

УДК 546.681.3'191

DOI [https://doi.org/10.15589/znп2025.1\(499\).5](https://doi.org/10.15589/znп2025.1(499).5)

## USING THE MULTIPLE CORRELATION METHOD TO STUDY DOPED GALLIUM ARSENIDE CRYSTALS

### ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ МНОЖИННОЇ КОРЕЛЯЦІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІВ ЛЕГОВАНОГО АРСЕНІДУ ГАЛІЮ

**Maryna B. Litvinova**

maryna.litvinova@nuos.edu.ua

ORCID: 0000-0002-4917-2132

**Oleg M. Dudchenko**

kbnuos@nuos.edu.ua

ORCID: 0000-0002-7724-0892

**Oleksandr D. Shtanko**

oleksandr.shtanko@nuos.edu.ua

ORCID: 0000-0003-3572-7915

**Svitlana O. Karpova**

svitlana.karpova@nuos.edu.ua

ORCID: 0009-0004-6728-9272

**М. Б. Літвінова,**

доктор пед. наук, канд. фіз.-мат. наук, професор

**О. М. Дудченко,**

канд. техн. наук, професор

**О. Д. Штанько,**

канд. фіз.-мат. наук, доцент

**С. О. Карпова,**

старший викладач

*Kherson Educational-Scientific Institute of Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Kherson**Херсонський навчально-науковий інститут Національного університету кораблебудування  
імені адмірала Макаров, м. Херсон*

**Abstract.** The paper shows the possibility of using correlation analysis as a means of mathematical modeling for non-destructive testing of semiconductor crystals on the example of doped gallium arsenide.

The aim of the study was to analyze the relationships between the physical parameters of single crystals of doped gallium arsenide using multivariate correlation analysis. The following tasks were solved: to determine the algorithm for correlation analysis of the physical parameters of GaAs single crystals with different ligatures and to build the corresponding linear models, to analyze the results obtained.

As the material for the study, plates of single crystals of doped gallium arsenide of three types were chosen: with copper impurity, which has an intergranular embedding; with cadmium impurity, which is embedded in the gallium sublattice; with selenium impurity with arsenic embedding in the sublattice. The concentration of impurities, mechanical stresses, and dislocation density were measured at 32 points along the diameter of each plate.

Based on the results of the study, linear models were constructed in which the variable  $y$  (mechanical stresses) – the response depended on two factors  $x_1$  (impurity concentration) and  $x_2$  (dislocation density). According to the values of the coefficients of determination, it was found that all models are statistically significant, and according to the coefficients of multiple correlation, the relationship between the parameters is quite close. The significance of the coefficients of determination was assessed using Fisher's F-test with a probability of 0.95, and the significance of the correlation coefficients was assessed using Student's t-statistics with a significance level of 0.05. Thus, the error for all statistical hypotheses and conclusions does not exceed 5%.

The regression equations were used to determine the known and previously unknown correlations between the physical properties of crystals. It was found that the sign of the correlation for selenium impurity with respect to mechanical stress response is negative, and the corresponding signs for copper and cadmium impurities are positive. This indicates the existence of a special mechanism for compensating for mechanical stress due to the redistribution of impurities embedded in the arsenic sublattice compared to impurities embedded in the gallium sublattice or in the intergranular spaces. The results obtained are a prerequisite for further improvement of semiconductor crystal modeling using correlation analysis.

**Key words:** gallium arsenide; impurities; correlation analysis; single crystal; point defects.

**Анотація.** В роботі показана можливість використання кореляційного аналізу як засобу математичного моделювання для неруйнівного дослідження напівпровідникових кристалів на прикладі легovanого арсеніду галію.

Метою дослідження було здійснити аналіз зв'язків між фізичними параметрами монокристалів легованого арсеніду галію з використанням багатофакторного кореляційного аналізу. Вирішувалися наступні завдання: визначити алгоритм проведення кореляційного аналізу фізичних параметрів монокристалів GaAs з різною лігатурою та побудувати відповідні лінійні моделі, провести аналіз отриманих результатів.

В якості матеріалу для дослідження були обрані пластини з монокристалів легованого арсеніду галію трьох типів: з домішкою міді, яка має міжвузлове вбудовування; з домішкою кадмію, що вбудовується в підгратку галію; з домішкою селену з вбудовуванням в підгратку миш'яку. Було здійснено вимірювання концентрації домішок, механічних напружень і щільності дислокацій в 32 точках вздовж діаметру кожної пластини.

За результатами дослідження побудовані лінійні моделі, в яких змінна  $y$  (механічні напруження) – відгук залежав від двох факторів  $x_1$  (концентрація домішки) та  $x_2$  (щільність дислокацій). За значеннями коефіцієнтів детермінації встановлено, що всі побудовані моделі є статистично значимими, а за коефіцієнтами множинної кореляції – що зв'язок між параметрами є досить тісним. Здійснено оцінку значущості коефіцієнтів детермінації за статистикою  $F$ -критерія Фішера при ймовірностях 0,95, а також – значущості коефіцієнтів кореляції за  $t$ -статистикою Ст'юдента з рівнем значущості 0,05. Таким чином, помилка для всіх статистичних гіпотез і висновків не перевищує 5%.

За рівняннями регресії були визначені відомі, так і як раніше невідомі кореляційні зв'язки між фізичними характеристиками кристалів. Було з'ясовано, що знак кореляції для домішки селену щодо відгуку механічних напружень є від'ємним, а відповідні знаки для домішок міді та кадмію є додатними. Це свідчить про наявність особливого механізму компенсації механічних напружень за рахунок перерозподілу домішок, що вбудовуються в підгратку миш'яку, порівняно з домішками, що вбудовуються в підгратку галію або в міжвузлілля. Отримані результати є передумовою для подальшого покращення моделювання напівпровідникових кристалів з використанням кореляційного аналізу.

