

第一章、緒論

深能阱暫態能譜(deep level transient spectroscopy, DLTS)於1974年被 D. V. Lang [1] 發明後，就被廣泛的用來量測半導體材料或元件中各種可能的缺陷能階與其物理參數。在 DLTS 量測中，如果缺陷能階是由多個 defect level 所簡併而成時，在使用傳統 DLTS 量測此 defect level，DLTS 訊號中的 peak 將會很寬，造成我們選取 $T(\max)$ 會有誤差，進而獲得不正確的活化能與捕獲截面積等等物理量。

然而其他類似的電性缺陷量測方法如 Fourier transform DLTS (FTDLTS) [2, 3]、optical DLTS (ODLTS)、導納頻譜 (admittance spectroscopy) [4]、似乎都沒有有效的解決上述問題。因此1994年 L. Dobaczewski 提出 Laplace Deep level transient spectroscopy (Laplace DLTS) [5]，可以有效的提高 Boxcar DLTS 的解析度，並且被廣泛的應用在量測 Silicon[6, 7, 8, 9]、量子井結構 (Quantum wells) [10]、三五族化合物 (表一)、二六族化合物中 [11, 12]。

所以 Laplace DLTS，就是要加強原本 DLTS 量測解析度所產生的。簡單的來說，傳統的 DLTS 是選定速率視窗(emission rate)，觀察電容與溫度的關係。而 Laplace DLTS 是由定溫的 capacity transient 曲線中，利用 Tikhonov method 來 fitting 出所對應的 emission rate [5]。找出每個 deep level 分別所對應的 emission rate 後，再由 Arrhenius plot 求得代表缺陷能階之物理量。如此一來，利用 Laplace DLTS，可以有效的解決當 defect level 簡併時，無法由 DLTS 電性量測中，精確的分析出來每個缺陷能階的問題。

在文獻中 fitting capacitance transient 方法不止一種，除了使用 Tikhonov regularization method 的 CONTIN “Fortran 程式外，在 [13] 中 L. Dobaczewski 也使用 constrained regularization method，在 [14] 中 Junyong Kang 為了簡化模擬過程，改用 conjugate gradient method 也都有相似的結果。我們將會在後面章節中比較 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 的優劣。

最後我們固定 Laplace DLTS 的模擬模式為先使用 Tikhonov regularization method，來決定電容暫態曲線的方程形式，再把此解當成 Conjugate gradient method 迭代法的初始值，進行迭代希望會收斂到一個最佳解。

接下來的討論將會使用 Laplace DLTS 量測使用 MOCVD 成長之 GaAs、AlGaAs 塊材 (bulk)，並且與其他以電容為主的電性量測如導納頻譜 (admittance spectroscopy)、Boxcar DLTS，比較此方法的正確性與解析度。

作者	期刊	年份	量測塊材
L.Dobaczewski	Material Science Technology V.83 P.769	1992	AlGaAs , GaSb
L.Dobaczewski	Physical Review Letter V68. P2508	1992	AlGaAs
L.Dobaczewski	APL V.76 P.194	1994	Si , GaAs
L.Dobaczewski	Material Science Technology V.143 1001	1994	GaAs
L.Dobaczewski	Material Science Technology V.11 P.1071	1995	Si , GaAs , AlGaAs
L.Dobaczewski	JAP V.78 P.2468	1995	AlGaAs , GaAsP
C. K. Chung	Applied Surface Science V.115 P.174	1997	AlGaAs
H. H. Zhan	JAP V.84 P.2497	1998	AlGaAs
Junyong Kang	Journal of crystal growth V.210 P.247	2000	AlGaAs , GaAsP
P. Muret	Material Science and Engineering V.B82 91	2001	GaN

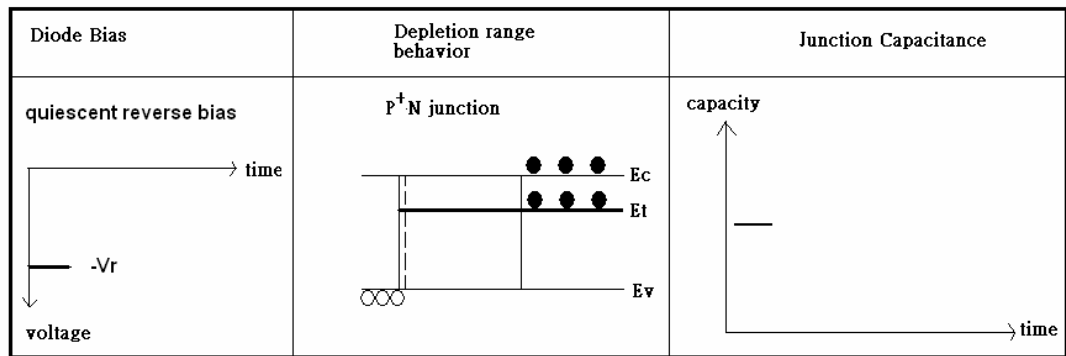
使用 Laplace DLTS 量測三五族半導體的的相關文獻。

表 (1.1)

第二章、電容暫態頻譜響應

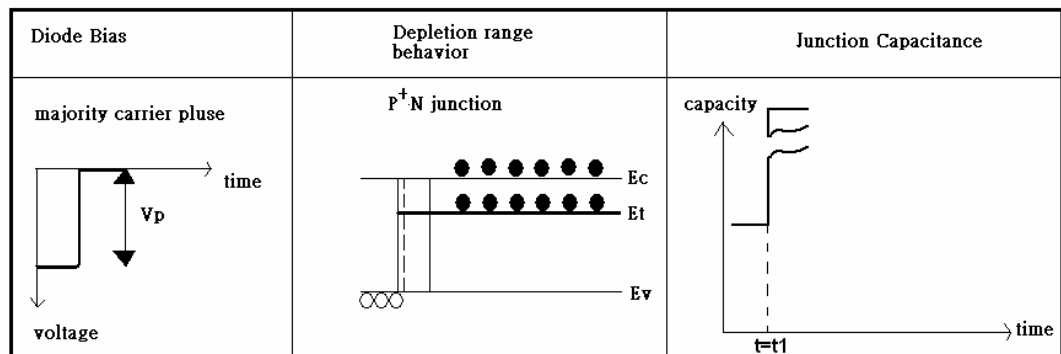
2.1 電容暫態產生之物理原因

我們利用週期性的偏壓施加在樣本上，藉此改變樣本中空乏區的大小，由電容值大小的改變，進而獲得深層能階的相關資訊。以 p^+n 二極體為例，由於 P 型半導體中的濃度較 n 型半導體為高，空乏區我們可以視為僅存於 n 型半導體中，如圖 (2-1) 中一逆向偏壓 ($-V_r$) 施加於 p 型半導體上時，電子發射速率遠大於電子捕獲速率而建立一空乏區，並且此段空乏區為電中性。如圖 (2-2) 此時 ($t = t_1$) 由於一個電壓脈衝 (V_p) 輸入，造成電子 (多數載子) 大量注入 trap center，並且此時空乏區縮小，造成接面電容值上升。



一逆向偏壓 ($-V_r$) 施加於 p^+n 二極體上

圖 (2-1)

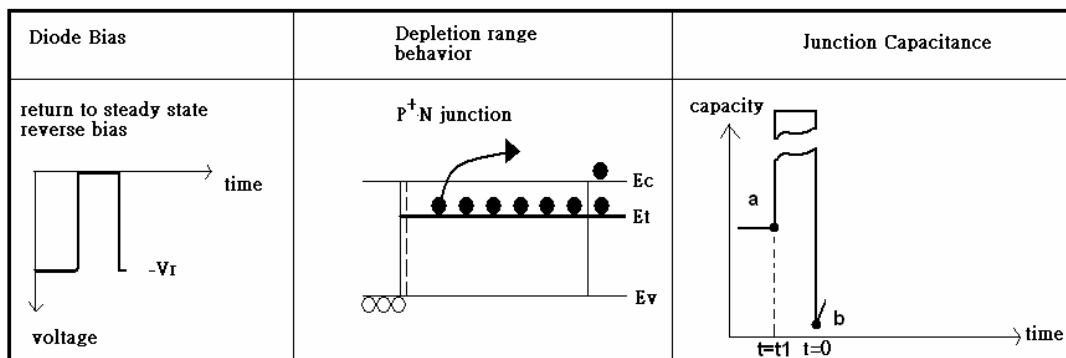


一個電壓脈衝 (V_p) 輸入，造成電子 (多數載子) 大量注入 trap center

圖 (2-2)

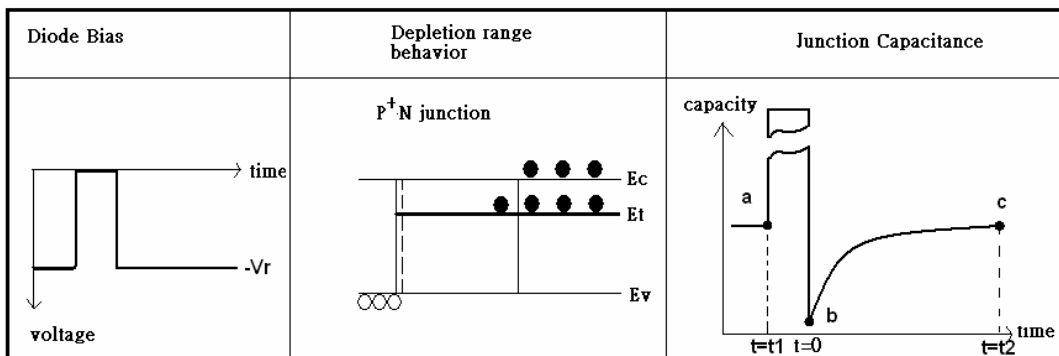
如圖(2-3)中當脈衝時間足夠長，則缺陷將會被電子完全填滿。隨著電壓脈衝(V_p)過去後， p^+n 二極體又回到原先逆偏狀態($-V_r$)。由於脈衝時電子(多數載子)被原本處於空乏區的缺陷(trap center)捕獲，使得空乏區必須進一步擴大以維持 p^+n 二極體的電場平衡。所以圖(2-3)電容對時間的曲線中， a ($t = t_1$)點電容值會小於 b ($t = 0$)點電容值。

如圖(2-4)中缺陷因脈衝電壓捕獲的電子，會因熱激發而慢慢釋放出來，空乏區寬度，也會逐漸恢復成圖(2-1)的空乏區寬度，電容值也會隨之上升。因此我們得知 b ($t = 0$)、 c ($t = t_2$)的電容曲線與溫度有關，當溫度越高時，曲線就會爬升越快。



隨著電壓脈衝(V_p)過去後， p^+n 二極體又回到原先逆偏狀態($-V_r$)

圖(2-3)



缺陷因脈衝電壓捕獲的電子，會因熱激發而慢慢釋放出來

圖(2-4)

2.2 電容暫態之數學表示式

p⁺n 接面二極體的電容值，依據二極體空乏區寬度公式可以表示如下[16]：

$$C = A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_{scr}}{2(V_{bi} - V)}} \dots\dots\dots(2.1)$$

A : 二極體面積

q : 單位電荷量

V_{bi} : building voltage

V : 外加電場

ε_s : 材料之介電常數

N_{scr}: 空乏區內解離雜質濃度

N_{scr} 依據受不同雜質原子影響，而有不同的型態。大致分成兩種：

- (1) 施體型態的深層能階：電子佔據時成電中性，失去電子或是獲得電洞成帶正電，N_{scr} 變化如下：

$$N_{scr} = N_D^+ + p_T^+ = N_D^+ + (N_T - n_T^-)$$

其中N_D 為dopant濃度

n_T : G-R 中心被電子佔據的濃度

p_T : G-R 中心被電洞佔據的濃度

- (2) 受體型態的深層能階：電洞佔據時成電中性，失去電洞或是捕獲電子帶負電，N_{scr} 變化如下：

$$N_{scr} = N_D^+ - n_T^- \dots\dots\dots(2.2)$$

由上述式子可以發現，不論何種型態的缺陷，n_T 越大則 N_{scr} 越小，反之亦然。

由 Schockley-Read-Hall 復合理論，假設 n >> p, C_n >> C_p, n_r(t) 可表示如下：

$$n_T(t) = N_T e^{-t/\tau_n} \dots\dots\dots(2.3)$$

N_T : 全部缺陷濃度 (n_T + p_T)

(2.3) 式推導見 2.3 節

又假設存在於材料的缺陷為受體型態，則其電容值由 (2.1), (2.2), (2.3) 可以整理成：

$$C = A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_D}{2(V_{bi} - V)}} \sqrt{1 - \frac{N_T}{N_D} e^{-\frac{t}{\tau}}}$$

$$\text{令 } C_0 = A \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_D}{2(V_{bi} - V)}}$$

並且假設 $N_D \gg N_T$, C 可重新整理成下式：

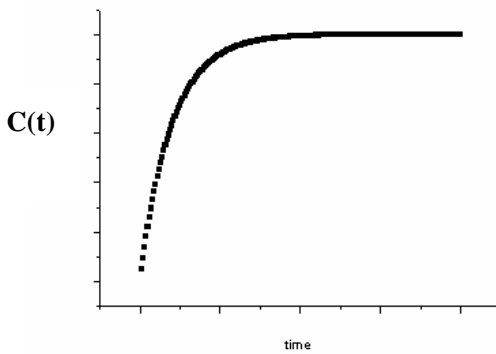
$$C = C_0 \sqrt{1 - \frac{N_T}{N_D} e^{-st}} = C_0 \left(1 + \frac{N_T}{2N_D} e^{-st}\right)$$

$$\text{故 } C(t) = C_0 + \sum_{s_i=1}^{s_n} \frac{N_T(s_i)}{2N_D} e^{-s_i t} \dots\dots(2.4)$$

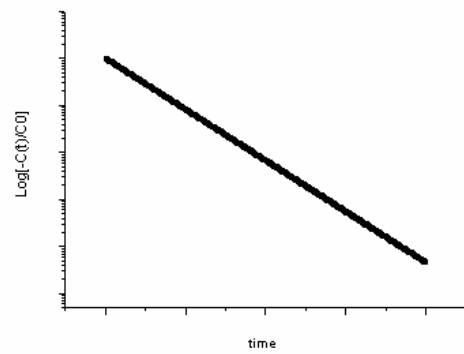
最後 The function of capacity transient :

$$\Rightarrow \frac{C(t)}{C_0} - 1 = - \int_0^\infty \frac{N_T(s_i)}{2N_D} e^{-s_i t} d(s) \dots\dots(2.5)$$

當我們給予一個週期性的逆向偏壓如圖 (2-4)，並且擷取電容值由 b (t = 0) 點到 c (t = t2) 點，我們便可以得到隨著時間改變的電容暫態值 C(t)，根據(2.4)式並且假設 C(t) 值由單一缺陷 (electron trap) 所提供，此 C(t)/C₀ 值就會如圖 (2-5) 一般，成單一指數數曲線分佈。此時我們把 Y-座標取對數尺寸 (Log - scale)，如圖 (2-6) 所示，Log[-C(t)/C₀] 值將會改為一斜直線。

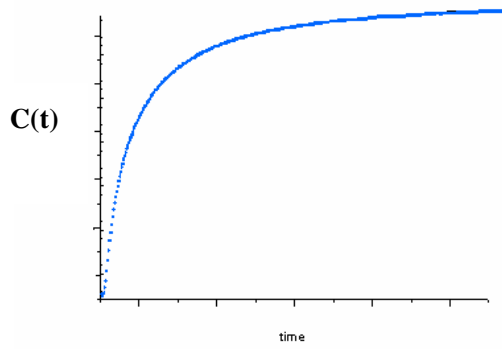


C(t) 值由單一缺陷所提供
圖 (2-5)

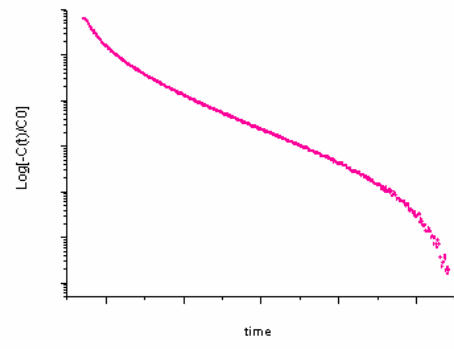


Y 軸取對數尺寸
圖 (2-6)

假設 C(t) 值由多個缺陷 (electron trap) 所提供，此 C(t)/C₀ 值就會如圖 (2-7) 一般，為多個指數數合成之曲線分佈。此時我們把 Y-座標取對數尺寸 (Log - scale)，如圖 (2-8) 所示，Log[-C(t)/C₀] 值將不再是一條斜直線。所以我們可以式(2.4)做圖，就可以簡單的來判斷此電容暫態 (capacity transient) 是由單一缺陷或者是多個缺陷所提供。



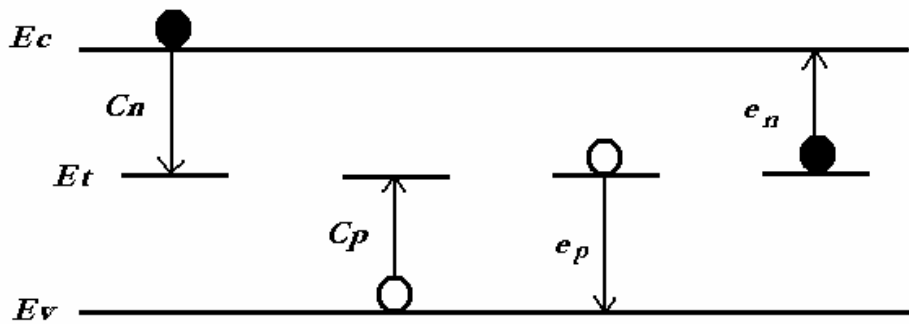
C(t)值由多個缺陷提供
圖 (2-7)



Y 軸取對數尺寸
圖 (2-8)

2.3 Shockley - Read - Hall theory

當一缺陷能階位於半導體材料的能隙中，會使得載子能經由這缺陷捕捉而產生遷移，而 Shockley-Read-Hall 復合理論及說明此缺陷有四種不同的復合過程。如下圖所示，即所謂的電子捕獲 (C_n)、電洞捕獲 (C_p)、電洞發射 (e_p)、電子發射 (e_n)。



缺陷有四種不同的復合過程
圖 (2-9)

對 G-R 中心而言，假設缺陷被電子佔據的濃度為 n_T ，被電洞佔據的濃度為 p_T ，而全部的缺陷濃度為 $N_T = n_T + p_T$

$$\frac{dn}{dt} = e_n n_T - c_n p_T \dots\dots(1)$$

$$\frac{dp}{dt} = e_p p_T - c_p n_T \dots\dots(2)$$

(1) - (2) 可得：

$$\frac{dn_T}{dt} = \frac{dp}{dt} - \frac{dn}{dt} = (c_n + e_p)(N_T - n_T) - (c_p + e_n)n_T$$

$$\Rightarrow n_T(t) = n_T(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{e_p + c_n}{e_n + c_n + e_p + c_p} N_T (1 - e^{-\frac{t}{\tau}})$$

對 n 型的 Schottky diode 而言， C_D 可以被忽略，故上式可改寫如下：

$$\Rightarrow n_T(t) = n_T(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{e_p + c_n}{e_n + c_n + e_p} N_T (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) \dots\dots(3)$$

又我們元件都處於逆偏狀態，導致 C_n 、 C_p 皆很小，所以與 e_p 、 e_n 比較起來是可以忽略的。另外假設 $n_T(0) \approx N_T$ ， $e_n \gg e_p$ ， c_n ，故方程式可以整理成：

$$n_T(t) = N_T e^{-te_n} \dots\dots(2.3)$$



第三章 深層能階暫態頻譜系統理論與導納頻譜

簡介

(Deep Level Transient Spectroscopy & Admittance spectroscopy)

3.1 DLTS 優勢

深層能階暫態頻譜(DLTS)的技術在 1978 年, 首先由 D. V. Lang 所提出[1], 由於能同時量測多數載子 (majority carrier) 與少數載子 (minority carrier), 量測系統的靈敏度可以到 10^{10}cm^{-3} 之濃度偵測範圍, 並且能提高信號對雜訊比 (S/N ratio) 與觀測到的缺陷能階較廣, 尤其是較深層的缺陷能階也能夠被精準的量測到。因此使得 DLTS 目前被廣泛的應用在研究半導體內深層能階缺陷問題的有效分析工具 [17, 18, 19, 20]。

3.2 DLTS 可獲得的參數與基本假設

3.2 (a) DLTS 主要可以獲得以下四個物理參數：

- (1) 缺陷的能階活化能 (trap ionization energy)。
- (2) 載子的捕獲截面積 (capture cross section)。
- (3) 缺陷的濃度 (trap concentration)。
- (4) 區分缺陷為多數載子陷阱還是少數載子的陷阱。

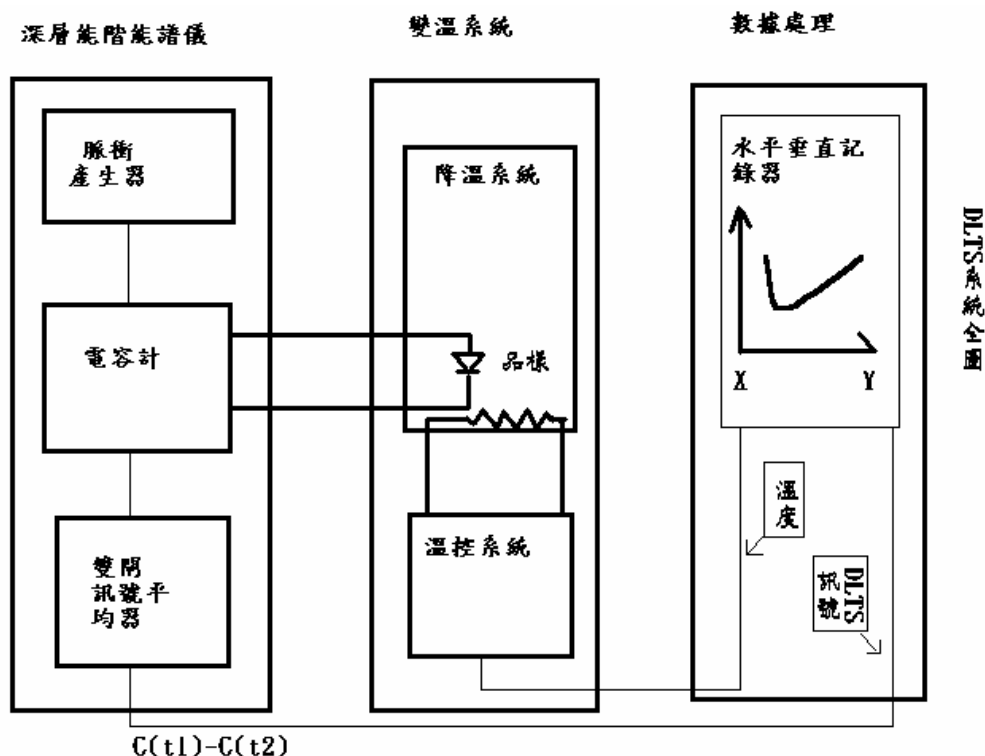
3.2 (b) DLTS 系統有兩個基本假設如下：

假設一：深層能階在電容暫態中，只由一種載子的激發速率所控制，則此時被缺陷捕捉的載子濃度成指數式衰減。例如電子控制激發速率時， $e_n \gg e_p$ ，則被深層能階捕捉的電子濃度可以表示為： $n_t = N_T e^{-e_n t}$

假設二：深層能階濃度必須要小於 Dopant 濃度， $N_T \ll N_D$ ，也就是隨著外加偏壓改變的電容暫態值 (ΔC_0) 必須遠小於穩態電容值 (C_0)。而這個基本假設我們是用於空乏區電容方程 $C = C_0 \sqrt{1 - \frac{N_T}{N_D} e^{-\frac{t}{\tau}}}$ 利用此假設可近似為：

$C = C_0 \left(1 + \frac{N_T}{2N_D} e^{-\frac{t}{\tau}}\right)$ 。我們就根據此假設而獲得電容暫態曲線方程。

3.3 DLTS 基本系統理論



DLTS 系統簡圖
圖 (3-1)

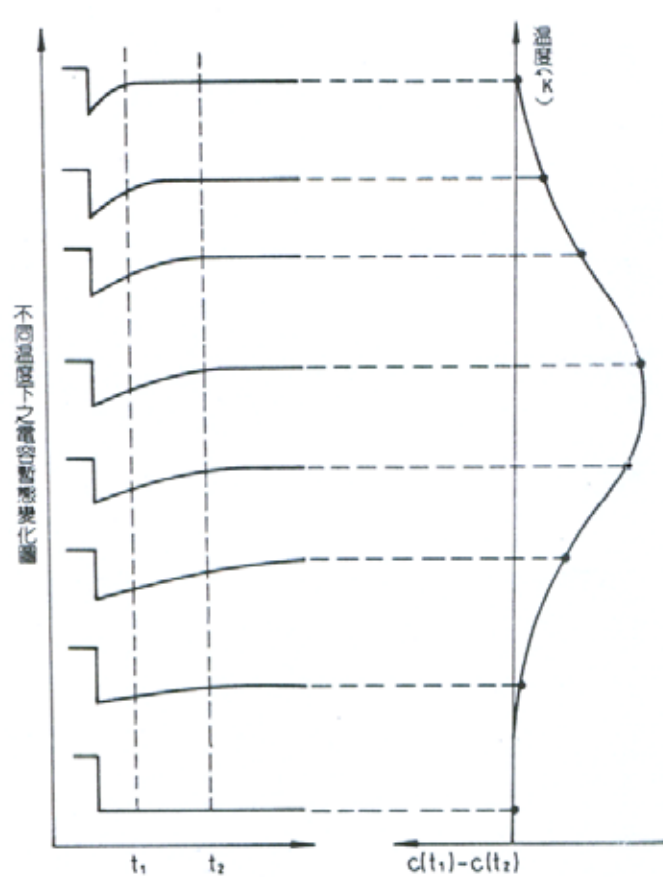
如圖 (3-1) DLTS 系統簡圖所示，由脈衝產生器 (Pulse Generator) 輸送一週期性逆向偏壓，此週期性偏壓範圍可先由 C-V 量測，來獲得想要的量測區域所對應的偏壓。接著此週期性偏壓先傳送到電容電壓量測儀後 (C-V meter)，再傳送到帶測樣品上，並且同時擷取樣品的暫態電容與時間變化的曲線。最後深層能階系統利用雙閘訊號平均器 (dual-gate signal average or double boxcar) 選定的速率視窗 (emission rate window)，因此雙閘訊號平均器輸出的即為電容暫態的差值

$C(t_1) - C(t_2)$ ，此即為一般而言的 DLTS 訊號。訊號方程如下：

$$S = C(t_2) - C(t_1) = C_0 \left(1 + \frac{N_T}{2N_D} e^{-e_n t_2} \right) - C_0 \left(1 + \frac{N_T}{2N_D} e^{-e_n t_1} \right)$$

$$= \frac{C_0 N_T}{2N_D} (e^{-e_n t_2} - e^{-e_n t_1}) \dots (3.1)$$

而方程式 (3.1) 中的 S，即為所謂的 DLTS 訊號。如圖 (3-2) 左半部為不同溫度下的電容暫態，當溫度很低 (高) 時，激發速率很慢 (快) 而使暫態變化很慢 (快)。若兩個選定的速率視窗 (t_1 、 t_2) 所對應的電容值幾乎沒有差別時，DLTS 訊號 S 為零，而到某些特定溫度範圍時，激發速率落在選定的速率視窗附近才會有訊號出現 (如圖 (3-2) 右半部所示)。



DLTS 訊號成因示意圖
圖 (3-2)

3.4 DLTS 缺陷參數決定

我們以多數載子的缺陷為例，缺陷藉由載子注入脈衝 (Saturating injection plus) 而被填滿，這些暫態的訊號被設有 t_1 及 t_2 雙閘訊號平均器所接收。故輸出的 boxcar 訊號則為 $C(t_2) - C(t_1)$ 。而如圖 (3-2) 所示 DLTS 訊號會出現一個最大值，我們對 DLTS 訊號方程 (方程式(3.1)) 取極值，即對 e_n 微分為零可得到 DLTS 訊號峰值的激發速率：

$$e_{n,\max} = \frac{\ln(t_2/t_1)}{t_2 - t_1} \dots\dots(3.2)$$

因為電子的激發速率可以表示為：

$$e_n = \sigma_n v_{th} N_c \exp[-(E_c - E_T)/kT]$$

$$\text{其中 } v_{th} = \sqrt{\frac{3kT}{m_n}}, \quad N_c = 2\left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

帶入上式可得激發速率與溫度關係表示式

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{e_n}{T^2} &= [2(3)^{1/2} (2\pi)^{3/2} \frac{k^2 m_n}{h^3}] \sigma_n \exp[-(E_c - E_T)/kT] \\ &= \gamma_n \sigma_n \exp[-(E_c - E_T)/kT] \dots\dots(3.3) \end{aligned}$$

$$\gamma_n = \frac{v_{th}}{T^{1/2}} \frac{N_c}{T^{3/2}} = 3.25 \times 10^{21} \left(\frac{m_n}{m_0} \right) \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-2}$$

m_0 : 電子靜止質量

m_n : 電子有效質量

k : 波茲曼常數

h : 普朗克常數

把方程式 (3) 兩邊取自然對數 (natural logarithm) 可得：

$$\ln\left(\frac{e_n}{T^2}\right) = \ln(\gamma_n \sigma_n) - \frac{(E_C - E_T)}{kT} \dots\dots(3.4)$$

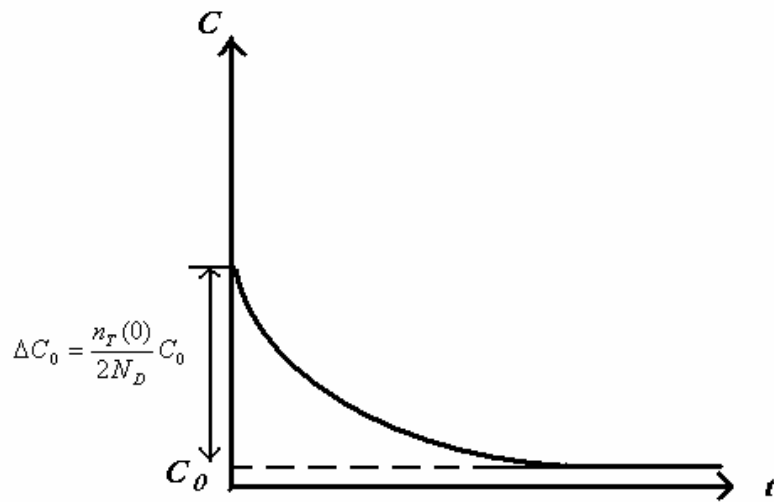
由方程式 (3.4) 可知 $\ln\left(\frac{e_n}{T^2}\right)$ 對 $(1/T)$ 的 Arrhenius plot 直線斜率可以求得缺陷的活化能，直線截距可以求得缺陷捕獲截面積。所以我們藉由設定的速率視窗 (t_1 、 t_2)，利用方程式 (3.2) 將可獲得 $e_{n,max}$ 與其在 DLTS 訊號圖中對應的 T_{max} 數據。把這兩變數帶入方程式 (3.4)，就能獲得 Arrhenius plot 的一組數據，再改變不同的速率視窗 (t_1 、 t_2)，將獲得更多組不同的 $e_{n,max}$ 與 T_{max} 數據點，因而畫出 Arrhenius plot 求得活化能 (斜率) 及捕獲截面積 (截距)。

至於 DLTS 訊號峰值大小可以方程式 (3.1) 看出與缺陷濃度 N_T 有關，帶入平衡狀態的逆向偏壓電容值 C_0 ，與 C-V 量測可知的 N_D 和設定的 t_1 、 t_2 。就可以由方程式 (3.1) 得到缺陷濃度 N_T 的大小。或者是由電容暫態曲線方程出發：

$$C(\infty) - C(0) \Rightarrow \Delta C_0 = \frac{n_T(0)}{2N_D} C_0$$

也可以獲得缺陷濃度 N_T 的值。

而我們是由電容暫態曲線 (capacitance transient) 的樣子來區分此缺陷是多數載子陷阱還是少數載子的陷阱。多數載子陷阱的電容暫態曲線我們在前一節已有詳述，而少數載子陷阱的電容暫態曲線如圖 (3-3) 所示，成因雷同多數載子陷阱。而在 DLTS 訊號圖中假設多數載子陷阱貢獻的是正值，而少數載子貢獻的就會是負值。



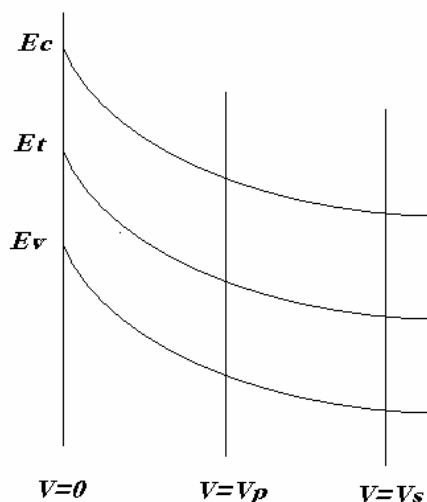
少數載子陷阱的電容暫態曲線
圖 (3-3)

缺陷捕捉電子截面積在三五族半導體中常常是與溫度有關的[21、22]，而與溫度有關的捕獲截面積方程為： $\sigma_n(T) = \sigma_\infty \exp\left(\frac{-E_\sigma}{kT}\right)$ ，其中 E_σ 為載子捕捉時所需克服的位能障 (barrier for carrier capture)，而 σ_∞ 可由實驗中 fitting 求出。而[23]中即利用此關係找出 InAs 量子點捕捉載子時所需克服的位能障。

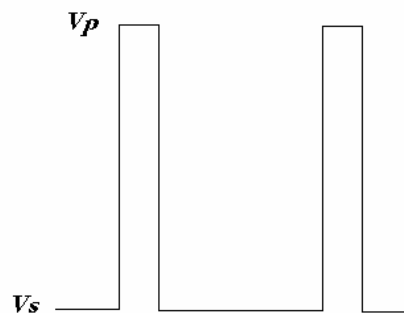
另外在量測 DLTS 前，我們先確認逆向 IV 特性曲線的漏電流會不會過大，因為樣品如果在逆偏時漏電流很大，易會造成量測誤差[24]。而也必須從順向 I-V 曲線中推算一下串聯電阻大小。如果串聯電阻很大時，在 DLTS 量測中，就要考慮選去適當的量測頻率，以避開串聯電阻的效應 (RC time constant)。如果不考慮的話，很有可能使多數載子的缺陷 (少數載子的缺陷) 表現出少數載子的缺陷 (多數載子) 訊號，造成量測的誤判。[25]

3.5 深層能階空間分佈

在 DLTS 量測中研究深層能階隨空間分佈，可以讓我知道 DLTS 量到的訊號是均勻分佈的塊材缺陷，還是隨著深度而有變化的局部能階。[19]



蕭特基二極體能帶圖
圖 (3-4)



週期性逆向脈衝電壓，
Vp 為脈衝電壓 Vs 為穩帶電壓
圖 (3-5)

圖(3-4)是 n 型蕭特基二極體能帶圖，我們給予此蕭特基二極體如圖(3-5)般週期性逆向脈衝電壓，Vp 為脈衝電壓、Vs 為穩帶電壓。當逆向偏壓為脈衝電壓 Vp 時，除了 0 至 Xp 之外的深層能階都填上電子，接著外加偏壓回到穩態偏壓 Vs 時，位於 Xp 與 Xs 之間的區域深層能階放出電子。故脈衝前後過程中的電容變化為：

$$\frac{\Delta C}{C_0} = \int_{x_p}^1 dx N_T(x) \frac{x}{N^+(x)} \dots (3.5)$$

其中 $N_T(x)$: 深層能階位於 x 的濃度

$N^+(x)$: 位於 x 的雜質濃度

$$\Delta C(x_p) = \frac{\delta Q}{\delta V_p} = \frac{qN^+(x_p)AW\delta x_p}{\delta V_p}$$

$$C(x_p) = \frac{\epsilon A}{x_p w}$$

$$\Rightarrow \delta x_p = \frac{\epsilon_s \delta V_p}{w^2 q N^+(x_p)^2} \text{ 帶入方程式(3.5)中得}$$

$$\Rightarrow \frac{\delta Q}{\delta V_p} = \frac{\epsilon_s N_T(x_p)}{q w^2 N^+(x_p)^2} \delta V_p \dots (3.6)$$

其中 w : 穩態時的空乏區寬度

$C(x_p)$: 當偏壓為 V_p 時的電容值

在固定穩態偏壓 V_s 下，改變脈衝偏壓 V_p ，我們就可以得到一連串的 $(\frac{\Delta C}{C_0})$ 後，再將兩個相鄰的 V_p 值與最接近的訊號 $(\frac{\Delta C}{C_0})$ 相減，就能獲得 $\delta V_p, \delta(\frac{\Delta C}{C_0})$ 。

而空乏區寬度 w 可以由 $\frac{\epsilon_s A}{C}$ 得知。故方程式 (3.6) 中所有參數都已經決定了，我們繼續整理之：

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{\Delta C}{C_0}\right) &= \frac{\epsilon_s N_t(x_p)}{qw^2 N^+(x_p)^2} \delta V_p \\ &= \frac{\epsilon_s C^2 N_t(x_p)}{qN^+(x_p)^2 \epsilon_s^2 A^2} \delta V_p \\ N_t(x_p) &= \frac{qN^+(x_p)^2 \epsilon_s A^2}{C^2} \left(\frac{\delta(\frac{\Delta C}{C_0})}{\delta V_p}\right) \dots\dots (3.7) \end{aligned}$$

最後由方程式 (3.7)，可以求出 $N_t(x_p)$ ，把 $N_t(x_p)$ 與 C-V 量測中不同偏壓所對應到的深度大小值做圖，就可以很清楚看出缺陷隨深度分佈的狀況。



3.6 DLTS 理論曲線

在 DLTS 量測中，我們藉由改變速率視窗而獲得不同溫度的訊號峰值。故我們由 Arrhenius 圖可獲得深層能階的活化能 ($E_c - E_t$)、捕獲截面積 (cross section) [19]。若深層能階為單純點缺陷所造成，我們使用 DLTS 量測到的結果反推理論曲線應該會與實驗曲線吻合。但是如果吻合的話，此 DLTS 訊號可能為多個鄰近的缺陷共同貢獻所致。故在接下來的論文中，我們將會使用理論曲線與實驗曲線的相似度來比較，是傳統 Boxcar DLTS 結果比較正確，還是 Laplace DLTS 結果真能提高解析度？

$$\text{由 DLTS 訊號方程為：} S(T) = C(t_2) - C(t_1) = \frac{C_0 N_T}{2N_D} (e^{-e_n t_2} - e^{-e_n t_1}) \dots \dots (3.8),$$

故我們求此方程的極值即為訊號峰值的激發速率 e_{\max} 。

$$e_{\max} \text{ 方程式為：} e_{\max} = \frac{\ln(t_2/t_1)}{t_2 - t_1} \dots \dots (3.9)$$

$$\text{另外載子的熱激發速率也可以表示為：} e_{\max} = \gamma \sigma T_{\max}^2 \exp(-\Delta E_T / KT) \dots \dots (3.10)$$

在這裡我們先相信捕獲截面積的數據，故我們把 DLTS 量測到的捕獲截面積，與方程式 (3.9) 所得的 e_{\max} 帶入方程式 (3.10) 中，我們就可以求出較正確的活化能 ΔE_T 。再由 $e_n(T) = \gamma \sigma T^2 \exp(-\Delta E_T / KT)$ 便可以得到每個溫度所對應到的 $e_n(T)$ ，最後把 $e_n(T)$ 再帶回方程式 (3.8) 中便可以得到理論訊號 $S(T)$ 的方程式，利用 $S(T)$ 做圖即為理論曲線。若我們相信 DLTS 獲得之活化能的數據，同上我們也帶入方程式 (3.10) 中，就可以求出較正確的捕獲截面積，之後與上述相同便可以獲得 DLTS 訊號方程 $S(T)$ 。

3.7 導納頻譜 (Admittance spectroscopy)

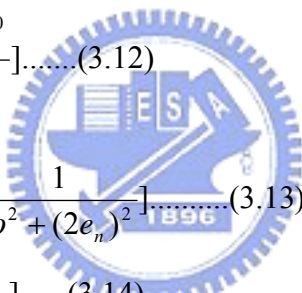
3.7 (a). 導納頻譜的理論簡述：

導納頻譜分析是在準平衡 (quasi-equilibrium) 條件下，利用小訊號調變來量測元件。所以當我們對一元件輸入小電壓訊號 $\tilde{V} e^{i\omega t}$ ，及元件將會得到一對應小電流訊號 $\tilde{I} e^{i\omega t}$ ，則元件所對應的導納為：

$$Y = \frac{\tilde{I}}{\tilde{V}} = G + i\omega C \dots (3.11)$$

接著我們將分別探討缺陷與串聯電組對導納 (Y) 的影響，而詳細推導見 [26、27、28、29、30]。

3.7 (b) 缺陷對導納量測的影響

$$G(\omega) = \left[\frac{\omega^2}{(2e_n)^2} (2e_n)^2 C_0 \right] \dots (3.12)$$


$$C(\omega) = \frac{\epsilon}{x_d} + (2e_n)^2 C_0 \left[\frac{1}{\omega^2 + (2e_n)^2} \right] \dots (3.13)$$

$$= \frac{\epsilon}{x_d} + \left[\frac{C_0}{\frac{\omega^2}{(2e_n)^2} + 1} \right] \dots (3.14)$$

其中 C_0 是低頻極限下缺陷對電容的貢獻

ω ：外加頻率

e_n ：emission rate

由方程式(3.13)知電容值隨頻率變化

- (1) 當量測頻率遠小於 e_n ，缺陷來得及趕缺陷來流電壓，而進行捉放電子 $C_p(\omega)$ 主要是由 e_n 所貢獻 (控制)
- (2) 當測量頻率遠大於 e_n ，同上所以 $C_p(\omega)$ 主要是由外加 ω 所控制，而缺陷所影響的將不被顯現出來。

根據 (1) & (2) 我們在定溫下，量測電容對頻率的變化關係曲線，低頻時訊號為缺陷所貢獻的，當頻率逐漸增大到缺陷趕不上時，訊號就被外加頻率所控制。而當 $\omega = 2e_n$ 時此點即為曲線的反曲點。故導納頻譜與 DLTS 一樣具有頻譜性 (spectroscopic)，即一個 peak 對應到一個能階的位置。

3.7 (c) 串聯電組對導納量測的影響

由於本論文的元件皆為使用熱蒸鍍法製作蕭特基元件 (Schottky diode)，故如果蕭特基接面做的不好，那元件的串聯電組將會影響我們的導納量測，因此我們考慮電容（二極體的接面電容或者是缺陷電容）與電阻（接面電阻或者是接面電阻）的串連，其阻抗為：

$$Z(\omega) = R(\omega) + \frac{1}{i\omega C(\omega)}$$

因此其導納為：
$$Y(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\left(\frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2 \omega_{RC} C}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2} + i\omega \frac{C}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2} \\ &= G_R(\omega) + i\omega C_R(\omega) \end{aligned}$$

其中 $\omega_{RC} = (RC)^{-1}$

故量測的電容與電導分別為

$$C_R(\omega) = \frac{C}{\left(1 + \frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2} \dots\dots(3.15)$$

$$G_R(\omega) = \frac{\left(\frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2 \omega_{RC} C}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_{RC}}\right)^2} \dots\dots(3.16)$$



方程式 (3.15)、(3.16) 即為 RC 時間常數的效應。如果將缺陷對導納影響 (3.12)、(3.13) 與串聯電組對導納影響式 (3.15)、(3.16) 相互比較，可以發現這兩組方程式是完全一致的，因此在量測導納頻譜獲得訊號結果後，必須確認是串聯電組所造成的還是缺陷所貢獻的。

故在量測導納頻譜前，我們通常會先量測元件的順向偏壓的 I-V 曲線，利用金半接面的電流電壓關係式：
$$I = I_0 \left[\text{Exp}\left(\frac{q(V - IR_s)}{nKT}\right) - 1 \right]$$
，來決定串聯電組 (R_s) 值的大小。

第四章 拉普拉司深層能階暫態頻譜

(Laplace Deep Level Transient Spectroscopy)

4.1 導論

the function of capacitance transient :

$$\Rightarrow \frac{C(t)}{C_0} - 1 = -\int_0^{\infty} \frac{N_T}{2N_D} e^{-\frac{t}{\tau}} d\left(\frac{1}{\tau}\right)$$

$$\text{令 } s = \frac{1}{\tau} \Rightarrow \frac{C(t)}{C_0} - 1 = -\int_0^{\infty} \frac{N_T}{2N_D} e^{-st} d(s)$$

$$\text{if } f(t) = \frac{C(t)}{C_0} - 1$$

$$F(s) = \frac{N_T}{2N_D}$$

$$\text{前式可以整理成 } f(t) = \int_0^{\infty} F(s) e^{-st} d(s) \dots \dots (4.1)$$

其中兩個參數 t：時間

s：熱激發速率 (emission rate)

兩個係數 f (t)：正比隨時間改變的電容值

F (s)：缺陷濃度與樣品 doped 濃度有關

所以最後 p+n 二極體接面暫態電容方程式 (4.1)，即為常見的 Laplace transform function。在固定溫度下，當我們給予一個週期性的逆向偏壓如圖 (2-4) 並且擷取電容值由 b (t = 0) 點到 c (t = t2) 點，我們便可以得到隨著時間改變的 C (t) 與當 t = ∞ 時的 C₀ 值。所以兩個係數中的 f (t) 我們已知，兩個參數中的 t 是我們在量測電容暫態值時就已知了，而另一參數”s” 熱激發速率 (emission rate) 則與 t 有關。假設我們使用相同時間間距，來擷取圖 (2-4) 中點 b (t = 0) 至點 c (t = t2) 的電容暫態值，則合理的熱激發速率 s 範圍如下 [5]：

$$\frac{1}{3\Delta t} \geq s \geq \frac{1}{N\Delta t} \dots \dots (4.2)$$

$$\tau = \frac{1}{s}$$

$$3\Delta t \leq \tau \leq N\Delta t$$

τ：時間常數 (life time)

Δt：每間隔多少時間來抓取電容值

N：擷取電容暫態之個數

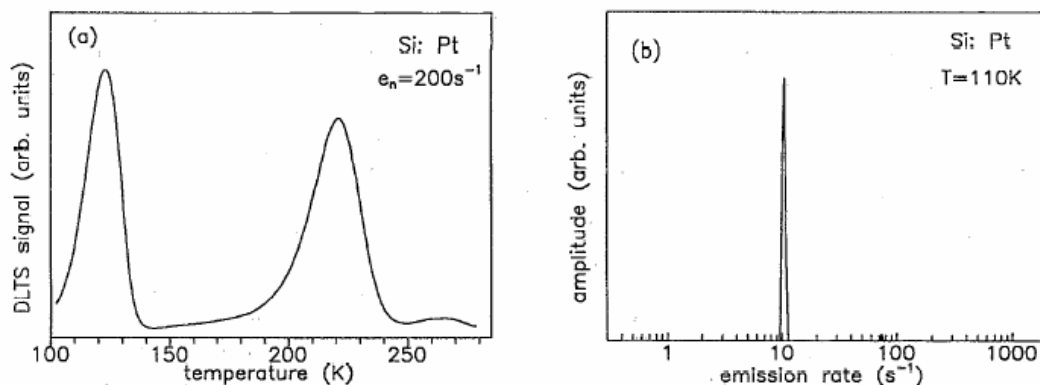
因為最少要三個點才能畫成一條曲線，所以時間常數 (life time) 的最小值必須大於等於 3Δt 才有意義。而 NΔt 為總量測時間，所以我們不應該抓到比總量測時間還長的時間常數 (life time) 之訊號。最後因為熱激發速率 (emission rate) 之倒數即為時間常數 (life time)，因此我們可以寫出 (4.2)

之關係式。

回到 Laplace transform function (4.1), $f(t)$ 是實驗暫態電容數據、 t (time) 皆已知。而 s (熱激發速率 emission rate), 與缺陷雜質濃度有關的 $F(s)$ 是未知的兩個變數。一個方程式 (4.1) 中有兩個未知數, 是沒有唯一解只有最近似解。所以我們必須根據不等式 (4.2) 先決定一段合理的 s (熱激發速率 emission rate), 這樣我們就能從方程式 (4.1) 中解出 $F(s)$ 這個未知數, 並且做圖以 $F(s)$ 為 Y 軸、把 s 取對數 (logarithmic emission rate scale) 令為 X 軸, 我們就可以得到類似高斯分佈 (Gaussian distribution) 函數的圖形如圖 (4-2) [5], 至於如何解此拉普拉斯轉換方程式 (Laplace transform function) 得到 $F(s)$, 我們將會在後面章節詳述之。前述中高斯分佈的波型, 波峰最大值所對應到的 s 值即為在定溫下, 從某一缺陷中電子受熱所躍遷出來的熱激發速率 (emission rate), 另外由 $F(s)$ 定義可知, 波型底下總面積即為缺陷濃度。所以我們在不同的溫度下量測電容暫態值, 可以獲得隨溫度改變的熱激發速率 (emission rate), 再由奧瑞尼司圖 (Arrhius Plot) 的斜率與截距, 就分別可以獲得缺活化能與捕獲結面積 (cross section) 等物理量。

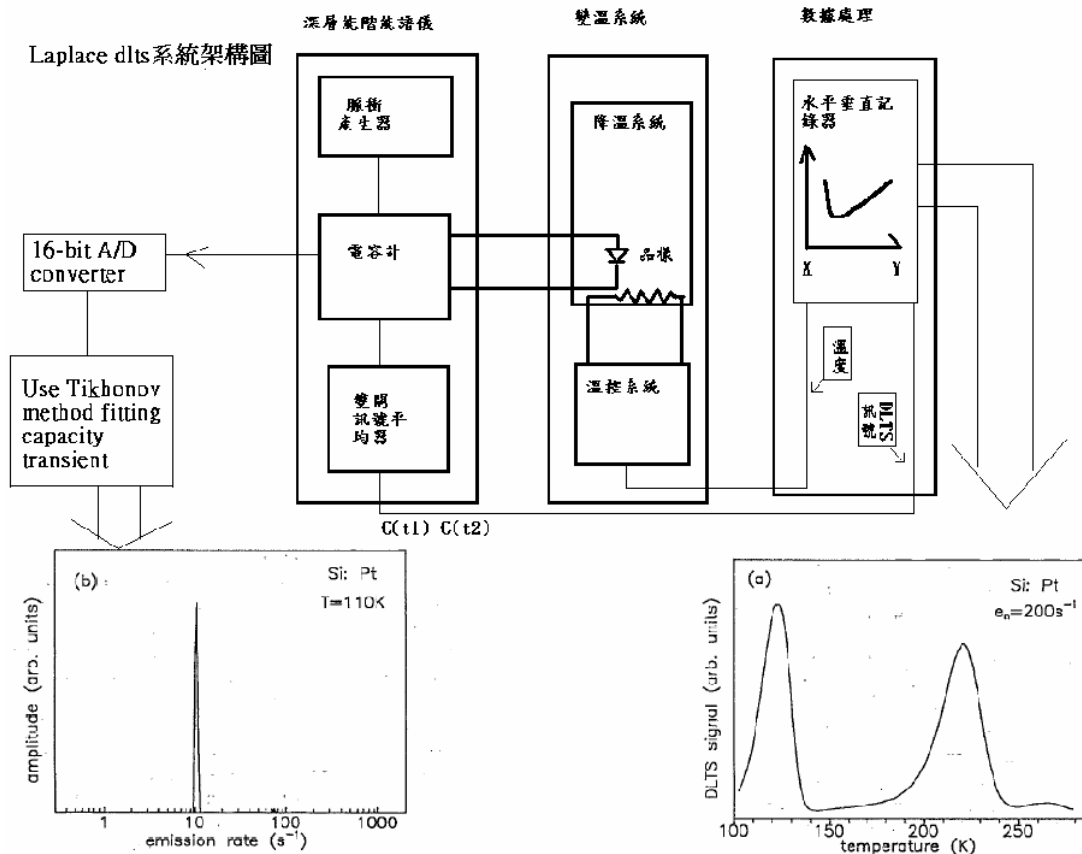
圖 (4-1) [5] 是使用典型 DLTS 量測參雜白金 (Pt) 所造成的點缺陷 (point defect), 我們從典型 DLTS 訊號可以發現兩個訊號, 其中高溫的訊號比低溫的訊號還寬, 但是受限於典型 DLTS 本身的解析度, 我們無法得知高溫的訊號是由單一缺陷所貢獻的, 還是多個缺陷貢獻所得?

