УДК 539.25;620.187;53.187/.088

О некоторых возможностях использования конфлюентного анализа для интервального оценивания параметров полупроводников в катодолюминесцентной микроскопии

Ю. Е. Гагарин, М. А. Степович
Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана, г. Калуга, Россия

Изучены возможности использования конфлюентного анализа для интервального оценивания диффузионных длин неосновных носителей заряда в полупроводниках с помощью методов математического моделирования. Конфлюентный анализ реализован для прямозонных полупроводников при различных значениях погрешности измеряемых величин энергий электронов пучка, характерных для реального эксперимента.

При взаимодействии электронного зонда растрового электронного микроскопа с твердым телом возможны необратимые изменения в мишени, особенно в катодолюминесцентной (КЛ) микроскопии, когда плотность тока на образце может достигать 10 А/см^2 и более. Конкретное планирование эксперимента и обработки полученных результатов осложняется в довольно часто реализующемся на практике случае, когда по тем или иным причинам полная статистическая информация об измеряемом сигнале отсутствует. Вопросы оптимизации измерений в таких случаях достаточно подробно обсуждены в работе [1].

Ниже рассматривается следующий этап КЛ исследований: использование метода конфлюентного анализа (МКА) для обработки исходных данных, который позволяет оценивать параметры функциональных зависимостей с учетом погрешностей как в значениях функций, так и в значениях аргументов. С помощью методов математического моделирования изучены возможности интервального оценивания параметров полупроводниковых материалов, в частности нахождение интервальных оценок одной из основных характеристик полупроводника — диффузионной длины неосновных носителей заряда (ННЗ).

© Гагарин Ю. Е., Степович М. А., 2004

Использование конфлюентного анализа для интервального оценивания параметров полупроводниковых материалов

Используемые в настоящее время методы оценивания параметров функциональных зависимостей, как правило, сводятся к методу наименьших квадратов (МНК). При этом результаты расчетов, проводимых согласно математической модели рассматриваемого явления или процесса, сравниваются с экспериментальными результатами с помощью некоторого квадратичного критерия; обычно в качестве такого критерия рассматривается сумма квадратов невязок. Оптимальные для данных экспериментальных результатов и рассматриваемой математической модели параметры определяются из условия минимизации используемого критерия.

Недостатком традиционных статистических методов оценивания параметров функциональных зависимостей является то, что они не учи-

тывают в полной мере ошибки измерений исходных данных. При оценивании параметров важно, насколько строго учитываются погрешности исходных данных, поскольку использование усредненных величин приводит к смещенным оценкам параметров и, следовательно, к неверным результатам [2].

КЛ-излучение возникает при взаимодействии электронного пучка с поверхностью мишени и может быть использовано для определения параметров исследуемого полупроводника. Для прямозонных полупроводников некоторые параметры могут быть получены из измерений зависимости интенсивности монохроматической КЛ I от энергии электронов пучка E_0.

Одной из основных характеристик полупроводникового материала является диффузионная длина ННЗ L, оценку которой можно получить из КЛ-измерений [3]. Функциональную зависимость, связывающую интенсивность монохроматической КЛ с энергией электронов пучка и диффузионной длиной ННЗ, запишем в виде $I = I(E_0, L)$.

МКА позволяет учесть погрешности измерений I, E_0 и получить несмещенные точечные и интервальные оценки параметра L. Основы использования этого метода в КЛ микроскопии в случае точечной оценки изложены в [4]. Исходная модель оценивания параметра L с учетом погрешностей измеряемых величин имеет вид

$$\begin{cases} I_i = I(E_0^{(i)}, L) + \delta_i \\ E_{0i} = E_0^{(i)} + \varepsilon_i \end{cases},$$

где $E_0^{(i)}$ — неизвестные (истинные) значения $E_{0i} (i = \overline{1,n})$;

n — количество измерений;

δ_i и ε_i — случайно распределенные погрешности величин I_i и E_{0i}, соответственно.

