

НЕСТАЦИОНАРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ С ВЫБОРОМ ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ПО L-КРИВОЙ

М. Н. Левин, А. В. Татаринцев, А. Э. Ахкубеков

Воронежский государственный университет

Предложено использовать подход L-кривой при выборе параметра регуляризации в методе Laplace-DLTS для исключения неконтролируемых ошибок и повышения достоверности получаемых результатов. Возможности метода продемонстрированы численным анализом модельного релаксационного сигнала, содержащего три экспоненты с близкими значениями показателей и малую шумовую составляющую. Показано, что предложенный вариант Laplace-DLTS с использованием L-кривой для выбора параметра регуляризации или LL-DLTS обладает большей надежностью по сравнению с методом Laplace-DLTS с выбором параметра регуляризации по невязке.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: МОП структуры, спектроскопия, глубокие уровни, численный анализ, модельный релаксационный заряд, L-кривая, метод Laplace-DLTS.

Метод DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) является одним из основных методов, широко используемых для определения параметров дефектов, приводящих к возникновению глубоких уровней (ГУ) в запрещенной зоне полупроводникового материала.

Основной проблемой стандартного метода DLTS является недостаточная разрешающая способность, делающая практически невозможным разделение сигналов от нескольких близко расположенных глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводниковой структуры. Процесс релаксации в этом случае представляет собой сумму нескольких экспоненциальных процессов, входящих с разными весами:

$$S(t) = \sum_{i=1}^n C_{0i} \exp(-e_{ni}t), \quad (1)$$

где e_{ni} — скорость эмиссии с уровня с энергией E_{ti} .

Целью обработки сигнала DLTS является нахождение скоростей эмиссии для каждого ГУ и последующее получение параметров ГУ (сечения испускания и захвата, энергетического положения уровня, а также концентрации уровня) из измеряемых значений емкости (емкостный DLTS) или тока (токовый DLTS) [1].

В работе [2] для повышения разрешающей способности было предложено использовать обратное преобразование Лапласа сигнала (1), результатом которого будет сумма дельта-функций:

$$R(s) = \sum_{i=1}^n C_{0i} \delta[s - 1/\tau_i(T)], \quad (2)$$

положение которых по оси абсцисс определяет значения скоростей эмиссии в (1).

Для численного обращения преобразования Лапласа в работе [2] использовался алгоритм, разработанный Стехфестом [3] и Гавером [4]. Этот алгоритм дает хорошие результаты в случае, когда сама функция и ее преобразование являются гладкими, но демонстрирует плохую сходимость для негладких функций. Тот факт, что результатом обратного преобразования Лапласа является дельта-функция, а также обязательное присутствие шумовой составляющей в сигнале (1) ограничивает применение данного алгоритма.

Идея применения обратного преобразования Лапласа получила продолжение в методе Laplace-DLTS, предложенного в работе [5]. В общем случае измеренное значение емкости представляет собой непрерывный спектр скоростей эмиссии:

$$f(t) = \int_0^{\infty} F(s) \exp(-st) ds, \quad (3)$$

где $f(t)$ — измеренное значение емкости, $F(s)$ — функция спектральной плотности.

Для получения значений $F(s)$ необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа для функции $f(t)$. Результатом подобной процедуры является спектр четких, резко выраженных пиков, позволяющий получить информацию о количестве уровней и о значениях коэффициентов эмиссии для каждого из них. Основ-

ная трудность заключается в том, что для аналитической зависимости $f(t)$ имеется однозначное решение $F(s)$, но в случае экспериментально полученных данных наличие различного вида погрешностей (шумов) ведет к появлению множества решений, которые могут сильно отличаться друг от друга.

Задачу восстановления оригинала $F(s)$ по изображению $f(t)$ можно рассматривать как задачу о нахождении решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода, которая относится к классу некорректных задач.

Принимая во внимание дискретный характер экспериментальных данных, можно представить (3) в виде:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (4)$$

где \mathbf{b} — вектор N_f элементов экспериментальных данных (емкость), \mathbf{x} — вектор N_F элементов спектральной функции плотности, и A — матрица размера $N_f \times N_F$, представляющая дискретную аппроксимацию интегрального преобразования Лапласа. Для поиска устойчивых решений в методе Laplace-DLTS использовались алгоритмы, основанные на изложенных в работе [6] способах решения некорректно поставленных задач, основу которых составляют методы регуляризации.

