

**В.Г.Тихомиров^{1,2}, А.Г.Гладышев³,
Н.А.Малеев², Н.В.Крыжановская³**

¹ ФГБОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

² Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН

³ Академический университет — научно-образовательный центр нанотехнологий РАН

Восстановление характеристик полупроводниковых гетероструктур с модулированным легированием по результатам измерений спектров фотолюминесценции

Предложен неразрушающий метод определения концентрации свободных носителей в транзисторных структурах по спектрам фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре для полевых СВЧ-транзисторов на основе псевдоморфных гетероструктур AlGaAs-InGaAs-GaAs (pHEMT).

Ключевые слова: численное моделирование, спектры фотолюминесценции, полевые транзисторы

Разработка неразрушающего метода восстановления характеристик полупроводниковых гетероструктур с модулированным легированием является необходимой с точки зрения тестирования финальных транзисторных структур без потери части структуры, которая могла быть использована для создания приборов. Также использование неразрушающего метода позволяет получать информацию об однородности параметров по площади структуры, путем применения метода для различных областей пластины.

Нами предложен неразрушающий метод определения концентрации свободных носителей в транзисторных структурах по спектрам фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре. Суть метода заключается в аппроксимации спектров ФЛ тестируемых структур и определении по результатам аппроксимации концентрации свободных носителей заряда. Аппроксимация спектров ФЛ производится численным методом многомерной оптимизации по пространству заданных физической моделью параметров.

Математически, наша задача сводится к нахождению минимума функционала квадрата невязок экспериментальных данных и линейной комбинации аналитических и эмпирических функций, зависящей от одиннадцати оптимизационных параметров. Таким образом, пространство поиска является одиннадцатимерным. Кроме того, очевидно, что в силу неоднозначного отображения пространства оптимизационных параметров в пространство физических параметров, решение обратной задачи является многоэкстремальным.

Решение задачи на поиск экстремумов многомерной функции требует использования сложных алгоритмов, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки. В работе первоначально исследовалось возможность использования модифицированных методов координатного спуска [1,2] и сопряженных градиентов [3,4]. С целью сведения задачи с ограничениями к задаче без ограничений, в этих работах применялась штрафная функция. Однако в настоящее время считается, что для задач нелинейного программирования метод

штрафных функций менее эффективен, чем метод, основанный на теореме Куна – Таккера, где ищется седловая точка функции Лагранжа рассматриваемой условной экстремальной задачи. Этот метод успешно применялся для решения некоторых обратных задач. Исследовался также алгоритм, основанный на последовательной квадратичной аппроксимации функции Лагранжа и решении соответствующей задачи квадратичного программирования квазиньютоновским методом. Этот алгоритм также реализован в модуле пакета MATLAB (Optimization Toolbox). Детали реализации алгоритма изложены в [5]. Русский перевод с комментариями и пояснениями можно найти в [6]. Далее была изучена возможность применения алгоритма Levenberg-Marquardt и trust region для нашей задачи [7,8,9], реализованных в дополнениях к пакету MATLAB. Отметим особо, несмотря на успехи в этой области математики, часто для успешного решения обратной задачи с помощью алгоритмов многомерной оптимизации требуется задать особые, «удачные» начальные приближения [9]. Вычисление оптимизационных параметров может также проводиться методами координатного или градиентного спуска. Использование методов градиентного спуска для решения [3] требует меньших вычислительных затрат, чем метод координатного спуска. Но при этом метод координатного спуска является менее чувствительным к заданию начальных приближений. Метод координатного спуска (метод Хука-Дживса) относится к простым и надежным методам многомерной оптимизации. При отсутствии жестких ограничений на время поиска, он может быть рекомендован как основной метод, который легко может быть адаптирован к особенностям конкретной физической модели.

Анализ указанных алгоритмов послужил основой разработки оригинальной программы восстановления параметров структуры по спектру ФЛ. Предложенная нам модель аппроксимации спектров ФЛ была опробована на большом количестве тестовых транзисторных структур с InGaAs псевдоморфным каналом, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs.

Типичный спектр ФЛ транзисторной структуры представлен на рис.1. На спектре ФЛ видны пики от InGaAs канала и барьера со стороны подложки – слоя GaAs. Канал в транзисторной структуре представляет собой напряженную квантовую яму, в которой, как правило, существует четыре квантовых состояния (два электронных и два дырочных). В обычной прямоугольной квантовой яме существует запрет на переходы электронов между уровнями с различными порядковыми номерами. Но в транзисторных структурах, в силу асимметричного характера легирования окружающих канал барьеров, квантовая яма становится треугольной и данный запрет снимается.

