

УДК 539.25:620.187:53.187/.088

О возможности интервальной идентификации функциональных зависимостей при исследовании полупроводниковых материалов в катодолюминесцентной микроскопии

Ю. Е. Гагарин

Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана,
г. Калуга, Россия

В. А. Хомутский, А. В. Сначев, Ю. В. Дворянчикова, М. А. Степович
Калужский государственный педагогический университет им. Циолковского,
г. Калуга, Россия

Рассмотрены возможности получения интервальных оценок функциональной зависимости, связывающей интенсивность монохроматической катодолюминесценции с энергией электронов пучка, при учете случайного характера исходной информации. Учет случайного характера исходной информации осуществлен с использованием конъюгентного анализа. Методами математического моделирования получены интервальные оценки функциональных зависимостей для прямозонных полупроводников.

Исследование полупроводниковых материалов в катодолюминесцентной (КЛ) микроскопии требует строгого учета неопределенности исходной информации. Как правило, при проведении конкретного эксперимента полная статистическая информация об измеряемом сигнале отсутствует. Измеряемый сигнал содержит случайную составляющую, которую необходимо учитывать при обработке результатов эксперимента. В работе [1] для учета случайного характера величин при оценивании параметров измеряемого сигнала рассмотрено использование метода конъюгентного анализа (МКА), который позволяет определять точечные и интервальные оценки параметров функциональных зависимостей.

В настоящей работе рассмотрены возможности использования МКА для интервальной идентификации функциональной зависимости, связывающей интенсивность монохроматической КЛ I с энергией электронов пучка E_0 .

Использование конъюгентного анализа для интервальной идентификации функциональных зависимостей

КЛ-излучение возникает при взаимодействии электронного пучка с поверхностью мишени и может быть использовано для определения параметров исследуемого полупроводника. Одной из основных характеристик полупроводникового материала является диффузионная длина неосновных носителей заряда (ННЗ) L , точечная и интервальная оценки которой были получены из КЛ-

измерений с помощью МКА [1]. Функциональную зависимость, связывающую интенсивность монохроматической КЛ I с энергией электронов пучка E_0 и диффузионной длиной ННЗ L , запишем в виде

$$I = I(E_0, L).$$

МКА, в отличие от традиционных методов оценивания параметров функциональных зависимостей, например метода наименьших квадратов (МНК), позволяет с учетом погрешностей измерений I и E_0 получить несмещенные точечные и интервальные оценки параметров [2]. 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.

Для нормально распределенных случайных величин δ_i и ε_i с нулевыми средними дисперсиями $\sigma(I_i)$ и $\sigma(E_{0i})$ и коэффициентом корреляции $\rho_i = 0$ минимизируемый функционал имеет вид [3]

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

При нахождении минимума функционала (1) по параметру L , в отличие от МНК, истинные значения $E_0^{(i)}$ экспериментальных точек неизвестны, а известны лишь их доверительные интервалы. Поэтому перед тем как найти оценки параметра L , необходимо каким-либо образом оценить $E_0^{(i)}$ и только затем находить минимум функционала (1) по параметру L . Истинные значения $E_0^{(i)}$ определяются из условий

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

Оценка параметра L находится из условия

$$\frac{\partial F}{\partial L} = 0.$$

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

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

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

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

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

здесь

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

По несмещенной оценке параметра L определим точечные оценки функции $I(E_0, L)$. Поскольку оценка параметра L имеет некоторую погрешность ΔL , то и оценки функций будут иметь некоторую неопределенность

$$I(E_0, L) \pm \Delta I(E_0, L).$$

Найдем две границы, которые с заданной вероятностью накроют функцию $I(E_0, L)$, т. е. для функций, помимо точечных оценок, необходимо определять и интервальные оценки. С заданной вероятностью γ интервальные оценки функций $I(E_0, L)$ можно определить, зная оценку параметра \tilde{L} и дисперсию $D(\tilde{L})$.

$$P \left(I(E_0, \tilde{L}) - t_\gamma \sqrt{D(I(E_0, \tilde{L}))} \leq I(E_0, L) \leq I(E_0, \tilde{L}) + t_\gamma \sqrt{D(I(E_0, \tilde{L}))} \right) = \gamma, \quad (2)$$

