

ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ РЕЛАКСАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А. А. Шматов

Киевский политехнический институт, Киев, Украина
(Получена 5.11.1992 г. Принята к печати 10.12.1992 г.)

В статье рассматриваются две тенденции в направлении развития техники релаксационной спектроскопии глубоких уровней (РСГУ). Указываются достоинства и недостатки при различных распределениях удельного объема обработки получаемой информации в приборной части и в части математических расчетов. Проводится сравнительный анализ широко используемых методов обработки спектров РСГУ. Описывается идея применения метода математического моделирования для обработки РСГУ спектров. Приводятся ряд рекомендаций по использованию этого метода и перечисляются его основные преимущества. Для обработки методом математического моделирования достаточно спектра, снятого при одном «окне эмиссии», при этом может быть использован любой участок спектра, в том числе лишенный максимума пика; метод применим для любой корреляционной функции, позволяет обрабатывать перекрывающиеся пики, вычислять параметры глубоких центров с высокой точностью и получать дополнительную информацию из формы спектра, например температурную зависимость сечения захвата носителей заряда на глубокие центры.

Неоспоримые достоинства метода релаксационной спектроскопии глубоких уровней (РСГУ) [1] давно прочно завоевали симпатии огромной армии исследователей. В результате интенсивного развития этого метода к настоящему времени не только значительно усовершенствовались методика РСГУ и соответствующая аппаратура, но и появилось множество различных способов расчетов параметров глубоких центров (ГЦ) из полученных экспериментальных данных.

Настоящая работа посвящена одному из наиболее перспективных способов расчета параметров ГЦ из спектров РСГУ, заключающемуся в применении математического моделирования (далее в тексте именуемым методом ММ). Перед рассмотрением данного вопроса необходимо коснуться некоторых аспектов измерений РСГУ, а также провести сравнительный анализ широко используемых методов обработки РСГУ спектров.

Конкретные задачи исследований диктуют свои особенности измерений и этим частично объясняется существующее обилие модификаций РСГУ. Как показывает опыт, при этом преимущество принадлежит тем способам получения информации, которые обладают прежде всего максимальной однозначностью, достоверностью, точностью и чувствительностью. Экспериментатору, искусному достижениями вычислительной техники, кажется наиболее естественным использовать непосредственно саму кривую релаксации для перевода ее в цифровой код, т. е. сместить акцент обработки информации на вторую стадию математических расчетов. (Получение параметров ГЦ из анализа фурье-преобразований релаксационного сигнала описано в работах [2, 3]). Однако такой подход приведет к большому затратам и результатам значительно худшим, чем в случае использования традиционного РСГУ. Одна из причин состоит в том, что в традиционном РСГУ используется устройство — дискриминатор (коррелятор) [1], позволяющее выделять сигнал с определенной постоянной времени релаксации.

Это придает РСГУ спектроскопический характер, точность и высокую чувствительность. Вторая причина — наглядность и простота обработки получаемых данных. Существуют и другие причины, в частности спектры РСГУ удобно сопоставлять и сравнивать со спектрами, полученными другими исследователями. О целесообразности предварительной приборной аналоговой обработки сигнала указывается и в работе [4].

С другой стороны, известны попытки облегчить обработку результатов и уменьшить количество измерений за счет специальной приборной обработки. Для этого, например, используют в качестве дискриминатора стробирующий накопитель, осуществляющий выборку сигнала в трех [5] или четырех [6] точках релаксационной кривой. Однако такая модернизация может быть применима только для одиночного, ничем неискаженного пика РСГУ. Кроме того, при этом приносятся в жертву точность и чувствительность. Таким образом, чрезмерный перенос обработки в аналоговую часть спектрометра также вреден, и, по-видимому, традиционная РСГУ наиболее близка к компромиссному варианту.

Для определения зависимости постоянной времени термоэмиссии носителей заряда от температуры в традиционной РСГУ проводят несколько температурных сканирований при различных «окнах эмиссии». Для расчета используют точку максимума пика [1] или значения температуры на уровне полувысоты пика [7]. Последний способ позволяет приближенно рассчитать параметры ГЦ из спектра, снятого при одном окне эмиссии. Точность будет выше, если использовать информацию о всей кривой. Такой способ расчета параметров был разработан для случая узких стробирующих импульсов [8, 9]. «Многоточечный» метод (так иногда его называют) имеет, к сожалению, ограниченные возможности — проблематична обработка перекрывающихся пиков и требуется точное знание амплитудного значения и положения (по температуре) максимума пика. Последнее относится и к способам, аналогичным описанному в работе [10], где предлагается получить информацию из «низкотемпературного хвоста» РСГУ, где путем несложной математической обработки. Метод ММ лишен перечисленных недостатков и позволяет значительно расширить возможности метода РСГУ.

