

## ОПТИМИЗАЦИЯ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПРОЦЕДУРЫ В МЕТОДАХ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ РЕЛАКСАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

О. Ф. Вывенко, А. А. Истратов

Санкт-Петербургский государственный университет, 190034, Санкт-Петербург, Россия  
(Получена 22.01.1992. Принята к печати 2.04.1992)

При исследовании уровней примесей, точечных дефектов и дислокаций в полупроводниках методами релаксационной спектроскопии возникает задача разрешения близлежащих максимумов. Основным способом решения этой задачи является правильный выбор корреляционной процедуры обработки сигналов релаксации. Проведено сравнение чувствительности и разрешающей способности корреляционных методов с различными весовыми функциями. Сравнение основано на расчете параметров коррелятора в зависимости от времени задержки  $T_c$  весовой функции относительно начала релаксации. Показано, что разрешающая способность коррелятора может быть заметно улучшена правильным выбором  $T_c$ . Построена параметрическая диаграмма, позволяющая наглядно сравнить известные весовые функции и выбрать коррелятор, соответствующий экспериментальным задачам. Результаты математического моделирования подтверждены экспериментально полученными спектрами DLTS с различными корреляционными процедурами.

*Введение.* В настоящее время для исследования глубоких центров в полупроводниках широкое распространение получили методы термостимулированной релаксационной спектроскопии, такие как DLTS, PICS и их разновидности. Для определения постоянной времени релаксации в этих методах используется корреляционная процедура, состоящая в перемножении сигнала релаксации с некоторой весовой функцией с последующим интегрированием. Разрешающая способность и чувствительность методов при прочих равных условиях определяются видом весовой функции.

Применение автоматизированных установок, в которых сигнал релаксации емкости после заполняющего импульса оцифровывается с помощью аналогово-цифрового преобразователя и далее подвергается численной обработке посредством ЭВМ [1-5], позволяет легко реализовать весовую функцию любой формы с произвольными параметрами. Таким образом, возникает задача выбора оптимальной весовой функции. В литературе описан целый ряд различных весовых функций, отличающихся по ширине линии и соотношению сигнал—шум [6-10]. В работах [7, 11] проведено сравнение некоторых корреляционных процедур, однако детальный анализ, позволяющий выбрать функцию с оптимальными параметрами, не проводился.

В настоящей работе мы провели сравнение чувствительности и разрешающей способности корреляционных методов с различными весовыми функциями. Сравнение основано на расчете параметров коррелятора в зависимости от времени задержки весовой функции относительно начала отсчета времени. Такой подход дает возможность представить полученные данные в виде параметрической диаграммы, наглядно сравнить известные весовые функции по всем параметрам в комплексе и выбрать коррелятор, соответствующий экспериментальным задачам.

Корреляционную процедуру описывают следующие основные соотношения. Выходной сигнал коррелятора  $S(\tau)$  описывается формулой

$$S(\tau) = \int_0^{\tau} e(t, \tau) w(t) dt, \quad (1)$$

где  $w(t)$  — весовая функция,  $e(t, \tau)$  — входной сигнал, в общем случае представляющий собой экспоненту или сумму экспонент с добавкой шумовой составляющей  $n(t)$ :

$$e(t) = \sum_i A_i \exp(-t/\tau_i) + n(t). \quad (2)$$

Как отмечается в [11], корреляционная процедура есть по сути дела преобразование Лапласа от весовой функции, отличной от нуля в промежутке от 0 до  $T$ :

$$S(\tau) = \sum_i A_i \int_0^{\infty} \exp(-t/\tau_i) w(t) dt + \int_0^{\infty} n(t) w(t) dt. \quad (3)$$

Весовая функция  $w(t)$  выбирается таким образом, чтобы значение  $S$  удовлетворяло условиям

$$\begin{aligned} S(\tau) &\rightarrow 0 \text{ при } \tau \rightarrow 0, \\ S(\tau) &\rightarrow 0 \text{ при } \tau \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4)$$

и имело максимум при некотором  $\tau = \tau_0$ . Многие функции имеют преобразование Лапласа достаточно простого вида, удовлетворяющее вышеуказанным требованиям, поэтому помимо функций, приведенных в работах [6–10], можно предложить большое количество возможных весовых функций, воспользовавшись таблицами преобразования Лапласа [12]. Однако далеко не все функции обеспечивают приемлемую ширину линии и соотношение сигнал—шум.