Одной из самых известных форм регуляризации является регуляризация Тихонова [7]. В данном методе в качестве регуляризованного решения принимается приближенное решение уравнения \mathbf{x}_λ , минимизирующее следующее выражение:

$$\mathbf{x}_\lambda = \arg \min \left\{ \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{Lx}\|_2^2 \right\}, \quad (5)$$

где второе слагаемое — стабилизирующий (сглаживающий) функционал, λ — параметр регуляризации, контролирующий вклад стабилизатора в минимизацию нормы невязки. В качестве матрицы L может быть взята единичная матрица I_n или $p \times n$ дискретная аппроксимация дифференциального оператора порядка $(n - p)$. В данной работе использовался вид стабилизирующего функционала, предложенный в [7].

В практических задачах правая часть — вектор \mathbf{b} всегда содержит различного рода погрешности, такие как ошибки измерений, аппроксимации или округления. Представим его в виде

$$\mathbf{b} = \bar{\mathbf{b}} + \mathbf{e}, \quad (6)$$

где \mathbf{e} — погрешность, $\bar{\mathbf{b}}$ — невозмущенная правая часть. Точная правая часть $\bar{\mathbf{b}}$ и соответствующее невозмущенное (точное) решение $\bar{\mathbf{x}}$ неизвестны.

Необходимой составляющей любого процесса регуляризации является процедура выбора параметра регуляризации. Данные методы могут быть разделены на два класса в зависимости от предположений вида $\|\mathbf{e}\|_2$ — нормы возмущения (погрешности) правой части \mathbf{b} . Первый класс — методы, основанные на знании или достаточно достоверной оценке $\|\mathbf{e}\|_2$, второй класс — методы, не предполагающие знания $\|\mathbf{e}\|_2$.

Примером метода, относящегося к первому классу, может служить принцип невязки [8], согласно которому параметр регуляризации выбирается таким, чтобы норма невязки для регуляризованного решения удовлетворяла выражению

$$\|\mathbf{Ax}_{reg} - \mathbf{b}\|_2 = \|\mathbf{e}\|_2. \quad (7)$$

При этом недооценка $\|\mathbf{e}\|_2$ может приводить к слабой регуляризации решения с большой нормой и возникновению дополнительных пиков в спектре Laplace-DLTS, не соответствующих глубокому уровню, а переоценка, в свою очередь, к сильно регуляризованному решению и снижению разрешающей способности.

Альтернативой могут служить методы, относящиеся ко второму классу. Одним из наиболее эффективных и наглядных является метод так называемой L-кривой [9,10]. Суть данного метода состоит в вычислении для набора значений параметра регуляризации λ кривизны линии в координатах $(\log \|\mathbf{Ax}_\lambda - \mathbf{b}\|_2, \log \|\mathbf{Lx}_\lambda\|_2)$ и поиску точки с максимальной кривизной. Построенный для случая дискретной некорректной задачи в логарифмических координатах график приобретает характерную L-образную форму с хорошо различимым углом, разделяющим вертикальную и горизонтальную части кривой. Вертикальная часть L-кривой соответствует решениям, в которых величина $\|\mathbf{Lx}_{reg}\|_2$ наиболее чувствительна к изменениям параметра регуляризации. Горизонтальная часть соответствует решениям, в которых норма невязки $\|\mathbf{Ax}_{reg} - \mathbf{b}\|_2$ более чувствительна к изменениям параметра регуляризации, и преобладает влияние погрешности регуляризации.

Таким образом, L-кривая четко показывает оптимум между нормой решения (т.е. его близостью к точному решению) и его стабилизацией (сглаженностью). Для данной правой части $\mathbf{b} = \bar{\mathbf{b}} + \mathbf{e}$, очевидно, существует значение параметра регуляризации, обеспечивающее опти-

мальную степень регуляризации решения \mathbf{x}_{reg} . Одним из важных свойств L-кривой является тот факт, что оптимальное значение параметра регуляризации всегда находится вблизи угла кривой [10], по положению которого можно найти регуляризованное решение с наилучшим балансом между нормой невязки и нормой решения.