所以 L. Dobaczewski 使用 Laplace DLTS 在定溫 (110K) 下量測電容暫態, 在合理的 s 值下由方程式 (4.1) 可以求得 $F(s)$ 並且作圖如圖 (4-2)。相較於典型的 DLTS 訊號, Laplace DLTS 訊號更窄解析度更高, 由訊號分佈我們可以說此訊號是由單一缺陷所提供。另外圖 (4-2) 訊號相對於典型 DLTS 圖 (4-1) 是比較低溫的 peak。而圖 (4-3) 即為 Laplace DLTS 系統結構圖, 簡單的來說就是把電容計中的電容暫態曲線用 DAQ 卡擷取出來, 我們再利用數值模擬分析這些暫態曲線。



傳統 DLTS 頻譜圖
圖 (4-1) [5]

Laplace DLTS 頻譜圖
圖 (4-2) [5]



Laplace DLTS 系統簡圖

圖 (4-3)

4.2 求解未知函數 $F(s)$

我們回到方程式 (4.1)，當我們根據不等式 (4.2) 假設 s (熱激發速率 emission rate) 範圍，在求解 $F(s)$ 時，不是真的去用 Laplace Transform 求解。在 [5,13] 中 L. Dobaczewski 使用 Tikhonov method 與 constrained regularization method 來 fitting $f(t)$ 曲線，求得未知的 $F(s)$ 。在 [14] 中 Junyong Kang 為了簡化模擬過程，使用 conjugate gradient method，求得未知的 $F(s)$ 。接著我們將解釋為何需要用到 regularization method 來模擬 $f(t)$ 。

從電容暫態方程式，假設 Δs 夠小的話，我們可以把黎曼和矩型近似如下：

$$\begin{aligned} \frac{C(t)}{C_0} - 1 &= \int_0^{\infty} \frac{N_T}{2N_D} e^{-st} d(s) \\ &\cong \sum_i \frac{N_T(s_i)}{2N_D} \text{Exp}[-s_i t] \end{aligned}$$

$$\text{define} \Rightarrow u(t) = A(s,t)Z(s) \dots \dots (4.3)$$

在矩陣方程 (4.3) 中 $A(s, t)$ 與 $u(t)$ 是已知，未知是 $Z(s)$ 。所以矩陣方程 (4.3) 為一個反函數問題 (inverse problem)。而此 inverse problem 主要有兩個問題，第一個問題來自量測暫態電容值 $u(t)$ 時，系統無可避免的雜訊干擾。第二個問題是矩陣方程(3-3)中的矩陣 $A(s, t)$ 所產生的，為了解釋之，所以把此矩陣方程列出如下：

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} u(t_1) \\ u(t_2) \\ u(t_3) \\ \vdots \\ u(t_{n-1}) \\ u(t_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\text{Exp}[-t_1 * s_1] & -\text{Exp}[-t_1 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_1 * s_{m-1}] & -\text{Exp}[-t_1 * s_m] \\ -\text{Exp}[-t_2 * s_1] & -\text{Exp}[-t_2 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_2 * s_{m-1}] & -\text{Exp}[-t_2 * s_m] \\ -\text{Exp}[-t_3 * s_1] & -\text{Exp}[-t_3 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_3 * s_{m-1}] & -\text{Exp}[-t_3 * s_m] \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ -\text{Exp}[-t_{n-1} * s_1] & -\text{Exp}[-t_{n-1} * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_{n-1} * s_{m-1}] & -\text{Exp}[-t_{n-1} * s_m] \\ -\text{Exp}[-t_n * s_1] & -\text{Exp}[-t_n * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_n * s_{m-1}] & -\text{Exp}[-t_n * s_m] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} Z(s_1) \\ Z(s_2) \\ Z(s_3) \\ \vdots \\ Z(s_{m-1}) \\ Z(s_m) \end{bmatrix}$$

我們觀察矩陣 $A(s, t)$ ，由電容暫態方程式之黎曼和要用矩型近似法，必要條件就是 Δs 要越小越好，而 Δt 代表我們實驗時間隔多久來擷取數據，為了不讓擷取到的電容暫態曲線失真，所以也是希望越小越好。因此這些條件會造成 $A(s, t)$ 矩陣中，行與行因 Δs 很小（如 $\text{Exp}[-t_1 * s_1]$ 比 $\text{Exp}[-t_1 * s_2]$ ）所以會太過相似。同理列與列也因 Δt 很小（如 $\text{Exp}[-t_1 * s_1]$ 比 $\text{Exp}[-t_2 * s_1]$ ）所以也會太過相似，因此 $\det(A)$ (determinant) 會幾乎等於零即為奇異矩陣 (singular matrix)。這樣會造成 $A(s, t)$ 的反矩陣 (inverse matrix) $A^{-1}(s, t)$ 可能因此而不存在。所以我們在求解反函數問題，矩陣方程式 (4.3) 中的未知數 $Z[s]$ ，不能直接求解如下所示：

$$\begin{aligned} u(t) &= A(s, t)Z(s) \dots \dots (4.3) \\ A^{-1}(s, t)u(t) &= A^{-1}(s, t)A(s, t)Z(s) \\ \Rightarrow Z(s) &= A^{-1}(s, t)u(t) \end{aligned}$$

所以我們只好使用正規化 (regularization) 近似法來求解此方程式 $Z(s)$ 的最合理解 (Constructing approximate solution)。故 Tikhonov method 與 Constrained regularization method 的必須使用，也是因此而產生的。

因此矩陣方程 (4.3) 第二個問題就是因為類似奇異矩陣 (singular matrix) 的 $A(s, t)$ ，讓此方程會對約略誤差擁有很強的敏感性 (inherent sensitivity to round-off error)，如此一來前述的第一個問題將會變的更嚴重，在數學上我們稱此種聯立方程為病態問題 (ill-posed problem)，在第五章中我們將會討論如何克服之。

第五章 Ill - posed problem of Fredholm equation

5.1. 何謂良態問題(well - posed problem)與病態問題(ill - posed problem)：

1915 年由 Hadamard 對於定義良態 (well-posed problem) 問題有以下定義，

定義一個 A 矩陣，mapping $A : X \rightarrow Y$ ，而方程式為 $AX=Y$ 。[32, 33, 34]

良態問題(well - posed problem)必須滿足以下三個條件：

(1)解的存在性(Existence)：

任何 $y \in Y, \exists x \in X, \text{ such that } Ax = y$

(2)解的唯一性(Uniqueness)：

$Ax_1 = Ax_2 \Rightarrow x_1 = x_2$

(3)解的連續性(stability)：

A^{-1} 是連續 (continuous) 的。

若不滿足上述三個條件中的任何一點，則稱為病態問題 (Ill - posed problem)。因為反算問題 (inverse problem) 的解通常並非唯一，所以反算問題是最典型常見的病態問題 (Ill - posed problem)。

5.2. Fredholm equation of first and second kind

$$g(t) = \int_a^b K(t,s)f(s)ds \dots (5.1)$$

方程式 (5.1) 是第一型 Fredholm 方程式 (inhomogeneous Fredholm equation of first kind)，並且類似矩陣方程： $g = K*f$ ，此矩陣方程的解為： $f = k^{-1}*g$ 。第一型 Fredholm 方程式通常是嚴重的病態問題 (ill - posed problem) [35、36]。

$$f(t) = \lambda \int_a^b K(t,s)f(s)ds + G(t), \lambda = \frac{1}{\sigma}, G = -g\sigma \dots (5.2)$$

方程式 (5.2) 是第二型 Fredholm 方程式 (inhomogeneous Fredholm equation of second kind)，並且類似矩陣方程： $g = (K - \sigma I)*f$ 。

我們回顧方程式(4.1)與方程式(4.3)，由於矩陣 $A(s, t)$ 是奇異矩陣 (singular matrix)，所以不符合良態問題 (well - posed problem) 定義中的第三點，並且比較第一型 Fredholm 方程式 (inhomogeneous Fredholm equation of first kind)，我們可以說電容暫態方程式 (4.3) 即為第一型 Fredholm 方程式的病態問題 (Ill - posed problem)。

在前一章中我們以知矩陣方程 (4.3) 為一反函數問題 (inverse problem)。故我們舉一例 [37] 說明 inverse problem 的第一個問題：因為是病態問題 (Ill - posed problem)，所以在求解未知數時，容易受到實驗中量測的雜訊影響。

Example :

$$A \cdot X = D$$

$$\begin{bmatrix} 6 & 18 & 14.2 \\ 3 & -2 & -1 \\ 8 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.8 \\ 2 \\ 7 \end{bmatrix}$$

$$\text{exact solution} \Rightarrow \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

其中 $\det(A) = -0.2$ 很接近零，所以此 ill-conditioned 方程組 (4.3) 中的係數矩陣 A (coefficient matrix)，可以說是接近奇異矩陣的傾向。

情況一：我們利用高斯消去法計算 $[A|D]$ ，並且精確到小數點下五位

$$\begin{bmatrix} 6 & 18 & 14.2 & 9.8 \\ 3 & -2 & -1 & 2 \\ 8 & 1 & 2 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 17.3 & -12.7 & 4.55 \\ 0 & 0 & -0.00283 & 0.000953 \end{bmatrix}$$

我們可以得到一組 X 矩陣的解如下：

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.337 \\ 0.510 \\ 0.896 \end{bmatrix} \dots (\text{解-1})$$

很明顯的跟正確解有一段不小的誤差。

情況二：我們利用高斯消去法計算 $[A|D]$ ，並且精確到小數點下九位

$$\begin{bmatrix} 6 & 18 & 14.2 & 9.8 \\ 3 & -2 & -1 & 2 \\ 8 & 1 & 2 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 1 & 2 & 7 \\ 0 & 17.3 & -12.7 & 4.55 \\ 0 & 0 & -0.001449275 & 0.0001449275 \end{bmatrix}$$

我們也可以得到一組 X 矩陣的解如下：

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \dots (\text{解-2})$$

我們比較 (解 - 1) 與 (解 - 2)，可以清楚的發現精確到小數點下九位所得到的解，遠比精確到小數點下五位所得的解正確很多。因此由此例我們可以證明病態問題 (Ill-posed problem) 在求解未知數時，會受到實驗中量測的雜訊影響而得到不正確的解。所以我們在使用 Laplace DLTS 模擬運算時，需要平均多次以降低雜訊影響。

5.3 最小平方法 (Least square approximation method)

因為 $A(s, t)$ 矩陣是類奇異矩陣，所以我們只好使用正規化 (regularization 即找尋一種近似解的方法) 以近似法來求解此方程式 $Z(s)$ 的最合理解 (Constructing approximate solution)。接下來我們將嘗試使用最普遍的近似法，線性最小平方法 (Linear Least square approximation method) [37]，來模擬 (fitting) 我們自己假設的電容暫態方程。

接著我們先簡述一下最小平方法如下所示：

假設對一個現象或母群體中的兩個變量 x 與 y 觀測 n 次，得到一組數據如下表所示：

x_i	x_1, x_2, \dots, x_n
y_i	y_1, y_2, \dots, y_n

我們要找一函數 $y=f(x)=A \cdot Z$ ，來調配 (fit) 上表之數據。

$$\begin{aligned}
 s &= \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 \\
 &= (y - f(x))^T (y - f(x)) \\
 &= (y - A \cdot Z)^T (y - A \cdot Z) \\
 &= y^T y - Z^T A^T y - y^T A Z + Z^T A A^T Z
 \end{aligned}$$

對 s 偏微分找尋最小值：

$$by \frac{\partial s}{\partial A^T} = 0$$

$$so \ we \ get : z = (A^T \cdot A)^{-1} (A^T \cdot y) \dots \dots (5.3)$$



接下來我們將嘗試使用線性最小平方法，來模擬 (fitting) 我們自己假設的電容暫態方程如下：

$$C(t) = A(s, t) \cdot Z(s)$$

其中假設 $C(t)$ 方程式已知： $C(t) = -1\text{Exp}[-10t] \dots \dots (5.4)$

$$\Delta t = 0.1 \Rightarrow 1 \geq t \geq 0.1$$

$$\text{並且由 (4.2) 猜 } \Delta s = 1 \Rightarrow 14 \geq s \geq 5$$

故未知矩陣 $Z(s)$ ，與已知矩陣 $C(t)$ 與 $A(s, t)$ 表示如下：

$$Z(s) = \begin{bmatrix} Z(5) \\ Z(6) \\ \cdot \\ \cdot \\ Z(13) \\ Z(14) \end{bmatrix}$$

$$C(t) = -\text{Exp}[-10t] = \begin{bmatrix} -0.368 \\ -0.135 \\ -0.0498 \\ -0.018 \\ -0.00674 \\ -0.00248 \\ -0.000912 \\ -0.0003355 \\ -0.0001234 \\ -0.000045 \end{bmatrix} \quad A(s, t) = \begin{bmatrix} e^{-5*0.1} & e^{-6*0.1} & \cdot & \cdot & \cdot & e^{-14*0.1} \\ e^{-5*0.2} & e^{-6*0.2} & \cdot & \cdot & \cdot & e^{-14*0.2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ e^{-5*0.9} & e^{-6*0.9} & \cdot & \cdot & \cdot & e^{-14*0.9} \\ e^{-5*1.0} & e^{-6*1.0} & \cdot & \cdot & \cdot & e^{-14*1.0} \end{bmatrix}$$


根據最小平方法 (Least square approximation method) 求解 $Z(s)$ 可以帶入下列 (5.3) 式中：

$$Z(s) = (A(s, t)^T \cdot A(s, t))^{-1} (A(s, t)^T \cdot C(t)) \dots \dots (5.4)$$

利用最小平方法得解 \Rightarrow

$$\begin{bmatrix} Z(5) \\ Z(6) \\ Z(7) \\ Z(8) \\ Z(9) \\ Z(10) \\ Z(11) \\ Z(12) \\ Z(13) \\ Z(14) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.000364 \\ -0.005 \\ 0.0584 \\ -0.09229 \\ 0.5635 \\ 0.723 \\ -0.190 \\ 0.35 \\ -0.033 \\ -0.0954 \end{bmatrix}$$

而正確解 \Rightarrow

$$\begin{bmatrix} Z(5) \\ Z(6) \\ Z(7) \\ Z(8) \\ Z(9) \\ Z(10) \\ Z(11) \\ Z(12) \\ Z(13) \\ Z(14) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$


我們可以得到一個最小平方法 (Least square approximation method) 的最佳解，並且比較於正確解我們可以發現有明顯的不同。所以最簡單常用的最小平方法(Least square approximation method)，無法解決代求解的電容暫態方程式 (4.3)。即為第一型 Fredholm 方程式的病態問題 (Ill - posed problem) 無法由最小平方法得出正確解。所以我們將在下節使用 Tikhonove method 正規化方法來求解此問題。

第六章 Tikhonov regularization method

在這一節中，我們在 6.1 節中介紹 Tikhonov method [38, 39, 40, 41]，並使用來解第一型 Fredholm 方程式的病態問題 (Ill - posed problem)。接著在 6.2 節使用 Tikhonov method 來解決代求解的電容暫態方程式 (3-3)。在 6.3 節中我們將會決定 Tikhonov method 中的未知數 α (regularization parameter 正規劃係數)，與如何在 $A(s, t)$ 矩陣中帶入最佳範圍的熱激發速率 (emission rate)。在 6.4 節中，嘗試使用前述方法，來模擬已知函數的電容暫態方程，並且觀察是否正確。

6.1 簡介 Tikhonov method

我們要先定義一些參數的代號如下：

Symbols :

$K(t, s)Z(s)=u(t)$, $a < s < b$, $c < x < d$

K : 正確方程 (exact form) 中，作用在 Z 矩陣上可得 u 矩陣的運算子。
(operator from Z into U given in the exact form .)

K_h : 為一趨近於 K 運算子的近似運算子。

(operator given in the approximate form)

h : 趨近運算子 K_h 與真實運算子 K 差。($h=K_h-K$)

(error in specifying an operator)

u : 為一已知矩陣。

u_δ : 為一趨近於 u 矩陣。(即為加入雜訊的實驗數據所構成之矩陣)。

δ : $u-u_\delta$ 。(即為雜訊)

$\eta=(\delta, h)$: is the error vector .

α : 正規劃參數。(regularization parameter) 並且其值一定要大於零。

並且此正規劃參數與 δ 有直接關係。($\frac{(h+\eta)^2}{\alpha(\eta)} \rightarrow 0$ that $\alpha(\eta) \rightarrow 0$)

Z : 代求未知矩陣。

Z_η^α : 與 α 有關的 Z 矩陣近似解。如果運算中使用越小的 α ，我們將會得到越正確的 Z_η^α 矩陣。($Z_\eta^\alpha \rightarrow Z$ as $\alpha(\eta) \rightarrow 0$)

Tikhonov smoothing functional :

$$M^\alpha[Z]=\|k_h Z - u_\delta\|^2 + \alpha \|Z\|^2$$

$$\text{where } \|Z\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Z_i)^2} = \left[\int_a^b Z(s) ds \right]^{\frac{1}{2}}$$

$h_s : \Delta s$ 。(我們簡化問題，讓 s 等間距分佈)

$h_t : \Delta t$ 。(量測時，讓 t 等間距分佈)

舉例：

$$s_{\min}=1(1/\text{sec}), s_{\max}=100(1/\text{sec}) \rightarrow a=1(1/\text{sec}), b=100(1/\text{sec})$$

$$u(t)= \begin{bmatrix} u(1) \\ u(2) \\ u(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u(35) \end{bmatrix} \rightarrow c=1(\text{sec}), d=35(\text{sec})$$

$$n=100, m=35$$

$$hs=1=\frac{1}{n}(a-b), ht=1=\frac{1}{m}(c-d)$$

下面我們將會使用 Tikhonov 有限維度的近似法求解，第一型的 Fredholm 積分方程中 (Finite - dimensional approximation of first kind Fredholm integral equation)，來解釋如何使用 Tikhonov 方法。

$$\text{第一型的 Fredholm 積分方程：} \int_a^b K(t,s)z(s)ds = u(t) \dots\dots(6.1)$$

接著我們解釋 Tikhonov smoothing functional：

$$M^\alpha[Z] = \underbrace{\|k_h Z - u_\delta\|^2}_{\text{(first term)}} + \underbrace{\alpha \|Z\|^2}_{\text{(second term)}} \dots\dots(6.2)$$

$$\text{where } \|Z\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Z_i)^2} = \left[\int_a^b Z(s)ds \right]^{\frac{1}{2}}$$

在 Tikhonov smoothing functional 中的第一項(first term)：即為其一節所討論的最小平方法 (Least square approximation method)。

在 Tikhonov smoothing functional 中的第二項(second term)：為一個與誤差有關的修正項矩陣，主要目的在於破壞第四章中，所討論過的 K(t, s) 行與行列與列太過相似的問題。所以加入一個修正的矩陣，讓 det (K) >>0，以避免病態問題 (Ill - posed problem) 所產生的一些困難。

所以綜合第一項與第二項的理由，Tikhonov smoothing functional 可以視為加入一個修正項的變形最小平方法 (Least square approximation method)。所以我們對此函數偏微分取極值：

$$(M^\alpha[Z])' = 0$$

$$\Rightarrow K_h * K_h Z + \alpha Z = K_h * u_\delta \dots\dots(6.3)$$

上式 (6.3) 數學家通常叫它 Euler 方程式。

把第一型的 Fredholm 積分方程(5-1)帶入 Tikhonov smoothing functional (6.2)：

$$M^\alpha[Z] = \|k_h Z - u_\delta\|^2 + \alpha \|Z\|^2$$

$$\Rightarrow \int_c^d \int_a^b [K_h(t,s)z(s)ds - u_\delta(t)]^2 dt + \alpha \int_a^b \{Z(s)^2 + [Z'(s)]^2\} ds \dots (6.4)$$

我們對式 (6.4) 取極值帶入 (6.3) Euler 方程式來決定未知數 $Z(s)$ 矩陣的近似解 Z_η^α ：

$$L^\alpha[z] = \alpha \left\{ \frac{\partial [K \frac{\partial Z}{\partial s}]}{\partial s} - Z \right\} - \left\{ \int_a^b \int_c^d K(\xi,s)K(\xi,\zeta)d\zeta d\xi - \int_c^d K(\xi,s)u(\xi)d\xi \right\} = 0 \quad z'(a) = z'(b) = 0$$

我們把上式與設定邊界條件的 Green' s Function 比較：

$$\text{Green' s Function} \Rightarrow L^w[z] = \frac{\partial}{\partial s} [K \frac{\partial z}{\partial s}] - z(s) = f(s) \quad z'(a) = z'(b) = 0$$

所以我們如果把第一型的 Fredholm 積分方程 (6.1) 帶入 Tikhonov smoothing 取極值，來決定未知數 $Z(s)$ 矩陣的近似解 Z_η^α 時，就會把問題更複雜化，變成了要解一個設定邊界條件的 Green' s 函數問題。所以 Tikhonov 使用矩型近似法 (rectangle formula to approximate the integral) 簡化 (6.4) 式，所以我們重新改寫式 (6.4)：

$$M^\alpha[Z] = \|k_h Z - u_\delta\|^2 + \alpha \|Z\|^2$$

$$\Rightarrow \int_c^d \int_a^b [K_h(t,s)z(s)ds - u_\delta(t)]^2 dt + \alpha \int_a^b \{Z(s)^2 + [Z'(s)]^2\} ds \dots (6.4)$$

(element1) (element2) (element3)

$$(\text{element1}) \Rightarrow \int_c^d \int_a^b [K_h(t,s)z(s)ds - u_\delta(t)]^2 dt \cong \sum_{i=1}^m [\sum_{j=1}^n a_{ij} Z_j h_s - u_i]^2 h_x$$

$$(\text{element2}) \Rightarrow \int_a^b z(s)^2 ds \cong \sum_{j=1}^n z_j^2 h_s$$

$$(\text{element3}) \Rightarrow \int_a^b [z'(s)]^2 ds \cong \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s}$$

$$\text{so (5-4)} \Rightarrow M^\alpha[z] = \sum_{i=1}^m [\sum_{j=1}^n a_{ij} Z_j h_s - u_i]^2 h_x + \alpha \sum_{j=1}^n z_j^2 h_s + \sum_{j=2}^n \frac{(z_j - z_{j-1})^2}{h_s}$$

$$\Rightarrow 2h_t h_s \sum_{k=1}^n [\sum_{i=1}^m a_{ik} a_{i1}] z_k + 2\alpha h_s z_1 - \alpha \frac{z_2 - z_1}{h_s} = 2 \sum_{i=1}^m a_{i1} u_i h_t h_s$$

$$\Rightarrow h_t h_s \sum_{k=1}^n [\sum_{i=1}^m a_{ik} a_{i1}] z_k + 2\alpha h_s z_j - \alpha \frac{z_{j-1} - 2z_j + z_{j+1}}{h_s} = 2 \sum_{i=1}^m a_{i1} u_i h_t h_s$$

$$j = 2, \dots, n-1$$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow h_t h_s \sum_{k=1}^n [\sum_{i=1}^m a_{ik} an] z_k + \alpha h_{sj} z_n - \alpha \frac{z_{n-1} - z_n}{h_{sj}} = \sum_{i=1}^m a_{in} u_i h_t h_s \\ &\Rightarrow h_t h_s \sum_{k=1}^n [\sum_{i=1}^m a_{ik} an] z_k + \alpha (h_{sj} z_n - \frac{z_{n-1} - z_n}{h_{sj}}) = \sum_{i=1}^m a_{in} u_i h_t h_s \\ &\Rightarrow Bz \qquad \qquad \qquad + \alpha Cz \qquad \qquad \qquad = f \dots\dots\dots(6.5) \end{aligned}$$

我們把C寫出來：

$$C \equiv \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{1}{h_s^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

我們發現原來C矩陣，在△s等間距下，C矩陣可以大幅簡化成一個簡單的對角單位矩陣，說明如下：



$$C_{4*4} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{1}{h_s^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \\ Z_4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} Z_1 + \frac{Z_1}{h_s^2} - \frac{Z_2}{h_s^2} \\ -\frac{Z_1}{h_s^2} + Z_2 + \frac{2Z_2}{h_s^2} - \frac{Z_3}{h_s^2} \\ -\frac{Z_2}{h_s^2} + Z_3 + \frac{2Z_3}{h_s^2} - \frac{Z_4}{h_s^2} \\ -\frac{Z_3}{h_s^2} + Z_4 + \frac{Z_4}{h_s^2} \end{pmatrix}$$

$$= \boxed{Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_4}$$

我們把C矩陣以4*4寫出來化簡，結果C矩陣作用到Z矩陣的結果，與單位對角化矩陣作用到Z矩陣上是相同的。所以在本論文中，為了簡化數學模擬的時間，我們都採用等間距的△s來模擬。當然這樣會產生一些模擬問題如在熱激發速率值較小時解析度會很差，而在熱激發速率值較大時解析度會比較好。

最後可以使用從(6.4)式矩型近似而得的式(6.5)，求解未知Z矩陣如下：

$$\begin{aligned} Bz + \alpha Cz &= f \dots\dots\dots(6.5) \\ \Rightarrow (B + \alpha C)z &= f \\ \Rightarrow (B + \alpha C)^{-1} (B + \alpha C)z &= (B + \alpha C)^{-1} f \\ \Rightarrow z_n^\alpha &= (B + \alpha C)^{-1} f = (h_t h_s \sum_{k=1}^n [\sum_{i=1}^m a_{ik} an] + \alpha C)^{-1} \cdot \sum_{i=1}^m a_{in} u_i h_t h_s \dots\dots\dots(6.6) \end{aligned}$$

所以利用式 (6.6)，得到與 α (正規化係數 regularization parameter) 有關的第一型的 Fredholm 積分方程中 (Finite - dimensional approximation of first kind Fredholm integral equation) 近似解 Z_n^α 。我們將會在 6.3 節中決定使用式 (6.6) 時， α (正規化係數 regularization parameter) 的大小。

6.2 使用 Tikhonov method 來解決代求解的電容暫態方程式 (4.3)

$$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = - \sum_i Z_{si}(s) \text{Exp}[-S_i t] \dots (4.3)$$

$$\Rightarrow U(t) = A(s, t) Z(s)$$

把上式帶入前一節提過的帶入 Tikhonov smoothing functional(6.2)：

$$M^\alpha[Z] = \|A_h z - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2$$

$$(M^\alpha[z])' = 2(A_h^* A_h z - A_h^* u_\delta + \alpha z) = 0$$

$$\Rightarrow A_h^* A_h z^\alpha + \alpha z^\alpha = A_h^* u_\delta$$

$$\Rightarrow (A_h^* A_h + \alpha) z^\alpha = A_h^* u_\delta$$

$$\Rightarrow z^\alpha = (A_h^* A_h + \alpha E)^{-1} A_h^* u_\delta \dots (6.7)$$

define : $\alpha \geq 0$

在 Δs 等間距下，E 矩陣可以大幅簡化成一個簡單的對角單位矩陣，我們得到與(6.6)完全相同的結果，但是方程式 (6.7) 是比較不嚴謹的推導過程。比如說 Δs 並非等間距的話，E 矩陣就是一個很複雜的矩陣。或者是量測時間非等間距基本上 (6.7) 式就不成立，我們就必須由 (6.4) 式中重新推導。但是在本論文中為了要簡化數學運算會讓 Δs 與 Δt 等間距，並且間距盡量越小越好、點數越多越好，以提高解析度。

所以電容暫態方程式 (4.3) 中的 z 矩陣近似解，當我們使用對的 α 值 (regularization parameter)，即可使用方程式 (6.7) 算出一個與 α 有關的近似解 z^α 。但要注意此 α 值一定要大於零，並且觀察一下方程式 (6.7) 中，如果 α 值越小，近似解 z^α 矩陣，就會越接近正確解的 z 矩陣 ($z(s) = A^{-1}(s, t) * u(t)$)。所以使用 Tikhonov regularization method 求解電容暫態方程式時， α 值 (regularization parameter) 選取是很重要的，我們將在 6.3 節討論之。

另外在方程式 (6.7) 中，還有一個未知數即 A_k 矩陣，為了求出想要的未知矩陣 $z(s)$ ，所以未知數 A_k 矩陣我們必須用猜的。如果猜的與正確 A 矩陣差太多，會導致誤差 h_s 加大。我們必須要用合理的熱激發速率範圍 (emission rate) 來定義每一個矩陣元素都是指數的 A_k 矩陣的 s 變數。至於合理的熱激發速率範圍 (emission rate) 是多少？我們也一樣將會在 6.3 節中討論之。

最後我們要注意由方程式 (6.7)，所獲得的解 z^α 必須大於零才有物理上的意義。並且我們觀察之前要解的電容暫態方程式：

$$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = -\int_0^\infty \frac{N_T}{2N_D} e^{-st} d(s)$$

我們可以對求出的近似解 z^α ，定義其物理意義為 $\frac{N_T}{2N_D}$ 。因為我們在 DLTS 理論中以假設 $N_D \gg N_T$ ，所以我們的近似解 z^α 必須遠小於一。而這個觀念是接下來判斷解正確與否的重要資料。

6.3 未知數 α (regularization parameter) 與 $A_h(s, t)$ 矩陣

6.3 (a) . α (regularization parameter)

我們先證明 α (regularization parameter) 有一定的範圍：

α 範圍一：

我們先回到 Tikhonov smoothing functional(6.2)

$$M^\alpha[Z] = \|A_h z - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2 = \text{const}$$

$$\|A_h z - u_\delta\|^2 = \text{const} - \alpha \|z\|^2 \dots\dots(6.8)$$

define: $\alpha \geq 0$

由 (6.8) 等式中右邊值越小， $A_h z^\alpha$ 就越接近 u_δ ，又 α 值一定要大於零，所以我們可以得到 α 範圍： α 值使用過小時，方程式 (6.8) 右邊的值，無法趨近於我們希望的零，所以 α 值不能太小。

α 範圍二：

並且觀察一下方程式 (6.7) 中， $z^\alpha = (A_h^* A_h + \alpha)^{-1} A_h^* u_\delta$ 。如果 α 值越小，近似解 z^α 矩陣，就會越接近正確解的 z 矩陣 ($z(s) = A^{-1}(s, t) * u(t)$)。所以我們因此知道 α 值不能太大。

我們根據 α 範圍一與 α 範圍二，我們可以獲得最後結論： α 值是在一定的範圍內的。

我們再來說明 α (regularization parameter) 值的大小關係與意義：

Tikhonov smoothing functional : $M^\alpha[Z] = \|Az - u\|^2 + \alpha \|z\|^2$, 現在我們在此式中, 加入雜訊 u_δ 矩陣 ($ht = u - u_\delta$), ht 即為雜訊大小。即可改寫成：

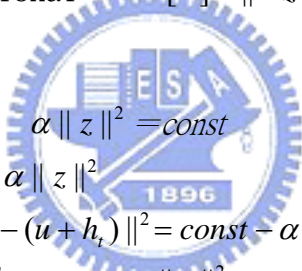
$$\begin{aligned} M^\alpha[Z] &= \|Az - u\|^2 + \alpha \|z\|^2 \\ &= \|Az - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2 \\ &= \|Az - (u + h_t)\|^2 + \alpha \|z\|^2 \\ &= \text{const} \\ \Rightarrow \|Az - (u + h_t)\|^2 &= \text{const} - \alpha \|z\|^2 \dots\dots(6.9) \end{aligned}$$

if $\alpha = \frac{h_t^2}{\|z\|^2}$ 就可以利用 regularization term ($\alpha \|z\|^2$)

把(6.9)等式中左邊的 ht 雜訊干擾減弱, 讓原本希望趨近於零的 const 值, 不會因為 ht 雜訊而變大。接下來我們來看 α 值可否將另外一個來自臆測 A_h 產生的 hs 誤差消除？

我們定義誤差 $hs = A_h(s, t)z(s) - A(s, t)z(s)$, 我們把此雜訊加入

Tikhonov smoothing functional : $M^\alpha[Z] = \|Az - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2$ 中, 此式中可改寫成：



$$\begin{aligned} M^\alpha[Z] &= \|A_h z - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2 = \text{const} \\ \Rightarrow \|A_h z - u_\delta\|^2 &= \text{const} - \alpha \|z\|^2 \\ \Rightarrow \|(A_h z^\alpha - Az^\alpha) + Az^\alpha - (u + h_t)\|^2 &= \text{const} - \alpha \|z\|^2 \\ \Rightarrow \|(h_s + Az^\alpha - u - h_t)\|^2 &= \text{const} - \alpha \|z\|^2 \\ \Rightarrow \|(Az^\alpha - u - h_t + h_s)\|^2 &= \text{const} - \alpha \|z\|^2 \dots\dots(6.10) \end{aligned}$$

the same if $\alpha = \frac{h_s^2 + h_t^2}{\|z^\alpha\|^2}$ 就可以利用 regularization term ($\alpha \|z\|^2$)

把(6.10)等式中左邊的 ht 與 hs 雜訊干擾減弱, 讓原本希望趨近於零的 const 值, 不會因為這些雜訊而變大。

所以由上述討論我們可以說 α 值 (regularization parameter) 與 hs 、 ht 有正比關係： $\frac{h_s^2 + h_t^2}{\alpha} \rightarrow 0$ 。所以當我們量測系統雜訊越大時, 與電容暫態有關的 u_δ 矩陣就會改變 (即 ht 加大); 或者是為了求解未知數矩陣 $z(s)$, 所必須去猜測的 A_h 矩陣與 A 矩陣差得太多 (hs 誤差就會增大), 此時我們就要用大一點的 α 值, 才能獲得比較合理的近似解。如此一來, 我們也利用此 α 值, 解決了前述中會被雜訊會干擾之電容暫態方程的問題。

我們舉一個例子說明何謂猜的 A_h 矩陣與 A 矩陣差得太多時, 會造成 hs 誤差產生？

Ex :

$$Az = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\det(A) = 0$$

$$\text{so if we define: } A_h = \begin{bmatrix} 1 & w \\ w & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{此時 } hs = w$$

所以如果 w 越大， hs 就會越大，也就要用越大的 α 值來抵銷之。

因此我們在這裡可以下一個結論， α 值與猜測 A_h 矩陣產生的誤差大小與系統雜訊大小有正比關係。當上述誤差很大時，我們必須採用較大的 α 值、當誤差蠻小時，就必須改用小的 α 值。

接著由下證明我們可以找出 α 值 (regularization parameter) 的上限值：



Proof :

$$M^\alpha[z] = \|Az - u_\delta\|^2 + \alpha \|z\|^2$$

$$(M^\alpha[z])' = 2A^*Az^\alpha - 2A^*u + 2\alpha z^\alpha$$

$$(M^\alpha[z])'' = 2(A^*A + 2\alpha E) \geq 0$$

故 $M^\alpha[z_\eta^\alpha]$ 為 $M^\alpha[z]$ 的最小值

其中 E 為一單位對角矩陣

$$M^\alpha[z_\eta^\alpha] = \|Az_\eta^\alpha - u_\delta\|^2 + \alpha \|z_\eta^\alpha\|^2 \geq \alpha \|z_\eta^\alpha\|^2$$

$$\text{又 } M^\alpha[0] = \|u_\delta\|^2$$

$$M^\alpha[z_\eta^\alpha] \leq M^\alpha[0]$$

$$\Rightarrow \alpha \|z_\eta^\alpha\|^2 \leq \|u_\delta\|^2$$

$$\sqrt{\alpha} \leq \frac{\|u_\delta\|}{\|z_\eta^\alpha\|}$$

但是我們在模擬電容暫態曲線時，此 α 值的上限值太大了，所以功用也不大。在數學上 h_s 與 h_t 之值是已知的，根據[42]中，Tikhonov 使用 **generalized discrepancy principle** 來決定 α 值 (regularization parameter)。但是我們現在是要拿來解一個物理問題，物理實驗中，我們會量到多少雜訊 h_t 我們無法斷定。所以 α 值大小的決定，我們將不會用數學的 generalized discrepancy principle 來決定之。而是用模擬電容暫態曲線，與真實電容曲線做比較， α 值上下調整，直到我們會得一個與真實曲線相差最小的模擬結果。

我們在決定 α 值 (regularization parameter) 值前，因為 α 值與 h_s 、 h_t 有正比關係 ($\frac{h_s^2 + h_t^2}{\alpha} \rightarrow 0$)，所以我們使用不同的 $A_h(s, t)$ 矩陣，最佳的 α 值可能因為 h_s 的不同，而會有所調整。所以接下來我們要討論 $A_h(s, t)$ 矩陣的如何決定，與 $A_h(s, t)$ 矩陣中的元素 (element) 哪些是已知、哪些是未知的，會由適當的物理範圍來猜測之。

6.3 (b) . $A_h(s, t)$ 矩陣的決定

我們先把 $A_h(s, t)$ 矩陣形式列出如下：

$$A_h(s, t) = \begin{bmatrix} -\text{Exp}[-t_1 * s_1] & -\text{Exp}[-t_1 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_1 * s_{n-1}] & -\text{Exp}[-t_3 * s_n] \\ -\text{Exp}[-t_2 * s_1] & -\text{Exp}[-t_2 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_2 * s_{n-1}] & -\text{Exp}[-t_3 * s_n] \\ -\text{Exp}[-t_3 * s_1] & -\text{Exp}[-t_3 * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_3 * s_{n-1}] & -\text{Exp}[-t_3 * s_n] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\text{Exp}[-t_{m-1} * s_1] & -\text{Exp}[-t_{m-1} * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_{m-1} * s_{n-1}] & -\text{Exp}[-t_{m-1} * s_n] \\ -\text{Exp}[-t_m * s_1] & -\text{Exp}[-t_m * s_2] & \dots & -\text{Exp}[-t_m * s_{n-1}] & -\text{Exp}[-t_m * s_n] \end{bmatrix}$$

其中 $\begin{cases} t : t_1 \leq t \leq t_m \\ s : s_1 \leq s \leq s_m \end{cases}$

我們觀察要猜測的 $A_h(s, t)$ 矩陣，因為我們已知電容暫態方程式是由指數所組成的，所以 $A_h(s, t)$ 矩陣中每一個元素 (element) 都是指數形式。接著觀察每一個元素 (element) 中的兩個變數： s (熱激發速率 emission rate)， t (時間 time)。

t (時間 time)：我們在量測時，每隔多少時間取一個電容值回來時構成電容暫態曲線，這個變數 t 已經決定好了。

s (熱激發速率 emission rate)：我們在第四章中，在決定了 t (時間 time) 後， s 合理範圍應該如 (4.2) 方程所示，所以與其說我們猜 $A_h(s, t)$ 矩陣，不如說我們要找一個合理於量測樣品的 s (熱激發速率 emission rate) 更為恰當。

所以我們在實際使用 Laplace DLTS 前，通常會先用典型 DLTS 量測此樣品，並且從典型 DLTS 所獲得的活化能 (E_a) 與捕獲截面積 (cross section)，來反推在幾度在幾度下會有電容暫態出現。同時也知道利用典型 DLTS 下，所獲得的定溫熱激發速率是多少，我們將拿此值當猜 $A_h(s, t)$ 矩陣中的變數 s 的參考。

接著我們由典型 DLTS 下，所獲得的定溫熱激發速率為猜 $A_h(s, t)$ 矩陣中的變數 s 依據，開始使用 Tikhonov regularization method。在相同 α 值

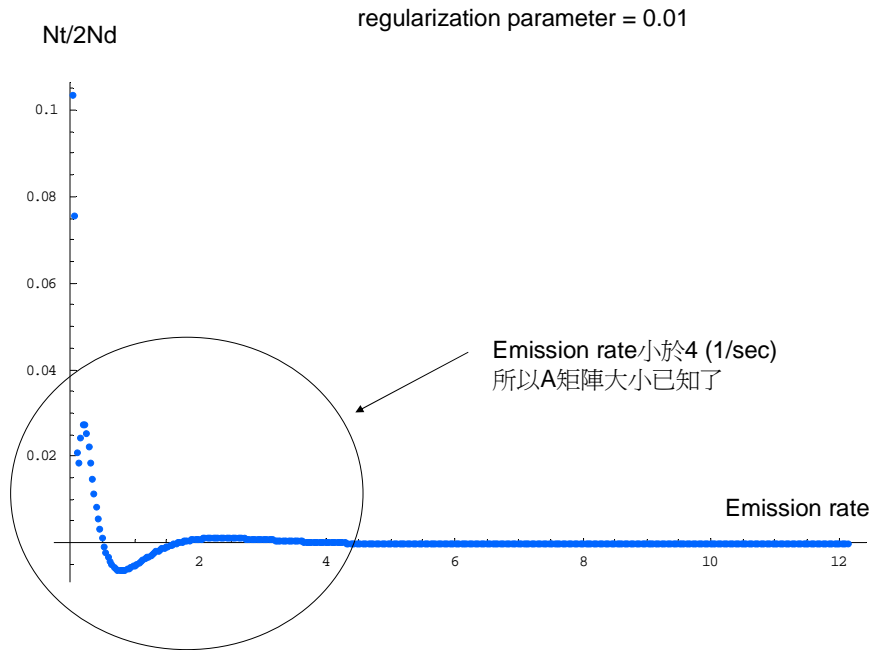
(regularization parameter) 的前提下，我們觀察所獲得的近似解矩陣 z^α ，如果 s (熱激發速率 emission rate) 變數猜的太大時，比較大的 s 所對應到解 z^α 的就幾乎是零，這時我們就要把 s 縮小，如圖 (6-1)。故我們觀察圖中有訊號的 s 範圍，可以大概猜測到一段合理的 s 範圍，如由圖 (6.1) 發現 s 值大於 4 (1/sec) 時， z^α 的幾乎是零，所以我們就縮小猜測的 s 範圍為 6 (1/sec) 以下，重新使用方程式 (6.7) 運算。結果如圖 (6.2) 所示，可以明顯的發現解析度提高，並且幾乎每個 s 值幾乎都對應到一個合理的值。

如果最大的變數 s 所對應到解 z^α 的值沒有下降，那就可能是有更大的 s 我們漏猜到，這時我們要把變數 s 範圍拉大。舉例如圖 (6-3) 所示，我們故意把 s 的範圍縮小到 $1.4E-3$ (1/sec)，結果就會如上述一般。所以當有這個現象出現，我們就必須把猜測的 s 範圍調大。

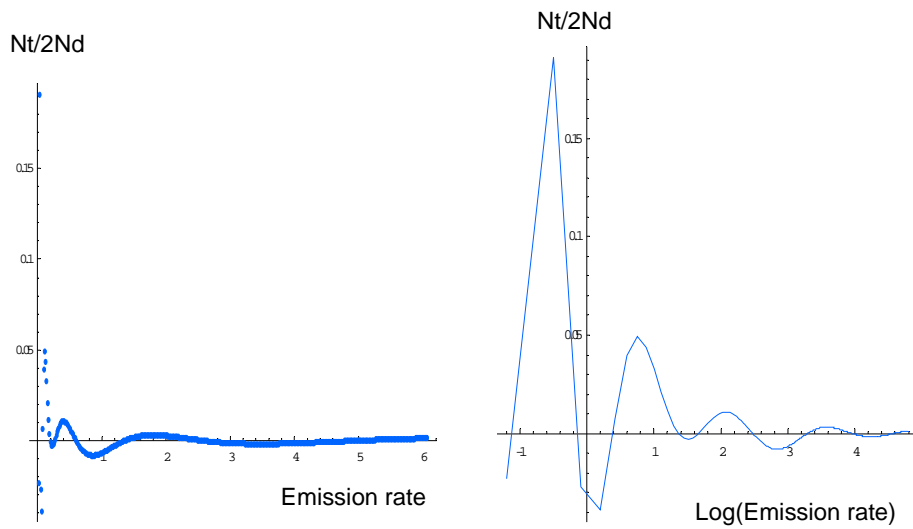
有一點值的注意，如果我們不管如何修正 s 範圍，經由方程式 (6.7) 獲得的解都是大於一或者是遠大於一 (這樣的解釋沒有物理意義的)，那就是因為我們採用太小的 α 值修正過渡所造成的。

最後我們觀察由 Tikhonov regularization method 結果反推的模擬電容暫態曲線，與真實電容曲線兩者的誤差大小，作為調整 s 變數範圍的客觀依據。當 s 變數決定時，如何猜 $A_h(s, t)$ 矩陣也同時被決定了。

