

INSTYTUT FIZYKI
POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ
Raport serii PRE /85

WYDAJNOŚĆ KWANTOWA
WEWNĘTRZNEGO EFEKTU
FOTOELEKTRYCZNEGO
w $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$

Paweł Scharoch

Praca doktorska
wykonana w Instytucie Fizyki
Politechniki Wrocławskiej
Promotor:
doc.dr hab. Janusz M. Pawlikowski

WROCŁAW 1985

Dziękuję promotorowi doc.dr hab. Januszowi M. Pawlikowskiemu za stałą opiekę naukową podczas wykonywania pracy.

Jednocześnie dziękuję dr Janowi Szatkowskiemu oraz dr Kazimierzowi Sierańskiemu za dyskusje i pomoc przy rozwiązywaniu niektórych, związanych z pracą problemów.

Dziękuję również pozostałym członkom zespołu fizyki półprzewodników za pomoc i cenne rady podczas wykonywania eksperymentów.

Spis treści

1. WSTĘP	str. 4
2. WEWNĘTRZNY EFEKT FOTOELEKTRYCZNY W PÓLPRZEWODNIKACH	6
2.1. Ogólna charakterystyka efektu	6
2.2. Wydajność kwantowa	9
2.3. Efekt fotowoltaiczny w złączu p-n	10
2.4. Model Antoncik'a - Tauc'a dla InSb	16
3. MODEL WEWNĘTRZNEGO EFEKTU FOTOELEKTRYCZNEGO Z WĄSKĄ PRZERWĄ DLA $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$	24
3.1. Struktura pasmowa i funkcje falowe $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$	24
3.2. Model obliczeń wydajności kwantowej.....	26
3.3. Wyniki obliczeń wydajności kwantowej.....	38
4. POMIARY EFEKTU FOTOWOLTAICZNEGO W $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$...	47
4.1. Próbki i układ pomiarowy	47
4.2. Wyniki pomiarów	50
5. DYSKUSJA WYNIKÓW I WNIOSKI	53
6. DODATEK - METODA "MONTE CARLO" OBLICZANIA CALEK	62
7. LITERATURA	64

1. WSTĘP

Liczne zastosowania przyrządów półprzewodnikowych w nauce i technice jak również ciągle rosnące wymagania co do ich jakości stały się inspiracją dla prowadzonych przez wiele ośrodków badań podstawowych w zakresie technologii wytwarzania odpowiednich elementów fotoelektrycznych oraz fizyki zjawisk fotoelektrycznych. Jednym z podstawowych parametrów stosowanych przy opisie zjawisk fotoelektrycznych w półprzewodnikach jest wydajność kwantowa wewnętrznego efektu fotoelektrycznego, QE, definiowana jako ilość par elektron-dziura generowanych przez jeden, ulegający absorpcji podstawowej, foton. Wielkość ta, jak się okazuje, oprócz roli jaką spełnia w opisie zjawisk fotoelektrycznych, może być bogatym źródłem informacji o procesach rozpraszania energii elektronów i dziur w półprzewodnikach. Mimo trudności, jakie związane są z pomiarem wydajności kwantowej, znane są charakterystyki spektralne QE (lub wielkości do niej zbliżonej), dla wielu półprzewodników np. InSb, Ge, Si [1,2,3,4]. Jedną z interesujących cech danych eksperymentalnych jest zauważalny wzrost wydajności kwantowej procesów fotogeneracji dla energii fotonów, $h\nu$, przewyższających podwojoną wartość szerokości przerwy energetycznej, E_g , półprzewodnika. Efekt ten zaobserwowano po raz pierwszy dla InSb, półprzewodnika o wąskiej przerwie energetycznej [1].

Model teoretyczny wydajności kwantowej w InSb został zaproponowany przez Antoncik'a i Tauc'a w roku 1966 [2]. Obliczenia wykonane w oparciu o ten model dały dobrą zgodność

jakościową i ilościową z eksperymentem, nie przewidywały jednak zależności wydajności kwantowej od takich parametrów jak koncentracja nośników czy temperatura. Ponadto pozostały niewyjaśnione pewne szczegóły charakterystyki spektralnej QE, takie jak np. istnienie dwóch punktów progowych wzrostu krzywej QE w funkcji $h\nu$. Fakty te stały się inspiracją dla prób ulepszenia modelu Antoncik'a i Tauc'a.

Celem niniejszej pracy jest zaproponowanie ulepszonego modelu i wykonanie obliczeń charakterystyk spektralnych wydajności kwantowej wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ z wąską przerwą energetyczną, tj. dla składów molowych $0.2 < x < 0.4$. Ulepszenie modelu polega na uwzględnieniu antysymetryzacji funkcji wieloelektronowych oraz wykorzystaniu opisu struktury pasmowej i funkcji falowych wg modelu Kane'a [5]. Dzięki wymienionym ulepszeniom uzyskano interesujące rezultaty m.in. teoretyczne zależności wartości wydajności kwantowej od wartości przerwy energetycznej i koncentracji elektronów w półprzewodniku. To z kolei pozwoliło na bardziej, niż czyniono dotąd, wnikliwą dyskusję zebranych danych doświadczalnych. Wykonano ponadto pomiary mające na celu eksperymentalną weryfikację wpływu ekranowania na wydajność kwantową, przewidywanego przez model zaproponowany w tej pracy. Fragmenty niniejszej pracy zostały opublikowane w [6,7].

2. WEWNĘTRZNY EFEKT FOTOELEKTRYCZNY W PÓLPRZEWODNIKACH

2.1. Ogólna charakterystyka efektu.

Wewnętrznym efektem fotoelektrycznym nazywa się zjawisko generacji par elektron-dziura w półprzewodniku będącej następstwem absorpcji podstawowej fotonów, dla uproszczenia pomijając efekty inne niż przejścia pasmo-pasmo. Zjawisko to doczekało się bardzo wielu opracowań monograficznych (patrz np [8]). Uważając, iż nie byłoby celowe obszerne streszczanie tych opracowań podamy w niniejszym rozdziale tylko bardzo ogólny opis trzech podstawowych typów zjawisk fotoelektrycznych, związanych z wewnętrznym efektem fotoelektrycznym: efektu foto-przewodnictwa (PC), efektu foto-elektro-magnetycznego (PEM), oraz efektu foto-woltaicznego (PV).

Efekt foto-przewodnictwa polega na wzroście przewodnictwa próbki półprzewodnika spowodowanym wzrostem koncentracji nośników lub wzrostem ich ruchliwości (bądź zmianą obu) wywołaną przez absorbowane fotony. Typowy układ do obserwacji efektu PC przedstawiono na rys.1. Zmiana przewodnictwa właściwego półprzewodnika w tym efekcie, przy założeniu że zmiany ruchliwości elektronów i dziur, μ_e i μ_h , są pomijalnie małe, wyraża się wzorem:

$$\Delta \sigma = e\mu_e \Delta n + e\mu_h \Delta p \quad (1)$$

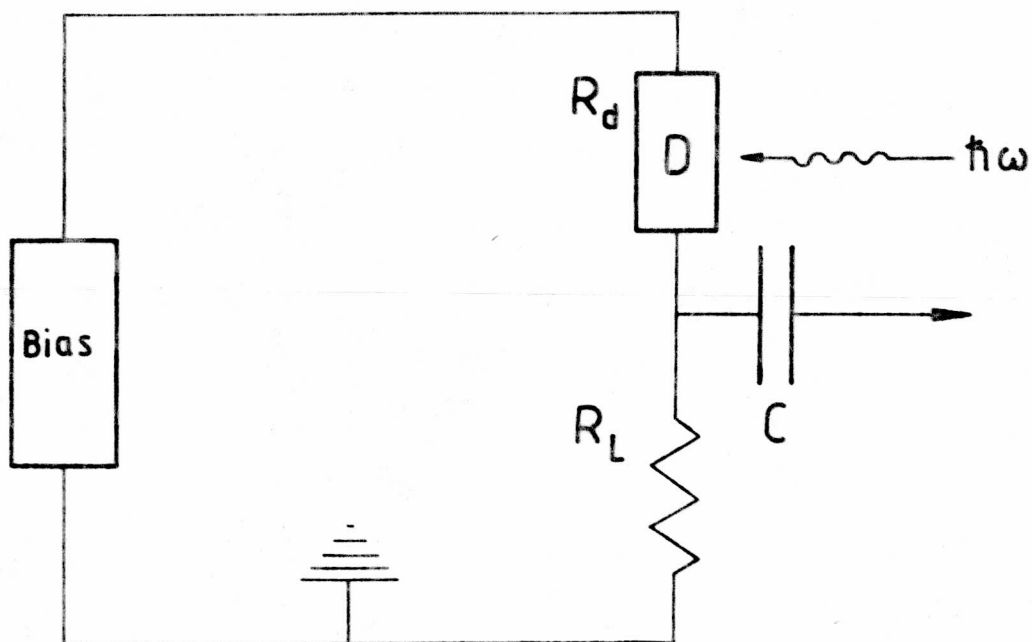
gdzie Δn i Δp to koncentracje nadmiarowe, odpowiednio, elektronów i dziur, powstałe na skutek oświetlenia próbki.

Efekt foto-elektro-magnetyczny polega na pojawieniu się siły elektromotorycznej w próbce półprzewodnika w wyniku jego oświetlenia przy jednoczesnym działaniu pola magnetycznego. Generowane głównie przy powierzchni półprzewodnika pary elektron-dziura (e-h) dyfundują w głąb próbki. Na skutek działania siły Lorentza tory elektronów i dziur są odchylane w przeciwnych kierunkach przez co następuje rozseparowanie różnoimiennych ładunków i pojawienie się siły elektromotorycznej. Wartość siły elektromotorycznej, U_{PEM} przy konfiguracji pola magnetycznego, elektrod i oświetlenia względem półprzewodnika, pokazanej na rys.2 oraz przy zaniedbaniu rekombinacji powierzchniowej wyraża się wzorem:

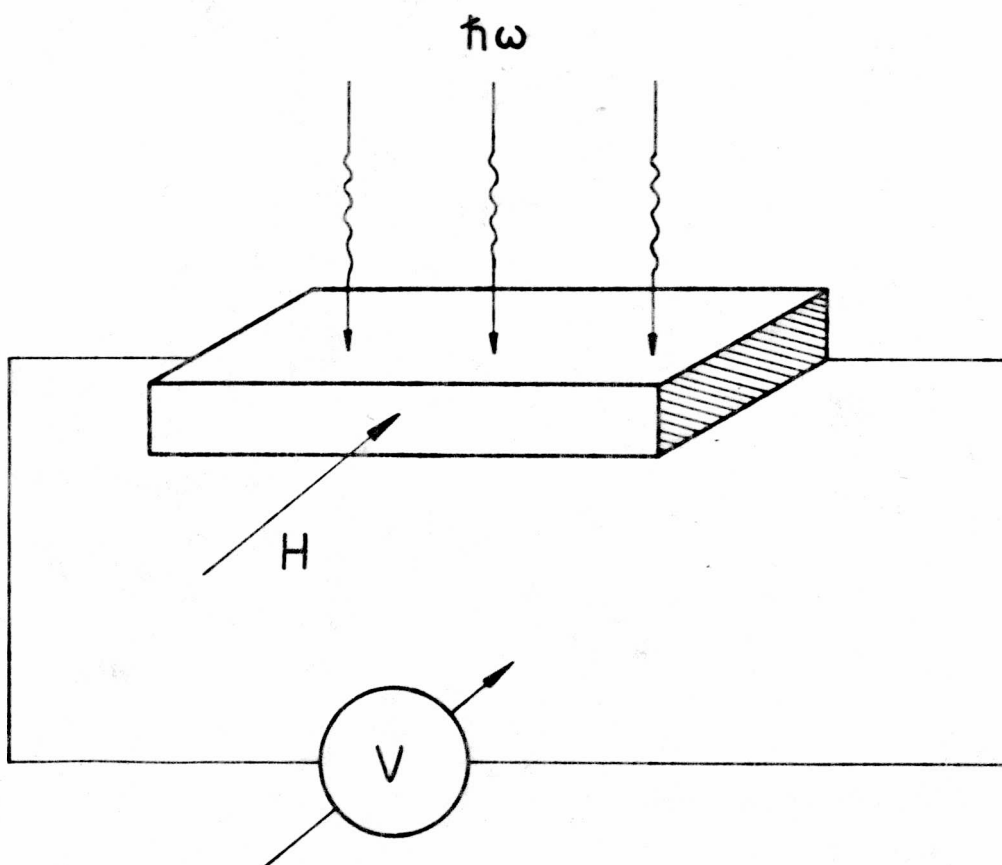
$$U_{PEM} = \frac{e\Gamma L(\mu_e + \mu_h)B}{\sigma} \quad (2)$$

gdzie Γ jest prędkością generacji par e-h, B indukcją pola magnetycznego, L-średnią drogą dyfuzji ambipolarnej, a σ - przewodnictwem próbki.

Efekt foto-woltaiczny polega na pojawieniu się siły elektromotorycznej w próbce półprzewodnika na skutek jego oświetlenia, przy czym warunkiem koniecznym wystąpienia tego efektu jest istnienie w półprzewodniku bariery potencjału. Generowane przez fotony pary e-h rozdzielane są w polu elektrycznym bariery potencjału, co powoduje różnoimienne ładowanie się obszarów po jej dwóch stronach, a więc pojawienie się siły elektromotorycznej. Efekt ten zostanie bardziej szczegółowo omówiony w jednym z następnych rozdziałów, ponieważ w części eksperymentalnej niniejszej pracy wykonywano właśnie pomiary efektu PV.



Rys.1. Typowy układ służący do obserwacji efektu fotoprzewodnictwa.



Rys.2. Układ służący do obserwacji efektu fotoelektromagnetycznego.

2.2. Wydajność kwantowa.

Z formalnego punktu widzenia wydajność kwantowa efektu fotoelektrycznego przyjmuje wartość 1 lub 0 w zależności od tego czy proces "wyprodukowania" przez foton swobodnego nośnika prądu (lub pary nośników) zaszedł czy nie, odpowiednio. W pracach eksperymentalnych używa się natomiast często (choć niefortunnie) pojęcia wydajności kwantowej w sensie ilości nośników prądu "odebranych" od próbki a wytworzonych przez jeden foton. W niniejszej pracy pojęcie "wydajność kwantowa" używane będzie w jej poprawnym znaczeniu.

Podkreślić jednak należy trudność (a nawet wątpliwą możliwość) eksperymentalnego wyznaczenia wydajności kwantowej. Eksperymentalnie określić można bowiem, z jednej strony, jedynie ilość fotonów padających na powierzchnię próbki, odbitych od niej i przez nią przepuszczonych (nie zaś ilość fotonów generujących swobodne nośniki) oraz, z drugiej strony, jedynie wartość napięcia lub natężenia prądu (lub obu) zarejestrowanego przez obwód zewnętrzny (nie zaś ilość nośników wygenerowanych przez fotony). Faktycznie, analizując wyniki eksperymentalne i ograniczając rozważania do procesów generacji typu pasmo-pasmo musimy uzyskać odpowiedzi na cztery podstawowe pytania (patrz [9]):

- a - jaka ilość (część strumienia) fotonów padających na powierzchnię próbki została zaabsorbowana w procesach generacji międzypasmowej? Jest to tzw. wydajność kolekcji (wychwytu) fotonów, PCE ;
- b - jaką ilość nośników (lub ich par) wytworzył efektywnie każdy z fotonów uczestniczący w procesie generacji

- międzypasmowej? Jest to właśnie wydajność kwantowa, QE ;
- c - jaka część (ilość) wygenerowanych nośników zdołała dotrzeć do kontaktów zewnętrznych, w przeliczeniu na jedną parę e-h generowaną w procesie absorpcji? Jest to tzw. wydajność kolekcji (zbierania) nośników, CCE ;
- d - jaka jest efektywność przetwarzania zebranych na kontaktach nośników w sygnał (prądowy, napięciowy lub mocy) rejestrowany przez odbiornik? Jest to tzw. wydajność przetwarzania, CE, zależna od parametrów elektrycznych próbki (np. jakości złącza p-n, kontaktów, procesów rekombinacji, etc).

Jak widać w punkcie b powyżej, tak zdefiniowana wydajność kwantowa będzie więc przyjmowała wartości $QE \geq 1$, a jej relacja do tzw. ogólnej wydajności przetwarzania energii padającego promieniowania, TCE (często mylnie utożsamianej z wydajnością kwantową procesu fotoelektrycznego - patrz wyżej) dana jest przez zależność [9] :

$$TCE = PCE \cdot QE \cdot CCE \cdot CE \quad (3)$$

Wielkości wprowadzone powyżej będą używane w dalszej części pracy.

2.3. Efekt fotowoltaiczny w złączu p-n

Jak już zostało powiedziane w rozdziale 2.1. warunkiem koniecznym wystąpienia efektu PV jest obecność bariery potencjału w obszarze generacji par e-h lub w jego pobliżu, nie dalej jednak niż średnia droga dyfuzji nośników mniejszościo-

wych. W praktyce warunek ten realizowany jest w ogólności na trzy zasadniczo różne sposoby: poprzez wytworzenie w próbce tzw. homoziłącza p-n, wytworzenie heteroziłącza półprzewodników, lub złącza metal-półprzewodnik. Efekt foto-woltaiczny wraz z analizą wydajności PCE, CCE, QE, OCE i TCE zostanie poniżej omówiony na przykładzie homoziłącza p-n.

Rysunek 3 przedstawia przekrój poprzeczny detektora PV z homoziłączem p-n. Przedmiotem naszego zainteresowania będzie przypadek, kiedy absorpcja fotonów a zatem i generacja par e-h następuje głównie w obszarze typu n, czyli przed barierą potencjału. Ma to praktycznie miejsce ze względu na silne pochłanianie w interesującym nas zakresie energii fotonów, $h\nu > 2 E_g$. Należy ponadto dodać, że w praktyce możliwy jest pomiar siły elektromotorycznej efektu PV bezpośrednio poprzez pomiar napięcia przy rozwartym obwodzie zewnętrznym detektora. Mają zatem miejsce, w stanie ustalonym, następujące fakty:

- absorpcja podstawowa fotonów w obszarze typu n, w obszarze złącza oraz (na ogół pomijalnie mała) w obszarze typu P, z wydajnością

$$PCE = 1 - R - T - A \quad (4)$$

gdzie R - to energetyczny współczynnik odbicia fotonów,

T - energetyczny współczynnik transmisji fotonów
(w rozpatrywanym zakresie energii fotonów równy praktycznie zero)

A - energetyczny współczynnik absorpcji fotonów w procesach innych niż absorpcja podstawowa pasmo-pasmo;

- generacja par e-h z wydajnością QE, będąca przedmiotem

- zainteresowania niniejszej pracy; oraz
- kolekcja (rozdzielanie) nośników z wydajnością CCE, którą dla pytkiego złącza n-na-p z zaniedbywalną rekombinacją w obszarze złącza można wyrazić wzorem (z pominięciem wkładu do CCE z obszaru bazy typu p) [10] :

$$CCE = \frac{\alpha L_h}{\alpha^2 L_h^2 - 1} \left\{ -\alpha L_h \exp(-\alpha t) + \frac{SL_h + \alpha L_h \exp(-\alpha t) [SL_h \cosh(t/L_h) + \sinh(t/L_h)]}{SL_h \sinh(t/L_h) + \cosh(t/L_h)} \right\} + \exp(-\alpha t) [1 - \exp(-\alpha d)] , \quad (5)$$

gdzie: α jest współczynnikiem absorpcji pasmo-pasmo, L_h jest drogą dyfuzji dziur w obszarze typu n, t i d są grubościami obszarów typu n i złącza p-n, odpowiednio, a S jest stosunkiem szybkości rekombinacji powierzchniowej do długości drogi dyfuzji dziur w obszarze typu n.

Przy rozwartym obwodzie zewnętrznym złącze na skutek oświetlenia polaryzuje się w kierunku przewodzenia do pewnej wartości U_{OC} , na ogół mniejszej od wartości tzw. napięcia dyfuzyjnego, będącego różnicą quazi-poziomów Fermiego po obu stronach złącza (patrz rys.4). Pomiar napięcia w tej sytuacji, przy znanej jednocześnie charakterystyce I-V, pozwala na określenie wartości gęstości prądu a zatem i ilości par ulegających rozdzieleniu (patrz poniżej). Jednoczesny pomiar mocy oświetlenia próbki pozwala na eksperymentalne określenie tzw. całkowitej wydajności kolekcji, CCE, [9] będącej iloczy-

nem trzech wydajności wspomnianych powyżej, tj.

$$OCE = PCE \cdot QE \cdot CCE \quad (6)$$

Jeśli chcemy uzyskać z foto-przetwornika energię, wówczas w obwodzie zewnętrznym występuje oporność obciążenia R_0 . Schemat elektryczny zastępczy takiego układu pokazany jest na rys.5. Charakterystyka prądowo-napięciowa jest dla takiego układu dana wyrażeniem

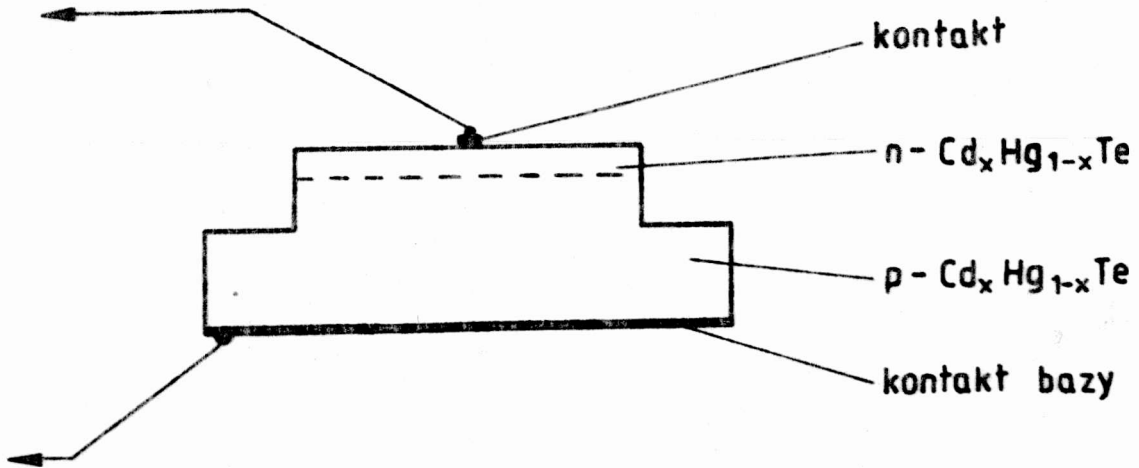
$$I = I_S \left[\exp \frac{q(U - IR_S)}{nk_B T} - 1 \right] + \frac{U - IR_S}{R_p} - I_{SC} \quad (7)$$

gdzie I_S jest prądem nasycenia (w kierunku wstecznym), k_B i T to stała Boltzmanna i temperatura, R_S i R_p to oporność szeregową i równoległą (upływu), a n to tzw. współczynnik diodowy (zależny głównie od mechanizmu rekombinacji).