**Ключові слова:** арсенід галію; домішки; кореляційний аналіз; монокристал; точкові дефекти.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

Кореляційний аналіз має значний потенціал у фізиці напівпровідників для виявлення зв'язків між різними характеристиками напівпровідникових матеріалів і приладів. Він дозволяє визначити, як зміни одного параметра впливають на інші, що є важливим для поліпшення функціонування напівпровідникових сенсорів та інших пристроїв. Традиційний підхід передбачає аналіз кореляцій між двома параметрами при фіксованих інших, але метод множинної кореляції є більш ефективним. Хоча цей метод вже використовується в матеріалознавстві, зокрема в рентгено-структурному аналізі, його застосування може бути значно розширене завдяки сучасним комп'ютерним програмам.

Найбільші проблеми виникають у встановленні зв'язків між фізичними властивостями для складних бінарних і тернарних кристалів, особливо з урахуванням їх домішкового складу [1]. Це особливо актуально для арсеніду галію (сполука  $A^{III}B^V$ ), важливого матеріалу для виготовлення сонячних елементів. Проте, технологічна складність стабільного отримання матеріалів із заданими властивостями обмежує його використання. Багатокомпонентне моделювання властивостей легованого арсеніду галію може вирішити цю проблему. Ефективність багатофакторного кореляційного аналізу може бути продемонстрована саме на цьому матеріалі. Успішне застосування множинної кореляції для кристалів GaAs дозволить перенести отримані результати на моделювання фізичних властивостей інших напівпровідників.

## АНАЛІЗ ОСТАННІХ ДОСЛІДЖЕНЬ І ПУБЛІКАЦІЙ

Арсенід галію є сполукою, що має високу затребуваність на ринку сучасних напівпровідникових матеріалів (див. рис.1).

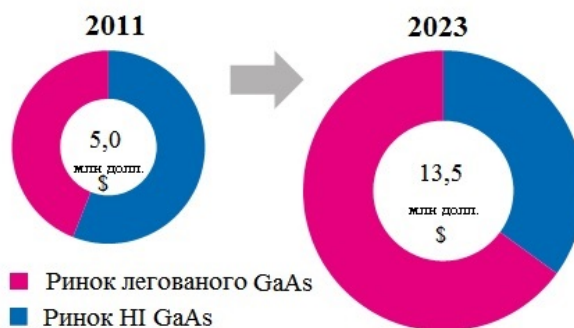


Рис. 1. Динаміка розвитку напівізолюючого (НІ) нелегованого та легованого GaAs [2]

В роботах [3, 4] зазначається, що нові умови застосування вимагають від пластин GaAs дотримання надзвичайно високих технічних стандартів. Для досягнення передбачуваних характеристик напівпровідникових пристроїв необхідно мати детальне розуміння закономірностей, що пов'язують різні фізичні параметри кристалів. Навіть незначні зміни в концентрації домішок у матеріалі можуть суттєво впливати на основні властивості напівпровідникових елементів.

Однак, незважаючи на сучасний рівень наукових досліджень, як це видно з роботи [5], аналітичні оцінки та статистична обробка даних про структуру GaAs

часто проводяться спрощено. Зокрема, дослідники зазвичай використовують лише парні зв'язки між різними параметрами матеріалу. Це призводить до зниження валідності отриманих висновків та фізичних моделей, як це відбувається в дослідженні [6].

Не надто ефективний парний статистичний аналіз параметрів напівпровідникових матеріалів був також застосований у роботах [7, 8]. Обмеження статистичного аналізу лише двома параметрами, незважаючи на наявність більше чотирьох експериментальних змінних, значно погіршило достовірність висновків, які отримали автори.

Лише в дослідженні [9] було продемонстровано використання багатофакторного кореляційного аналізу для легованих кристалів GaAs. Проте для легованих кристалів арсеніду галію подібний аналіз ще не проводився.

### ВІДОКРЕМЛЕННЯ НЕВИРІШЕНИХ РАНІШЕ ЧАСТИН ЗАГАЛЬНОЇ ПРОБЛЕМИ

За оглядом досліджень можна стверджувати, що наявність лише парних зв'язків не дозволяє повністю зрозуміти складні взаємодії між параметрами, що може призвести до помилкових висновків і обмежити розвиток нових технологій на основі напівпровідникових матеріалів. В той же час застосування багатофакторного статистичного аналізу для напівпровідникових матеріалів в цілому, а також для арсеніду галію зокрема, залишається обмеженим. Це суттєво погіршує можливості підвищення якості неруйнівного дослідження та моделювання властивостей цих матеріалів. В подальших дослідженнях в цій галузі необхідно зосередитися на розширенні статистичних методів та використанні багатофакторного аналізу для отримання більш точних і надійних результатів.

**Метою дослідження** є здійснити аналіз зв'язків між фізичними параметрами монокристалів легованого арсеніду галію з використанням багатофакторного кореляційного аналізу. Вирішувалися наступні завдання: визначити алгоритм проведення кореляційного аналізу фізичних параметрів монокристалів GaAs з різною лігатурою та побудувати відповідні лінійні моделі, провести аналіз отриманих результатів.

### МЕТОДИ, ОБ'ЄКТ ТА ПРЕДМЕТ ДОСЛІДЖЕННЯ

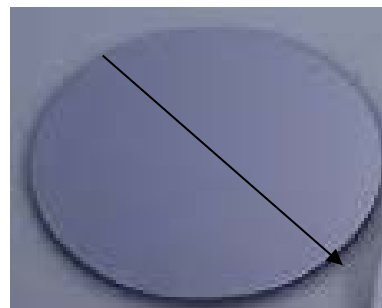
*Об'єкт дослідження:* монокристали легованого арсеніду галію. *Предмет дослідження:* кореляційний зв'язок фізичних параметрів монокристалів легованого GaAs.

В якості матеріалу для дослідження були обрані пластини з монокристалів легованого арсеніду галію трьох типів. В першому кристалі домішкою була мідь, яка, з найбільшою ймовірністю, має міжвузлове

вбудовування [10]; в другому – з домішкою кадмію, що вбудовується в підгратку галію; в третьому – з домішкою селену з найбільш ймовірним вбудовуванням в підгратку миш'яку [10].