В качестве модельного был рассмотрен сигнал вида $S(t) = \exp(-3t) + \exp(-4t) + \exp(-5t)$ с добавкой в виде шумовой составляющей (белый гауссов шум).

В начале рассмотрим результаты обратного преобразования Лапласа данного сигнала с выбором параметра регуляризации по невязке [8].

Для соотношения шум—сигнал, равного 0.001, были получены спектры Laplace-DLTS для значений невязок, начиная с $\|e\|_2$ (норма возмущения правой части (6)), и далее в сторону уменьшения. Спектры представлены на рис. 1. Можно видеть, как меняется регуляризованное решение в зависимости от заданного уровня невязки δ и параметра регуляризации λ . На рис. 1,а изображено сильно регуляризованное решение с большими значениями δ и λ . Подобная ситуация приводит к неразрешимости уровней, на спектре Laplace-DLTS наблюдается одиночный широкий пик. Заметим, что данный спектр соответствует уровню невязки, равному норме возмущения правой части $\|e\|_2$, который в работе [8] считается приемлемым для выбора параметра регуляризации. Видно, что

использование данного уровня невязки явно недостаточно для разрешения близко расположенных уровней. Далее, по мере уменьшения δ , сигналы от разных уровней начинают разделяться, в некоторый момент регуляризация оптимальна с точки зрения баланса между нормой невязки и нормой решения. При дальнейшем уменьшении уровня невязки δ в спектре Laplace-DLTS появляются артефакты в виде дополнительных пиков (рис. 1,б), не соответствующих уровням, присутствующим во входном сигнале DLTS, что может приводить к ошибкам в определении количества глубоких уровней и их параметров.

Далее приведены спектры Laplace-DLTS, соответствующие тому же входному сигналу и уровню шума, при построении которых параметр регуляризации выбирался с помощью метода L-кривой. На рис. 2 изображен график L-кривой в логарифмических координатах, полученный для набора значений λ в пределах $[10^{10}, 1]$. Как упоминалось выше, оптимальное решение с точки зрения регуляризованности должно выбираться максимально близко к положению угла L-кривой (отмечено стрелкой). Это можно делать визуально, анализируя график в логарифмических координатах, или автоматически, вычисляя максимальную кривизну 2D-сплайна, аппроксимирующего дискретный набор значений.

На рис. 3 изображен спектр Laplace-DLTS, полученный для значения λ , найденного с помощью L-кривой. Как видно, уровни хорошо

