

問題

1. 厚さ 100 nm の a-SiO₂ の単位面積当たり静電容量 C_{OX} を求めよ。
a-SiO₂ の比誘電率は $\epsilon_r = 11.9$ とする。
2. TransferCurve.csv のデータから、飽和移動度を求めよ
電極幅 $W = 300 \mu\text{m}$, $L = 50 \mu\text{m}$ とする。
飽和移動度を求める際の V_g , V_d は各自で選ぶこと。
その値を選んだ理由も説明せよ。

最尤推定法

尤度関数とは:

事象 (x_k) が起こる確率を、既知のパラメータ (a_k) の確率密度関数

$$P(X = x_i | a_k) = \prod_i \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}} \exp \left[-\frac{\varepsilon_i(a_k)^2}{2\sigma_i^2} \right] \right\} = \prod_i \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}} \right) \cdot \exp \left[-\sum_i \frac{\varepsilon_i(a_k)^2}{2\sigma_i^2} \right]$$

などとすると、逆に $X = (x_i)$ がわかっているとし、

パラメータ (a_k) がどれだけ尤もらしいか (尤度) を表す確率密度関数とみなし、

上記の確率密度関数を変数 (a_k) の関数として

尤度関数 $P(a_i) = P(x_i | a_i)$ という。

最尤推定法

誤差 $\varepsilon_i = f(x_i, a_i) - y_i$ が分散 σ_i の正規分布に従うとする。データ (x_i, y_i) に対するパラメータ (a_i) の尤度関数は

$$P(a_i) = \prod_i \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}} \right) \cdot \exp \left[-\sum_i \frac{\varepsilon_i^2}{2\sigma_i^2} \right]$$

尤度を最大化するパラメータを求めるのが「最尤推定法」。

$$\max P(a_i) = \max \ln P(a_i) = \min \sum_i \frac{\varepsilon_i^2}{\sigma_i^2}: \text{最小二乗法に一致する}$$