Рассмотрим случай одновременно перезаряжающихся N типов ГЦ, выразив алгоритм РСГУ измерений математически. Предположим, что релаксация заряда носит экспоненциальный характер для каждого типа ГЦ. Тогда сигнал P на выходе дискриминатора может быть представлен в виде [11]:

$$P = \frac{K}{T_m} \int_0^{T_m} \left[\sum_{i=1}^N C_i \exp(-t/\tau_i) + n(t) \right] w(t) dt, \quad (1)$$

где C_i , τ_i — величина релаксирующей части емкости и постоянная времени перезарядки i -го глубокого уровня соответственно; $w(t)$ — корреляционная функция; $n(t)$ — искажающая функция (например, гауссовый шум); K — масштабный коэффициент; T_m — характерное время выходного фильтра (время интегрирования).

Величина C_i связана с концентрацией соответствующего глубокого уровня, а τ_i является функцией температуры, в которую как параметры входят энергия активности соответствующего типа ГЦ и сечение захвата на них носителей заряда. Зависимость сигнала P от температуры (1) фактически представляет собой в общем виде теоретическое представление РСГУ спектра. Параметры ГЦ определены, если найдены их значения, обеспечивающие совпадение теоретического выражения типа (1) и экспериментального спектра (в том числе при различных окнах эмиссии).

Вычисления, учитывая их большой объем, производят на ЭВМ по специальной программе. По измеренному спектру можно угадать количество глубоких уровней и их приближенные параметры (последнее не обязательно). Далее необходимо подогнать параметры теоретического спектра так, чтобы он максимально совпадал

$$\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M [Y(j) - P(j)]^2 = S_k, \quad (2)$$

где $Y(j)$, $P(j)$ — экспериментальное и теоретическое значения РСГУ сигнала при j -й температуре соответственно; M — количество экспериментальных точек (температур); S_k — величина, характеризующая совпадение на k -ом шаге вычисления; k — номер шага.

Последовательно изменяя на незначительную величину определяемые и приблизительно известные параметры, ЭВМ стремится уменьшить величину S_k . Вычисления циклически повторяются с уменьшающимися поправками до определенного предела, ограниченного точностью измеренных величин, и т. п. Очевидно, что так же можно получать из спектра температурную зависимость сечения захвата — достаточно для рассчитанной энергии активации в каждой температурной точке вычислить сечение захвата.

Принципиальным для обработки методом ММ является качество спектров, которое зависит от измерительного тракта РСГУ установки и корреляционной функции. Что касается выбора корреляционной функции, то автором ранее был произведен расчет и показано [12], что наилучшей во всех отношениях является функция с широкими стробирующими импульсами. Оптимальная длительность этих импульсов Δt приблизительно равна $T/4$, где T — длительность опустошающих импульсов.

Теоретическое выражение РСГУ спектра, например в случае использования корреляционной функции, обеспечивающей повышенную разрешающую способность [12], имеет вид

$$P = \frac{K}{4t_0} \sum_{i=1}^N C_i \tau_i [1 - \exp(-4t_0/\tau_i)] [\exp(-12t_0/\tau_i) - \exp(-21t_0/\tau_i)] + Q, \quad (3)$$

где t_0 — время задаваемой дискретности (для данного случая окно эмиссии приблизительно равно $18.1t_0$); Q — величина, не зависящая от температуры, часто пренебрежимо мала.

В некоторых случаях сокращение времени расчетов может быть достигнуто следующим приемом. Форма РСГУ спектра для одного уровня такова, что вдали от максимума величина сигнала резко уменьшается. Это означает, что для отдельных или незначительно перекрывающихся пиков процедура вычислений может быть избирательной, т. е. для данного пика можно ограничить диапазон температурных точек. Удобно использовать для этих целей весовую функцию, близкую по форме к теоретической функции РСГУ кривой одного уровня, последовательно обрабатывая каждый пик спектра.