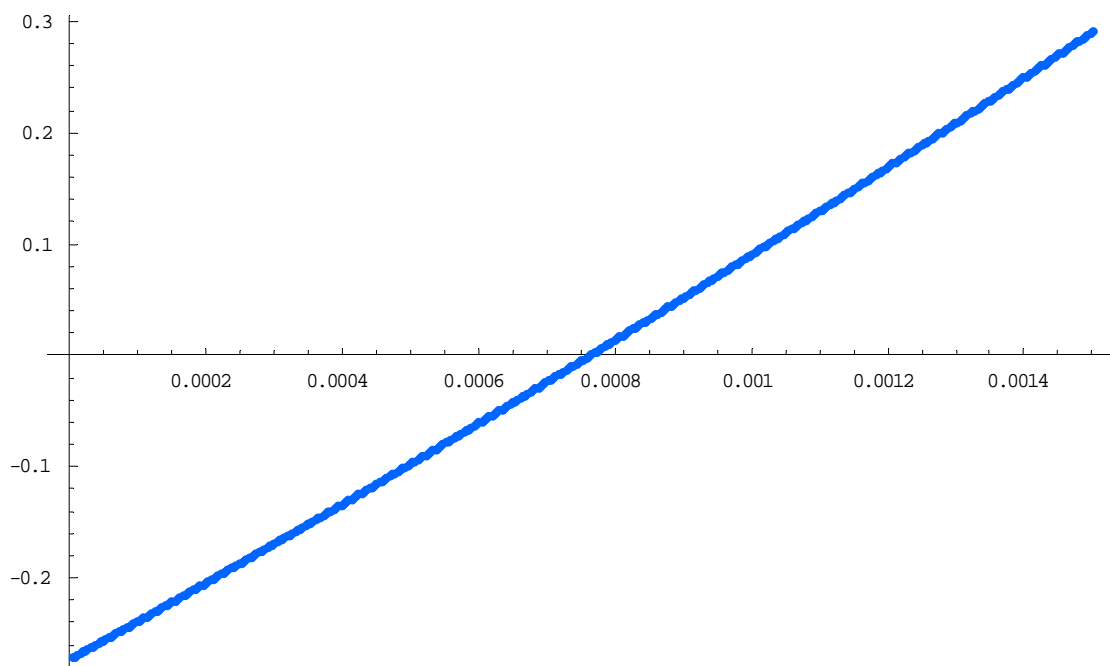
當我們決定了 $A_h(s, t)$ 矩陣時，代求之電容暫態方程該該使用的最佳 α 值，同時也會被固定住。所以接著我們上下調整 α 值並且比較模擬電容暫態曲線，與真實電容曲線的差距大小，直到我們會得一個與真實曲線相差最小的模擬結果。我們將會在 6.4 節中模擬 (fitting) 一個已知方程式的電容暫態方程來輔助說明之。



先猜測 A 矩陣中的 s 值為很大的範圍
圖 (6-1)



故我們決定 A 矩陣中 s 大小約為 6(1/sec) 以下
圖 (6-2)



當 A 矩陣中的 s 範圍猜太小的結果
圖 (6-3)

6.4 模擬已知方程的電容暫態曲線

$$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.3e^{-0.225t} - 0.6e^{-1.125t} + 1\%(noise) \dots (6.11)$$

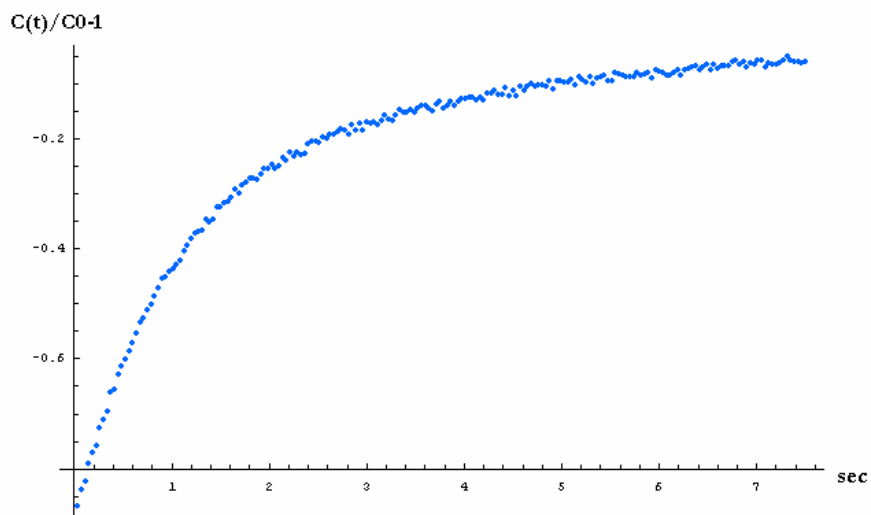
$$0.0375 \leq t \leq 200 * 0.0375 \quad \Delta t = 0.0375$$

$$define: error1 = \sqrt{(A_h(s,t)Z^\alpha(s) - \frac{C(t)}{C_0} - 1)^2}$$

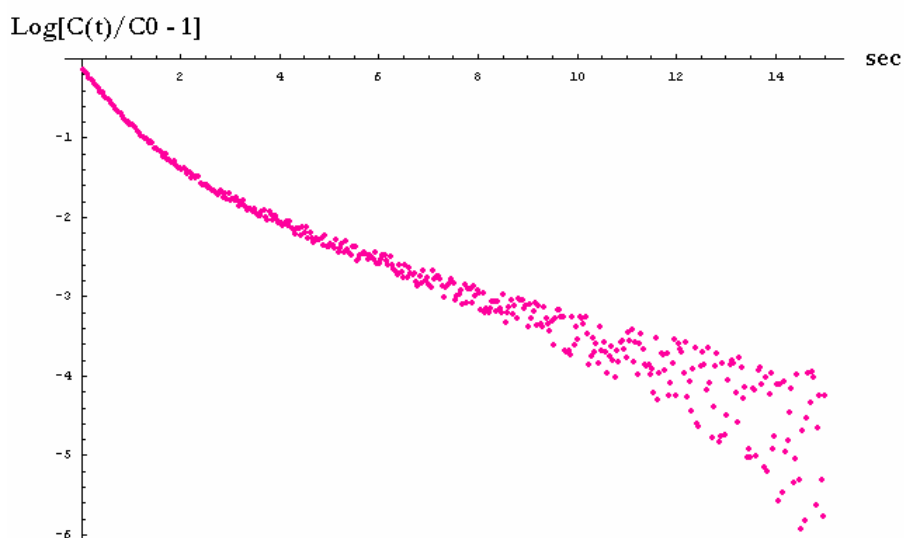
$A_h(s,t)$: 在猜測 s 變數後, 所寫下的矩陣

$Z^\alpha(s)$: 固定某一 α 值下, 我們所獲得的解

故 error1 即為模擬的電容曲線與真實曲線差之和



方程式 (6.11) 做圖所得
圖 (6-4)



把圖 (6-4) Y 軸取對數得知
圖 (6-5)

假設要拿來做模擬測試的電容暫態方程如 (6.11) 所示，我們把此方程式作圖如圖 (6-4)。並且把圖 (6-4) 的 Y 軸取對數如圖 (6-5) 所示，可以看出 3 秒前為一固定斜率的斜直線，3 秒後為另一斜率的斜直線。原因可以由方程式 (6.11) 可以得知，所以未來我們要模擬未知形式的電容暫態曲線時，我們可以如此處理來判斷電容暫態曲線是由幾個指數所組成。

接著我們在固定 α 值 (regularization parameter) 下，先來決定 $A_h(s, t)$ 矩陣大小。在這裡我們定義變數 s 間隔為： $\Delta s = n \Delta t$ ，其中 t (time) 為我們 $A_h(s, t)$ 矩陣中另外一個已知的變數，一開始我們通常會使用大範圍的 s (熱激發速率)，觀察結果後再縮小 s 至合理範圍，同時觀察 error1 值是否逐漸趨近於零。

故首先把 α 值 (regularization parameter) 固定為 1、 n 初始值帶蠻大的 100，利用 Tikhonov regularization method 求解。我們把所得之 $Z_\alpha(s)$ 矩陣對 s (熱激發速率 emission rate) 做圖，如圖 (6-6) 所示。我們可以

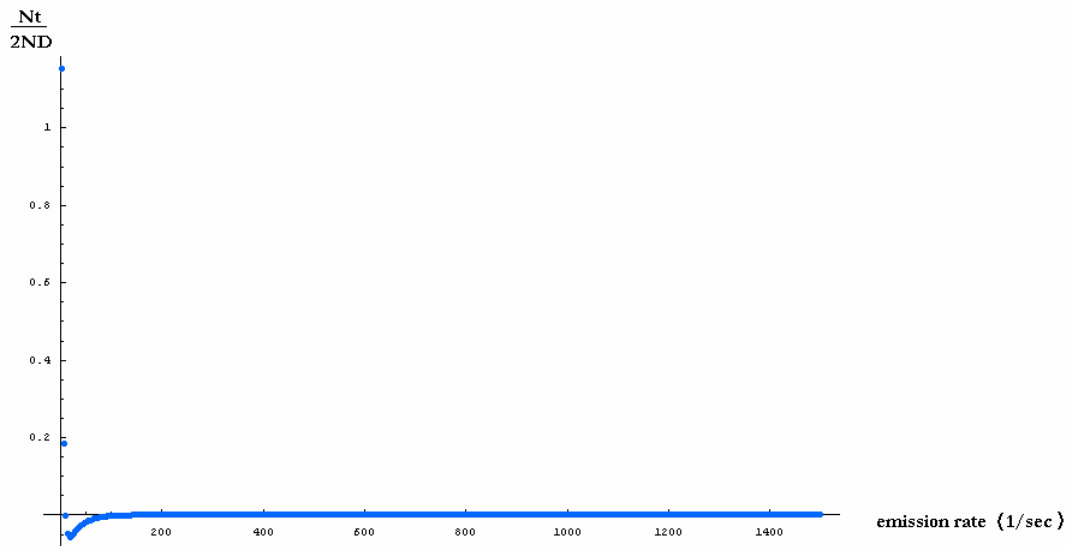
發現當 n 為 100 時計算結果 $error1=9.036$ ，誤差顯然不小，因為此 s 範圍比合理範圍大太多了，故圖中 s 在 150(1/sec)以上幾乎沒有變化，所以我們就要把 n 值縮小為 10，並且 α 值 (regularization parameter) 要保持 1。

當 $n=10$ 時結果如圖 (6 - 7) 所示，此時 $error1 = 0.1416$ ，並且由圖可知 s 在 20 (1/sec)以上幾乎沒有變化，所以我們就把 n 值縮小為 1.25。另外我們發現 $error1$ 值有明顯的變小。

當在 $n=1.25$ 時如圖 (6 - 8) 所示，此時 $error1 =0.0128$ ，並且由圖可知 s 在 10 (1/sec)以上幾乎沒有變化，所以我們就直接把 n 值縮小為 0.5。另外我們發現 $error1$ 值繼續變小。

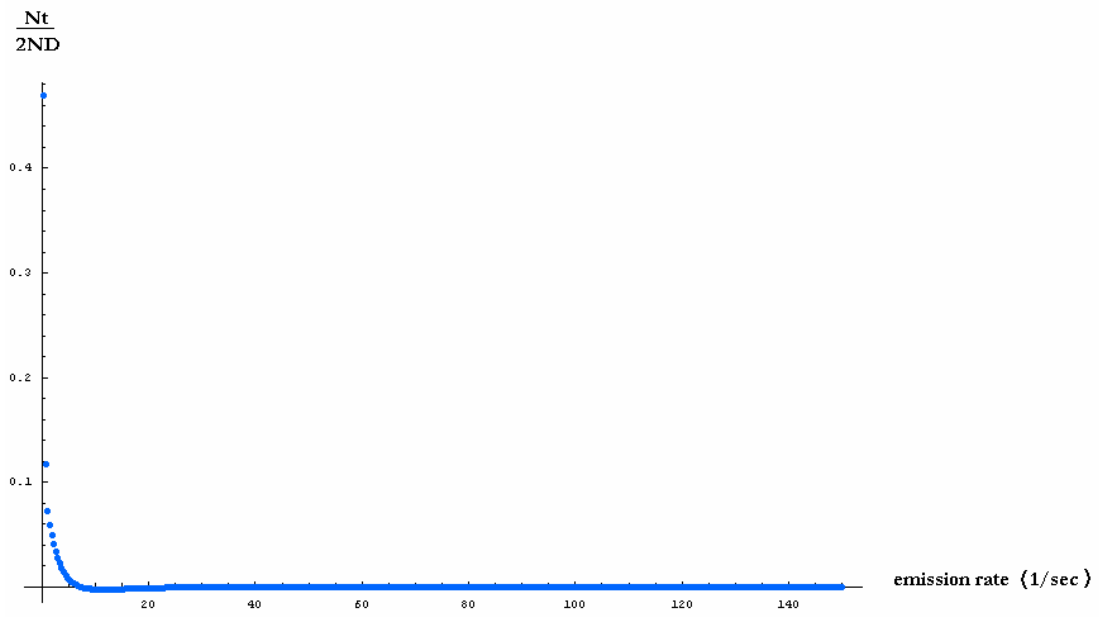
當在 $n=0.5$ 時結果如圖 (6 - 9) 所示，此時 $error1 =0.0115$ ，由圖可知 s 在 4(1/sec)以上幾乎沒有變化，並且 $error1$ 值持續變小。所以我們繼續再把 n 值縮小為 0.2。

當在 $n=0.2$ 時結果如圖 (6 - 10) 所示，此時 $error1 =0.0110459$ ，並且在圖中每一個 s 幾乎都有明顯大於零的值。所以我們就選擇此 s 的範圍，故帶入我們要猜測的 A_h 矩陣中。最後我們來決定，代求之電容暫態方程應該使用之最佳 α 值。圖 (6 - 11) 中虛線為方程式 (6.11)，而實線為 $n=0.2$ ， $\alpha = 1$ 下所得的模擬的結果。



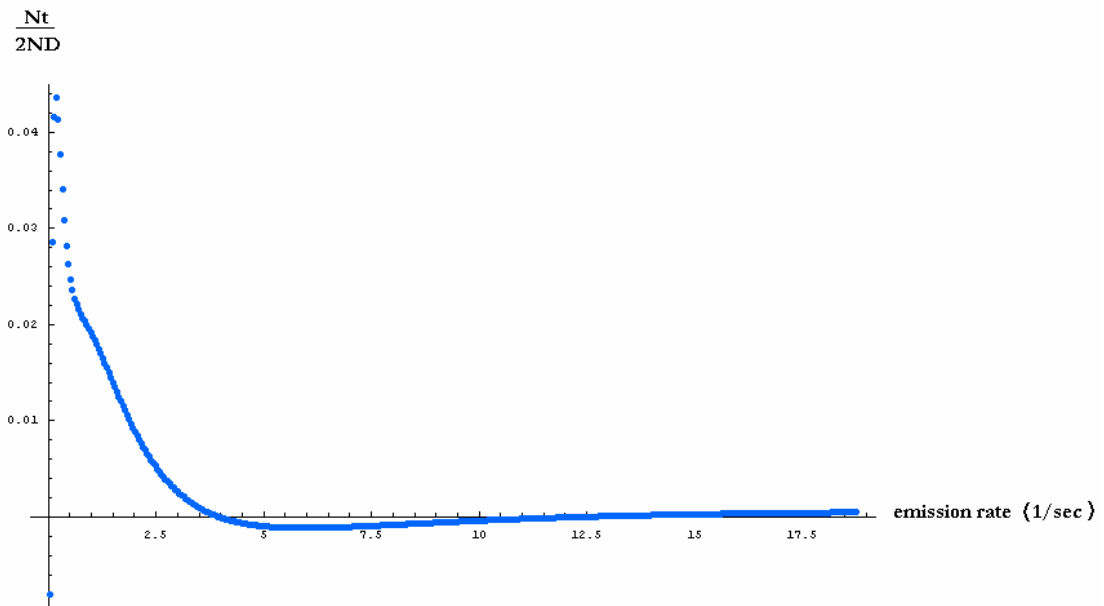
$n=100$ ， $\alpha = 1$ ， $error1=9.036$

圖 (6-6)



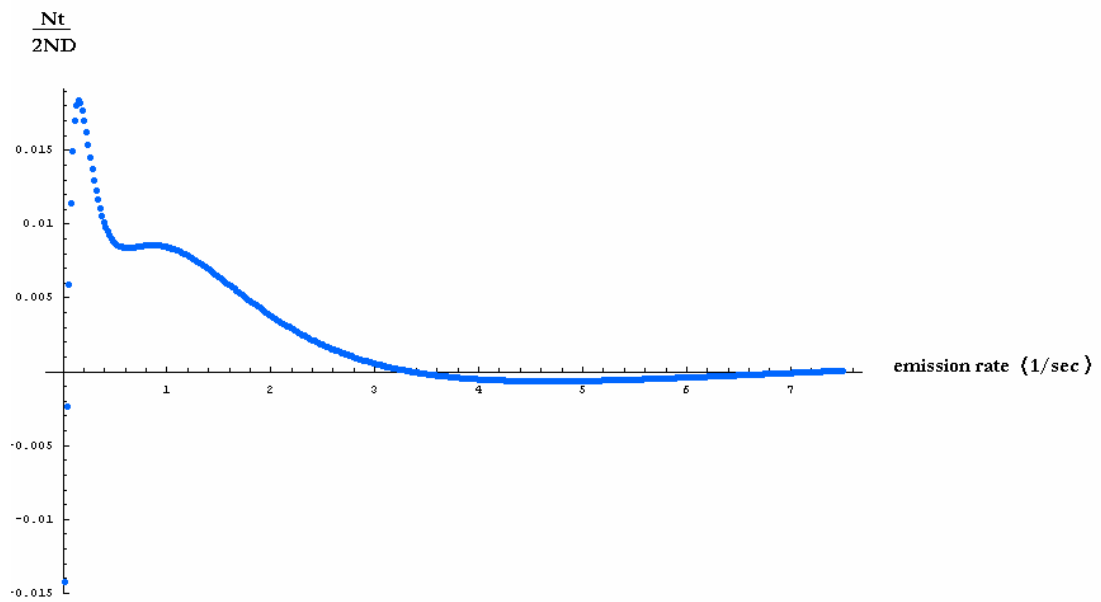
$n=10, \alpha = 1, \text{error1}=0.1416$

圖 (6-7)

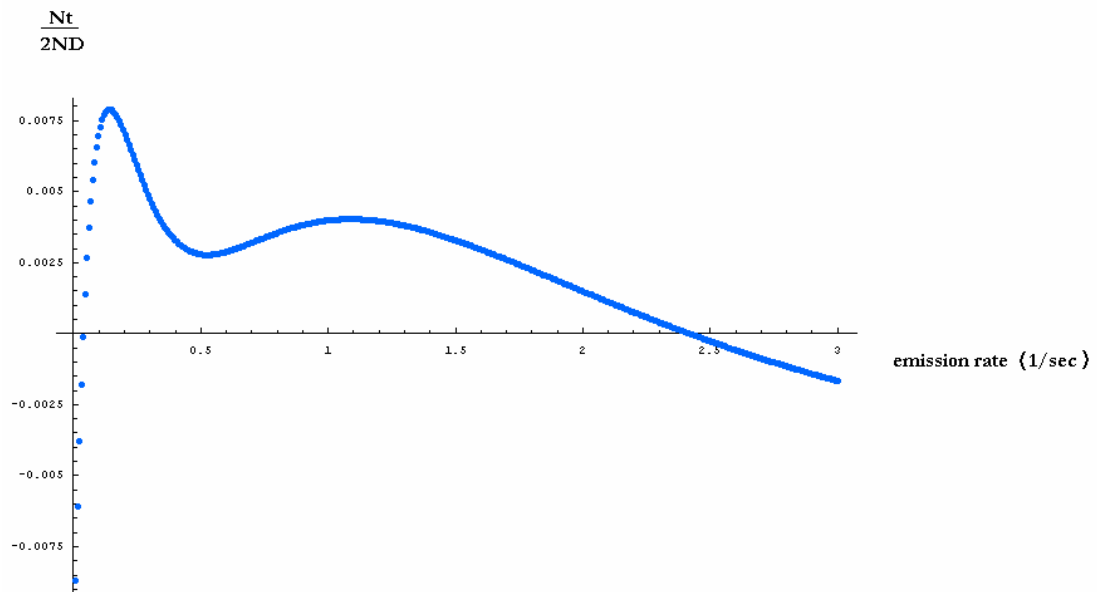


$n=1.25, \alpha = 1, \text{err0r1}=0.0128$

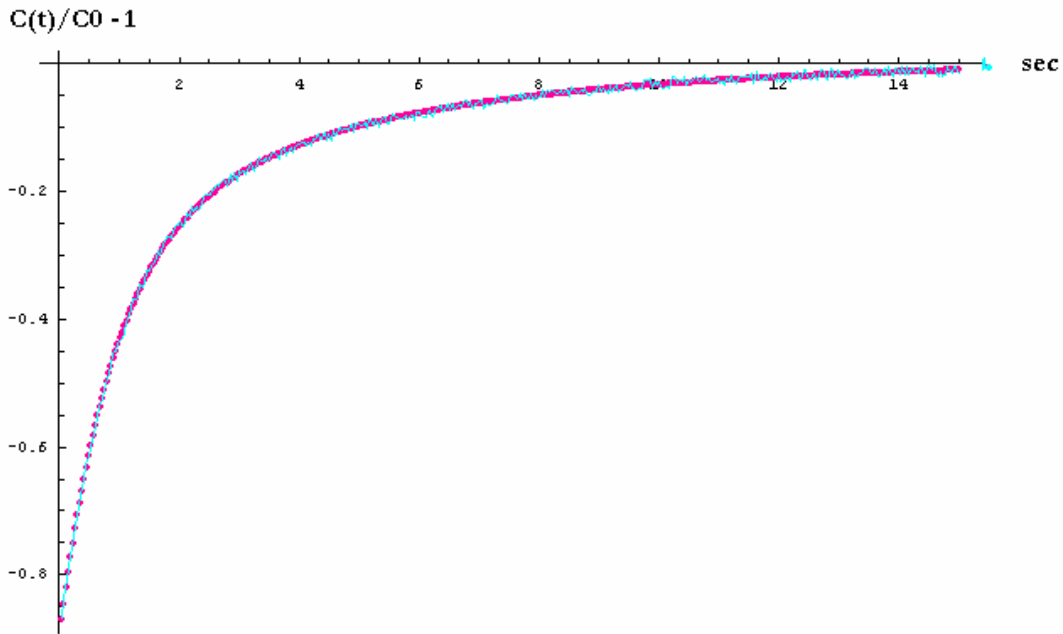
圖 (6-8)



$n=0.5$, $\alpha = 1$, error1=0.0115
圖 (6-9)



$n = 0.2$, $\alpha = 1$, error1=0.0110459
圖 (6-10)



虛線為方程式 (5-11)，而實線為 $n=0.2$ ， $\alpha = 1$ 下所得的模擬的結果
圖 (6-11)

接著我們在固定 n 為 0.2 下，上下調整 α 值得結果如表 (6.1) 所示。除了可以找到最小的 $error1$ 所對應的 α 值為 $1E-23$ 外。如同理論一樣，在 α 大於 $1E-23$ 的條件下，當 α 值變小時我們的所得的 $z^\alpha(s)$ 值就會和真正解 $z(s)$ 更接近，當然此時 $error1$ 就會越來越小。但是 α 值再繼續小下去時，如同 5.3 所討論的範圍一之討論相同， α 值就無法達到消除誤差的功能。我們嘗試帶此 α 值，由模擬結果之 $Z_\alpha(s)$ 反推模擬曲線如圖 (6-12)。其中虛線為方程式，而實線為 $n=0.2$ ， $\alpha = 1E-24$ 下所得的模擬的結果。結果似乎不錯，但是要注意 $Z_\alpha(s)$ 值的物理意義是 $\frac{N_t}{2N_D}$ ，所以 $Z_\alpha(s)$ 值不能超過一，而圖 (6-13) $Z_\alpha(s)$

值與 s 做圖，其中 $Z_\alpha(s)$ 早就遠大於一了。所以雖然圖 (6-12) 中模擬結果不差，但是在物理上式沒有意義的。所以我們定義另一組誤差函數 ($error2$) 來判斷 α 值：

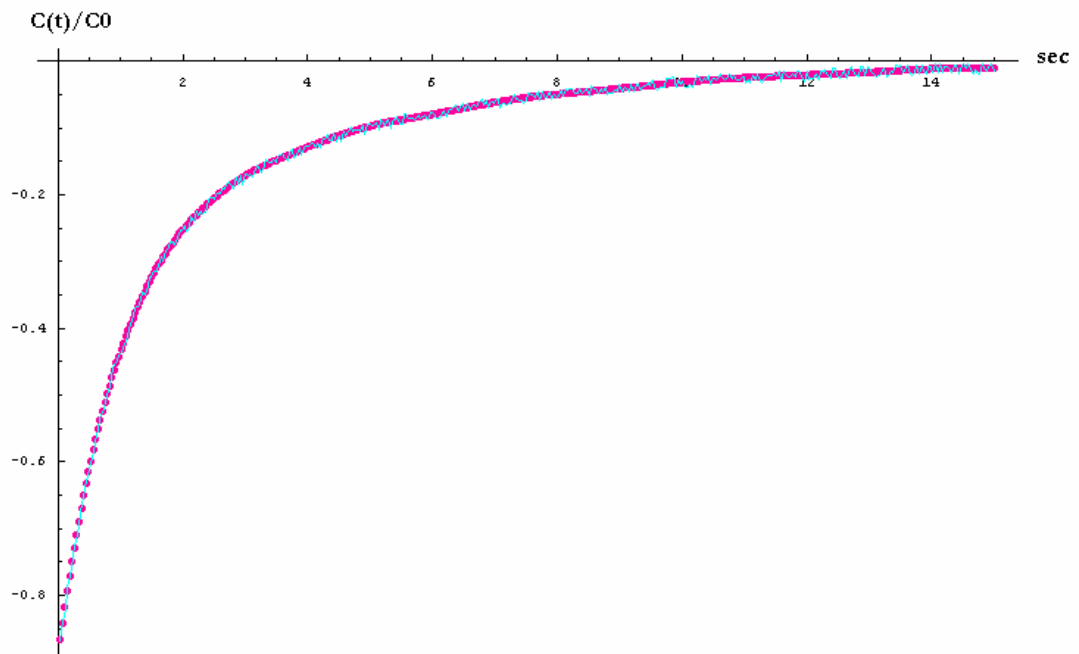
$$error2: \sqrt{(A_h'(s,t)Z^\alpha(s) - \frac{C(t)}{C_0} - 1)^2}$$

在圖 (6-9) 中每一個 $Z_\alpha(s)$ 值對應一個 s ，有在圖中有兩個波峰。故 $error2$ 中的 A_h' 矩陣定義是把所有 s 對應的 $Z_\alpha(s)$ 值疊加到波峰的 s_{max} 身上，而其他非波峰所對應的 $Z_\alpha(s)$ 值我們令為零。在物理上每一個 s 可以看成一個缺陷能階 (trap level)，所以缺陷能階不應該如 $error1$ 中所假設為連續的。故接著我們由找尋 $error2$ 的最小值來決定 α 值。

α 值	Error1		
10	0.0137	1E-14	0.01064
1	0.01105	1E-15	0.01063
0.1	0.01078	1E-16	0.01062
0.01	0.01074	1E-17	0.01057
1E-3	0.01073	1E-18	0.005309
1E-4	0.01073	1E-19	0.0105275
1E-5	0.01072	1E-20	0.0105216
1E-6	0.01072	1E-21	0.0105091
1E-7	0.01071	1E-22	0.0105041
1E-8	0.0107	1E-23	0.0104998
1E-9	0.0107	1E-24	0.0105697
1E-10	0.0107	1E-25	0.0117448
1E-11	0.01069	1E-26	0.0438536
1E-12	0.01068		
1E-13	0.01066		

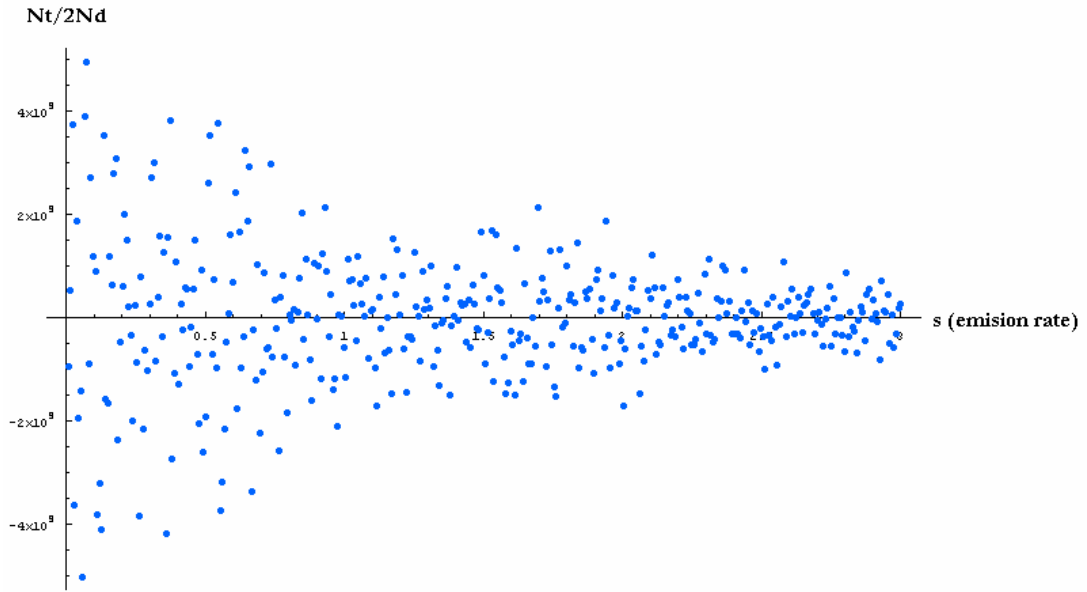
固定 n 為 0.2 下，上下調整 α 值

表 (6.1)



虛線為方程式，而實線為 $n=0.2$ ， $\alpha = 1E-24$ 下所得的模擬的結果。

圖 (6-12)



$n=0.2, \alpha = 1E-24$ 下所得的模擬的待求矩陣 $Z_\alpha(s)$ (物理意義是 $\frac{N_t}{2N_D}$)

圖 (6-13)

我們在固定 n 為 0.2 下，上下調整 α (regularization parameter) 值並且計算 error2 值。結果如表 (6.2)，不管我們 α 是用何值，當我們以 s (emission rate) 為 X 軸， $Z[s]$ 為 Y 軸，我們都可以得到兩個明顯的波包，這與我們的答案方程式 (6.11) 恰好相符，為兩個指數所合成的。S1 皆定義為比較小的 s (emission rate) 波包之峰值，而 $Ns1$ 則為此波包底下之面積。而 S2 定義為比較大的 s (emission rate) 波包之峰值， $Ns2$ 是另一波型底下面積。

如同方程式 (6.7) 討論的，當我們的 α (regularization parameter) 越小時，所獲得的解會越接近正確解 (方程式(6.11))，但是 α (regularization parameter) 取太小時 $Ns1$ 與 $Ns2$ 的值會大於正確值，造成我們的模擬曲線與真實曲線誤差增加。所以最後我們根據 error2 來判斷 α (regularization parameter) 選 0.01 時，擁有一個最小的 error2 = 0.2793。故最後我們在 $n=0.2, \alpha = 0.01$ 下得到模擬的方程式為：

$$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.318e^{-0.195t} - 0.69e^{-1.17t} \dots\dots(6.12), \text{ 我們比較解答方程式 (6.11) 得 S1}$$

誤差約 13%、S2 誤差約 4%、 $Ns1$ 誤差約 6%、 $Ns2$ 誤差約 15%。

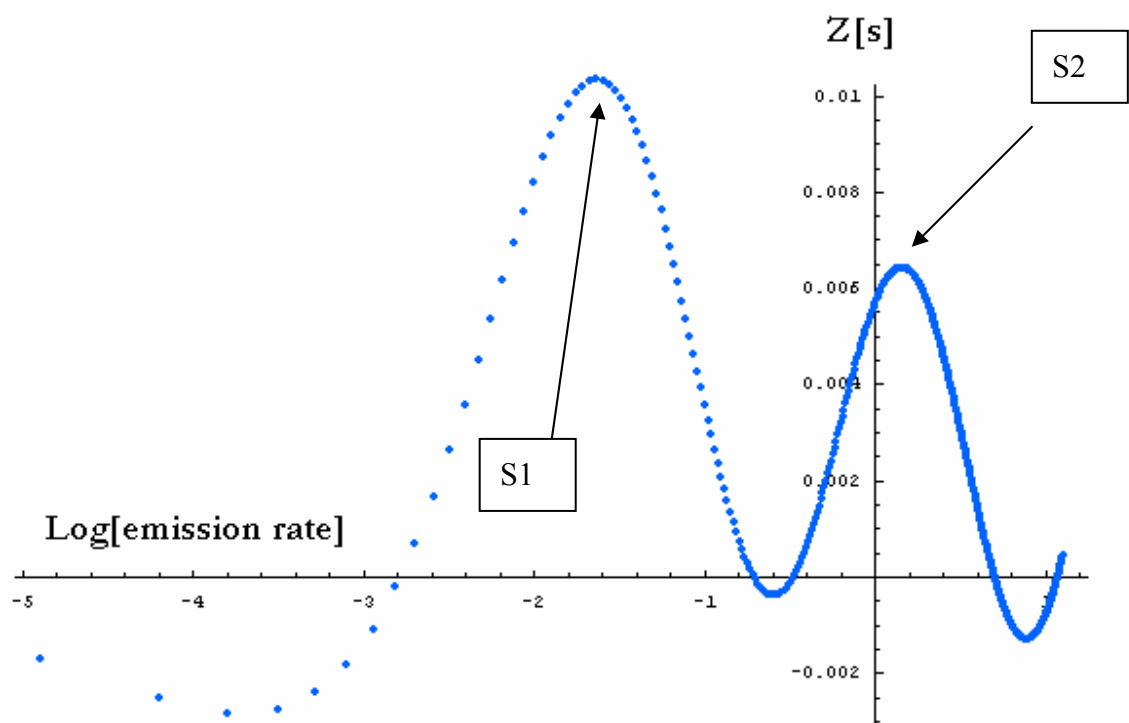
圖 (6-14) X 軸為 $\text{Log}[\text{emission rate}]$ ，Y 軸為 $Z[s]$ ，並且我們發現 S2 附近解析度遠比 S1 高，這種現象也反映在前述的誤差中，而這就是選取相同 Δs 下所產生的問題。圖 (6-15) 中虛線為方程式 (6.11)，而實線為 $n=0.2, \alpha = 0.01$ 下所得的模擬的結果。圖 (6-16) 虛線為方程式 (6-11)，而實線為所得的模擬的結果方程式 (6-12)。可以觀察到實線與虛線有些平移，這是因為我們為了寫出模擬方程 (6.12)，必須把圖 (6-14) 的波形近似為 delta 函數所

造成的。另外還有幾點為負值的解，我們令為零（與濃度有關的解不可能為負值）。因此我們使用 Tikhonov regularization method 時 $Z[s]$ 會比較不準，我們有必要採用平均的方式，或是利用迭代法收斂以提高準確度。

α	Error2	S1	Ns1	S2	Ns2
1	1.19913	0.1425	0.3184	1.0875	0.66856
0.1	0.626378	0.165	0.32	1.1775	0.693
0.03	0.32211	0.1875	0.3175	1.17	0.686
0.01	0.2793	0.195	0.318	1.17	0.69
0.0075	0.309919	0.195	0.32	1.17	0.695
0.005	0.297984	0.2025	0.323319	1.1775	0.701469
0.001	0.379119	0.2175	0.3379	1.215	0.72835

n 為 0.2 下，上下調整 α

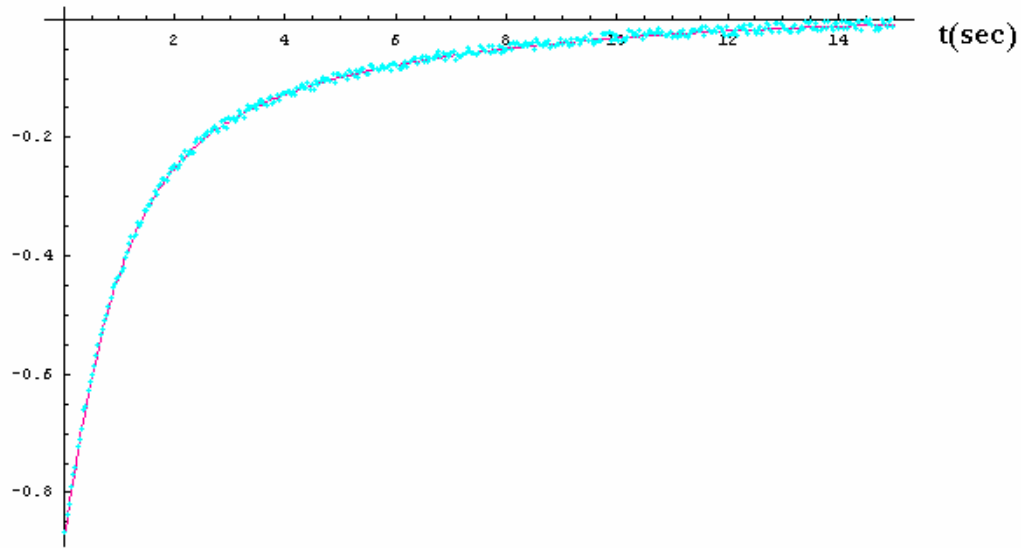
表 (6.2)



當 $n=0.2$ ， $\alpha = 0.01$ 下的模擬結果

圖 (6-14)

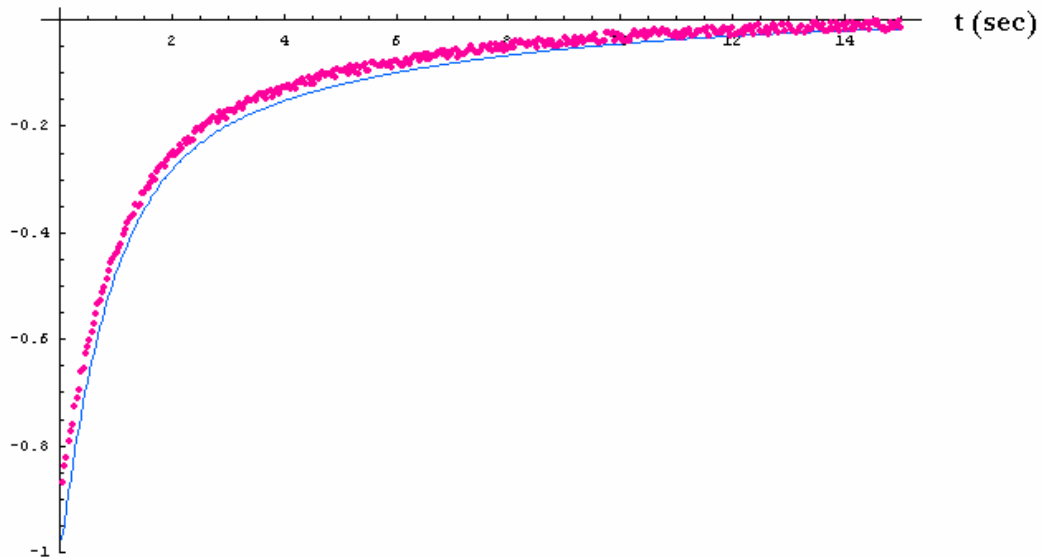
$C(t)/C_0 - 1$



虛線為方程式 (5-11)，而實線為 $n=0.2$ ， $\alpha = 0.01$ 下所得的模擬的結果
圖 (6-15)



$C(t)/C_0 - 1$



虛線為方程式 (6-11)，而實線為所得的模擬的結果方程式 (6-12)
圖 (6-16)

第七章 共軛梯度法 (Conjugate gradient method)

7.1 導論

除了前一節我們介紹的 Tikhonov regularization method 外，求解線性聯立方程組有兩大類方法：(1) 直接解法 (direct method) 如高司消去法，通常用在小型結構問題。(2) 迭代法 (iterative method) 通常適用於大型結構問題中。在各種迭代法中，因為共軛梯度法除了擁有較快的收斂速度外，其求解的值域並不會受到特別限制，所以共軛梯度法也是目前處理無約束最佳化問題 (unconstrained optimization problem) 中最常被使用的方法之一 [35, 43]。

值得一提的是當問題結構較小時，迭代法的運算結果不會比直接法好甚至更差。因為我們代求的方程式為一大結構的問題，所以我們使用迭代法中的共軛梯度法 (Conjugate gradient method)。迭代法的原理就是先假設一個初始值，開始進行迭代，在觀察其收斂情形，若收斂的狀況未達要求則繼續迭代修正之，一直到達收斂要求為止，所以迭代法所得到的解是達到收斂條件的近似解。我們將會使用 Mathcad 軟體中的 "genfit" 指令，此指令即使用共軛梯度法 (Conjugate gradient method) 來 fitting 曲線的函數。

當然使用共軛梯度法 (Conjugate gradient method) 來 fitting 代求的電容暫態方程式會有兩個問題。(1) 因為我們不知到此電容暫態方程為幾個時間常數 (lift time) 所構成的，所以會讓我們無法去定義未知數來求解。比如說當我們的曲線為單一時間常數所貢獻的， $\frac{C(t)}{C_0} - 1 = A \text{Exp}[-\frac{t}{\tau}]$ 那我們的未知數即為 A 與 τ 。如果為兩個時間常數所貢獻的，

$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = A \text{Exp}[-\frac{t}{\tau_1}] + B \text{Exp}[-\frac{t}{\tau_2}]$ 那我們的未知數即為 A、B、 τ_1 與 τ_2 。所以到底需要幾個時間常數 (lift time)，才能夠成暫態曲線是使用共軛梯度法求解電容暫態方程時，最重要的問題。(2) 迭代法中需要一個會收斂的初始值，初始值該如何設定？不同的初始值將會收斂到不相同的解，到底哪一個解才是最合理解？

第一個問題我們將會先用 Tikhonov regularization method，先確定到底有幾個時間常數 (lift time) 後，再使用共軛梯度法 (Conjugate gradient method) 求解。而第二個問題，也是代入 Tikhonov regularization method 所得的解當成共軛梯度法的初始值，進行迭代。在下一節中，我們如同 Tikhonov regularization method 去模擬已知方程的電容暫態方程，並且模擬完全相同的方程式 (6.11) 式。我們將會比較兩種方法的正確性。

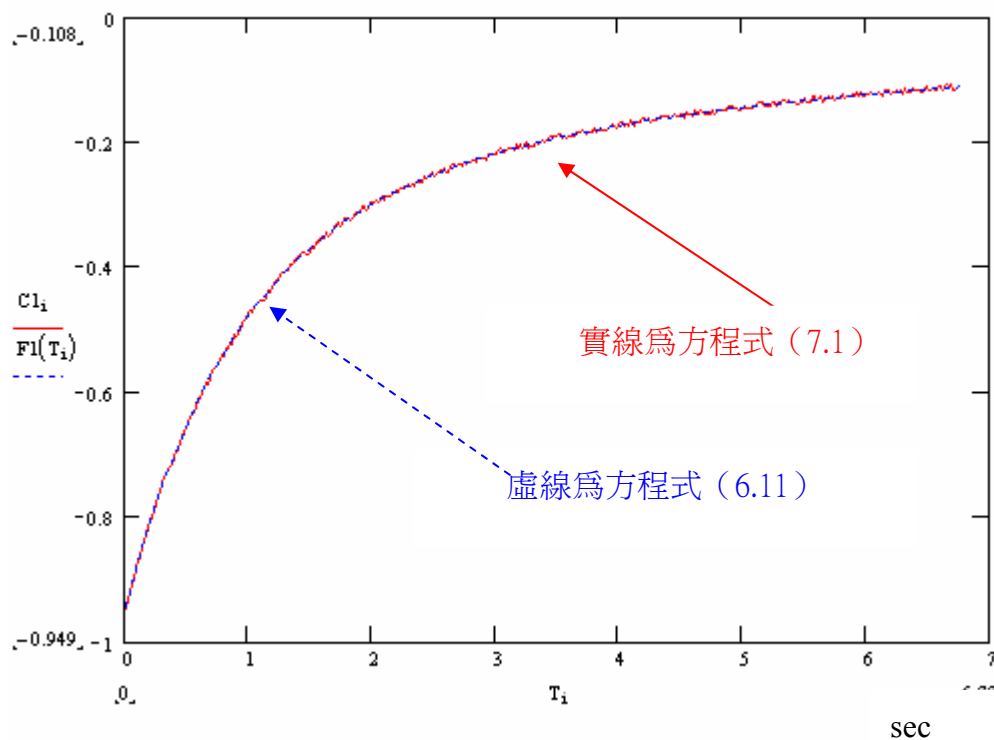
7.2 模擬已知方程的電容暫態曲線

$$\frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.3e^{-0.225t} - 0.6e^{-1.125t} + 1\%(noise).....(6.11)$$

$$0.0375 \leq t \leq 200 * 0.0375 \quad \Delta t = 0.0375$$

我們帶入 6.4 節中 Tikhonov regularization method 的解 (6.12) 式，當迭代的初始值，我們得到解為： $\frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.358e^{-0.296t} - 0.539e^{-1.33t}.....(7.1)$ 。

圖 (7-1) 中，實線為模擬結果方程式 (7.1)，虛線為正確解 (6.11) 式。



實線為模擬曲線，虛線為正確解

圖 (7-1)

$$\text{初始解：} \frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.318e^{-0.195t} - 0.69e^{-1.17t}.....(6.12)$$

$$\text{迭代法收斂的解為：} \frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.358e^{-0.296t} - 0.539e^{-1.33t}.....(7.1)$$

$$\text{正確解為：} \frac{C(t)}{C_0} - 1 = -0.3e^{-0.225t} - 0.6e^{-1.125t} + 1\%(noise).....(6.11)$$

我們比較上面三式，可以清楚的發現 Conjugate gradient method 把 Tikhonov regularization method 解收斂到一個更正確的最佳值。

7.3 比較 Tikhonov regularization method 與 Conjugate gradient method

由表 (7.1) 兩種方法所得到的解相差不遠，由表 (7.2) 誤差大小來看，在本例中使用 Conjugate gradient method 所獲得的解比較接近正確解，同時我們也證明了 Conjugate gradient method 是可以使用的。

	S1	Ns1	S2	Ns2
Tikhonov regularization method	0.195	0.318	1.17	0.69
Conjugate gradient method	0.25	0.305	1.147	0.584
正確解	0.225	0.3	1.125	0.6

比較 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method
表 (7.1)

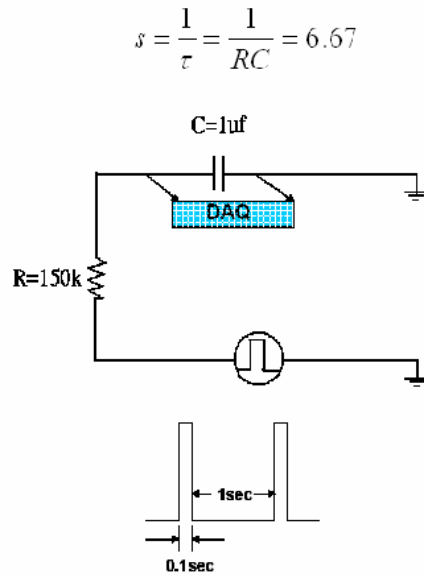
	S1 誤差	Ns1 誤差	S2 誤差	Ns2 誤差
Tikhonov regularization method	13%	6%	4%	15%
Conjugate gradient method	11.11%	1.67%	1.96%	2.7%

比較 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method
誤差
表 (7.2)