здесь t_γ — квантиль распределения Стьюдента; $D(I(E_0, \tilde{L}))$ — дисперсия значения оценки функции $I(E_0, \tilde{L})$, которая определяется по формуле

$$D(I(E_0, \tilde{L})) = \left(\frac{\partial I(E_0, L)}{\partial L} \right)^2 \Big|_{L=\tilde{L}} D(\tilde{L}). \quad (3)$$

Результаты математического моделирования

Методами математического моделирования проведена интервальная идентификация функциональных зависимостей для некоторых прямозонных полупроводниковых материалов групп A^3B^5 и A^2B^6 .

Для количественного описания зависимостей $I(E_0)$ в [4] использовалось выражение

$$I = C_1 \frac{2}{1 - \alpha^2 L^2} \left[\exp \left(\alpha Z_{ms} \left(\frac{\alpha Z_{ms}}{4} - 1 \right) \right) + \frac{\eta}{1 - \eta} Z^{-1/3} \exp \left(\alpha Z_{ss} \left(\frac{\alpha Z_{ss}}{4} - 1 \right) \right) \right] + C_1 C \left[\exp \left(\frac{Z_{ms}}{L} \left(\frac{Z_{ms}}{4L} - 1 \right) \right) + \frac{\eta}{1 - \eta} Z^{-1/3} \exp \left(\frac{Z_{ss}}{L} \left(\frac{Z_{ss}}{4L} - 1 \right) \right) \right], \quad (4)$$

здесь

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

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

$$G_0 = \frac{1}{E} [I_0 E_0 (1 - \eta \eta_E)];$$

$$z_{ss} = Z^{-1/3} z_{ms};$$

$$z_{ms} = \frac{1,38 \cdot 10^{-2} A E_0^{3/2}}{\rho Z^{8/9}} \left[1 - \frac{0,042 Z^{4/3}}{(1 + 0,187 Z^{2/3})^2} \right];$$

z_c — центр тяжести области рассеяния энергии электронами пучка;
 l_s — толщина приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда;
 $\alpha(\lambda)$ — спектральная зависимость коэффициента поглощения;
 S — приведенная скорость поверхностной рекомбинации;
 τ — время жизни ННЗ.
 Величина z_c определяется по формуле

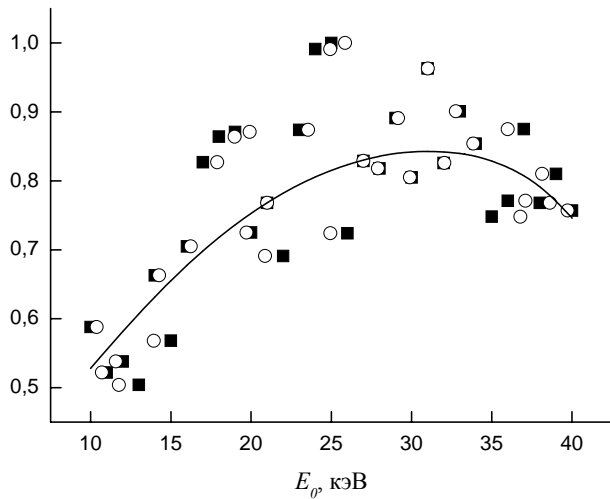
$$z_c = \frac{z_{ms} \left(\frac{1}{e\sqrt{\pi}} + 1 \right) \left(1 + \frac{\eta}{Z^{2/3}(1-\eta)} \right)}{1 + \frac{\eta}{Z^{1/3}(1-\eta)}}.$$

При моделировании изучалось влияние погрешностей исходных данных на интервальные оценки функциональных зависимостей. Сравнивались методы МНК и МКА.

На рис. 1, а, б показаны результаты математического моделирования зависимостей $I(E_0)$ при значениях параметров, характерных для монокристаллических GaP_{0,38}As_{0,62} и CdTe. Количество измерений для монокристаллического GaP_{0,38}As_{0,62} принималось равным 30, а для монокристаллического CdTe — 40.

При расчетах использованы следующие параметры полупроводников:

I , отн.ед.