Примем, что ошибки измерений δ_i и ε_i — нормально распределенные случайные величины с нулевыми средними дисперсиями $\sigma(I_i)$ и $\sigma(E_{0i})$ и коэффициентом корреляции $\rho_i = 0$. Тогда минимизируемый функционал будет иметь вид [4]

$$F = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{(I_i - I(E_0^{(i)}, L))^2}{\sigma^2(I_i)} + \frac{(E_{0i} - E_0^{(i)})^2}{\sigma^2(E_{0i})}\right]. \quad (1)$$

Оценки параметра L и значений $E_0^{(i)}$ определяются из условий:

$$\frac{\partial F}{\partial L} = 0; \quad \frac{\partial F}{\partial E_0^{(i)}} = 0; \quad i = \overline{1,n}.$$

Задача нахождения оценок параметра L и истинных значений $E_0^{(i)}$ эквивалентна решению системы $(n + 1)$-уравнений:

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{(I_i - I(E_0^{(i)}, L))}{\sigma^2(I_i)}\frac{\partial I(E_0^{(i)}, L)}{\partial L} = 0,$$

$$\frac{(E_{0i} - E_0^{(i)})}{\sigma^2(E_{0i})} + \frac{(I_i - I(E_0^{(i)}, L))}{\sigma^2(I_i)}\frac{\partial I(E_0^{(i)}, L)}{\partial E_0^{(i)}} = 0, \; i = \overline{1,n}).$$

Данная система представляет систему нелинейных уравнений и может быть решена одним из итерационных методов, например методом Гаусса.

С помощью функционала F можно не только оценить параметр L, но и определить дисперсию параметра $D(L)$. Дисперсия параметра L будет оцениваться по формуле

$$D(\tilde{L}) = -1 / (\partial^2 F / \partial L^2)\Big|_{L=\tilde{L}}.$$

Оценки параметра L определяются по экспериментальным значениям величин I и E_0, содержащим случайные ошибки. Значения оценок параметра $\tilde{L}$ в каждом конкретном эксперименте могут отличаться от истинного значения параметра L на величину, значение которой можно оценить по дисперсии параметра $D(\tilde{L})$. Интервальная оценка параметра L с доверительной вероятностью γ определяется условием

$$P(\tilde{L} - t_\gamma\sqrt{D(\tilde{L})} \le L \le \tilde{L} + t_\gamma\sqrt{D(\tilde{L})} = \gamma, \quad (2)$$

здесь t_γ — квантиль распределения Стьюдента для доверительной вероятности γ.

Некоторые результаты математического моделирования

Использование рассмотренного метода позволило провести математическое моделирование для некоторых прямозонных полупроводниковых материалов групп A^3B^5 и A^2B^6.

Для количественного описания зависимостей $I(E_0)$ в [3, 5] использовалось выражение:

$$I(E_0) \cong \left\{1 + 1{,}155\left[1 - \exp\left(-\frac{z_c}{L}\right)\right]\right\} \times$$

$$\times \int_0^\infty dz_0 \int_{l_s}^\infty \Delta p(z, z_0) e^{-\alpha(\lambda)z} dz, \quad (3)$$

здесь z_c — центр тяжести области рассеяния энергии электронами пучка;

$\Delta p(z, z_0)$ — распределение по глубине z генерированных в полупроводнике ННЗ после их диффузии от планарного источника, находящегося на глубине z_0;

l_s — толщина приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда;

$\alpha(\lambda)$ — спектральная зависимость коэффициента поглощения.

Величина $\Delta p(z, z_0)$ определяется по формуле:

$$\Delta p(z,z_0) = \frac{p(z_0)\tau}{2L} \times$$

$$\times \begin{cases} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right)\left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1}\exp\left(-\frac{z}{L}\right)\right], z \in [0, z_0) \\ \exp\left(-\frac{z}{L}\right)\left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1}\exp\left(-\frac{z_0}{L}\right)\right], z \in [z_0, \infty) \end{cases}, \quad (4)$$

здесь S — приведенная скорость поверхностной рекомбинации;

$p(z)$ — плотность энергии первичного пучка;

τ — время жизни ННЗ.