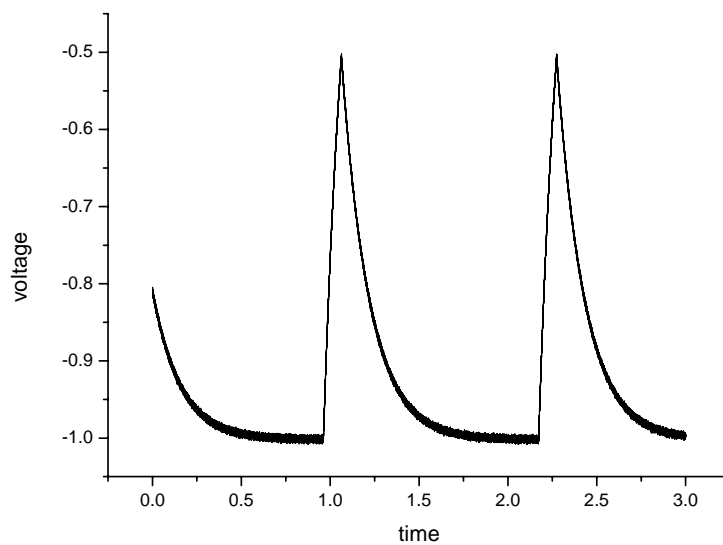
所以在之後的模擬中，我們會先使用 Tikhonov regularization method 決定曲線方程的形式，並且拿 Tikhonov regularization method 的解當初始值，帶入 Conjugate gradient method 中開始迭代而得出最佳解。

第八章 模擬 RC 電路

在這一章中，如圖一所示我們將使用一個簡單的 RC 電路， $R=150\text{K}$ 歐姆、 $C=1\ \mu\text{f}$ ，並且用 DAQ 卡擷取出訊號如圖 (8-2)。接著我們將使用 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 來反推此 RC 電路的時間常數 ($\tau = \frac{1}{RC}$)，來檢測 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 的正確性。



使用 DAQ 卡擷取 RC 訊號的系統簡圖
圖 (8-1)

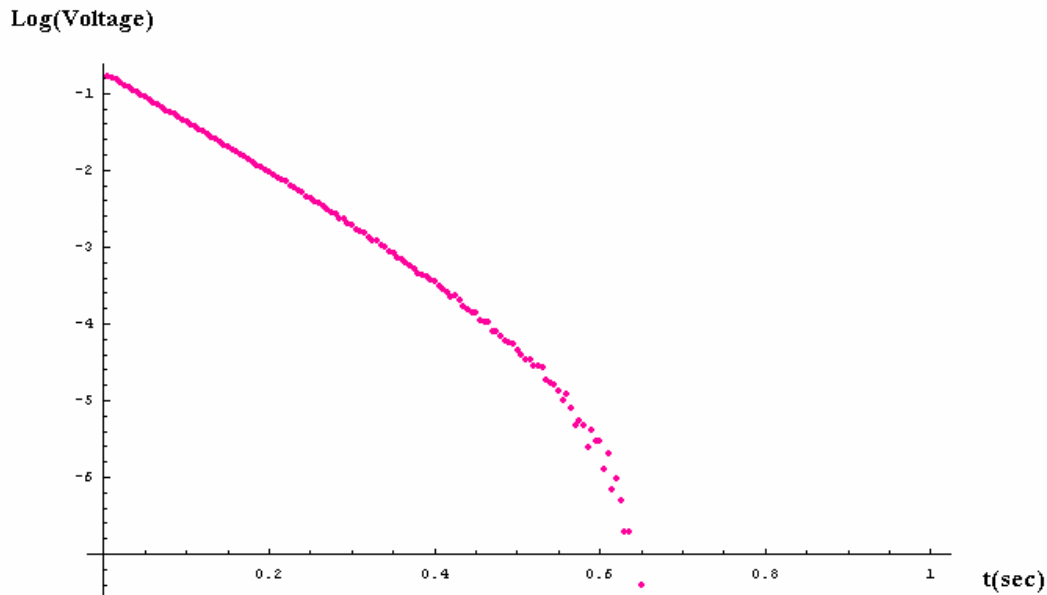


DAQ 卡擷取到的 RC 電路訊號

圖 (8-2)

8.1 Tikhonov regularization method

我們先決定此 RC 電路的方程式形式。由圖 (8-3) (圖 (8-2) Y 軸的電壓值 $V(t)$ 取對數) 所示，幾乎為一條斜直線。故我們可以說此 RC 電路方程為單一時間常數 (time constant) 所構成，其函數形式： $V(t) = V_0 e^{-st}$ ， $s = \frac{1}{\tau}$ 。



把圖 (8-2) Y 軸的電壓值 $V(t)$ 取對數

圖 (8-3)

由 Tikhonov regularization method，我們知道要先決定 A 矩陣中合理的 s ($\frac{1}{\tau}$) 範圍。在先固定 α (regularization parameter) 為 0.1 下，我們由 error1 的值來決定 s 的範圍。如表 (8.1) 所示，其中 $\Delta s = n * \Delta t$ ， Δt 即為量測的時間間隔 ($\Delta t = 0.005 \text{ sec}$)。我們可以發現當 $n=15$ 時，error1 的值為最小，故我們決定 $\Delta s = 15 * 0.005 = 0.075 \text{ sec}$ 。

接著我們在固定 $\Delta s = 0.075 \text{ sec}$ 下，改變一開始定義的 α (regularization parameter) 並且上下調整，藉由 error2 來決定最合適的 α 值。由表 (8.2) 可知 $\alpha = 3$ 時，所對應到的 error2 為最小值。此時我們由 $\alpha = 3$ 與 $\Delta s = 0.075 \text{ sec}$ 可算出近似解如圖 (8-4) 所示。由圖可以得知 s ($\frac{1}{\tau}$) 值為 $5.55 (1/\text{sec})$ ， V_0 為 0.5286 。圖 (8-5) 實線為模擬所得之曲線，虛線為量測到的 RC 曲線。我們把圖 (8-4) 結果近似為 delta function，可以近似寫出模擬結果反推的 RC 曲線方程。圖 (8-6) 虛線為量測到的 RC 曲線，而實線方程式： $V(t) = 0.5286 e^{-5.55t}$ 。

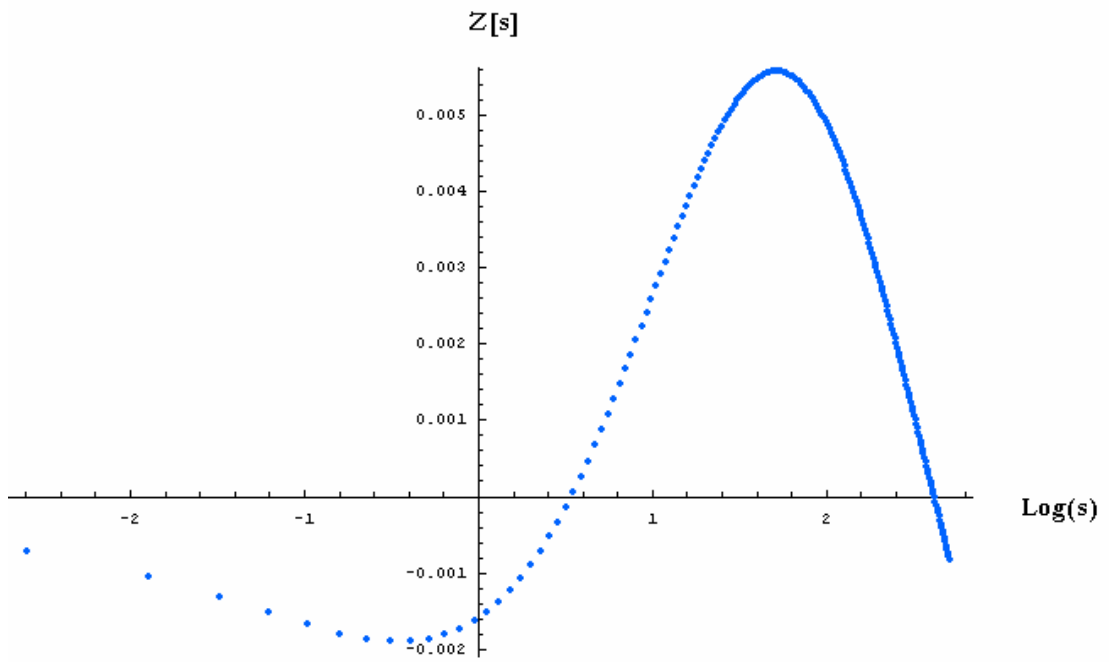
n	Error1
100	0.00031
50	0.000262
30	0.0002268
20	0.00020861
19	0.000205351
18	0.00020186
17	0.00019864
16	0.000196351
15	0.000195992
14	0.00019878
13	0.0002058
12	0.000217

固定 α 為 0.1 下，我們由 error1 的值來決定 s 的範圍
表 (8.1)



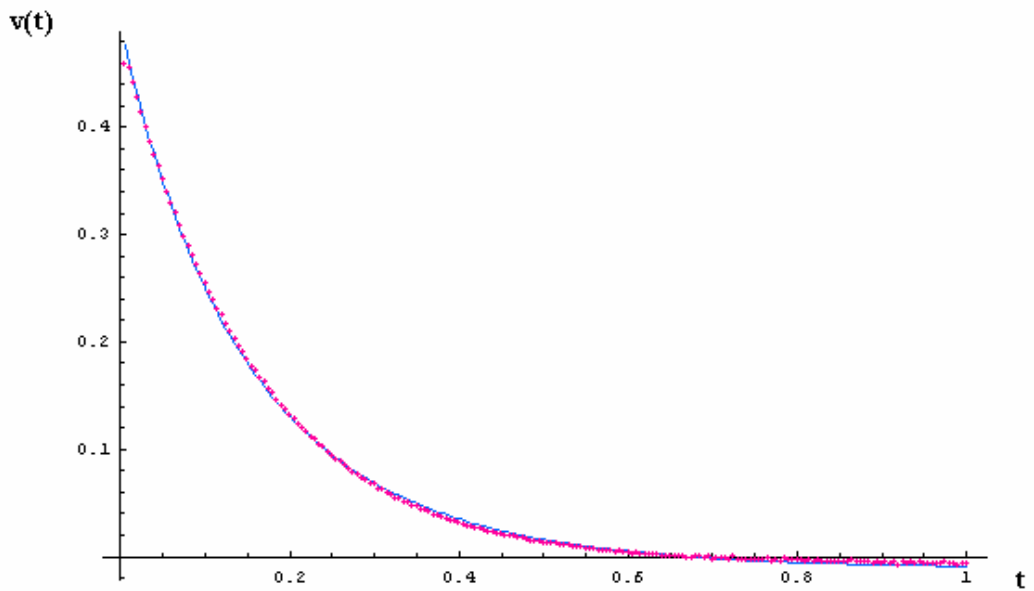
α	Error2	S	V_0
10	0.247811	5.175	0.525
5	0.179709	5.3999	0.5229
4	0.166805	5.475	0.52441
3	0.162588	5.55	0.5286
2	0.172495	5.625	0.537298
1	0.194987	5.775	0.55448
0.5	0.228422	5.85	0.5688
0.1	0.238594	6.075	0.5854
0.01	0.245483	6.15	0.57916

在固定 $\Delta s=0.075\text{sec}$ 下，改變一開始定義的 α 並且上下調整
表 (8.2)



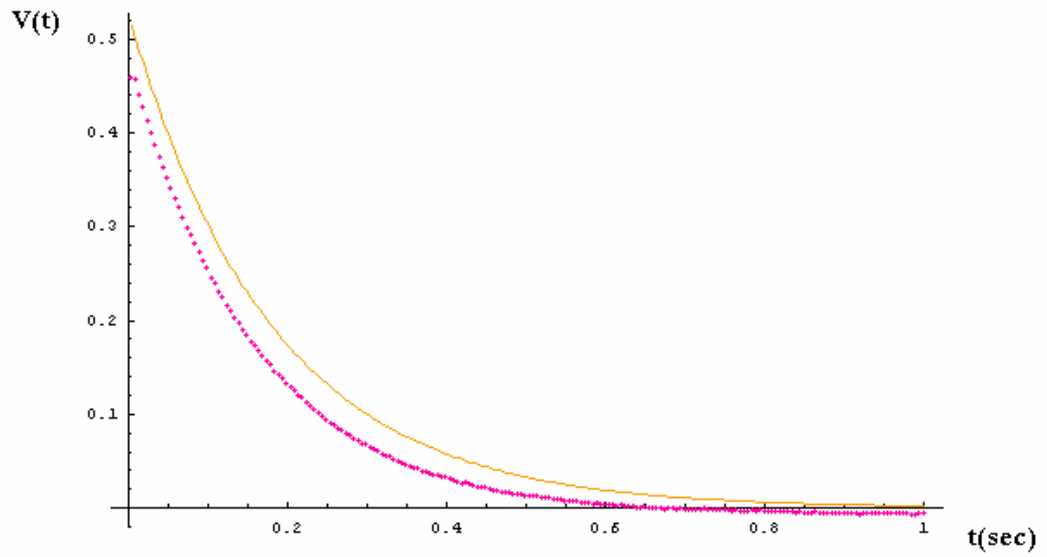
在 $\alpha=3$ 與 $\Delta s=0.075\text{sec}$ 下的模擬結果

圖 (8-4)



實線為模擬所得曲線，虛線為量測到的 RC 曲線

圖 (8-5)



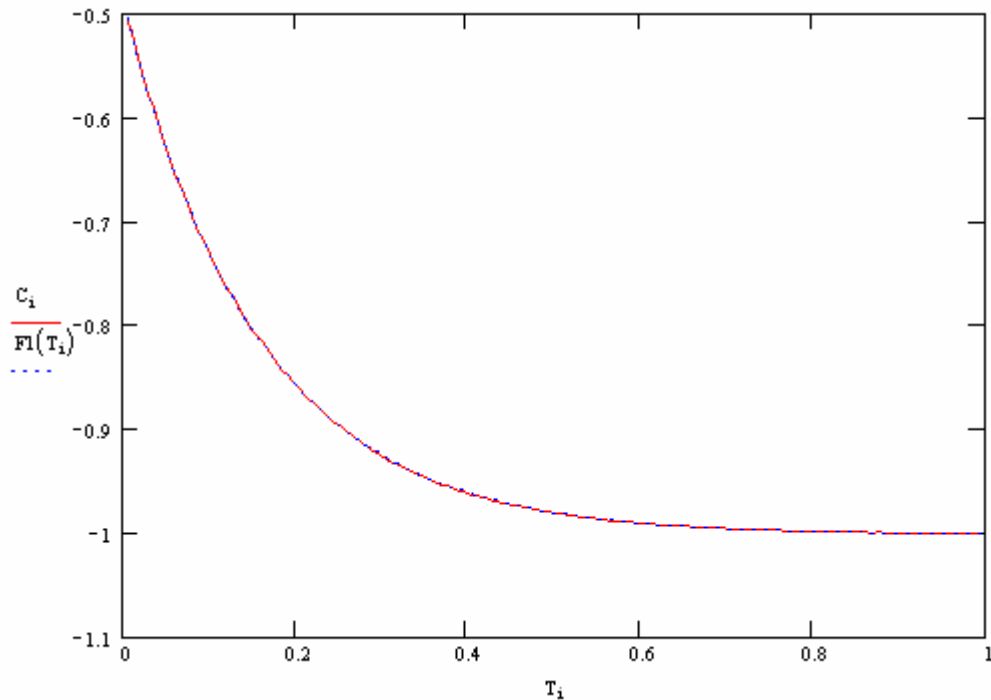
虛線為量測到的 RC 曲線，而實線方程式： $V(t) = 0.5286e^{-5.55t}$

圖 (8-6)



8.2 conjugate gradient method

由於我們已知 RC 電路方程為單一指數所構成函數形式： $V(t) = V_0 e^{-st}$ 。所以我們可以很容易的利用 conjugate gradient method，在設定一個會收斂的初始值下，我們獲得解為： $V(t) = 0.513_0 e^{-6.376t}$ 。圖 (8-7) 中，實線為量測曲線，曲線為 conjugate gradient method 所獲得的解。



實線為量測曲線，曲線為 conjugate gradient method 所獲得的解
圖 (8-7)

我們比較 Tikhonov regularization method 所獲得的解 $V(t) = 0.5286e^{-5.55t}$ 與 conjugate gradient method 所獲得的解 $V(t) = 0.513_0 e^{-6.376t}$ 。與我們由已知電阻電容值換算出來的時間常數 $\tau = 6.75$ 比較，很明顯的在此例中 conjugate gradient method 所獲得的解比較正確。接著比較兩種方法所獲得的 V_0 值，我們發現兩者其實相差不遠。因此以後我們會同時使用迭代法 conjugate gradient method 與 Tikhonov regularization method 來 fitting 我們代求的電容暫態方程式。

8.3 比較 Tikhonov regularization method 與 Conjugate gradient method

由表 (8.3) 兩種方法所得到的解相差不遠，其中 V_0 是 $V(t)$ 當 $t = 0$ 時的值。由表 (8.3) 誤差大小來看，使用 Conjugate gradient method 所獲得的解比較接近正確解。因此我們也可以說在已知 RC 大小的 RC 電路暫態模擬測試中，共軛梯度法有迭代出一個更趨近於正確解的收斂值。

	S	V_0
Tikhonov regularization method	5.55	0.5286
Conjugate gradient method	6.376	0.513
正確解	6.67	0.49198

比較 Tikhonov regularization method 與 Conjugate gradient method
表 (8.3)

	S 誤差	V_0
Tikhonov regularization method	16.792%	7.4%
Conjugate gradient method	4.4%	4.27%

比較 Tikhonov regularization method 與 Conjugate gradient method 誤差
表 (8.4)

第九章. 電容暫態值 (Capacitance transient)

9.1 導論

不管是 Tikhonov regularization method 或者是共軛梯度法 (conjugate gradient method) 使用於 Laplace DLTS 運算時，如果我們想要獲得正確的物理量資訊如活化能 (Et)、捕獲截面積 (cross section)、缺陷濃度 (trap concentration)，就必須先得到正確無誤的電容暫態值 (capacitance transient)，所以我們將在這一節中討論一些影響電容暫態值 (capacitance transient) 的一些變因。

9.2 量測暫態電容之溫度

因為要先確認模擬的方法是否有錯，所以我們會先使用典型的 DLTS 法找出活化能 (Et)、捕獲截面積 (cross section)，再帶入多數載子的熱激發速率方程式中： $e_n = \gamma \sigma T^2 \text{Exp}[\frac{-E_t}{kT}] \dots (9.1)$ 。我們可以根據方程式 (9.1) 先預估在幾 K 時會有電容暫態訊號出現，並且根據方程式 (4.2) 可知會被我們用 DAQ 卡，擷取到的合理熱激發速率 (emission rate) 範圍比較，就可以決定該在哪些溫度下量測電容暫態值。

我們舉 GaAs 中有名的 EL2 缺陷當例子，EL2 的活化能 (Et) 為 0.82 電子伏特，捕獲節面積 (emission rate) 為 $4.7E-16 \text{cm}^2$ ，故根據方程式 (4.2) 300K 到 450K 的熱激發速率 (emission rate) 如表 (9.1) 所示。假設我們總共擷取 400 個點，時間間隔 $\Delta t = 0.3 \text{ sec}$ 。又根據方程式 (4.2) 擷取到的合理熱激發速率 (emission rate) 範圍為： $\frac{1}{3\Delta t} \geq s \geq \frac{1}{400\Delta t} \Rightarrow 1.11 \geq s \geq 0.00278$ 。故我們應該會在 330k 與 400k 中量得有關於 EL2 的電容暫態值訊號。

溫度 (k)	300K	310	320	330	340
熱激發速率 (1/sec)	0.00171558	0.00050867	0.001412	0.00369134	0.00914
350K	360	370	380	390	400K
0.0215066	0.0483524	0.104207	0.215995	0.43186	0.83513
410	420	430	440	450	
1.56576	2.85233	5.05873	8.75	14.78	

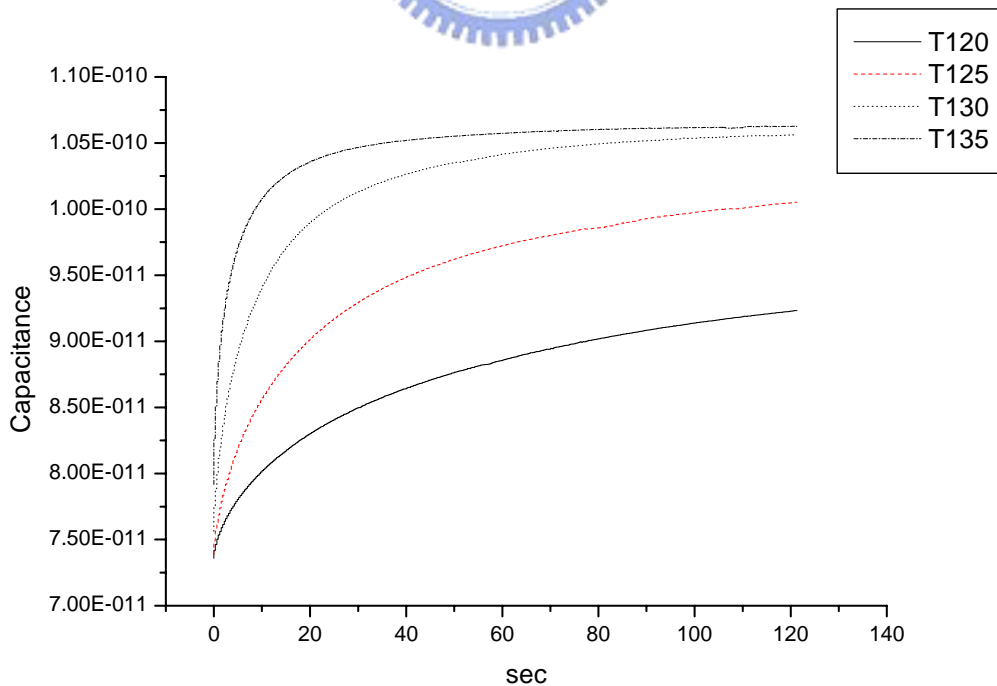
EL2 center 與溫度相關的熱激發速率
表 (9.1)

9.3 時間間隔 (Δt) 與雜訊

由表 (9.1) 我們可以發現熱激發速率 (emission rate) 隨著溫度劇烈的改變，並且對於 Tikhonov regularization method 或者是共軛梯度法

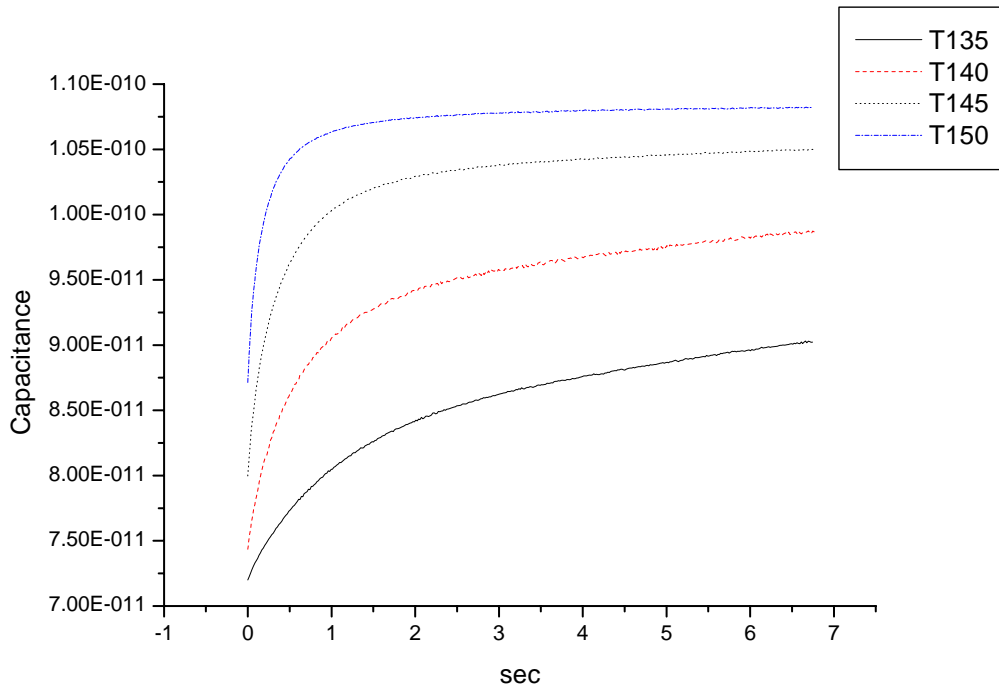
(conjugate gradient method) 在模擬電容暫態曲線時，每一個擷取到的電容值都是一個聯立方程式的常數項。所以如果希望獲得正確的物理資訊時，如何降低系統雜訊與有效的時間間隔選取變的很重要。對於降低雜訊部分，我們採測量測數次平均之，可以降低雜訊的影響。另外我們也提高雜質參雜濃度，讓 ΔC ($C(t=\infty) - C(t=0)$) 值變大，這樣系統的雜訊就會相對的減小，當然提高雜質參雜濃度會讓塊材缺陷特性改變，比如說與雜質有關的 DX 缺陷中心就容易出現。

接著我們討論時間間隔 (Δt) 該如何選取，才能獲得完整的電容暫態曲線值。由於我們是使用 HP4194 來擷取訊號，所以 Δt 有三種選擇，分別是 $\Delta t_1 = 0.3\text{sec}$ 、 $\Delta t_2 = 0.0169\text{sec}$ 、 $\Delta t_3 = 0.0033\text{sec}$ ，並且考慮到模擬曲線時電腦運算能力與時間，我們不管 Δt 為何下固定每一次量測都擷取 400 個點 (此時數學上就是模擬 400×400 的矩陣)。假設電容暫態曲線在小於 1.3sec 內 $C(t) = C(t=\infty)$ 時，我們選取最小的時間間隔 Δt_3 。若電容暫態曲線在 6.76sec 附近 $C(t) = C(t=\infty)$ 時，我們選取較大的時間間隔 Δt_2 。若電容暫態曲線在大於 20sec 時 $C(t) = C(t=\infty)$ 時，我們選取最大的時間間隔 Δt_1 。如同圖 (9-1) 為 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材在 -1.5V 填充 10 秒後，回到 -2V 開始量測，並且每隔 $\Delta t_1 = 0.3\text{sec}$ 擷取一次訊號，隨著溫度上升到 135K 時，我們縮短時間間隔為 Δt_2 如圖 (9-2) 所示。同樣的當溫度繼續上升到 150k 時，縮短時間間隔為 Δt_3 如圖 (9-3) 所示。



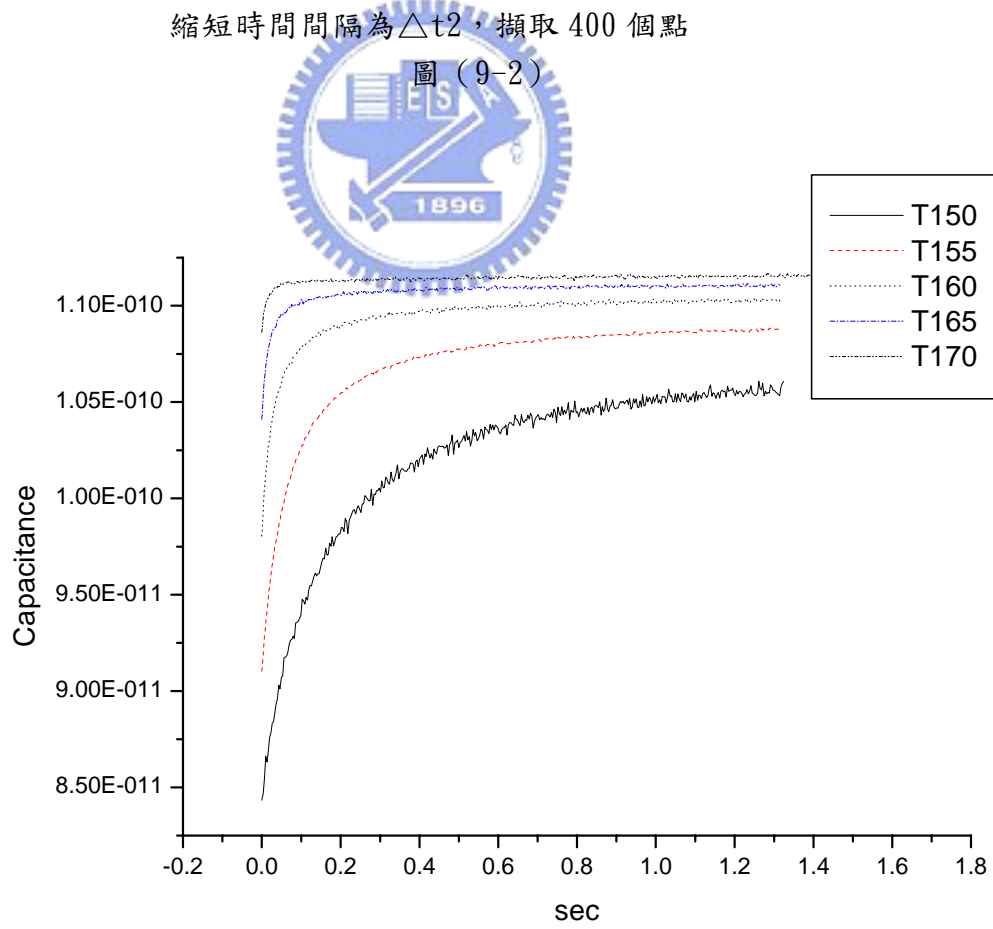
$\Delta t_1 = 0.3\text{sec}$ ，擷取 400 個點

圖 (9-1)



縮短時間間隔為 Δt_2 ，擷取 400 個點

圖 (9-2)



再縮短時間間隔為 Δt_3 ，擷取 400 個點

圖 (9-3)

9.4 非指數式分佈的電容暫態曲線

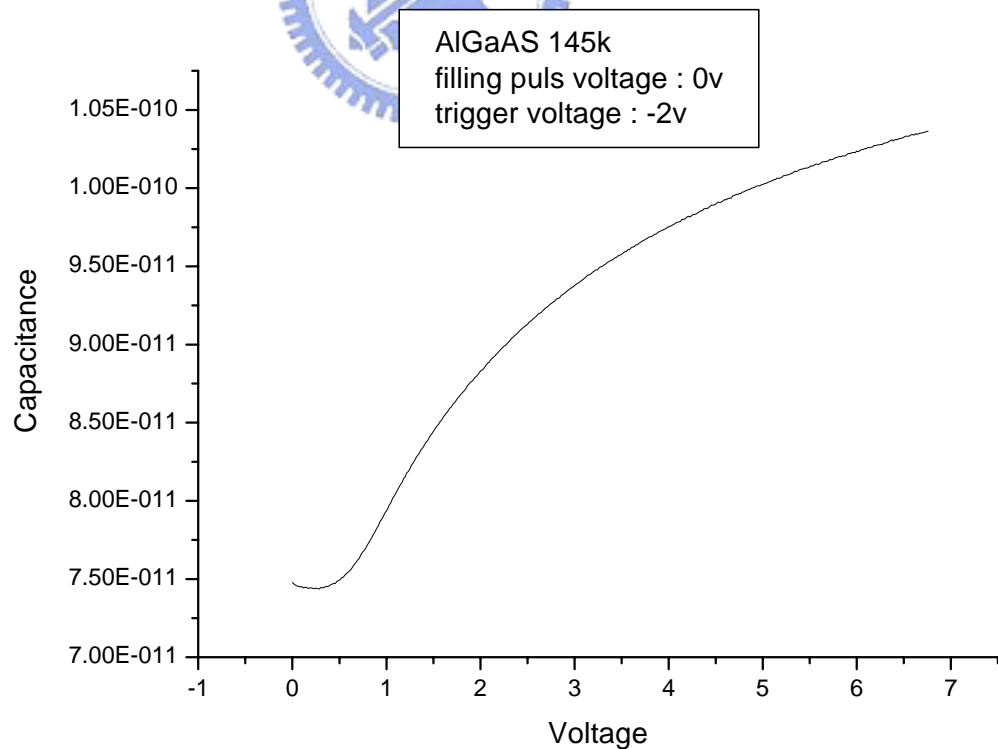
在 Lang 的理論中，是假設電容暫態曲線是呈指數式分佈波形，並且假設陷阱間是獨立的放射與捕捉而互不影響，缺陷濃度遠小於雜質濃度。而事實上並非這麼單純，往往有很多因素會導致我們量測到非指數型的電容暫態曲線。然而這些非指數型的曲線如果我們拿去使用 Laplace DLTS 分析就會出現錯誤的結論，所以接下來我們要討論會造成非指數型分佈電暫態曲線的成因。

會讓電容暫態曲線造成非指數型分佈的大致的成因有三種[3, 44, 45, 46]：

- (1) 高陷阱濃度
- (2) 電場效應
- (3) 不均勻的參雜濃度

因為當初我們的電容暫態表示式由泰勒展開式近似而得的 ($f(x) = f(x_0) + (1/1!) f'(x_0) (x-x_0) + (1/2!) f''(x_0) (x-x_0)^2 + \dots$ (高次項))，以前的電容暫態曲線 (2.4) 式是忽略高次項的近似，但是在高陷阱濃度下，就沒辦法忽視之。所以要使用 Laplace DLTS 模擬曲線時就不能忽略高次項的影響，而我們的數學模擬矩陣會變的相當複雜，所以在量測時要小心避免。

圖 (9-4) 為 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材，缺陷濃度約為雜質濃度的一半。我們在定溫 145k 下，先用 0V 填充 1 秒後，回到 -2V 開始量測，並且每隔 $\Delta t_1 = 0.0033\text{sec}$ 擷取一次訊號。很明顯的在一秒前電容暫態曲線是非指數型分佈的，所以如果拿這樣的曲線分析是會有問題產生的。



高陷阱濃度下產生的非指數式分佈的電容暫態曲線

圖 (9-4)

由[45]中說到如果熱激發速率 (emission rate) 與電場有關的話，在空乏區 (depletion region) 內不同位置的同一缺陷中心 (trap center)，將會產生不同的熱激發速率，故我們將會得到非指數型式 (non-exponential) 的電容暫態曲線。另外在[3]中也有提到不均勻的參雜濃度也會出現相同的問題。因此我們在使用 DLTS 與 Laplace DLTS 前，必須先排除這三個會造成非指數型式的原因，才能由電容暫態曲線獲得可信的缺陷物理參數。



第十章. $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材

在這一節中，我們使用 Laplace DLTS 量測 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材，與典型 DLTS、CF 導納頻譜比較量測結果。而在 Laplace DLTS 模擬時，比較使用 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 是否有差異。

10.1 基本電性量測

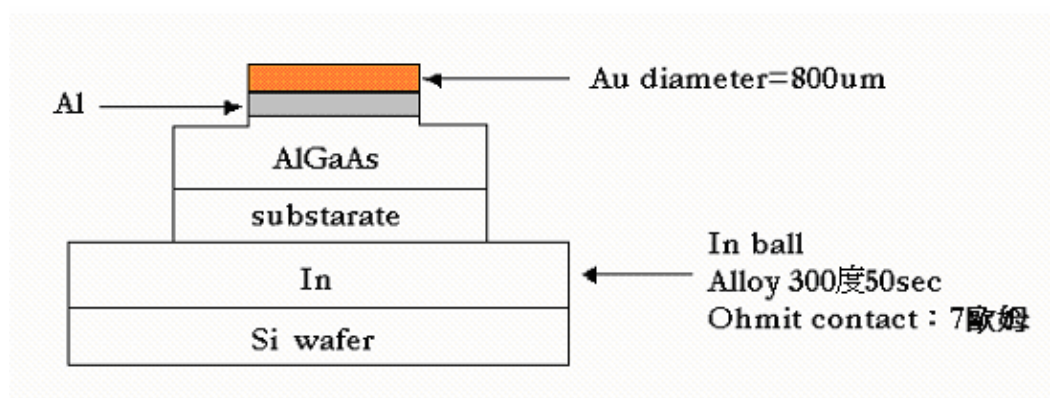
我們把 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材正面先鍍鋁 (Al) 再鍍金 (Au)，以製作蕭特基界面 (Schottky contact)。因為樣品背面似乎有雜質，故我們在製作歐米接觸面 (ohmit contact) 前要先用氨水：雙氧水：水=1：1：3 濕蝕刻 17 秒。接著背面再黏著銦球 (In ball) 後放進爐管合金 (alloy) 300 度 50 秒，這樣我們 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材的蕭特基原件 (Schottky diode) 就完成，如圖 (10-1) 結構所示。而鍍金就是為了保護 pattern 不被蝕刻。

圖 (10-2) 為 IV 特性曲線，理想因子 (ideal factor) 約為 1.8，又因為量測典型 DLTS 時，逆偏的漏電流不能太大，故在用氨水濕蝕刻時，不能吃過頭，不然漏電流會太大，而量測到有問題的資料。圖(10-3)為 CV 特性曲線，圖(10-4)為此片 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材的縱深分佈，Si 雜質濃度大約都是 $2\text{E}+16\text{cm}^{-3}$ 。如此提高雜質參雜濃度可以讓我們量測電容暫態時，可以獲得比較明顯的曲線。

如圖 (10-5) 所示，我們把 IV 曲線的縱座標 Y 軸取對數，我們可以明顯發現在高電壓區域 IV 曲線受到串聯電阻影響。由金半界面的電流電壓關係式：

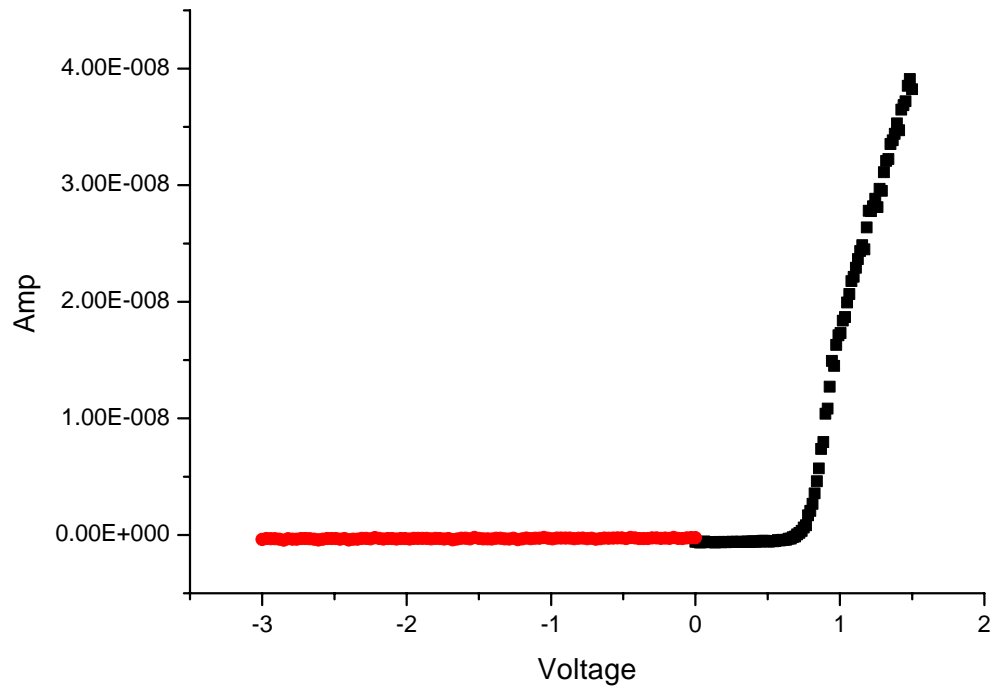
$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nKT}\right) - 1 \right]$$

來決定串聯電阻 (R_s) 值的大小。利用數值模擬曲線的結果 $R_s \cong 1.2634 * 10^7$ 歐姆，所以我們在量測 DLTS 與導納頻譜時，都必須要判斷是否為此串聯電阻產生的 RC 時間常數訊號。



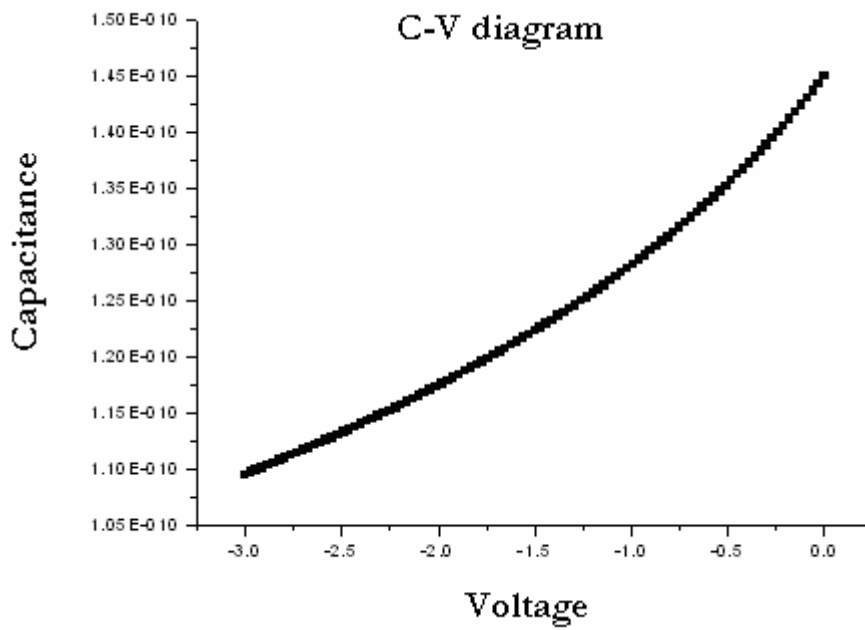
AlGaAs Schottky diode structure

圖 (10-1)



AlGaAs I-V Diagram

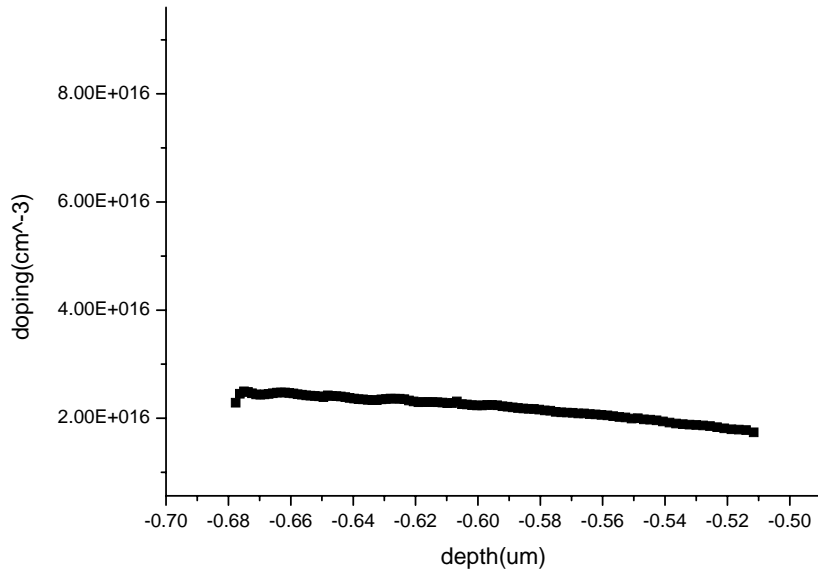
圖 (10-2)



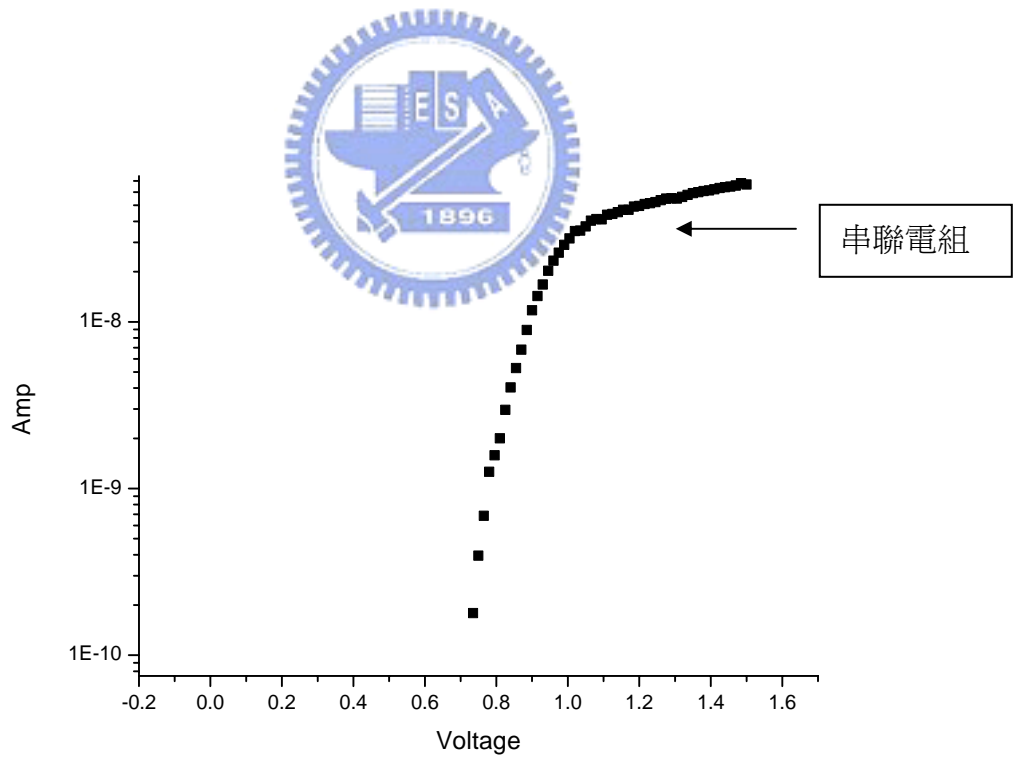
C-V diagram

AlGaAs C-V Diagram

圖 (10-3)



AlGaAs 縱深分佈圖
圖 (10-4)



在高電壓區域的 IV 曲線受到串聯電阻影響
圖 (10-5)

10.2 典型 DLTS 量測

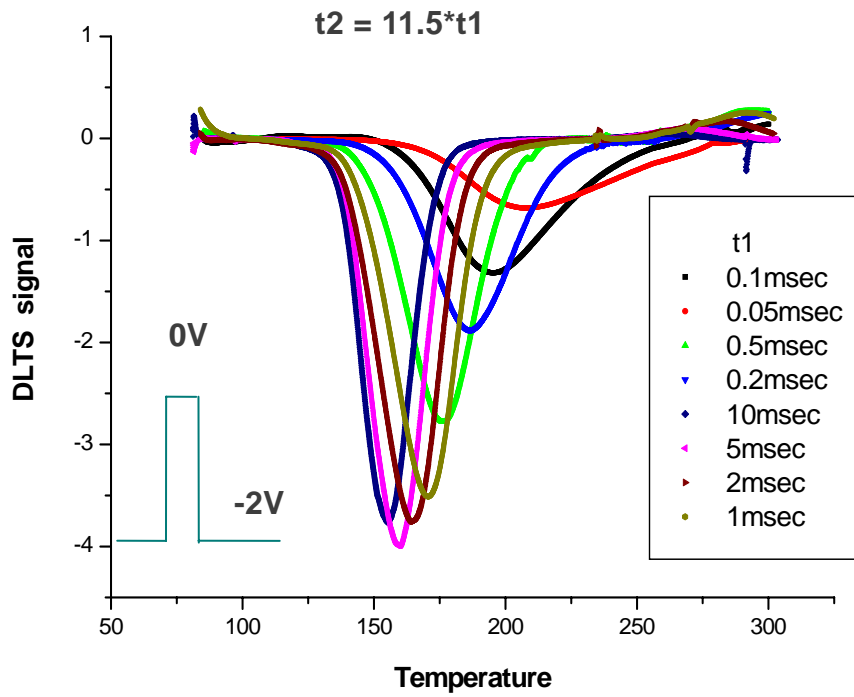
在 10.2 (a)中，我們使用典型 DLTS 量測 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材缺陷特性。在 10.2(b)中，我們改變偏壓範圍，研究缺陷空間分佈。

10.2 (a.)