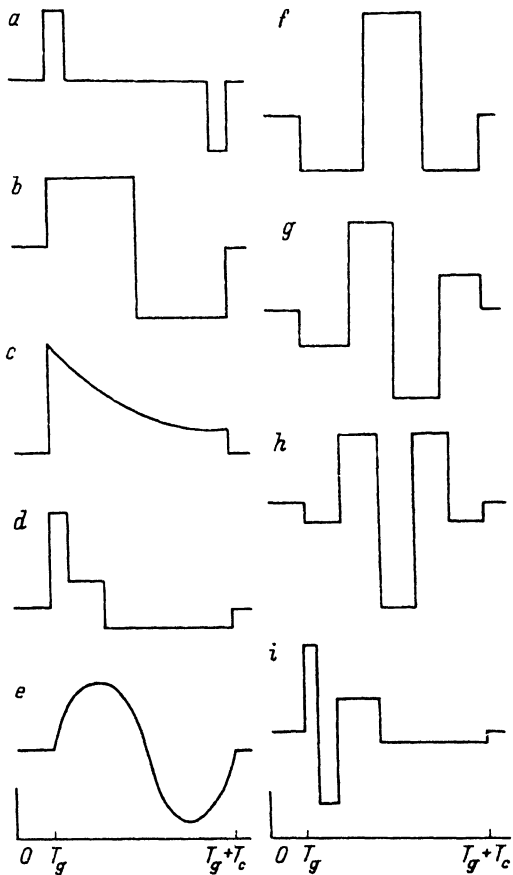
Наиболее распространенные весовые функции приведены на рис. 1. На рис. 1, *a* изображен двухимпульсный интегратор (double boxcar). Его широкое распространение обусловлено простотой и минимальными требованиями к измерительной аппаратуре. Соотношение сигнал—шум такого коррелятора зависит от ширины стробов  $T_s$  и убывает по мере уменьшения  $T_s$  [6]. Мы выбрали для расчетов длительность стробов, равную 0.1 от длительности коррелятора  $T_c$ .

Экспоненциальная весовая функция, совпадающая по форме с обрабатываемым сигналом, обеспечивает, как известно из теории, наилучшее возможное соотношение сигнал—шум [7]. Ее практическая реализация затруднена необходимостью восстановления постоянной составляющей зашумленного сигнала релаксации емкости. Эта задача тем более сложна при компьютерной реализации коррелятора. Небольшая погрешность в определении постоянной составляющей может привести к значительным ошибкам в величине выходного сигнала. Следовательно, реализация экспоненциального коррелятора в автоматизированной установке требует более сложного и отработанного программного обеспечения, чем другие корреляторы.

Функция на рис. 1, *d* предложена Ходгартон в [9] для исследования сильно зашумленных сигналов.

Функции на рис. 1, *f*, *g*, *h* [8] и *i* [10] предложены как корреляционные функции для DLTS-спектроскопии высокого разрешения.

рис. 1. Различные весовые функции. *a* — двухимпульсный интегратор (double boxcar); *b* — синхронный усилитель (lock-in); *c* — экспоненциальная весовая функция вида  $\exp(-t/(0.4T_c))$ ; *d* — функция Ходгарта. Длительность ступенек (0.1, 0.15, 0.75)  $T_c$ , высота ступенек (4.7, 1.45, -0.92); *e* — синусоидальная весовая функция; *d, g, h* — функции высокого разрешения HiRes-3, HiRes-4, HiRes-5. Длительности ступенек равны, высота построена на основе биномиальных коэффициентов и соответственно равна (-1, 2, 1), (-1, 3, -3, 1) и (-1, 4, -6, 4, -1); *i* — функция высокого разрешения HiRes-6, длительность ступенек пропорциональна (1, 2, 4, 8), высота ступенек (1, -7/8, 7/32, -1/64).



В качестве параметра весовой функции на рис. 1 выделено время задержки  $T_g$ . Под временем задержки мы понимаем промежуток времени между окончанием заполняющего импульса до момента, когда весовая функция принимает отличное от нуля значение. Время задержки всегда используется в эксперименте. Это связано с тем, что в момент заполняющего импульса происходит перегрузка входных цепей емкостного моста. Чтобы избежать искажений выходного сигнала коррелятора, используют «импульс ворот», вырезающий из сигнала релаксации перегруженный участок. Импульс ворот (gate) длиннее заполняющего импульса на величину  $T_g$ , определяемую быстродействием емкостного моста. Как правило, время задержки  $T_g$  значительно меньше времени корреляции  $T_c$ . С учетом времени задержки формула (1) приобретает вид

$$S(\tau) = \int_{T_g}^{T_g + T_c} e(t, \tau) w(t) dt. \quad (5)$$

Из рассматриваемых функций только double boxcar всегда используется со значительным временем задержки  $T_g$ , которое традиционно считается частью весовой функции. Для формирования единого подхода мы отделили время задержки от собственно весовой функции.

