

Laplace 缺陷谱方法研究*

詹华瀚 康俊勇 黄启圣

(厦门大学物理系 厦门 361005)

摘要 本文讨论了研究半导体缺陷深能级瞬态谱中遇到的多指数分解问题,并使用共轭梯度计算法对瞬态谱进行数值 Laplace 逆变换处理来实现多指数瞬态的分解.结果表明,此方法具有较高的分辨率,而且存储和计算量较小,适用于进行常规的深能级瞬态精细结构测量.

PACC: 7155, 0270

1 引言

半导体工业的发展,很大程度上取决于材料及其器件中杂质和缺陷的有效控制.然而,目前由于人们对半导体晶体中缺陷行为了解不够,所能控制的缺陷种类仍然较少.因此,对半导体中缺陷行为的研究一直受到人们的高度重视.缺陷最重要的性质是它在半导体禁带中的能量位置,它可以通过测量缺陷能级上电子的发射过程来确定.单一能级上电子的发射是一个随时间单指数变化的过程.由于半导体中常常存在着多个缺陷能级,能够测量得到的电子发射过程就表现为随时间变化的多个指数之和.对多指数电子发射谱的分解是最古老,并且至今仍未完全解决的函数分析问题之一^[1].1974年 D. V. Lang 提出一种对发射谱进行简单信号处理的方法,使材料禁带中多个深能级上的电子发射过程能以温度扫描为横轴的深能级瞬态谱(DLTS)的形式呈现出来^[2].尽管 DLTS 谱对深能级上的电子发射过程的信号很灵敏,但是由于它对单指数的电子发射过程所呈现的谱峰具有较大的宽度,因此,对多指数电子发射的分辨还比较低.特别是对于半导体混晶,由于混晶无序效应将引起局域组分涨落,同一缺陷在不同局域组分下将具有不同的能级位置,这些能级的差别较小,用传统的 DLTS 方法很难进行分辨.有些人根据基本的统计规律,假设局域组分及其深能级分布呈 Gauss 型,于是能级上电子的发射过程为以 Gauss 分布为分布函数的各个单指数瞬态之和^[3]

$$f(t) = \int_0^{\infty} F(e) \exp(-et) de \quad (1)$$

式中 e 为深能级上的电子热发射率; $F(e)$ 为分布函数.虽然此式与一些测量结果能够符合,但是模型中所假设的分布函数并不总能代表发射率的真实分布.因此,多年来人们一直在探讨各种方法,试图了解一些重要缺陷深能级的真实分布和精细结构.

* 国家及福建省自然科学基金资助项目

詹华瀚 男,1969年生,博士生,从事半导体物理学研究. Email: huahan@xmu.edu.cn

1996年6月5日收到初稿,1996年9月23日收到修改稿

实际上,式(1)中的 $f(t)$ 可以看作是真实的分布函数 $F(e)$ 的 Laplace 变换,因此,通过对 $f(t)$ 进行 Laplace 逆变换应可以得到真实的分布函数,即

$$F(e) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} f(t)\exp(et)dt \quad (2)$$

对多个单指数瞬态变换的结果将是一些近似 δ 函数的和的谱线. 由于方程(2)需要对复平面求积,必须预先确定复数变量 t 的 $f(t)$ 的形式,而实验得到的是 $f(t)$ 的实数值,要直接求解方程(2)是不可能的. 许多人因此采用近似计算的方法求得分布函数 $F(e)$ ^[1,4,5]. 然而,瞬态信号 $f(t)$ 是实验测得的数据,其中不可避免地包含有噪声,于是方程(2)将不会有唯一解^[6]. 因此,必须用求解病态代数方程组的方法才能得到最真实的分布函数 $F(e)$.

求解病态线性代数方程组的方法多种多样. 最近, L. Dobaczewski 等人采用了用约束正则法编程的 CONTIN 程序包^[7],对半导体中一些深能级的电子发射瞬态进行数值 Laplace 逆变换,其分辨率比传统的 DLTS 有显著的改进,他们称此方法为 Laplace DLTS^[8]. 然而,CONTIN 通常只能在大中型计算机上运行,目前许多实验室不具备这条件,而且也将不利于对深能级瞬态谱进行实时分解. 为此我们采用共轭梯度(Conjugate Gradient)法求解病态代数方程组,并在微机上实现了对多指数深能级瞬态谱的真实分布函数的求解.