圖(10-6)偏壓範圍為 0v 到-2v，填充時間(filling plus time)為 3msec。圖(10-7)改變偏壓範圍為-1.5v 到-2v，但填充時間固定之。因為我們的元件為蕭特基原件(Schottky diode)，故在 DLTS 量測中只會獲得多數載子(majority carriers)的訊號，但是由圖(10-7)，在高溫 300k 之後，有一個明顯的少數載子(minority carriers) DLTS 訊號，並且會隨著速率視窗(emission rate window)改變。由[47]我們可以說這是因為樣品本身串聯電阻所造成的 DLTS 訊號，而不是缺陷所提供的。而圖(10-6)多數載子 DLTS 訊號命名為”electron1”，接著我們改變週期限脈衝偏壓範圍結果如圖(10-7)所示，此圖中的多數載子 DLTS 訊號命名為”electron2”。

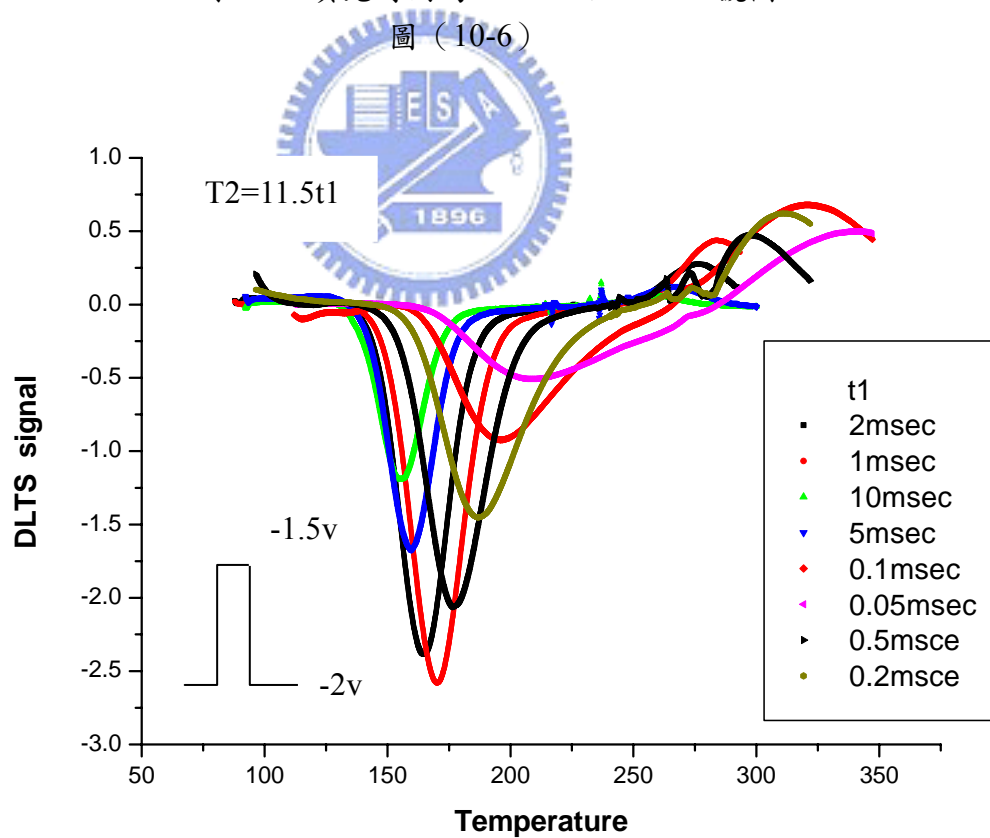
接下來我要說明為什麼要做兩個不同偏壓範圍的 DLTS 量測，因為由圖(9-4)我們發現在大偏壓範圍下(0V~-2V)，我們的電容暫態曲線在一開始並不是指數式分佈的電容暫態曲線。而我們定溫改做小偏壓範圍(-1.5V~-2V)的電容暫態曲線，則沒有這方面的問題。

最後我們比較一下兩個 DLTS 所分析的缺陷物理參數，如圖(10-8)把訊號一起畫在奧瑞尼思(Arrhenius plot)圖中，”electron1”與”electron2”的活化能都約為 0.252ev，捕獲節面積為 $8.37\text{E}-16\text{cm}^2$ 。但是我們去翻閱文獻[48、49]，相同塊材($\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$)的活化能都約為 0.4ev，捕獲截面積為 $1.6\text{E}-14\text{cm}^2$ 左右。很明顯的，我們的 DLTS 量測中有一些問題，讓我們最後的結果出現誤差。比如說當速率視窗為 0.000215sec 時，DLTS 訊號左右不對稱，這就表示此訊號可能由兩個缺陷共同提供所得的。所以我們有必要提高 DLTS 的解析度，讓我們減少這類的問題產生。另外值的一提的是我們發現改變速率視窗(rate window)大小，DLTS 訊號也會有改變，原因是因為本塊材缺陷濃度太大(約為參雜濃度的一半)所造成的。至於缺陷濃度大小，我們於 10.2 (b) 討論。



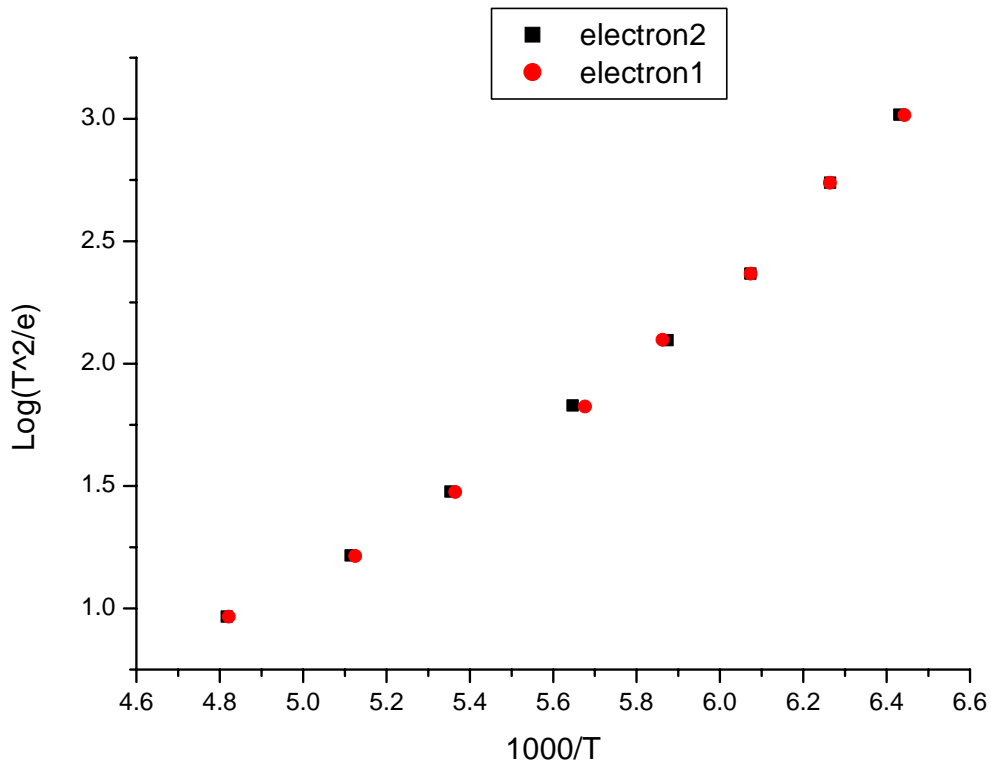
0v 到 -2v，填充時間為 3msec 之 DLTS 訊號圖

圖 (10-6)



-1.5v 到 -2v，填充時間為 3msec 之 DLTS 訊號圖

圖 (10-7)



AlGaAs 塊材的奧瑞尼思 (Arrhenius plot) 圖
圖 (10-8)

10.2 (b) 深層能階空間分佈

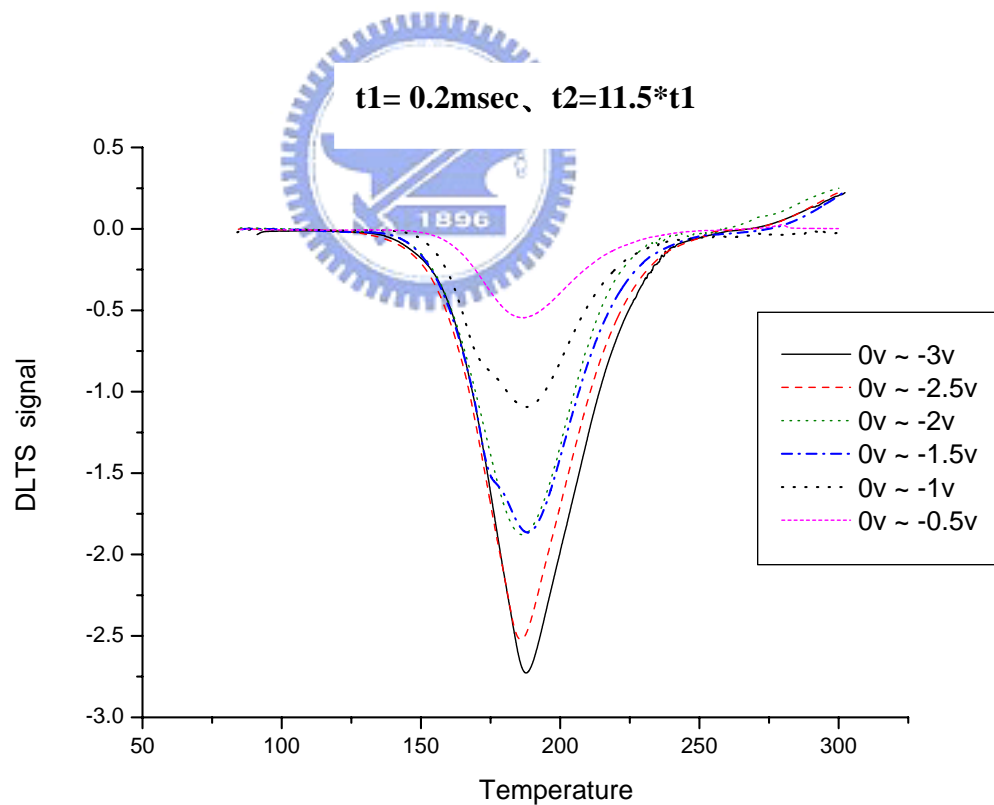
我們改變偏壓範圍，研究缺陷空間分佈，觀察此缺陷，是否均勻分佈於塊材中。如表 (10.1) 所示，我們改變穩態電壓的大小，紀錄訊號峰值，實驗數據如圖 (10-9) 所示。經過運算後，我們可以得到與深度有關的缺陷濃度分佈如表 (10.2) 所示，並且繪圖在 (10-10) 中。故我們可以說此 DLTS 量測到的訊號為均勻分佈於塊材的缺陷，而缺陷濃度大約在 $6E+15\text{cm}^{-3}$ 上下，相較於我們 DLTS 的假設大致符合。

但是有一點值的注意的是，在圖 (10-9) 中，當我們的 trigger 電壓 (穩態電壓) 為 1V 與 1.5V 時，其 DLTS 訊號可以發現似乎有兩個峰值。但是其它的穩態偏壓下 DLTS 訊號又是只有單一峰值，故我們在此猜測 DLTS 訊號應該是由一個以上的缺陷所貢獻的，只是其中一個缺陷濃度較大，而把另外一個缺陷訊號掩蓋掉了，所以在 DLTS 量測中，我們幾乎只看到單一峰值。

	量測一	量測二	量測三	量測四	量測五	量測六
脈衝電壓	0V	0V	0V	0V	0V	0V
穩態電壓	-3V	-2.5V	-2V	-1.5V	-1V	-0.5V
C_p (pf)	27.27	21.0297	12.492	9.3229	3.64613	0.758057

C_p/C_0	0.249	0.1856	0.1065	0.0777	0.0285	0.0056
-----------	-------	--------	--------	--------	--------	--------

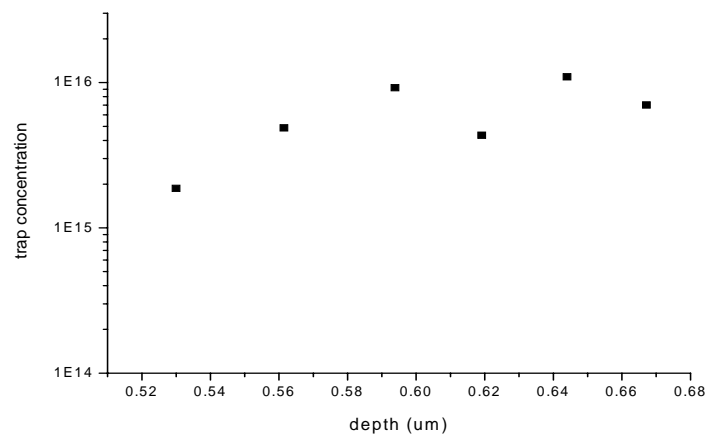
改變穩態電壓的大小，紀錄訊號峰值 C_p (pf)
表 (10.1)



DLTS 在不同偏壓範圍的訊號
圖 (10-9)

Nt(-3v~-2.5v)	Nt(-2.5v~-2v)	Nt(-2v~-1.5v)
7.026E15	1.0973E16	4.34887E15
Nt(-1.5v~-1v)	Nt(-1v~-0.5v)	Nt(-0.5v~-0v)
9.2357E15	4.87977E15	1.8709E15

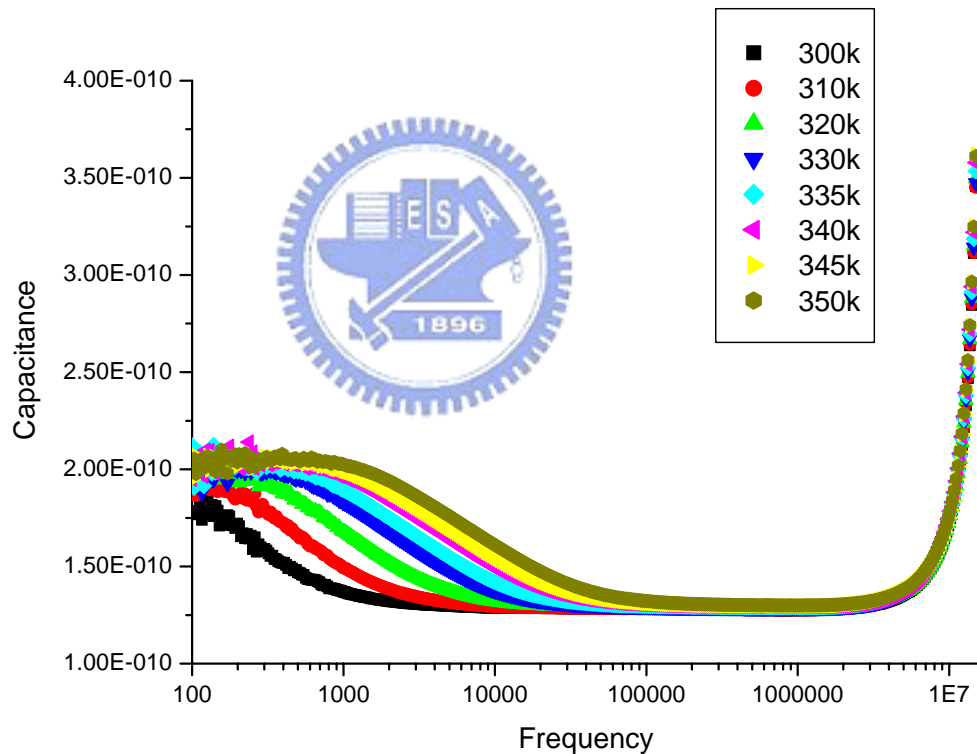
缺陷浓度纵深分佈
表 (10.2)



缺陷浓度纵深分佈
圖 (10-10)

10.3 導納頻譜量測

我們把此 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 塊材，變溫量 C-F。根據導納頻譜特性，圖 (10-11) 中反曲點即為兩倍的熱激發速率。由導納頻譜的理論可知元件的串聯電組將會影響我們的導納量測，由 $R_s \cong 1.2634 * 10^7$ 歐姆與常溫下 $C \cong 100 \text{ pf}$ 。故由串聯電組造成的 RC 時間常數 (RC time const) 約為 $1.2634 * 10^{-3} \text{ sec}$ 。我們觀察圖 (10-11) 在定溫為 300k 的曲線反曲點約為 500(1/sec)，所以可以說此導納訊號的形成並非由缺陷所引起的，而是串聯電組效應所造成。至於在 C-F 頻譜中，當頻率大於 $1\text{E}+7\text{Hz}$ 時，量測到的電容值會急速上升，這是由於量測機台 (HP4194) 本身在高頻下所產生的電桿效應所影響的。



$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 導納頻譜
圖 (10-11)

10.4 Al_{0.3}Ga_{0.7}As 電容暫態曲線

從典型 DLTS 量測 Al_{0.3}Ga_{0.7}As 中，發現一個活化能為 0.2528eV，捕獲截面積為 9.1283E-16cm² 的缺陷能階。故我們使用上述活化能與捕獲截面積來推算，要固定在哪些溫度下，才量測的與 DLTS 相同缺陷的電容暫態曲線。表 (10.3) 是由方程式 (8.1) 推出得到的熱激發速率 (emission rate) 大小，我們可以發現本樣品中的熱激發速率會隨溫度增加得很快。為了讓以後使用 Laplace DLTS 時參考數據多一些，所以我們決定每隔 5k 擷取一次電容暫態訊號。這時量測系統溫度穩定度對我們的結果影響，就會相對的更加重要。

圖 (10-12) 為 Al_{0.3}Ga_{0.7}As 在 140k 下 改變不同的脈衝偏壓 (-1V) 填充時間後，再回到穩態偏壓 (-1.5V) 擷取訊號。在圖中我們可以發現填充秒數拉長時電容暫態曲線似乎有所不同，可以說當填充秒數為 1sec 時，Al_{0.3}Ga_{0.7}As 塊材中的缺陷才被填滿，所以我們就選取 1sec 當成之後脈衝偏壓填充時間的固定條件。

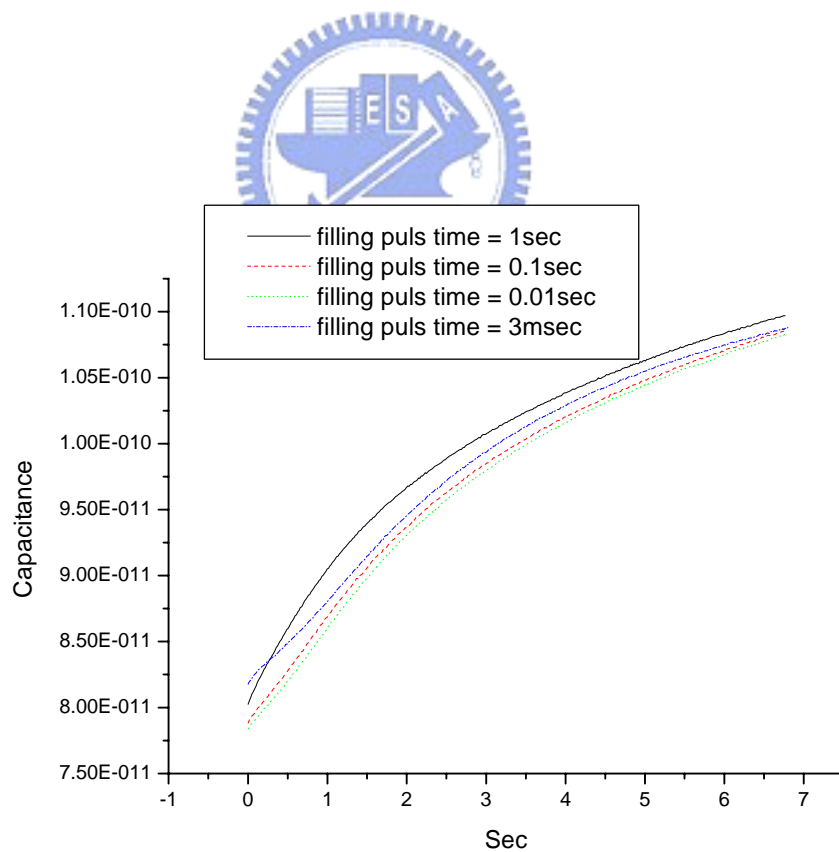
在 140k 下固定填充時間為 1sec 後，偏壓打不同的區域，擷取訊號如圖 (10-13)。由深層能階空間分佈的討論，我們知道 DLTS 量測到的缺陷是均勻分佈在每一處，故我們在相同 ΔV 下量測到的電容暫態曲線應該要蠻類似的。但是由圖 (10-12) 中發現，當偏壓改變範圍太大時 (從 0V~-2V)，我們擷取到的電容暫態曲線就會明顯的不同，而且是非 DLTS 假設的指數式曲線分佈。我們在不同的定溫下量測，如圖 (10-14) 是在定溫 145k 下量測的，而上述現象也有重複出現，另外文獻 [50] 中也有提到這種狀況發生。

但是我們在 DLTS 量測時，當大偏壓範圍的結果 (圖 (10-6)) 與小偏壓範圍的結果 (圖 (10-7)) 是相同的。唯一不同的 T_{max} 對應的峰值隨速率視窗改變的模式不同，大偏壓的 DLTS 訊號峰值幾乎是正比於速率視窗值的大小，而小偏壓範圍的 DLTS 訊號峰值則沒有此類現象。

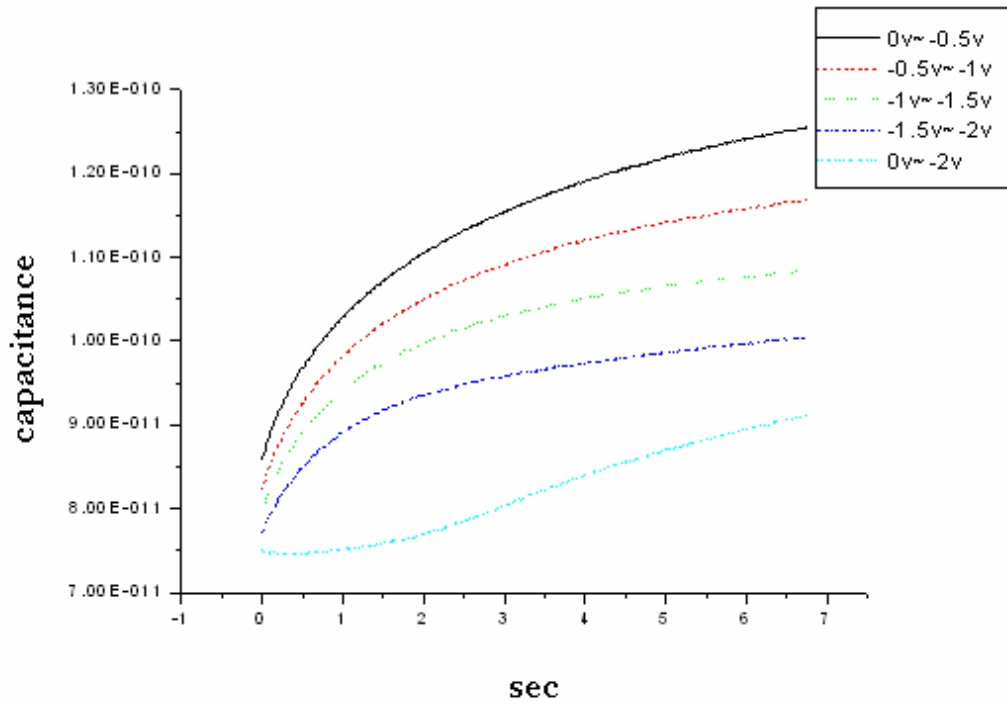
所以接著我們要選取這些電容暫態曲線去 fitting 時，上述的大偏壓範圍的非指數式電容曲線就要先排除，否則 Laplace DLTS 的結果會有問題。所以我們將模擬在四種不同的小偏壓範圍 (0V~-0.5V、-0.5V~-1V、-1V~-1.5V、-1.5V~-2V) 下，脈衝時間固定為 1sec、穩態偏壓時間大小則依據電容暫態曲線改變的快慢適當的調整。我們舉偏壓範圍 -1V~-1.5V 為例子，曲線如圖 (10-15) 所示。

100K	4E-4 (1/s)	140K	3.3655 (1/s)
110K	6.9E-3 (1/s)	150K	15.579 (1/s)
120K	0.0757 (1/s)	160K	60.044 (1/s)
130K	0.5807 (1/s)	170K	198.91 (1/s)

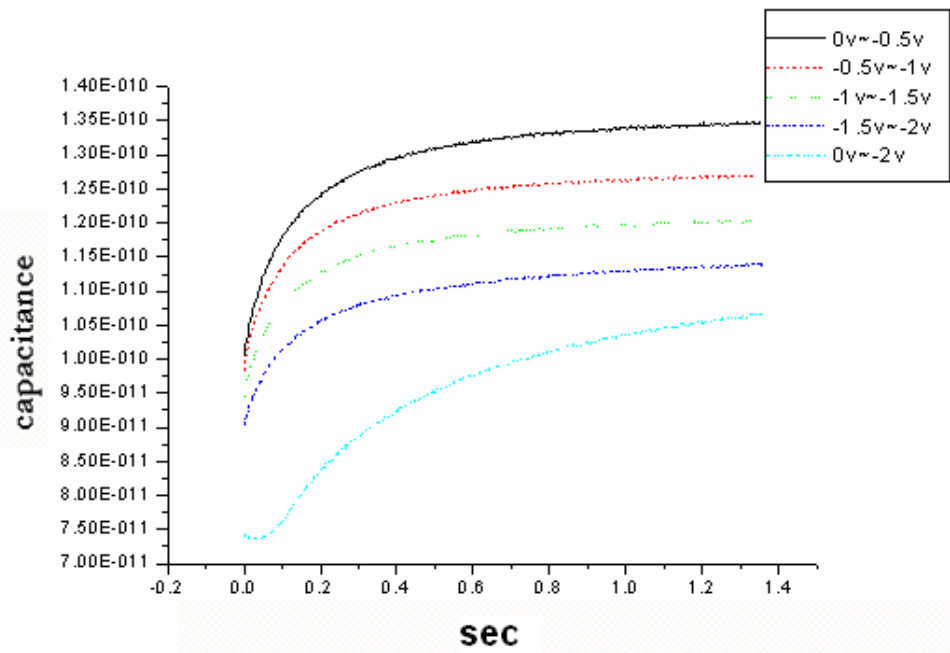
由傳統 DLTS 結果反推的 emission rate (T)
表 (10.3)



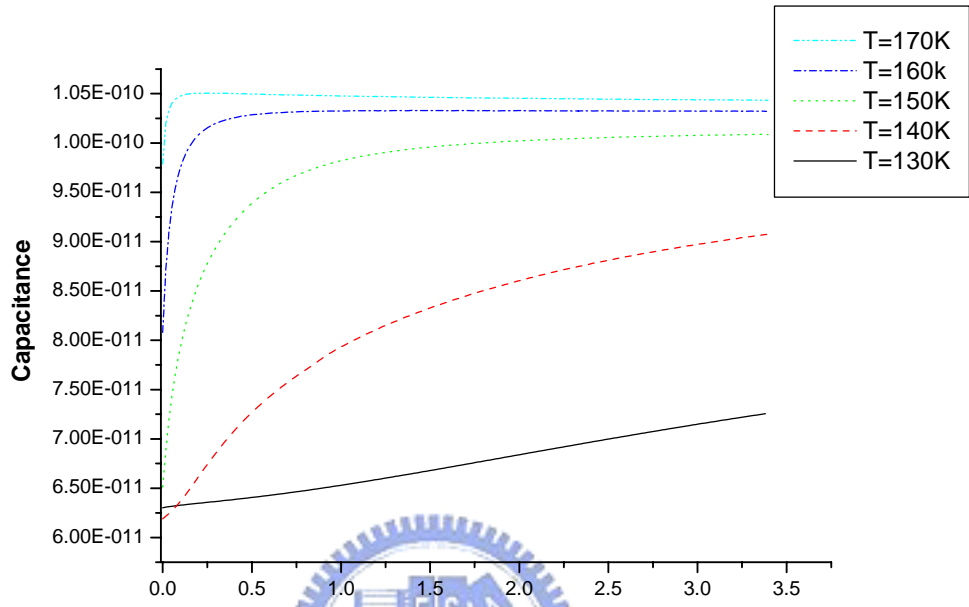
定溫 140k 下改變不同的脈衝時間，量測電容暫態曲線
圖 (10-12)



定溫 140k 下，不同偏壓範圍的電容暫態曲線
圖 (10-13)



定溫 145k 下，不同偏壓範圍的電容暫態曲線
圖 (10-14)



偏壓範圍-1v~-1.5v 下，隨著溫度改變的電容暫態曲線

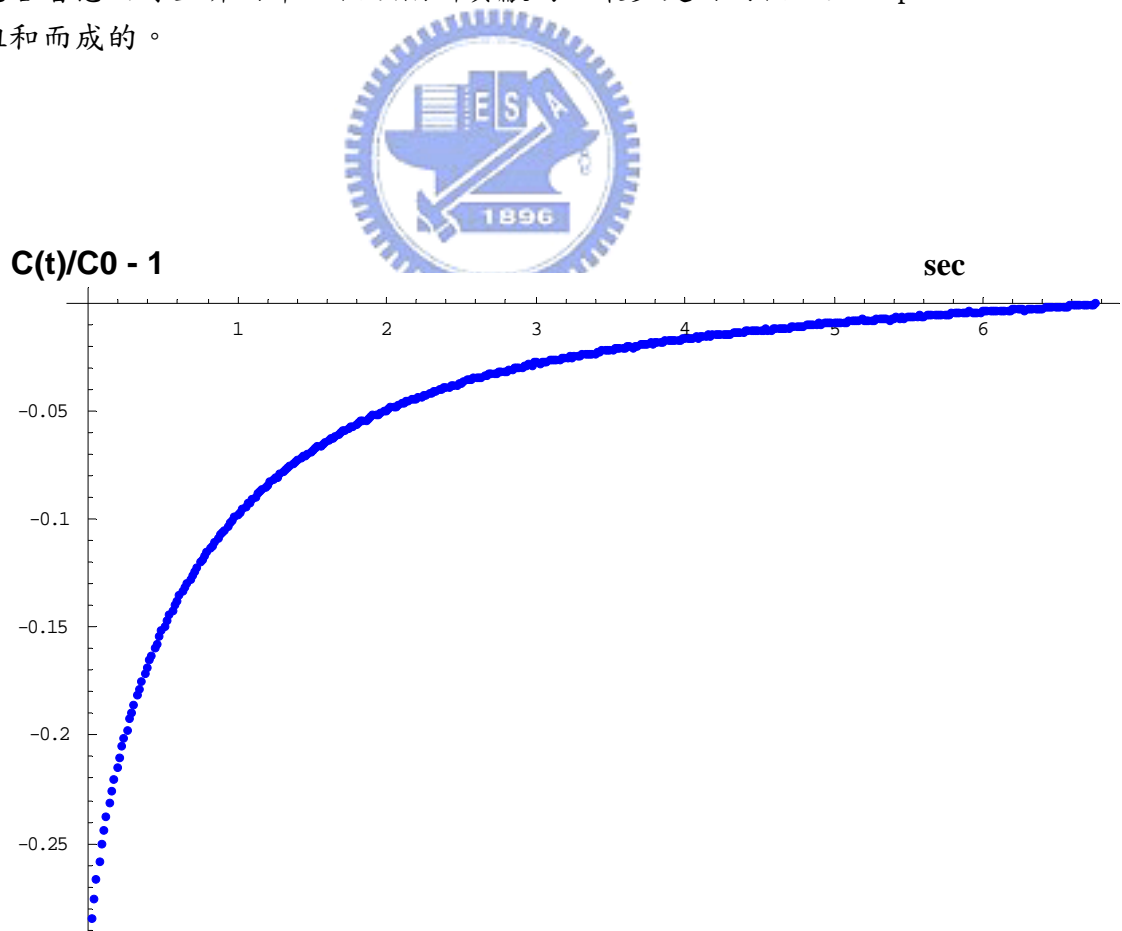
圖 (10-15)

10.5 Laplace DLTS

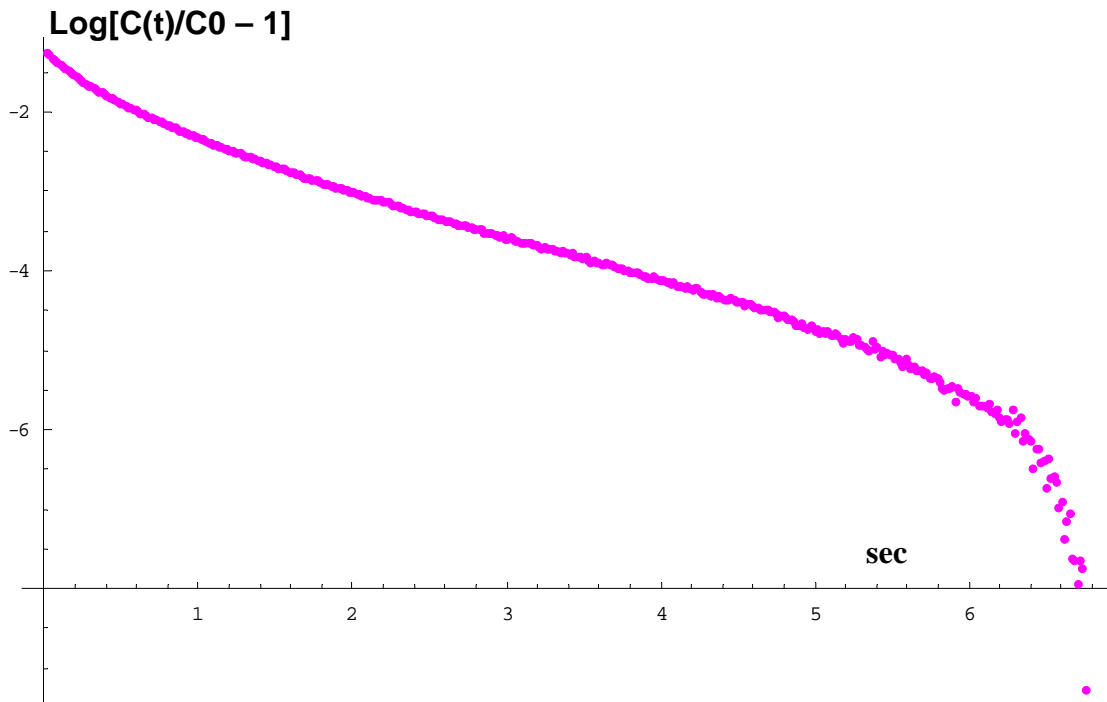
在本節中，我們分別定溫在 135k、140k、145k、150k、155k 下量測電容暫態曲線。另外為了確定缺陷是否均於分佈在塊材中，我們在定溫下量測四種不同的偏壓範圍分別為 (1) 0V~-0.5V、(2) -0.5V~-1V、(3) -1V~-1.5V、(4) -1.5V~-2V。接下來我們要拿這些電容暫態曲線先使用 Tikhonov regularization method，來決定這些電容暫態曲線的方程式形式後，再把 Tikhonov regularization method 當 Conjugate gradient method 的迭代法的初始值。

10.5 (a) 模擬過程範例

我們舉定溫 145K、偏壓範圍為 -1V~-1.5V 下的電容暫態曲線當模擬範例，圖 (10-16) 即為在此條件下，量測到的電容暫態曲線。接著我們對 Y 軸取對數可得圖 (10-17)，由圖中曲線並非單一斜直線，所以我們可以說圖 (10-16) 的電容暫態曲線並非由單一個缺陷所貢獻的，最少是由兩個以上 exponential 所組和而成的。



定溫 145K、偏壓範圍為 -1V~-1.5V 下的電容暫態曲線
圖 (10-16)



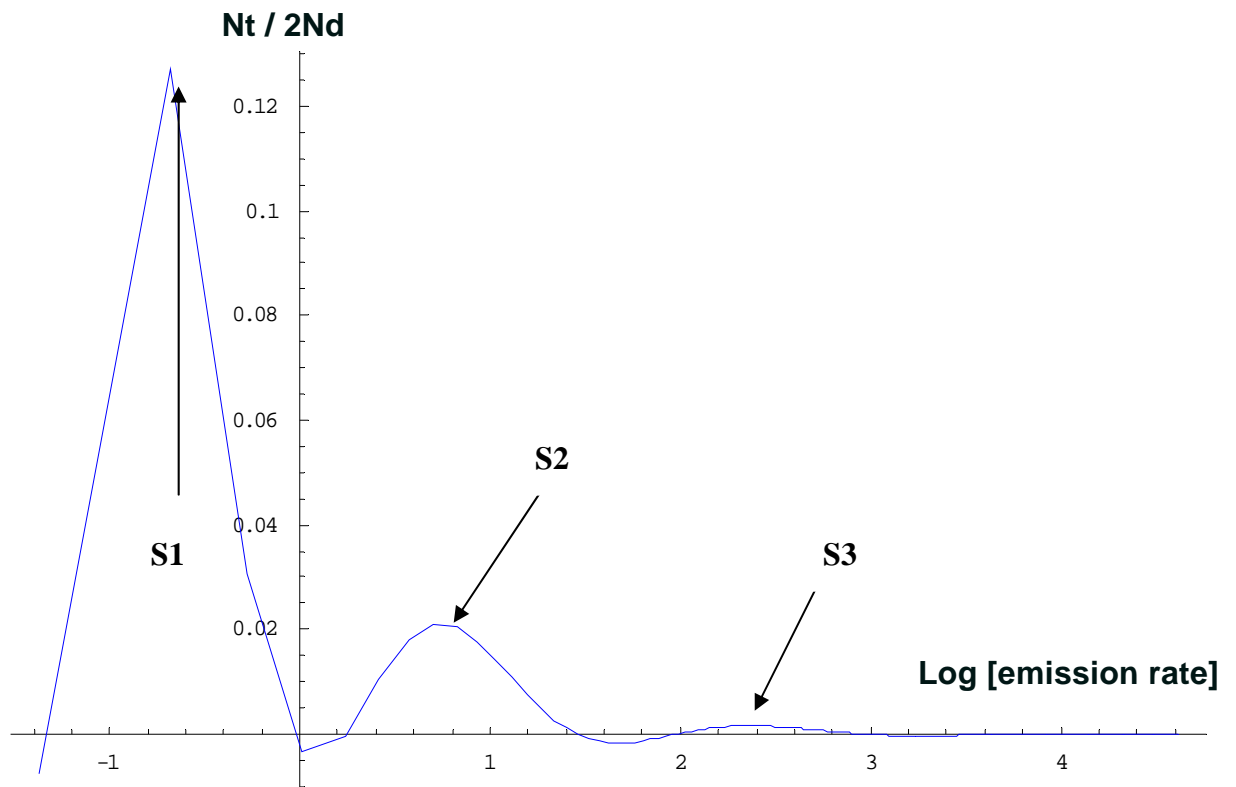
把圖 (10-16) Y 軸取對數尺寸
圖 (10-17)

我們首先用 Tikhonov regularization method 模擬上述曲線，由 error2 的極值我們選取出 α (regularization parameter) 為 0.01，帶入方程式 (6.7) 中求出與缺陷濃度有關的 $Z[s]$ 矩陣。圖 (10-18) 中 Y 軸為 $Z[s]$ 、X 軸為 $\text{Log}(s)$ ，我們可以明顯的看到有三個峰值，如表 (10.4) 所示。但是 S_3 在其他溫度下的模擬中並沒有穩定出現，所以我們把 $Z[S_3]$ 當成為了平衡負值的 $Z[s]$ 所產生的假峰值，所以此峰值在物理上式沒有意義的。

因此在定溫 145k 下的電容暫態曲線，是由兩個缺陷所同時貢獻的，其中較深的缺陷濃度比較大，這也是為什麼 DLTS 量測時只看到單一峰值的合理解釋。接著我們把 $Z[s]$ 矩陣回推模擬曲線，並且和量測曲線比較之。圖 (10-19) 中曲線為量測曲線，實線為模擬曲線，而兩者幾乎重疊在一起。如果把圖(10-18) 中波形下面積令為波峰 S_{\max} 所對應的 $Z[S_{\max}]$ 值，而其它的 S 對應的 $Z[s]$ 令為零，這樣模擬曲線方程就可以近似寫出：

$$C(t)/C_0 - 1 = -0.1577 \text{Exp}[-0.507t] - 0.1287 \text{Exp}[-2.027t] - 0.042 \text{Exp}[-10.64t] \dots (10-1)$$

而圖 (10-19) 中虛線為量測曲線，實線為模擬曲線方程方程式 (10-1) 所得。我們發現模擬曲線方程，與真實量測曲線有平移的現象。這是因為模擬曲線方程是經由近似所得，所以 $Z[s]$ 值大小都會出入。因此我們在找尋缺陷濃度時，必須把不同溫度相同缺陷的 $Z[s]$ 值加以平均，以提高準確度。



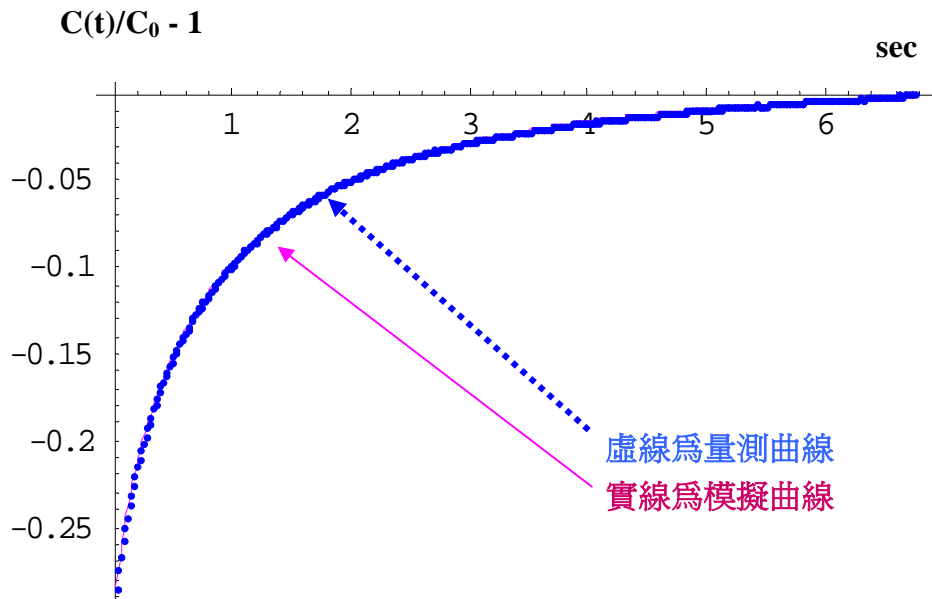
Y 軸為 $Z[s]$ 、X 軸為 $\text{Log}(s)$ 的 Laplace DLTS 頻譜圖
圖 (10-18)



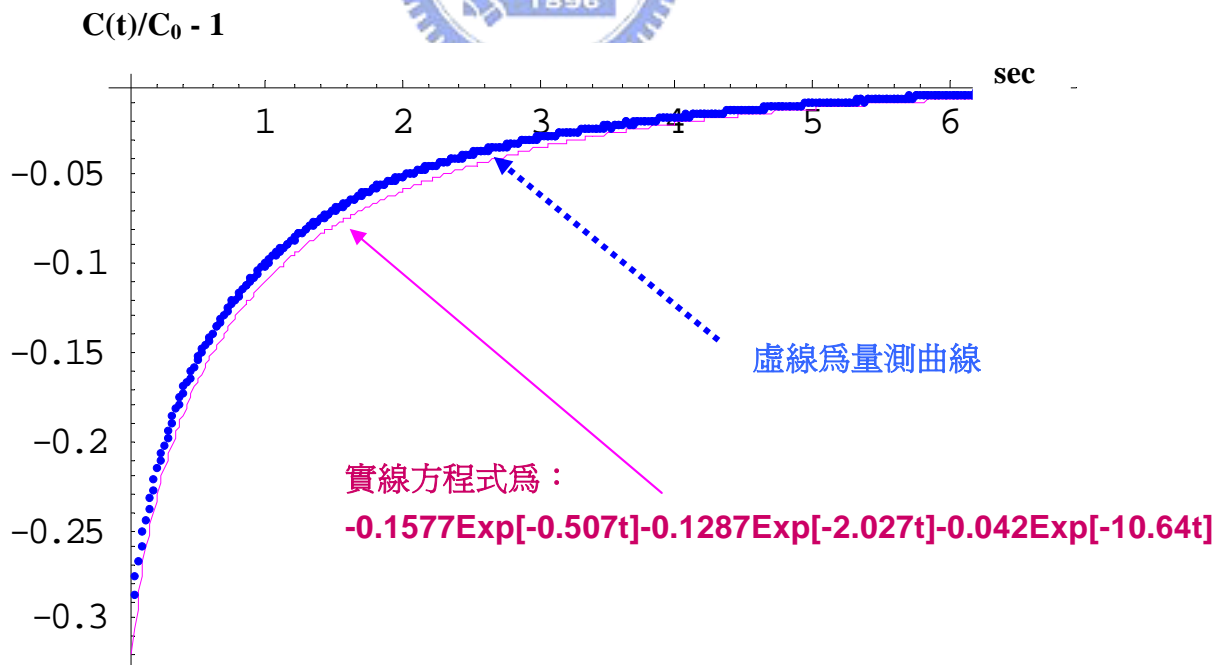
	$(1/s)$		$Nt/2Nd$
S1	0.507	NS1	0.158
S2	2.207	NS2	0.129
S3	10.64	NS3	0.042

Laplace DLTS 頻譜峰值與波形底下面積

表 (10.4)



模擬結果與量測曲線比較
圖 (10-19)

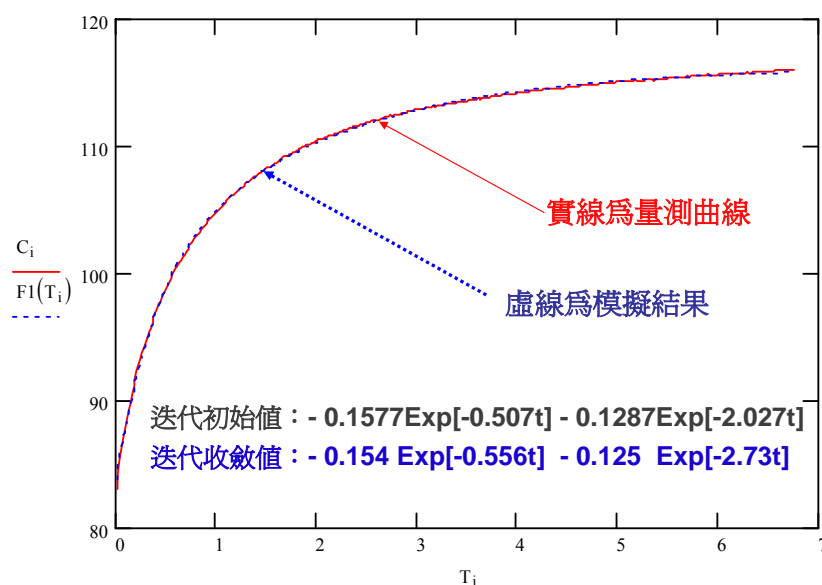


近似寫出模擬方程與量測曲線比較
圖 (10-20)

接著我們把 Tikhonov regularization method 的結果，當成共軛梯度法 (conjugate gradient method) 的初始時，並且假設該曲線方程為兩個 exponential 所組成而成的。圖 (10-21) 中虛線即為迭代之最後的最佳解，而實線為量測曲線。而模擬方程為：

$$C(t)/C_0-1=-0.154\text{Exp}[-0.556t]-0.125\text{Exp}[-2.73t] \dots\dots (10-2)$$

比較方程式 (10-1) 與 (10-2)，我們比較迭代初始值與迭代收斂值，由圖 (10-21) 中迭代收斂值，已經完全修正了圖 (10-20) 中迭代初始值沒辦法與量測曲線重疊的問題。因此我們可以說共軛梯度法有迭代出更接近量測曲線的解。因此接著我們就循著這個方法，來模擬不同條件的定溫電容暫態曲線。



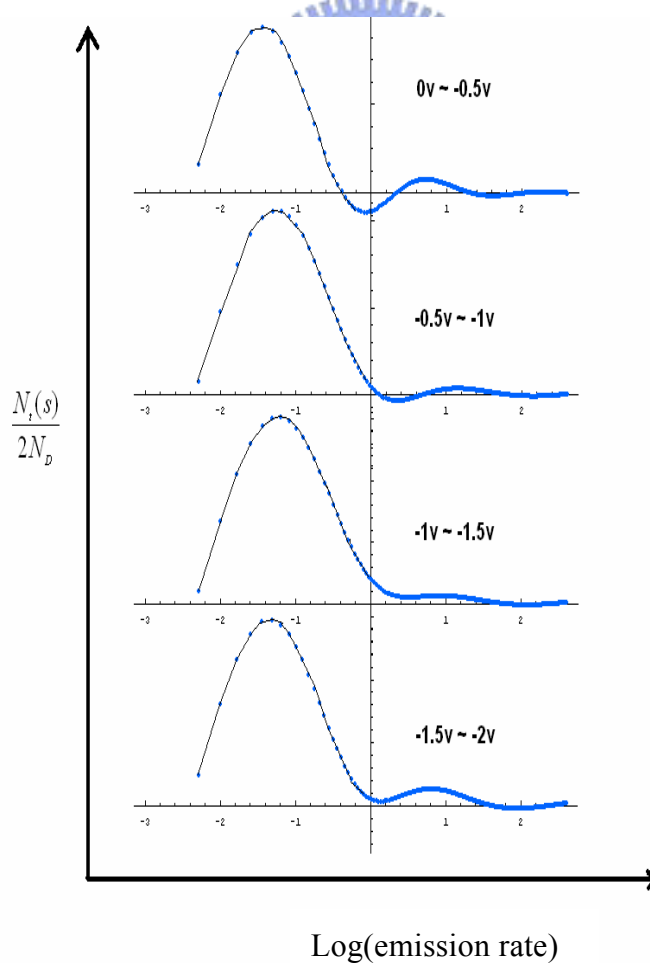
實線為量測曲線，虛線為迭代結果反推的模擬曲線
圖 (10-21)

