Wpływ parametrów procedury numerycznej CONTIN na kształt prążków widmowych otrzymywanych w wyniku analizy temperaturowych zmian relaksacyjnych przebiegów fotoprądu

Jarosław Żelazko, Paweł Kamiński, Roman Kozłowski

¹ Institute of Electronic Materials Technology, 133 Wolczynska Str., 01-919 Warsaw, POLAND e-mail: Jaroslaw.Zelazko@itme.edu.pl

Streszczenie: Opisano procedurę numeryczną CONTIN zastosowaną do wyznaczania temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku z centrów defektowych w półprzewodnikach o wysokiej rezystywności. Zależności te są wizualizowane poprzez prążki widmowe powstające w wyniku przekształcenia relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. Określono wpływ parametrów sterujących procesem obliczeniowym na kształt i intensywność prążków widmowych.

Słowa kluczowe: HRPITS, CONTIN, radiacyjne centra defektowe, prążki widmowe

Influence of the CONTIN numerical procedure parameters on the shape of the spectral fringes obtained through the analysis of the temperature changes of the photocurrent relaxation waveforms

Abstract: The CONTIN numerical procedure applied to determine the temperature dependence of the charge carriers emission rate from defect centers in high resistivity semiconductors is presented. This relationship is visualized as spectral fringes formed through the transformation of the photocurrent relaxation waveforms. The influence of the parameters controlling the numerical procedure on the shape and intensity of the spectral fringes is determined.

Key words: HRPITS, CONTIN, radiation defect centres, spectral fringes

1. Wprowadzenie

Procedura numeryczna CONTIN opracowana została przez S. Provenchera do wyznaczania rozwiązań równań całkowych, a w szczególności równania całkowego Fredholma [1 - 3]. Stosowana jest ona do analizy sygnałów będacych sumą przebiegów eksponencjalnych. Umożliwia ona określenie stałych czasowych oraz amplitud eksponencjalnych przebiegów składowych. Może być ona zastosowana do badania wpływu różnych czynników fizycznych na stałe czasowe przebiegów składowych. W ITME procedura CONTIN zastosowana została do badania właściwości centrów defektowych w półprzewodnikach wysokorezystywnych metodą niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej o wysokiej rozdzielczości (High-Resolution Photoinduced Transient Spectroscopy -HRPITS) [4 - 7]. Opracowany i wdrożony w ITME system pomiarowy umożliwia prowadzenie badań na najwyższym poziomie światowym, a w szczególności prowadzonych przy współpracy z CERN badań radiacyjnych centrów defektowych w monokryształach krzemu stosowanych do wytwarzania detektorów cząstek o wysokiej energii. Nieprzerwanie prowadzone są również prace badawcze w kierunku zwiększenia rozdzielczości metody HRPITS. W artykule przedstawiono wyniki badań przeprowadzonych w celu zoptymalizowania procedury wyznaczania parametrów centrów defektowych na podstawie prążków widmowych Laplace'a otrzymywanych w wyniku analizy

relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku. Badania te pozwoliły na określenie wpływu parametrów sterujących procedurą obliczeniową w programie CONTIN wykorzystywanym do numerycznej analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, na kształt i separację prążków widmowych Laplace'a. Dobrano wartości tych parametrów zapewniające najlepszą rozdzielczość prążków widmowych Laplace'a. Działanie programu CONTIN z wykorzystaniem optymalnych parametrów sterujących procedurą obliczeniową zademonstrowano na przykładzie badania właściwości radiacyjnych centrów defektowych w monokrystalicznym krzemie napromieniowanym hadronami o wysokiej energii.

2. Opis procedury obliczeniowej w programie CONTIN

Wyznaczanie parametrów centrów defektowych w półprzewodnikach wysokorezystywnych metodą HRPITS dokonywane jest na podstawie relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku, które rejestrowane są w szerokim zakresie temperatur. Zapełnianie tych centrów nadmiarowymi nośnikami ładunku zachodzi poprzez impulsowe oświetlanie próbki promieniowaniem o określonej długości fali.

Relaksacyjny przebieg fotoprądu związany z termiczną

emisją nadmiarowych elektronów z zapełnionych pułapek możemy opisać wyrażeniem [5 - 6]:

$$i(t) = q n_T(0) \mu_n \tau_n E C e_{nT} \exp(-e_{nT} t),$$
(1)

w którym *q* oznacza ładunek elementarny, $n_T(0)$ – koncentrację pułapek zapełnionych elektronami w chwili wyłączenia oświetlenia, $\mu_n \tau_n$ – iloczyn ruchliwości i czasu życia elektronów, e_{nT} – szybkość termicznej emisji elektronów, *E* - natężenie pola elektrycznego powodującego unoszenie emitowanych z pułapek elektronów, zaś *C* - pole powierzchni przekroju poprzecznego obszaru, w którym zachodzi termiczna emisja elektronów.

Równanie (1) można przedstawić w postaci:

$$i(t) = I_0 \exp(-e_n t),$$
 (2)

gdzie I_0 jest amplitudą relaksacyjnego przebiegu fotoprądu określoną wyrażeniem:

$$I_{0} = qn_{T}(0)\mu_{n}\tau_{n}ECe_{nT}$$
(3)

Szybkość emisji elektronów e_{nT} w danej temperaturze T określona jest równaniem Arrheniusa:

$$e_{nT}(T) = AT^2 \exp(-E_a / kT),$$
 (4)

w którym E_a oznacza energię aktywacji pułapek, zaś A jest iloczynem przekroju czynnego na wychwyt elektronów i zależnej od masy efektywnej stałej materiałowej γ_n . Dla elektronów w Si $\gamma_n = 7,17 \times 10^{21}$ cm⁻²s⁻¹K⁻², zaś dla dziur $\gamma_n = 3,8 \times 10^{21}$ cm⁻²s⁻¹K⁻².