Кристали були вирощені компанією «Чисті метали» (м. Світловодськ, Україна) шляхом витягування з розплаву за методом Чохральського з орієнтацією (100). За паспортними даними кристалів концентрація домішок в кожному з них знаходилася в межах  $10^{17}$ – $10^{19}$  см<sup>-3</sup>. Перпендикулярно напрямку росту кристалів були вирізані пластини приблизно однакового діаметру  $68 \pm 2$  мм. Розподіл дислокацій за діаметром пластини мав W- подібний вид. Таким чином найбільша щільність дислокацій була у центральній та периферійних областях пластин.

В херсонській лабораторії 10-2 (Лабораторія технології матеріалів для оптоелектроніки) Інституту фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова НАН України фахівцями лабораторії було здійснено вимірювання певних фізичних характеристик вздовж діаметру пластини GaAs, вирізаних перпендикулярно осі росту кристалу. Вимірювання проводилися в 32 точках від одного краю пластини до іншого, як вказано стрілкою на рис. 2.



**Рис. 2.** Напрямок вимірювання фізичних характеристик на пластині, вирізаній з монокристалу GaAs

Під час дослідження відстань зміщення між точками вимірювання складала 2 мм (похибка  $\pm 0,1$  мм). Обране значення зсуву відповідало двом діаметрам робочого поля зору мікроскопа під час визначенні щільності дислокацій. Тому значення крок зсуву гарантувала неперекриття досліджуваних зон пластини.

За неруйнівними методиками був знайдений розподіл за діаметром пластин наступних фізичних параметрів:

- 1) концентрації атомів домішки (знаходилися за концентрацією відповідних носіїв струму, що визначалися люмінесцентним методом) [11];
- 2) величини залишкових механічних напружень  $\sigma$  (визначалися оптичним методом) [11].
- 3) розподілу щільності дислокацій (за підрахунком кількості ямок травлення) [11].

Одержані параметри представлені в таблиці 1.

У кожному стовпці таблиці 1 знаходиться певний показник, обраний для статистичного аналізу, який надалі стає відповідною незалежною змінною (фактором). Для проведення статистичних розрахунків та графічних побудов були використано програму Excel.

### ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Попередній аналіз вхідної інформації в результаті побудови діаграм розсіювання дав можливість зробити висновок про наявність лінійної форми зв'язку між обраними показниками. У разі, коли параметри корелюють між собою (коефіцієнт кореляції більше 0,35), графік розсіювання, побудований у відповідних координатах, має бути функціонально близьким до лінійної залежності, а точки на ньому групуються поблизу лінії регресії. Приклад діаграми розсіювання та регресійної прямої, що відображає залежності механічних напружень від щільності дислокацій з лінією регресії для пластини арсеніду

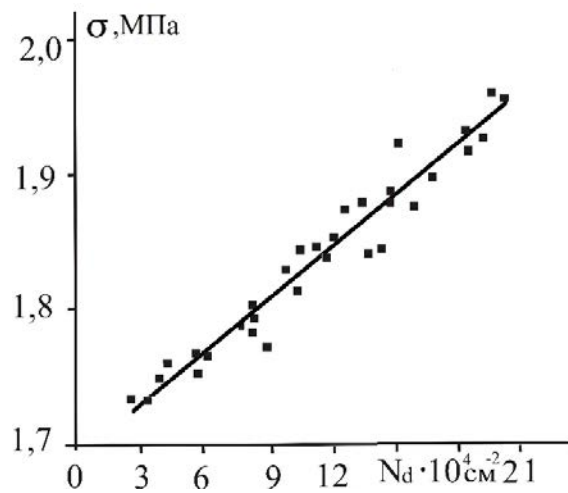


Рис. 3. Діаграма розсіювання та регресійна пряма, що відображає залежність механічних напружень від щільності дислокацій в кристалі GaAs, легованому Cu

