

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ  
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
**ΦΩΤΟΘΕΡΜΙΚΟΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ ΚΑΙ  
ΗΛΙΑΚΩΝ ΕΠΙΛΕΚΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ**

**ΜΑΡΙΟΣ ΝΕΣΤΟΡΟΣ**

**Διδακτορική Διατριβή**



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ**  
**ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

Οκτώβρης 1999

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ  
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΕΞΕΤΑΣΤΗΡΙΟ

ΦΩΤΟΘΕΡΜΙΚΟΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ ΚΑΙ ΗΛΙΑΚΩΝ  
ΕΠΙΛΕΚΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

Εξωτερικός Εξεταστής: Ανδρούλλα Νασεικινάου (Ερευνητική Κέντρο, Κύπρος)

Εξωτερικός Εξεταστής: Ιωάννης Σταθάκης (Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης)

Εξωτερικός Εξεταστής: **ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ**

του

Μάριου Νέστορος

Εξωτερικός Εξεταστής: Ανδρέας Ούσης

Επιβλέπων Καθηγητής  
Κωνσταντίνος Χριστοφίδης

Η παρούσα διατριβή υποβλήθηκε προς εκπλήρωση των απαιτήσεων απόκτησης  
Διδακτορικού Διπλώματος Φυσικής του Τμήματος Φυσικών Επιστημών του  
Πανεπιστημίου Κύπρου

Οκτώβριος 1999



## ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Πρόεδρος: **Κωνσταντίνος Μουλόπουλος**

Εξωτερικός Εξεταστής: **Ανδρούλλα Νασιοπούλου** (Ερευνητικό Κέντρο Δημόκριτος)

Εξωτερικός Εξεταστής: **Ιωάννης Στοϊμένος** (Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης)

Εσωτερικός Εξεταστής: **Κωνσταντίνος Χριστοφίδης**

Εσωτερικός Εξεταστής: **Ανδρέας Όθωνος**

## Ευχαριστίες

Η διατριβή αυτή είναι στην πραγματικότητα το αποτέλεσμα όχι μόνο της δικής μου προσπάθειας αλλά και της προσπάθειας ενός μεγάλου αριθμού ανθρώπων γνωστών αλλά και αγνώστων που ηθέλησαν ή θέλουν να με βοηθήσουν με διάφορους τρόπους. Πρώτα απ' όλα, μια μεγάλη ευχαριστία οφείλεται στον καθ. κ. Γεώργιο Κωνσταντίνου για την πρόκληση της κριτικής της διατριβής. Ευχαριστώ επίσης τον καθ. κ. Γεώργιο Κωνσταντίνου για την πρόκληση της κριτικής της διατριβής.

### Περίληψη

Η εργασία αυτή έχει σαν στόχο τον χαρακτηρισμό υλικών υψηλής τεχνολογίας με δυο μη καταστροφικές τεχνικές, την Φωτοθερμική Ραδιομετρία (*PTR*) και την Φωτο-Διαμορφωμένη Θερμική Ανακλαστικότητα (*PMTR*). Στην μεγαλύτερη της έκταση η εργασία επικεντρώνεται στην μελέτη των ημιαγωγών και κυρίως του πυριτίου.

Αρχικά παρουσιάζεται μια ποσοτική ανάλυση της συμπεριφοράς του φωτοθερμικού σήματος *PMTR* σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας στη περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών (40–300K) σε εμφυτευμένα με φωσφόρο δισκία πυριτίου. Διερευνάται επίσης ο μηχανισμός *Drude* και ο μηχανισμός πλήρωσης ζώνης καθώς και οι σχέσεις τους με τον χρυσταλλικό χαρακτήρα του πλέγματος. Η ποσοτική ανάλυση έχει σαν αποτέλεσμα την εξαγωγή των θερμικών και ηλεκτρονικών παραμέτρων των εμφυτευμένων δειγμάτων, και τον διαχωρισμό των συνεισφορών πλάσματος και θερμοκρασίας με βάση την θερμοκρασία του πλέγματος.

Ακολούθως παρουσιάζεται ένα διστρωματικό μοντέλο που περιγράφει την φωτοθερμική συμπεριφορά ενός εμφυτευμένου ημιαγωγού. Η μελέτη έγινε με στόχο τον προσδιορισμό των ηλεκτρονικών και θερμικών ιδιοτήτων ενός αμόρφου στρώματος ημιαγωγού που βρίσκεται πάνω σε χρυσταλλικό υπόστρωμα. Το μοντέλο αυτό με μικρές τροποποιήσεις μπορεί να περιγράψει την φωτοθερμική συμπεριφορά ενός οποιουδήποτε συστήματος αγωγού, μονωτή και ημιαγωγού. Επίσης παρουσιάζεται για πρώτη φορά ο συσχετισμός των συντελεστών πλάσματος και θερμοκρασίας του φαινομένου *PTR* με την πυκνότητα προσμείξεων.

Στη συνέχεια διερευνάται η επίδραση του όρου θερμικής γένεσης ηλεκτρικών φορέων που παρουσιάζεται στην εξίσωση θερμικής διάχυσης, στην διάδοση των φωτοδιεγερμένων κυμάτων φορέων σε ημιαγωγούς σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας και της πυκνότητας προσμείξεων. Η διερεύνηση της επίδρασης αυτής γίνεται στα πλαίσια της ανισότητας των Vasile'ν και Sandomirskii και εξάγονται συμπεράσματα για τις συνθήκες κάτω από τις οποίες είναι απαραίτητη η ανάγκη εισαγωγής του όρου αυτού στους φωτοθερμικούς υπολογισμούς.

Ακολούθως με την μέθοδο της φωτοθερμικής ραδιομετρίας χαρακτηρίζεται μια κατηγορία υλικών που συμπεριφέρονται επιλεκτικά σε σχέση με τις οπτικές ιδιότητες του ηλιακού φωτός. Ένα μονοδιάστατο μοντέλο χρησιμοποιείται για την εύρεση θερμικών παραμέτρων των δειγμάτων ηλιακών απορροφητικών επιφανειών.

Θέλω επίσης να ευχαριστήσω τον καθ. R. S. Bes στο Laboratoire Matériaux et Energies του Université Paul Sabatier, τον καθ. Jose Martinez Duarte στο Departamento de Física Aplicada του Universidad Autónoma de Madrid, τον καθ. David Cahen στο Weizmann Institute of Science, τον καθ. Hanna Poliak στο Beilinson University, και τους διάδοχικούς τους φοιτητές Jean-Louis Salmi, Araceli Gutierrez, Yehudik Mastai, Aref Awazmay με τους οποίους συνεργάστηκα στα πλαίσια του πιο πάνω ερευνητικού προγράμματος.

Ευχαριστώ επίσης τον καθ. του Πανεπιστημίου Κόπεν, Κωνσταντίνο Μουλόπου-



## Ευχαριστίες

Η διατριβή αυτή είναι στην πραγματικότητα το αποτέλεσμα όχι μόνο της δικής μου προσπάθειας αλλά και της προσπάθειας ενός μεγάλου αριθμού ανθρώπων γνωστών αλλά και αγνώστων που ηθελημένα ή άθελα τους με βοήθησαν με διάφορους τρόπους. Μια συμβουλή, μια υπόδειξη, το διάβασμα μιας δημοσίευσης που έχει γράψει κάποιος άγνωστος για μένα ερευνητής, η κριτική της δουλειάς μου και η ηθική συμπαράσταση και επιβράβευση σε στιγμές που όλα φαίνονται δύσκολα, μαζί με την δική μου προσπάθεια συνιστούν την εργασία αυτή. Ο κατάλογος των ευχαριστιών είναι στην πραγματικότητα αρκετά μεγάλος, γι' αυτό και θα αναφερθώ, με χρονολογική σειρά, στα άτομα που με βοήθησαν " άμεσα ".

Ο αναπλ. καθ. Κωσταντίνος Χριστοφίδης που υπήρξε ο επιβλέπων καθηγητής, μου έδωσε την αρχική ώθηση για να αρχίσω αυτή την εργασία. Ο ενθουσιώδης χαρακτήρας του και η ικανότητα του να μεταδίδει τον ενθουσιασμό αυτό μαζί με τις γνώσεις της φυσικής στο περιβάλλον του, με βοήθησαν αφάνταστα. Με αντιμετώπισε από την αρχή σαν ισότιμο συνεργάτη του και μου έδωσε την ευκαιρία να επεκταθώ στο ερευνητικό πεδίο, δημοσιεύοντας μαζί του επιστημονικές εργασίες. Ένα μεγάλο ευχαριστώ λοιπόν του αξίζει.

Ευχαριστώ τον Δρ. Αντώνη Σέα, μεταδιδακτορικό συνεργάτη στο Πανεπιστήμιο Κύπρου κατά την διάρκεια των τριών πρώτων χρόνων της φοίτησης μου, με τον οποίο έκανα τα " πρώτα βήματα " στο ερευνητικό εργαστήριο του τμήματος.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στον επιχ. καθ. Ανδρέα Όθωνος που με την ιώβεια υπομονή του και τις πολύτιμες πραγματικά γνώσεις του, με βοήθησε σε μεγάλο βαθμό ώστε να αποκτήσω τις απαραίτητες γνώσεις ενός σύγχρονου πειραματικού φυσικού, που συνδυάζει την μέτρηση και την τεχνολογία με την θεωρία.

Είχα την τύχη να εργαστώ για λίγο με τον καθ. του University of Toronto, Ανδρέα Μανδέλη, ένα από τους πρωτεργάτες και θεμελιωτές της φωτοθερμικής φυσικής. Η βοήθεια του ήταν ανεκτίμητη και τον ευχαριστώ πολύ.

Ευχαριστώ πολύ τον Δρ. Κυριάκο Καλλή, μεταδιδακτορικό συνεργάτη, που με βοήθησε σε μεγάλο βαθμό στο εργαστήριο και συζήτησε σε έκταση τμήματα της διατριβής μου.

Ο αναπλ. καθ. Χαράλαμπος Τσέρτος, με βοήθησε σε μεγάλο βαθμό στο γράψιμο της εργασίας σε γλώσσα *LATEX*. Επίσης με βοήθησε να επιλύσω μια σειρά προβλημάτων που αντιμετώπισα με το λειτουργικό σύστημα και τους Η.Υ που εργαζόμουν, γι' αυτό και τον ευχαριστώ πολύ.

Ευχαριστώ επίσης την φιλόλογο κα. Νίκη Ελευθερίου που διάβασε και διόρθωσε μεγάλο μέρος της εργασίας αυτής.

Θέλω επίσης να αναφερθώ στην σημαντική υποστήριξη της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Ένα σημαντικό τμήμα της έρευνας που παρουσιάζεται στη διατριβή αυτή έγινε στα πλαίσια του ευρωπαϊκού προγράμματος AVICENNE (Grant No. AVI-CT94-0008).

Θέλω επίσης να ευχαριστήσω τους καθ. R. S. Bes στο Laboratoire Materieux et Energie του Universite Paul Sabatier, τον καθ. Jose Martinez Duart στο Departamento de Fisica Aplicada του Universidad Autonoma de Madrid, τον καθ. David Cahen στο Weizmann Institute of Science, τον καθ. Hanna Hallak στο Bethlehem University, και τους διδακτορικούς τους φοιτητές Jaouad Salmi, Araceli Guttierrez, Yizhak Mastai, Aref Awazwaz με τους οποίους συνεργάστηκα στα πλαίσια του πιο πάνω ερευνητικού προγράμματος.

Ευχαριστώ επίσης τον επιχ. καθ. του Πανεπιστημίου Κύπρου, Κωνσταντίνο Μουλόπου-

λο, την διευθύντρια του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του Ερευνητικού Κέντρου Δημόκριτος στην Αθήνα, Δρ. Ανδρούλλα Νασιοπούλου και τον καθ. του Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης, Ιωάννη Στοιμένο, μέλη της επιτροπής για την αξιολόγηση της διατριβής μου, για τις εύστοχες παρατηρήσεις και διορθώσεις τους.

Στους γονείς μου, Μόδεστο και Ελένη

Μάριος Νέστορος



# Αφιέρωση

## Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	3
1.1	Το βιβλίο, ο αναγνώστης και μέθοδοι χαρακτηρισμού του	3
1.2	Οι προτάσεις του βιβλίου: Μια ιστορική αφήγηση	7
	<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>8</b>
	<b>Στους γονείς μου, Μόδεστο και Ελένη</b>	
2	Στοιχεία από την φυσική των Ηλιακώνών	11
2.1	Απόδοση των ηλεκτρικών σε χημικά φορτία και ηλιακή	11
2.2	Είδη-μείζονες εξισώσεις για τη γαλαξία και ηλιακή ενέργεια	12
2.3	Εισαγωγή στην ηλιακή ενέργεια	15
2.3.1	Εισαγωγή στην ηλιακή ενέργεια	15
2.3.2	Εισαγωγή στην ηλιακή ενέργεια	15
2.3.3	Εισαγωγή στην ηλιακή ενέργεια	15
2.4	Κόστος ηλεκτρικών φορτίων και ηλιακή ενέργεια	16
2.5	Η ηλιακή ενέργεια και η ηλεκτρική ενέργεια σε ένα ηλιακό	16
2.6	Ηλιακή ενέργεια	17
2.6.1	Ηλιακή ενέργεια και ηλιακή ενέργεια	17
2.6.2	Ηλιακή ενέργεια και ηλιακή ενέργεια	17
2.6.3	Η ηλιακή ενέργεια και ηλιακή ενέργεια	17
2.6.4	Η ηλιακή ενέργεια και ηλιακή ενέργεια	17
2.7	Ηλιακή ενέργεια (thermal energy)	18
	<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>19</b>
3	Θερμικά κύματα και κλίματα πλάσματος. Οι τεχνικές PMTR και PTR	41
3.1	Διάδοση της θερμότητας	41
3.2	Η εξίσωση διάδοσης της θερμότητας	42
3.3	Δημιουργία θερμικών κυμάτων στην βία	43
3.4	Δημιουργία κυμάτων πλάσματος	45
3.5	Η τεχνική PMTR	50
3.5.1	Αναλυτικά χαρακτηριστικά των πλάσμων θερμοκρασίας και κλίματος	51
3.5.2	Η ηλιακή ενέργεια και ηλιακή ενέργεια	53

## Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
1.1	Τεχνολογία Πυριτίου και μέθοδοι χαρακτηρισμού του. . . . .	1
1.2	Οι φωτοθερμικές μέθοδοι-Μια ιστορική αναδρομή. . . . .	3
	<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Στοιχεία από την Φυσική των Ημιαγωγών.</b>	<b>11</b>
2.1	Διάκριση των χρυστάλλων σε αγωγούς, μονωτές και ημιαγωγούς. . . . .	11
2.2	Ενδογενείς και εξωγενείς ημιαγωγοί – Υπολογισμός της πυκνότητας ηλεκτρικών φορέων. . . . .	13
2.3	Επιπλέον φορείς σε ημιαγωγούς – Οπτική απορρόφηση και επανασύνδεση .	17
2.3.1	Επανασύνδεση σε ημιαγωγούς με άμεσο ενεργειακό χάσμα. . . . .	18
2.3.2	Επανασύνδεση σε ημιαγωγούς με έμμεσο ενεργειακό χάσμα. . . . .	19
2.3.3	Επανασύνδεση στην επιφάνεια του ημιαγωγού. . . . .	22
2.4	Κίνηση ηλεκτρικών φορέων σ'ένα ημιαγωγό κάτω από την επιρροή ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου. . . . .	22
2.5	Η διάχυση των ηλεκτρικών φορέων σε ένα ημιαγωγό. . . . .	24
2.6	Ιοντική εμφύτευση. . . . .	27
2.6.1	Πλεγματικές ατέλειες στο πυρίτιο . . . . .	29
2.6.2	Άμορφοι ημιαγωγοί και ιοντική εμφύτευση . . . . .	31
2.6.3	Η επίδραση της ιοντικής εμφύτευσης στις οπτικές ιδιότητες του πυριτίου. . . . .	33
2.6.4	Η επίδραση της ιοντικής εμφύτευσης στις ηλεκτρονικές και θερμικές ιδιότητες του πυριτίου. . . . .	35
2.7	Θερμική ανόπτηση (thermal annealing). . . . .	36
	<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>39</b>
<b>3</b>	<b>Θερμικά κύματα και κύματα πλάσματος. Οι τεχνικές PMTR και PTR.</b>	<b>41</b>
3.1	Διάδοση της θερμότητας. . . . .	41
3.2	Η εξίσωση διάχυσης της θερμότητας. . . . .	42
3.3	Δημιουργία θερμικών κυμάτων στην ύλη . . . . .	43
3.4	Δημιουργία κυμάτων πλάσματος . . . . .	48
3.5	Η τεχνική <b>PMTR</b> . . . . .	50
3.5.1	Αναλυτικός υπολογισμός των πεδίων θερμοκρασίας και πλάσματος σε ημιάπειρο ημιαγωγό. . . . .	51
3.5.2	Η λύση της εξίσωσης διάχυσης των ηλεκτρικών φορέων . . . . .	53



3.5.3	Η λύση της εξίσωσης διάχυσης της θερμότητας . . . . .	55
3.5.4	Ο θερμικός συντελεστής $C_T$ . . . . .	56
3.5.5	Η συντελεστής πλάσματος $C_N$ . . . . .	56
3.5.6	Ο μηχανισμός <b>Drude</b> . . . . .	56
3.5.7	Το φαινόμενο πλήρωσης ζώνης. . . . .	58
3.5.8	Το φαινόμενο Franz-Keldysh. . . . .	58
3.5.9	Μερικές προσομοιώσεις για το σήμα PMTR . . . . .	59
3.5.10	Πειραματική διάταξη <b>PMTR</b> . . . . .	60
3.6	Η μέθοδος <b>PTR</b> . . . . .	62
3.6.1	Πειραματική διάταξη <b>PTR</b> . . . . .	68

## Βιβλιογραφία 71

4	Η φωτοθερμική ανακλαστικότητα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας: μια ποσοτική διερεύνηση και ανάλυση. . . . .	72
4.1	Εισαγωγή . . . . .	72
4.2	Θεωρία . . . . .	73
4.2.1	Βασικές φωτοθερμικές εξισώσεις-τριδιάστατη λύση. . . . .	73
4.2.2	Εξάρτηση των θερμικών ιδιοτήτων από τη θερμοκρασία. . . . .	74
4.2.3	Εξάρτηση των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων από τη θερμοκρασία. . . . .	75
4.2.4	Οι συντελεστές πλάσματος και θερμοκρασίας $C_N$ και $C_T$ . . . . .	77
4.2.5	Επίδραση της θερμοκρασίας στη σχετική σημασία των συνεισφορών πλάσματος και θερμοκρασίας-Προσομοιώσεις. . . . .	77
4.3	Πειραματικά αποτελέσματα και θεωρητική προσαρμογή. . . . .	78
4.4	Συμπεράσματα . . . . .	85

## Βιβλιογραφία 89

5	Ένα διστρωματικό μοντέλο για την περιγραφή του φωτοθερμικού ραδιομετρικού σήματος, από εμφυτευμένο ημιαγωγό. . . . .	91
5.1	Η ανάγκη εισαγωγής ενός διστρωματικού μοντέλου. . . . .	91
5.2	Φυσικό μοντέλο . . . . .	92
5.3	Παραμετρική διερεύνηση . . . . .	97
5.3.1	Η επίδραση του χρόνου ζωής των φορέων στο επιφανειακό στρώμα . . . . .	99
5.3.2	Η επίδραση της ταχύτητας επανασύνδεσης (επιφανειακή και ενδοεπιφανειακή). . . . .	99
5.3.3	Η επίδραση του συντελεστή οπτικής απορρόφησης $\alpha_f$ και του συντελεστή αμφιπολικής ηλεκτρονικής διάχυσης $D_f$ . . . . .	101
5.3.4	Σύγκριση του <i>PTR</i> σήματος που δίνει ένα χρυσταλλικό και ένα εντελώς άμορφο δισχίο ημιαγωγού . . . . .	101

## Βιβλιογραφία 107

6	Σύζευξη θερμοηλεκτρονικών κυμάτων σε ημιαγωγούς στην περιοχή των υψηλών θερμοκρασιών. . . . .	108
6.1	Εισαγωγή . . . . .	108

6.2	Θεωρία . . . . .	109
6.3	Εφαρμογή σε δισκία Si κάτω από συνθήκες θερμικής ανόπτησης . . . . .	112
6.3.1	Στατιστική φορέων στο Si . . . . .	112
6.3.2	Η εξάρτηση ενός συζευγμένου θερμοηλεκτρονικού κύματος από την συχνότητα διαμόρφωσης. . . . .	117
6.3.3	Θερμοκρασιακή συμπεριφορά των συζευγμένων θερμοηλεκτρονικών κυμάτων . . . . .	120
6.4	Συμπεράσματα . . . . .	123

## **Βιβλιογραφία** **130**

7	Πρακτικές εφαρμογές της τεχνικής <i>PTR</i> . Θερμοφυσικός χαρακτηρισμός ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών. <span style="float: right;"><b>131</b></span>
7.1	Ανανεώσιμες μορφές ενέργειας και ηλιακές επιλεκτικές επιφάνειες. . . . . <span style="float: right;">131</span>
7.1.1	Επιλεκτικές επιφάνειες για σκοπούς παθητικής ψύξης. . . . . <span style="float: right;">133</span>
7.1.2	Επιλεκτικές επιφάνειες για σκοπούς θέρμανσης. . . . . <span style="float: right;">138</span>

## **Βιβλιογραφία** **145**

8	Συμπεράσματα και μελλοντικοί στόχοι <span style="float: right;"><b>146</b></span>
A	Η υπέρυθη απορρόφηση των ελεύθερων φορέων. <span style="float: right;"><b>148</b></span>



## Αχρωνύμια

1. PMTR: Photomodulated Thermoreflectance
2. PTR: Photothermal Radiometry
3. PDS: Photothermal Deflection Spectroscopy
4. PAS: Photoacoustic Spectroscopy
5. TEM: Transmission Electron Microscopy
6. DLTS: Deep Level Transient Spectroscopy
7. RBS: Rutherford Backscattering
8. RS: Raman Scattering
9. LS: Luminescence
10. MOS: Metal Oxide Semiconductor
11. IR: Infrared

Μάριος Νέστορος

Οι περισσότερές από τις παραπάνω μεθόδους που αναφέρονται είναι μη καταστρεφτικές και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ανάλυση των υλικών. Η μέθοδος της φωτοακουστικής (PAS) είναι μια τεχνική που βασίζεται στην ανίχνευση των ηχητικών κυμάτων που παράγονται κατά τη διάρκεια της απορρόφησης της ακτινοβολίας. Η μέθοδος της φωτοθερμικής αντανάκλασης (PTR) βασίζεται στην ανίχνευση της αλλαγής στην αντανάκλαση της ακτινοβολίας που προκαλείται από την απορρόφηση της ακτινοβολίας. Η μέθοδος της φωτοθερμικής εκτροπής (PDS) βασίζεται στην ανίχνευση της εκτροπής της ακτινοβολίας που προκαλείται από την απορρόφηση της ακτινοβολίας. Η μέθοδος της φωτοακουστικής (PAS) βασίζεται στην ανίχνευση των ηχητικών κυμάτων που παράγονται κατά τη διάρκεια της απορρόφησης της ακτινοβολίας. Η μέθοδος της φωτοθερμικής αντανάκλασης (PTR) βασίζεται στην ανίχνευση της αλλαγής στην αντανάκλαση της ακτινοβολίας που προκαλείται από την απορρόφηση της ακτινοβολίας. Η μέθοδος της φωτοθερμικής εκτροπής (PDS) βασίζεται στην ανίχνευση της εκτροπής της ακτινοβολίας που προκαλείται από την απορρόφηση της ακτινοβολίας.

Επιπλέον, χωρίς να είναι δυνατό να έρχεται σε επαφή με στοιχεία ή καλώδια (air, contact),

## Κεφάλαιο 1

### Εισαγωγή

#### 1.1 Τεχνολογία Πυριτίου και μέθοδοι χαρακτηρισμού του.

Από τα μέσα του αιώνα μας η ηλεκτρονική είναι βασισμένη στο πυρίτιο και γενικά στους ημιαγωγούς [1]. Τα ημιαγώγιμα υλικά χρησιμοποιούνται σε μεγάλη κλίμακα στην κατασκευή εξειδικευμένων οπτοηλεκτρονικών διατάξεων όπως τα τρανζίστορ, οι φωτοδιόδοι, τα διοδικά laser και τα φωτοβολταικά.

Απαραίτητη προϋπόθεση για την άριστη λειτουργία αυτών των ημιαγωγικών διατάξεων είναι η γνώση και η βελτιστοποίηση των φυσικών τους ιδιοτήτων [2]. Η μέθοδος της ιοντικής εμφύτευσης ως μια τεχνολογική διαδικασία της μοντέρνας μικροηλεκτρονικής, εισήχθη ως εναλλακτική μέθοδος εισαγωγής προσμείξεων στους ημιαγωγούς. Με την εισαγωγή προσμείξεων στο πλέγμα του ημιαγωγού μπορούμε να μεταβάλουμε τις φυσικές του ιδιότητες κατά βούληση. Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των στρωμάτων αυτών (ταχύτητα επανασύνδεσης, χρόνος ζωής των φορέων, ευκινησία των φορέων) και οι θερμικές (συντελεστής θερμικής διάχυσης και συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας) καθορίζουν τη λειτουργία της ηλεκτρονικής διάταξης. Επομένως πρέπει να είναι γνωστές στον κατασκευαστή με ορισμένη ακρίβεια. Επιπλέον το βασικό πρόβλημα που προκύπτει λόγω της εμφύτευσης είναι η δημιουργία ζημιών στο κρυσταλλικό πλέγμα του στόχου. Έτσι η ιοντική εμφύτευση πρέπει να ακολουθηθεί από μια διαδικασία ανόπτησης με σκοπό το πλέγμα του υλικού να ανακτήσει την κρυσταλλικότητα του και οι προσμείξεις να γίνουν ηλεκτρονικά ενεργές. Συνεπώς είναι αναγκαία η ανάπτυξη μεθόδων χαρακτηρισμού των λεπτών στρωμάτων ημιαγωγού από τα οποία είναι κατασκευασμένες οι διατάξεις αυτές.

Οι μικροσκοπικές ολοκληρωμένες διατάξεις που συνιστούν μια μικροηλεκτρονική συσκευή αποτελούνται από λεπτά στρώματα ημιαγωγών, μονωτών και μετάλλων. Οι διαστάσεις των στρωμάτων αυτών είναι της τάξης του  $\mu\text{m}$  ή ακόμα και  $\text{nm}$ . Μια μέθοδος χαρακτηρισμού τους θα πρέπει επομένως να παρουσιάζει ανάλογη ικανότητα χωρικής ανάλυσης, και να είναι αρκετά ευαίσθητη στις ιδιότητες της επιφάνειας που παίζουν καθοριστικό ρόλο στην λειτουργία του υλικού. Γενικά οι τεχνικές χαρακτηρισμού θα πρέπει να παρουσιάζουν τα εξής χαρακτηριστικά:

1. να γίνονται χωρίς το υλικό να έρχεται σε επαφή με συσκευές ή καλώδια (non contact),



2. να είναι μη καταστροφικές (non destructive) δηλαδή οι αλλαγές που δημιουργούνται στο υλικό κατά τη διάρκεια της μέτρησης να μην καταστρέφουν τις ιδιότητες του,
3. να είναι επαναλήψιμες και να δίνουν γρήγορα αποτελέσματα,
4. να παρουσιάζουν χωρική ανάλυση μεγαλύτερη από τις διαστάσεις της εξεταζόμενης κατασκευής, και
5. να είναι ευαίσθητες στις επιφανειακές ιδιότητες της συσκευής και στις ιδιότητες αμέσως κάτω από την επιφάνεια.

Οι οπτικές μέθοδοι ανήκουν γενικά στην ομάδα των μη καταστροφικών τεχνικών μια και το φως διεγείρει τον ημιαγωγό και αλλάζει τις ιδιότητες του με αντιστρεπτό όμως τρόπο, διότι ο ημιαγωγός αποδιεγείρεται με διάφορους μηχανισμούς, στους οποίους θα αναφερθούμε στην συνέχεια. Μια σειρά από τεχνικές χαρακτηρισμού, οι φωτοθερμικές μέθοδοι, αναπτύχθηκαν τα τελευταία τριάντα χρόνια και χρησιμοποιούνται σε μεγάλο βαθμό στον χαρακτηρισμό υλικών στην βιομηχανία. Πριν προχωρήσουμε όμως στις φωτοθερμικές μεθόδους θα αναφερθούμε εν συντομία σε άλλες κατηγορίες τεχνικών και μεθόδων.

1. **Φυσικοχημική ανάλυση:** Η Οπισθοσκέδαση Rutherford (*RBS*) [3] χρησιμοποιείται για να εκτιμήσει την αναλογία των εμφυτευμένων ιόντων που βρίσκονται σε ενδοπλεγματικές θέσεις ή θέσεις αντικατάστασης. Μια άλλη μέθοδος που ανήκει στην πιο πάνω κατηγορία είναι η Μικροσκοπία Ηλεκτρονικής Διέλευσης (*TEM*) [4] που χρησιμοποιείται στην μελέτη των χρυσταλλογραφικών ατελειών λόγω της ιοντικής εμφύτευσης.
2. **Ηλεκτρονικές μέθοδοι:** Η Μεταβατική Φασματοσκοπία Βαθειών Επιπέδων (*DL-TS*) [5] χρησιμοποιείται στην μελέτη των ενεργειακών καταστάσεων που δημιουργούνται στο ενεργειακό χάσμα. Η Μέθοδος των Τεσσάρων Σημείων (four point probe) [6] δίνει την μέση αγωγιμότητα του ημιαγωγού, ενώ η Μέθοδος Hall [7] έχει επίσης χρησιμοποιηθεί στον προσδιορισμό των ιδιοτήτων ηλεκτρονικής μεταφοράς εμφυτευμένων και ανοπτημένων στρωμάτων ημιαγωγών.
3. **Οπτικές μέθοδοι:** Οι κλασικές οπτικές μέθοδοι της φασματοσκοπίας ανάκλασης και διέλευσης χρησιμοποιήθηκαν για τον χαρακτηρισμό εμφυτευμένων ημιαγωγών, και μπορούν να δώσουν πληροφορίες για τον βαθμό ενεργοποίησης των προσμείξεων [8]. Επιπλέον η ελλειψομετρική μέθοδος χρησιμοποιήθηκε στην μελέτη της κινητικής της ανόπτησης και μπορεί να μας δώσει την μιγαδική διηλεκτρική συνάρτηση του υλικού που έχει υποστεί χρυσταλλική ζημιά όσο και αυτού που δεν έχει υποστεί ζημιά (π.χ. του εμφυτευμένου στρώματος και του υποστρώματος). Βέβαια υπάρχει ο περιορισμός πως η διαφορά των διηλεκτρικών συναρτήσεων ανάμεσα στο στρώμα που έχει υποστεί ζημιά και σε αυτό που είναι ανέπαφο πρέπει να είναι σημαντική [9]. Η Σκέδαση Raman (*RS*) και η Φωτο-φωταύγεια (*PL*) είναι πολύ χρήσιμες στον προσδιορισμό του βαθμού ανάκτησης της χρυσταλλικής τάξης στους εμφυτευμένους ημιαγωγούς μετά την διαδικασία της θερμικής ανόπτησης [10].



## 1.2 Οι φωτοθερμικές μέθοδοι-Μια ιστορική αναδρομή.

Οι φωτοθερμικές μέθοδοι στηρίζονται στην περιοδική διαταραχή μιας περιοχής της επιφάνειας του δείγματος από μια δέσμη φωτός διαμορφωμένης έντασης, και την ανίχνευση των διαταραχών που επιφέρει με διάφορους τρόπους.

1. Το **Φωτοακουστικό Φαινόμενο** αναφέρεται για πρώτη φορά από τον Alexander Graham Bell [11] στα τέλη του περασμένου αιώνα. Ο Bell [12] στην προσπάθεια του να μεταδώσει ένα τηλεφωνικό σήμα χρησιμοποιώντας μια διαμορφωμένη δέσμη φωτός, ανακάλυψε το φωτοακουστικό φαινόμενο. Χρησιμοποιώντας ένα καθρέφτη προσαρμοσμένο σε μια μικροφωνική διάταξη (έτσι ώστε οι παλμοί πίεσης να δημιουργούν ταλαντώσεις στον καθρέφτη) κατόρθωσε να διαμορφώσει την ένταση μιας δέσμης ηλιακού φωτός. Ακολούθως εστίασε αυτή την δέσμη σε μια κυψελίδα *Se* (σελήνιο), με αποτέλεσμα την διαμόρφωση της ηλεκτρικής αντίστασης της. Η κυψελίδα αυτή ήταν ενσωματωμένη στο ηλεκτρικό τηλεφωνικό κύκλωμα. Με αυτό τον τρόπο κατόρθωσε να αναπαράξει την μεταδιδόμενη ομιλία σ' ένα ακουστικό δέκτη. Η απρόσμενη ανακάλυψη του Bell ήταν πως το *Se* και άλλα στερεά εξέπεμπαν ήχο κάτω από την επίδραση διαμορφωμένης ακτινοβολίας. Ακόμα βρήκε πως η ένταση του φαινομένου εξαρτόταν από το μήκος κύματος του φωτός και ήταν αποτέλεσμα της διadixασίας οπτικής απορρόφησης. Διάφοροι επιστήμονες της εποχής όπως οι Tyndall, Rayleigh και Roentgen έδειξαν ενδιαφέρον και ασχολήθηκαν με το φωτοακουστικό φαινόμενο, όμως λόγω των τεχνολογικών περιορισμών της εποχής, δεν μελετήθηκε διεξοδικά.

Η ανακάλυψη αυτή του Bell έμεινε ξεχασμένη μέχρι το 1976 οπότε και ανακαλύφθηκε ξανά. Η **Φωτοακουστική Μέθοδος (PA)**, που είναι η πιο παλιά φωτοθερμική μέθοδος χαρακτηρισμού, θεμελιώθηκε από τους Rosencwaig και Gersho [13, 1] το 1976. Το φωτοθερμικό σήμα λαμβάνεται ως εξής: μια δέσμη φωτός διεγείρει την επιφάνεια του δείγματος, και η περιοδική θερμική διαστολή που υφίσταται δημιουργεί ελαστικά κύματα στο υλικό και στο μέσον που το περιβάλλει. Τα κύματα πίεσης ανιχνεύονται με την χρήση μικροφώνου. Το 1984 οι Vasilev και Sandomirski [15] έδωσαν την θεωρητική περιγραφή για το φωτοακουστικό σήμα που δίνουν οι ημιαγωγοί. Η φωτοακουστική τεχνική χρησιμοποιήθηκε σε μεγάλο βαθμό για την μέτρηση θερμικών ιδιοτήτων υγρών, στερεών και αερίων και στην απεικόνιση ηλεκτρονικών κυκλωμάτων [1]. Η μέθοδος αυτή έχει βέβαια κάποιους περιορισμούς από το γεγονός πως το δείγμα πρέπει να τοποθετηθεί σε κάποιο κουτί. Ένα άλλο τεχνικό εμπόδιο είναι το περιορισμένο εύρος συχνοτήτων της μικροφωνικής μεμβράνης. Αυτό βέβαια μπορεί να αντιμετωπιστεί με την χρήση πιεζοηλεκτρικών χρυστάλλων οι οποίοι όμως πρέπει να είναι σε επαφή με το δείγμα. Μια σειρά από πιο πρόσφατες εφαρμογές αφορά τον χαρακτηρισμό ημιαγωγικών υπερπλεγμάτων και ετεροδομών από τους Zhang και Sawada [16].

2. Η **Φωτοδιαθλαστική Μέθοδος (PD)** στηρίζεται στην ανίχνευση της βαθμίδας θερμοκρασίας που δημιουργείται στο ρευστό που βρίσκεται σε επαφή με την επιφάνεια του



υλικού, που θερμαίνεται περιοδικά από μια δέσμη φωτός. Μια δεύτερη δέσμη φωτός κατευθύνεται παράλληλα με την επιφάνεια του δείγματος και λόγω της βαθμίδας του δείκτη διάθλασης του ρευστού, η οποία προκαλείται από την βαθμίδα θερμοκρασίας, διαθλάται. Μετρώντας την γωνία διάθλασης με κάποιο ανιχνευτή θέσης μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση διαμορφωμένη αλλαγή της θερμοκρασίας της επιφάνειας του υλικού, και απο εκεί να βρούμε κάποιες φυσικές ιδότητες του. Η τεχνική αυτή αναπτύχθηκε από τους A.C.Boccard et.al, [17], και τους Murphy et.al, το 1980. Η περίπτωση των ημιαγωγών και η συνεισφορά των φωτοδιεγερμένων φορέων στο σήμα μελετήθηκε αρχικά από τους Fournier et.al και Amer [18] το 1986 και τον Sablicov [19] το 1987. Η τεχνική *PD* χρησιμοποιήθηκε από τους Yacoubi et.al [20] το 1986 για την μέτρηση του συντελεστή οπτικής απορρόφησης και της θερμικής αγωγιμότητας ημιαγωγικών ετεροδομών. Το 1997 οι Kalli et.al [21] αξιολόγησαν την ευαισθησία ενός ανιχνευτή υδρογόνου φτιαγμένου από λεπτό στρώμα παλλαδίου πάνω σε οργανικό στρώμα *PVDF*.

3. Η τεχνική της **Φωτοδιαμορφωμένης Θερμο-ανακλαστικότητας** (*PMTR*) στηρίζεται στην διαμόρφωση της ανακλαστικότητας της επιφάνειας του δείγματος λόγω της αλλαγής της θερμοκρασίας της επιφάνειας, της δημιουργίας ελαστικής τάσης ή/ και της επαγωγής ηλεκτρικών φορέων (περίπτωση των ημιαγωγών). Όλες οι πιο πάνω διεργασίες οφείλονται, επίσης, στην απορρόφηση ακτινοβολίας από μια διαμορφωμένη ένταση φωτεινή δέσμη. Η μέθοδος αυτή εφαρμόστηκε για πρώτη φορά το 1967 από τους Wang et.al [22] σε ημιαγωγούς, παρόλο που ο μηχανισμός δημιουργίας του σήματος δεν ήταν κατανοητός. Το 1985 οι Smith et.al, [23] εξήγησαν διάφορες πειραματικές μετρήσεις που έκαναν σε εμφυτευμένα δείγματα πυριτίου. Για να εξηγήσουν τις μετρήσεις χρησιμοποίησαν τόσο την επαγόμενη συνεισφορά της θερμοκρασίας όσο και αυτήν των επαγόμενων ηλεκτρικών φορέων. Το 1989 οι Mandelis et.al [24] χρησιμοποίησαν την τεχνική *PMTR* για τον χαρακτηρισμό επαφών  $p - n$  (προσδιορισμός χρόνων ζωής). Το 1990 οι Christofides et.al μελέτησαν την κινητική της θερμικής απόπτωσης [25]. Την ίδια χρονιά οι Vitkin et.al [26] εξέτασαν το σήμα ως συνάρτηση της θερμοκρασίας παίρνοντας μετρήσεις στο διάστημα θερμοκρασιών 40-300K και το 1995 οι Nestoros et. al [27] έδωσαν την θεωρητική ανάλυση στις πειραματικές μετρήσεις των προηγούμενων.
4. Η μέθοδος της **Φωτοθερμικής Ραδιομετρίας** (*PTR*) ανιχνεύει την υπέρυθη ακτινοβολία που εκπέμπεται από το δείγμα λόγω της μεταβολής της θερμοκρασίας του. Η μέθοδος *PTR* αναφέρεται για πρώτη φορά το 1981 από τους Nordal και Kanstad [28]. Το αντικείμενο της μελέτης τους ήταν το φάσμα οπτικής απορρόφησης σκόνης  $Nd_2O_3$ , αίματος και πράσινων φύλλων. Μερικά χρόνια μετά (1988) οι Sheard και Somekh [29, 30] χρησιμοποίησαν την πιο πάνω τεχνική για τον προσδιορισμό χρόνων ζωής και ταχυτήτων επανασύνδεσης σε δείγματα *GaAs* και *Si*, καθώς και για την εξήγηση της σχέσης μεταξύ του σήματος και της δόσης ιοντικής εμφύτευσης σε ημιαγωγούς. Οι πιο πρόσφατες εργασίες με την μέθοδο *PTR* επικεντρώνονται στην χρονική ανάλυση του φωτοθερμικού σήματος και τον προσδιορισμό ενεργειακών επιπέδων προσμείξεων σε ημιαγωγούς [31], της τομογραφικής ανάλυσης του χρόνου



ζωής σε εμφυτευμένους ημιαγωγούς [22], τον ποσοτικό προσδιορισμό της σχέσης του σήματος και της δόσης εμφύτευσης [33, 34], της συσχέτισης προσμείξεων στους ημιαγωγούς και στον χαρακτηρισμό συσκευών *MOS* [35], στην μέτρηση της χημικής απόδοσης και των μετασταθών χρόνων ζωής σε ενεργά υλικά laser [13]. Ακόμα η τεχνική αυτή χρησιμοποιήθηκε πρόσφατα στον χαρακτηρισμό υλικών [37, 38], που έχουν επιλεκτικό φάσμα απορρόφησης ή εκπομπής, όσον αφορά την ηλιακή ακτινοβολία, και που χρησιμοποιούνται για την αξιοποίηση της ηλιακής ενέργειας για σκοπούς θέρμανσης ή ψύξης. Η περίπτωση αυτή ενδιαφέρει ιδιαίτερα την περίπτωση της Κύπρου όπου η βελτίωση της απόδοσης των υλικών που χρησιμοποιούνται σαν απορροφητικές επιφάνειες σημαίνει ελάττωση της αξίας της μονάδας παραγόμενης από τον ήλιο ενέργειας. Η μέθοδος *PTR* χρησιμοποιήθηκε [39] με μεγάλη επιτυχία στην διάγνωση πλαστών χαρτονομισμάτων με βάση τις θερμικές και οπτικές τους ιδιότητες σε σχέση με αυτές των γνήσιων. Το 1994 οι Mandelis et. al [40] διερεύνησαν με την πιο πάνω μέθοδο την προέλευση γεωλογικών πετρωμάτων, που αποτελούσαν τμήματα αγαλλμάτων, τα οποία βρέθηκαν στην Κύπρο. Ο προσδιορισμός του συντελεστή θερμικής διάχυσης των πετρωμάτων, έδωσε πληροφορίες για την περιοχή προέλευσης τους. Οι φωτοθερμικές τεχνικές αποτελούν λοιπόν, ένα ισχυρό διαγνωστικό εργαλείο τόσο στην βασική έρευνα στον τομέα της επιστήμης των υλικών, όσο και σε εφαρμογές που αφορούν το περιβάλλον, τις ανανεώσιμες πηγές ενέργειας και την αρχαιομετρία.

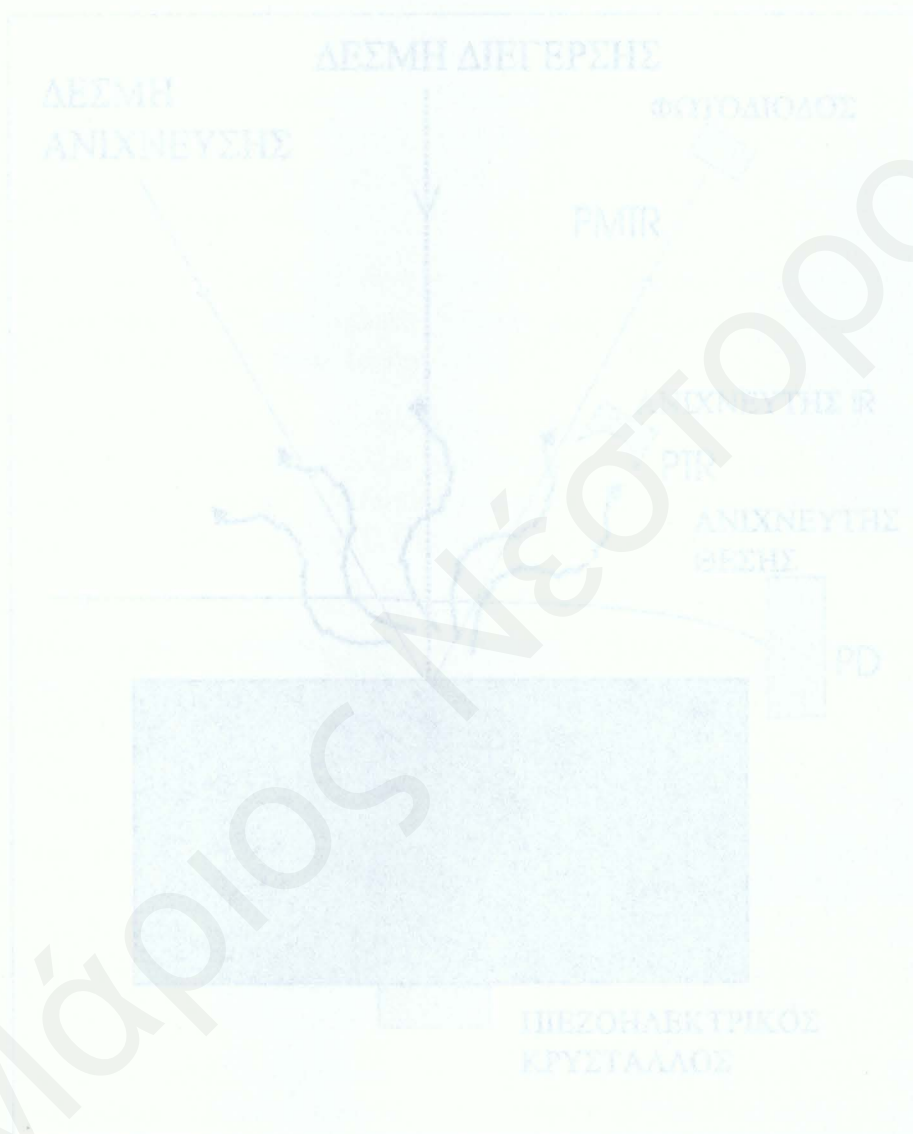
Η διατριβή πρωτοτυπεί σ' ένα μεγάλο βαθμό στο γεγονός πως για πρώτη φορά δίνεται μια ποσοτική ανάλυση του σήματος *PMTR* εμφυτευμένων ημιαγωγών σε χαμηλές θερμοκρασίες. Ακόμα διευκρινίζει τον ρόλο των συνεισφορών πλάσματος και θερμοκρασίας και αποδεικνύει πως εργαζόμενοι σε χαμηλές θερμοκρασίες μπορούμε να διαχωρίσουμε τις δυο συνεισφορές. Ανοίγει επίσης καινούριους δρόμους σε σχέση με την αξιολόγηση διαστρωματικών ημιαγωγών και συστημάτων μονώτων/ημιαγωγών και μετάλλων που αποτελούν τις ηλεκτρονικές διατάξεις υψηλής τεχνολογίας

Η ανάλυση του φωτοθερμικού σήματος σε υψηλές θερμοκρασίες με την εισαγωγή του όρου θερμικής σύζευξης αποτελεί μια σημαντική βελτίωση των υφιστάμενων φωτοθερμικών μοντέλων. Ακόμα δημιουργεί μια νέα δυναμική όσον αφορά τον on line έλεγχο της διαδικασίας ανόπτησης και θερμικής καθοδήγησης, που υφίστανται οι ημιαγωγοί μετά την ιοντική εμφύτευση τους.

Για πρώτη φορά έχουν μελετηθεί με την μέθοδο *PTR* ηλιακές επιλεκτικές επιφάνειες και έχουν υπολογιστεί θερμικές και οπτικές τους ιδιότητες.

Η διάταξη των θεμάτων στην διατριβή έχει ως εξής: στο Κεφ. 2 θα παρουσιαστούν βασικά στοιχεία και έννοιες από την φυσική των ημιαγωγών, ενώ στο Κεφ. 3 θα εξεταστούν η δημιουργία θερμικών κυμάτων και κυμάτων πλάσματος, καθώς και οι τεχνικές *PMTR* και *PTR* στις οποίες στηρίζεται η εργασία. Στο Κεφ. 4 θα μελετηθεί η συμπεριφορά του σήματος *PMTR* που δίνουν δισχία *Si* με διάφορες πυκνότητες προσμείξεων, που έχουν εισαχθεί με ιοντική εμφύτευση. Το σήμα *PMTR* θα εξεταστεί ως συνάρτηση της θερμοκρασίας στο διάστημα θερμοκρασιών 50 – 300K. Στο επόμενο κεφάλαιο (Κεφ. 5) παρουσιάζεται ένα μοντέλο δύο στρωμάτων, το οποίο έχει ως κύριο στόχο να περιγράψει το Φωτοθερμικό Ραδιομετρικό σήμα *PTR* που δημιουργείται από ένα εμφυτευμένο ημιαγωγό. Η συμπεριφορά του φωτοθερμικού σήματος διερευνάται ως συνάρτηση των θερμικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων του επιφανειακού στρώματος. Στο Κεφ. 6 μελετώνται

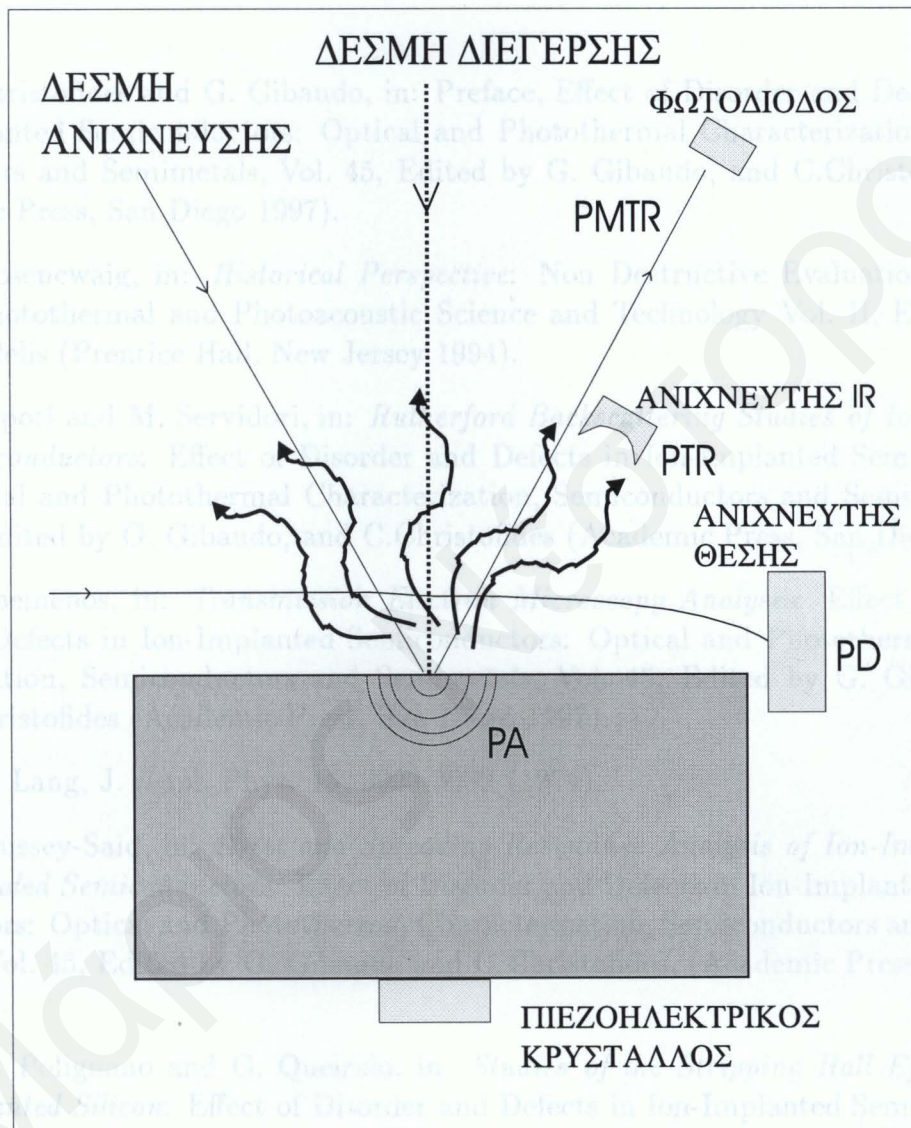
οι συζευγμένες εξισώσεις διάχυσης των ηλεκτρικών φορέων και της θερμότητας, σ' ένα ημιαγωγό  $Si$  για διάφορες τιμές της πυκνότητας προσμείξεων. Σκοπός της μελέτης είναι η εύρεση της ισχύος του όρου σύζευξης και της επίδρασης του στο φωτοθερμικό σήμα. Στο Κεφ. 7 παρουσιάζονται εφαρμογές της τεχνικής  $PTR$  στην μελέτη ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών. Τέλος στο Κεφ. 8 συγκεντρώνονται τα βασικά συμπεράσματα και τοποθετούνται μελλοντικοί στόχοι.



Εικόνα 1.1: Οι φωτοθερμικές τεχνικές  $PMTR$ ,  $PTR$ ,  $PD$ ,  $PA$  και τα φαινόμενα που συγχέουν.



## Βιβλιογραφία



Εικόνα 1.1: Οι φωτοθερμικές τεχνικές PMTR, PTR, PD, PA και τα φαινόμενα που ανιχνεύουν.



## Βιβλιογραφία

- [1] C. Christofides and G. Gibaudo, in: Preface, Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo, and C.Christofides (Academic Press, San Diego 1997).
- [2] A. Rosencwaig, in: *Historical Perspective: Non Destructive Evaluation: Progress In Photothermal and Photoacoustic Science and Technology* Vol. II, Edited by A. Mandelis (Prentice Hall, New Jersey 1994).
- [3] R. Nipoti and M. Servidori, in: *Rutherford Backscattering Studies of Ion Implanted Semiconductors: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals*, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo, and C.Christofides (Academic Press, San Diego 1997).
- [4] J. Stoemenos, in: *Transmission Electron Microscopy Analyses: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals*, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo, and C.Christofides (Academic Press, San Diego 1997).
- [5] D. V. Lang, *J. Appl. Phys.* **45**, 3023-3032 (1974).
- [6] J. Boussey-Said, in: *Sheet and Spreading Resistance Analysis of Ion-Implanted and Annealed Semiconductors: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals*, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C Christofides, (Academic Press, San Diego 1997).
- [7] M. L. Polignano and G. Queirolo, in: *Studies of the Stripping Hall Effect in Ion-Implanted Silicon: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals*, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C.Christofides, (Academic Press, San Diego 1997).
- [8] A. Seas and C. Christofides, in: *Reflection Spectroscopy in Ion-Implanted Semiconductors: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization, Semiconductors and Semimetals*, Vol. 46, Edited by C. Christofides and G. Gibaudo, (Academic Press, San Diego 1997).
- [9] M. Fried, T. Lohner and J. Gyulai, in: *Ellipsometric Analysis: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Charac-*



- terization, Semiconductors and Semimetals, Vol. 46, Edited by C. Christofides and G. Gibaudo, (Academic Press, San Diego 1997).
- [10] A. Othonos, and C. Christofides, in: *Photoluminescence and Raman Scattering of Ion Implanted Semiconductors. Influence of Annealing: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Optical and Photothermal Characterization*, Semiconductors and Semimetals, Vol. 46, Edited by C. Christofides and G. Gibaudo, (Academic Press, San Diego 1997).
- [11] A. G. Bell, *Philos. Mag.* **11**, 510 (1888).
- [12] D. P. Almond and P. M. Patel, *Photothermal Science and Techniques* in: *Physics and its Applications*, Edited by E. R. Dobbs and S. P. Palmer (Chapman and Hall, London 1996) ch. 1.
- [13] A. Rosencwaig and A. Gersho, *J. Appl. Phys.* **47**, 64 (1976).
- [14] A. Rosencwaig, *Science* **218**, 223 (1982).
- [15] A. N. Vasilev and V.B. Sandomirski, *Sov. Phys. Semicond.* **18**, 1095 (1984).
- [16] S. Y. Zhang and T. Sawada, *Photoacoustic and Photothermal Characterizations of Semiconductor Supperlattices and Heterojunctions* in: *Non Destructive Evaluation*, Edited by A. Mandelis (Prentice Hall, New Jersey 1994) ch. 6.
- [17] A. C. Boccara, D. Fournier et J. Badoz, *Appl. Phys. Lett.* **36**, 130 (1980).
- [18] D. Fournier, A. C. Boccara, A. Skumanich and N.M. Amer, *J. Appl. Phys.* **59**, 787 (1986).
- [19] V. A. Sablicov, *Sov. Phys. Semicond.* **21**, 1319 (1987).
- [20] N. Yacoubi, B. Girault, and J. Fesquet, *Appl. Opt.* **25**, 4622 (1986).
- [21] K. Kalli, A. Othonos and C. Christofides *Rev. Sci. Instrum.* **68**, 3544 (1997).
- [22] E. Y. Wang, W. A. Albers, and C. E. Bleil, "II-VI Semiconducting Compounds, 1967 International Conference, Proceedings" (D. G. Thomas, ed.) Benjamin, New York, p.136.
- [23] W. L. Smith, A. Rosencwaig, D. L. Willenborg, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 584 (1985).
- [24] A. Mandelis, A. Ward, and K. T. Lee, *J. Appl. Phys.* **66**, 5584 (1989).
- [25] C. Christofides, I. A. Vitkin, and A. Mandelis, *J. Appl. Phys.* **67**, 2815 (1990).
- [26] I. A. Vitkin, C. Christofides, and A. Mandelis, *J. Appl. Phys.* **67**, 2822 (1990).
- [27] M. Nestoros, B.C. Forget, C. Christofides and A. Seas, *Phys. Rev. B.* **51**, 14 115 (1995).
- [28] P. Nordal and O. Kanstad, *Appl. Phys. Lett.* **38**, 486 (1981).
- [29] S. J. Sheard and M. G. Somekh, *Infrared Phys.* **28**, 287 (1988).

- [30] S. Sheard and M. Somekh, *Photothermal Radiometry of Semiconductors* in: Non Destructive Evaluation, Edited by A. Mandelis (Prentice Hall, New Jersey 1994) ch. 5.
- [31] A. Mandelis, R.A. Budiman, M. Vargas and D. Wolf, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1582 (1995).
- [32] A. Salnick A. Mandelis, A. Othonos and C. Christofides, in: Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation, Vol. 16, Edited by D.O Thompson and D.E Chimenti, (Plenum Press, New York 1997).
- [33] A. Salnick, A. Mandelis, F.Funac and C. Jean *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1531 (1997).
- [34] M. Nestoros, Y. Karmiotis, and C. Christofides *J. Appl. Phys.* **82**, 6220 (1997).
- [35] A. Salnick, C. Jean, and A. Mandelis *Sol. State Elec.* **41**, 591 (1997).
- [36] A. Mandelis, M. Munidasa, and A. Othonos, *IEEE J. Quant. Electron.* **29**, 1498 (1993).
- [37] A. Othonos, M. Nestoros, D. Palmeiro C. Christofides, R.S Bes, and J. P. Traverse *Sol. Ener. Mat. and Solar Cells* **51**, 171 (1997).
- [38] M. Nestoros, A. G. Lliorente, A. Othonos C. Christofides and J. M Martinez-Duart, *J. Appl. Phys.* **82**, 6215 (1997).
- [39] A. Othonos, A. Mandelis, M. Nestoros and C. Christofides, *Opt. Eng.* **36**, 400-407 (1997).
- [40] A. Mandelis, K. Mcallister, C. Christofides and C. Xenofontos, *Archaeometry* **37**, 257 (1992).

Στην Εικ. 2.1 (α) φαίνεται το ενεργειακό φάσμα ενός κρυστάλλου, όπου η τελευταία επωκτισμένη ζώνη (μη καταλημμένη) έχει καταληφθεί πλήρως από τα ηλεκτρόνια. Ένας τέτοιος κρυστάλλος ονομάζεται απορροητικός, γιατί τα ηλεκτρόνια του με την παρουσία ενός ηλεκτρικού πεδίου, μπορούν να καταλάβουν τις ενεργειακές καταστάσεις της επόμενης ζώνης, που ενεργειακά είναι αρκετά μικρά, λόγω του μεγάλου ενεργειακού χάσματος ( $E_g \sim 5eV$ ). Στην δεύτερη περίπτωση (Εικ. 2.1 (β)), ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο μπορεί εύκολα να επιταχύνει τα ηλεκτρόνια της ημικαταλημμένης ζώνης, τα οποία θα καταλάβουν τις ελεύθερες επόμενες μη καταλημμένες καταστάσεις της ζώνης. Στην περίπτωση αυτή το υλικό είναι αγώγιμο. Η διαφορά που παρουσιάζει στην αγωγιμότητα ένας μονωτής και ένας αγώγιμος δεν οφείλεται στην απουσία ηλεκτρονίων σθένους στον πρώτο αλλά στους αφυπνιστικούς περιορισμούς που επιβάλλει η απαγορευτική αρχή του Pauli : όταν μια ενεργειακή ζώνη είναι γεμάτη, κανένα ηλεκτρόνιο της ζώνης δεν μπορεί να αλλάξει την ενεργειακή του κατάσταση, αφού όλες οι άλλες ενεργειακές καταστάσεις είναι καταλημμένες και η απαγορευτική αρχή δεν επιτρέπει την διπλή κατάληψη.

Η περίπτωση ενός ημιαγωγού είναι η μέση περίπτωση ενός μονωτή με αρκετά μικρό



## Κεφάλαιο 2

### Στοιχεία από την Φυσική των Ημιαγωγών.

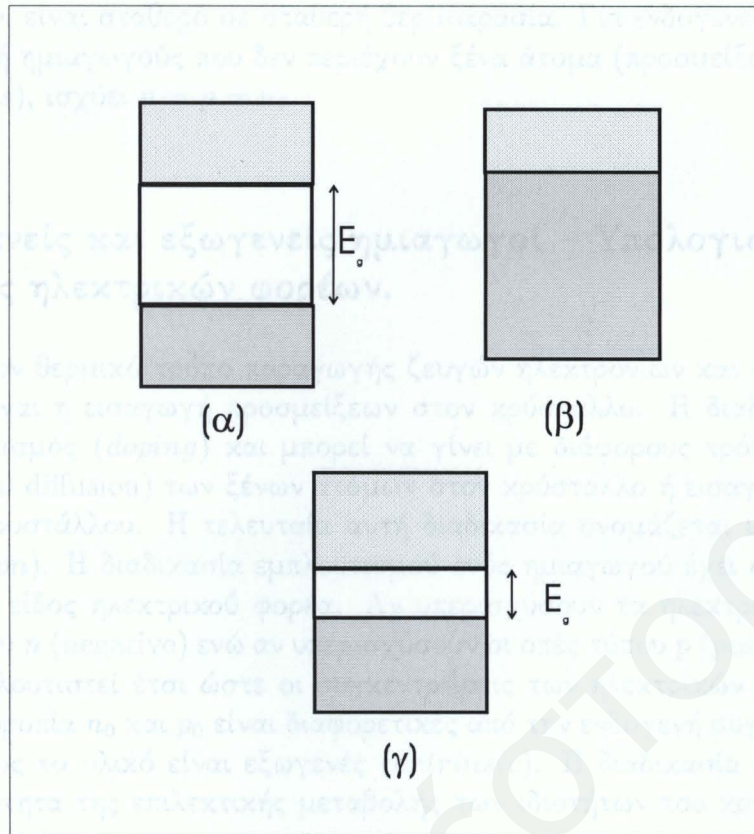
#### 2.1 Διάκριση των κρυστάλλων σε αγωγούς, μονωτές και ημιαγωγούς.

Όπως γνωρίζουμε από την ατομική φυσική, τα απομονωμένα άτομα έχουν διάκριτο ενεργειακό φάσμα. Καθώς τα άτομα πλησιάζουν για να σχηματίσουν ένα στερεό, οι διάκριτες ενεργειακές στάθμες πλησιάζουν αρκετά κοντά και σχηματίζουν ενεργειακές ζώνες (όπου η ενέργεια παίρνει συνεχείς τιμές) οι οποίες χωρίζονται από απαγορευμένες ενεργειακά περιοχές, τα ενεργειακά χάσματα. Η δημιουργία των ενεργειακών ζωνών και χασμάτων οφείλεται στην αλληλεπίδραση των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων που είναι χαλαρά συνδεδεμένα με τα άτομα (ηλεκτρόνια σθένους) με το περιοδικό δυναμικό που δημιουργούν οι βαριές ιοντικές καρδιές, που βρίσκονται περιοδικά διατεταγμένες στις πλεγματικές θέσεις. Το θεώρημα του Bloch [1] είναι άμεσο αποτέλεσμα της περιοδικότητας του κρυστάλλου και περιγράφει τις οπές και τα ηλεκτρόνια με κυματοσυναρτήσεις, απλωμένες στον χώρο, που καθορίζονται από την κρυσταλλική ορμή. Η αγωγιμότητα των διαφόρων υλικών μπορεί να εξηγηθεί με την κβαντική θεωρία. Η απαγορευτική αρχή του *Pauli* και η ταινιωτή υφή του ενεργειακού φάσματος είναι τα βασικά στοιχεία της εξήγησης [2].

Στην Εικ. 2.1 (α) έχουμε το ενεργειακό φάσμα ενός κρυστάλλου, όπου η τελευταία εποικισμένη ζώνη (διαγραμμισμένη) έχει καταληφθεί πλήρως από τα ηλεκτρόνια. Ένας τέτοιος κρύσταλλος είναι υποχρεωτικά μονωτής, γιατί τα ηλεκτρόνια του με την παρουσία ενός ηλεκτρικού πεδίου δεν μπορούν να καταλάβουν τις ενεργειακές καταστάσεις της επόμενης ζώνης, που ενεργειακά είναι αρκετά μακριά, λόγω του μεγάλου ενεργειακού χάσματος (π.χ  $4-5\text{eV}$ ). Στην δεύτερη περίπτωση (Εικ. 2.1 (β)), ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο μπορεί εύκολα να επιταχύνει τα ηλεκτρόνια της ημικατειλημμένης ζώνης, τα οποία θα καταλάβουν τις αμέσως επόμενες μη κατειλημμένες καταστάσεις της ζώνης. Στην περίπτωση αυτή το υλικό είναι αγωγός. Η διαφορά που παρουσιάζει στην αγωγιμότητα ένας μονωτής και ένας αγωγός δεν οφείλεται στην απουσία ηλεκτρονίων σθένους στον πρώτο αλλά στους ασφυκτικούς περιορισμούς που επιβάλλει η απαγορευτική αρχή του *Pauli*: όταν μια ενεργειακή ζώνη είναι γεμάτη, κανένα ηλεκτρόνιο της ζώνης δεν μπορεί να αλλάξει την ενεργειακή του κατάσταση, αφού όλες οι άλλες ενεργειακές καταστάσεις είναι κατηλειμμένες και η απαγορευτική αρχή δεν επιτρέπει την διπλή κατάληψη.

Η περίπτωση ενός ημιαγωγού είναι η ειδική περίπτωση ενός μονωτή με αρκετά μικρό





**Εικόνα 2.1:** Η διάκριση των χρυστάλλων σε μονωτές, αγωγούς και ημιαγωγούς.

ενεργειακό χάσμα. Για παράδειγμα στο πυρίτιο ( $Si$ ) το ενεργειακό χάσμα σε θερμοκρασία δωματίου είναι γύρω στο  $1.1eV$ . Σε θερμοκρασία  $0 K$  ο ημιαγωγός συμπεριφέρεται ως μονωτής, γιατί η θερμική ενέργεια ενός ηλεκτρονίου είναι μηδέν και επομένως δεν μπορεί να μεταβεί στην ζώνη αγωγιμότητας. Η πιθανότητα μετάβασης στην ζώνη αγωγιμότητας είναι ανάλογη της ποσότητας :

$$\exp(-Eg/K_B T) \quad (2.1)$$

όπου  $Eg$  το ενεργειακό χάσμα του υλικού,  $T$  η θερμοκρασία του και  $K_B$  η σταθερά του Boltzmann. Συνεπώς με την αύξηση της θερμοκρασίας τα ηλεκτρόνια από την χαμηλότερη ενεργειακή ζώνη (ζώνη σθένους) μπορούν να μεταβούν στην επόμενη ζώνη (ζώνη αγωγιμότητας) που έχει ελεύθερες ενεργειακές καταστάσεις. Έτσι με την εφαρμογή ενός ηλεκτρικού πεδίου τα ηλεκτρόνια επιταχύνονται και έχουμε ηλεκτρικό ρεύμα. Η περίπτωση ενός ημιαγωγού φαίνεται στην Εικ. 2.1 (γ). Ένα ηλεκτρόνιο που εγκαταλείπει την ζώνη σθένους και μεταβαίνει στην ζώνη αγωγιμότητας, αφήνει στην ζώνη σθένους μια κενή θέση (οπή). Η οπή αυτή έχει θετικό φορτίο, κατ' απόλυτη τιμή ίσο με αυτό του φορτίου του ηλεκτρονίου. Ένα ηλεκτρόνιο της ζώνης σθένους μπορεί να καταλάβει τη θέση της οπής, αφήνοντας πίσω του μια οπή στην θέση που βρισκόταν προηγουμένως. Η φορά της κίνησης των οπών στη ζώνη σθένους είναι αντίθετη αυτής των ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας οπότε προσφέρουν και οι δυο στο ηλεκτρικό ρεύμα κατά την ίδια φορά (συμβατική). Έτσι τελικά η αγωγιμότητα ενός ημιαγωγού οφείλεται στην κίνηση των οπών και των ηλεκτρονίων. Το γινόμενο της συγκέντρωσης  $p$  των οπών και της συγκέντρωση  $n$



των ηλεκτρονίων, είναι σταθερό σε σταθερή θερμοκρασία. Για ενδογενείς (*intrinsic*) ημιαγωγούς, δηλαδή ημιαγωγούς που δεν περιέχουν ξένα άτομα (προσμείξεις) ή πλεγματικές ατέλειες (*defects*), ισχύει  $n = p = n_i$ .

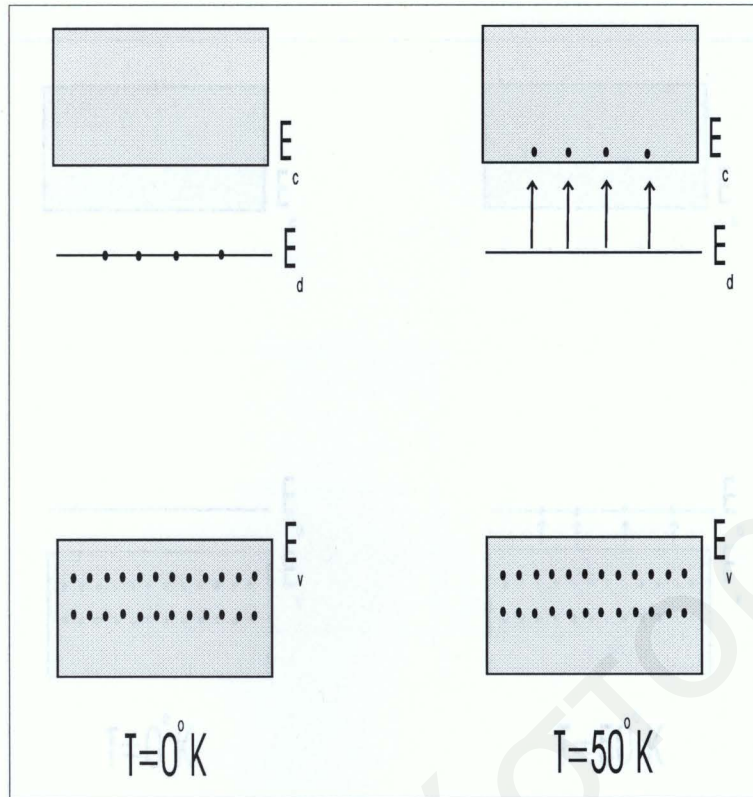
## 2.2 Ενδογενείς και εξωγενείς ημιαγωγοί – Υπολογισμός της πυκνότητας ηλεκτρικών φορέων.

Εκτός από τον θερμικό τρόπο παραγωγής ζευγών ηλεκτρονίων και οπών ( $h - e$ ) ένας άλλος τρόπος είναι η εισαγωγή προσμείξεων στον κρύσταλλο. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται εμπλουτισμός (*doping*) και μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους, π.χ θερμική διάχυση (*thermal diffusion*) των ξένων ατόμων στον κρύσταλλο ή εισαγωγή τους με βομβαρδισμό του κρυστάλλου. Η τελευταία αυτή διαδικασία ονομάζεται ιοντική εμφύτευση (*ion implantation*). Η διαδικασία εμπλουτισμού ενός ημιαγωγού έχει ως αποτέλεσμα να υπερισχύσει ένα είδος ηλεκτρικού φορέα. Αν υπερισχύσουν τα ηλεκτρόνια ο ημιαγωγός ονομάζεται τύπου  $n$  (*negative*) ενώ αν υπερισχύσουν οι οπές τύπου  $p$  (*positive*). Όταν ένας κρύσταλλος εμπλουτιστεί έτσι ώστε οι συγκεντρώσεις των ηλεκτρικών φορέων στην θερμοδυναμική ισορροπία  $n_0$  και  $p_0$  είναι διαφορετικές από την ενδογενή συγκέντρωση φορέων  $n_i$ , τότε λέμε πως το υλικό είναι εξωγενές (*extrinsic*). Η διαδικασία του εμπλουτισμού δίνει την δυνατότητα της επιλεκτικής μεταβολής των ιδιοτήτων του κρυστάλλου, π.χ της ηλεκτρικής αγωγιμότητας του.