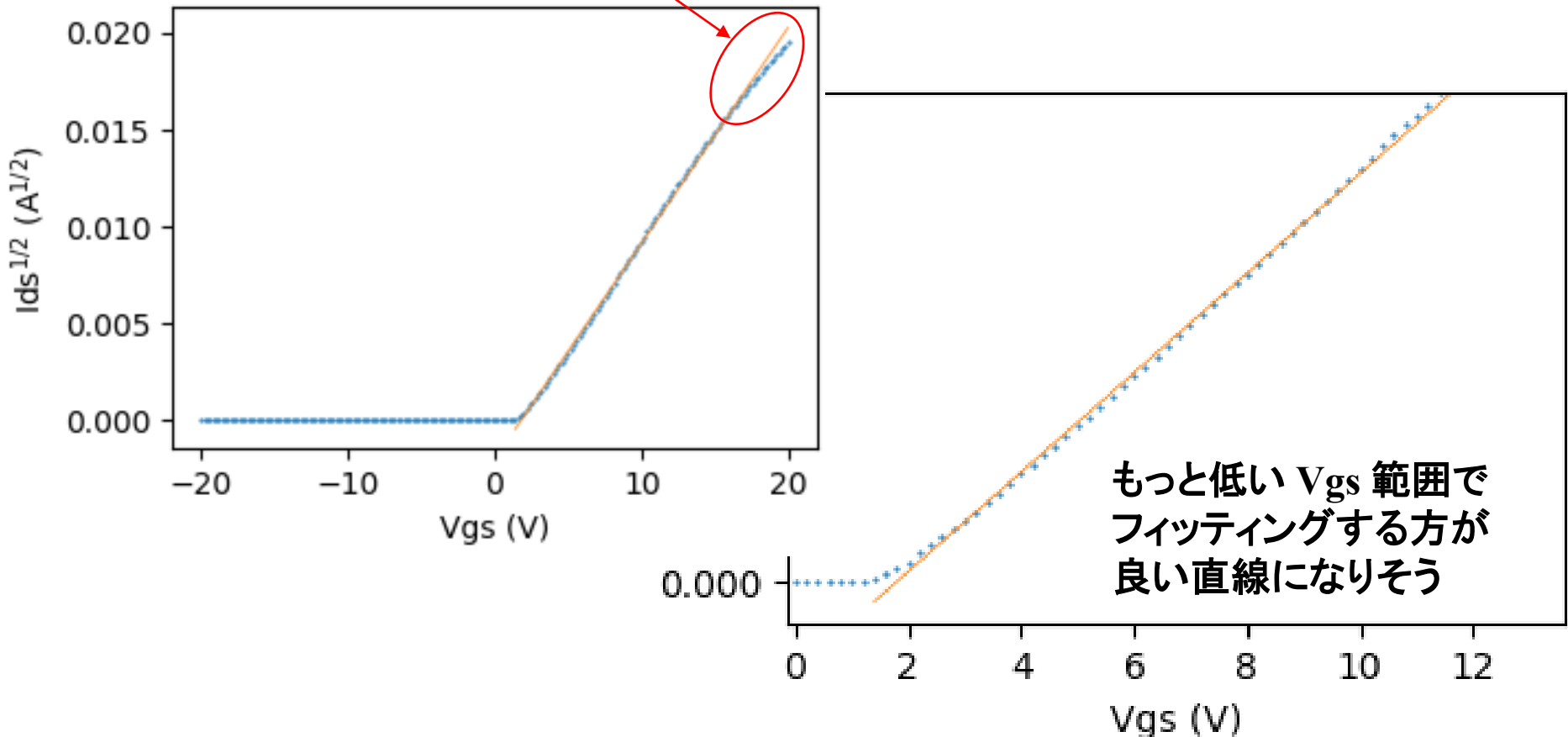
フィッティング範囲の妥当性

TFTiv_errorcheck.py

フィッティング範囲 2.0 ~ 10.0V

高 V_{gs} では $V_{ds} < V_p = V_{gs} - V_{th}$ となり、
直線から外れる

最小二乗に入れてはいけない



線形最小二乗法 $y = a + bx$ の誤差

酒井英行訳、M.C.Barford著、実験精度と誤差、丸善

$$f(x_i) = a + bx_i$$

$$\varepsilon_i = f(x_i) - (a + bx_i) \quad \text{目的関数 } S = \sum \varepsilon_i^2 \text{ を最小化}$$

$$\begin{pmatrix} n & s_x \\ s_x & s_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_y \\ s_{xy} \end{pmatrix} \quad s_x = \sum x_i, s_y = \sum y_i, s_{xx} = \sum x_i^2, s_{xy} = \sum x_i y_i$$

$\langle A \rangle$ は A の平均

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} s_{xx} & -s_x \\ -s_x & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_y \\ s_{xy} \end{pmatrix} \quad \Delta = ns_{xx} - s_x^2 = n \sum (x_i - \langle x \rangle)^2$$

$$b = \frac{ns_{xy} - s_x s_y}{\Delta} = \frac{\sum (x_i - \langle x \rangle)(y_i - \langle y \rangle)}{\sum (x_i - \langle x \rangle)^2} \quad a = \frac{s_{xx} s_y - s_x s_{xy}}{\Delta} = \langle y \rangle - b \langle x \rangle$$

$$\sigma_y^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 - \frac{(\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle)^2}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{n^2} \left[ns_{yy} - s_y^2 - \frac{(ns_{xy} - s_x s_y)^2}{ns_{xx} - s_x^2} \right]$$

$$\text{標準誤差: } S_a = \frac{\sigma_y \sqrt{\langle x^2 \rangle}}{\sqrt{(n-2)(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)}}$$

$$S_b = \frac{\sigma_y}{\sqrt{(n-2)(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)}}$$

$$\text{相関係数: } r = s_{xy} / \sqrt{s_{xx} s_{yy}}$$

誤差の計算

誤差の伝播則

変数 a, b の標準誤差 σ_a, σ_b が既知の場合、 $f(a, b)$ の誤差は

$$\delta f(a, b) = \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_b \delta a + \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)_a \delta b$$

