

УДК: 621.315.592

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ ПОЛУПРОВОДНИКА МЕТОДОМ АНАЛИЗА ЗАВИСИМОСТЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЕМКОСТИ

©2014 Е. А. Татохин<sup>1</sup>, А. В. Буданов<sup>1</sup>, М. Е. Семёнов<sup>2</sup>, Е. В. Руднев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр. Революции, д. 19, 394036 Воронеж, Россия,

<sup>2</sup>Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1, 394006 Воронеж, Россия  
e-mail: rudneff@mail.ru

Поступила в редакцию 21.10.2014 г.

**Аннотация.** В работе предложен новый метод спектроскопии глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводников на основе анализа зависимостей изотермической релаксации емкости использованием методов регрессионного, корреляционного и кластерного анализа. Также представлены результаты спектроскопии глубоких уровней в запрещенной зоне арсенида галлия n-типа, полученные с помощью предлагаемого метода.

**Ключевые слова:** глубокие уровни, регрессионный анализ, корреляционный анализ, кластерный анализ.

### ВВЕДЕНИЕ

Определение параметров глубоких уровней (ГУ) в запрещенной зоне полупроводников является одной из важных задач, которую приходится решать разработчикам и производителям полупроводниковых приборов. В настоящее время для определения параметров ГУ широко используется метод релаксационной спектроскопии глубоких уровней (PCGU или DLTS — Deep Level Transient Spectroscopy) [1]. Достоинствами метода являются высокая чувствительность, возможность определения параметров ГУ при изменении их заполнения как основными, так и неосновными носителями, возможность исследования ГУ как в полупроводниковых приборах, изготовленных по реальной технологии, так и в исходном полупроводнике [1—3]. Вместе с тем этот метод не лишён и недостатков, главным из которых является недостаточная разрешающая способность [2, 4]. Альтернативой предложенному в работе [1] методу может служить спектроскопия ГУ по данным об изотермической релаксации ёмкости (ИРЕ). Зависимости ИРЕ являются более информативными, чем DLTS-спектр [2, 4]. Поэтому целью данной работы является: во-первых, разработка метода определения

параметров ГУ в запрещённой зоне полупроводника по данным об ИРЕ, во-вторых, определение этим методом спектра ГУ в полуизолирующем  $n-GaAs$ .

### МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ ПО ЗАВИСИМОСТЯМ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЕМКОСТИ

Для определённости изложения, будем рассматривать диод Шоттки на базе донорного полупроводника. Метод определения параметров ГУ по зависимостям ИРЕ состоит из трёх этапов.

#### *Этап I. Регрессионный анализ зависимостей ИРЕ*

Так как ёмкость диода Шоттки при заданной температуре пропорциональна корню квадратному от концентрации ионизированных доноров [2, 3], то для адекватного определения параметров ГУ преобразуем зависимость  $C = f(t)$  (здесь  $C$  — ёмкость диода,  $t$  — время) в зависимость  $C^2 = f(t)$ .

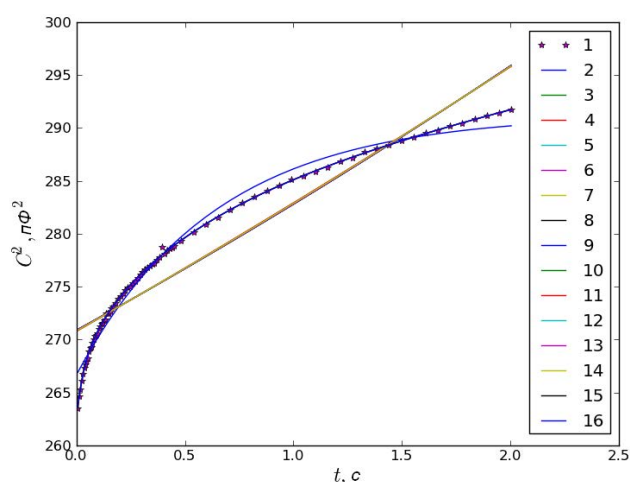
Для определения параметров ГУ необходимо вычислить значения скоростей термоэмиссии во всём исследуемом интервале температур. В данной работе эти величины вычислялись методом регрес-

сионного анализа по соответствующим зависимостям  $C^2 = f(t)$ .

В запрещённой зоне полупроводника существует множество донорных ГУ, каждый из которых при данной температуре вносит соответствующий вклад в релаксацию ёмкости диода. Предположим, что при данной температуре  $T$  и обратном напряжении смещения на диоде  $V_r$ , для каждого донорного ГУ в запрещённой зоне полупроводника превалирующим процессом будет термическая генерация электронов с уровней в зону проводимости. Иными словами, будем считать, что релаксация каждого из ГУ происходит по экспоненциальному закону. Тогда уравнение регрессии запишется в следующем виде:

$$\hat{C}^2(t) = A + \sum_{i=1}^M B_i e^{\alpha_i t}, \quad (1)$$

где  $M$  — число экспоненциальных членов в уравнении;  $A$ ,  $B_i$  и  $\alpha_i$  — коэффициенты нелинейной регрессии. Они имеют следующий физический смысл. Во-первых,  $A = C_s^2$ , где  $C_s$  — равновесное значение ёмкости диода Шоттки при данной температуре. Во-вторых, если выполняются условия:  $B_i < 0$  и  $\alpha_i < 0$ , то  $(B_i( = C_{0i}^2, (\alpha_i( = e_{ni}$ , где  $C_{0i}$  — ёмкость диода Шоттки в момент времени  $t = 0$ , соответствующего подаче на структуру обратного напряжения смещения  $V_r$ , и обусловленная концентрацией  $i$ -того ионизированного донорного ГУ;  $e_{ni}$  — скорость термоэмиссии электронов с  $i$ -того ГУ в зону проводимости при данной температуре.