本文将介绍采用共轭梯度法求解深能级瞬态的电子发射率真实分布的方法,简称 CG Laplace 缺陷谱法,并从多个深能级上电子的发射率和分布等方面来检验此方法的分辨率及可靠性,最后与实验结果及其它计算结果进行比较.

2 原理与方法

在用计算机进行数据处理时,方程(1)的积分可以近似由求和表示为

$$f(t) \approx \sum_{j=1}^N F(e_j)\exp(-e_j t)\Delta e_j = \sum_{j=1}^N A(e_j)\exp(-e_j t) \quad (3)$$

$$A(e_j) = F(e_j)\Delta e_j$$

其中假设 $F(e_j)$ 在 $e_j \sim e_j + \Delta e_j$ 范围内为常数. 当 e_j 在某一由实验确定的区间 $e_{\min} \sim e_{\max}$ 取值足够密集时,该假设是合理的. 于是实验过程 M 个不同时刻 t_i 所采集的信号 $f(t_i)$ 可表示为

$$\begin{pmatrix} f(t_1) \\ f(t_2) \\ \vdots \\ f(t_i) \\ \vdots \\ f(t_M) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-e_1 t_1} & e^{-e_2 t_1} & \cdots & e^{-e_j t_1} & \cdots & e^{-e_N t_1} \\ e^{-e_1 t_2} & e^{-e_2 t_2} & \cdots & e^{-e_j t_2} & \cdots & e^{-e_N t_2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ e^{-e_1 t_i} & e^{-e_2 t_i} & \cdots & e^{-e_j t_i} & \cdots & e^{-e_N t_i} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ e^{-e_1 t_M} & e^{-e_2 t_M} & \cdots & e^{-e_j t_M} & \cdots & e^{-e_N t_M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(e_1) \\ A(e_2) \\ \cdots \\ A(e_j) \\ \cdots \\ A(e_N) \end{pmatrix} \quad (4)$$

为了方便,简单将此方程记为 $\mathbf{f} = \mathbf{E}\mathbf{A}$, 其法方程的形式为

$$\mathbf{E}^T \mathbf{E} \mathbf{A} = \mathbf{E}^T \mathbf{f} \quad (5)$$

式中 \mathbf{E}^T 为矩阵 \mathbf{E} 的转置矩阵; $\mathbf{E}^T \mathbf{E}$ 为正定对称的. 由此可见, Laplace 逆变换(2)所要求解的真实深能级分布函数,关键在于求解矩阵 \mathbf{E} 的广义逆 \mathbf{E}^{-1} .

由方程(4)中可见, \mathbf{E} 矩阵元随着深能级上电子热发射率和发射时间的增大而指数减

小,于是越靠右下边的矩阵元越小,并且有许多近似为零.对于这种高阶稀疏矩阵,用共轭梯度法进行处理较节省存储量和运算量,特别适用微机来运行.同时,计算过程中总与原始矩阵 E 发生联系,有利于数据的稳定.只要法方程组不是十分病态,采用共轭梯度法一般可求得满意结果^[9].

根据共轭梯度法的原理,我们用 Fortran 语言编程,使用 NDP-Fortran 2.1 编译系统,在 486-DX/33 微机用双精度进行计算,并按等比方式分别取 N 个 e_j 和 M 个 t_i 点,其中 $M > N$, N 越大,结果所能达到的精度越高.

3 结果

为了检验结果的正确性,我们首先用上述程序求解了数个已知精确解的简单方程组.在计算机最高数值精度范围内,计算得到的方程解与精确解完全一致.同时,我们对已知多指数瞬态 $f(t) = \sum_k A_k e^{-\epsilon_k t}$ 的分布函数进行计算,以对程序进行检测.从计算的结果可以看到,由于数值计算采用简化近似,每一个指数分量对应的分布函数不可能是 δ 函数,而是具有一定宽度的尖锐的谱峰.当不同指数上发射率间距足够大时,在 $e-A$ 坐标图上的 e_k 处分别出现尖锐的谱峰;谱峰的面积基本上分别正比于 A_k .这些特性都与用 CONTIN 计算的一致.因此,可以认为我们所用方法和程序是正确和可行的.