Таблиця 1. Значення фізичних параметрів вздовж діаметру пластини GaAs

| Домішка | Мідь                                   |                      |                      | Селен                                  |                      |                      | Кадмій                                 |                      |                      |
|---------|----------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------------------------|----------------------|----------------------|
| № точки | $N_{Cu} \cdot 10^{18}, \text{см}^{-3}$ | $N_d \cdot \text{Ч}$ | $\sigma, \text{МПа}$ | $N_{Se} \cdot 10^{18}, \text{см}^{-3}$ | $N_d \cdot \text{Ч}$ | $\sigma, \text{МПа}$ | $N_{Cd} \cdot 10^{18}, \text{см}^{-3}$ | $N_d \cdot \text{Ч}$ | $\sigma, \text{МПа}$ |
| 1       | 2                                      | 3                    | 4                    | 5                                      | 6                    | 7                    | 8                                      | 9                    | 10                   |
| 1       | 1,98                                   | 20,9                 | 4,0                  | 3,71                                   | 7,9                  | 4,1                  | 1,11                                   | 1,90                 | 1,2                  |
| 2       | 1,95                                   | 17,1                 | 5,9                  | 2,65                                   | 7,2                  | 5,9                  | 1,16                                   | 1,90                 | 1,5                  |
| 3       | 1,88                                   | 15,2                 | 6,4                  | 2,72                                   | 6,3                  | 6,4                  | 1,21                                   | 1,86                 | 1,9                  |
| 4       | 1,84                                   | 11,0                 | 9,2                  | 2,77                                   | 6,1                  | 12,3                 | 1,45                                   | 1,74                 | 2,2                  |
| 5       | 1,81                                   | 5,8                  | 8,4                  | 2,74                                   | 5,7                  | 17,4                 | 1,41                                   | 1,56                 | 2,8                  |
| 6       | 1,81                                   | 4,2                  | 12,5                 | 2,72                                   | 4,3                  | 23,5                 | 1,46                                   | 1,75                 | 3,1                  |
| 7       | 1,80                                   | 4,1                  | 18,4                 | 2,71                                   | 4,2                  | 27,4                 | 1,49                                   | 1,65                 | 3,4                  |
| 8       | 1,86                                   | 4,5                  | 14,6                 | 2,76                                   | 4,5                  | 24,6                 | 1,34                                   | 1,41                 | 4,5                  |
| 9       | 1,84                                   | 4,0                  | 25,0                 | 2,74                                   | 4,1                  | 35,1                 | 1,27                                   | 1,39                 | 4,8                  |
| 10      | 1,81                                   | 4,1                  | 25,9                 | 2,72                                   | 4,2                  | 35,9                 | 1,35                                   | 1,55                 | 5,4                  |
| 11      | 1,82                                   | 2,1                  | 20,6                 | 2,73                                   | 3,2                  | 31,6                 | 1,42                                   | 1,53                 | 20,6                 |
| 12      | 1,75                                   | 3,6                  | 12,9                 | 2,71                                   | 3,6                  | 23,9                 | 1,44                                   | 1,51                 | 12,7                 |
| 13      | 1,74                                   | 5,3                  | 4,4                  | 2,72                                   | 5,3                  | 4,4                  | 1,47                                   | 1,52                 | 4,4                  |
| 14      | 1,79                                   | 8,5                  | 4,8                  | 2,97                                   | 7,5                  | 4,7                  | 1,64                                   | 1,46                 | 3,8                  |
| 15      | 1,80                                   | 8,7                  | 4,1                  | 2,71                                   | 7,7                  | 4,2                  | 1,87                                   | 1,47                 | 3,1                  |
| 16      | 1,86                                   | 8,7                  | 5,9                  | 2,76                                   | 7,7                  | 5,9                  | 1,74                                   | 1,58                 | 5,7                  |
| 17      | 1,81                                   | 8,9                  | 8,0                  | 2,72                                   | 7,9                  | 7,1                  | 1,62                                   | 1,65                 | 9,0                  |
| 18      | 1,95                                   | 9,4                  | 20,2                 | 2,95                                   | 9,6                  | 31,3                 | 1,58                                   | 182                  | 20,2                 |
| 19      | 1,95                                   | 5,6                  | 24,0                 | 2,95                                   | 6,6                  | 34,1                 | 1,53                                   | 1,77                 | 23,0                 |
| 20      | 1,97                                   | 6,4                  | 22,9                 | 2,97                                   | 5,4                  | 33,9                 | 1,60                                   | 1,47                 | 22,7                 |
| 21      | 1,81                                   | 4,3                  | 16,8                 | 2,72                                   | 4,3                  | 26,7                 | 1,48                                   | 1,42                 | 16,9                 |
| 22      | 1,80                                   | 3,8                  | 11,1                 | 2,71                                   | 3,7                  | 22,2                 | 1,45                                   | 1,14                 | 11,1                 |
| 23      | 1,96                                   | 2,1                  | 8,4                  | 2,96                                   | 3,2                  | 7,4                  | 1,42                                   | 1,21                 | 8,3                  |
| 24      | 1,98                                   | 4,4                  | 9,1                  | 2,97                                   | 4,4                  | 9,2                  | 1,47                                   | 1,36                 | 7,1                  |
| 25      | 1,90                                   | 5,5                  | 6,6                  | 2,91                                   | 5,5                  | 6,6                  | 1,47                                   | 1,41                 | 6,6                  |
| 26      | 1,88                                   | 5,1                  | 5,4                  | 2,77                                   | 5,2                  | 5,4                  | 1,42                                   | 1,44                 | 5,4                  |
| 27      | 1,81                                   | 6,1                  | 4,2                  | 2,72                                   | 6,2                  | 4,3                  | 1,44                                   | 1,42                 | 4,2                  |
| 28      | 1,82                                   | 8,7                  | 4,1                  | 2,73                                   | 7,7                  | 4,2                  | 1,32                                   | 1,48                 | 3,1                  |
| 29      | 1,84                                   | 11,1                 | 2,2                  | 2,74                                   | 8,2                  | 3,3                  | 1,29                                   | 1,74                 | 3,2                  |
| 30      | 1,86                                   | 19,1                 | 1,2                  | 2,76                                   | 8,2                  | 2,3                  | 1,37                                   | 1,92                 | 4,2                  |
| 31      | 1,88                                   | 20,8                 | 0,9                  | 2,77                                   | 8,7                  | 1,9                  | 1,22                                   | 1,93                 | 4,7                  |
| 32      | 1,90                                   | 21,5                 | 0,4                  | 2,77                                   | 8,5                  | 1,4                  | 1,16                                   | 1,95                 | 5,3                  |

Розглядалася багатофакторна модель, в якій змінна  $y$  (механічні напруження в кристалі) – відгук залежить від двох незалежних змінних – факторів  $x_1$  (концентрація домішки) та  $x_2$  (щільність дислокацій).

Тоді у випадку лінійної форми взаємозв'язку багатофакторна модель має вид:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2. \quad (1)$$

Значення оцінок встановлювалося за формулою [12]:

$$A = (X^T X)^{-1} X^T Y, \quad (2)$$

де  $X^T$  – матриця, що є транспонованою до матриці  $X$ .

Матриці  $X$ ,  $Y$  формувалися на основі таблиці 1. В якості відгуку (матриця  $Y$ ) розглядалися значення механічних напружень  $\sigma$ , а в якості факторів – концентрація домішки ( $x_1$ ) та щільність дислокацій ( $x_2$ ).

За результатами обчислень були отримані рівняння:

$$\text{для кристалу GaAs з домішкою міді} \\ y = -12,81 + 1,2x_1 + 0,39x_2; \quad (3)$$

$$\text{для кристалу GaAs з домішкою селену} \\ y = -13,59 - 3,3x_1 + 0,81x_2; \quad (4)$$

$$\text{для кристалу GaAs з домішкою кадмію:} \\ y = 3,88 + 2,2x_1 + 0,55x_2. \quad (5)$$

Обчислення коефіцієнта множинної детермінації відбувалося за формулою [12]:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (6)$$

де  $\bar{y}$  – середнє значення всіх  $y$ ;  $\hat{y}_i$  – розрахункові значення  $y$  за виразами (3)–(5).