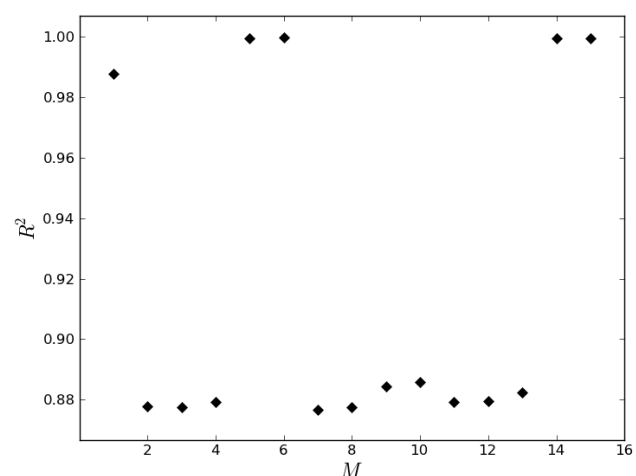


**Рис. 1.** Экспериментальная (1) и теоретические (2—16) зависимости  $C^2 = f(t)$ , рассчитанные с использованием уравнения (1) и алгоритма Левенберга — Маркардта при значениях  $M$  от 1 до 15 (кривые 2, 3, и т. д. соответственно)

Нахождение коэффициентов в уравнении (1) может быть осуществлено методом наименьших квадратов (рис. 1) [5]. В случае нелинейной регрессии идеальных методов нахождения этих величин не существует [5]. Поэтому в данной работе использовались метод градиентного спуска, алгоритм Левенберга — Маркардта и квазиньютоновский метод [6]. Численные эксперименты показали, что наиболее оптимальным в плане адекватности конечных результатов наиболее предпочтительным для данной задачи является квазиньютоновский метод.

Значение  $M$  заранее неизвестно для каждой кривой  $C^2 = f(t)$ . Искусственное задание этой величины неизбежно приведёт к неконтролируемой погрешности при определении параметров ГУ. Поэтому для решения этой проблемы использовался «метод выбора «наилучшего подмножества» предикторов» [5]. Для этого, в данном случае, необходимо:

1. задать величину  $\tilde{M}$  — максимального числа экспоненциальных членов в уравнении (1);
2. для  $\forall M \in [1, \tilde{M}] \subset Z$  ( $Z$  — множество целых чисел) решить уравнение (1), то есть найти все коэффициенты, входящие в него;
3. используя эти коэффициенты, для каждого момента времени экспериментальной зависимости  $C^2 = f(t)$  (рис. 1, кривая 1) вычислить теоретические зависимости  $\hat{C}^2 = f(t)$  (рис. 1, кривые 2—16);
4. для  $\forall M \in [1, \tilde{M}] \subset Z$  вычислить по известным формулам [5, 7] величину  $R^2$  множественного коэффициента корреляции (коэффициента детерминации).
5. построить зависимость  $R^2 = f(M)$  (рис. 2) и выбрать  $M$ , соответствующее максимуму этой зависимости;



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента детерминации от числа экспоненциальных членов в уравнении (1)

б. использовать при дальнейшем анализе значения  $A$ ,  $B_i$  и  $\alpha_i$ , соответствующие выбранному значению  $M$ .

Продолав все выше описанные процедуры для зависимостей ИРЕ, измеренных при заданных значениях прямого смещения на диоде  $V_d$ , обратного смещения  $V_r$ , длительности импульса прямого смещения  $t_d$ , длительности импульса обратного смещения  $t_r$  и для всех температур  $T \in [T_{min}, T_{max}]$  (здесь  $T_{min}$  и  $T_{max}$  — минимальная и максимальная температуры диапазона измерения ИРЕ, соответственно), определяем множества значений:  $\{A\}$ ,  $\{B_i\}$  и  $\{\alpha_i\}$ .

Если элементы множеств  $\{B_i\}$  и  $\{\alpha_i\}$  удовлетворяют условию

$$\begin{cases} B_i < 0 \\ \alpha_i < 0 \end{cases}, \quad (2)$$

то значения температуры  $T$  и соответствующие им значения  $(\alpha_i)$  отображаются в виде точек в аррениусовских координатах.

В том случае, когда релаксация ГУ происходит по экспоненциальному закону, температурная зависимость скорости термоэмиссии электронов с него в зону проводимости будет выражаться следующим соотношением [1—3]:

$$e_n(T) = \sigma v(T) N_c(T) e^{\frac{E_c - E}{kT}}, \quad (3)$$

где  $\sigma$  — сечение захвата;  $v(T)$  — средняя тепловая скорость электронов в полупроводнике;  $N_c(T)$  — эффективная плотность электронных состояний в зоне проводимости;  $E_c$  — нижний край зоны проводимости;  $E$  — энергия теплового возбуждения ГУ;  $k$  — постоянная Больцмана. А это значит, что в пределах температурного интервала, где перезарядка ГУ определяется процессом термоэмиссии электронов в зону проводимости, соответствующие точки в аррениусовских координатах будут удовлетворять линейному закону. Определив для них коэффициенты линейной регрессии, можно определить такие параметры ГУ как энергия теплового возбуждения и сечение захвата.

Для проверки состоятельности положений первого этапа предлагаемого метода была решена следующая задача. Во-первых, используя экспериментальные данные о параметрах ГУ в арсениде галлия (табл. 1), была построена совокупность модельных зависимостей ИРЕ. Предполагалось, что мгновенная суммарная концентрация ионизированных донорных ГУ при данной температуре определяется соотношением

$$n(t, T) = \sum_{i=1}^6 [N_i - (N_i - n_i(0, T)) \cdot e^{-e_m(T)t}], \quad (4)$$

где  $N_i$  — концентрация центра локализации заряда (ЦЛЗ), образующего  $i$ -тый ГУ в запрещенной

Таблица 1. Исходные данные и результаты анализа модельного множества зависимостей ИРЕ

№	ПАРАМЕТРЫ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ							
	Экспериментальные (по данным [3])		Рассчитанные					
	$E_c - E$ , эВ	$\sigma$ , см <sup>2</sup>	$E_c - E$ , эВ	$\sigma$ , см <sup>2</sup>	Корреляционные параметры			
$r$					$m$	$(\hat{i}($	$\hat{i}_{1-\gamma, m-2}$ (по данным [7])	
1	0.13	$3 \cdot 10^{-16}$	0.125	$5.24 \cdot 10^{-17}$	-0.9997	87	380.12	< 2.66
2	0.2	$9 \cdot 10^{-16}$	0.2	$2.35 \cdot 10^{-16}$	-0.9972	77	115.48	< 2.66
3	0.35	$1.6 \cdot 10^{-14}$	0.315	$7.54 \cdot 10^{-15}$	-0.9972	82	119.27	< 2.66
4	0.41	$1.5 \cdot 10^{-14}$	0.439	$1.26 \cdot 10^{-14}$	-0.9951	34	56.93	< 2.75
5	0.6	$1.4 \cdot 10^{-13}$	0.649	$1.62 \cdot 10^{-13}$	-0.9512	179	41.01	< 2.62
6	0.84	$6 \cdot 10^{-14}$	0.887	$2.1 \cdot 10^{-14}$	-0.8952	73	16.93	< 2.66