После интегрирования (3) и с учетом выражения (4) получим [5]

$$I = C_1 \frac{2}{1-\alpha^2 L^2} \times$$

$$\times\left[\exp\left(\alpha z_{ms}\left(\frac{\alpha z_{ms}}{4} - 1\right)\right) + \frac{\eta}{1-\eta} Z^{-1/3} \exp\left(\alpha z_{ss}\left(\frac{\alpha z_{ss}}{4} - 1\right)\right)\right] +$$

$$+C_1 C\left[\exp\left(\frac{z_{ms}}{L}\left(\frac{z_{ms}}{4L} - 1\right)\right) + \frac{\eta}{1-\eta} Z^{-1/3} \exp\left(\frac{z_{ss}}{L}\left(\frac{\alpha z_{ss}}{4L} - 1\right)\right)\right],$$

здесь

$$C_1 = \left\{1 + 1{,}155\left[1 - \exp\left(-\frac{z_c}{L}\right)\right]\right\} \frac{1{,}085(1-\eta)G_0\tau}{4(1-\eta+\eta Z^{-1/3})},$$

$$C = \exp(-\alpha l_s)\left(\frac{S-1}{S+1}\frac{\exp(-l_s/L)}{1+\alpha L} - \frac{\exp(l_s/L)}{1-\alpha L}\right).$$

При моделировании изучалось влияние погрешностей в значениях измерений на точечные и интервальные оценки диффузионной длины. Сравнивались два метода: МНК и МКА.

На рис. 1, *а*, *б* показаны результаты математического моделирования зависимостей $I(E_0)$ для параметров, характерных для монокристаллических $GaP_{0,38}As_{0,62}$ и CdTe.

При расчетах использованы следующие параметры полупроводников:

для GaPAs: атомный номер A = 64; заряд ядра $Z = 29$; плотность $\rho = 5{,}0$ г·см$^{-3}$; коэффициент обратного рассеяния электронов $\eta = 0{,}32$; доля энергии, уносимой обратнорассеянными электронами $\eta_E = 0{,}73$;

для CdTe: A = 120; $Z = 50$; $\rho = 5{,}86$ г·см$^{-3}$; $\eta = 0{,}42$; $\eta_E = 0{,}8$.

Следующие значения параметров при расчетах принимались одинаковыми для обоих материалов: $l_s = 0{,}1$ мкм; $S = 100$; $L = 0{,}3$ мкм; $\tau = 10^{-8}$ с; $\alpha = 0$.

На рассчитанные согласно (3) значения интенсивности КЛ накладывались случайные ошибки с математическими отклонениями $\sigma(I_i) = 0{,}1 I_i$. Погрешность в определении энергий электронов пучка принималась равной 0,5; 0,3; 0,1 кэВ, что отвечает реальным значениям в серийных растровых микроскопах.

На рис. 1 изображены кривые $I(E_0)$, полученные по описанной методике, и точки, соответствующие значениям E_0, I_i. На этих же рисунках изображены значения $E_0^{(i)}$, I_i, полученные в результате проведенных с использованием конфлюентного анализа вычислений.