Σαν παράδειγμα ας πάρουμε το Si το οποίο είναι τετρασθενές, και είναι κρυσταλλωμένο στή δομή του διαμαντιού [3]. Κάθε άτομο έχει τέσσερις ισαπέχοντες πλησιέστερους γείτονες ως αποτέλεσμα του ομοιοπολικού δεσμού που δένει τα ηλεκτρόνια σθένους των δομών αυτών. Ας υποθέσουμε πως σε ένα κρύσταλλο πυριτίου ( $Si$ ) μερικά από τα άτομα του έχουν αντικατασταθεί από πεντασθενή άτομα  $As$ . Είναι φανερό ότι κάθε ένα από τα τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους του  $As$  θα μετέχουν σε ένα δεσμό, ενώ το πέμπτο θα είναι χαλαρά συνδεδεμένο και θα αρκεί η προσφορά πολύ μικρής ενέργειας, για να αποσπαστεί από το μητρικό άτομο και να γίνει ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας. Στην εικόνα των ενεργειακών ζωνών, τα άτομα του  $As$  δημιουργούν μια ενεργειακή στάθμη (στάθμη δοτών) κοντά στην ζώνη αγωγιμότητας (απέχει  $0.05 \text{ eV}$ ), η οποία μπορεί να προσφέρει τα πέμπτα ηλεκτρόνια του  $As$  στην ζώνη αγωγιμότητας. Η αθρόα παροχή ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση των οπών. Έτσι τα ηλεκτρόνια αποτελούν φορείς πλειοψηφίας και λέμε πως ο ημιαγωγός είναι τύπου  $n$ .

Αν εισάξουμε στο  $Si$  άτομα  $B$  που είναι τρισθενή, τότε στο δεσμό που θα κάνει με τα άτομα  $Si$  θα υπάρχει μια οπή, η οποία μπορεί να συμπληρωθεί από κάποιο γειτονικό ηλεκτρόνιο σθένους που θα αφήσει με την σειρά του μια οπή στην θέση του. Τα άτομα του  $B$  δημιουργούν μια ενεργειακή στάθμη κοντά στην ζώνη σθένους, η οποία μπορεί να προσλάβει ηλεκτρόνια. Σε αυτή την περίπτωση ο ημιαγωγός είναι τύπου  $p$  και οι οπές αποτελούν τους φορείς πλειοψηφίας. Οι περιπτώσεις των ημιαγωγών  $n$  και  $p$  τύπου φαίνονται στις Εικ. 2.2 και 2.3 αντίστοιχα. Επειδή οι στάθμες των προσμείξεων βρίσκονται πολύ κοντά στην ζώνη αγωγιμότητας ή σθένους, μια μικρή θερμική διαταραχή είναι ικανή





Εικόνα 2.2: Η περίπτωση του ημιαγωγού τύπου n.

να δώσει την απαραίτητη ενέργεια στους φορείς να υπερπηδήσουν το ενεργειακό χάσμα. Η συχέντρωση των ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας στην ισορροπία δίνεται από την σχέση [4] :

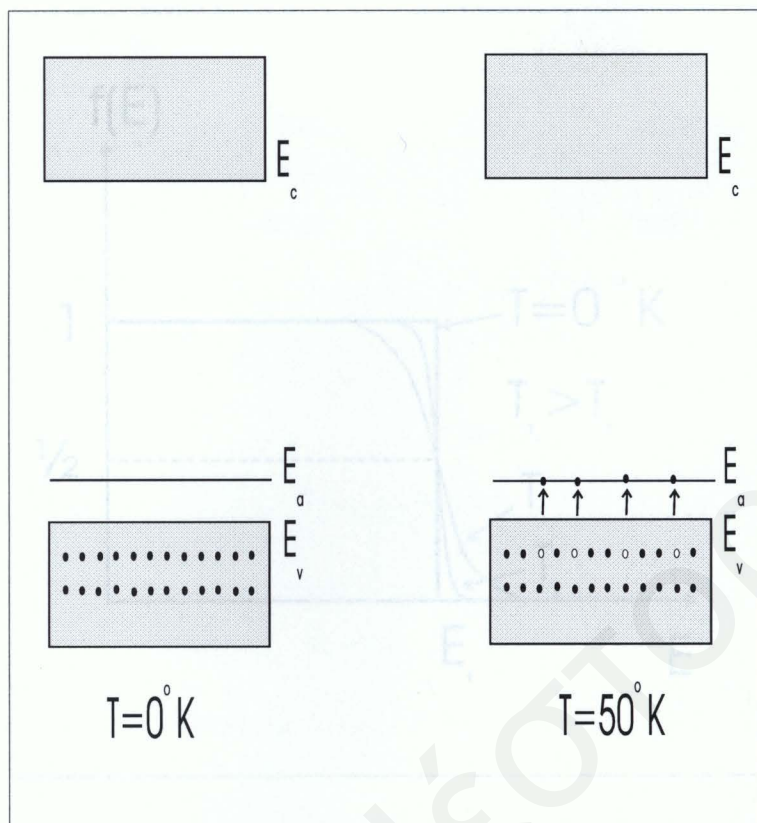
$$n_o = \int_{E_c}^{\infty} f(E)N(E)dE \quad (2.2)$$

όπου  $f(E)$  η συνάρτηση *Fermi*, που εκφράζει την πιθανότητα κατάληψης μιας διαθέσιμης μονοσωματιδιακής κατάστασης ενέργειας  $E$  σε θερμοκρασία  $T$ , και  $N(E)d(E)$  είναι η πυκνότητα καταστάσεων της ενέργειας στο ενεργειακό διάστημα από  $E$  έως  $E + dE$ . Με  $E_c$  συμβολίζουμε την ενέργεια του άκρου της ζώνης αγωγιμότητας, ενώ με  $E_v$  αυτήν του άκρου της ζώνης σθένους. Η πυκνότητα των οπών στην ζώνη αγωγιμότητας δίνεται από παρόμοια σχέση. Η συνάρτηση  $f(E)$  δίνεται από την σχέση :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E-E_F}{K_B T}\right)} \quad (2.3)$$

Η συμπεριφορά της ως συνάρτηση της θερμοκρασίας φαίνεται στην Ειχ. 2.4. Η τιμή της συνάρτησης για  $E = E_F$  είναι  $f(E_F) = 1/2$ , δηλαδή μια ενεργειακή κατάσταση στη στάθμη *Fermi* έχει πιθανότητα κατάληψης  $1/2$ . Σε θερμοκρασία  $T = 0K$  κάθε ενεργειακή κατάσταση μέχρι την ενέργεια *Fermi* είναι κατηλειμμένη. Για  $T = T_1$  υπάρχει μια πιθανότητα  $f(E)$  για καταστάσεις με ενέργεια μεγαλύτερη από την  $E_F$  να είναι καταλημμένες και μια αντίστοιχη πιθανότητα  $[1 - f(E)]$  για καταστάσεις κάτω από την  $E_F$  να είναι άδειες. Η μεταβολή της συνάρτησης  $f(E)$  είναι επίσης συμμετρική γύρω από την  $E_F$ . Η στάθμη *Fermi* σε ένα ενδογενή ημιαγωγό βρίσκεται στην μέση περίπου του ενεργειακού





Εικόνα 2.3: Η περίπτωση του ημιαγωγού τύπου p.

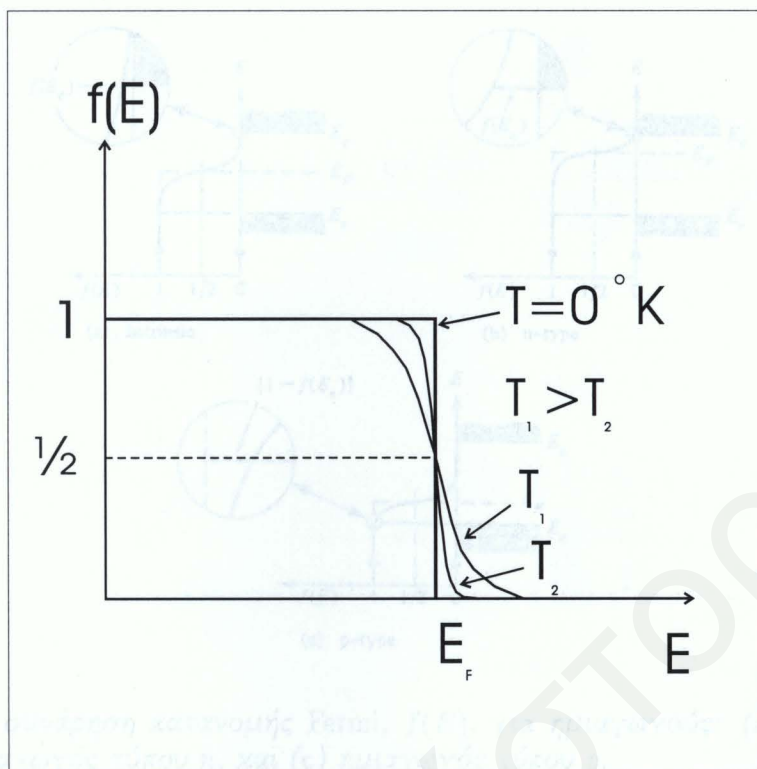
χάσματος για  $T = 0K$ . Λόγω της συμμετρίας της μεταβολής της  $f(E)$  γύρω από την  $E_F$ , η ουρά της κατανομής  $f(E)$  που εκτείνεται στην ζώνη αγωγιμότητας είναι συμμετρική με την ουρά της κατανομής πιθανότητας για τις οπές,  $[1 - f(E)]$ , στην ζώνη σθένους. Σε θερμοκρασία δωματίου οι τιμές της  $f(E)$  για τις ενέργειες  $E_c$  και  $E_v$  του άκρου της ζώνης αγωγιμότητας και σθένους αντίστοιχα είναι πολύ μικρές σε ένα ενδογενή ημιαγωγό. Σε ένα n τύπου ημιαγωγό όπου υπάρχει μεγάλη συγκέντρωση ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας, η συνάρτηση Fermi θα είναι μετατοπισμένη προς την ζώνη αγωγιμότητας και η στάθμη  $E_F$  θα βρίσκεται ψηλότερα από την τιμή  $E_i$  που αντιστοιχεί σε ενδογενή ημιαγωγό. Αντίστροφα σε ένα p τύπου ημιαγωγό η στάθμη  $E_F$  θα βρίσκεται χαμηλότερα από την  $E_i$ . Καθώς η  $f(E)$  κινείται προς την ζώνη αγωγιμότητας (για ημιαγωγό τύπου n) η τιμή της για κάθε ενεργειακή στάθμη μέσα στη ζώνη αυξάνει με αποτέλεσμα την αύξηση της συγκέντρωσης των ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας. Αντίστοιχα συμβαίνουν για τους p τύπου ημιαγωγούς. Τα πιο πάνω φαίνονται παραστατικά στην Εικ. 2.5 [4].

Τελικά ο υπολογισμός μέσω της Εξ. 2.2 δίνει για το  $n_0$  :

$$n_0 = N_c \exp \frac{-(E_c - E_F)}{K_B T} \quad (2.4)$$

όπου η ενεργός πυκνότητα καταστάσεων της ζώνης αγωγιμότητας είναι :

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.5)$$



**Εικόνα 2.4:** Η πιθανότητα κατάληψης μιας μονοσωματιδιακής φερμιονικής κατάστασης  $f(E)$ , ως συνάρτηση της ενέργειας, για διάφορες θερμοκρασίες.

ενώ για τις οπές

$$p_0 = N_v \exp \frac{-(E_F - E_v)}{K_B T} \quad (2.6)$$

όπου η ενεργός πυκνότητα καταστάσεων της ζώνης σθένους είναι :

$$N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_p^* K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2.7)$$

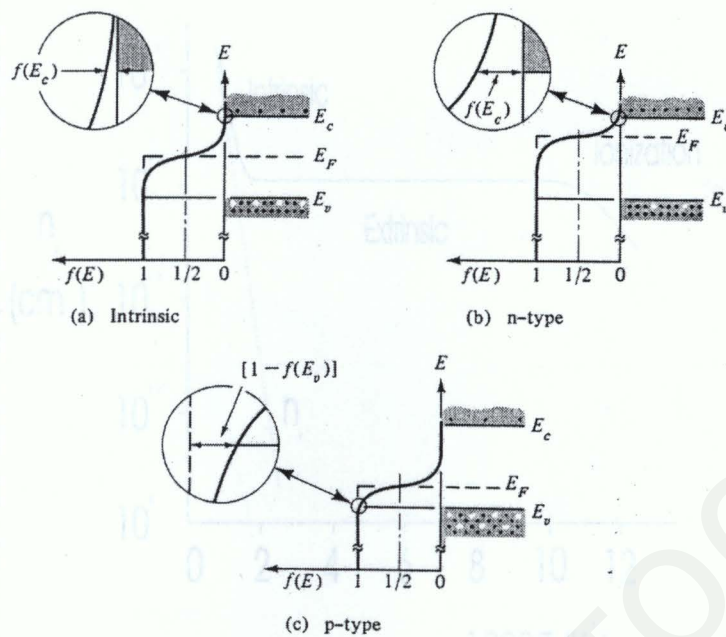
Στις πιο πάνω σχέσεις  $m_n^*$  και  $m_p^*$  είναι οι ενεργές μάζες [5] των ηλεκτρονίων και των οπών αντίστοιχα και  $h$  η σταθερά του Planck.

Οι πιο πάνω σχέσεις ισχύουν είτε το υλικό είναι ενδογενές είτε είναι εμπλουτισμένο με προσμίξεις. Οι τιμές των συγκεντρώσεων ηλεκτρονίων και οπών,  $n_i$  και  $p_i$  αντίστοιχα, στην ενδογενή περίπτωση δίνονται από τις πιο πάνω σχέσεις αντικαθιστώντας στην θέση της  $E_F$  την  $E_i$ . Η τιμή του γινομένου  $n_0$  και  $p_0$  στην ισορροπία είναι σταθερή για δεδομένο υλικό και δεδομένη θερμοκρασία και δίνεται από την σχέση :

$$n_0 p_0 = n_i^2 = N_c N_v \exp \left( \frac{-E_g}{K_B T} \right) \quad (2.8)$$

Η εξάρτηση της πυκνότητας φορέων στην ενδογενή περίπτωση από την θερμοκρασία προέρχεται κυρίως από τον εκθετικό όρο της προηγούμενης εξίσωσης.



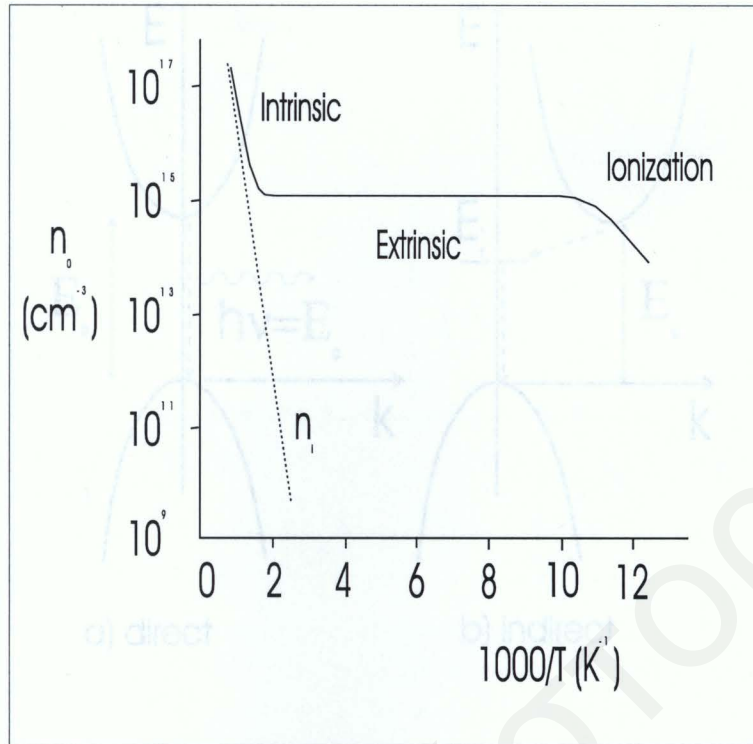


**Εικόνα 2.5:** Η συνάρτηση κατανομής Fermi,  $f(E)$ , για ημιαγωγούς: (α) ενδογενής ημιαγωγός, (β) ημιαγωγός τύπου  $n$ , και (γ) ημιαγωγός τύπου  $p$ .

Γενικά σε ένα εμπλουτισμένο ημιαγωγό η συγκέντρωση φορέων μεταβάλλεται με την θερμοκρασία όπως στην Εικ. 2.6 . Με την αύξηση της θερμοκρασίας ( μέχρι 100 K) τα ηλεκτρόνια των σταθμών των δοτών ionίζονται και μεταβαίνουν στην ζώνη αγωγιμότητας. Η περιοχή αυτή ονομάζεται περιοχή ionισμού. Με την περαιτέρω αύξηση της θερμοκρασίας η συγκέντρωση των φορέων  $n_0$  μένει σταθερή και ίση με αυτήν των δοτών  $N_d$ . Η περιοχή αυτή ονομάζεται εξωγενής. Τελικά μετά από κάποια θερμοκρασία αρχίζει η ενδογενής συνεισφορά όπου τα ηλεκτρόνια της ζώνης σθένους αποκτούν αρκετή ενέργεια ώστε να μεταβούν στην ζώνη αγωγιμότητας.

### 2.3 Επιπλέον φορείς σε ημιαγωγούς – Οπτική απορρόφηση και επανασύνδεση

Οι περισσότερες ημιαγωγικές συσκευές εργάζονται με την δημιουργία ηλεκτρικών φορέων επιπλέον από αυτούς που επιβάλλει η θερμοδυναμική ισορροπία. Αυτοί οι επιπλέον φορείς μπορούν δημιουργηθούν με διάφορους μηχανισμούς: ένας από αυτούς είναι η οπτική απορρόφηση που θα εξετάσουμε εδώ. Μια σημαντική τεχνική προσδιορισμού του ενεργειακού χάσματος ενός ημιαγωγού είναι αυτή της απορρόφησης των φωτονίων που προσπίπτουν στο υλικό. Εφόσον φωτόνια με ενέργεια μεγαλύτερη από το ενεργειακό χάσμα απορροφούνται ενώ αυτά με μικρότερη ενέργεια το διαπερνούν, η μέθοδος αυτή είναι αρκετά ακριβής. Ένα φωτόνιο με ενέργεια  $h\nu \geq E_g$  δίνει την ενέργεια του σε ένα ηλεκτρόνιο της ζώνης σθένους που μεταβαίνει στην ζώνη αγωγιμότητας που περιέχει πληθώρα άδειων ενεργειακών καταστάσεων. Το διεγερμένο ηλεκτρόνιο αλληλεπιδρά με το πλέγμα μέσω



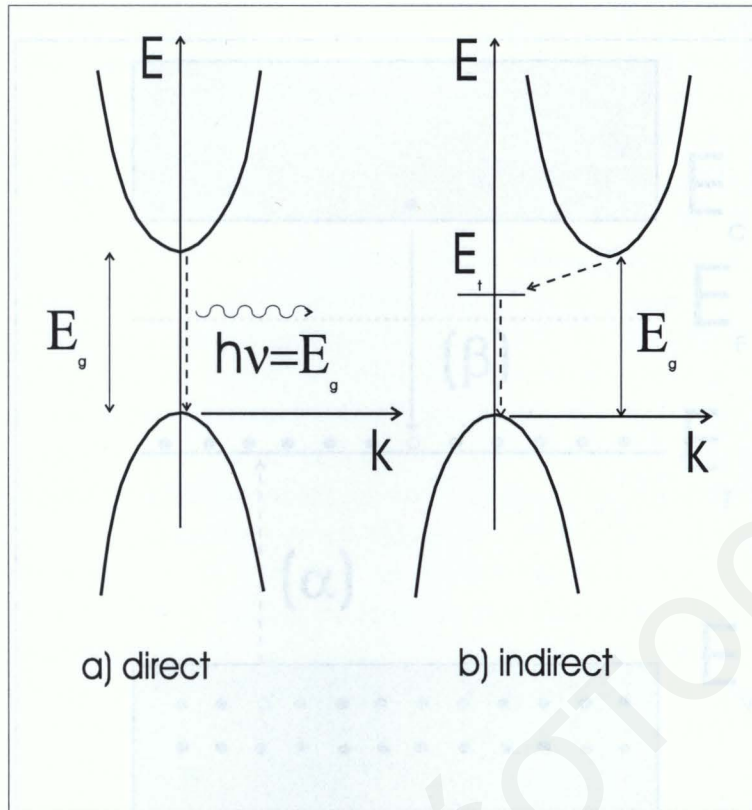
**Εικόνα 2.6:** Η συσχέτιση ηλεκτρικών φορέων ως συνάρτηση του αντιστρόφου της θερμοκρασίας στην περίπτωση Si εμπλουτισμένου με δόση δοτών  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

φαινομένων σκέδασης με τα φωνόνια μέχρις ότου η θερμική του ενέργεια γίνει ίση με αυτή των άλλων ηλεκτρονίων της ζώνης και χαλαρώνει στο άκρο της ζώνης αγωγιμότητας. Με αυτό τον τρόπο αποδίδει στο πλέγμα ενέργεια  $h\nu - E_g$ . Το διεγερμένο ηλεκτρόνιο στην ζώνη αγωγιμότητας και η οπή στην ζώνη σθένους είναι επιπλέον φορείς από αυτούς που επιβάλλει η θερμοδυναμική ισορροπία και γι' αυτό πρέπει να επανασυνδεθούν. Προτού επανασυνδεθούν, οι επιπλέον φορείς μπορούν να προσφέρουν στην αγωγιμότητα. Η διαδικασία της επανασύνδεσης στους ημιαγωγούς μπορεί να είναι αρκετά περίπλοκη καθώς εξαρτάται από πολλούς παράγοντες όπως το ενεργειακό του χάσμα (άμεσο ή έμμεσο) [6], την παρουσία προσμείξεων και πλεγματικών ατελειών, από τις ενεργειακές καταστάσεις της επιφάνειας κ.λ.π.

### 2.3.1 Επανασύνδεση σε ημιαγωγούς με άμεσο ενεργειακό χάσμα.

Ημιαγωγοί με άμεσο ενεργειακό χάσμα είναι αυτοί στους οποίους το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας βρίσκεται ακριβώς απέναντι από το μέγιστο της ζώνης σθένους, σε ένα διάγραμμα ενέργειας-χρυσταλλικού κυματοδιανύσματος [Ειχ. 2.7]. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι το  $GaAs$ . Η ενέργεια  $E_g$  που αποδεσμεύεται με την άμεση επανασύνδεση μεταφέρεται από φωτόνιο και δεν αποτελεί πηγή θερμότητας για το πλέγμα. Ο χρόνος επανασύνδεσης καθορίζει τον ρυθμό με τον οποίο φθίνει ο πληθυσμός των επιπλέον φορέων και είναι αντιστρόφως ανάλογος της πιθανότητας επανασύνδεσης. Η διαφορική εξίσωση [7] που περιγράφει την χρονική εξέλιξη των επιπλέον φορέων περιέχει τον όρο δημιουργίας και





**Εικόνα 2.7:** Επανασύνδεση σε ημιαγωγό άμεσου ενεργειακού χάσματος με εκπομπή φωτονίου, και σε ημιαγωγό έμμεσο χάσματος, μέσω ενεργειακής στάθμης ατέλειας.

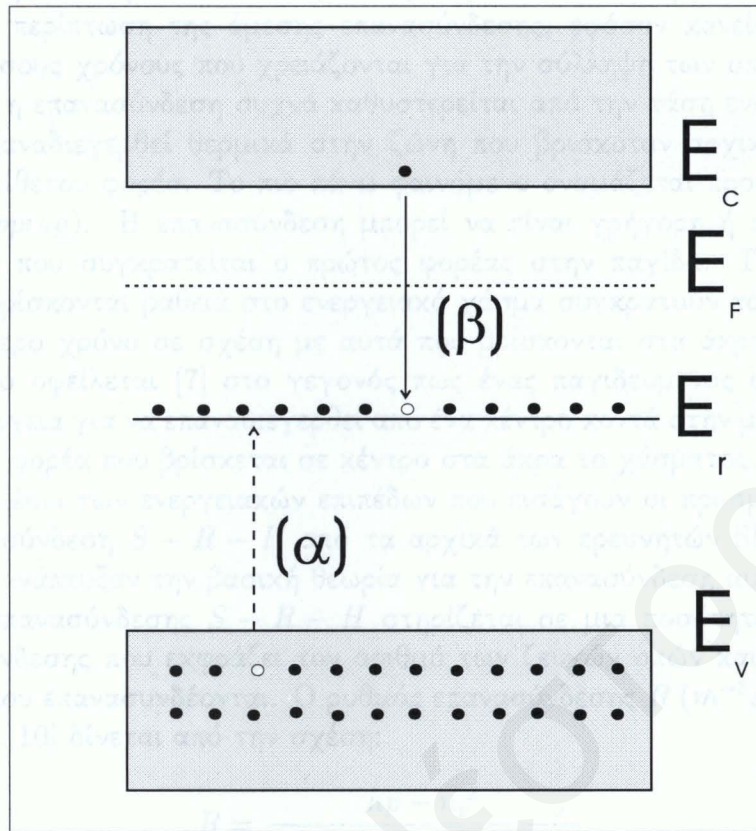
τον όρο επανασύνδεσης των επιπλέον φορέων και είναι γενικά αρκετά δύσκολο να λυθεί, όμως επιδέχεται σημαντικών απλοποιήσεων στην περίπτωση που η πυκνότητα των επιπλέον φορέων είναι αρκετά μικρή σε σχέση με την πυκνότητα φορέων στην θερμοδυναμική ισορροπία. Για παράδειγμα σε ένα ημιαγωγό  $p$  τύπου τα επιπλέον ηλεκτρόνια επανασυνδέονται με σταθερά χρόνου,

$$\tau_n = (a_r p_0)^{-1} \quad (2.9)$$

όπου  $a_r$  είναι μια σταθερά αναλογίας για την επανασύνδεση. Επειδή το αποτέλεσμα αφορά τους φορείς μειοψηφίας ο χρόνος ζωής ονομάζεται χρόνος ζωής των φορέων μειοψηφίας.

### 2.3.2 Επανασύνδεση σε ημιαγωγούς με έμμεσο ενεργειακό χάσμα.

Η δεύτερη αυτή περίπτωση μας ενδιαφέρει ιδιαίτερα μια και οι ημιαγωγοί που εξετάζουμε σε αυτή την εργασία,  $Si$  και  $Ge$ , ανήκουν σε αυτή την κατηγορία. Στους ημιαγωγούς έμμεσο χάσματος τα ακρότατα της ζώνης σθένους και αγωγιμότητας δεν βρίσκονται απέναντι στο διάγραμμα ενέργειας - κρυσταλλικής ορμής για τούτο είναι απαραίτητη η παρουσία ενός φωτονίου για να διατηρηθεί η κρυσταλλική ορμή [Ειχ. 2.7]. Στην πιο πάνω κατηγορία ημιαγωγών η πιθανότητα άμεσης επανασύνδεσης  $e - h$  είναι πολύ μικρή. Χαρακτηριστικά για το ενδογενές πυρίτιο, σε θερμοκρασία δωματίου ο χρόνος επανασύνδεσης είναι 4.6 ώρες ενώ για βαριά εμπλουτισμένα δείγματα 2500  $\mu s$  [8].



**Εικόνα 2.8:** Διαδικασία σύλληψης σε ένα κέντρο επανασύνδεσης: (α) σύλληψη οπής σε γεμάτο ενεργειακό κέντρο, (β) σύλληψη ηλεκτρονίου σε άδειο ενεργειακό κέντρο.

Η μεγάλη πλειοψηφία γεγονότων επανασύνδεσης συμβαίνει μέσω των επιπέδων που εισάγουν οι προσμειξίς και τα οποία βρίσκονται μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Η ενέργεια που απελευθερώνεται με αυτό τον μηχανισμό δίνεται στο πλέγμα ως θερμότητα. Κάθε είδος πρόσμειξης ή πλεγματικής ατέλειας μπορεί να λειτουργήσει ως κέντρο επανασύνδεσης αν μπορεί να έχει κάποιο είδος φορέα και να συλλάβει τον αντίθετο τύπο φορέα, εξαυλώνοντας έτσι το ζεύγος  $e - h$ . Στην Εικ. 2.8 παρουσιάζεται μια ενεργειακή στάθμη επανασύνδεσης,  $E_r$ , με ενέργεια μικρότερη της  $E_F$  στην ισορροπία, και επομένως γεμάτο με  $e$ . Όταν δημιουργηθούν επιπλέον οπές και ηλεκτρόνια στο υλικό κάθε ζεύγος  $e - h$  μπορεί να επανασυνδεθεί στη στάθμη με ενέργεια  $E_r$  σε δυο στάδια [7]: (α) σύλληψη οπής και (β) σύλληψη ηλεκτρονίου. Εφόσον τα κέντρα επανασύνδεσης στην Εικ. 2.8 είναι γεμάτα στην ισορροπία, το πρώτο γεγονός της επανασύνδεσης είναι η σύλληψη οπής. Το γεγονός αυτό είναι ισοδύναμο με ένα από τα ηλεκτρόνια της  $E_r$  να πέφτει στην ζώνη σθένους, αφήνοντας πίσω μια άδεια θέση στο κέντρο επανασύνδεσης. Έτσι στην διαδικασία (α) αποδίδεται θερμότητα στο πλέγμα. Παρόμοια αποδίδεται ενέργεια όταν ένα ηλεκτρόνιο πέφτει από την ζώνη αγωγιμότητας στην άδεια θέση της  $E_r$ . Όταν και τα δυο αυτά γεγονότα συμβούν, το κέντρο επανασύνδεσης βρίσκεται στην αρχική του κατάσταση, αλλά ένα ζεύγος  $e - h$  λείπει. Έτσι μια επανασύνδεση  $e - h$  έχει συμβεί και το κέντρο επανασύνδεσης είναι έτοιμο για το επόμενο συμβάν επανασύνδεσης.



Ο χρόνος ζωής που προκύπτει από μια έμμεση επανασύνδεση είναι κάπως πίο πολύπλοκος από την περίπτωση της άμεσης επανασύνδεσης, εφόσον κανείς πρέπει να λάβει υπόψην τους άνισους χρόνους που χρειάζονται για την σύλληψη των οπών και των ηλεκτρονίων. Ειδικά η επανασύνδεση συχνά καθυστερείται από την τάση ενός φορέα που έχει συλληφθεί, να ξαναδιεγερθεί θερμικά στην ζώνη που βρισκόταν αρχικά, πριν συμβεί η σύλληψη του αντίθετου φορέα. Το πιο πάνω φαινόμενο ονομάζεται προσωρινή παγίδευση (*temporary trapping*). Η επανασύνδεση μπορεί να είναι γρήγορη ή αργή, ανάλογα με τον μέσο χρόνο που συγχρατείται ο πρώτος φορέας στην παγίδα. Γενικά οι στάθμες "παγίδας" που βρίσκονται βαθειά στο ενεργειακό χάσμα συγχρατούν τους παγιδευμένους φορείς περισσότερο χρόνο σε σχέση με αυτά που βρίσκονται στα άκρα του ενεργειακού χάσματος. Αυτό οφείλεται [7] στο γεγονός πως ένας παγιδευμένος φορέας χρειάζεται περισσότερη ενέργεια για να επαναδιεγερθεί από ένα κέντρο κοντά στην μέση του χάσματος σε σχέση με ένα φορέα που βρίσκεται σε κέντρο στα άκρα το χάσματος. Η περιγραφή της επανασύνδεσης μέσω των ενεργειακών επιπέδων που εισάγουν οι προσμείξεις αναφέρεται συχνά ως επανασύνδεση  $S - R - H$  από τα αρχικά των ερευνητών Shockley, Read και Hall [9, 10] που ανέπτυξαν την βασική θεωρία για την επανασύνδεση αυτού του τύπου. Η περιγραφή της επανασύνδεσης  $S - R - H$  στηρίζεται σε μια ποσότητα που ονομάζεται ρυθμός επανασύνδεσης που εκφράζει τον αριθμό των ζευγών οπών και ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου, που επανασυνδέονται. Ο ρυθμός επανασύνδεσης  $R$  ( $m^{-3}s^{-1}$ ) στην στάσιμη κατάσταση [7, 9, 10] δίνεται από την σχέση:

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (2.10)$$

όπου

$$\tau_n = \frac{1}{c_n N_T} \quad (2.11)$$

και

$$\tau_p = \frac{1}{c_p N_T} \quad (2.12)$$

είναι οι χρόνοι ζωής των ηλεκτρονίων μειονότητας και οπών μειονότητας αντίστοιχα. Οι σταθερές  $c_n$  και  $c_p$  εξαρτώνται από την ενεργό διατομή της αντίστοιχης διαδικασίας σύλληψης και την θερμική ενέργεια των φορέων [7, 9, 10, 11]. Οι ποσότητες  $n_1$  και  $p_1$  είναι αντίστοιχα οι συγκεντρώσεις των  $e$  και  $h$  που θα ήταν παρούσες στην περίπτωση που η στάθμη  $E_f$  συνέπιπτε με την ενεργειακή στάθμη των παγίδων. Παρατηρούμε πως οι χρόνοι ζωής είναι αντιστρόφως ανάλογοι της πυκνότητας των καταστάσεων παγίδας  $N_T$  και δεν εξαρτώνται ρητά από τον αριθμό των προσμείξεων. Στην περίπτωση του πυριτίου έχει παρατηρηθεί πειραματικά ότι οι χρόνοι ζωής των φορέων ελαττώνονται με την αύξηση του αριθμού των προσμείξεων  $N_i$ . Μια εμπειρική σχέση για το πυρίτιο είναι [12]

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{1 + \frac{N_i}{N_0}} \quad (2.13)$$

όπου  $\tau_{n0} = 395 \mu s$  και  $N_0 = 7.10 \times 10^{15} cm^{-3}$ . Ο χρόνος ζωής σε μια τέτοια διαδικασία είναι αντιστρόφως ανάλογος της αριθμητικής πυκνότητας των παγίδων.



### 2.3.3 Επανασύνδεση στην επιφάνεια του ημιαγωγού.

Τελειώνοντας την αναφορά στην έμμεση επανασύνδεση θα πρέπει να πούμε πως η επιφάνεια ενός ημιαγωγού αποτελεί μια ιδιαιτερότητα όσον αφορά την χρυσταλλική του συμμετρία που διακόπτεται απότομα. Έτσι η επιφάνεια εισάγει χβαντικές καταστάσεις μέσα στο ενεργειακό χάσμα όμοιες με αυτές των προσμείξεων και των ατελειών [11].

Οι επιφανειακές παγίδες ή επιφανειακές καταστάσεις, είναι ισοδύναμες με κέντρα επανασύνδεσης χωρικά εντοπισμένα στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Η κατανομή των επιφανειακών καταστάσεων παρουσιάζει μια συνεχή κατανομή μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Σε αναλογία με τον χρόνο επανασύνδεσης μπορούμε να ορίσουμε την ταχύτητα επανασύνδεσης στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Μια μεγάλη ταχύτητα επανασύνδεσης θα αντιστοιχεί σε ένα μικρό χρόνο επανασύνδεσης και αντίστροφα. Η προφανής φυσική ομοιότητα που παρουσιάζουν η επανασύνδεση στην επιφάνεια και η επανασύνδεση στο εσωτερικό του ημιαγωγού οδηγεί σε μια παράλληλη μαθηματική περιγραφή της διαδικασίας. Παρόλα αυτά υπάρχουν οι δυο πιο κάτω βασικές διαφορές [13].

1. Επειδή οι καταστάσεις της επιφάνειας είναι διατεταγμένες σ' ένα επίπεδο στο χώρο, ο ρυθμός επανασύνδεσης εκφράζεται σε όρους αριθμών των φορέων που μετακινούνται από μια ενεργειακή ζώνη ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα χρόνου.
2. Ενώ συνήθως μια μόνο στάθμη κυριαρχεί στην επανασύνδεση που λαμβάνει χώρα στο εσωτερικό του ημιαγωγού, η περίπτωση της επιφανειακής επανασύνδεσης σχετίζεται με φορείς που κατανέμονται σε όλο το ενεργειακό χάσμα.

Έτσι είναι αναγκαίο να ολοκληρώσει κανείς τους ρυθμούς επανασύνδεσης πάνω σε ολόκληρο το ενεργειακό χάσμα. Η ταχύτητα επανασύνδεσης θα πρέπει να ληφθεί υπόψη ως συνθήκη στην επιφάνεια του αγωγού, για την λύση της εξίσωσης διάχυσης των επιπλέον φορέων που δημιουργούνται με οποιοδήποτε τρόπο κοντά στην επιφάνεια του ημιαγωγού.

### 2.4 Κίνηση ηλεκτρικών φορέων σ'ενα ημιαγωγό κάτω από την επιρροή ενός ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου.

Η κατευθυνόμενη κίνηση ενός ηλεκτρικού φορτίου κάτω από την επίδραση ενός ηλεκτρικού πεδίου ονομάζεται ολίσθηση και η κατευθυνόμενη ταχύτητα του, ταχύτητα ολίσθησης. Εκτός από την κίνηση που επιβάλλει το ηλεκτρικό πεδίο υπάρχει και η θερμική κίνηση που είναι όμως τυχαία με μέση χρονική τιμή μηδέν και επομένως δεν συνεισφέρει στο ηλεκτρικό ρεύμα. Σε ένα ημιαγωγό οι οπές και τα ηλεκτρόνια κινούνται σε αντίθετες κατευθύνσεις κάτω από την επίδραση ενός ηλεκτρικού πεδίου, λόγω του αντίθετου φορτίου που έχουν· συνεισφέρουν όμως στο ηλεκτρικό ρεύμα στην ίδια κατεύθυνση (συμβατική φορά). Η επιταχυνόμενη κίνηση των φορέων κάτω από την επίδραση της ηλεκτρικής δύναμης διακόπτεται συχνά λόγω σκέδασης τους με ιονισμένα άτομα πρόσμειξης, με φωνόνια (θερμικά διεγερμένες πλεγματικές ταλαντώσεις) και άλλα κέντρα σκέδασης. Η μικροσκοπική κίνηση είναι αρκετά πολύπλοκη για να αναλυθεί, υπάρχουν όμως κάποιες μακροσκοπικές ποσότητες που μπορούν να περιγράψουν την μέση τους κίνηση. Η ταχύτητα ολίσθησης



περιλαμβάνει τόσο την επιτάχυνση των φορέων όσο και τα φαινόμενα σκέδασης, δίνοντας έτσι μια ταχύτητα σταθερή στο χρόνο που περιγράφει την κίνηση κάθε είδους φορέα παράλληλα ή αντιπαράλληλα στο ηλεκτρικό πεδίο. Το ρεύμα ολίσθησης  $J_p$  σε ένα  $p$  τύπου ημιαγωγό ορίζεται ως το φορτίο που διαπερνά κάθετα μια επιφάνεια, του ημιαγωγού στην περίπτωση μας, ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα επιφάνειας και είναι [12, 14]:

$$J_{p/drift} = e p u_d \quad (2.14)$$

Η ταχύτητα ολίσθησης  $u_d$  για μικρές μέχρι ενδιάμεσες τιμές του ηλεκτρικού πεδίου  $E$  (4000V/cm) μπορεί να γραφεί ως

$$u_d = \mu_p E \quad (2.15)$$

η ποσότητα  $\mu_p$  ονομάζεται ευκινησία των οπών. Οι δυο πιο πάνω σχέσεις εκφράζουν βασικά τον νόμο του Ohm, εφόσον μαζί δίνουν:

$$J_{p/drift} = e p \mu_p E \quad (2.16)$$

Αντίστοιχα ισχύουν και στην περίπτωση ημιαγωγών  $n$  τύπου. Το ολικό ρεύμα θα είναι το άθροισμα των συνεισφορών των δυο ειδών φορέων. Έτσι σε ένα ενδογενή ημιαγωγό

$$J_{drift} = e(\mu_n + \mu_p)n_i E \quad (2.17)$$

και η ηλεκτρική αγωγιμότητα θα είναι:

$$\sigma_i = e(\mu_n + \mu_p)n_i \quad (2.18)$$

Η ευκινησία είναι ένα μέτρο της ευκολίας της κίνησης ενός ηλεκτρικού φορέα σε ένα ημιαγωγό. Μια μικρή τιμή ευκινησίας αντιστοιχεί σε μεγάλο αριθμό γεγονότων σκέδασης. Οι παράγοντες σκέδασης [12] είναι βασικά οι εξής:

1. σκέδαση με φωνόνια
2. σκέδαση με ιονισμένες προσμίξεις
3. σκέδαση με ηλεκτρικά ουδέτερες προσμίξεις και με πλεγματικές ατέλειες
4. σκέδαση φορέων-φορέων
5. πιεζοηλεκτρική σκέδαση.

Από τους πιο πάνω παράγοντες, αυτοί που συνεισφέρουν περισσότερο στην σκέδαση μέσα σε ηλεκτρονικές συσκευές ποιότητας, είναι οι δυο πρώτοι. Ο παράγοντας σκέδασης με ουδέτερα άτομα και με πλεγματικές ατέλειες είναι σημαντικός σε χαμηλές θερμοκρασίες όπου ένα σημαντικό ποσοστό των δοτών ή/και των δεχτών "παγώνουν". Όπως θα δούμε παρακάτω, η σκέδαση με προσμίξεις είναι σημαντική σε ημιαγωγούς που έχουν πάθει ζημιά λόγω ιοντικής εμφύτευσης. Η ευκινησία στην περίπτωση σκέδασης με φωνόνια εξαρτάται από την θερμοκρασία ως εξής:

$$\mu_L \propto T^{-3/2} \quad (2.19)$$

ενώ η ευκινησία λόγω σκέδασης με ιονισμένες προσμίξεις είναι:

$$\mu_I \propto T^{3/2}/N_I \quad (2.20)$$



με  $N_I$  τον αριθμό των ιονισμένων προσμείξεων. Γενικά στην περίπτωση που συνεισφέρουν στην σκέδαση περισσότεροι από ένας ανεξάρτητοι μηχανισμοί, η συνολική ευκινησία δίνεται από την σχέση

$$\frac{1}{\mu} = \sum_{j=1}^k \frac{1}{\mu_j} \quad (2.21)$$

όπου  $k$  το πλήθος των μηχανισμών.

Η εξάρτηση της ευκινησίας από την ποσότητα των προσμείξεων και την θερμοκρασία είναι απόλυτα αναγκαία για τον σχεδιασμό ηλεκτρονικών συσκευών. Καθώς η συγκέντρωση των προσμείξεων αυξάνει, τα φαινόμενα της σκέδασης των φορέων με τις προσμείξεις γίνονται πιο έντονα σε ψηλές θερμοκρασίες όπως μπορεί να δει κανείς από την σχέση 2.20. Για παράδειγμα η ευκινησία των ηλεκτρονίων στο ενδογενές πυρίτιο σε θερμοκρασία δωματίου είναι  $1350 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ .

Με την εισαγωγή προσμείξεων συγκέντρωσης  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , η ευκινησία ελαττώνεται σε  $700 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ . Το φαινόμενο αυτό φαίνεται στην Εικ.(2.9). Για μικρές τιμές της πυκνότητας προσμείξεων η ευκινησία είναι σταθερή και οφείλεται στην σκέδαση με τα φωνόνια. Για πιο μεγάλες τιμές της πυκνότητας προσμείξεων η ευκινησία ελαττώνεται λόγω της αύξησης των φαινομένων σκέδασης των φορέων με τις προσμείξεις. Όσον αφορά την εξάρτηση της ευκινησίας από την θερμοκρασία θα πρέπει να αναφέρουμε πως σε βαριά εμπλουτισμένα δείγματα ημιαγωγών η θερμοκρασιακή εξάρτηση λόγω της συνεισφοράς της σκέδασης με φωνόνια αλληλοαναιρείται με αυτήν της σκέδασης λόγω προσμείξεων και έτσι η ευκινησία εξαρτάται πολύ λίγο από την θερμοκρασία [12, 15]. Στο Si η ευκινησία των φορέων περιγράφεται σε πολύ ικανοποιητικό βαθμό από την εμπειρική σχέση που προέρχεται από προσαρμογή σε πειραματικές μετρήσεις [12]

$$\mu = \mu_{min} + \frac{\mu_0}{1 + (N_d/N_{ref})^\alpha} \quad (2.22)$$

όπου  $\mu$  είναι η ευκινησία,  $N_d$  η αριθμητική πυκνότητα των προσμείξεων και όλες οι άλλες παράμετροι έχουν θερμοκρασιακή εξάρτηση της μορφής

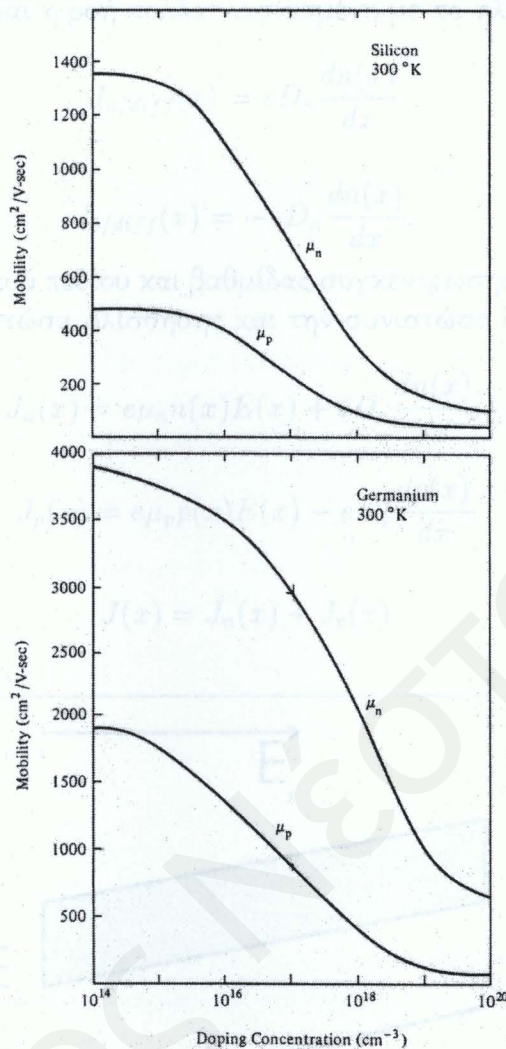
$$A = A_0(T/300)^M \quad (2.23)$$

$A_0$  είναι μια σταθερά ανεξάρτητη της θερμοκρασίας (η τιμή της παραμέτρου στους 300 K),  $T$  η θερμοκρασία σε K και  $M$  ένας εκθέτης που είναι δεδομένος για κάθε παράμετρο. Στα Κεφ. 4 και 6 έχει γίνει χρήση των πιο πάνω σχέσεων για την ευκινησία των ηλεκτρικών φορέων, και οι τιμές των διαφόρων παραμέτρων θα παρουσιαστούν εκεί.

## 2.5 Η διάχυση των ηλεκτρικών φορέων σε ένα ημιαγωγό.

Όταν σε ένα ημιαγωγό δημιουργηθεί μια βαθμίδα στην συγκέντρωση των φορέων (οπών ή και ηλεκτρονίων) τότε παρουσιάζεται κίνηση των φορέων έτσι ώστε να αποκαταθεί η ομοιογένεια στο υλικό. Η κίνηση γίνεται από την περιοχή της μεγάλης προς την περιοχή της μικρής συγκέντρωσης ηλεκτρικών φορέων και ονομάζεται διάχυση. Οι δυο βασικές διαδικασίες ηλεκτρικής αγωγιμότητας στους ημιαγωγούς είναι η διάχυση και





**Εικόνα 2.9:** Μεταβολή της ευκινησίας των ηλεκτρονίων  $\mu_n$  και των οπών  $\mu_p$ , με την συγκέντρωση εμπλουτισμού δοτών  $N_d$  στο Si και Ge σε θερμοκρασία δωματίου.

η ολίσθηση κάτω από την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου, την οποία και εξετάσαμε προηγουμένως.

Οι φορείς σε ένα ημιαγωγό διαχέονται κάτω από την επίδραση της βαθμίδας συγκέντρωσης,  $n(x)$ , με τυχαία θερμική κίνηση και σκέδαση από το πλέγμα και τις προσμείξεις. Η ροή των ηλεκτρονίων (αριθμός φορέων ανά μονάδα χρόνου και εμβαδού μιας επιφάνειας κάθετα τοποθετημένης στην κίνηση), δίνεται από τον νόμο του Fick και είναι :

$$\phi_n(x) = \frac{-\bar{l}^2}{2\bar{t}} \frac{dn(x)}{dx} \quad (2.24)$$

Η πιο πάνω σχέση αναφέρεται στην μονοδιάστατη διάχυση και μπορεί να γενικευτεί απευθείας στις τρεις διαστάσεις. Η μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων είναι  $\bar{l}$  και ο χρόνος που μεσολαβεί μεταξύ δυό χρούσεων είναι  $\bar{t}$ . Η ποσότητα  $\bar{l}^2/2\bar{t}$  έχει μονάδες  $m^2/s$  και ονομάζεται συντελεστής διάχυσης των ηλεκτρονίων  $D_n$ . Με τον ίδιο τρόπο ορίζεται και

ο συντελεστής διάχυσης των οπών  $D_p$ . Το ρεύμα διάχυσης των ηλεκτρονίων που διαπερνά μια μοναδιαία επιφάνεια είναι η ροή πολλαπλασιασμένη με το ηλεκτρικό φορτίο :

$$J_{n/diff}(x) = eD_n \frac{dn(x)}{dx} \quad (2.25)$$

και για τις οπές

$$J_{p/diff}(x) = -eD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (2.26)$$

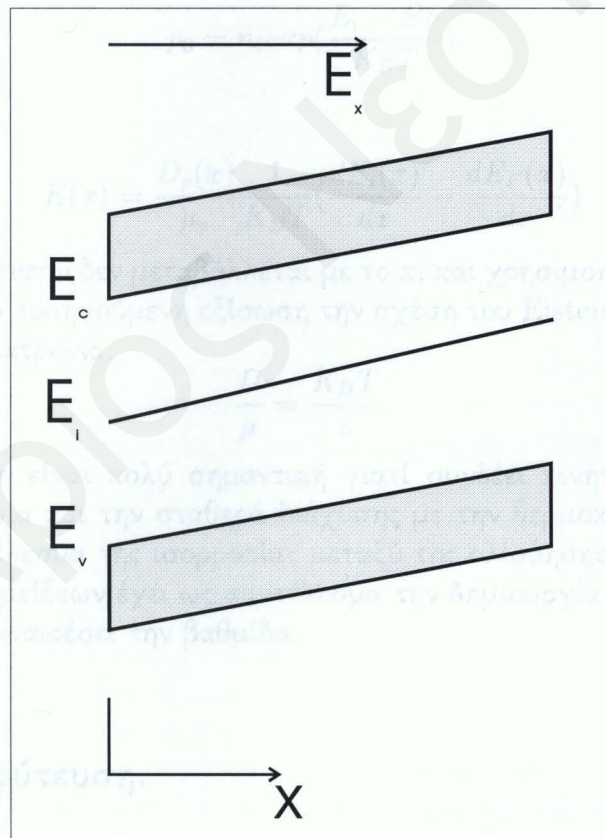
Στην παρουσία ηλεκτρικού πεδίου και βαθμίδας συγκέντρωσης, το ηλεκτρικό ρεύμα έχει δυο συνιστώσες, την συνιστώσα ολίσθησης και την συνιστώσα διάχυσης :

$$J_n(x) = e\mu_n n(x)E(x) + eD_n \frac{dn(x)}{dx} \quad (2.27)$$

$$J_p(x) = e\mu_p p(x)E(x) - eD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (2.28)$$

και το ολικό ρεύμα είναι:

$$J(x) = J_n(x) + J_p(x) \quad (2.29)$$



**Εικόνα 2.10:** Διάγραμμα ενεργειακών ζωνών ενός ημιαγωγού κάτω από την επίδραση ενός ηλεκτρικού πεδίου στην διεύθυνση  $x$

Στην παρουσία ηλεκτρικού πεδίου οι ενέργειες των ηλεκτρονίων σε ένα απλοποιημένο διάγραμμα ενεργειακής ζώνης, παρουσιάζονται στην Εικ. 2.10. Μπορούμε να συσχετίσουμε



το πεδίο  $E(x)$  με την δυναμική ενέργεια των ηλεκτρονίων διαλέγοντας κάποια ενέργεια αναφοράς. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την χωρική μεταβολή του ηλεκτροστατικού δυναμικού  $U(x)$ , οπότε οποιοδήποτε σημείο των ενεργειακών ζωνών είναι βολικό. Διαλέγοντας την ενεργειακή στάθμη  $E_i$  μπορούμε να την συνδέσουμε με το ηλεκτρικό πεδίο μέσω της σχέσης :

$$E(x) = -\frac{dU(x)}{dx} = -\frac{dE_i}{dx} \frac{-1}{e} = \frac{1}{e} \frac{dE_i}{dx}. \quad (2.30)$$

Η κλίση στις ενεργειακές ζώνες της Εικ. 2.10 είναι τέτοια, ώστε τα ηλεκτρόνια να κατεβαίνουν την "κατηφόρα".

Στην ισορροπία δεν έχουμε καθαρή ροή ρεύματος στον ημιαγωγό. Κάθε διαχύμανση που θα μπορούσε να δημιουργήσει ένα ρεύμα διάχυσης, ανάβει και ένα ηλεκτρικό πεδίο που ανακατανέμει τους φορείς με ολίσθηση. Θέτοντας τις Εξ. (2.28) ίση με μηδέν στην ισορροπία, έχουμε :

$$E(x) = \frac{D_p(x)}{\mu_p} \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx} \quad (2.31)$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση :

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{K_B T}\right) \quad (2.32)$$

έχουμε :

$$E(x) = \frac{D_p(x)}{\mu_p} \frac{1}{K_B T} \left( \frac{dE_i(x)}{dx} - \frac{dE_F(x)}{dx} \right) \quad (2.33)$$

Εφόσον η στάθμη Fermi δεν μεταβάλλεται με το  $x$ , και χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.30) έχουμε τελικά από την προηγούμενη εξίσωση την σχέση του Einstein: Τα πιο πάνω ισχύουν φυσικά και για τα ηλεκτρόνια.

$$\frac{D}{\mu} = \frac{K_B T}{e}. \quad (2.34)$$

Η πιο πάνω σχέση είναι πολύ σημαντική γιατί συνδέει κινητικά μεγέθη με θερμοδυναμικά, την ευκινησία και την σταθερά διάχυσης με την θερμοκρασία του κρυστάλλου. Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της ισορροπίας μεταξύ της ολίσθησης και της διάχυσης είναι πως μια βαθμίδα προσμείξεων έχει ως αποτέλεσμα την δημιουργία εσωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, που τείνει να αναιρέσει την βαθμίδα.

## 2.6 Ιοντική εμφύτευση.

Η μέθοδος της ιοντικής εμφύτευσης αποτελεί ένα τρόπο εμπλουτισμού των ημιαγωγών όπως έχουμε ήδη αναφέρει. Η μέθοδος αυτή συνίσταται στην επιτάχυνση ιόντων σε ηλεκτροστατικό πεδίο [16, 17], την δημιουργία κατευθυνόμενης δέσμης και τον βομβαρδισμό του υλικού-στόχου. Τα πλεονεκτήματα που εμφανίζει η μέθοδος αυτή έναντι άλλων μεθόδων όπως η μέθοδος της διάχυσης, είναι [16]:



1. έχει την ικανότητα να εισαγει σε μια ποικιλία υποστρωμάτων, με ποσοτική ακρίβεια σχεδόν κάθε επιθυμητού είδους ατόμων.
2. παρουσιάζει ικανότητα ελέγχου του προφίλ της χωρικής κατανομής των εμφυτευμένων ιόντων σε μεγάλο βαθμό, ελέγχοντας την ενέργεια και το ρεύμα εμφύτευσης καθώς και την θέση της ιοντικής ακτίνας.

Τα εμφυτευμένα ιόντα διεισδύουν στο υλικό σε βάθος που εξαρτάται από την ενέργεια, την μάζα και τον ατομικό αριθμό των ιόντων-βλημάτων, καθώς και από την μάζα και τον ατομικό αριθμό των ατόμων του στόχου, την πυκνότητα του υλικού του στόχου, το ρεύμα της ιοντικής δέσμης, και την ολική δόση εμφύτευσης. Ακόμα εξαρτάται και από τον προσανατολισμό του στόχου ως προς την διεύθυνση της δέσμης εμφύτευσης. Στην περίπτωση που ο στόχος είναι χρυσταλλικός και η διεύθυνση της ιοντικής δέσμης είναι η ίδια με μια χρυσταλλογραφική διεύθυνση του χρυστάλλου στην οποία δεν προβάλλονται τα άτομα του, η ιοντική ακτίνα μπορεί να διανύσει μεγαλύτερες αποστάσεις (φαινόμενο καναλιού). Αν ο στόχος είναι άμορφος, δεν παρουσιάζει δηλαδή χρυσταλλική συμμετρία σε μεγάλη έκταση το φαινόμενο αυτό δεν συμβαίνει.

Η ιοντική ακτίνα χάνει ενέργεια με δυο μηχανισμούς [18, 19, 20]:

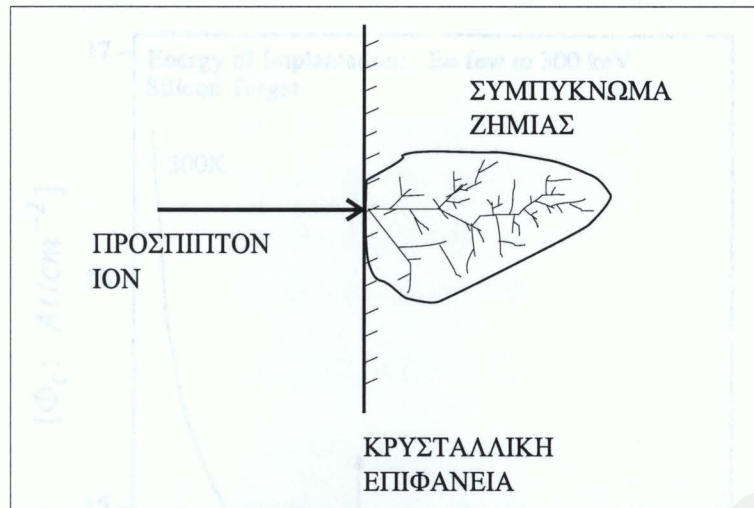
1. αλληλεπιδράσεις με ελεύθερα και δέσμια ηλεκτρόνια του στόχου
2. με την αλληλεπίδραση της με τους πυρήνες των ατόμων του στόχου.

Για μεγάλες τιμές της ενέργειας εμφύτευσης επικρατεί ο παράγοντας αλληλεπίδρασης με τα ηλεκτρόνια και στις χαμηλές ενέργειες ο παράγοντας αλληλεπίδρασης με τον πυρήνα, που μπορούν να μοντελοποιηθούν πολύ εύκολα χρησιμοποιώντας την περιγραφή της κλασικής μηχανικής για ελαστικές χρούσεις [18]. Η ζημιά που προκαλεί η δέσμη οφείλεται στο γεγονός πως τα κινούμενα ιόντα μεταφέρουν αρκετή ενέργεια ώστε να μετακινήσουν τα άτομα του στόχου από τις πλεγματικές τους θέσεις. Αν η ενέργεια ενός ιόντος της δέσμης είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια με την οποία ένα άτομο είναι δεσμευμένο με το πλέγμα, τότε το άτομο αυτό συμπεριφέρεται ως δευτερογενές βλήμα δημιουργώντας μια αλυσίδα από χρούσεις. Μια τέτοια "καράμπολα" δημιουργεί ένα συμπύκνωμα ζημιών (*damage cluster*) (βλ. Εικ. 2.11), μια περιοχή από μετατοπισμένα άτομα που οφείλονται στην αρχική χρούση. Το μέγεθος του συμπυκνώματος εξαρτάται από πολλούς παράγοντες, κυρίως από την μάζα του ιόντος-βλήματος, την ενέργεια του, την μάζα του ατόμου του στόχου, και την θερμοκρασία του στόχου. Οι διαδικασίες πέδησης ενός ιόντος της δέσμης έχουν στατιστικό χαρακτήρα, έτσι που δυο όμοια ιόντα που εμφυτεύονται με τις ίδιες συνθήκες θα προκαλέσουν διαφορετικά συμπυκνώματα.

Διάφορα θεωρητικά μοντέλα έχουν κατασκευαστεί για τον υπολογισμό του αριθμού των ατόμων που μετατοπίζονται από ένα ιόν καθώς αυτό έρχεται σε ηρεμία. Εάν η μέση πυκνότητα των ατελειών σε ένα συμπύκνωμα είναι μεγαλύτερη από μια ορισμένη τιμή, το υλικό θεωρείται άμορφο. Αυτό συμβαίνει [21] όταν περίπου 10% των ατόμων του στόχου μετατοπιστούν από τις πλεγματικές τους θέσεις. Όταν η δόση εμφύτευσης ξεπεράσει μια ορισμένη κρίσιμη τιμή  $\Phi_c$  (*Atoms/cm<sup>2</sup>*) η περιοχή στην οποία έχουν καταναμεηθεί τα ιόντα καθίσταται άμορφη. Η εξάρτηση της κρίσιμης δόσης από την θερμοκρασία του στόχου και τον ατομικό αριθμό των βλημάτων φαίνεται στην Εικ. 2.12 [22].

Η διαδικασία της ιοντικής εμφύτευσης δημιουργεί στο χρυσταλλικό πλέγμα μια σειρά από ατέλειες στις οποίες θα αναφερθούμε σύντομα πιο κάτω. Η δημιουργία αυτών των





**Εικόνα 2.11:** Δημιουργία συμπυκνώματος ζημιάς λόγω ιοντικής εμφύτευσης μιας χρυσταλλικής επιφάνειας.

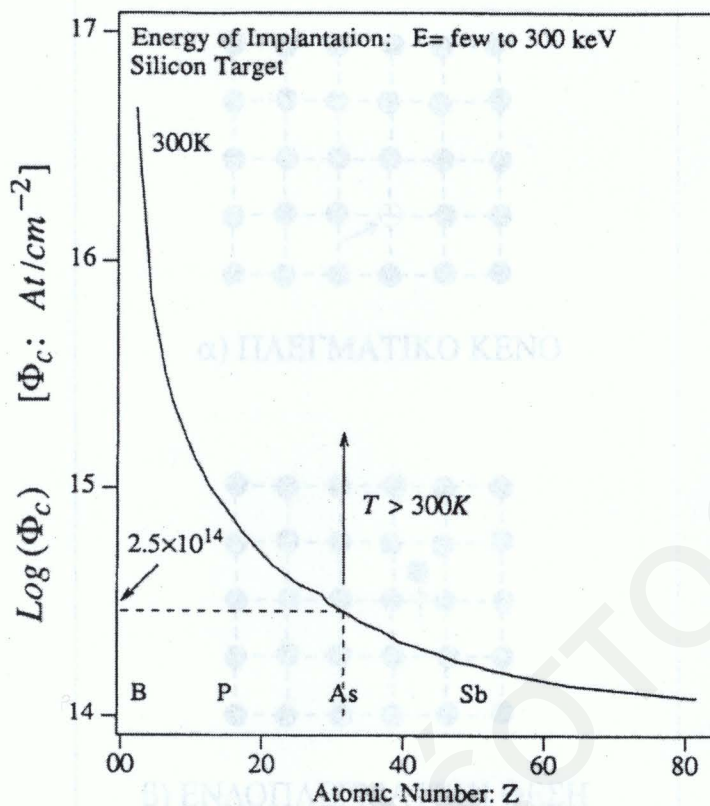
ατελειών προκαλεί δραστική αλλαγή στις οπτοηλεκτρονικές και θερμικές ιδιότητες του ημιαγωγού. Οι προσμείξεις δεν μπορούν να συνεισφέρουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα γιατί δεν βρίσκονται σε πλεγματικές θέσεις. Έτσι η ευκινησία και συνεπώς η ηλεκτρική αγωγιμότητα είναι πολύ μικρή. Η θερμική αγωγιμότητα ελαττώνεται επίσης δραστικά λόγω της ιοντικής εμφύτευσης. Γι' αυτό τον λόγο μετά την ιοντική εμφύτευση, ακολουθεί συνήθως η διαδικασία της θερμικής ανόπτησης, όπου ο ημιαγωγός θερμαίνεται σε ψηλές θερμοκρασίες για να ενεργοποιηθούν οι προσμείξεις και να αποκατασταθεί η χρυσταλλική τάξη. Στην επόμενη παράγραφο θα δούμε τις κυριότερες πλεγματικές ατέλειες που εισάγονται στο πυρίτιο λόγω της ιοντικής εμφύτευσης καθώς και τις θερμοκρασίες ανόπτησης του κάθε είδους.

### 2.6.1 Πλεγματικές ατέλειες στο πυρίτιο

Γενικά ως χρυσταλλικές ή πλεγματικές ατέλειες εννοούμε οποιεσδήποτε περιοχές όπου η ιοντική διάταξη διαφέρει δραστικά από αυτήν ενός τέλειου χρυστάλλου. Οι ατέλειες ονομάζονται επιφανειακές, γραμμικές, ή σημειακές ανάλογα εάν η ατελής περιοχή περιορίζεται σε ατομική κλίμακα σε μια δυο, ή τρεις διαστάσεις [23]. Η δυο πιο βασικές κατηγορίες χρυσταλλικών ατελειών είναι:

1. Κενά και ενδοπλεγματικές. Αυτές είναι σημειακές ατέλειες λόγω απουσίας ιόντων ή παρουσίας επιπλέον ιόντων σε μια πλεγματική θέση. Έχουν θερμοδυναμική προέλευση και είναι παρούσες σε κάθε πραγματικό χρυστάλλο.
2. Εξαρμώσεις (*dislocations*). Είναι γραμμικές ατέλειες, και έχουν σχέση με την μετατόπιση πλεγματικών επιπέδων σε κάποια χρυσταλλική διεύθυνση.

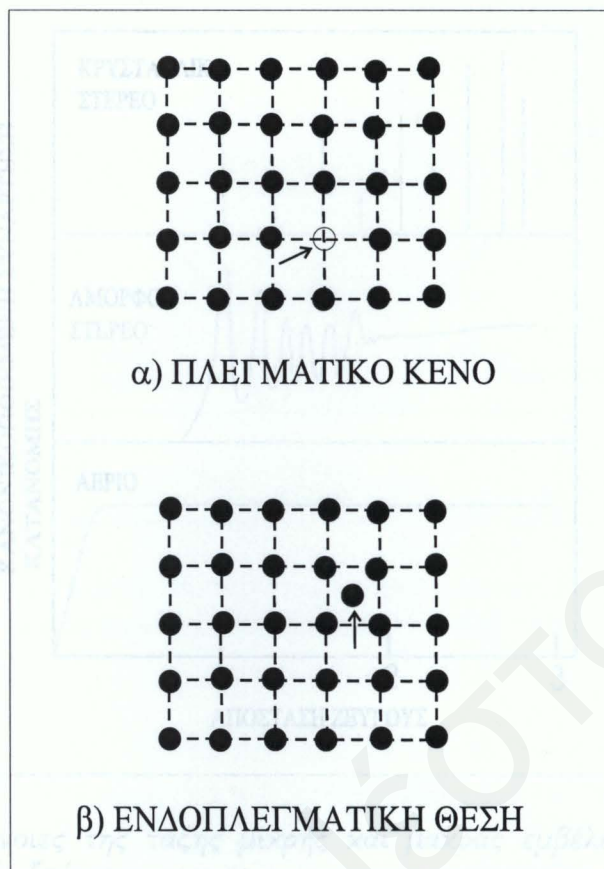
Στο πυρίτιο οι πιο βασικές μορφές ατελειών είναι [24]:



Εικόνα 2.12: Η κρίσιμη δόση εμφύτευσης  $\Phi_c$  (Atoms/cm<sup>2</sup>), ως συνάρτηση του ατομικού αριθμού  $Z$  των ιοντικών βλημάτων.

1. Οι ατέλειες *Frenkel*. Αυτές συνίστανται στην απουσία ενός ατόμου από την πλεγματοική του θέση και την τοποθέτηση του σε μια ενδιάμεση. Τόσο η άδεια πλεγματοική θέση όσο και το ενδοπλεγματοικά τοποθετημένο άτομο μπορούν να παίξουν σημαντικούς ρόλους στον σχηματισμό άλλων ατελειών.
2. Ζευγάρια Πρόσμειξης-Απουσίας (*Vacancy – Impurity Pair*). Αυτές οι ατέλειες μπορούν να σχηματισθούν με την διάχυση ενός απλού πλεγματοικού κενού (*vacancy*) σε μια πλεγματοική θέση δίπλα σε κάποιο άτομο πρόσμειξης.
3. Διπλή απουσία (*Divacancy*). Από την σκοπιά της ιοντικής εμφύτευσης είναι ίσως η πιο σημαντική σημειακή ατέλεια. Μπορεί να σχηματισθεί απευθείας εάν ένα προσπίπτον ιόν καταφέρει να μετατοπίσει δυο γειτονικά άτομα. Επίσης μπορεί να σχηματισθεί με τον συνδυασμό δυο απλών απουσιών.
4. Γραμμές και βρόγχοι μετατόπισης. Το είδος αυτό των ατελειών μπορεί να προκύψει ως αποτέλεσμα συσσώρευσης απλών ατελειών ή ως αποτέλεσμα πεδίων τάσης που συνοδεύουν την πλεγματοική ζημιά. Η ιοντική εμφύτευση υποβοηθά την χωρική εξάπλωση αυτών των ατελειών. Η ειδική σημασία που έχει αυτή η κατηγορία ατελειών οφείλεται στο γεγονός πως τα χαρακτηριστικά τους όπως το μήκος τους, το σχήμα τους και η θέση τους αλλάζουν καθώς το υλικό υφίσταται την διαδικασία της θερμικής





Εικόνα 2.13: Βασικές σημειακές ατέλειες στο Si.

ανόπτησης. Επίσης διότι είναι πολύ δύσκολο να εξαφανιστούν (χρειάζεται ανόπτηση σε κενό, σε θερμοκρασία  $1000^{\circ}\text{C}$  για αρκετές ώρες.)

5. *Vacancy and interstitial platelets.* Η πιο πάνω κατηγορία ατελειών μπορεί να δημιουργηθεί με την συσσωμάτωση απουσιών ή ενδοπλεγματικών ατελειών.

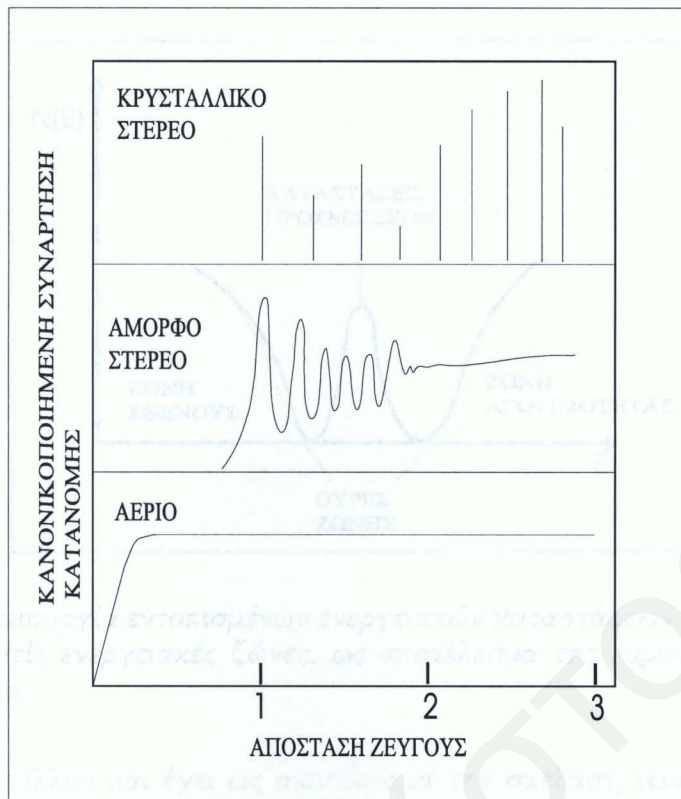
Στην Εικ. 2.13 παρουσιάζονται οι σημειακές πλεγματικές ατέλειες στο Si.