зоне полупроводника (в данной задаче  $N_i = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ );  $n_i(0, T)$  — концентрация дырок на  $i$ -том ГУ в момент времени  $t = 0$  при заданной температуре  $T$  ( $n_i(0, T) = 10^5 \text{ см}^{-3}$ );  $e_{ni}(T)$  — скорость термоэмиссии электронов с  $i$ -того ГУ в зону проводимости при данной температуре (определялась по формуле (3) на основе экспериментальных данных, представленных в табл. 1). Температура изменялась в диапазоне от 100 К до 580 К с шагом в 1 К. Во-вторых, полученное множество релаксационных зависимостей использовалось для решения обратной задачи: определение параметров ГУ. Для этого применялся первый этап алгоритма. Расчёт коэффициентов в уравнении (1) проводился квази뉴тоновским методом. Полученные аррениусовские зависимости представлены на рис. 3. Результаты их анализа приведены в табл. 1. Для подтверждения линейной взаимосвязи между соответствующими точками в аррениусовских координатах в табл. 1 приведены коэффициенты корреляции  $r$  [5, 7] и число точек  $m$ , образующих каждую из линейных зависимостей. Для оценки статистической значимости отличия коэффициента корреляции от нуля использовался  $t$ -критерий Стьюдента [7]. Для этого по известной формуле [7] вычислялась величина  $\hat{t}$  — коэффициента корреляции. Абсолютное значение этой величины сравнивалось с табличным значением  $t$ -критерия Стьюдента  $\hat{t}_{1-\gamma, m-2}$  [7], определённого на уровне значимости  $\gamma = 0.01$ .

Данная задача решалась для проверки возможности использования методов регрессионного анализа для определения параметров ГУ по зависимостям ИРЕ. Выбор для этого «идеальной» модельной совокупности ИРЕ вполне оправдан по

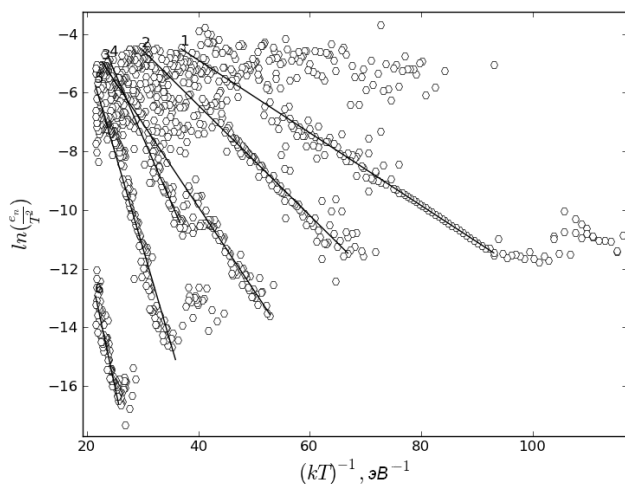


Рис. 3. Аррениусовские зависимости, рассчитанные по модельному множеству зависимостей ИРЕ

следующим причинам. Во-первых, заранее известно, что модельные релаксационные зависимости образуются суммарным вкладом от известного числа однократно ионизируемых донорных центров, заполнение которых дырками происходит по экспоненциальному закону. Во-вторых, заранее известные, заложенные в модель параметры ГУ позволяют оценить точность метода.

Как видно из анализа данных, приведённых в табл. 1, относительная ошибка определения энергии активации ГУ предлагаемым методом не превышает 10%. Кроме того, значения коэффициентов корреляции  $r$  (табл. 1) свидетельствуют о «весьма тесной» и «тесной» линейной корреляции [7] между соответствующими предикторами и откликами [5] в аррениусовских координатах (рис. 1). Так как  $(\hat{t} > \hat{t}_{1-\gamma, m-2})$  для каждой из выделенных зависимостей (рис. 1), то коэффициент корреляции статистически значимо отличается от нуля с надёжностью 99%.

Таким образом, результаты проделанного численного эксперимента позволяют сделать вывод о принципиальной возможности определения параметров ГУ с использованием методов регрессионного и корреляционного анализов по зависимостям ИРЕ. Более того, такой подход может гарантировать высокую точность и надёжность результатов.

Однако, в целом, метод определения параметров ГУ по зависимостям ИРЕ не может быть ограничен только той последовательностью действий, которая была изложена выше. Дело в том, что объективный анализ множества точек в аррениусовских координатах (рис. 1), а именно выделение из всей совокупности точек, удовлетворяющих линейному закону, представляет собой трудоёмкую задачу. Проблема заключается в необходимости адекватно классифицировать эти точки. То есть, разделить их на отдельные группы: кластеры точек, характеризующих температурные зависимости скоростей термоэмиссии различных ГУ, удовлетворяющих уравнению (3); кластеры точек, характеризующие зависимости  $e_n = f(T)$ , не удовлетворяющие уравнению (3) и кластеры точек, являющихся результатом ошибок при вычислении коэффициентов нелинейной регрессии в уравнении (1).

Причём, практическое значение для определения параметров ГУ имеет только первая группа точек. Так как при анализе зависимостей ИРЕ, измеренных на реальных образцах, число ГУ, участвующих в образовании этих релаксационных



кривых, заранее неизвестно, то однозначно решить такую задачу представляется возможным только методами кластерного анализа.

**Этап II. Корреляционно-кластерный анализ множества точек в аррениусовских координатах**

Рассмотрим множество точек в аррениусовских координатах  $U = \{u_1, u_2, \dots, u_{m_p}\}$ , где  $u_i = (x_i, y_i)$  —  $i$ -тый элемент множества, имеющий соответствующие

координаты  $x_i = (kT)_i^{-1}$  и  $y_i = \ln\left(\frac{e_n}{T^2}\right)_i$ ,  $m_p$  —

общее количество элементов. Цель второго этапа, во-первых, адекватно выделить точки, удовлетворяющие различным линейным зависимостям, во-вторых, вычислив для этих зависимостей коэффициенты линейной регрессии, определить такие параметры ГУ, как энергии активации и сечения захвата. Для решения этой задачи, на основе алгоритма QT (Quality Treshold) Clustering, предложенного в работе [8], был разработан специальный алгоритм, состоящий из следующей последовательности действий.