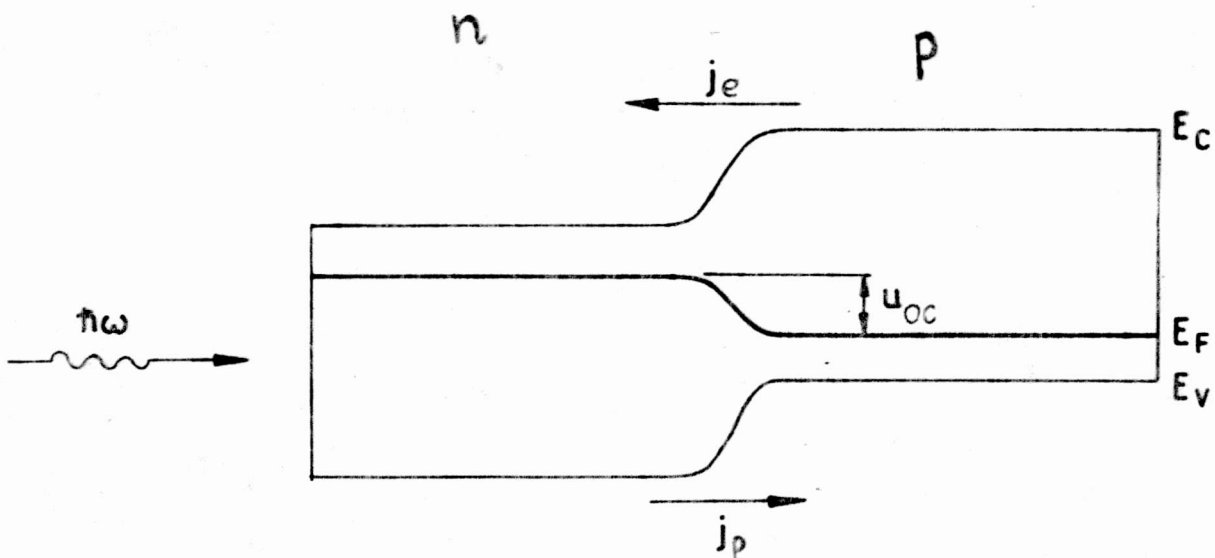
Typowe kształty charakterystyk prądowo-napięciowych złącza p-n nieoświetlonego i oświetlonego pokazano na rys.6. Dla płytkiego złącza idealnego, w którym $R_p \approx \infty$, $R_S \approx 0$, oraz $n = 2.5$ (dominują procesy rekombinacji w obszarze bariery potencjału), z kształtu charakterystyki można określić wartość j_{SC} (lub I_{SC}). Jest ona równa, z drugiej strony,

$$j_{SC} = q \int_{\hbar\omega_1}^{\hbar\omega_2} \varphi(\hbar\omega) \cdot OCE(\hbar\omega) d\hbar\omega \quad (8)$$

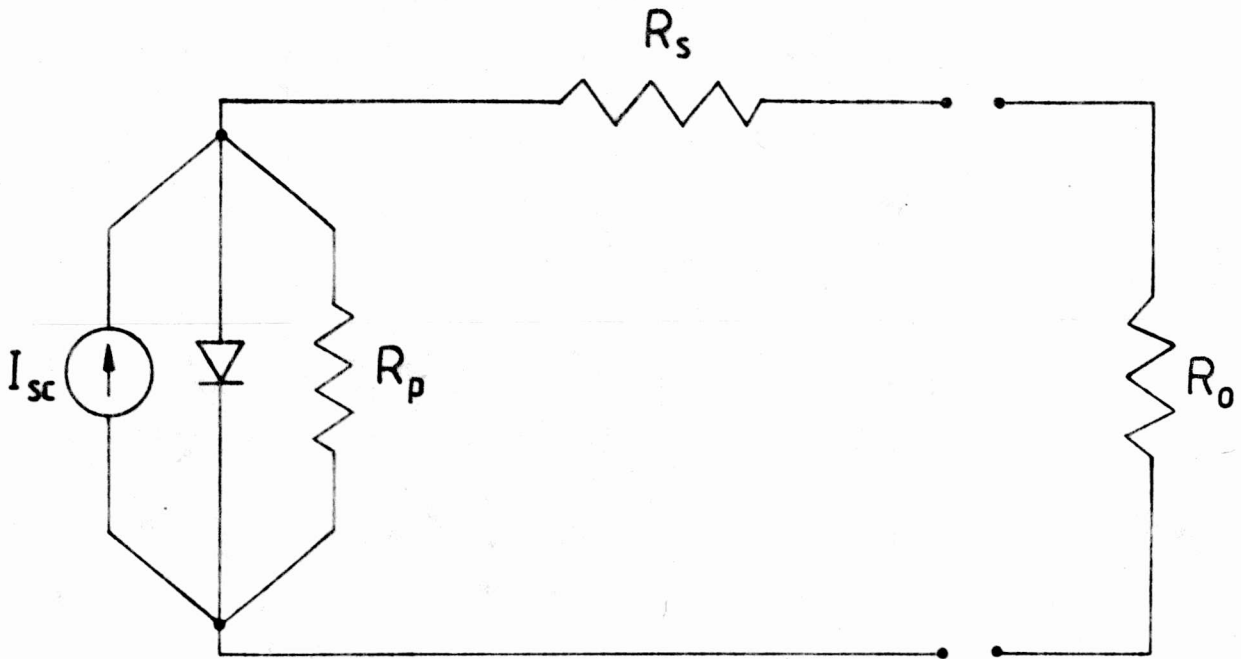
gdzie φ jest natężeniem strumienia fotonów o energii w przedziale $(\hbar\omega_1, \hbar\omega_2)$.



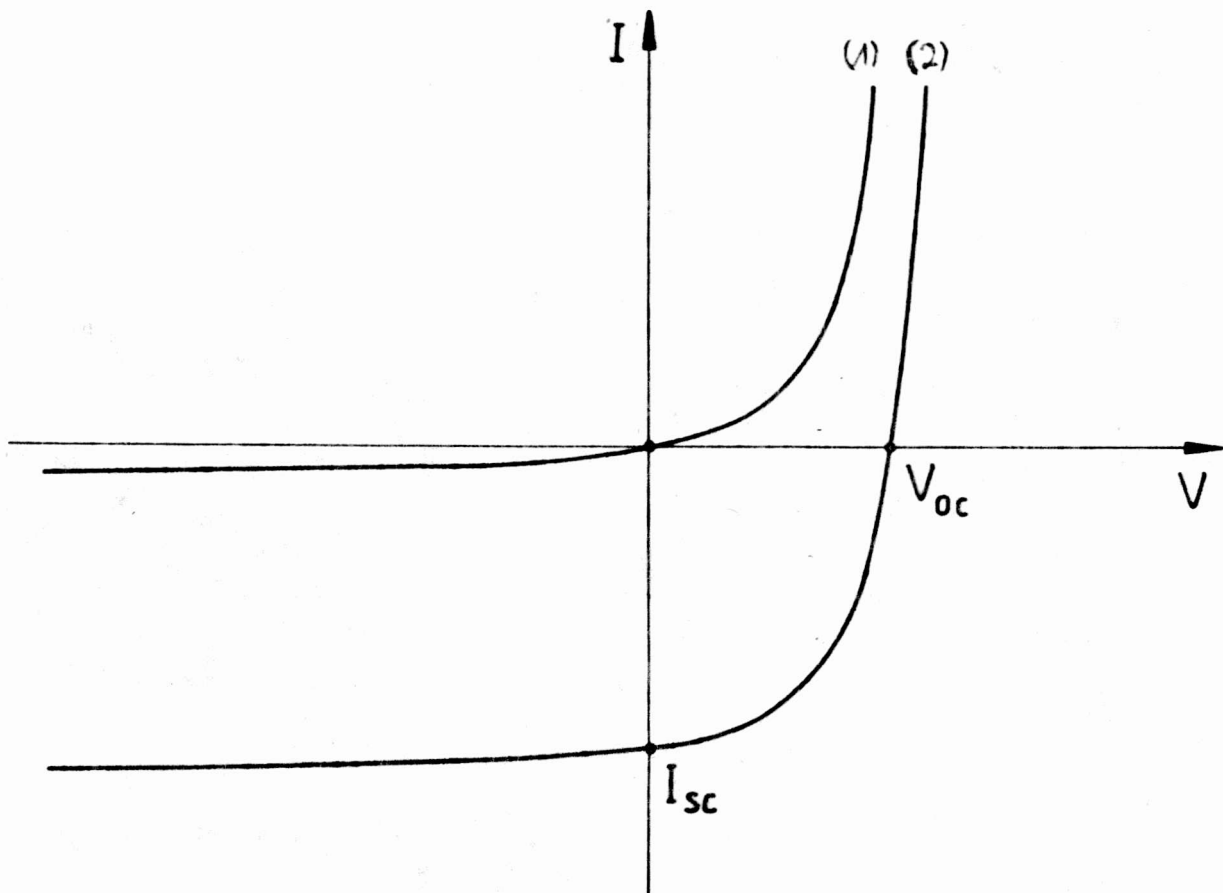
Rys.3. Przekrój poprzeczny detektora fotowoltaicznego z homozłączem p-n.



Rys.4. Schemat energetyczny złącza p-n spolaryzowanego w kierunku przewodzenia na skutek pojawienia się napięcia fotowoltaicznego, j_e - prąd przewodzenia, j_p - prąd fotoelektryczny, E_c - brzeg pasma przewodnictwa, E_v - brzeg pasma walencyjnego, E_f - poziom fermiego.



Rys.5. Układ zastępczy detektora fotowoltaicznego,
 R_p - oporność równoległa, R_s - oporność szeregową,
 R_o - oporność obciążenia.



Rys.6. Charakterystyki prądowo-napięciowe detektora
 fotowoltaicznego nieoświetlonego (1) i oświet-
 lonego (2).

Niestety, szczególnie założenie $R_S = 0$ jest nieprawdziwe w praktyce i straty prądowe na oporności wewnętrznej utrudniają określenie OCE tą drogą. Pozostaje wtedy pomiar bezprądowy, tj. pomiar wartości U_{OC} ; którą, jak widać z równania (7) dla $I = 0$ i $R_p \approx \infty$, można zapisać jako

$$U_{OC} = \frac{n k_B T}{q} \ln \left(\frac{I_{SC}}{I_S} + 1 \right) \approx C_1 \ln I_{SC} - C_2 \quad (9)$$

gdzie C_1 i C_2 są stałe w warunkach eksperymentu. Dla oświetlenia monochromatycznego

$$J_{SC} = q \phi_{hw} \text{ OCE} \quad (10)$$

oraz, z równania (9), zakładając pomijalnie mały prąd wsteczny nasycenia,

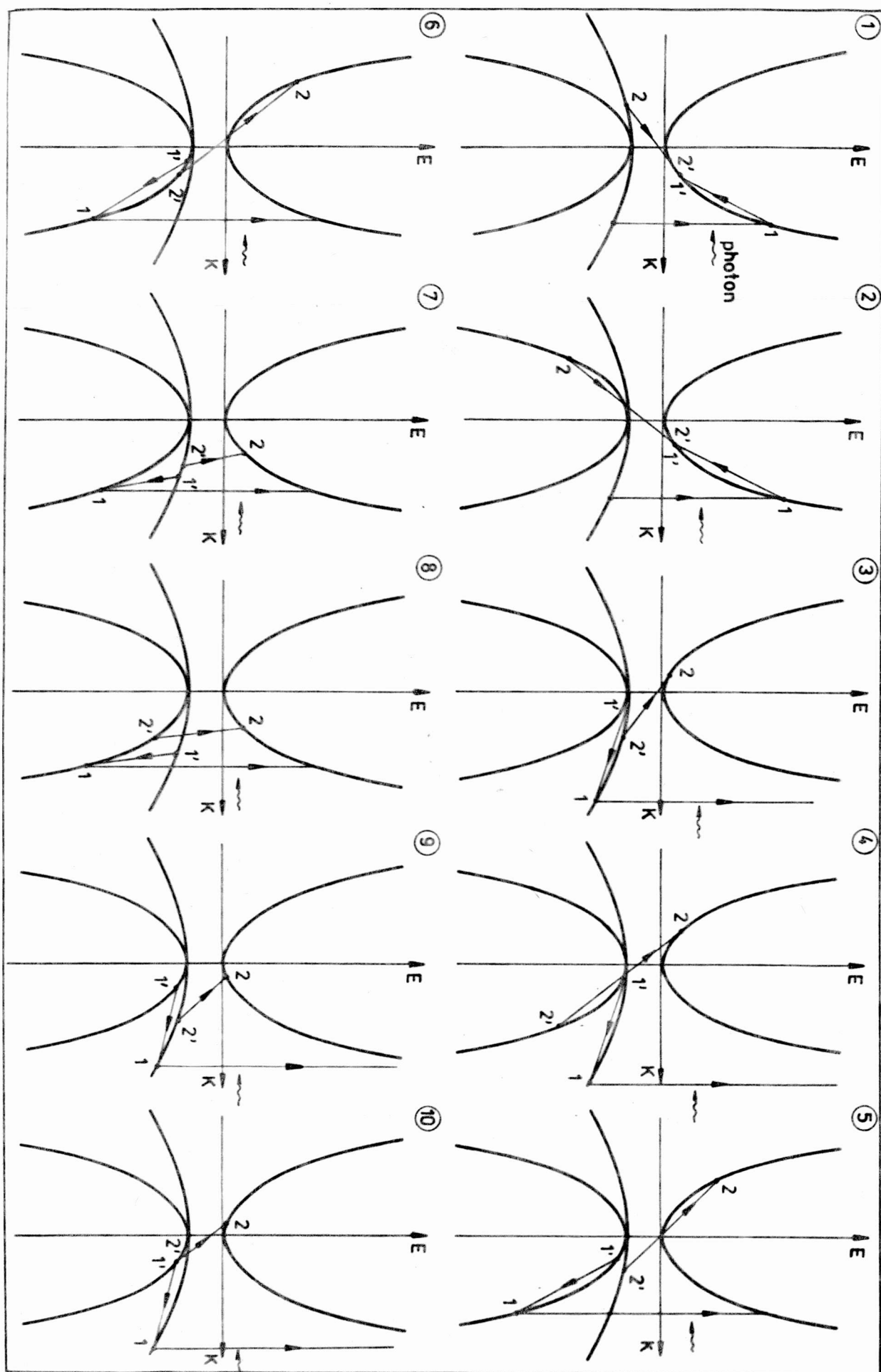
$$J_{SC} = \frac{I_S}{A_S} \exp \left(\frac{U_{OC}}{C_1} \right) \quad (11)$$

gdzie A_S jest powierzchnią przekroju złącza p-n.

Z pomiarów napięcia U_{OC} w warunkach rozwarcia oraz przy założeniu "idealności" złącza można zatem określić wartość OCE. Zakładając że zależność CCE od wartości energii fotonów wyraża się jedynie poprzez zależność d od hw (co jest założeniem zupełnie dobrym) oraz znając PCE dla danej energii fotonów, można określić eksperymentalnie wartość QE.

2.4. Model Antoncik'a - Tauc'a dla InSb.

Teoretyczny model wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w InSb zaproponowany przez Antoncik'a i Tauc'a w 1966 r. [2] zakłada następujący przebieg zjawiska: wnikające do próbki półprzewodnika fotony o energii $2E_g > \hbar\omega > E_g$ ulegają absorpcji podstawowej powodując przejścia elektronów z pasma dziur ciężkich i lekkich do pasma przewodnictwa. Energia wzbudzonych nośników (elektronów i dziur) ulega rozpraszaniu na skutek oddziaływania z fotonami optycznymi i akustycznymi oraz oddziaływania nośnik-nośnik. Wydajność kwantowa efektu fotoelektrycznego w tym zakresie energii fotonów jest równa jedności. Jeżeli energia kinetyczna niektórych wzbudzonych elektronów w paśmie przewodnictwa jest większa od $2E_g$ wówczas, dodatkowo, może nastąpić jonizacja zderzeniowa będąca procesem odwrotnym do rekombinacji typu Auger'a. W jej wyniku, kosztem energii wzbudzonego pierwotnie nośnika, wygenerowana zostaje dodatkowa para e-h, a więc QE wzrośnie powyżej jedności. Istnieje dziesięć możliwych konfiguracji przejść typu Auger'a pokazanych na rys.7, z których, jak się okazuje, jedynie przejścia nr 1 i nr 7 odgrywają istotną rolę w generacji dodatkowych par nośników. W obliczeniach przeprowadzonych przez Antoncik'a i Tauc'a uwzględniono faktycznie tylko przejście nr 1, ponieważ przejście nr 7 jest mniej prawdopodobne i ponadto wymaga wzbudzania elektronów z pasma dziur lekkich. Przejścia z pasma dziur lekkich ze względu na wyraźnie mniejszą gęstość stanów w tym paśmie, są znacznie mniej prawdopodobne niż przejścia z pasma dziur ciężkich (stosunek współczynników absorpcji obu tych przejść wynosi około 0.14 [11]). W przejściu nr 1 uwzględniono tylko elektrony wzbudzone



Rys. 7. Dziesięć możliwych konfiguracji przejść typu Auger'a.

z pasma dziur ciężkich ponieważ po pierwsze, ze względu na wspomnianą różnicę współczynników absorpcji, liczba ich o mniej więcej jeden rząd wielkości przewyższa liczbę elektronów z pasma dziur lekkich i po drugie, ze wzrostem energii fotonów elektrony z pasma dziur ciężkich pierwsze osiągają próg energetyczny, powyżej którego może nastąpić jonizacja zderzeniowa.

Wydażność kwantową przy przyjętych założeniach można wyrazić wzorem wg [11]

$$QE = 1 + \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} P_I(E_0, \infty) \quad (12)$$

gdzie α_1 i α_2 są współczynnikami absorpcji odpowiednio dla pasma dziur ciężkich i lekkich a $P_I(E_0, t)$ jest prawdopodobieństwem, że elektron wzbudzony w wyniku absorpcji podstawowej fotonu na poziom energetyczny E_0 wywoła jonizację zderzeniową do chwili t .

Prawdopodobieństwo $P_I(E_0, t)$ spełnia [11] równanie :

$$\frac{d}{dt} P_I(E_0, t) = P(E)(1 - P_I(E_0, t)) \quad (13)$$

gdzie $P(E)$ jest prawdopodobieństwem zajścia jonizacji zderzeniowej w jednostce czasu dla elektronu o energii E .

Wstawiając rozwiązanie równania (13) do wzoru (12) otrzymuje się zależność:

$$QE = 1 + \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2} \left(1 - \exp - \int_{E_i}^{E_0} P(E)/R(E) dE \right) \quad (14)$$

w której całkowanie po czasie zostało zamienione na całkowanie po energii, E_i jest progiem energetycznym, poniżej którego nie

może wystąpić jonizacja zderzeniowa, $R(E) = dE/dt$ jest szybkością rozpraszania energii elektronu.

Jak widać z zależności (14) obliczenie spektralnej charakterystyki QE wymaga znajomości funkcji $P(E)$ i $R(E)$. Prawdopodobieństwo $P(E)$ wyraża się zależnością:

$$P(E) = \sum_{k'_1 k'_2 k_2} w_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} \quad (15)$$

gdzie $w_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ jest prawdopodobieństwem przejścia Auger'a z udziałem elektronu jonizującego znajdującego się w paśmie przewodnictwa w stanie o wektorze falowym k_1 oraz elektronu z pasma dziur ciężkich znajdującego się w stanie o wektorze falowym k_2 , stany końcowe elektronów odpowiadają wektorom falowym k'_1, k'_2 a sumowanie obejmuje pierwszą strefę Brillouina. Przejścia Auger'a spowodowane są bliskozasięgowym oddziaływaniem elektronów a ich prawdopodobieństwa, $w_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$, obliczono stosując pierwszy rząd rachunku zaburzeń zależnych od czasu, przy następujących założeniach:

- i) Hamiltonian wieloelektronowy jest sumą hamiltonianów jednoelektronowych przybliżenia Hartree-Focka;
- ii) Funkcje falowe wieloelektronowe mają postać iloczynów funkcji jednoelektronowych; oraz
- iii) Różnica między pełnym Hamiltonianem a Hamiltonianem przybliżenia Hartree-Focka traktowana jest jako stałe zaburzenie włączone w pewnej chwili czasu t i ma postać ekranowanego potencjału oddziaływania między elektronami :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{e^2}{r_{ij}} \exp - \lambda^{-1} r_{ij} \quad (16)$$

gdzie $r_{ij} = |r_i - r_j|$, r_i i r_j są wektorami wodzącymi elektronów i ij a λ jest stałą ekranowania.

Prawdopodobieństwo $W_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ można wyrazić wówczas zależnością:

$$W_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}|^2 \delta(E_1 + E_2 - E'_1 - E'_2) \quad (17)$$

gdzie

$$M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = \int d\tau_1 d\tau_2 U_{ck_1}^* e^{-ik_1 r_1} U_{hk_2} e^{-ik_2 r_2} \cdot \\ \cdot \frac{e^2 \exp - \frac{r_{12}}{\lambda}}{r_{12}} U_{ck'_1} e^{ik_1 r_1} U_{ck'_2} e^{ik_2 r_2}$$

jest elementem macierzowym przejścia, E_1 , E_2 , E'_1 i E'_2 są energiami stanów biorących udział w przejściu, a litery h i c oznaczają stany pasma dziur ciężkich i pasma przewodnictwa, odpowiednio.

Szybkość rozpraszania energii elektronu, $R(E)$, obliczano przy założeniu, że główną rolę w rozpraszaniu odgrywają fonony optyczne, wówczas

$$R(E) = -\hbar\omega_c \sum_q (W_{k_1 k_1+q} - W_{k_1 k_1-q}) \quad (18)$$

gdzie $\hbar\omega_c$ jest energią fononu, $W_{k_1 k_1+q}$ jest prawdopodobieństwem absorpcji a $W_{k_1 k_1-q}$ prawdopodobieństwem emisji fononu przez elektron.