Τέλος σημειώνουμε πως περίπου το 50% της ιοντικής ενέργειας καταναλώνεται κατά την διάρκεια του ταξιδιού του ιόντος στο υλικό, στην δημιουργία ατελειών μέσω ελαστικών χρούσεων με τα πλεγματικά άτομα. Είναι σημαντικό να γνωρίζουμε:

α) την συγκέντρωση τους β) την ενέργεια σχηματισμού τους γ) τον μηχανισμό αποσύνθεσης των σύνθετων ατελειών και τέλος δ) τους μηχανισμούς αλληλεπίδρασης με τους ηλεκτρικούς φορείς.

### 2.6.2 Άμορφοι ημιαγωγοί και ιοντική εμφύτευση

Η αταξία σε ένα υλικό, που έχει υποστεί ιοντική εμφύτευση, αφορά αποκλίσεις, του μήκους και των γωνιών των δεσμών, σε σχέση με το αντίστοιχο χυσταλλικό, και μπορεί να οφείλεται στην ιοντική εμφύτευση. Η απώλεια της χυσταλλικής τάξης μακράς εμβέλειας



Εικόνα 2.14: Οι έννοιες της τάξης μικρής και μακράς εμβέλειας στην γλώσσα της συνάρτησης κατανομής ζεύγους.

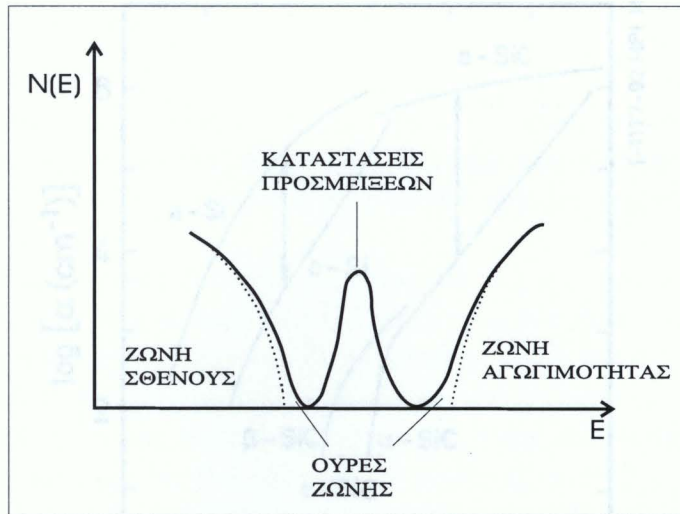
(long range order) είναι το βασικό χαρακτηριστικό που διακρίνει ένα άμορφο από ένα χρυσταλλικό υλικό. Το χρυσταλλικό υλικό παρουσιάζει τάξη μικρής εμβέλειας (short range order) όσο και τάξη μακράς εμβέλειας (long range order). Η έννοια της τάξης μικρής και μακράς εμβέλειας μπορεί να γίνει κατανοητή μέσω της έννοιας της ατομικής συνάρτησης ζεύγους (pair distribution function) που είναι η πιθανότητα ευρέσεως ενός ατόμου σε απόσταση  $R$  από ένα άλλο. Στην Εικ. 2.14 έχουμε την πιο πάνω συνάρτηση για την χρυσταλλική, άμορφη και αέρια φάση ενός υλικού.

Όπως βλέπουμε από το πιο πάνω σχήμα οι σχετικές θέσεις των ατόμων στο αέριο είναι τυχαίες, σε αντίθεση με τον κρύσταλλο όπου τα άτομα βρίσκονται σε πολύ καλά καθορισμένες θέσεις σε μεγάλη έκταση στο υλικό. Στην περίπτωση του άμορφου στερεού, βλέπουμε πως παρουσιάζει την ίδια τάξη μικρής εμβέλειας με τον κρύσταλλο, αλλά απουσιάζει η τάξη μακράς εμβέλειας. Οι αποστάσεις των πλησιέστερων γειτόνων είναι διακρίσιμες αλλά η συσχέτιση μεταξύ των ζευγαριών των ατόμων χάνεται μετά από μερικές ενδοατομικές αποστάσεις. Οι ιδιότητες των άμορφων ημιαγωγών είναι συνήθως παρόμοιες με αυτές των αντίστοιχων χρυσταλλικών λόγω της παρουσίας της τοπικής τάξης.

Ως αποτέλεσμα της χρυσταλλικής αταξίας έχουμε την δημιουργία ουρών (band tailing) στην μορφή των ενεργειακών ζωνών οι οποίες επεκτείνονται στο ενεργειακό χάσμα, καθώς και τον εντοπισμό των ηλεκτρικών φορέων. Οι πλεγματικές ατέλειες δημιουργούν όπως ήδη έχουμε αναφέρει ηλεκτρονικές καταστάσεις μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Τα πιο πάνω φαινόμενα παρουσιάζονται στην Εικ. 2.15

Στη γλώσσα της κβαντομηχανικής, η αταξία αποτελεί μια διαταραχή στο περιοδικό





**Εικόνα 2.15:** Η δημιουργία εντοπισμένων ενεργειακών καταστάσεων μέσα στο ενεργειακό χάσμα και ουρών στίς ενεργειακές ζώνες, ως αποτέλεσμα της παρουσίας ατελειών σ'ένα κρυσταλλικό πλέγμα.

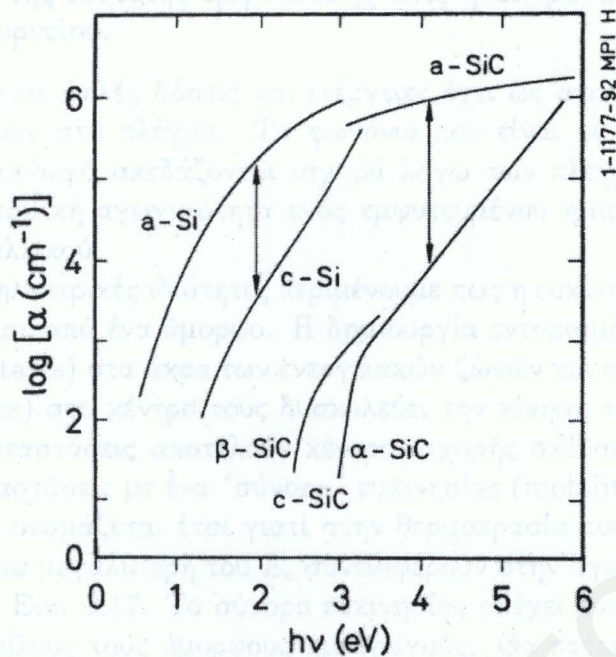
δυναμικό του κρυστάλλου και έχει ως αποτέλεσμα την σκέδαση των ηλεκτρικών φορέων από μια κατάσταση Bloch σε άλλη. Ως αποτέλεσμα της μεγάλης συχνότητας της σκέδασης η ηλεκτρονική κυματοσυνάρτηση χάνει συμφωνία φάσης μέσα σε μια ή δυο ενδοατομικές αποστάσεις. Η αβεβαιότητα στην ορμή των φορέων, καθίσταται μεγάλη και συγκρίσιμη με την μέση τιμή της, έτσι που πια δεν αποτελεί "καλό" κβαντικό αριθμό. Η απώλεια του νόμου διατήρησης του κυματοδιανύσματος  $\mathbf{K}$ , είναι ένα από τα πιο σημαντικά αποτελέσματα της κρυσταλλικής αταξίας, και αλλάζει σημαντικά την περιγραφή των ηλεκτρονικών καταστάσεων. Μερικές από τις συνέπειες της απώλειας του κανόνα της  $\mathbf{K}$  διατήρησης είναι [25]:

1. Οι ενεργειακές ζώνες δεν περιγράφονται πλέον από σχέσεις της μορφής  $E(\mathbf{K})$ , αλλά από την πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων  $N(E)$  (Εικ. 2.15). Σαν συνέπεια αυτού οι ενεργές μάζες των οπών και των ηλεκτρονίων πρέπει να οριστούν ξανά.
2. Οι κανόνες επιλογής για την εκπομπή και απορρόφηση σε ένα άμορφο ημιαγωγό δεν καθορίζονται πλέον από την διατήρηση της κρυσταλλικής ορμής. Οι οπτικές μεταβάσεις συμβαίνουν ανάμεσα σε ενεργειακές καταστάσεις που επικαλύπτονται στον χώρο. Αυτή η διάκριση είναι πιο εμφανής στο Si το οποίο έχει έμμεσο χάσμα στην κρυσταλλική φάση αλλά όχι στην άμορφη.
3. Η αταξία ελαττώνει την ευκινησία των φορέων λόγω των συχνών σκεδάσεων και προκαλεί το προφανές φαινόμενο του εντοπισμού των κυματοσυναρτήσεων τους (εντοπισμός Anderson).

### 2.6.3 Η επίδραση της ιοντικής εμφύτευσης στις οπτικές ιδιότητες του πυριτίου.

Στην Εικ. (2.16) συνοψίζονται τα δεδομένα της οπτικής απορρόφησης για την κρυσταλλική (c-Si) και άμορφη φάση του πυριτίου (a-Si). Στην κρυσταλλική του φάση το Si





**Εικόνα 2.16:** Οπτική απορρόφηση των κρυσταλλικών φάσεων πυριτίου  $c\text{-Si}$ , κρυσταλλικού ανθρακιδίου του πυριτίου ( $c\text{-SiC}$ ) και των άμορφων φάσεων τους,  $a\text{-Si}$  και  $a\text{-SiC}$ , ως συνάρτηση της φωτονικής ενέργειας. Τα  $\alpha\text{-SiC}$  και  $\beta\text{-SiC}$  υποδηλώνουν το εξαγωνικό και κυβικό πολύτυπο του  $c\text{-SiC}$  αντίστοιχα. Τα βέλη δείχνουν αντιστρεπτές μεταβολές ανάμεσα στις φάσεις, οι οποίες μεταβολές προέρχονται είτε από ιοντικό βομβαρδισμό ( $c \rightarrow a$ ) ή από θερμική ανόπτηση ( $a \rightarrow c$ ).

παρουσιάζει έμμεσο χάσμα στα 1.1 eV. Λόγω του έμμεσου χάσματος η οπτική απορρόφηση πάνω από το χάσμα είναι μικρή και αυξάνει σταδιακά καθώς η ενέργεια των φωτονίων πλησιάζει την τιμή του άμεσου χάσματος που είναι 3.3 eV. Παρατηρούμε πως στο διάστημα ενεργειών 1.1 έως 3.3 eV η οπτική απορρόφηση του  $a\text{-Si}$  (λόγω εμφύτευσης), είναι ιδιαίτερα αυξημένη σε σχέση με αυτή του  $c\text{-Si}$ . Επίσης το  $a\text{-Si}$  παρουσιάζει σημαντική οπτική απορρόφηση κάτω από το ενεργειακό χάσμα του  $c\text{-Si}$ . Το τελευταίο αυτό φαινόμενο οφείλεται στην δημιουργία ουρών (tailing), της ζώνης σθένους και αγωγιμότητας μέσα στο ενεργειακό χάσμα, ενώ το πρώτο στην χαλάρωση του κανόνα επιλογής του κρυσταλλικού χυματοδιανύσματος (K selection rule), για οπτικές μεταβάσεις στην άμορφη κατάσταση.

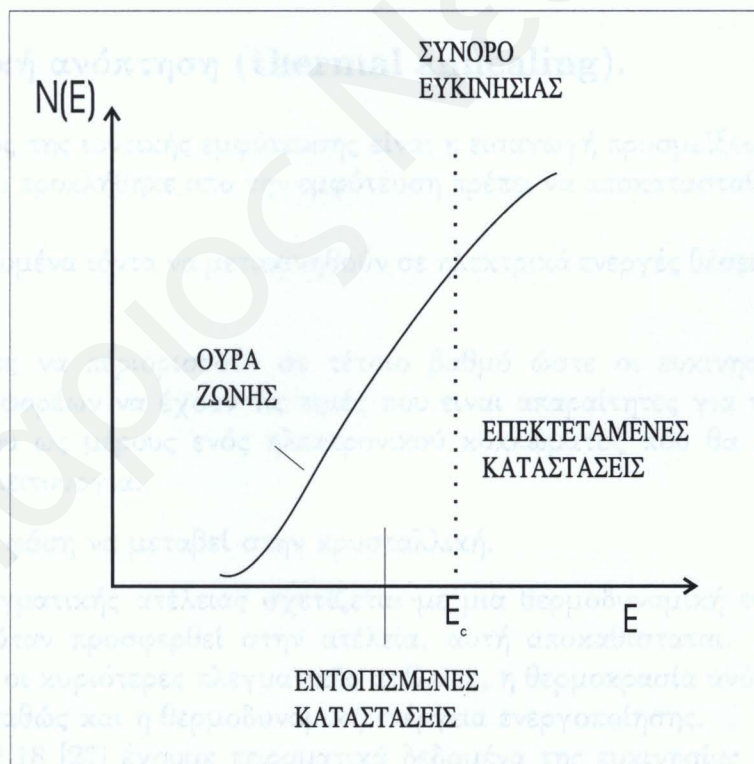
Όπως έχουμε αναφέρει ο κανόνας διατήρησης του κρυσταλλικού χυματοδιανύσματος οφείλεται στις συμμετρίες μεγάλης εμβέλειας (long range symmetries), των αντιστοιχών κρυσταλλικών δομών. Το ερώτημα σε ποιό βαθμό η αταξία που προκαλεί η ιοντική εμφύτευση σπάζει την κρυσταλλική συμμετρία του Si έχει διερευνηθεί από τους Richther και Breitling το 1957 και τους Fortner και Lannin το 1988 [26]. Στην άμορφη φάση η τετραεδρική τάξη μικρής εμβέλειας διατηρείται μέχρι και την δεύτερη γειτονική στοιβάδα. Σε μεγαλύτερες αποστάσεις τα άτομα Si εμφανίζονται κατανομημένα τυχαία μέσα στο δίκτυο του  $a\text{-Si}$ . Η τάξη μακράς εμβέλειας σπάζει λοιπόν μέσα σε μια περιοχή ίση περίπου με το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας του  $c\text{-Si}$ .



#### 2.6.4 Η επίδραση της ιοντικής εμφύτευσης στις ηλεκτρονικές και θερμικές ιδιότητες του πυριτίου.

Η ιοντική εμφύτευση σε ψηλές δόσεις και ενέργειες έχει ως αποτέλεσμα την δημιουργία χρυσταλλικών ατελειών στο πλέγμα. Τα φωνόνια που είναι οι κύριοι φορείς θερμικής ενέργειας σε ένα ημιαγωγό σχεδιάζονται ισχυρά λόγω των πλεγματικών ατελειών. Για τούτο τον λόγο η θερμική αγωγιμότητα ενός εμφυτευμένου ημιαγωγού είναι μικρότερη από αυτή του χρυσταλλικού.

Όσον αφορά τις ηλεκτρικές ιδιότητες περιμένουμε πως η ευκινησία σε ένα χρυσταλλικό υλικό είναι μεγαλύτερη από ένα άμορφο. Η δημιουργία εντοπισμένων ενεργειακών καταστάσεων (localized states) στα άκρα των ενεργειακών ζωνών και επεκτεταμένων καταστάσεων (extended states) στο κέντρο τους δυσκολεύει την κίνηση των ηλεκτρικών φορέων. Οι επεκτεταμένες καταστάσεις αποτελούν κέντρο ισχυρής σκέδασης και χωρίζονται από τις εντοπισμένες καταστάσεις με ένα 'σύνορο' ευκινησίας (mobility edge) [25] σε ενέργεια  $E_c$ . Το σύνορο αυτό ονομάζεται έτσι γιατί στην θερμοκρασία του απόλυτου μηδέν, μόνο ηλεκτρόνια με ενέργεια μεγαλύτερη του  $E_c$  συνεισφέρουν στην αγωγιμότητα. Τα πιο πάνω παρουσιάζονται στην Εικ. 2.17. Το σύνορο ευκινησίας απέχει τυπικά 0.1 – 0.5eV από το άκρο της ζώνης, σε όλους τους άμορφους ημιαγωγούς. Θα πρέπει να αναφέρουμε πως η πλεγματική αταξία ελαττώνει την ευκινησία των ηλεκτρικών φορέων πέρα από τα σύνορα ευκινησίας.



Εικόνα 2.17: Το σύνορο ευκινησίας, οι εντοπισμένες καταστάσεις και οι επεκτεταμένες καταστάσεις.

Τα εμφυτευμένα σε ενδιάμεσες δόσεις και ενέργειες στρώματα Si δεν είναι καθαρά



Τύπος ζημιάς	$T_a$ ( $0^{\circ}C$ )	$E_a$ (eV)
Ενδοπλεγματρική απουσία	180	0.2-0.5
Απουσία	200	0.8
Διπλή απουσία	300	1
Εντελώς άμορφο στρώμα	550-650	2-3
Ατελώς άμορφο στρώμα	700	3-4
Εξαρθρώσεις γραμμής	800-1000	5-8
Εξαρθρώσεις βρόγχου	800-1000	5-8

**Πίνακας 2.1:** Επαγόμενες ατέλειες λόγω ιοντικής εμφύτευσης : οι θερμοκρασίες ανόπτησης και οι ενέργειες ενεργοποίησής τους.

άμορφα ούτε και ατελώς χρυσταλλικά όσον αφορά τις ιδιότητες μεταφοράς· είναι μάλλον ανομοιογενή υλικά που παρουσιάζουν νησίδες με εντελώς τυχαία κατανομή των ατόμων μέσα σε μεγαλύτερες περιοχές που εμφανίζουν χρυσταλλική τάξη. Γενικά δεν υπάρχει κάποια θεωρία που να περιγράφει με ακρίβεια την ηλεκτρική συμπεριφορά τέτοιων υλικών. Παρακάτω στα πλαίσια της παρουσιάσης της θερμικής ανόπτησης θα αναφέρουμε περισσότερα για τις ηλεκτρικές ιδιότητες και τις σχέσεις τους με την ιοντική εμφύτευση.

## 2.7 Θερμική ανόπτηση (thermal annealing).

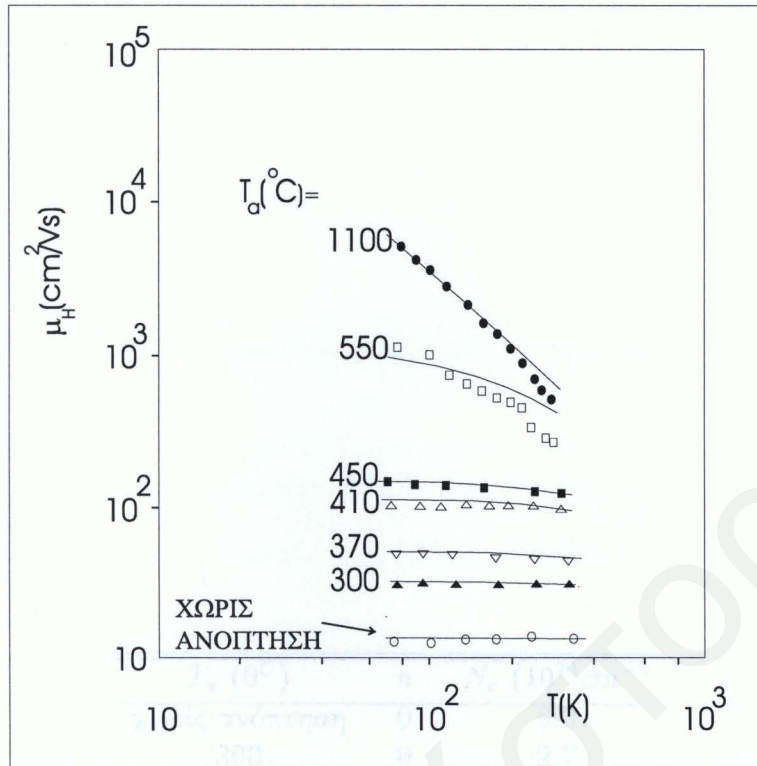
Εάν ο σκοπός της ιοντικής εμφύτευσης είναι η εισαγωγή προσμείξεων στον χρυσταλλο τότε η ζημιά που προκλήθηκε απο την εμφύτευση πρέπει να αποκατασταθεί με τέτοιο τρόπο ώστε :

1. Τα εμφυτευμένα ιόντα να μετακινηθούν σε ηλεκτρικά ενεργές θέσεις στο χρυσταλλικό πλέγμα.
2. Οι ατέλειες να περιοριστούν σε τέτοιο βαθμό ώστε οι ευκινησίες και οι χρόνοι ζωής των φορέων να έχουν τις τιμές που είναι απαραίτητες για την λειτουργία του χρυστάλλου ως μέρους ενός ηλεκτρονικού κυκλώματος που θα πραγματοποιεί μια ορισμένη λειτουργία.
3. Η άμορφη φάση να μεταβεί στην χρυσταλλική.

Κάθε είδος πλεγματικής ατέλειας σχετίζεται με μια θερμοδυναμική ενέργεια ενεργοποίησης η οποία όταν προσφερθεί στην ατέλεια, αυτή αποκαθίσταται. Στον Πίνακα 2.1 παρουσιάζονται οι κυριότερες πλεγματικές ατέλειες, η θερμοκρασία ανόπτησης στην οποία εξαφανίζονται καθώς και η θερμοδυναμική ενέργεια ενεργοποίησης.

Στην Εικ. 2.18 [27] έχουμε πειραματικά δεδομένα της ευκινησίας Hall για μια σειρά από  $n$  τύπου δείγματα  $Si$  εμφυτευμένα σε ενέργεια  $E=120 keV$  με ιόντα  $As$ , και δόση  $\Phi=8 \times 10^{14} cm^{-2}$ . Τα δείγματα έχουν υποστεί την διαδικασία της θερμικής ανόπτησης σε διάφορες θερμοκρασίες. Παρατηρούμε πως για το δείγμα που δεν έχει υποστεί θερμική ανόπτηση καθώς και για τα δείγματα που έχουν υποστεί θερμική ανόπτηση σε μικρές θερμοκρασίες η ευκινησία είναι σχεδόν ανεξάρτητη από την θερμοκρασία.





**Εικόνα 2.18:** Η ευκινησία Hall ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορες τιμές της θερμοκρασίας ανόπτησης  $T_a$ , στην περίπτωση εμφυτευμένου Si με ιόντα As.

Για τα δείγματα που έχουν ανοπτηθεί σε ψηλές θερμοκρασίες ο εκθέτης της θερμοκρασίας πλησιάζει την τιμή  $-1.5$ , που χαρακτηρίζει την σχέδαση από τα πλεγματικά φωνόνια και αφορά το χρυσταλλικό υλικό. Παρατηρούμε πως σε θερμοκρασία δωματίου η ευκινησία των μη ανοπτημένων δειγμάτων είναι 35 φορές μικρότερη από αυτή των ανοπτημένων σε θερμοκρασία  $1100^\circ\text{C}$ . Αυτό μπορεί να αποδοθεί στην μείωση της πυκνότητας των συμπυκνωμάτων των ατελειών [27]. Οι συνεχείς γραμμές στην Εικ. 2.18 είναι η θεωρητική προσαρμογή που έγινε στα πειραματικά δεδομένα χρησιμοποιώντας την ενεργό ευκινησία, που οφείλεται σε δυο όρους, την ευκινησία λόγω σχέδασης με τα φωνόνια και την ευκινησία λόγω σχέδασης με τα συμπυκνώματα των ατελειών. Ο Πίνακας 2.2 παρουσιάζει τον εκθέτη της θερμοκρασίας στην σχέση που δίνει την ευκινησία καθώς και την πυκνότητα των συμπυκνωμάτων των ατελειών για τις διάφορες θερμοκρασίες ανόπτησης.

Οι πειραματικές μετρήσεις για την αγωγιμότητα, από τους ίδιους ερευνητές δείχνουν αύξηση της αγωγιμότητας με την αύξηση της θερμοκρασίας ανόπτησης. Αυτό οφείλεται κατά ένα μέρος στην αύξηση της πυκνότητας των ηλεκτρικά ενεργών ιόντων, μια και η προσφερόμενη θερμική ενέργεια έχει ως αποτέλεσμα την μετακίνηση των εμφυτευμένων ιόντων σε ενεργές πλεγματικές θέσεις.

## Βιβλιογραφία

- [1] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Καταστάσεως, 3η έκδοση (Γ. Παπαδόπουλος, Αθήνα 1979) σελ. 191-196.
- [2] Σ. Τραγιάδης, Κβαντομηχανική II, Τραυδιόματα Προβλημάτων, Κέντρο Μεταπτυχιακών Σπουδών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, (1980) κτφ.33.
- [3] H. M. Roseberg, The Solid State, 3rd edition, Edited by J. A. D. Matthew (Oxford University Press (1963) ch.L.
- [4] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, 2nd Edition, by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 3.
- [5] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Καταστάσεως, 3η έκδοση (Γ. Παπαδόπουλος, Αθήνα 1979) σελ. 219-221.
- [6] N. W. Ashcroft, N.D Mermin, Solid State Physics, 2nd Edition, Edited by D. Crazer (Hold, Rinehart and Winston, USA 1976) pp. 47-50.
- [7] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, 2nd Edition, Edited by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 4.

$T_a$ ( $0^{\circ}C$ )	$n$	$N_c$ ( $10^{20}cm^{-3}$ )
χωρίς ανόπτηση	0	6.0
300	0	2.7
370	0	1.7
410	-0.1	0.8
450	-0.2	0.6
550	-1.0	0.8
1100	-1.5	0

**Πίνακας 2.2:** Τιμές του εκθέτη της θερμοκρασίας  $n$  και της πυκνότητας συμπυκνωμάτων  $N_c$  για διάφορες θερμοκρασίες ανόπτησης.

- [8] W. Shockley and W. T. Read, JR, Phys. Rev. 87, 835 (1952).
- [9] P. Klenz, La Physique des semiconducteurs (Mir, Moscow 1975) pp. 493-494.
- [10] J. L. Pankove, Optical Processes in Semiconductors (Dover, New York, 1971) p.265.
- [11] R. F. Pierret, Modular Series on Solid State Devices, Vol.VI, Advanced Semiconductor Fundamentals, Edited by R. F. Pierret and G. W. Neudeck (Addison-Wesley, Reading, MA, 1987), ch. 6.
- [12] R. F. Pierret, Modular Series on Solid State Devices, Vol.VI, Advanced Semiconductor Fundamentals, Edited by R. F. Pierret and G. W. Neudeck (Addison-Wesley, Reading, MA, 1987), ch. 5.
- [13] K. Seeger, Semiconductor Physics, 6th edition, Edited by M. Cardona and H. Quitsack (Springer-Verlag, Deutscher Verlag, Berlin Heidelberg (1997) ch. 4.
- [14] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, Edited by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 3.



## Βιβλιογραφία

- [1] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Καταστάσεως, 5η έκδοση (Γ. Πνευματικός, Αθήνα 1979) σελ. 190-196.
- [2] Σ. Τραχανάς, Κβαντομηχανική II, Τρισδιάστατα Προβλήματα, Κβαντική Θεωρία της Ύλης, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, (1986) κεφ.13.
- [3] H. M. Rosenberg, The Solid State, 3rd edition, Edited by J. A. D Matthew (Oxford University Press (1988) ch.1.
- [4] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, Edited by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 3.
- [5] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Καταστάσεως, 5η έκδοση (Γ. Πνευματικός, Αθήνα 1979) σελ. 219-223.
- [6] N. W. Ashcroft, N.D Mermin, Solid State Physics, Edited by D. Crane (Holt, Rinehart and Winston, USA 1976) pp. 566-568.
- [7] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, Edited by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 4.
- [8] J. I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors (Dover, New York, 1971) p.265.
- [9] W. Shockley and W.T. Read, JR, Phys. Rev. **87**, 835 (1952).
- [10] P. Kireev, La Physique des semiconducteurs (Mir, Moscow 1975) pp. 493-499.
- [11] J. I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors (Dover, New York, 1971) p.265.
- [12] R. F. Pierret *Modular Series on Solid State Devices, Vol. VI, Advanced Semiconductor Fundamentals*, Edited by R. F. Pierret and G. W. Neudeck (Addison-Wesley, Reading, MA, 1987), ch. 6.
- [13] R. F. Pierret *Modular Series on Solid State Devices, Vol. VI, Advanced Semiconductor Fundamentals*, Edited by R. F. Pierret and G. W. Neudeck (Addison-Wesley, Reading, MA, 1987), ch. 5.
- [14] K. Seeger, Semiconductor Physics, 6th edition, Edited by M. Cardona and H. Queisser (Springer-Verlag, Berlin-Verlag, Berlin Heidelberg (1997) ch. 4.
- [15] B. Streetman, Solid State Electronic Devices, Edited by N. Holonyak (Prentice Hall, New Jersey 1980) ch. 3.



- [16] J. F. Gibbons, *Range Distribution Theory and Experiments* in: Ion-Implantation in Semiconductors, Proceedings of the IEEE, vol. 56 (1968), p. 295.
- [17] H. Ryssel, *Ion Implantation into Semiconductors: Historical Perspectives* in: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Electrical and Physicochemical Characterization, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C. Christofides (Academic Press, Massachusetts) 1997) ch. 1.
- [18] J. F. Gibbons, *Range Distribution Theory and Experiments* in: Ion-Implantation in Semiconductors, Proceedings of the IEEE, vol. 56, (1968), pp. 298-305.
- [19] Y.N. Wang and T.C Ma, *Electronic Stopping Power for Energetic Ions in Solids* in: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Electrical and Physicochemical Characterization, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C. Christofides (Academic Press, Massachusetts) 1997) ch. 2.
- [20] S. Nakagawa, *Solid Effect on the Electronic Stopping of Crystalline Target and Application to Range Estimation* in: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Electrical and Physicochemical Characterization, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C. Christofides (Academic Press, Massachusetts, 1997) ch. 3.
- [21] A. L. Christel, J. F. Gibbons, and T. W. Sigmon, J. Appl. Phys. **52**, 7143-7146 (1989).
- [22] C. Christofides, *Photomodulated Thermoreflectance Investigation of Implanted Wafers. Annealing Kinetics of Defects* in: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Electrical and Physicochemical Characterization, Vol. 46, Edited by C. Christofides and G. Gibaudo (Academic Press, Massachusetts, 1997) ch. 4.
- [23] N. W. Ashcroft, N.D Mermin Streetman, Solid State Physics, Edited by D. Crane (Holt, Rinehart and Winston, USA 1976) pp. 616-641.
- [24] J. F. Gibbons, *Damage Production and Annealing* in: Ion-Implantation in Semiconductors, Proceedings of the IEEE, vol. 56, (1968), pp. 1064-1066..
- [25] R. A. Street, Hydrogenated amorphous silicon The Solid State, 1st edition, Edited by R.W. Cahn, E.A Davis, I. M. Ward (Cambridge University Press, 1991) ch.1.
- [26] G. Muller, S. Kalbitzer, G. N. Greaves *Ion Beams in Amorphous Semiconductor Research:* in: Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors: Electrical and Physicochemical Characterization, Vol. 45, Edited by G. Gibaudo and C. Christofides (Academic Press, Massachusetts) 1997) ch. 4.
- [27] C. Christofides, H. J. Jaouen, and G. Gibaudo, J. Appl. Phys. **65**, 4832-4839 (1989).



## Κεφάλαιο 3

# Θερμικά κύματα και κύματα πλάσματος. Οι τεχνικές PMTR και PTR.

### 3.1 Διάδοση της θερμότητας.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, οι φωτοθερμικές τεχνικές βασίζονται στην μετατροπή της απορροφούμενης από κάποιο υλικό φωτεινής ενέργειας σε θερμότητα. Προτού αναφερθούμε στα αποτελέσματα της επαγόμενης αυτής θερμότητας θα ήταν καλό να αναφερθούμε στους τρεις βασικούς τρόπους διάδοσης της. Η θερμότητα που είναι μια μορφή ενέργειας σε κίνηση διαδίδεται με τους πιο κάτω μηχανισμούς:

**A) Με αγωγή (conduction)** όπου η θερμική ενέργεια μεταφέρεται μέσω των πλεγματοειδών ταλαντώσεων (φωνόνια) στα στερεά και στα ακίνητα ρευστά. Στην περίπτωση αυτή η ροή θερμότητας περιγράφεται από τον γενικό νόμο της διάχυσης (νόμος του Fourier):

$$\vec{F}_{cond} = -\chi \vec{\nabla}T \quad (3.1)$$

όπου  $F$  είναι η θερμική ισχύς που διαπερνά την μονάδα επιφάνειας που είναι κάθετα τοποθετημένη στην διεύθυνση διάδοσης της θερμότητας. Η σταθερά αναλογίας  $\chi$  είναι χαρακτηριστικό του υλικού (συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας). Το πρόσημο μείον δηλώνει πως η θερμότητα κινείται από την περιοχή υψηλών θερμοκρασιών προς την περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών.

**B) Με μεταφορά (convection).** Ο νόμος (ψύξης του Newton) που περιγράφει αυτή την διαδικασία αφορά την ανταλλαγή θερμότητας ανάμεσα σε μια επιφάνεια και σε ένα κινούμενο ρευστό. Στη περίπτωση αυτή η ροή θερμότητας είναι ανάλογη της διαφοράς θερμοκρασίας ανάμεσα στην επιφάνεια  $T_s$  και σε αυτή του ρευστού  $T_\infty$ . Η σταθερά αναλογίας  $h$  έχει μονάδες ( $W/m^2K$ ).

$$F_{conv} = h (T_s - T_\infty) \quad (3.2)$$

Αυτός ο μηχανισμός διάδοσης της θερμότητας δεν θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα γιατί είναι αμελητέος σε ένα φωτοθερμικό πείραμα. Η θερμική διαταραχή που επάγεται στο υλικό κατά τον φωτισμό του με μια δέσμη φωτός είναι συνήθως πολύ μικρή και για αυτό τον λόγο μπορούμε να θεωρήσουμε πως οι θερμοκρασίες  $T_s$  και  $T_\infty$  είναι ίσες, και επομένως η διάδοση ακτινοβολίας με αγωγή είναι μηδενική.

3 Γ) Με ακτινοβολία (radiation), όπου η ενέργεια μεταφέρεται υπό μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (φωτόνια) που εκπέμπουν τα άτομα του υλικού και οφείλεται στην θερμική τους κίνηση. Σε αυτή την περίπτωση η ροή ακτινοβολίας περιγράφεται από τον νόμο των Stefan-Boltzmann :

$$F_{rad} = \epsilon \sigma T_s^4 \quad (3.3)$$

Η σταθερά  $\epsilon$  είναι ο συντελεστής εκπομπής του σώματος ( $0 < \epsilon < 1$ ) που εξαρτάται από το είδος του υλικού και την φυσική κατάσταση της επιφάνειας του και  $T_s$  η θερμοκρασία του σώματος. Για ένα ιδανικό εκπομπό (μέλαν σώμα) ο συντελεστής εκπομπής είναι μονάδα. Η σταθερά  $\sigma$  είναι γνωστή ως σταθερά των Stefan-Boltzmann και έχει την τιμή  $5.67 \times 10^8 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ .

### 3.2 Η εξίσωση διάχυσης της θερμότητας.

Ο νόμος 'κίνησης' της θερμότητας μπορεί να εξαχθεί από την αρχή διατήρησης της ενέργειας σε ένα στοιχείο όγκου του υλικού και τον νόμο του Fourier για την αγωγή της θερμότητας. Η ροή θερμότητας ορίζεται ως η θερμική ενέργεια που διαπερνά μια μοναδιαία επιφάνεια, τοποθετημένη κάθετα στην διεύθυνση αγωγής της θερμότητας, ανά μονάδα χρόνου. Η διατήρηση της ενέργειας μας λέει πως η ροή της θερμότητας μέσα από μια κλειστή επιφάνεια που δεν περιέχει κάποια πηγή ή καταβόθρα ενέργειας ισούται με τον ρυθμό μείωσης της θερμότητας  $Q$  μέσα στην κλειστή περιοχή, δηλαδή :

$$\oint \vec{F} \cdot \vec{ds} = -\frac{dQ}{dt} \quad (3.4)$$

Από το θεώρημα του Gauss μπορούμε να γράψουμε

$$\oint \vec{F} \cdot \vec{ds} = \int \nabla \vec{F} \cdot dV = -\frac{dq}{dt} dV \quad (3.5)$$

όπου  $q$  είναι τώρα η ροή θερμότητας ανά μονάδα όγκου. Από τις δυο προηγούμενες σχέσεις και τον νόμο του Fourier έχουμε

$$\nabla \vec{F} = \nabla (-\chi \vec{\nabla} T) = -\frac{dq}{dt} \quad (3.6)$$

και συνεπώς

$$\frac{dq}{dt} = \chi \nabla^2 T \quad (3.7)$$

Το στοιχειώδες ποσό θερμότητας  $dq$  μπορεί να γραφεί ως  $\rho C dT$  με  $C$  την ειδική θερμότητα του υλικού και  $\rho$  την πυκνότητά του, οπότε η εξίσωση διάχυσης της θερμότητας λαμβάνει την μορφή :

$$\frac{dT}{dt} - \frac{1}{D_T} \nabla^2 T = 0 \quad (3.8)$$

όπου  $D_T$  ο συντελεστής θερμικής διάχυσης

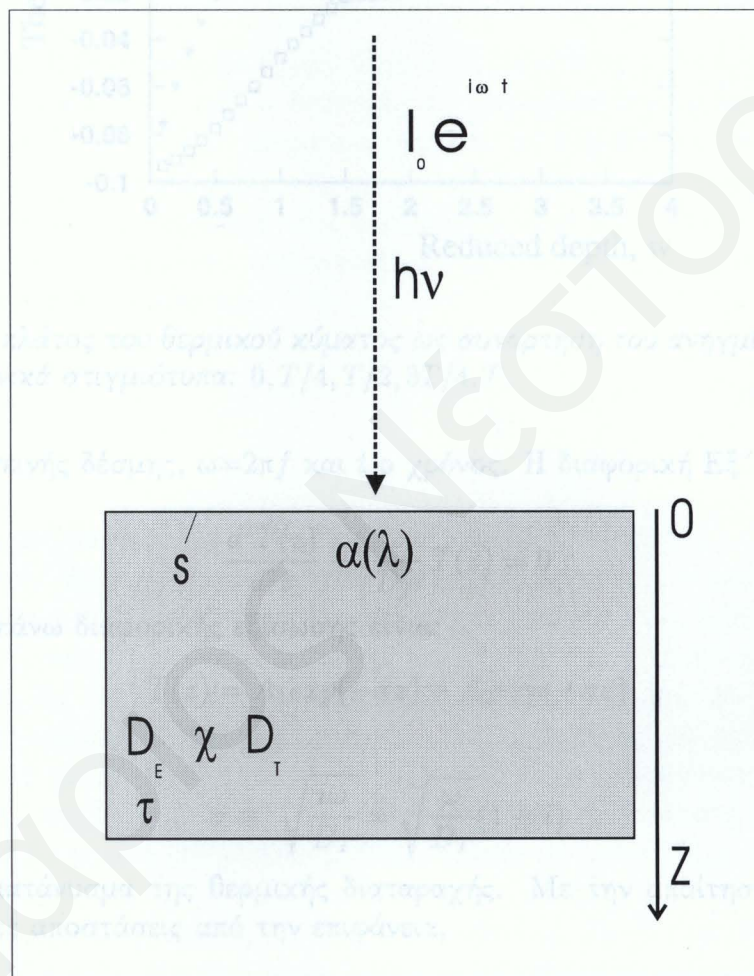
$$D_T = \frac{\chi}{\rho C} \quad (3.9)$$



### 3.3 Δημιουργία θερμικών κυμάτων στην ύλη

Ένα απλό αλλά πολύ σημαντικό πρόβλημα είναι η εύρεση του πεδίου θερμοκρασίας (δηλαδή της τιμής της θερμοκρασίας σε κάθε σημείο του χώρου) σ' ένα ημιάπειρο ομογενές υλικό, το οποίο φωτίζεται από μια μονοχρωματική δέσμη.

Υποθέτουμε λοιπόν πως μονοχρωματική ακτινοβολία μήκους κύματος  $\lambda$ , φωτίζει την επιφάνεια ενός υλικού με συντελεστή οπτικής απορρόφησης  $\alpha(\lambda)$ , για το συγκεκριμένο μήκος κύματος (βλ. Εικ. 3.1). Ένα ποσοστό της προσπίπτουσας φωτεινής ενέργειας απορροφάται από το υλικό και μέρος του μετατρέπεται σε θερμότητα. Το πεδίο θερμοκρασίας θα βρεθεί από την λύση της εξίσωσης διάχυσης της θερμότητας.

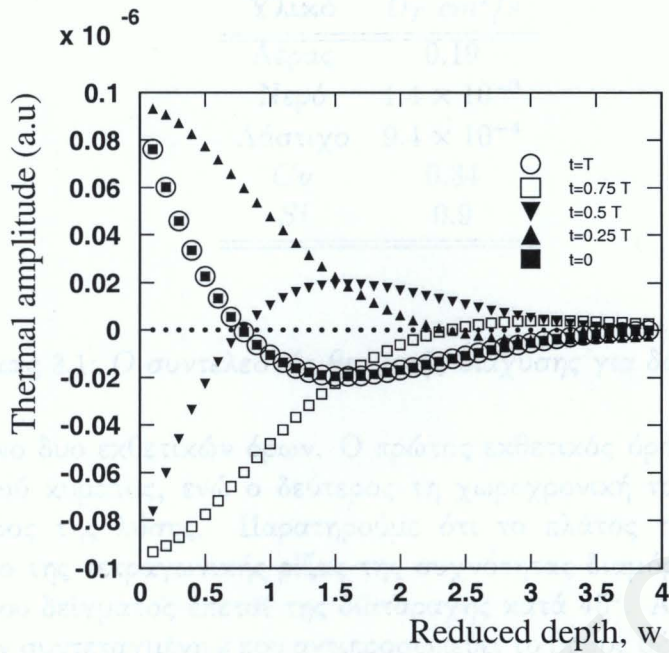


**Εικόνα 3.1:** Μονοδιάστατο φωτοθερμικό μοντέλο. Διαμορφωμένη ακτινοβολία μήκους κύματος  $\lambda$ , προσπίπτει κάθετα στο υλικό, το οποίο θεωρείται ημιάπειρο στην κατεύθυνση  $z$ .

Για ένα ημιάπειρο δείγμα, του οποίου η επιφάνεια θερμαίνεται περιοδικά, η μονοδιάστατη λύση για τη θερμοκρασία  $T$  είναι της μορφής:

$$T(z, t) = T(z) \exp(i\omega t) \quad (3.10)$$

όπου  $\omega$  είναι η κυκλική συχνότητα που αντιστοιχεί στην συχνότητα διαμόρφωσης  $f$  της



**Εικόνα 3.2:** Το πλάτος του θερμικού κύματος ως συνάρτηση του ανηγμένου βάρους  $w$  του υλικού, στα χρονικά στιγμιότυπα:  $0, T/4, T/2, 3T/4, T$ .

έντασης της φωτεινής δέσμης,  $\omega = 2\pi f$  και  $t$  ο χρόνος. Η διαφορική Εξ'. 3.8 γράφεται ως εξής :

$$\frac{d^2 T(z)}{dz^2} - i \frac{\omega}{D_T} T(z) = 0 \quad (3.11)$$

Η λύση της πιο πάνω διαφορικής εξίσωσης είναι:

$$T(z) = A_1 \exp(-\sigma z) + A_2 \exp(+\sigma z) \quad (3.12)$$

με

$$\sigma \equiv \sqrt{\frac{i\omega}{D_T}} = \sqrt{\frac{\omega}{D_T}}(1+i) \quad (3.13)$$

το μιγαδικό κυμαάνυσμα της θερμικής διαταραχής. Με την απαίτηση μηδενισμού της λύσης σε μεγάλες αποστάσεις από την επιφάνεια,

$$T(z = \infty) = 0 \quad (3.14)$$

παίρνουμε αμέσως ότι  $A_1 = 0$ . Χρησιμοποιώντας επίσης την συνθήκη περιοδικής θέρμανσης στην επιφάνεια του δείγματος :

$$-\chi \frac{dT(0,t)}{dz} = h\nu I_{abs} \exp(i\omega t) \quad (3.15)$$

όπου  $I_{abs}$  η απορροφούμενη από το υλικό ισχύς της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, παίρνουμε :

$$T(z,t) = \frac{I_{abs}}{2\chi} \sqrt{\frac{D_T}{2\pi f}} \exp\left(\frac{-z}{\mu_T}\right) \exp\left(i\omega t - \frac{z}{\mu_T} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.16)$$



Υλικό	$D_T \text{ cm}^2/\text{s}$
Αέρας	0.19
Νερό	$1.4 \times 10^{-3}$
Λάστιχο	$9.4 \times 10^{-4}$
Cu	0.34
Si	0.9

Πίνακας 3.1: Ο συντελεστής θερμικής διάχυσης για διάφορα υλικά.

που είναι γινόμενο δυο εκθετικών όρων. Ο πρώτος εκθετικός όρος περιγράφει την απόσβεση του θερμικού κύματος, ενώ ο δεύτερος τη χωροχρονική του εξέλιξη και αποτελεί το κυματικό μέρος της λύσης. Παρατηρούμε ότι το πλάτος του κύματος είναι αντιστρόφως ανάλογο της τετραγωνικής ρίζας της συχνότητας διαμόρφωσης και πως η φάση στην επιφάνεια του δείγματος έπεται της διαταραχής κατά  $45^\circ$ . Ακόμα η φάση εξαρτάται γραμμικά από την συντεταγμένη  $z$  που αντιπροσωπεύει το βάθος μέσα στο υλικό. Ορίζουμε το μήκος θερμικής διάχυσης ως

$$\mu_T \equiv \sqrt{\frac{D_T}{\pi f}} \quad (3.17)$$

#### Παρατηρήσεις:

##### A) Ομοιότητες θερμικών και ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων.

Η εξίσωση του θερμικού κύματος στο υλικό και το μήκος θερμικής διάχυσης μας θυμίζουν αντίστοιχα το πλάτος ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος στην περιοχή ενός μεταλλικού αγωγού, και το επιδερμικό βάθος του ηλεκτρομαγνητικού κύματος στο υλικό αυτό αντίστοιχα. Το πλάτος του θερμικού κύματος ως συνάρτηση του ανηγμένου βάθους  $w$ , ( $w = z/\mu_T$ ), του υλικού φαίνεται στην Εικ. 3.2, για διάφορα χρονικά στιγμιότυπα. Παρατηρούμε πως το θερμικό κύμα απορροφάται κατά ένα παράγοντα  $1/e$  σε βάθος ίσο με το μήκος θερμικής διάχυσης. Σε ένα υλικό με μεγάλο συντελεστή θερμικής διάχυσης το θερμικό κύμα θα φτάσει σε μεγάλο βάθος. Επίσης το μήκος θερμικής διάχυσης είναι αντιστρόφως ανάλογο της τετραγωνικής ρίζας της συχνότητας διαμόρφωσης, κάτι που μας δίνει τη δυνατότητα τομογραφικής μελέτης του υλικού [1, 2]. Για μεγάλες τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης το θερμικό κύμα βρίσκεται εντοπισμένο κοντά στην επιφάνεια του υλικού, ενώ για μικρές τιμές το κεντροειδές του θερμικού κύματος βρίσκεται πιο βαθειά στο υλικό.

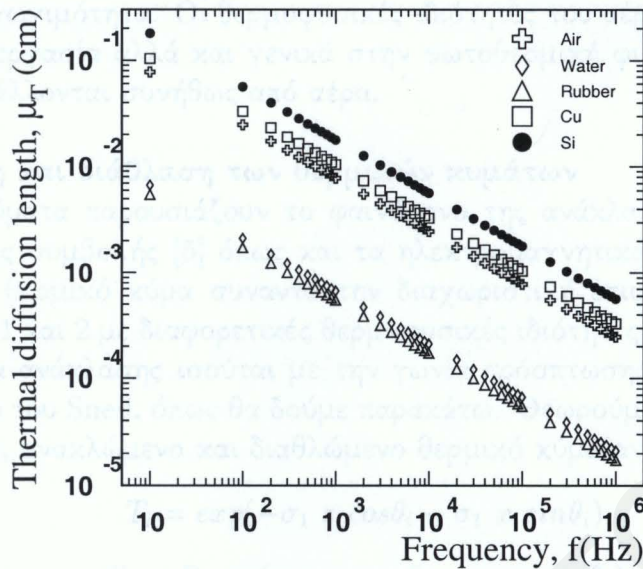
Ένα στρώμα υλικού με πάχος  $d$  χαρακτηρίζεται ως **θερμικά λεπτό** αν  $d \ll \mu_T$  και **θερμικά παχύ** αν  $d \gg \mu_T$ . Στην Εικ. 3.3 έχουμε το μήκος θερμικής διάχυσης ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για διάφορα υλικά.

##### B) Ταχύτητα φάσης

Η ταχύτητα φάσης των θερμικών κυμάτων είναι :

$$v = \mu_T \omega = \sqrt{2 D_T \omega} \quad (3.18)$$





Εικόνα 3.3: Το μήκος θερμικής διάχυσης ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για διάφορα υλικά.

επομένως τα θερμικά κύματα παρουσιάζουν το φαινόμενο της διασποράς, δηλαδή κύματα διαφορετικής συχνότητας ταξιδεύουν με διαφορετική ταχύτητα φάσης. Τα υψηλής συχνότητας θερμικά κύματα ταξιδεύουν με μεγαλύτερη ταχύτητα από αυτά με χαμηλή συχνότητα. Το φαινόμενο της διασποράς δεν θα μας απασχολήσει μια και εμφανίζεται στην περίπτωση διέγερσης του υλικού με παλμικό φως. Οι φωτοθερμικές τεχνικές με χρήση παλμικού φωτός, παίρνουν πληροφορίες για το υλικό μελετώντας την χρονική εξέλιξη της θερμικής διέγερσης. Στο πεδίο της χρονικής απόκρισης η λύση για την θερμοκρασία,  $T(r, t)$  μπορεί να γραφεί σαν μια επαλληλία λύσεων στο πεδίο συχνοτήτων  $T(r, \omega_n, t)$ , την γνωστή σειρά Fourier με κατάλληλους συντελεστές  $a_n$ .

### Γ) Θερμική εμπέδηση

Σε αναλογία με την ηλεκτρική εμπέδηση μπορεί να οριστεί η θερμική εμπέδηση. Την θέση της πυκνότητας ηλεκτρικού ρεύματος θα πάρει η ροή θερμότητας και αυτή του ηλεκτρικού πεδίου το πεδίο θερμοκρασίας. Η θερμική εμπέδηση  $Z$  [3, 4] είναι:

$$Z = \frac{1}{\chi \sigma} = \frac{1}{i \sqrt{\omega \rho C \chi}} \quad (3.19)$$

Η θερμική εμπέδηση καθορίζει το πλάτος του θερμικού κύματος στην επιφάνεια του δείγματος. Στην φωτοθερμική φυσική ορίζεται και μια νέα ποσότητα η **εχροή** (effusivity) από την πιο κάτω σχέση:

$$e = \sqrt{\rho C \chi} \quad (3.20)$$

Μικρές τιμές της εχροής έχουν ως αποτέλεσμα μεγάλη τιμή του θερμικού πλάτους της επιφανειακής θερμοκρασίας. Γενικά τα υλικά με μεγάλο συντελεστή θερμικής διάχυσης παρουσιάζουν μεγάλο συντελεστή εχροής, με μερικές εξαιρέσεις όμως, όπως αυτή του αέρα.



Ο αέρας έχει μεγάλο συντελεστή θερμικής διάχυσης επειδή η μικρή τιμή της θερμικής του αγωγιμότητας εξισορροπείται από την επίσης μικρή τιμή της πυκνότητας του. Ο συντελεστής εκροής όμως είναι πολύ μικρός γιατί προκύπτει από το γινόμενο της πυκνότητας επί την θερμική αγωγιμότητα. Οι θερμοφυσικές ιδιότητες του αέρα είναι πολύ σημαντικές για την παρούσα εργασία αλλά και γενικά στην φωτοθερμική φυσική γιατί τα υλικά που εξετάζονται περιβάλλονται συνήθως από αέρα.

#### Δ) Ανάκλαση και διάθλαση των θερμικών κυμάτων

Τα θερμικά κύματα παρουσιάζουν το φαινόμενο της ανάκλασης, της διάθλασης, της περίθλασης και της συμβολής [5] όπως και τα ηλεκτρομαγνητικά και ακουστικά κύματα. Έτσι καθώς ένα θερμικό κύμα συναντά την διαχωριστική επιφάνεια (έστω το επίπεδο  $z = 0$ ) δυο μέσων 1 και 2 με διαφορετικές θερμοφυσικές ιδιότητες ανακλάται και διαθλάται εν μέρει. Η γωνία ανάκλασης ισούται με την γωνία πρόσπτωσης και η γωνία διάθλασης υπακούει τον νόμο του Snell, όπως θα δούμε παρακάτω. Θεωρούμε τις πιο κάτω εκφράσεις για το προσπίπτον, ανακλώμενο και διαθλώμενο θερμικό κύμα αντίστοιχα:

$$T_i = \exp(-\sigma_1 z \cos\theta_i - \sigma_1 x \sin\theta_i) \quad (3.21)$$

$$T_r = R \exp(-\sigma_1 z \cos\theta_r - \sigma_1 x \sin\theta_r) \quad (3.22)$$

$$T_t = T \exp(-\sigma_2 z \cos\theta_t - \sigma_2 x \sin\theta_t) \quad (3.23)$$

Το πλάτος του προσπίπτοντος θερμικού κύματος είναι μονάδα,  $R$  και  $T$  είναι οι συντελεστές ανάκλασης και μετάδοσης αντίστοιχα. Η συνέχεια της θερμοκρασίας στο επίπεδο  $z = 0$  δίνει:

$$\exp(-\sigma_1 x \sin\theta_i) + R \exp(-\sigma_1 x \sin\theta_r) = T \exp(-\sigma_2 x \sin\theta_t) \quad (3.24)$$

Εφόσον η πιο πάνω συνθήκη πρέπει να ισχύει για κάθε  $x$  στο επίπεδο  $z = 0$  τα ορίσματα των εκθετικών της προηγούμενης σχέσης πρέπει να είναι ίσα:

$$\sigma_1 x \sin\theta_i = \sigma_1 x \sin\theta_r = \sigma_2 x \sin\theta_t \quad (3.25)$$

Οι νόμοι της ανάκλασης και της διάθλασης προκύπτουν άμεσα από την προηγούμενη σχέση και είναι αντίστοιχα :

$$\theta_i = \theta_r \quad (3.26)$$

$$\sigma_1 \sin\theta_i = \sigma_2 \sin\theta_t \quad (3.27)$$

Η συνέχεια της ροής της θερμότητας στην διαχωριστική επιφάνεια δίνει :

$$\chi_1 \sigma_1 \cos\theta_i - R \chi_1 \sigma_1 \cos\theta_r = T \chi_2 \sigma_2 \cos\theta_t \quad (3.28)$$

Εφόσον η γωνία ανάκλασης ισούται με την γωνία πρόσπτωσης και  $T = R + 1$  στο  $x = 0$  οι συντελεστές ανάκλασης και μετάδοσης είναι:

$$R = \frac{\cos\theta_i - b \cos\theta_t}{\cos\theta_i + b \cos\theta_t} \quad (3.29)$$

$$T = \frac{2 \cos\theta_i}{\cos\theta_i + b \cos\theta_t} \quad (3.30)$$



όπου

$$b \equiv \frac{\chi_2 \sigma_2}{\chi_1 \sigma_1} = \frac{\sqrt{\chi_2} \rho_2 C_2}{\sqrt{\chi_1} \rho_1 C_1} . \quad (3.31)$$

Στην περίπτωση κάθετης πρόσπτωσης ( $\theta_i = \theta_r = 0$ ) οι συντελεστές ανάκλασης και διάθλασης παίρνουν την απλή μορφή:

$$R = \frac{1 - b}{1 + b} \quad (3.32)$$

$$T = \frac{2}{1 + b} . \quad (3.33)$$

Τα μεγέθη των συντελεστών διέλευσης και μετάδοσης εξαρτώνται από την τιμή του  $b$  και συνεπώς από των λόγο των συντελεστών εκροής των δύο μέσων. Ο συντελεστής εκροής αποτελεί λοιπόν ένα μέτρο της θερμικής ασυμφωνίας δυό μέσων. Οι εκφράσεις για τους συντελεστές  $T$  και  $R$  είναι ανάλογες με αυτές που ισχύουν στην περίπτωση των ηλεκτρομαγνητικών και ακουστικών κυμάτων.

### Παραδοχές

Για να πάρουμε την λύση 3.16 κάναμε τις εξής παραδοχές: Η μετατροπή της φωτεινής ενέργειας σε θερμική είναι στιγμιαία και γίνεται στην επιφάνεια του υλικού, ενώ η διεύθυνση διάδοσης της θερμότητας είναι μονοδιάστατη. Η διάδοση της θερμότητας μπορεί να προσεγγιστεί ως μονοδιάστατη όταν η ακτίνα της δέσμης άντλησης (pump beam) ( $\alpha_p$ ) είναι μεγαλύτερη από το μήκος θερμικής διάχυσης στο υλικό. Στην αντίθετη περίπτωση,  $\alpha_p < \mu_T$ , η εξίσωση διάχυσης θα πρέπει να λυθεί στις τρεις διαστάσεις, όπως θα δούμε και σε συγκεκριμένο παράδειγμα στην συνέχεια.

## 3.4 Δημιουργία κυμάτων πλάσματος

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει αν η ενέργεια των προσπιπόντων φωτονίων είναι ίση ή μεγαλύτερη από το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού, τα φωτόνια θα δημιουργήσουν ζεύγη οπών-ηλεκτρονίων. Η εξίσωση κίνησης των ηλεκτρικών φορέων προκύπτει από τον νόμο διατήρησης του ηλεκτρικού φορτίου:

$$\frac{\partial(N e)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = G e - \frac{N e}{\tau} \quad (3.34)$$

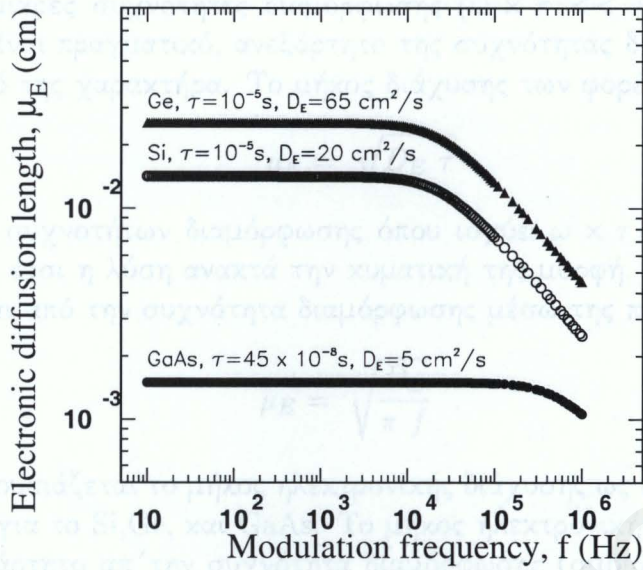
όπου όπου  $N$  η συγκέντρωση των επιπλέον ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου,  $J$  η πυκνότητα ρεύματος,  $G$  ο ρυθμός γενέσεως των  $e$ , και  $\tau$  ο χρόνος ζωής τους. Έτσι ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος της πιο πάνω εξίσωσης αντιπροσωπεύει τον ρυθμό καταστροφής των  $e$ . Απουσία ηλεκτρικού πεδίου η πυκνότητα ρεύματος  $J$  οφείλεται στην βαθμίδα συγκέντρωσης των  $e$  και είναι λοιπόν:

$$\vec{J} = -e D_E \vec{\nabla} N . \quad (3.35)$$

Έτσι η εξίσωση διατήρησης του ηλεκτρικού φορτίου (οπών και ηλεκτρονίων) σ'ένα ημιαγωγό, με την προσθήκη του όρου επανασύνδεσης και του όρου πηγής παίρνει την μορφή :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_E \nabla^2 N - \frac{N}{\tau} + G . \quad (3.36)$$





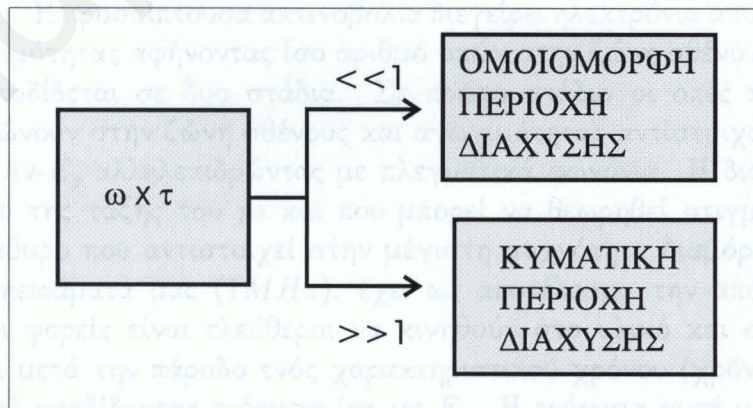
Εικόνα 3.4: Το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για το Si, Ge, GaAs.

Υποθέτωντας περιοδική λύση στην επιφάνεια παίρνουμε κυματική λύση για την πυκνότητα φορέων ανάλογη με αυτή που πήραμε για την θερμοκρασία. Το κυματόνισμα που αντιστοιχεί στην κυματική λύση για τις οπές και τα ηλεκτρόνια (πλάσμα) είναι:

$$u = \sqrt{\frac{1 + i \omega \tau}{D_E \tau}} \quad (3.37)$$

ενώ το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης είναι

$$\mu_E = \frac{1}{\text{Re}(u)} = \sqrt{\frac{2 D_E \tau}{1 + \sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}}} \quad (3.38)$$



Εικόνα 3.5: Οι ανισότητες  $\omega \times \tau$  και οι περιοχές διάχυσης των ηλεκτρικών φορέων.



Η επανασύνδεση των φορέων καθορίζει δυο περιοχές διάχυσης των φορέων, την **κυματική περιοχή** για τις μεγάλες συχνότητες διαμόρφωσης  $\omega \times \tau \gg 1$  και την **ομοιόμορφη περιοχή** για τις μικρές συχνότητες διαμόρφωσης ( $\omega \times \tau \ll 1$ ). Όταν  $\omega \times \tau \ll 1$  το κυματόνυσμα είναι πραγματικό, ανεξάρτητο της συχνότητας διαμόρφωσης, και η λύση χάνει τον κυματικό της χαρακτήρα. Το μήκος διάχυσης των φορέων είναι :

$$\mu_E = \sqrt{D_E \tau} \quad (3.39)$$

ενώ στην περιοχή συχνοτήτων διαμόρφωσης όπου ισχύει  $\omega \times \tau \gg 1$ , το κυματόνυσμα είναι μιγαδικό και έτσι η λύση αναχτά την κυματική της μορφή. Το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης εξαρτάται από την συχνότητα διαμόρφωσης μέσω της πιο κάτω σχέσης :

$$\mu_E = \sqrt{\frac{D_E}{\pi f}} \quad (3.40)$$

Στην Εικ. 3.4 παρουσιάζεται το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για το Si, Ge, και GaAs. Το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης για το GaAs είναι σχεδόν ανεξάρτητο απ' την συχνότητα διαμόρφωσης (ομοιόμορφη περιοχή) γιατί ο χρόνος ζωής των φορέων στο υλικό αυτό είναι πάρα πολύ μικρός. Στην περίπτωση των Si και Ge η ηλεκτρονική διάχυση είναι στην ομοιόμορφη περιοχή μέχρι την συχνότητα των 10kHz περίπου και μετά μεταβαίνει σταδιακά στην κυματική περιοχή, καθώς ο χρόνος ζωής πλησιάζει και ξεπερνά την σταθερά χρόνου της διαμόρφωσης που είναι  $2\pi/\omega$ . Στην Εικ. 3.5 παρουσιάζεται σχεδιαγραμματικά η συμπεριφορά της συνιστώσας πλάσματος ενός ημιαγωγού σε σχέση με την συχνότητα διαμόρφωσης και τον χρόνο ζωής των φορέων στο υλικό. Τα σχόλια που έγιναν στην προηγούμενη παράγραφο για την γεωμετρία της διάχυσης και την ικανότητα τομογραφικής ανάλυσης ισχύουν και στην περίπτωση των κυμάτων πλάσματος.

### 3.5 Η τεχνική PMTR

Ας ξεκινήσουμε την ανάλυση μας από τις διαδικασίες που συμβαίνουν σε ένα ημιαγωγό όταν μια δέσμη φωτονίων, ενέργειας  $h\nu$  μεγαλύτερης από το ενεργειακό του χάσμα, φωτίσει την επιφάνεια του. Η προσπίπτουσα ακτινοβολία διεγείρει ηλεκτρόνια από την ζώνη σθένους στην ζώνη αγωγιμότητας αφήνοντας ίσο αριθμό οπών στην ζώνη σθένους. Η ενέργεια που απορροφάται, αποδίδεται σε δυο στάδια. Σε πρώτο στάδιο οι οπές και τα ηλεκτρόνια (πλάσμα) χαλαρώνουν στην ζώνη σθένους και αγωγιμότητας αντίστοιχα, ελευθερώνοντας ενέργεια ίση με  $h\nu - E_g$  αλληλεπιδρώντας με πλεγματικά φωνόνια. Η διαδικασία αυτή που γίνεται σε χρόνο της τάξης του  $ps$  και που μπορεί να θεωρηθεί στιγμιαία σε σχέση με το χρονικό παράθυρο που αντιστοιχεί στην μέγιστη συχνότητα διαμόρφωσης που χρησιμοποιούμε στα πειράματα μας (1MHz), έχει ως αποτέλεσμα την απόδοση θερμότητας στο πλέγμα. Οι φορείς είναι ελεύθεροι να κινηθούν στο υλικό και σε δεύτερο στάδιο επανασυνδέονται μετά την πάροδο ενός χαρακτηριστικού χρόνου (χρόνος ζωής ή χρόνος επανασύνδεσης  $\tau$ ) αποδίδοντας ενέργεια ίση με  $E_g$ . Η ενέργεια αυτή μπορεί να αποδοθεί είτε σε μορφή ακτινοβολίας, που δεν αποτελεί πηγή θερμότητας για το πλέγμα είτε με εκπομπή φωνονίων με αποτέλεσμα την αύξηση της πλεγματικής θερμοκρασίας. Στην



περίπτωση του Si ο κύριος μηχανισμός επανασύνδεσης είναι αυτός των  $S - R - H$  που συμβαίνει τόσο στην επιφάνεια του όσο και στο εσωτερικό του και έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση της πλεγματικής θερμοκρασίας. Το φωτοθερμικό σήμα  $PMTR$  οφείλεται στην διαμόρφωση του δείκτη διάθλασης του υλικού και συνεπώς της ανακλαστικότητας του, από τους περιοδικούς παλμούς του laser άντλησης. Εφόσον τα αποτελέσματα της οπτικής διαταραχής του υλικού είναι η αύξηση της θερμοκρασίας του και η δημιουργία ελεύθερων φορέων που δεν βρίσκονται σε θερμική ισορροπία, μπορεί να υποθέσει κανείς πως έχουμε δυο συνεισφορές στο σήμα, την θερμική  $S_T$  και την συνεισφορά πλάσματος  $S_N$ . Το φωτοδιεγερμένο πλάσμα συμμετέχει και έμμεσα στην αύξηση της θερμοκρασίας  $\Delta T$  μέσω της αλληλεπίδρασης του με το πλέγμα. Για μικρές αλλαγές  $\Delta T$  και  $\Delta N$  στην επιφανειακή θερμοκρασία και στην πυκνότητα ηλεκτρικών φορέων στην επιφάνεια αντίστοιχα, η σχετική αλλαγή στην ανακλαστικότητα είναι [6]:

$$S_R \equiv \frac{\Delta R}{R} = C_T \Delta T + C_N \Delta N = S_T + S_N \quad (3.41)$$

όπου  $R$  η ανακλαστικότητα σε θερμοκρασία  $T$  και  $\Delta R$  η μεταβολή της ανακλαστικότητας. Οι συντελεστές  $C_T$  και  $C_N$  δίνονται αντίστοιχα από τις σχέσεις :

$$C_T = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \quad (3.42)$$

$$C_N = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} \quad (3.43)$$

Η διαμόρφωση της δέσμης άντλησης σε συχνότητα  $f$ , εκτός από τη δυνατότητα τομογραφικής ανάλυσης του υλικού που μας προσφέρει, μας επιτρέπει και τη διάκριση της συνιστώσας πλάσματος από την θερμική συνιστώσα. Όταν ισχύει  $\omega \times \tau \ll 1$ , σημαίνει πως ο χρόνος ζωής των φορέων είναι πολύ μικρός σε σχέση με το χρονικό παράθυρο ανίχνευσης ( $2\pi/\omega$ ) άρα ο ανιχνευτής μετρά την θερμική συνεισφορά. Στην άλλη ακραία περίπτωση  $\omega \times \tau \gg 1$  φωτοδιεγερμένοι φορείς ζουν αρκετά έτσι ώστε να συνεισφέρουν στο φωτοθερμικό σήμα.

### 3.5.1 Αναλυτικός υπολογισμός των πεδίων θερμοκρασίας και πλάσματος σε ημιάπειρο ημιαγωγό.

Για να υπολογίσει κανείς τη σχετική ανακλαστικότητα  $\Delta R/R$  θα πρέπει να λύσει τις εξισώσεις διάχυσης του πλάσματος και της θερμότητας στο υλικό, δηλαδή να υπολογίσει τις ποσότητες  $\Delta T(\vec{r})$  και  $\Delta N(\vec{r})$ . Θεωρώντας ένα ημιάπειρο και ισότροπο υλικό και αγνοώντας μή γραμμικά φαινόμενα (η τιμή της πυκνότητας των φωτοδιεγερμένων φορέων δεν αποκλίνει πολύ από αυτή της ισορροπίας) οι εξισώσεις διάχυσης για την πυκνότητα πλάσματος και τη θερμότητα είναι αντίστοιχα:

$$\frac{\partial(\Delta N)}{\partial t} = D_E \nabla^2(\Delta N) - \frac{\Delta N}{\tau} + \frac{\partial n_0}{\partial T} \frac{\Delta T}{\tau} + \Phi \psi_p(r) \alpha e^{-\alpha z} e^{i\omega t} \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial(\Delta T)}{\partial t} = D_T \nabla^2(\Delta T) + D_T \frac{E_g}{\chi} \frac{\Delta N}{\tau} + D_T \left( \frac{h\nu - E_g}{\chi} \right) \Phi \psi_p(r) \alpha e^{-\alpha z} e^{i\omega t} \quad (3.45)$$

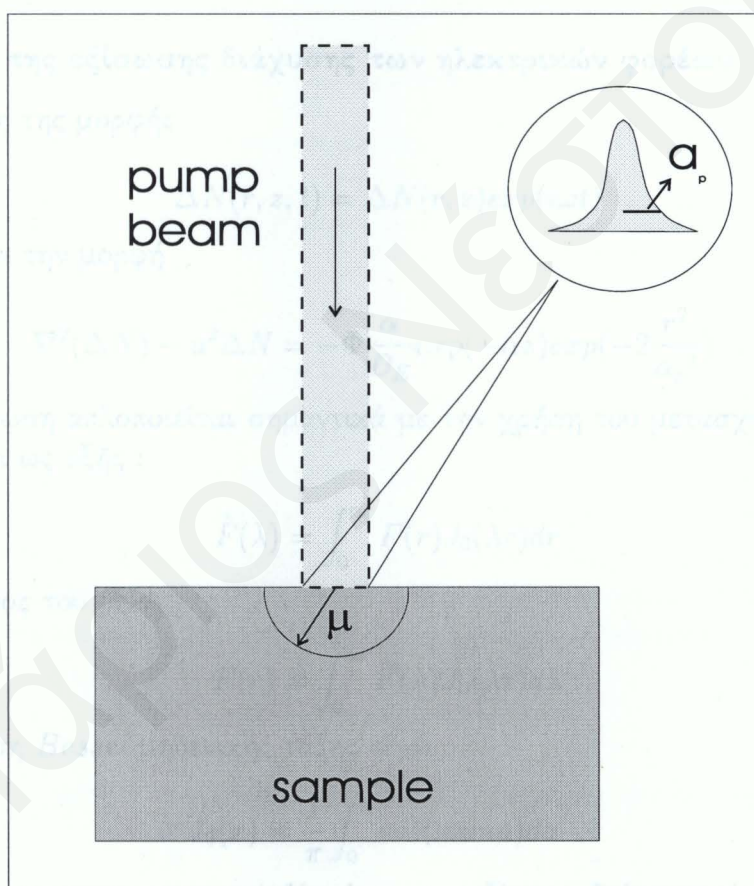
όπου  $n_0$  η συγκέντρωση των φορέων στην ισορροπία και  $\Phi$  ο αριθμός των φωτονίων που απορροφώνται ανά μονάδα επιφάνειας του υλικού και ανά μονάδα χρόνου:

$$\Phi = \frac{2(1-R)P}{h\nu\pi\alpha_p^2/2} \quad (3.46)$$

Η ακτίνα άντλησης έχει γκαουσιανό προφίλ όπως φαίνεται και στην Εικ. 3.6 και η χωρική της κατανομή δίνεται από την σχέση :

$$\psi_p(r) = \exp\left(-\frac{2r^2}{\alpha_p^2}\right) \quad (3.47)$$

όπου  $\alpha_p$  η  $1/e^2$  ακτίνα της δέσμης άντλησης. Αυτό σημαίνει πως για  $r = \alpha_p$  η ένταση της δέσμης ελαττώνεται κατά  $1/e^2$  σε σχέση με την ένταση στον άξονα συμμετρίας της ( $r = 0$ ).