Biorąc pod uwagę fakt, że w półprzewodniku o bardzo wysokiej rezystywności występuje wiele rodzajów centrów defektowych, relaksacyjny przebieg fotoprądu w zadanej temperaturze *T* można wyrazić jako sumę przebiegów wykładniczych opisywanych równaniem (2). Suma ta przyjmuje postać wyrażenia:

$$i(t,T) = \sum_{k=1}^{K} I_{0k}(T) \exp\left[-e_{Tk}(T)t\right],$$
(5)

w którym *K* jest liczbą rodzajów centrów defektowych, zaś $e_{Tk} = 1/\tau_k$ jest szybkością emisji nośników ładunku dla poszczególnych rodzajów centrów defektowych równą odwrotności stałej czasowej przebiegu wykładniczego. Należy dodać, że przebiegi opisywane równaniem (5) są rejestrowane eksperymentalnie w szerokim zakresie temperatur, który w przypadku badania centrów defektowych w krzemie zawiera się w przedziale 20 - 320 K.

W metodzie HRPITS relaksacyjne przebiegi fotoprądu opisywane równaniem (5) analizowane są za pomocą dwuwymiarowej procedury korelacyjnej oraz dwuwymiarowej procedury numerycznej wykorzystującej odwrotne przekształcenie Laplace'a [4 - 6]. Celem tej analizy jest określenie temperaturowych zależności szybkości emisji nośników ładunku dla poszczególnych rodzajów centrów defektowych ($e_{Tk} = f(T)$). Zarówno w widmie

korelacyjnym, jak i w widmie Laplace'a zależności te określone są poprzez linie grzbietowe fałd występujących na powierzchni widmowej [4 - 6] i parametry centrów defektowych są wyznaczane poprzez dopasowanie linii grzbietowych tych fałd do linii opisywanych równaniem Arrheniusa w układzie współrzędnych określonym poprzez szybkość emisji e_r oraz temperaturę T [4 - 6]. W przypadku procedury Laplace'a powierzchnia widmowa $S_{i}(e_{\tau}, T)$ tworzona jest z wielu jednowymiarowych widm $S_{i}(e_{\tau})$ otrzymanych w wyniku analizy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zarejestrowanych w różnych temperaturach T. W celu otrzymania widm Laplace'a analiza relaksacyjnych przebiegów fotoprądu opisywanych równaniem (5) realizowana jest za pomocą programu CONTIN, który został opracowany i udostępniony przez S. Provenchera [1 - 3] i jest częścią oprogramowania ZanVis, stworzonego i rozwijanego w ITME przez autora niniejszego artykułu.

Złożony z K składowych wykładniczych relaksacyjny przebieg fotoprądu opisywany równaniem (5) możemy w temperaturze T_j przedstawić w postaci całkowego równania Fredholma drugiego rodzaju [2]:

$$i_{I}(t) = \int_{0}^{\infty} S_{Ii}(e_{T}) K(e_{T}, t) de_{T},$$
(6)

w którym $K(e_r, t)$ nazywana jest jądrem równania. Wyrażenie (6) umożliwia przekształcenie relaksacyjnego przebiegu fotoprądu zmierzonego w domenie czasu w temperaturze T_j w postać widmową $S_{L_j}(e_r)$ w domenie szybkości emisji e_r , która jest odwrotnością stałych czasowych przebiegów składowych. W szczególnym przypadku jądro równania (6) może być funkcją eksponencjalną i wówczas zależność (6) nazywana jest rzeczywistym przekształceniem Laplace'a:

$$i_{j}(t) = \int_{0}^{\infty} S_{Li}(e_{T}) \exp(-e_{T}t) de_{T},$$
(7)

w którym $S_{Lj}(e_T)$ jest jednowymiarową funkcją widmową dla ustalonej temperatury T_j . Problem obliczeniowy polega na określeniu funkcji widmowej $S_{Lj}(e_T)$ na podstawie danych pomiarowych relaksacyjnego przebiegu fotoprądu $i_j(t)$. Ze względu na dyskretny charakter tych danych w obliczeniach numerycznych całkowanie w równaniu (7) zastępuje się sumowaniem:

$$i_{j}(t) = \sum_{m=1}^{N_{g}} C_{m} S_{Lj}(e_{Tm}) \exp(-e_{Tm}t), \qquad (8)$$

gdzie C_m są współczynnikami wagowymi w numerycznym całkowaniu równania (7), zaś N_g jest liczbą punktów w zbiorze wartości szybkości emisji e_T o granicznych wartościach równych $e_{T1} = e_{Tmin}$ i $e_{TNx} = e_{Tmax}$.