1. Задаём величины порога качества ( $QT$ ) и минимального объёма кластера ( $\eta$ ). Порог качества подбирается эмпирически, но для данной задачи его значение должно удовлетворять условию  $-1 < QT < 0$ . По сути,  $QT$  имеет смысл «наихудшего» допустимого коэффициента корреляции при выделении линейных зависимостей. Чем ближе его значение к  $-1$ , тем «теснее» линейная взаимосвязь между предикторами и откликами [5, 7] для соответствующих точек в аррениусовских координатах.  $\eta$  — это минимальное допустимое число точек в кластере, то есть точек, удовлетворяющих выделенной линейной зависимости. Так же, как и значение  $QT$ , величина параметра  $\eta$  подбирается эмпирически. Однако, для оптимизации процесса кластеризации и получения адекватных результатов, на величину минимального объёма кластера имеет смысл наложить следующие ограничения.

$$С\ одной\ стороны,\ \eta > \frac{3,08^2(1-QT^2)}{QT^2} + 2.$$

Иными словами, величина  $\eta$  должна гарантированно обеспечивать статистически значимое отличие коэффициента корреляции от нуля с надёжностью 80% (3.08 — максимальное значение критерия Стьюдента на уровне значимости 0.2 [7]). С другой стороны, значение  $\eta$  не должно быть слишком велико. Дело в том, что увеличение этого

параметра приводит к уменьшению количества выделяемых кластеров и, как следствие, к снижению разрешающей способности всего метода определения параметров ГУ в целом.

2. Определим величину  $c = 1$ , как метку текущего кластера;

$$3.\ \forall i \in [1, m_p - 2] \subset Z$$

3.1 если элемент множества  $u_i$  не имеет метки кластера, то:

$$3.1.1\ создаём\ множество\ \hat{U} = \{u_i\};$$

$$3.1.2\ создаём\ множество\ G = \emptyset;$$

$$3.1.3\ \forall j \in [i+1, m_p - 1] \subset Z$$

3.1.3.1 если элемент  $u_j$  не имеет метки класте-

ра и  $\frac{y_j - y_i}{x_j - x_i} < 0$ , то:

$$3.1.3.1.1\ \{u_j\} \cup \hat{U};$$

$$3.1.3.1.2\ \forall l \in [j+1, m_p] \subset Z$$

3.1.3.1.2.1 если элемент  $u_l$  не имеет метки кластера, то:

3.1.3.1.2.1.1 для  $u_l$  и всех элементов множества  $\hat{U}$  вычисляем коэффициент корреляции  $r$ ;

$$3.1.3.1.2.1.1.1\ если\ r \leq QT,\ то\ \{u_l\} \cup \hat{U};$$

3.1.3.1.3 если число элементов множества  $\hat{U}$  —  $\hat{m} \geq \eta$ , то:

$$3.1.3.1.3.1\ \hat{U} \cup G;$$

3.1.4 если  $G \neq \emptyset$ , то:

3.1.4.1 определяем  $\tilde{U} \subset G$  для которого число элементов максимально;

3.1.4.2  $\forall u \in \tilde{U}$  присваиваем текущую метку кластера  $c$ ;

$$3.1.4.3\ c := c + 1.$$

$$4.\ \forall i \in [1, c - 1] \subset Z$$

4.1 для всей совокупности элементов множества  $U$ , для которых метка кластера равна  $i$ , вычисляем коэффициенты линейной регрессии  $a_i$  и  $b_i$ , которые имеют следующий физический смысл:

$$(a_i = (E_i, b_i = \ln\left(\frac{e_{n\infty}}{T_\infty^2}\right)_i) \text{ (здесь } E_i \text{ — энергия теплового возбуждения } i\text{-того ГУ, } e_{n\infty} \text{ — скорость термоэмиссии с этого уровня при бесконечно большой температуре } T_\infty);$$

4.2 зная коэффициент  $b_i$ , определяем величину сечения захвата  $i$ -того ГУ  $\sigma_i$ , пользуясь известным из работы [2] соотношением.

Таким образом, при выполнении вышеизложенной последовательности действий, получаем набор параметров ( $E$  и  $\sigma$ ) для различных ГУ, дающих вклад в релаксацию ёмкости при заданных режимах измерения ИРЕ.

Достоинства предлагаемого алгоритма кластеризации состоят в следующем. Во-первых, при наличии линейных корреляций для точек в аррениусовских координатах алгоритм гарантирует разделение их на соответствующие кластеры. Во-вторых, при выполнении процедуры кластеризации нет необходимости исходно задавать количество кластеров. Эта величина определяется автоматически при выполнении алгоритма. Данный факт является особенно важным в виду того, что исходно при анализе зависимостей ИРЕ число ГУ, участвующих в релаксации ёмкости, неизвестно. Поэтому использование данного алгоритма позволяет получать более объективные результаты. Действительно, при использовании предлагаемого метода, снимается проблема выделения максимумов DLTS-сигнала сложной конфигурации, характерная для традиционного метода DLTS.

Таким образом, последовательное применение первого и второго этапа предлагаемого метода позволяет автоматически определить параметры ГУ по зависимостям ИРЕ. Однако алгоритмы, лежащие в основе этих этапов, не являются строго аналитическими. То есть, в данном случае невозможно получить соотношения для определения погрешности косвенных измерений. Поэтому для оценки достоверности получаемых параметров ГУ разработан третий этап, использующий методы математической статистики и кластерного анализа.

### Этап III. Кластерный и статистический анализ параметров глубоких уровней

Для реализации этого этапа необходимо. Во-первых, провести измерения ИРЕ на  $m_s$  различных образцах, изготовленных на базе одного и того же полупроводника по сходной технологии. Измерение зависимостей ИРЕ желательно проводить в  $m_{reg}$  различных режимах и в одном температурном диапазоне. Выполнение этого условия должно обеспечить репрезентативность данных для дальнейшего статистического анализа. Во-вторых, с использованием алгоритмов первого и второго этапов, провести анализ  $m_s \cdot m_{reg}$  наборов зависимостей ИРЕ. В результате получится  $m_c$  кластеров линейных зависимостей в аррениусовских координатах и  $2m_c$  соответствующих параметров.

Рассмотрим множество  $W = \{w_1, w_2, \dots, w_{m_c}\}$ , где  $w_i = (a_i, b_i)$  —  $i$ -тый элемент множества. Для статистической оценки полученных результатов элементы множества  $W$  необходимо объединить в группы, относящихся к одинаковым ГУ. Для этого используется алгоритм QT (Quality Treshold

Clustering [8], состоящий в данном случае из следующей последовательности действий.

1. Поскольку координаты элементов множества  $W$  имеют разный масштаб и физический смысл, задаём величины порогов качества  $QT_a > 0$  и  $QT_b > 0$ , а также минимальное число элементов в кластере  $\xi$ . Значения  $QT_a$  и  $QT_b$  определяют максимально допустимые расстояния вдоль соответствующих координат между соседними элементами в кластере.