**Εικόνα 3.6:** Η γκαουσιανή κατανομή της δέσμης άντλησης και η σχέση της με το μήκος ηλεκτρονικής ή θερμικής διάχυσης.

Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέρος της εξίσωσης 3.45 οφείλεται στην θερμότητα που απελευθερώνεται λόγω επανασύνδεσης των ελεύθερων φορέων και ο τρίτος στην χαλάρωση των οπών και των ηλεκτρονίων στην ζώνη σθένους και αγωγιμότητας αντίστοιχα. Στο δεξί μέρος της εξίσωσης 3.44 ο δεύτερος όρος οφείλεται στην επανασύνδεση των φορέων



ο τρίτος στην θερμική διέγερση τους και ο τέταρτος στην οπτική γένεση φορέων στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Παρατηρούμε πως οι εξισώσεις 3.44 και 3.45 είναι συζευγμένες μέσω του όρου θερμικής διέγερσης στην εξίσωση (3.44). Κάτω από τις συνθήκες που επικρατούν σε ένα τυπικό πείραμα *PMTR*, η μεταβολή στην θερμοκρασία είναι αρκετά μικρή και μπορεί να δείξει κανείς πως η δημιουργία φορέων λόγω της θερμικής διέγερσης είναι αμελητέα, όταν η πυκνότητα φορέων στην ισορροπία ικανοποιεί την ανισότητα των *Vasilev* και *Sandomirski* [1]:

$$n_0 \ll \frac{\chi}{K_B D_E} \left( \frac{K_B T_0}{E_g} \right)^2 \omega \tau \sqrt{1 + (\omega \tau)^2} \quad (3.48)$$

και επομένως ο όρος θερμικής διέγερσης μπορεί να παραληφθεί. Έτσι η Εξ. 3.44 μπορεί να επιλυθεί με τις κατάλληλες οριακές συνθήκες και ακολούθως να επιλυθεί η Εξ. 3.45. Το πρόβλημα της διάχυσης παρουσιάζει κυλινδρική συμμετρία και οι εξισώσεις μπορούν απλοποιηθούν σημαντικά χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό *Hankel*.

### 3.5.2 Η λύση της εξίσωσης διάχυσης των ηλεκτρικών φορέων

Θεωρώντας λύση της μορφής

$$\Delta N(r, z, t) = \Delta N(r, z) \exp(i\omega t) \quad (3.49)$$

η δ.ε 3.44 παίρνει την μορφή

$$\nabla^2(\Delta N) - u^2 \Delta N = -\Phi \frac{\alpha}{D_E} \exp(-\alpha z) \exp\left(-2\frac{r^2}{\alpha_p^2}\right) \quad (3.50)$$

Η πιο πάνω εξίσωση απλοποιείται σημαντικά με την χρήση του μετασχηματισμού *Hankel* [8], που ορίζεται ως εξής :

$$\hat{F}(\lambda) = \int_0^\infty F(r) J_0(\lambda r) dr \quad (3.51)$$

ενώ ο αντίστροφος του είναι

$$F(r) = \int_0^\infty \hat{F}(\lambda) J_0(\lambda r) d\lambda \quad (3.52)$$

όπου η συνάρτηση *Bessel* μηδενικής τάξης είναι :

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \sin a) da \quad (3.53)$$

Εφαρμόζοντας τον μετασχηματισμό *Hankel* στην εξίσωση διάχυσης έχουμε :

$$\frac{d^2(\Delta \hat{N})}{dz^2} - (u^2 + \lambda^2) \Delta \hat{N} = -\Phi \frac{\alpha}{D_E} \hat{\Psi}_p(\lambda) \exp(-\alpha z) \quad (3.54)$$

όπου

$$\hat{\Psi}_p(\lambda) = \int_0^\infty \exp\left(-2\frac{r^2}{\alpha_p^2}\right) J_0(\lambda r) dr \quad (3.55)$$

Η γενική λύση της δ.ε 3.54 είναι:

$$\Delta \hat{N} = \hat{A}_+ \exp(z(\sqrt{u^2 + \lambda^2})) + \hat{A}_- \exp(-z(\sqrt{u^2 + \lambda^2})) \quad (3.56)$$

ενώ η ειδική της λύση :

$$\Delta \hat{N} = \hat{P} \exp(-\alpha z) \quad (3.57)$$

όπου  $\hat{P}$ :

$$\hat{P} = -\frac{\Phi}{D_E} \frac{\alpha \hat{\Psi}_p(\lambda)}{\alpha^2 - (u^2 + \lambda^2)} \quad (3.58)$$

Τέλος με χρήση της συνοριακής συνθήκης :

$$\Delta \hat{N}(z = \infty) = 0 \quad (3.59)$$

και της συνθήκης πως στην επιφάνεια του ημιαγωγού η διάχυση φορέων προς το εσωτερικό του εξισορροπείται από την επανασύνδεση, δηλαδή :

$$D_E \frac{\partial(\Delta \hat{N}(z=0))}{\partial z} = s \Delta \hat{N}(z=0) \quad (3.60)$$

μπορούμε να πάρουμε την λύση στην επιφάνεια :

$$\Delta \hat{N}_s = \Delta \hat{N}(z=0) = \hat{A}_- + \hat{P} = \Phi \frac{\Psi_p(\lambda)}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{\alpha}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \quad (3.61)$$

Με χρήση του αντίστροφου *Hankel* η λύση είναι :

$$\Delta N_s = \Phi \frac{\alpha_p^2}{4} \int_0^\infty \frac{\exp(-\lambda^2 \frac{\alpha_p^2}{8})}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{\alpha}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} J_0(\lambda r) dr \quad (3.62)$$

Αυτό βέβαια που μας ενδιαφέρει δεν είναι ακριβώς η πυκνότητα φορέων στην επιφάνεια αλλά η συνεισφορά της στο φωτοθερμικό σήμα που εξαρτάται από την χωρική κατανομή της ακτίνας ανίχνευσης, η οποία ανακλάται στο δείγμα, στην ίδια περιοχή όπου προσπίπτει η δέσμη διέγερσης, και μας δίνει το φωτοθερμικό σήμα. Η χωρική κατανομή της δέσμης ανίχνευσης είναι γκαουσιανή και χαρακτηρίζεται από την συνάρτηση :

$$\Psi_s(r) = \exp(-2 \frac{r^2}{\alpha_s^2}) \quad (3.63)$$

όπου  $\alpha_s$  είναι η  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  ακτίνα της δέσμης ανίχνευσης. Έτσι η συνεισφορά του πλάσματος είναι τελικά :

$$\left(\frac{\Delta R}{R}\right)_N = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} \frac{\int_0^\infty \Psi_s(r) \Delta N_s(r) 2\pi r dr}{\int_0^\infty \Psi_s(r) 2\pi r dr} \quad (3.64)$$

όπου :

$$\Delta N_s(r) = \int_0^\infty \Delta \hat{N}_s J_0(\lambda r) \lambda d\lambda \quad (3.65)$$

Εισάγοντας την πιο πάνω σχέση στην 3.54 και αλλάζοντας την σειρά ολοκλήρωσης παίρνουμε :

$$\left(\frac{\Delta R}{R}\right)_N = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} \Phi \frac{\alpha_p^2}{4} \int_0^\infty \frac{\exp(-\lambda^2 \frac{\alpha_p^2 + \alpha_s^2}{8})}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{\alpha}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \lambda d\lambda \quad (3.66)$$



### 3.5.3 Η λύση της εξίσωσης διάχυσης της θερμότητας

Η διαφορική εξίσωση που περιγράφει την μονοδιάστατη διάδοση της θερμότητας παίρνει την πιο κάτω μορφή μετά από ένα μετασχηματισμό *Hankel*:

$$\frac{d^2(\Delta\hat{T})}{dz^2} - (\sigma^2 + \lambda^2)\Delta\hat{T} = -\frac{E_g \Delta\hat{N}}{\chi \tau} - \frac{\Phi\Psi_p(\lambda)(h\nu - E_g)\alpha \exp(-\alpha z)}{\chi} \quad (3.67)$$

Χρησιμοποιώντας την έκφραση για την πυκνότητα φορέων στον χώρο *Hankel*  $\Delta N$ , καθώς και την ασυμπτωτική συμπεριφορά της λύσης για μεγάλες αποστάσεις από την επιφάνεια του ημιαγωγού :

$$\Delta\hat{T}(z = \infty) = 0 \quad (3.68)$$

μπορούμε να υπολογίσουμε την γενική λύση της δ.ε 3.66. Η λύση αυτή έχει την μορφή  $B\exp(-z\sqrt{\sigma^2 + \lambda^2})$ . Η ειδική λύση που σχετίζεται με τον όρο πηγής που αφορά την διείσδυση της φωτεινής ενέργειας στο υλικό, είναι της μορφής  $C\exp(-\alpha z)$ , ενώ αυτή που σχετίζεται με την διάχυση των ελεύθερων φορέων έχει την μορφή  $D\exp(-z\sqrt{u^2 + \lambda^2})$ . Οι ειδικές αυτές λύσεις ικανοποιούν την δ.ε 3.66 και ο υπολογισμός τους είναι τετριμμένος. Η συνθήκη στην επιφάνεια :

$$-D_T \frac{\partial(\Delta\hat{T}(z=0))}{\partial z} = \frac{E_g}{\rho C} s \Delta\hat{N}_s \quad (3.69)$$

η οποία μας λέει πως η ροή θερμότητας προς το εσωτερικό του υλικού οφείλεται στην επανασύνδεση στην επιφάνεια του, μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τον συντελεστή  $\hat{B}$  ως συνάρτηση των  $\hat{C}$  και  $\hat{D}$ . Η θερμοκρασία στην επιφάνεια είναι:

$$\Delta\hat{T}_s = \hat{B} + \hat{C} + \hat{D} \quad (3.70)$$

Τελικά η θερμοκρασία στην επιφάνεια είναι :

$$\Delta\hat{T}_s = \frac{\Phi\alpha\Psi_p(\lambda)}{\chi\sqrt{\sigma^2 + \lambda^2}}(M + N \Xi) \quad (3.71)$$

όπου :

$$M = \frac{1}{\alpha + \sqrt{\sigma^2 + \lambda^2}} \left[ (h\nu - E_g) - \frac{E_g}{D_E \tau (\alpha^2 - (u^2 + \lambda^2))} \right] \quad (3.72)$$

$$N = \frac{1}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{E_g}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \quad (3.73)$$

$$\Xi = \left( s + \frac{1}{\tau(\sqrt{u^2 + \lambda^2})(\sqrt{\sigma^2 + \lambda^2})} \frac{\alpha + s/D_E}{\alpha - \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \right) \quad (3.74)$$

έτσι η συνεισφορά της διαμορφωμένης μεταβολής της επιφανειακής θερμοκρασίας είναι:

$$\left( \frac{\Delta R}{R} \right)_T = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \frac{\int_0^\infty \Psi_s(r) \Delta T_s(r) 2\pi r dr}{\int_0^\infty \Psi_s(r) 2\pi r dr} \quad (3.75)$$

Τελικά εισάγοντας τον μετασχηματισμό *Hankel* για την θερμοκρασία και αντιστρέφοντας την σειρά ολοκλήρωσης έχουμε:

$$\left( \frac{\Delta R}{R} \right)_T = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \int_0^\infty \Delta\hat{T}_s(\lambda) \exp(-\lambda\alpha_s^2/8) \lambda d\lambda \quad (3.76)$$

Με την εύρεση και της συνεισφοράς της θερμοκρασίας στο *PMTR* σήμα απομένει ο προσδιορισμός των συντελεστών  $C_N$  και  $C_T$ .

### 3.5.4 Ο θερμικός συντελεστής $C_T$

Ο συντελεστής  $C_T$  μπορεί να υπολογιστεί πειραματικά αρκετά εύκολα με την μέτρηση της αλλαγής της ανακλαστικότητας του υλικού καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία του [9]. Το δείγμα του ημιαγωγού στερεώνεται στο άκρο μιας ράβδου  $Al$ , η οποία είναι περιτυλιγμένη με ένα σύρμα αντίστασης  $R$ , το οποίο θερμαίνεται όταν διαρρέεται από ρεύμα  $dc$ . Σαν αποτέλεσμα η θερμοκρασία της ράβδου αυξάνει σιγά σιγά. Η ανακλαστικότητα του δείγματος ελέγχεται με μια δέσμη φωτός laser  $He - Ne$ , η οποία ανακλάται από την επιφάνεια του ημιαγωγού σε μια φωτοδιόδο. Η θερμοκρασία του δείγματος προδιορίζεται με ένα θερμοζεύγος στερεωμένο επίσης στο άκρο της ράβδου  $Al$ . Στην αρχή καταγράφεται η αρχική θερμοκρασία του δείγματος  $T_1$  και το σήμα από την φωτοδιόδο. Με την αύξηση της θερμοκρασίας καταγράφεται η νέα τιμή του σήματος της φωτοδιόδου. Για μια δεδομένη διαφορά θερμοκρασίας  $\Delta T = T_2 - T_1$  είναι εύκολο να δείξει κανείς πως  $\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{R}{\Delta T} \left[ \frac{V(T_2)}{V(T_1)} - 1 \right]$ , όπου  $V(T_j)$  το σήμα της φωτοδιόδου για  $T_j$ . Μια θεωρητική προσέγγιση στον υπολογισμό του  $C_T$  θα παρουσιαστεί στο Κεφ. 4, όπου εξετάζεται η συμπεριφορά του σήματος  $PMTR$  ως συνάρτηση της θερμοκρασίας του ημιαγωγού.

### 3.5.5 Η συντελεστής πλάσματος $C_N$ .

Ο συντελεστής  $C_N$  οφείλεται κυρίως στους εξής μηχανισμούς/φαινόμενα, το φαινόμενο *Drude* [10], το φαινόμενο πλήρωσης ζώνης (band filling effect), και το φαινόμενο Franz-Keldysh.

### 3.5.6 Ο μηχανισμός *Drude*

Οι οπές στην ζώνη σθένους και τα ηλεκτρόνια στην ζώνη αγωγιμότητας που δημιουργούνται από την δέσμη άντλησης αλληλεπιδρούν με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο της δέσμης ανίχνευσης και εκτελούν ταλαντώσεις. Η σύζευξη ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος και ενός αερίου ελευθέρων φορέων μελετήθηκε από το 1900 όταν ο *Drude* κατασκεύασε ένα απλό μοντέλο για την εξήγηση της εναλλασσόμενης ηλεκτρικής αγωγιμότητας ενός μετάλλου. Εφαρμόζοντας την ίδια ιδέα μπορεί κανείς να εξηγήσει την διηλεκτρική συμπεριφορά των ελευθέρων φορέων σε ένα ημιαγωγό που διεγείρεται από οπτικές συχνότητες. Αγνοώντας την επίδραση του μαγνητικού πεδίου, η εξίσωση κίνησης ενός  $e$  κάτω από την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου της δέσμης ανίχνευσης είναι :

$$m_n^* \frac{d^2 z}{dt^2} = -eE \exp(i\omega_c t) \quad (3.77)$$

όπου  $\omega_c$  η κυκλική συχνότητα του ηλεκτρικού πεδίου,  $\lambda_c$  το μήκος κύματος του, και  $E$  το πλάτος του. Η λύση της πιο πάνω εξίσωσης είναι περιοδική και το πλάτος της ταλάντωσης είναι

$$z = \frac{eE}{m_n^* \omega_c^2} \quad (3.78)$$

Η ηλεκτρική διπολική ροπή είναι :

$$p = -e z = -\frac{e^2 E}{m_n^* \omega_c^2} \quad (3.79)$$



και η πόλωση που ορίζεται ως η διπολική ροπή ανά μονάδα όγκου, γράφεται :

$$P = -N e z = -\frac{N e^2 E}{m_n^* \omega_c^2} \quad (3.80)$$

όπου  $N$  η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων. Η διηλεκτρική σταθερά δίνεται ως συνάρτηση της πόλωσης και του ηλεκτρικού πεδίου από την σχέση:

$$\epsilon(\omega_c) = 1 + \frac{P(\omega_c)}{\epsilon_0 E(\omega_c)} \quad (3.81)$$

και λόγω της προηγούμενης σχέσης είναι τελικά

$$\epsilon(\omega_c) = 1 - \frac{n e^2 E}{\epsilon_0 m_n \omega_c^2} \quad (3.82)$$

Ο δείκτης διάθλασης του υλικού είναι :

$$\eta(\omega_c) = \sqrt{\epsilon(\omega_c)} \quad (3.83)$$

και η παράγωγος  $\frac{\partial R}{\partial N}$  μπορεί να υπολογιστεί αρκετά εύκολα :

$$\frac{\partial R}{\partial N} = \frac{\partial R}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial N} = -\frac{\lambda_c^2 e^2}{2\pi^2 \epsilon_0 m_n c^2} \frac{n-1}{n(n+1)^3} \quad (3.84)$$

όπου  $c$  είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Επειδή τόσο οι οπές όσο και τα  $e$  συνεισφέρουν στο φαινόμενο αυτό, στον πιο πάνω τύπο η μάζα του ηλεκτρονίου θα αντικατασταθεί με την ανοιγμένη μάζα των φορέων  $m^*$  :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_n^*} + \frac{1}{m_p^*} \quad (3.85)$$

Ο συντελεστής πλάσματος μπορεί να υπολογιστεί από την σχέση του *Fresnel* η οποία συνδέει την ανακλαστικότητα  $R$  ενός υλικού με τον δείκτη διάθλασης του  $\hat{n}$  :

$$\hat{\eta} = \eta + ik \quad (3.86)$$

Το φανταστικό μέρος του δείκτη διάθλασης  $k$  συνδέεται με τον συντελεστή οπτικής απορρόφησης  $\alpha$  του υλικού για ακτινοβολία μήκους κύματος  $\lambda$  μέσω της σχέσης :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.87)$$

Αν υποθέσουμε πως μια μονοχρωματική δέσμη φωτός πέσει κάθετα στην επιφάνεια ενός ημιάπειρου υλικού που περιβάλλεται από αέρα, το ποσοστό της ανακλώμενης ακτινοβολίας (ανακλαστικότητα) είναι:

$$R = \frac{(\eta - 1)^2 + k^2}{(\eta + 1)^2 + k^2} \quad (3.88)$$

Έτσι ο συντελεστής *Drude* είναι τελικά :

$$[C_N]_D = \left[ \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} \right]_D = -\frac{\lambda_c^2 e^2}{2\pi^2 \epsilon_0 m^* c^2} \frac{1}{n(n^2 - 1)} \quad (3.89)$$

Παρατηρούμε πως ο συντελεστής *Drude* έχει πάντα αρνητικό πρόσημο.



### 3.5.7 Το φαινόμενο πλήρωσης ζώνης.

Ο μηχανισμός *Drude* που εξετάσαμε πιο πάνω είναι αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης φωτονίων με τα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας και τις οπές της ζώνης σθένους. Αντίθετα το φαινόμενο της πλήρωσης ζώνης αναφέρεται στις οπτικές διαδικασίες που συμβαίνουν μεταξύ της ζώνης σθένους και αγωγιμότητας.

Η απορρόφηση φωτονίων με ενέργεια μεγαλύτερη από το ενεργειακό χάσμα σε ένα ημιαγωγό είναι μεγαλύτερη όταν οι καταστάσεις της ζώνης σθένους είναι γεμάτες ενώ οι καταστάσεις της ζώνης αγωγιμότητας άδειες. Κατά την διαδικασία της απορρόφησης από την μια ζώνη στην άλλη, η κατάληψη των ενεργειακών καταστάσεων θα μεταβληθεί και οι οπτικές μεταβάσεις θα είναι πιο δύσκολες μια και τώρα μερικές καταστάσεις της ζώνης αγωγιμότητας είναι γεμάτες ενώ κάποιες καταστάσεις της ζώνης σθένους είναι άδειες. Η μελέτη του φαινομένου πλήρωσης ζώνης είναι αρκετά πολύπλοκη και ξεφεύγει από τους στόχους της εργασίας αυτής, γι' αυτό τον λόγο θα παρουσιάσουμε μόνο τα βασικά της συμπεράσματα [11].

Ο συντελεστής πλάσματος που οφείλεται στο φαινόμενο πλήρωσης ζώνης  $(C_N)_{bf}$  εξαρτάται από την ενέργεια των φωτονίων ως εξής: α) για ενέργειες μικρότερες από το ενεργειακό χάσμα ο συντελεστής είναι μικρός και αρνητικός β) για ενέργειες κοντά στο ενεργειακό χάσμα παρουσιάζει ταλαντωτική συμπεριφορά και παίρνει την μέγιστη τιμή του γ) για ενέργειες αρκετά πιο μεγάλες από το ενεργειακό χάσμα ο συντελεστής είναι μικρός και έχει θετική τιμή.

Ο συντελεστής πλάσματος λόγω του φαινομένου πλήρωσης ζώνης είναι μεγαλύτερος για υλικά με άμεσο ενεργειακό χάσμα. Το φαινόμενο πλήρωσης ζώνης είναι όμως σημαντικό στην περίπτωση των άμορφων ημιαγωγών (άμεσου ή και έμμεσου ενεργειακού χάσματος) επειδή το φάσμα απορρόφησης τους είναι αρκετά απότομο. Στην τελευταία αυτή περίπτωση ο μηχανισμός πλήρωσης ζώνης υπερσχύει του μηχανισμού *Drude*.

### 3.5.8 Το φαινόμενο Franz-Keldysh.

Το φαινόμενο αυτό που εξηγήθηκε από τους Franz-Keldysh είναι κατεξοχήν κβαντικό και έχει ως βάση της εξήγησης του το φαινόμενο σήραγγας. Η παρουσία των ηλεκτρονικών καταστάσεων της επιφάνειας ενός ημιαγωγού δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο που περιορίζεται στην περιοχή φορτίου χώρου του οποίου το πάχος εξαρτάται από την πυκνότητα των ηλεκτρικών φορέων στο δείγμα, και τον αριθμό των επιφανειακών καταστάσεων ως συνάρτηση της ενέργειας. Το στατικό ηλεκτρικό αυτό πεδίο μεταβάλλει τις οπτικές ιδιότητες του ημιαγωγού που έχουν σχέση με την αλληλεπίδραση της ζώνης σθένους με αυτή της ζώνης αγωγιμότητας (interband).

Εξετάζοντας πρώτα την περίπτωση που τα προσπίπτοντα φωτόνια έχουν ενέργεια μικρότερη από το ενεργειακό χάσμα ενός ημιαγωγού άμεσου χάσματος, το ηλεκτρικό πεδίο μπορεί να 'προωθήσει' τα ηλεκτρόνια της ζώνης σθένους, μέσω φαινομένου σήραγγας, στην ζώνη αγωγιμότητας. Στην περίπτωση που  $h\nu > E_g$  η θεωρία των Franz-Keldysh προβλέπει ότι το διαταραγμένο από το πεδίο φάσμα απορρόφησης θα ταλαντώνεται γύρω από το μη διαταραγμένο φάσμα καθώς η ποσότητα  $h\nu$  θα μεγαλώνει σε σχέση με το  $E_g$ .

Εδώ θα πρέπει να αναφέρουμε ότι οι πιο σημαντικές αλλαγές στις οπτικές ιδιότητες συμβαίνουν σε ενέργειες φωτονίων που αντιστοιχούν σε 'κρίσιμα' σημεία όπου ισχύει η σχέση  $\nabla_k (E_C - E_V) = 0$ . Ένα τέτοιο σημείο αντιστοιχεί και στο άμεσο ενεργειακό χάσμα



Ιδιότητα	Σύμβολο	Τιμή
Ενεργειακό χάσμα	$E_g$	$1.8 \times 10^{-19} \text{ J}$
Επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_1$	$10 \text{ m/s}$
Χρόνος ζωής	$\tau$	$10^{-5} / 10^{-9} \text{ s}$
Συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης	$D$	$20 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας	$\chi$	$150 \text{ W}/(\text{mK})$
Συντελεστής θερμικής διάχυσης	$D_T$	$1 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής οπτικής απορρόφησης στα $500 \text{ nm}$	$\alpha$	$1 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$
Συντελεστής πλάσματος	$C_N$	$-1.6 \times 10^{-28} \text{ m}^{-3}$
Συντελεστής θερμοκρασίας	$C_T$	$1 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$

Πίνακας 3.2: Παράμετροι για την προσομοίωση του σήματος *PMTR* για το *Si*.

ενός ημιαγωγού. Μακριά από τα κρίσιμα σημεία ο μηχανισμός αυτός είναι αμελητέος σε σχέση με τους προαναφερθέντες [11]. Περισσότερες πληροφορίες και μαθηματική ανάλυση για το φαινόμενο αυτό μπορεί να βρει κανείς στις αναφορές [11-12]. Τα σημαντικά σημεία της ανάλυσης είναι πως ο συντελεστής πλάσματος που αντιστοιχεί στο φαινόμενο αυτό είναι ανάλογος του λογαρίθμου της διαμορφωμένης πυκνότητας των φορέων  $\Delta N$ .

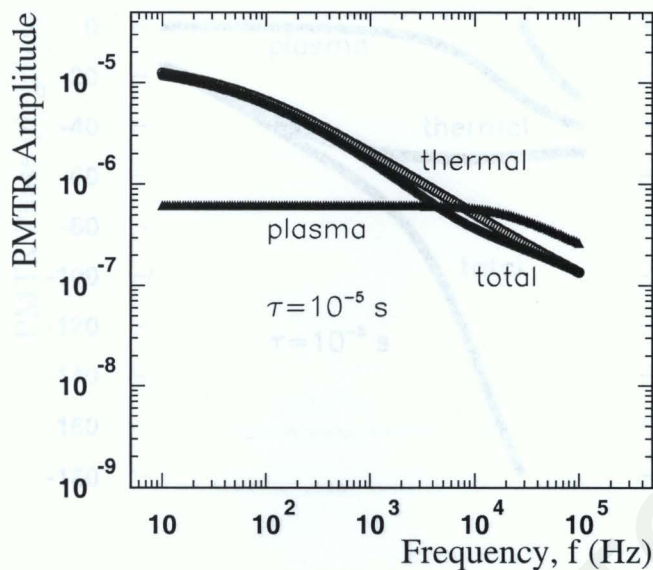
### 3.5.9 Μερικές προσομοιώσεις για το σήμα *PMTR*

Προτού κλείσουμε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε μερικές προσομοιώσεις σήματος *PMTR* για το *Si*.

Το πλάτος και η φάση του σήματος παρουσιάζονται στις Εικ.3.7/9 και 3.8/10 αντίστοιχα. Στα σχήματα αυτά παρουσιάζεται τόσο η συνεισφορά πλάσματος όσο και αυτή της θερμοκρασίας. Η προσομοίωση έγινε για το *Si* για δυο διαφορετικές τιμές του χρόνου ζωής των φορέων, και οι τιμές των φυσικών ιδιοτήτων του *Si* παρουσιάζονται στον Πίνακα 3.2.

Και στις δυο περιπτώσεις το σήμα κυριαρχείται από την θερμική συνεισφορά όπως φαίνεται και από τα διαγράμματα του πλάτους όσο και της φάσης του σήματος *PMTR*. Στην περίπτωση όμως του μεγάλου χρόνου ζωής  $\tau = 10^{-5} \text{ s}$  η συνιστώσα πλάσματος κάνει εμφανή την παρουσία της σε συχνότητες μεγαλύτερες από  $10 \text{ kHz}$ .

Η ελάττωση του χρόνου ζωής (Εικ. 3.9 και 3.10) προκαλεί την δραματική ελάττωση της πυκνότητας των φωτοδιεγερμένων φορέων, επομένως και της συνιστώσας πλάσματος. Η φάση της ηλεκτρονικής συνεισφοράς είναι σταθερή και ίση με μηδέν σε όλο το φάσμα συχνοτήτων διαμόρφωσης μια και τα ζεύγη  $e - h$  είναι εντοπισμένα πολύ κοντά στην επιφάνεια του ημιαγωγού όπου και επανασυνδέονται  $1 \text{ ns}$  μετά την δημιουργία τους. Επίσης στις Εικ. 3.11 και 3.12 φαίνονται για σκοπούς σύγκρισης το πλάτος και η φάση του σήματος *PMTR* αντίστοιχα, για τους δυο πιο πάνω χρόνους ζωής.



Εικόνα 3.7: Το ολικό πλάτος *PMTR* και οι συνεισφορές πλάσματος και θερμοκρασίας για το Si,  $\tau = 10^{-5}$  s.

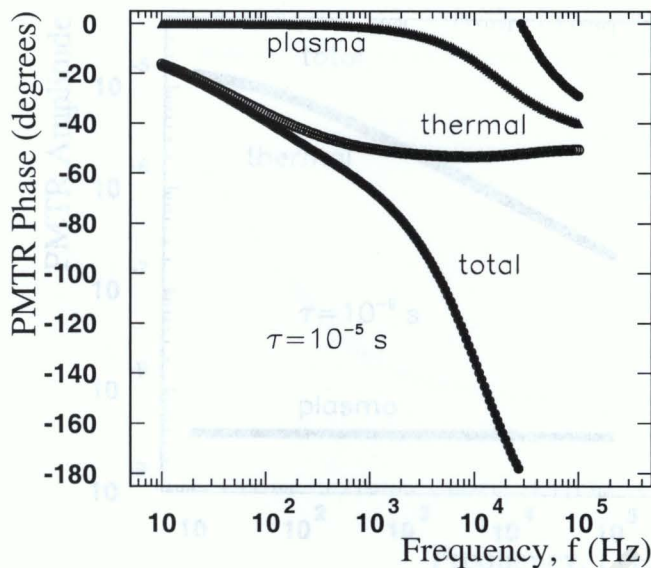
### 3.5.10 Πειραματική διάταξη *PMTR*

Στην Εικ. 3.13 παρουσιάζεται μια τυπική διάταξη *PMTR* η οποία χρησιμοποιείται στο Φωτοθερμικό-Φωτονικό εργαστήριο του τμήματος Φυσικών Επιστημών του Πανεπιστημίου Κύπρου.

Το *laser Ar - Kr* εκπέμπει πολωμένη δέσμη μήκους κύματος  $\lambda=498$  nm (δέσμη διέγερσης ή άντλησης) η οποία εστιάζεται στην ενεργό οπή ενός **ακουστο-οπτικού διαμορφωτή** (acousto-optic modulator, *AO*) μέσω του φακού (*L*). Ο ακουστο-οπτικός διαμορφωτής είναι ένας κρύσταλλος, στου οποίου τα άκρα όταν εφαρμοστεί μια περιοδική διαφορά δυναμικού, επάγει μια περιοδική μεταβολή στην πυκνότητά του, με αποτέλεσμα την δημιουργία ενός οπτικού φράγματος στο εσωτερικό του. Η συχνότητα διαμόρφωσης του οπτικού φράγματος επιβάλλεται από μια γεννήτρια συχνοτήτων. Σαν αποτέλεσμα η φωτεινή δέσμη που διέρχεται από τον κρύσταλλο περιθλάται δίνοντας χρονικά διαμορφωμένους φωτεινούς χροσσούς. Συνήθως από το σύνολο των χροσσών επιλέγεται ο χροσσός πρώτης τάξης, με την βοήθεια μιας ίριδας, ο οποίος συγκεντρώνει και την περισσότερη ενέργεια. Ακολούθως η δέσμη διέγερσης ή άντλησης εστιάζεται στο δείγμα, με την βοήθεια ενός φακού. Σαν αποτέλεσμα έχουμε την περιοδική θέρμανση της επιφάνειας και την δημιουργία : **α) ενός θερμικού κύματος και β) ενός κύματος πλάσματος**, αν το δείγμα είναι ημιαγωγός με ενεργειακό χάσμα μικρότερο από την ενέργεια των φωτονίων που το φωτίζουν. Η αύξηση της θερμοκρασίας και η δημιουργία οπών και ηλεκτρονίων πέρα από την τιμή που επιβάλλει η θερμική ισορροπία έχουν ως αποτέλεσμα την αλλαγή της ανακλαστικότητας της επιφάνειας.

Μια δεύτερη φωτεινή δέσμη, μή πολωμένη, που εκπέμπεται από ένα *laser He - Ne*



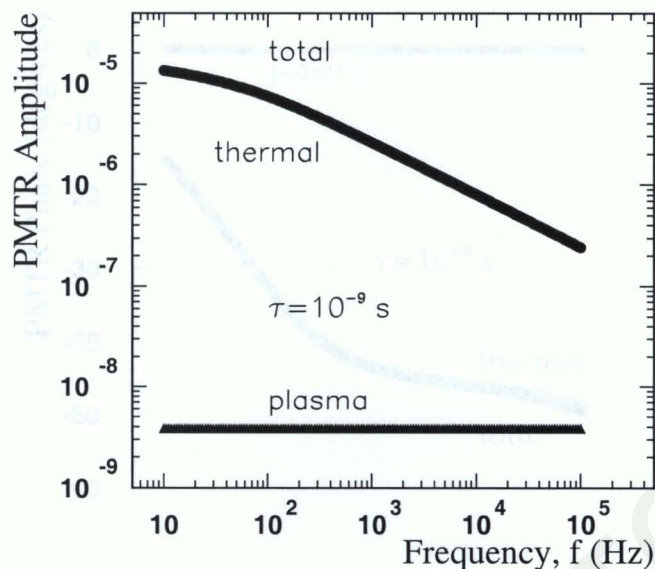


Εικόνα 3.8: Η ολική φάση PMTR και οι συνεισφορές πλάσματος και θερμοκρασίας για το Si,  $\tau = 10^{-5}$  s.

με μήκος κύματος  $\lambda = 632.8$  nm χρησιμοποιείται ως δέσμη ανίχνευσης της διαταραχής που δημιουργεί η δέσμη άντλησης. Η δέσμη ανίχνευσης κατευθύνεται σ' ένα **πολωτικό διαχωριστή δέσμης** (polarizing beam splitter, *P*) ο οποίος την διαχωρίζει σε δυο συνιστώσες μια *p* πολωμένη και μια *s* πολωμένη. Η *p* πολωμένη δέσμη ακολουθεί την πορεία της αρχικής δέσμης ανίχνευσης ενώ η *s* πολωμένη δέσμη εκτρέπεται κατά  $90^\circ$ . Η *p* πολωμένη δέσμη διέρχεται μέσα από ένα πλακίδιο καθυστέρησης φάσης  $\lambda/4$  και το επίπεδο πόλωσης της στρέφεται κατά  $\pi/4$ . Ακολούθως ανακλάται στον **διχρωικό καθρέφτη** (*DM*) και εστιάζεται μέσω του **αχρωματικού φακού** (*AL*) κάθετα στο δείγμα, στην ίδια περιοχή που εστιάζεται η δέσμη άντλησης.

Η δέσμη ανίχνευσης ανακλάται στο δείγμα και ακολουθεί την αντίστροφη πορεία, διέρχεται ξανά από το πλακίδιο  $\lambda/4$ , κάτι που έχει ως αποτέλεσμα τη στροφή του διανύσματος πόλωσης κατά ακόμα  $\pi/4$ . Η δέσμη ανίχνευσης είναι πια *s* πολωμένη και ανακλάται στην επιφάνεια του κύβου πόλωσης (*P*) σε διεύθυνση κάθετη προς την αρχική. Αφού περάσει από μια ίριδα, ανακλάται από ένα κάτοπτρο *M* προς την διεύθυνση του ανιχνευτή που είναι μια **φωτοδίοδος πυριτίου** (με χρόνο ανόδου 1 ns). Στον ανιχνευτή είναι προσαρμοσμένο ένα φίλτρο στενής ζώνης (narrow band filter, *NB*), το οποίο απορροφά όλες τις ακτινοβολίες με μήκος κύματος έξω από μια στενή περιοχή με κέντρο τα 632.8 nm.

Η φωτοδίοδος πυριτίου μετατρέπει τα προσπίπτοντα φωτόνια σε ηλεκτρικό ρεύμα, το οποίο μεταφέρεται σε ένα **ενισχυτή σύγχρονης ανίχνευσης** (lock in amplifier). Ο ανιχνευτής αυτός δέχεται επίσης ένα σήμα αναφοράς από την γεννήτρια συχνοτήτων, η οποία είναι ενωμένη με τον ακουστο-οπτικό διαμορφωτή. Το lock-in amplifier με την χρήση κάποιων ηλεκτρονικών φίλτρων που διαθέτει αποκλείει κάθε σήμα με συχνότητα διαφορετική από την συχνότητα διαμόρφωσης. Στην οθόνη του ανιχνευτή μπορούμε να διαβάσουμε



Εικόνα 3.9: Το ολικό πλάτος PMTR και οι συνεισφορές πλάσματος και θερμοκρασίας για το Si,  $\tau = 10^{-9}$  s.

το μέτρο του σήματος και την φάση του.

### 3.6 Η μέθοδος PTR

Η τεχνική PTR στηρίζεται στη διαμόρφωση της ακτινοβολίας που εκπέμπει ένα σώμα λόγω της θερμοκρασίας του (ακτινοβολία μέλανος σώματος). Σε θερμοκρασία δωματίου η εκπομπή ακτινοβολίας γίνεται κυρίως στο υπέρυθρο. Η πυκνότητα ακτινοβολίας  $W_P(W/m)$  στο διάστημα μηκών κύματος  $\lambda$  και  $\lambda + d\lambda$  δίνεται από την συνάρτηση του Planck:

$$W_P(T, \lambda) = \frac{2\pi hc^2 A}{\lambda^5 [ \exp(\frac{hc}{\lambda k_B T}) - 1 ]} \quad (3.90)$$

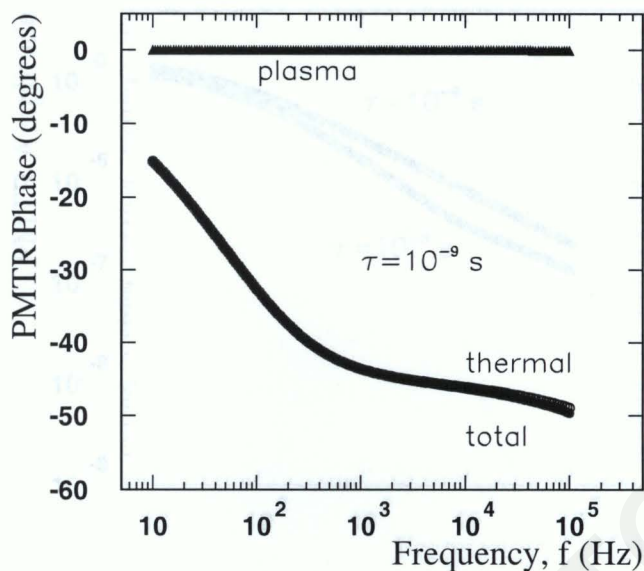
όπου  $A$  είναι το εμβαδόν της επιφάνειας που εκπέμπει την ακτινοβολία. Η διαμόρφωση της ακτινοβολίας μέλανος σώματος γίνεται με την θέρμανση του υλικού με μια διαμορφωμένης έντασης δέσμη φωτός (π.χ laser). Η απορρόφηση της ακτινοβολίας από το υλικό έχει ως αποτέλεσμα την μεταβολή της θερμοκρασίας του και την τροποποίηση της συνάρτησης Planck. Η μεταβολή της θερμοκρασίας είναι [13,14]:

$$T(z, t) = T_0 + \Delta T(z) \exp(i \omega t) \quad (3.91)$$

και η συνάρτηση Planck τροποποιείται ως εξής :

$$W_P(T(z, T)\lambda) = W_P(\lambda, T_0) + \Delta W_P(z, \lambda, T_0) \quad (3.92)$$





Εικόνα 3.10: Η ολική φάση PMTR και οι συνεισφορές πλάσματος και θερμοκρασίας για το Si,  $\tau = 10^{-9}$  s.

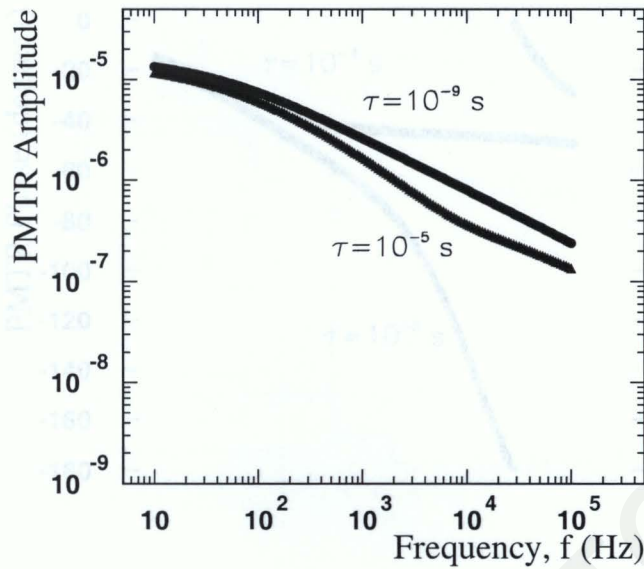
όπου η μεταβολή της συνάρτησης Planck,  $\Delta W_P$ , σε πρώτη τάξη μπορεί να βρεθεί εύκολα με ανάπτυγμα Taylor γύρω από την θερμοκρασία  $T_0$  :

$$\Delta W_P(z, \lambda, T_0) = W_P(\lambda, T_0) \frac{hc/\lambda K_B T_0}{\exp(hc/\lambda K_B T_0) - 1} \frac{\Delta T(z, \omega)}{T_0} . \quad (3.93)$$

Σύμφωνα με τον νόμο του Kirchoff, στην θερμοδυναμική ισορροπία ο ρυθμός εκπομπής ακτινοβολίας μέλανος σώματος από την επιφάνεια και το εσωτερικό ενός σώματος είναι ίσος με τον ρυθμό απορρόφησης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας στο ίδιο διάστημα ακτινοβολίας. Η πρόταση αυτή εξακολουθεί να ισχύει [15, 16] στην περίπτωση των ημιαγωγών σε αρκετές διαδικασίες μακριά από την ισορροπία. Έτσι το φάσμα της υπέρυθρης εκπομπής μιας διαδικασίας αποδιέγερσης ενός ημιαγωγού μπορεί να ληφθεί κατευθείαν από το φάσμα απορρόφησης του που συνήθως είναι πιο εύκολο να μετρηθεί. Στην περίπτωση που το υλικό είναι ημιαγωγός, η δημιουργία ζευγών  $e - h$  έχει ως αποτέλεσμα την μεταβολή του συντελεστή υπέρυθρης απορρόφησης του υλικού,  $\alpha_{IR}$ . Έτσι στην παρουσία του πεδίου της διαμορφωμένης ακτινοβολίας ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης στο υπέρυθρο είναι:

$$\alpha_{IR}(z; \omega, \lambda) = \alpha_{IR}^0 + \Delta\alpha(z, \lambda) e^{i\omega t} . \quad (3.94)$$

Ο πρώτος όρος στο δεξί μέρος είναι ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης του υλικού απουσία της διεγείρουσας ακτινοβολίας, ενώ ο δεύτερος όρος είναι η διαμορφωμένη μεταβολή του. Ο όρος  $\Delta\alpha(z, \lambda)$  είναι ανάλογος της πυκνότητας των επαγόμενων φορέων  $\Delta N$  όπως μπορεί να δείξει κανείς χρησιμοποιώντας ένα κλασσικό μοντέλο για την διάδοση κυμάτων σε ελεύθερο πλάσμα (Παράρτημα Α). Η ολική ισχύς ακτινοβολίας ανά μονάδα μήκους κύματος ( $W/m$ ), στην μπροστινή επιφάνεια που καταφθάνει από το εσωτερικό του



**Εικόνα 3.11:** Το πλάτος PMTR για τους δυο χρόνους ζωής  $\tau = 10^{-5} s$  και  $\tau = 10^{-9} s$ .

δείγματος πάχους  $L$ , με την πίσω επιφάνεια αστίλβωτη έτσι ώστε οι πολλαπλές ανακλάσεις να είναι αμελητέες, έχει ως εξής [17]:

$$P(\omega, \lambda) = [1 - R(\lambda)] \int_0^L \alpha_{IR}(z, \omega, \lambda) \exp\left[-\int_0^z \alpha_{IR}(y, \omega, \lambda) dy\right] W_P[T(z, t)] dz \quad (3.95)$$

Υποθέτοντας πως  $L \leq 500 \mu m$  και πως η φωτοεπαγόμενη πυκνότητα φορέων περιορίζεται μέχρι  $\approx 10^{19} cm^{-3}$ , η πιο πάνω έκφραση δίνει συνεισφορές  $dc$ ,  $\omega$  και  $2\omega$ . Η πρώτη αρμονική συνεισφορά ( $\omega$ ) που απομονώνεται με την χρήση του lock-in amplifier είναι:

$$P(\omega, \lambda) = [1 - R(\lambda)] \int_0^L \alpha_{IR}^0(z, \lambda) \Delta W_P(z, \omega, \lambda) dz + \int_0^L W_P(T_0, \lambda) \Delta a(z, \omega, \lambda) dz \quad (3.96)$$

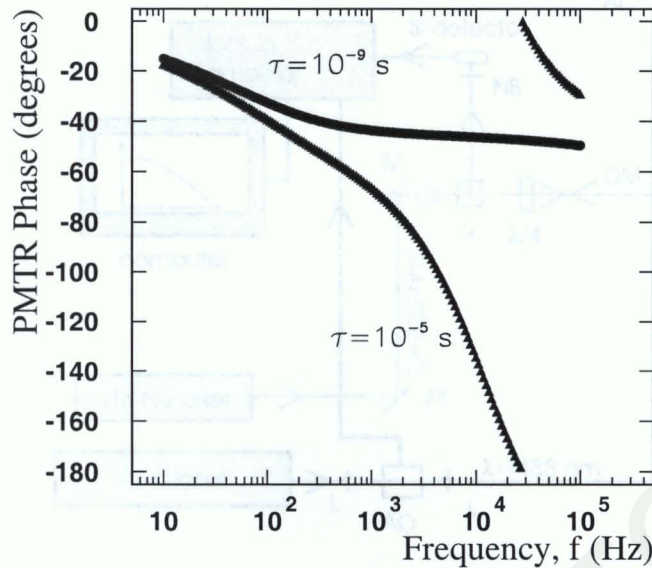
Η πιο πάνω έκφραση μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά αν υποθέσουμε πως ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης  $\alpha_{IR}^0$  είναι ανεξάρτητος του βάθους μέσα στο υλικό :

$$S_{PTR}(\omega, \alpha_{VIS}) = a^T(\lambda_{vis}, T_0, \lambda_1, \lambda_2) \int_0^L \Delta T(z; \alpha_{vis}, \omega) dz \quad (3.97)$$

$$+ b^N(\lambda_{vis}, T_0, \lambda_1, \lambda_2) \int_0^L \Delta N(z; \alpha_{vis}, \omega) dz \quad .$$

Οι συντελεστές  $a^T$  και  $b^N$  είναι ανεξάρτητοι από την συχνότητα διαμόρφωσης, αλλά εξαρτώνται από την θερμοκρασία και το φασματικό εύρος του ανιχνευτή υπέρυθρης ακτινοβολίας. Ο θερμικός συντελεστής  $a^T$  είναι :





Εικόνα 3.12: Η φάση PMTR για τους δυο χρόνους ζωής  $\tau = 10^{-5} s$  και  $\tau = 10^{-9} s$ .

$$a^T = [1 - R(\lambda_{vis})] \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} [1 - R(\lambda)] W_P(\lambda, T_0) \frac{h c \alpha_{IR}^0(\lambda) d\lambda}{\lambda K_B T_0^2 [\exp(hc/\lambda K_B T_0) - 1]} \quad (3.98)$$

ενώ ο συντελεστής πλάσματος

$$b^N = [1 - R(\lambda_{vis})] \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} [1 - R(\lambda)] W_P(\lambda, T_0) \frac{\lambda^2 e^3 d\lambda}{4 \pi^2 c^3 n \epsilon_0 m^{*2} \mu_n} \quad (3.99)$$

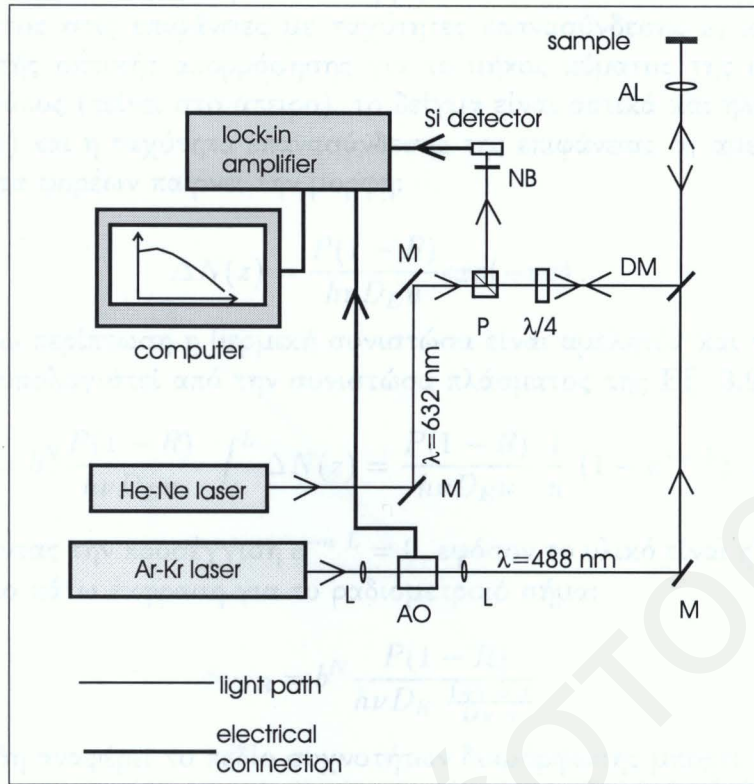
Εδώ υποθέσαμε πως η ηλεκτρονική μεταφορά γίνεται από τους επιπλέον φορείς  $n$  τύπου.

Υποθέτοντας την ίδια γεωμετρία όπως στην μονοδιάστατη περίπτωση PMTR, δηλαδή μονοδιάστατη διάχυση στην κατεύθυνση  $z$ , σε ένα ημιαγωγό πάχους  $L$ , η πυκνότητα φορέων ως συνάρτηση του βάθους από την επιφάνεια του υλικού θα βρεθεί από την λύση των γνωστών μας εξισώσεων ηλεκτρονικής και θερμικής διάχυσης με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες (σ.σ). Η παρουσία της επιφάνειας  $z = L$  με επιφανειακή ταχύτητα  $S_2$  επιβάλλει την πιο κάτω συνθήκη για την εξίσωση ηλεκτρονικής διάχυσης :

$$D_E \frac{d}{dz} \Delta N(z = L) = -s_2 \Delta N(z = L) \quad (3.100)$$

ενώ για την θερμική διάχυση, εφόσον η επανασύνδεση αποτελεί πηγή θερμότητας, η καινούρια σ.σ είναι :

$$\chi \frac{d}{dz} \Delta T(z = L) = s_2 E_g \Delta N(z = L) \quad (3.101)$$



Εικόνα 3.13: Η πειραματική διάταξη PMTR.

Στην περίπτωση που η πυκνότητα προσμεϊξων είναι σχετικά μικρή και η επιφάνεια του ημιαγωγού έχει μικρή ταχύτητα επανασύνδεσης (η τελευταία αυτή υπόθεση αποκλείει ημιαγωγούς που έχουν υποστεί ζημιά λόγω ιοντικής εμφύτευσης) επικρατεί η συνιστώσα πλάσματος σε συχνότητες μεγαλύτερες των 300 Hz.

Η λύση της εξίσωσης διάχυσης των φορέων είναι [17]:

$$\Delta N(z) = \frac{\alpha P(1-R)}{h\nu D_E(\alpha^2 - u^2)} \left[ \frac{g_1 G_2 - G_1 g_2 \exp(-L(\alpha + u))}{G_2 - G_1 \exp(-2uL)} \exp(-uz) + \frac{g_1 - g_2 \exp(-L(\alpha - u))}{G_2 - G_1 \exp(-2uL)} \exp(u(z - 2L)) - \exp(-\alpha z) \right] \quad (3.102)$$

όπου

$$G_1 = \frac{D_E u - s_1}{D_E u + s_1} \quad (3.103)$$

$$G_2 = \frac{D_E u + s_2}{D_E u - s_2} \quad (3.104)$$

$$g_1 = \frac{D_E \alpha + s_1}{D_E u + s_1} \quad (3.105)$$

$$g_2 = \frac{D_E \alpha - s_2}{D_E u - s_2} \quad (3.106)$$



Οι συντελεστές  $G_1$  και  $G_2$  μπορούν να ερμηνευθούν ως συντελεστές ανάκλασης του κύματος πλάσματος στις επιφάνειες με ταχύτητες επανασύνδεσης  $s_1$  και  $s_2$  αντίστοιχα. Εάν ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης για το μήκος κύματος της οπτικής διέγερσης είναι αρκετά μεγάλος (τείνει στο άπειρο), το δείγμα είναι οπτικά και ηλεκτρονικά "παχύ" ( $\alpha L = u L = \infty$ ) και η ταχύτητα επανασύνδεσης της επιφάνειας  $S_1$  αμελητέα, η έκφραση για την πυκνότητα φορέων παίρνει την μορφή:

$$\Delta N(z) = \frac{P(1-R)}{h\nu D_E u} \exp(-uz) \quad (3.107)$$

Στην πιο πάνω περίπτωση η θερμική συνιστώσα είναι αμελητέα και το συνολικό σήμα  $PTR$  μπορεί να υπολογιστεί από την συνιστώσα πλάσματος της Εξ. 3.96

$$S_{PTR} = b^N \frac{P(1-R)}{h\nu D_E u} \int_0^L \Delta N(z) dz = \frac{P(1-R)}{h\nu D_E u} \frac{1}{u} (1 - e^{-uL}) \quad (3.108)$$

Χρησιμοποιώντας την προσέγγιση  $e^{-uL} = 0$ , εφόσον το υλικό είναι ηλεκτρονικά λεπτό, παίρνουμε την πιο κάτω έκφραση για το ραδιομετρικό σήμα:

$$S_{PTR} = b^N \frac{P(1-R)}{h\nu D_E \frac{1+i\omega\tau}{D_E\tau}} \quad (3.109)$$

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει το πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης μπορεί να διαχωριστεί σε δυο βασικές περιοχές, στην περιοχή μικρών συχνοτήτων ( $\omega \times \tau \ll 1$ ) και σε αυτή των μεγάλων συχνοτήτων όπου ( $\omega \times \tau \gg 1$ ).

**A)** Στην περιοχή μικρών συχνοτήτων το σήμα είναι πραγματικό και ανάλογο του χρόνου ζωής των φορέων και δεν εξαρτάται από τον συντελεστή ηλεκτρονικής διάχυσης. Η φάση του είναι μηδέν. Επίσης το σήμα δεν εξαρτάται από την συχνότητα διαμόρφωσης.

$$S_{PTR} = b^N \frac{P(1-R)}{h\nu} \tau \quad (3.110)$$

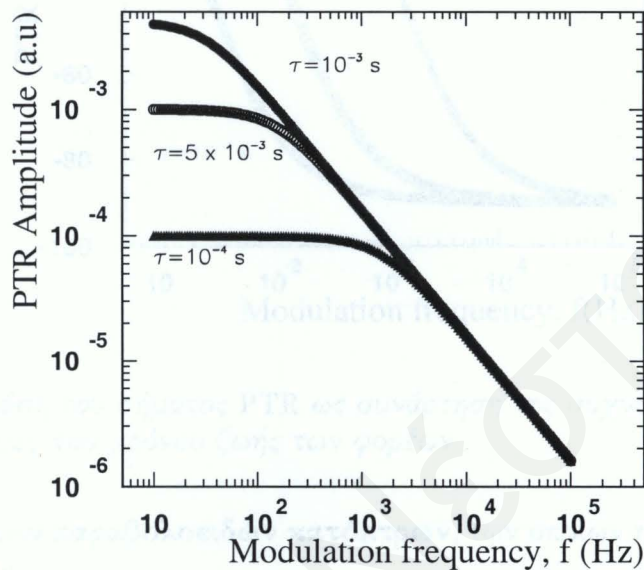
**B)** Στην περιοχή μεγάλων συχνοτήτων το σήμα είναι φανταστικό και εξαρτάται από την συχνότητα διαμόρφωσης ως  $\omega^{-1}$ . Η φάση του έχει την τιμή  $-90^\circ$ , δηλαδή η ηλεκτρονική διαταραχή έπεται της διέγερσης κατά  $90^\circ$ . Η ηλεκτρονική διαταραχή έπεται της διέγερσης κατά  $90^\circ$ .

$$S_{PTR} = b^N \frac{P(1-R)}{i h \nu \omega} \quad (3.111)$$

Οι δυο αυτές οριακές περιπτώσεις του πιο πάνω απλοποιημένου προβλήματος είναι σημαντικές γιατί με την βοήθεια τους μπορούμε να εξηγήσουμε ποιοτικά πιο πολύπλοκα προβλήματα.

Στην Εικ. 3.14 έχουμε το ραδιομετρικό πλάτος του σήματος ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για το Si χρησιμοποιώντας το πιο πάνω απλό μοντέλο, ενώ στην Εικ. 3.15 την φάση του. Όπως βλέπουμε για σχετικά μεγάλους χρόνους ζωής ( $\tau = 10^{-3}s$ ) η ανισότητα  $\omega \times \tau \ll 1$  δεν ισχύει ούτε στο διάστημα μικρών συχνοτήτων  $10 - 1000Hz$ , καθώς το πλάτος εξαρτάται από την συχνότητα διαμόρφωσης. Επίσης η φάση του απέχει αρκετά από την τιμή 0. Με την αύξηση του χρόνου ζωής ( $\tau = 5 \times 10^{-3}s$ ) το πλάτος του σήματος αρχίζει να ανεξαρτητοποιείται από την συχνότητα στο διάστημα μικρών συχνοτήτων όπως βλέπουμε από την αντίστοιχη κλίση της καμπύλης της Εικ. 3.14.

Η τιμή δε της φάσης στο ίδιο διάστημα συχνοτήτων πλησιάζει την τιμή  $0^\circ$ . Η ανεξάρτηση του πλάτους είναι εμφανής στην περίπτωση που ο χρόνος ζωής έχει την τιμή ( $\tau = 1 \times 10^{-4} \text{ s}$ ). Η κλίση της καμπύλης του πλάτους είναι μηδέν στην περιοχή συχνοτήτων  $10 - 1000 \text{ Hz}$ . Η τιμή της φάσης είναι σχεδόν μηδέν στο ίδιο διάστημα συχνοτήτων (Εικ. 3.15). Αξίζει να αναφέρουμε πως στο διάστημα συχνοτήτων διαμόρφωσης που ισχύει  $\omega \times \tau \gg 1$  το πλάτος ελαττώνεται ως  $\omega^{-1}$  και επιπλέον η φάση του σήματος τείνει στην οριακή τιμή  $-90^\circ$ .



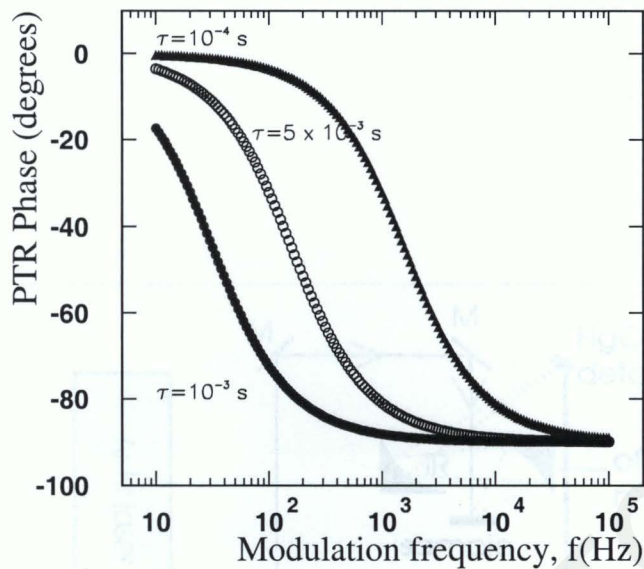
Εικόνα 3.14: Το πλάτος του σήματος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης στο Si για διάφορες τιμές του χρόνου ζωής των φορέων.

Η θερμική συνεισφορά στο ραδιομετρικό σήμα που δίνει ένας ημιαγωγός είναι σημαντική στην περίπτωση που έχει εμφυτευθεί με μεγάλη δόση ιόντων, ή γενικά στην περίπτωση που η πυκνότητα κέντρων επανασύνδεσης της επιφάνειας του ημιαγωγού είναι μεγάλη. Στην πιο πάνω περίπτωση η θερμική συνιστώσα είναι κυρίαρχη στην περιοχή μικρών συχνοτήτων. Στο Κεφάλαιο 5 όπου θα εξεταστεί η περίπτωση των εμφυτευμένων ημιαγωγών, θα γίνει εκτενής αναφορά και στην θερμική συνιστώσα.

### 3.6.1 Πειραματική διάταξη PTR.

Η πειραματική διάταξη PTR είναι αρκετά πιο απλή από αυτή του PMTR, τόσο από την άποψη του αριθμού των οπτικών και ηλεκτρονικών διατάξεων που χρησιμοποιούνται όσο και από την άποψη πειραματικής διαδικασίας. Στην Εικ. 3.16 παρουσιάζεται μια τυπική πειραματική διάταξη φωτοθερμικής ραδιομετρίας. Η πηγή της οπτικής διαταραχής είναι ένα laser Ar-Kr συνεχούς κύματος. Η εκπομπή του ρυθμίστηκε στα 488 και 514 nm (συνδυασμένη εκπομπή). Η ένταση της φωτεινής δέσμης διαμορφώνεται κατά τα γνωστά με την χρήση μιας κυψελίδας Bragg (ακουστο-οπτικός διαμορφωτής) και εστιάζεται, αν χρειαστεί, πάνω στο δείγμα. Η εκπεμπόμενη υπέρυθη ακτινοβολία εστιάζεται στον ανιχνευτή με



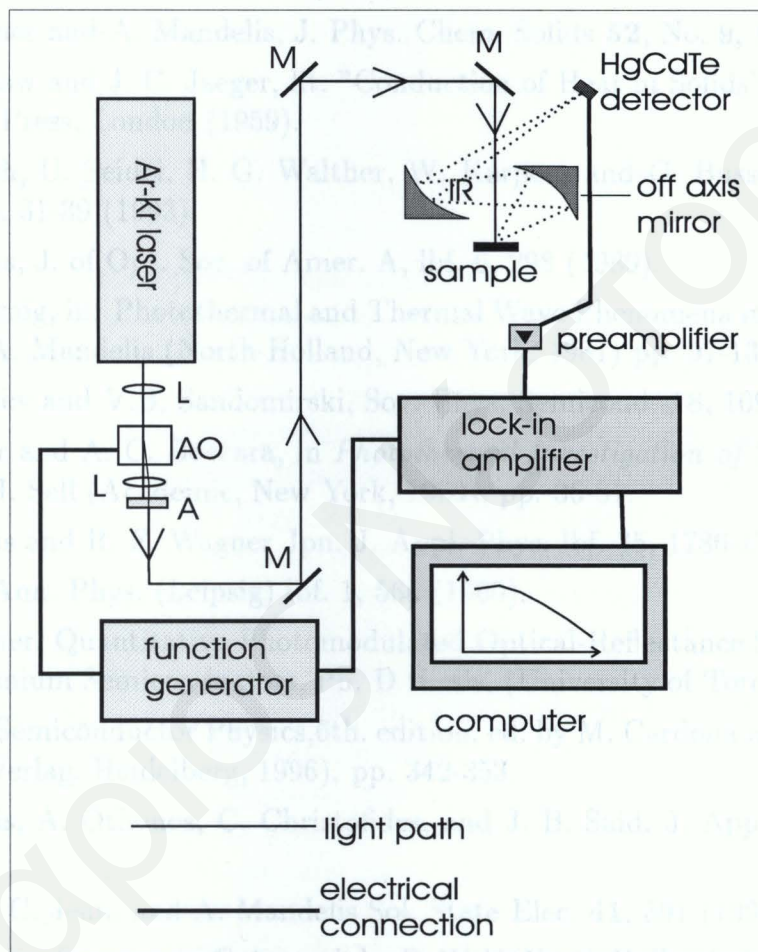


Εικόνα 3.15: Η φάση του σήματος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης στο Si για διάφορες τιμές του χρόνου ζωής των φορέων.

χρήση δυο έκκεντρων παραβολοειδών κατόπτρων, των οποίων η ενεργός επιφάνεια είναι επιστρωμένη με Ag.

Ο ανιχνευτής είναι φωτοαγώγιμο  $HgCdTe$  (MT) και έχει φασματική ευαισθησία στην περιοχή  $2 - 12\mu m$ . Στην είσοδο του ανιχνευτή εφαρμόζεται ένα "παράθυρο" Ge για να απορρίπτει την δέση διεγερσης. Το κύκλωμα του ανιχνευτή και του προ-ενισχυτή (preamplifier) έχουν συνδυασμένη ζώνη συχνοτήτων από 1 έως  $10^6 Hz$ . Το φωτοθερμικό σήμα από τον προενισχυτή κατευθύνεται στον ενισχυτή σύγχρονης ανίχνευσης (lock in amplifier).

## Βιβλιογραφία



Εικόνα 3.16: Η πειραματική διάταξη PTR.



## Βιβλιογραφία

- [1] A. Rosencwaig, *Science* **218**, 223 (1982).
- [2] R. E. Wagner and A. Mandelis, *J. Phys. Chem. Solids* **52**, No. 9, 1061-1070 (1991).
- [3] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, lit. "Conduction of Heat in Solids", 2nd ed., Oxford University Press, London (1959).
- [4] K. Friedrich, U. Seidel, H. G. Walther, W. Karpen, and G. Busse, *Res. Nondestr. Eval. lbf.* 5, 31-39 (1993).
- [5] A. Mandelis, *J. of Opt. Soc. of Amer. A*, lbf. 6, 298 (1989).
- [6] A. Rosencwaig, in: *Photothermal and Thermal Wave Phenomena in Semiconductors*, edited by A. Mandelis (North-Holland, New York, 1987) pp. 97-136.
- [7] A. N. Vasilev and V.B. Sandomirski, *Sov. Phys. Semicond.* **18**, 1095 (1984).
- [8] D. Fournier and A. C. Boccara, in *Photothermal Investigation of Solids and Fluids*, ed. by A. J. Sell (Academic, New York, 1989), pp. 36-81.
- [9] A. Mandelis and R. E. Wagner *Jpn. J. Appl. Phys. lbf.* 35, 1786-1797 (1996).
- [10] P. Drude, *Ann. Phys. (Leipzig) lbf.* 1, 566 (1900).
- [11] R. E. Wagner, *Quantitative Photomodulated Optical-Reflectance Studies Of Silicon and Germanium Semiconductors*, Ph. D thesis, (University of Toronto, 1993).
- [12] K. Seeger, *Semiconductor Physics*, 6th. edition, ed. by M. Cardona and H-J. Queisser, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1996), pp. 342-353.
- [13] A. Mandelis, A. Othonos, C. Christofides, and J. B. Said, *J. Appl. Phys.* **80**, 5332 (1996).
- [14] A. Salnick, C. Jean, and A. Mandelis *Sol. State Elec.* **41**, 591 (1997).
- [15] H. P. Baltes in *Progress in Optics*, ed. by E. Wolf (North Holland, Amsterdam, 1976), Ch. 1.
- [16] E. A. Ulmer and D. R. Frank, in *Proceedings of the Ninth International Conference on Semiconductor Physics* (Nauka, Moscow, 1968), pp. 170-174.
- [17] A. Salnick, A. Mandelis, and C. Jean, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2522 (1996).

## 4.2 Θεωρία

### 4.2.1 Ποσοτική φωτοθερμική εξίσωση τριδιάστατου δείγματος

## Κεφάλαιο 4

# Η φωτοθερμική ανακλαστικότητα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας: μια ποσοτική διερεύνηση και ανάλυση.

## 4.1 Εισαγωγή

Η θερμοκρασία αποτελεί μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα παράμετρο ενός φυσικού συστήματος. Η θερμική ενέργεια των ατόμων ενός σώματος είναι καθοριστική όσον αφορά την εκδήλωση διαφόρων ιδιοτήτων του. Για παράδειγμα στην οπτική φασματοσκοπία αν ενδιαφερόμαστε να εντοπίσουμε ενεργειακές καταστάσεις εξιτονίων σε ένα υλικό, θα πρέπει να εργαστούμε σε χαμηλές θερμοκρασίες όπου το σύμπλεγμα οπής και ηλεκτρονίου που αποτελεί το εξιτόνιο, είναι σταθερό. Μπορούμε επίσης να αναφέρουμε πολλά παραδείγματα από τη φυσική στερεού σώματος μέχρι και την ατομική φυσική όπου πειράματα γίνονται σε χαμηλές ή υψηλές θερμοκρασίες, σε σχέση με την θερμοκρασία δωματίου, έτσι ώστε να είναι δυνατή η παρατήρηση διαφόρων μηχανισμών ή φαινομένων. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται μια ποσοτική ανάλυση της εξάρτησης του σήματος PMTR που λαμβάνεται από χυσταλλικό και εμφυτευμένο πυρίτιο σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας του δείγματος [1]. Απώτερος σκοπός είναι η διερεύνηση της εξάρτησης της θερμικής συνιστώσας και της συνιστώσας πλάσματος από την θερμοκρασία και η συνεισφορά τους στο φωτοθερμικό σήμα. Ακόμα εξετάζεται ο ρόλος των φαινομένων Drude και πλήρωσης ζώνης και η σχέση που έχουν με την άμορφη και χυσταλλική φάση του πυριτίου. Μετά από μια σύντομη παρουσίαση του θεωρητικού φωτοθερμικού τριδιάστατου μοντέλου (3-Δ), γίνεται η επέκτασή του με χρήση εμπειρικών σχέσεων που περιγράφουν την συμπεριφορά θερμοφυσικών και οπτοηλεκτρονικών ιδιοτήτων του πυριτίου ως προς την θερμοκρασία. Ακολούθως παρουσιάζονται δεδομένα για τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν, σχόλια για την πειραματική τεχνική, καθώς και τα πειραματικά αποτελέσματα τα οποία θα αποτελέσουν το αντικείμενο της ανάλυσης. Τα αποτελέσματα της προσαρμογής σχολιάζονται σε έκταση στο ίδιο υποκεφάλαιο. Τέλος στο τελευταίο υποκεφάλαιο συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα.



## 4.2 Θεωρία

### 4.2.1 Βασικές φωτοθερμικές εξισώσεις-τρισεδιάστατη λύση.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει ο μηχανισμός του σήματος PMTR στους ημιαγωγούς μπορεί να εξηγηθεί με την επαγόμενη διαμόρφωση του δείκτη διάθλασης, που εξαρτάται από την διαταραχή της επιφανειακής θερμοκρασίας και την πυκνότητα των φωτοεπαγόμενων φορέων στην επιφάνεια του υλικού. Έτσι το ολικό σήμα μπορεί να γραφτεί σαν άθροισμα των δυο συνεισφορών, της θερμικής και του πλάσματος:

$$S_R \equiv \frac{\Delta R}{R} = C_T \Delta T + C_N \Delta N = S_T + S_N \quad (4.1)$$

Οι εξισώσεις διάχυσης πλάσματος και θερμότητας πρέπει να λυθούν με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες για να μας δώσουν τις τιμές των  $\Delta N$  και  $\Delta T$  στην επιφάνεια του δείγματος. Η συχνότητα διαμόρφωσης για όλες τις μετρήσεις ήταν  $100 \text{ kHz}$ . Σε αυτή την συχνότητα το μήκος θερμικής διάχυσης ( $\mu_T = \sqrt{D_T/\pi f}$ ) στο κρυσταλλικό πυρίτιο είναι  $17 \mu\text{m}$  (στους  $300 \text{ K}$ ). Είναι δηλαδή της ίδιας τάξης μεγέθους με την ακτίνα της δέσμης άντλησης ανίχνευσης (βλ. Πίνακα 4.1). Θα πρέπει να λάβουμε επίσης υπόψη πως καθώς κινούμαστε σε χαμηλότερες θερμοκρασίες, ο συντελεστής θερμικής διάχυσης αυξάνει, με αποτέλεσμα να αυξάνει και το μήκος θερμικής διάχυσης [βλ. Εικ. 4.1]. Έτσι ένα μοντέλο που λαμβάνει υπόψη του μονοδιάστατη διάχυση θα μπορούσε να περιγράψει σωστά τα πειραματικά αποτελέσματα μόνο σε ψηλές σχετικά θερμοκρασίες (στην Εικ.4.1 βλέπουμε πως το  $\mu_T$  γίνεται ίσο με την ενεργή ακτίνα,  $L_c$ , γύρω στους  $280 \text{ K}$ ). Η ίδια ανάλυση μπορεί να γίνει και για το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης,  $\mu_E$ , το οποίο είναι μεγαλύτερο από το  $\mu_T$ .