Коефіцієнт множинної детермінації  $R^2$  має значення:

$$\text{для GaAs з домішкою Cu } R_{Cu}^2 = 0,8911;$$

$$\text{для GaAs з домішкою Se } R_{Se}^2 = 0,9143;$$

$$\text{для GaAs з домішкою Cd } R_{Cd}^2 = 0,8468.$$

Отже, на 89,11%, 91,43% і 84,68% дисперсії значень механічних напружень в кристалах GaAs пояснюється їх залежністю від щільності дислокацій та концентрації в них домішки Cu, Se та Cd, відповідно. І тільки 10,89% для домішки Cu, 8,57% для домішки Se і 15,32% для домішки Cd загальної дисперсії  $\sigma$  не може бути пояснено отриманими залежностями (3)–(5). Таким чином, можна зробити висновок, що побудована модель є статистично значимою.

Коефіцієнт множинної кореляції  $R$  складає:  $R_{Cu} = 0,9439$ ;  $R_{Se} = 0,9561$ ;  $R_{Cd} = 0,9202$ .

Отримано досить високі значення коефіцієнту множинної кореляції. Це свідчить про те, що зв'язок між величиною механічних напружень, щільністю дислокацій та концентрацією домішок для всіх розглянутих кристалів є досить тісним [13].

Для вимірювання сили лінійних зв'язків різних пар змінних із заданої множини знайдені коефіцієнти парної кореляції. Для їх знаходження застосовувалася формула [12]:

$$r_{yx} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{\sqrt{\left[ n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right] \left[ n \sum_{i=1}^n y_i^2 - \left( \sum_{i=1}^n y_i \right)^2 \right]}}. \quad (7)$$

Згідно з класифікацією, наданою в роботі [14], величини коефіцієнтів  $r$  в дослідженні трактувалися таким чином: якщо абсолютне значення коефіцієнта кореляції знаходилося в межах 0,3–0,5, то як взаємозв'язок вважався слабким; в межах значень 0,5–0,7 – середнім; при значеннях, що перевищували 0,7, взаємозв'язок вважався сильним.

Після підстановки значень із табл. 1 до формули (7) і проведення розрахунків отримані наступні результати для коефіцієнтів парної кореляції.

Для GaAs з домішкою Cu  $r_{yx1} = 0,711$ ,  $r_{yx2} = 0,843$ , взаємозв'язок є сильним. Це свідчить про те, що за змінною  $x_1$  (концентрація домішки) 71,1% загальної дисперсії змінної  $y$  (механічних напружень) пояснюється лінійною моделлю  $y = \beta_1 + \gamma_1 x_1$ . Непояснена дисперсія викликана випадковою складовою, становить 15,7%. Аналогічно, за змінною  $x_2$  (щільність дислокацій) лінійною моделлю  $y = \beta_2 + \gamma_2 x_2$  пояснюється 84,3% загальної дисперсії змінної  $y$ . Непояснена дисперсія при цьому становить 28,9%.

Для GaAs з домішкою Se  $r_{yx1} = -0,683$ ,  $r_{yx2} = 0,896$ , взаємозв'язок є сильним. Отриманий результат свідчить про те, що за змінною  $x_1$  (концентрація домішки) 68,3% загальної дисперсії змінної  $y$  (механічних напружень) пояснюється лінійною моделлю  $y = \beta_3 + \gamma_3 x_1$ . Слід відзначити, що як і в виразі (4) коефіцієнт кореляції є від'ємним. Непояснена дисперсія викликана випадковою складовою, становить 31,7%. Аналогічно, за змінною  $x_2$  (щільність дислокацій) лінійною моделлю  $y = \beta_4 + \gamma_4 x_2$  пояснюється 89,6% загальної дисперсії змінної  $y$ . Непояснена дисперсія при цьому становить 10,4%.

Для GaAs з домішкою Cd  $r_{yx1} = 0,696$ ,  $r_{yx2} = 0,910$ , взаємозв'язок є сильним. Отриманий результат свідчить про те, що за змінною  $x_1$  (концентрація домішки) 69,6% загальної дисперсії змінної  $y$  (механічних напружень) пояснюється лінійною моделлю  $y = \beta_5 + \gamma_5 x_1$ . Непояснена дисперсія викликана випадковою складовою, становить 30,4%. Аналогічно, за змінною  $x_2$  (щільність дислокацій) лінійною моделлю  $y = \beta_6 + \gamma_6 x_2$  пояснюється 91% загальної дисперсії змінної  $y$ . Непояснена дисперсія при цьому становить 9%.

За формулою, аналогічною до виразу (7) були розраховані коефіцієнти  $r_{x1x2}$ .

Для GaAs з домішкою Cu  $r_{x1x2} = 0,357$ ; для GaAs з домішкою Se  $r_{x1x2} = -0,281$ ; для GaAs з домішкою Cd  $r_{x1x2} = 0,404$ . Для всіх домішок знайдені значення  $r_{x1x2}$  відповідають критерію слабого взаємозв'язку. Іншими словами, пояснювана змінна  $x_1$  не корелює з  $x_2$ , що вказує на відсутність мультиколінеарності. Через це немає потреби розраховувати коефіцієнти

часткової кореляції, які враховують лише чистий зв'язок між відгуком і фактором за умови фіксованих значень усіх інших ознак у парі.

Якість кореляційної моделі оцінювалася за допомогою коефіцієнтів детермінації. У цьому контексті була сформульована нульова гіпотеза ( $H_0$ ) проти альтернативної ( $H_1$ ), зміст яких полягає в наступному:

- $H_0$ : жодна з пояснюючих змінних, що входять до моделі, не має істотного впливу на залежну змінну.
- $H_1$ : принаймні одна з  $m$  пояснюючих змінних, що включені в модель, має значний вплив на результативний показник.