2. Определим величину  $\tilde{c} = 1$ , как метку текущего кластера.

3.  $\forall i \in [1, m_c - 1] \subset Z$

3.1 если элемент множества  $w_i$  не имеет метки кластера, то:

3.1.1 создаём множество  $\tilde{W} = \{w_i\}$

3.1.2  $\forall j \in [i + 1, m_c] \subset Z$

3.1.2.1 если элемент множества  $w_j$  не имеет метки кластера, то:

3.1.2.1.1 вычисляем расстояния вдоль координат между элементами:  $\Delta a_{ij} = \sqrt{(a_i - a_j)^2}$ ,

$\Delta b_{ij} = \sqrt{(b_i - b_j)^2}$ ;

3.1.2.1.2 если  $\Delta a_{ij} \leq QT_a$  и  $\Delta b_{ij} \leq QT_b$ , то:

3.1.2.1.2.1  $\{w_j\} \cup \tilde{W}$ ;

3.1.3 если число элементов множества  $\tilde{W} - m_w \geq \xi$ , то:

3.1.3.1  $\forall w \in \tilde{W}$  присваиваем метку кластера  $\tilde{c}$ ;

3.1.3.2  $\tilde{c} := \tilde{c} + 1$ ;

3.1.3.3 вычисляем координаты центра масс кластера:

$$\langle a_{\tilde{c}} \rangle = \frac{1}{m_w} \sum_{l=1}^{m_w} a_l, \quad \langle b_{\tilde{c}} \rangle = \frac{1}{m_w} \sum_{l=1}^{m_w} b_l;$$

3.1.3.4 определяем границы доверительных интервалов для координат  $a$  и  $b$  элементов множества  $\tilde{W}$ ;

3.1.3.5 зная величины  $\langle b_{\tilde{c}} \rangle$ , вычисляем наиболее вероятное значение сечения захвата для данного ГУ и абсолютную погрешность измерения этой величины.

Таким образом, вышеизложенные процедуры позволяют однозначно идентифицировать  $m_{cl}$  ГУ, определить их параметры и доверительные интервалы для них. Тот факт, что вычисленные  $2m_{cl}$  параметра являются результатом анализа  $m_s \cdot m_{reg}$  независимых экспериментов, позволяет сделать вывод об их статистической достоверности. Причём, чем больше значение  $m_s \cdot m_{reg}$ , тем выше их надёжность.

В результате выполнения третьего этапа метода, множество  $W$  разбивается на  $m_{dl} + 1$  подмножество. Множество  $\bar{W} \subset W$  включает в себя некластеризованные элементы, которые не обладают таким же высоким уровнем достоверности, как и элементы  $m_{dl}$  кластеризованных подмножеств. Поэтому они анализируются в отдельном порядке.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ МЕТОДОМ АНАЛИЗА ЗАВИСИМОСТЕЙ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЁМКСТИ**

С целью проверки состоятельности предлагаемого метода определения параметров ГУ и оценки его разрешающей способности было проведено исследование спектра глубоких энергетических состояний в запрещённой зоне арсенида галлия донорного типа. Для этого была изготовлена серия из  $m_s = 9$  образцов, представляющих собой диоды Шоттки  $Al - GaAs$ . В качестве подложки использовался арсенид галлия ориентации  $\langle 100 \rangle$  с концентрацией мелкой донорной примеси  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Алюминиевые контакты площадью  $1 \text{ мм}^2$  наносились методом термического напыления. В качестве тыльного контакта применялась индий — галлиевая эвтектика.

Измерение ИРЕ проводилось на установке, описанной в работе [9], в диапазоне температур  $T$  от 100 К до 366 К с шагом в 2 К. Для каждого из  $m_s$  образцов использовалось  $m_{reg} = 3$  режима измерения ИРЕ. Параметры этих режимов: для всех трёх —  $V_d = 2 \text{ В}$ ,  $t_d = 10 \text{ мс}$ ,  $t_r = 2 \text{ с}$ ; № 1 —  $V_r = -0.199 \text{ В}$ , № 2 —  $V_r = -1 \text{ В}$ , № 3 —  $V_r = -2 \text{ В}$ . При заданном значении температуры, за интервал времени от 0 до  $t_r$  проводилось не менее 170 измерений ёмкости.

При регрессионном анализе зависимостей ИРЕ (первый этап метода) максимальное число экспоненциальных членов  $\tilde{M} = 5$ . Это значение было подобрано экспериментально, исходя из принципа оптимизации процесса вычислений. Оно, с одной

стороны, обеспечивает нахождение глобального максимума зависимости  $R^2 = f(M)$  для большинства из зависимостей ИРЕ. С другой стороны, поскольку квазиньютоновский метод, используемый для определения параметров в уравнении (1), требует больших вычислительных затрат, выбранное значение  $\tilde{M}$  позволяет сократить время, необходимое для нахождения этих коэффициентов.

Типичный результат выполнения первого этапа предлагаемого метода представлен на рис. 4. Корреляционно-кластерный анализ множества точек, отображённых на рис. 4 (как и для всех  $m_s \cdot m_{reg}$  наборов ИРЕ) проводился при условии —  $QT = -0.9988775$ ,  $\eta = 5$ . Результаты реализации второго этапа метода представлены на рис. 4 и табл. 2. Номера выделенных линейных зависимостей между предикторами и откликами на рис. 4 соответствуют номерам ГУ в табл. 2. Как видно из анализа этих данных, предлагаемый в работе алгоритм корреляционно-кластерного анализа позволяет проводить качественную идентификацию ГУ. Значения коэффициентов корреляции (табл. 2) и тот факт, что для всех выделенных ГУ ( $\hat{i} > \hat{i}_{1-\gamma, \hat{m}-2}$  на уровне значимости  $\gamma = 0.01$ , свидетельствуют о статистической значимости получаемых результатов.