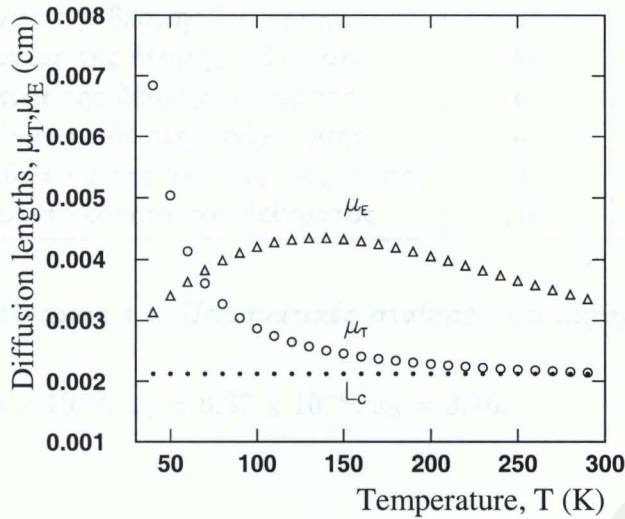
Μια τρισεδιάστατη λύση είναι λοιπόν αναγκαία για την περιγραφή του φωτοθερμικού σήματος. Λαμβάνοντας υπόψη την κυλινδρική συμμετρία του προβλήματος μπορούμε να λύσουμε σχετικά εύκολα τις εξισώσεις διάχυσης με την χρήση των μετασχηματισμών Hankel [20]. Η πυκνότητα πλάσματος,  $\Delta N$ , και η θερμοκρασία,  $\Delta T$ , ολοκληρωμένες πάνω στην επιφάνεια της δέσμης ανίχνευσης είναι :

$$\Delta N = \Phi \frac{a_p^2}{4} \int_0^\infty \frac{e^{-\lambda^2 (a_p^2 + a_s^2)/8}}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{\alpha}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \lambda d\lambda \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \Delta T = & \alpha \Phi \frac{a_p^2}{4} \int_0^\infty \frac{e^{-\lambda^2 (a_p^2 + a_s^2)/8}}{\chi \sqrt{\sigma^2 + \lambda^2}} \left\{ \frac{1}{\alpha + \sqrt{\sigma^2 + \lambda^2}} \left[ (h\nu - E_g) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{E_g}{D_{ET}(\alpha^2 - (u^2 + \lambda^2))} \right] + \frac{1}{\alpha + \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \frac{E_g}{s + D_E \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \right. \\ & \left. \left[ s + \frac{1}{\tau(\sqrt{u^2 + \lambda^2} + \sqrt{\sigma^2 + \lambda^2})} \frac{\alpha + s/D_E}{\alpha - \sqrt{u^2 + \lambda^2}} \right] \right\} \lambda d\lambda \quad (4.3) \end{aligned}$$

όπου  $\lambda$  η χωρική συχνότητα που εισάγεται από τον μετασχηματισμό *Hankel*. Η ροή φωτονίων που μπαίνει στο δείγμα μετά από ανάκλαση στην επιφάνεια του είναι :

$$\Phi = \frac{2(1-R)P}{h\nu \pi a_p^2} \quad (4.4)$$



**Εικόνα 4.1:** Το μήκος θερμικής διάχυσης  $\mu_T$ , και ηλεκτρονικής διάχυσης  $\mu_E$  σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για το κρυσταλλικό, μή εμφυτευμένο Si σε συχνότητα  $f = 100\text{kHz}$ . Με στικτή γραμμή παρουσιάζεται η ενεργός ακτίνα  $L_C$ , η οποία καθορίζει την διάσταση του μοντέλου (1-Δ ή 3-Δ) που πρέπει να χρησιμοποιηθεί.

Οι τιμές των  $R$ ,  $h\nu$ , δίνονται στον Πίνακα 4.1.

Σχεδόν όλες οι φυσικές παράμετροι του υλικού όπως:  $s$ ,  $\tau$ ,  $D_E$ ,  $D_T$ ,  $\alpha$ ,  $\chi$ , και  $E_g$  παρουσιάζουν εξάρτηση από την θερμοκρασία η οποία επηρεάζει το φωτοθερμικό σήμα. Η ανάλυση μας συγκεντρώνεται στις τρεις βασικές ηλεκτρονικές παραμέτρους  $D_E$ ,  $s$ , και  $\tau$  και στους συντελεστές πλάσματος και θερμοκρασίας  $C_N$  και  $C_T$ . Άλλες παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στην αριθμητική προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων, όπως το ενεργειακό χάσμα και ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης λήφθηκαν από την βιβλιογραφία [3,4,5,6].

#### 4.2.2 Εξάρτηση των θερμικών ιδιοτήτων από τη θερμοκρασία.

Παρακάτω παρατίθενται εμπειρικές σχέσεις για τον συντελεστή θερμικής διάχυσης και τον συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας.

1. Συντελεστής θερμικής διάχυσης [3,4]:

$$D_T = D_0 \exp\left[\frac{d_1 + d_2 T + d_3 T^2}{1 + d_4 T + d_5 T^2 + d_6 T^3}\right] \quad (4.5)$$

όπου:  $d_1 = 4.35$ ,  $d_2 = 0.16$ ,  $d_3 = -4 \times 10^{-4}$ ,  $d_4 = -2.9 \times 10^{-2}$ ,  $d_5 = 1.4 \times 10^{-3}$ , και  $d_6 = -2.39 \times 10^{-6}$ .

2. Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας [6]:

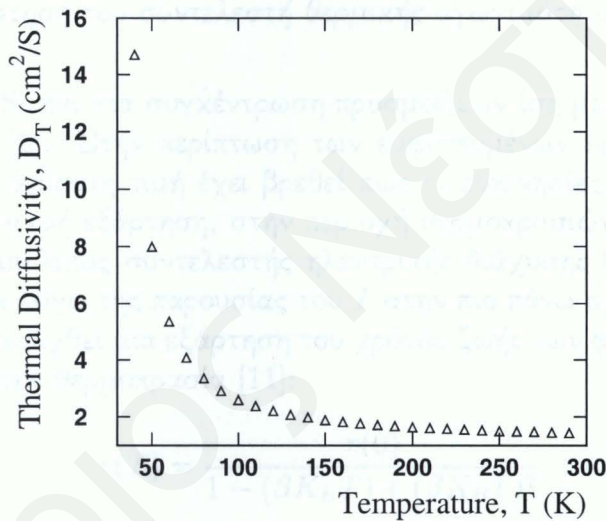
$$\chi(T) = \frac{1}{x_1 + x_2 T^2 + x_3 T^{-3}} \quad (4.6)$$



Πειραματικές σταθερές	Σύμβολο	Τιμή
Συχνότητα διαμόρφωσης	$f$	3 και 100kHz
Ισχύς της δέσμης διέγερσης	$P$	25 mW
Ενέργεια της δέσμης διέγερσης	$h\nu$	2.548 eV
Ακτίνα της δέσμης διέγερσης	$a_p$	15μm
Ακτίνα της δέσμης ανίχνευσης	$a_s$	15μm
Μήκος κύματος της ακτίνας ανίχνευσης	$\lambda_0$	632.8 nm
Ανακλαστικότητα του δείγματος	$R$	0.35

Πίνακας 4.1: Πειραματικές σταθερές και παράμετροι.

όπου  $x_1 = 9.45 \times 10^{-3}$ ,  $x_2 = 8.37 \times 10^{-6}$ ,  $x_3 = 3.46$ .



Εικόνα 4.2: Η εξάρτηση του συντελεστή θερμικής διάχυσης από την θερμοκρασία.

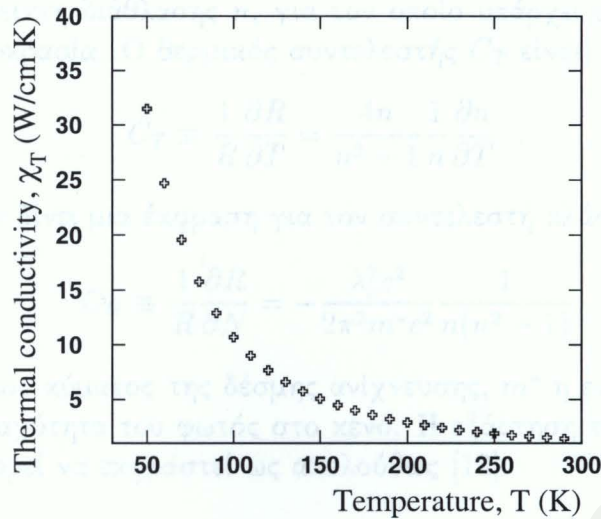
#### 4.2.3 Εξάρτηση των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων από τη θερμοκρασία.

Οι ευκινησίες οπών και ηλεκτρονίων ( $\mu_e$  και  $\mu_h$ ) στους ημιαγωγούς [7], σχετίζονται με τον αμφιπολικό συντελεστή ηλεκτρικής διάχυσης ( $D_E$ ) μέσω της σχέσης του Einstein [6]:

$$D_E = \frac{K_B T}{e} \frac{2\mu_e \mu_h}{\mu_e + \mu_h} \quad (4.7)$$

όπου  $e$  το φορτίο του ηλεκτρονίου. Η ευκινησία των οπών και των ηλεκτρονίων δίνεται από την σχέση:

$$\mu_h = a \left(\frac{T}{300}\right)^x, \quad \mu_e = b \left(\frac{T}{300}\right)^y \quad (4.8)$$



Εικόνα 4.3: Η εξάρτηση του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας από την θερμοκρασία.

Για το χρυσταλλικό Si και για συγκέντρωση προσμειξεων ίση με  $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$ ,  $a = 1350$ ,  $b = 480$ ,  $x = -0.3$  [8]. Στην περίπτωση των εμφυτευμένων ημιαγωγών σε δόσεις που έχουν ξεπεράσει την κρίσιμη τιμή έχει βρεθεί πως οι ευκινησίες παραμένουν σταθερές, ή παρουσιάζουν πολύ μικρή εξάρτηση, στην περιοχή θερμοκρασιών που εξετάζουμε [9, 10]. Παρόλα αυτά ο αμφιπολικός συντελεστής ηλεκτρικής διάχυσης θα παρουσιάζει εξάρτηση από την θερμοκρασία λόγω της παρουσίας του  $T$  στην πιο πάνω σχέση. Για εμπλουτισμένα δείγματα, πρέπει να εισαχθεί μια εξάρτηση του χρόνου ζωής των φορέων και της ταχύτητας επανασύνδεσης από την θερμοκρασία [11]:

$$\tau(T) = \frac{\tau(0)}{1 - (\beta K_B T) + (\beta K_B T)^2} \quad (4.9)$$

Στην πιο πάνω εξίσωση  $\beta$  είναι ένας παράγοντας αντιστρόφως ανάλογος της ενέργειας παγίδευσης της πρόσμειξης. Στη περίπτωση των πρόσμειξεων φωσφόρου το  $\beta$  υπολογίστηκε γύρω στα  $0.1 \text{ meV}^{-1}$ . Η πιο πάνω σχέση είναι συνεπής με την  $T^{-2}$  εξάρτηση που παρατηρείται στην επανασύνδεση *Shockley – Read – Hall* στο ισχυρά εμπλουτισμένο πυρίτιο [12]. Περαιτέρω, στην περίπτωση του ενδογενούς πυριτίου ο χρόνος ζωής οφείλεται σε παγίδες βαθιών επιπέδων (*deep-level*), αφού το  $\beta$  είναι αντιστρόφως ανάλογο της ενέργειας της παγίδας. Σε αυτή την περίπτωση το  $\beta$  είναι περίπου  $0.01 \text{ meV}^{-1}$ , έτσι ο χρόνος ζωής παρουσιάζει μια ανεπαίσθητη εξάρτηση από την θερμοκρασία, και στους υπολογισμούς μας λαμβάνεται σταθερός.

Η ταχύτητα επανασύνδεσης ( $s$ ), είναι μια φαινομενολογική παράμετρος η οποία εκφράζει την πιθανότητα επανασύνδεσης στην επιφάνεια του δείγματος (ο χρόνος ζωής είναι αντίστροφος της πιθανότητας επανασύνδεσης). Για τούτο τον λόγο η εξάρτηση της  $s$  από την θερμοκρασία λήφθηκε να είναι η αντίστροφη αυτής του χρόνου ζωής:

$$s(T) = s(0)[1 - (\beta K_B T) + (\beta K_B T)^2] \quad (4.10)$$



#### 4.2.4 Οι συντελεστές πλάσματος και θερμοκρασίας $C_N$ και $C_T$ .

Ο θερμικός συντελεστής ( $C_T$ ) και ο συντελεστής πλάσματος ( $C_N$ ) μπορούν να εκφραστούν ως συνάρτηση του δείκτη διάθλασης  $n$ , για τον οποίο υπάρχει εμπειρική σχέση που τον συνδέει με την θερμοκρασία. Ο θερμικός συντελεστής  $C_T$  είναι:

$$C_T \equiv \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} = \frac{4n}{n^2 - 1} \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial T} \quad (4.11)$$

Το φαινόμενο *Drude* δίνει μια έκφραση για τον συντελεστή πλάσματος ( $C_N$ ):

$$C_N \equiv \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} = - \frac{\lambda_c^2 e^2}{2\pi^2 m^* c^2} \frac{1}{n(n^2 - 1)} \quad (4.12)$$

όπου  $\lambda_c$  είναι το μήκος κύματος της δέσμης ανίχνευσης,  $m^*$  η ενεργός μάζα των φορέων μειοψηφίας και  $c$  η ταχύτητα του φωτός στο κενό. Η εξάρτηση του δείκτη διάθλασης από την θερμοκρασία μπορεί να εκφραστεί ως ακολούθως [13]:

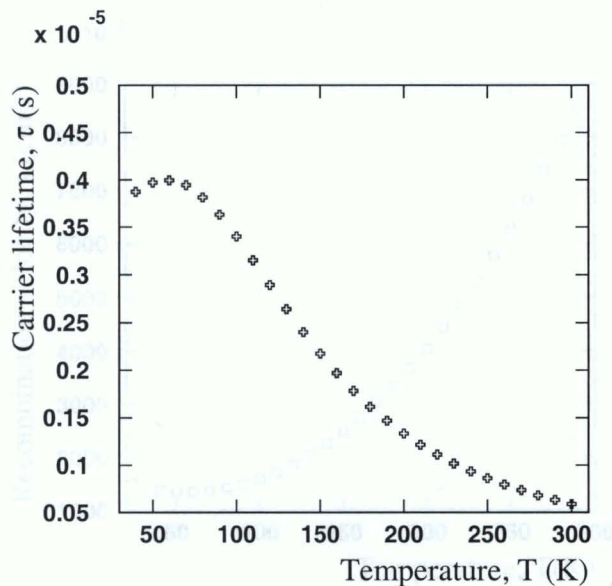
$$n = n_c \exp \left[ kT + \sigma(1.9595 - E_{go} + \frac{mT^2}{T + T_o}) \gamma \right] \quad (4.13)$$

όπου οι τιμές των διαφόρων σταθερών είναι:  $n_c = 3.6$ ,  $k = 3.9 \times 10^{-5} /K$ ,  $\gamma = 1.67$ ,  $\sigma = 0.1004 \text{ eV}^{-1}$ ,  $m = 4.73 \times 10^{-4} \text{ eV}/K$ ,  $E_{go} = 1.52 \text{ eV}$ , και  $T_o = 636 \text{ K}$ . Παρόλο που ο δείκτης διάθλασης μεταβάλλεται ελαφρά με την θερμοκρασία στο εξεταζόμενο διάστημα θερμοκρασιών, η τιμή της παραγώγου του ως προς την θερμοκρασία δεν είναι αμελητέα. Η Ειχ. 4.7 παρουσιάζει την κανονικοποιημένη θερμοκρασιακή μεταβολή των  $C_T/C_{T300}$  και  $C_N/C_{N300}$  (όπου ο δείκτης 300 αναφέρεται σε θερμοκρασία 300 K). Παρατηρούμε πως οι μεταβολές των δυο συντελεστών είναι ανταγωνιστικές. Όσον αφορά την περίπτωση του φαινομένου πλήρωσης ζώνης, ο όρος  $C_{NBF}$ , εξαρτάται από την θερμοκρασία μόνο μέσω του παράγοντα  $1/R$ . Η εξάρτηση αυτή είναι πολύ μικρή:  $R(300) = 0.3493$  και  $R(77) = 0.3433$  [17, 13] επομένως ο  $C_{NBF}$  μπορεί να θεωρηθεί σταθερός.

#### 4.2.5 Επίδραση της θερμοκρασίας στη σχετική σημασία των συνεισφορών πλάσματος και θερμοκρασίας-Προσομοιώσεις.

Όλες οι προσομοιώσεις που παρουσιάζονται στην εργασία αυτή αφορούν δείγματα χρυσταλλικού πυριτίου ( $\rho \approx 6 \text{ } \Omega\text{cm}$ ). Οι τιμές που χρησιμοποιούνται για τις διάφορες ηλεκτρονικές και θερμικές παραμέτρους στους 300K φαίνονται στον Πίνακα 4.2 ενώ οι πειραματικές σταθερές στον Πίνακα 4.1. Το σχήμα 4.8 παρουσιάζει την μεταβολή του πλάτους του ολικού σήματος καθώς επίσης και των συνεισφορών πλάσματος και θερμοκρασίας για δυο τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (5.1),(5.2) και (5.3). Παρατηρούμε πως στην περίπτωση της χαμηλής συχνότητας (1 kHz) το σήμα είναι κυρίως θερμικό. Από την άλλη, στην περίπτωση της υψηλής συχνότητας (1 MHz) η συνεισφορά πλάσματος αρχίζει να παίζει σημαντικό ρόλο. Εμφανής είναι η παρουσία του ελαχίστου που οφείλεται στο άθροισμα των δυο συνεισφορών που έχουν αντίθετα πρόσημα. Στην Ειχ. 4.9 παρουσιάζεται η φάση του σήματος για τις δυο προηγούμενες συχνότητες, καθώς και οι δυο συνιστώσες της. Παρατηρούμε και στις δυο περιπτώσεις ότι το πέρασμα από την συνεισφορά πλάσματος στην συνεισφορά θερμοκρασίας συνοδεύεται με μια αλλαγή





Εικόνα 4.4: Η εξάρτηση του χρόνου ζωής των φορέων από την θερμοκρασία.

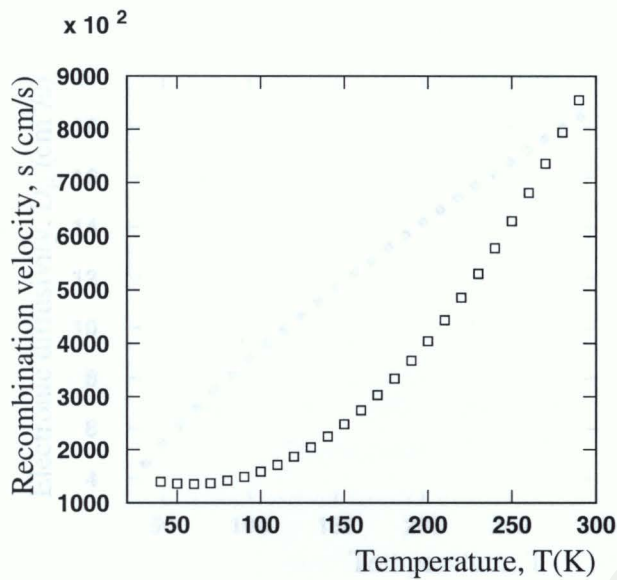
στην φάση κατά  $180^\circ$ . Είναι φανερό πως η φάση του σήματος στις χαμηλές συχνότητες (1 kHz) κυριαρχείται από την θερμική επίδραση, σε αντίθεση με την περίπτωση των υψηλών συχνοτήτων (1 MHz).

Στην Εικ. 4.10 φαίνονται το φωτοθερμικό πλάτος και η φάση ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για δυο διαφορετικές τιμές του χρόνου ζωής των φορέων. Ακόμα στην Εικ. 4.11 παρουσιάζεται το πλάτος και την φάση του σήματος ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορες τιμές της ταχύτητας επανασύνδεσης. Η θέση του ελαχίστου [το πηδύμα φάσης  $180^\circ$  στην Εικ. 4.11] εξαρτάται ισχυρά από την τιμή του  $s$ . Έτσι, για πολύ μεγάλες τιμές της ταχύτητας επανασύνδεσης ( $10^6$  cm/s) η θερμική συνεισφορά κυριαρχεί στο φωτοθερμικό σχήμα σε όλο το εξεταζόμενο εύρος θερμοκρασιών. Από την άλλη, η μείωση της ταχύτητας επανασύνδεσης μετατοπίζει το μέγιστο σε πιο υψηλές θερμοκρασίες. Όπως έχουμε αναφέρει και πιο πριν, η μείωση του χρόνου ζωής των φορέων αντιστοιχεί σε αύξηση της ταχύτητας επανασύνδεσης και αντίστροφα. Με την ελάττωση του χρόνου ζωής των φορέων ο ρυθμός παραγωγής θερμότητας λόγω της επανασύνδεσης των φορέων αυξάνει. Έτσι υποβοηθείται η θερμική συνιστώσα του σήματος κάτι που είναι κυρίως εμφανές στην περιοχή συχνοτήτων όπου  $\omega \times \tau \ll 1$ . Συμπεραίνουμε λοιπόν πως η αύξηση του ρυθμού επανασύνδεσης έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του σήματος PMTR.

### 4.3 Πειραματικά αποτελέσματα και θεωρητική προσαρμογή.

Κρυσταλλικά δισκία πυριτίου  $n-$  τύπου  $< 100 >$  εμφυτεύθηκαν με ιόντα φωσφόρου σε τρεις διαφορετικές δόσεις:  $1 \times 10^{12}$ ,  $1 \times 10^{14}$  και  $1 \times 10^{16}$   $P^+/cm^2$ , σε ενέργεια  $E = 150$  keV. Επίσης ένα  $p-$  τύπου κρυσταλλικό δισκίο πυριτίου  $< 100 >$  ( $\rho \approx 6 \Omega cm$ ) χρησιμοποιήθηκε σε αυτή την μελέτη. Στο συγκεκριμένο πείραμα εκτός από την τυποποιημένη διάταξη



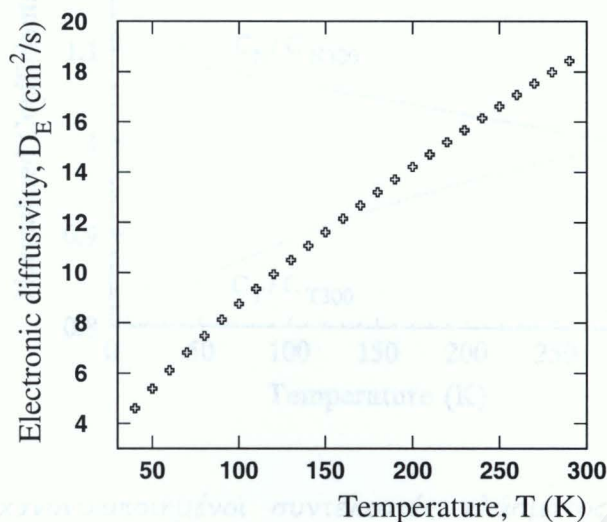


Εικόνα 4.5: Η εξάρτηση της ταχύτητας επανασύνδεσης των φορέων από την θερμοκρασία.

Πρόσμειξη	Φωσφόρος	Φωσφόρος	Φωσφόρος	Βόρον
$\Phi_1(\text{ions}/\text{cm}^2)$	$1 \times 10^{16}$	$1 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{12}$	–
$\alpha_0(\text{cm}^{-1})$	$6 \times 10^4$	$6 \times 10^3$	$6 \times 10^3$	$6 \times 10^3$
$\mu_e(\text{cm}^2/\text{Vs})$	5	30	$437(T/300)^{-0.3}$	Αναφ. 8
$\mu_h(\text{cm}^2/\text{Vs})$	2	10	$135(T/300)^{-0.3}$	Αναφ. 8
$D_0(\text{cm}^2/\text{s})$	0.1	0.4	1	1
$\tau_0(\text{s})$	$1 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$3 \times 10^{-6}$	$7.7 \times 10^{-4}$
$s_0(\text{cm}/\text{s})$	$4 \times 10^5$	$2 \times 10^5$	$1.8 \times 10^5$	$3.87 \times 10^3$

Πίνακας 4.2: Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές προσαρμοσμένες τιμές.

PMTR χρησιμοποιήθηκε ένα χρυσογενικό σύστημα για να δώσει την δυνατότητα λήψης μετρήσεων στην περιοχή θερμοκρασιών 40 έως 300K [14]. Οι διάφορες πειραματικές σταθερές παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.1. Με σκοπό να εξεταστεί η συνεισφορά πλάσματος και θερμοκρασίας του φωτοθερμικού σήματος ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, λήφθηκαν φωτοθερμικές μετρήσεις σε δυο διαφορετικές συχνότητες διαμόρφωσης: 3 και 100 kHz. Τα πειραματικά αποτελέσματα φαίνονται στην Εικ. 4.12. Η Εικ. 4.12(α) παρουσιάζει πειραματικά δεδομένα και θεωρητική προσαρμογή [με χρήση των Εξισ. (4.1)(4.2) και (4.3)] για το δείγμα χρυσταλλικού πυριτίου *p* τύπου. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν για τις διάφορες ηλεκτρονικές και θερμικές παραμέτρους δίνονται στον Πίνακα 4.2. Σημειώνουμε την ελάττωση του πλάτους του σήματος με την αύξηση της συχνότητας διαμόρφωσης. Η εξάρτηση του σήματος από την συχνότητα επιβεβαιώνει τις θεωρητικές προσομοιώσεις που φαίνονται στην Εικ. 4.8. Για θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 150K, όπου η θερμική συνεισφορά κυριαρχεί, παρατηρούμε μια ελάττωση της συνεισφοράς με την αύξηση



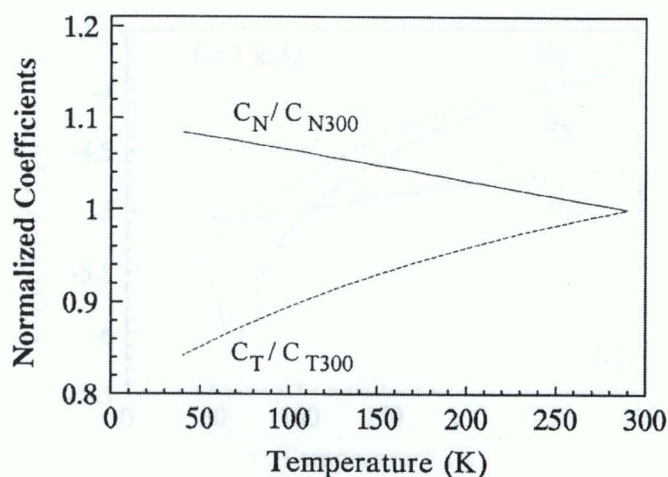
Εικόνα 4.6: Η εξάρτηση του συντελεστή ηλεκτρονικής διάχυσης των φορέων από την θερμοκρασία για το Si, με  $a = 1350$ ,  $b = 480$ ,  $x = -0.3$

της συχνότητας διαμόρφωσης. Ένα άλλο σημαντικό σημείο είναι η ασυμφωνία ανάμεσα στην θεωρία και στα πειραματικά αποτελέσματα σε θερμοκρασίες μικρότερες των  $170K$ , αυτό οφείλεται κυρίως στον ηλεκτρονικό θόρυβο. Η Εικ. 4.12(β) παρουσιάζει πειραματικά και θεωρητικά δεδομένα που λήφθηκαν από ένα δείγμα Si το οποίο έχει υποστεί μεγάλη ζημιά λόγω της μεγάλης δόσης εμφύτευσης  $\Phi = 1 \times 10^{16} (\text{ions}/\text{cm}^2)$ . Παρατηρούμε ότι η συχνότητα διαμόρφωσης επηρεάζει το σήμα με τον ίδιο τρόπο όπως και στο  $p$  τύπου κρυσταλλικό πυρίτιο. Όσον αφορά το επίπεδο του σήματος, το σήμα είναι αρκετά πιο ψηλό λόγω της παρουσίας της αταξίας που προήλθε από την ιοντική εμφύτευση, και πιθανότατα την αύξηση της επιφανειακής ταχύτητας επανασύνδεσης και την δραστική ελάττωση του χρόνου ζωής των φορέων. Η δυσαναλογία όσον αφορά την εξάρτηση από την συχνότητα διαμόρφωσης και η σχετικά σημαντική συνεισφορά της συνιστώσας πλάσματος στις χαμηλές θερμοκρασίες οδήγησε την ομάδα των Vitkin et.al [14] να εργαστούν στην συχνότητα των  $100 \text{ kHz}$ .

Στην Εικ. 4.13 παρουσιάζονται τα πειραματικά αποτελέσματα και οι θεωρητικές προσαρμογές για τα εμφυτευμένα δείγματα: η συμφωνία μεταξύ τους είναι εξαιρετική. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν για τις διάφορες ηλεκτρονικές και θερμικές ιδιότητες παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.2. Όπως αναμενόταν και είχε καταγραφεί αρκετές φορές στο παρελθόν [14, 15, 16], παρατηρείται μια αύξηση του σήματος αυξανόμενης της ζημιάς στο πλέγμα (αταξία μικρού και μεγάλου πεδίου). Σε όλες τις περιπτώσεις το σήμα κυριαρχείται από τη θερμική συνεισφορά για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από  $200K$ .

Όσον αφορά τα σχετικά πλάτη των γραφημάτων που παρουσιάζονται στην Εικ. 4.13 σημειώνουμε πως η συμπεριφορά του φωτοθερμικού σήματος δεν μπορεί να μεταβληθεί από τυχόν φαινόμενα συμβολής. Στην περίπτωση των μικρών δόσεων εμφύτευσης, το εμφυτευμένο στρώμα και το υπόστρωμα έχουν παρόμοιους δείκτες διάθλασης και θερμικές



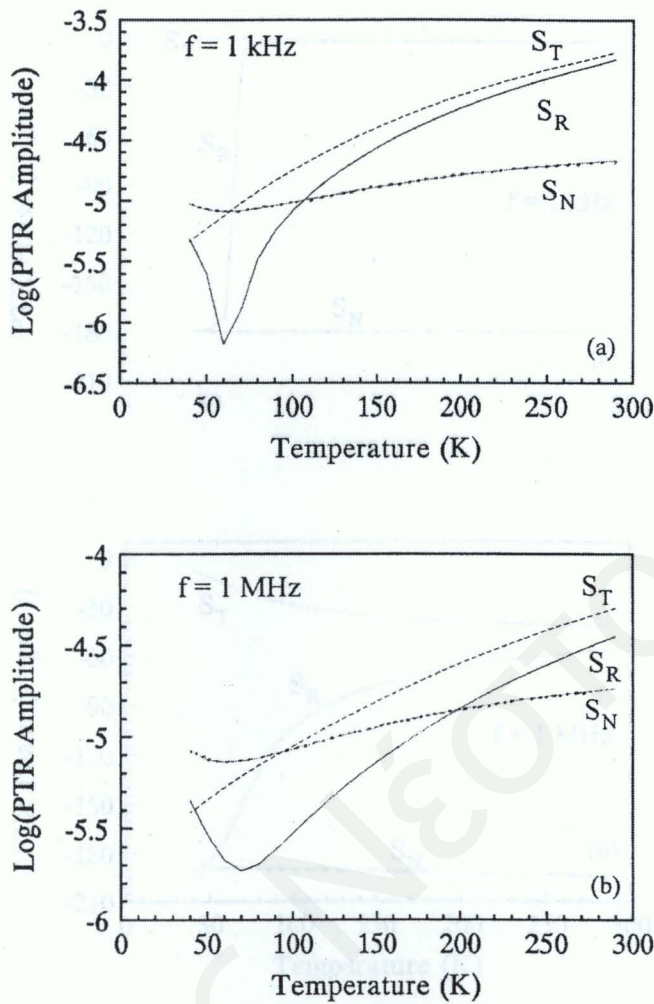


**Εικόνα 4.7:** Οι κανονικοποιημένοι συντελεστές πλάσματος και θερμοκρασίας ως συνάρτηση της θερμοκρασίας.

ιδιότητες, ενώ στην περίπτωση της μεγάλης δόσης δεν παρατηρούμε στο πειραματικό φάσμα κάτι που μπορεί να μοιάζει με συμβολή. Σύμφωνα με το θεωρητικό μοντέλο των Wurm et al. [17] θα έπρεπε να παρατηρούμε φαινόμενα συμβολής σε εμφυτευμένα δείγματα με πάχη μικρότερα από  $0.4 \mu m$ . Πειραματικά δεδομένα από τους ίδιους ερευνητές παρουσιάζουν φαινόμενα συμβολής για δείγματα με εμφυτευμένα στρώματα πάχους μικρότερου από  $0.3 \mu m$ . Επιπλέον, υποστηρίζουν ότι δεν μπορούν να εμφανιστούν φαινόμενα συμβολής σε δείγματα εμφυτευμένα σε ενέργειες μεγαλύτερες από  $125 keV$ , λόγω του φαινομένου της αυτο-άνοπτης της επιφάνειας που δημιουργείται μεταξύ του άμορφου εμφυτευμένου στρώματος και του κρυσταλλικού υποστρώματος. Στη περίπτωση μας η ενέργεια εμφύτευσης ήταν πάνω από  $150 keV$  και το πάχος του δείγματος που εμφυτεύθηκε στην μεγάλη δόση είναι περίπου  $0.53 \mu m$  [18]. Έτσι τυχόν φαινόμενα συμβολής αποκλείονται. Εξάλλου στην περίπτωση μας η παράμετρος που μεταβάλλεται στο πείραμα είναι η θερμοκρασία.

Επομένως αυτό που θα πρέπει να ελέγξουμε είναι κατά πόσον μεταβάλλεται το πάχος του εμφυτευμένου στρώματος στο διάστημα θερμοκρασιών 40 έως 300K. Σύμφωνα με τον *Touloukian* [19], μια τέτοια μεταβολή θερμοκρασίας θα προκαλούσε μια μεταβολή του πάχους λιγότερο από  $7nm$ . Μια τέτοια μεταβολή είναι αρκετά μικρή για να προκαλέσει φαινόμενα συμβολής με την ακτινοβολία ανίχνευσης που χρησιμοποιείται στο πείραμα.

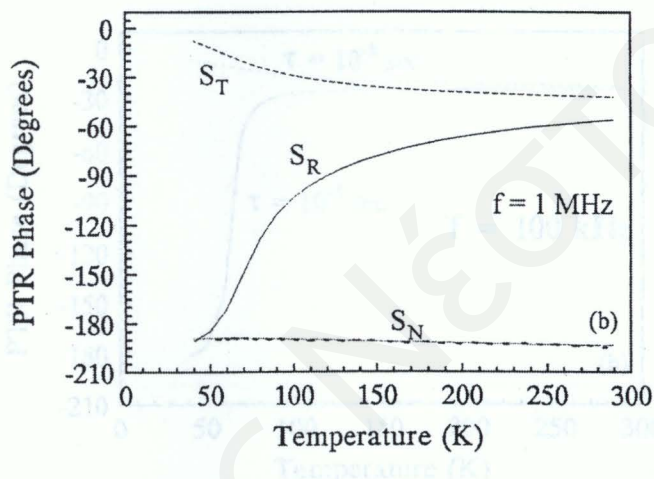
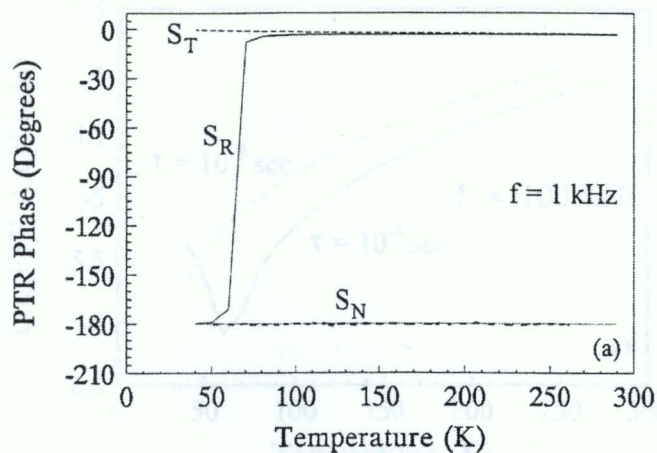
Πολύ σημαντικό είναι το γεγονός πως τα σήματα *PMTR* των εμφυτευμένων δειγμάτων σε δόσεις  $1 \times 10^{12}$  και  $1 \times 10^{14} P^+/cm^2$  έχουν ελάχιστα γύρω στους 120 και 140K αντίστοιχα, ενώ το δείγμα με την μεγάλη δόση εμφύτευσης ( $1 \times 10^{16} P^+/cm^2$ ) παρουσιάζει εντελώς διαφορετική συμπεριφορά. Αυτό το φαινόμενο που επιβεβαιώθηκε από πρόσφατα αποτελέσματα που λήφθηκαν σε θερμοκρασία δωματίου [20], και το οποίο παρατηρείται εδώ για πρώτη φορά στο εμφυτευμένο πυρίτιο, σχετίζεται άμεσα με τον βαθμό καταστροφής του εμφυτευμένου στρώματος. Η θερμική συνεισφορά και η συνεισφορά πλάσματος έχουν διαφορετικές θερμοκρασιακές εξαρτήσεις. Έτσι αναμένουμε ότι οι μετρήσεις θα δείχνουν ένα πέρασμα από την μια συνεισφορά στην άλλη καθώς τα σχετικά πλάτη τους αλλάζουν. Η παρουσία του ελαχίστου δείχνει πως οι δυο αθροιζόμενες συνεισφορές έχουν αντίθετο



**Εικόνα 4.8:** Θεωρητική προσομοίωση του φωτοθερμικού πλάτους ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για δυο τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης :  $f = 1 \text{ kHz}$  και  $f = 1 \text{ MHz}$ .

πρόσθημο (ή αλλιώς οι φάσεις τους διαφέρουν κατά  $180^\circ$ ) [21]. Εισάγοντας το φαινόμενο *Drude* μπορούμε να επιτύχουμε μια εξαιρετική προσαρμογή. Οι Εικ. 4.14(α), (β), και (γ) παρουσιάζουν τα πειραματικά αποτελέσματα και τις θεωρητικές προσαρμογές του φωτοθερμικού σήματος συναρτήσει της θερμοκρασίας καθώς και τις συνεισφορές πλάσματος και θερμοκρασίας. Στις Εικ. 4.14(α) και (β) βλέπουμε καθαρά πως για τα δείγματα που είναι εμφυτευμένα στις δόσεις  $1 \times 10^{12}$  και  $1 \times 10^{14} \text{ P}^+/\text{cm}^2$ , το ελάχιστο παρουσιάζεται στην θερμοκρασία που οι δυο συνεισφορές είναι ίσες κατ' απόλυτη τιμή. Από την άλλη το δείγμα που είναι εμφυτευμένο σε δόση  $1 \times 10^{16} \text{ P}^+/\text{cm}^2$  [βλ Εικ. 4.14(γ)] δεν παρουσιάζει αυτό το ελάχιστο. Ως αποτέλεσμα μπορούμε να συμπεράνουμε πως το φαινόμενο *Drude* δεν λαμβάνει χώρα για το συγκεκριμένο σήμα, σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αυτό μπορεί να εξηγηθεί από το γεγονός ότι η δόση  $1 \times 10^{16} \text{ P}^+/\text{cm}^2$  είναι πάνω από την κρίσιμη τιμή ( $\Phi_c = 5 \times 10^{14} \text{ P}^+/\text{cm}^2$  [22]) που αμορφοποιεί το πυρίτιο και το φαινόμενο *Drude* αναμένεται να είναι αμελητέο στους άμορφους ημιαγωγούς [20]. Για να γίνει κατορθωτή η προσαρμογή πρέπει να υιοθετήσουμε ένα συντελεστή πλάσματος με το ίδιο πρόσθημο με





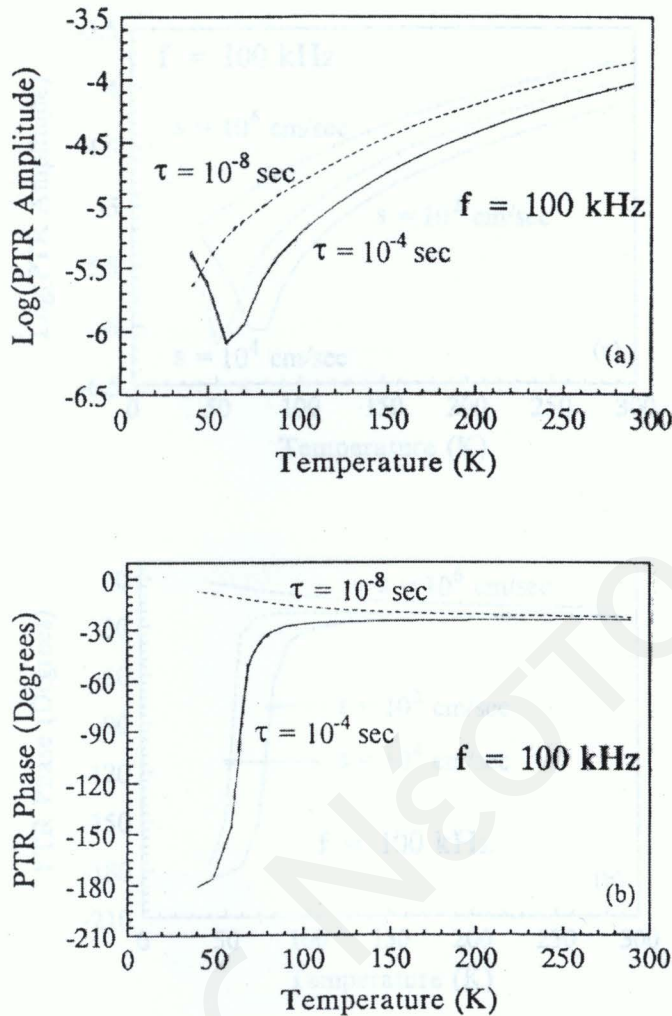
Εικόνα 4.9: Θεωρητική προσομοίωση της φωτοθερμικής φάσης ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για δυο τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης :  $f = 1 \text{ kHz}$  και  $f = 1 \text{ MHz}$ .

αυτό του θερμικού. Από τις Εικ. 4.14(α)-(γ) μπορεί κανείς να συμπεράνει τα εξής [17]:

1. τα δείγματα που είναι εμφυτευμένα σε μικρή δόση παρουσιάζουν συνεισφορές (θερμική και πλάσματος) με αντίθετο πρόσημο, γεγονός που οδηγεί σε ελάχιστα στο σήμα
2. τα δείγματα που είναι εμφυτευμένα σε μεγάλες δόσεις κυριαρχούνται, όπως αναμενόταν, από την θερμική συνεισφορά.

Αν σε οποιαδήποτε περίπτωση υπάρχει επιπρόσθετη συνεισφορά (άλλος μηχανισμός), αυτός πρέπει να έχει το ίδιο πρόσημο.

Τώρα θα εξετάσουμε τις τιμές των διαφόρων παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν στις θεωρητικές προσαρμογές. Ο Πίνακας 4.2 παρουσιάζει οπτικές, θερμικές και ηλεκτρονικές παραμέτρους που είναι αποτελέσματα της προσαρμογής. Είναι σημαντικό να σημειώσουμε πως η μεταβολή αυτών των παραμέτρων με την αύξηση της καταστροφής λόγω της εμφύτευσης (αυξανόμενη δόση εμφύτευσης) είναι συνεπής με την μεταβολή των θερμικών

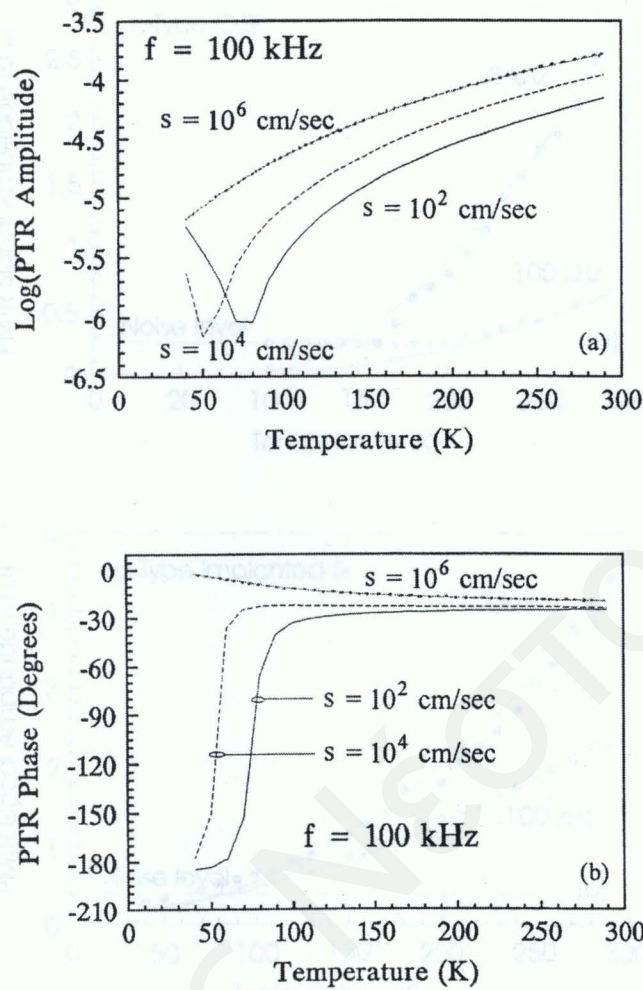


Εικόνα 4.10: Η επίδραση του χρόνου ζωής των φορέων  $\tau$ , στο φωθοθερμικό: (a) πλάτος και (b) φάση, για συχνότητα διαμόρφωσης  $f = 100 \text{ kHz}$ .

και οπτοηλεκτρονικών παραμέτρων. Ο Πίνακας 4.3 παρουσιάζει τις πιο πάνω ιδιότητες στους  $300 \text{ K}$  για όλα τα εξεταζόμενα δείγματα. Παρατηρούμε πως καθώς αναμενόταν, στη περίπτωση του δείγματος  $p$  τύπου (δόση  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) χρυσταλλικού πυριτίου, ο χρόνος ζωής  $\tau$  είναι ίσος με  $770 \mu\text{s}$  [1,6], μια τιμή πολύ κοντά σε αυτή που παρουσιάζεται στην βιβλιογραφία [23]. Επίσης όπως αναμενόταν, ο χρόνος ζωής των φορέων ελαττώνεται καθώς ο βαθμός καταστροφής του χρυσταλλικού πλέγματος μεγαλώνει, επομένως καθώς η δόση εμφύτευσης αυξάνει. Παρόμοια σχόλια μπορούν να γίνουν επίσης για την επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης.

Ο Πίνακας 4.2 παρουσιάζει επίσης τους συντελεστές  $C_N$  και  $C_T$ . Ο  $C_T$  είναι σε καλή συμφωνία με την βιβλιογραφία και είναι της τάξης του  $10^{-4}$  [4, 24]. Από την άλλη, καθώς αναφέρθηκε και προηγουμένως για τον συντελεστή  $C_N$ , το πρόσημο αλλάζει στην περίπτωση αλλαγής από χρυσταλλικό σε άμορφο υλικό. Επισημαίνουμε πως ο συντελεστής θερμικής διάχυσης ελαττώνεται κατά μια τάξη μεγέθους από τη χρυσταλλική στην άμορφη φάση (από  $1.38$  σε  $0.14 \text{ cm}^2/\text{s}$ ) που είναι σε καλή συμφωνία με τις τιμές που βρίσκει κανείς



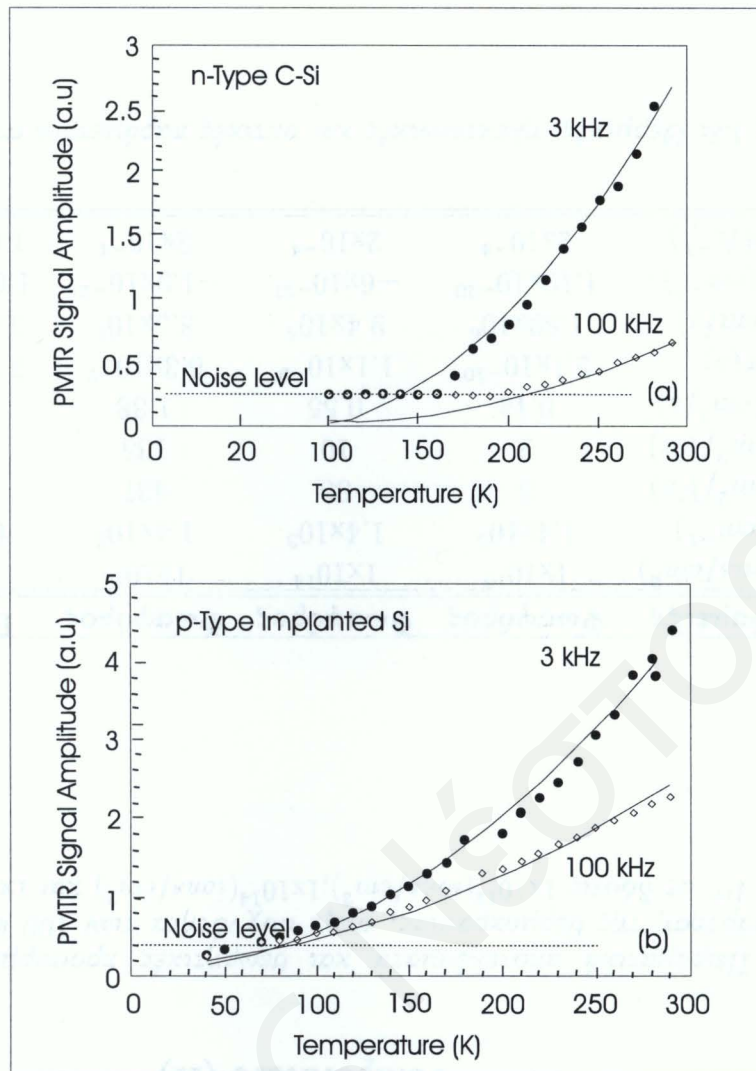


Εικόνα 4.11: Η επίδραση της ταχύτητας επανασύνδεσης,  $s$ , στο φωτοθερμικό: (a) πλάτος και (b) φάση ( $f = 100$  kHz).

στην βιβλιογραφία [19].

#### 4.4 Συμπεράσματα

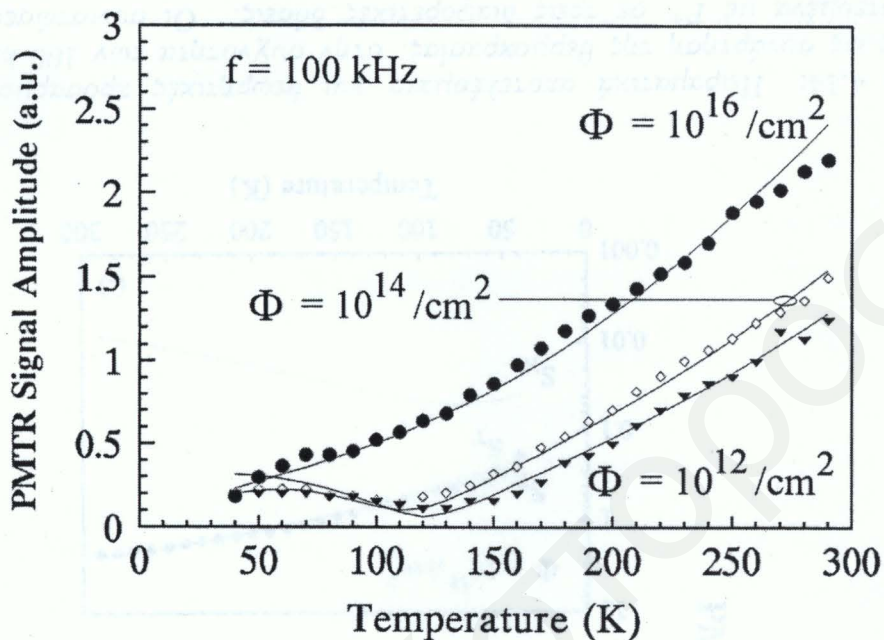
Συμπερασματικά η μέθοδος *PMTR* είναι μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα μη καταστροφική τεχνική για την μελέτη οπτοηλεκτρονικών παραμέτρων σε ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών. Έχουμε δει καθαρά ότι η συνεισφορά των ελεύθερων φορέων στο σήμα *PMTR* γίνεται πιο σημαντική καθώς η θερμοκρασία ελαττώνεται. Επιπλέον έχουμε δείξει ότι η φύση της συνεισφοράς αλλάζει όταν το εμφυτευμένο στρώμα αμορφοποιείται. Ο φυσικός μηχανισμός αλλάζει από *Drude* σε αυτόν της πλήρωσης ζώνης. Για πρώτη φορά έχουν εκτιμηθεί ποσοτικά με φωτοθερμική μέθοδο τιμές του χρόνου ζωής και της ταχύτητας επανασύνδεσης ως συνάρτηση της θερμοκρασίας. Η εξάρτηση των συντελεστών πλάσματος και θερμοκρασίας από τη θερμοκρασία φάνηκε να είναι πολύ σημαντική. Ένα άλλο συμπέρασμα είναι



**Εικόνα 4.12:** Πειραματικά αποτελέσματα και θεωρητικές προσαρμογές του *PMTR* πλάτους ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, στην συχνότητα των  $100\text{ kHz}$  για: (α) το δείγμα *Si* τύπου *p* και (β) το δείγμα *Si* εμφυτευμένο με  $P^+$  και δόση  $\Phi = 1 \times 10^{16}(\text{ions}/\text{cm}^2)$ .

πως εργαζόμενοι σε χαμηλές θερμοκρασίες μπορούμε να διαχωρίσουμε την συνεισφορά πλάσματος από την θερμική ακόμα και σε μικρές συχνότητες διαμόρφωσης. Επίσης το σήμα *PMTR* αυξάνει με την αύξηση της πλεγματικής ζημιάς.

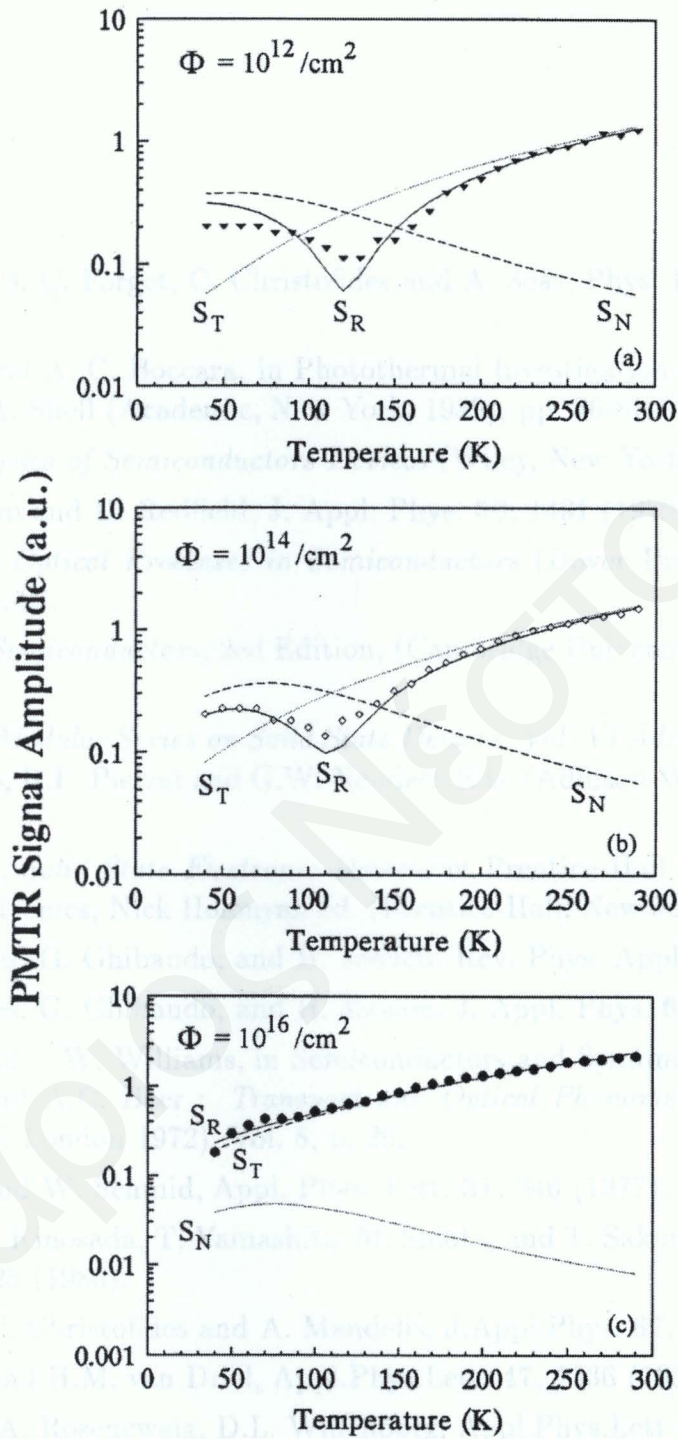




Εικόνα 4.13: Πειραματικά αποτελέσματα και θεωρητικές προσαρμογές του PMTR πλάτους ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, στην συχνότητα των 100 kHz για δείγμα Si εμφυτευμένο με P<sup>+</sup> σε δόσεις  $1 \times 10^{12}$  (ions/cm<sup>2</sup>),  $1 \times 10^{14}$  (ions/cm<sup>2</sup>) και  $1 \times 10^{16}$  (ions/cm<sup>2</sup>).

Πρόσμελιξη	Φωσφόρος	Φωσφόρος	Φωσφόρος	Βόρον
$\Phi_1$ (ions/cm <sup>2</sup> )	$1 \times 10^{16}$	$1 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{12}$	–
$\alpha$ (cm <sup>-1</sup> )	$1.4 \times 10^5$	$1.4 \times 10^3$	$1.4 \times 10^3$	$6 \times 10^3$
$\mu_e$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	5	30	437	1435
$\mu_h$ (cm <sup>2</sup> /Vs)	2	10	135	489
$D_T$ (cm <sup>2</sup> /s)	0.14	0.55	1.38	1.38
$\tau$ (s)	$2.1 \times 10^{-10}$	$1.1 \times 10^{-9}$	$6.3 \times 10^{-7}$	$7.7 \times 10^{-4}$
$s$ (cm/s)	$1.89 \times 10^6$	$9.4 \times 10^5$	$8.5 \times 10^5$	$3.87 \times 10^3$
$C_N$ (cm <sup>-3</sup> )	$1.19 \times 10^{-20}$	$-6 \times 10^{-21}$	$-1.9 \times 10^{-21}$	$1.6 \times 10^{-22}$
$C_T$ (K <sup>-1</sup> )	$2 \times 10^{-4}$	$2 \times 10^{-4}$	$2 \times 10^{-4}$	$1.8 \times 10^{-4}$

Πίνακας 4.3: Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές παράμετροι στους 300 K.



**Εικόνα 4.14:** Πειραματικά αποτελέσματα και θεωρητικές προσαρμογές του PMTR πλάτους ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, στην συχνότητα των 100 kHz για δείγματα Si εμφυτευμένα με  $P^+$  σε τρεις διαφορετικές δόσεις. Οι συνιστώσες πλάσματος και θερμοκρασίας φαίνονται ξεχωριστά.



## Βιβλιογραφία

- [1] M. Nestoros, B. C. Forget, C. Christofides and A. Seas, Phys. Rev. B **51**, 14 115-14 123, (1995).
- [2] D. Fournier and A. C. Boccara, in Photothermal Investigation of Solids and Fluids, edited by J. A. Shell (Academic, New York, 1989), pp. 36-81.
- [3] S.M. Sze, *Physics of Semiconductors Devices* (Wiley, New York 1965).
- [4] H.A. Weakliem and D. Redfield, J. Appl. Phys. **50**, 1491 (1979).
- [5] J.I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors* (Dover Publications, Inc. New York, 1971) p. 27.
- [6] R.A. Smith, *Semiconductors*, 2ed Edition, (Cambridge University, Cambridge, 1978) p.321.
- [7] R.F. Pierret, *Modular Series on Solid State Devices, Vol. VI Advanced Semiconductor Fundamentals*, R.F. Pierret and G.W. Neudeck Eds. (Addison-Wesley, Reading 1987) pp.188-192.
- [8] B. Streetman, *Solid State Electronic Devices* in Prentice Hall Series In Solid State Physical Electronics, Nick Holonyak ed. (Prentice-Hall, New Jersey 1980) p. 87.
- [9] C. Christofides, G. Ghibaudo, and H. Jaouen, Rev. Phys. Appl. **22**, 407 (1987).
- [10] C. Christofides, G. Ghibaudo, and H. Jaouen, J. Appl. Phys. **65**, 4840 (1989).
- [11] H.B. Bebb and E.W. Williams, in Semiconductors and Semimetals, Edited by R.K. Willardson and A.C. Beer : *Transport and Optical Phenomena*, Academic Press, New York and London 1972). Vol. 8, p. 262.
- [12] J. Dziejwior and W. Schmid, Appl. Phys. Lett. **31**, 346 (1977).
- [13] T. Tomita, T. Kinosada, T. Yamashita, M. Shiota, and T. Sakurai, Japanese J. Appl. Phys. **25**, L925 (1986).
- [14] I.A. Vitkin, C. Christofides and A. Mandelis, J.Appl.Phys. **67**, 2815 (1990).
- [15] D. Guidotti and H.M. van Driel, Appl.Phys.Lett. **47**, 1336 (1985).
- [16] W.L. Smith, A. Rosencwaig, D.L. Willenborg, Appl.Phys.Lett **47**, 584 (1985).
- [17] S. Wurm, P. Alpern, D. Savignac, and R. Kakoschke, Appl. Phys. A **47**, 147 (1988).
- [18] A. Othonos, C. Christofides, J.B. Said, and M. Bisson, J. Appl. Phys. **75**, 8032 (1994).
- [19] Y.S. Touloukian, P.W. Powell, C.Y. Ho and M.C. Nicolaou, *Thermophysical Properties of Matter*, Vol.10 (IFI/Plenum, New York, Washington, 1973) p. 160.

- [20] R.E. Wagner, *Quantitative Photomodulated- Reflectance Studies of Silicon and Germanium Semiconductors*, Ph.D. Thesis, University of Toronto (1993).
- [21] D. Fournier and B.C. Forget, *J. de Phys. IV*, **6**, 241 (1991).
- [22] S. Prussin, D. Margolese, and R. Tauber, *J. Appl. Phys.* **57**, 180 (1985).
- [23] H.H. Li, *J. Chem. Ref. Data* **9**, 561 (1980).
- [24] L. Huld, N.G. Nilsson, and K.G. Svantesson, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 776 (1979).

Ένα διατρωματικό μοντέλο για την περιγραφή του φωτοθερμικού ραδιομετρικού σήματος από εμφυτευμένο ημιαγωγό.

### 5.1 Η ανάγκη εισαγωγής ενός διατρωματικού μοντέλου.

Η διαδοκία της οπτικής εμφύτεσης ενός ημιαγωγού, όπως αναφέρεται στην αλλαγή των οπτοηλεκτρονικών και θερμικών ιδιοτήτων του, είναι η αιτία που εστιάστηκε στην παρούσα εργασία. Η περιοχή αυτή καθορίζεται από την οπτική διαπερατότητα του ημιαγωγού, τον χρόνο ζωής των φορέων, και τον ατομικό αριθμό των ατόμων του στόχου. Το βάθος διείσδυσης του φωτός στο ημιαγωγό που χρησιμοποιείται είναι πολύ μικρό κατά συνέπεια, και ο ατομικός αριθμός του είναι μικρότερος από 100. Η μετατόπιση των ατόμων του στόχου από τις θέσεις τους έχει ως αποτέλεσμα την απομόρφωση των φωτεινών και θερμικών δυνάμεων που η δράση εμφυτεύεται παράγει την κρίσιμη τιμή, η οποία στην παρούσα περίπτωση τα ιόντα, αρνητικά και οι θερμοί και οπτικοηλεκτρονικοί φορείς της αλληλεξέλιξης δραστηριοποιούνται με αυτή του ημιαγωγού. Η συγκεκριμένη αυτή κατάσταση λειτουργεί ως μια καλά καθορισμένη επιφανειακή περιοχή της εμφυτευμένης και της περιβάλλουσας. Η επιφάνεια αυτή είναι ένα πολύ σημαντικό μέρος στην διάδοση των θερμοηλεκτρονικών φορέων και των οπτικοηλεκτρονικών πλάσματος από την μια περιοχή στην άλλη, καθώς και στην διάδοση των φορέων μέσα στο υλικό. Από τον κανόνα ή θεωρία που αφορά με ένα υλικό που αποτελείται από μια περιοχή που η άλλη στην οποία η ταχύτερη διάδοση του φωτός γίνεται στην μεταξύ τους διαχωριστική επιφάνεια.

Μέχρι τώρα κατά τη χρησιμοποιούμενη οπτική θέρμανση τον εμφυτευμένο ημιαγωγό σαν μια ελαστική περιοχή και επιπλέον λάβοντας υπόψη τους οπτικοηλεκτρονικούς μόνο την θερμική αντιστάση ή μόνο την οπτικοηλεκτρονική κλάση, ανάλογα με την επίδραση της ακτινοβολίας (φωτός). Παρόλο που η αντανάκλαση των φωτοηλεκτρονικών ηλεκτρονικών φορέων μπορεί να παραγάγει το PTR στην σε αρκετές περιπτώσεις (για σε εμφυτευμένο ημιαγωγό) με μεγάλη ακρίβεια, η θερμική αντιστάση γίνεται εξαιρετικά σημαντικό στη περίπτωση των εμφυτευμένων ημιαγωγών, όπου η δραστηριότητα μέτρηση των φορέων (φωτός) αυξάνεται την μετατόπιση της οπτικοηλεκτρονικών ενόσθενος σε θερμική. Έτσι την χαρακτηριστική του διατρωματικού μοντέλου επιδόσεων όσο πάντα τον οπτικοηλεκτρονικό



## Κεφάλαιο 5

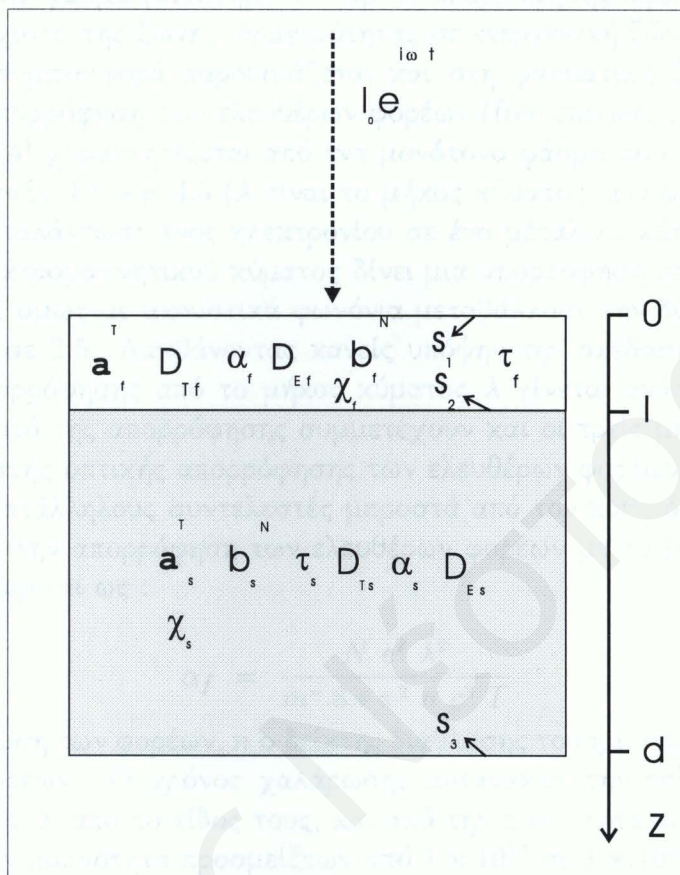
### Ένα διστρωματικό μοντέλο για την περιγραφή του φωθοθερμικού ραδιομετρικού σήματος, από εμφυτευμένο ημιαγωγό.

#### 5.1 Η ανάγκη εισαγωγής ενός διστρωματικού μοντέλου.

Η διαδικασία της ιοντικής εμφύτευσης ενός ημιαγωγού έχει ως αποτέλεσμα την αλλαγή των οπτο-ηλεκτρονικών και θερμικών ιδιοτήτων του, σε μια περιοχή κοντά στην επιφάνεια του. Η περιοχή αυτή καθορίζεται κυρίως από την ενέργεια των ιόντων που βομβαρδίζουν την επιφάνεια του ημιαγωγού, τον ατομικό τους αριθμό και τον ατομικό αριθμό των ατόμων του στόχου. Το βάθος διείσδυσης των ιόντων σε δισχία ημιαγωγών που χρησιμοποιούνται σε τεχνολογικές κατασκευές κυμαίνεται από μερικές εκατοντάδες Å μέχρι και μερικά μm. Η μετατόπιση των ατόμων του στόχου από τις πλεγματικές τους θέσεις έχει ως αποτέλεσμα την τροποποίηση των φυσικών του ιδιοτήτων. Στη περίπτωση που η δόση εμφύτευσης ξεπεράσει την κρίσιμη τιμή, η περιοχή στην οποία κατανέμονται τα ιόντα, αμορφοποιείται και οι θερμικές και οπτοηλεκτρονικές ιδιότητες της αλλάζουν δραστικά σε σχέση με αυτές του υπόλοιπου ημιαγωγού. Στην τελευταία αυτή περίπτωση δημιουργείται μια καλά καθορισμένη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ της εμφυτευμένης και μη περιοχής. Η επιφάνεια αυτή παίζει ένα πολύ σημαντικό ρόλο στην διάδοση των δημιουργούμενων θερμικών κυμάτων και κυμάτων πλάσματος από την μια περιοχή στην άλλη, καθώς και στη διάδοση της ακτινοβολίας μέσα στο υλικό. Από την κυματική θεωρία γνωρίζουμε ότι ένα κύμα καθώς διαδίδεται από μια περιοχή σε μια άλλη στην οποία η ταχύτητα διάδοσης του διαφέρει, ανακλάται στην μεταξύ τους διαχωριστική επιφάνεια.

Μέχρι πρόσφατα τα χρησιμοποιούμενα μοντέλα θεωρούσαν τον εμφυτευμένο ημιαγωγό σαν μια ενιαία περιοχή και επιπλέον λάμβαναν υπόψη τους στους υπολογισμούς μόνο την θερμική συνεισφορά ή μόνο την συνεισφορά πλάσματος, ανάλογα με την εκτίμηση της πλεγματικής ζημιάς. Παρόλο που η συνεισφορά των φωτοδιεγερμένων ηλεκτρικών φορέων μπορεί να περιγράψει το PTR σήμα σε αρκετές περιπτώσεις (π.χ σε ενδογενείς ημιαγωγούς) με μεγάλη ακρίβεια, η θερμική συνεισφορά γίνεται εξαιρετικά σημαντική στη περίπτωση των άμορφων ημιαγωγών, όπου η δραματική μείωση του χρόνου ζωής των φορέων υποβοηθά την μετατροπή της οπτικά αποθηκευμένης ενέργειας σε θερμική. Με την χρησιμοποίηση του διστρωματικού μοντέλου επιδιώκουμε όπως πάντα τον υπολογισμό

των οπτοηλεκτρονικών και θερμικών ιδιοτήτων του επιφανειακού στρώματος και του υποστρώματος. Στο τέλος θα εξετάσουμε την ευαισθησία του σήματος PTR όσον αφορά την ύπαρξη λεπτών άμορφων στρωμάτων σε χυσταλλικό υπόστρωμα.



**Εικόνα 5.1:** Μονοδιάστατη θερμική και ηλεκτρονική διάχυση στο διστρωματικό μοντέλο ημιαγωγού, όπου οι δείκτες f και s αναφέρονται στο επάνω και κάτω στρώμα αντίστοιχα.

