaturowe zależności szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych wskazują, że

pierwsza z tych fałd powstała z udziałem siedmiu rodzajów centrów defektowych T1 (56 meV), T2 (59 meV), T3 (78 meV), TB (151 meV), T4 (117 meV), T5 (138 meV) i T6 (153 meV). Z kolei druga fałda jest wynikiem złożenia sześciu fałd odpowiadającym centrom TA (146 meV), T7 (168 meV), T8 (196 meV), TC (152 meV), T9 (211 meV) i TD (346 meV). Porównując amplitudy fałd, można zauważyć różnice w koncentracji poszczególnych centrów defektowych. Widoczna jest mniejsza koncentracja centrów T10 (400 meV), T11 (420 meV), T12 (423 meV), T13 (421 meV), T14 (471 meV) i TE (521 meV) tworzących poziomy energetyczne położone bliżej środka przerwy zabronionej w porównaniu z koncentracją płytszych centrów obserwowanych w zakresie temperatur 60 – 200 K. Otrzymany obraz struktury defektowej wskazuje (Rys. 12), że dominującymi centrami defektowymi są centra TA (146 meV) identyfikowane z atomami miedzi  $Cu^{0-}$  oraz centra TC (152 meV), identyfikowane ze znanymi pułapkami elektronowymi EA7, których konfiguracja atomowa nie została dotychczas ustalona.



**Rys. 12.** Obraz struktury defektowej kryształu półizolującego GaAs powstały w wyniku nałożenia linii ilustrujących temperaturowe zmiany szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych na rzut korelacyjnej powierzchni widmowej na płaszczyznę wyznaczoną osią temperatury i osią szybkości emisji. Zmiany szybkości emisji nośników w funkcji temperatury wyznaczone zostały w wyniku zastosowania odwrotnej transformacji Laplace'a do analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu.

**Fig. 12.** The image of the SI GaAs crystal defect structure obtained as a result of combining the lines, illustrating the temperature dependences of the emission rate of charge carriers for detected defect centres, and the correlation spectral fringes. The changes of the emission rate with the temperature were determined by the implementation of the inverse Laplace transformation to the analysis of the photocurrent relaxation waveforms.

## 6. PODSUMOWANIE

Niestacjonarną spektroskopię fotoprądową z wykorzystaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a do analizy temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zastosowano po raz pierwszy do badania centrów defektowych w kryształach półizolującego GaAs. Przeprowadzono analizę funkcjonalności programu CONTIN jako narzędzia do realizacji obliczeń numerycznych, przekształcających relaksacyjne przebiegi fotoprądu w postać widmową w domenie temperatury i szybkości emisji. W celu uzyskania maksymalnej rozdzielczości tak dobrano wartości parametrów programu sterujących procesem obliczeniowym, aby możliwe było otrzymanie prążków o dużej intensywności przy zachowaniu ich ciągłości. Z otrzymanego widma odfiltrowano artefakty związane z losowymi zakłóceniami relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Do usuwania artefaktów zastosowano podejścia eksperckie, polegające na wykorzystaniu bazy wiedzy o właściwościach centrów defektowych w SI GaAs i odrzuceniu tych elementów obrazu, które dla zadanych parametrów centrów defektowych nie odzwierciedlają temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku opisywanych równaniem Arrheniusa. Do aproksymacji linii grzbietowych fałd na powierzchni widmowej Laplace'a równaniem Arrheniusa i wyznaczania parametrów centrów defektowych zastosowano sieć neuronową. Zoptymalizowaną procedurę analizy temperaturowych zmian stałych czasowych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zastosowano do zobrazowania struktury defektowej kryształu półizolującego GaAs, otrzymanego metodą pionowego przesuwu gradientu temperatury (VGF). Wykryto 19 rodzajów centrów defektowych charakteryzujących się energią aktywacji w zakresie od 56 do 521 meV. Na podstawie bazy wiedzy wykryte centra defektowe przyporządkowano znanym defektom punktowym w SI GaAs. W szczególności stwierdzono obecność centrów defektowych związanych z zanieczyszczeniem kryształu atomami boru ( $B_{As}^{0/-}$ ,  $B_{As}^{-/2-}$ ) oraz atomami miedzi ( $Cu^{0/-}$ ,  $Cu^{-/2-}$ ), a także obecność centrów związanych z różnego rodzaju defektami rodzimymi: lukami arsenowymi ( $V_{As}^{-/0}$ ,  $V_{As}^{0/+}$ ), lukami galowymi ( $V_{Ga}$ ), atomami galu w położeniach antystrukturalnych ( $Ga_{As}^{0/-}$ ) oraz kompleksami  $V_{Ga} - V_{As}$ ,  $As_{Ga} - V_{As}$  i  $As_{Ga} - V_{Ga}$ . Na podstawie uzyskanego obrazu struktury defektowej stwierdzono również, że w próbce kryształu SI GaAs otrzymanego metodą VGF dominującymi centrami defektowymi są centra TA (146 meV) identyfikowane z atomami miedzi  $Cu^{0/-}$  oraz centra TC (152 meV) identyfikowane ze znanymi pułapkami elektronowymi EA7, których konfiguracja atomowa nie została dotychczas ustalona.

Przedstawione wyniki wskazują, że w celu zastosowania niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej do oceny jakości kryształów półizolującego GaAs relaksacyjne przebiegi fotoprądu powinny być mierzone w możliwie szerokim zakresie temperatur i analizowane zarówno za pomocą procedury korelacyjnej, jak i pro-

M.Pawłowski, P.Kamiński, R.Kozubal

cedury wykorzystującej odwrotne przekształcenie Laplace'a. Zobrazowanie struktury defektowej otrzymywane jest bowiem w wyniku nałożenia temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku wyznaczonych za pomocą odwrotnego przekształcenia Laplace'a na obraz korelacyjnych prążków widmowych.