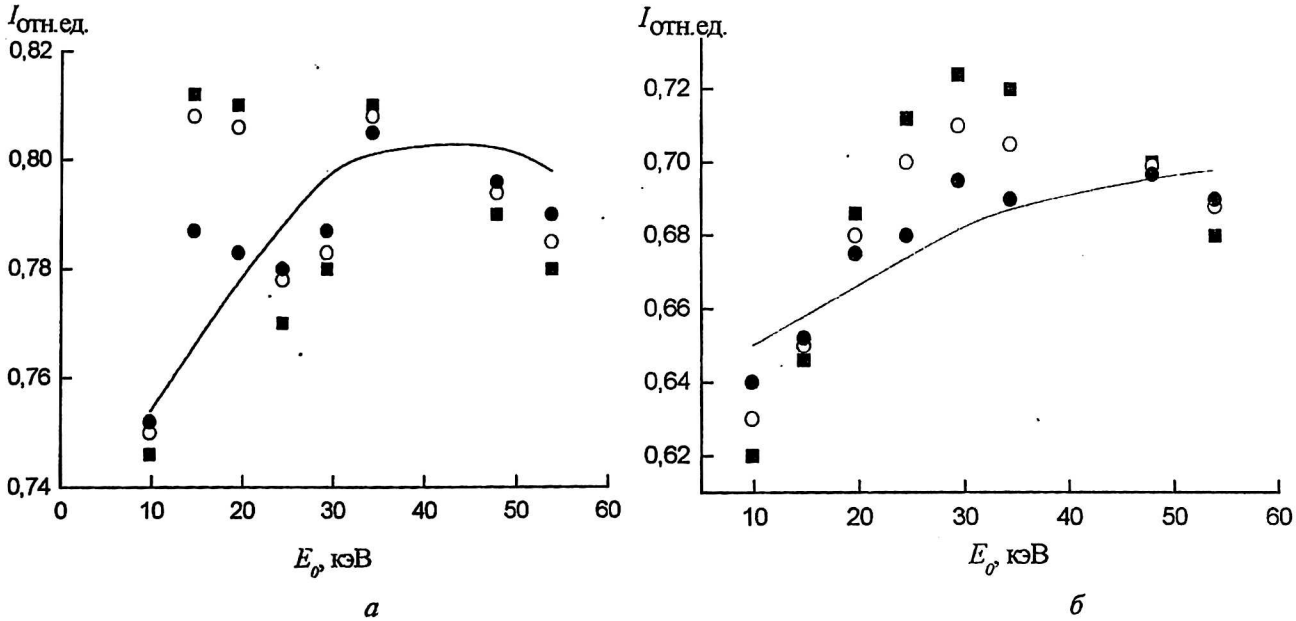

Рис. 1. Результаты математического моделирования зависимости интенсивности I монохроматического катодолюминесцентного излучения от энергии электронов пучка E_0:

а — для монокристаллического $GaP_{0,38}As_{0,62}$; *б* — для монокристаллического CdTe.

■ — значения интенсивности КЛ, полученные путем наложения случайных ошибок с равными нулю математическими ожиданиями и средними квадратичными отклонениями $\sigma(I_i) = 0{,}1 I_i$; ○ — значения интенсивности КЛ I_i, полученные в результате использования итерационного процесса в методе конфлюентного анализа (точность измерения энергий электронов пучка равна 0,1 кэВ); ● — значения интенсивности КЛ I_i, полученные в результате использования итерационного процесса в методе конфлюентного анализа (точность измерения энергий электронов пучка равна 0,3 кэВ); —— — зависимость $I(E_0)$, полученная в результате конфлюентного анализа

Определение истинных значений $E_0^{(i)}$ приводит к уточнению значения параметра L и к уменьшению значения функционала (1). Рассчитанные значения функционалов для модели КЛ рассматриваемых полупроводников приведены на рис. 2, *а*, *б*, из которого видно, что значения функционалов существенно зависят от заданных погрешностей определения энергий электронов пучка. Итерационный процесс определения параметра L с использованием конфлюентного анализа приводит к существенным уменьшениям значений функционалов. При этом количество шагов итерационного цикла слабо влияет на значения функционала.