10.5 (b) 模擬結果

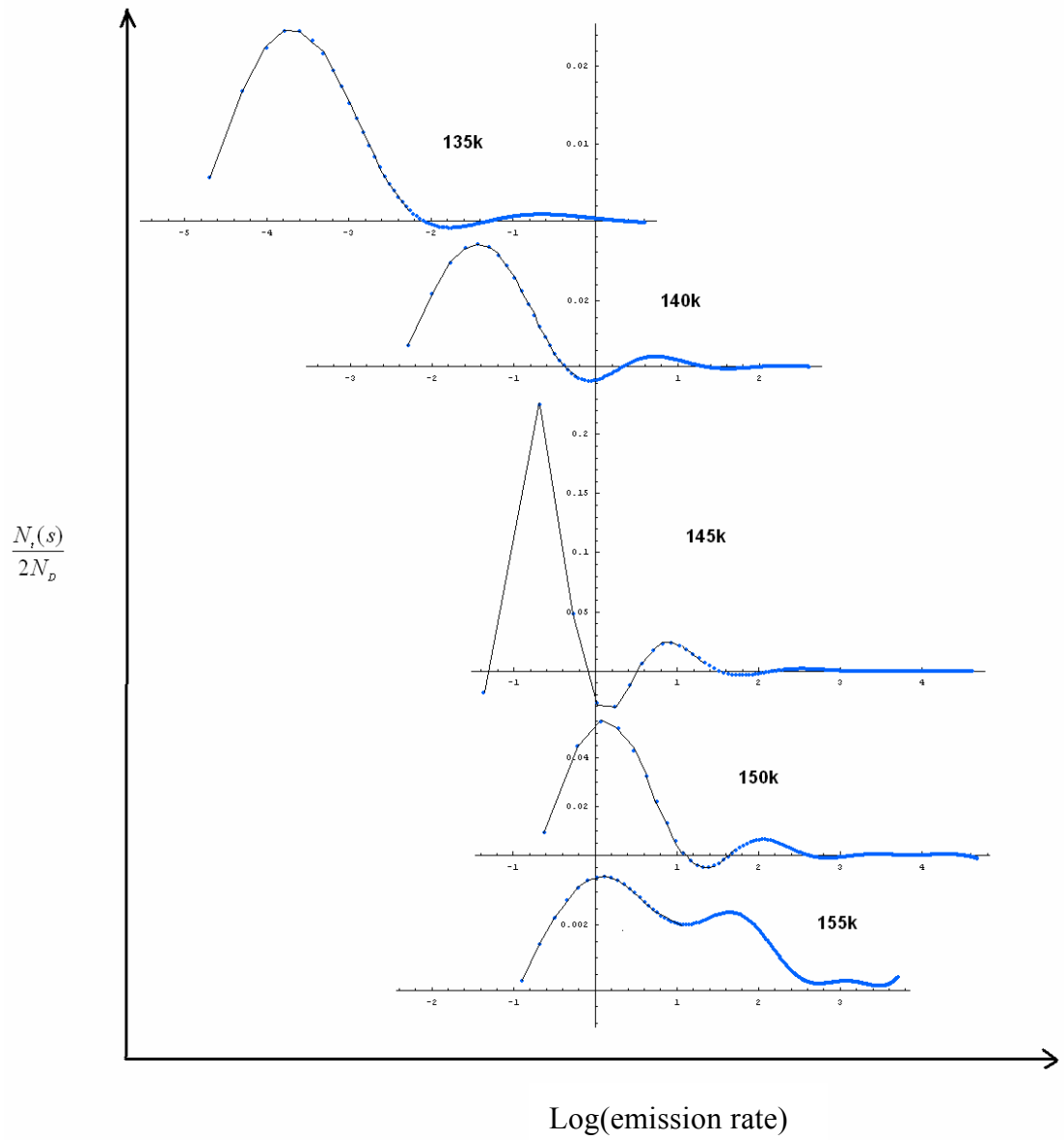
首先我們先來觀察使用 Laplace DLTS 找到的兩個缺陷是否均勻分佈在塊材中，我們選取固定溫度為 140k，但不同偏壓範圍的模擬結果畫在圖 (10-22) 中。圖中的 X 軸為熱激發速率取對數座標、Y 軸代表 $N_t/2N_D$ ，我們發現四種不同的偏壓範圍的 Laplace DLTS 頻譜中都有兩個明顯的 S(electron emission) 訊號固定出現。所有由這個結果我們可以說這兩個缺陷是均勻分佈在塊材中的。另外其中較小的 S 所對應之缺陷濃度明顯大於另外一個 S 所對應的缺陷濃度。

接著我們觀察在溫度改變下，看這兩個熱激發速率是否由隨著溫度上升而增加？圖 (10-23) 的偏壓範圍固定在 -0.5v ~ -1v，溫度循序由 135k 到 155k。除了在 155k 有三個峰值外，其他溫度都是兩個峰值並且隨著溫度上升穩定增加。接著我們改變偏壓範圍觀察模擬結果，情況與本圖結果類似。

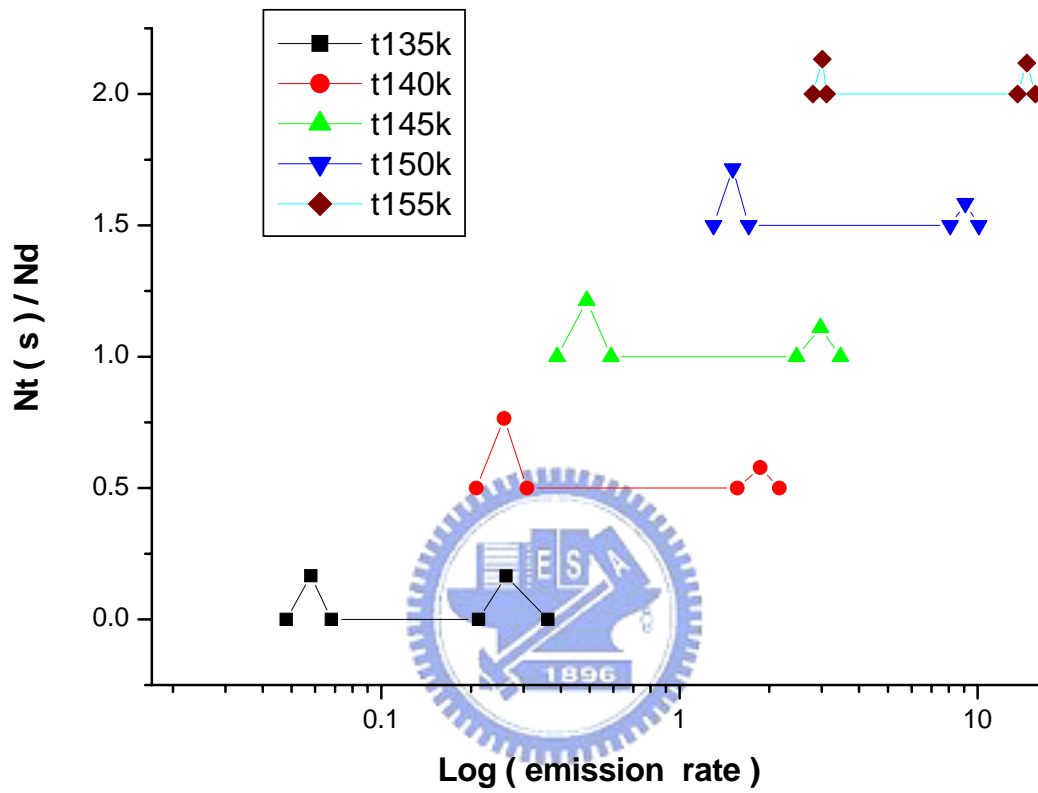
接著我們把這些結果當成共軛梯度法的初始值開始迭代，結果如圖 (10-24) 所示，同樣有兩個熱激發速率是否由隨著溫度上升而增加。相同的我們也有做同偏壓範圍的情況，結果也是相同。而表 (10.5) 是使用 Tikhonov regularization method 在不同偏壓範圍，不同溫度下的模擬結果，表 (10.6) 則是 Conjugate gradient method 的模擬結果。



固定溫度為 140k 但不同偏壓範圍的模擬結果
圖 (10-22)



偏壓範圍固定在 $-0.5\text{v} \sim -1\text{v}$ ，溫度循序由 135k 到 155k 的模擬結果圖 (10-23)



共軛梯度法迭代結果
圖 (10-24)

-0v~-0.5v	--	--	--	--			
溫度	S1	NS1	S2	NS2	S3	NS3	alpha
135	0.09553	0.2992	0.66875	0.07865	--	--	0.01
140	0.27	0.33987	3.21	0.07792	--	--	1
145	0.507	0.2736	12.67	0.0554	2.5335	0.1484	0.01
150	1.34	0.256	61.64	0.04	10.988	0.088	0.1
155	5.1867	0.1499	--	--	21.6621	0.038	0.01
-0.5v~-1v	--	--	--	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2	S3	NS3	alpha
135	0.0273	0.2765	0.40944	0.17	--	--	1
140	0.27	0.29283	3.14154	0.0583	--	--	1
145	0.507	0.221	12.67	0.041	2.28	0.1278	0.01
150	1.1232	0.2374	35.6616	0.0625	7.8624	0.2374	0.01
155	4.6092	0.0957	--	--	15.73	0.1	0.01
-1v~-1.5v	--	--	--	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2	S3	NS3	alpha
135	0.02275	0.2867	0.3184	0.1284	--	--	1
140	0.3044	0.247	2.5365	0.049	--	--	1
145	0.507	0.1577	10.64	0.042	2.027	0.1287	0.01
150	1.0912	0.2516	32.4632	0.0765	7.656	0.192	0.01
155	7.236	0.143	--	--	--	--	0.01
-1.5v~-2v	--	--	--	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2	S3	NS3	alpha
135	0.02275	0.3098	0.464	0.076	--	--	1
140	0.2704	0.18866	2.23	0.084	--	--	1
145	0.507	0.14436	11.4345	0.07846	2.0328	0.2178	0.01
150	1.0912	0.31	33.83	0.055	7.9	0.192	0.01
155	6.445	0.1197	--	--	--	--	0.01
-0v~-2v	--	--	--	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2	S3	NS3	alpha
135	0.02275	0.358	0.1638	0.1613	1.12	0.13	0.1
140	0.2704	0.4794	3.5152	0.20489	--	--	1
145	0.507	0.57	10.9	0.302	2.2815	0.225	0.01
150	1.0912	0.3085	34.373	0.0551	8.184	0.194	0.01
155							0.01

Tikhonov regularization method 在不同偏壓範圍，不同溫度的模擬結果
表 (10.5)

-0v~-0.5v	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2
135	0.058	0.166	0.262	0.165
140	0.258	0.265	1.863	0.07834
145	0.489	0.21376	2.97	0.11
150	1.507	0.216	9.084	0.084
155	3.014	0.1324	14.612	0.1179
--	--	--	--	--
-0.5v~-1v	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2
135	0.031	0.2257	0.482	0.10602
140	0.297	0.2274	1.767	0.085
145	0.531	0.18897	2.908	0.024
150	1.426	0.181	8.587	0.091
155	2.906	0.104	14.245	0.11552
--	--	--	--	--
-1v~-1.5v	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2
135	0.026	0.2335	0.374	0.09044
140	0.313	0.175	1.584	0.15
145	0.556	0.154	2.73	0.125
150	0.984	0.159	7.866	0.1033
155	2.712	0.097	13.063	0.11299
--	--	--	--	--
-1.5v~-2v	--	--	--	--
溫度	S1	NS1	S2	NS2
135	0.032	0.257	0.301	0.07
140	0.124	0.1595	1.317	0.1224
145	0.319	0.098	2.283	0.163
150	0.704	0.196	8.649	0.082
155	2.072	0.103	12.463	0.105

Conjugate gradient method 的模擬結果
表 (10.6)

首先我們命名 Tikhonov regularization method 所找到的兩個缺陷分別為：TA1（較深的缺陷）、TA2（較淺的缺陷）。由於不同溫度下都可以觀察到這兩個缺陷訊號，所以我們把同一缺陷的雜質濃度加以平均，已克服前面我們模擬近似所產生的誤差。所以最後平均 TA1 與 TA2 的雜質濃度比約為：68.6%：31.4%。接著我們命名 Conjugate gradient method 所找到的兩個缺陷分別為：CA1（較深的缺陷）、CA2（較淺的缺陷）。最後平均的 CA1 與 CA2 雜質濃度比約為：61.862%：38.12%。

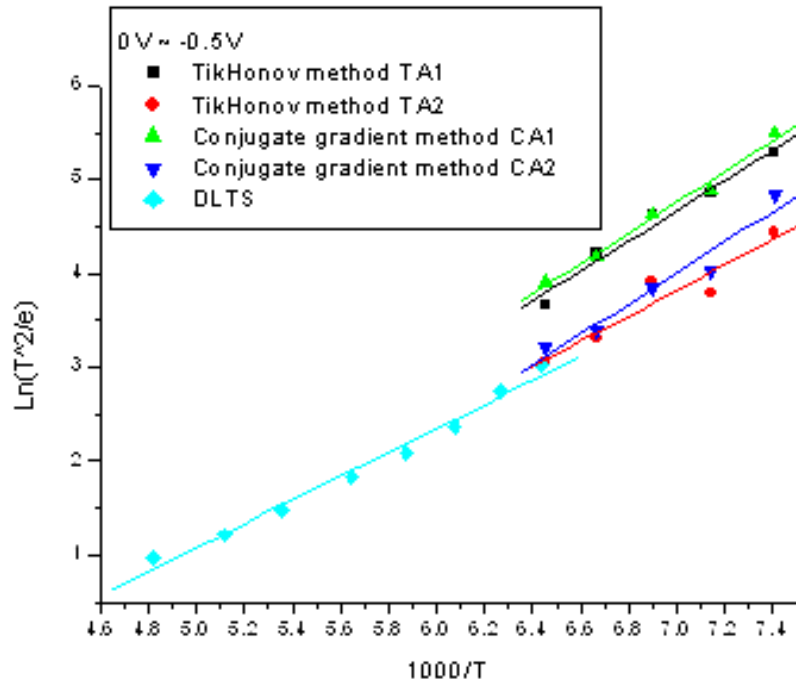
圖（10-25）我們在固定偏壓範圍下（0V~-0.5V），綜合 Tikhonov regularization 與 conjugate gradient method 與傳統 DLTS 結論，畫在同一張 Arrhenius plot 上。我們可以說 Laplace DLTS 量到的 TA2 與 CA2 缺陷，是與傳統 Boxcar DLTS 所量到的是相同的。而 TA1 與 CA1 是完全相同的缺陷，此缺濃即為 DLTS 解析度無法觀察到的。

因為缺陷為平均分佈在塊材的缺陷，所以我們平均不同偏壓範圍相同溫度的資料。平均後 TA1 的活化能 0.3977eV，捕獲截面積為 $7.7E-12\text{cm}^2$ 。CA1 平均後活化能為 0.3456eV，捕獲截面積為 $9.523E-14\text{cm}^2$ ，由文獻[48、49]中此缺陷為與雜質有關的 DX 中心。然而另外一個由 Laplace DLTS 找到的缺陷，也是 DX 中心，平均的 TA2 活化能約為 0.3040eV，捕獲截面積為 $4.117E-14\text{cm}^2$ 。平均後的 CA2 活化能為 0.3017eV，捕獲截面積為 $1.96E-14\text{cm}^2$ 。圖（10-26）為 TA1 與 CA1 的奧瑞尼思圖（Arrhenius plot），圖中相鄰的點是在相同溫度不同偏壓範圍下的條件，模擬所得相似之結果。圖（10-27）為 TA2 與 CA2 的奧瑞尼思（Arrhenius plot）圖。

我們把 DLTS 量到的缺陷濃度（Nt），以上述比例分配給兩個缺陷後，利用活化能與捕獲節面積回推理論曲線，與傳統 Boxcar DLTS 的理論曲線比較，看哪一個較為接近真實量測所得的 DLTS 訊號。

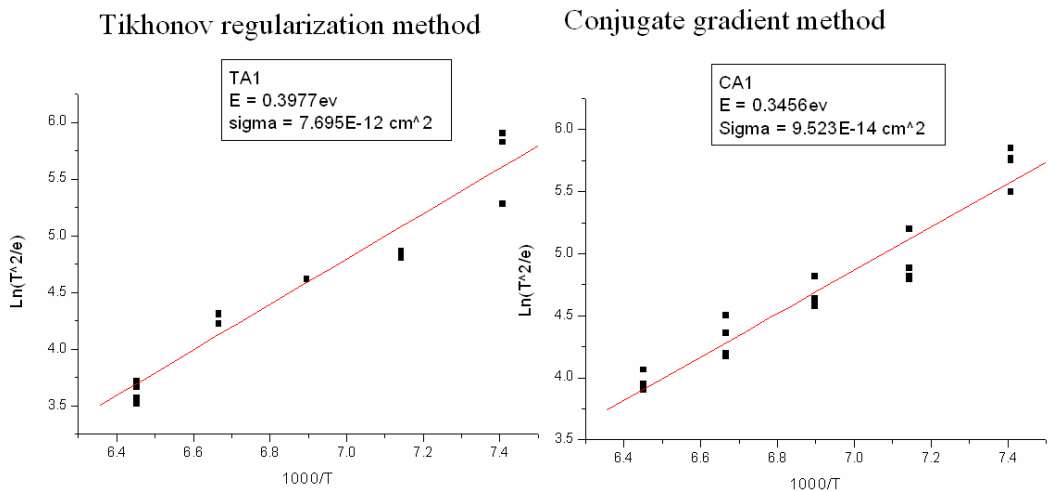
圖(10-28)中，虛線為 Laplace DLTS 使用 Tikhonov regularization method 的結果（TA1、TA2），反推出速率視窗為 0.5msec 的理論曲線（ $t_2 = 11.5t_1$ ）。我們很明顯的發現會比傳統 DLTS 的理論曲線更接近量測曲線。而圖（10-29）中我們把 TA1 與 TA2 反推的理論曲線畫出，所以由此圖可知，傳統 DLTS 訊號主要是由 TA1 所貢獻的，因為 TA2 上的缺陷濃度較少，又 TA1 與 TA2 非常靠近所以會造成傳統 DLTS 量測時 TA2 缺陷被我們忽略。由此例我們也可以說 Laplace DLTS 可以有效的提高傳統 Boxcar DLTS 的正確性與解析度。

接著我們觀察 Conjugate gradient method 的結果（CA1、CA2）所反推的理論曲線結果是否與 Tikhonov regularization method 相同？由圖（10-30）一樣的 Laplace DLTS 的理論曲線，比傳統 DLTS 結果反推的理論曲線更接近量測所得的訊號。而圖（10-31）把 CA1 與 CA2 反推的理論曲線畫出，一樣是被包在量測訊號中，且一個較大一個較小。



固定偏壓範圍下 (0V~-0.5V)，綜合 Tikhonov regularization 與 conjugate gradient method 與傳統 DLTS 結論，畫在同一張 Arrhenius plot

上圖 (10-25)

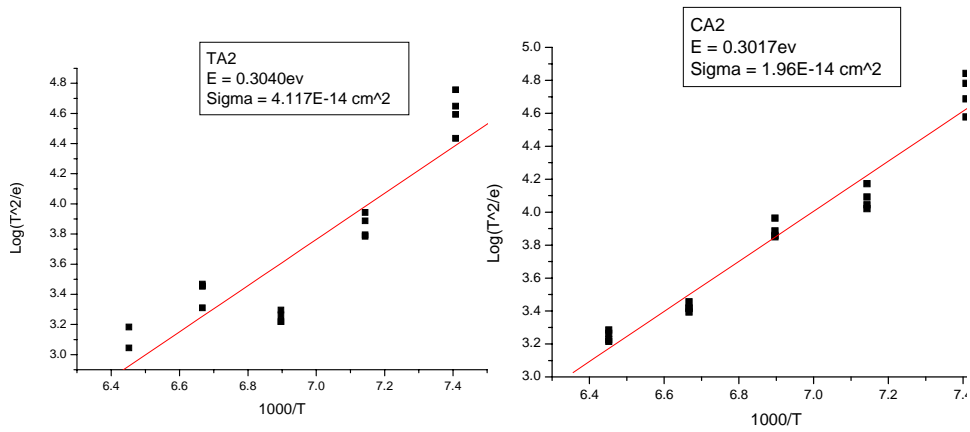


TA1 與 CA1 的奧瑞尼思圖 (Arrhenius plot)

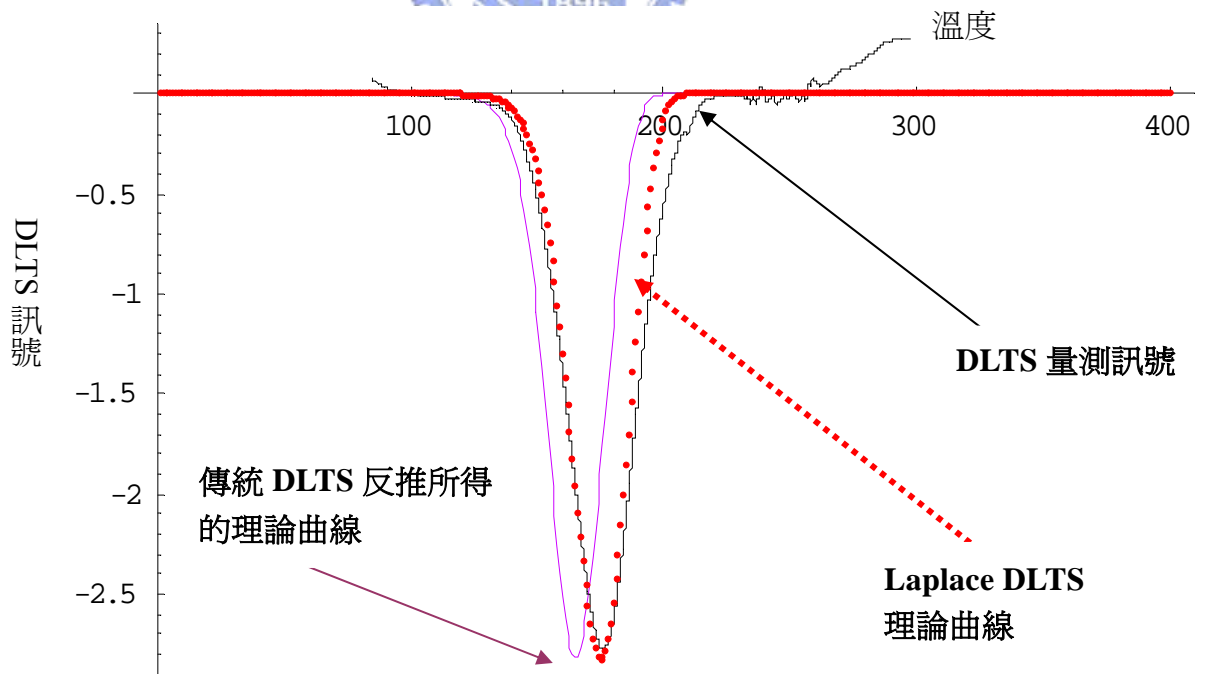
圖 (10-26)

Tikhonov regularization method

Conjugate gradient method

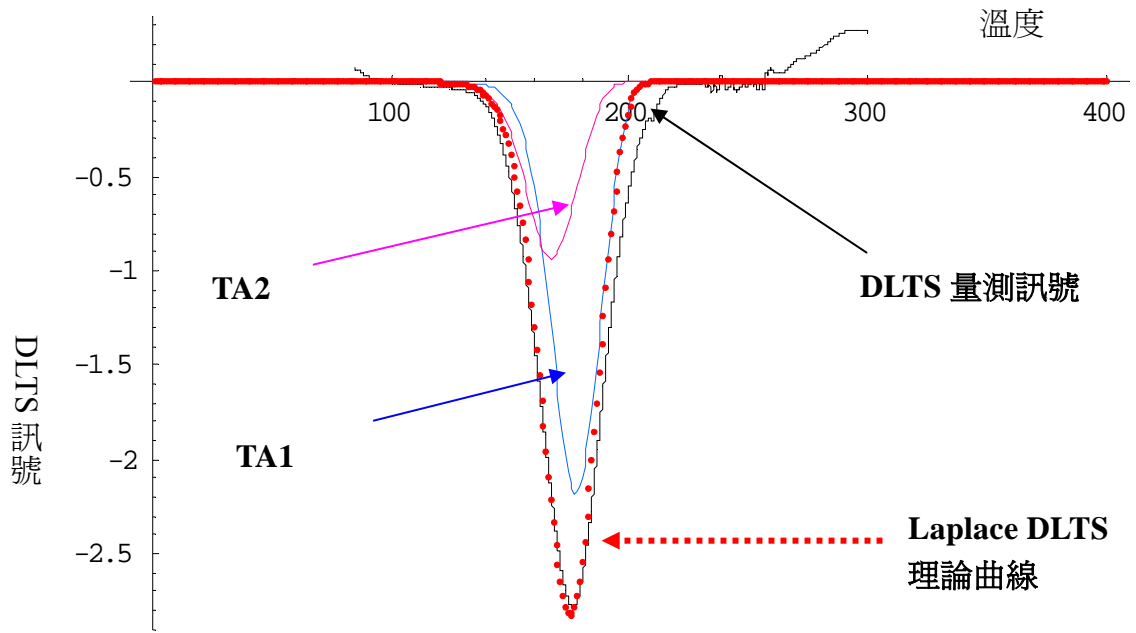


TA2 與 CA2 的奧瑞尼思 (Arrhenius plot) 圖
圖 (10-27)

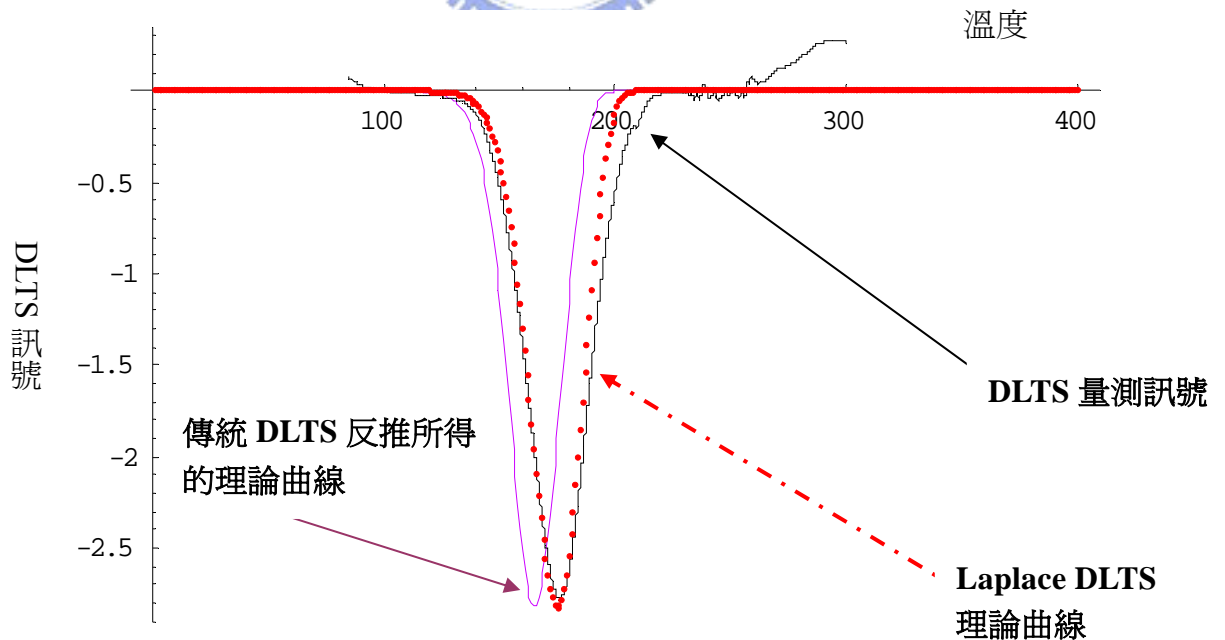


Laplace DLTS 使用 Tikhonov regularization method 的結果 (TA1、TA2)，
反推出 t_1 為 0.5msec 的理論曲線 ($t_2 = 11.5t_1$)

圖 (10-28)

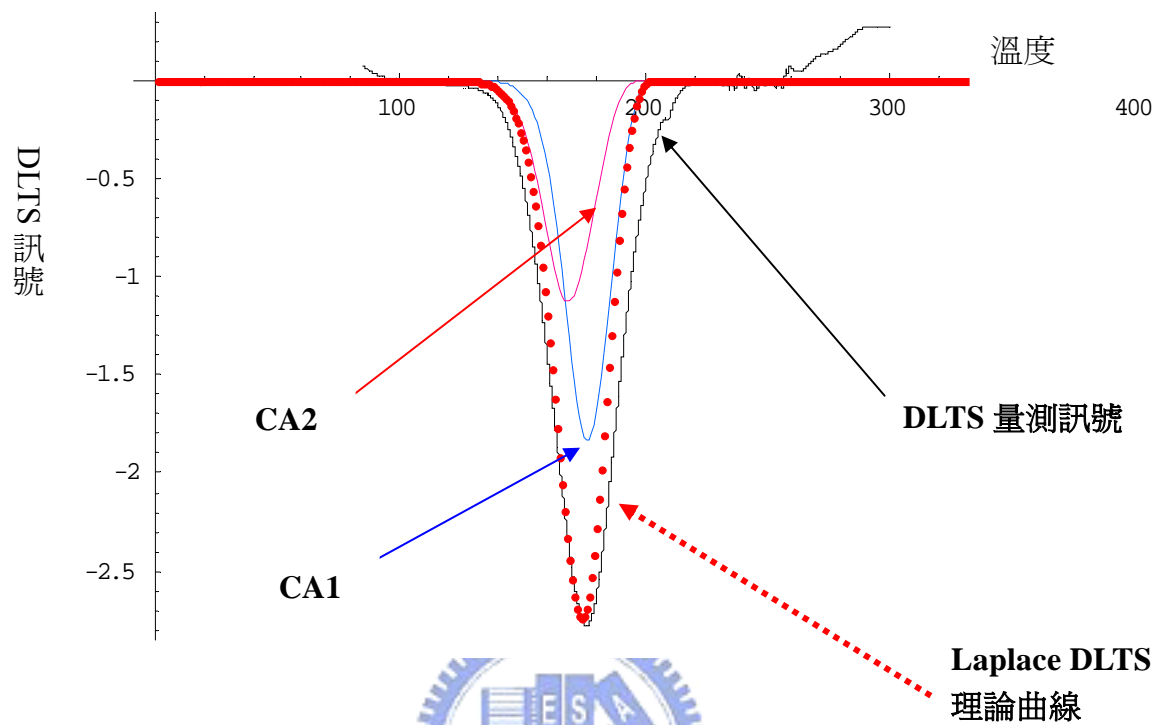


TA1 與 TA2 反推的理論曲線與量測曲線被包在 DLTS 量測曲線中
圖 (10-29)



由 Conjugate gradient method 的結果 (CA1、CA2) 所反推的理論曲線，
比傳統 DLTS 結果反推的理論曲線更接近量測所得的訊號

圖 (10-30)



CA1 與 CA2 反推的理論曲線與量測曲線被包在 DLTS 量測曲線中



圖 (10-31)

10.6 結論

最後我們討論一下為什麼在圖(10-28)中，使用傳統的 DLTS 結果反推的理論曲線與量測曲線相差這麼多的原因。理由有兩點，第一點是此片樣品有兩個相同成因的缺陷(DX center)並且相距 50meV 而已。所以如果使用傳統 DLTS 量測本片樣品會沒辦法明顯的分辨出這兩個缺陷，訊號甚至是一個很窄的 peak。第二點是因為較深的缺陷能階缺陷濃度：較淺的缺陷能階濃度比約為 35%:65%，這會惡化傳統 DLTS 判斷的正確性，我們將無法看到較深的缺陷訊號。甚至因為缺陷濃度相對小很多，所以由傳統 DLTS 量測訊號看起來左右是對稱的。

由表(10.7) Laplace DLTS 與傳統 DLTS 結果，我們發現 DX2 在迭代前後答案都蠻接近的，但是 DX1 在迭代前活化能相差 52meV。我們比較相信迭代後的結果，即使用 Conjugate gradient method 迭代收斂的結果。我們參考相關文獻[50]也找到兩個 DX center。較深的能階約為 350meV，較淺的缺陷能階約為 290meV，與我們使用共軛梯度法，收斂(Tikhonov regularization method 的解當初始值)所得之最佳解幾乎相同。故在此也證明我們運用的數學方法是合理與可行的。在文獻[48]中，C. K. Chung 使用 multi-exponential DLTS 量測與我們完全相同的塊材，結果中也有兩個與我們量測完全相同的缺陷。

文獻[51]中，Laplace DLTS 發明者 L. Dobaczewski 在 1992 年也有量測過 $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ 塊材缺陷，他量到三個非常接近的缺陷能階，分別是 412meV、420meV 與 429meV，並且在文獻中並沒有明確的指出他找到新的缺陷。我們比較 L. Dobaczewski 與我們的結果，除了 412meV 很接近我們量測到的較深的缺陷外，另外兩個是完全不同的缺陷。當然這是因為我們的塊材略有不同

($\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$)所造成的，但是我覺得另外兩個缺陷在其他電性量測中從未被提起過，所以這有可能是模擬誤差(模擬近似)所造成的假訊號。而在本論文中，我們不只是使用 L. Dobaczewski 所提出的 Tikhonov regularization method，接著我們也有用共軛梯度法收斂之。如果在 Tikhonov regularization method 中，我們誤判多假設了一個缺陷能階，我們利用共軛梯度法將會收斂到一個比迭代初始值更差的解，這時我們就可以回頭去檢查，看是否把一些模擬雜訊訊號當成缺陷能階了。當然也因此有效的避免使用 Laplace DLTS 找到許多不存在的能階。

另外我們在 10.2(a) 中討論到 DLTS 訊號會隨著速率視窗(emission rate window)而改變的問題，因為我們使用 Laplace DLTS 解析出兩個缺陷能階是很靠近的 DX center，又因為 DX 中心是點缺陷，所以應該不是捕捉位障影響。我們猜測是因為缺陷濃度與雜質濃度相近，而形成的近似誤差所產生的現象。

	DX1	缺陷濃度 Cm⁻²	DX2	缺陷濃度 Cm⁻²
DLTS	Energy : 0.2517 ev Sigma : 2.2E-15 cm²	6.38E15	無	無
Laplace DLTS By Tikhonov method	Energy : 0.3977ev Sigma : 7.7E-12 cm²	4.466E15	Energy : 0.3040ev Sigma : 4.12E-14cm²	1.914E15
Laplace DLTS By 共軛梯度法	Energy : 0.3456ev Sigma : 9.52E-14cm²	3.95E15	Energy : 0.3017ev Sigma : 1.96E-14cm²	2.432E15

Laplace DLTS 與傳統 DLTS 結果
表 (10.7)

第十一章. GaAs 塊材

在這一節中，我們使用 Laplace DLTS 量測 GaAs 塊材，與典型 DLTS、CF 導納頻譜比較量測結果。而在 Laplace DLTS 模擬時，比較使用 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 是否有差異。

11.1 基本電性量測

我們把 GaAs 塊材正面鍍金(Au)，以製作蕭特基界面(Schottky contact)。因為樣品背面似乎有雜質，故我們在製作歐米界面(ohmit contact)前要先用氨水：雙氧水：水=1：1：3 濕蝕刻 15 秒。接著背面再黏著錫球(In ball)後放進爐管合金(alloy) 300 度 40 秒，這樣我們 GaAs 塊材的蕭特基原件就完成，如圖(11-1)結構所示。而鍍金就是為了保護 pattern 不被蝕刻。

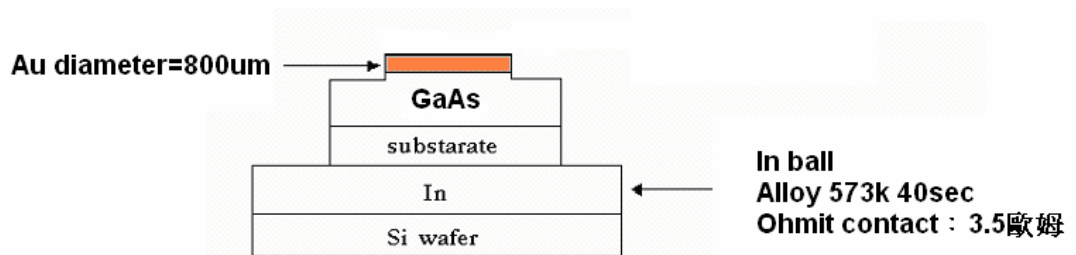
圖(11-2)為 IV 特性曲線，理想因子(ideal factor)約為 1.26。另外因為量測典型 DLTS 時，逆偏的漏電流不能太大，故在用氨水濕蝕刻(wet etch)時，不能吃過頭，不然漏電流會太大，而量測到有問題的資料。圖(11-3)為 C-V 特性曲線，圖(11-4)為此片 GaAs 塊材的縱深分佈，Si 雜質濃度大約都是 $5E+16\text{cm}^{-3}$ 。如此提高雜質參雜濃度可以讓我們在量測電容暫態時，可以獲得比較明顯的曲線。

如圖(11-5)所示，我們把 IV 曲線的縱座標 Y 軸取對數，由高電壓區域 IV 曲線來計算本元件的串聯電阻。由金半界面的電流電壓關係式：

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nKT}\right) - 1 \right]$$

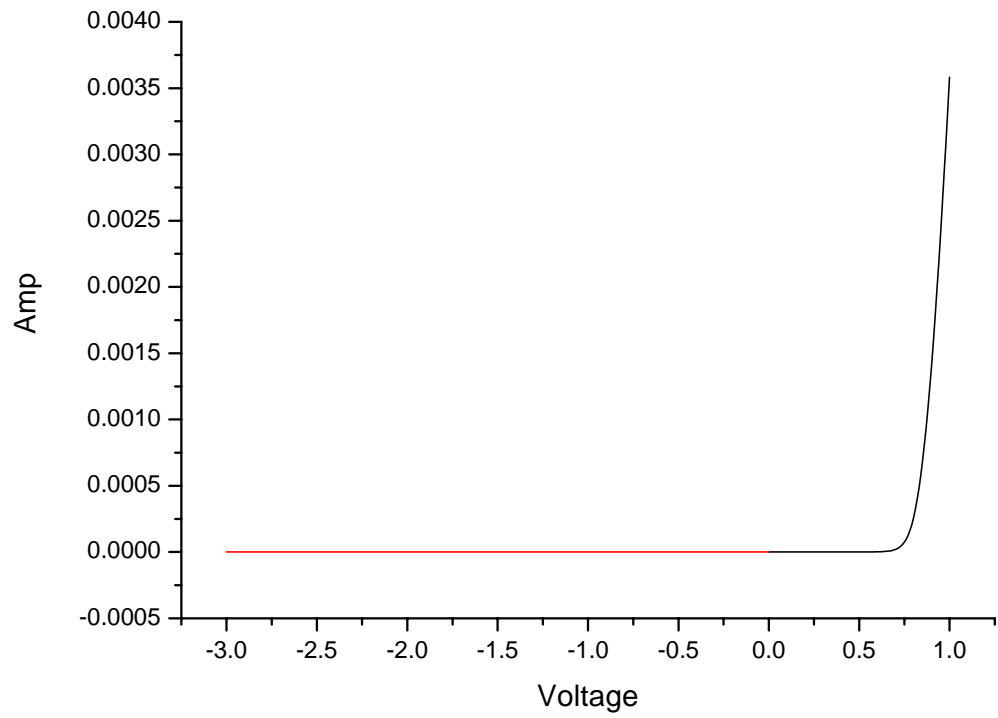
數值模擬出串聯電阻 $R_s \cong 5.698$ 歐姆，所以我們接

下來做任何與電容相關的電性量測，串聯電阻的效應都可以忽略。



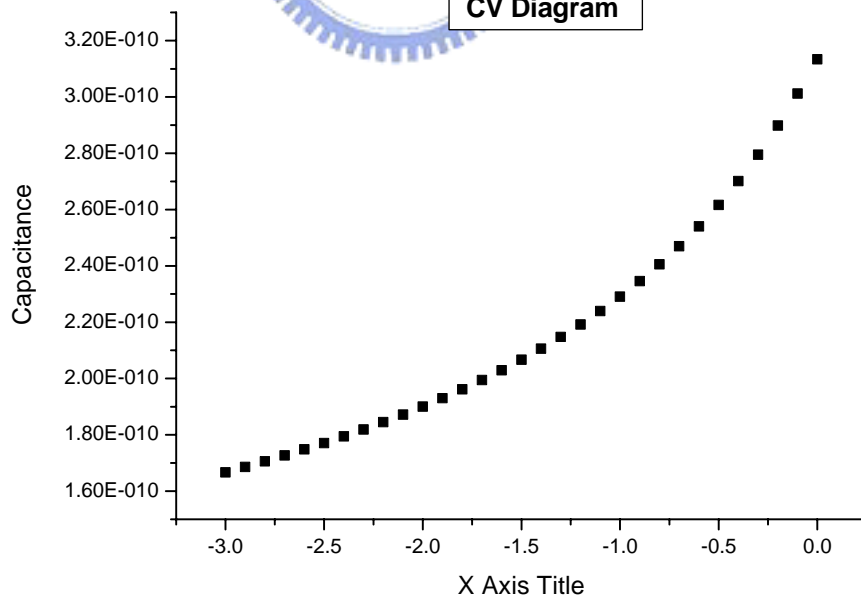
GaAs Schottky diode structure

圖(11-1)



GaAs I-V Diagram

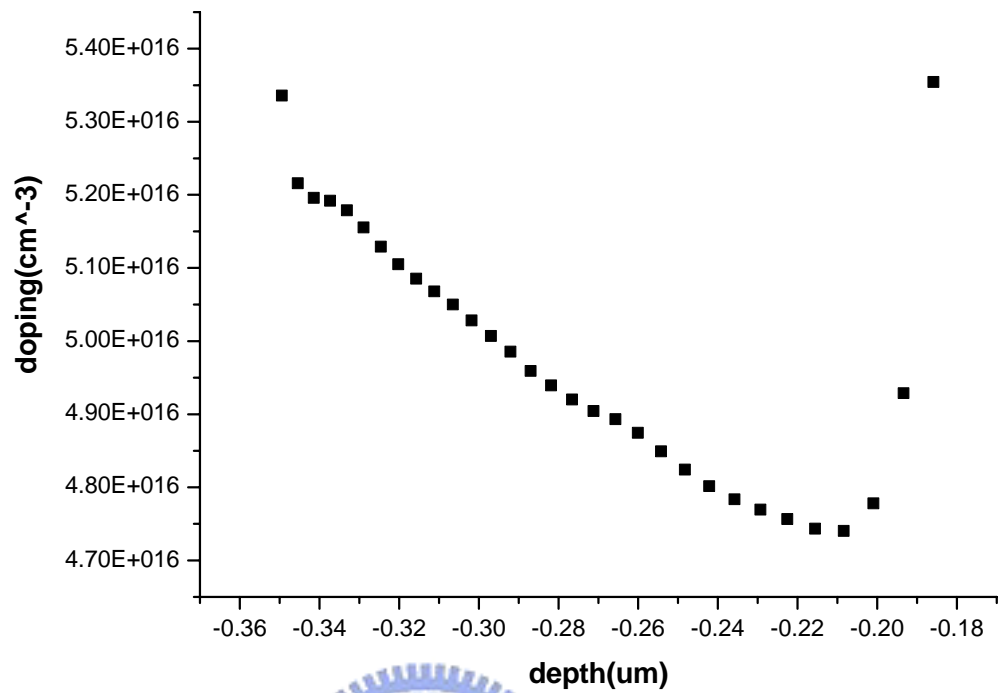
圖 (11-2)



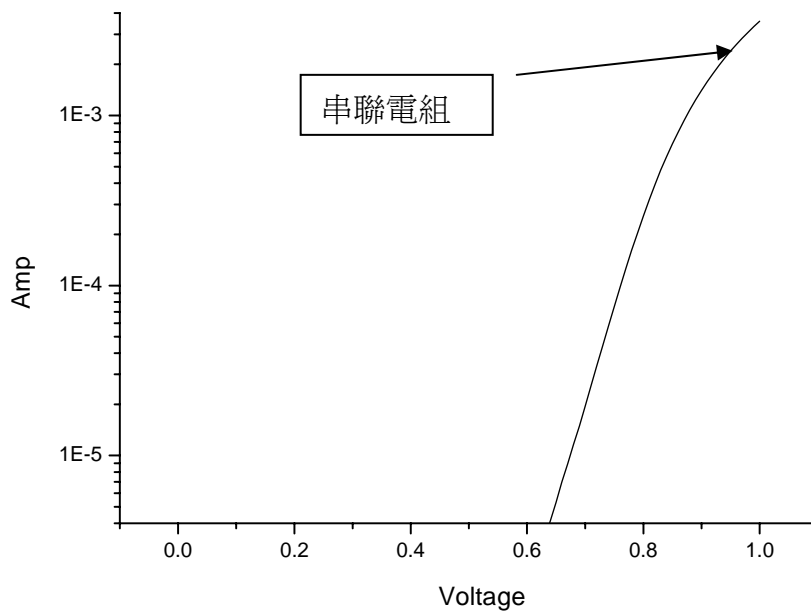
CV Diagram

GaAs C-V diagram

圖 (11-3)



GaAs 縱深分佈圖
圖 (11-4)



在高電壓下的 IV 曲線受到串聯電組影響

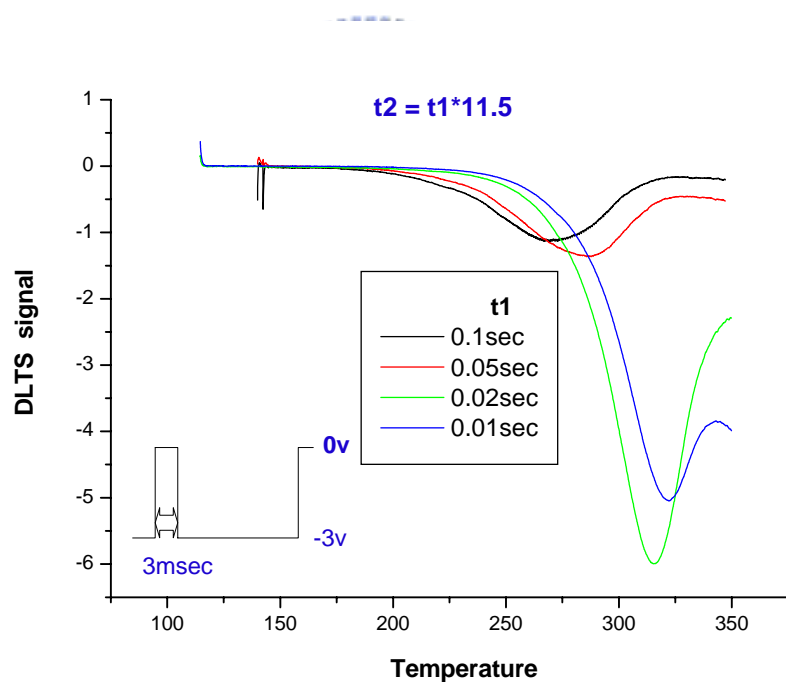
圖 (11-5)