Для оцінки значущості множинного коефіцієнта детермінації використовувалася статистика  $F$ -критерію Фішера. Між  $F$ -критерієм Фішера та множинним коефіцієнтом детермінації існує певний зв'язок [13]:

$$F = \frac{R^2}{1-R^2} \cdot \frac{n-m-1}{m-1}. \quad (8)$$

У цьому виразі  $R^2$  – коефіцієнт детермінації;  $(n-m-1)$  – число ступенів вільності  $n$  – кількість позицій, що обчислюються;  $m$  – число незалежних змінних (в даній роботі  $n=32$ ,  $m=2$ ).

Для GaAs з домішкою Cu:

$$F = \frac{0,8911}{1-0,8911} \cdot 29 = 257,3.$$

Оскільки  $F_{розр} > F_{табл}$  при ймовірностях 0,95 [13], то встановлений коефіцієнт детермінації є значимим і вірною є гіпотеза  $H_1$ .

Для GaAs з домішкою Se:

$$F = \frac{0,9143}{1-0,9143} \cdot 29 = 309,4.$$

Оскільки  $F_{розр} > F_{табл}$  при ймовірностях 0,95 [13], то встановлений коефіцієнт детермінації є значимим і вірною є гіпотеза  $H_1$ .

Для GaAs з домішкою Cd:

$$F = \frac{0,8468}{1-0,8468} \cdot 29 = 251,1.$$

Оскільки  $F_{розр} > F_{табл}$  при ймовірностях 0,95 [13], то встановлений коефіцієнт детермінації є значимим і вірною є гіпотеза  $H_1$ .

При перевірці якості побудованих моделей також було здійснено оцінку значущості коефіцієнтів кореляції. Дана оцінка ґрунтується на  $t$ -статистиці Ст'юдента [13]:

$$t_{розр} = \frac{|R|\sqrt{n-m-1}}{\sqrt{1-R^2}}, \quad (9)$$

і обчислене значення  $t$  за формулою (9) порівнюють з критичним значенням  $t_{к\alpha}$ , знайденим за таблицею  $t$ -розподілу для рівня значущості  $\alpha$  і числа ступенів вільності  $k=n-m-1$ .

Якщо  $t_{розр.}/> t_{к\alpha}$ , то гіпотеза  $H_0$  відхиляється і приймається гіпотеза  $H_1$ . У цьому випадку можна зробити

висновок про значущість коефіцієнта множинної кореляції між залежною та незалежними змінними. Якщо ж статистика не перевищує критичне значення, то приймається нульова гіпотеза щодо відсутності кореляційного зв'язку між параметрами  $y$  та  $x$ .

За розрахунками було знайдено:

для GaAs з домішкою Cu:  $t_{розр} = 2,12$ ;

для GaAs з домішкою Se:  $t_{розр} = 2,38$ ;

для GaAs з домішкою Cd:  $t_{розр} = 2,09$ ;

Оскільки для рівня значущості  $\alpha=0,05$  всі  $t_{розр.}/> t_{к\alpha}$  [], то гіпотезу  $H_0$  відхилено і прийнято гіпотезу  $H_1$ , що встановлює значущість коефіцієнтів множинної кореляції.

Таким чином, за перевіркою значущості коефіцієнтів детермінації та кореляції, помилка для всіх статистичних гіпотез і висновків не перевищує 5%.

Тривимірну візуалізацію результатів регресійного аналізу для кристалу арсеніду галію легованого селеном для параметрів  $\sigma$ ,  $N_{se}$  і  $N_d$ , з використанням бібліотеки `corrplot` [15], надано на рис. 4.

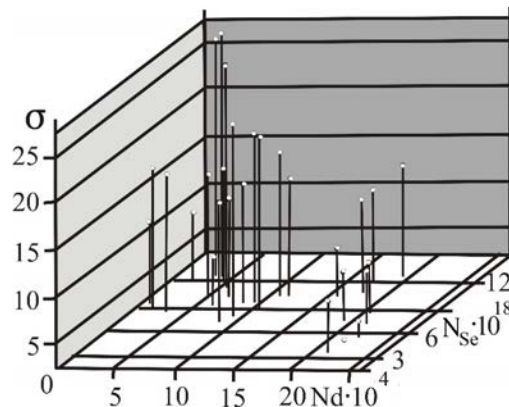


Рис. 4. Залежність механічних напружень від концентрації домішки селену та щільності дислокацій

## ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Якщо узагальнити результати проведеного регресійного аналізу, то можна визначити таке. В дослідженні на основі багаторфакторного кореляційного аналізу було, по-перше, підтверджені відомі раніше результати про кореляційний зв'язок між механічними напруженнями, щільністю дислокацій і концентрацією домішки в легованому арсеніді галію. Тобто визначено те, що механічні напруження створюються за рахунок дислокаційної структури і перерозподілу точкових дефектів. Таким чином, було підтверджено достовірність кореляційного аналізу як методу для досліджень.

Крім того, був встановлений невідомий раніше факт. З'ясовано, що знак кореляції між фактором  $x_1$  (концентрація домішки) для домішки селену та відгуком (механічні напруження) є від'ємним, а відповідні знаки для домішок міді та кадмію є додатними (вирази (3)–(5)). Це свідчить про наявність особливостей в механізмі компенсації механічних напружень за рахунок

перерозподілу домішок, що вбудовуються в підгратку миш'яку (селен), порівняно з домішками, що вбудовуються в підгратку галію (кадмій) або в міжвузелля (мідь). Від'ємний знак в кореляційному рівнянні показує, що концентрація селену зростає в областях кристалу з меншою щільністю дислокацій, які є основним джерелом залишкових механічних напружень [14]. Це протирічить загальній уяві, що дислокації є «стоком» для точкових дефектів, які перерозподіляються до них [14]. Однак миш'як в кристалах GaAs є суттєво більш летючим елементом, ніж галій. Тому значна кількість його вакансій може утворюватися вже під час остигання кристалу. Саме ці вакансії займає селен, що первинно знаходився в міжвузеллі. Такий механізм вбудовування селену в кристалічну гратку GaAs й пояснює різницю знаків в кореляційних виразах (3), (5) та (4). Однак це явище вимагає проведення додаткових досліджень.