W programie CONTIN dyskretne wartości relaksacyjnego przebiegu fotoprądu $i_j(t)$ w chwili t_k oznaczane są jako y_k i w notacji zastosowanej przez Provenchera [1 -3] przekształcane są w postać widmową w wyniku rozwiązania układu liniowych równań algebraicznych:

$$y_{k} = \sum_{m=1}^{N_{g}} c_{m} F_{k}(\lambda m) S(\lambda_{m}) + \sum_{i=1}^{N_{L}} L_{ki} \beta_{i} + \varepsilon_{k}.$$
 (9)

W wyrażeniu (9) $s(\lambda_m)$ jest wartością szukaną funkcji widmowej odpowiadającej $S_{Lj}(e_{Tm})$ w równaniu (8), zaś $F_k(\lambda_m)$ jest wartością funkcji exp (- $e_{Tm}t_k$) w chwili t_k . Dodatkowa suma iloczynów $L_k\beta_i$ umożliwia zadanie poziomu odniesienia, który dla $N_L = 1$ oraz $L_{k1} = 1$ określony jest wartością parametru β_1 . Wartości ε_k uwzględniają wpływ warunków pomiaru związany z niepewnością wartości y_k spowodowaną zakłóceniami losowymi (szumem). Wartości $s(\lambda_m)$ określane są dla liczby punktów siatki N_g odpowiadających wartościom λ_m . Równanie (9) można przedstawić w postaci uogólnionej:

$$y_k = \sum_{j=1}^{N_x} A_{kj} x_j + \varepsilon_k, \tag{10}$$

w której $N_x = N_g + N_L$, zaś wektor x o wymiarach $N_x \times 1$ zawiera niewiadome $s(\lambda_m)$ i β_i , natomiast macierz A zawiera wartości $c_m F_k(\lambda_m)$ i L_{ki} . Tak więc równanie (10) stanowi uogólnioną postać układu równań algebraicznych, rozwiązanie którego umożliwia przekształcenie relaksacyjnego przebiegu fotoprądu w jednowymiarową funkcję widmową.

Proces obliczeniowy realizowany za pomocą programu CONTIN kontrolowany jest poprzez plik sterujący *in_cntrl* umożliwiający wprowadzanie zmian wartości parametrów występujących w równaniach (8-10). Nazwy poszczególnych parametrów, ich znaczenie oraz dopuszczalne wartości zestawiono w Tab. 1. Parametr LAST, przyjmujący wartości logiczne dotyczy sposobu wyboru źródła danych wejściowych, którymi są pliki z zarejestrowanymi relaksacyjnymi przebiegami fotoprądu w zadanym zakresie temperatur. Wartość 1 określa wybór pojedynczego pliku dla każdej temperatury. Parametry GMNMX1 i GMNMX2 definiują dolną i górną granicę numerycznego całkowania równania Fredholma (7).

Tab. 1. Parametry procedury obliczeniowej wpływające na właściwości funkcji widmowej otrzymywanej za pomocą programu CONTIN [1 - 3].

Tab. 1. Parameters of the numerical procedure determining the properties of the spectral function obtained using CONTIN [1 - 3].

Parametr	Znaczenie	Dozwolone wartości	Domyślna wartość
LAST	Sposób wczytywania danych wejściowych	0 lub 1	1
GMNMX1	Dolny zakres wartości szukanych rozwiązań dowolna liczba dodatnia w fe cie X.XE+X		1.E+0
GMNMX2	Górny zakres wartości szukanych rozwiązań	dowolna liczba dodatnia w forma- cie X.XE+X	5.E+4
IWT	Wybór sposobu wagowania	Wybór sposobu wagowania1, 2, 3, 4 lub 5	
NERFIT	Liczba punktów marginesu wagowania	Dowolna całkowita liczba do- datnia	2.
NINTT	Liczba przedziałów, na które dzielony jest przebieg relak- sacyjny	Dowolna całkowita liczba do- datnia	3.
NLINF	Wartość N _L w równaniu (9) Dowolna całkowita datnia		1.
NG	Wartość N_{g} w równaniu (9)	Dowolna całkowita liczba do- datnia	251.
ALPST 2	Parametr wyboru siatki stosowanej w procedurze końco- wej szukania rozwiązania równania Fredholma	0 lub dowolna liczba dodatnia w formacie X.E+X	1.E-6
NONNEG	Wartość 1 narzuca warunek $x \ge 0$ w równaniu (10)	0 lub 1	1.
MPKMOM	Maksymalna liczba szukanych rozwiązań równania Fre- dholma	Dowolna całkowita liczba do- datnia	3.
IQUAD	Sposób szukania rozwiązań równania Fredholma	1, 2 lub 3	1.
IFORMY	Format zapisu danych wejściowych y_k	Liczba rzeczywista w formacie (XEXX.X)	(E15.6)
DOUSNQ	Włączenie/Wyłączenie podprogramu USERNQ narzucają- cego ograniczenia na rozwiązania równania Fredholma	0 lub 1	1
IUSER 10	Wartość zmiennej podprogramu IUSER 10	0 lub dowolna całkowita liczba dodatnia	2.
RUSER 16	Wartość zmiennej podprogramu RUSER 16	0 lub dowolna całkowita liczba dodatnia	0.
RUSER 22	Wartość zmiennej podprogramu RUSER 22	0 lub dowolna całkowita liczba dodatnia	1.
RUSER 20	Wartość zmiennej podprogramu RUSER 20	0 lub dowolna całkowita liczba dodatnia	1.
RUSER 10	Wartość zmiennej podprogramu IUSER 10	0 lub dowolna całkowita liczba dodatnia	0.
END	Komenda zakończenia pliku in_cntrl		