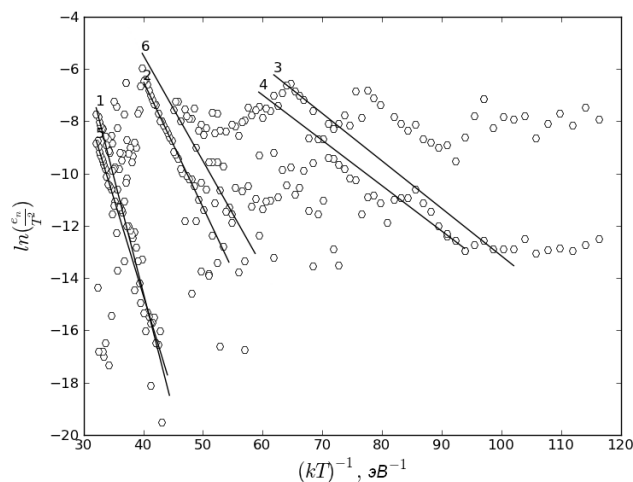


Рис. 4. Аррениусовские зависимости, выделенные методом кластерного анализа ( $QT = -0.9988775$ ,  $\eta = 5$ )

Таблица 2. Результаты корреляционно-кластерного анализа множества точек в аррениусовских координатах, представленных на рис. 4 ( $\gamma = 0,01$ )

№	$E_c - E_i, \text{ эВ}$	$\ln\left(\frac{e_{\text{нво}}}{T_{\infty}^2}\right)_i$	$\sigma_i, \text{ см}^2$	$\hat{m}$	$r$	$(\hat{i} ($	$\hat{i}_{1-\gamma, \hat{m}-2}$ (по данным [7])
1	2	3	4	5	6	7	8
1	0.8972	21.3297	$8.01 \cdot 10^{-8}$	21	-0.998918	93.63	2.86

Окончание табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8
2	0.4828	12.8378	$1.64 \cdot 10^{-11}$	15	-0.998913	77.27	3.01
3	0.1819	5.0224	$6.63 \cdot 10^{-15}$	10	-0.999259	73.43	3.35
4	0.1736	3.4111	$1.32 \cdot 10^{-15}$	8	-0.99888	51.71	3.71
5	0.7524	15.4291	$2.19 \cdot 10^{-10}$	8	-0.99907	56.76	3.71
6	0.405	10.724	$1.99 \cdot 10^{-12}$	6	-0.99963	73.7	4.6

В результате выполнения первого и второго этапов метода для всех  $m_s \cdot m_{reg}$  наборов ИРЕ было сформировано множество  $W$ , состоящее из  $m_c = 188$  элементов. Третий этап метода проводился при условиях —  $QT_a = 0.0539706$ ,  $QT_b = 0.5561836$  и  $\zeta = 3$ . К сожалению, объёмы статьи не позволяют полностью привести результаты корреляционно-кластерного и кластерного

анализов для всей совокупности полученных параметров. Однако, для иллюстрации особенностей второго и третьего этапов метода в табл. 3 приведены результаты для трёх ГУ выделенных в диапазоне температур от 258 К до 366 К.

Результаты статистического анализа всей совокупности выделенных кластеров параметров ГУ представлены в табл. 4.

**Таблица 3.** Результаты корреляционно-кластерного анализа ( $\gamma = 0,01$ ) точек в аррениусовских координатах и кластерного анализа параметров глубоких уровней в запрещённой зоне арсенида галлия

№	$E_c - E$ , эВ	$\ln\left(\frac{e_{nso}}{T_\infty^2}\right)$	$\sigma$ , см <sup>2</sup>	$r$	$\hat{m}$	$(\hat{i}($	$\hat{i}_{1-\gamma, \hat{m}-2}$ (по данным [7])
1	2	3	4	5	6	7	8
1	0.8962	21.07	$6.18 \cdot 10^{-8}$	-0.999469	8	75.14	3.71
	0.9244	21.28	$7.63 \cdot 10^{-8}$	-0.999006	12	70.87	3.17
	0.875	21.33	$7.98 \cdot 10^{-8}$	-0.998988	7	49.66	4.03
	0.8972	21.33	$8.01 \cdot 10^{-8}$	-0.998918	21	93.63	2.86
	0.8717	20.8	$4.73 \cdot 10^{-8}$	-0.998973	14	76.38	3.05
	0.8827	20.87	$5.08 \cdot 10^{-8}$	-0.999033	15	81.93	3.01
	0.8849	21.46	$9.12 \cdot 10^{-8}$	-0.999051	10	64.88	3.35
2	0.8674	20.62	$3.94 \cdot 10^{-8}$	-0.999038	12	72.04	3.17
	0.9069	20.49	$3.49 \cdot 10^{-8}$	-0.999008	9	59.35	3.5
	0.8844	20.14	$2.44 \cdot 10^{-8}$	-0.999159	8	59.69	3.71
	0.8254	20.09	$2.31 \cdot 10^{-8}$	-0.999578	7	76.94	4.03
	0.8422	20.72	$4.37 \cdot 10^{-8}$	-0.999506	11	95.41	3.25
	0.8975	20.36	$3.02 \cdot 10^{-8}$	-0.998899	16	79.67	2.98



Окончание табл. 3

1	2	3	4	5	6	7	8
3	0.8336	19.12	$8.68 \cdot 10^{-9}$	-0.998894	20	90.13	2.88
	0.8403	19.36	$1.11 \cdot 10^{-8}$	-0.998883	13	70.11	3.11
	0.8254	19.59	$1.42 \cdot 10^{-8}$	-0.999268	12	82.6	3.17
	0.8093	18.57	$5.09 \cdot 10^{-9}$	-0.999214	9	66.69	3.5
	0.8459	18.66	$5.55 \cdot 10^{-9}$	-0.999158	8	59.65	3.71
	0.8446	19.63	$1.47 \cdot 10^{-8}$	-0.998879	15	76.08	3.01
	0.8317	19.26	$1.01 \cdot 10^{-8}$	-0.999168	16	91.66	2.98
	0.8269	18.97	$7.59 \cdot 10^{-9}$	-0.998953	18	87.34	2.92

Таблица 4. Результаты статистического анализа параметров глубоких уровней в запрещенной зоне арсенида галлия

