

การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อนของโมบิลิตี้สเปกตรัมของพาหะนำไฟฟ้าในสารกึ่งตัวนำ
ที่ได้จากวิธีเอนโทรปีสูงสุด

นายเจษฎา แม่นยำ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2546

ISBN 974-17-5413-2

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

AN ERROR ANALYSIS OF MAXIMUM-ENTROPY MOBILITY SPECTRUM
OF ELECTRICAL CARRIERS IN SEMICONDUCTORS



Mr. Jedsada Manyam

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science in Physics

Department of Physics

Faculty of Science

Chulalongkorn University

Academic Year 2003

ISBN 974-17-5413-2

เจษฎา แม่นยำ : การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อนของโมบิลิตีสเปกตรัมของพาหะนำไฟฟ้าในสารกึ่งตัวนำที่ได้จากวิธีเอนโทรปีสูงสุด. (AN ERROR ANALYSIS OF MAXIMUM-ENTROPY MOBILITY SPECTRUM OF SEMICONDUCTORS).

อ.ที่ปรึกษา: ดร. สมชาย เกียรติกรมลชัย. 104 หน้า. ISBN 974-17-5413-2.

แนวทางใหม่สำหรับการวิเคราะห์โมบิลิตีสเปกตรัมได้ถูกพัฒนาเพื่อใช้วิเคราะห์สมบัติทางไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำที่มีพาหะนำไฟฟ้าหลายกลุ่ม เทคนิคดังกล่าวเป็นวิธีเชิงตัวเลขที่ใช้วิธีการทางสถิติเบย์เซียนและหลักการเอนโทรปีสูงสุดรวมถึงอัลกอริทึมไซมาคอฟมอนติคาร์โล โมบิลิตีสเปกตรัมสามารถคำนวณได้จากข้อมูลค่าสภาพต้านทานไฟฟ้าและสัมประสิทธิ์ฮอลล์ที่ขึ้นกับสนามแม่เหล็ก ซึ่งระบุจำนวนพาหะนำไฟฟ้า สภาพเคลื่อนที่ได้และความหนาแน่นพาหะแต่ละกลุ่ม เทคนิคนี้ทำให้การอนุมานสเปกตรัมที่เป็นบวกและมีสมบัติการรวมได้จากข้อมูลที่มีจำนวนจำกัดและมีสัญญาณรบกวนเป็นไปได้อย่างดี วิธีการคำนวณช่วยให้สามารถตรวจสอบสัญญาณรบกวนจากการทดลอง และประมาณค่าคลาดเคลื่อนของคำตอบ การทดสอบกับข้อมูลสังเคราะห์แสดงให้เห็นว่าระดับความไม่แน่นอนของคำตอบเป็นระดับเดียวกันกับค่าคลาดเคลื่อนของข้อมูลการทดลอง เสถียรภาพของการคำนวณขึ้นกับระดับค่าคลาดเคลื่อน ค่าสูงสุดของความแรงสนามแม่เหล็กที่ใช้ในการวัดข้อมูล จำนวนข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณ และการปรับค่าตัวแปรในกระบวนการคำนวณ วิธีการนี้ถูกนำมาใช้กับการนำไฟฟ้าในสารโครงสร้างวิวิธ $p\text{-Ge/Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ ในช่วงอุณหภูมิ 200 ถึง 300 เคลวิน ซึ่งพบว่า มีพาหะโฮลเป็นพาหะหลักสองกลุ่มและอิเล็กตรอนเป็นพาหะพื้นหลังตามที่คาด โฮลกลุ่มที่มีสภาพนำไฟฟ้าสูง คาดว่าเป็นพาหะที่เคลื่อนที่ในสองมิติในบ่อศักย์ชั้นเจอมาเนียมและมีสภาพเคลื่อนที่ได้สูงถึง $2,500 \text{ เซนติเมตร}^2 \text{ โวลต์}^{-1} \text{ วินาที}^{-1}$ ที่อุณหภูมิห้อง ส่วนโฮลกลุ่มที่มีสภาพเคลื่อนที่ได้น้อยกว่า คาดว่ามาจากชั้นซิลิคอนเจอมาเนียมที่ถูกโด๊ปด้วยโบรอน โดยมีสภาพเคลื่อนที่ได้ $800 \text{ เซนติเมตร}^2 \text{ โวลต์}^{-1} \text{ วินาที}^{-1}$ ที่อุณหภูมิห้อง

ภาควิชาฟิสิกส์
สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2546

ลายมือชื่อนิสิต..... *เจษฎา แม่นยำ*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา..... *S. Kiatgumolchai*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....