Określają one zatem przedział wartości szybkości emisji dla których szukana jest funkcja widmowa. Parametr IWT przyjmuje wartości całkowite w przedziale [1, 5], które definiują sposób wagowania zastosowany podczas rozwiązywania równania (7). Parametr ten związany jest z wykonywaną metodami statystycznymi analizą losowego rozrzutu wartości y_{μ} w równaniu (10). Dla wartości domyślnej IWT = 1 przyjmowane jest założenie jednakowego poziomu szumów dla wszystkich wartości danvch wejściowych. Wariancja $\sigma^2(y_k)$ przyjmuje wówczas wartość 1. Parametr NERFIT określa sposób obliczenia błędu wynikającego z dopasowania rozwiązania równania Fredholma do danych eksperymentalnych. Parametr ten pozwala na określanie liczby wartości odchyleń pomiędzy wartościami obliczonymi i wartościami eksperymentalnymi zastosowanymi do obliczenia błędu dopasowania. Parametr NINTT określa liczbę przedziałów o jednakowej szerokości ograniczonych punktami t_{μ} zastosowanych do całkowania równania Fredholma (6). Parametry NLINF i NG pozwalają na zadanie odpowiednio wartości N, i N w równaniu (9) określających liczbę punktów siatki zastosowanych do wyznaczenia poziomu odniesienia i funkcji widmowej. Parametr ALPST 2 umożliwia zastosowanie dodatkowej siatki do końcowej analizy rozwiązań równania Fredholma uzyskiwanych w wyniku obliczeń numerycznych. Innymi słowy służy do zwiększenia dokładności wykonywanych obliczeń, Parametr NONNEG przyjmuje wartości logiczne (0 lub 1). Wartość 1 narzuca warunek, aby dane wejściowe relaksacyjnego przebiegu fotoprądu nie zawierały wartości ujemnych. Parametr MPKMOM pozwala na zadanie maksymalnej liczby szukanych rozwiązań równania Fredholma. Innymi słowy wartość tego parametru definiuje liczbę maksimów funkcji widmowej, a tym samym liczbę składowych wykładniczych występujacych w relaksacyjnym przebiegu fotopradu. Parametr IQUAD określa sposób wyznaczania funkcji widmowej. Dla IQUAD = 1 funkcja widmowa wyznaczana jest bezpośrednio poprzez rozwiązanie układu równań (10). Dla IQUAD = 2 równanie (7) rozwiązywane jest metodą numeryczna z wykorzystaniem metody trapezów. Natomiast dla IQUAD = 3 równanie to rozwiązywane jest z zastosowaniem metody Simpsona. Parametr IFORMY określa format zapisu danych wejściowych, zaś parametr DOUSNQ przyjmuje wartości logiczne i umożliwia wywołanie podprogramu narzucającego szczegółowe ograniczenia na wartości funkcji widmowej. Parametry IUSER 10, RUSER 10, RUSER 16, RUSER 20, RUSER 22 służą do definiowania wartości zmiennych występujących w poszczególnych podprogramach. Plik sterujący in_ctrln kończy komenda END.

3. Określenie wpływu parametrów sterujących programu CONTIN na kształt prążków widmowych Laplace'a

Badanie wpływu parametrów programu CONTIN na kształt prążków widmowych Laplace'a rozpoczęto od przekształcenia w postać widmową relaksacyjnego przebiegu fotoprądu związanego z termiczną emisją nośników ładunku z jednego rodzaju centrów defektowych. Centra te charakteryzowały się energią aktywacji $E_a = 0,047$ eV i zależnym od przekroju czynnego na wychwyt nośników ładunku parametrem $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻². Centra te związane są z defektami radiacyjnymi powstałymi w krzemie otrzymanym metodą Czochralskiego z zastosowaniem pola magnetycznego (MCz-Si) wskutek napromieniowania neutronami o energii 1 MeV.

Obraz przedstawiony na Rys. 1 ilustruje rzut fałdy występującej na korelacyjnej powierzchni widmowej na płaszczyznę określoną przez oś temperatury (*T*) i szybkości emisji (e_T). Parametry centrów defektowych wyznaczone zostały w wyniku dopasowania linii grzbietowej fałdy do linii opisywanej równaniem Arrheniusa $e_T = AT^2 \exp(-E_a/k_T)$, w którym *k* jest stałą Boltzmanna.

Na Rys. 2 pokazano prążek widmowy Laplace'a uzyskany w wyniku zastosowania programu CONTIN do przekształcenia w postać widmową tych samych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, które zastosowane zostały do uzyskania prążka korelacyjnego widocznego na Rys. 1. Przebiegi te zostały zarejestrowane w zakresie



Rys. 1. Korelacyjny prążek widmowy dla radiacyjnych centrów defektowych wykrytych w MCz-Si napromieniowanym neutronami o energii 1 MeV. Linia ciągła ilustruje temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku dla centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².

Fig. 1. Image of the spectral fringe obtained using the correlation procedure for a radiation defect center detected in MCz-Si irradiated with 1 MeV neutrons. The solid line illustrates the temperature dependence of the emission rate for the detected defect center with the activation energy $E_a = 0.047$ eV and the pre-exponential factor $A = 8.2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².



Rys. 2. Widmowy prążek Laplace'a uzyskany za pomocą programu CONTIN dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻². Linia ciągła ilustruje temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku. W tabeli zestawiono wartości parametrów programu CONTIN, dla których wykonano obliczenia numeryczne w celu otrzymania prążka widmowego.

Fig. 2. Laplace spectral fringe obtained using the CONTIN program for a radiation defect center with the activation energy $E_a = 0.047$ eV and the pre-exponential factor $A = 8.2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻². The solid line illustrates the temperature dependence of the emission rate for the detected defect center. Table shows the values of the CONTIN program parameters used in numerical calculations to obtain the spectral fringe.