№	$\langle E_c - E \rangle$ , эВ	$\Delta E$ , эВ	$\langle \sigma \rangle$ , $см^2$	$\Delta \sigma$ , $см^2$
1	2	3	4	5
1	0.8903	0.00675	$6.962 \cdot 10^{-8}$	$6.25 \cdot 10^{-9}$
2	0.8706	0.01303	$3.262 \cdot 10^{-8}$	$3.36 \cdot 10^{-9}$
3	0.8322	0.00424	$9.623 \cdot 10^{-9}$	$1.27 \cdot 10^{-9}$
4	0.7873	0.01289	$1.471 \cdot 10^{-9}$	$2.23 \cdot 10^{-10}$
5	0.7678	0.01167	$3.362 \cdot 10^{-10}$	$8.3 \cdot 10^{-11}$
6	0.6563	0.00717	$8.511 \cdot 10^{-8}$	$3.89 \cdot 10^{-9}$
7	0.4834	0.01385	$1.034 \cdot 10^{-12}$	$9.25 \cdot 10^{-14}$
8	0.4809	0.00743	$1.857 \cdot 10^{-11}$	$2.52 \cdot 10^{-12}$
9	0.384	0.01082	$2.286 \cdot 10^{-14}$	$9 \cdot 10^{-16}$
10	0.3823	0.01533	$1.008 \cdot 10^{-12}$	$2.3 \cdot 10^{-13}$
11	0.3738	0.00972	$1.843 \cdot 10^{-15}$	$1.47 \cdot 10^{-16}$
12	0.3458	0.00139	$5.13 \cdot 10^{-15}$	$4.96 \cdot 10^{-16}$
13	0.306	0.01615	$6.453 \cdot 10^{-16}$	$1.26 \cdot 10^{-16}$
14	0.3014	0.02058	$1.092 \cdot 10^{-16}$	$9,51 \cdot 10^{-18}$
15	0.2987	0.00642	$1.53 \cdot 10^{-13}$	$2.56 \cdot 10^{-14}$

1	2	3	4	5
16	0.2361	0.01253	$4.155 \cdot 10^{-13}$	$1.88 \cdot 10^{-14}$
17	0.2191	0.00917	$3.033 \cdot 10^{-14}$	$1.95 \cdot 10^{-15}$
18	0.1947	0.00774	$7.392 \cdot 10^{-15}$	$9.14 \cdot 10^{-16}$
19	0.1935	0.01699	$1.384 \cdot 10^{-16}$	$3.23 \cdot 10^{-17}$
20	0.1723	0.00559	$3.179 \cdot 10^{-15}$	$2.09 \cdot 10^{-16}$
21	0.1665	0.0082	$1.441 \cdot 10^{-15}$	$8.75 \cdot 10^{-17}$
22	0.1641	0.01041	$2.379 \cdot 10^{-16}$	$3.48 \cdot 10^{-17}$

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Анализ данных, представленных в работе, позволяет сделать следующие заключения.

Предлагаемый в работе метод определения параметров ГУ обладает значительно большей разрешающей способностью по сравнению с классическим DLTS-методом. Если метод Д. В. Лэнга позволяет выделять в арсениде галлия донорного типа в температурном интервале  $T \in [100, 400]$  К шесть, семь глубокоуровневых ЦЛЗ [3, 10], то предлагаемый в работе метод однозначно идентифицирует 22 ГУ, существование которых обосновано методами математической статистики.

Используемый в работе метод позволяет более точно и адекватно определять значения сечения захвата ГУ (особенно высокотемпературных), чем DLTS-метод. Для иллюстрации этого вывода рассмотрим теоретические DLTS-спектры для двух ГУ (рис. 5): 1 —  $E_c - 0.84$  эВ,  $\sigma = 6 \cdot 10^{-14}$  см<sup>2</sup> [3]; 2 —  $E_c - 0.8322$  эВ,  $\sigma = 9.623 \cdot 10^{-9}$  см<sup>2</sup> (табл. 4, № 3). Для построения этих спектров использовалась известная из работы [2] формула:

$$\frac{\Delta C}{C_s} = \frac{N_{dl}}{2N_D} \left[ e^{-e_n(T)t_1} - e^{-e_n(T)t_2} \right], \quad (5)$$

где  $\Delta C = C(t_2) - C(t_1)$ ;  $t_1$  и  $t_2$  — границы окна сканирования;  $N_{dl}$  — концентрация ГУ;  $N_D$  — концентрация мелкой донорной примеси. Величина

$\frac{N_{dl}}{2N_D}$  определяет только амплитуду DLTS-сигнала,

что в данном численном эксперименте не существенно. Поэтому для простоты полагалось, что  $N_{dl} = N_D = 10^{14}$  см<sup>-3</sup>.

Из анализа зависимостей, представленных на рис. 5, видно, что теоретический DLTS-пик от первого ГУ (график 1) проявляется в диапазоне температур от 500 К до 650 К, в то время как экспериментально он наблюдается в диапазоне от 325 К до 410 К [3, 10]. В тоже время, теоретический DLTS-пик от второго ГУ (график 2), параметры которого определены в данной работе, практически при такой же энергии активации, как и у первого, проявляется в том же интервале температур, что и на экспериментальном DLTS-спектре. В свою очередь, из анализа соотношений (3, 5) видно, что положение DLTS-пику от ГУ определяется не только величиной энергии активации уровня, но и его сечением захвата. Уменьшение величины сечения захвата должно приводить к смещению

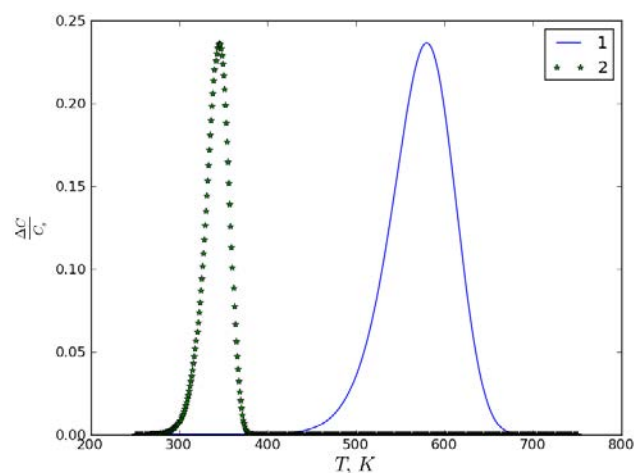


Рис. 5. Теоретические DLTS-спектры ( $t_1 = 0.5$  с,  $t_2 = 2$  с) для глубоких уровней:  $E_c - 0.84$  эВ,  $\sigma = 6 \cdot 10^{-14}$  см<sup>2</sup> (1);  $E_c - 0.8322$  эВ,  $\sigma = 9.623 \cdot 10^{-9}$  см<sup>2</sup> (2)

DLTS-пика в сторону более высоких температур. Таким образом, из всего вышесказанного следует, что при использовании классического DLTS-метода получаются заведомо заниженные значения сечения захвата, особенно для ГУ, лежащих вблизи середины запрещённой зоны полупроводника. В тоже время представленный в работе метод лишён этого недостатка.

Важным достоинством предлагаемого метода является его практически полная автоматизированность. Это означает, что влияние субъективности экспериментатора на конечный результат ограничивается только выбором параметров  $\tilde{M}$ ,  $QT$ ,  $\eta$ ,  $QT_a$ ,  $QT_b$  и  $\xi$ . Этот факт, несомненно, повышает объективность получаемых результатов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lang D. V. // *J. Appl. Physics*, 1974, vol. 45, № 7, pp. 3023—3033.