11.2 典型 DLTS 量測

在 11.2 (a) 中，我們使用 Boxcar DLTS 量測 GaAs 塊材缺陷特性。在 11.2(b) 中，我們改變偏壓範圍，研究缺陷與空間分佈的關係。

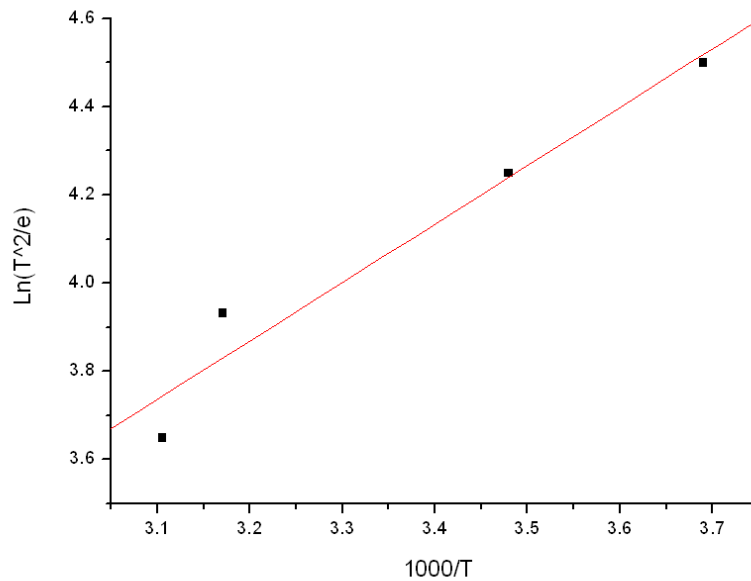
11.2 (a.) DLTS 量測

圖 (11-6) 是在偏壓範圍為 0v 到 -3v，填充時間 (filling plus time) 為 3msec，穩態偏壓時間為一秒所獲得的 DLTS 訊號。而這個多數載子訊號在奧瑞尼思 (Arrhenius plot) 圖上，如圖 (11-7) 所示，我們由斜率與截距即可獲得活化能都約為 0.2629ev，捕獲截面積約為 $1.069E-20\text{cm}^2$ 。但是此 DLTS 量測中，DLTS 訊號的高度有隨著速率視窗而改變，一般認為這種現象是與差排 (dislocation) 所產生的缺陷有關。另外在速率視窗 t_1 為 0.1sec 時，我們可以發現 DLTS 訊號左右並不對稱，且訊號分佈在蠻寬的溫度範圍中，所以我們由 DLTS 量測到的訊號很有可能是由兩個以上的缺陷所共同提供的。另外由圖 (11-6) 中 DLTS 訊號會隨著速率視窗 (emission rate window) 而改變，我們接著討論此現象的成因。



GaAs 塊材傳統 DLTS 量測結果

圖 (11-6)



GaAs 塊材的奧瑞尼思 (Arrhenius plot) 圖

圖 (11-7)

在使用 DLTS 量測三五族塊材缺陷時，我們以前假設的模型都是當缺陷為點缺陷 (point defect) 的情況，如 DX 中心、EL2 缺陷都是很常見的點缺陷例子。但是缺陷種類除了點缺陷外還有一種因為差排 (dislocation) 所產生的缺陷。而這種 Dislocation defect 通常擁有捕捉位障 (capture barrier)，所以在 DLTS 訊號圖中有些特殊現象就是這捕捉位障所造成的。

而當發現改變填充時間，DLTS 峰值訊號會隨填充時間增加的關係。或者在 t_2/t_1 固定下，改變速率視窗 (rate window) 大小，DLTS 訊號也會有改變。這些現象是由於缺陷在捕捉電子時有捕捉位障所造成的，因此若是缺陷填充時間越長，則缺陷填充電子的機率就越大。

圖 (11-8) 當缺陷的電子填充速率很低時，它對電子捕捉情形類似一般的點缺陷。圖 (11-9) 當電子填充率越來越多時，會在它的周圍形成位能障，使它對電子的捕捉速率越來越慢。圖中 Dislocation line 是垂直紙面。當缺陷捕捉到電子之後，會在周圍形成電位場，排斥其他電子繼續填入缺陷，而這個電場大小與缺陷電子填充率成正比：

$$\phi(t_p) = \phi_0 n_i(t_p) / n_{i0}$$

$$\text{其中 } n_i(t_p) = f(t_p) N_t$$

下標0表示達到平衡時的值, t_p 表逆偏壓填充的時間

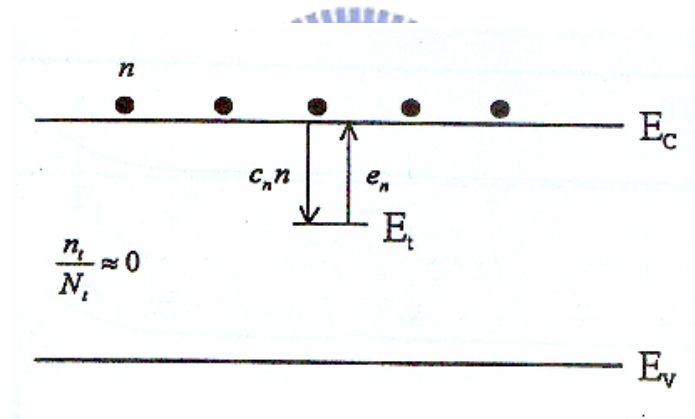
缺陷對電子捕捉的動態過程如下：

$$\frac{dn_i}{dt_p} = \sigma_n v_{th} n N_t [1 - f(t_p)] e^{-\frac{q\phi(t_p)}{kT}} \dots\dots\dots(11.1)$$

爲了能求上式的解析解, 我們忽略變化量 $[1 - f(t_p)]$

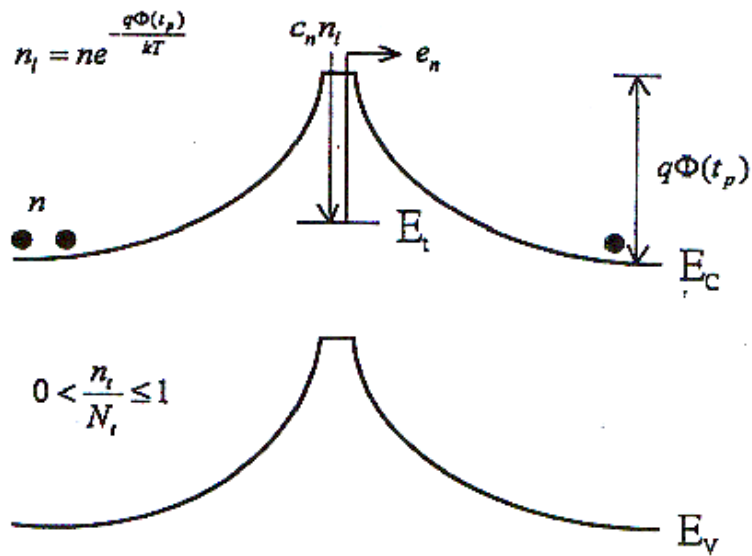
故(11.1)解：

$$n_i(t_p) = \frac{kT}{q} \frac{f_0}{\phi_0} N_t \ln\left(\frac{t_p + \tau}{\tau}\right) \dots\dots\dots(11.2)$$



當缺陷的電子填充率很低時，它對電子的捕捉就類似一般的點缺陷

圖 (11-8) [44]



當缺陷的電子填充率越來越多時，會在它周圍形成位能障，使的它對電子的捕捉速率越來越慢

圖 (11-9) [44]

因此我們觀察圖 (11-6) 中，速率視窗大小與訊號峰值大小的關係，發現正好與方程式 (11.2) 中速率視窗越大訊號峰值越小的關係相同。雖然說速率視窗 (t_1) 為 0.01 秒時 DLTS 訊號並沒有最大，那應該是因為在更高溫時出現另外一個缺陷訊號產生的關係。所以我們可以說本片樣品的缺陷可能與 Dislocation defect 也關。最後再注意圖 (11-6) 中， t_1 為 0.1sec、0.05sec 時的 DLTS 訊號，很明顯的該訊號左右不對稱，並且訊號波形橫跨很大的溫度範圍。因此我們猜測此訊號，可能由兩個以上的缺陷所共同提供的。

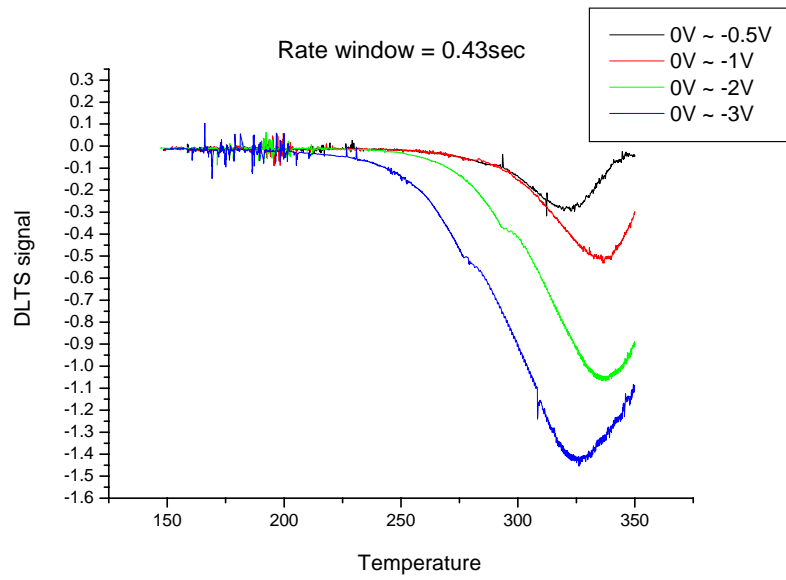
11.2 (b) 深層能階空間分佈

我們改變偏壓範圍，研究缺陷空間分佈，看 DLTS 所量測到的缺陷，是否均勻分佈於塊材中。故我們改變穩態電壓的大小，紀錄訊號峰值如表 (11.1) 所示，而實驗數據如圖 (11-10) 所示。經過運算後，我們可以得到與深度有關的缺陷濃度分佈繪圖在 (11-11) 中。故我們可以說此 DLTS 量測到的訊號為均勻分佈於塊材的缺陷，而缺陷濃度大約在 $1E+15\text{cm}^{-3}$ ，也符合我們 DLTS 的假設。

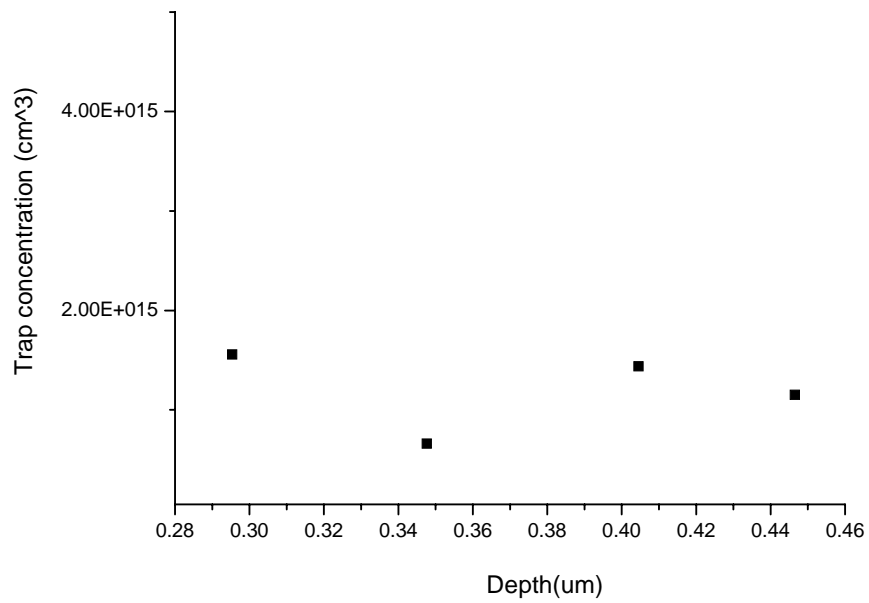
但是有一點值的注意的是，在圖 (11-10) 中，DLTS 訊號峰值所對應到的 T_{\max} 會左右擺動，這應該是 DLTS 訊號分佈太寬（此及該訊號波形為兩個以上的缺陷所貢獻），造成改變穩態偏壓下 T_{\max} 會略有不同。

脈衝偏壓	0V	0V	0V	0V
穩態偏壓	-0.5V	-1V	-2V	-3V
DLTS 訊號峰值	0.2826	0.532	1.065747	1.4544
T_{\max}	321.7k	336.4k	336.4k	326.1k

改變穩態電壓的大小，紀錄訊號峰值
表 (11.1)



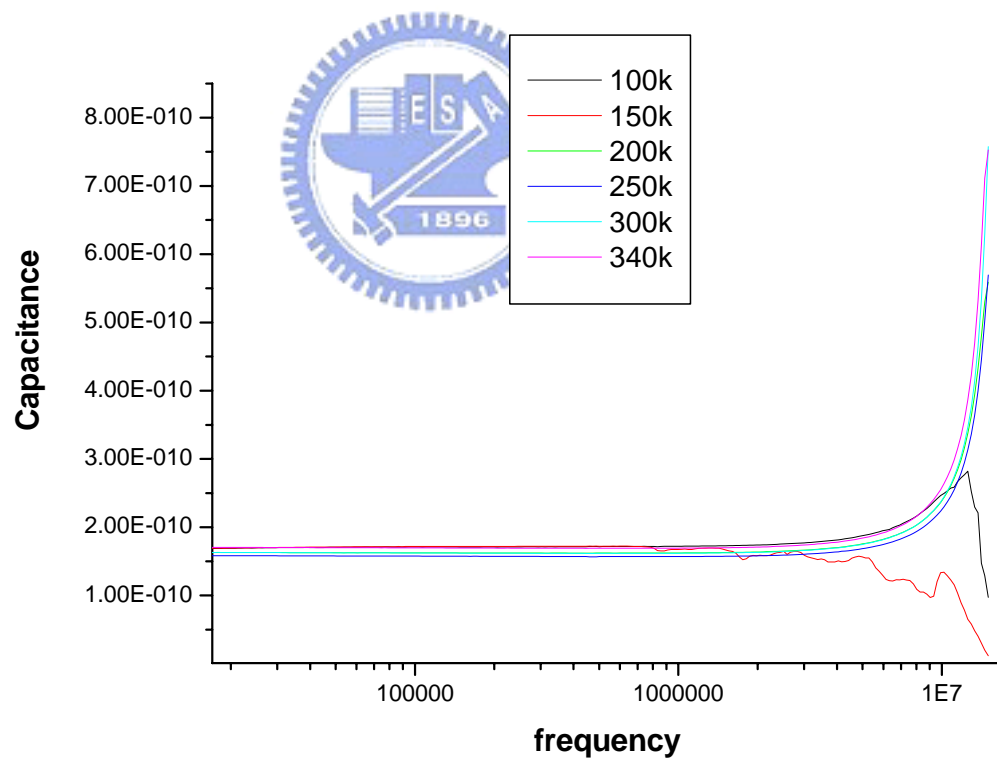
DLTS 在不同偏壓範圍的訊號
圖 (11-10)



GaAs 塊材樣品的縱深分佈
圖 (11-11)

11.3 導納頻譜量測

我們把此 GaAs 塊材，變溫量 C-F，根據導納頻譜特性，圖中反曲點的倒數即為兩倍的熱激發速率。我們在定偏為 -2V，改變頻率範圍從 100Hz 到 1.5×10^7 Hz，溫度範圍從 100k 到 340k。由圖 (11-12) 發現沒有反曲點存在，也就是說無法由導納頻譜中量到與 DLTS 相同的缺陷訊號。至於 C-F 頻譜中，當頻率大於 1×10^7 Hz 時，量測到的電容值急速上升，這是由於量測機台 (HP4194) 本身在高頻下所產生的電桿效應所影響的。所以在本例子中，我們無法由導納頻譜直接印證 DLTS 量測結果正確與否，不過接著我們將使用 Laplace DLTS 重複量測本片樣品的電容量測實驗。



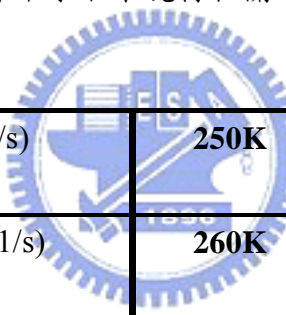
GaAs 塊材變溫導納頻譜
圖 (11-12)

11.4 GaAs 電容暫態曲線

從典型 DLTS 量測 GaAs 中，發現一個活化能都約為 0.2629eV，捕獲截面積約為 $1.069E-20\text{cm}^2$ 。故我們使用上述活化能與捕獲截面積來推算，要固定在哪些溫度下，才量測的與 DLTS 相同缺陷的電容暫態曲線。表 (11.2) 是由方程式 (9.1) 所得到的熱激發速率 (emission rate) 值，我們可以發現熱激發速率增加很緩慢，所以我們每隔 10k 擷取一次電容暫態訊號，這樣選取可以讓系統溫度穩定度對我們的結果影響略微簡小。

圖 (11-13) 為 GaAs 在 220k 下改變不同的脈衝偏壓 (-1v) 填充時間後，再回到穩態偏壓 (-2v) 擷取訊號。在圖中我們可以的發現填充秒數拉長時電容暫態曲線似乎都相同，所以我們可以說當填充秒數為 3msec 時，GaAs 塊材中的缺陷就被填滿，所以當我們選取 1sec 為脈衝偏壓填充時間下，缺陷因該是被填滿電子的。

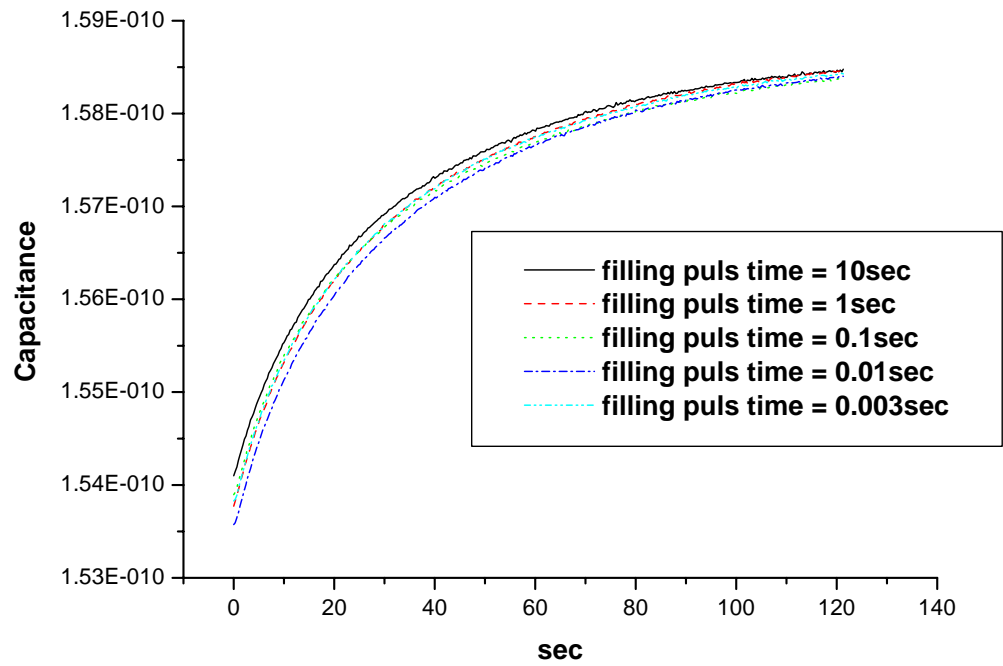
所以在脈衝偏壓為 0V、脈衝時間為 1sec，穩態偏壓為 3V、穩態偏壓時間大小則依據電容暫態曲線改變的快慢適當的調整。圖 (11-14)、圖 (11-15) 即為與傳統 DLTS 量測相同偏壓範圍下，電容暫態曲線隨溫度變化的關係圖。由表 (11.2) 決定溫度範圍為 200k~300K，我們接下來及拿這些電容暫態曲線數據，帶入 Laplace DLTS 模擬運算中求取本塊材相關之缺陷物理量。



190K	9.6E-3 (1/s)	250K	0.7812 (1/s)
200K	2.37E-2 (1/s)	260K	1.35 (1/s)
210K	5.4E-2 (1/s)	270K	2.246 (1/s)
220K	0.1149 (1/s)	280K	3.614 (1/s)
230K	0.2293 (1/s)	290K	5.641 (1/s)
240K	0.43342 (1/s)	300K	8.57 (1/s)

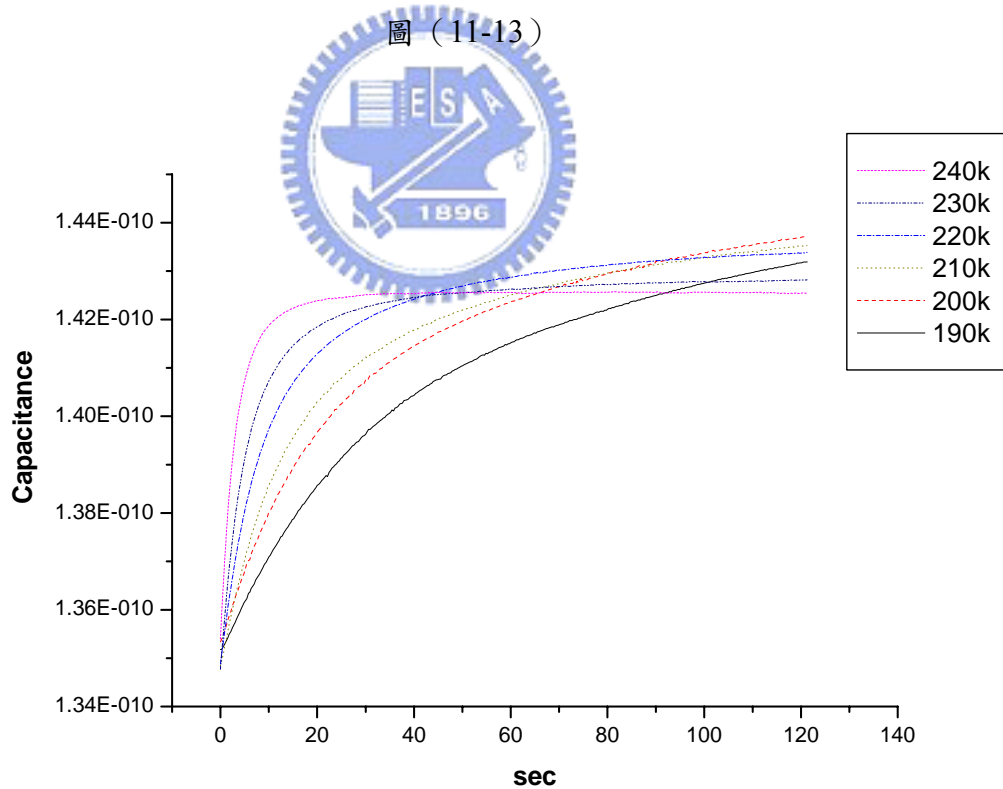
由典型 DLTS 量測結果反推 $s(T)$

表 (11.2)



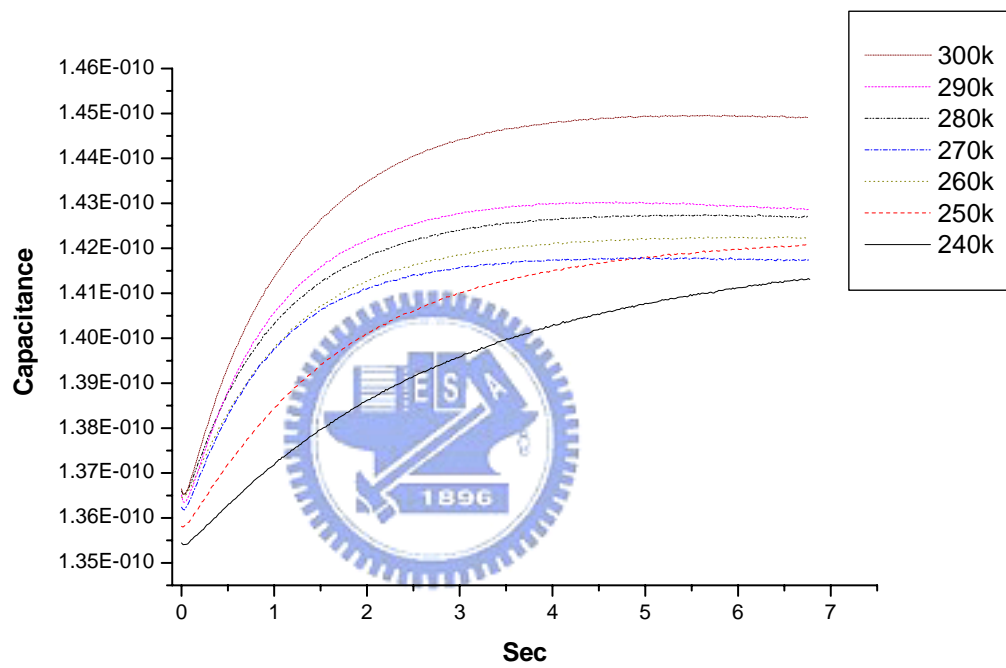
GaAs 在 220k 下改變不同的脈衝偏壓之電容暫態訊號

圖 (11-13)



電容暫態曲線隨溫度變化的關係圖

圖 (11-14)



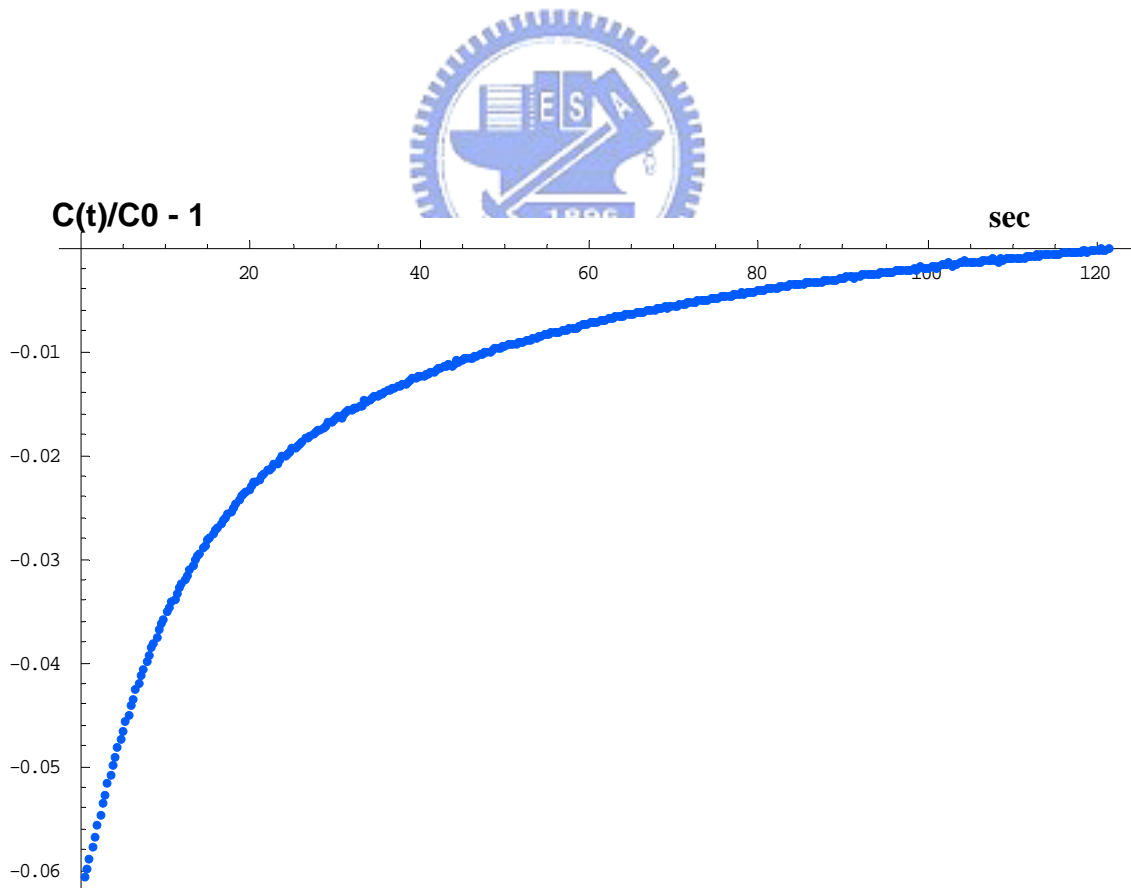
電容暫態曲線隨溫度變化的關係圖
圖 (11-15)

11.5 Laplace DLTS

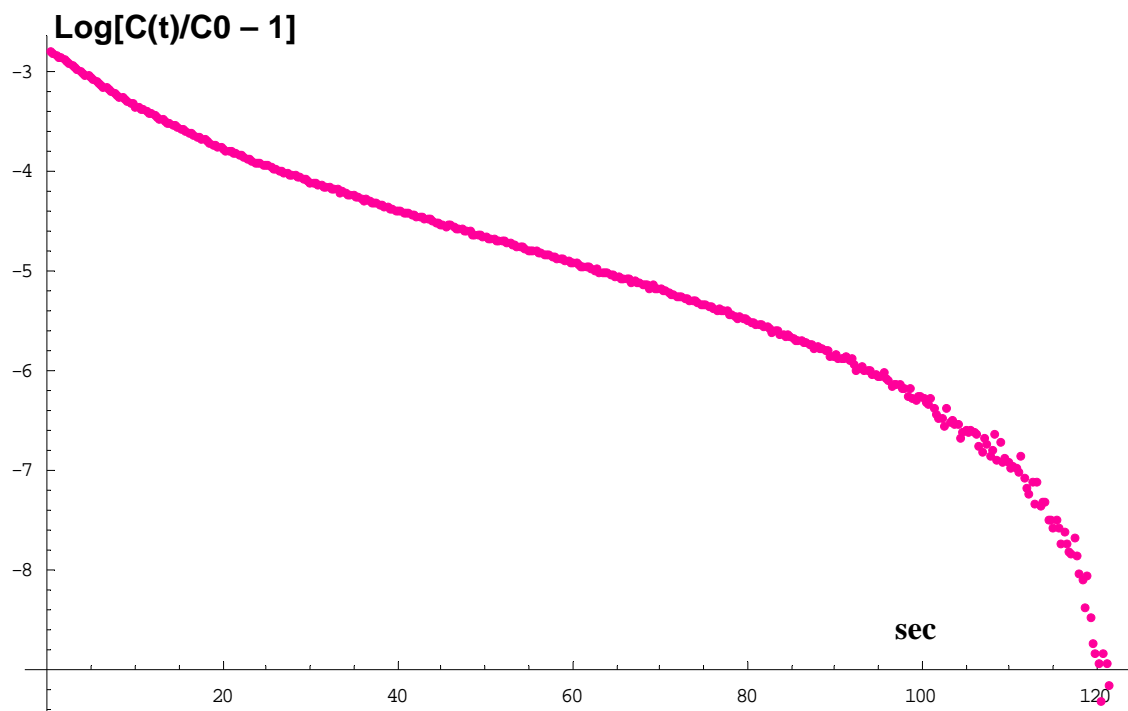
在本節中，我們分別在定溫下量測電容暫態曲線。接著我們要拿這些電容暫態曲線先使用 Tikhonov regularization method，來決定這些電容暫態曲線的方程式形式後，再把 Tikhonov regularization method 當 Conjugate gradient method 的迭代法的初始值，期望收斂到一個最合理解。

11.5 (a) 模擬過程範例

我們舉定溫 210K、偏壓範圍為 $-0V \sim -3V$ 下的電容暫態曲線當模擬範例，圖 (11-16) 即為在此條件下，量測到的電容暫態曲線。接著我們對 Y 軸取對數可得圖 (11-17)，由圖中曲線並非單一斜直線，所以我們可以說圖 (11-16) 的電容暫態曲線並非由單一個缺陷所貢獻的，最少是由兩個以上 exponential 所組和而成的。



定溫 210K、偏壓範圍為 $-0V \sim -3V$ 下的 GaAs 電容暫態曲線
圖 (11-16)



把圖 (11-16) 對 Y 軸取對數座標

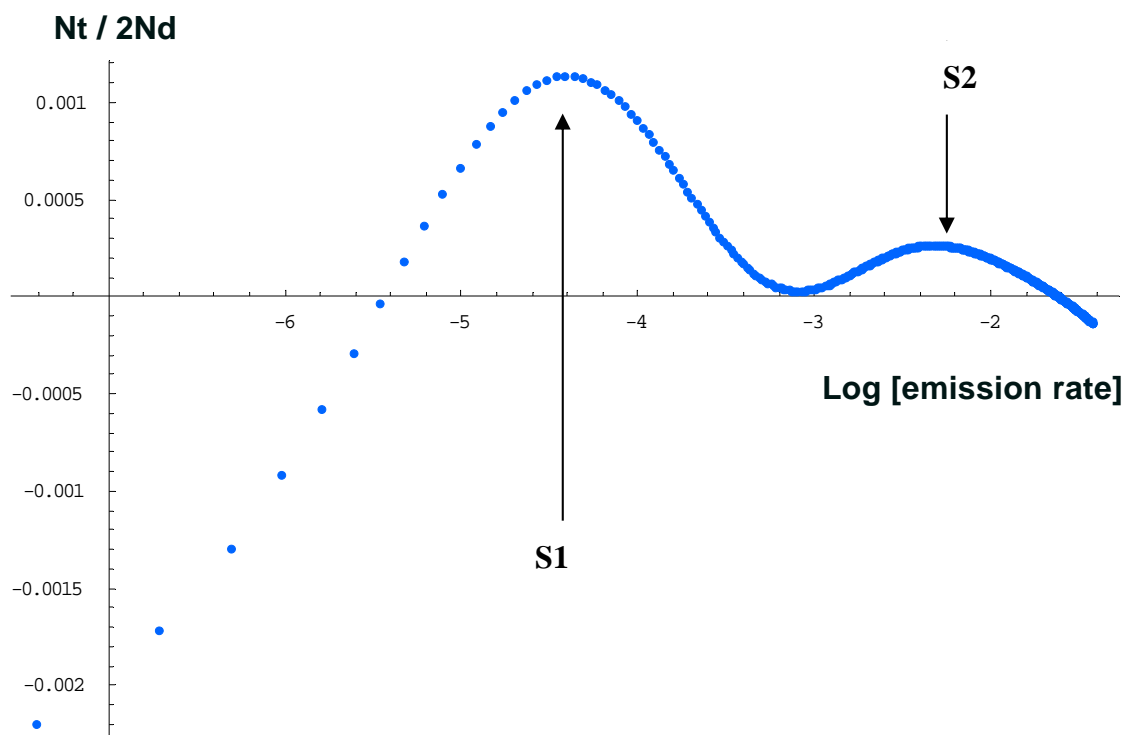
圖 (11-17)

首先用 Tikhonov regularization method 來模擬，由 error2 的極值我們選取出 α (regularization parameter) 為 0.1，帶入求出與缺陷濃度有關的 $Z[s]$ 矩陣。圖 (11-18) 中 Y 軸為 $Z[s]$ 、X 軸為 $\log(s)$ ，我們可以明顯的看到有兩個峰值，如表 (11.3) 所示。

因此在定溫 210k 下的電容暫態曲線，是由兩個缺陷所同時貢獻的，其中較深的缺陷濃度比較大，這也是為什麼 DLTS 量測時只看到單一峰值的合理解釋。接著我們把 $Z[s]$ 矩陣回推模擬曲線，並且和量測曲線比較之。圖 (11-19) 中虛線為量測曲線，實線為模擬結果回推之曲線，而兩者幾乎重疊在一起。如果把圖 (11-16) 中波形下面積令為波峰 S_{max} 所對應的 $Z[S_{max}]$ 值，而其它的 S 對應的 $Z[s]$ 令為零，這樣模擬曲線方程就可以近似寫出：

$$C(t)/C_0 - 1 = -0.0345 \text{Exp}[-0.01213t] - 0.03973 \text{Exp}[-0.09824t] \dots \quad (11.3)$$

而圖 (11-20) 中虛線為量測曲線，實線為模擬曲線方程方程式 (11.3) 所得。我們發現模擬曲線方程，與真實量測曲線有平移的現象。這是因為模擬曲線方程是經由近似所得，所以 $Z[s]$ 值大小都會出入。因此我們在找尋缺陷濃度時，必須把不同溫度相同缺陷的 $Z[s]$ 值加以平均，以提高準確度。

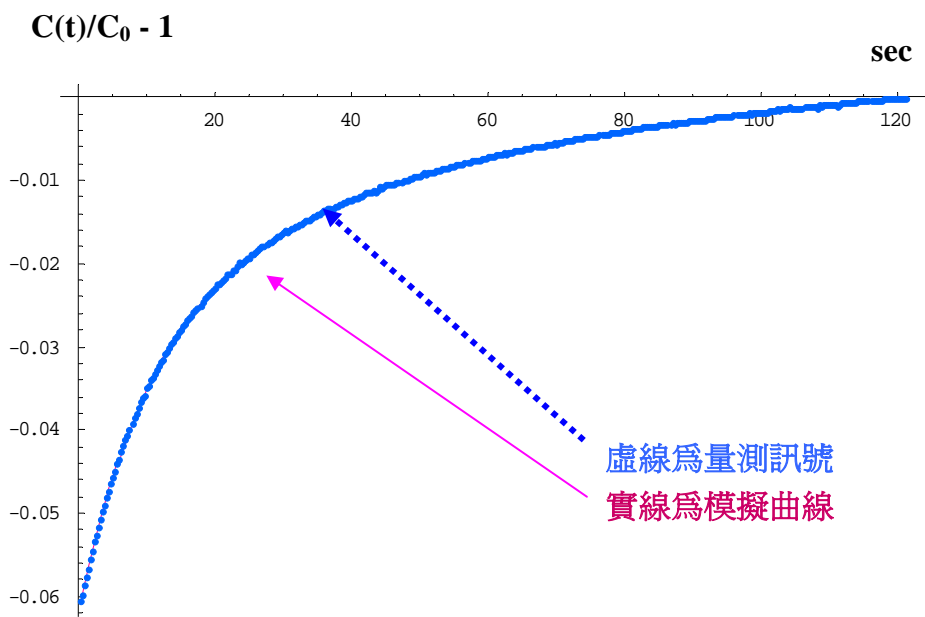


Y 軸為 $Z[s]$ 、X 軸為 $\text{Log}(s)$ 的 Laplace DLTS 頻譜圖
圖 (11-18)



	(1/s)		$Nt/2Nd$
S1	0.01213	NS1	0.0345
S2	0.09824	NS2	0.03973

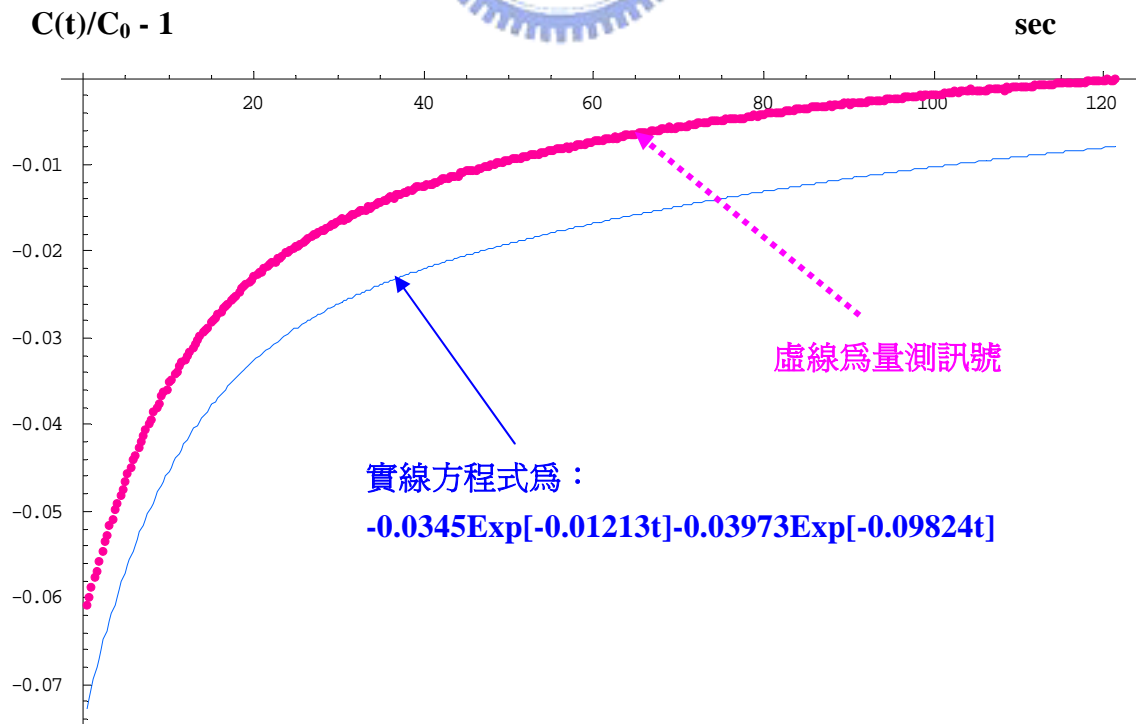
圖 (11-18) 波形峰值與底下面積
表 (11.3)



虛線為量測訊號
實線為模擬曲線

虛線為量測曲線，實線為模擬結果回推之曲線

圖 (11-19)



實線方程式為：
 $-0.0345\text{Exp}[-0.01213t]-0.03973\text{Exp}[-0.09824t]$

虛線為量測訊號

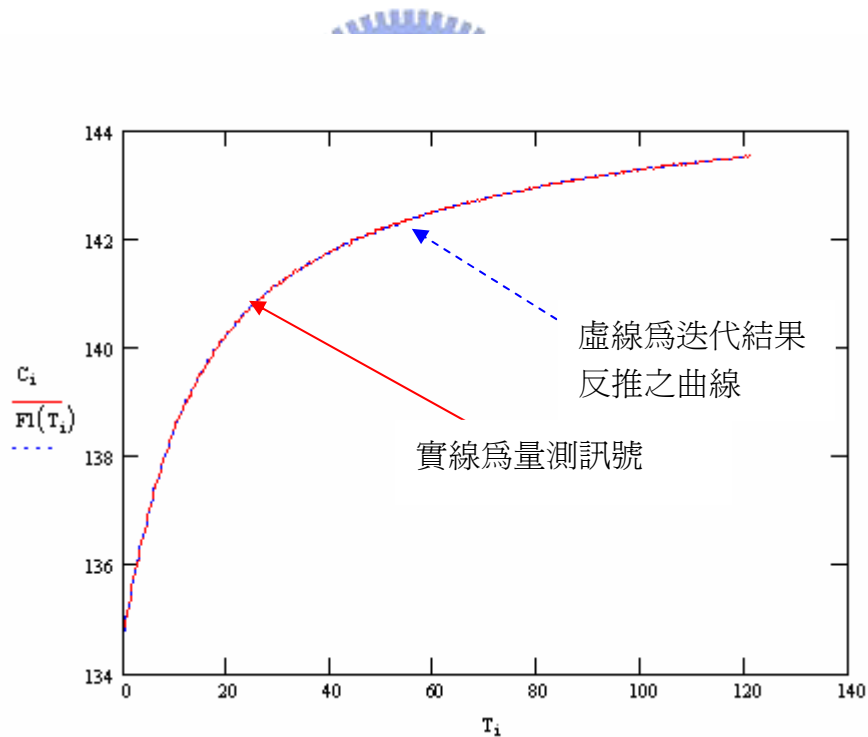
虛線為量測曲線，實線為模擬曲線方程方程式 (11.3)

圖 (11-20)

接著我們把 Tikhonov regularization method 的結果，當成共軛梯度法 (conjugate gradient method) 的初始時，並且假設該曲線方程為兩個 exponential 所組和而成的。圖 (11-21) 中虛線即為迭代之最後的最佳解，而實線為量測曲線。而模擬方程為：

$$C(t)/C_0-1 = - 0.030553\text{Exp}[-0.017t] - 0.0344\text{Exp}[-0.097t] \dots\dots \quad (11.4)$$

比較方程式 (11.3) 與 (11.4)，我們發現除了與缺陷濃度有關的 $Z(s1)$ 、 $Z(s2)$ 值被高估外 (尤其是 $Z(s2)$)，其實結果還蠻接近的。並且由圖 (11-21) 發現我們收斂的解似乎更接近量測到的電容暫態訊號。所以我們可以說使用共軛梯度法有迭代出更接近量測曲線的解。因此接著我們就循著這個方法，來模擬不同條件的定溫電容暫態曲線。



迭代初始值：- 0.0345Exp[-0.01213t] - 0.03973Exp[-0.09824t]
 迭代收斂值：- 0.030553Exp[-0.017t] - 0.0344Exp[-0.097t]
 實線為量測訊號，虛線為迭代結果反推之理論曲線

圖 (11-21)

11.5 (b) 模擬結果

首先我們先來觀察使用 Laplace DLTS by Tikhonov regularization method 確定的這兩個缺陷是否由隨著溫度上升而增加，模擬結果如表 (11.4) 所示。由於並不是每個溫度模擬出來都是兩個峰值的情況，甚至在 230k 的模擬結果有三個訊號峰值，而 240k 的模擬結果我們只看到單一峰值。因此在本樣品 (GaAs) 中，我們在不同溫度條件下，找尋相同缺陷所引起的訊號峰值就比較困難。

因此我們由缺陷濃度大小與熱激發速率會隨溫度穩定上升，這兩點來分析表 (11.4) 的數據。我們猜測有一個明顯比較淺的缺陷，從 200k 到 300k 都存在著，而這個缺陷應該是 DLTS 量測中能被我們分析得到的。而另外一個較深的缺陷，從 250k 開始穩定出現，而這個缺陷應該就是我們由 DLTS 中被忽略的。故我們就假設本片樣品的電容暫態值是由兩個缺陷所提供的，而開始使用 conjugate gradient method 迭代。結果如表 (11.5) 所示，這兩個熱激發速率穩定的隨著溫度上升而增加，但是缺陷濃度大小就不穩定了。

把 Tikhonov regularization method 結果可整理成圖 (11-22)，其中 X 軸為熱激發速率 (取對數座標)、Y 軸代表 $N_t/2N_D$ ，而偏壓範圍固定在 0v ~ -3v，溫度循序由 250k 到 290k。接著我們改變偏壓範圍觀察模擬結果，情況與前述的類似。值得注意的是溫度在 270k 以上的電容暫態曲線模擬結果，似乎在低熱激發速率時有第三個訊號出現，也就是說該電容暫態曲線似乎有可能由三個缺陷所共同提供的。但是由於我們在先前為了簡化 Tikhonov regularization method 模擬過程時，我們假設 Δs 皆為等間距。所以造成我們在低熱激發速率的解析度不佳，因此在本例中直接影響到我們無法客觀的判斷該缺陷的訊號位置。

同樣把 Conjugate gradient method 結果可整理成圖 (11-23)。因為 270k 以上的模擬初始值似乎是三個 exponential 所形成的，但是我們迭代時已假設本電容暫態是由兩個 exponential 所組成，所以 270k 以上的電容暫態訊號我們就不進行迭代了。圖 (11-23) 為迭代收斂結果，有兩個熱激發速率穩定隨溫度而上升。