Rys. 3. Wykres Arrheniusa dla wykrytych centrów defektowych ($E_a = 0,047 \text{ eV}, A = 8,2 \times 10^2 \text{ s}^{-1}\text{K}^{-2}$) (a) oraz zależność wysokości linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od termicznej szybkości emisji nośników ładunku (b). **Fig. 3.** Arrhenius plot for the detected defect center ($E_a = 0.047 \text{ eV}, A = 8.2 \times 10^2 \text{ s}^{-1}\text{K}^{-2}$) (a) and the height of the 2D Laplace function spectral ridge line versus the thermal emission rate of charge carriers (b).

temperatur 25 - 140 K. Przyjęte wartości parametrów sterujących programem CONTIN przedstawione na Rys. 2 zostały dobrane na podstawie wykonanych dotychczas analiz relaksacyjnych przebiegów fotoprądu zmierzonych dla różnego rodzaju centrów defektowych w półprzewodnikach o wysokiej rezystywności [7 - 10]. Należy dodać, że wartość parametru GMNMX2 została tak ustawiona, aby ograniczyć od góry zakres szybkości emisji do wartości 10⁴ s⁻¹. Ograniczenie to pozwala bowiem na wyeliminowanie dominującej składowej szumowej widocznej w widmie korelacyjnym (Rys. 1) w zakresie szybkości powyżej 10⁴ s⁻¹. Składowa szumowa o mniejszej intensywności zawarta w relaksacyjnych przebiegach fotoprądu widoczna na Rys. 1 w zakresie szybkości emisji $< 10^4$ s⁻¹ manifestuje się na Rys. 2 w postaci nieregularnej linii obserwowanej w pobliżu szybkości emisji 10^3 s⁻¹. Linią ciągłą na Rys. 2 zaznaczono temperaturową zależność szybkości emisji nośników ładunku dla wykrytych centrów defektowych otrzymaną w wyniku aproksymacji linii grzbietowej fałdy występującej w widmie Laplace'a równaniem Arrheniusa.

Na Rys. 3a - b przedstawiono odpowiednio wykres Arrheniusa otrzymany dla maksymalnych wartości amplitudy linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a oraz zależność wartości tych maksimów od szybkości emisji nośników ładunku. Rzut tej fałdy na płaszczyznę określoną przez oś temperatury (T) i szybkości emisji (e_r) ilustruje Rys. 2.

Wyniki przedstawione na Rys. 3 wskazują na dużą przydatność programu CONTIN do badania centrów defektowych. Na podstawie prążka widmowego Laplace'a można bowiem wyznaczyć wykres Arrheniusa umożliwiający określenie energii aktywacji i przekroju czynnego na wychwyt nośników ładunku, a także temperaturową zależność amplitudy relaksacyjnych przebiegów fotoprądu pozwalającą na określenie koncentracji centrów defektowych [8]. Warto dodać, że zależności pokazane na Rys. 3 są zgodne z przyjętym modelem opisywanym równaniami (2 - 4).

Na Rys. 4a - c zilustrowano wpływ wartości parametru ALPST na kształt prążka widmowego Laplace'a dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².

Wyniki przedstawione na Rys. 4 wskazują, że kształt prążka widmowego Laplace'a silnie zależy od wartości parametru ALPST. Najlepszy wynik uzyskano dla wartości tego parametru równej 1E-5 (Rys. 4 b) i 1E-4 (Rys. 4 c). Należy dodać, że dla parametru ALPST = 1E-7 procedura obliczeniowa została przerwana przez program CONTIN po wystąpieniu błędu dla temperatury 65K (Rys. 4a).

Na Rys 5a, 5c i 5e pokazano wpływ wartości parametru ALPST na wykres Arrheniusa, zaś na Rys. 5b, 5d i 5f przedstawiono jego wpływ na amplitudę linii grzbietowej fałdy w widmie Laplace'a w funkcji szybkości emisji dla centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².

Jak wskazują dane z Rys. 5c i 5e w zakresie $1/kT \sim 150 - 225 \text{ eV}^{-1}$ zależność $\ln[T^2/e_T]$ od 1/kT zgodna jest z równaniem Arrheniusa, zaś dane z Rys. 5d wskazują, że w zakresie szybkości emisji od 100 do ~ 2000 s⁻¹ amplituda linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a jest zgodna z modelem. Tak więc, dla wartości parametru ALPST równego 1E-5 otrzymano zgodność z modelem zarówno temperaturowej zmiany szybkości emisji nośników ładunku, jak i amplitudy prążków w widmie Laplace'a.

Na Rys. 6 przedstawiono zmiany obrazu prążka widmowego Laplace'a dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku A = $8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻² w zależności od wartości parametru NG programu CONTIN. Najlepszy obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymano dla wartości parametru NG równej 70.

Na Rys 7a, 7c i 7e pokazano wpływ wartości parametru NG programu CONTIN, odpowiednio równego 200, 100 i 70, na wykres Arrheniusa, zaś na Rys. 7b, 7d i 7f przedstawiono jego wpływ na amplitudę linii grzbietowej fałdy w widmie Laplace'a w funkcji szybkości emisji dla centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².

Jak wskazują dane z Rys. 7a, 7c i 7e w zakresie $1/kT \sim 150 - 225 \text{ eV}^{-1}$ zależność $\ln[T^2/e_T]$ od 1/kT zgodna jest z równaniem Arrheniusa, zaś dane z Rys. 7b, 7d



Rys. 4. Zilustrowanie wpływu wartości parametru ALPST programu CONTIN na obraz prążka widmowego Laplace'a dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a =$ 0,047 eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2 \text{ s}^{-1}\text{K}^{-2}$. Wartości parametru ALPST są następujące: 1E-7 (a), 1E-5 (b) i 1E-4 (c). Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2.