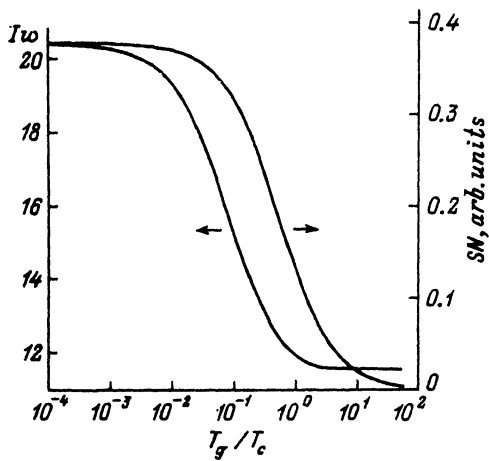
## 2. Методы сравнительного анализа весовых функций

Для проведения сравнительного анализа различных процедур вычислялись следующие значения.

1. Ширина DLTS-линии как соотношение показателей экспоненты  $\tau_{\min}$  и  $\tau_{\max}$ , при которых достигается половина высоты DLTS-максимума:

$$lw = \tau_{\max} / \tau_{\min}. \quad (6)$$

Рис. 2. Зависимость ширины линии  $lw$  и соотношения сигнал—шум  $SN$  в зависимости от времени задержки на примере экспоненциального коррелятора.



Рассчитанная таким образом относительная ширина в отличие от реальной ширины  $\Delta T$  или отношения  $\Delta T/T_{\max}$  не зависит от параметров глубокого центра и является характеристикой только корреляционной функции.

2. Соотношение сигнал—шум в точке DLTS-максимума

$$SN = A_0/N, \quad (7)$$

где амплитуда DLTS-максимума определялась по формуле

$$A_0 = \int_{T_g}^{T_g+T_c} \exp(-t/\tau_0) w(t) dt, \quad (8)$$

а величина шума — по формуле [13]

$$N = \left( \int_{T_g}^{T_g+T_c} (w(t))^2 dt \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Вычисление параметров весовых функций для их сравнительного анализа производилось методами математического моделирования путем численного расчета всей линии. Выражение для формы линии, как правило, легко получается из (5) аналитически, однако задача нахождения точки максимума и, тем более, ширины линии требует решения трансцендентного уравнения. В частности, для функции lock-in получается следующее выражение для формы линии:

$$S(\tau) = (\tau/T_c) \exp(-T_g/\tau) \times \\ \times (1 - \exp(-T_c/2\tau))^2. \quad (10)$$

Точка DLTS-максимума дается уравнением

$$\frac{\tau/T_c + T_g/T_c}{\tau/T_c + T_g/T_c + 1} = \exp(-T_c/2\tau). \quad (11)$$

Из этого уравнения, в частности, следует, что постоянная времени  $\tau_0$ , при которой достигается DLTS-максимум, зависит от отношения времени задержки  $T_g$  к длительности корреляции  $T_c$ . Постоянство отношения  $T_g/T_c$  обеспечивает независимость от  $T_c$  (т. е. от опорной частоты DLTS) необходимого для построения графика Аррениуса отношения  $\tau_0/T_c$  и, таким образом, прямолинейность графика Аррениуса. Исходя из этого, далее в статье везде приводится не абсолютное значение  $T_g$ , а отношение  $T_g/T_c$ .