由于 Laplace 缺陷谱最具魅力之处是谱线分辨率高,为此,我们进一步检测所用方法和程序的各种分辨率.

3.1 发射率的分辨率

对发射率的分辨率检测,我们采用等幅三指数分量的函数 $f(t) = e^{-\epsilon_1 t} + e^{-\epsilon_2 t} + e^{-\epsilon_3 t}$ 作为已知瞬态,取 $N=200$ 、 $M>200$ 进行计算.由于谱峰具有一定的宽度,随着发射率比率 $e_3/e_2 = e_2/e_1 = k$ 的减小,三个谱峰不断靠近,最后相互重叠.然而,即使发射率比率小到 $k=1.5$,

三个谱峰仍清晰可辨,如图 1 所示.图中(a)瞬态表达式为 $f(t) = e^{-0.5t} + e^{-t} + e^{-2.0t}$; (b)瞬态表达式为 $f(t) = e^{-0.67t} + e^{-t} + e^{-1.5t}$.

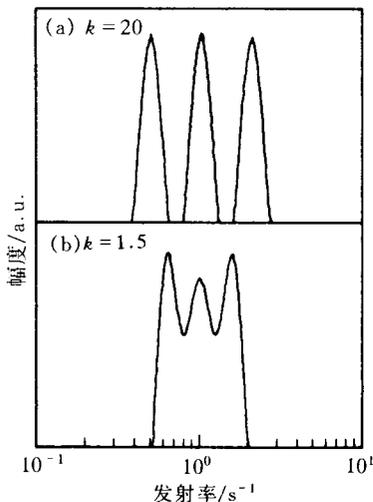


图 1 不同发射率比的三指数分量瞬态的 CG Laplace 缺陷谱

3.2 幅度的分辨率

对幅度的分辨率检测,我们采用二指数分量的函数 $f(t) = A_1 e^{-\epsilon_1 t} + A_2 e^{-\epsilon_2 t}$ 作为已知瞬态进行计算.由于数值计算的近似性,不可避免会给谱线带来一定的噪声.随着二指数分量幅度比的增大,低幅度的谱会逐渐接近噪声的幅度,并且最后被噪声所淹没.图 2 为幅度比 $A_1/A_2 = r$ 分别为 0.1、0.01 的计算谱线.图中(a)瞬态表达式为 $f(t) = e^{-t} + 10e^{-2.5t}$; (b)瞬态表达式为 $f(t) = e^{-t} + 100e^{-2.5t}$.由图可见,即使二指数分量的幅度相差 100 倍,弱的分量仍可分辨.对于 r 分别为 10、100 的情形,其结果也相似.这表明此方法可分解幅度相差二个数量级以上的指数分量.

3.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中的 DX 中心

由于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中 DX 中心的深能级瞬态谱结构复杂,近 20 年来一直是人们十分关注的研究课题. 其中研究最为透彻的是 Si 相关 DX 中心,它的常规 DLTS 呈图 3 中插图所示的多峰结构^[10]. 图中可以辨认的只能是两个谱峰,而且两谱峰重叠部分较多,不易对它们进行准确的测量. 使用 Laplace DLTS 进行实验研究时,首先须将样品置于温度恒定的低温样品室内,使用电容仪测量其电容瞬态,用计算机进行数据高速采集,调用 CONTIN 程序包进行数值 Laplace 逆变换,实现多指数瞬态的分解,其结果清楚地分辨出 Si 相关 DX 中心的三个谱峰,如图 3(a) 所示^[11]. 用我们的程序计算得到的 CG Laplace 缺陷谱,同样也能清楚地展现三个谱峰,如图 3(b) 所示,其分辨率与用 CONTIN 程序计算得到的相近. 然而,用我们的方法在普通微机上就能运行,而且运算时间短. 还可以进一步将此程序应用于深能级瞬态测量设备,以进行谱线的实时分析.