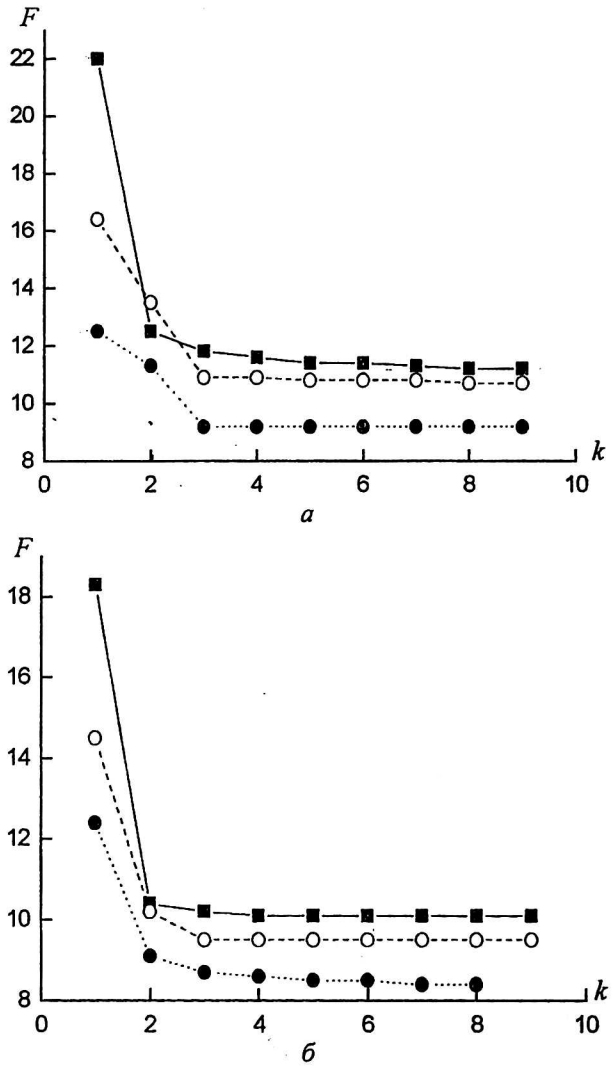

Рис. 2. Результаты математического моделирования зависимости функционала (1) от числа итераций k в методе конфлюентного анализа при определении диффузионной длины неосновных носителей заряда:
а — для монокристаллического $GaP_{0,38}As_{0,62}$;
б — для монокристаллического CdTe. Заданная точность измерения энергии электронов пучка, кэВ:
■ – 0,1; ○ – 0,3; ● – 0,5. По оси абсцисс указан номер числа итераций; методу наименьших квадратов соответствует номер $k = 1$

На рис. 3, *а*, *б* приведены зависимости относительных погрешностей вычислений диффузионной длины ННЗ $(L_k - L_0)/L_0$ от шага вычислений; значение L_0 отвечает нулевому шагу вычислений, т. е. заданной величине диффузионной длины $L = 0,3$ мкм. Погрешность в значениях энергий электронов пучка принималась равной 0,1 кэВ. Помимо точечных значений на рис. 3 показаны и интервальные оценки диффузионной длины, рассчитанные по (2). При количестве измерений $n = 10$, при одном оцениваемом параметре и для доверительной вероятности $\gamma = 0,95$, квантиль распределения Стьюдента $t_\gamma = 2,26$.