2. Берман Л. С., Лебедев А. А. *Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках*. Ленинград, Наука, 1981, 176 с.

3. Денисов А. А., Лактюшин В. Н., Садофьев Ю. Г. // *Обзоры по электронной технике. Серия 7*, 1985, № 54.

4. Берман Л. С. // *ФТП*, 1998, т. 32, № 6, с. 688—689.

5. Дрейпер Н. Смит Г. *Прикладной регрессионный анализ*. Пер. с англ., в 2 кн. Москва, Финансы и статистика, 1987, 717 с.

6. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. *Практическая оптимизация*. Пер. с англ. Москва, Мир, 1985, 509 с.

7. Кремер Н. Ш. *Теория вероятности и математическая статистика: Учебник для вузов*. Москва, ЮНИТИ-ДАНА, 2-е изд., 2004, 573 с.

8. Heuer L. J., Kruglyak S., Yooseph S. *Genome Res*, 1999, vol. 9, pp. 1106—1115.

9. Каданцев А. В., Котов Г. И., Левин М. Н., Татаринцев А. В., Шлык Ю. К. *ИТЭ*, 2004, № 6, с. 138—139.

10. Reddy C. V., Fung S., Beling C. D. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 54, № 16, pp. 11290—11297.

## DEEP LEVELS PARAMETERS DETERMINATION IN THE SEMICONDUCTOR BAND GAP BY THE ISOTHERMAL CAPACITY RELAXATION METHOD

© 2014 E. A. Tatrohin<sup>1</sup>, A. V. Budanov<sup>1</sup>, M. E. Semenov<sup>2</sup>, E. V. Rudnev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Voronezh State University of Engineering Technologies, pr. Revolution, 19, 394036 Voronezh, Russia

<sup>2</sup>Voronezh State University, Universitetskaya pl., 1, 394006  
e-mail: rudneff@mail.ru

**Abstract.** Deep levels parameters determination by isothermal capacity relaxation in our methodology is based on three stages of numerical analysis. Firstly we need to carry out a regression analysis of isothermal capacity relaxation characteristics. The modeling exercise results motivate to carry out a correlation-cluster analysis of set of points in Arrhenius coordinates. A consistent application of these two stages provides an opportunity to automatically determine the deep level parameters. However, applying algorithms are not pure analytic. The third stage uses mathematical statistics and cluster analysis methods to estimate the validity of obtained deep level parameters. Experimental investigation of deep levels energies spectrums in n-type gallium arsenide band gap was carried out. As an important result it should be noted that our method possesses much better resolving power in comparison with the standard DLTS-method. We can make a conclusion that our method allow to determine the deep level capture cross sections more precisely in comparison with standard DLTS-method, especially for deep levels located in the middle of semiconductor band gap. Also one of the advantages of the method under consideration consists in its almost full automatization.

**Keywords:** deep levels, regression analysis, correlation analysis, cluster analysis.

## REFERECES

1. Lang D. V. *J. Appl. Phys.*, 1974, vol. 45, no. 7, pp. 3023—3033. Available at: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1663719>.

2. Berman L. S., Lebedev A. A. *Emkostnaya spektroskopiya glubokikh tsentrov v poluprovodnikakh*. Ленинград, Nauka Publ., 1981, 176 p.

3. Denisov A. A., Laktyushin V. N., Sadof'ev Yu. G. *Obzory po elektronnoy tekhnike. Seriya 7*, 1985, 54 p.

4. Berman L. S. *FTP*, 1998, vol. 32, no. 6, pp. 688—689. Available at: <http://journals.ioffe.ru/ftp/1998/06/p688—689.pdf>

5. Draper N. Smith H. *Prikladnoi regressionnyi analiz*. Per. s angl., v 2 kn. Moskva, Finansy i statistika Publ., [Applied Regression Analysis, Second Edition] 1987, 717 p.
6. Gill F., Myurrei U., Rait M. *Prakticheskaya optimizatsiya*. [Practical Optimization. Philip E. Gill Walter Murray Margaret H. Wright. Systems Optimization Laboratory Department of Operations Research Stanford University California, USA] Per. s angl. Moscow, Mir Publ., 1985, 509 p.
7. Kremer N. Sh. *Teoriya veroyatnosti i matematicheskaya statistika: Uchebnyk dlya vuzov*. Moscow, YuNI-TI-DANA Publ., 2004, 573 p.
8. Heyer L. J., Kruglyak S., Yooseph S. *Genome Res*, 1999, vol. 9, pp. 1106—1115. DOI:10.1101/gr.9.11.1106
9. Kadantsev A. V., Kotov G. I., Levin M. N., Tatarintsev A. V., Shlyk Yu.K. *PTE [Instruments and Experimental Techniques]*, 2004, no. 6, pp. 138—139.
10. Reddy C. V., Fung S., Beling C. D. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 54, № 16, pp. 11290—11297. DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11290> Available at: <http://hdl.handle.net/10722/43180>

---

*Татохин Евгений Анатольевич* — к. ф.-м. н., доцент кафедры физики, Воронежский государственный университет инженерных технологий; тел.: +7 (920) 2186892, e-mail: tea.vsueta@mail.ru

*Буданов Александр Владимирович* — к. ф.-м. н., доцент кафедры физики Воронежский государственный университет инженерных технологий; тел.: +7 (903) 8527719, e-mail: budanova9@gmail.com

*Семёнов Михаил Евгеньевич* — д. ф.-м. н., профессор кафедры цифровых технологий, Воронежский государственный университет; тел.: +7 (903) 6528639, e-mail: mkl150@mail.ru

*Руднев Евгений Владимирович* — к. ф.-м. н., доцент кафедры физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: +7 (951) 8764844, e-mail: rudneff@mail.ru

*Tatokhin Evgeny A.* — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Physics Department, Voronezh State University of Engineering Technologies; ph.: +7 (920) 2186892, e-mail: tea.vsueta@mail.ru

*Budanov Alexander V.* — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Physics Department, Voronezh State University of Engineering Technologies; ph.: +7 (903) 8527719, e-mail: budanova9@gmail.com

*Semenov Michael E.* — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor of the Digital Technologies Department, Voronezh State University; ph.: +7 (903) 6528639, e-mail: mkl150@mail.ru

*Rudnev Evgeniy V.* — Can. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Solid State Physic and Nanostructures Department, Voronezh State University; ph.: +7 (951) 8764844, e-mail: rudneff@mail.ru