Слід зазначити, що високолеговані кристали арсеніду галію, в яких концентрація домішок перевищує  $(1-2) \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , за характером перерозподілу точкових дефектів на фронті кристалізації можуть суттєво відрізнятися від кристалів з нижчим рівнем легування. Тому вони вимагають проведення окремих аналітико-статистичних досліджень.

### ВИСНОВКИ

На цей час для напівпровідникових матеріалів загалом, і для арсеніду галію, зокрема, використання багатофакторного статистичного аналізу є дуже обмеженим. Це знижує можливість підвищення якості неруйнівного дослідження та моделювання властивостей таких матеріалів.

Побудовано моделі парної та множинної лінійної регресії фізичними параметрами кристалів арсеніду галію з трьома видами домішок: з домішкою міді, яка має міжвузлове вбудовування; з домішкою кадмію, що вбудовується в підгратку галію; з домішкою селену, що вбудовується в підгратку миш'яку. Дослідження проводилися за розподілом фізичних параметрів вздовж діаметру пластин GaAs. За значеннями коефіцієнтів детермінації встановлено, що всі побудовані моделі є статистично значимими, а за коефіцієнтами множинної кореляції – що зв'язок між параметрами є досить тісним. Помилка для всіх статистичних гіпотез і висновків не перевищувала 5%.

Множинний кореляційний аналіз, застосований до монокристалів легованого арсеніду галію, надав можливість встановити як раніше відомі, так і невідомі кореляційні зв'язки між фізичними характеристиками кристалів. Він підтвердив наявність тісних зв'язків між механічними напруженнями, щільністю дислокацій і концентрацією домішок в кристалах. Крім того, з'ясовано, що знак кореляції для домішки селену щодо відгуку механічних напружень є від'ємним, а відповідні знаки для домішок міді та кадмію є додатними. Це свідчить про наявність особливого механізму компенсації механічних напружень за рахунок перерозподілу домішок, що вбудовуються в підгратку миш'яку, порівняно з домішками, що вбудовуються в підгратку галію або в міжвузелля.

Отримані результати можуть стати передумовою для подальшого покращення моделювання напівпровідникових кристалів з використанням кореляційного аналізу.

### REFERENCES

- [1] Vidrinsky, B.V., & Zamurueva, O.V. (2019). Vplyv lehuвання rідkozemelnyimi elementamy (Nd, Dy, Er, Lu) na optychni vlastyivosti krystaliv  $A^{III}B^{VI}$ . [The effect of doping with rare earth elements (Nd, Dy, Er, Lu) on the optical properties of  $A^{III}B^{VI}$  crystals]. *Perspektyvni tekhnolohiyi ta prylady – Promising technologies and devices*, Iss.14, 42–45. doi: <https://doi.org/10.36910/6775-2313-5352-2019-14-6> [in Ukrainian].
- [2] GaAs wafer market growing at 15% GaAs to 2023, driven by photonics applications growing at 37%. *Semiconductor Today*. Retrieved from: [www.semiconductor-today.com/news\\_items/2018/jul/yole\\_240718.shtml](http://www.semiconductor-today.com/news_items/2018/jul/yole_240718.shtml) (application date 22.01.2025)
- [3] Wangila, E. et al. (2024). High-Quality Single-Step Growth of GaAs on C-Plane Sapphire by Molecular Beam Crystals. 14(8), 724. doi: <https://doi.org/10.3390/cryst14080724>
- [4] Balaghi, L. et al. (2021). High electron mobility in strained GaAs nanowires. *Nat. Commun.*, 12, 6642. doi: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27006-z>
- [5] Oksanych, O.P. et al. (2018). Udoskonalennya metodu otrymannya poruvatoho sharu na pidkladkakh n-GaAs [Improvement of the method for obtaining a porous layer on n-GaAs substrates]. *Vcheni zapysky TNU imeni V.I. Vernads'koho. Seriya: tekhnichni nauky – Scientific notes of the V.I. Vernadsky TNU. Series: technical sciences*, 29(68), P. 2, No 6, 228–234. [in Ukrainian].
- [6] Pritchin, S.E. (2016). *Rozrobka tekhnolohiyi vyrobnytstva pidkladok arsenidu haliyu dlya vyrobiv mikroelektroniky: dys. d-ra. tekhn. nauk: 05.27.06 – tekhnolohiya, obladnannya ta vyrobnytstvo elektronnoyi tekhniki [Development of technology for production of gallium arsenide substrates for microelectronic products: thesis. Dr. technical Science: 05.27.06 – Technology, equipment and production of electronic equipment]*. Kremenichug: M. Ostrogradskyi Kremenichug University [in Ukrainian].
- [7] Zlomanov, V. (2008). *Nonstoichiometric compounds. Intermetallics Research Progress*. New York: Nova Science Publishers, 290.
- [8] Kulchitsky, N.A., Naumov, A.V., & Startsev, V.V. (2020). Photonic is a New Driver of Gallium Arsenide Market. *Photonica*, Vol. 14, Iss. 2. 138–149. doi: 10.22184/1993-7296.FRos.2020.14.2.138.149
- [9] Litvinova, M. et al. (2019). Application of multiple correlation analysis method to modeling the physical properties of crystals (on the example of gallium arsenide). *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, Vol. 6, No. 12(102), 39–45. doi: 10.15587/1729-4061.2019.188512