Obliczenia prawdopodobieństw jonizacji zderzeniowej, $P(E)$, wymagają znajomości wartości tzw. całek przekrycia (patrz rozdz.3.2) mających postać:

$$F = \int U_{n,k}^*(r) U_{n',k'}(r) d^3r \quad (19)$$

gdzie całkowanie obejmuje obszar komórki elementarnej. W przypadku gdy znane są jawne postaci funkcji falowych obliczanie całek przekrycia nie stwarza żadnych trudności, gdy funkcje falowe nie są znane konieczne jest stosowanie przybliżeń. W pracy Antoncik'a i Tauc'a zastosowano następujące przybliżenie: całkę przekrycia przedstawiono w postaci:

$$I(k)_{nq}^{n'q'} = \int U_{n',k+q'}^* U_{n,k+q} d^3r \quad (20)$$

gdzie q i q' są na tyle małe aby można było stosować rezultaty pierwszego rzędu rachunku zaburzeń metody $\hat{k}p$. Rozwijając funkcje $U_{n,k+q}$ w szereg względem q oraz pomijając składniki zawierające wyższe niż jeden potęgę q wyprowadza się zależności:

$$\left| I(k)_{nq}^{n'q'} \right|^2 \approx 1 \quad (21)$$

jeśli $n = n'$, oraz gdy $n \neq n'$:

$$\left[E_{n'}(k) - E_n(k) \right] \left| I(k)_{nq}^{n'q'} \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (q_{\alpha'} - q_{\alpha})(q_{\beta'} - q_{\beta}) f_{n'n}^{(\alpha\beta)}(k) \quad (22)$$

gdzie $f_{n'n}^{(\alpha\beta)}(k)$ jest siłą oscylatora definiowaną jako:

$$f_{n'n}^{(\alpha\beta)}(k) = \frac{V_{nn'}^{\alpha} V_{n'n}^{\beta} + V_{n'n}^{\alpha} V_{nn'}^{\beta}}{E_{n'}(k) - E_n(k)} m_0 \quad (23)$$

$V_{n'n}$ są elementami macierzowymi operatora prędkości uwzględniającymi efekty spin-orbita.

Jak wiadomo siła oscylatora spełnia regułę f-sum a więc podobną regułę można wyprowadzić dla całek przekrycia:

$$\begin{aligned} \sum_{n'} [E_{n'}(k) - E_n(k)] |I(k)_{nq}^{n'q'}|^2 &= \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} (q - q')^2 - \sum_{\alpha, \beta=1}^3 (q'_\alpha - q_\alpha)(q'_\beta - q_\beta) \left(\frac{1}{m} \right)_{nn'}^{\alpha\beta} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

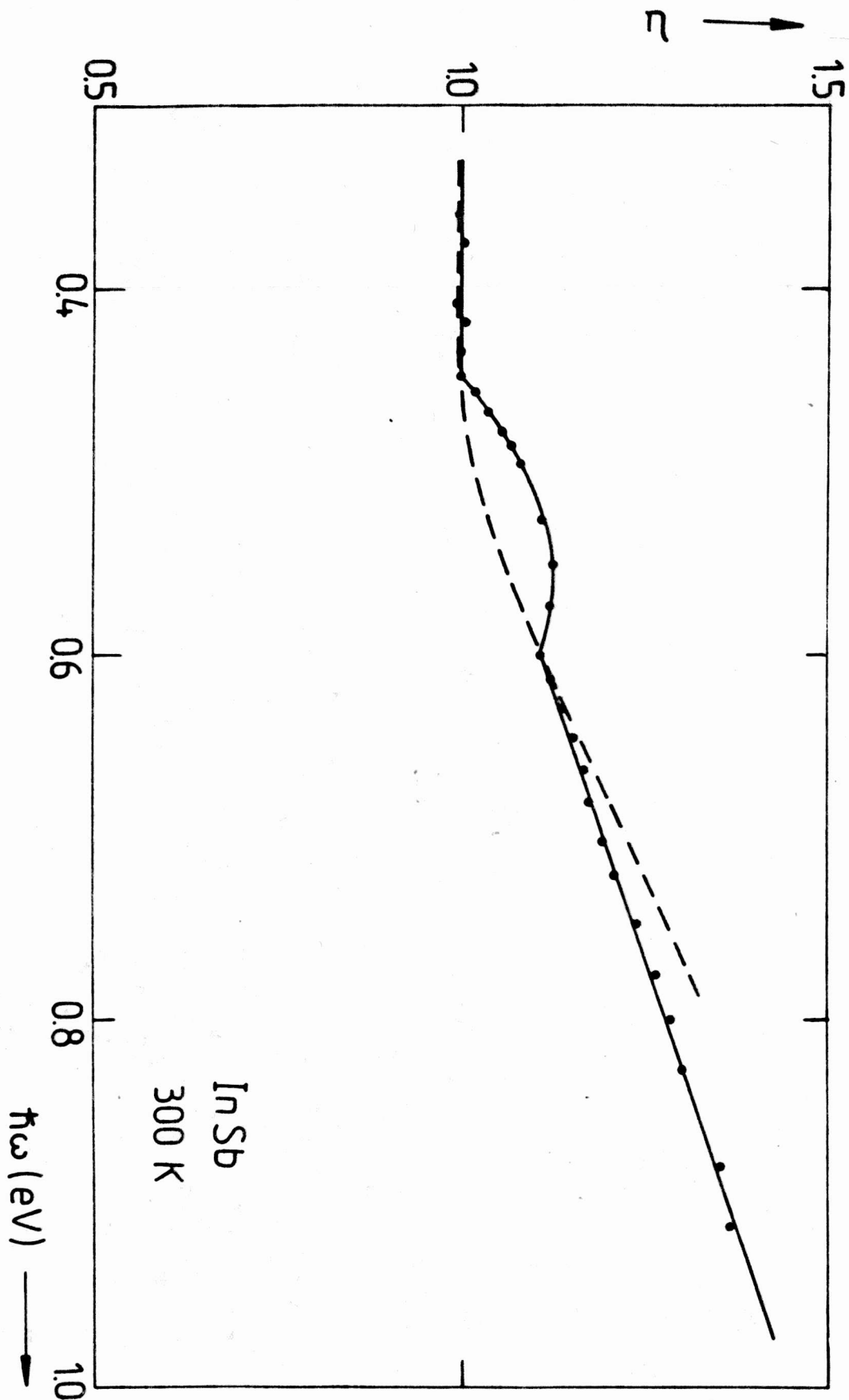
Powyższe równanie umożliwia obliczenie całek przekrycia, w oparciu o dane liczbowe masy efektywnej lub siły oscylatora (szczegóły - patrz [2]).

Przy obliczeniach szybkości rozpraszania energii elektronu, $R(E)$, wykorzystano wzór Callena [12], a mianowicie dla pasma parabolicznego:

$$R(E) = \frac{2\pi (2m_e)^{\frac{1}{2}} (ce)^2}{M \Omega (\hbar\omega_0)^{\frac{1}{2}}} f_0 \left(\frac{E}{\hbar\omega_0}, \frac{kT}{\hbar\omega_0} \right) \quad (25)$$

gdzie M jest zredukowaną masą jonów, Ω objętością komórki elementarnej, a c^* efektywnym ładunkiem jonowym.

Wyniki obliczeń Antonicik'a i Tauc'a przedstawia rys.8.



Rys. Wydajność kwantowa $QE(\hbar\omega)$ dla InSb wg [2] ; linia przerywana - krzywa teoretyczna, linia ciągła - krzywa eksperymentalna .

3. MODEL WEWNĘTRZNEGO EFEKTU FOTOELEKTRYCZNEGO DLA

$\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ Z WĄSKĄ PRZERWĄ

3.1. Struktura pasmowa i funkcje falowe $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$

$\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ jest związkiem, który dla niewielkich składów x ($0.2 < x < 0.4$) jest zaliczany, podobnie jak InSb, do półprzewodników z wąską przerwą energetyczną. Funkcje falowe oraz opis struktury pasmowej w tym związku zostały wyprowadzone z modelu Kane'a [5], w przybliżeniu kryształu wirtualnego. Dla wartości przerw energetycznych $0 < E < 0.3$ eV oraz energii kinetycznej elektronu $E < E_g + \frac{2}{3}\Delta$ (gdzie Δ jest wartością rozszczepienia spin-orbita) czynniki modulujące funkcji Blocha mają postać [13]:

- dla dwukrotnie zdegenerowanego pasma przewodnictwa:

$$U_{k \frac{1}{2}} = (iaS - \frac{b - c\sqrt{2}}{2} \frac{k_+}{k} R_- + \frac{b + c\sqrt{2}}{2} \frac{k_-}{k} R_+ + \\ + c \frac{k_z}{k} Z) \uparrow - b(\frac{k_z}{k} R_+ - \frac{k_+}{k\sqrt{2}} Z) \downarrow \quad (26)$$

$$U_{k \frac{3}{2}} = (iaS + \frac{b + c\sqrt{2}}{2} \frac{k_+}{k} R_- - \frac{b - c\sqrt{2}}{2} \frac{k_-}{k} R_+ + c \frac{k_z}{k} Z) \downarrow + \\ + b(\frac{k_z}{k} R_- - \frac{k_-}{k\sqrt{2}} Z) \uparrow$$

- dla dwukrotnie zdegenerowanego pasma dziur ciężkich:

$$U_{k \frac{3}{2}} = \left(\frac{1}{2} \frac{k_+}{k} \delta R_- - \frac{1}{2} \frac{k_-}{k} \delta^{-1} R_+ + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} \delta Z \right) \dagger +$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_+}{k} \delta Z - \frac{k_z}{k} \delta R_+) \dagger$$

(27)

$$U_{k- \frac{3}{2}} = \left(\frac{1}{2} \frac{k_-}{k} \delta R_+ - \frac{1}{2} \frac{k_+}{k} \delta^{-1} R_- + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} \delta Z \right) \dagger +$$

$$\left(\frac{k_z}{k} \delta R_- - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_-}{k} \delta Z \right) \dagger$$

gdzie $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$; $R_{\pm} = (X \pm i Y)$; X, Y, Z, S są amplitudami Luttingera-Kohna, transformującymi się wg reprezentacji nieprzywiedlnej grupy tetraedru T_d , strzałki oznaczają przeciwnie zwroty spinu elektronu, a wielkości a, b i c opisywane są wzorami:

$$a^2 = 1 - L, \quad b^2 = \frac{1}{3} L, \quad c^2 = \frac{2}{3} L \quad (28)$$

gdzie $L = (E_g + 2E)E^{-1}$, oraz wielkość δ wyraża się wzorem:

$$\delta = \left[(k^2 - k_z^2)(k^2 + 3k_z^2)^{-1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Strukturę pasmową tellurku kadmowo-rtęciowego z wąską przerwą opisują zależności : dla pasma przewodnictwa :

$$E_c(k) = -\frac{1}{2} E_g \left[1 - \left(1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (29)$$

gdzie P jest elementem macierzowym pędu; oraz dla pasma walencyjnego przyjętego za płaskie:

$$E_v = -E_g \quad . \quad (30)$$

3.2. Model obliczeń wydajności kwantowej

Ze względu na podobieństwo struktur pasmowych InSb i $Cd_xHg_{1-x}Te$ z wąską przerwą, podejście Antoncika i Tauc'a do wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w InSb może być zastosowane do tellurku kadmowo-rtęciowego. Tak więc, podobnie jak w obliczeniach Antoncika i Tauc'a, uwzględniono w niniejszej pracy tylko wzbudzenia optyczne elektronów z pasma dziur ciężkich, przejście Auger'a nr 1 na rys.7 jako odpowiedzialne za generację dodatkowych par e-h, oraz oddziaływanie elektronów z fononami optycznymi jako przyczynę rozpraszania energii elektronu. Tak więc obowiązują wzory: (14) na wydajność kwantową, oraz (18) na szybkość rozpraszania energii elektronu. We wzorze (15) na prawdopodobieństwo jonizacji zderzeniowej, uwzględniono dodatkowe prawdopodobieństwa obsadzeń stanów biorących udział w przejściu. W celu obliczenia prawdopodobieństw przejść Auger'a, $W_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$, zachowano założenia modelu wy-

korzystanego przez Antoncik'a i Tauc'a za wyjątkiem punktu (ii) dotyczącego funkcji falowych wieloelektronowych, które w niniejszej pracy przyjęto w postaci wyznaczników Slater'a :

$$\varphi = \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^{n!} (-1)^{p_j} P_j (\psi_1(1) \psi_2(2) \dots \psi_n(n)) \quad (31)$$

gdzie n jest liczbą elektronów w układzie, $\psi_i(j)$ oznacza jednoelektronową funkcję falową i -tego elektronu przy czym j w argumencie funkcji oznacza komplet zmiennych przestrzennych i spinowej j -tego elektronu, P_j oznacza permutację układu zmiennych przy zachowanym ustawieniu funkcji $\psi_1 \dots \psi_n$ w iloczynie, p_j jest ilością przestawień w permutacji (lub parzystością permutacji) a sumowanie obejmuje wszystkie możliwe permutacje.

W przeciwieństwie natomiast do obliczeń wykonanych przez Antoncik'a i Tauc'a, (patrz rozdz.2.4) wykorzystano w niniejszej pracy jawne postaci funkcji falowych oraz opis struktury pasmowej przedstawiony w rozdz.3.1., przez co, oprócz spodziewanej większej dokładności obliczeń, uwzględniona została degeneracja pasm ze względu na rzut całkowitego momentu pędu elektronu na oś Z , symetria stanów, jak również przewidziano wpływ dodatkowych parametrów na wydajność kwantową takich jak stała ekranowania czy przerwa energetyczna. Poniżej przedstawiony zostanie szczegółowo sposób obliczeń prawdopodobieństw jonizacji zderzeniowej $P(E)$ oraz szybkości rozpraszania energii elektronu $R(E)$.

Prawdopodobieństwo jonizacji zderzeniowej, $P(E)$, obliczono z wzoru

$$P(E) = \sum_{k'_1 k'_2 k'_2} f'_1 f'_2 f'_2 W_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} \quad (32)$$

gdzie $f'_1 f'_2 f'_2$ są prawdopodobieństwami obsadzeń stanów odpowiadających wektorom falowym odpowiednio k'_1, k'_2 i k'_2 , będącymi funkcjami rozkładu Fermiego-Diraca a $W_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ wyraża się wzorem (17).

Element macierzowy $M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2}$ ma postać:

$$\begin{aligned} M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = & \int \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^{n!} (-1)^j P_j (\psi_1^*(1) \psi_2^*(2) \dots \psi_n(n)) \cdot \\ & \cdot \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{\epsilon r_{ij}} \exp(-\lambda^{-1} r_{ij}) \cdot \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^{n!} (-1)^k \cdot \\ & \cdot P_k (\psi_1(1) \psi_2(2) \dots \psi_n(n)) d\tau_1 d\tau_2 \dots d\tau_n \end{aligned} \quad (33)$$

gdzie stany początkowe ψ_1, ψ_2 oraz końcowe ψ_1', ψ_2' oddziałujących elektronów dla wygody umieszczono na pierwszych miejscach w iloczynie (co zawsze można zrobić), a znak $\int$ oznacza całkę wielokrotną po całej przestrzeni po zmiennych $r_1, r_2, \dots, r_n$ oraz sumowanie po odpowiednich zmiennych spinowych.

Dowodzi się (patrz [14]), że powyższe wyrażenie redukuje się do postaci:

$$M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = \frac{e^2}{\epsilon} \int (\psi_1^*(1) \psi_2^*(2) - \psi_1^*(2) \psi_2^*(1)) \cdot \frac{\exp - \lambda^{-1} r_{12}}{r_{12}} \cdot \psi_1'(1) \psi_2'(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (34)$$

gdzie znak $\int$ oznacza całkę dwukrotną po całej przestrzeni po zmiennych r_1 i r_2 oraz sumowanie po zmiennych spinowych σ_1 i σ_2 .

Wstawiając funkcje Blocha za funkcje falowe w/g wzorów:

$$\begin{aligned} \psi_1(1) &= U_{ck_1}(\sigma_1, r_1) e^{-ik_1 r_1} \\ \psi_2(2) &= U_{hk_2}(\sigma_2, r_2) e^{-ik_2 r_2} \\ \psi_1'(1) &= U_{ck'_1}(\sigma_1, r_1) e^{-ik'_1 r_1} \\ \psi_2'(2) &= U_{ck'_2}(\sigma_2, r_2) e^{-ik'_2 r_2} \end{aligned} \quad (35)$$

otrzymujemy następującą postać elementu macierzowego:

$$\begin{aligned} M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} &= \frac{e^2}{\epsilon} \int \frac{\exp - \lambda^{-1} r_{12}}{r_{12}} U_{ck_1}(1) U_{hk_2}(2) U_{ck'_1}(1) \\ &\quad U_{ck'_2}(2) e^{ir_1(k_1 - k'_1)} e^{ir_2(k_2 - k'_2)} d\tau_1 d\tau_2 \\ &- \frac{e^2}{\epsilon} \int \frac{\exp - \lambda^{-1} r_{12}}{r_{12}} U_{ck_1}(2) U_{hk_2}(1) U_{ck'_1}(1) \\ &\quad U_{ck'_2}(2) e^{ir_1(k_2 - k'_1)} e^{ir_2(k_1 - k'_2)} d\tau_1 d\tau_2 \end{aligned} \quad (36)$$

Kolejne uproszczenie polega na zastosowaniu następującego przybliżenia:

jeżeli funkcja $G(r)$ posiada periodyczność sieci krystalicznej a $F(r)$ jest wolnozmienna w stosunku do $G(r)$ to

$$\int_V F(r) G(r) d\tau \approx \frac{1}{V} \int_V G(r) d\tau \int_V F(r) d\tau \quad (37)$$

gdzie V oznacza objętość kryształu.

Zastosowanie powyższego przybliżenia we wzorze (36) upraszcza element macierzowy do postaci:

$$M_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon V} \left(\frac{F_3 F_1}{\lambda^{-2} + (k_2 - k'_2)^2} - \frac{F_2 F_4}{\lambda^{-2} + (k_1 - k'_1)^2} \right) \cdot \delta_{k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2} \quad (38)$$

gdzie

$$\begin{aligned} F_1 &= \int U_{hk_2}(2) U_{ck'_2}(2) d\tau_2 \\ F_2 &= \int U_{ck_1}(2) U_{ck'_2}(2) d\tau_2 \\ F_3 &= \int U'_{ck_1}(1) U_{ck_1}(2) d\tau_1 \\ F_4 &= \int U_{hk_2}(1) U_{ck'_1}(1) d\tau_1 \end{aligned} \quad (39)$$

są tzw. całkami przekrycia (znak $\int$ oznacza w tym wypadku całkowanie po zmiennej r_i i sumowanie po zmiennej spinowej σ_i).

Obecność delty Kroneckera $\delta_{k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2}$ w wyrażeniu świadczy o tym, że w rozpatrywanych przez nas przejściach obowiązuje zasada zachowania quasi-pędu.

Taką samą postać wyrażenia na element macierzowy otrzymuje się poprzez rozwinięcie czynników modulujących funkcji Blocha na fale płaskie i pominięcie pewnych małych składników (patrz [15]).

Łącząc wzory (38) i (17) ze wzorem (32), w którym sumowanie po wektorach falowych zamieniono na całkowanie, otrzymuje się ostateczne wyrażenia na prawdopodobieństwo jonizacji zderzeniowej $P(E)$:

$$P(E) = \frac{v^2}{(2\pi)^6} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{4\pi e^2}{\varepsilon V} \right)^2 \sum_{\substack{j_{z1}' \\ j_{z2}' \\ j_{z2}}} \int d\tau_{k_1} d\tau_{k_2} \quad (40)$$

$$W_{j_{z1}', j_{z2}', j_{z2}, k_1 k_2 k_1' k_2'} \cdot \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2')$$

gdzie

$$W_{j_{z1}', j_{z2}', j_{z2}, k_1 k_2 k_1' k_2'} =$$

$$= f_1' f_2 f_2' \left| \frac{F_{j_{z1}', j_{z1}} F_{j_{z2}, j_{z2}'}}{\lambda^{-2} + (k_2 - k_2')^2} - \frac{F_{j_{z1}, j_{z2}'} F_{j_{z2}, j_{z1}'}}{\lambda^{-2} + (k_1 - k_1')^2} \right|^2 \quad (41)$$

W otrzymanym przez nas wyrażeniu pojawia się dodatkowo sumowanie po liczbach kwantowych j_z oraz indeksy j_z przy całkach przekrycia, co związane jest z degeneracją pasm ze względu na rzut całkowitego momentu pędu elektronu na oś z .

Całkę przekrycia obliczane z wzorów (39) z wykorzystaniem funkcji danych wzorami (26) i (27) mają postać:

$$F_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}}(k_2, k') = \frac{b' + c' \sqrt{2}}{4} \left(\frac{k_{2-}}{k_2} \delta_2 \frac{k_+}{k'} - \frac{k_{2+}}{k_2} \delta_2^{-1} \frac{k_-}{k'} + 4 \frac{k_{2z}}{k_2} \frac{k'_z}{k'} \right)$$

$$F_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(k_1, k') = a_1 a' + \frac{k'_z}{k'} (c_1 c' + b_1 b')$$

$$F_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}(k_1, k') = \frac{k'_-}{k'} \left(\frac{b' - c' \sqrt{2}}{2} b_1 - \frac{c_1 b'}{\sqrt{2}} \right) \quad (42)$$

$$F_{\frac{3}{2} - \frac{1}{2}}(k_2, k') = \frac{b' + c' \sqrt{2}}{2} \delta_2 \left(\frac{k_{2-}}{k_2} \frac{k'_z}{k'} - \frac{k_{2z}}{k_2} \frac{k'_-}{k'} \right)$$

$$F_{-\frac{3}{2} - \frac{1}{2}}(k_2, k') = \overline{F_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}}(k_2, k')}$$

$$F_{-\frac{3}{2} \frac{1}{2}}(k_2, k') = - \overline{F_{\frac{3}{2} - \frac{1}{2}}(k_2, k')}$$

Po przejściu do współrzędnych sferycznych, wygodnym ze względu na symetrię sferyczną zagadnienia, wzór na prawdopodobieństwo jonizacji zderzeniowej przyjmuje postać:

$$P(E) = \frac{\Lambda}{(2P)^4} \int_0^\pi d\theta'_1 \int_0^{2\pi} d\varphi'_1 \int_0^{E_1-E_g} dE'_1 \int_0^\pi d\theta'_2 \int_0^{2\pi} d\varphi'_2 (6E'_1 + 3E_g) \cdot \\ \cdot (6E'_2 + 3E_g) \cdot k'_1 \sin \theta'_1 \cdot k'_2 \sin \theta'_2 \cdot W_{jz_1 jz'_1 jz_2 k_1 k_2 k'_1 k'_2}$$

gdzie

$$A = \frac{1}{2} \frac{e^4}{\pi^3 \hbar \epsilon^2} \quad (44)$$

Obliczenie całki pięciokrotnej we wzorze (43) wymaga zastosowania metod numerycznych. Przy pierwszej próbie obliczeń zastosowano metodę parabol będącą klasyczną metodą iteracyjną. Okazało się jednak, że czas pracy maszyny przy tej metodzie jest bardzo długi co uniemożliwia wykonanie obliczeń dla różnych parametrów. Zastosowano ostatecznie statystyczną metodę obliczania całek zwaną metodą "Monte Carlo", której zaletą jest znacznie krótszy czas obliczeń z zachowaniem jednocześnie możliwości oszacowania dokładności wyników. Ideę metody "Monte Carlo" przedstawiono w dodatku 1. W niniejszej pracy posłużono się tzw. "metodą podstawową", w której wartości całek znajduje się z następującej zależności [16] :

$$\hat{I} = \frac{|\Omega|}{N} \sum_{j=1}^N f(X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{nj}) \quad (45)$$

gdzie $\hat{I}$ jest oszacowaniem szukanej całki wielokrotnej, $f(X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{nj})$ jest wartością funkcji podcałkowej obliczoną dla punktu o współrzędnych $(X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{nj})$, $|\Omega|$ jest objętością obszaru całkowania a N oznacza ilość wybranych punktów przy czym punkty próbne wybierane są z rozkładem równomiernym.