а

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

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

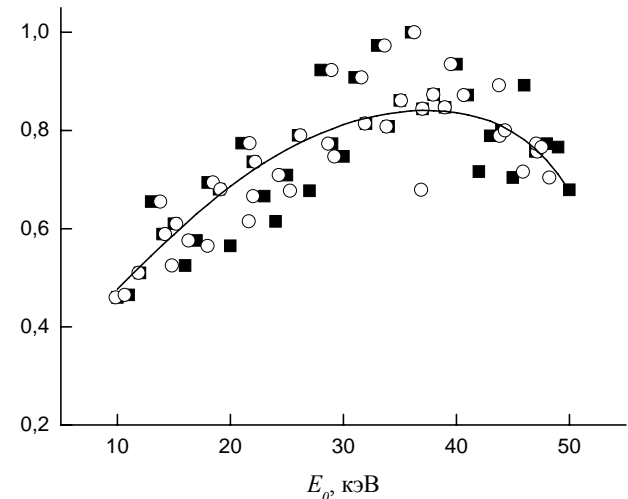
Следующие значения параметров при расчетах принимались одинаковыми для обоих материалов: $l_s = 0,1 \text{ мкм}$, $S = 100$, $L = 0,3 \text{ мкм}$, $\tau = 10^{-8} \text{ с}$, $\alpha = 0$.

На рассчитанные согласно (4) значения интенсивности КЛ накладывались случайные ошибки с математическими отклонениями $\sigma(I_i) = 0,3 I_i$. Погрешность в определении энергий электронов пучка принималась равной 0,3 кэВ, что отвечает реальным значениям в серийных растровых микроскопах.

На рис. 1 изображены кривые $I(E_0)$, параметры которых получены МКА: точки, соответствующие исходным значениям ($E_{0,i}$, I_i), и точки, соответствующие значениям ($E_0^{(i)}$, I_i), полученным в результате проведенных с использованием МКА вычислений.

На рис. 2, а, б приведены кривые, параметры которых получены МКА: точки, соответствующие значениям ($E_0^{(i)}$, I_i), и интервальные оценки функциональных зависимостей, полученные МНК и МКА по (2). При одном оцениваемом параметре для доверительной вероятности $\gamma = 0,95$ и количестве измерений $n = 40$ квантиль распределения Стьюдента $t_\gamma = 2,02$, а при $n = 30$ квантиль — $t_\gamma = 2,04$.

I , отн.ед.



б

Рис. 1. Результаты математического моделирования зависимости интенсивности I монохроматического катодолумinesцентного 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 $\sigma(I_i) = 0,3 I_i$; ○ — значения интенсивности КЛ I_i , полученные в результате использования итерационного процесса в методе конфлюэнтного анализа (точность измерения энергий электронов пучка равна 0,3 кэВ); — зависимость $I(E_0)$, полученная в результате конфлюэнтного анализа