- [10] Litvinova, M.B., & Shtanko, A.D. (2005). Influence of structural defects on the mechanical stress in the impurity diffusion zone of GaAs single crystals. *Inorganic Materials*, Vol. 41, No 4, 903–906.
- [11] Kovalenko, V.F., Shutov, S.V., Baganov, Ye.A., & Smykalo, M.M. (2009). Near band-edge luminescence of semi-insulating undoped gallium arsenide at high levels of excitation. *Journal of Luminescence*, Vol. 129, Iss. 9, 1029–1031. doi: 10.1016/j.jlumin.2009.04.017
- [12] Pashko, A.O. (2019). *Statystychnyy analiz danykh: Elektronne vydannya [Statistical Data Analysis: Electronic Edition]*, KNU im. T.H. Shevchenka, 55. Retrieved from: [https://csc.knu.ua/media/filer\\_public/19/d5/19d56780-269a-4eef-bb3b-48ec8da23859/intelektualnaobrobkadanikh.pdf](https://csc.knu.ua/media/filer_public/19/d5/19d56780-269a-4eef-bb3b-48ec8da23859/intelektualnaobrobkadanikh.pdf) (application date 27.11.2024) [in Ukrainian].
- [13] Oleshchenko, L.M. (2021). *Tekhnolohiyi obroblyennya velykykh danykh: konspekt lektsiy z dysypliny «Tekhnolohiyi obroblyennya velykykh danykh»: navch. posib. dlya stud. Spetsial'nosti 121 «Inzheneriya prohramnoho zabezpechennya» [Big Data Processing Technologies: Lecture Notes on the Discipline "Big Data Processing Technologies": Textbook for Students of Speciality 121 "Software Engineering"]*, KPI im. Ihorya Sikors'koho – Kyiv: Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, 227 [in Ukrainian].
- [14] Zhu, X.A., & Tsai, C. T. (2000). Effects of doping impurity and growth orientation on dislocation generation in GaAs crystals grown from the melt: A qualitative finite-element study. *J. Appl. Phys*, 88, 2295–2301. doi: <https://doi.org/10.1063/1.1287600>

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Відринський, Б.В., & Замуруєва, О.В. (2019). Вплив легування рідкоземельними елементами (Nd, Dy, Er, Lu) на оптичні властивості кристалів  $A^{IV}B^{VI}$ . *Перспективні технології та прилади*, Вип. 14, 42–45. doi: <https://doi.org/10.36910/6775-2313-5352-2019-14-6>
- [2] GaAs wafer market growing at 15% GaAs to 2023, driven by photonics applications growing at 37%. *Semiconductor Today*. URL: [www.semiconductor-today.com/news\\_items/2018/jul/yole\\_240718.shtml](http://www.semiconductor-today.com/news_items/2018/jul/yole_240718.shtml) (дата звернення 22.01.2025).
- [3] Wangila, E. et al. (2024). High-Quality Single-Step Growth of GaAs on C-Plane Sapphire by Molecular Beam Crystals. 14(8), 724. doi: <https://doi.org/10.3390/cryst14080724>
- [4] Balaghi, L. et al. (2021). High electron mobility in strained GaAs nanowires. *Nat. Commun*, 12, 6642. doi: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27006-z>
- [5] Оксанич, О.П. та інші. (2018). Удосконалення методу отримання поруватого шару на підкладках n-GaAs. *Вчені записки ТНУ імені Б.І. Вернадського. Серія: технічні науки*, 29(68), Ч. 2, № 6, 228–234.
- [6] Притчин, С.Е. (2016). Розробка технології виробництва підкладок арсеніду галію для виробів мікроелектроніки: дис. д-ра. техн. наук: 05.27.06 – технологія, обладнання та виробництво електронної техніки. Кременчук. ун-т ім. М. Остроградського: Кременчук, 326 с.
- [7] Zlomanov, V. (2008). *Nonstoichiometric compounds. Intermetallics Research Progress*. New York: Nova Science Publishers, 290.
- [8] Kulchitsky, N.A., Naumov, A.V., & Startsev, V.V. (2020). Photonic is a New Driver of Gallium Arsenide Market. *Photonica*, Vol. 14, Iss. 2. 138–149. doi: 10.22184/1993-7296.FRos.2020.14.2.138.149
- [9] Litvinova, M. et al. (2019). Application of multiple correlation analysis method to modeling the physical properties of crystals (on the example of gallium arsenide). *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, Vol. 6, No. 12(102), 39–45. doi: 10.15587/1729-4061.2019.188512
- [10] Litvinova, M.B., & Shtanko, A.D. (2005). Influence of structural defects on the mechanical stress in the impurity diffusion zone of GaAs single crystals. *Inorganic Materials*, Vol. 41, No 4, 903–906.
- [11] Kovalenko, V.F., Shutov, S.V., Baganov, Ye.A., & Smykalo, M.M. (2009). Near band-edge luminescence of semi-insulating undoped gallium arsenide at high levels of excitation. *Journal of Luminescence*, Vol. 129, Iss. 9, 1029–1031. doi: 10.1016/j.jlumin.2009.04.017
- [12] Пашко, А.О. (2019). *Статистичний аналіз даних: Електронне видання*, КНУ ім. Т.Г. Шевченка, 55. URL: [https://csc.knu.ua/media/filer\\_public/19/d5/19d56780-269a-4eef-bb3b-48ec8da23859/intelektualnaobrobkadanikh.pdf](https://csc.knu.ua/media/filer_public/19/d5/19d56780-269a-4eef-bb3b-48ec8da23859/intelektualnaobrobkadanikh.pdf) (дата звернення 27.11.2024).
- [13] Олещенко, Л.М. (2021). *Технології оброблення великих даних: конспект лекцій з дисципліни «Технології оброблення великих даних»: навч. посіб. для студ. Спеціальності 121 «Інженерія програмного забезпечення»*, Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 227.
- [14] Zhu, X.A., & Tsai, C. T. (2000). Effects of doping impurity and growth orientation on dislocation generation in GaAs crystals grown from the melt: A qualitative finite-element study. *J. Appl. Phys*, 88, 2295–2301. doi: <https://doi.org/10.1063/1.1287600>

© Літвінова М.Б., Дудченко О.М., Штанько О.Д., Карпова С.О.  
 Дата надходження статті до редакції: 14.02.2025  
 Дата затвердження статті до друку: 02.03.2025