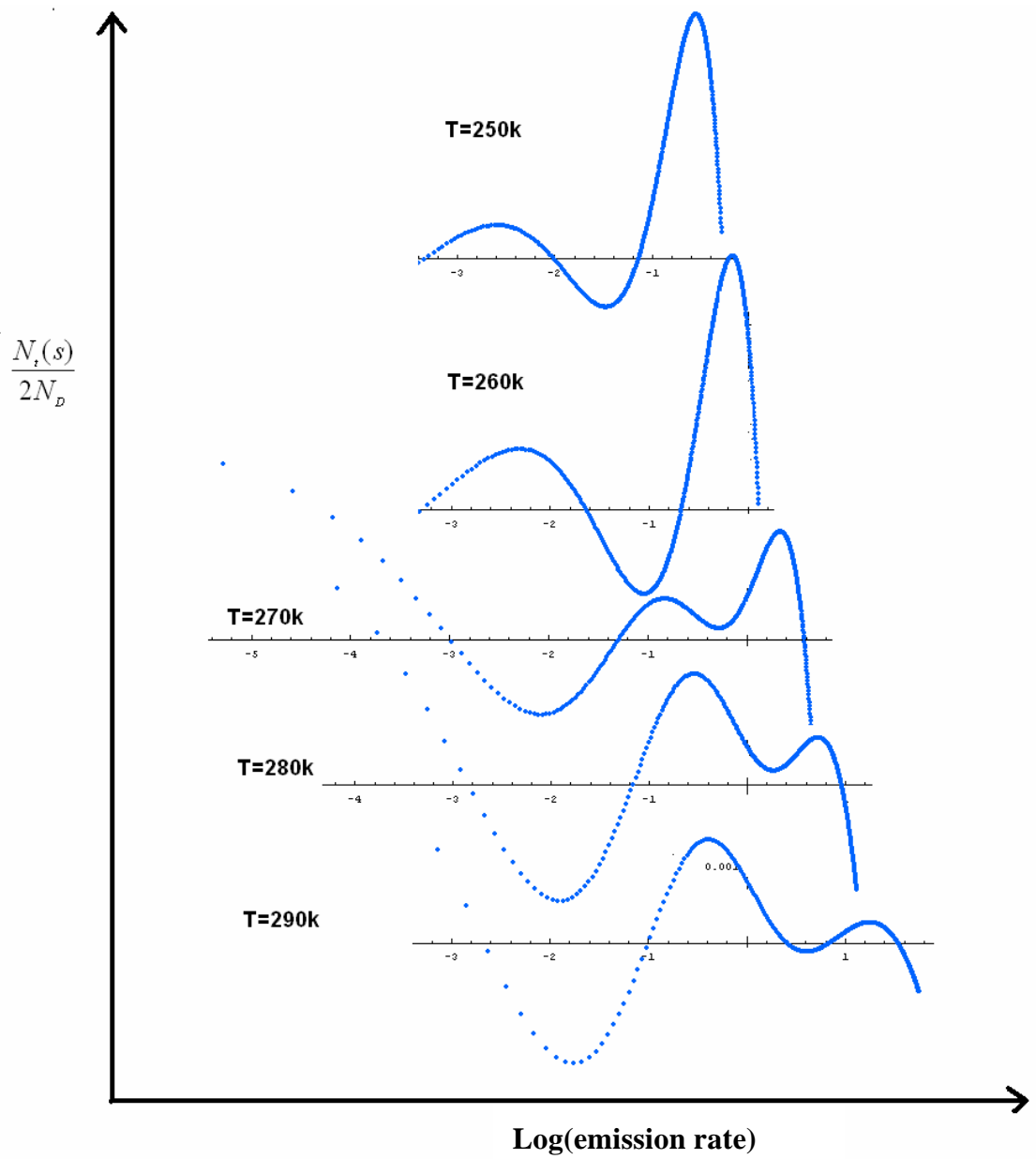
Regularization parameter = 0.1

<u>T</u>	<u>SI</u>	<u>NSI</u>	<u>S2</u>	<u>NS2</u>	<u>S3</u>	<u>NS3</u>
T=200	0.01063	0.043	0.0749	0.0416		
T=210	0.01213	0.0345	0.09824	0.03973		
T=220	0.01698	0.03059	0.1693	0.033		
T=230	0.01365	0.0056	0.09	0.0253	0.2838	0.0299
T=240	0.3684	0.0566				
T=250	<i>0.0744</i>	<i>0.00162</i>	0.57325	0.05		
T=260	<i>0.1</i>	<i>0.00314</i>	0.85249	0.04965		
T=270	<i>0.4363</i>	<i>0.01</i>	1.4	0.05469		
T=280	<i>0.579</i>	<i>0.04</i>	2.057	0.02784		
T=290	<i>0.69</i>	<i>0.0592</i>	3.7886	0.02634		
T=300	<i>0.73394</i>	<i>0.0762</i>	6.578	0.0299		

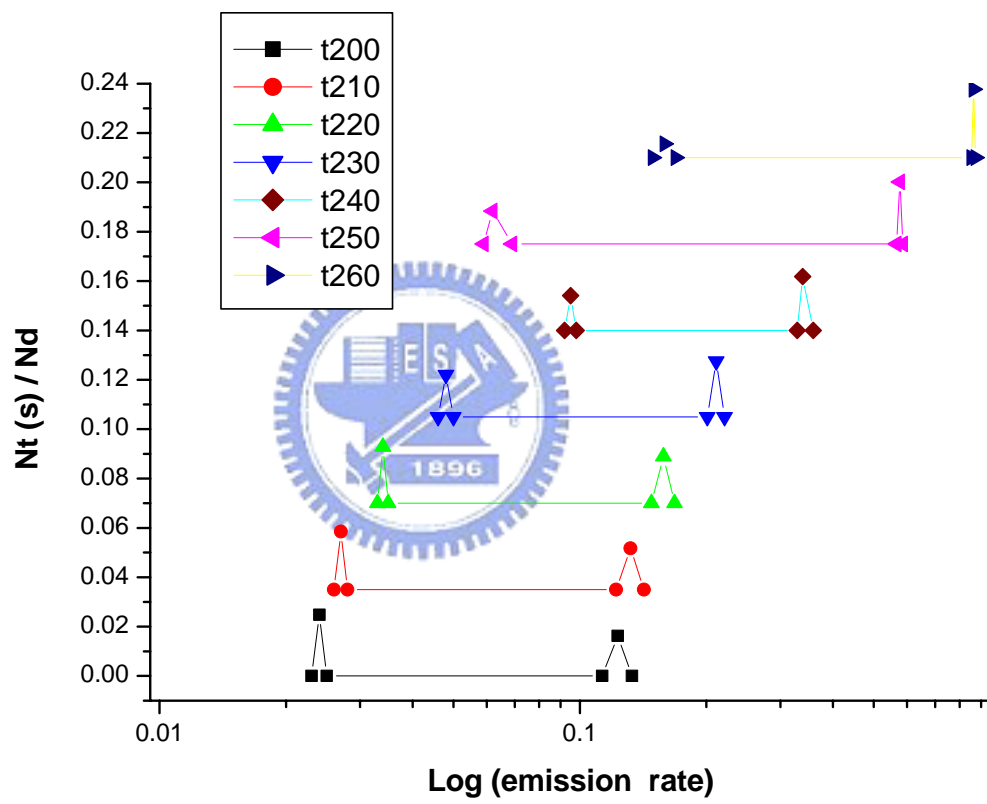
Tikhonov regularization method 模擬結果
表 (11.4)

溫度	SC1	Ns1	SC2	Ns2
200	<i>0.024</i>	<i>0.02478</i>	0.123	0.01625
210	<i>0.027</i>	<i>0.0235</i>	0.132	0.0167
220	<i>0.034</i>	<i>0.02291</i>	0.158	0.019
230	<i>0.048</i>	<i>0.0171</i>	0.211	0.02255
240	<i>0.095</i>	<i>0.0141</i>	0.339	0.02184
250	<i>0.062</i>	<i>0.0134</i>	0.577	0.0252
260	<i>0.159</i>	<i>0.0056</i>	0.864	0.0277

conjugate gradient method 迭代結果
表 (11.5)



偏壓範圍固定在 $0\text{v} \sim -3\text{v}$ ，溫度循序由 250k 到 290k 之 Tikhonov regularization method 的模擬結果
圖 (11-22)



Conjugate gradient method 結果
圖 (11-23)

接著我們命名 Tikhonov regularization method 所找到的兩個缺陷分別為：TS1（較深的缺陷）、TS2（較淺的缺陷）。由於不同溫度下都可以觀察到這兩個缺陷訊號，所以我們把同一缺陷的雜質濃度加以平均，已克服前面我們模擬近似所產生的誤差。所以最後平均 TS1 與 TS2 的雜質濃度比約為：44.25%：55.79%。接著我們命名 Conjugate gradient method 所找到的兩個缺陷分別為：CS1（較深的缺陷）、CS2（較淺的缺陷）。最後平均的 CS1 與 CS2 雜質濃度比約為：64.3%：35.7%。

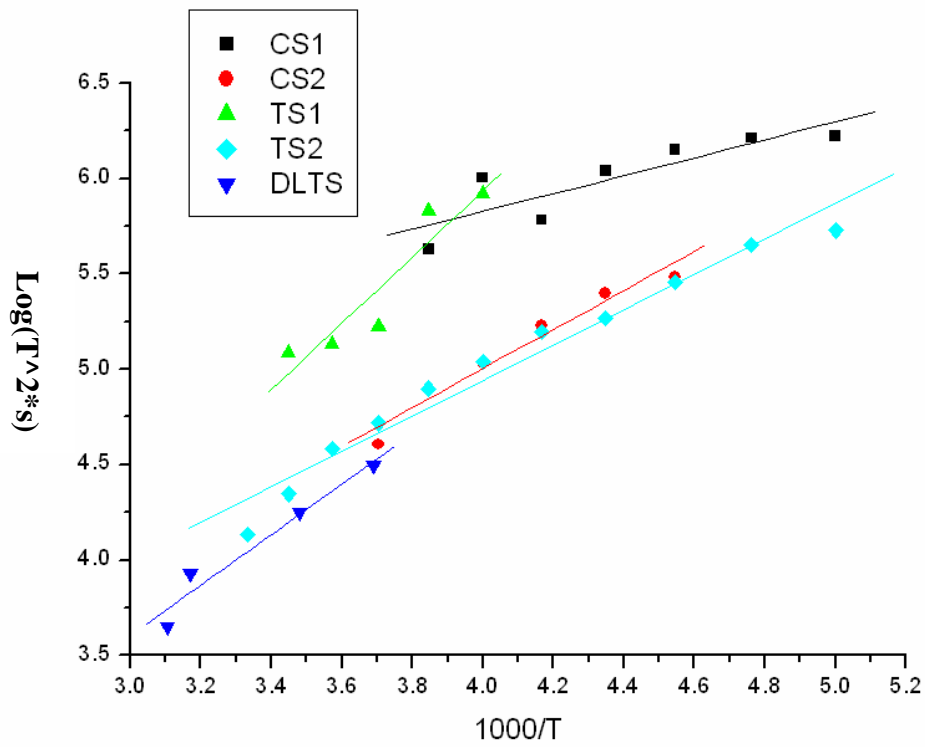
圖（11-24）是綜合 Tikhonov regularization 與 conjugate gradient method 與傳統 DLTS 結論，畫在同一張 Arrhenius plot 上。由圖我們可以說 Laplace DLTS 量到的 TS2 與 CS2 缺陷，是與傳統 Boxcar DLTS 所量到的是相同的。而 TS1 與 CS1 而是由 Laplace DLTS 新找到的兩個不同的缺陷，而這些缺陷的活化能與捕獲截面積見表（11.6）。我們可以發現平均後缺陷濃度較大的缺陷，即為 DLTS 量測中被觀察到的缺陷，而缺陷濃度較小的缺陷即為被忽略的缺陷。

接著我們討論由 Laplace DLTS 新找到的兩個缺陷訊號 TS1 與 CS1。TS1 由文獻[53]發現此缺陷為高濃度參雜（Si）後所產生的 DX 中心。然而另外一個由缺陷 CS1 在以前的文獻中，並沒有找到類似的。

最後我們把 DLTS 量到的缺陷濃度（ N_t ），以上述比例分配給兩個缺陷後，利用活化能與捕獲截面積回推理論曲線，與傳統 Boxcar DLTS 的理論曲線比較，看哪一個較為接近真實量測所得的 DLTS 訊號。

圖（11-25）中，虛線為典型 DLTS 所反推在速率視窗 t_1 為 0.1sec 的理論曲線。很明顯的跟實線的 DLTS 量測訊號有一段偏差。接著我們反推 TS1、TS2 的理論曲線，由圖（11-26）中 TS1 與 TS2 這兩個理論曲線被 DLTS 量測訊號包圍著，尤其 TS1 訊號的存在剛好是典型 DLTS 訊號左右不對稱的成因，而 TS2 應該是主導 DLTS 訊號峰值的位置，但是有些偏移。接著我們把 TS1 理論曲線疊加上 TS2 理論曲線，與 DLTS 量測訊號相比較如圖（11-27）所示。我想是因為在運算缺陷濃度時，我們採用近似的方法造成缺陷濃度比較不準，所以才會有圖（11-27）那樣的誤差。或者是該 DLTS 訊號波形是由三個缺陷訊號疊加而成的，所以我們模擬過程中假設兩個缺陷訊號，無法反推出與量測訊號完全相同的理論曲線。但是與圖（11-25）典型 DLTS 結果反推的理論曲線相比，TS1 疊加 TS2 所得的理論曲線最少曲線峰值與 DLTS 量測訊號峰值是大小一致的。

最後使用 Conjugate gradient method 的結果（CS1、CS2），反推在速率視窗為 0.43sec 的理論曲線。由圖（11-28）我們發現 CS2 與傳統 DLTS 的理論曲線峰值大小是相同的。接著我們把 CS1 理論曲線疊加上 CS2 理論曲線，與量測曲線相比較如圖（11-29）所示，很明顯的與量測曲線有很大的出入。因為 CS2 缺陷是傳統 DLTS 量測的到的缺陷，所以我想應該是 CS1 這個新找到的缺陷是有問題的，也許可能根本是模擬誤差所造成的。一種合理的解釋可能是本片樣品的 DLTS 訊號可能不只由兩個缺陷所貢獻的，然而我們在使用共軛梯度法時卻假設此訊號只由兩個缺陷所提供，所以最後會迭代出一個有問題的解（CS1）。

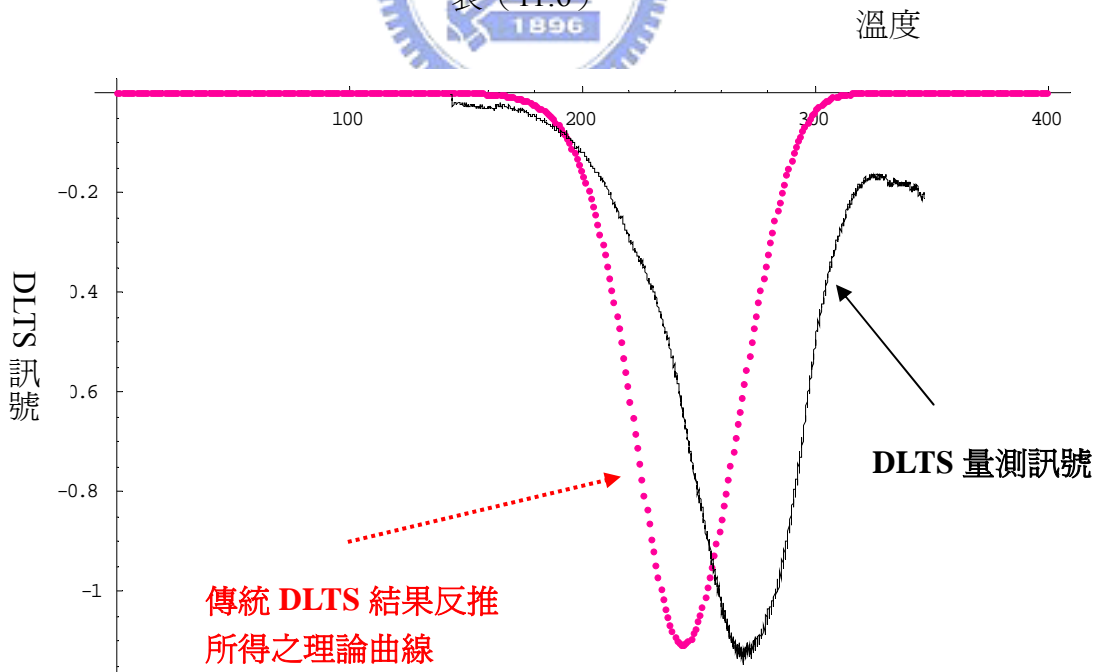


綜合 Tikhonov regularization 與 conjugate gradient method 與傳統 DLTS 結論，畫在同一張 Arrhenius plot 上
圖 (11-24)

	缺陷能階	缺陷濃度	缺陷能階	缺陷濃度
DLTS	Energy : 0.2629 ev Sigma : 1.07E-20cm²	100%	無	無
Laplace DLTS By Tikhonov method	Energy : 0.347ev Sigma : 4.7E-20 cm² TS1	44.25%	Energy : 0.2077ev Sigma : 7.5E-22cm² TS2	55.75%
Laplace DLTS By 共 軛梯度法	Energy : 0.10ev Sigma : 1.28E-24cm² CS1	35.7%	Energy : 0.2971ev Sigma : 4.48E-20 cm² CS2	64.3%

Laplace DLTS 使用 Tikhonov regularization method 與 conjugate gradient method 所得出的缺陷物理量

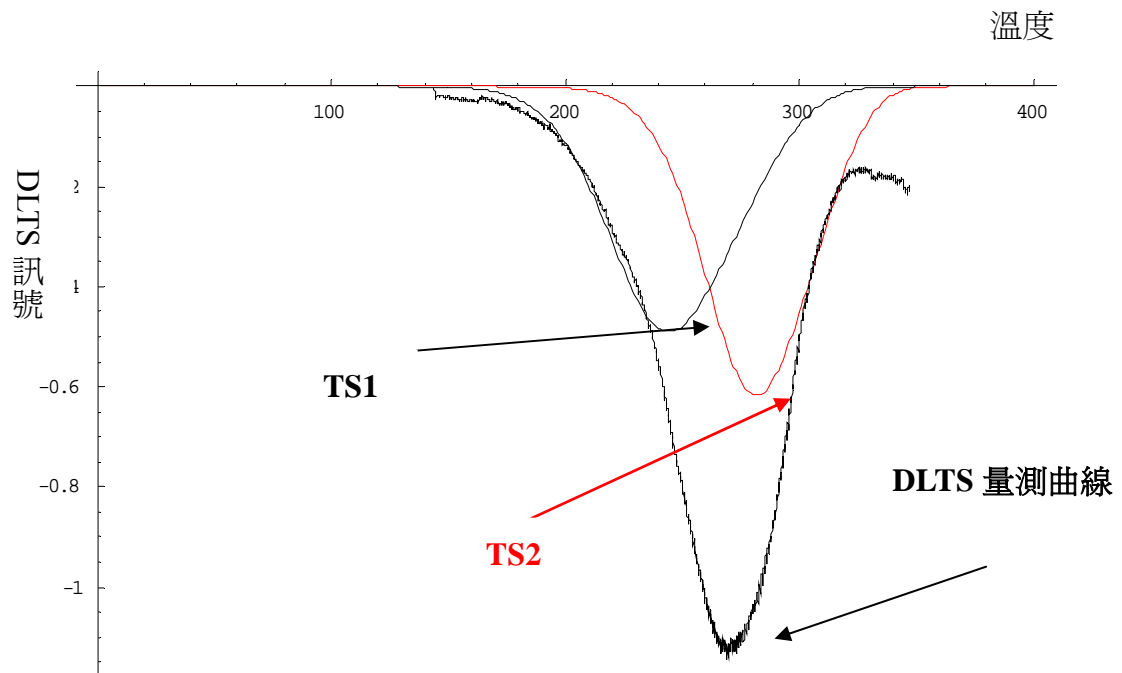
表 (11.6)



虛線為典型 DLTS 所反推在速率視窗 t_1 為 0.1sec 的理論曲線。

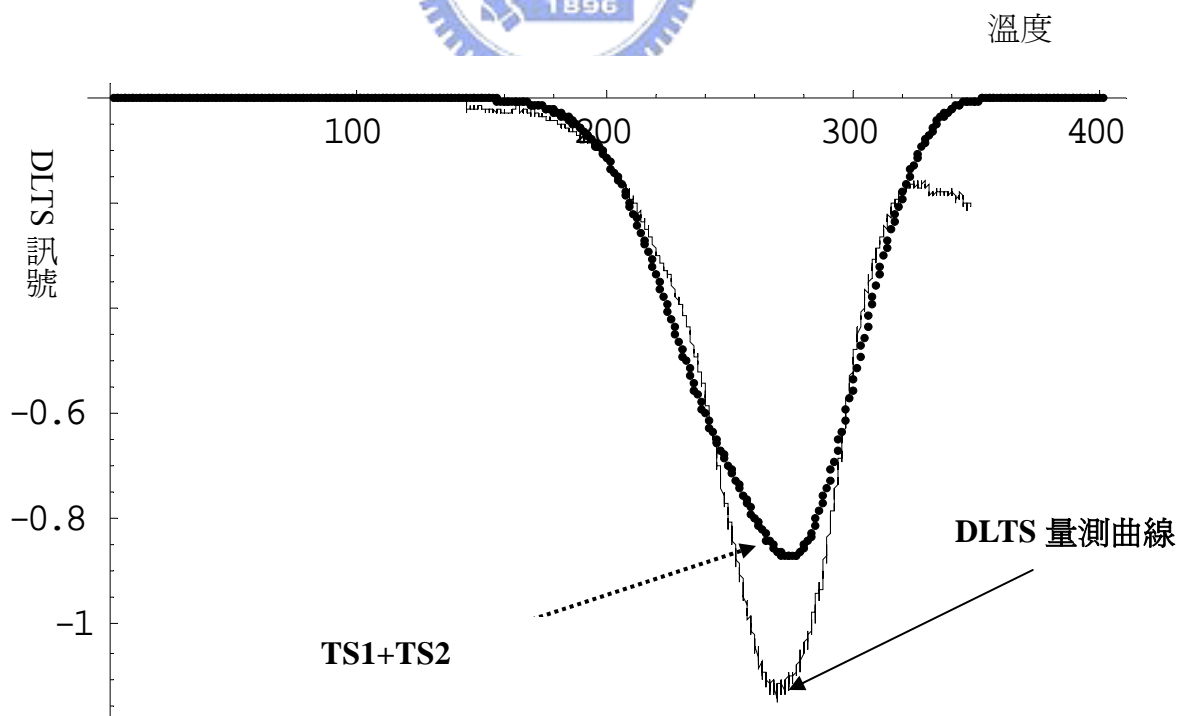
很明顯的跟實線的 DLTS 量測訊號有一段偏差

圖 (11-25)



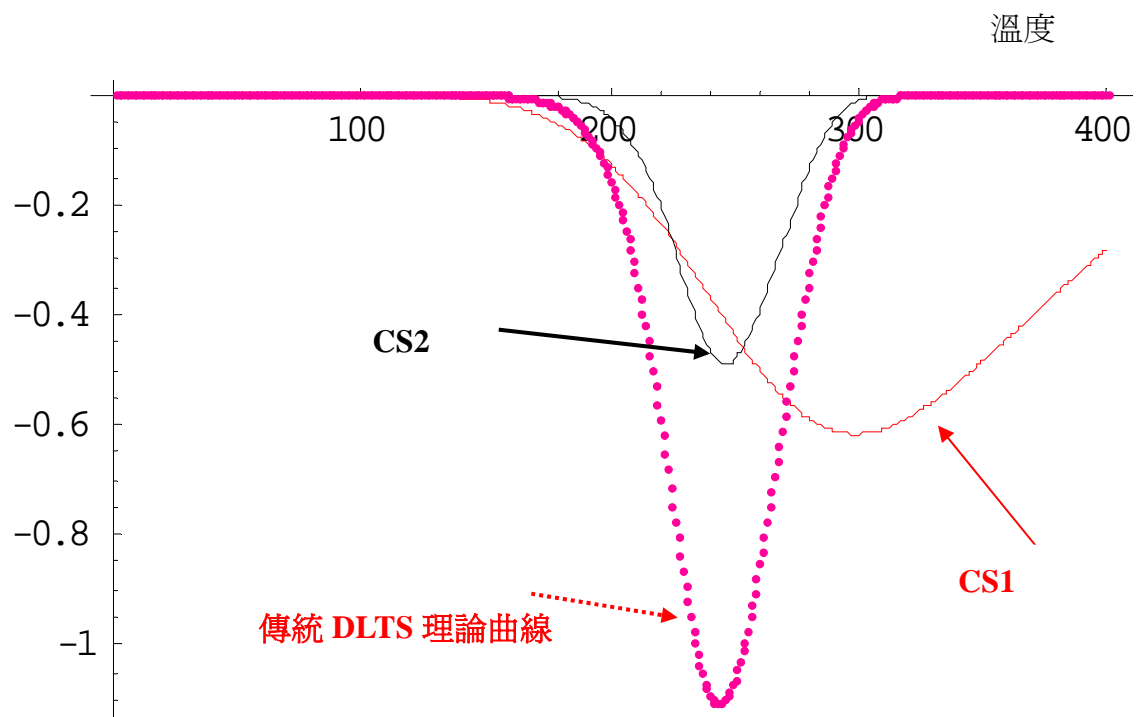
TS1 與 TS2 理論曲線被包在 DLTS 量測訊號中

圖 (11-26)

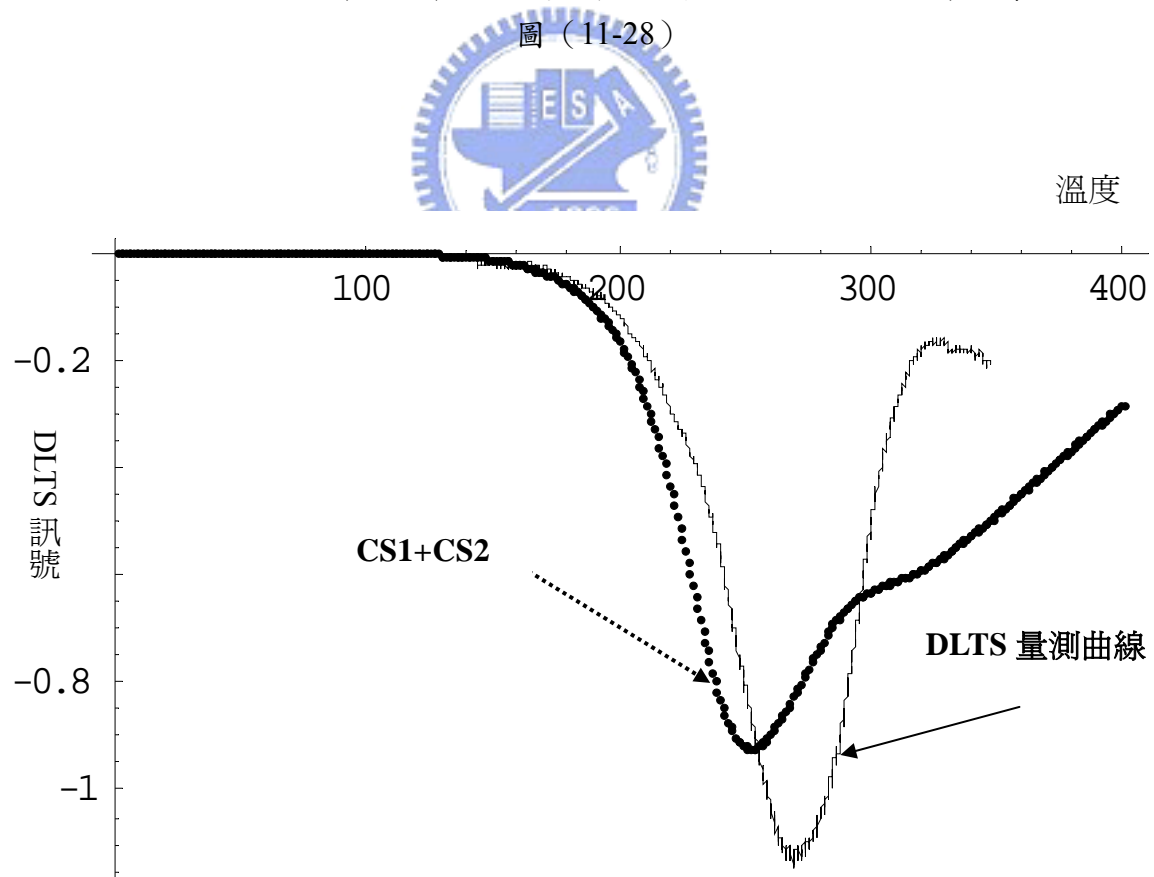


把 TS1 理論曲線疊加上 TS2 理論曲線，與 DLTS 量測訊號相比較

圖 (11-27)



CS2 理論曲線被包在 DLTS 量測訊號中，而 CS1 理論曲線沒有
圖 (11-28)



疊加 CS1 與 CS2 理論曲線，並且與 DLTS 量測訊號比較之
圖 (11-29)

11.6 結論

與 AlGaAs 塊材模擬結果比較，GaAs 塊材模擬結果似乎比較不理想。尤其我們使用 Conjugate gradient method 中迭代出來的解，竟然不會比迭代初始值更接近最佳化。合理的解釋如同前面所述，也許 GaAs 訊號並非只由兩個缺陷所提供的。

當然由於我們最後會使用 Conjugate gradient method 來迭代，我們觀察迭代最後的結果，如果收斂出比初始值 (Tikhonov regularization method) 更不合理的解時，這時那就很有可能是我們誤把 Laplace DLTS 頻譜中模擬產生的震盪峰值當成缺陷訊號。或者是少考慮到因為解析度不夠，而訊號不明顯的缺陷峰值訊號所造成的。所以由本例 (GaAs 塊材) 可以證明 Conjugate gradient method 有檢查 Tikhonov regularization method 結果的功能與意義。

最後回頭看看由 Tikhonov regularization method 的解，由圖 (11-26) 所示，最少 TS1 與 TS2 這兩個缺陷可以合理的解釋為什麼在速率視窗 $t_1=0.1\text{sec}$ 時，DLTS 訊號橫跨很大的溫度範圍，與訊號左右不對稱的成因。



第十二章. 總結與未來研究方向

12.1 總結

在本篇論文中我們已經成功的使用 Tikhonov regularization method，解出病態問題 (ill - posed problem) 的最佳解，並且把此值當共軛梯度法 (conjugate gradient method) 的初始值開始迭代，最後會收斂到一個更合理的最佳解。並且使用這種數學模擬方法 fitting 已知方程的曲線，與 RC 電路的時間常數曲線都獲得可信的結果。

我們會事先利用 Tikhonov regularization method 的解決定電容暫態曲線的形式，並且把此解帶入共軛梯度法中當迭代的初始條件。因為 Tikhonov regularization method 的解 ($Z[s]$) 通常一個很胖的波包，我們為了寫解的方程式，通常會把波包近似為近似 dela 函數的波形。並且模擬結果通常會出現 $Z[s]$ 為負值的情況，在物理上是不合理的，所以我們也把它令為零。所以在經過這些的近似手續後，我們由 Tikhonov regularization method 結果所推出的缺陷濃度物理量通常會稍大，為了克服這個問題，通常我們會再把此結果拿去使用共軛梯度法迭代出一個更合理的最佳解。

在論文的最後兩章中，我們使用 Laplace DLTS 量測 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 與 GaAs 這兩種塊材，成功的提高 DLTS 的解析度與解析度。在 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 量測中，我們使用 Laplace DLTS 比 DLTS 多找到一個較深的 DX 中心，由於這個較深的缺陷濃度較高，所以在傳統 DLTS 量測訊號是被這個缺陷所主導的，另外這兩個缺陷也非常的靠近。也因此我們由傳統 DLTS 回推理論曲線時，很明顯的無法和量 DLTS 測訊號重疊。並且在文獻[49]中，這兩個缺陷訊號在文獻中的傳統 DLTS 量測只被解析出缺陷濃度較大的 DX 缺陷能階 (活化能為 0.36eV)。如果多加考慮由 Laplace DLTS 找到的兩個 DX 缺陷，我們反推出的理論曲線幾乎與量測曲線重疊，同時由於 Laplace DLTS 找到的兩個缺陷在文獻上都有記載，所以這兩個缺陷應該是真實存在的。

然而在 GaAs 量測中，我們由 Tikhonov regularization method 所得的結果 TS1、TS2 發現，而由 TS1 與 TS2 反推的理論曲線的確是被包在 DLTS 量測曲線中的，所以我們可以說這兩個缺陷應該是存在的，並且同時可以合理的解釋 DLTS 訊號橫跨很大的溫度範圍，與左右不對稱的問題。只是由於 TS2 理論曲線訊號峰值與量測曲線峰值有些平移，造成我們疊加 TS1 與 TS2 的理論曲線結果與真實量測曲線有些不同。另一種合理解釋是 DLTS 量測到的曲線可能是由三個缺陷所共同提供的，而我們在模擬時有些溫度真的是有三個訊號出現。同時這也可以解釋在使用共軛梯度法求出的解 CS1 看起來有些不合理的原因。而另外一個解 CS2 則剛好與 DLTS 量測到相同的缺陷。

由這兩個塊材量測 (GaAs 與 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$) 結果，我們成功的看到 Laplace DLTS 提高了 DLTS 的解析度，並且可以分析出兩個缺陷能階相差只有 50meV 的 DLTS 訊號。所以接下來本論文的方法，就可以廣泛的應用於量測其他材料的缺陷特性分析。

12.2 未來研究方向

12.2 (a) 改善 Laplace DLTS 量測方法

我們可以分成硬體與軟體兩方面來討論之，首先因為系統定溫能力與雜訊對量測結果影響很大，所以硬體方面可以使用更佳的 DAQ 卡擷取數據。比如可以買解析度更好（以免擷取出的訊號失真），取樣速率更快（可以多點平均以降低雜訊誤差）的 DAQ 卡，都可以有效的提高結果的正確性。

在本論文中，是以 HP4194 擷取 400 個點來表示一個電容暫態曲線，所以在 fitting 時就是處理一個 400×400 的龐大矩陣。當然點數越多，在 Laplace DLTS 頻譜中解析度就越高，但是同時就要付出更多的數學模擬運算時間。另外因為在運算過程中，要求精確卻到小數點下幾位是會對於最後的解有所影響（第五章），所以我們在寫模擬程式時都有要求必須精準到小數點下六十位，也因此跑一次模擬運算就必須花上十分鐘。因此採購一台記憶體更大、CPU 更快的處理器將可以有效的節省模擬時間。

接下來我們討論軟體的模擬程式部分，詳細程式內文請見附錄 A。我們先從等間距的 s （熱激發速率）說起，在 6.1 節中，我們為了簡化模擬過程與時間，所以整篇論文中，我們都定義為 Δs 為等間距下進行模擬。但是如果 Δs 定義為等間距下，我們的 Laplace DLTS 頻譜圖在熱激發速率值較小時解析度會很差，而在熱激發速率值較大時解析度會比較好。但是當 Δs 為非等間距時，方程式 (6.6) 中的 C 矩陣將會是一個複雜的矩陣。而且如果你越要求結果解析度時， C 矩陣就會的更加的龐大與複雜，因此 Δs 要改成非等間距，就必須要規律與技巧的選取（比如以等差級數之類的），如此一來 C 矩陣中每一個元素（element）值會比較好決定與輸入程式中。

然而最理想的模擬過程，是先用等間距的數學模擬方式（本論文所述）先 fitting 出電容暫態方程的 Laplace DLTS 頻譜後，我們觀察頻譜中有訊號 ($Z[s]$ 有極值) 處，使用較小的 Δs 值，而頻譜中沒有訊號處 Δs 就可以用比較大的值跨過以節省模擬時間。

12.2 (b) 未來展望

在本論文中，我們以成功的使用 Laplace DLTS 量測基本的 GaAs、AlGaAs 塊材缺陷參數，並且證明 Laplace DLTS 方法是可行的。但是因為 Laplace DLTS 必須先猜測一段合理的 s (emission rate) 範圍，在本論文中是先用傳統 Boxcar DLTS 決定 s 大概的數值範圍，輔以儀器所產生的 s 限制（方程式 (4.2)）來決定。所以在 Laplace DLTS 方法成熟完整之前，我們是把 Laplace DLTS 方法定位在提高傳統 Boxcar DLTS 解析度中。

但是如果可以有效的解決 Laplace DLTS 頻譜中解有負值 ($Z[s] < 0$)，與模擬所產生的震盪現象，容易讓人誤以為是缺陷訊號這兩個問題，也許我們就可以嘗試使用 Laplace DLTS 量測一些傳統 DLTS 沒量過的半導體材料，並且獲得可信的解，而可以省去使用傳統 DLTS 多次溫度掃瞄的時間。



優點：

1. 保有傳統 DLTS 的優點：

可以由電容暫態曲線形式，來判斷此曲線是由量測多數載子 (majority carrier) 與少數載子 (minority carrier) 所提供的。量測系統的靈敏度一樣可以到 10^{10}cm^{-3} 之濃度偵測範圍，而較深層的缺陷能階也能夠被精準的量測到。

2. 節省量測所需時間：

由於我們是拿定溫下的暫態電容數據模擬出提供此訊號的缺陷物理參數，所以可以省去數次溫度掃描時間。

3. 成功提高 DLTS 的解析度：

當兩個缺陷能階很靠近時，往往在傳統 Boxcar DLTS 訊號峰值決定相當麻煩。而 Laplace DLTS 的訊號通常是類似 dela 函數的波形，所以在決定訊號峰值時，非常清楚與明顯。

缺點：

1. 定溫能力與系統雜訊對量測結果影響很大：

我們盡可能的可以採用平均的方式平衡掉雜訊與溫度影響。另外也可以選用最合適的 Δt ，並且擷取越多點數（在本論文中是擷取四百個點做運算）來提高解析度。

2. 數值模擬所產生的問題：

- (1) 假設模擬結果近似為 dela 函數所造成缺陷濃度 (Nt) 有所誤差，我們可以經由共軛梯度法迭代出最佳的解。
- (2) 在本論文中我們為了簡化模擬的數學過程，所以通常會假設 Δs 是固定的。但是通常由模擬結果可以發現，在熱激發速率值較小時解析度會很差，而在熱激發速率值較大時解析度會比較好。而這個問題我們可以由改寫模擬的程式而獲得最佳的解析度。

3. 容易誤判出並不存在的缺陷能階：

由於在數學模擬結果中往往有許多”假的”訊號峰值出現，所以我們可以由 Conjugate gradient method 看是否會收斂到一個最佳的解。依此來判斷該 Lapalce DLTS 訊號是缺陷所造成的，而不是模擬震盪峰值。當然也可以藉由其他的電性量測來證明這些缺陷訊號是真實存在的。



附錄 A

```
a = "C:/1.txt"
```

讀取位於C槽中的1.txt檔案

```
OpenRead[a]
```

```
ReadList[a, Number]
```

這時我們把讀到的資料串命名為v

並且複製到下面C (#) 中

```
v = {C (1), C (2), C (3) ... ..}
```

```
r = {};
```

```
Do[AppendTo[r,  $\frac{v[[i]]}{C(\infty)} - 1$ ], {i, 400}]
```

```
r
```

其中C (∞) 請帶入最後呈現穩定的電容暫態值

並且把運算後的結果r (#) 我們從新命名為prdata (#)

```
prdata = {r (1), r (2), r (3) ... ..}
```

```
time = Table[N[t], {t, At, 400 * At, At}];
```

請輸入實驗量測時的時間間隔At大小

```
pi = {};
```

```
Do[AppendTo[pi, {time[[i]], prdata[[i]]}], {i, 400}]
```

```
pi;
```

```
ListPlot[pi, PlotRange -> All, PlotStyle -> Hue[.6]];
```

這裡可以會輸出與時間相關的電容暫態曲線圖

```
time = Table[N[t], {t, At, 400 * At, At}];
```

```
pd1 = {};
```

```
Do[AppendTo[pd1, Log[-prdata[[i]]]], {i, 400}]
```

```
pd1;
```

```
ze5 = {};
```

```
Do[AppendTo[ze5, {time[[i]], pd1[[i]]}], {i, 400}];
```

```
ze5;
```

這裡我們把電容暫態值取對數座標可初步的觀察

該此電容暫態曲線是由一個缺陷或多個缺陷所提供的

```

e = DiagonalMatrix[Table[1, {400}]];
time = Table[N[t], {t, At, 400 * At, At}];
emission = Table[N[n * s], {s, At, 400 * At, At}];

```

我們s範圍為 $\Delta s = n * \Delta t$

故n值大小請參考DLTS反推結果與是方程式 (4.2) 之限制

```

x = Table[-Exp[SetPrecision[-time[[i]] * emission[[j]], 60]], {i, 400}, {j, 400}];
y = {};
Do[AppendTo[y, {prdata[[i]]}], {i, 400}]
y;
b = SetPrecision[MatrixPower[x, 2], 60];
t = SetPrecision[Transpose[x], 60];
r = SetPrecision[t.y, 60];
alpha = 0.1

```

這裡請輸入regularization parameter的大小

```

l = SetPrecision[alpha * e + b, 60];
i = SetPrecision[Inverse[l], 60];
z = SetPrecision[i.r, 60];
u_alpha = SetPrecision[x.z, 60];
data = prdata;
du = {};
Do[AppendTo[du, u_alpha[[i]] - data[[i]]], {i, 400}];
du;
error = {};
Do[AppendTo[error, Sum[du[[i]]^2, {i, 1, 400}], {i, 1}];
z1 = Transpose[z];
f = Transpose[u_alpha];
z // MatrixForm;
u_alpha - y // MatrixForm;
alpha;
error

```

這裡獲得的error值大小即為6.4節中的error1參數

```

{z2}=z1;
ze={};
Do[AppendTo[ze, {emission[[i]], z2[[i]]}], {i, 400}]
ze;
s01=ListPlot[ze, PlotRange All, PlotStyle->Hue[.6]];
lt={};
Do[AppendTo[lt, Log[emission[[i]]]], {i, 400}]
lt;
pic={};
Do[AppendTo[pic, {lt[[i]], z2[[i]]}], {i, 400}]
pic;
ListPlot[pic, PlotRange All, PlotStyle->Hue[.6]];

```

這裡你即可獲得Laplace DLTS 頻譜圖

```
f2={f(#)};
```

把寫成串列的Z[s]結果重新命名為f2

```

ne={};
Do[AppendTo[ne, {time[[i]], f2[[i]]}], {i, 400}]
ne;
num=ListPlot[ne, PlotJoined True, PlotRange
All, PlotStyle->Hue[.1]];
re={};
Do[AppendTo[re, {time[[i]], prdata[[i]]}], {i, 400}]
re;
real=ListPlot[re, PlotRange All, PlotStyle->Hue[.9]];
Show[num, real]

```

num: 即為模擬結果反推的電容暫態模擬曲線
real: 即為實驗量測到的電容暫態曲線

```

z // MatrixForm
emission = Table[N[ns], {s, At, 400 * At, At}] // MatrixForm
[s] = [z[s]]

```

把上面列出來的矩陣複製放入第三行中
找出峰值位置與每個波形底下總面積

```
nda = Table[N[-0.12543 Exp[-0.20292 t] - 0.17 Exp[-1.75864 t]], {t, At, 400 * At, At}];
```

在把Laplace DLTS中的波形近似成delta function寫出模擬方程

```

error2 = {}
Do[AppendTo[error2, nda[[i]] - data[[i]]], {i, 400}];
error2;
error2 = {};
Do[AppendTo[error2,  $\sum_{i=1}^{400} \text{error2}[[i]]^2$ ], {i, 1}]
error2

```

這裡的error2即為6.4節定義的誤差參數error2

```

ne1 = {};
Do[AppendTo[ne1, {time[[i]], nda[[i]]}], {i, 400}]
ne1;
num1 = ListPlot[ne1, PlotJoined -> True, PlotRange -> All, PlotStyle -> Hue[.2]];
re1 = {};
Do[AppendTo[re1, {time[[i]], prdata[[i]]}], {i, 400}]
re1;
real1 = ListPlot[re1, PlotJoined -> True, PlotRange -> All, PlotStyle -> Hue[.9]];
Show[num1, real1]

```

num1: 由fitting結果寫出的方模擬程式繪圖
real1: 量測到的電容暫態曲線

Reference :

- [1] D.V.Lang, "Deep level transient spectroscopy", *J. Appl. Phys.*, Vol.45, P3032.
- [2] A Le Bloa, *Meas, Sci, Technol*, Vol.4 325 (1993) .
- [3]徐渭州, 國立成功大學電機工程研究所博士論文
- [4] J. Barbolla, *Solid – State Electronics* Vol. 35, No.3, 285 (1992) .
- [5] L. Dobaczewski, *J. Appl. Phys.* Vol.76, 194 (1994) .
- [6] L. Dobaczewski, *Phys. Rev. B*, 65 (2002), 075205
- [7]K. Bonde Nielsn, *Materials Science Forum*, 258-263, 331 (1997)
- [8] L. Dobaczewski, *Materials Science Forum*, 196-201, 669 (1996)
- [9]A. R. Peaker, *Physica B* 273-274, 243 (1999)
- [10] M. A. Gad, *JAP*, V.92, P5252
- [11] C.Eiche, *Advanced Materials for Optics and Electronics* Vol.13, 269(1994).
- [12] D.Maier, *J. Appl. Phys.* Vol.174, 6667 (1993) .
- [13] L. Dobaczewski, *Materials Science and Technology*, V.11 P1071 (1995) .
- [14] Junyong Kang, *Journal of Crystal Grow*, V.210, P.247 (2000) .
- [15]Dieter K. Schroder, "Deep Level Impurities", *Semiconductor Material and device characterization*, p297-329
- [16]交通大學 吳幸娟 氧化鋅變阻器及砷化鋁鎵的深階暫態量測、碩士論文
- [17]科儀新知 郝樹聲 第七卷第五期 p76
- [18]光電半導體技術手冊 紀國鐘 蘇炎坤 p116
- [19]交通大學 楊瑞玲 玻璃相氧化鋅變阻器之缺陷研究、碩士論文
- [20]台灣大學 劉進浩 以分子束磊晶成長之砷化鎵鋁應變層之深層能階分析
- [21]*The Electrical Characterization of Semiconductors: Majority Carriers and Electron state*, P. Blood and J.W. ORTON p433
- [22]C. R. Barvett, W. D. nix, and A. S. Tetelman, *The principles of Engineering Materials*, Prentice – Hall, (1973)
- [23]H. L. Wang, F.H. Yang, *Physical Review B*, V.61 P.5530
- [24]M. C. Chen, *Appl. Phys. Lett.*, V44(18) P.790
- [25]E.V. Astrova, A.A. Lebedev, and A.A. Lebedev, *Sov. Phys. Semicond.* V19 p850
- [26] G. Vincent, D. Bois, and P. Pinard, *J. Appl. Phys.* V46 P5173
- [27] J. BaRBOLLA, S. DUENAS. *Solid-State Electronics* V.35 P285
- [28]交通大學陳乃權分子束磊晶低溫成長砷化鎵電性量測、博士論文
- [29]交通大學徐念慶 GaAs/AlGs/GaAs 量子結構的導納頻譜、碩士論文
- [30]M. Derdour, L. Mahdjoubi, *Solid-State Electronics* V.25 P925
- [31] <http://www.mcc.ac.uk/cem/laplace/index.html>
http://info.ifpan.edu.pl/dlts/LaplaceIFPAN_1.htm#computer

- [32] Peter monk , Basic theory of linear ill-posed problems , department of mathematical sciences university of delaware
- [33] Curt Vogel , Regularization Methods an applied mathematican's perspective , Montana sate university
- [34] Regularization methods for ill-posed problems /V.A. Morozov, English edition editor, Michael Stessin.
- [35] Press, William/Teukolsky, Saul A./Vetterling, William T./Flannery, Bri , Numerical Recipes in C:The Art of Scientific Computing
- [36] A survey of numerical methods for the solution of fredholm integral equations of the second kind/Atkinson, Kendall E.
- [37] 數值分析 , 林丕靜著 , 儒林/民 79
- [38] Numerical methods for the solution of ill-posed problems /A. N. Tikhonov & et al. Dordrecht /Kluwer Academic Publishers /c1995
- [39] Ill-posed problems in the natural sciences/Tikhonov, A. N. & Goncharsky, A. V. ed. ; Bloch, M. tr. Moscow/MIR Publishers/1987
- [40] The theory of Tikhonov regularization for Fredholm equations of the first kind/Groetsch, C. W. Boston/Pitman/c1984
- [41] SOLUTIONS OF ILL-POSED PROBLEMS/ ANDREY N. TIKHONOV,VASILYI Y. ARSENIN/V. H. WINSTON&SONS Washington,D.C.
- [42] Doklady 1965 Tcm 164 , No.3 Tikhonov
- [43] Conjugate gradient type methods for ill-posed problems /M. Hanke. Harlow, Essex, England /Longman Scientific & Technical /c1995
- [44] 國立交通大學/電子物理系 / 王錦雄 InGaAs/GaAs 量子點與 GaAsN/GaAs 量子井的電性與光性研究
- [45] The electrical characterization of semiconductors : Majority carriers and electron states , P. Blood
- [46]SEMICONDUCTOR MATERIAL DEVICE CHARACTERIZATION , DIETER K. SCHRODER
- [47]E. V. Astrova , Sov. Phys. Semicond. V.19 (8) P. 850
- [48]C.K. Chung , Applied Surface Science V.115 , P.174
- [49]H. Ishii , Journal of crystal growth , V.210 P.242
- [50] [L. Dózsa](#) and [Vo Van Tuyen](#)Journal of Applied Physics -- Volume 82, pp. 1967-1969
- [51] L.Dobaczewski Physical Review Letters 1992
- [52] Hzipurz , Semicond. Sci. Technol. v.8,p.1258
- [53]Subhasis Ghosh , Solid State Communications , V.98 P.195