## 5.2 Φυσικό μοντέλο

Για να απλοποιήσουμε το πρόβλημα θεωρούμε μονοδιάστατη διάδοση, του θερμικού κύματος και του κύματος πλάσματος, κατά την διεύθυνση πρόσπτωσης της ακτινοβολίας διέγερσης που είναι ο άξονας z, (βλ. Εικ. 5.1). Το επιφανειακό στρώμα έχει πάχος l ενώ το υπόστρωμα d-l. Γενικεύοντας το μοντέλο ενός στρώματος μπορούμε να γράψουμε το φωτοθερμικό σήμα ως: ένα άθροισμα [1] των συνεισφορών των δυο στρωμάτων του δείγματος:

$$S_{PTR} = a_f^T \int_0^l \Delta T_f(z, \alpha_{vis}, \omega) dz + b_f^N \int_0^l \Delta N_f(z, \omega, \lambda) dz + a_s^T \int_l^d \Delta T_s(z, \alpha_{vis}, \omega) dz + b_s^N \int_l^d \Delta N_s(z, \omega, \lambda) dz \quad (5.1)$$



Ο λόγος  $a^T/b^N$  είναι ανάλογος της ποσότητας  $a_{IR}^0 \times \mu_N$ , όπου  $a_{IR}^0$  ο συντελεστής υπέρυθρης απορρόφησης και  $\mu_N$  η ευκίνησια των φορέων μειοψηφίας. Ο πιο πάνω λόγος εξαρτάται ισχυρά από την πυκνότητα εμπλουτισμού του δείγματος [2, 3]. Ιδιαίτερα στο διάστημα  $1 - 5\mu m$  το ύψος της ζώνης απορρόφησης είναι ανάλογο της συγκέντρωσης των φορέων. Το πιο πάνω φάσμα (διάστημα  $1 - 5\mu m$ ) απορρόφησης οφείλεται στην διέγερση φορέων από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας σε ενεργειακή ζώνη μεγαλύτερης ενέργειας. Παρόμοια συμπεριφορά παρουσιάζεται και στη φασματική ζώνη  $5 - 12\mu m$  που συνδέεται με την απορρόφηση των ελευθέρων φορέων (free carriers). Η απορρόφηση των ελευθέρων φορέων [4] χαρακτηρίζεται από ένα μονότονο φάσμα που αυξάνει σαν  $\lambda^p$  όπου το  $p$  κυμαίνεται μεταξύ 1.5 και 3.5 ( $\lambda$  είναι το μήκος κύματος των φωτονίων). Η θεωρία του Drude για την ταλάντωση ενός ηλεκτρονίου σε ένα μέταλλο, κάτω από την επίδραση ενός αρμονικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος δίνει μια απορρόφηση που μεταβάλλεται σαν  $\lambda^2$ . Οι συγχρούσεις όμως με ακουστικά φωνόνια μεταβάλλουν την δύναμη του εκθέτη σε 1.5, ενώ με οπτικά σε 2.5. Λαμβάνοντας κανείς υπόψη την σχέδαση με τις προσμείξεις η εξάρτηση της απορρόφησης από το μήκος κύματος  $\lambda$  γίνεται ανάλογος του  $\lambda^3$  ή  $\lambda^{3.5}$ . Γενικά στο είδος αυτό της απορρόφησης συμμετέχουν και οι τρεις μηχανισμοί και έτσι ο συνολικός συντελεστής οπτικής απορρόφησης των ελευθέρων φορέων  $\alpha_f$  γράφεται ως ένα άθροισμα τους με κατάλληλους συντελεστές μπροστά από τον κάθε όρο.

Προσεγγίζοντας την απορρόφηση των ελευθέρων φορέων με το μοντέλο του Drude ο συντελεστής  $\alpha_f$  γράφεται ως :

$$\alpha_f = \frac{N e^2 \lambda^2}{m^* 8 \pi^2 n c^3 T} \quad (5.2)$$

όπου  $N$  η συγκέντρωση των φορέων,  $n$  ο δείκτης διάθλασης του ημιαγωγού, και  $T$  ο χρόνος χαλάρωσης των φορέων. Ο χρόνος χαλάρωσης ανταναχλά την επίδραση των κέντρων σχέδασης και εξαρτάται από το είδος τους, και από την πυκνότητα τους.

Μια αύξηση στην πυκνότητα προσμείξεων από  $1 \times 10^{14}$  σε  $1 \times 10^{20} cm^{-3}$  οδηγεί σε μια αύξηση τεσσάρων τάξεων μεγέθους στη ποσότητα  $a_{IR}^0$  ενώ η μείωση της ευκίνησιας των φορέων  $\mu_N$ , στο ίδιο διάστημα είναι μόνο μια τάξη μεγέθους [5]. Στην Εικ. 5.2 έχουμε τον συντελεστή απορρόφησης στο υπέρυθρο για δείγματα Si εμφυτευμένα με διάφορες δόσεις ιόντων.

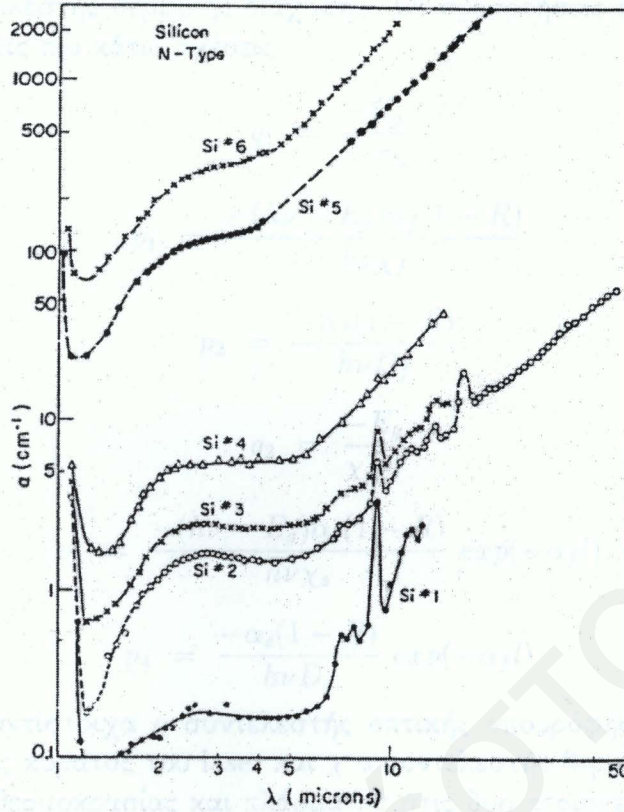
Για την εύρεση των πεδίων θερμοκρασίας και πλάσματος στα δυο στρώματα του υλικού, θα πρέπει να επιλυθούν οι εξισώσεις διάχυσης της θερμότητας και του φωτοδιεγερμένου πλάσματος σε κάθε στρώμα. Οι εξισώσεις διάχυσης της θερμότητας και των φορέων στο επάνω στρώμα είναι:

$$\frac{d^2 \Delta T_f(z)}{dz^2} - \sigma_f^2 \Delta T_f(z) = q_1 \Delta N_f(z) + p_1 \exp(-\alpha_f z) \quad (5.3)$$

$$\frac{d^2 \Delta N_f(z)}{dz^2} - u_f^2 \Delta N_f(z) = p_2 \exp(-\alpha_f z) \quad (5.4)$$

ενώ για το χρυσταλλικό υπόστρωμα:

$$\frac{d^2 \Delta T_s(z)}{dz^2} - \sigma_s^2 \Delta T_s(z) = q_2 \Delta N_s(z) + p_3 \exp[-\alpha_s(z-l)] \quad (5.5)$$



Εικόνα 5.2: Το υπέρυθρο φάσμα απορρόφησης του Si, σε θερμοκρασία δωματίου, για μια σειρά δειγμάτων με πυκνότητες προσμείξεων από  $1.4 \times 10^{16} - 1.0 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  (Si\*1 - Si\*6).

$$\frac{d^2 \Delta N_s(z)}{dz^2} - u_s^2 \Delta N_s(z) = p_4 \exp[-\alpha_s(z-l)] \quad (5.6)$$

Εδώ  $u_f$  και  $u_s$  είναι οι κυματαριθμοί του κύματος πλάσματος στα δυο στρώματα, που δίνονται από τις σχέσεις,

$$u_f = \sqrt{\frac{1 + i\omega\tau_f}{D_f\tau_f}} \quad (5.7)$$

$$u_s = \sqrt{\frac{1 + i\omega\tau_s}{D_s\tau_s}} \quad (5.8)$$

όπου  $\tau$  είναι ο χρόνος ζωής των ηλεκτρικών φορέων, και  $D$  ο συντελεστής αμφιπολικής ηλεκτρονικής διάχυσης. Τα θερμικά κυματανύσματα στις δυο περιοχές δίνονται από τις πιο κάτω σχέσεις :

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{i\omega}{\beta_f}} \quad (5.9)$$

$$\sigma_s = \sqrt{\frac{i\omega}{\beta_s}} \quad (5.10)$$



όπου  $\beta$  είναι ο συντελεστής θερμικής διάχυσης. Οι συναρτήσεις πηγής  $q_1, q_2, p_1, p_2, p_3,$  και  $p_4$  δίνονται από τις πιο κάτω σχέσεις:

$$q_1 = \frac{-E_g}{\chi_f \tau_f} \quad (5.11)$$

$$p_1 = \frac{-(h\nu - E_g)\alpha_f(1 - R)}{h\nu\chi_f} \quad (5.12)$$

$$p_2 = \frac{-\alpha_f(1 - R)}{h\nu D_f} \quad (5.13)$$

$$q_2 = \frac{-E_g}{\chi_s \tau_s} \quad (5.14)$$

$$p_3 = \frac{-(h\nu - E_g)\alpha_s(1 - R)}{h\nu\chi_s} \exp(-\alpha_f l) \quad (5.15)$$

$$p_4 = \frac{-\alpha_s(1 - R)}{h\nu D_s} \exp(-\alpha_f l) \quad (5.16)$$

ενώ  $\alpha$  και  $R$  είναι αντίστοιχα ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης και ο συντελεστής ανάκλασης στο μήκος κύματος του laser και  $\chi$  ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας. Οι λύσεις για τα πεδία θερμοκρασίας και πλάσματος στις δυο περιοχές είναι:

$$\Delta T_f(z) = \delta \exp(-\sigma_f z) + \epsilon \exp(\sigma_f z) + \zeta \exp(-\alpha_f z) + \eta \exp(-u_f z) + \theta \exp(-u_f z) \quad (5.17)$$

$$\Delta N_f(z) = A \exp(u_f z) + B \exp(-u_f z) + G \exp(-\alpha_f z) \quad (5.18)$$

$$\Delta T_s(z) = t \exp[-\sigma_s(z - l)] + r \exp[\sigma_s(z - l)] + V \exp[-\alpha_f(z - l)] + W \exp[-u_s(z - l)] + X \exp[u_s(z - l)] \quad (5.19)$$

$$\Delta N_s(z) = y \exp[-u_s(z - l)] + \phi \exp[u_s(z - l)] + Y \exp[-\alpha_s(z - l)] \quad (5.20)$$

Θεωρώντας τον αέρα που περιβάλλει το δείγμα ως εντελώς θερμικά μονωτικό, οι ακόλουθες συνοριακές συνθήκες και συνθήκες συνέχειας για τους φωτοδιεγερμένους φορείς και την θερμοκρασία, στην επιφάνεια ( $z=0$ ), την διαχωριστική επιφάνεια ( $z=l$ ), και την πίσω επιφάνεια ( $z=d$ ), θα δώσουν ένα γραμμικό αλγεβρικό σύστημα εξισώσεων από το οποίο θα προκύψουν οι συντελεστές των πεδίων της θερμοκρασίας και των φωτοδιεγερμένων φορέων που παρουσιάζονται στις Εξ. 5.17-5.20.

$$-\chi_f \frac{d\Delta T_f(0)}{dz} = s_1 E_g \Delta N_f(0) \quad (5.21)$$

$$\Delta T_f(l) = \Delta T_s(l) \quad (5.22)$$

$$\chi_f \frac{d\Delta T_f(l)}{dz} = \chi_s \frac{d\Delta T_s(l)}{dz} + s_2 E_g \Delta N_f(l) \quad (5.23)$$

$$\chi_s \frac{d\Delta T_s(d)}{dz} = s_3 E_g \Delta N_s(d) \quad (5.24)$$

$$D_f \frac{d\Delta N_f(0)}{dz} = s_1 \Delta N_f(0) \quad (5.25)$$

$$\Delta N_f(l) = \Delta N_s(l) \quad (5.26)$$

$$D_f \frac{d\Delta N_f(l)}{dz} = D_s \frac{d\Delta N_s(l)}{dz} - s_2 \Delta N_f(l) \quad (5.27)$$

$$D_s \frac{d\Delta N_s(d)}{dz} = s_3 \Delta N_s(d) \quad (5.28)$$

Επίσης μια ομάδα από γραμμικές εξισώσεις για τους συντελεστές  $\zeta, \eta, \theta, G, V, W, X, Y$  μπορεί να βρεθεί εύκολα καθώς οι πιο πάνω συντελεστές ανήκουν στις ειδικές λύσεις των Εξ. 5.17-5.20:

$$G = \frac{p_2}{\alpha_f^2 - u_f^2} \quad (5.29)$$

$$Y = \frac{p_4}{\alpha_s^2 - u_s^2} \quad (5.30)$$

$$\zeta = \frac{q_1 G + p_1}{\alpha_f^2 - u_f^2} \quad (5.31)$$

$$\eta = \frac{q_1 A}{u_f^2 - \sigma_f^2} \quad (5.32)$$

$$\theta = \frac{q_1 B}{u_f^2 - \sigma_f^2} \quad (5.33)$$

$$V = \frac{q_2 Y + p_3}{\alpha_s^2 - u_s^2} \quad (5.34)$$

$$W = \frac{q_2 y}{u_s^2 - \sigma_s^2} \quad (5.35)$$

$$X = \frac{q_2 \phi}{u_s^2 - \sigma_s^2} \quad (5.36)$$

Υποθέτουμε πως το ενεργειακό χάσμα είναι το ίδιο για τα δυο στρώματα και  $s_1, s_2, s_3$  είναι οι ταχύτητες επανασύνδεσης στην πάνω επιφάνεια, στην διαχωριστική επιφάνεια και στην πίσω επιφάνεια αντίστοιχα. Η ομάδα των αλγεβρικών εξισώσεων που προκύπτει από τις συνοριακές συνθήκες και τις συμπληρωματικές λύσεις μπορεί να γραφεί σε μορφή πινάκων

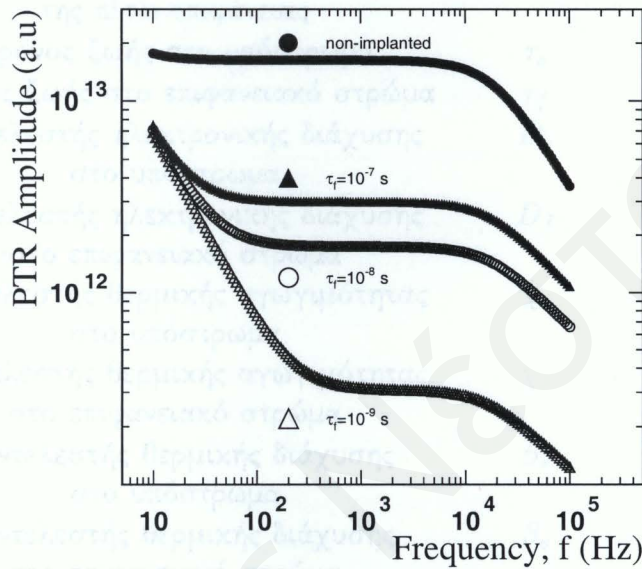
$$[M] \cdot [S] = [Q] \quad (5.37)$$



όπου  $[S]$  είναι ένας μονοδιάστατος πίνακας που περιλαμβάνει τους συντελεστές  $\delta, \epsilon, \zeta, \eta, \theta, A, B, G, t, r, V, W, X, \phi, y, Y$  που χρειάζονται για να γράψουμε την λύση του προβλήματος. Η λύση της εξίσωσης πινάκων που είναι:

$$[S] = [M]^{-1} \cdot [Q] \quad (5.38)$$

βρέθηκε με την χρήση μιας υπορουτίνας αντιστροφής σε γλώσσα Fortran.



Εικόνα 5.3: Η εξάρτηση του PTR πλάτους από τον χρόνο ζωής των φορέων στο επιφανειακό στρώμα: (πεδίο συχνοτήτων).

### 5.3 Παραμετρική διερεύνηση

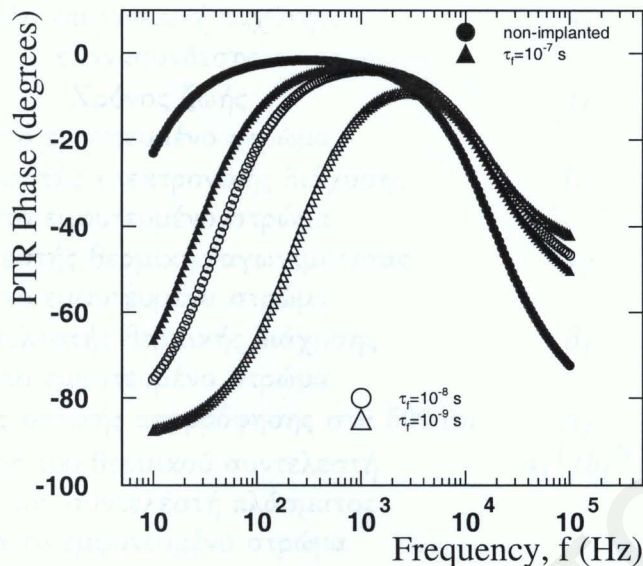
Σ' αυτό το τμήμα της εργασίας θα επιχειρήσουμε μια διερεύνηση της επιρροής των φυσικών παραμέτρων του επιφανειακού στρώματος, στο φωτοθερμικό σήμα.

Οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν στις προσομοιώσεις που ακολουθούν τόσο για το επιφανειακό στρώμα όσο και για το υπόστρωμα παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.1. Το πάχος του επιφανειακού στρώματος είναι  $1\mu\text{m}$ , μια τυπική τιμή για ένα εμφυτευμένο ημιαγωγό. Ο συντελεστής πλάσματος του λεπτού επιφανειακού στρώματος  $b_f^N$  στην περίπτωση μιας ισχυρής δόσης εμπλουτισμού ( $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ) αυξάνεται κατά ένα συντελεστή 50 λόγω της μείωσης της ευκινησίας [6]. Στην πραγματικότητα η αλλαγή αυτή είναι ανεπαίσθητη όσον αφορά το φωτοθερμικό σήμα, κάτι που φάνηκε και από την προσομοίωση.

Ιδιότητα του υλικού	Σύμβολο	Τιμή
Ενεργειακό χάσμα	$E_g$	$1.8 \times 10^{-19} \text{ J}$
Επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_1$	$10 \text{ m/s}$
Ενδο-επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_2$	$10 \text{ m/s}$
Ταχύτητα επανασύνδεσης της πίσω επιφάνειας	$s_3$	$5 \text{ m/s}$
Χρόνος ζωής στο υπόστρωμα	$\tau_s$	$5 \times 10^{-5} \text{ s}$
Χρόνος ζωής στο επιφανειακό στρώμα	$\tau_f$	$5 \times 10^{-7} \text{ s}$
Συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης στο υπόστρωμα	$D_s$	$20 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης στο επιφανειακό στρώμα	$D_f$	$5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας στο υπόστρωμα	$\chi_s$	$150 \text{ W}/(\text{mK})$
Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας στο επιφανειακό στρώμα	$\chi_f$	$50 \text{ W}/(\text{mK})$
Συντελεστής θερμικής διάχυσης στο υπόστρωμα	$\beta_s$	$1 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής θερμικής διάχυσης στο επιφανειακό στρώμα	$\beta_s$	$5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής οπτικής απορρόφησης στο υπόστρωμα	$\alpha_s$	$3 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$
Συντελεστής οπτικής απορρόφησης στο επιφανειακό στρώμα	$\alpha_f$	$3 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$
Λόγος του θερμικού συντελεστή προς τον συντελεστή πλάσματος για το επιφανειακό στρώμα	$a_f^T/b_f^N$	$5 \times 10^{22} \text{ m}^{-3} \text{ K}^{-1}$
Λόγος του θερμικού συντελεστή προς τον συντελεστή πλάσματος για το υπόστρωμα	$a_s^T/b_s^N$	$5 \times 10^{21} \text{ m}^{-3} \text{ K}^{-1}$
Πάχος του δείγματος	$d$	$5.5 \times 10^{-4} \text{ m}$
Πάχος του επιφανειακού στρώματος	$l$	$1 \times 10^{-6} \text{ m}$

Πίνακας 5.1: Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές προσαρμοσμένες τιμές.





Εικόνα 5.4: Η εξάρτηση της PTR φάσης από τον χρόνο ζωής των φορέων στο επιφανειακό στρώμα: (πεδίο συχνοτήτων).

### 5.3.1 Η επίδραση του χρόνου ζωής των φορέων στο επιφανειακό στρώμα

Στην Εικ. 5.3 μπορεί να δει κανείς πως καθώς ο χρόνος ζωής  $\tau_f$  ελαττώνεται, το πλάτος του σήματος ελαττώνεται επίσης. Ακόμα στην περιοχή μικρών συχνοτήτων  $10 - 100\text{Hz}$ , όπου  $\omega \times \tau_f \ll 1$ , η θερμική συνεισφορά είναι η πιο σημαντική.

Ο λόγος  $a^T/b^N$  είναι αρκετά μεγάλος έτσι ώστε να δίνει μια μικρή θερμική συνεισφορά ακόμα και στην περίπτωση των μεγάλων χρόνων ζωής ( $\tau_f = 5 \times 10^{-5}\text{s}$ ). Στην Εικ. 5.4 όπου παρουσιάζεται η φάση του PTR σήματος, μπορεί να διακρίνει κανείς πως ακόμα και στις χαμηλές συχνότητες υπάρχει μια σημαντική διαφορά φάσης, που φανερώνει την ύπαρξη μιας ισχυρής θερμικής συνιστώσας που υπερिशύει της συνεισφοράς του πλάσματος καθώς ελαττώνεται ο χρόνος ζωής. Η θερμική συνεισφορά επηρεάζει με εμφανή τρόπο το σήμα ακόμα και σε υψηλότερες συχνότητες, κρατώντας την διαφορά φάσης μακριά από την τιμή  $0^\circ$  (περίπτωση  $\tau_f = 5 \times 10^{-5}\text{s}$ ).

### 5.3.2 Η επίδραση της ταχύτητας επανασύνδεσης (επιφανειακή και ενδοεπιφανειακή).

Η αύξηση της τιμής της ταχύτητας επανασύνδεσης στην επιφάνεια ( $s_1$ ), ελαττώνει την συγκέντρωση των φωτοεπαγόμενων φορέων υποβοηθώντας έτσι την θερμική εκπομπή ακτινοβολίας. Η συμπεριφορά του σήματος PTR σε σχέση με την ταχύτητα επανασύνδεσης, όπως φαίνεται στις Εικ. 5.5 και 5.6 είναι όμοια με αυτή του χρόνου ζωής. Η αύξηση της ταχύτητας επανασύνδεσης οδηγεί σε μείωση του πλάτους του σήματος και ενίσχυση της θερμικής συνιστώσας, με την "θερμική ουρά" να κάνει εντονότερη την παρουσία της σε ολόένα και μεγαλύτερο διάστημα συχνοτήτων. Στην περίπτωση που  $s_1 = 10^4\text{m/s}$



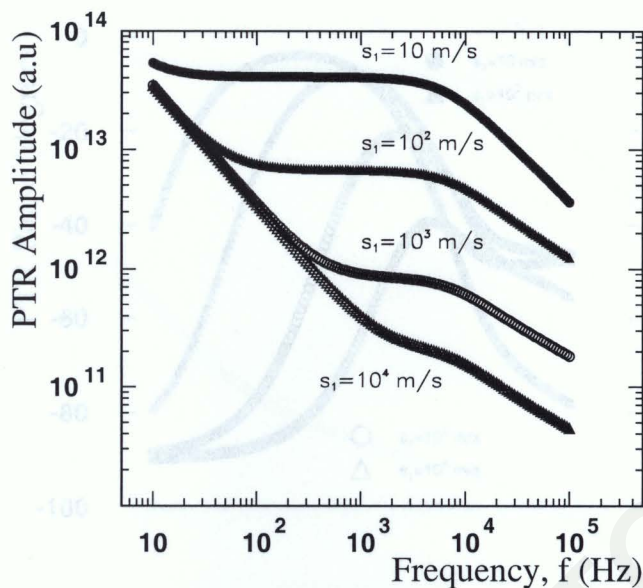
Ιδιότητα του υλικού	Σύμβολο	Τιμή
Επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_1$	$1000m/s$
Ενδο-επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_2$	$100m/s$
Χρόνος ζωής στο εμφυτευμένο στρώμα	$\tau_f$	$5 \times 10^{-11}s$
Συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης στο εμφυτευμένο στρώμα	$D_f$	$1 \times 10^{-4}m^2/s$
Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας στο εμφυτευμένο στρώμα	$\chi_f$	$10W/(mK)$
Συντελεστής θερμικής διάχυσης στο εμφυτευμένο στρώμα	$\beta_f$	$1 \times 10^{-5}m^2/s$
Συντελεστής οπτικής απορρόφησης στα $500nm$	$\alpha_f$	$3 \times 10^6m^{-1}$
Λόγος του θερμικού συντελεστή προς τον συντελεστή πλάσματος για το εμφυτευμένο στρώμα	$a_f^T/b_f^N$	$1 \times 10^{23}m^{-3}K^{-1}$
Πάχος του επιφανειακού στρώματος	$l$	$1 \times 10^{-6}m$

**Πίνακας 5.2:** Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές παράμετροι του άμορφου, λόγω ιοντικής εμφύτευσης, επιφανειακού στρώματος.

η θερμική συνιστώσα επικρατεί μέχρι και την συχνότητα των  $10MHz$  (Εικ. 5.5). Η φάση του σήματος γίνεται ολοένα και πιο μικρή με την αύξηση της  $s_1$  και πλησιάζει την τιμή  $-90^\circ$  για μικρές τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης. Με την αύξηση της  $f$  η φάση αυξάνει καθώς η συνιστώσα πλάσματος κάνει εμφανή την παρουσία της. Για την μικρή τιμή της ταχύτητας επανασύνδεσης  $s_1 = 10m/s$  παρατηρούμε πως η φάση για μεγάλες τιμές της  $f$  τείνει στην τιμή  $-90^\circ$ , ένδειξη επικράτησης της συνεισφοράς των ελευθέρων φορέων. Στην περίπτωση των μεγάλων τιμών της ταχύτητας επανασύνδεσης  $s_1 = 10^3m/s$  και  $s_1 = 10^4m/s$  η φάση στην περιοχή συχνοτήτων  $f > 10^4Hz$  σταθεροποιείται στην τιμή των  $-45^\circ$ . Επίσης η κλίση της καμπύλης του σήματος στην περιοχή των μεγάλων συχνοτήτων όπου υπερσχύει η ηλεκτρονική συνεισφορά, γίνεται λιγότερο απότομη με την αύξηση της  $s_1$ .

Ένα ενδιαφέρον χαρακτηριστικό των γραφημάτων της φάσης είναι η μετακίνηση του τοπικού μεγίστου προς μεγαλύτερες τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης, καθώς η ταχύτητα επανασύνδεσης αυξάνεται (το ίδιο παρατηρείται και με την ελάττωση του χρόνου ζωής). Το μέγιστο αυτό, χαρακτηρίζει την μετάβαση από την περιοχή κυριαρχίας της θερμικής συνεισφοράς σε αυτή της συνεισφοράς πλάσματος. Μια αυξημένη τιμή της ταχύτητας επανασύνδεσης λόγω της ζημιάς που επιφέρει η ιοντική εμφύτευση στην επιφάνεια, ελαττώνει την πυκνότητα των φωτοεπαγόμενων φορέων, αυξάνει τον ρυθμό παραγωγής θερμικής ενέργειας και οδηγεί στην επικράτηση της θερμικής συνιστώσας. Οι ενεργειακές καταστάσεις της διαχωριστικής επιφάνειας μεταξύ του επιφανειακού στρώματος και του υποστρώματος λειτουργούν ως κέντρα επανασύνδεσης των ηλεκτρικών φορέων. Η συμπεριφορά του σήματος *PTR* σε σχέση με την αλλαγή στην ταχύτητα επανασύνδεσης  $s_2$





**Εικόνα 5.5:** Η εξάρτηση του PTR πλάτους από τον ταχύτητα επανασύνδεσης  $s_1$  των φορέων στο επιφανειακό στρώμα: (πεδίο συχνοτήτων).

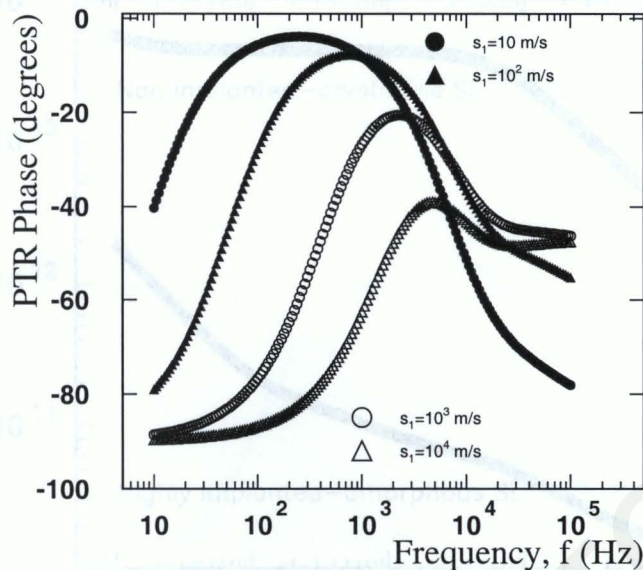
της διαχωριστικής επιφάνειας, είναι παρόμοια με αυτήν της  $s_1$  μια και οι δυο επιφάνειες βρίσκονται πολύ κοντά (1 nm) σε σχέση με την απόσταση που διανύουν οι φορείς προτού επανασυνδεθούν ( $L = (D_f \tau_f)^{1/2} = 16 \mu\text{m}$ ).

### 5.3.3 Η επίδραση του συντελεστή οπτικής απορρόφησης $\alpha_f$ και του συντελεστή αμφιπολικής ηλεκτρονικής διάχυσης $D_f$ .

Ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης του επιφανειακού στρώματος δεν φαίνεται να επηρεάζει σημαντικά το φωτοθερμικό σήμα. Αυτό είναι αναμενόμενο εφόσον το επιφανειακό στρώμα είναι αρκετά λεπτό και η προσπίπτουσα ακτινοβολία απορροφάται κυρίως από το υπόστρωμα. Ο συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης στο διάστημα τιμών που αφήσαμε να μεταβάλλεται, δεν επηρεάζει το σήμα. Ο λόγος είναι πως η ταχύτητα επανασύνδεσης της επιφάνειας και της διαχωριστικής επιφάνειας είναι πια αρκετά μεγάλες για να προκαλούν την επανασύνδεση των φορέων με πολύ γρήγορο ρυθμό, τόσο γρήγορο που δεν προλαμβάνουν να κινηθούν αρκετά μακριά από το σημείο δημιουργίας τους.

### 5.3.4 Σύγκριση του PTR σήματος που δίνει ένα κρυσταλλικό και ένα εντελώς άμορφο δισκίο ημιαγωγού

Το πλάτος του σήματος [Εικ. 5.7] και η φάση του [Εικ. 5.8] παρουσιάζονται για ένα μη εμφυτευμένο κρυσταλλικό δείγμα πυριτίου και ένα βαριά εμφυτευμένο (που η επιφάνεια του έχει καταστεί άμορφη). Οι τιμές των οπτοηλεκτρονικών και θερμοφυσικών ιδιοτήτων του εμφυτευμένου στρώματος παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.2, ενώ αυτές του υποστρώματος του εμφυτευμένου και του μη εμφυτευμένου δείγματος στον Πίνακα 5.3 (είναι οι ίδιες μια



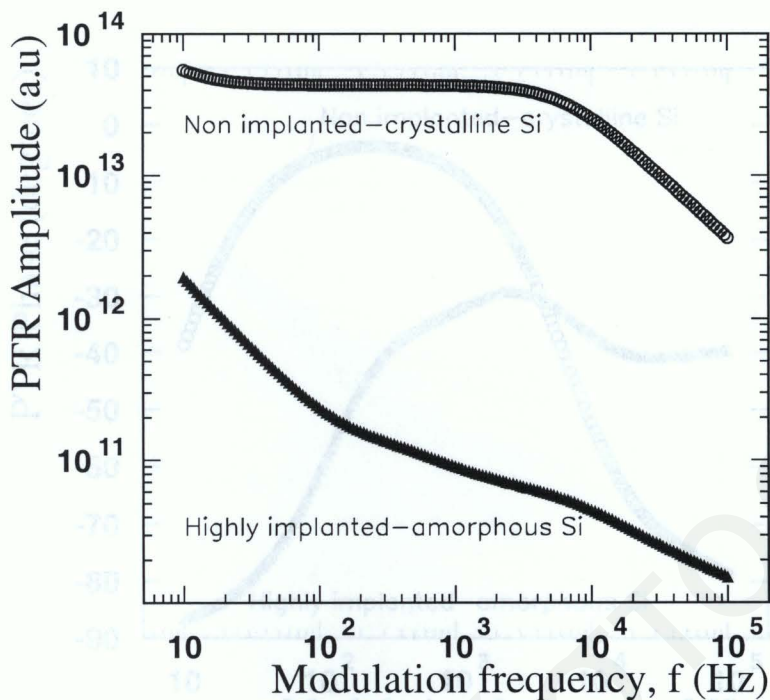
**Εικόνα 5.6:** Η εξάρτηση της PTR φάσης από την ταχύτητα επανασύνδεσης των φορέων  $s_1$  στο επιφανειακό στρώμα: (πεδίο συχνοτήτων).

και το υλικό είναι το ίδιο). Ο μικρός χρόνος ζωής του φωτοεπαγόμενου πλάσματος στο εμφυτευμένο στρώμα, και οι υψηλές τιμές των ταχυτήτων επανασύνδεσης  $s_1$  και  $s_2$  καθώς και του συντελεστή  $a_f^T$  (εφόσον το λεπτό στρώμα γίνεται αδιαφανές στο υπέρυθρο, λόγω της μεγάλης δόσης εμφύτευσης), έχουν ως αποτέλεσμα την εξολοκλήρου επιπρόσθετη της θερμικής συνιστώσας στην περίπτωση του βαριά εμφυτευμένου ημιαγωγού.

Σε μια πρόσφατη δουλειά τους οι Salnick et al. [7] εφάρμοσαν την μέθοδο *PTR* για να εξετάσουν μια σειρά από δείγματα πυριτίου εμφυτευμένα με ιόντα φωσφόρου  $P^+$  σε διάφορες δόσεις και ενέργειες εμφύτευσης (βλ. Εικ. 5.9). Η συμπεριφορά των πειραματικών δεδομένων στην Εικ. 5.9 μπορεί να συγκριθεί με αυτή των Εικ. 5.3-5.6. Για παράδειγμα μπορεί κανείς να συγκρίνει ποιοτικά και ποσοτικά την αλλαγή στο πλάτος του σήματος *PTR* και στη φάση της Εικ. 5.3 και της Εικ. 5.4. Στην περίπτωση της φάσης μπορεί να δει κανείς την καλή ποσοτική συμφωνία. Οι πειραματικές και θεωρητικές φάσεις μεταβάλλονται μεταξύ των τιμών  $-10^\circ$  και  $-85^\circ$ .

Στην Εικ. 5.10 έχουμε το φωτοθερμικό σήμα ως συνάρτηση του πάχους του άμορφου επιφανειακού στρώματος Si που βρίσκεται σε χυσταλλικό υπόστρωμα του ίδιου υλικού [8]. Το πάχος του υποστρώματος έχει την τιμή  $1\text{mm}$ , έτσι ώστε να είναι ηλεκτρονικά παχύ σε όλο το εύρος συχνοτήτων διαμόρφωσης και θερμικά παχύ για συχνότητες διαμόρφωσης μεγαλύτερες των  $50\text{Hz}$ . Σε όλο το φάσμα των συχνοτήτων διαμόρφωσης ισχύει η ανισότητα  $\omega\tau_f \ll 1$  και το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης είναι  $3.2 \times 10^{-7}\text{m}$  στο άμορφο στρώμα. Το αρχικό πάχος του υποστρώματος είναι  $1 \times 10^{-8}\text{m}$  και άρα είναι ηλεκτρονικά λεπτό. Με την αύξηση του πάχους του άμορφου στρώματος φαίνεται μια οριακή αύξηση του πλάτους του σήματος μέχρι που το πάχος του να συμπέσει με το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης  $\mu_E$ .



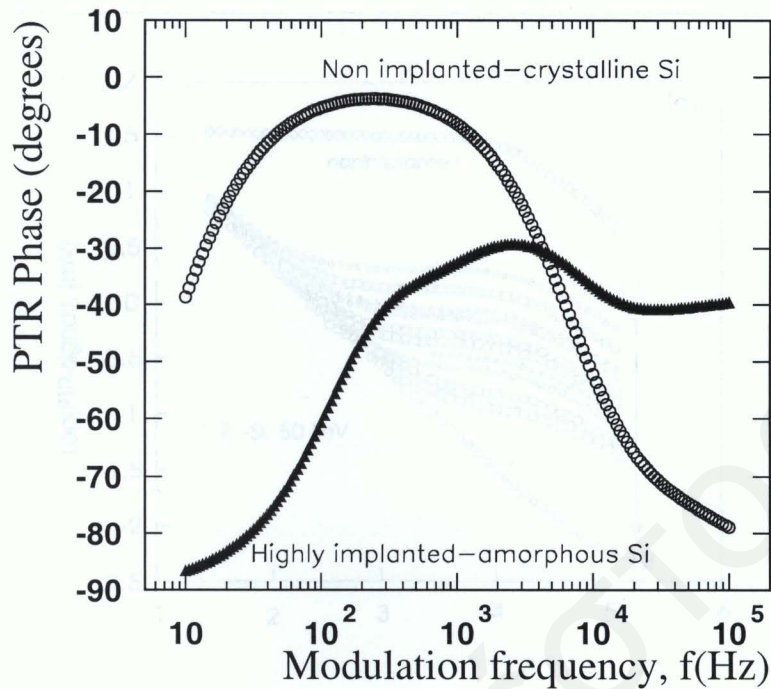


Εικόνα 5.7: Το πλάτος του σήματος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης, στην περίπτωση ενός κρυσταλλικού δισκίου Si και ενός εμφυτευμένου, με δόση που έχει ξεπεράσει την κρίσιμη τιμή.

Μετά από αυτό το σημείο το πλάτος PTR ελαττώνεται επειδή [9] η συνεισφορά του λεπτού φιλμ φτάνει στον κόρο (συνεισφέρει ένα πάχος της τάξης του  $\mu E$ ) και επειδή ολοένα και λιγότερη εκπεμπόμενη IR ακτινοβολία που προέρχεται από το υπόστρωμα καταφέρνει να περάσει μέσα από το άμορφο στρώμα καθώς το πάχος του αυξάνει.

Εύρος-επίστροφο-ακτινική επανα-απόδοση	$\rho$	$10 \text{ g/cm}^3$
Ταχύτητα του φωτός της πλάσας	$c$	$3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$
Απόσταση από την πηγή ζέσης	$r$	$1 \times 10^{-2} \text{ cm}$
Απόσταση από το επιφανειακό στρώμα	$z$	$5 \times 10^{-3} \text{ cm}$
Απόσταση από ηλεκτρονικές διόδους	$D$	$20 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$
Απόσταση θερμικής αγωγιμότητας	$\chi$	$10 \text{ W/(cmK)}$
Απόσταση θερμικής διάχυσης	$\theta$	$1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$
Απόσταση οπτικής διασποράς στο υλικό	$\alpha$	$3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$
Διάφορα είδη θερμικής αντανάκλαση προς την συντελεστή	$\epsilon^2/\nu^2$	$5 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{K}^{-2}$
Απόσταση από την πηγή ζέσης	$l$	$5.5 \times 10^{-3} \text{ cm}$

Πίνακας 5.3: Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές παράμετροι για τη μη εμφυτευμένη, κρυσταλλική δίσκου Si. Οι τιμές πάνω περιλαμβάνουν (από αριστερά προς δεξιά) και τα χαρακτηριστικά εύρους και για το υπόστρωμα του εμφυτευμένου στρώματος.

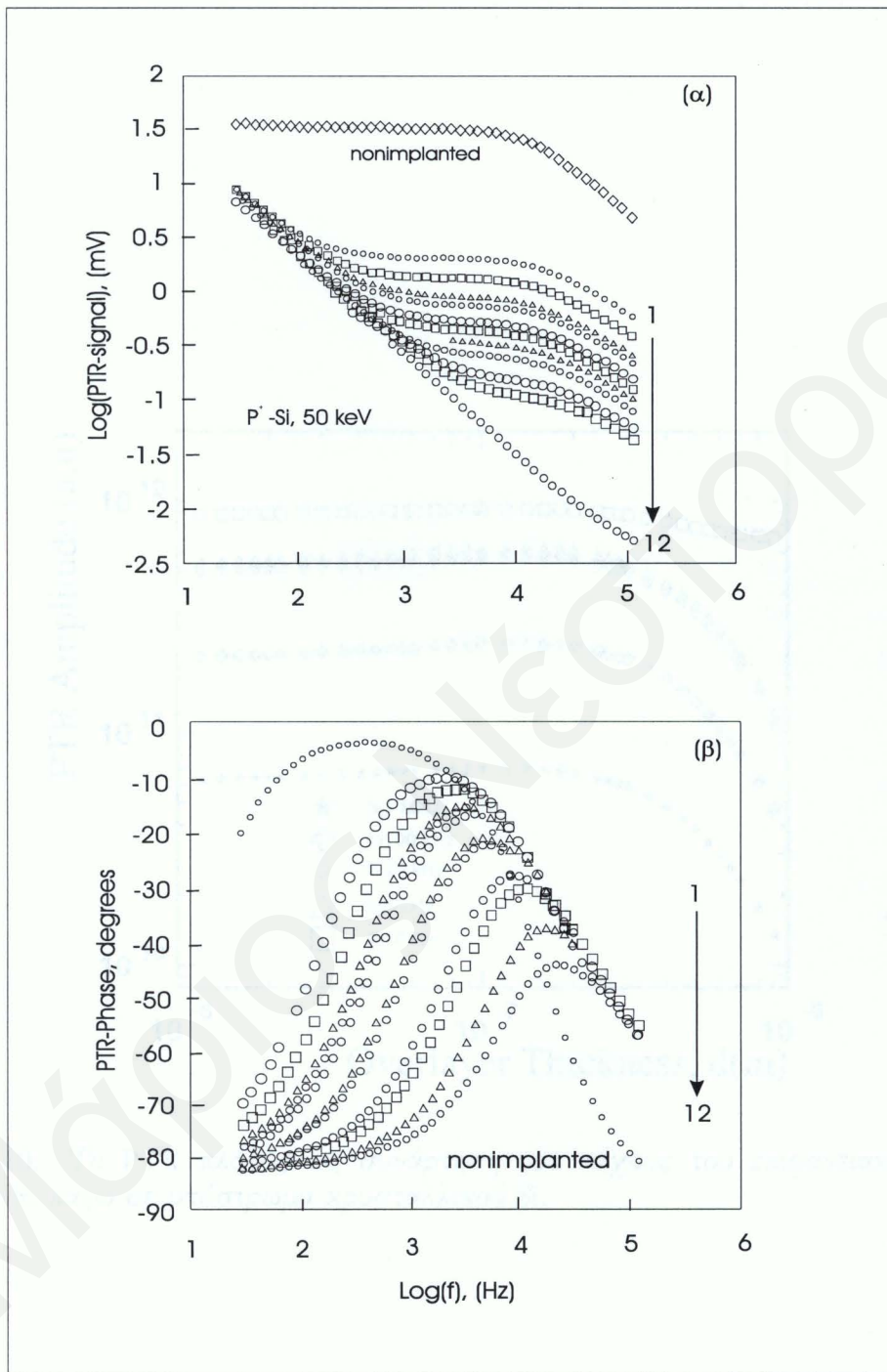


Εικόνα 5.8: Η φάση του σήματος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης, στην περίπτωση ενός χρυσταλλικού δισκίου Si και ενός εμφυτευμένου, με δόση που έχει ξεπεράσει την κρίσιμη τιμή.

Ιδιότητα του υλικού	Σύμβολο	Τιμή
Ενεργειακό χάσμα	$E_g$	$1.8 \times 10^{-19} \text{ J}$
Επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_1$	$10 \text{ m/s}$
Ενδο-επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης	$s_2$	$0 \text{ m/s}$
Ταχύτητα επανασύνδεσης της πίσω επιφάνειας	$s_3$	$10 \text{ m/s}$
Χρόνος ζωής	$\tau$	$5 \times 10^{-5} \text{ s}$
Χρόνος ζωής στο επιφανειακό στρώμα	$\tau_f$	$5 \times 10^{-7} \text{ s}$
Συντελεστής ηλεκτρονικής διάχυσης	$D$	$20 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας	$\chi$	$150 \text{ W}/(\text{mK})$
Συντελεστής θερμικής διάχυσης	$\beta$	$1 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Συντελεστής οπτικής απορρόφησης στα $500 \text{ nm}$	$\alpha$	$3 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$
Λόγος του θερμικού συντελεστή προς τον συντελεστή πλάσματος	$a^T/b^N$	$5 \times 10^{21} \text{ m}^2/\text{K}^{-1}$
Πάχος του δείγματος	$l$	$5.5 \times 10^{-4} \text{ m}$

Πίνακας 5.3: Θερμικές, ηλεκτρονικές και οπτικές παράμετροι για το μη εμφυτευμένο, χρυσταλλικό δείγμα Si. Οι πιο πάνω παράμετροι (εκτός από τις  $s_1$  και  $s_2$ ) χρησιμοποιούνται επίσης και για το υπόστρωμα του εμφυτευμένου στρώματος.

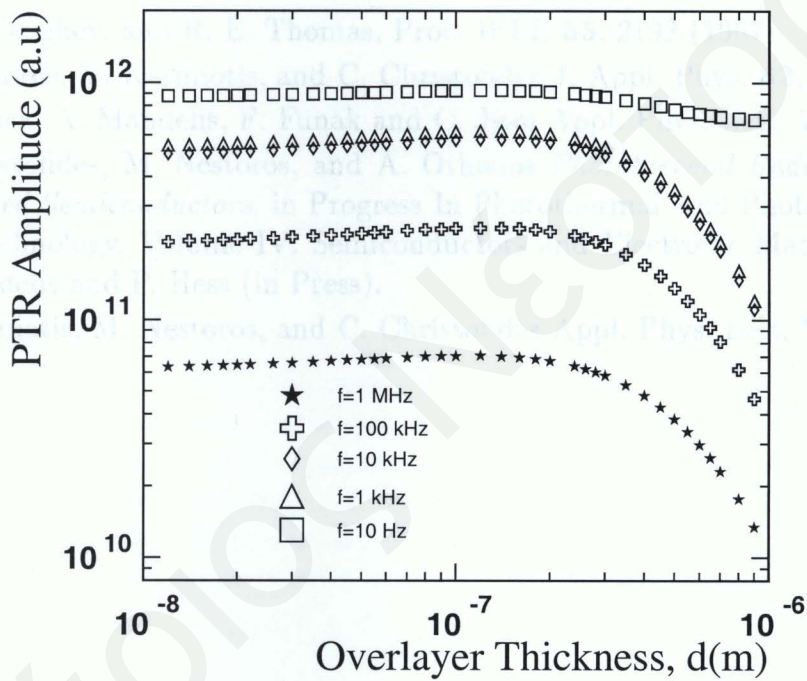




**Εικόνα 5.9:** Πειραματικό PTR πλάτος (a) και φάση (b) ως συνάρτηση της συχνότητας, για μή εμφυτευμένο δείγμα αναφοράς Si και για δείγματα Si εμφυτευμένα με ιόντα P<sup>+</sup>, σε ενέργεια 50keV και για διάφορες τιμές της δόσης εμφύτευσης:  $5 \times 10^{10}$  έως  $1 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>.

Βιβλιογραφία

[1] J. Salbeck, D. Jena, A. Mandel, *Surf. Sci.* **31**, 691 (1971).  
 [2] W. Schottky and H. Y. Fan, *Phys. Rev.* **102**, 208 (1957).  
 [3] M. Balkanski, A. Arifin, and E. Anzures, *Phys. Stat. Sol.* **31**, 373 (1979).  
 [4] J. Pantsev, *Optical Processes in Semiconductors* (Plenum, New York, 1987), pp. 191-205.  
 [5] D. M. Miller, R. C. Thomas, *Prog. Surf. Sci.* **33**, 219 (1980).  
 [6] M. Yeh, *Surf. Sci.* **100**, 159 (1981).  
 [7] A. S. Lee, *Surf. Sci.* **71**, 157 (1978).  
 [8] C. Chi, M. Yeh, and A. G. Ostrowski, *Thin Solid Films*, in press.  
 [9] J. Y. Kim, M. Yeh, and C. Chi, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 693 (1997).



Εικόνα 5.10: Το PTR πλάτος ως συνάρτηση του πάχους του επιφανειακού άμορφου στρώματος Si πάνω σε υπόστρωμα κρυσταλλικού Si.



## Βιβλιογραφία

- [1] A. Salnick, C. Jean, A. Mandelis Sol. State El. **41**, 591 (1997).
- [2] W. Spitzer and H. Y. Fan, Phys. Rev. **108**, 268 (1957).
- [3] M. Balkanski, A. Aziza, and E. Amzallag, Phys. Stat. Sol. **31**, 323 (1969).
- [4] J.I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors, (Dover, New York, 1971) pp.74-75.
- [5] D. M. Caughey, and R. E. Thomas, Proc. IEEE **55**, 2192 (1967).
- [6] M. Nestoros, Y. Karmiotis, and C. Christofides J. Appl. Phys. **82**, 6220 (1997).
- [7] A. Salnick, A. Mandelis, F. Funak and C. Jean Appl. Phys. Lett. **71**, 1531 (1997).
- [8] C. Christofides, M. Nestoros, and A. Othonos *Photothermal Radiometric Study of Implanted Semiconductors*, in Progress In Photothermal And Photoacoustic Science And Technology, Volume IV: Semiconductors and Electronic Materials, Edited by A. Mandelis and P. Hess (in Press).
- [9] Y. Karmiotis, M. Nestoros, and C. Christofides Appl. Phys. Lett. **72**, 695 (1997).

## Κεφάλαιο 6

### Σύζευξη θερμοηλεκτρονικών κυμάτων σε ημιαγωγούς στην περιοχή των υψηλών θερμοκρασιών.

#### 6.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετηθούν οι συζευγμένες γραμμικές εξισώσεις διάχυσης της θερμότητας και των φωτοεπαγόμενων φορέων, σε ένα ημιάπειρο ημιαγωγό πυριτίου κάτω από την διέγερση μιας δέσμης laser. Η σύζευξη των δυο εξισώσεων διάχυσης θα μελετηθεί στα πλαίσια της ανισότητας των Vasil'ev και Sandomirskii. Η ανάπτυξη των υπάρχοντων θεωρητικών αναλύσεων του σήματος PTR, και γενικά όλων των φωτοθερμικών σημάτων που λαμβάνονται από ημιαγωγούς, βασίζεται στην διάχυση του κύματος πλάσματος που θεωρείται εντελώς ανεξάρτητη από οποιαδήποτε κυματικά θερμικά φαινόμενα. Από την άλλη η εξίσωση θερμικής διάχυσης περιλαμβάνει ένα όρο πηγής από την επανασύνδεση (χωρίς εκπομπή ακτινοβολίας) του φωτοδιεγερμένου πλάσματος. Παρόλα αυτά οι εξισώσεις συνέχειας όταν εφαρμοστούν για την διατήρηση της θερμότητας και του πλάσματος σε ένα ημιαγωγό για οποιαδήποτε τιμή της έντασης της δέσμης διέγερσης δείχνουν πως οι δυο εξισώσεις διάχυσης είναι πλήρως συζευγμένες :

$$\frac{\partial(\Delta N)}{\partial t} = D_E \nabla^2(\Delta N) - \frac{\Delta N}{\tau} + \frac{\partial n_0}{\partial T} \frac{\Delta T}{\tau} + \Phi \alpha F(t) \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial(\Delta T)}{\partial t} = D_T \nabla^2(\Delta T) + D_T \frac{E_g}{\chi} \frac{\Delta N}{\tau} + D_T \left( \frac{h\nu - E_g}{\chi} \right) \Phi \alpha F(t) \quad (6.2)$$

Στις πιο πάνω εξισώσεις υπενθυμίζουμε πως  $n_0$  είναι η συγκέντρωση φορέων στην ισορροπία σε θερμοκρασία  $T$ ,  $\Phi$  είναι ο αριθμός των φωτονίων ανά μονάδα χρόνου και εμβαδού που διαπερνούν την επιφάνεια του ημιαγωγού και  $F(t)$  η χρονική συνάρτηση διαμόρφωσης της έντασης της ακτινοβολίας διέγερσης. Ο τρίτος όρος στο δεξί μέρος της Εξ. (6.1) είναι ο όρος σύζευξης. Οι Vasil'ev και Sandomirskii πρώτοι δήλωσαν πως στην περίπτωση αρμονικής διαμόρφωσης  $F(t) = 1/2(1 + e^{i\omega t})$  ο όρος σύζευξης στην Εξ. 6.1 είναι αμελητέος στην περίπτωση των σχετικά χαμηλών θερμοκρασιών και γενικά όταν η συγκέντρωση ελευθέρων φορέων  $n_0$  ικανοποιεί την ανίσωση [1]:

$$n_0 \ll \frac{\chi}{K_B D_E} \left( \frac{K_B T_0}{E_g} \right)^2 \omega \tau \sqrt{1 + (\omega \tau)^2} \quad (6.3)$$



Η ποσότητα στο δεξί μέρος της πιο πάνω ανίσωσης έχει την τιμή  $\approx 10^{16} \text{cm}^{-3}$  όταν  $\omega \tau = 10^{-4}$  και  $\approx 10^{20} \text{cm}^{-3}$  όταν  $\omega \tau = 1$ , για το Si.

Η αναλυτική μελέτη και η υπολογισμοί που θα ακολουθήσουν έχουν πρακτική σημασία στον in-situ φωτοθερμικό χαρακτηρισμό ημιαγωγών σε υψηλές θερμοκρασίες, και/ή για μικρές τιμές του γινομένου  $\omega \times \tau$  όπου ο όρος σύζευξης μπορεί να είναι σημαντικός. Η μελέτη αυτή είναι κατά κάποιο τρόπο μια προέκταση και γενίκευση της μελέτης που παρουσιάστηκε στο Κεφ.4, σε ποιά υψηλές όμως θερμοκρασίες. Η περιοχή θερμοκρασιών που εξετάζεται εδώ παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον γιατί αφορά στάδια επεξεργασίας των ημιαγωγών, όπως η θερμική ανόπτηση που ακολουθεί την ιοντική εμφύτευση και η θερμική καθοδήγηση (drive-in) που ακολουθεί την διάχυση των προσμείξεων στον ημιαγωγό.

## 6.2 Θεωρία

Όπως έχουμε αναφέρει και προηγουμένως το σήμα PTR που λαμβάνεται από ένα ημιαγωγό πάχους L, όταν η συνεισφορά πλάσματος υπερισχύει της θερμικής είναι :

$$S_{PTR}(\lambda_{vis}, T) = b^N(\lambda_1, \lambda_2, T) \int_0^L \Delta N(z, \lambda_{vis}, T) dz \quad (6.4)$$

όπου  $b^N$  είναι μια σταθερά που εξαρτάται από την θερμοκρασία, και τις ηλεκτρονικές ιδιότητες του ημιαγωγού. Ο ανιχνευτής υπερίθρου έχει παράθυρο ανίχνευσης από  $\lambda_1$  έως  $\lambda_2$ . Υποθέτουμε πως το μέγεθος της ακτίνας laser είναι αρκετά πιο μεγάλο από το μήκος ηλεκτρονικής διάχυσης στο υλικό έτσι ώστε να έχουμε μονοδιάστατη γεωμετρία. Η σταθερά  $b^N$  δίνεται από την σχέση :

$$b^N(\lambda_1, \lambda_2, T) = [1 - R(\lambda_{vis})] \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} [1 - R(\lambda)] \left( \frac{\lambda^2 q^3}{4 \pi^2 c^3 n \epsilon_0 m^2 \mu} \right) W_p(\lambda, T) d\lambda \quad (6.5)$$

Με την συγκεκριμένη μορφή για την  $F(t)$  οι εξισώσεις διάχυσης είναι:

$$D_E \nabla^2 \Delta N(r) - (i \omega + \frac{1}{\tau}) \Delta N(r) + \frac{1}{\tau} \frac{\partial n_0}{\partial T} \Delta T(r) = -\frac{\alpha P}{\pi W^2} e^{-\alpha z} e^{-\frac{r^2}{W^2}} \quad (6.6)$$

$$D_T \nabla^2 \Delta T(r) - i \omega \Delta T(r) + \frac{E_g}{\rho C} \frac{\Delta N(r)}{\tau} = -\frac{\alpha P}{\pi W^2} \frac{h\nu - E_g}{\rho C} e^{-\alpha z} e^{-\frac{r^2}{W^2}} \quad (6.7)$$

όπου  $P$  είναι η προσπίπτουσα οπτική ισχύς,  $\rho C$  είναι το γινόμενο της πυκνότητας μάζας επί την ειδική θερμότητα του υλικού και  $W$  το μέγεθος της ακτίνας laser,  $W = \frac{\alpha_p}{\sqrt{2}}$ . Οι μετασχηματισμοί Hankel για τις κυματικές εξισώσεις της πυκνότητας πλάσματος και της θερμότητας είναι οι πιο κάτω :

$$\Delta \hat{N}(k, z) = \int_0^\infty \Delta N(r, z) J_0(kr) k dk \quad (6.8)$$

και

$$\Delta \hat{T}(k, z) = \int_0^\infty \Delta T(r, z) J_0(kr) k dk \quad (6.9)$$

Μετασχηματίζοντας τις Εξ. 6.6 και 6.7 στον χώρο Hankel, διαφορίζοντας δυο φορές και αντικαθιστώντας τις δεύτερες παραγώγους από τις μετασχηματισμένες Hankel εξισώσεις, λαμβάνουμε τις αποσυζευγμένες συνήθεις διαφορικές εξισώσεις για τους μετασχηματισμούς του θερμικού κύματος και του κύματος πλάσματος [2]:

$$\frac{d^4 \Delta \hat{N}(k, z)}{dz^4} - A(k) \frac{d^2 \Delta \hat{N}(k, z)}{dz^2} + B(k) \Delta \hat{N}(k, z) = G(k) \exp(-\alpha z) \quad (6.10)$$

$$\frac{d^4 \Delta \hat{T}(k, z)}{dz^4} - A(k) \frac{d^2 \Delta \hat{T}(k, z)}{dz^2} + B(k) \Delta \hat{T}(k, z) = H(k) \exp(-\alpha z) \quad (6.11)$$

όπου οι εξαρτήσεις των διαφόρων συντελεστών από την παράμετρο Hankel  $k$  ορίζονται ως εξής :

$$A(k) \equiv 2k^2 + i\omega \left( \frac{1}{D_E} + \frac{1}{D_T} \right) + \frac{1}{D_E \tau} \quad (6.12)$$

$$B(k) \equiv \left( k^2 + \frac{i\omega}{D_T} \right) \left( k^2 + \frac{i\omega}{D_E} + \frac{1}{D_E \tau} \right) - \xi \quad (6.13)$$

Εδώ η ποσότητα  $\xi$  αντιπροσωπεύει τον όρο σύζευξης μεταξύ της θερμικής συνιστώσας και της συνιστώσας πλάσματος :

$$\xi(T) \equiv \frac{1}{D_E \tau^2} \left( \frac{E_g}{\chi} \right) \left( \frac{\partial n_0}{\partial T} \right) \quad (6.14)$$

Επιπλέον, οι όροι καθοδήγησης στις Εξ. 6.10 και 6.11 είναι :

$$G(k) = \frac{g(k)}{D_E} \left[ k^2 + \frac{i\omega}{D_T} - \alpha^2 + \left( \frac{h\nu - E_g}{\chi \tau} \right) \frac{\partial n_0}{\partial T} \right] \quad (6.15)$$

$$H(k) = \frac{g(k)}{\chi} \left[ \frac{E_g}{D_E \tau} + (h\nu - E_g) \left( k^2 + \frac{i\omega}{D_E} + \frac{1}{D_E \tau} - \alpha^2 \right) \right] \quad (6.16)$$

Η συνάρτηση πηγής  $g(k)$  αντιπροσωπεύει την μετασχηματισμένη συνάρτηση Hankel της γκαουσιανής χωρικής κατανομής της δέσμης laser :

$$g(k) = \frac{\alpha P}{2 \pi} \exp\left(-\frac{k^2 W^2}{4}\right) \quad (6.17)$$

Μόνο η λύση της μετασχηματισμένης Hankel της εξίσωσης διάχυσης πλάσματος μας ενδιαφέρει στην παρούσα ανάλυση. Η λύση της Εξ. 6.10 για ένα ημιάπειρο δείγμα ημιαγωγού είναι :

$$\Delta \hat{N}(k, z) = C_1(k) \exp[-Q(k) z] + C_2(k) \exp[-\alpha z] \quad (6.18)$$

όπου  $C_1$  είναι μια σταθερά ολοκλήρωσης της ομογενούς λύσης ενώ η σταθερά  $C_2$  δίνεται από την συμπληρωματική λύση :

$$C_2(k) = g(k) \frac{M^2(k) - \alpha^2 + \tau D_E \left[ \frac{h\nu}{E_g} - 1 \right] \xi}{D_E \left[ [M^2(k) - \alpha^2][\Lambda^2(k) - \alpha^2] - \xi \right]} \quad (6.19)$$



Ο εκθέτης  $Q(k)$  στην Εξ. 6.18 είναι η λύση μιας χαρακτηριστικής αλγεβρικής εξίσωσης τετάρτου βαθμού, η οποία φυσικά έχει τέσσερις ρίζες. Από τις τέσσερις ρίζες διαλέγουμε αυτή που μας δίνει την κατάλληλη και γνωστή αναλυτική λύση για την  $n(k, z)$  με  $\xi = 0$  :

$$Q(k) = \left[ \frac{1}{2} (\Lambda^2(k) + M^2(k) + ((\Lambda^2(k) - M^2(k))^2 + 4 \xi^2)^{\frac{1}{2}}) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6.20)$$

όπου

$$\Lambda(k) \equiv \left( k^2 + \frac{i\omega}{D_E} + \frac{1}{D_E \tau} \right)^{1/2} \quad (6.21)$$

$$M(k) \equiv \left( k^2 + \frac{i\omega}{D_T} \right)^{1/2} . \quad (6.22)$$

Τελικά, η άγνωστη σταθερά ολοκλήρωσης  $C_1(k)$  μπορεί να καθοριστεί μονοσήμαντα από τον μετασχηματισμό Hankel της συνηθισμένης συνοριακής συνθήκης για την διατήρηση των φορέων στην επιφάνεια του δείγματος :

$$D_E \frac{d\hat{N}(k, z=0)}{dz} = s \Delta \hat{N}(k, z=0) \quad (6.23)$$

όπου  $s$  είναι η ταχύτητα επανασύνδεσης στην επιφάνεια του δείγματος. Οι Εξ. 6.18 και 6.23 δίνουν :

$$C_1(k) = - \frac{s + \alpha D_E}{s + Q(k) D_E} C_2(k) . \quad (6.24)$$

Στο όριο  $\xi = 0$  η Εξ. 6.18 γίνεται

$$\Delta \hat{N}(k, z; \xi = 0) = \frac{g(k)}{D_E (\Lambda^2 - \alpha^2)} \left[ e^{-\alpha z} - \frac{s + \alpha D_E}{s + \Lambda D_E} e^{-\Lambda z} \right] \quad (6.25)$$

η οποία είναι η γνωστή λύση του μετασχηματισμού Hankel της αποσυζευγμένης εξίσωσης μεταφοράς για το πλάσμα στην ημιάπειρη περιοχή  $z \geq 0$ :

$$\frac{d^2 \Delta \hat{N}(k, z)}{dz^2} - \Lambda^2(k) \Delta \hat{N}(k, z) = - \frac{g(k)}{D_E} \exp(-\alpha z) . \quad (6.26)$$

Ενώ η Εξ. 6.18 ισχύει για κάθε διαγνωστική μεθοδολογία η οποία μπορεί να ελέγξει το κύμα πλάσματος σε ένα ημιαγωγό, στην ειδική περίπτωση της τεχνικής PTR χρειάζεται να ολοκληρώσουμε ως προς το πάχος του δείγματος. Έτσι τελικά η μετασχηματισμένη Hankel του σήματος PTR θα είναι [2]:

$$\hat{S}_{PTR} = b^N(\lambda_1, \lambda_2, T) C_2(k) \left[ \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{Q(k)} \left[ \frac{s + \alpha D_E}{s + Q(k) D_E} \right] \right] . \quad (6.27)$$

Η εξίσωση αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για αριθμητικές προσομιώσεις της φωτοθερμικής ραδιομετρικής απόκρισης των ημιαγωγών. Ως παράδειγμα θα θεωρήσουμε ένα δισκίο πυριτίου και θα πάρουμε το φωτοθερμικό σήμα ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης και της θερμοκρασίας. Στην τελευταία περίπτωση θα δοθεί περαιτέρω προσοχή στην T εξάρτηση του ολοκληρώματος που δίνει τον συντελεστή  $b(\lambda_1, \lambda_2, T)$  στην Εξ.6.5. Χρησιμοποιώντας τον νόμο ακτινοβολίας του Planck για την IR εκπομπή από μια επιφάνεια εμβαδού  $A$  ενός μελανού εκπομπού στις Εξ. 6.4 και 6.5 :

$$W_P(\lambda, T) = \frac{2 \pi h}{\lambda^5} \frac{A c^2}{\exp(hc/\lambda K_B T) - 1} \quad (6.28)$$

και υποθέτοντας μια ασθενή θερμοκρασιακή εξάρτηση της ανακλαστικότητας στο υπέρυθρο λαμβάνουμε την εξής έκφραση για τον συντελεστή πλάσματος  $b^N$  :

$$b^N = \frac{(1 - R(\lambda_{VIS}))(1 - \langle R \rangle) q^3 A K_B^2}{2 \pi h c^3 n \epsilon_0 m^2} \frac{T^2}{\mu(T)} I \quad (6.29)$$

όπου

$$I = \int_{x_2}^{x_1} \frac{x dx}{e^x - 1} \quad (6.30)$$

με

$$x_i = hc/\lambda_i K_B T, \quad i = 1, 2 \quad (6.31)$$

Η μέση ανακλαστικότητα στα όρια της υπέρυθρης ευαισθησίας του ανιχνευτή συμβολίζεται με  $\langle R \rangle$ . Η θερμοκρασιακή εξάρτηση της ευκινησίας  $\mu(T)$  εξαρτάται από τον φυσικό μηχανισμό που ελέγχει την παράμετρο αυτή, όπως έχουμε αναφέρει στο Κεφ. 2. Υπογραμμίζουμε πως η φασματική απόκριση ενός ανιχνευτή με μεγάλο φασματικό εύρος μπορεί να προσεγγιστεί θέτοντας τα όρια ολοκλήρωσης  $[0, \infty)$  στην Εξ. 6.30. Αυτό θα δώσει μια απλή και σχετικά αργή θερμοκρασιακή εξάρτηση στον παράγοντα  $b^N \propto T^2/\mu(T)$ .

### 6.3 Εφαρμογή σε δισκία Si κάτω από συνθήκες θερμικής ανόπτησης

Στην περίπτωση των βαριά εμπλουτισμένων δειγμάτων η ανίσωση 6.3 είναι απίθανο να ισχύει και σε τούτη την περίπτωση τα θεωρητικά αποτελέσματα των Εξισ. 6.27 και 6.29 θα πρέπει να ληφθούν υπόψη. Η αναλυτική αντιστροφή του μετασχηματισμού Hankel είναι αδύνατη κάτω από αυτές τις συνθήκες. Έτσι "επιστρατεύσαμε" την υπορουτίνα Gaussub της Fortran 77 για όλα τα ολοκληρώματα που εμφανίζονται στους μετασχηματισμούς Hankel. Προχωρώντας στους υπολογισμούς σχετικά με την θερμοκρασιακή εξάρτηση του PTR σήματος, κάναμε την υπόθεση πως η διαμορφωμένη αύξηση της θερμοκρασίας λόγω της απορρόφησης της δέσμης διέγερσης είναι αμελητέα σε σχέση με την θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Αυτό είναι σωστό στην περίπτωση καλών θερμικών αγωγών όπως στο Si, των οποίων η επιφάνεια δεν έχει υποστεί ζημιά. Επιπλέον η ήπια θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή  $b^N$  παραλήφθηκε από τις προσομοιώσεις για να επικεντρωθεί η σημασία στην φυσική συμπεριφορά του υλικού.

#### 6.3.1 Στατιστική φορέων στο Si

Η παράμετρος σύζευξης εξαρτάται από την παράγωγο της θερμοκρασίας της συγκέντρωσης φορέων στην ισορροπία  $n_0(T)$ , η οποία είναι παρούσα σε ένα ημιαγωγό και στην απουσία διεγείρουσας ακτινοβολίας η οποία θα επάγει επιπλέον φορείς. Για τον υπολογισμό της πυκνότητας ελευθέρων ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας του ενδογενούς Si, χρησιμοποιείται η πιο κάτω εξίσωση [3]:

$$n(T) = N_c F_{1/2}(\eta), \eta \equiv \frac{E_F(T) - E_g}{K_B T} \quad (6.32)$$



Η συνάρτηση  $F_{1/2}(\eta)$  είναι γνωστή ως ολοκλήρωμα Fermi τάξης 1/2 και ορίζεται ως [4]:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2} dE}{1 + \exp(E - \eta)} \quad (6.33)$$

Για ενδογενείς, εξωγενείς, και εκφυλισμένους (degenerate) ημιαγωγούς Si (για μεγάλες δόσεις πρόσμειξης και μεγάλες θερμοκρασίες) ο Blakemore [3] παρουσιάζει την πιο κάτω προσέγγιση για την συνάρτηση  $F_{1/2}(\eta)$  :

$$F_{1/2}(\eta) \approx \frac{e^{\eta(T)}}{1 + 0.27 \eta(T)} \quad (6.34)$$

η οποία ισχύει για  $\eta < 1.3$  με σφάλμα  $\leq \pm 3\%$ . Στο πεδίο θερμοκρασιών  $300K \leq T \leq 1200K$ , τόσο η ενδογενής όσο και η εξωγενής θερμική διέγερση συνεισφέρουν στην πυκνότητα ελευθέρων φορέων στο Si. Όσον αφορά την ενδογενή διέγερση η ισότητα των ελευθέρων ηλεκτρονίων και των ελευθέρων οπών απαιτεί όπως το δεξί μέλος της Εξ. 6.32 να είναι ίσο με  $N_v \exp(-E_F(T)/K_B T)$ . Οι Εξ. 6.32 και 6.33 έχουν ως αποτέλεσμα μια τετάρτης τάξης εξίσωση για την ποσότητα  $e^{n(T)}$  η οποία με την σειρά της δίνει την ακόλουθη έκφραση για την ενδογενή πυκνότητα ελευθέρων ηλεκτρονίων :

$$n_{0i} = [0.135a(T) + (0.0182a^2(T) + a(T))^{1/2}] \exp(-E_g/K_B T) \quad (6.35)$$

όπου η ποσότητα  $a(T)$  δίνεται ως συνάρτηση του λόγου των ενεργών μαζών των ελευθέρων ηλεκτρονίων και οπών :

$$a(T) = \left(\frac{m_p^*}{m_e^*}\right)^{3/2} \exp(-E_g/K_B T) \quad (6.36)$$

Για εξωγενείς ημιαγωγούς, το δεξί μέλος της Εξ. 6.32 πρέπει να είναι ίσο με :

$$n_{0e}(T) = \frac{N_d}{1 + \beta^{-1} \exp(\epsilon_d + \eta)} \quad (6.37)$$

όπου  $N_d$  είναι η πυκνότητα των δοτών ( $n$ -τύπου),  $\beta$  ο βαθμός εκφυλισμού της δέσμιας κατάστασης του δότη (1/2 για το Si [3]) και  $\epsilon_d = E_d/K_B T$ , όπου  $E_d$  η ενέργεια της κατάστασης του δότη μέσα στο ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού. Συνδυάζοντας τις Εξ. 6.32 και 6.36 καταλήγουμε σε μια εξίσωση τετάρτου βαθμού για την  $e^{n(T)}$ . Λύνοντας αυτή την εξίσωση λαμβάνουμε την ακόλουθη έκφραση για την πυκνότητα εξωγενών φορέων για  $n$  τύπου ημιαγωγούς:

$$n_{0e}(T) = \frac{2 N_d N_c(T)}{N_c(T) + 0.27 N_d + ((N_c(T) - 0.27 N_d)^2 + v)^{1/2}} \quad (6.38)$$

όπου  $v$  η πιο κάτω ποσότητα:

$$v = 2 N_d N_c(T) e^{E_d/K_B T} \quad (6.39)$$

Ο Πιν. 6.1 παρουσιάζει την τιμή της ποσότητας  $\eta$  για διάφορες τιμές του  $N_d$  που κινείται μεταξύ του ενδογενούς και του εξωγενούς ορίου, για τις ακραίες τιμές της θερμοκρασίας που μας ενδιαφέρουν δηλ. τους 300 K και τους 1400 K. Στην Εικ. 6.1 παρουσιάζουμε το διάγραμμα Arrhenius της συνδυασμένης πυκνότητας φορέων :  $n_0(T) = n_{0i}(T) + n_{0e}(T)$ ,

$N_d(cm^{-3})$	$\eta(300K)$	$\eta(1200K)$	$\eta(1400K)$
0 (intrinsic)	-22.034	-3.981	-3.021
$1 \times 10^{14}$	-12.551	-14.63	-14.862
$1 \times 10^{16}$	-7.946	-10.025	-10.257
$1 \times 10^{18}$	-3.343	-5.425	-5.655
$1 \times 10^{20}$	+1.138	-1.089	-1.295

Πίνακας 6.1: Οι τιμές της παραμέτρου του Blakemore  $\eta(T)$ .