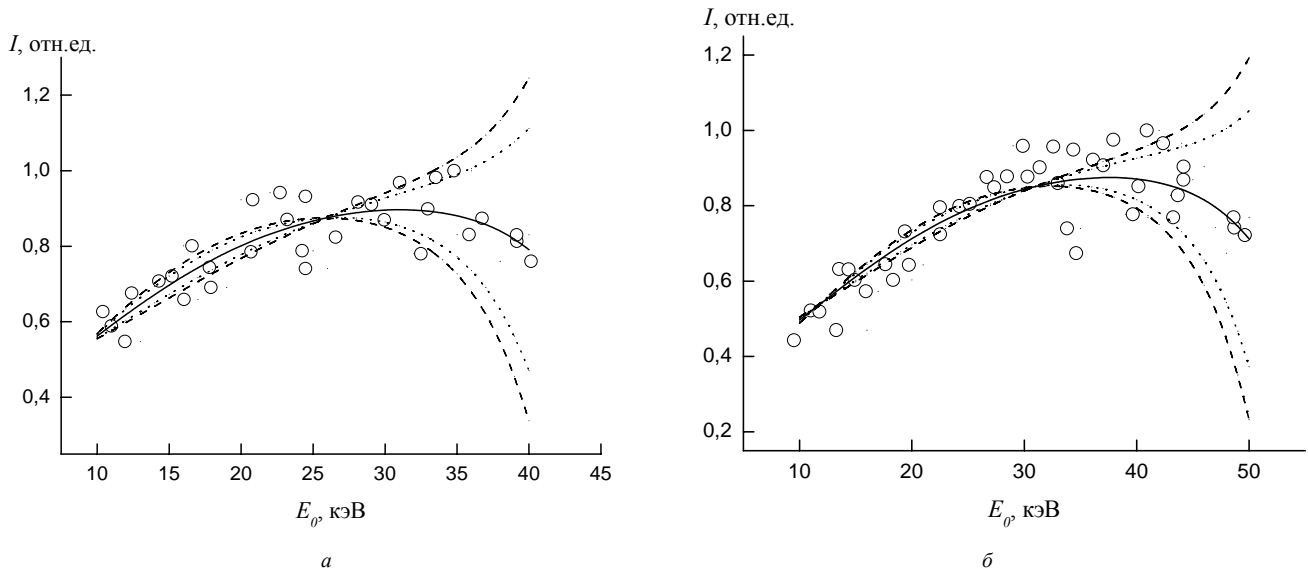


Рис. 2. Результаты математического моделирования интервальной идентификации функциональных зависимостей:

а — для монокристаллического $\text{GaP}_{0.38}\text{As}_{0.62}$; б — для монокристаллического CdTe ;

○ — значения интенсивности КЛ I , полученные МКА; — — зависимость $I(E_0)$, полученная в результате решения МКА;

----- — интервальные оценки функциональной зависимости $I(E_0)$, полученные МКА; — интервальные оценки функциональной зависимости $I(E_0)$, полученные МНК

Анализ результатов показывает, что интервальные оценки функциональных зависимостей, полученные МКА и МНК, различны. Доверительный интервал с вероятностью 0,95 в МКА получился шире, чем в МНК. Это объясняется учетом случайного характера энергии электронов пучка в каждом измерении, что отражается на дисперсии значения оценки функции, определяемой по формуле (3).

Выводы

С использованием МКА проведено математическое моделирование зависимостей $I(E_0)$ для параметров мишеней, характерных для материалов полупроводниковой оптоэлектроники. Анализ полученных результатов показал, что в КЛ-микроскопии, кроме точечных и интервальных оценок параметров функциональных зависимостей, необходимо находить и интервальные оценки самих функциональных зависимостей с учетом погрешностей энергии электронов пучка. Для практики именно интервальные оценки функциональных зависимостей представляют большую ценность, поскольку дают достаточное количество информации об оцениваемой функциональной зависимости, связывающей интенсивность монохроматической КЛ с энергией электронов пучка.

Работа выполнена при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных
исследований и Правительства Калужской об-
ласти (проект № 04-03-97210).

Л и т е р а т у р а

1. Гагарин Ю. Е., Степович М. А. // Прикладная физика. 2004. № 1. С. 109.
2. Грешилов А. А. Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конфлюентный анализ. — М.: Радио и связь, 1990.
3. Гагарин Ю. Е., Петров В. И., Степович М. А. // Известия РАН. Сер. физическая. 2001. Т. 65. № 9. С. 1308.
4. Гетманская И. В., Степович М. А. // Сб. тр. междунар. науч.-техн. конф. "Приборостроение-2002". — Винница-Алупка: Винницкое представительство ВМУРоЛ "Украина", 2002. С. 209.

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

About the possibility of interval identification of functional dependences at research of semiconductor materials in a cathodoluminescent microscopy

Yu. E. Gagarin

Kaluga Branch of Bauman Moscow State Technical University, Kaluga, Russia

V. A. Khomutski, A. V. Snachev, Yu. V. Dvoryanchikova, M. A. Stepovich
Kaluga Tsiolkovski State Pedagogical University, Kaluga, Russia

Opportunities of reception of interval estimations of the functional dependence connecting the intensity of monochromatic cathodoluminescence with electron beam energies are considered at the account of casual character of the initial information. The account of casual character of the initial information is carried out with use of the confluence analysis. The methods of mathematical modeling receive interval estimations of functional dependences for directly zoned semiconductors.

* * *