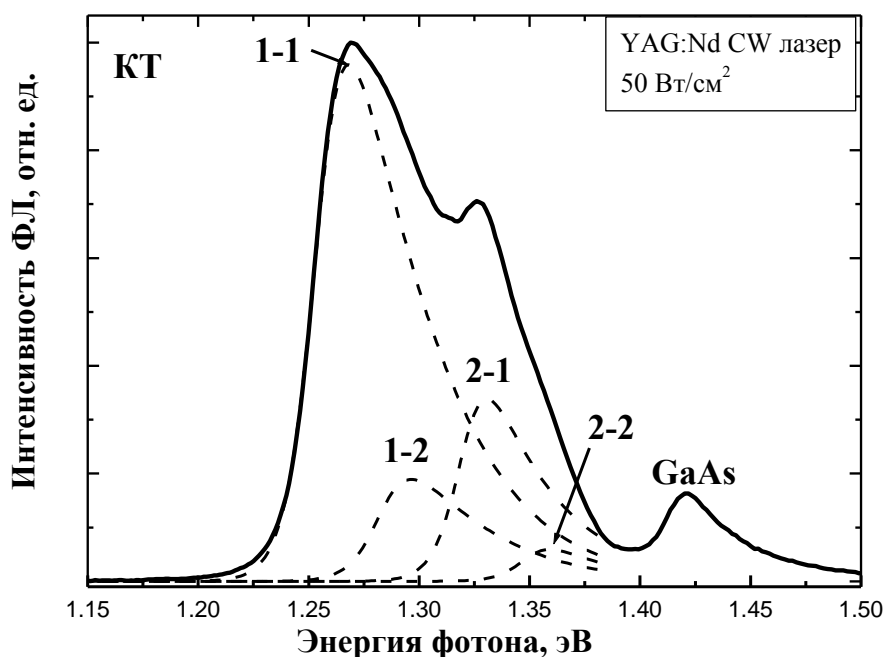


Рисунок 1

По этой причине спектр ФЛ канала описывается четырьмя оптическими переходами: с первого электронного уровня на первый и второй дырочные (переходы 1-1 и 1-2, соответственно) и со второго электронного уровня также на первый и второй дырочные уровни (переходы 2-1 и 2-2, соответственно).

Согласно существующим теоретическим моделям [11,12], каждый из оптических переходов в канале транзисторной структуры описывается выражением вида:

$$I_{ij}(h\nu) = A_{ij} * D_i(h\nu) * f_e(h\nu) * f_h(h\nu) \quad i, j = 1, 2, \text{ где}$$

I_{ij} - интенсивность соответствующего перехода, A_{ij} – матричный элемент перехода, D_i – уширенная функция плотности состояний, f_e (f_h) – функция распределения электронов (дырок).

Спектр ФЛ получается путем суммирования данного выражения по всем значениям i и j .

Энергии уровней, матричные элементы, уровни Ферми, уширения и подставка – являются 11-ю неизвестными и используются программой аппроксимации в качестве оптимизационных параметров. По определенным параметрам определяется значение слоевой концентрации в канале (n_s), как показано на рис.2.

Значения, полученные в результате работы программы, сравнивались со значениями, полученными методом Холла для тестируемых структур.

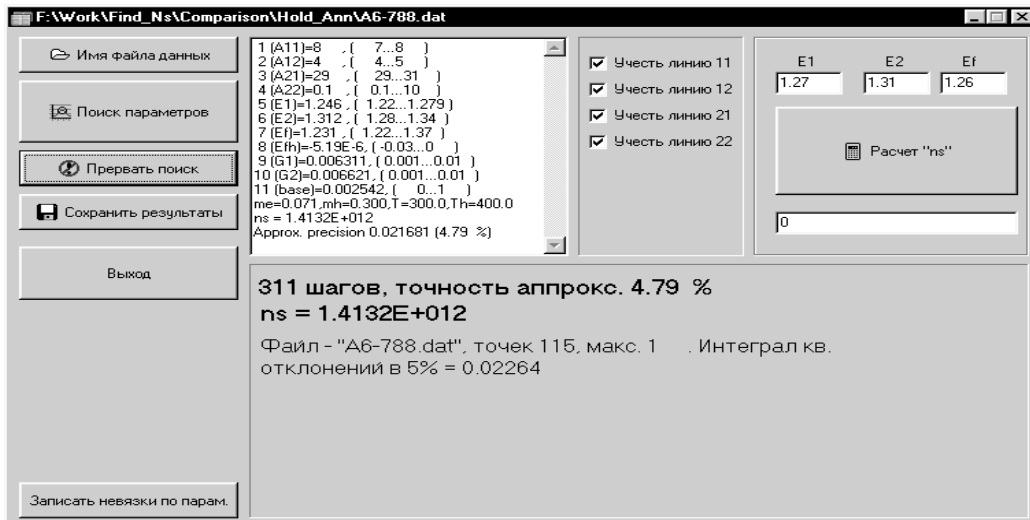


Рисунок 2

На рис.3 проиллюстрирован результат работы программы аппроксимации экспериментальных спектров ФЛ для транзисторной структуры. Также на графике в виде списка выведены значения определенных подгоночных параметров. Как видно из рисунка, результаты работы программы имеют высокую точность аппроксимации (2,29 %) и определения концентрации носителей заряда, что указывает на пригодность используемых моделей для данного типа структур.