4472242923 : MAJOR PHYSICS

KEY WORD : ERROR ANALYSIS / MOBILITY SPECTRUM

JEDSADA MANYAM : AN ERROR ANALYSIS OF MAXIMUM-ENTROPY MOBILITY SPECTRUM OF SEMICONDUCTORS.

THESIS ADVISOR: SOMCHAI KIATGAMOLCHAI, Ph.D. 104 pp. ISBN 974-17-5413-2.

A new approach for mobility spectrum analysis is developed to characterize an electrical transport of multi-carrier material. The technique is a numerical method based on the Bayesian statistics and maximum entropy principle including a Markov chain Monte Carlo algorithm. The mobility spectrum is calculated from the magnetic-field-dependent resistivity and Hall coefficient data and from which the number of carrier species, mobility, and carrier concentration are extracted. This technique is feasible to infer the positive and additive spectrum from a discrete, limited, and noisy data. This calculation technique allows the effect of experimental noise on the calculated mobility spectrum to be examined and the uncertainty of solution is estimated. Testing on the synthetic data shows that the order of magnitude of the uncertainty in solution is consistent with the noise level in measured data. The stability of calculation depends on the error level, the maximum magnetic field strength in data collection, the number of data points used in calculation, and adjustable parameters in the algorithm. The technique is applied to the electrical transport of p-Ge/Si_{0.4}Ge_{0.6} heterostructure in the temperature range of 200 - 300 K. Two hole species are found as expected with electron-like species in the background. The high conductivity carrier species is expected to be a two-dimensional hole gas in Ge-layer having a high mobility of 2,500 cm²V⁻¹s⁻¹ at room temperature. The lower mobility carrier is expected to come from the boron-doped layer and is found to have a mobility of 800 cm²V⁻¹s⁻¹ at room temperature.

Department Physics

Field of study Physics

Academic year 2003

Student's signature..... *Prof. Kiatgamolchai*

Advisor's signature..... *S. Kiatgamolchai*

Co-advisor's signature.....

Acknowledgments

I would like to express my gratitude to my advisor, Dr. Somchai Kiatgamolchai, for his motivation and guidance throughout the course of my thesis work. I am grateful to the thesis committee Assoc. Prof. Wichit Sritrakool, Dr. Boonchoat Paosawatyanong and Dr. Somrit Wongmaneerot for their valuable suggestions and comments on this thesis.

I would like to acknowledge the Development and Promotion of Science and Technology Talents Project of Thailand (DPST) for providing me a scholarship during the study. I also would like to acknowledge the Semiconductor Physics Research Laboratory (SPRL) for providing computing facility and other assistance.

Finally, I am very thankful to my good friends at the Physics Department for their friendship and helps in various ways. Special thanks go to Mr. Uthai Pinmuang, my senior, for his guidance on the thesis preparation in a \LaTeX format.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Contents

	Page
Abstract in Thai	iv
Abstract in English	v
Acknowledgements	vi
Contents.....	vii
List of Tables.....	ix
List of Figures	x
Chapter 1 Introduction.....	1
Chapter 2 Theory	7
2.1 Classical equation approach	7
2.2 Quasi-classical Boltzmann equation	10
2.3 Parameters in mobility spectrum	12
Chapter 3 A review of mobility spectrum analysis.....	15
3.1 Introduction	15
3.2 Beck and Anderson mobility spectrum	17
3.3 Quantitative method	19
3.4 Maximum entropy mobility spectrum analysis	21
3.5 Summary	23
Chapter 4 A Development of a Bayesian mobility spectrum.....	24
4.1 Introduction	24
4.2 Information Entropy and Maximum entropy principle	25
4.3 Bayesian theory	27
4.4 Bayesian mobility spectrum	34