$\delta a, \delta b$ が正規分布に従う場合、 $\delta f(a, b)$ の標準偏差 σ_f は

$$\sigma_f = \sqrt{\left[\left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_b \sigma_a\right]^2 + \left[\left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)_a \sigma_b\right]^2}$$

最小自乗法で $y = a + bx$ の標準誤差 σ_a, σ_b が得られたら …

$$\cdot V_{th}(a, b) = -a/b$$

$$\delta V_{th} = -\delta a/b + a\delta b/b^2$$

$$\sigma_{V_{th}} = \sqrt{\left[\left(\frac{1}{b}\right) \sigma_a\right]^2 + \left[\left(\frac{a}{b^2}\right) \sigma_b\right]^2}$$

$$\cdot \mu(a, b) = b^2 / \sqrt{\frac{C_{ox}}{2L}}$$

$$\delta \log \mu = \frac{\delta \mu}{\mu} = \delta [\text{const} + 2 \ln b] = 2 \frac{\delta b}{b}$$

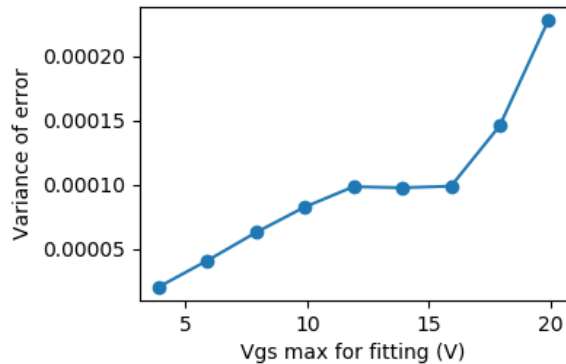
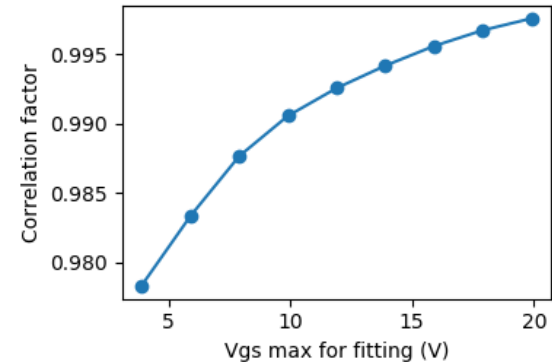
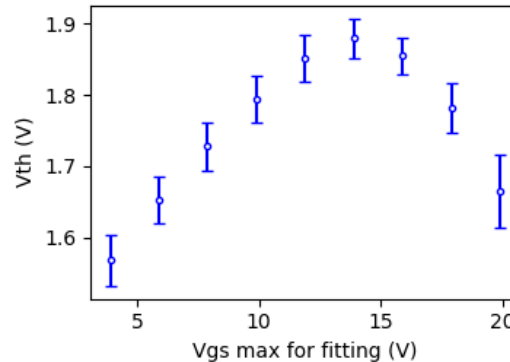
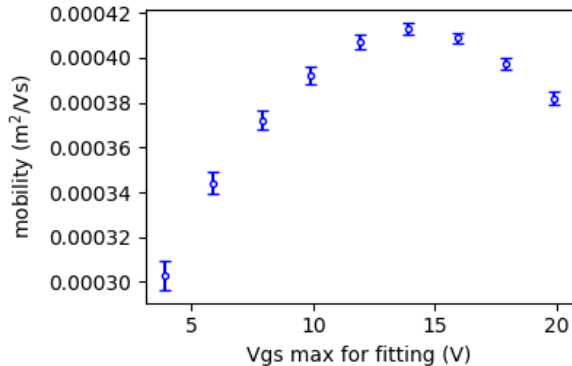
$$\sigma_\mu = 2\mu\sigma_b/b$$

$$\delta \log V_{th} = \frac{\delta V_{th}}{V_{th}} = \delta a/a - \delta b/b$$

$$\sigma_{V_{th}} = V_{th} \sqrt{\left[\left(\frac{1}{a}\right) \sigma_a\right]^2 + \left[\left(\frac{1}{b}\right) \sigma_b\right]^2}$$