Błąd oszacowania ΔI obliczono z następującej zależności:

$$\Delta I = \frac{2S_f}{\sqrt{N}} \quad (46)$$

gdzie

$$s_f^2 = \frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^N f^2(\bar{X}_i) - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N f(\bar{X}_i) \right)^2 \right], \quad (47)$$

$$\bar{X}_i = (X_{1i}, X_{2i}, \dots, X_{ni})$$

Szybkość rozpraszania energii elektronu, $R(E)$, obliczano z wzoru (18). W przypadku $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ możliwe jest wykorzystanie znanych wyrażeń na prawdopodobieństwo emisji i absorpcji fononu ($W_{k,k-q}, W_{k,k+q}$) [17]:

$$W_{k,k+q} = W(k,q) N_q \delta(E(|k+q|) - E(|k|) - \hbar\omega_0) \quad (48)$$

$$W_{k,k-q} = W(k,q)(N_q + 1) \delta(E(|k-q|) - E(|k|) + \hbar\omega_0)$$

gdzie

$$W(k,q) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{4\pi e^* e}{\Omega} \right)^2 \frac{\hbar}{2NM\omega_0} \left(\frac{\lambda^2 q}{1 + \lambda^2 \frac{q^2}{2}} \right)^2 \left(\left| F_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} \right|^2 + \left| F_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}} \right|^2 \right) \quad (49)$$

$F_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}, F_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}$ są całkami przekrycia, N_q oznacza liczbę fononów o wektorze falowym q , e^* jest efektywnym ładunkiem jonowym, Ω objętością komórki elementarnej, M zredukowaną masą jonów, N oznacza liczbę komórek elementarnych w kryształu o objętości V .

Przepisując wzór (18) w postaci całkowej otrzymujemy:

$$+ R(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \hbar \omega_0 \int_{(BZ)} d\tau_q \omega_{k,k-q} - \frac{V}{(2\pi)^3} \hbar \omega_0 \cdot$$

$$\int_{q(BZ)} d\tau_q \omega_{k,k+q} = S_2 - S_1 \quad (50)$$

przy czym całkowanie obejmuje obszar pierwszej strefy

Brillouina. Poniżej przedstawiono krótki opis obliczeń $R(E)$

z wyszczególnieniem poszczególnych operacji:

- zamiana na współrzędne sferyczne:

$$S_1 = \frac{V \hbar \omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} d\tau_q \omega_{k,k+q} =$$

$$\frac{V \hbar \omega_0}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\ell \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{q_{\max}} dq q^2 \sin\theta \cdot \omega_{k,k+q} \quad (51)$$

- Podstawienie wyrażenia (48), wybór wektora k wzdłuż osi z (możliwy ze względu na symetrię sferyczną zagadnienia), pominięcie składnika $\hbar\omega$ w argumencie delty Diraca:

$$S_1 = \frac{V \hbar \omega_0}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\ell \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{q_{\max}} dq q \sin\theta \cdot \omega(k,q) N_q \frac{dk}{d\xi} \cdot$$

$$\cdot \delta\left(\frac{q}{2k} + \cos\theta\right) \quad (52)$$

- zamiana całkowania po Θ na całkowanie po $\cos \Theta$, podstawienie $\cos \Theta = y$, wyciągnięcie przed deltę Diraca czynnika $\frac{1}{2k}$, wykonanie całkowania po l :

$$S_1 = \frac{V \hbar \omega_0}{(2\pi)^2} \frac{dk}{d\varepsilon} \int_{-1}^{-1} dy \int_0^{q_{\max}} dq q W(k, q) N_q \delta(q + 2ky) \quad (53)$$

- podstawienia $-2ky = z$, wykonanie całkowania po z :

$$S_1 = \frac{V \hbar \omega_0}{(2\pi)^2} \frac{dk}{d\varepsilon} \int_0^{2k} dq q W(k, q) N_q \quad (54)$$

- podstawienie całki S_1 i podobnie obliczonej całki S_2 do wzoru (50):

$$R(E) = \hbar \omega_0 \frac{V}{4\pi^2} \frac{dk}{d\varepsilon} \int_0^{2k} dq q W(k, q) \quad (55)$$

- podstawienie jawnej postaci funkcji $W(k, q)$, oznaczenie przez R współczynnika występującego przed znakiem całki, wprowadzenie jawnych postaci całek przekrycia $F_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^1$ i $F_{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}}^1$:

$$R(E) = R \int_0^{2k} dq q \left(\frac{\lambda^2 q}{1 + \lambda^2 q^2} \right)^2 \cdot \left\{ \left[1 - (b^2 + c^2) \frac{q^2}{2k^2} \right]^2 + b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 \frac{q^2}{k^2} \cdot \left(1 - \frac{q^2}{4k^2} \right) \right\} \quad (56)$$

- wykonanie podstawienia $\frac{q^2}{k^2} = 1 :$

$$R(E) = R \frac{k^4 \lambda^4}{2} \int_0^4 dt \frac{t}{(1 + \lambda^2 k^2 t)^2} \cdot \left\{ 1 + t \left[b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 - (b^2 + c^2) \right] + t^2 \frac{1}{4} \left[(b^2 + c^2)^2 - b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 \right] \right\} \quad (57)$$

- dokonanie podstawienia $\lambda^2 k^2 t = X$ i wykonanie całkowania

$$R(E) = R (A + B + C) \quad (58)$$

gdzie

$$A = \ln(\zeta + 1) \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\zeta}{\zeta + 1}$$

$$B = \left[b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 - (b^2 + c^2) \right] \left(\frac{2}{\zeta + 1} - \frac{4}{\zeta} \ln|\zeta + 1| + 2 \right)$$

$$C = \left[(b^2 + c^2) - b^2 \left(\frac{b}{2} - c \sqrt{2} \right)^2 \right] \frac{2}{\zeta^2} \left(\frac{(\zeta + 1)^2}{2} - 3(\zeta + 1) + 3 \ln|\zeta + 1| + \frac{1}{\zeta + 1} + \frac{3}{2} \right)$$

gdzie $\zeta = (2\lambda k)^2$

Nietrudno pokazać, że funkcja $R(E)$ w granicy przy ζ dążącym do zera dąży do zera, co odpowiada sytuacji fizycznej "zatrzymania" elektronu na poziomie E spowodowanego brakiem rozpraszania.

3.3. Wyniki obliczeń wydajności kwantowej.

Obliczenia charakterystyki spektralnej wydajności kwantowej dla tellurku kadmowo-rtęciowego z wąską przerwą wykonano wykorzystując wzór (14), w którym wartości $P(E)$ i $R(E)$ obliczano z zależności odpowiednio (43) i (58) (we wzorze (14) pominięto dodatkowo czynnik $\frac{\mathcal{L}_1}{\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2}$ jako niewiele różniący się od jedności). Całkowanie występujące w argumencie funkcji exp w wyrażeniu na wydajność kwantową wykonano iteracyjną metodą trapezów.

Tabela 1 zawiera wartości występujących w obliczeniach parametrów uzyskane bądź z literatury bądź z przedstawionych poniżej zależności:

- masa efektywna elektronu na dnie pasma przewodnictwa, m_e ,
(zależność Kane'a)

$$\frac{1}{m_e} = \frac{4P^2}{3\hbar^2 E_g} \frac{\Delta + 1,5 E_g}{\Delta + E_g} \quad (62)$$

- zredukowana masa jonowa, M_r ,

$$\frac{1}{M_r} = \frac{1}{xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg}} + \frac{1}{M_{Te}} \quad (63)$$

gdzie M_i jest masą atomową (i - Cd, Hg lub Te)

- ładunek efektywny jonowy, e^* , [12]

$$e^* = \left[\frac{\Omega M_i \omega_0^2}{4\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (64)$$

gdzie ω_0 - częstość kołowa fononów optycznych, ϵ_s i ϵ_∞ - stałe dielektryczne odpowiednio statyczna i optyczna, Ω - objętość komórki elementarnej.

- stała ekranowania, λ , [48]

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{2e^2}{\pi k_B T \epsilon_s} \left(\frac{2m_e^* k_B T}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} L_{\frac{1}{2}}^0 \left(\ell, \beta \right) \quad (59)$$

gdzie $L_{\frac{1}{2}}^0$ jest uogólnioną całką fermiego, $\ell = \frac{E_F}{k_B T}$,

$\beta = \frac{k_B T}{E_g}$, k_B - stała Boltzmana, E_F - energia Fermiego

- koncentracja równowagowa elektronów, n , [49]

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}} L_{\frac{1}{2}}^0 \left(\ell, \beta \right) \quad (60)$$

gdzie $L_{\frac{1}{2}}^0$ jest uogólnioną całką fermiego

- n_i - koncentracja samoistna elektronów obliczana dla różnych składów molowych x , [49]

$$n_i(x, T) = (1,093 - 0,296x + 0,00044T) \cdot 5,16 \cdot 10^{14} \cdot \left(\frac{E_g}{k_B T} \right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (61)$$

Obliczenia przeprowadzono dla czterech składów molowych, $x = 0.25$, $x = 0.28$, $x = 0.32$ i $x = 0.35$, dla dwóch temperatur 77K i 300K oraz w każdej z możliwych kombinacji x i T dla trzech koncentracji równowagowych.

W tabeli nr 2 zestawione są wartości koncentracji równowagowych dla czterech przerw energetycznych i dwóch temperatur, tabele 3 i 4 zawierają, odpowiednio, koncentracje samoistne i

stałe ekranowania dla czterech przerw energetycznych i dwóch temperatur.

Tabela 1. Wartości parametrów użyte w obliczeniach wydajności kwantowej QE.

Parametr	Jednostka	W a r t o ś c i			
X	Ł. w.	0.25	0.28	0.32	0.35
E_g	eV	0.15	0.2	0.25	0.3
P	eVnm	0.84	0.84	0.84	0.84
m_e^*	m_e	0.011	0.015	0.018	0.021
ϵ_s	ϵ_0	17	16.5	16	15.5
a	nm	0.646	0.646	0.646	0.646
Ω	nm ³	$6.74 \cdot 10^{-22}$	$6.74 \cdot 10^{-22}$	$6.74 \cdot 10^{-22}$	$6.74 \cdot 10^{-22}$
M	g	$1.26 \cdot 10^{-22}$	$1.25 \cdot 10^{-22}$	$1.24 \cdot 10^{-22}$	$1.22 \cdot 10^{-22}$
e^*	e	0.23	0.23	0.24	0.24
ϵ_∞	ϵ_0	12.2	11.7	11.3	11
$\hbar\omega_0$	meV	18	18	18	18

Tabela 2. Wartości koncentracji samoistnych w cm^{-3}

$\begin{matrix} T \\ E_g \\ [K] \\ [eV] \end{matrix}$	77	300
0.15	$1.08 \cdot 10^{12}$	$4.1 \cdot 10^{16}$
0.20	$3 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^{16}$
0.25	$8.2 \cdot 10^8$	$8.5 \cdot 10^{15}$
0.30	$2 \cdot 10^7$	$35 \cdot 10^{15}$

Tabela 3. Wartości koncentracji równowagowych w cm^{-3}

$\begin{matrix} T \\ E_g \\ E_F \\ [K] \\ [eV] \end{matrix}$	0.15	0.2	0.25	0.3
77	$7 \cdot 10^2$	10^{17}	10^{17}	10^{17}
	10^2	$5 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{16}$	$5 \cdot 10^{16}$
	$-5 \cdot 10^2$	$5 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{12}$
300	0.3	$5 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{18}$
	0.1	$5 \cdot 10^{17}$	$5 \cdot 10^{17}$	$5 \cdot 10^{17}$
	-0.1	10^{15}	10^{15}	10^{15}

Tabela 4. Wartości stałych ekranowania w nm

T [K]	$\frac{E_g [eV]}{E_F [eV]}$	0.15	0.2	0.25	0.3
77	$7 \cdot 10^{-2}$	13	11	9.2	8.1
	10^{-2}	31	26	22	19
	$-5 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^3$	$9.7 \cdot 10^2$	$8 \cdot 10^2$	$7.3 \cdot 10^2$
300	0.3	5	5	4.7	4.3
	0.1	10	10	9	8.3
	-0.1	$1.5 \cdot 10^2$	$1.5 \cdot 10^2$	$1.2 \cdot 10^2$	$1.1 \cdot 10^2$

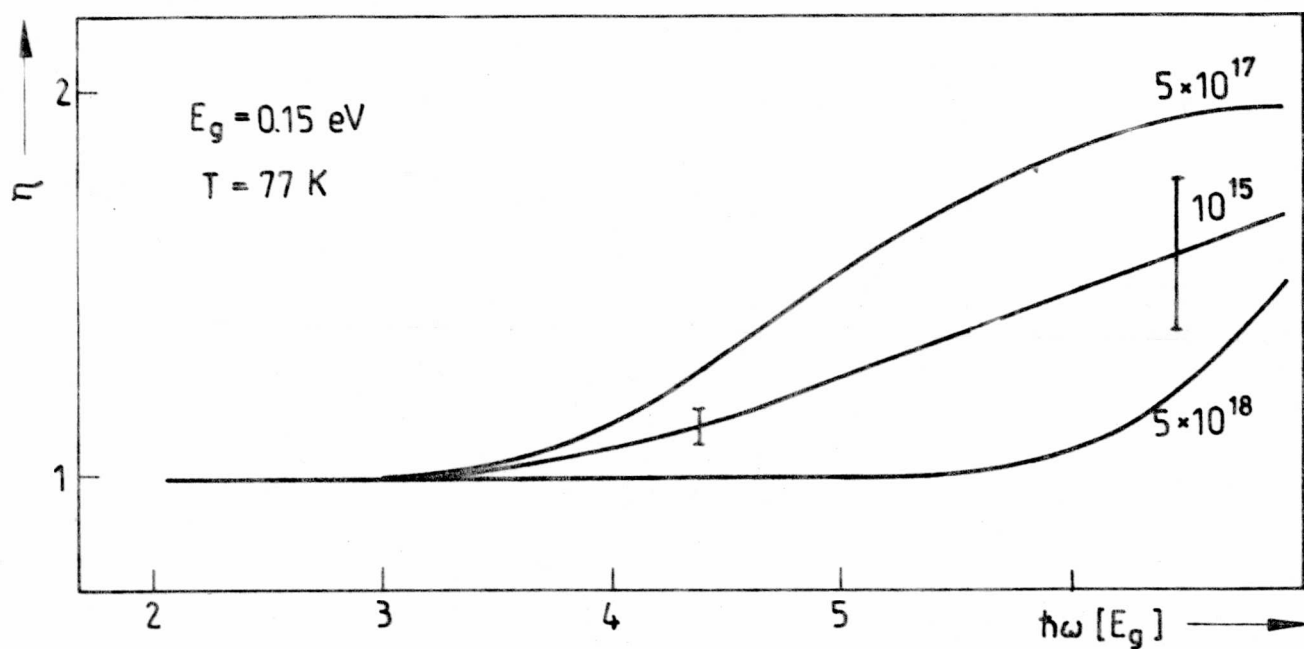
Wyniki obliczeń przedstawiono w postaci 24 krzywych pogrupowanych w ten sposób, że na jednym rysunku znajdują się trzy krzywe odpowiadające trzem różnym koncentracjom elektronów, przy ustalonej temperaturze i przerwie energetycznej (rys.9-16).

Analiza otrzymanych krzywych prowadzi do następujących wniosków:

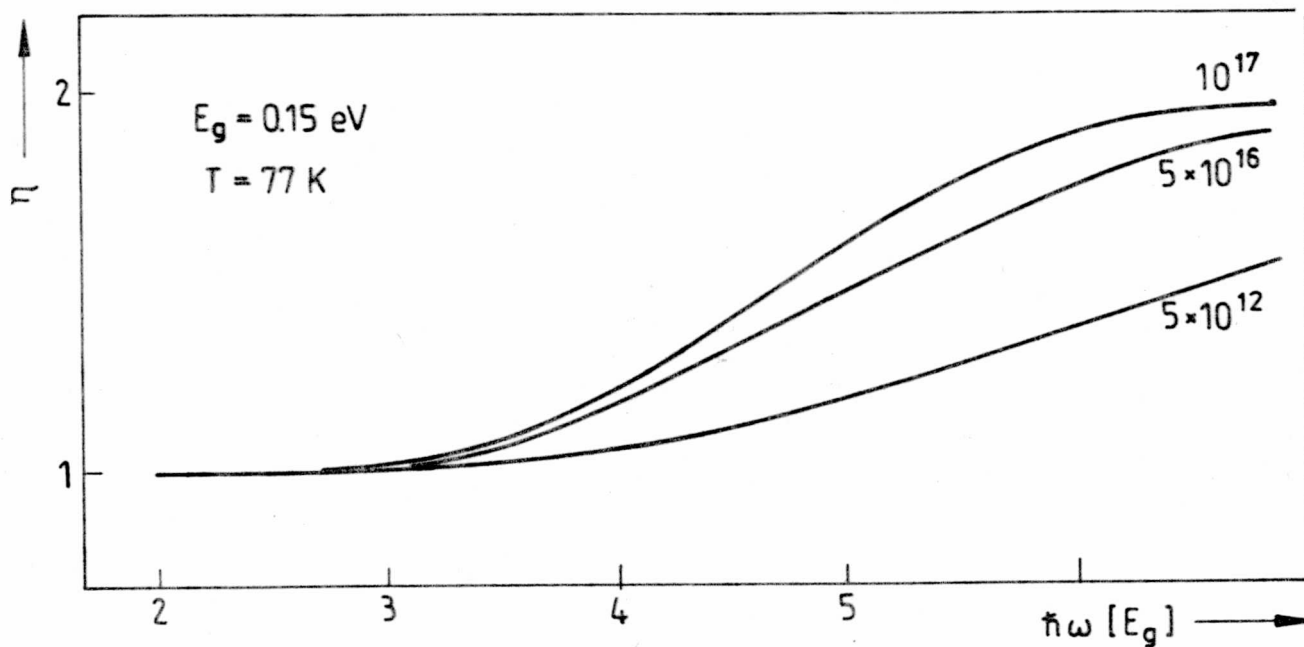
- Wyraźny wzrost wydajności kwantowej powyżej jedności rozpoczyna się dopiero przy energii fotonów $\hbar\omega \approx 3 E_g$ i dla energii $\hbar\omega \geq 4 E_g$ wzrost ten jest liniowy.
- Wydajność kwantowa rośnie ze wzrostem ekranowania przy ustalonej energii fotonów.

- c) Zwiększenie koncentracji równowagowej powoduje przesuwanie się punktu początkowego wzrostu $QE(\hbar\omega)$ w stronę wyższych energii (efekt spowodowany "nachodzeniem" poziomu Fermiego na pasmo przewodnictwa).
- d) Wydajność kwantowa rośnie ze wzrostem przerwy energetycznej przy ustalonej koncentracji i stosunku $\hbar\omega/E_g$ (patrz rys.17).
- e) Wartość $QE(\hbar\omega)$ w przyjętym modelu nie przekracza liczby 2.

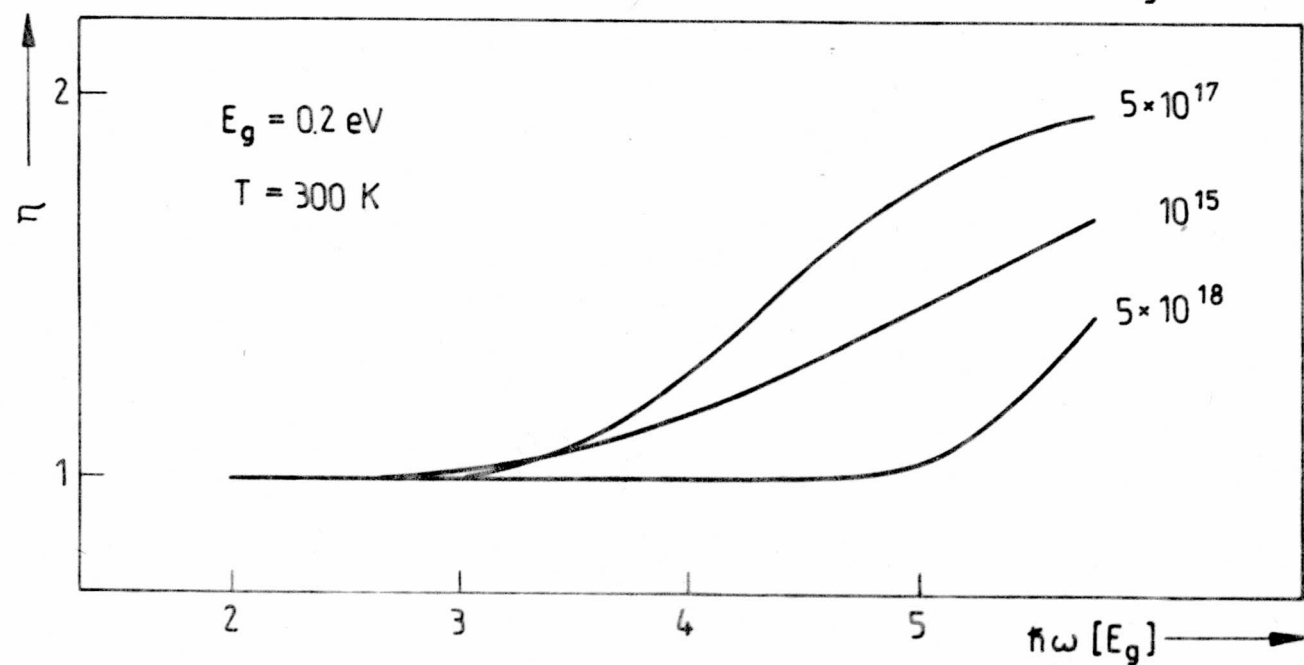
Błąd oszacowania $P(E)$ znajdowano ze wzoru (47), błąd obliczeń QE przedstawiono dla przykładu na rys.9 w postaci pionowych odcinków. Jak widać jest on różny w różnych zakresach energii fotonów (rośnie ze wzrostem $\hbar\omega$). W celu sprawdzenia dokładności obliczeń wykonano obliczenia QE dla jednego przypadku z dużą ilością punktów próbnych (10 000). Okazało się, że przebieg krzywej jest niemal identyczny jak przy 100 punktach (ilość jakiej używano dla wszystkich kombinacji parametrów) z czego można wnioskować, że dokładność obliczeń QE jest znacznie większa niż wynikałoby to z rys.9.