При измерениях и обработке необходимо учитывать опасность возникновения ошибок за счет неэкспоненциальности релаксации. Известно, что неэкспоненциальность может быть обусловлена такими причинами, как влияние электрического поля на скорость эмиссии [13], примерное равенство плотности ловушек и концентрации мелкой примеси [14, 15] или перезарядкой ловушек с близкими скоростями эмиссии. Последний случай легко обнаруживается следующим образом. Если в вычислениях на некотором участке спектра был задан один уровень, а в действительности пик был образован наложением сигналов от двух уровней, зависимость сечения захвата от температуры будет иметь ступенчатобразный вид. Для разделения пиков можно поступить, следуя работе [16], где используется метод анализа параметров ловушек в зависимости от ширины

заполняющих импульсов. Другой путь — при расчете правильно задать количество пиков.

Необходимо учитывать, что в ряде случаев, например при низкой подвижности носителей заряда и высокой концентрации ГЦ, обычно применяемая формула для скорости эмиссии становится несправедливой [17].

В отличие от всех других методов обработки РСГУ спектров метод ММ наилучшим образом подходит в нестандартных ситуациях, позволяя не только учесть искажающие факторы, но и получить при этом дополнительную информацию.

Для обработки методом ММ достаточно спектра, снятого при одном окне эмиссии. При этом может быть использован любой участок спектра, в том числе и не содержащий максимума линии (точность вычислений пропорциональна количеству экспериментальных точек). Метод применим для любой корреляционной функции, позволяет обрабатывать перекрывающиеся пики и получать некоторые зависимости, например температурную зависимость сечения захвата носителей заряда на ГЦ.

В заключение следует отметить, что было проведено всестороннее сравнение метода ММ на практике [18] с несколькими широко используемыми методами обработки. Результаты сравнения показали значительные преимущества метода ММ, в частности его высокую точность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] D. V. Lang, *J. Appl. Phys.*, **45**, 3023 (1974).
- [2] C. D. Wang, H. C. Lin. *J. Appl. Phys.*, **52**, 546 (1981).
- [3] M. Okuyama, H. Takakuda, Y. Hamakawa. *Sol. St. Electron.*, **27**, 689 (1983).
- [4] K. L. Wang. *J. Appl. Phys.*, **53**, 449 (1982).
- [5] F. Hasegawa. *Japan. J. Appl. Phys.* (I), **24**, 1356 (1985).
- [6] В. И. Зубков, А. В. Соломонов, М. Т. Тодоров. *ФТП*, **21**, 1734 (1987).
- [7] G. L. Miller, D. V. Lang, L. C. Kimerling. *Ann. Rev. Mater. Sci.*, **7**, 377 (1977).
- [8] A. L. Bloa, H. N. Fayennic, J. Colin. *Phys. St. Sol.* (a), **64**, 85 (1981).
- [9] А. В. Васильев, С. А. Смагулова, С. С. Шаймеев. *ФТП*, **17**, 162 (1983).
- [10] H. P. Hjalmarson, G. A. Samara. *J. Appl. Phys.*, **63**, 1801 (1988).
- [11] G. L. Miller, J. V. Ramirez, D. A. Robinson. *J. Appl. Phys.*, **46**, 2638 (1975).
- [12] А. А. Шматов. *ФТП*, **26**, 473 (1992).
- [13] G. Vincent, A. Chantre, D. Bois. *J. Appl. Phys.*, **50**, 5484 (1979).
- [14] A. C. Wang, C. T. Sah. *J. Appl. Phys.*, **55**, 565 (1984).
- [15] D. Stievenard, M. Lanoo, J. C. Bourgoin. *Sol. St. Electron.*, **28**, 485 (1985).
- [16] H. Nakasima, T. Miyagawa, S. Sugitani, K. Hashimoto. *Japan. J. Appl. Phys.* (I), **25**, 205 (1986).
- [17] А. Я. Шик. *ФТП*, **18**, 1759 (1984).
- [18] И. Н. Белокурова, О. В. Третьяк, С. И. Шаховцова, М. М. Шварц, А. А. Шматов. *ФТП*, **23**, 1869 (1989).

Редактор Т. А. Полянская