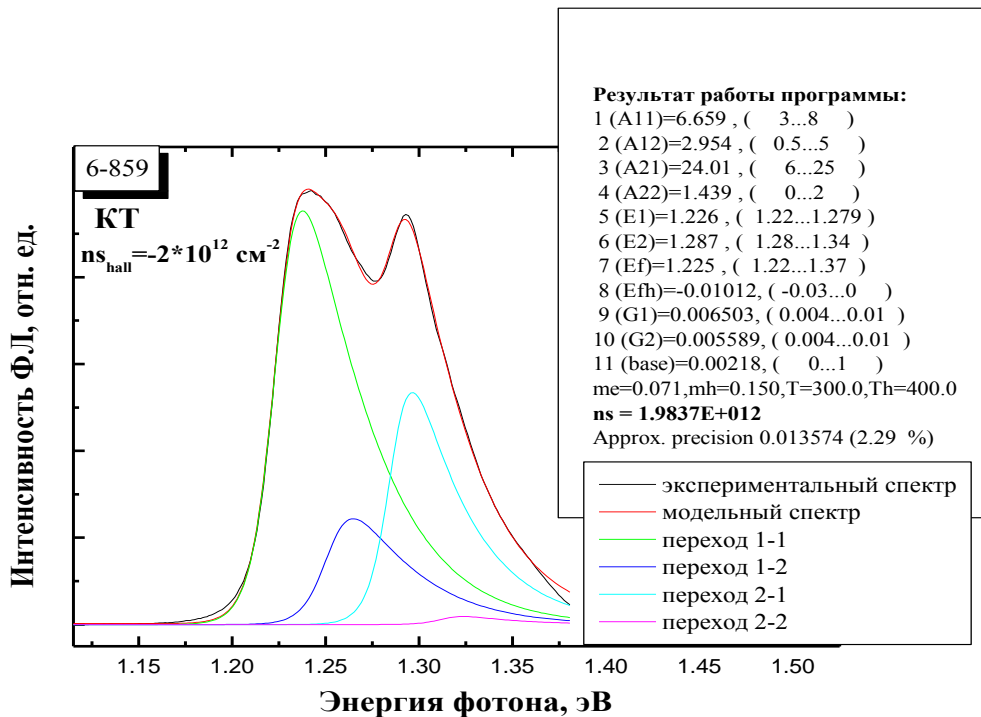


Рисунок 3

Нами предложен неразрушающий метод определения концентрации свободных носителей заряда в канале транзисторных структур на основе численного моделирования спектров фотолюминесценции данных структур при комнатной температуре. Предложенный метод опробован для большого количества транзисторных структур с InGaAs псевдоморфным каналом с целью накопления информации для определения границ применимости предложенного метода и разработки комплексной методики достоверного восстановления характеристик гетероструктур этого типа.

Библиографический список

1. Лесин В.В., Лисовец Ю.П. Основы методов оптимизации. - М.: Изд-во МАИ, 1995
2. Ф.Гилл. Практическая оптимизация. – М.: Мир, 1985.
3. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1990. - 232 с.
4. V.N.Sorokin, A.S.Leonov and A.V.Trushkin. Estimation of stability and accuracy of inverse problem solution for the vocal tract, *Speech Communication*, 2000, v. 30, N1, pp. 55-74.
5. Matlab Manual. <http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/optim/optim.shtml>.
6. Консультационный центр компании SoftLine.
<http://www.matlab.ru/optimiz/index.asp>; http://www.matlab.ru/optimiz/book_1/index.asp .
7. More, J.J., "The Levenberg-Marquardt Algorithm: Implementation and Theory," *Numerical Analysis*, ed. G. A. Watson, *Lecture Notes in Mathematics* 630, Springer Verlag, pp. 105-116, 1977.
8. Coleman, T.F. and Y. Li, "A Reflective Newton Method for Minimizing a Quadratic Function Subject to Bounds on some of the Variables," *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 6, Number 4, pp. 1040-1058, 1996.
9. Coleman, T.F. and Y. Li, "An Interior, Trust Region Approach for Nonlinear Minimization Subject to Bounds," *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 6, pp. 418-445, 1996.
10. S.K. Brierley, W.E. Hoke, P.S. Lyman, H.T. Hendriks "Photoluminescence characterization of pseudomorphic modulation-doped quantum wells at high carrier sheet densities", *Appl. Phys. Lett.*, **59** (25), pp. 3306-3308 (1991).
11. S.K. Brierley "Quatitative characterization of modulation-doped strained quantum wells through line-shape analysis of room-temperature photoluminescence spectra", *J. Appl. Phys.*, **74** (4), pp. 2760-2767 (1993).