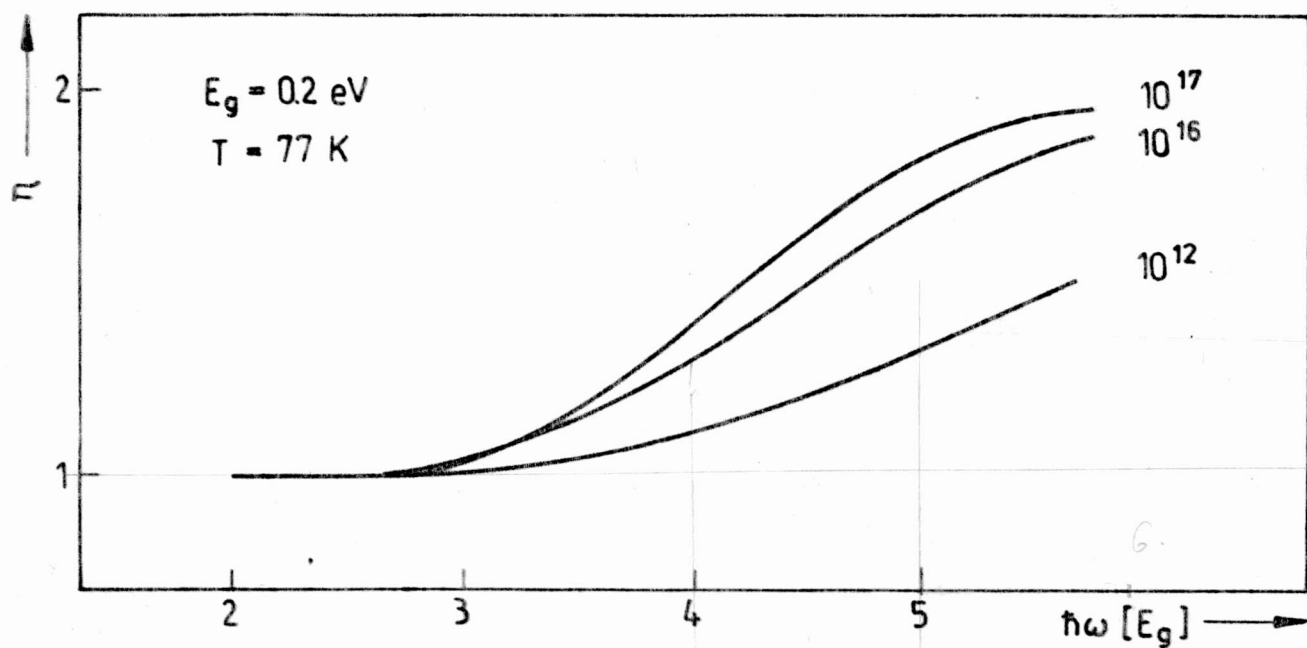
Rys. 9



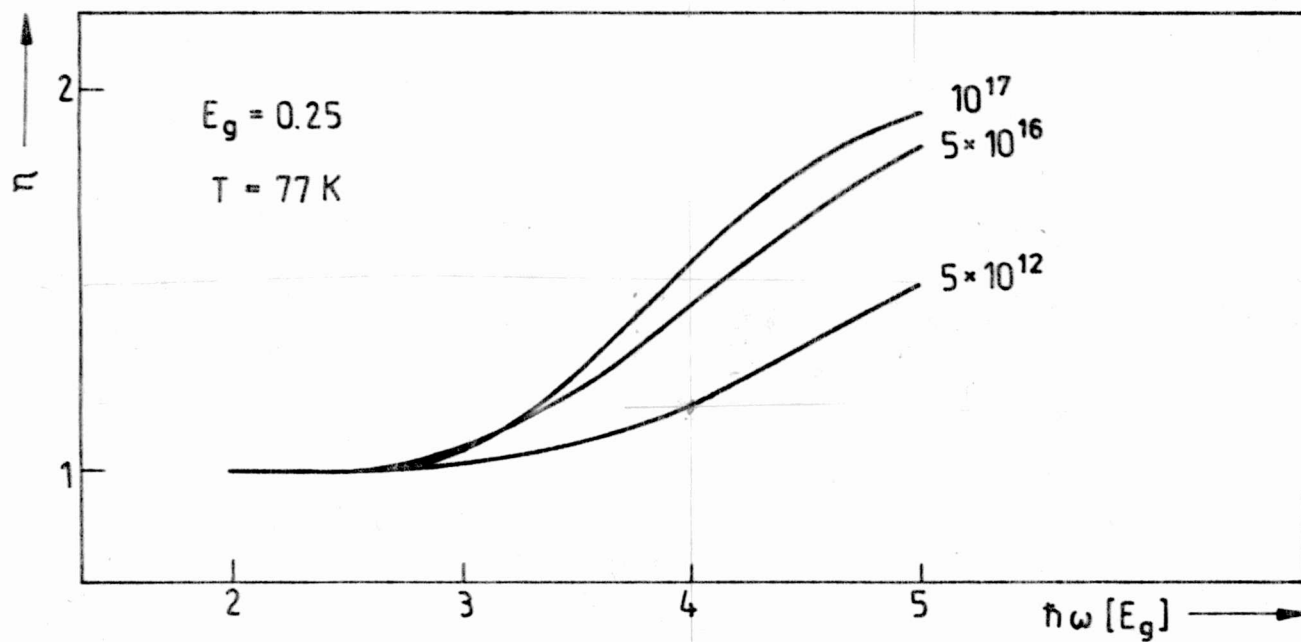
Rys. 10



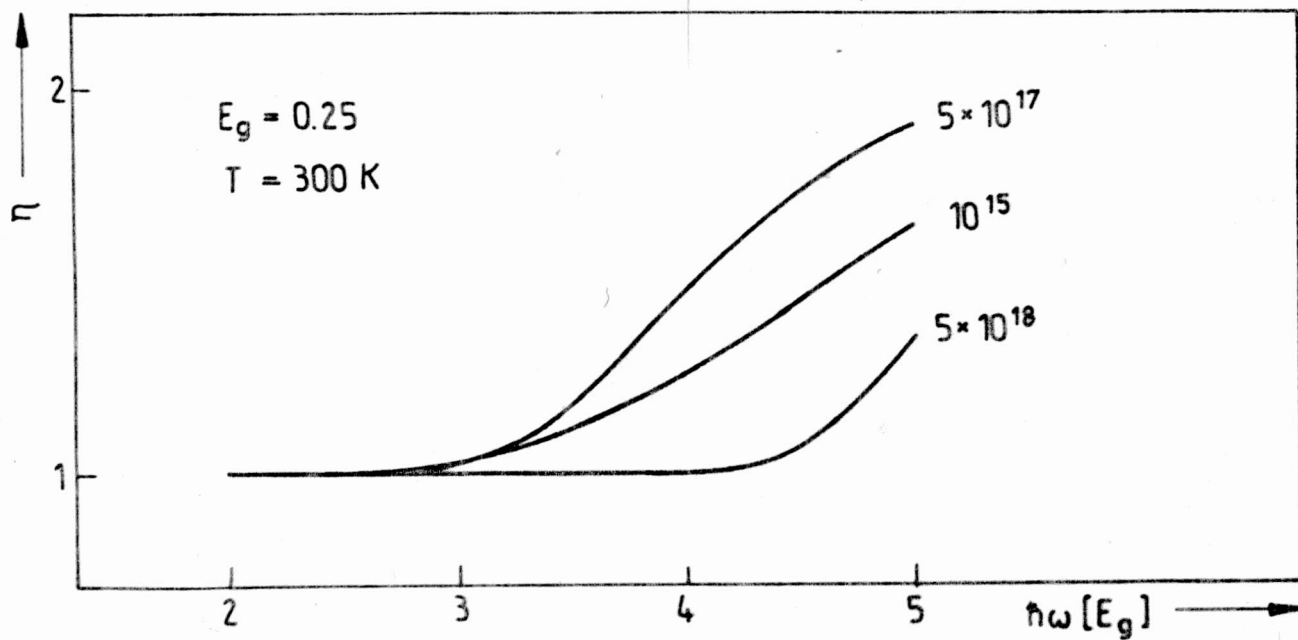
Rys. 11



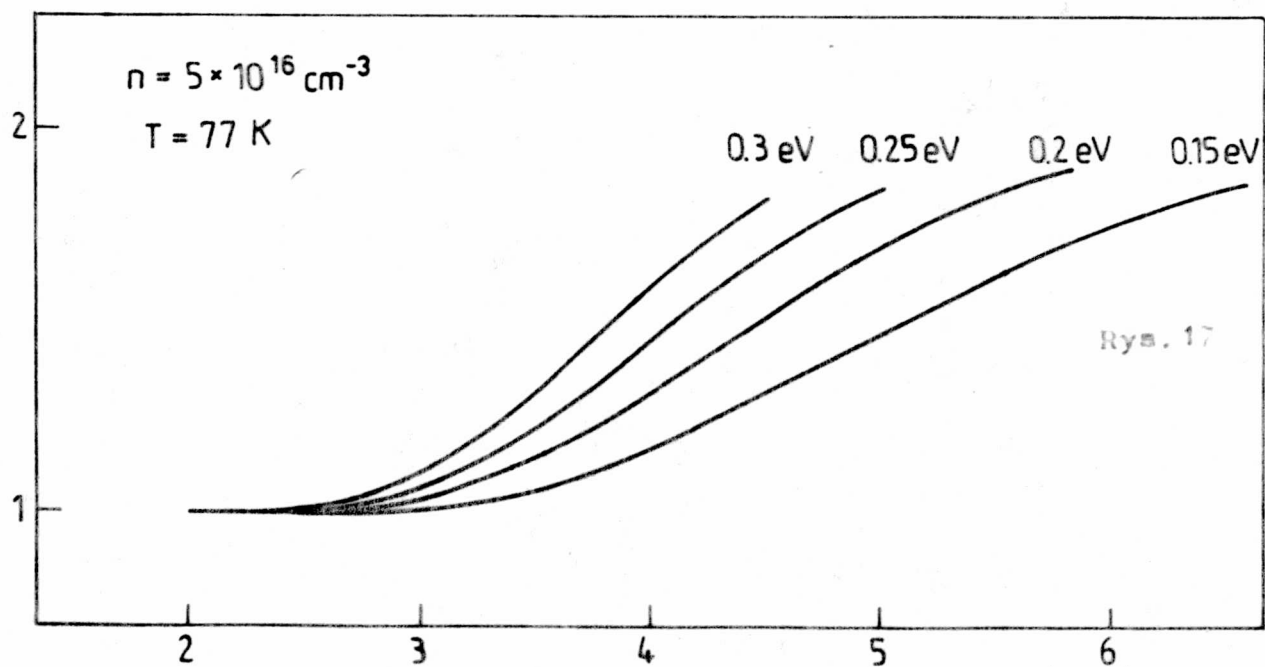
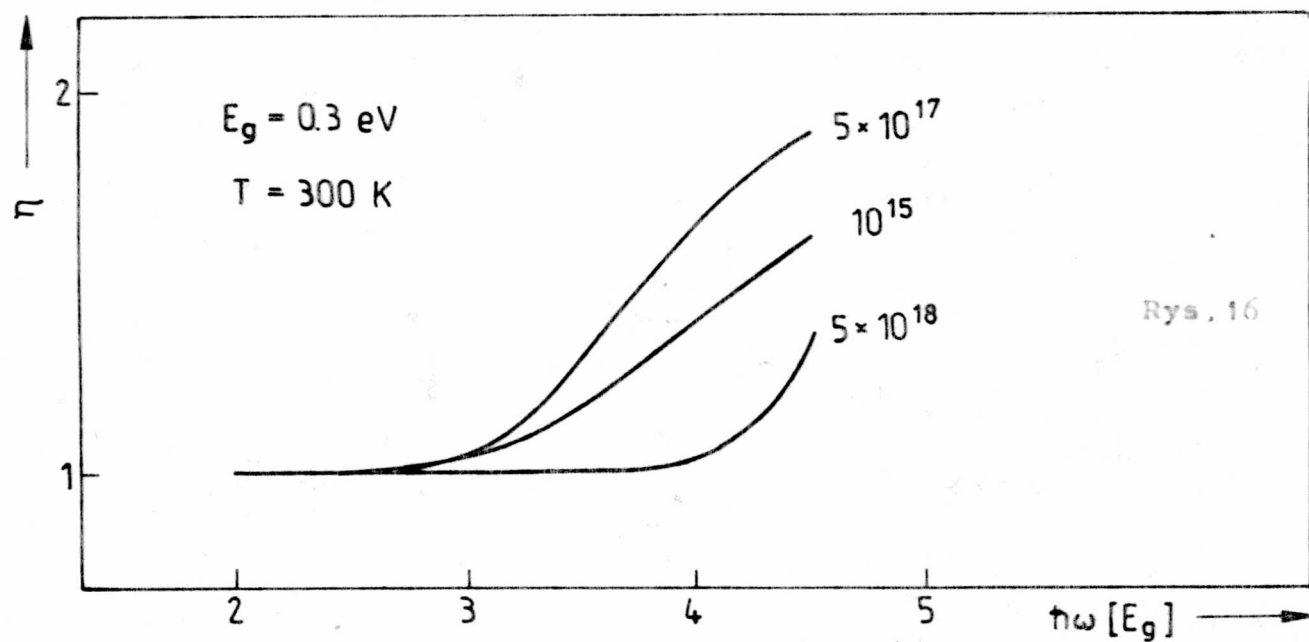
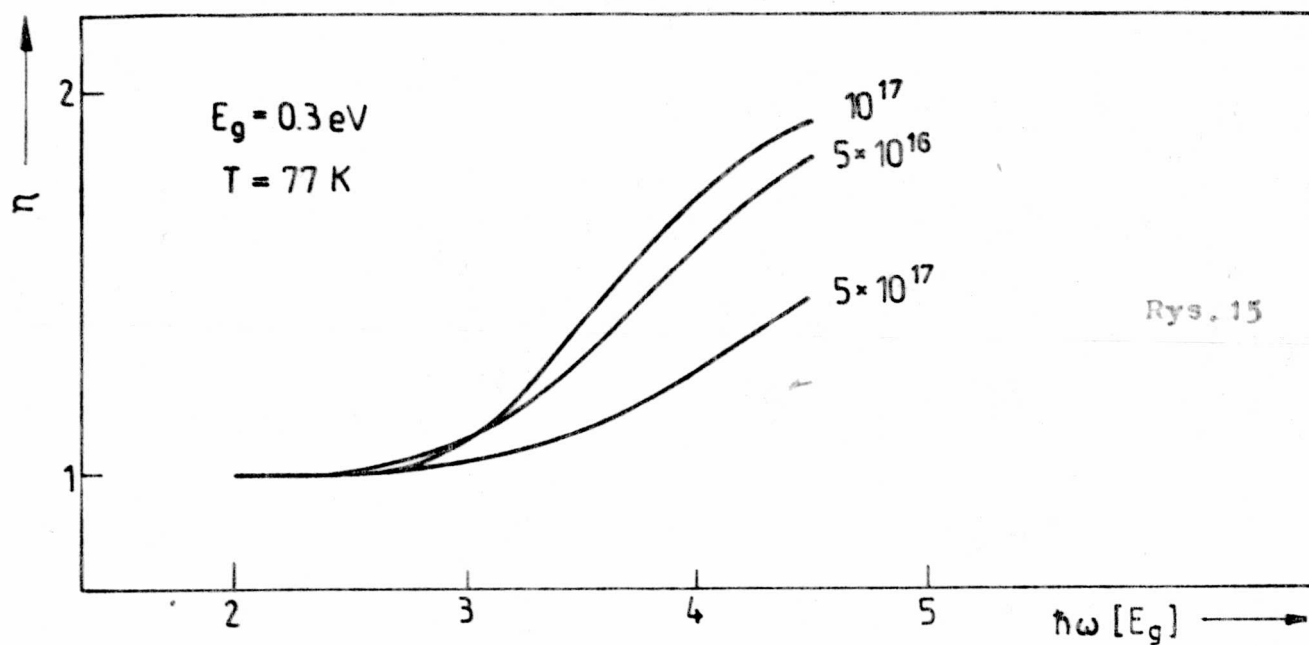
Rys. 12



Rys. 13



Rys. 14



4. POMIARY EFEKTU FOTOWOLTAICZNEGO W $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$

4.1. Próbki i układ pomiarowy

Do pomiaru wydajności OCE w efekcie PV wykorzystano detektory fotowoltaiczne z $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ z homozłączeniem p-n, o przerwie energetycznej $E_g = 0.25 \text{ eV}$, bardzo niskiej koncentracji równowagowej $n \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, powierzchni oświetlanej $S = 0.3 \text{ mm}^2$ i oporności różniczkowej R_d rzędu $6 \text{ k}\Omega$. Metodę wykonania detektorów, ich parametry oraz sposób wykonywania pomiarów opisano szczegółowo w pracach [20, 24, 27]. Pomiaru obejmowały zakres energii fotonów $0.25 \text{ eV} - 2.5 \text{ eV}$. Detektory schładzano do temperatury około 77K . Przy badaniu wpływu ekranowania na wydajność kwantową wykorzystano fakt, iż przy niewielkiej koncentracji równowagowej i stosunkowo dużej (w warunkach pomiaru) koncentracji foto-generowanych nośników zasadniczą rolę odgrywa ekranowanie nośnikami nadmiarowymi, przy czym zmianę ekranowania można względnie łatwo i powtarzalnie uzyskać poprzez zmianę mocy wiązki oświetlającej detektor.

Zastosowany układ pomiarowy przedstawiony został na rys. 13. W rozbieżnej wiązce światła monochromatycznego wychodzącej z monochromatora umieszczano badany detektor i mierzono fotonapięcie w całym zakresie pomiarowym. Następnie w tym samym miejscu umieszczano detektor wzorcowy (termoparę) i również mierzono fotonapięcie w całym zakresie. Wskazania termopary użyte zostały jako sygnał odniesienia, Zmianę mocy oświetlenia detektora uzyskiwano poprzez zmianę odległości

detektora od monochromatora (uzyskiwano w ten sposób zmianę mocy oświetlenia w granicach około dwóch rzędów wielkości).

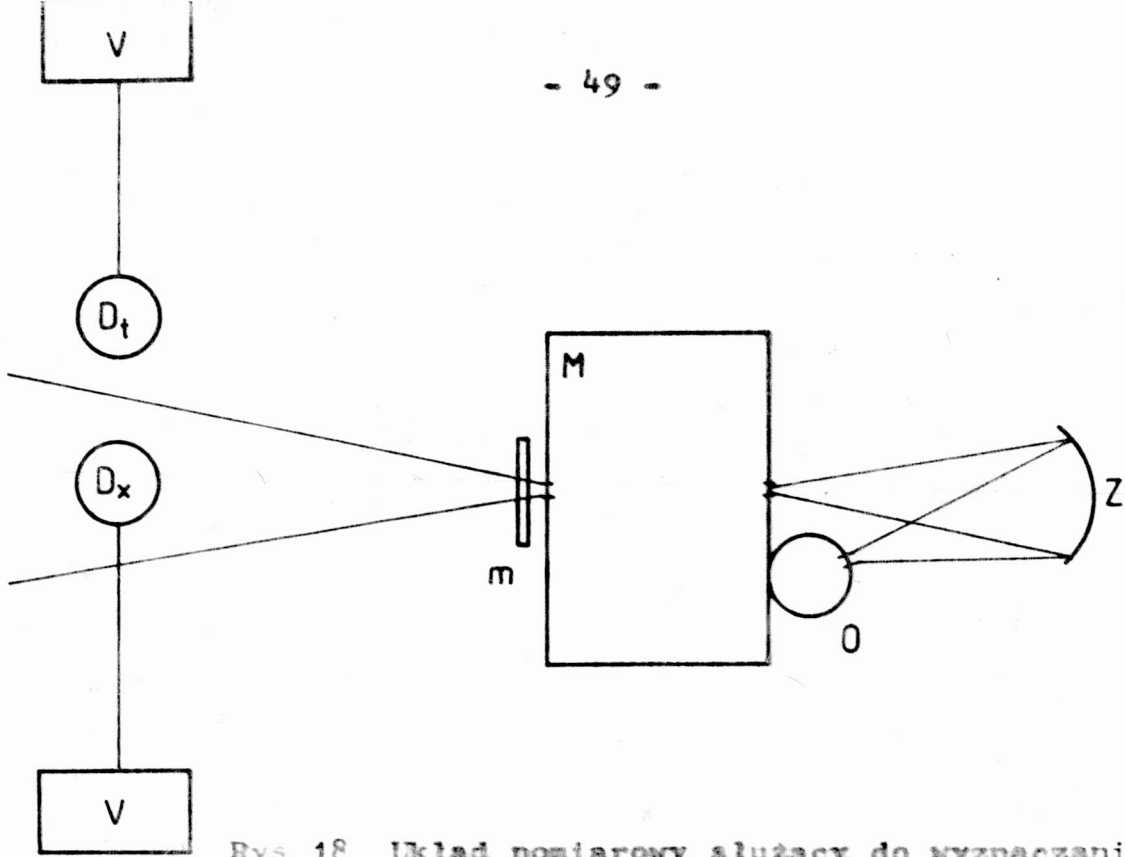
Jako detektora wzorcowego użyto termoparę o następujących parametrach: - czułość widmowa równa, przy częstotliwości modulacji 12 Hz, $S_{12} = 3.26 \text{ V/W}$, - czułość widmowa $s = 5.1 \text{ V/W}$, - stała czasowa 16 ms, - okienko z CaF_2 , - pole powierzchni światłoczułej 1 mm^2 .