最小二乗法の誤差と相関係数

TFTiv_errorcheck.py



- フィッティング範囲を広げると**相関係数**は 1.0 に近づく
x 範囲が広いと相関係数は大きくなりやすい。
必ずしも良い直線範囲の指標にはなっていない
- **誤差 ε_i の標準偏差 σ_{ε_i} は $V_{gs} > 16\text{V}$ で明確に大きくなる:**
 $V_{gs} > 16\text{V}$ のデータを入れてはいけない
- 移動度、 V_{th} は 14 V までのデータを入れると最大値をとる
意味はない。フィッティング範囲の妥当性の検証が重要
- **標準誤差** は 1σ で表示していることに注意。
 3σ を見込むのが普通

プログラム (抜粋)

TFTiv_errorcheck.py

```
# 誤差、相関係数計算付き 一次多項式線形最小二乗
def lsq1(x, y, iPrint = 0):
    n = len(x)
    # 統計量の計算
    # si: 変数 i の和          avi: i の平均
    # sij: 変数 i と j の積の和  sij: i*jの平均
    sx = sum(x)
    avx = sx / n
    sy = sum(y)
    avy = sy / n
    sxx = sum([x[i] * x[i] for i in range(n)])
    avxx = sxx / n
    sxy = sum([x[i] * y[i] for i in range(n)])
    avxy = sxy / n
    syy = sum([y[i] * y[i] for i in range(n)])
    avyy = syy / n
    delta = n * sxx - sx * sx

# y = a + bx
    b = (n * sxy - sx * sy) / delta
    a = avy - b * avx

# 残差の二乗和  $\sum \epsilon_i^2$ 、誤差の標準偏差  $\sigma(\epsilon_i)$ 
    sum_ei2 = sum([pow(y[i] - a - b * x[i], 2) for i in range(n)])
    sigma_ei = sqrt(sum_ei2 / (n - 1))
    sigma_y2 = avyy - avy * avy - pow(avxy - avx * avy, 2) / (avxx -
    avx * avx)
    sigma_y = sqrt(sigma_y2)

# パラメータ a, b の標準誤差と相関係数
    Sa = sigma_y * sqrt(avxx) / sqrt((n - 2) * (avxx - avx * avx))
    Sb = sigma_y / sqrt((n - 2) * (avxx - avx * avx))
    r = sxy / sqrt(sxx * syy)
```

```
# 戻り値が多いので、統計量、標準誤差、相関係数は
# 辞書変数 (ハッシュ、連想配列) で返す
# 辞書変数の値は、{key:val}
res = {'sx': sx, 'sy': sy, 'sxx': sxx, 'sxy': sxy, 'syy': syy,
       'Sa': Sa, 'Sb': Sb, 'r': r, 'sigma_ei': sigma_ei, 'residual': sum_ei2}
return a, b, res
```

```
def main():
    # 最小二乗を実行
    ai = lsq1(xfit, yfit, 0)
    # 辞書変数は ai[2] に入る
    res = ai[2]
    # a, b の標準誤差、相関係数
    # 辞書変数の要素は 変数名[key]で受け取る
    Sa = res['Sa']
    Sb = res['Sb']
    r = res['r']
```

```
Vth = -ai[0] / ai[1]
grad = ai[1]
mu = grad * grad / (W * Cox / 2.0 / L)
```

```
# 誤差伝播則からVth と  $\mu$  の標準誤差を計算
SVth = sqrt(pow(Sa / ai[1], 2) + pow(Sb * ai[0] / ai[1] / ai[1], 2))
Smu = 2.0 * mu * Sb / ai[1]
```

```
# エラーバー付きグラフのプロット
ax4.errorbar(xecheck, ymu, yerr = ySmu,
             capsize = 3.0, fmt = 'o', markersize = 3.0, ecolor = 'b',
             markeredgecolor = 'b', color = 'w')
```