$N_d(cm^{-3})$	$\tau_0(s)$
0	$39.5 \times 10^{-6}$
$1 \times 10^{14}$	$3.95 \times 10^{-6}$
$1 \times 10^{17}$	$0.395 \times 10^{-6}$
$5 \times 10^{18}$	$0.2 \times 10^{-6}$
$1 \times 10^{20}$	$39.5 \times 10^{-9}$

Πίνακας 6.2: Οι τιμές της παραμέτρου  $\tau_0$  ως συνάρτηση του  $N_d$ .

στο Si. Υποθέτουμε εμπλουτισμό με  $P$  που εισάγει ενεργειακές καταστάσεις στο ενεργειακό χάσμα,  $45meV$  από το κάτω άκρο της ζώνης αγωγιμότητας [5]. Η επικράτηση της ενδογενούς θερμικής διέγερσης είναι εμφανής στις υψηλές θερμοκρασίες για όλες εκτός από την υψηλότερη πυκνότητα προσμείξεων ( $N_d = 10^{20} cm^{-3}$ ). Στην εκφυλισμένη αυτή περίπτωση, βλέπουμε επίσης ότι η διείσδυση της στάθμης Fermi στην ζώνη αγωγιμότητας έχει ως αποτέλεσμα μια μετρήσιμη μεταβολή στην κλίση της εξωγενούς γραμμής. Ο όρος σύζευξης στην Εξ. 6.14 υπολογίστηκε διαφορίζοντας αριθμητικά τις καμπύλες της Εικ. 6.1 και οι αντίστοιχες τιμές του  $\xi$  εμφανίζονται στην Εικ. 6.2. Από την Εικ. 6.2 μπορούμε να συμπεράνουμε ότι :

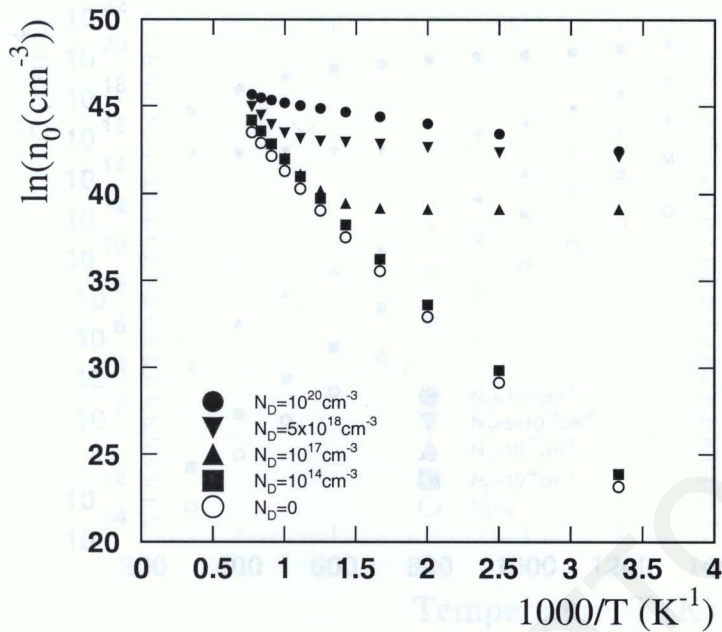
1. ο όρος σύζευξης καταλαμβάνει ένα εξαιρετικά μεγάλο εύρος τιμών (μέχρι δεκαπέντε τάξεις μεγέθους για ενδογενή υποστρώματα και υποστρώματα με μικρή ποσότητα προσμείξεων), ανάμεσα στους  $300 K$  και  $1400 K$  στο Si
2. το "σθένος" της σύζευξης ανάμεσα στο θερμικό και ηλεκτρονικό κύμα αυξάνει δραστηρικά με την αύξηση της πυκνότητας προσμείξεων, ειδικά στις χαμηλές θερμοκρασίες.

Η θερμοκρασιακή εξάρτηση των εναπομείναντων παραμέτρων στην έκφραση του όρου σύζευξης εισάγεται παρακάτω. Για την ευκίνησία χρησιμοποιούμε την γνωστή σχέση του Einstein [6]:

$$D_E = \frac{K_B T}{e} \frac{2\mu_e(T)\mu_h(T)}{\mu_e(T) + \mu_h(T)} \quad (6.40)$$

όπου οι ευκινήσιες οπών και ηλεκτρονίων εξαρτώνται από την θερμοκρασία μέσω της





Εικόνα 6.1: Διαγράμματα Arrhenius της ολικής πυκνότητας φορέων  $n_0(T)$  για μερικές τιμές της πυκνότητας εμπλουτισμού με P του Si,  $E_g = 1.12\text{eV}$ ,  $E_g - E_D = 45\text{meV}$ .

σχέσης [7, 8, 9]:

$$\mu(T) = \mu_{min} + \frac{\mu_0}{1 + (N_d/N_{ref})^\alpha} \quad (6.41)$$

όπου  $\mu$  είναι η ευκινησία των φορέων,  $N_d$  η πυκνότητα προσμείξεων και όλες οι άλλες ποσότητες είναι εμπειρικές παράμετροι που προέκυψαν από προσομοίωση και παρουσιάζουν θερμοκρασιακή εξάρτηση της μορφής:

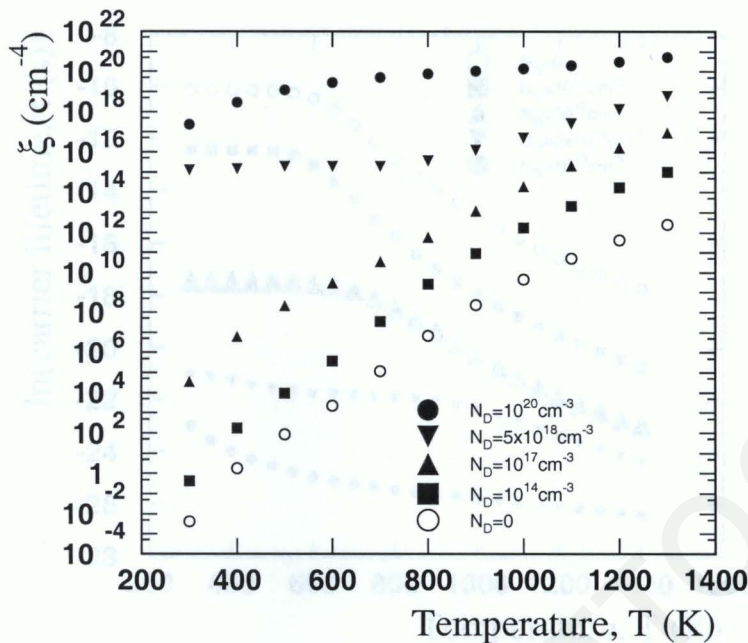
$$A = A_0(T/300)^M \quad (6.42)$$

Ο συντελεστής  $A_0$  είναι ανεξάρτητος από την θερμοκρασία (η τιμή της παραμέτρου για  $T = 300\text{K}$ ), και  $M$  είναι ένας εκθέτης ξεχωριστός για κάθε παράμετρο. Οι τιμές των  $N_{ref}$ ,  $\mu_{min}$ ,  $\mu_0$  και  $\alpha$  έχουν τις τιμές  $1.30 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ,  $92 \text{cm}^2/\text{Vs}$ ,  $1268 \text{cm}^2/\text{Vs}$  και  $0.91$ , αντίστοιχα για τα ηλεκτρόνια, και  $2.35 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ,  $54.3 \text{cm}^2/\text{Vs}$ ,  $406.9 \text{cm}^2/\text{Vs}$  και  $0.88$ , αντίστοιχα για τις οπές [7].

Η εξάρτηση του χρόνου ζωής από την θερμοκρασία θα δίνεται επίσης από την πιο κάτω σχέση [7, 10, 11] που χρησιμοποιήσαμε και στο Κεφ. 4, κάπως τροποποιημένη βέβαια ώστε να περιλαμβάνει τόσο την ενδογενή όσο και την εξωγενή συσχέτιση φορέων :

$$\tau(T) = \frac{\tau_0}{1 + \frac{n_{oi}(T) + n_{oe}(T)}{N_0}} \quad (6.43)$$

Η πιο πάνω εξίσωση είναι ενδεικτική μιας γενικής φύσης εξάρτησης του χρόνου ζωής από την συσχέτιση προσμείξεων. Στους θεωρητικούς μας υπολογισμούς,  $\tau_0 = \tau_0(N_d)$ , με



Εικόνα 6.2: Θερμοκρασιακή εξάρτηση της παραμέτρου σύζευξης  $\xi(T)$  στην περίπτωση P εμφυτευμένου Si, για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης δότη.

την λογική πως η πιο πάνω εμπειρική σχέση (κατ' αρχήν σωστή για το Si) έχει πολλαπλασιαστεί με μια σταθερά για κάθε τιμή του  $N_d$  έτσι ώστε να δίνει μια αποδεκτή τιμή, σε θερμοκρασία δωματίου, σύμφωνη με την βιβλιογραφία [3].

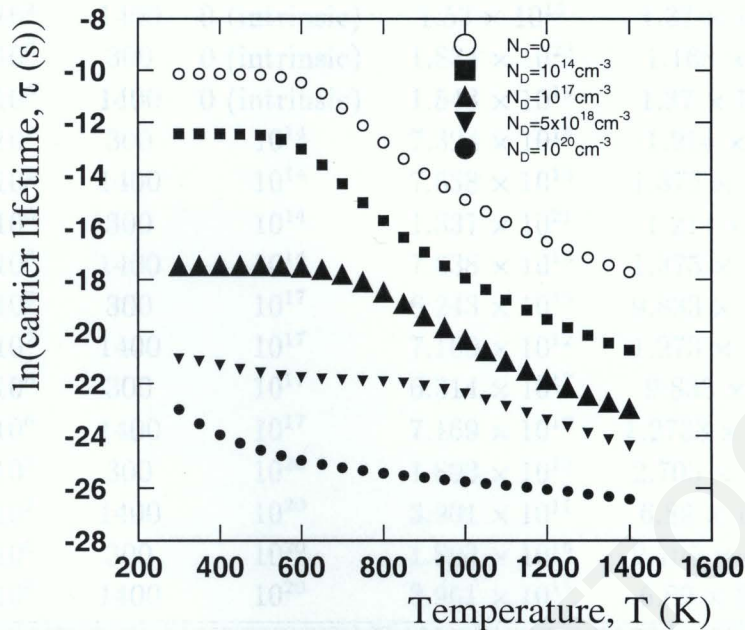
Στην περίπτωση του ενδογενούς Si, ο χρόνος ζωής οφείλεται κυρίως στις παγίδες βαθιών επιπέδων (deep-level traps). Η θερμοκρασιακή εξάρτηση της ταχύτητας επανασύνδεσης σχετίστηκε με τον χρόνο επανασύνδεσης [12] ως εξής :

$$s(T) = \sqrt{\frac{D_E(T)}{\tau_s(T)}} \quad (6.44)$$

Γράφοντας την πιο πάνω εξίσωση υποθέσαμε πως το μήκος κύματος της διεγείρουσας ακτινοβολίας είναι τέτοιο ώστε οι επαγόμενοι φορείς δημιουργούνται πολύ κοντά στην επιφάνεια του ημιαγωγού· σε αυτή την περίπτωση ο ενεργός χρόνος ζωής ελέγχεται από την ηλεκτρονική κατάσταση της επιφάνειας [13]. Έτσι δικαιολογείται και η υπόθεση  $\tau = \tau_s$  στην πιο πάνω εξίσωση. Στο σχ. 6.3 παρουσιάζεται η εξάρτηση του χρόνου ζωής από την θερμοκρασία στο Si με την πυκνότητα προσμείξεων ως παράμετρο. Στην ενδογενή περίπτωση όπου  $N_d = 0$ ,  $\tau_0 = 39.5\mu s$  σε θερμοκρασία δωματίου [13].

Η ελάττωση του χρόνου ζωής με την αύξηση της θερμοκρασίας και την αύξηση της πυκνότητας προσμείξεων αναμένεται λόγω της παρουσίας υψηλότερης πυκνότητας φορέων και άδειων καταστάσεων, που έτσι διευκολύνουν τον μηχανισμό της επανασύνδεσης. Η αύξηση της ταχύτητας επανασύνδεσης με την αύξηση της θερμοκρασίας δεν είναι τόσο





Εικόνα 6.3: Ο χρόνος ζωής των ηλεκτρικών φορέων ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, σε P εμφυτευμένο Si για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης του δότη  $N_d$ .

σημαντική όσο αυτή του  $\tau(T)$ , λόγω της εξάρτησης από την τετραγωνική ρίζα στην Εξ. 6.39.

Για τον συντελεστή οπτικής απορρόφησης στο Si ως συνάρτηση του μήκους κύματος και της θερμοκρασίας, χρησιμοποιήσαμε την πιο κάτω σχέση [6, 15]:

$$\alpha(\text{cm}^{-1}) = 6000 \left[ \frac{(h\nu - E_g(T) - 0.0575)^2}{1 - \exp(-670/T)} + \frac{(h\nu - E_g(T) + 0.0575)^2}{\exp(-670/T - 1)} \right] . \quad (6.45)$$

Η εξάρτηση του ενεργειακού χάσματος από την θερμοκρασία περιγράφεται από την πιο κάτω σχέση [6]:

$$E_g(T) = 1.16 - \frac{7.02 \times 10^{-4} T^2}{T + 1108} . \quad (6.46)$$

Τέλος η θερμοκρασιακή εξάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας στην Εξ. 6.14 είναι [15]:

$$\chi(T)(\text{W/cmK}) = 1.35(T/300)^{-1.12} \quad (6.47)$$

### 6.3.2 Η εξάρτηση ενός συζευγμένου θερμοηλεκτρονικού κύματος από την συχνότητα διαμόρφωσης.

Υπό το φώς της ανισότητας (6.3), θα επιχειρήσουμε μια αριθμητική διερεύνηση της εγκυρότητας της στις ακραίες θερμοκρασίες  $T = 300\text{K}$  και  $T = 1400\text{K}$ , καθώς και μια σειρά από υπολογισμούς για να επιβεβαιώσουμε τις προβλέψεις της. Συμβολίζοντας το δεξί μέλος της ανισότητας με  $Q(f, T)$  σε μονάδες ενεργής πυκνότητας φορέων ( $\text{cm}^{-3}$ ), ο



$f(Hz)$	$T(K)$	$N_d(cm^{-3})$	$Q(f,T)(cm^{-3})$	$n_0(cm^{-3})$
$10^2$	300	0 (intrinsic)	$7.394 \times 10^{16}$	$1.168 \times 10^{10}$
$10^2$	1400	0 (intrinsic)	$1.53 \times 10^{15}$	$1.37 \times 10^{19} *$
$10^6$	300	0 (intrinsic)	$1.834 \times 10^{23}$	$1.168 \times 10^{10}$
$10^6$	1400	0 (intrinsic)	$1.543 \times 10^{19}$	$1.37 \times 10^{19} *$
$10^2$	300	$10^{14}$	$7.394 \times 10^{15}$	$1.214 \times 10^{10}$
$10^2$	1400	$10^{14}$	$7.638 \times 10^{13}$	$1.375 \times 10^{19} *$
$10^6$	300	$10^{14}$	$1.837 \times 10^{21}$	$1.214 \times 10^{10}$
$10^6$	1400	$10^{14}$	$7.638 \times 10^{13}$	$1.375 \times 10^{19} *$
$10^2$	300	$10^{17}$	$6.243 \times 10^{13}$	$9.833 \times 10^{16} *$
$10^2$	1400	$10^{17}$	$7.169 \times 10^{12}$	$1.273 \times 10^{19} *$
$10^6$	300	$10^{17}$	$6.314 \times 10^{17}$	$9.833 \times 10^{16}$
$10^6$	1400	$10^{17}$	$7.169 \times 10^{16}$	$1.2733 \times 10^{19} *$
$10^2$	300	$10^{20}$	$1.893 \times 10^{12}$	$2.705 \times 10^{18} *$
$10^2$	1400	$10^{20}$	$3.901 \times 10^{11}$	$6.89 \times 10^{19} *$
$10^6$	300	$10^{20}$	$1.893 \times 10^{16}$	$2.705 \times 10^{18} *$
$10^6$	1400	$10^{20}$	$3.901 \times 10^{15}$	$6.89 \times 10^{19} *$

**Πίνακας 6.3:** Σύγκριση ανάμεσα στα  $n_0$  και  $Q$  για το ενδογενές και εξωγενές Si στις συχνότητες διαμόρφωσης  $100Hz$ ,  $1MHz$  και για θερμοκρασίες  $T=300$  και  $1400K$ .

Πίνακας 6.2 δείχνει με αστεράκι σε ποιές περιπτώσεις οι Vasil'ev και Sandomirskii έχουν προβλέψει πως η θερμο-ηλεκτρονική σύζευξη πιθανόν να μην είναι αμελητέα. Αυτές είναι όλες οι περιπτώσεις υψηλών θερμοκρασιών και οι περιπτώσεις όπου  $N_d > 10^{17}cm^{-3}$ . Ο πιο πάνω πίνακας δείχνει πως ακόμα και στην περίπτωση του ενδογενούς ημιαγωγού με πολύ μικρή συγκέντρωση προσμειξέων, σε μεγάλες θερμοκρασίες και/ή για ενδιάμεσες τιμές του  $N_d$  σε θερμοκρασία δωματίου, η θερμοηλεκτρονική σύζευξη μπορεί να είναι σημαντική. Η τελευταία περίπτωση, είναι φυσικά, σε πλήρη αντίθεση με τις περισσότερες θεωρητικές περιγραφές [1, 17, 18, 19, 20, 21] των φωτοθερμικών φαινομένων σε ημιαγωγούς. Ο Πίνακας 6.2 δείχνει πως όλα τα θεωρητικά μοντέλα πρέπει να λαμβάνουν υπόψη την θερμοηλεκτρονική σύζευξη όταν εξετάζουν φωτοθερμικά φαινόμενα σε ημιαγωγούς σε υψηλές θερμοκρασίες. Για τούτο τον λόγο οι εξαρτήσεις από την θερμοκρασία και την συχνότητα διαμόρφωσης του φωτοθερμικού σήματος μελετήθηκαν με κάποια λεπτομέρεια, ειδικά στην περιοχή που παραβιάζεται η ανισότητα (6.3). Στους ακόλουθους υπολογισμούς η θερμική συνιστώσα του σήματος θα αγνοηθεί αφού είναι αμελητέα σε υλικά υψηλής ποιότητας που δεν έχουν υποστεί ζημιά στην επιφάνεια, ή ιοντική εμφύτευση [18, 21].

Η ραδιομετρική απόκριση στην συχνότητα διαμόρφωσης ενός δισκίου Si δίνεται από τον μετασχηματισμό Hankel της Εξ. 6.27 σε καθορισμένη θερμοκρασία υποβάθρου. Οι καμπύλες του φωτοθερμικού πλάτους στην περίπτωση που η ακτίνα της δέσμης laser είναι  $1mm$ ,  $T = 300K$  ήταν παρόμοιες με αυτές που παρουσίασαν οι Sheard et al.[21], και οι καμπύλες της φάσης συμπίπτουν επίσης με αυτές των Salnick et al. [22]. Οι πιο πάνω ερευνητές χρησιμοποίησαν μονοδιάστατο μοντέλο για το ραδιομετρικό σήμα αγνοώντας



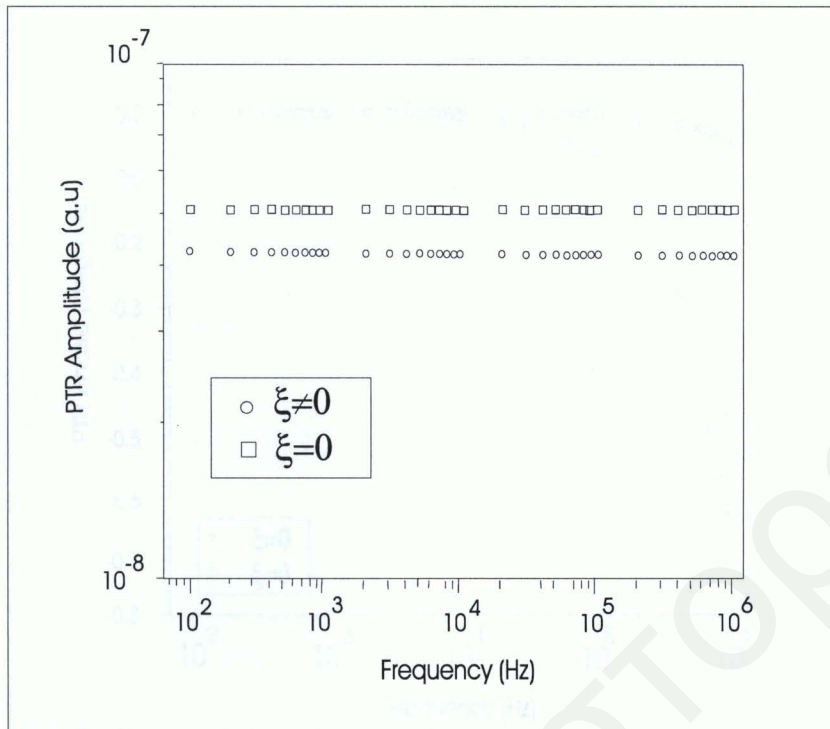
την θερμοηλεκτρονική σύζευξη, δηλ.  $\xi = 0$ . Αποτελέσματα παρόμοια με προηγούμενα τρισδιάστατα μοντέλα των Sheard [18] και Sheard et al [21] λήφθηκαν με διάμετρο ακτίνας  $1.5\mu m$  που εμπίπτει καθαρά στην τρισδιάστατη περίπτωση ανίχνευσης. Δεν μπορέσαμε να δούμε διαφορές στην ραδιομετρική απόκριση σε σχέση με τον παράγοντα σύζευξης  $\xi$ , κάτι που δείχνει την επάρχεια των υπάρχοντων θεωρητικών αποσυζευγμένων μοντέλων για μελέτη δειγμάτων με μικρή συγκέντρωση προσμείξεων σε θερμοκρασία δωματίου. Σε θερμοκρασία δωματίου τα προσομοιωμένα δισχία πυριτίου με υψηλή πυκνότητα πρόσμειξης,  $N_d > 10^{17} cm^{-3}$ , παρουσίασαν μειωμένο φωτοθερμικό πλάτος και φάση σε σχέση με την συμβατική αποσυζευγμένη περίπτωση, που αντιπροσωπεύεται από την μετοχηματισμένη Hankel της Εξ. 6.25.

Οι Ειχ. 6.4 (πλάτος) και 6.5 (φάση) παρουσιάζουν την ραδιομετρική απόκριση για  $N_d = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$ . Για την ίδια ροή φωτεινής ακτινοβολίας στην επιφάνεια του ημιαγωγού, μικρότερη πυκνότητα δέσμιων φορέων θα είναι διαθέσιμη στα ενεργειακά επίπεδα προσμείξεων για οπτική διέγερση, λόγω της προς τα πάνω μετακίνησης του επιπέδου Fermi που επάγεται θερμικά από τον όρο σύζευξης. Το αποτέλεσμα είναι ένα μικρότερο ραδιομετρικό σήμα, που είναι ένδειξη μιας ελαττωμένης φωτοδιεγερμένης χβαντικής απόκρισης, σε σχέση με την περίπτωση  $\xi = 0$ . Η επίπεδη συμπεριφορά του πλάτους οφείλεται στην ελάττωση του χρόνου ζωής για αυξημένες τιμές του  $N_d$ , έτσι ώστε το σημείο χαμπής  $\omega \tau \approx 1$  έχει μετακινηθεί σε μεγαλύτερες συχνότητες έξω από το συμβατικό πειραματικό διάστημα συχνοτήτων του  $1 MHz$ .

Παρόμοια φαινόμενα μπορεί να δει κανείς όταν η ακτίνα της δέσμης laser αυξηθεί στο  $1mm$ , και το συμπέρασμα είναι πως η διάσταση του προβλήματος δεν είναι σημαντικός παράγοντας στην συζευγμένη θερμοηλεκτρονική κυματική θεωρία. Η διάσταση του προβλήματος αναμένεται να είναι σημαντική, στην εξέλιξη της θερμικής κυματικής συνιστώσας που έχει όμως αγνοηθεί. Στην Ειχ. 6.5 η φάση μετακινείται προς αρνητικές τιμές δηλ. έπεται σε σχέση με την φάση της αποσυζευγμένης περίπτωσης. Αυτό οφείλεται στο γεγονός πως το κεντροειδές του κύματος πλάσματος κινείται βαθύτερα στο υλικό καθώς συμβαίνει η υποβοηθούμενη μετατροπή σε θερμική ενέργεια λόγω της σύζευξης. Από την άλλη, η προσομοίωση για  $N_d = 10^{20} cm^{-3}$  παρουσιάζει μια θετική μετακίνηση φάσης, δηλ. προηγείται της αποσυζευγμένης περίπτωσης. Το φαινόμενο αυτό συμβαίνει λόγω του συνδυασμού του κορεσμού της συνιστώσας πλάσματος σε σχέση με τον χρόνο ζωής για τις μεγάλες συγκεντρώσεις προσμείξεων ( $\omega \tau \ll 1$ ), και της αρχικά αυξημένης ταχύτητας επανασύνδεσης που εξαλείφει τους ενεργούς φορείς, μετακινώντας έτσι το κεντροειδές του κύματος πλάσματος προς την επιφάνεια, μειώνει σημαντικά την πυκνότητα πλάσματος και συνεπώς το σθένος του ραδιομετρικού σήματος. Ένας υπολογισμός έδειξε μια μείωση πέντε τάξεων μεγέθους σε σχέση με αυτό που φαίνεται στην Ειχ. 6.4. Στην Ειχ. 6.6 παρουσιάζονται προφίλ της ταχύτητας επανασύνδεσης  $s$  ως συναρτήσεις της θερμοκρασίας, για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης  $P$  στο Si.

Σε σχέση με τα αποτελέσματα των Ειχ. 6.4-5 και τα ακολουθούμενα σχόλια, διαδικασίες που αντιστοιχούν σε ενδιάμεσες μέχρι υψηλές συγκεντρώσεις προσμείξεων πρέπει να λαμβάνουν υπόψη τους την θερμοηλεκτρονική σύζευξη κατά την διάρκεια της ανάλυσης των φωτοθερμικών δεδομένων, ακόμα και σε συνθήκες θερμοκρασίας δωματίου. Για συγκέντρωση  $N_d = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$  η μετακίνηση φάσης αλλάζει από αρνητική (έπεται)





**Εικόνα 6.4:** Το πλάτος PTR, στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $T = 300K$ ,  $W = 1.5\mu m$  και  $N_d = 5 \times 10^{18}cm^{-3}$ .

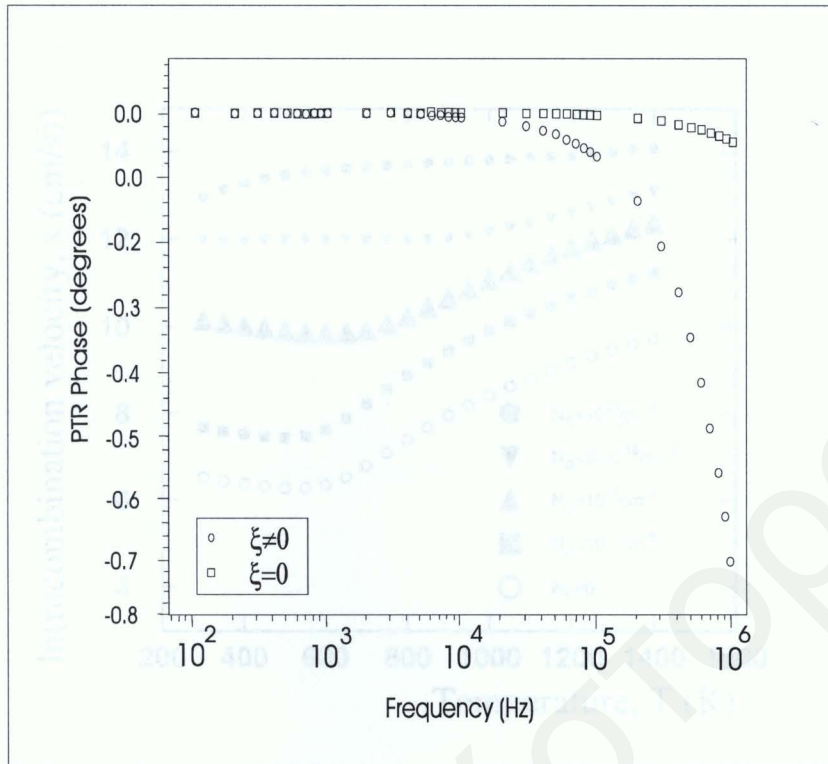
σε θετική (προηγείται) μεταξύ  $T = 800K$  και  $T = 1400K$ , ενώ για υψηλότερες τιμές της συγκέντρωσης η φάση προηγείται πάντα (βλ. Εικ. 6.8), ανεξάρτητα από την θερμοκρασία ( $300 < T < 1440K$ ). Αυτό αναμένεται λόγω της γοργά αυξανόμενης ταχύτητας επανασύνδεσης που παρουσιάζεται στην Εικ. 6.6. Η θερμοηλεκτρονική σύζευξη είναι φυσικά ισχυρότερη σε πιο ψηλές θερμοκρασίες (βλ. Εικ. 6.2), και σαν αποτέλεσμα η μείωση του σχετικού φωτοθερμικού πλάτους σε σχέση με την αποσυζευγμένη περίπτωση είναι πιο εμφανής σε χαμηλές θερμοκρασίες. Επίσης η απόλυτη τιμή του πλάτους ελαττώνεται κατά αρκετές τάξεις μεγέθους λόγω της υποβοηθούμενης επανασύνδεσης, όπως φαίνεται και στην Εικ. 6.7 και σε σύγκριση με την Εικ. 6.4.

Για το ενδογενές πυρίτιο, η σύζευξη επάγει μια καθυστέρηση φάσης στους  $1200K$ , η οποία, εαν δεν ληφθεί υπόψη, μπορεί να "παρεξηγηθεί" πως οφείλεται στον μεγαλύτερο χρόνο ζωής, οδηγώντας έτσι σε λανθασμένη τιμή της παραμέτρου αυτής, όπως φαίνεται και στις Εικ. 6.9 και 6.10.

### 6.3.3 Θερμοκρασιακή συμπεριφορά των συζευγμένων θερμοηλεκτρονικών κυμάτων

Οι υπολογισμοί του ραδιομετρικού σήματος που περιλαμβάνουν αρκετές τιμές της συγκέντρωσης προσμείξεων  $P$  στο  $Si$ , ως συναρτήσεις της θερμοκρασίας του περιβάλλοντος,  $T$ ,



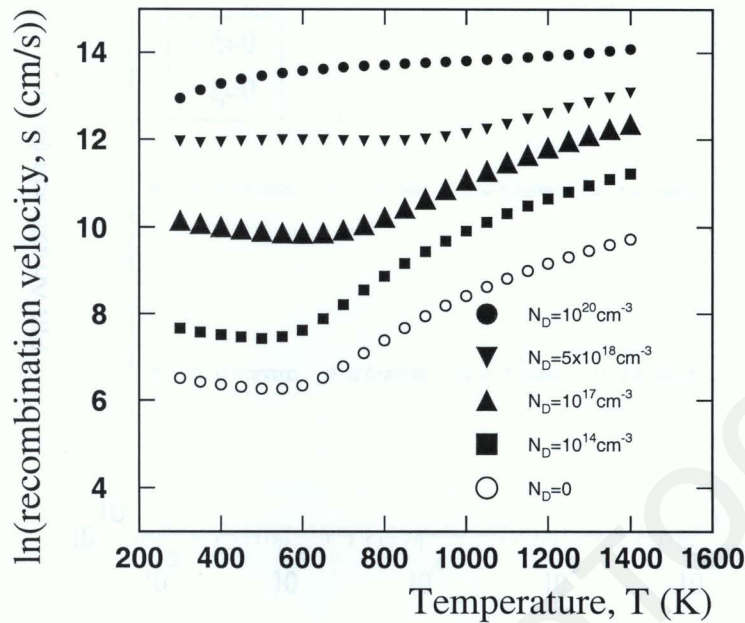


**Εικόνα 6.5:** Η φάση PTR, στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $T = 300K$ ,  $W = 1.5\mu m$  και  $N_d = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$ .

παρουσιάζονται στις Εικ. 6.11-12.

Οι συντελεστές αμφιπολικής ηλεκτρονικής διάχυσης και οπτικής απορρόφησης παρουσιάζονται ως συναρτήσεις της θερμοκρασίας στις Εικ. 6.13 και 6.14, αντίστοιχα. Στις Εικ. 6.11-12 μπορούν να αναγνωριστούν δυο  $T$  περιοχές : μια περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών ( $\leq 700K$ ) και μια περιοχή υψηλών θερμοκρασιών ανάμεσα 700 και 1400 K. Για το ενδογενές πυρίτιο μια αύξηση της θερμοκρασίας από το επίπεδο αναφοράς 300 K δημιουργεί αύξηση στο φωτοθερμικό σήμα καθώς περισσότεροι φορείς διεγείρονται θερμικά και περνούν στην ελεύθερη ζώνη αγωγιμότητας. Με περαιτέρω αύξηση της θερμοκρασίας, η δραστική μείωση του  $\tau$  ελαττώνει την πυκνότητα των επιπλέον φορέων, δημιουργώντας έτσι ένα πλατύ μέγιστο στο ραδιομετρικό πλάτος. Αυτό συνοδεύεται από ένα επίσης πλατύ ελάχιστο [Εικ. 6.12] στην φάση που σταθεροποιείται στην τιμή  $0^\circ$  στις μεγάλες θερμοκρασίες, καθώς το κεντροειδές του κύματος πλάσματος κινείται προς την επιφάνεια κάτω από συνθήκες επιταχυνόμενης επανασύνδεσης και καθώς αυξάνεται ο συντελεστής απορρόφησης, κάτι που εντοπίζει την πηγή των ελευθέρων φορέων στην επιφάνεια του υλικού. Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και στο ελαφρά εμπλουτισμένο Si,  $N_d = 10^{14} cm^{-3}$ , με μια πιο εμφανή μείωση του πλάτους και μια πιο απότομη σταθεροποίηση της φάσης στην τιμή των  $0^\circ$  στην περιοχή μεγάλων θερμοκρασιών, λόγω του σημαντικά μικρότερου  $\tau$  σε σχέση με την ενδογενή περίπτωση.

Η περίπτωση με  $N_d = 10^{17} cm^{-3}$ , προκαλεί ένα μικρότερο ολικό σήμα σε σχέση με



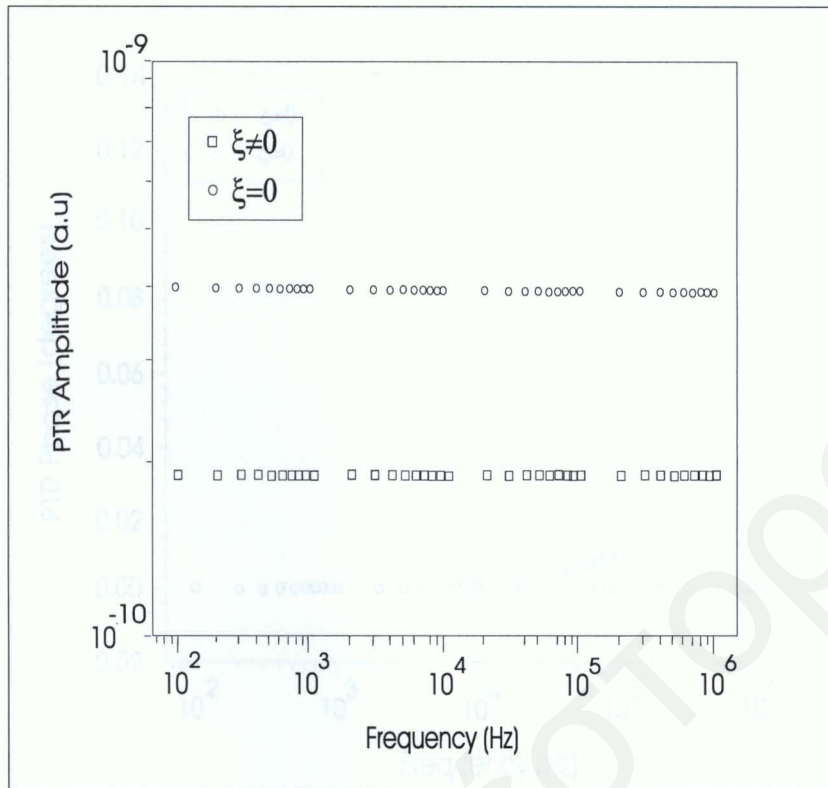
**Εικόνα 6.6:** Η ταχύτητα επανασύνδεσης των ηλεκτρικών φορέων ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, σε P εμφυτευμένο Si για διάφορες τιμές της συγκέντρωσης του δότη  $N_d$ .

τις προηγούμενες περιπτώσεις, που οφείλεται στην μετρήσιμη μεταβολή της ταχύτητας επανασύνδεσης (Εικ. 6.6) και στην περαιτέρω μείωση στην τιμή του  $\tau$  λόγω της υποβοηθούμενης επανασύνδεσης στην παρουσία μεγαλύτερων πυκνοτήτων των καταστάσεων πρόσμειξης. Είναι ενδιαφέρον να σημειώσουμε την αναστροφή στο πλάτος του σήματος για  $N_d = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  στις χαμηλές θερμοκρασίες. Αυτό συμβαίνει λόγω της απότομης πτώσης της τιμής του  $D_E$  σε αυτή την περίπτωση, βλ. Εικ. 6.13. Το φαινόμενο αυτό υποβοηθά τον εντοπισμό των ελευθέρων φορέων κοντά στην επιφάνεια, αυξάνοντας έτσι την ενεργό πυκνότητα (και το πλάτος του σήματος) σε σύγκριση με τις προηγούμενες περιπτώσεις. Σε ψηλές θερμοκρασίες η απότομη πτώση του χρόνου ζωής είναι υπεύθυνη για την "διασταύρωση" των περιπτώσεων  $N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  και  $N_d = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Τέλος, ο πολύ μικρός χρόνος ζωής που σχετίζεται με την εκφυλισμένη περίπτωση εμπλουτισμού ( $N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) γενικά ελαττώνει το μέγεθος του σήματος ουσιαστικά, αλλά όχι και μονότονα. Η ισχυρή θερμοηλεκτρονική σύζευξη και η ταχύτητα επανασύνδεσης προκαλούν μια απότομη πτώση του σήματος στις χαμηλές θερμοκρασίες, οι οποία όμως αντιστρέφεται λόγω:

1. της αυξανόμενης, θερμικά δημιουργούμενης, συγκέντρωσης φορέων από τις εκφυλισμένες στάθμες στην ζώνη αγωγιμότητας
2. της αυξανόμενης τιμής του  $D_E$
3. της αύξησης του συντελεστή οπτικής απορρόφησης.

Σε πολύ ψηλές θερμοκρασίες, ο σχεδόν μεταλλικός χαρακτήρας του ημιαγωγού προκαλεί τον κορεσμό του σήματος, παρόλη την πολύ αποδοτική θερμική επανασύνδεση. Η επίδραση



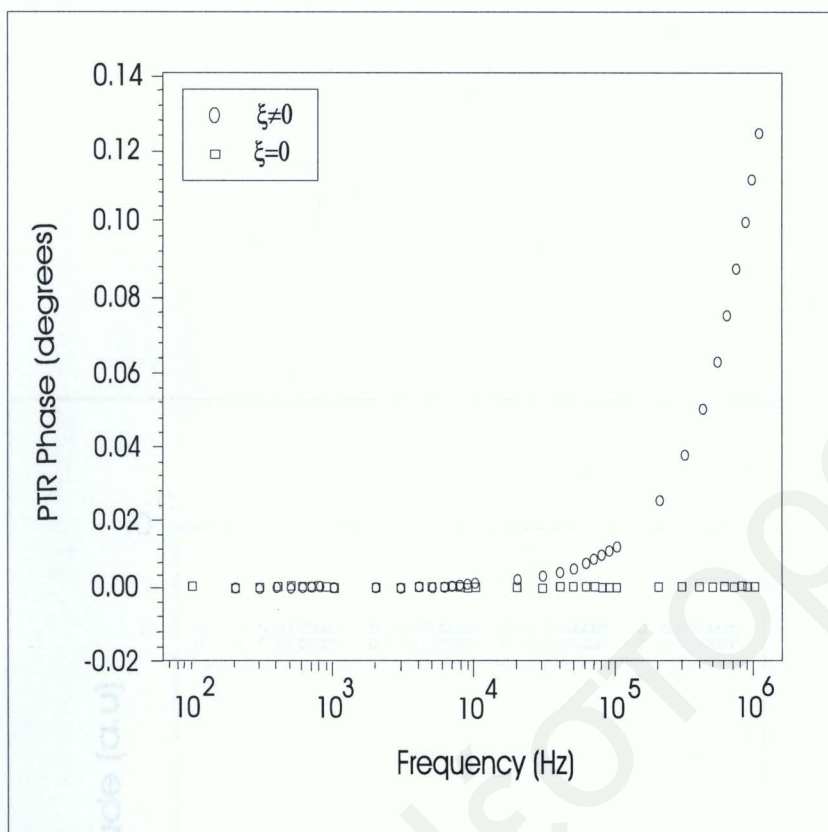


**Εικόνα 6.7:** Το πλάτος PTR, στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $T = 1200K$ ,  $W = 1.5\mu m$  και  $N_d = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$ .

του θερμοηλεκτρονικού όρου σύζευξης  $\xi(T)$  στην εκφυλισμένη αυτή περίπτωση φαίνεται στις Εικ. 6.15-16. Εκτός από την συνολική μείωση του πλάτους του σήματος λόγω της υποβοηθούμενης θερμικής επανασύνδεσης στην περίπτωση  $\xi(T) \neq 0$  τα αντίπαλα φαινόμενα της θερμικής φθοράς και θερμικής γένεσης δημιουργούν τα ακρότατα στη φάση και στο πλάτος στη περιοχή  $T \leq 800K$ . Σε πολύ ψηλές θερμοκρασίες η "διασταύρωση" του πλάτους οφείλεται στην εκφυλισμένη κατάσταση του υλικού: ο παράγοντας σύζευξης αυξάνει την πυκνότητα των διεγερμένων φορέων, οι οποίοι είναι διαθέσιμοι στην ζώνη αγωγιμότητας ως ελεύθεροι φορείς, με αποτέλεσμα την αύξηση του πλάτους που φαίνεται στις Εικ. 6.15 και 6.16. Αυτό φανερώνει ότι η θερμοηλεκτρονική σύζευξη μπορεί να αυξήσει το επίπεδο του φωτοθερμικού σήματος σε πολύ ψηλές θερμοκρασίες σε σύγκριση με την αποσυζευγμένη περίπτωση.

## 6.4 Συμπεράσματα

Σε αυτή την εργασία παρουσιάστηκε ένα θεωρητικό μοντέλο για την συμπεριφορά των πλήρως συζευγμένων εξισώσεων μεταφοράς της θερμότητας και της πυκνότητας πλάσματος. Για πρώτη φορά η θεωρία αυτή βοήθησε την μελέτη της επίδρασης του όρου θερμοηλεκτρονικής σύζευξης στην μεταφορά του κύματος πλάσματος ως συνάρτηση της

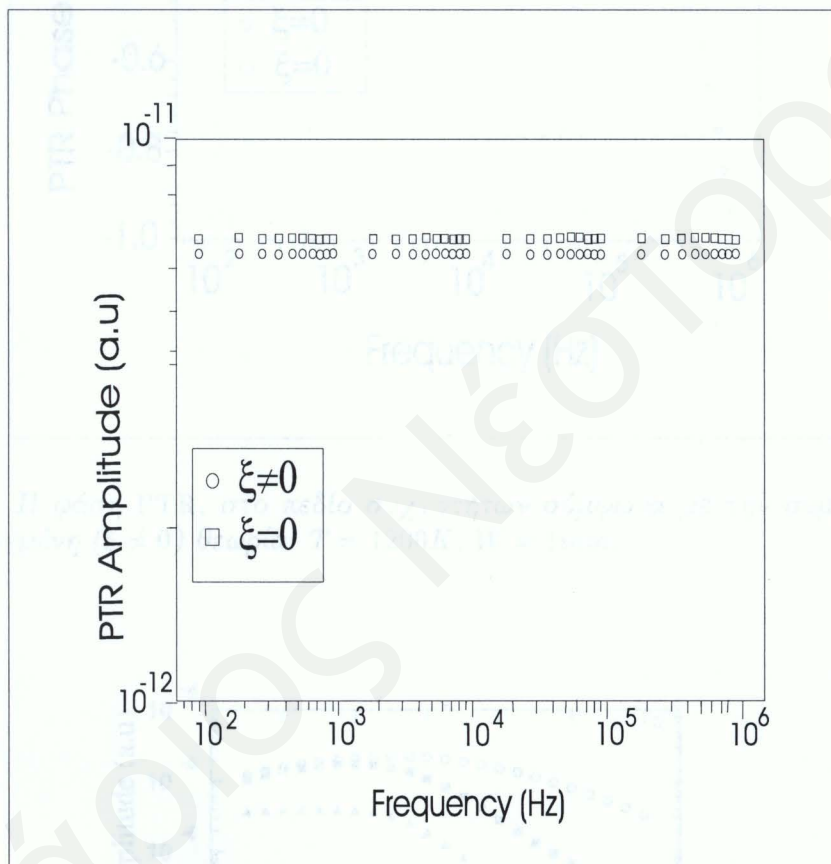


**Εικόνα 6.8:** Η φάση PTR, στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $T = 1200K$ ,  $W = 1.5\mu m$  και  $N_d = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$ .

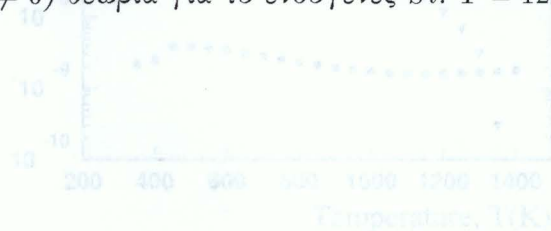
θερμοκρασίας και της πυκνότητας προσμείξεων, στην περιοχή όπου η ανίσωση των Vasil'ev και Sandomirskii παραβιάζεται. Η ανάλυση έγινε αγνοώντας την θερμική συνιστώσα του IR PTR σήματος, που είναι πραγματικά αμελητέα στην περίπτωση που το υλικό διατηρεί την κρυσταλλική του τάξη. Βρέθηκε πως ο όρος σύζευξης επηρεάζει αρνητικά το πλάτος του σήματος, εκτός από την περίπτωση του εντελώς εκφυλισμένου κύματος πλάσματος σε πολύ μεγάλες θερμοκρασίες και πρέπει να λαμβάνεται υπόψη για υπολογισμούς των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων των ημιαγωγών.

Εικόνα 6.9: Η φάση PTR, στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία για το υλικό γαλιό ΣΙ:  $T = 1200K$ ,  $W = 1.5\mu m$ .

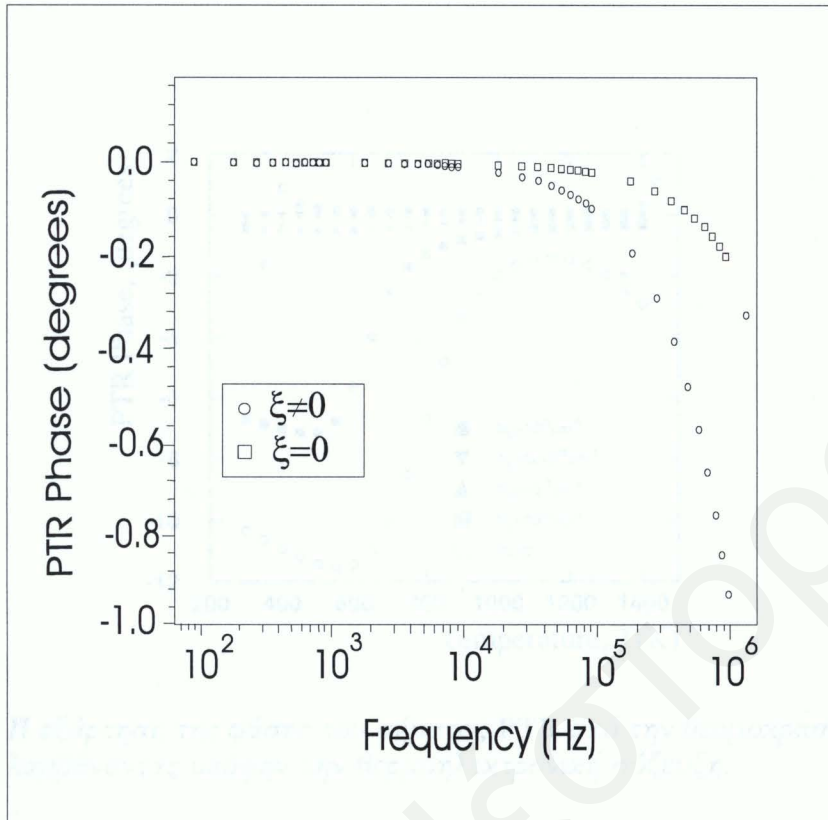




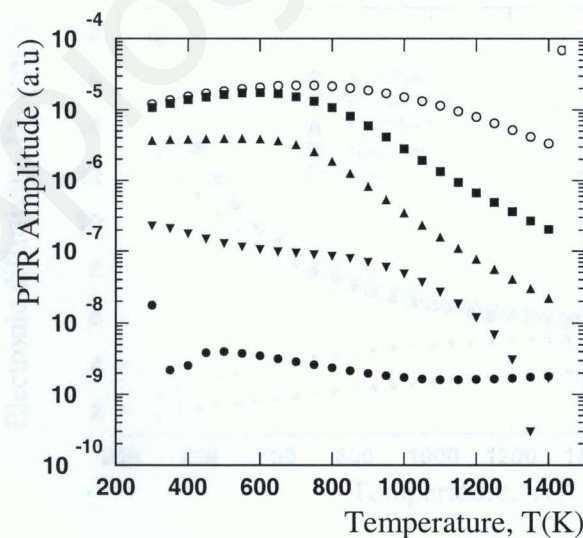
Εικόνα 6.9: Το πλάτος PTR, στο πεδίο συχνοτήτων σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία για το ενδογενές Si:  $T = 1200K$ ,  $W = 1mm$ .



Εικόνα 6.11: Η εξάρτηση των πλάτους των σημάτων PTR από την θερμοκρασία για διάφορες τιμές του  $\xi$ , αυξάνοντας από την θερμοηλεκτρική σέλιουζ. Στην πιο πάνω προσομοίωση:  $W = 1.5 \mu m$  και  $f = 100^4 Hz$ .

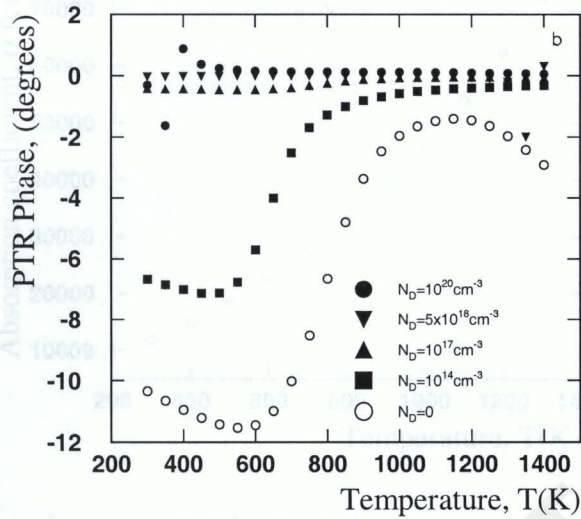


Εικόνα 6.10: Η φάση PTR, στο πεδίο συχνοτήτων σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $T = 1200K$ ,  $W = 1mm$ .

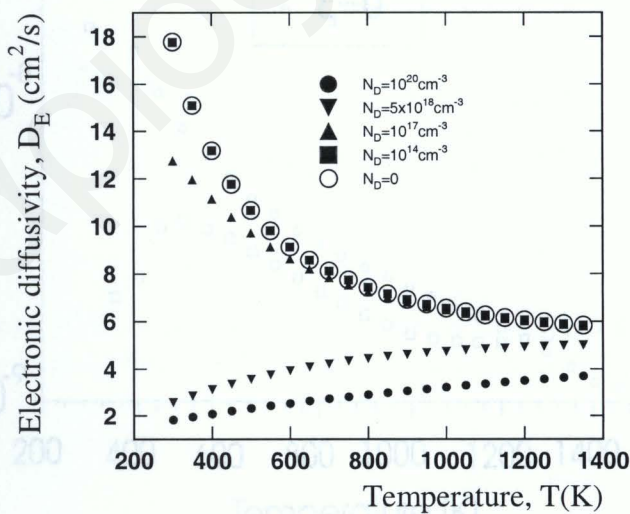


Εικόνα 6.11: Η εξάρτηση του πλάτους του σήματος PTR από την θερμοκρασία για διάφορες τιμές του  $N_d$ , λαμβάνοντας υπόψη την θερμοηλεκτρονική σύζευξη. Στην πιο πάνω προσομοίωση:  $W = 1.5 \mu m$  και  $f = 100 kHz$ .

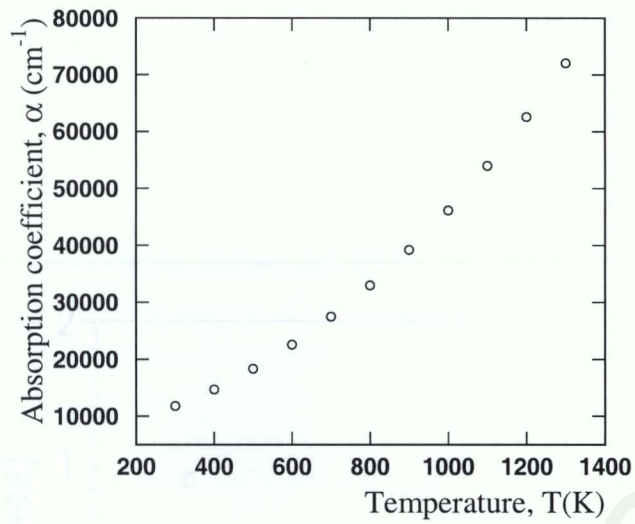




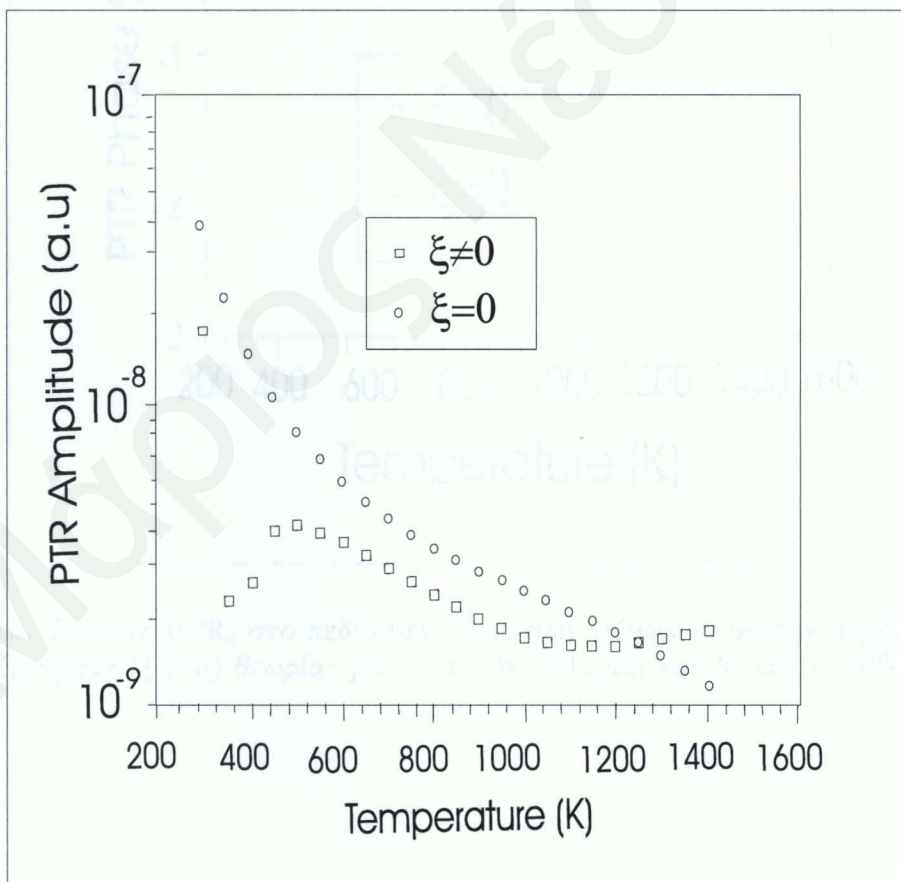
Εικόνα 6.12: Η εξάρτηση της φάσης του σήματος PTR από την θερμοκρασία για διάφορες τιμές του  $N_d$ , λαμβάνοντας υπόψη την θερμοηλεκτρονική σύζευξη.



Εικόνα 6.13: Θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή ηλεκτρονικής διάχυσης, με την συγκέντρωση του δότη  $N_d$  ως παράμετρο.

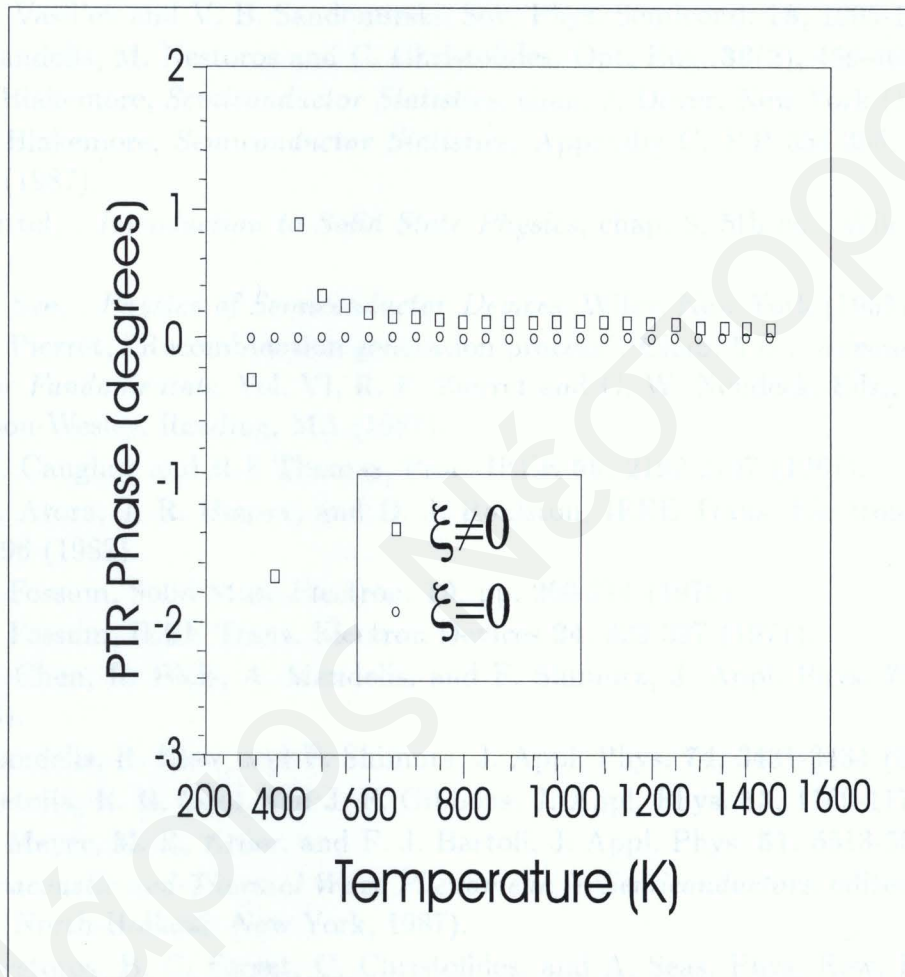


Εικόνα 6.14: Ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας.



Εικόνα 6.15: Το πλάτος PTR, στο πεδίο θερμοκρασιών σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $f = 1\text{kHz}$ ,  $W = 1.5\mu\text{m}$  και  $N_d = 1 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .





Εικόνα 6.16: Η φάση PTR, στο πεδίο θερμοκρασιών σύμφωνα με την συμβατική ( $\xi = 0$ ) και την συζευγμένη ( $\xi \neq 0$ ) θεωρία:  $f = 1kHz$ ,  $W = 1.5\mu m$  και  $N_d = 1 \times 10^{20}cm^{-3}$ .

[19] B. G. Prasad, "Observation des Propriétés de Transport des Électrons de Silicium par les Méthodes Diélectriques", *Ann. Phys. (Paris)*, Pierre et Marie Curie, Paris (1972).

[20] D. Bimberg and A. P. Bakula, "Phonon-mediated localization of solute ions: electrical properties", *Fluorimeter Laser-games of Solids and Fluids*, editor S. S. Kell, pp. 35-79, Academic, New York (1985).

[21] S. J. Camard, M. J. Somerschal, J. Hillier, *Nature Sci Rep*, 10, 166-172 (2021).

[22] A. Sushkov, R. Jen, and A. Manabe, *Solid State Electron*, 41, pp. 581-587 (1997).

## Βιβλιογραφία

- [1] A. N. Vasil'ev and V. B. Sandomirski, *Sov. Phys. Semicond.* **18**, 1095-1099 (1984).
- [2] A. Mandelis, M. Nestoros and C. Christofides, *Opt. Eng.* **36**(2), 459-468 (1997).
- [3] J. S. Blakemore, *Semiconductor Statistics*, chap. 2, Dover, New York (1987).
- [4] J. S. Blakemore, *Semiconductor Statistics*, Appendix C. P.P 354-365, Dover, New York (1987).
- [5] C. Kittel, . *Introduction to Solid State Physics*, chap. 8, 5th ed., Wiley, New York (1984).
- [6] S. M. Sze, . *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, New York (1965).
- [7] R. F. Pierret, "Recombination generation process", Chap. 5 in . *Advanced Semiconductor Fundamentals*, Vol. VI, R. F. Pierret and G. W. Neudeck, Eds., pp. 183-193, Adisson-Wesley, Reading, MA (1987).
- [8] D. M. Caughey and R.F Thomas, *Proc. IEEE* **55**, 2192-2197 (1967).
- [9] D. N. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston, *IEEE Trans. Electron Devices* **29**, 292-296 (1982).
- [10] J. G. Fossum, *Solid State Electron.* **19**, pp. 269-274 (1976).
- [11] J. G. Fossum, *IEEE Trans. Electron Devices* **24**, 322-327 (1977).
- [12] Z. H. Chen, R. Bleis, A. Mandelis, and F. Shimura, *J. Appl. Phys.* **73**, 5043-5048 (1993).
- [13] A. Mandelis, R. Bleis, and F. Shimura, *J. Appl. Phys.* **74**, 3431-3434 (1993).
- [14] A. Lietoila, R. B. Gold, and J. F. Gibbons, *J. Appl. Phys.* **53**, 1169-1172 (1982).
- [15] J. R. Meyer, M. R. Kruer, and F. J. Bartoli, *J. Appl. Phys.* **51**, 5513-5522 (1980).
- [16] *Photoacoustic and Thermal Wave Phenomena in Semiconductors*, edited by A. Mandelis (North-Holland, New York, 1987).
- [17] M. Nestoros, B. C. Forget, C. Christofides, and A. Seas, *Phys. Rev. B* **51**, 14115-14123 (1995).
- [18] S. J. Sheard, "Photothermal radiometric microscopy", Ph. D Thesis, University College, London (1987).
- [19] B. C. Forget, "Characterisation des Proprietes de Transport Electronique du Silicium par des Methodes Photothermiques", chap. 3, Ph. D Thesis, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris (1993).
- [20] D. Fournier and A. C. Boccara, "Photothermal investigations of solids: basic physical principles." . *Photoacoustic Investigations of Solids and Fluids*, editor J. A. Sell, pp. 35-79, Academic, New York (1989).
- [21] S.J. Sheard, M.G. Somekh and T. Hiller, *Mater. Sci. Eng. B5*, 101-105 (1990).
- [22] A. Salnick, C. Jean, and A. Mandelis, *Solid. State. Electron.*, **41**, pp. 591-597 (1997).



## Κεφάλαιο 7

### Πρακτικές εφαρμογές της τεχνικής *PTR*.

### Θερμοφυσικός χαρακτηρισμός ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών.

#### 7.1 Ανανεώσιμες μορφές ενέργειας και ηλιακές επιλεκτικές επιφάνειες.

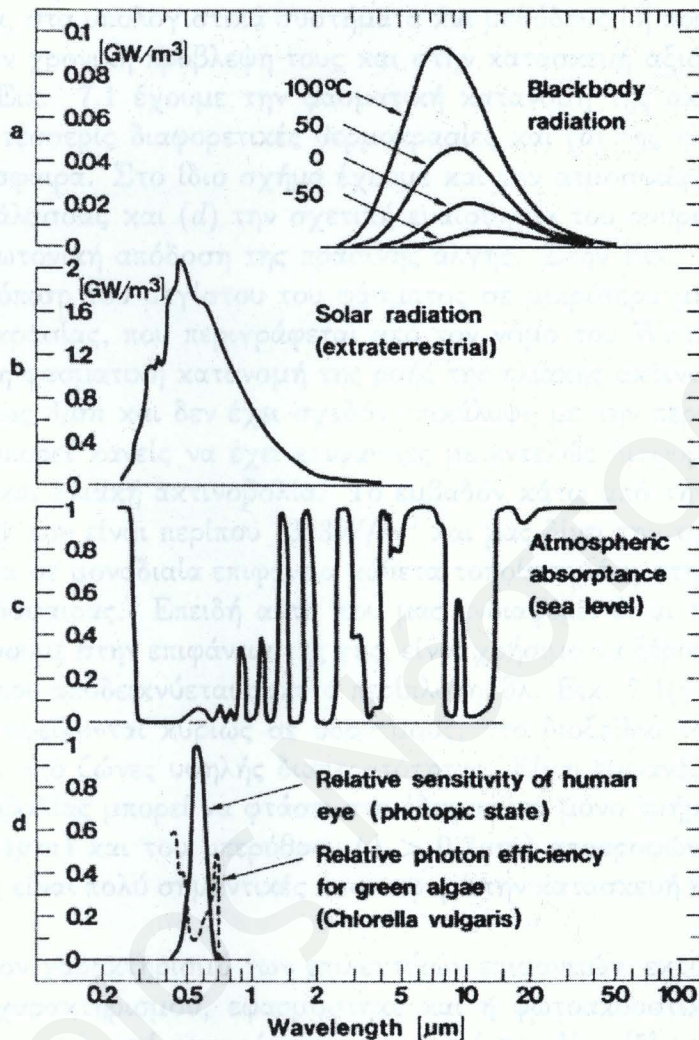
Οι στατιστικές προβλέψεις αναφέρουν πως οι πρωτογενείς ενεργειακές ανάγκες θα διπλασιαστούν μέχρι το 2020 και περισσότερο από το 80% του πληθυσμού της γής θα ζεί σε αναπτυσσόμενες χώρες [1]. Η περιορισμένη ποσότητα ορυκτών καυσίμων και οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις που έχει η καύση τους, έχουν αυξήσει τα τελευταία χρόνια το ενδιαφέρον για τις ανανεώσιμες μορφές ενέργειας. Ο όρος ανανεώσιμες πηγές χρησιμοποιείται γιατί οι πηγές αυτές δεν εξαντλούνται όπως οι κλασσικές πηγές (π.χ ορυκτά καύσιμα), αλλά το δυναμικό τους ανανεώνεται διαχρονικά. Στην κατηγορία αυτή ανήκουν :

1. Η ηλιακή ενέργεια που χρησιμοποιείται: (α) στην παραγωγή ηλεκτρικού ρεύματος μέσω φωτοβολταϊκών στοιχείων και (β) στην απευθείας θέρμανση ρευστών.
2. Η ενέργεια βιομάζας που αποτελεί προϊόν καύσης (φυτά, ξυλεία).
3. Η αιολική ενέργεια που αξιοποιεί την κινητική ενέργεια των αερίων μαζών.
4. Η ωκεάνια και υδροηλεκτρική ενέργεια που προέρχεται από την κίνηση των κυμάτων και τις υδατοπτώσεις αντίστοιχα.

Στην πραγματικότητα όλες οι μορφές ανανεώσιμης ενέργειας έχουν σαν πηγή τους τον ήλιο. Τα φυτά φωτοσυνθέτουν με την βοήθεια του ηλιακού φωτός, και οι κινήσεις των ωκεάνιων κυμάτων και των αερίων μαζών οφείλονται στις διαφορές θερμοκρασίας στην ατμόσφαιρα και στους ωκεανούς, που προέρχονται από την ηλιακή θέρμανση.

Στη ευρύτερη περιοχή της ανατολικής μεσογείου η ηλιακή ενέργεια αξιοποιείται σε μεγάλο βαθμό στην θέρμανση νερού με την χρήση των γνωστών μας ηλιακών συλλεκτών και σε μικρότερη έκταση στην παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας και την αφαλάτωση. Συγκεκριμένα για την Κύπρο, η αξιοποιήσιμη ηλιακή ενέργεια αποτελεί το 5% του ενεργειακού της προϋπολογισμού. Αυτό το ποσοστό αντιπροσωπεύει περίπου ένα ποσό των \$10,000,000 τον χρόνο. Μια βελτίωση της απόδοσης των ηλιακών συστημάτων θα οδηγούσε ασφαλώς σε περαιτέρω εξοικονόμηση.

Η απαίτηση για αποδοτικότερη αξιοποίηση της ηλιακής ενέργειας οδήγησε στην ιδέα του επιστημονικού 'σχεδιασμού' των ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών.



Εικόνα 7.1: (a) Φάσμα ακτινοβολίας μέλανος σώματος για τέσσερις θερμοκρασίες, (b) φάσμα ηλιακής ακτινοβολίας έξω από την ατμόσφαιρα, (c) φάσμα ατμοσφαιρικής απορρόφησης, (d) φάσμα της σχετικής ευαισθησίας του ανθρώπινου ματιού και της φωτονικής απόδοσης της πράσινης άλγης.

Ως ηλιακές επιλεκτικές επιφάνειες [2, 3, 4] χαρακτηρίζονται εκείνες οι επιφάνειες των οποίων οι οπτικές ιδιότητες (π.χ απορροφητικότητα, ανακλαστικότητα) παρουσιάζουν μια επιλεκτική συμπεριφορά σε σχέση με το ηλιακό φως. Έτσι έχουμε δυο μεγάλες κατηγορίες ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών: τις απορροφητικές επιφάνειες και τις επιφάνειες εκπομπής. Η κατασκευή τέτοιων επιφανειών προϋποθέτει την γνώση των οπτικών ιδιοτήτων:

1. της ατμόσφαιρας η οποία παρεμβάλλεται ανάμεσα στην πηγή της ενέργειας (τον ήλιο) και την επιλεκτική επιφάνεια,
2. της πηγής



3. και φυσικά των οπτικών ιδιοτήτων των υλικών από την οποία θα κατασκευαστεί η επιλεκτική επιφάνεια.