Badane złącza p-n pracowały (przy oświetleniu) w praktyce w warunkach pomiaru napięcia rozwarcia, U_{OC} . W tych warunkach można założyć, jak widać z rys. 19, liniową zależność prądu i napięcia, dla $U = U_{OC} \pm \delta U$, przy δU bardzo

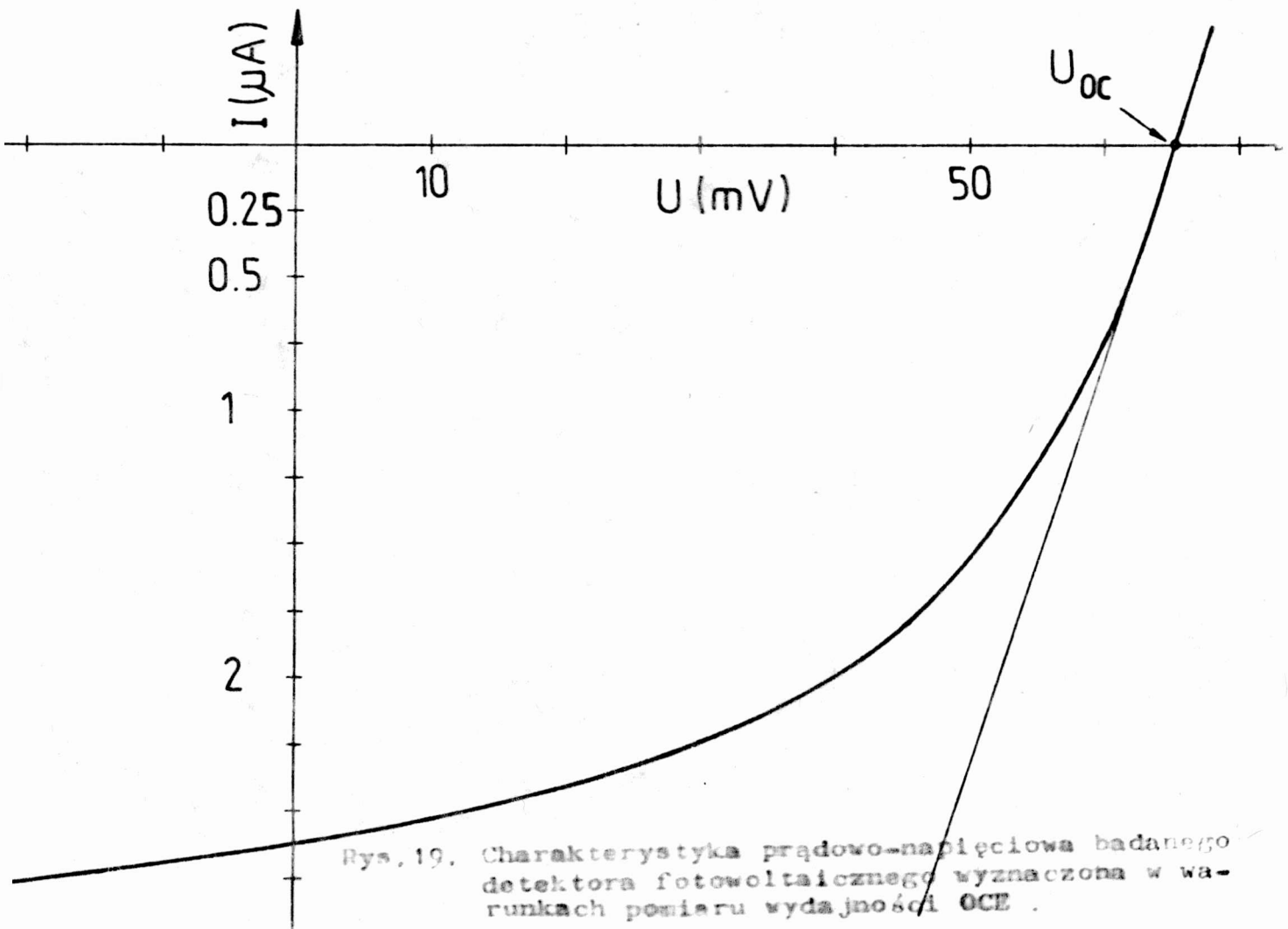
Wydajność całkowitą kolekcji nośników (OCE) obliczano więc z zależności:

$$OCE = \frac{\hbar\omega}{e} \frac{1}{R_d} \frac{U_d}{U_T} S_T \frac{A_T}{A_d} \frac{T_T}{T_d} \quad (48)$$

gdzie: $\hbar\omega$ - oznacza energię fotonów, U_d , U_T - napięcia uzyskiwane na detektorach badanym i wzorcowym, A_d , A_T - pola powierzchni detektora badanego i wzorcowego oświetlone podającym promieniowaniem, S_T - czułość spektralną (napięciową) detektora wzorcowego, T_d i T_T - współczynnik transmisji okienka kriostatu w którym znajdował się badany detektor i okienka termopary, oraz R_d - oporność różniczkowa badanego detektora (wyznaczona z charakterystyki prądowo-napięciowej zdjętej w warunkach pomiaru OCE).



Rys.18. Układ pomiarowy służący do wyznaczania charakterystyki spektralnej wydajności OCE dla różnych wartości mocy oświetlenia detektora, o - oświetlacz halogenowy, Z - zwierc. sferyczne, M - monochromator, m - modulator mechaniczny, D_x - detektor badany, D_t - detektor wzorcowy, V^x - nanowoltomierz.



Rys.19. Charakterystyka prądowo-napięciowa badanego detektora fotowoltaicznego wyznaczona w warunkach pomiaru wydajności OCE.

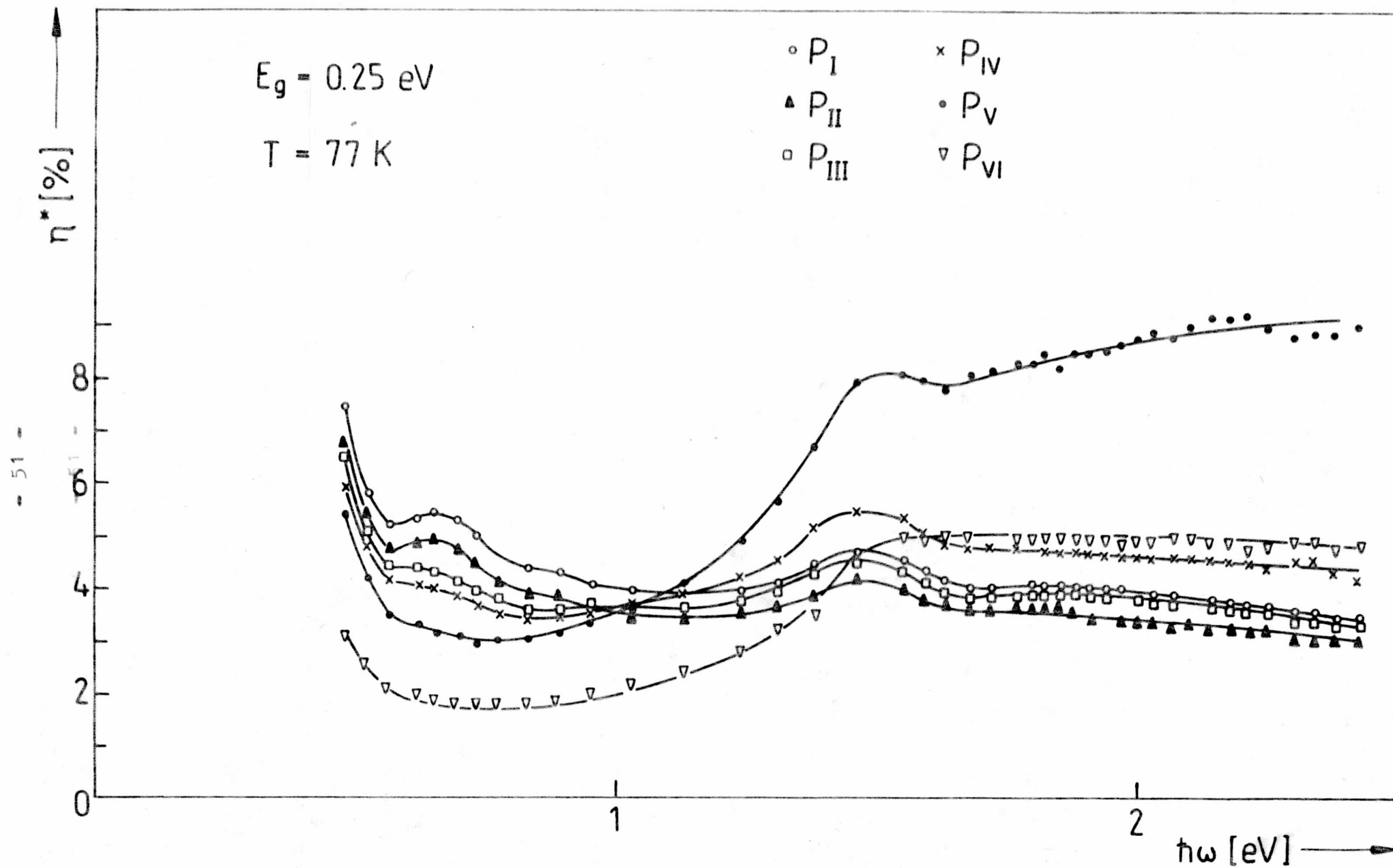
4.2. Wyniki pomiarów.

Przykładowe charakterystyki spektralne OCE uzyskane z pomiarów przedstawiono na rysunkach (20) i (21). Analiza otrzymanych krzywych z uwzględnieniem faktu, że wydajność kolekcji fotonów (PCE) oraz wydajność kolekcji nośników (CCE) są (w zakresie $\hbar\omega > 2 E_g$) bardzo wolno malejącymi funkcjami energii fotonów^{*)}, prowadzi do następujących wniosków dotyczących wydajności kwantowej:

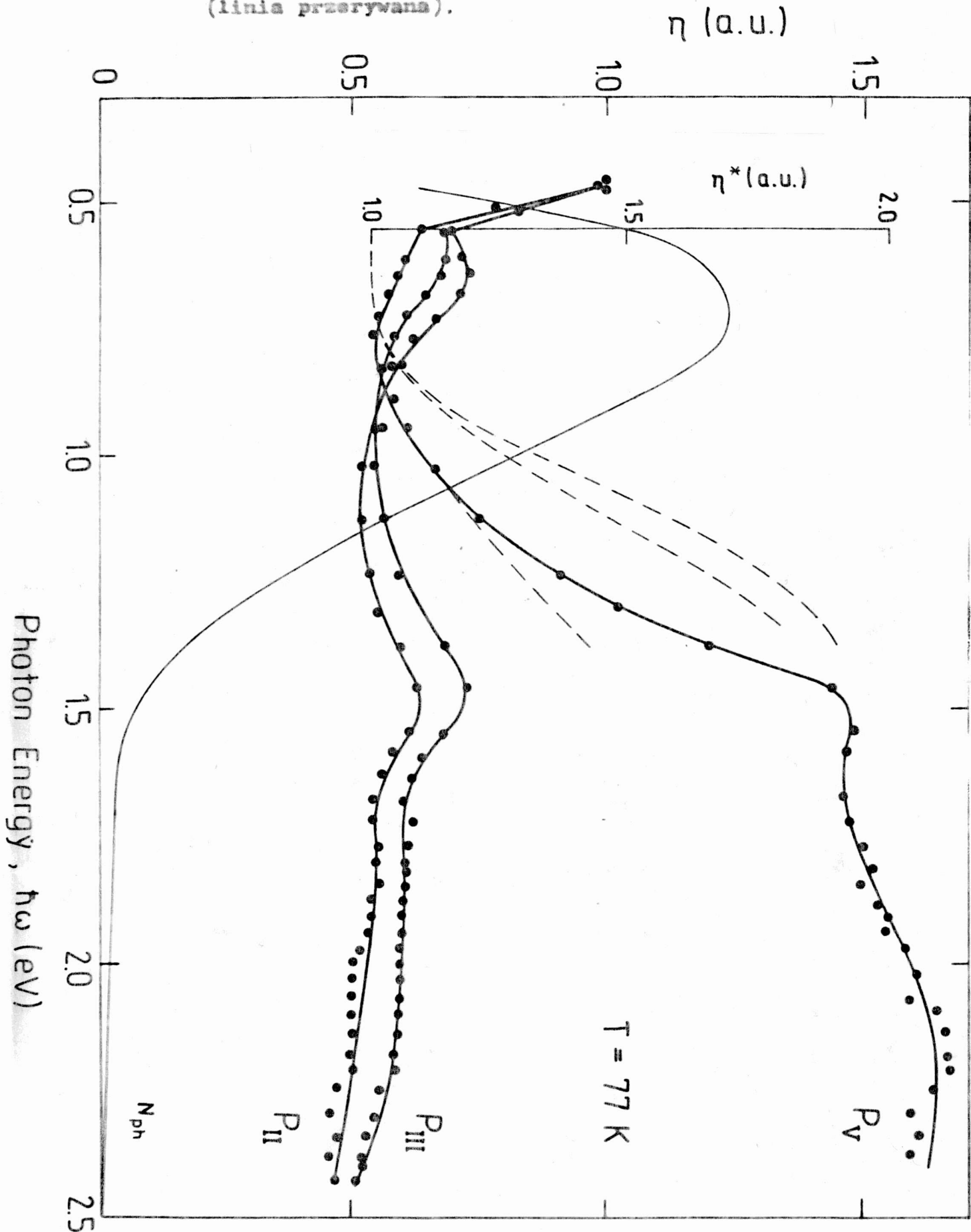
- 1) Wzrost QE rozpoczyna się dość gwałtownie przy $\hbar\omega = 2 E_g$ po czym następuje spadek i dalej powolny wzrost.
- 2) Właściwy wzrost QE (z pominięciem "wybrzuszenia") rozpoczyna się przy $\hbar\omega = 3 E_g$.
- 3) W zakresie $E_g < \hbar\omega < 3 E_g$ widoczny jest silny wzrost wydajności kwantowej ze wzrostem mocy oświetlenia, przy ustalonym $\hbar\omega$.
- 4) Wzrost QE kończy się dla każdego z wykresów przy $\hbar\omega \approx 6 E_g$.
- 5) Maksymalna wartość QE może przekraczać 2.

^{*)} Założenie dobrze spełnione dla CCE. Dla PCE spełnione dobrze poza punktami charakterystycznymi w odbiciu, dla których występują lokalne maksima współczynnika odbicia, a zatem minima w PCE. Nie są one na ogół większe niż kilka procent.

Rys.20. Charakterystyki spektralne OCE badanego detektora dla różnych mooy oświetlenia (P) ; $P_I < P_{II} < P_{III} < P_{IV} < P_V < P_n$



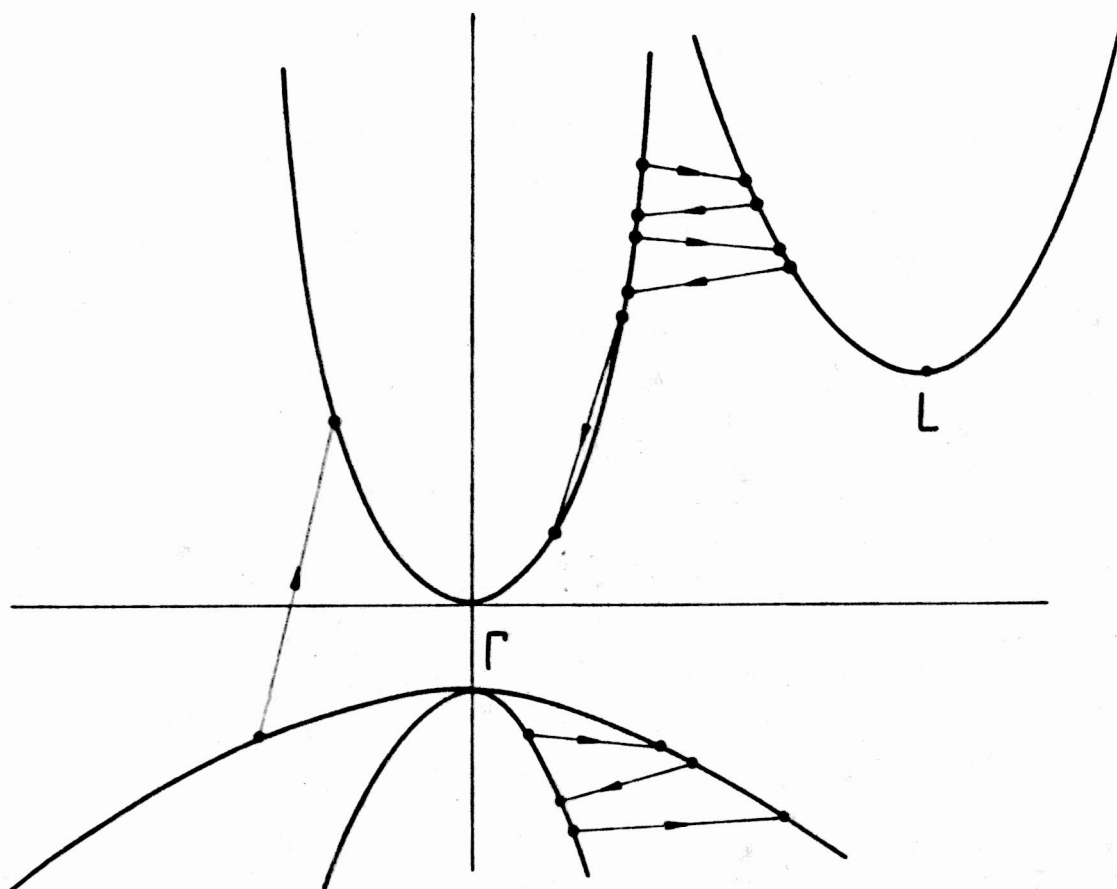
Rys. 21. Eksperymentalne charakterystyki spektralne wydajności OCE dla trzech różnych wartości mocy oświetlenia (P_{II} , P_{III} , P_V), znormalizowane do jedności przy $\hbar\omega \approx 2E_g$. Charakterystyka spektralna oświetlacza halogenowego (linia ciągła). Teoretyczne charakterystyki spektralne wydajności QE obliczone dla parametrów odpowiadających w przybliżeniu parametrom badanego detektora, wg rys. 10 (linia przerywana).



5. DYSKUSJA WYNIKÓW I WNIOSKI

Dobra zgodność jakościowa obliczeń z eksperymentem jaką stwierdza się porównując wnioski rozdziału 3.3 z wnioskami zawartymi w rozdziale 4.2 (patrz również rys.24) potwierdza słuszność zastosowanej metody obliczeniowej a w szczególności opisu struktury pasmowej i funkcji falowych w/g modelu Kane. Porównania ilościowe nie są obecnie możliwe ze względu na brak dużej ilości precyzyjnych i wiarygodnych danych eksperymentalnych, których uzyskanie, jak wspomniano wyżej, wymaga stosowania skomplikowanych metod pomiarowych. Istotnym uzupełnieniem wyników Antoncik'a i Tauc'a, uzyskanym w tej pracy, są informacje dotyczące wpływu ekranowania na wydajność kwantową oraz zależności wydajności kwantowej od przerwy energetycznej. Stwierdzono tutaj również, że wzrost QE rozpoczyna się przy $\hbar\omega \approx 3 E_g$ a nie przy $\hbar\omega \approx 2 E_g$ jak to wynikało z obliczeń opartych o paraboliczny model struktury pasmowej. Wykonany eksperyment, oprócz potwierdzenia przewidywań teoretycznych, ujawnił dodatkowe efekty, a mianowicie dość gwałtowne zahamowanie wzrostu QE przy $\hbar\omega \approx 6 E_g$ (efekt "nasyce-
nia" wydajności kwantowej), przekroczenie przez QE wartości 2 oraz występowanie charakterystycznego garbu w początkowej fazie wzrostu krzywej QE ($\hbar\omega$).

W roku 1983 ukazała się najnowsza (na ile wiadomo autorowi niniejszej pracy) praca teoretyczna dotycząca wydajności kwantowej wewnętrznego efektu fotoelektrycznego w InSb, której autorem jest A.R.Beattie [44]. Z względu na fakt, że praca ta oraz praca niniejsza w pewnym stopniu uzupełniają się, celowym



Rys.22. Schematyczne przedstawienie przejścia Auger'a oraz przejść "prawie poziomych" $\Gamma \rightleftharpoons L$ i pasmo dziur ciężkich $\rightleftharpoons$ pasmo - dziur lekkich.

będzie krótkie przedstawienia głównych założeń pracy [11] oraz uzyskanych tamże rezultatów obliczeń.

R.A.Beattie sugeruje, iż za dwa punkty progowe wzrostu wydajności kwantowej w InSb odpowiedzialne są przejścia Auger'a nr 1 i nr 7 (pokazane na rys 7) zaś efekt "nasycania" wydajności kwantowej związany jest z "prawie poziomymi" przejściami gorących elektronów z pasma Γ do pasma L oraz z faktem, że elektron znajdujący się w paśmie przewodnictwa nie może generować dodatkowych par e-h. W modelu obliczeń zastosowanym przez Beattie'go uwzględnione zostały następujące efekty:

- wzbudzenia optyczne elektronów do pasma przewodnictwa z pasma dziur lekkich oraz z pasma dziur ciężkich,
- rozpraszanie energii wzbudzonych nośników na skutek oddziaływań: nośnik-fonon optyczny, nośnik-fonon akustyczny i nośnik-nośnik,
- przejścia Auger'a nr 1 i nr 7 (rys.7),
- przejścia "prawie poziome" pasmo $\Gamma \rightleftharpoons$ pasmo L oraz pasmo dziur lekkich $\rightleftharpoons$ pasmo dziur ciężkich, spowodowane oddziaływaniami nośnik-fonon optyczny i nośnik-fonon akustyczny, (rys.20).

Wzrost wydajności kwantowej powyżej jedności wyraża się wzorem:

$$\eta = (\alpha \eta_{eh} + \eta_i + \eta_{el}) / (1 + \alpha) \quad (49)$$

gdzie α jest ilorazem współczynników absorpcji α_1 (z pasma dziur ciężkich) i α_2 (z pasma dziur lekkich), zaś człony η_i opisują wzrost wydajności kwantowej powyżej jedności dla

przypadku gdyby wszystkie nośniki były typu i ($i = eh$ - elektrony z par elektron-ciężka dziura, $i = l$ - lekka dziura, oraz $i = el$ - elektrony z par elektron-lekka dziura).

Dla przykładu, człon η_e wyraża się wzorem:

$$\eta_e = 1 - \exp \left[- \int_{E_i}^{E_0} P(E) p_c(t) / R(E) dE \right] \quad (50)$$

w którym, w porównaniu do wzoru użytego w niniejszej pracy (14) dochodzi wielkość $p_c(t)$, będąca prawdopodobieństwem, że elektron w chwili t znajduje się w paśmie przewodnictwa. Jeśli wartość E jest mniejsza niż energia odpowiadająca minimum pasma L (E_L) wówczas $p_c(t) = 1$ jeśli natomiast $E_0 > E_L$ wtedy $p_c(t)$ spełnia równanie:

$$\frac{d}{dt} p_c(t) = - p_c(t) R_{cL}(E) + (1 - p_c(t)) R_{Lc}(E) \quad (51)$$

gdzie $R_{cL}(E)$ jest szybkością przejść $\Gamma \rightarrow L$,

a $R_{Lc}(E)$ jest szybkością przejść $L \rightarrow \Gamma$. Przy obliczeniach szybkości rozpraszania energii elektronu $R(E)$ bierze się pod uwagę "średni" elektron, tj elektron "podzielony" pomiędzy dwa pasma, Γ i L .

Wówczas:

$$R(E) = p_c(t) R_{Ec}(E) + (1 - p_c(t)) R_{EL}(E) \quad (52)$$

gdzie R_{Ec} jest szybkością rozpraszania energii w paśmie L , a R_{EL} w paśmie Γ .