Параметры весовых функций при различных временах задержки

Весовая функция	$T_g = 0$			$T_{g-opt}$	$T_g = T_{g-opt}$		
	$lw$	$SN$	$\tau_{max}/T_c$		$lw$	$SN$	$\tau_{max}/T_c$
Boxcar	36.77	0.081	0.300	0.135	16.38	0.058	0.507
Lock-in	18.34	0.204	0.398	0.050	15.60	0.181	0.461
ExpCor	20.37	0.377	0.487	0.091	15.48	0.319	0.604
Sin	14.82	0.178	0.422	0	14.82	0.178	0.422
Hodgart	26.72	0.233	0.246	0.074	16.44	0.182	0.356
HiRes-3	9.75	0.076	0.175	0.018	8.542	0.069	0.189
HiRes-4	7.59	0.032	0.107	0.010	6.750	0.029	0.113
HiRes-5	6.59	0.015	0.075	0.007	5.905	0.014	0.079
HiRes-6	10.00	0.056	0.041	0.007	8.042	0.048	0.047

Весовая функция	$T_g = 0.1 \cdot T_c$			$T_g = T_c$		
	$lw$	$SN$	$\tau_{max}/T_c$	$lw$	$SN$	$\tau_{max}/T_c$
Boxcar	17.8	0.062	0.46	12.02	0.022	1.453
Lock-in	14.4	0.163	0.52	11.83	0.062	1.472
ExpCor	15.2	0.31	0.61	11.93	0.132	1.597
Sin	13.05	0.144	0.54	10.86	0.055	1.448
Hodgart	15.5	0.17	0.39	10.94	0.054	1.333
HiRes-3	6.85	0.047	0.245	5.58	0.0065	0.731
HiRes-4	4.95	0.014	0.158	4.05	0.00073	0.486
HiRes-5	4.00	0.0052	0.115	3.35	0.00009	0.364
HiRes-6	4.95	0.013	0.098	4.04	0.00025	0.425

Параметры корреляторов для различных весовых функций при разных временах задержки приведены в таблице. На рис. 2 приведена зависимость ширины линии и соотношения сигнал—шум для экспоненциального коррелятора. Подобный вид зависимости типичен для всех корреляционных функций. Из рисунка видно, что с увеличением  $T_g$  происходят уменьшение ширины линии и ухудшение отношения сигнал—шум, однако ширина линии при малых задержках убывает с ростом  $T_g$  быстрее, чем сигнал—шум. Поэтому предложенный в [7] параметр качества  $k = SN/lw$  достигает максимума при  $T_g = T_{g-opt} = (0.01 - 0.01) T_c$  (рис. 3). Оптимальное время задержки  $T_{g-opt}$  различно для разных корреляционных функций. Использование оптимальной задержки позволяет получить по сравнению с  $T_g = 0$  до 15—20% более узкую линию при практически том же отношении сигнал—шум. Кроме того, этот результат показывает, что быстрота затухания переходных процессов не является критичной для емкостного моста. Относительно медленный измеритель емкости позволяет с учетом вышесказанного создать хороший DLTS-спектрометр.

При больших временах задержки соотношение сигнал—шум падает до нуля. В то же время, как показали результаты моделирования, ширина линии не убывает ниже некоторого предела, который достигается при  $T_g \approx T_c$ . Дальнейшее увеличение задержки не улучшает разрешения, а лишь увеличивает шумы на спектре.

Из данных рис. 2 можно сделать вывод, что для получения наилучшего разрешения время задержки следует выбирать большим  $T_{g-opt}$ , но меньшим  $T_c$ , при котором происходит загиб кривой  $lw(T_g)$ . Видимо, можно считать удачным выбором величину  $T_g \approx 0.1 T_c$ .

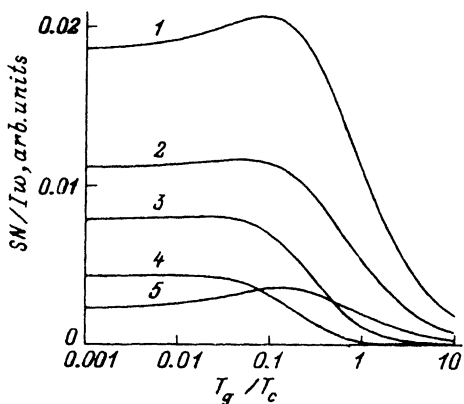


Рис. 3. Зависимость отношения сигнал—шум к ширине линии от величины времени задержки для различных весовых функций.