Contents (cont.)	Page
4.5 Mobility calculation and Error Analysis	45
4.6 Markov chain Monte Carlo	46
Chapter 5 Results and discussions	50
5.1 Synthetic data	50
5.1.1 Calculation setting	51
5.1.2 Selection of stopped alpha	54
5.1.3 Random generator	57
5.1.4 Incomplete data	64
5.2 Experimental data	74
5.2.1 Calculation details	74
5.2.2 Temperature-depcedent mobility and carrier concentration of the hole species	78
5.3 Error analysis	84
5.3.1 Standard deviation of likelihood distribution	87
5.3.2 Magnetic field strength dependency	88
5.3.3 The ratio of carrier conductivity	91
Chapter 6 Conclusions and suggestions	92
References	96
Appendices	
Appendix A An error propagation	99
Appendix B Programming flowchart	102
Curriculum Vitae	104

List of Tables

Table	Page
5.1 The detail of synthetic model for algorithm testing.	51
5.2 The parameter setting for the calculation of the mobility spectrum for a given data in Table 5.1.	54
5.3 The chi-square and entropy of mobility spectra at different α 's.	57
5.4 The chi-square, entropy and acceptance rate of mobility spectra at different ω 's.	61
5.5 The chi-square, entropy and acceptance rate of mobility spectra at different seed numbers.	64
5.6 The chi-square, entropy and acceptance rate of mobility spectra at different number of data points.	67
5.7 The chi-square, entropy and acceptance rate of mobility spectra at different μB	70
5.8 The chi-square, entropy and acceptance rate of mobility spectra at different levels of noise.	71
5.9 The parameter setting in Bayesian calculation on experimental data.	78
5.10 Hall mobility and concentration of carrier species in Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} heterostructure by ME-MSA.	79
5.11 Hall mobility and concentration of carrier species in Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} heterostructure by Bayesian method.	79
5.12 The percentage error of conductivity of each repeated spectrum.	87

List of Figures

Figure	Page
1.1 The modulation-doped $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ heterostructure contains 2DHG and a parallel conduction (after Kiatgamolchai (2000)).	2
1.2 The QMSA and MEMS spectra of synthetic data sets for two carrier species ($n_1=1\times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_1=2,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, $n_2=1\times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_2=6,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) subject to various errors in ρ_{xx} and R_H (after Kiatgamolchai (2000)).	4
2.1 Standard geometry for Hall effect and magnetoresistivity measurements. V_{Hall} is the Hall voltage, and \mathbf{J}_x is the current density in the flow direction (after Grosso et al. (2000)).	8
3.1 The kernel functions of magnetoconductivity $\sigma_{xx}(B)$ and $\sigma_{xy}(B)$ (after Kiatgamolchai (2000)).	17
4.1 The posterior probability distribution of bias-weighting for head of a coin (after Sivia (1996)).	30
4.2 Bayesian mobility spectra at different iterations for synthetic data of two hole species ($n_1=1\times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_1=2,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, $n_2=1\times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_2=6,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ with standard deviations of 250 and 500 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, respectively) with noise 0.1%. α is 900.	39
4.3 The Chi-square (solid square) and entropy (hollow circle) versus the number of iterations.	40
4.4 Bayesian mobility spectra of the test synthetic data for different α 's at 2,000,000 iterations.	41

Figure (cont.)	Page
4.5 Bayesian mobility spectra of synthetic data ($n_1=1\times 10^{11}$ cm ⁻² , $\mu_1=2,000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , $n_2=1\times 10^{11}$ cm ⁻² , $\mu_2=6,000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ with standard deviations of 250 and 500 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , respectively, and with 0.1% random noise) at different iteration (continued from spectrum in Fig. 4.2(f)). α is decreased from 900 by factor of 0.9 every 200,000 iterations. . . .	42
4.6 Chi-square (solid square) and entropy (hollow circle) versus iterations where α is decreased from 900 by a factor of 0.9 every 200,000 iterations. Solid circle represents the entropy where α is stopped at 80 at 5,000,000 iterations.	43
4.7 The resultant mobility spectrum (line-solid square) with error bars obtained from full operation of Bayesian method where α is 80. Two hole peaks located at mobility about 2,000 and 6,000 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ . The true mobility spectrum (thick line) is shown with equal maximum partial conductivity in arbitrary unit. The Bayesian peaks are little broader than the true peaks and its error bars do not perfectly cover the true spectrum.	44
4.8 Five independent sequences of a Markov chain simulation of the bivariate unit normal distribution. Solid squares indicate difference starting points (a) First 50 iterations, the sequence are still far from convergence. (b) After 1000 iterations, the sequences are nearer to convergence. (c) Second half of the sequence states (after Gelman et al. (1995)).	47
5.1 The synthetic mobility spectrum of two-hole carrier species ($n_1=1\times 10^{11}$ cm ⁻² , $\mu_1=2,000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , $n_2=1\times 10^{11}$ cm ⁻² , $\mu_2=6,000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ with standard deviations of 250 and 500 cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , respectively). . .	52
5.2 Hall coefficient and magnetoresistivity data versus magnetic field for synthetic mobility spectrum in Fig. 5.1.	52