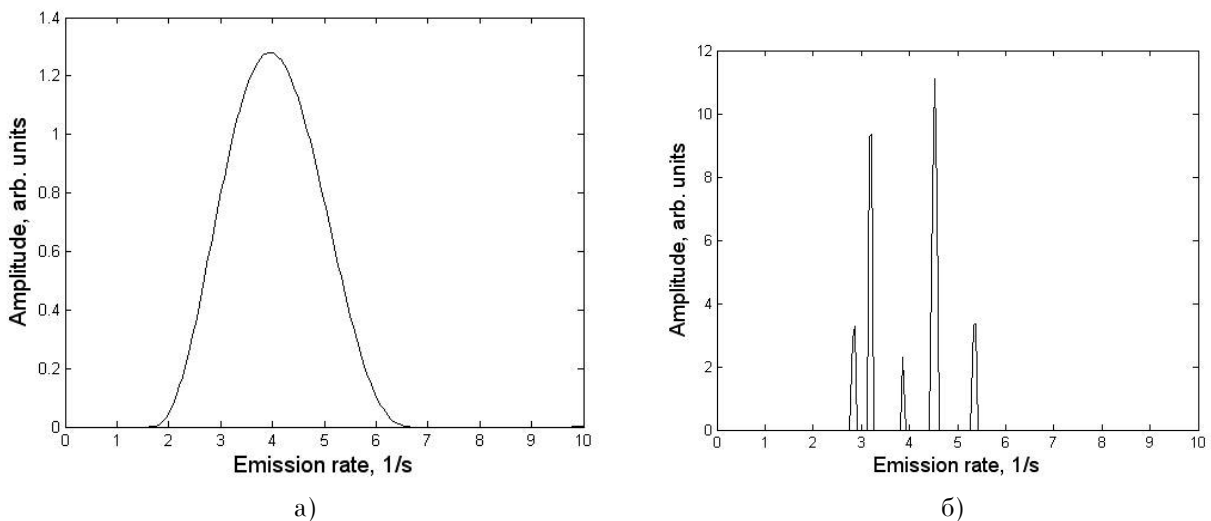


Рис. 1. Спектр Laplace DLTS с выбором параметра регуляризации по невязке: а) заданный уровень невязки $\delta = \|e\|_2 = 1.5363 \cdot 10^{-2}$. Значение параметра регуляризации $\lambda = 2.5 \cdot 10^{-1}$; б) заданный уровень невязки $\delta = 1 \cdot 10^{-5}$. Значение параметра регуляризации $\lambda = 2.3842 \cdot 10^{-7}$

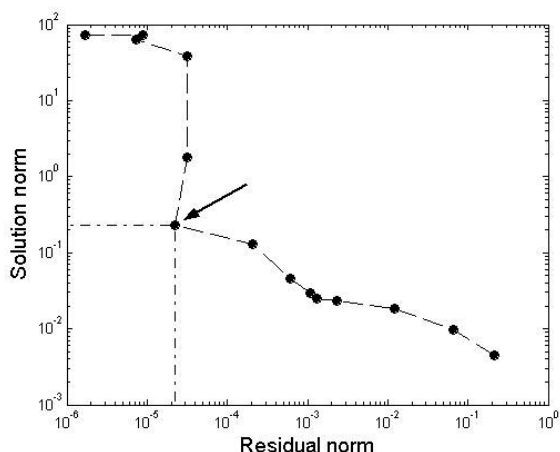


Рис. 2. График L-кривой в логарифмических координатах. Значение параметра регуляризации, соответствующее наиболее близкому решению к углу кривой: $\lambda = 5.1795 \cdot 10^{-7}$

разрешаются, значения коэффициентов эмиссии соответствуют заданным во входном сигнале DLTS.

Необходимо отметить, что данный подход может применяться не только для обработки сигналов DLTS, но и в других задачах, требующих анализа экспоненциальных сигналов, а также в задачах восстановления сигналов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lang D. V. // J. Applied Physics. — 1974. — Vol. 45, № 7. — P. 3023—3033.
2. Nolte D. D., Haller E. E. // J. Applied Physics. — 1987. — Vol. 62, № 3. — P. 900—906.
3. Stehfest H. // Commun. ACM. — 1970. — Vol. 13, № 1. — P. 47—49.

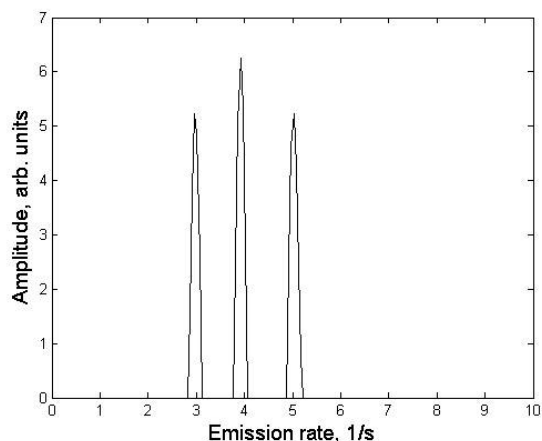


Рис. 3. Спектр Laplace-DLTS с выбором параметра регуляризации методом L-кривой. Значение параметра регуляризации $\lambda = 5.1795 \cdot 10^{-7}$

4. Gaver D. P. // Oper. Res. — 1966. — Vol. 14, № 3. — P. 444—459.

5. Dobaczewski L., Kaczor P., Hawkins I.D., Peaker A.R. // J. Applied Physics. — 1994. — Vol. 76, № 1. — P. 194—198.

6. Provencher S. W. // Computer Physics Communications. 1982. — № 27. — P. 213—227.

7. Тихонов А. П., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1979. — 288 с.

8. Морозов В. А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987. — 240 с.

9. Lawson C. L., Hanson R. J. Solving Least Squares Problems, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974. — 340 p.

10. Hansen P. C. // SIAM Review. — 1992. — Vol. 34. — P. 561—580.