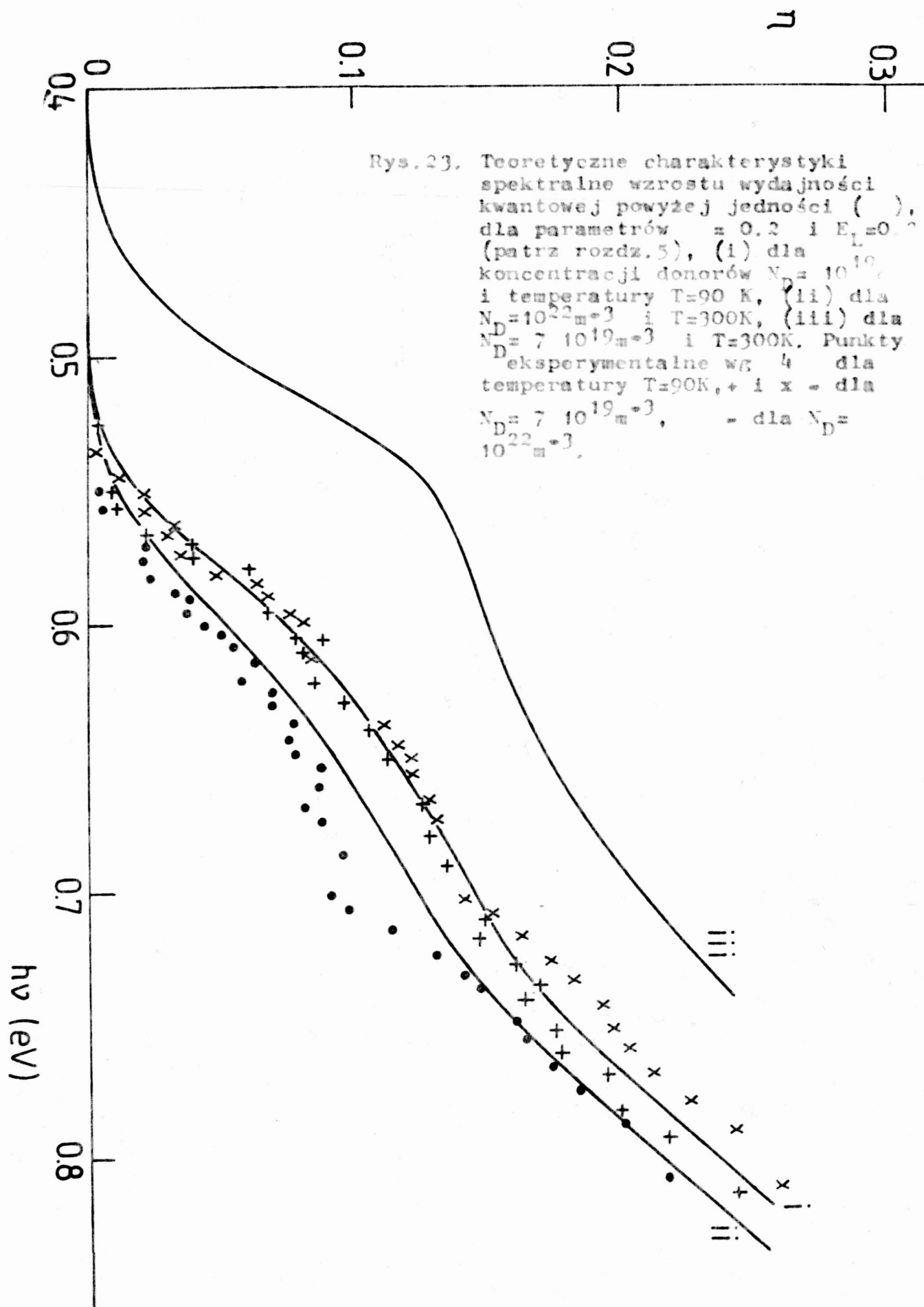
Zależności (51) i (52) pozwalają na przejście od zmiennej czasowej do energii dla prawdopodobieństwa $p_c(t)$, a mianowicie spełnione jest równanie:

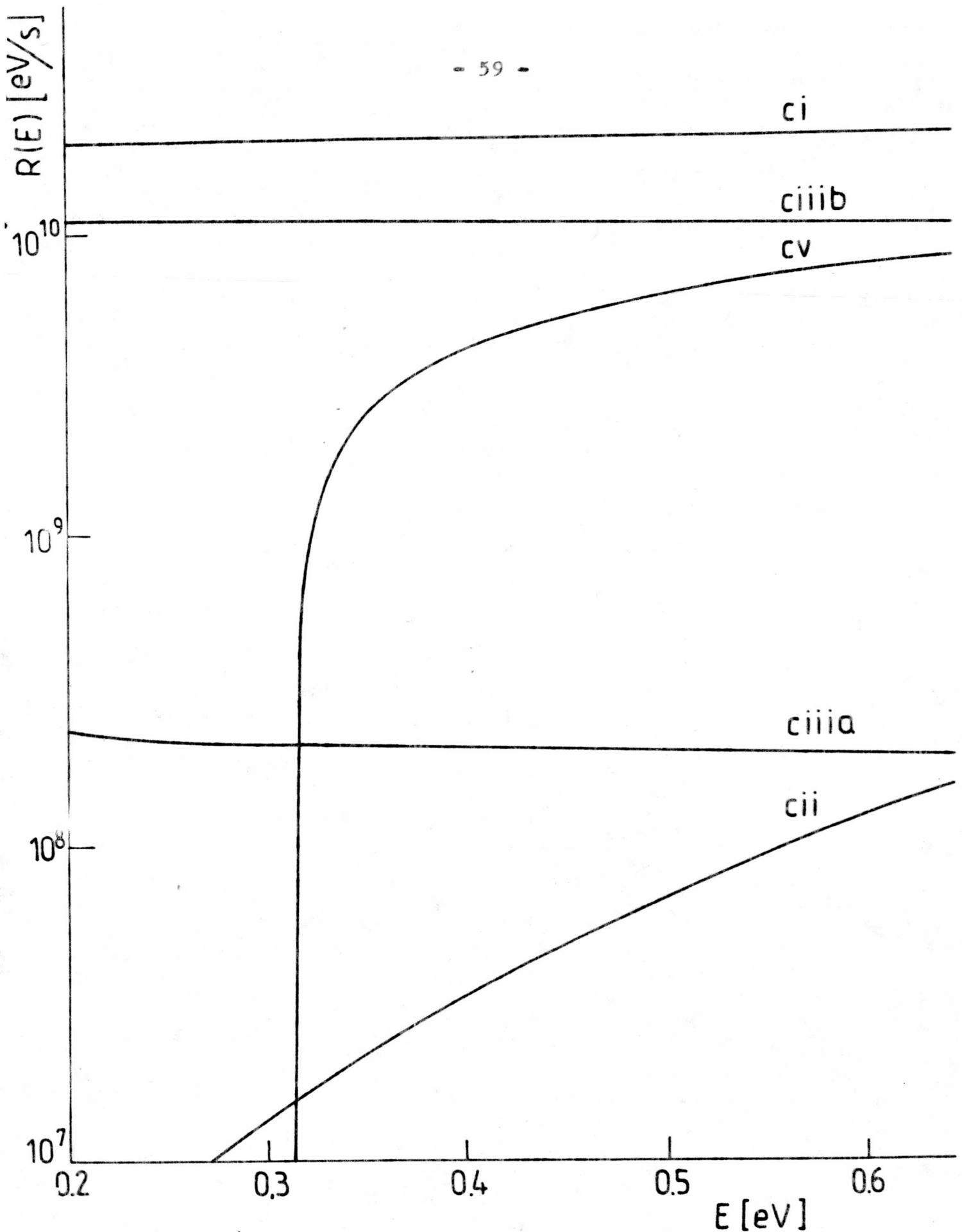
$$\frac{dp_c}{dE} = \frac{p_c R_{cL}(E) - (1 - p_c) R_{Lc}(E)}{p_c R_{Ec}(E) + (1 - p_o) R_{EL}(E)} \quad (53)$$

z warunkiem brzegowym $p_c(E=E_v) = 1$. Podobne rozumowanie stosuje się dla dziur lekkich.

Przy obliczeniach prawdopodobieństwa jonizacji zderzeniowej $P(E)$ zastosowano w [11] metodę odmienną od użytej w niniejszej pracy, uwzględniającą nieparaboliczność pasm lecz nie uwzględniającą degeneracji pasm ze względu na rzut całkowitego momentu pędu elektronu na oś z . Metoda ta zawierała jeden parametr dopasowania (γ). Przykładowe wyniki obliczeń przedstawiono na rys.23 (wzrost wydajności kwantowej powyżej jedności - porównanie z eksperymentem) oraz na rys.24 (szybkość rozpraszania energii elektronu dla różnych oddziaływań). Jak widać uzyskano dobre dopasowanie krzywej teoretycznej $\eta(\hbar\omega)$ do krzywej eksperymentalnej. Widoczny jest wyraźnie efekt "nasykania" wydajności kwantowej przy odpowiednio dobranych parametrach γ i E_L . Potwierdzony został również eksperymentalny fakt, że wydajność kwantowa maleje ze wzrostem koncentracji równowagowej (przy ustalonej energii fotonów).

Wracając do wyników obliczeń i wyników eksperymentalnych uzyskanych w niniejszej pracy oraz biorąc pod uwagę przedstawione powyżej rezultaty pracy Beattie'go można stwierdzić, że: - jak potwierdzają obliczenia Beattie'go (patrz rys.24) uzasadnione jest, przy niewielkich koncentracjach równowagowych, pominięcie mechanizmów rozpraszania energii elektronu poza oddziaływaniem elektron-fonon optyczny, co właśnie uczyniono w niniejszej pracy,





Rys. 24. Szybkość rozpraszania energii elektronu w paśmie przewodnictwa jako funkcja energii kinetycznej dla $T=90\text{K}$, $E_L = 0.3 \text{ eV}$ i $\gamma=0.2$ i dla różnych oddziaływań: (i) elektron-fonon optyczny, (ii) elektron-fonon akustyczny, (iii) elektron-elektron przy $N_D = 7 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$, (iiib) elektron-elektron przy $N_D = 10^{19} \text{ m}^{-3}$; (iv) szybkość przejść $\Gamma \rightarrow L$.

- obserwowany efekt "nasycania" wydajności kwantowej dla $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (rys. 21 i 20) spowodowany jest prawdopodobnie opisanymi przez Beattie'go przejściami "prawie poziomymi" elektronów (nieuwzględnionymi w obliczeniach w niniejszej pracy). Oznaczałoby to, że np. dno pasma L w $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ z małym składem molowym, dającym przerwę energetyczną $E_g = 0.25 \text{ eV}$ znajduje się na wysokości ok. 1.12 eV nad dnem pasma przewodnictwa, lub też, np. że w tym miejscu występuje silny wzrost współczynnika odbicia,
- obserwowany wzrost QE ze wzrostem ekranowania (patrz obliczenia i wyniki eksperymentalne - rys. 21) jest pozornie sprzeczny z wynikami Beattie'go (rys. 23). Sprzeczność ta jest pozorna ponieważ w naszym przypadku ekranowanie odbywa się poprzez nośniki nadmiarowe (nośniki o dużej energii kinetycznej) a więc w dalszym ciągu nieistotne jest rozpraszanie nośnik-nośnik, odpowiedzialne za obniżenie wydajności kwantowej przy wzroście koncentracji nośników równowagowych,
- niewyjaśniony pozostaje charakterystyczny garb w początkowej fazie wzrostu QE w CdHgTe występujący niezależnie od efektu "nasycania". Fakt, iż zanika on ze wzrostem mocy wiązki (patrz rys. 20 i 24) nasuwa przypuszczenie, że związany jest z jakimś efektem powiązanym z kolei z udziałem stanów zlokalizowanych, ponieważ ze wzrostem mocy wiązki udział stanów zlokalizowanych "zacierą się",
- fakt, iż wydajność kwantowa może przekraczać wartość 2 można wyjaśnić jedynie przez dodanie wzbudzeń par elektron-

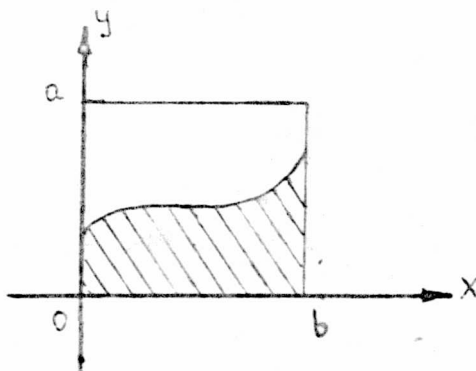
-dziura trzeciej i dalszych generacji.

Zupełnie zadowalające dopasowanie wyników obliczeń do danych eksperymentalnych (uwzględniając problemy dyskutowane powyżej) pozwala na wyrażenie przypuszczenia, iż przedstawiony w niniejszej pracy model może posłużyć jako przybliżony opis zachowania się wydajności kwantowej w CdHgTe z wąską przerwą w funkcji energii fotonów dla $\hbar\omega > E_g$.

Dodatek - metoda "Monte Carlo" obliczania całek

Idea metody "Monte Carlo" obliczania całek zostanie poniżej przedstawiona w dużym uproszczeniu (z pominięciem ścisłego aparatu matematycznego), na przykładzie tzw metody "orzeł-reszka".

Niech funkcja $y = f(x)$, określona na przedziale $(0, b)$, przyjmuje wartości w przedziale $(0, a)$. Interesuje nas wartość całki $A = \int_0^b f(x)dx$, równa polu powierzchni obszaru zakreskowanego na poniższym rysunku



Wybierając losowo punkt z prostokąta $a \times b$ z rozkładem równomiernym, trafiamy w obszar zakreskowany z prawdopodobieństwem P równym:

$$P = \frac{\int_0^b f(x)dx}{a \cdot b}$$

Obliczona z powyższej zależności wartość całki, A , wynosi:

$$A = \int_0^b f(x)dx = P \cdot a \cdot b \quad (1')$$

Z drugiej strony, jeżeli wybierzemy losowo N punktów z rozkładem równomiernym i N_c punktów znajdzie się w

obszarze zakreskowanym, to z definicji prawdopodobieństwa mamy:

$$P := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_c}{N} \approx \frac{N_c}{N} \quad (2')$$

Łącząc wzory (1') i (2') otrzymujemy zależność na wartość całki A :

$$A = \int_0^b f(x) dx \approx \frac{N_c}{N} \cdot a \cdot b$$

Oszacowanie całki sprowadza się zatem do wyboru losowego, z rozkładem równomiernym, N par (x_i, y_i) , gdzie $x_i \in (0, b)$ a $y_i \in (0, a)$, obliczenie jaka ilość tych par (N_c) spełnia warunek $f(x_i) < y_i$, podzielenia wartości N_c przez N i pomnożenia otrzymanego ilorazu przez pole prostokąta ab . Oszacowanie jest oczywiście tym dokładniejsze im większa jest ilość wybranych punktów N .

Jest to najprostszy wariant metody "Monte Carlo".

Warianty bardziej skomplikowane opierają się na teorii zmiennej losowej i wartości oczekiwanej oraz stosują różne funkcje rozkładu wyboru punktów, w zależności od kształtu całkowanej funkcji (patrz [6]). W niniejszej pracy posłużono się tzw. "metodą podstawową", w której wykorzystuje się fakt, że całka przy odpowiednich założeniach może być traktowana jako wartość oczekiwana zmiennej losowej. W celu obliczenia całki możliwe staje się zatem stosowanie wyników teorii zmiennej losowej i wartości oczekiwanej.

Bibliografia

1. V.S.Vavilov, K.I.Britzyn, Zh.Exp.Tehn.Fiz. 34, 1354 (1958).
2. E.Antoncik, J.Tauc, "Semiconductors and Semimetals", ed. R.K.Willardson, A.C.Beer, Academic Press, New York, (1966), vol.2, p.245.
3. E.Antoncik, N.K.S.Gaur, J.Phys. C11, 735 (1978).
4. Volkov et.al. Sov.Phys.Semiconductors 7, 64 (1973)
5. E.O.Kane, J.Phys.Chem.Solids. 1, 249 (1957).
6. P.Scharoch, J.Szatkowski, J.M.Pawlikowski, J.Appl.Phys. 53, 5710 (1982).
7. P.Scharoch, J.M.Pawlikowski, J.Appl.Phys. 55, 1487 (1984).
8. T.S.Moss, G.J.Burrell- B.Ellis, "Semiconductor Opto-Electronics", ed. Butterworths, London (1973)
9. J.M.Pawlikowski, Optica Applicata 15, (1985), także Proc.Internat.Conf. on Physics and Technology of Compensated Semiconductors, Madras (India), Luty 1985.
10. J.C.C.Fan, C.O.Bozler, B.J.Palm, Appl.Phys.Lett. 35, 875 (1979)
11. A.R.Beattie, J.Phys.C.Solid-State Phys. 16, 2265 (1983).
12. H.B.Callen, Phys.Rev. 76, 1394, (1949).
13. W.Szymańska, T.Dietl, J.Phys.Chem.Solids 39, 1025 (1978).
14. P.T.Landsberg, "Lectures in Theoretical Physics" Vol.VIIIA (1975) ed. Wesley E.Brittin, p.313.
15. A.R.Beattie, P.T.Lansberg, Proc.R.Soc.London Ser.A 249, 16 (1956).
16. R.Zieliński, "Metody Monte Carlo", ed.WNT,Warszawa (1970).
17. W.Zawadzki, "Mechanisms of Electron Scattering in Semiconductors", IP PAN Reports No.79 (1980).
18. W.Zawadzki and W.Szymańska, Phys.Status Solidi B45, 415 (1971).

19. C.Verie, Phys.Status Solidi 17, 886 (1966).
20. J.M.Pawlikowski, P.Becła, Infrared Phys.15, 331 (1975),
oraz 16, 457 (1976).
21. P.Becła, E.Płaczek-Popko, Infrared Phys. 21, 323 (1981).
22. E.Płaczek-Popko, Praca Doktorska, Inst.Fizyki Politechniki Wrocławskiej, 1985 .

Paweł SCHAROCH

Dodatek

do raportu serii PRE 427/85
pt. "Wydajność kwantowa wewnętrz-
nego efektu fotoelektrycz-
nego w $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ "

STRESZCZENIE.

Niniejszy dodatek zawiera poszerzenie dyskusji i uwag zawartych w raporcie PRE 427/85, a dotyczących pomiarów wydajności kwantowej w detektorach ze złączeniem p-n w CdHgTe oraz porównania wyników eksperymentalnych do wyników obliczeń teoretycznych.

A. Efekt nieliniowy w pomiarach wydajności kwantowej.

Wyda się celowym dokonanie kilku oszacowań ułatwiających dyskusję obserwowanego w eksperymencie efektu nieliniowego polegającego na tym, że ilość par elektron-dziura dających przyczynę do sygnału fotoelektrycznego nie jest wprost proporcjonalna do natężenia wiązki światła przy danej długości fali, tj. do ilości padających fotonów. Efekt ten uwidacznia się na krzywych eksperymentalnych wydajności kwantowej /rys. 20, 21/.

1. Oszacowanie koncentracji nadmiarowej.

Jeżeli przez P oznaczmy moc wiązki światła na jednostkę powierzchni prostopadłej do kierunku rozchodzenia się światła, wówczas ilość fotonów $/m/$ przechodząca przez jednostkę powierzchni w czasie t wynosi:

$$m = \frac{t P}{h\nu} \quad D1$$

gdzie $h\nu$ jest energią fotonów. Zakładając, że wszystkie fotony uległy absorpcji podstawowej w obszarze o objętości $s \cdot 1/\alpha_p$, gdzie s jest powierzchnią próbki a α_p to współczynnik absorpcji dla przejść pasmo-pasmo, oraz że pierwsza wygenerowana para ulegnie rekombinacji nie wcześniej niż po czasie τ , będącym średnim czasem życia generowanych nośników, uzyskuje się oszacowanie koncentracji nadmiarowej z zależności:

$$\Delta n = \frac{m s}{s \alpha_p^{-1}} = \frac{\tau P}{h\nu \alpha_p^{-1}} = \frac{\tau P \alpha_p}{h\nu} \quad D2$$

W czystej próbce $Cd_xHg_{1-x}Te$ o przerwie energetycznej $E_g=0.25$ eV można przyjąć $\tau \approx 10^{-8}$ s i $\alpha_p \approx 10^5$ cm⁻¹. W eksperymencie uzyskiwano z lampy halogenowej o mocy 100W, przy $h\nu=0.73$ eV, natężenia wiązki fotonów rzędu 10^{15} - 10^{17} s⁻¹cm⁻², co przy powierzchni próbki 0,03 cm² daje koncentracje nadmiarowe rzędu 10^{12} - 10^{14} cm⁻³. Są to oczywiście koncentracje średnie i dla niewielkiej w praktyce głębokości $\ll$ wnikania fotonów; lokalnie przy powierzchni próbki koncentracje te mogą być większe. Ponieważ koncentracja samoistna

w $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ dla $x=0.25$ i $T=77\text{K}$ jest rzędu 10^9cm^{-3} , może się zdarzyć taka sytuacja, że koncentracja nadmiarowa przekroczy znacznie koncentrację samoistną /np. w obszarze złącza p-n/ i taka sytuacja mogła przypuszczalnie wystąpić w badanych detektorach.

2/ Porównanie wydajności kwantowych: zmierzonej i oszacowanej teoretycznie.

Wydajność kwantowa teoretyczna jest definiowana jako:

$$\eta = \frac{N_{e-h}}{N_{ph}} \quad D3$$

gdzie N_{e-h} to liczba generowanych par elektron-dziura, a N_{ph} to liczba fotonów ulegających absorpcji podstawowej.

Wydajność kwantowa zmierzona może być zapisana jako:

$$\eta^* = \frac{N_{e-h}^*}{N_{ph}^*} \quad D4$$

gdzie N_{e-h}^* to część generowanych światłem par e-h dających przyczynek do sygnału fotoelektrycznego, a N_{ph}^* to całkowita liczba fotonów wnikaających do próbki.

Można ogólnie napisać:

$$N_{e-h}^* = A \cdot N_{e-h} \quad i \quad N_{ph}^* = \frac{1}{B} N_{ph} \quad D5$$

gdzie $B = \alpha_p / \alpha$, a α oznacza całkowity współczynnik absorpcji.

Zatem:

$$\eta = \frac{1}{A \cdot B} \eta^* \quad D6$$

Współczynniki A i B są funkcjami energii fotonów /B-bezpośrednio, natomiast A-pośrednio, poprzez miejsce generacji nośników/.

3/ Eksperymentalna wydajność kwantowa.

Wartość N_{ph}^* znajduje się z zależności wiążącej wielkości występujące w eksperymencie:

$$N_{ph}^* = (1-R) \frac{1}{\hbar\omega} \frac{U_T}{S_T} \frac{A_D}{A_T} \frac{T_D}{T_T} \quad D7$$

gdzie U_T to sygnał napięciowy z termopary, A_T to czułość spektralna termopary, A_D i A_T to powierzchnie detektora i termopary, T_D i T_T współczynniki transmisji okienek detektora i termopary, a R oznacza współczynnik odbicia światła od powierzchni detektora.