Figure (cont.)	Page
5.3 The longitudinal (σ_{xx}) and transverse (σ_{xy}) components of conductivity tensor in normalized unit versus magnetic field.	53
5.4 The 0.1% Gaussian noise of normalized longitudinal (σ_{xx}) and transverse (σ_{xy}) components of conductivity tensor versus magnetic field.	53
5.5 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different stopped α . Dash lines present the correct values.	56
5.6 Bayesian spectra of synthetic data at ω 's (a) 0.008, (b) 0.01, (c) 0.012, and (d) 0.014.	59
5.7 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different ω 's	60
5.8 Bayesian spectra of synthetic data at different initial seed number. α is 75.	62
5.9 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different initial seed numbers.	63
5.10 Bayesian spectra of synthetic data at different number of magnetic field points (M). A number of mobility points (N) is fixed to 50.	65
5.11 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different ratio of a number of data points ($2M$) to a number of mobility points (N).	66
5.12 Bayesian spectra of synthetic data of different maximum magnetic field strengths. The maximum strength is decreased form 10 Tesla to 2.5 Tesla.	68
5.13 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different $\mu_1 B_{MAX}$. Relative large error bars are observed for small value of $\mu_1 B_{MAX}$. $\mu_1=2,000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	69

Figure (cont.)	Page
5.14 Bayesian spectra of synthetic data at different levels of noise.	72
5.15 (a) Hall mobility and (b) concentration of Hole#1 and Hole#2 species at different levels of noise.	73
5.16 The nominal structural diagram of a modulation-doped Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} heterostructure used in this thesis.	75
5.17 Maximum-entropy mobility spectra of Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} in the temperature range of 200-300 K.	75
5.18 Bayesian mobility spectra of Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} in the temperature range of 200-300 K.	76
5.19 (a) Hall mobility and (b) carrier concentration of B:SiGe and 2DHG carrier species calculated from ME-MSA (hollow) and Bayesian method (solid).	80
5.20 The fit of temperature-dependent Hall mobility of (a) 2DHG and (b) B:SiGe from Bayesian method.	82
5.21 The temperature-dependent concentration of B:SiGe from Bayesian method (solid square) and Maximum-entropy method (hollow trian- gle). The fits are shown as solid line for Bayesian data and dash line for Maximum-entropy data.	83
5.22 (a) A selected component of Markov chain from Bayesian calculation on synthetic data. (b) A histogram of frequency count and a fitting of normal distribution with mean and standard deviations of 0.21 and 0.037, respectively.	86
5.23 A mobility spectrum of Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} at 200 K calculated by Bayesian method shows two major-hole peaks, B:SiGe ($\mu = 1,230 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, n $= 4.65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) and 2DHG ($\mu = 4,700 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, $n = 1.667 \times 10^{12}$ cm^{-2}).	86

Figure (cont.)	Page
5.24 A conductivity error of (a) B:SiGe species and (b) 2DHG from synthetic Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} data (noise free) at different standard deviations.	89
5.25 A conductivity error of B:SiGe and 2DHG species form three synthetic Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} data (with 0.1% noise) at different maximum magnetic field strengths.	90
5.26 A conductivity error of B:SiGe and 2DHG species form three synthetic Ge/Si _{0.4} Ge _{0.6} data (with 0.1% noise) at different conductivity ratio of 2DHG to B:SiGe.	90