### **Podziękowanie**

*Autorzy dziękują Panu Profesorowi Andrzejowi Jeleńskiemu za stymulujące dyskusje podczas wykonywania badań oraz za cenne uwagi merytoryczne i redakcyjne po przeczytaniu pierwotnej wersji pracy, które przyczyniły się do znacznego jej polepszenia.*

### **Summary**

## **IMAGING OF DEFECT STRUCTURE OF SEMI-INSULATING GaAs CRYSTALS BY ANALYSIS OF PHOTOCURRENT RELAXATION WAVE FORMS WITH IMPLEMENTATION OF INVERSE LAPLACE TRANSFORM**

Photoinduced transient spectroscopy with implementation of the inverse Laplace transform algorithm (ILT PITS) has been employed to imaging the defect structure of SI GaAs crystals. The computer program for three-dimensional visualisation of the temperature changes of time constants of the photocurrent transients has been optimised. The parameters of defect centres were determined by a neural approximation of the ridgelines of the folds related to the thermal emission of charge carriers. The image of defect structure is obtained by combining the image of the defect centres properties produced by using the inverse Laplace transform with the spectral fringes received by means of the correlation procedure

### **LITERATURA**

- [1] Pawłowski M.: Extraction of deep trap parameters from photocurrent transients by two dimensional spectral analysis, *Solid-State Electron.*, 46, 2002, 1879-1885
- [2] Pawłowski M., Kamiński P., Jankowski St., Kozłowski R., Wierzbowski M., Miczuga M.: Inteligentny system pomiarowy do badania centrów defektowych w materiałach półizolujących. Sprawozdanie końcowe z wykonania projektu badawczego KBN nr 4 T10C 033 22, KBN-ITME 2004, 146 s.

- [3] Provencher S. W.: CONTIN: A general purpose program for inverting noisy linear algebraic and integral equations, *Comp. Phys. Comm.*, 27, 1982, 229-242
- [4] Provencher S.: A constrained regularization method for inverting data represented by linear algebraic and integral equations, *Comp. Phys. Comm.* 1982, 27, 213-228.
- [5] Dobaczewski L., Kaczor P., Hawkins I.D., Peaker A.R.: Laplace transform deep-level transient spectroscopic studies of defects in semiconductors, *J. Appl. Phys.* 76 (1), 1994, 194–198
- [6] Dobaczewski L., Peaker A.R., Bonde Nielsen K. : Laplace-transform deep-level spectroscopy: The technique and its application to study of point defects in semiconductors, *J. Appl. Phys.* 96 (9), 2004, 4689–4728.
- [7] Istratov A.A., Vyvenko O. F: Exponential analysis in physical phenomena, *Rev. Sci. Instrum.*, 70, 2, 1999, 1233-1257
- [8] Provencher S.: CONTIN: A portable program for the regularized solution of linear algebraic and integral equations of first kind, EMBL Technical Report DA07, European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg, March 1984
- [9] Pawłowski M., Kamiński P., Kozłowski R.: Opracowanie procedury analizy niestacjonarnych przebiegów fotoprądu wykorzystującej algorytm przekształcenia Laplace'a, Sprawozdanie z pracy badawczo-rozwojowej, ITME, 2003
- [10] Kozłowski R.: Niestacjonarna spektroskopia fotoprądowa o dużej rozdzielczości jako nowa metoda badania centrów defektowych w półprzewodnikach wysokorezystywnych. Rozprawa doktorska, ITME 2001
- [11] Kamiński P., Kozłowski R.: High-resolution photoinduced transient spectroscopy as a new tool for quality assessment of semi-insulating GaAs, *Mater. Sci. Eng.* B91-92, 2002, 398-402
- [12] Lawson C.L., Hanson R.J.: Solving least squares problems, Prentice-Hall, 1974
- [13] Bourgoin C., von Bardeleben H. J., Stiévenard D.: Native defects in gallium arsenide, *J. Appl. Phys.*, 64, 1988, R65-R91
- [14] Martin G. M., Mitonneau A., Mircea A.: Electron traps in bulk and epitaxial GaAs crystals, *Electron. Lett.*, 13 (7), 1977, 191-193
- [15] Martin G. M., Mitonneau A., Mircea A. : Hole traps in bulk and epitaxial GaAs crystals, *Electron. Lett.*, 13 (22), 1977, 666-668.
- [16] Kullendorff N., Jansson L., Ledebø L-A.: Copper-related deep level defects in III-V semiconductors, *J. Appl. Phys.*, 54 (6) 1983, 3203-3212
- [17] Z. El achheb, A. Hourmatallaha, M. Barnoussi, N. Benzakour and A. Jorio, Theoretical investigation of the level energies for ideal Ga and As vacancies in GaAs, *J. Condensed Matter*, 5 (1), 2004, 28-34
- [18] M. Bugajski, K. H. Ko, J. Lagowski and H. C. Gatos, Native acceptor levels in Ga-rich GaAs, *J. Appl. Phys.* 65 (2), 1988, 596-599

M.Pawłowski, P.Kamiński, R.Kozubal

- [19] S. Brehme, P. Krispin and D. I. Lubyshev, Hole traps in indium-doped and indium-free GaAs grown by molecular beam epitaxy, *Semicond. Sci. Technol.* 7, 1992, 467-471
- [20] A. M. Hennel, Energy levels due to cobalt in GaAs, EMIS Datareview RN=16313, October 1989.