Wartość N_{e-h}^* uzyskujemy z zależności:

$$N_{e-h}^* = \frac{U_D}{e R_D} \quad D8$$

gdzie U_D to napięcie uzyskiwane na detektorze /w warunkach eksperymentu jest to napięcie przy rozwartym obwodzie zewnętrznym, U_{OC} /, zaś R_D to parametr zwany opornością różniczkową będący stosunkiem przyrostu napięcia do przyrostu prądu w punkcie pracy charakterystyki prądowo-napięciowej detektora /patrz rys. 19/.

Łącząc wzory D7 i D8 otrzymuje się zależność na eksperymentalną wydajność kwantową /patrz także wzór 48 na str. 43 w pracy/:

$$\eta^* = \frac{\hbar\omega S_T}{e(1-R)R_d} \frac{U_D}{U_T} \frac{A_T}{A_D} \frac{T_T}{T_D} \quad D9$$

4/ Zależność pomiędzy η i η^* .

Łącząc wzory D6 i D9 otrzymujemy:

$$\eta = \frac{1}{ABR_d} \left\{ \frac{S_T \hbar\omega}{e(1-R)} \frac{U_D}{U_T} \frac{A_T}{A_D} \frac{T_T}{T_D} \right\} \quad D10$$

W eksperymencie obserwowano zmiany wartości wydajności kwantowej przy zmianie natężenia wiązki fotonów, dla danej długości fali, tj. przy zmianie ilości fotonów. Współczynnikami we wzorze D10, które mogą zależeć od natężenia wiązki fotonów, są A, B i R_D . R_D może się zmieniać przy zmianie natężenia wiązki oświetlającej na skutek zmiany kształtu charakterystyki prądowo-napięciowej (zmienia się np. istotnie oporność szeregowo detektora); A może się zmieniać np. na skutek zmiany długości drogi dyfuzji przy dużych poziomach generacji; natomiast B przypuszczalnie maleje na skutek zwiększenia udziału absorpcji na swobodnych nośnikach. O ile można z grubsza oszacować zmiany R_D ze zmianami natężenia wiązki promieniowania, o tyle trudno jest przewidzieć charakter zmian współczynników A i B ze zmianami tego natężenia. Z drugiej jednak strony trudno jest znaleźć przyczynę dla której w zakresie $\hbar\omega > 3E_g$ (a więc w zakresie, w którym niewiele zmienia się charakter zjawisk absorpcji, generacji i transportu nośników w półprzewodniku) zależności A, B i R_D od ilości fotonów miałyby istotnie się zmieniać ze zmianą energii fotonów. Stąd wynika sugestia, że bardzo wyraźny efekt nieliniowy dodatni widoczny np. na rys. 20 i 21 przy $\hbar\omega > 4E_g$ (oprócz efektu nieliniowego ujemnego widocznego w zakresie $2E_g < \hbar\omega < 4E_g$ i związanego przypuszczalnie właśnie ze zmianami A, B i R_D) spowodowany jest, równie wyraźnie widocznym na krzywych teoretycznych, efektem wzrostu wydajności kwantowej ze wzrostem ekranowania. Inaczej mówiąc, dodatni efekt nieliniowy byłby to efekt polegający na tym, że przy dużych poziomach wzbudzenia następuje wolniejsze rozpraszanie energii gorących nośników spowodowane osłabieniem oddziaływań na skutek "samoe ekranowania". Oddziaływanie nośnik-nośnik nie odgrywa tu istotnej roli ponieważ wszystkie wzbudzone nośniki mają zbliżoną energię kinetyczną. Wzrost wydajności kwantowej natomiast spowodowany jest faktem, że nośniki dłużej przebywają na poziomach, przy których możliwe są przejścia Augera. Interpretacja taka, choć wydaje się możliwa, jest jednak trudna do potwierdzenia. Jej potwierdzenie wymagałoby bowiem wielu różnorodnych

eksperymentów jak np. dokładnego pomiaru charakterystyk I-V przy różnych natężeniach oświetlenia, pomiarów współczynników absorpcji, drogi dyfuzji, koncentracji równowagowych, natężenia wiązki oświetlającej w całym zakresie pomiarowym, itp. Należy także dodać, że w wypadku, gdyby koncentracja nadmiarowa nie przewyższała znacznie koncentracji równowagowej, przedstawiona powyżej interpretacja efektu nieliniowego nie byłaby właściwa.

B. Struktura krzywej eksperymentalnej.

Jak pokazano w pracy, krzywe eksperymentalne wydajności kwantowej wykazują cechy nie przewidywane przez model teoretyczny. Są to: 1/ "nasycanie" zależności $\eta^*(\hbar\omega)$ przy $\hbar\omega \approx 1.5\text{eV}$; 2/ przekraczanie przez η^* wartości 2 i 3/ niewielki "garbek" $\eta^*(\hbar\omega)$ występujący przy małych natężeniach wiązki w początkowej fazie wzrostu krzywej. Dyskusję tych cech krzywej $\eta^*(\hbar\omega)$ przedstawioną w pracy można w pewnym stopniu uzupełnić o model struktury pasmowej CdHgTe oraz charakterystyki widmowe współczynnika odbicia R. Strukturę pasmową związków CdTe, HgTe oraz $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ dla $x = 0.146$ przedstawiają rysunki a, b i c wg [D1], natomiast charakterystyki widmowe R dla różnych składów x pokazuje rys. d [wg D2]. Za fakt nasycania się wydajności kwantowej mogą być odpowiedzialne następujące efekty: przejścia prawie-poziome $\Gamma \rightarrow L$ (jak sugeruje się w pracy [11]), silny wzrost współczynnika odbicia (sugestia zawarta w niniejszej pracy), oraz ponadto "włączanie się" absorpcji podstawowej z pasma rozszczepienia spin-orbita i zmiana zakrzywienia pasm w miarę oddalania się od punktu Γ . Pierwsze dwa wytłumaczenia wydają się mniej prawdopodobne, gdyż jak widać na obrazie struktury pasmowej przejścia "prawie-poziome" $\Gamma \rightarrow L$ wymagałyby absorpcji fotonów o energii $\hbar\omega > 2\text{eV}$. Podobnie ostry wzrost współczynnika odbicia następuje dopiero przy $\hbar\omega$ równym ok. 2.2. eV (dla niższych energii R przypuszczalnie łagodnie maleje, podobnie jak w InSb). Bardzo prawdopodobna wydaje się natomiast sugestia dotycząca dodatkowych przejść z pasma rozszczepienia spin-orbita, mogących występować dla energii fotonów równej ok. 1.3 eV, a więc w pobliżu punktu, w którym obserwuje się nasycanie wydajności kwantowej. Skutkiem takich przejść byłaby generacja par e-h nieefektywnych dla wzrostu wydajności kwantowej powyżej jedności, przy jednoczesnym gwałtownym obniżeniu udziału absorpcji z pasma dziur ciężkich i w konsekwencji zahamowaniu wzrostu wydajności kwantowej η^* . Podobnie obserwowane na obrazie struktury pasmowej zmiany zakrzywień pasm dziur lekkich i ciężkich w miarę oddalania się od

punktu Γ mogą prowadzić do zmian współczynników absorpcji i w konsekwencji spadku wydajności kwantowej. Wydaje się jednak, że spadek ten nie byłby wówczas tak gwałtowny jak to się obserwuje w eksperymencie.

Możliwym wytłumaczeniem występowania "garbka" w początku krzywej $\eta^*(\hbar\omega)$ mogłaby być absorpcja z głębokich poziomów stanów zlokalizowanych. Elektrony pochodzące z takich przejść wywoływałyby jonizację zderzeniową, jednak ich udział w miarę wzrostu natężenia wiązki byłby coraz mniejszy. Zgadzałoby się to z obserwacją, że garbek znika ze wzrostem mocy wiązki. Niestety autor nie dysponuje żadnymi informacjami dotyczącymi istnienia takich stanów.

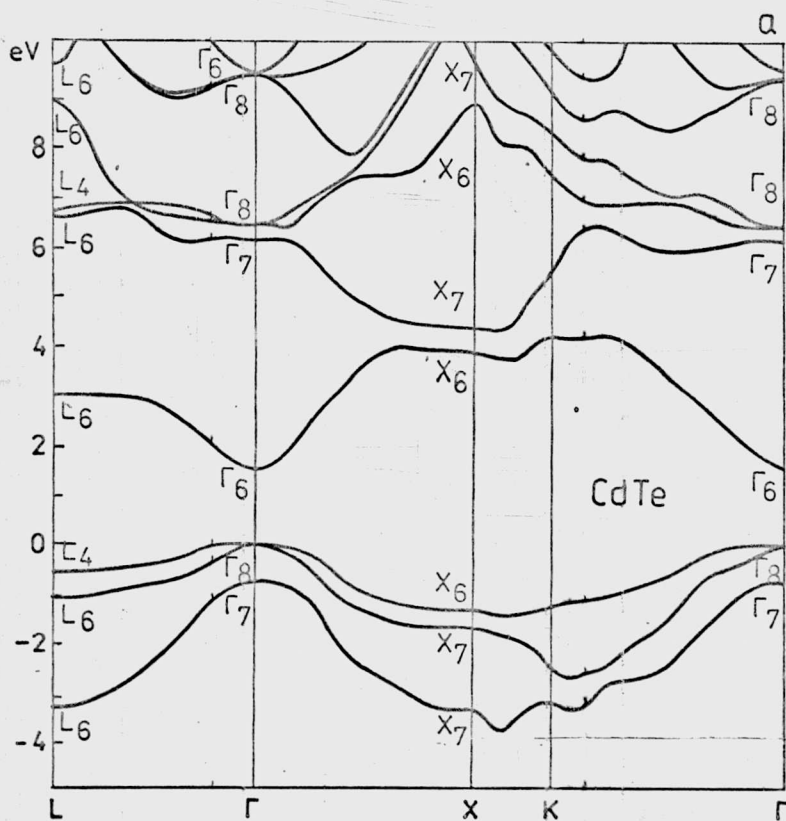
Celem uzupełnienia wyników eksperymentalnych przedstawionych w pracy pokazano na rys. e porównanie krzywej eksperymentalnej $\eta^*(\hbar\omega)$ dla stałej (co do rzędu wielkości) koncentracji fotonów w wiązce, znormalizowanej do jedności przy $\hbar\omega = 0.73$ eV, z krzywą teoretyczną odpowiadającą parametrom badanego detektora. Porównanie to potwierdza konkluzję zawartą w pracy o dobrej jakościowej zgodności teorii z eksperymentem. Niestety, nadal otwartą pozostaje kwestia zgodności ilościowej, która wobec braku dostatecznej adekwatności eksperymentu do teorii w niniejszej pracy nie mogła być potwierdzona.

LITERATURA

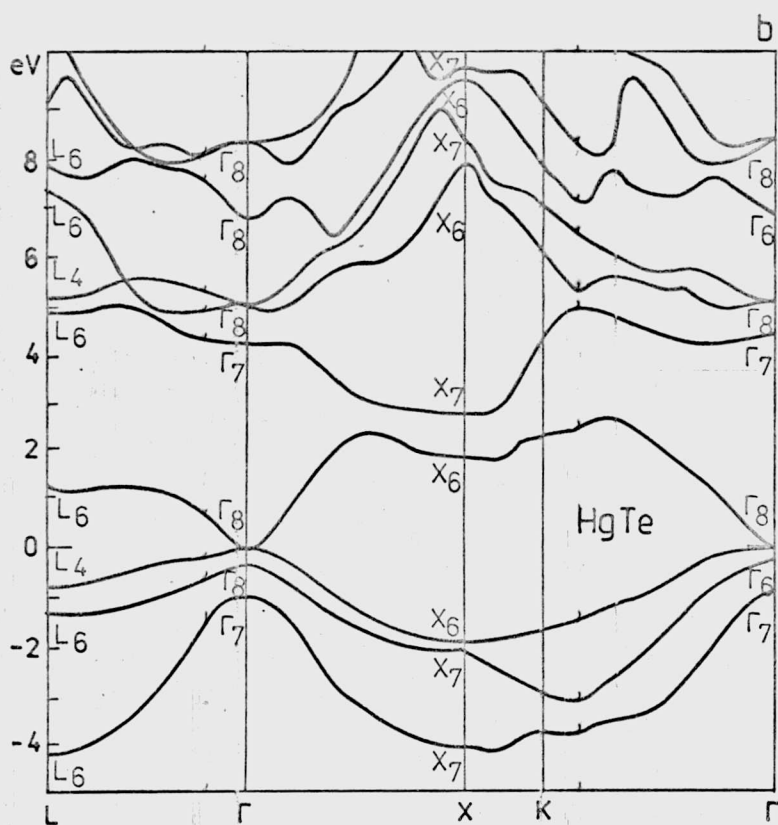
- [D1] - Shin-ichi Katsuki, Makoto Kunimune, J.Phys.Soc.
Japan 31, 445 (1971).
- [D2] - R.R. Gałazka, A. Kisiel, phys.stat.sol. 34, 61
(1969)

PODPISY POD RYSUNKAMI

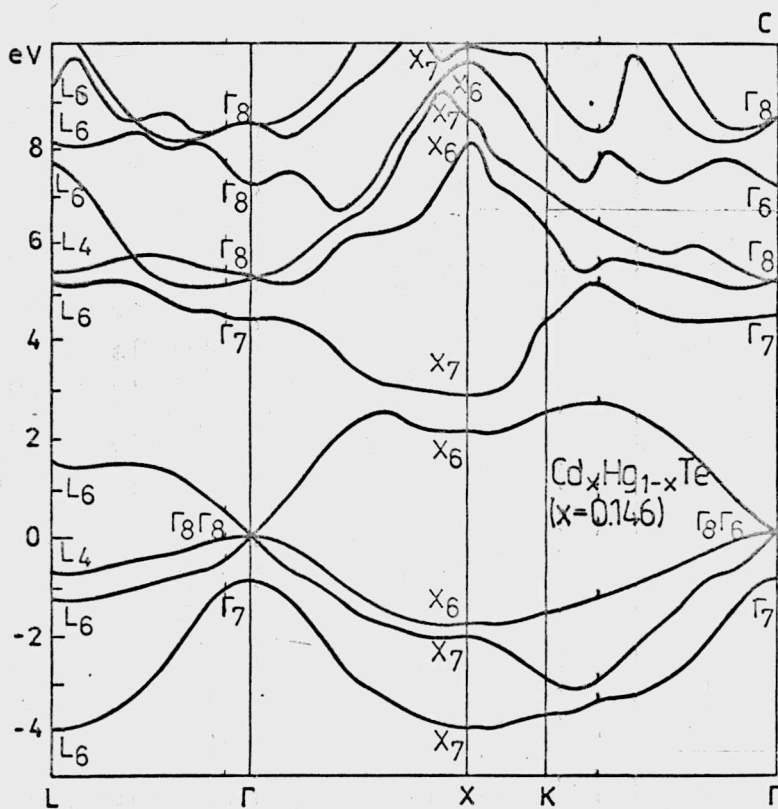
- Rys. a. Struktura pasmowa CdTe
- Rys. b. Struktura pasmowa HgTe
- Rys. c. Struktura pasmowa $\text{Cd}_{0.146}\text{Hg}_{0.854}\text{Te}$
- Rys. d. Widmowe charakterystyki współczynnika odbicia dla CdHgTe z różną zawartością molową kadmu, x.
- Rys. e. Teoretyczna (linia ciągła) i eksperymentalna (punkty, linia przerywana) charakterystyka spektralna wydajności kwantowej omawianej w pracy.



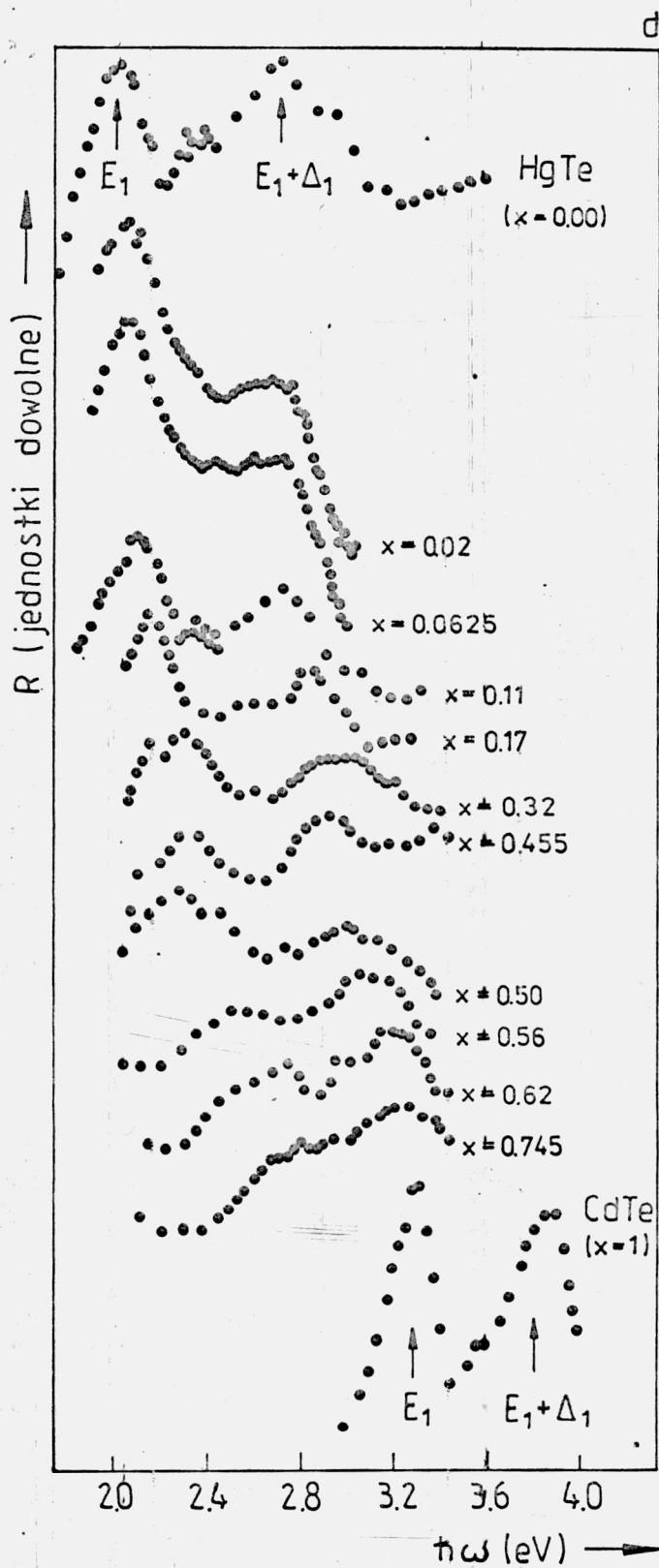
Rys. a



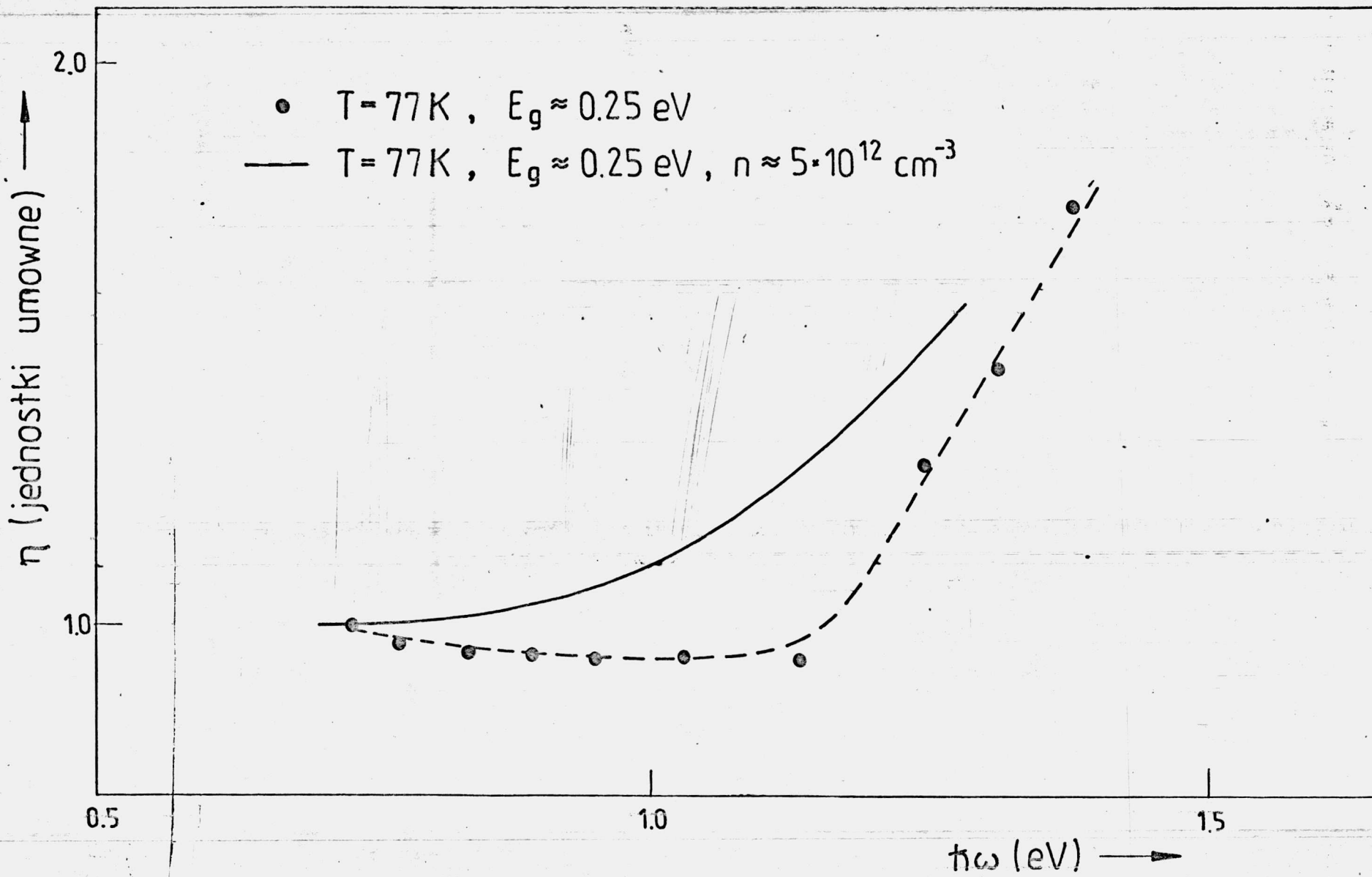
Rys. b



Rys. C



Rys. d



e

Fig. 2