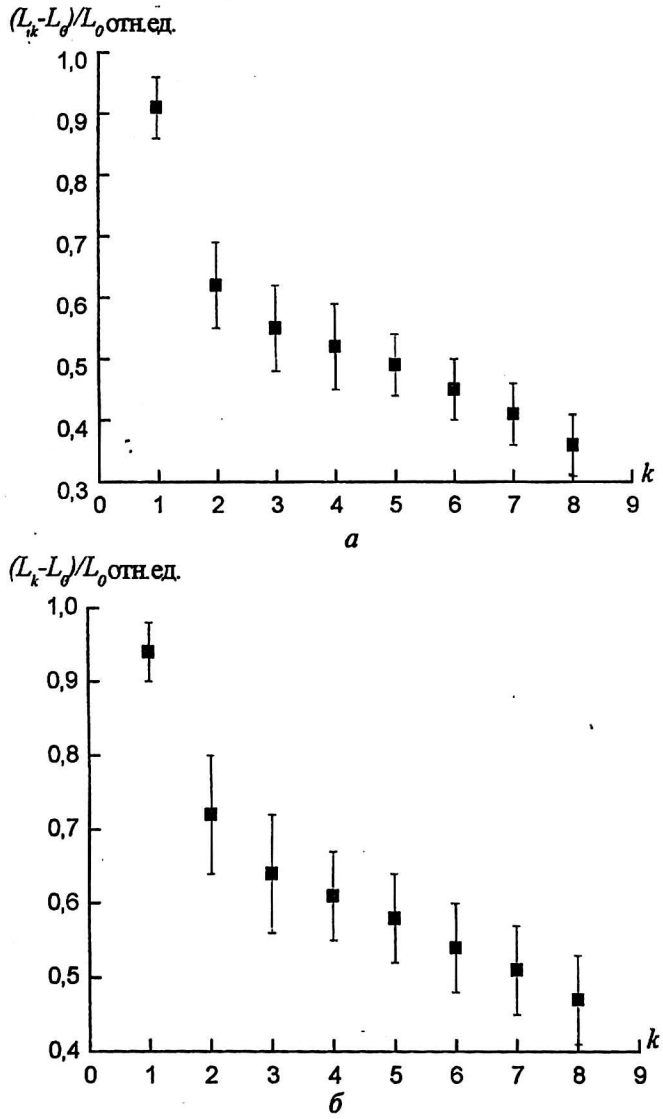

Рис. 3. Результаты математического моделирования зависимости относительных погрешностей вычислений диффузионной длины неосновных носителей заряда $(L_k - L_0)/L_0$ от числа итераций k в методе конфлюентного анализа:
а – для монокристаллического $GaP_{0,38}As_{0,62}$; *б* – для монокристаллического CdTe. По оси абсцисс указан номер числа итераций; методу наименьших квадратов соответствует номер $k = 1$

Анализ полученных результатов показывает различие интервальных оценок, полученных МКА и МНК. Доверительный интервал с вероятностью 0,95 в МКА получился шире, чем в МНК. Это обусловливается учетом случайного

характера энергии электронов пучка в каждом измерении, что вносит дополнительную неопределенность в значение диффузионной длины ННЗ.

МНК не учитывает погрешности энергии электронов пучка. Точечные оценки диффузионной длины ННЗ при использовании МНК не попадают даже в доверительные интервалы, получаемые МКА.

Заключение

С использованием МНК и МКА проведено математическое моделирование зависимостей $I(E_0)$ для параметров мишеней, характерных для материалов полупроводниковой оптоэлектроники. Анализ полученных результатов показал, что оценивание диффузионной длины ННЗ в КЛ микроскопии без учета погрешностей энергии электронов пучка приводит к смещенным точечным и интервальным оценкам диффузионной длины ННЗ и к возможным неверным практическим выводам.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и администрации Калужской области (гранты 02-01-96023, 02-02-96017).

Литература

1. *Петров В. И., Степанов С. Е., Степович М. А.*//Изв. РАН. Сер. физ. 1999. Т. 63. № 7. С. 1332.
2. *Грешилов А. А.* Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конфлюентный анализ. — М.: Радио и связь, 1990.
3. *Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А.*//Изв. РАН. Сер. физ. 1992. Т. 56. № 3. С. 176.
4. *Гагарин Ю. Е., Петров В. И., Степович М. А.*//Там же. 2001. Т. 65. № 9. С. 1308.
5. *Гетманская И. В., Степович М. А.*//Сб. тр. международной науч.-техн. конф. "Приборостроение-2002". Винница-Алупка. Винницкое представительство ВМУРоЛ "Украина", 2002. С. 209.

Some possibilities of the use of confluence analysis for an interval parameter estimation of semiconductors in a cathodoluminescent microscope

Yu. E. Gagarin, M. A. Stepovich
Kaluga Branch of Bauman Moscow State Technical University, Kaluga, Russia

The methods of mathematical modeling have been applied to study possibilities of using confluence analysis for interval estimation of diffusion lengths of minority charge carriers in semiconductors. Confluence analysis has been realized for directly zoned semiconductors at different measurands errors of electron beam energies characteristic of real experiment.