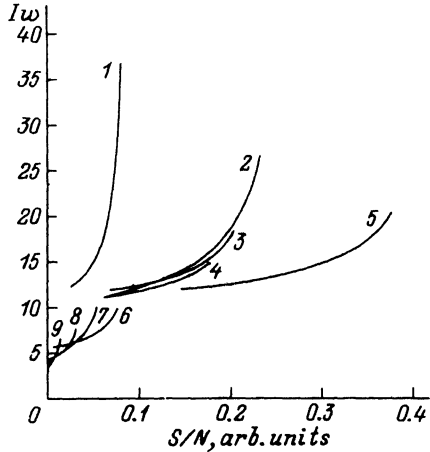


Рис. 4. Параметрическая диаграмма ширины линии — отношение сигнал—шум для различных весовых функций. Параметр — время задержки (изменяется от  $T_g=0$  до  $T_g=T_c$ ). 1 — double boxcar, 2 — функция Ходгарта, 3 — lock-in, 4 — синусоидальная весовая функция, 5 — экспоненциальный коррелятор, 6 — HiRes-3, 7 — HiRes-6, 8 — HiRes-4, 9 — HiRes-5.

#### 4. Параметрическая диаграмма весовых функций

На рис. 4 приведены в осях координат  $Iw$  от  $SN$  кривые для каждой из корреляционных процедур в параметрической зависимости от времени задержки  $T_g$ . По этому семейству кривых возможно, задавшись шириной линии, выбрать весовую функцию, обеспечивающую наименьший шум или, наоборот, — при заданном шуме наименьшую ширину. Предлагаемая своего рода фазовая диаграмма для корреляционных функций позволяет наглядно сравнить их между собой и может использоваться как способ сравнения вновь предлагаемых весовых функций с уже существующими.

Видно, что экспоненциальный коррелятор значительно превосходит все остальные весовые функции по отношению сигнал—шум. Следует отметить, что корреляционную обработку с экспоненциальной весовой функцией можно реализовать несколькими различными способами, по-разному восстанавливая постоянную составляющую опорного и измеряемого сигналов. Наши расчеты показывают, что только вариант, когда постоянная составляющая обрабатываемого сигнала восстанавливается по величине сигнала в конце релаксации

$$e(t) = A_0 \exp(-t/\tau) - \exp(-(T_g + T_c)/\tau), \quad (12)$$

а опорный сигнал берется без восстановления постоянной составляющей, дает максимально низкий уровень шума. Именно такой вариант описан в работах [6, 7]. Другие возможные реализации коррелятора с экспоненциальной весовой функцией лишь незначительно превосходят существенно более простой lock-in или уступают ему.

Функции lock-in, sin и функция Ходгарта имеют приблизительно одинаковые параметры, в то время как double-boxcar значительно уступает им по отношению сигнал—шум. Все вышеперечисленные функции имеют приблизительно одинаковую минимальную ширину линии, достигаемую при увеличении времени задержки.

Важным является вывод, что очень широко распространенная функция double-boxag не превосходит, как это часто считается, функции lock-in и экспоненциальный коррелятор по ширине линии. При правильном выборе времени задержки функция lock-in или экспоненциальная весовая функция позволяет получить ту же ширину линии, что и double-boxag, при значительно лучшем отношении сигнал—шум.

Лучшее разрешение дают функции HiRes-3, HiRes-4, HiRes-5 и HiRes-6. Следует отметить, что, не сильно отличаясь друг от друга по ширине линии, эти функции в несколько раз отличаются по отношению сигнал—шум.

## 5. Экспериментальные результаты

В качестве иллюстрации вышеизложенного на рис. 5 приведены экспериментальные DLTS-спектры, снятые с различными весовыми функциями при времени задержки  $T_g = 0$  и  $T_g = 0.1T_c$ . Измерения проводились на образце  $p$ -SiGe(S) на автоматизированной установке на базе компьютера IBM AT, крейта КАМАК и аналогового емкостного спектрометра [14]. Ранний вариант автоматизированной установки описан в [6]. Два близкорасположенных максимума при температуре около 140 К, почти сливающихся при измерениях с помощью функции lock-in, удовлетворительно разрешаются корреляторами с функциями HiRes-3, HiRes-4. В то же время видно, что при работе с корреляторами высокого разрешения значительно возрастает уровень шума. Показательно сравнение спектров, полученных с функциями HiRes-4 и HiRes-5. В то время как разрешение близлежащих линий почти одинаково, шум на кривых отличается в несколько раз.