Fig. 4. Effect of the ALPST parameter values used in the CONTIN program on the image of the Laplace spectral fringe for a radiation defect center ($E_a = 0.047 \text{ eV}, A = 8.2 \times 10^2 \text{ s}^{-1}\text{K}^{-2}$). The ALPST values are as follows: 1E-7 (a), 1E-5 (b) and 1E-4 (c). The values of the remaining parameters are as in Fig. 2.

i 7f wskazują, że w zakresie szybkości emisji od 100 do $\sim 2000 \text{ s}^{-1}$ amplituda linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a jest zgodna z modelem. Tak więc, należy stwierdzić, że wartość parametru NG z zakresu 70 - 200 nie ma wpływu na układ punktów tworzących wykres Arrheniusa oraz układ punktów tworzących zależność wysokości linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od szybkości emisji. Należy dodać, że szybkość obliczeń komputerowych zależy od parametru NG. Dla mniejszego parametru NG obliczenia przebiegają szybciej.

Na Rys. 8 pokazano wpływ parametru IQUAD programu CONTIN na obraz prążka widmowego Laplace'a, zaś na Rys. 9 wpływ tego parametru na wykres Arrheniusa oraz amplitudę fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od szybkości emisji dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 10^2$ s⁻¹K⁻².



Rys. 5. Zilustrowanie wpływu wartości parametru ALPST programu CONTIN na układ punktów tworzących wykresy Arrheniusa (a, c, e) oraz układ punktów tworzących zależności wysokości linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od szybkości emisji (b, d, f).

Fig. 5. Effect of the ALPST parameter values used in the CONTIN program on the arrangement of the experimental points forming the Arrhenius plots (a, c, e) and the height dependence of the 2D Laplace function spectral ridge line versus the thermal emission rate of charge carriers (b, d, f).



Rys. 7. Zilustrowanie wpływu wartości parametru NG programu CONTIN na układ punktów tworzących wykresy Arrheniusa (a, c, e) oraz układ punktów tworzących zależności wysokości linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od szybkości emisji (b, d, f).

Fig. 7. Effect of the NG parameter values used in the CONTIN program on the arrangement of the experimental points forming the Arrhenius plots (a, c, e) and the height dependence of the 2D Laplace function spectral ridge line versus the thermal emission rate of charge carriers (b, d, f).

MATERIAŁY ELEKTRONICZNE (Electronic Materials), T. 43, Nr 4/2015



Rys. 8. Zilustrowanie wpływu parametru IQUAD programu CONTIN na obraz prążka widmowego Laplace'a dla radiacyjnych centrów defektowych o energii aktywacji $E_a = 0,047$ eV i współczynniku $A = 8,2 \times 102$ s⁻¹K⁻². Wartości parametru IQUAD są następujące: 2 (a) i 3 (b). Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2. **Fig. 8.** Effect of the IQUAD parameter values used in the CONTIN program on the image of the Laplace spectral fringe for

a radiation defect center ($E_a = 0.047 \text{ eV}, A = 8.2 \times 102 \text{ s}^{-1}\text{K}^{-2}$). The IQUAD values are as follows: 2 (a) and 3 (b). The values of the remaining parameters are as in Fig. 2.



Rys. 9. Zilustrowanie wpływu wartości parametru IQUAD programu CONTIN na układ punktów tworzących wykresy Arrheniusa (a, c) oraz układ punktów tworzących zależności wysokości linii grzbietowej fałdy w dwuwymiarowym widmie Laplace'a od szybkości emisji (b, d).

Fig. 9. Effect of the IQUAD parameter values used in the CONTIN program on the arrangement of the experimental points forming the Arrhenius plots (a, c) and the height dependence of the 2D Laplace function spectral ridge line versus the thermal emission rate of charge carriers (b, d).

Etykieta	E_a [meV]	A [K-2s-1]	N_{T} [cm ⁻³]	Identyfikacja
T10	315	2,5 x 10 ⁵	4.7 x 10 ¹⁶	C _i (+/0) [10]
TA5	325	1,4 x 10 ⁶	3,9 x 10 ¹⁶	V ₃ O(2-/-) [11]
TS6	410	1,0 x 10 ⁷	5,2 x 10 ¹⁶	E(205a), V ₄ (2-/-) [12]
TA6	420	4,4 x 10 ⁶	4,0 x 10 ¹⁶	Luki podwójne V ₂ (-/0) [10, 12]
TA8	493	4,0 x 10 ⁷	2,4 x 10 ¹⁶	V ₂ O(-/0) [10]

Tab. 2. Parametry centrów defektowych przyjętych do symulacji relaksacyjnych przebiegów fotoprądu. **Tab. 2.** Parameters of the defect centers used to simulate photocurrent relaxation.



Rys. 10. Obraz korelacyjnego prążka widmowego (a) oraz obraz prążków widmowych Laplace'a (b) otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu złożonych z przebiegów wykładniczych wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 o założonych właściwościach podanych w Tab. 2. Obliczenia przeprowadzono dla wartości parametrów programu CONTIN przedstawionych na Rys. 2.

Fig. 10. Image of the correlation spectral fringe (a) and the Laplace spectral fringes (b) obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms composed of the exponential waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers with the properties given in Tab. 2. The calculations were made for the CONTIN program parameters shown in Fig. 2.

Jak wskazują dane z Rys. 8 - 9 zmiana parametru IQU-AD pozwala na otrzymywanie wykresów Arrheniusa, nie daje natomiast zależności amplitudy w funkcji szybkości emisji zgodnej z modelem. Tak więc, do obliczeń powinna być stosowana wartość parametru IQUAD równa 1.