Για τις οπτικές ιδιότητες των δυο πρώτων παραγόντων του ζητήματος, η φυσική έχει δώσει τις απαντήσεις εδώ και καιρό, αν και σημαντικές βελτιώσεις έχουν γίνει με την πρόοδο στην μετεωρολογία, στα υπολογιστικά συστήματα και μεθόδους [4] που έχουν βοηθήσει σε μεγάλο βαθμό στην χρονική πρόβλεψη τους και στην κατασκευή αξιόπιστων θεωρητικών μοντέλων. Στην Εικ. 7.1 έχουμε την φασματική κατανομή της ακτινοβολίας μέλανος σώματος: (a) για τέσσερις διαφορετικές θερμοκρασίες και (b) της ηλιακής ακτινοβολίας έξω από την ατμόσφαιρα. Στο ίδιο σχήμα έχουμε και την ατμοσφαιρική απορρόφηση (c) στο επίπεδο της θάλασσας και (d) την σχετική ευαισθησία του ανθρώπινου ματιού όπως και την σχετική φωτονική απόδοση της πράσινης άλγης. Στην Εικ. 7.1(a) παρατηρούμε την γνωστή μετατόπιση του μεγίστου του φάσματος σε μικρότερα μήκη κύματος με την αύξηση της θερμοκρασίας, που περιγράφεται από τον νόμο του Wien. Στην Εικ. 7.1(b) παρατηρούμε πως η φασματική κατανομή της ροής της ηλιακής ακτινοβολίας περιορίζεται στο διάστημα 0.2 ως  $3\mu\text{m}$  και δεν έχει σχεδόν επικάλυψη με την περιοχή θερμικής ακτινοβολίας. Έτσι μπορεί κανείς να έχει επιφάνειες με εντελώς διαφορετικές ιδιότητες ως προς την θερμική και ηλιακή ακτινοβολία. Το εμβαδόν κάτω από την καμπύλη μας δίνει την ηλιακή σταθερά που είναι περίπου  $1353\text{W}/\text{m}^2$  και μας δίνει την τιμή της ισχύος ακτινοβολίας που πέφτει σε μοναδιαία επιφάνεια κάθετα τοποθετημένη στην ροή ακτινοβολίας, στο όριο της ατμόσφαιρας. Επειδή αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η ροή ηλιακής ακτινοβολίας που παίρνουμε στην επιφάνεια της γής, είναι χρήσιμο να ξέρουμε την απορρόφηση της ατμόσφαιρας, που αποδεικνύεται αρκετά περίπλοκη [βλ. Εικ. 7.1(γ)]. Οι ζώνες υψηλής απορρόφησης που οφείλονται κυρίως σε υδρατμούς, στο διοξείδιο του άνθρακα και στο όζον, διακόπτονται από ζώνες υψηλής διαπερατότητας. Είναι εμφανές πως η πλειονότητα της ηλιακής ακτινοβολίας μπορεί να φτάσει στο έδαφος και μόνο τμήματα του υπερύθρου φάσματος ( $\lambda < 0.4\mu\text{m}$ ) και του υπερύθρου ( $\lambda > 0.7\mu\text{m}$ ) απορροφώνται ισχυρά. Οι πιο πάνω παρατηρήσεις είναι πολύ σημαντικές όσον αφορά την κατασκευή ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών.

Όσον αφορά τον χαρακτηρισμό των επιλεκτικών επιφανειών, εκτός από τις κλασσικά οπτικές τεχνικές χαρακτηρισμού, εφαρμόστηκε και η φωτοακουστική μέθοδος για τον προσδιορισμό του συντελεστή απορρόφησης τους από τον Yun [5] και τον προσδιορισμό της απόδοσης κάποιων άλλων από τον Cahen [6]. Οι εργασίες αυτές είχαν ως πρόδρομο την πρόταση [7] των McClelland και Kinsley για χρήση του φωτοακουστικού φαινομένου για χαρακτηρισμό της απόδοσης των ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών. Μια ενδιαφέρουσα ενημέρωση για τον φωτοθερμικό χαρακτηρισμό διαφόρων τύπων λεπτών επιστρωμάτων εκδόθηκε από τους Busse και Walther [8]. Η τεχνική *PTR* χρησιμοποιήθηκε στον χαρακτηρισμό ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών το 1997-98 [9, 10] και παρουσιάζεται παρακάτω.

### 7.1.1 Επιλεκτικές επιφάνειες για σκοπούς παθητικής ψύξης.

Η ατμόσφαιρα της γής είναι διαπερατή σε μεγάλο βαθμό στη φασματική περιοχή μηκών κύματος 8 –  $13\mu\text{m}$  (Εικ. 7.1(c), γνωστή και ως "ατμοσφαιρικό παράθυρο". Έτσι είναι δυνατή η ανταλλαγή θερμικής ενέργειας μεταξύ μιας επιφάνειας που έχει μεγάλο συντελεστή εκπομπής στο "παράθυρο" αυτό και του διαστήματος. Ως αποτέλεσμα έχουμε την πτώση της θερμοκρασίας της επιφάνειας, κάτω από αυτή του περιβάλλοντος. Μια σειρά από κατάλληλα υλικά είναι στρώματα οξειδίων κεραμικών ( $\text{MgO}$ ), κυψελίδες αερίων



Δείγμα	Πάχος ( $\text{\AA}$ )	Απορροφητικότητα
MB107	1000	0.37
MB106	1700	0.46
MB94	3000	0.62
MB105	5000	0.73

**Πίνακας 7.1:** Πάχος και απορροφητικότητα των λεπτών φίλμ νιτριδίου του πυριτίου στο μήκος κύματος της δέσμης διέγερσης.

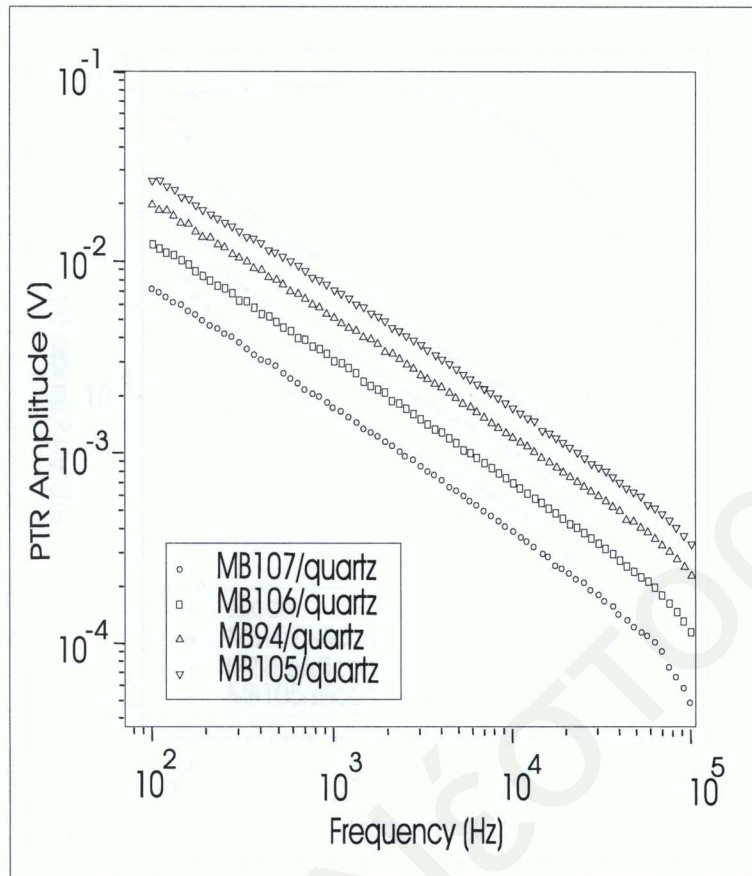
( $\text{NH}_3, \text{C}_2\text{H}_4$ ) που έχουν ως υπόστρωμα κάποιο μέταλλο, και λεπτά φίλμ οξειδίων του  $\text{Si}$  σε μεταλλικά υποστρώματα [2, 4]. Στην εργασία αυτή χαρακτηρίστηκαν λεπτά στρώματα νιτριδίου του πυριτίου,  $\text{Si}_x\text{N}_y$ , όπου  $x$  και  $y$  οι επί τοις εκατό περιεκτικότητες σε  $\text{Si}$  και  $\text{N}$  αντίστοιχα.

Τα λεπτά φίλμ νιτριδίου του πυριτίου, με διαφορετικά πάχη εναποτέθηκαν με διαδικασία  $\text{RF}$  sputtering από υψηλής καθαρότητας νιτρίδιο του πυριτίου ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), σε ατμόσφαιρα  $\text{Ar}$  σε πίεση  $3 \times 10^{-3} \text{ Torr}$ . Η εναπομείνουσα πίεση στον θάλαμο εναπόθεσης ήταν  $3 \times 10^{-7} \text{ Torr}$ . Η θερμοκρασία του υποστρώματος ήταν  $100^\circ\text{C}$ . Τα φίλμ εναποτέθηκαν σε υποστρώματα  $\text{Si}$ , τύπου  $n$ ,  $< 100 >$ , ( $\rho = 10 - 30 \text{ } \Omega\text{cm}$ ) με πάχος  $200 \text{ } \mu\text{m}$ , και σε υποστρώματα χαλαζία (πάχος  $500 \text{ } \mu\text{m}$ ). Πριν την εισαγωγή τους στον θάλαμο εναπόθεσης τα υποστρώματα πυριτίου καθαρίστηκαν με  $\text{HF}$  (5%), για να αφαιρεθούν τυχόν οξειδία που δημιουργήθηκαν στην επιφάνεια. Τα πάχη των φίλμ μετρήθηκαν με προφιλόμετρο και οι τιμές τους εμφανίζονται στον Πίνακα 7.1.

Ο χαρακτηρισμός των δειγμάτων έγινε με την χρήση της τυπικής πειραματικής διάταξης  $\text{PTR}$  που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 3. Η δέσμη διέγερσης ήταν από ένα laser  $\text{Ar} - \text{Kr}$ , σε συνδυασμένο μήκος κύματος  $488$  και  $514.5 \text{ nm}$ . Η ισχύς της δέσμης στην επιφάνεια του δείγματος ήταν  $180 \text{ mW}$  και η διάμετρος της δέσμης  $3 \text{ mm}$ . Το πλάτος  $\text{PTR}$  ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για τα δείγματα νιτριδίου του πυριτίου σε χαλαζία ( $\text{Si}_x\text{N}_y/\text{quartz}$ ) παρουσιάζεται στην Εικ. 7.1. Σε όλες τις περιπτώσεις το πλάτος έχει καθαρά θερμική συμπεριφορά [11, 12] κάτι που είναι προφανές από την κλίση των γραμμών. Το γεγονός πως οι γραμμές είναι παράλληλες δείχνει πως οι φυσικές ιδιότητες των δειγμάτων  $\text{Si}_x\text{N}_y/\text{quartz}$  είναι οι ίδιες. Ο καθαρά θερμικός χαρακτήρας του σήματος είναι μια ένδειξη για την έλλειψη ηλεκτρικής δραστηριότητας των στρώματων  $\text{Si}_x\text{N}_y$ , εφόσον ο χαλαζίας είναι μονωτής.

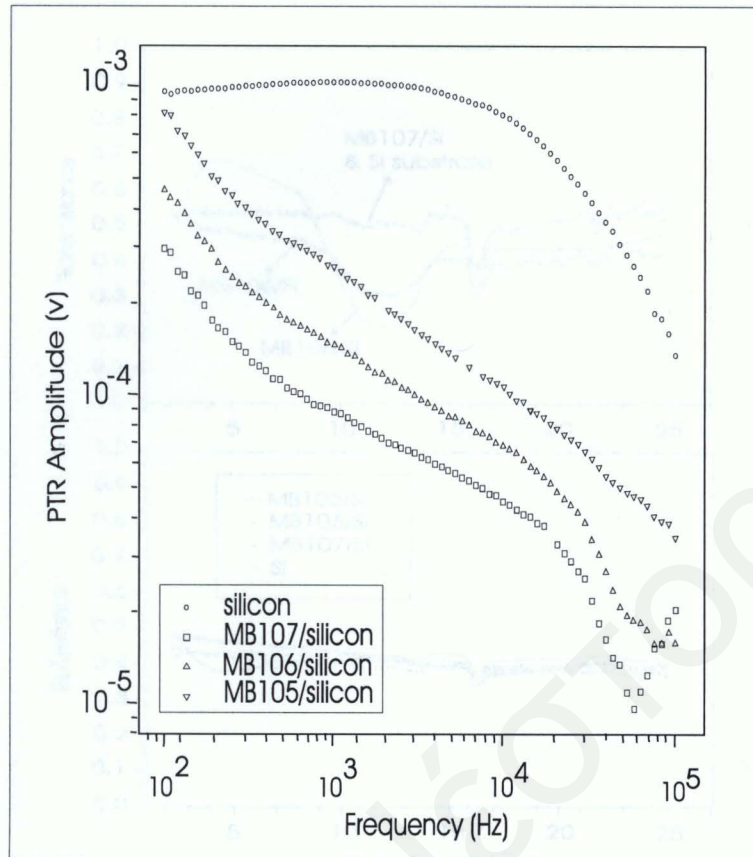
Το δείγμα με το παχύτερο φίλμ απορροφά μεγαλύτερο ποσό της προσπίπτουσας οπτικής ενέργειας και γι' αυτό δημιουργεί ισχυρότερο πεδίο θερμοκρασίας, το οποίο έχει ως αποτέλεσμα την ισχυρή εκπομπή υπέρυθρης ( $\text{IR}$ ) ακτινοβολίας. Για τον πιο πάνω λόγο το δείγμα  $\text{MB105}/\text{quartz}$  δείνει το πιο ψηλό σήμα ακολουθούμενο κατά σειρά μεγέθους από τα  $\text{MB94}/\text{quartz}$ ,  $\text{MB106}/\text{quartz}$  και  $\text{MB107}/\text{quartz}$ . Το φωτοθερμικό σήμα από το υπόστρωμα ήταν στο όριο του θορύβου. Από τις φασματοσκοπικές μετρήσεις που πραγματοποιήθηκαν η διαπερατότητα του χαλαζία ήταν πάνω από 90%. Έτσι αφού η απορρόφηση είναι μηδαμινή δεν περιμένουμε καθόλου σήμα  $\text{PTR}$  από τον χαλαζία. Η απορ-





**Εικόνα 7.2:** Το πλάτος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για τα δείγματα  $Si_xN_y/quartz$ .

ροφητικότητα των φίλμ  $Si_xN_y$  στο μήκος κύματος του *laser* βρέθηκε να κυμαίνεται από 0.37 (*MB107*) έως 0.73 (*MB105*). Οι απορροφητικότητες των δειγμάτων παρουσιάζονται επίσης στον Πίνακα 7. 1. Στην Εικ. 7.2 έχουμε το πλάτος του σήματος για τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$  και για το υπόστρωμα πυριτίου, ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης. Το υπόστρωμα πυριτίου με την χαρακτηριστική συμπεριφορά του, αποδίδει το μεγαλύτερο σήμα. Η συμπεριφορά του υποστρώματος είναι καθαρά ηλεκτρονική και έχει εξηγηθεί πλήρως με βάση την διαμορφωμένη πυκνότητα πλάσματος, λόγω της απορρόφησης των φωτονίων της δέσμης διέγερσης. Το δείγμα *MB105/Si* αποδίδει και πάλιν το ισχυρότερο σήμα εφόσον διαθέτει το παχύτερο φίλμ. Η συμπεριφορά του φωτοθερμικού σήματος για τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$  είναι αρκετά διαφορετική από την συμπεριφορά αυτών που βρίσκονται σε υπόστρωμα χαλαζία. Το σήμα είναι ένας συνδυασμός της ηλεκτρονικής και της θερμικής συνεισφοράς, με την ηλεκτρονική συνεισφορά να είναι πιο εμφανής στην περιοχή υψηλών συχνοτήτων ( $f > 10^3 Hz$ ). Η πηγή της ηλεκτρονικής συνεισφοράς είναι χωρίς αμφιβολία το υπόστρωμα πυριτίου. Η συνεισφορά των φωτοδιεγερμένων ηλεκτρικών φορέων επισιιάζεται λόγω της μεγάλης απορρόφησης των προσπιπτόντων φωτονίων από τα φίλμ  $Si_xN_y$ , και επειδή μέρος της εκπεμπόμενης από το *Si* ακτινοβολίας *IR* απορροφάται από τα πιο πάνω στρώματα. Η τελευταία υπόθεση βασίζεται στην οπτική συμπεριφορά των δειγμάτων στο υπέρυθρο φάσμα, όπως φαίνεται στην Εικ. 7.4. Τα πιο πάνω σχήματα

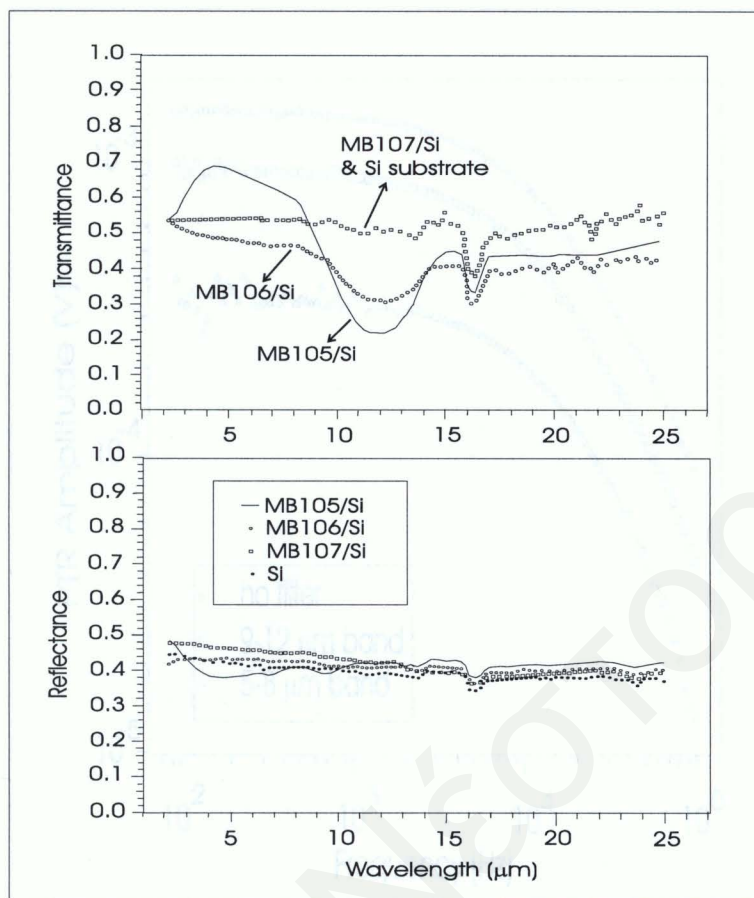


**Εικόνα 7.3:** Το πλάτος PTR ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης για τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$ .

παρουσιάζουν την διαπερατότητα και την ανακλαστικότητα των δειγμάτων  $Si_xN_y/quartz$  στο υπέρυθρο φάσμα και λήφθηκαν με την χρήση συσκευής FTIR. Μια ζώνη απορρόφησης στη περιοχή 9 – 12 $\mu m$  είναι εμφανής για τα φιλμ  $Si_xN_y$ . Τα αποτελέσματα αυτά είναι σε αντίθεση με τα δεδομένα FTIR για τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$  τα οποία δείχνουν μόνο μια ασθενική απορρόφηση στην περιοχή 2 – 5 $\mu m$ .

Μια φασματοσκοπική ανάλυση του σήματος PTR που έγινε δυνατή με την τοποθέτηση φίλτρων μπροστά από τον ανιχνευτή παρουσιάζεται στις Εικ. 7.5, για το  $Si$ . Η βασική συνεισφορά στο φωτοθερμικό σήμα βρίσκεται στο διάστημα 9-12  $\mu m$  ενώ ένα μικρότερο ποσοστό στο διάστημα 5-8 $\mu m$ . Παρόμοιες μετρήσεις έγιναν και για το δείγμα MB105/Si και το αντίστοιχο σήμα παρουσιάζεται στην Εικ. 7.6. Παρατηρούμε ξανά πως η μεγαλύτερη συνεισφορά στο σήμα βρίσκεται στο διάστημα 9-12 $\mu m$  ενώ μόνο μια μικρή συνεισφορά βρίσκεται στο διάστημα 5-8 $\mu m$ . Για τις πιο πάνω μετρήσεις λήφθηκε υπόψη η φασματική απόκριση του ανιχνευτή. Μια παρόμοια μελέτη έγινε και για το δείγμα MB105/quartz και παρουσιάζεται στην Εικ. 7.7. Η συνεισφορά στο παράθυρο 9-12 $\mu m$  είναι το 60% του σήματος όπως υπολογίστηκε ενώ το υπόλοιπο 40% κατανέμεται μεταξύ 5-8 $\mu m$ . Είναι σημαντικό να αναφέρουμε πως δεν εμφανίζεται καμιά ηλεκτρονική συνεισφορά στα προαναφερθέντα φασματικά παράθυρα.



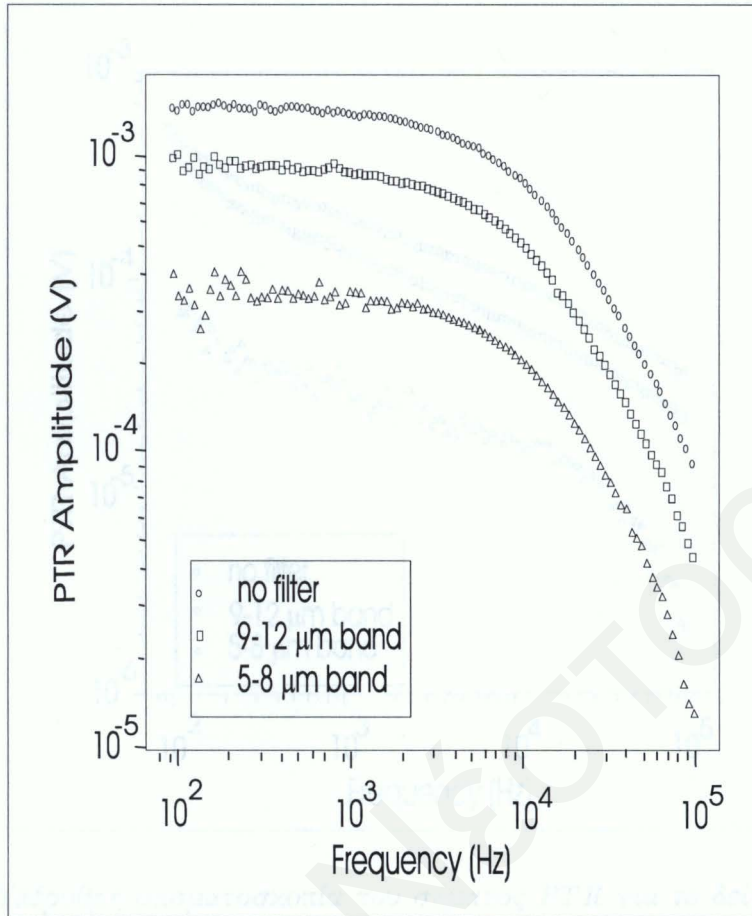


Εικόνα 7.4: Οι συντελεστές διάβασης και ανάκλασης στο υπέρυθρο φάσμα, για τα δείγματα  $Si_xN_y/quartz$ .

Για σκοπούς σύγκρισης, τα αποτελέσματα των μετρήσεων *PTIR* παρουσιάζονται κατά ζεύγη,  $Si_xN_y/quartz$  και  $Si_xN_y/Si$ , στην Εικ. 7.8(α)-(γ). Η ηλεκτρονική συνεισφορά αν και ασθενής, είναι εμφανής για όλα τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$ . Ακόμα η ηλεκτρονική συνεισφορά του δείγματος *MB105/Si* είναι πιο εμφανής λόγω του μεγάλου αριθμού φωτονίων που φτάνουν το υπόστρωμα πυριτίου, αφού το φιλμ είναι αρκετά λεπτό, έτσι ώστε να απορροφά επίσης σε μικρό βαθμό την εκπεμπόμενη *IR* ακτινοβολία από το υπόστρωμα πυριτίου.

Ένα άλλο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό από την πιο πάνω ομάδα δεδομένων, είναι πως τα δείγματα  $Si_xN_y/quartz$ , δίνουν ένα φωτοθερμικό σήμα περίπου τριάντα φορές πιο μεγάλο από αυτό που δίνουν τα δείγματα  $Si_xN_y/Si$ . Αυτό οφείλεται κατά κύριο λόγο στις διαφορές των θερμικών ιδιοτήτων του χαλαζία και του πυριτίου. Η θερμική αγωγιμότητα του υποστρώματος χαλαζία είναι μόνο  $\chi_{quartz} = 0.0136 Wcm^{-1}K^{-1}$  [13], περίπου εκατό φορές πιο μικρή από αυτή του πυριτίου [13] ( $\chi_{Si} = 1.5 Wcm^{-1}K^{-1}$ ). Ο συντελεστής θερμικής διάχυσης για το Si ( $D_{T,Si} = 0.88 cm^2 s^{-1}$ ) είναι επίσης 100 φορές πιο μεγάλος από αυτόν του χαλαζία,  $D_{T,quartz} = 0.0087 cm^2 s^{-1}$ . Βασιζόμενοι σε αυτές τις παραμέτρους μόνο, μπορούμε να υπολογίσουμε τον λόγο των θερμικών πεδίων για αυτά τα υλικά ο οποίος

φάσμα, ο οποίος καθορίζεται από την θερμοκρασία της, τα είναι μια καλή ημισελή επιλεκτική επιφάνεια απορρόφησης... είναι ποιότητες που χαρακτηρίζουν την λειτουργία μιας επιφανειακής



Εικόνα 7.5: Υπέρυθρη φασματοσκοπία του σήματος PTR για υπόστρωμα Si.

είναι :

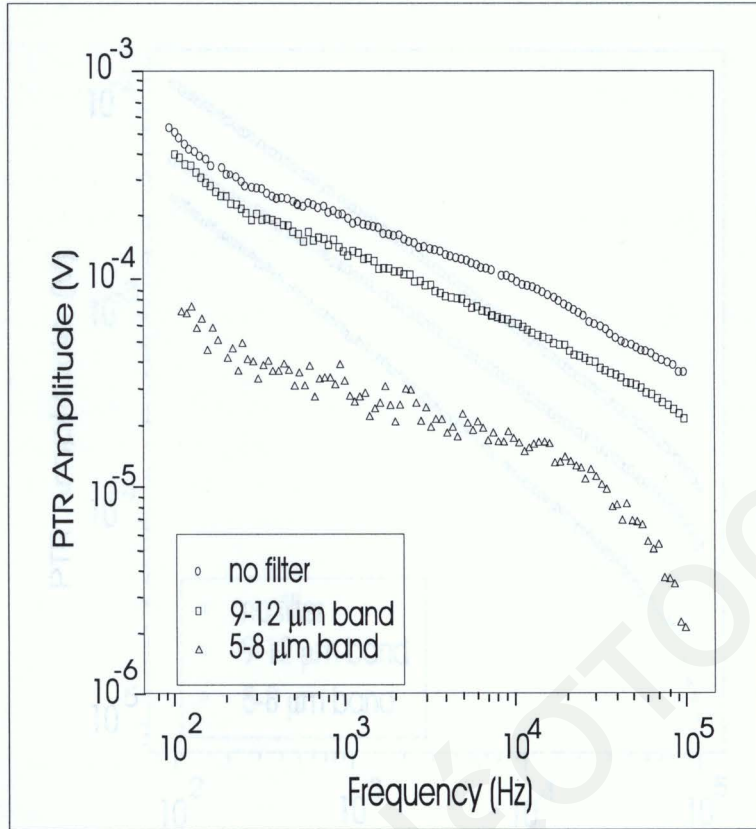
$$b = \frac{\chi_{Si} \sqrt{D_{T,quartz}}}{\chi_{quartz} \sqrt{D_{T,Si}}} = 11 \quad (7.1)$$

Ο πιο πάνω λόγος δίνει ένα συντελεστή διάβασης,  $T$ , για το θερμικό κύμα, σύμφωνα με την Εξ. 3.33 ίσο με 17% περίπου. Στα πιο πάνω θα πρέπει να προσθέσουμε πιθανές διαφορές στην ανακλαστικότητα των δειγμάτων καθώς και φαινόμενα πολυανάκλασης ανάμεσα στην επιφάνεια και στην ενδοεπιφάνεια των δειγμάτων. Η διαφορές στις θερμικές ιδιότητες του λεπτού φιλμ και του υποστρώματος χαλαζία έχουν ως αποτέλεσμα τον περιορισμό του θερμικού πεδίου στο λεπτό φίλμ, και έτσι την δημιουργία ισχυρού φωθοθερμικού σήματος.

### 7.1.2 Επιλεκτικές επιφάνειες για σκοπούς θέρμανσης.

Η ηλιακή ακτινοβολία που φτάνει στην γή περιορίζεται στο διάστημα  $0.3 - 2\mu\text{m}$ . Μια επιφάνεια που απορροφά αποδοτικά στο διάστημα αυτό, θερμαίνεται και ακτινοβολεί θερμική ενέργεια. Αν επιπλέον η επιφάνεια αυτή έχει μικρό συντελεστή εκπομπής στο θερμικό φάσμα, ο οποίος καθορίζεται από την θερμοκρασία της, θα είναι μια καλή ηλιακή επιλεκτική επιφάνεια απορρόφησης. Δυο ποσότητες που χαρακτηρίζουν την λειτουργία μιας επιφάνειας





Εικόνα 7.6: Υπέρουθρη φασματοσκοπία του σήματος PTR για το δείγμα MB105/Si.

απορρόφησης είναι η κάθετη ηλιακή απορρόφηση  $A_{sol}$  και η θερμική ημισφαιρική εκπομπή  $E_{th}$ :

$$A_{sol} = \frac{\int d\lambda W_{sol} [1 - R(\lambda, \theta = 0)]}{\int d\lambda W_{sol}(\lambda, T)} \quad (7.2)$$

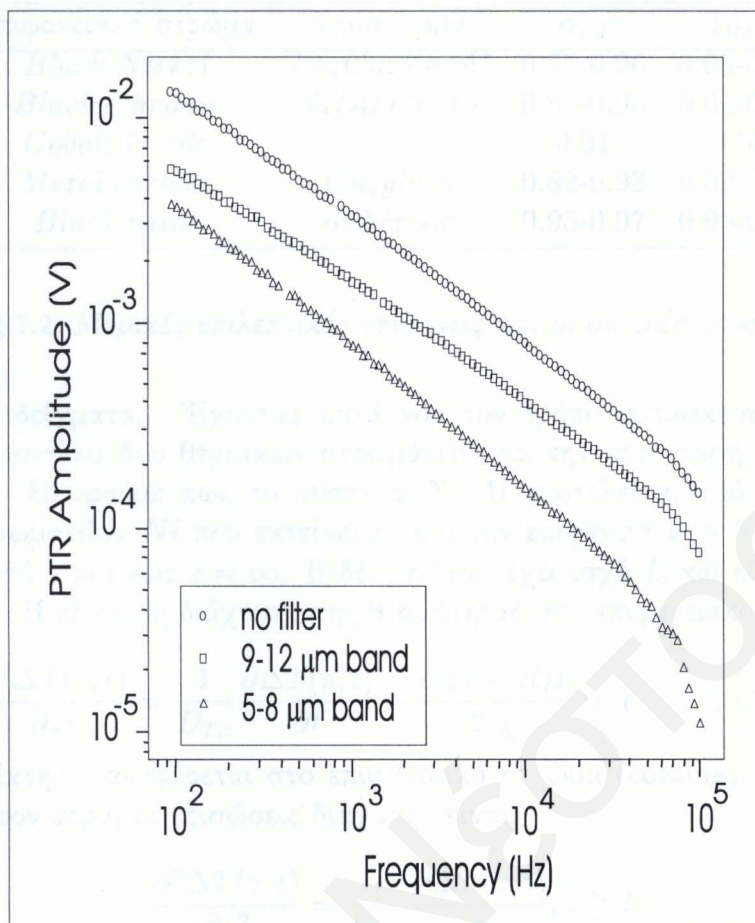
$$E_{th} = \frac{\int d\lambda \int_0^{\pi/2} d(\sin^2 \theta) W_{th}(\lambda, T) [1 - R(\theta, \lambda)]}{\int d\lambda W_{th}(\lambda, T)} \quad (7.3)$$

Στις πιο πάνω εξισώσεις με  $W_{sol}(\lambda)$  συμβολίζεται η πυκνότητα ακτινοβολίας του ήλιου, ενώ με  $W_{th}(\lambda, T)$  η πυκνότητα ακτινοβολίας της επιλεκτικής επιφάνειας που δίνεται από την πιο κάτω σχέση:

$$W_{th}(\lambda, T) = c_1 \lambda^{-5} \exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) \quad (7.4)$$

Οι σταθερές  $c_1$  και  $c_2$  έχουν τις τιμές  $3.7814 \times 10^{-16} W/m^2$  και  $1.4388 \times 10^{-2} m K$ . Μια ιδανική επιφάνεια θα έχει συντελεστή  $A_{sol}$  ίσο με την μονάδα στο ηλιακό φάσμα και συντελεστή  $E_{th}$  ίσο με μηδέν, στο θερμικό. Αυτό συμβαίνει αν η ανακλαστικότητα  $R$  στις Εξισώσεις 7.2 και 7.3 είναι 0 και 1 αντίστοιχα. Η ανάγκη για αξιοποίηση της ηλιακής ενέργειας, έχει οδηγήσει τα τελευταία χρόνια, στην κατασκευή και βελτίωση τέτοιων υλικών. Μερικά επιλεκτικά απορροφητικά υλικά είναι κατασκευασμένα:

1. από μεταλλικά σωματίδια Ni τοποθετημένα σε ανοδικό  $Al_2O_3$  που έχει δημιουργηθεί πάνω σε υπόστρωμα Al



Εικόνα 7.7: Υπέρυθρη φασματοσκοπία του σήματος PTR για το δείγμα MB105/quartz.

2. από Cr και διηλεκτρικό  $Cr_2O_3$  σε υπόστρωμα Al, γνωστό ως black chromium
3. καθώς και σύνθετα υλικά από μέταλλο και μονωτή, φτιαγμένα με τεχνικές ανοδικής επιμετάλλωσης, (cosputtering), και εξαέρωσης (coevaporation).

Πιο κάτω παρατιθεται ένας πίνακας με μερικές επιλεκτικές απορροφητικές επιφάνειες και τους συντελεστές εκπομπής ( $\epsilon_{ther}$ ) στο θερμικό φάσμα και απορρόφησης ( $\alpha_{sol}$ ) στο ηλιακό φάσμα εκπομπής.

Ακολούθως θα παρουσιαστεί ο χαρακτηρισμός ηλιακών απορροφητικών επιφανειών κατασκευασμένων από Ni/Al. Τα δείγματα Ni/Al αποτελούνται από ένα λεπτό στρώμα  $Al_2O_3$  που δημιουργήθηκε με ανοδοποίηση (anodization) σε υπόστρωμα Al. Το δημιουργούμενο οξείδιο έχει πορώδη μορφή, και στους πόρους αυτούς εισάγονται σωματίδια Ni. Η τάση U κάτω από το οποίο έγινε η εισαγωγή των σωματιδίων Ni στο πορώδες οξείδιο για τα τέσσερα δείγματα παρουσιάζεται στον Πίνακα 7.3. Ο χρόνος που εφαρμόστηκε η τάση στα δείγματα 1,3 και 4 είναι 3 λεπτά ενώ για το τέταρτο δείγμα 4 λεπτά.

Η δέσμη διέγερσης laser είχε ένταση 300mW, διάμετρο 6mm και φώτιζε κάθετα τα δείγματα Ni/Al. Τα πειραματικά αποτελέσματα (πλάτος και φάση ως συνάρτηση της συχνότητας διαμόρφωσης) για τα τέσσερα δείγματα παρουσιάζονται στις Εικ. 7.8-9, αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι η φάση για τα τέσσερα αυτά δείγματα είναι σχεδόν η



Επιφανειακό στρώμα	Υπόστρωμα	$\alpha_{sol}$	$\epsilon_{ther}$
<i>Black Nickel</i>	<i>Fe, Cu, Zn/Al</i>	0.85-0.96	0.05-0.15
<i>Black Chrome</i>	<i>Ni/Al, Cu, Fe</i>	0.82-0.96	0.04-0.15
<i>Cobalt Oxide</i>	<i>Ni</i>	0.91	0.09
<i>Metal carbide</i>	<i>Cu, glass</i>	0.82-0.93	0.02-0.05
<i>Black paint</i>	οτιδήποτε	0.95-0.97	0.95-0.97

Πίνακας 7.2: Μερικές επιλεκτικές επιφάνειες και οι οπτικές τους ιδιότητες.

ίδια για όλα τα δείγματα. Έχοντας κατά νου τον τρόπο κατασκευής των δειγμάτων υποθέσαμε ένα μοντέλο δυο θερμικών στρωμάτων για την περιγραφή των πειραματικών αποτελεσμάτων. Θεωρούμε πως το σύστημα *Ni/Al* αποτελείται από το λεπτό στρώμα οξειδίου με τα σωματίδια *Ni* που εκτείνεται από την επιφάνεια  $z = 0$  έως  $z = l$  και το υπόστρωμα *Al* από  $z = l$  έως  $z = \infty$ . Η δέσμη laser έχει ισχύ  $I_0$  και είναι διαμορφωμένη σε συχνότητα  $\omega$ . Η εξίσωση διάχυσης της θερμότητας στο επιφανειακό στρώμα είναι:

$$\frac{\partial^2 \Delta T(z, t)}{\partial z^2} = \frac{1}{D_{T,c}} \frac{\partial \Delta T(z, t)}{\partial t} - \frac{\alpha (1 - R) I_0}{2 \chi_c} [1 + e^{i \omega t}] e^{-\alpha z} \quad (7.5)$$

όπου ο κάτω δείκτης  $c$  αναφέρεται στο επιφανειακό στρώμα (coating). Παρόμοια για το υπόστρωμα και τον αέρα, οι εξισώσεις διάχυσης είναι:

$$\frac{\partial^2 \Delta T(z, t)}{\partial z^2} = \frac{1}{D_{T,s}} \frac{\partial \Delta T(z, t)}{\partial t}, z \geq l \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta T(z, t)}{\partial z^2} = \frac{1}{D_{T,g}} \frac{\partial \Delta T(z, t)}{\partial t}, z \leq 0 \quad (7.7)$$

όπου οι κάτω δείκτες  $s$  και  $g$  αναφέρονται στο υπόστρωμα και το περιβάλλον αέριο (αέρας) αντίστοιχα. Επειδή το επιφανειακό στρώμα είναι πολύ λεπτό (μικρότερο από  $\mu m$ ) σε σχέση με το θερμικό κύμα, μπορούμε να υποθέσουμε πως η βασική συνεισφορά στο σήμα *PTR* προέρχεται από την επιφάνεια του υποστρώματος, και δίνεται από την πιο κάτω σχέση [11]:

$$\Delta T = \frac{\alpha I_0 (1 - R)}{2 \chi_c (\alpha^2 - \sigma_c^2)} \times \frac{(1 - r)(b + 1) e^{\sigma_c L} - (r + 1)(b - 1) e^{-\sigma_c L} + 2(b - r) e^{-\alpha L}}{(g + 1)(b + 1) e^{\sigma_c L} - (g - 1)(b - 1) e^{-\sigma_c L}} \quad (7.8)$$

όπου

$$b = \frac{\chi_s \sigma_s}{\chi_c \sigma_c}, g = \frac{\chi_g \sigma_g}{\chi_c \sigma_c}, r = \frac{\alpha}{\sigma_c} \quad (7.9)$$

Τα θερμικά κυμαtanύσματα στο υπόστρωμα, το επιφανειακό στρώμα και τον αέρα είναι αντίστοιχα  $\sigma_c$ ,  $\sigma_s$ , και  $\sigma_g$ . Η ροή θερμικής ακτινοβολίας σύμφωνα με τον νόμο των Stefan-Boltzmann είναι :

$$F = \epsilon_{ther} \sigma T^4 \quad (7.10)$$

Δείγμα	$U$ (V)	$\epsilon_{ther}$	$L$ ( $\mu m$ )	$\chi_c$ (W/(m K))	$ PTR $ (mV)
1	9.0	12.5	0.250	1.7	0.065
2	9.0	21.5	0.250	2.8	0.116
3	9.3	16.0	0.320	1.8	0.085
4	9.5	19.0	0.480	3.1	0.133

Πίνακας 7.3: Παράμετροι των ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών απορρόφησης.

Σε πρώτη προσέγγιση η μεταβολή της ροής αυτής λόγω της αλλαγής στην θερμοκρασία  $T$  του σώματος γράφεται:

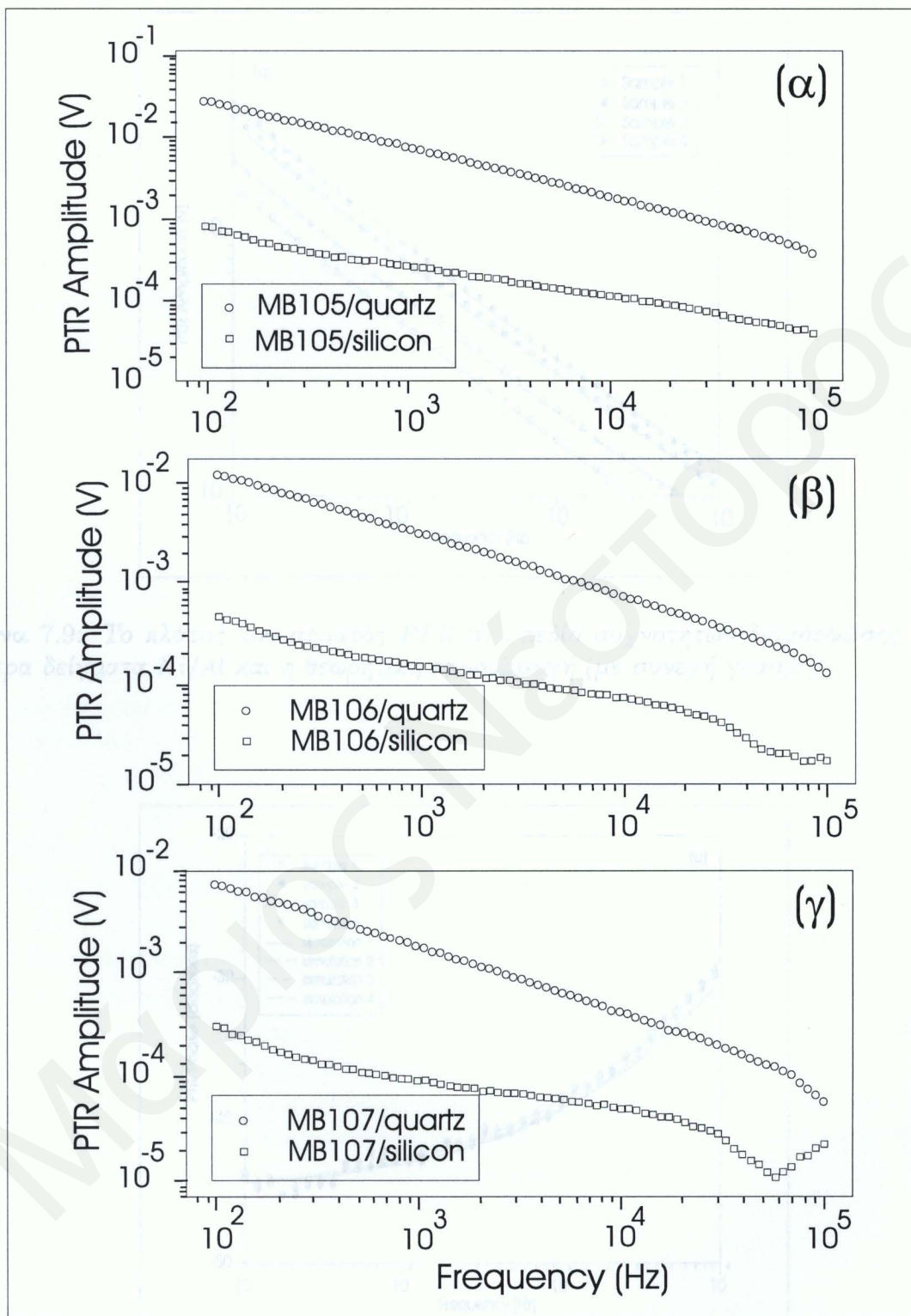
$$\Delta F(\omega) = \epsilon_{ther} \sigma T^3 \Delta T(\omega) \quad (7.11)$$

και είναι λοιπόν ανάλογη της διαμορφωμένης μεταβολής της θερμοκρασίας  $\Delta T(\omega)$ .

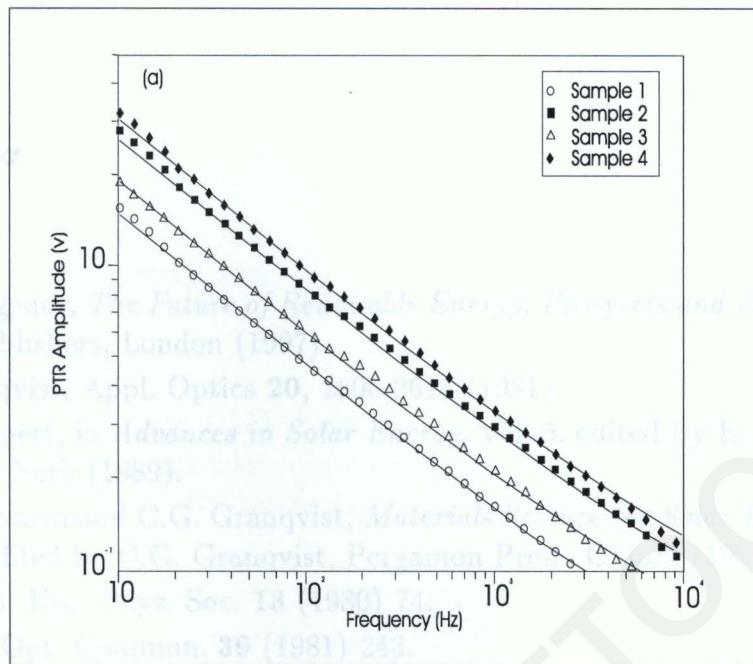
Οι χαμπύλες προσαρμογής, που έγιναν με το πιο πάνω θεωρητικό μοντέλο, στα πειραματικά δεδομένα φαίνονται με γραμμές στις Εικ. 7.8-7.9. Η προσαρμογή έγινε με μεταβολή των συντελεστών οπτικής απορρόφησης  $\alpha$ , θερμικής διάχυσης  $D_{T,C}$  και θερμικής αγωγιμότητας  $\chi_C$  του επιφανειακού στρώματος. Η ευαισθησία του σήματος στην μεταβολή του  $\alpha_c$  και του  $D_{T,C}$  ήταν μικρή. Έτσι από την προσαρμογή είναι δύσκολο να καθορίσουμε ακριβώς την τιμή τους, όμως η μέση τιμή για αυτά τα μεγέθη ήταν  $D_{T,c} = 1 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$  και  $\alpha = 2 \times 10^6 \text{ m}^{-1}$  με σφάλμα 20%. Για τον αέρα και το υπόστρωμα, χρησιμοποιήθηκαν οι πιο κάτω τιμές για τον συντελεστή θερμικής διάχυσης και αγωγιμότητας [13]:  $\chi_{T,g} = 0.024 \text{ W/mK}$ ,  $D_{T,g} = 0.19 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $\chi_{T,s} = 201 \text{ W/mK}$ ,  $D_{T,s} = 0.75 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ . Όλες οι θεωρητικές χαμπύλες προσαρμογής είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Στον Πίν. 7.3 παρουσιάζονται οι διάφορες παράμετροι που προήλθαν από την προσαρμογή. Σε αυτό τον πίνακα η σταθερά  $\epsilon$  είναι ο συντελεστής εκπομπής που μετρήθηκε [10] με παραδοσιακές τεχνικές οπτικής απορρόφησης και  $L$  το πάχος του επιφανειακού στρώματος. Οι μετρήσεις του συντελεστή εκπομπής  $\epsilon$  έγιναν με μέτρηση της ολικής ημισφαιρικής εκπομπής της επιφάνειας των δειγμάτων και της αντίστοιχης εκπομπής μιας ιδανικής επιφάνειας μέλανος σώματος, στην ίδια θερμοκρασία ( $70^\circ\text{C}$ ) με αυτή των δειγμάτων. Ο λόγος των δυο πιο πάνω μετρήσεων έδωσε τον συντελεστή εκπομπής [14]. Η κρίσιμη παράμετρος για την προσαρμογή ήταν ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας του στρώματος  $Al/Ni$ . Το δείγμα 1 δίνει το πιο μικρό πλάτος  $PTR$  κάτι που είναι σε συμφωνία με τον πειραματικά προσδιορισμένο συντελεστή εκπομπής (Πίν. 7.3). Τα δείγματα 2 και 4 από την άλλη, έχουν το μεγαλύτερο πλάτος  $PTR$  που είναι και πάλι σε καλή συμφωνία με τις μετρήσεις του συντελεστή εκπομπής. Κατατάσσοντας τα δείγματα σε αύξουσα σειρά ανάλογα με το πλάτος του σήματος που δίνουν, έχουμε 1,3,2 και 4. Σημειώνουμε πως η διαφορά πλάτους για τα δείγματα 2 και 4 είναι της τάξης του 10 %. Κάνοντας το ίδιο ως προς τον συντελεστή εκπομπής έχουμε 1,3,4 και 2, όπου οι τιμή του  $\epsilon_{ther}$  για το δείγμα 4 διαφέρει από αυτή του 2 κατά 6 %.

Εικόνα 7.8: Σημειώση των σημείων  $PTR$  για δείγματα με το ίδιο φίλμ με υπόστρωμα πυρίτιου και χαλκό: (α)  $M\#105/\etaλιακ$  και  $M\#105/Si$  (β)  $M\#106/\etaλιακ$  και  $M\#106/Si$  (γ)  $M\#107/\etaλιακ$  και  $M\#107/Si$

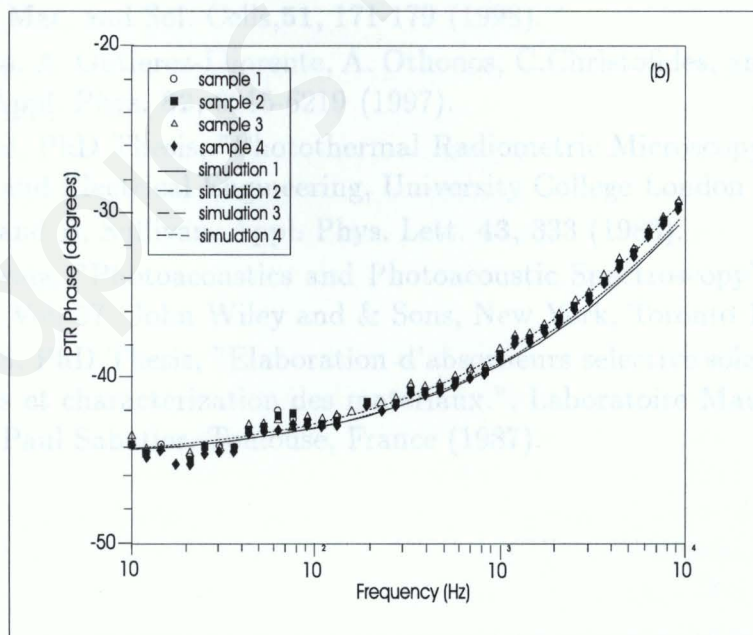




Εικόνα 7.8: Σύγκριση των σημάτων PTR για δείγματα με το ίδιο φιλμ σε υπόστρωμα πυριτίου και χαλαζία: (α) MB105/quartz και MB105/Si, (β) MB106/quartz και MB106/Si, (γ) MB107/quartz και MB107/Si.



**Εικόνα 7.9:** Το πλάτος του σήματος PTR στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης για τα τέσσερα δείγματα Ni/Al και η θεωρητική προσαρμογή (με συνεχή γραμμή).



**Εικόνα 7.10:** Η φάση του σήματος PTR στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης για τα τέσσερα δείγματα Ni/Al και η θεωρητική προσαρμογή (με συνεχή γραμμή).



## Βιβλιογραφία

- [1] EUREC Agency, *The Future of Renewable Energy, Prospects and Directions*, Preface, Science Publishers, London (1997).
- [2] C.G. Granqvist, *Appl. Optics* **20**, 2606-2615 (1981).
- [3] C. M. Lampert, in *Advances in Solar Energy*, Vol. 5, edited By K. W. Boer, Plenum Press, New York (1989).
- [4] G.A. Nicklasson and C.G. Granqvist, *Materials Science for Solar Energy Conversion Systems*, edited by C.G. Granqvist, Pergamon Press, Oxford (1991).
- [5] S. I. Yun, *J. Kor. Phys. Soc.* **13** (1980) 74.
- [6] D. Cahen, *Opt. Commun.* **39** (1981) 243.
- [7] J. F. McClelland, R. M. Kniseley, *Proc. Semin. Test. Sol. En. Mater. Syst. Inc. Environ. Sci. Mt. Prospect*, **111**, 1978, pp. 245-252; C.A.90, 22:171494.
- [8] G. Busse, H. G. Walther, "Principles and Perspectives of Photothermal and Photoacoustic Science", in *Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology*, Vol. 1, ch. 5 Edited by A. Mandelis, Elsevier, New York (1992) pp. 205-198.
- [9] A. Othonos, M. Nestoros, D. Palmerio, C. Christofides, R. S. Bes, and J. P. Traverse, in *Sol. En. Mat. and Sol. Cells*, **51**, 171-179 (1998).
- [10] M. Nestoros, A. Gutierrez-Lliorente, A. Othonos, C. Christofides, and J. M. Martinez-Duart, *J. Appl. Phys.* **82**, 6215-6219 (1997).
- [11] S. J. Sheard, PhD Thesis, "Photothermal Radiometric Microscopy", Department of Electronic and Electrical Engineering, University College London (1987).
- [12] A.C. Tam and B. Sullivan, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 333 (1983).
- [13] A. Rosencwaig, "Photoacoustics and Photoacoustic Spectroscopy", *Chemical Analysis Series*, Vol. 57 (John Wiley and Sons, New York, Toronto 1980).
- [14] M. Belghith, PhD Thesis, "Elaboration d'absorbeurs selective solaires: optimization de procedes et caracterization des materiaux.", *Laboratoire Materieux et Energie, Universite Paul Sabatier, Toulouse, France* (1987).

## Κεφάλαιο 8

### Συμπεράσματα και μελλοντικοί στόχοι

Οι φωτοθερμικές τεχνικές *PMTR* και *PTR* που παρουσιάστηκαν στη διατριβή αυτή χρησιμοποιήθηκαν με επιτυχία κυρίως στον χαρακτηρισμό εμφυτευμένων ημιαγωγών *Si* και άλλων σύνθετων υλικών. Πιο κάτω παρουσιάζονται συνοπτικά τα συμπεράσματα.

1. Η τεχνική *PMTR* χρησιμοποιήθηκε για τον χαρακτηρισμό εμφυτευμένων δειγμάτων *Si* σε χαμηλές θερμοκρασίες. Κατ'αρχήν η ανάλυση έδωσε τις οπτικές, ηλεκτρονικές και θερμικές ιδιότητες των δειγμάτων, δείχνοντας έτσι πως η τεχνική *PMTR* αποτελεί ένα ισχυρό μη καταστροφικό τρόπο αξιολόγησης των ημιαγωγών.
2. Επιπλέον έδειξε πως η θερμική και ηλεκτρονική συνεισφορά μπορούν να διαχωρισθούν, όχι μόνο με βάση την συχνότητα διαμόρφωσης αλλά και με βάση την θερμοκρασία του δείγματος. Στο πεδίο χαμηλών θερμοκρασιών ( $T < 150K$ ), ακόμα και για μικρές τιμές της συχνότητας διαμόρφωσης, υπερισχύει η συνεισφορά πλάσματος ενώ η θερμική συνεισφορά κυριαρχεί σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες. Όσον αφορά την τεχνική *PMTR* αυτό είναι πολύ σημαντικό, γιατί ακόμα και στην περιοχή των μεγάλων συχνοτήτων διαμόρφωσης η θερμική συνεισφορά είναι αρκετά ισχυρή (βλ. προσομοιώσεις κεφ.3), σε θερμοκρασία δωματίου.
3. Στο πλαίσιο της πιο πάνω ανάλυσης έγινε σαφής και ο ρόλος των φαινομένων *Drude* και πλήρωσης ζώνης όσον αφορά την χρυσταλλική και άμορφη (λόγω ιοντικής εμφύτευσης) φάση του *Si*. Η φύση της συνεισφοράς αλλάζει, καθώς το εμφυτευμένο στρώμα ημιαγωγού περνά από την χρυσταλλική στην άμορφη φάση, από την *Drude* σε αυτήν της πλήρωσης ζώνης.
4. Η τεχνική της φωτοθερμικής ραδιομετρίας *PTR* είναι πολύ πιο ευαίσθητη στις ηλεκτρονικές ιδιότητες του ημιαγωγού κάτω από ορισμένες συνθήκες. Οι συνθήκες αυτές είναι η μικρή πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων της επιφάνειας του ημιαγωγού (μικρή ταχύτητα επανασύνδεσης), και η ύπαρξη χρυσταλλικής τάξης στο υλικό. Μικρές αλλαγές στο χρόνο ζωής των φορέων, ή στην επιφανειακή ταχύτητα επανασύνδεσης, επιφέρουν μεγάλες αλλαγές (τάξεις μεγέθους) στο πλάτος του σήματος *PTR*, σε αντίθεση με την τεχνική *PMTR* όπου οι αλλαγές αυτές είναι στην ίδια τάξη μεγέθους.
5. Το ενοποιημένο μοντέλο *PTR* που παρουσιάζεται στο κεφ. 5 επεδίωξε την περιγραφή τόσο της θερμικής όσο και της ηλεκτρονικής συνιστώσας ενός ημιαγωγού δυο στρωμάτων στο πεδίο συχνοτήτων διαμόρφωσης. Ο σκοπός του μοντέλου αυτού είναι η περιγραφή του φωτοθερμικού σήματος που λαμβάνεται από ημιαγωγό που έχει υποστεί ιοντική εμφύτευση σε μεγάλες ενέργειες και δόσεις με αποτέλεσμα την δημιουργία ενός



επιφανειακού στρώματος με διαφορετικές φυσικές ιδιότητες από αυτές του υποστρώματος. Τα πειραματικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται είναι σε πλήρη συμφωνία με το μοντέλο αυτό. Με μικρές μετατροπές το θεωρητικό αυτό μοντέλο μπορεί να περιγράψει ένα πλήθος συνδυασμών ημιαγωγών, μετάλλων και μονωτών.

6. Στο πλαίσιο της πιο πάνω μελέτης ο συντελεστής θερμικής συνεισφοράς του σήματος PTR συνδέθηκε με την συσχέτιση ηλεκτρικών φορέων, προσφέροντας ίσως ένα τρόπο προσδιορισμού τους. Το σήμα PTR είναι σχεδόν καθαρά ηλεκτρονικό στην περίπτωση χρυσταλλικών ημιαγωγών των οποίων η επιφάνεια είναι ομαλή (σε μικροσκοπική κλίμακα) και δεν έχει υποστεί ζημιά από ιοντική εμφύτευση (δηλαδή η ταχύτητα επανασύνδεσης είναι μικρή). Σε αυτή τη περίπτωση, όπως έχουμε δει, το πλάτος του σήματος PTR είναι ανάλογο του χρόνου ζωής των φορέων. Στην αντίθετη περίπτωση που ο ημιαγωγός έχει υποστεί ζημιά από την ιοντική εμφύτευση το σήμα καθορίζεται από την θερμική συνιστώσα.
7. Το συζευγμένο σύστημα διαφορικών εξισώσεων της διάχυσης της θερμότητας και της πυκνότητας φωτοεπαγόμενων φορέων, μελετήθηκε στα πλαίσια της ανίσωσης των Vasilen και Sandomirskii στην περιοχή θερμοκρασιών 300 – 1200K. Βρέθηκε πως ο όρος θερμικής διέγερσης των φορέων είναι σημαντικός και επηρεάζει αρνητικά το πλάτος του σήματος στην περίπτωση του Si, εκτός από την περίπτωση του πλήρως εκφυλισμένου πλάσματος σε πολύ ψηλή θερμοκρασία. Η επίδραση του όρου σύζευξης πρέπει να λαμβάνεται υπόψη στην ανάλυση των πειραματικών μετρήσεων ώστε οι εξαγόμενες τιμές των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων των υλικών να είναι αξιόπιστες.
8. Η θερμική διέγερση είναι αμελητέα στην περίπτωση που ο ημιαγωγός διατηρεί την χρυσταλλική του τάξη. Η ανάλυση αυτή μπορεί να είναι χρήσιμη στον in-situ χαρακτηρισμό δισκίων ημιαγωγών κατά την διάρκεια των διαδικασιών θερμικής ανόπτησης, ή θερμικής καθοδήγησης.
9. Η τεχνική PTR αποδείχθηκε πολύ ικανή στον χαρακτηρισμό μιας μεγάλης κατηγορίας υλικών όπως των ηλιακών επιλεκτικών επιφανειών. Στην περίπτωση των επιλεκτικών επιφανειών παθητικής φύξης όπου μας ενδιαφέρει η εκπομπή στο ατμοσφαιρικό παράθυρο, η τεχνική PTR είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη μια και ανιχνεύει την ίδια φασματική περιοχή και αποδίδει ένα ισχυρό και επαναλήψιμο σήμα.

## Παράρτημα Α

### Η υπέρυθρη απορρόφηση των ελεύθερων φορέων.

Το πιο κάτω μοντέλο υποθέτει ένα ίσο αριθμό θετικών και αρνητικών φορέων. Η αλληλεπίδραση των φορέων γίνεται μέσω των ανελαστικών χρούσεων τους. Η υπέρυθρη ακτινοβολία αδυνατεί να διεγείρει τα ηλεκτρόνια από την ζώνη σθένους στην ζώνη αγωγιμότητας αλλά τα αναγκάζει να εκτελούν μεταβάσεις μέσα στην ζώνη σθένους. Η εξίσωση κίνησης για τους φορείς είναι:

$$m \frac{d \langle v \rangle}{dt} + m \langle v \rangle g = -eE \quad (\text{A.1})$$

όπου  $g$  είναι ένα παράγοντας αντίστροφος του χρόνου χαλάρωσης  $T$ , των φορέων. Η μέση ταχύτητα των φορέων είναι  $\langle v \rangle$  και  $E$  είναι το ηλεκτρικό πεδίο που έχει την πιο κάτω μορφή και αντιστοιχεί στην συχνότητα του υπέρυθρου  $\omega_c$ :

$$E = E_o \exp(i \omega_c \tau) \quad (\text{A.2})$$

Θεωρώντας περιοδική λύση, της μορφής:

$$\langle v \rangle = \langle v_o \rangle \exp(i \omega_c \tau) \quad (\text{A.3})$$

το πλάτος  $\langle v_o \rangle$  είναι:

$$\langle v_o \rangle = -\frac{e E_o}{m} \frac{1}{i \omega + g} \quad (\text{A.4})$$

Η λύση αυτή έχει ως αποτέλεσμα μια μιγαδική πυκνότητα ρεύματος, η οποία όταν εισαχθεί στις εξισώσεις του Maxwell δίνει μια μιγαδική διηλεκτρική σταθερά της μορφής:

$$\epsilon^* = \epsilon_r - \frac{N e^2}{m \epsilon_o (g + \omega_c^2)} - i \frac{N e^2 g}{\omega_c m \epsilon_o (g + \omega_c^2)} \quad (\text{A.5})$$

Μπορούμε να ορίσουμε ένα μιγαδικό δείκτη διαθλάσεως ως:

$$n^* = n - i k = \sqrt{\epsilon^*} \quad (\text{A.6})$$

Από τις Εξ. A-5 και A-6 έχουμε

$$n^2 - k^2 = \epsilon_r \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{g^2 + \omega_c^2} \right) \quad (\text{A.7})$$



και

$$2 n k = \frac{N e^2 g}{\omega_c \epsilon_0 m (g^2 + \omega_c^2)} \quad (\text{A.8})$$

με

$$\omega_p = \sqrt{\frac{N e^2}{\epsilon_r \epsilon_0 m}} \quad (\text{A.9})$$

Η κυκλική συχνότητα  $\omega_p$  αντιστοιχεί στην συχνότητα ταλάντωσης του πλάσματος σαν ένα 'σώμα' στην απουσία απόσβεσης. Υποθέτοντας πως  $\omega^2 \gg g^2$  και θέτοντας  $g = e/(\mu m)$  η σχέση  $a = 2 \pi k/c$  μας δίνει την απορρόφηση που οφείλεται στους ελεύθερους φορείς:

$$a_{fc} = \frac{N \lambda^2 e^3}{4 \pi^2 c^3 n \epsilon_0 m^2 \mu}. \quad (\text{A.10})$$

Η πιο πάνω σχέση μας δείχνει πως η απορρόφηση είναι ανάλογη της πυκνότητας ελεύθερων φορέων, αν και στην πράξη η εξάρτηση της ευκινησίας  $\mu$ , από την πυκνότητα των ελεύθερων φορέων  $N$ , αλλάζει την γραμμικότητα της εξάρτησης μεταξύ  $a_{fc}$  και  $N$ .

## Marios Nestoros - List of Publications

### 1 Chapters in Books

1. C. Christofides, M. Nestoros and A. Othonos: *Photothermal Radiometric Study of Implanted Semiconductors*, in Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology Volume IV: Semiconductors and Electronic Materials, ch. 4, (ed, by A. Mandelis and P. Hess),(In Press, 1999)

### 2 Papers in Refereed Scientific Journals

1. Y. Karmiotis, M. Nestoros, and C. Christofides: Finite Thickness and Semi-Infinite Photothermal Radiometric Models for The Characterization of Semiconductors, *Applied Physics Letters* 72, 695 (1998).
2. M. Nestoros, Y. Karmiotis and C. Christofides: Two Layer Model for Photothermal Radiometry Applied on Semiconducting Thin Films, *Journal of Applied Physics Letters* 82, 6220-6227 (1998).
3. M. Nestoros, A. Gutierrez-Llorente, A. Othonos, C. Christofides, and J. Martinez-Duart: Photothermal Radiometric and Spectroscopic Measurements on Silicon Nitride, Thin Films, *Journal of Applied Physics* 82, 6215 (1997).
4. A. Othonos, M. Nestoros, D. Palmerio, C. Christofides, R.S. Bes, and J.P. Traverse: Photothermal Radiometry on Nickel (Pigmented Aluminium Oxide) Selective Solar Absorbing Surface Coatings, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 51, 171 (1997).
5. A. Mandelis, M. Nestoros, A. Othonos, and C. Christofides: Thermophysical Characterization of Commercial Paper by Use of Laser Infrared Radiometry, *Journal of Pulp and Paper Science* 23, J108-J112 (1997).
6. [Invited Paper] A. Othonos, A. Mandelis, M. Nestoros, and C. Christofides: Laser Photothermal Diagnostics of Genuine and Counterfeit British and United States Banknotes, *Optical Engineering* 36, 400 (1997).
7. [Invited Paper] A. Mandelis, M. Nestoros and C. Christofides: Thermoelectronic-Wave Coupling in Laser Photothermal Theory of Semiconductors at Elevated Temperatures, *Optical Engineering* 36, 459 (1997).



8. C. Christofides, F. Diaconos, A. Seas, C. Christou, M. Nestoros, and A. Mandelis: Two Layer Model for Photomodulated Thermoreflectance of Semiconductor Wafers, *Journal of Applied Physics* 80, 1713-1725 (1996).
9. M. Nestoros, B.C. Forget, and C. Christofides, and A. Seas: Photothermal Reflectance Versus Temperature: Quantitative Analysis, *Physical Review B* 51, 14115-14123 (1995).

### 3 Invited Presentations at Conferences

1. C. Christofides and M. Nestoros: Photothermal Reflectance at low and high Temperatures 2<sup>nd</sup> Gordon Research Conference on Photoacoustics and Photothermal Phenomena Colby, Colby Sawyer College (North), New England, New Hampshire, U.S.A. (June 1995).

### 4 Contributions in Refereed Conferences Proceedings

1. M. Nestoros, A. Gutierrez-Llorente, A. Othonos, C. Christofides, and J. Martinez-Duart: Photothermal Radiometric and Spectroscopic Measurements on Silicon Nitride, Thin Films, X International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Book of Abstracts, 7-P4, Rome 1998.
2. M. Nestoros, Y. Karmiotis and C. Christofides: Photothermal Radiometry Applied on Semiconducting Thin Films: A Two Layer Model. X International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Book of Abstracts, 7-P18, Rome 1998.
3. M. Nestoros, B.C. Forget, and C. Christofides: Photothermal Reflection signal Versus Temperature: Study of Implanted Si Wafer. Progress in Natural Science, Edited by Shu-Yi Zhang, Vol. 6 Supplement, S-507 (Taylor and Francis, 1996).

## Marios Nestoros - List of Publications

### 1 Chapters in Books

1. C. Christofides, M. Nestoros and A. Othonos: *Photothermal Radiometric Study of Implanted Semiconductors*, in Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology Volume IV: Semiconductors and Electronic Materials, ch. 4, (ed, by A. Mandelis and P. Hess),(In Press, 1999)

### 2 Papers in Refereed Scientific Journals

1. Y. Karmiotis, M. Nestoros, and C. Christofides: Finite Thickness and Semi-Infinite Photothermal Radiometric Models for The Characterization of Semiconductors, *Applied Physics Letters* 72, 695 (1998).
2. M. Nestoros, Y. Karmiotis and C. Christofides: Two Layer Model for Photothermal Radiometry Applied on Semiconducting Thin Films, *Journal of Applied Physics Letters* 82, 6220-6227 (1998).
3. M. Nestoros, A. Gutierrez-Llorente, A. Othonos, C. Christofides, and J. Martinez-Duart: Photothermal Radiometric and Spectroscopic Measurements on Silicon Nitride, Thin Films, *Journal of Applied Physics* 82, 6215 (1997).
4. A. Othonos, M. Nestoros, D. Palmerio, C. Christofides, R.S. Bes, and J.P. Traverse: Photothermal Radiometry on Nickel (Pigmented Aluminium Oxide) Selective Solar Absorbing Surface Coatings, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 51, 171 (1997).
5. A. Mandelis, M. Nestoros, A. Othonos, and C. Christofides: Thermophysical Characterization of Commercial Paper by Use of Laser Infrared Radiometry, *Journal of Pulp and Paper Science* 23, J108-J112 (1997).
6. **[Invited Paper]** A. Othonos, A. Mandelis, M. Nestoros, and C. Christofides: Laser Photothermal Diagnostics of Genuine and Counterfeit British and United States Banknotes, *Optical Engineering* 36, 400 (1997).
7. **[Invited Paper]** A. Mandelis, M. Nestoros and C. Christofides: Thermoelectronic-Wave Coupling in Laser Photothermal Theory of Semiconductors at Elevated Temperatures, *Optical Engineering* 36, 459 (1997).



8. C. Christofides, F. Diaconos, A. Seas, C. Christou, M. Nestoros, and A. Mandelis: Two Layer Model for Photomodulated Thermoreflectance of Semiconductor Wafers, *Journal of Applied Physics* 80, 1713-1725 (1996).
9. M. Nestoros, B.C. Forget, and C. Christofides, and A. Seas: Photothermal Reflectance Versus Temperature: Quantitative Analysis, *Physical Review B* 51, 14115-14123 (1995).

### **3 Invited Presentations at Conferences**

1. C. Christofides and M. Nestoros: Photothermal Reflectance at low and high Temperatures 2<sup>nd</sup> Gordon Research Conference on Photoacoustics and Photothermal Phenomena Colby, Colby Sawyer College (North), New England, New Hampshire, U.S.A. (June 1995).

### **4 Contributions in Refereed Conferences Proceedings**

1. M. Nestoros, A. Gutierrez-Llorente, A. Othonos, C. Christofides, and J. Martinez-Duart: Photothermal Radiometric and Spectroscopic Measurements on Silicon Nitride, Thin Films, X International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Book of Abstracts, 7-P4, Rome 1998.
2. M. Nestoros, Y. Karmiotis and C. Christofides: Photothermal Radiometry Applied on Semiconducting Thin Films: A Two Layer Model. X International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, Book of Abstracts, 7-P18, Rome 1998.
3. M. Nestoros, B.C. Forget, and C. Christofides: Photothermal Reflection signal Versus Temperature: Study of Implanted Si Wafer. Progress in Natural Science, Edited by Shu-Yi Zhang, Vol. 6 Supplement, S-507 (Taylor and Francis, 1996).