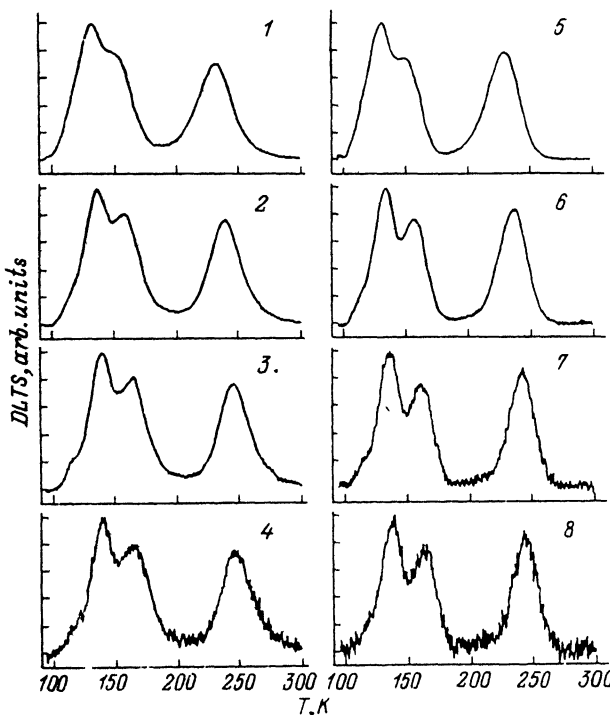


Рис. 5. Экспериментальные спектры DLTS, полученные с различными весовыми функциями на образце  $p$ -SiGe(S).  $T_g$ : 1—4 — 0.5—8—0.1  $T_c$ . 1, 5 — lock-in; 2, 6 — HiRes-3; 3, 7 — HiRes-4; 4, 8 — HiRes-5.

**Заключение.** Полученные результаты показывают, что разрешающая способность и чувствительность релаксационного спектрометра зависят не только от вида весовой функции, но и от выбора времени задержки. Здесь просматривается глубокая аналогия с оптической спектроскопией. Если корреляционная функция соответствует аппаратной функции оптического прибора, обусловленной его конструкцией, то время задержки аналогично ширине щели. При увеличении  $T_g$  увеличивается разрешающая способность спектрометра и одновременно с этим уменьшается величина обрабатываемого сигнала, т. е. чувствительность. Предел разрешающей способности коррелятора, достигаемый при  $T_g = T_c$ , аналогичен дифракционному пределу оптической спектроскопии, когда ширина щели становится сравнимой с длиной волны света. Правильный выбор времени задержки в релаксационной спектроскопии так же важен, как выбор ширины щели в оптических методах исследования.

На основании проделанного сравнительного анализа мы пришли к выводу, что для экспериментальных целей достаточно иметь возможность использовать весовую функцию lock-in и биномиальные функции HiRes-3, HiRes-4 со временем задержки, равным нулю и 0.1 длительности коррелятора. Использование функции double-boxcar нежелательно в силу плохих шумовых свойств. Применение экспоненциального коррелятора полезно при исследовании слабых сильно зашумленных сигналов, однако не всегда оправдано в силу сложности его реализации. Полученные результаты сохраняют значение и для аналоговых установок. Как показано в [15], правильный выбор фазы опорного сигнала позволяет реализовать в аналоговой установке времени задержки до  $T_g = T_c$ . Предложенная в [10] конструкция коррелятора дает возможность использовать в аналоговой установке практически любую весовую функцию.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Вагнер Хиллер, Марс. Приборы для научных исследований, 66 (1980).
- [2] Асада, Сугано. Приборы для научных исследований, 71 (1982).
- [3] Джервис, Тетер, Коул, Данлави. Приборы для научных исследований, 1160 (1982).
- [4] Хельцлайн, Пенсл, Шульц, Штольц. Приборы для научных исследований, 89 (1986).
- [5] Н. В. Базлов, О. Ф. Вывенко, А. А. Истратов. ПТЭ, 159 (1990).
- [6] D. V. Lang. J. Appl. Phys., 45, 3023 (1974).
- [7] G. L. Miller, J. V. Ramirez, D. A. H. Robinson. J. Appl. Phys., 46, 2638 (1975).
- [8] M. S. Hodgart. Electron. Lett., 15, 724 (1979).
- [9] M. S. Hodgart. Electron. Lett., 14, 388 (1978).
- [10] Е. В. Чихрай. ПТЭ, 184 (1988).
- [11] D. D. Nolte, E. E. Haller. J. Appl. Phys., 62, 900 (1987).
- [12] Г. Деч. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа, 287. М. (1965).
- [13] Дмовский, Пюро. Приборы для научных исследований, 78 (1987).
- [14] Н. В. Базлов, О. Ф. Вывенко, А. В. Тульев. ПТЭ, (1987).

Редактор: В. В. Чалдышев

---