Wpływ parametrów sterujących programem CONTIN na wyniki obliczeń funkcji widmowej dla przebiegów relaksacyjnych złożonych z kilku składowych wykładniczych badano dla przebiegów symulowanych przy założeniu występowania w materiale pięciu rodzajów radiacyjnych centrów defektowych charakterystycznych dla krzemu napromieniowanego hadronami o wysokiej energii [10 - 12]. W Tab. 2 zestawiono wartości energii aktywacji E_a , współczynnika A i koncentracji N_T radiacyjnych centrów defektowych w krzemie przyjęte do symulacji relaksacyjnych przebiegów fotoprądu.

Na Rys. 10a pokazano obraz korelacyjnego prążka widmowego otrzymany w wyniku zastosowania procedury korelacyjnej do analizy symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, zaś Rys. 10b ilustruje obraz prążków widmowych Laplace'a (obliczenia przeprowadzono dla wartości parametrów programu CONTIN przedstawionych na Rys. 2). Linie ciągłe ilustrują temperaturowe zależności szybkości emisji dla centrów defektowych, których parametry przyjęto do symulacji (Tab.2).

Obraz pokazany na Rys. 10a wskazuje, że w wyniku zastosowania procedury korelacyjnej do symulowanych przebiegów fotoprądu otrzymujemy szeroki prążek korelacyjny, który nie pozwala na wyróżnienie termicznej szybkości emisji nośników ładunków z centrów defektowych, których parametry przyjęto do symulacji relaksacyjnych przebiegów fotopradu. Natomiast na Rys. 10b w widmie otrzymanym na podstawie analizy symulowanych przebiegów fotoprądu metodą Laplace'a z wykorzystaniem procedury CONTIN widać wyraźne prążki, których linie grzbietowe pokrywają się z liniami ciągłymi ilustrującymi temperaturowe zależności szybkości emisji dla centrów defektowych, których parametry przyjęto do symulacji (Tab. 2). Na Rys. 11 pokazano obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu związanych z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych



Rys. 11. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 po zmianie parametru ALPST z 1E-6 na 1E-5. Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2.

Fig. 11. Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers. The parameter ALPST was changed from 1E-6 to 1E-5. The values of the remaining parameters are as in Fig. 2.



Rys. 12. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8. NG = 100, wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2. **Fig. 12.** Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers. NG = 100, the values of the remaining parameters are as in Fig. 2.

T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 po zmianie parametru ALPST z 1E-6 na 1E-5. Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2.

Jak wskazują dane z Rys. 11 zmiana parametru ALPST z 1E-6 na 1E-5 nie ma wpływu na przebieg linii grzbie-



Rys. 13. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8. IQUAD = 2, wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2.

Fig. 13. Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers. IQUAD = 2, the values of the remaining parameters are as in Fig. 2.



Rys. 14. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 z dodaną składową szumową.

Fig. 14. Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers with an added noise component.

towych prążków w widmie Laplace'a. Rys. 12 ilustruje obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu związanych z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8



Rys. 15. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 z dodaną składową szumową. IWT = 2 (a) i IWT = 3 (b) oraz GMNMX2 = 1.E+3 (a, b), wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2. **Fig. 15.** Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers with an added noise component. IWT = 2 (a) and IWT = 3 (b) and GMNMX = 1.E+3 (a, b), the values of the remaining parameters are as in Fig. 2.



Rys. 16. Obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu wywołanych termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 z dodaną składową szumową. IQUAD = 2 i IWT = 3, wartości pozostałych parametrów programu CONTIN takie jak na Rys. 2.

Fig. 16. Image of the Laplace spectral fringes obtained from the simulated photocurrent relaxation waveforms related to the thermal emission of the charge carriers from the T10, TA5, TS6, TA6 and TA8 defect centers with an added noise component. IQUAD = 2 and IWT =3, the values of the remaining parameters are as in Fig. 2.

po zmianie parametru NG na 100. Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN sa takie jak na u Rys. 2.

Obraz prążków widmowych zilustrowanych na Rys. 12 pokazuje, że zmiana parametru NG na 100 nie wpływa na zmianę położenia linii grzbietowych prążków Laplace'a. Na Rys. 13 pokazano obraz prążków widmowych Laplace'a otrzymany na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu związanych z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych T10, TA5, TS6, TA6 i TA8 po zmianie parametru IQUAD na 2. Wartości pozostałych parametrów programu CONTIN są takie jak na rysunku Rys. 2.

Prążki widmowe Laplace'a pokazane na Rys. 13 są znacznie węższe w stosunku do prążków Laplace'a zilustrowanych na Rys. 10a oraz Rys. 11 - 12. W zakresie szybkości emisji od 30 do 3000 s⁻¹ linie grzbietowe tych prążków pokrywają się z liniami ciągłymi wyznaczonymi na podstawie parametrów centrów defektowych z Tab. 2. Na Rys. 14 - 16 pokazano prążki widmowe Laplace'a otrzymane na podstawie symulowanych relaksacyjnych przebiegów fotoprądu związanych z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych, których parametry zestawiono w Tab. 2, z dodaną losową składową szumową, której maksymalna amplituda wynosiła 5% amplitudy przebiegu relaksacyjnego.

Otrzymane wyniki wskazują, że określenie parametrów centrów defektowych na podstawie prążków widmowych Laplace'a, uzyskanych w wyniku analizy przebiegów relaksacyjnych fotopradu z dodaną składową szumową, jest trudniejsze dla standardowych ustawień parametrów programu CONTIN. Wynik można poprawić poprzez zmniejszenie górnego zakresu szybkości emisji, dla którego szukane są rozwiązania parametrem GMNMX2. Powoduje to pominięcie w obliczeniach części relaksacyjnego przebiegu fotoprądu, w którym składowa szumowa ma największe znaczenie. Najlepsze wyniki, pozwalające na dokładne wyznaczenie parametrów centrów defektowych, otrzymane zostały po zmianie parametrów IWT oraz IQUAD, co zilustrowano na Rys. 16. W tym przypadku jednak zależności amplitudy w funkcji szybkości emisji nie jest zgodna z modelem.