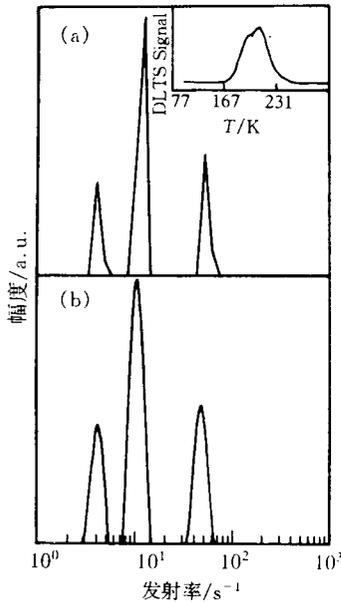


图 3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$ 中 DX 中心的不同谱图
插图为常规 DLTS 谱;
(a) Laplace-DLTS 谱;
(b) CG Laplace 谱.

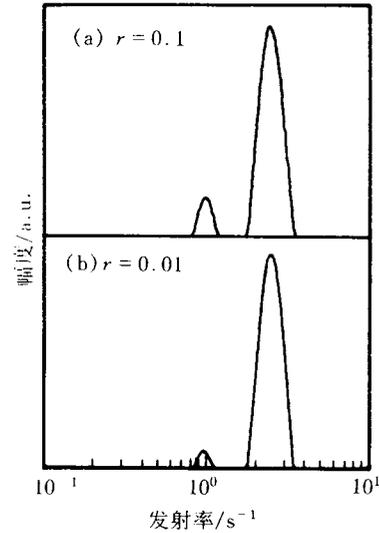


图 2 不同幅度比的两指数分量瞬态的 CG Laplace 缺陷谱

4 结论

本文介绍了研究半导体中缺陷深能级瞬态谱中遇到多指数分解问题,并用共轭梯度法对深能级瞬态进行 Laplace 逆变换处理. 结果表明,CG Laplace 缺陷谱方法不但保留 Laplace DLTS 谱分辨率高的特点,而且节省存储量和运算量,在普通微机上就能运行. 因此,用此方法可以简单地对缺陷深能级进行精细结构的分析. 进一步还可以将此程序应用于深能级瞬态测量设备进行谱线的实时分析,使深能级瞬态精细结构的测量成为一种常规方法.

致谢 工作中得到成都理工大学何昌礼教授及本校其他老师的热忱帮助,特此感谢.

参 考 文 献

- [1] D. D. Nolte and E. E. Haller, J. Appl. Phys. , 1987, **62**: 900.
- [2] D. V. Lang, J. Appl. Phys. , 1974, **45**: 3023.
- [3] 康俊勇,黄启圣,J. Luminescence 1988, **40&41**: 365 .
- [4] H. J. Stockmann, Nuclear Instrument and Methods 1978, **150**: 278 .
- [5] K. Ikossi-Anastasiou and K. P. Roenker, J. Appl. Phys. , 1987, **61**: 182.
- [6] G. A. Korn and T. M. Korn, in Mathematical Handbook , McGraw-Hill, New York, 1968.
- [7] S. W. Provencher, Comput. Phys. Commun. , 1982, **27**: 213.
- [8] L. Dobaczewski, P. Kaczor, I. D. Hawkins and A. R. Peaker, J. Appl. Phys. , 1994, **76**: 194.
- [9] 冯康,数值计算方法,北京: 国防工业出版社,1978. 303.
- [10] P. Mooney, J. Appl. Phys. , 1990, **67**(3): R1~R26.
- [11] L. Dobaczewski et al. , Mater. Sci. Forum. , 1992, **83~87**: 769.

Investigation of Laplace Defect Spectroscopy Method

Zhan Huahan, Kang Junyong and Huang Qisheng

(*Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005*)

Received 5 June 1996, revised manuscript received 23 September 1996

Abstract The problem of decomposing a multiple exponential transient into its constituent parts in study of deep energy levels in semiconductors is discussed. To deconvolute a multiple exponential transient, conjugate gradient method is used to perform numerical inverse Laplace transform by a personal computer. The results show that this method is not only of high resolution, but also requires less memory and calculation, which is suitable for study of fine structure of deep level transient.

PACC: 7155, 0270