4. Podsumowanie

W artykule przedstawiono wpływ wartości parametrów sterujących procesem obliczeniowym w programie CONTIN na kształt i intensywność prażków Laplace'a wyznaczanych na podstawie relaksacyjnych przebiegów fotopradu związanych z termiczną emisją nośników ładunku z centrów defektowych w materiałach półizolujących. W tym celu wykorzystano zarówno symulowane jak i eksperymentalne relaksacyjne przebiegi fotopradu dla próbek krzemowych zawierających radiacyjne centra defektowe powstałe wskutek napromieniowania hadronami o wysokiej energii. Najlepszą rozdzielczość prążków Laplace'a dla radiacyjnych centrów defektowych wykrywanych metoda niestacjonarnej spektroskopii fotopradowej o wysokiej rozdzielczości (HRPITS) uzyskano dla następujących parametrów: NG = 151, ALPST = 1.E-6, IWT = 1, NERFIT = 2 i MPKMOM = 3. Ponadto zauważono, że zmiana parametru IQUAD na wartość inną niż 1 pozwala na otrzymywanie wykresów Arrheniusa z większą dokładnością, nie daje natomiast zależności amplitudy w funkcji szybkości emisji zgodnej z modelem. Tak więc, do obliczeń wykorzystywanych do obliczenia koncentracji centrów defektowych powinna być stosowana wartość parametru IQUAD równa 1, a inne wartości tego parametru mogą być stosowane jedynie do wyznaczania temperaturowej zależności szybkości emisji nośników ładunku. Parametry GMNMX1 i GMNMX2 określają odpowiednio dolny i górny zakres wartości szybkości emisji nośników ładunku dla których szukana jest funkcja widmowa. W przypadkach gdy dane pomiarowe zawierają składową szumową, uwidaczniającą się w górnym zakresie otrzymywanej funkcji widmowej, wskazane jest ograniczenie zakresu szukanych rozwiązań poprzez wartość parametru GMNMX2 równa 1.E+3.

Wyniki badań przedstawione zostały w ramach realizacji projektu statutowego ITME kierowanego przez mgr inż. Jarosława Żelazko w 2015 roku. Prezentowane wyniki zostaną wykorzystane w rozprawie doktorskiej kierownika tego projektu.

Literatura

- [1] Provencher S. W.: CONTIN: A general purpose program for inverting noisy linear algebraic and integral equations, *Comp. Phys. Comm.*, 1982, 27, 229 – 242
- [2] Provencher S. W.: A constrained regularization method for inverting data represented by linear algebraic or integral equations, *Comp. Phys. Comm.*, 1982, 27, 213 – 227

- [3] Provencher S. W.: CONTIN Users Manual, EMBL Technical Report DA05, European Molecular Biology Laboratory, 1982
- [4] Pawłowski M., Kamiński P., Kozłowski R., Jankowski S., Wierzbowski M.: Intelligent measuring system for characterisation of defect centres in semi-insulating materials by photoinduced transient spectroscopy, *Metrology and Measurements Systems*, 2005, 12, 2, 207
- [5] Pawłowski M., Kamiński P., Kozłowski R., Kozubal M., Żelazko J.: Obrazowanie struktury defektowej kryształów półizolującego GaAs poprzez analizę relaksacyjnych przebiegów fotoprądu z zastosowaniem odwrotnego przekształcenia Laplace'a, *Materiały Elektroniczne*, 2006, 34, 1/2, 48 – 75
- [6] Pawłowski M.: Obrazowanie struktury defektowej materiałów pólizolujących z wykorzystaniem niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej, Wydawnictwo Wojskowej Akademii Technicznej, 2007
- [7] Żelazko J., Pawłowski M., Kamiński P., Kozłowski R., Miczuga M.: Zastosowanie graficznego środowiska programistycznego w niestacjonarnej spektroskopii fotoprądowej o dużej rozdzielczości, *Przegląd Elektrotechniczny*, 2008, 84, 5, 305 – 308
- [8] Kozłowski R., Kamiński P., Żelazko J.: Wyznaczanie koncentracji centrów defektowych w półprzewodnikach wysokorezystywnych na podstawie prążków widmowych otrzymywanych w wyniku relaksacyjnych przebiegów fotoprądu, *Materiały Elektroniczne*, 2012, 40, 1, 19 – 33
- [9] Kamiński P., Kozłowski R., Krupka J., Kozubal M., Wodzyński M., Żelazko J.: Głębokie centra defektowe o bardzo wysokiej rezystywności, *Materiały Elektroniczne*, 2014, 42, 4, 16 – 24
- [10] Kamiński P., Kozłowski R., Żelazko J.: Chacterization of radiation defect centers in neutron irradiated Si using inverse Laplace transformation to analysis of photocurrent relaxation waveforms, *Acta Physica Polonica A*, 2014, 125, 976 – 981
- [11] Markevich V. P., Peaker A. R., Lastovskii S. B., Murin L. I., Coutinho J., Torres V. J. B., Briddon P. R., Dobaczewski L., Monakhov E. V., Svensson B. G.: Trivacancy and trivacancy-oxygen complexes in silicon: Experiments and ab initio modeling, *Phys. Rev. B*, 2009, 80, 235207
- [12] Krupka J., Karcz W., Avdeyev S. P., Kamiński P., Kozłowski R.: Electrical properties of deuteron irradiated high resistivity silicon, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, 2014, 325, 107 – 117