

Метод Laplace-DLTS с выбором параметра регуляризации по L -кривой

© М.Н. Левин[¶], А.В. Татаринцев, А.Э. Ахкубеков

Воронежский государственный университет,
394006 Воронеж, Россия

(Получена 4 февраля 2008 г. Принята к печати 1 октября 2008 г.)

Метод DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) является одним из основных методов, широко используемых для определения параметров дефектов, приводящих к возникновению глубоких уровней в запрещенной зоне полупроводникового материала. 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 3 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.

PACS: 71.55.Gs, 61.72.S-

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_{ii} .

Цель обработки сигнала DLTS состоит в нахождении скоростей эмиссии для каждого глубокого уровня (ГУ) и последующем получении 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 δ -функций:

$$R(s) = \sum_{i=1}^n C_{0i} \delta\left(s - \frac{1}{\tau_i(T)}\right), \quad (2)$$

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 δ -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, предложенном 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.

Основная 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 1-го 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 собой 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.

[¶] E-mail: levin@phys.vsu.ru

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

$$x_\lambda = \operatorname{argmin} \{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|Lx\|_2^2 \}, \quad (5)$$

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 b всегда содержит различного рода погрешности, такие как ошибки измерений, аппроксимации или округления. Представим его в виде

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

где e — погрешность, \bar{b} — невозмущенная правая часть. Точная правая часть \bar{b} и соответствующее невозмущенное (точное) решение \bar{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 $\|e\|_2$ — нормы возмущения (погрешности) правой части b . Первый класс — методы, основанные на знании или достаточно достоверной оценке $\|e\|_2$, второй класс — методы, не предполагающие знания $\|e\|_2$.

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

$$\|Ax_{\text{reg}} - b\|_2 = \|e\|_2. \quad (7)$$

При этом недооценка $\|e\|_2$ может приводить к слабой регуляризации решения с большой нормой и к 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 их наиболее эффективных и наглядных является метод так называемой L -кривой [9–11]. Суть данного метода состоит в вычислении для набора значений параметра регуляризации λ кривизны линии в координатах $(\lg \|Ax_\lambda - b\|_2, \lg \|Lx_\lambda\|_2)$ и поиске 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

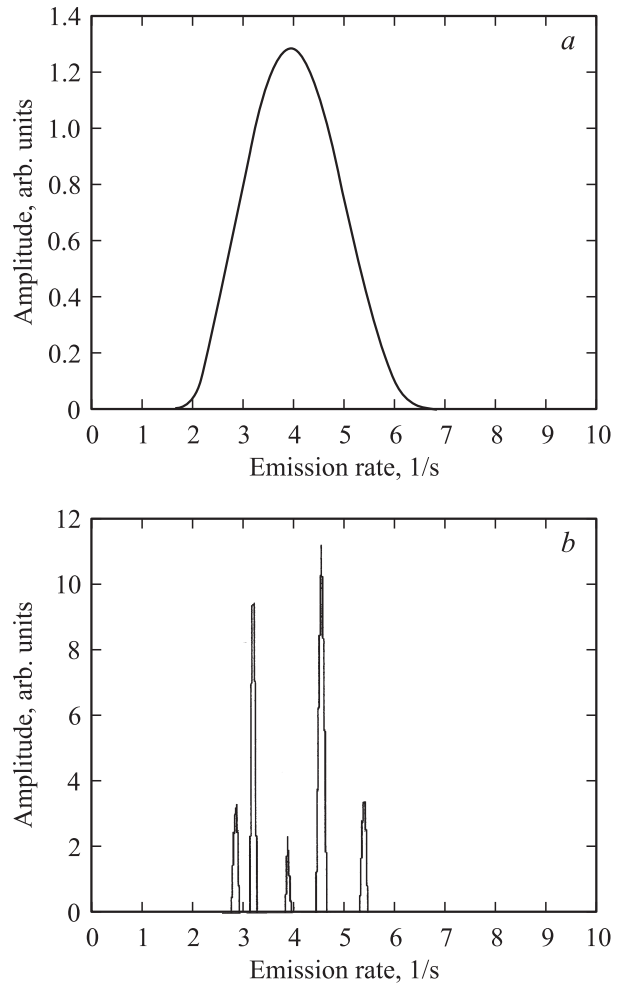


Рис. 1. Спектры Laplace-DLTS с выбором параметра регуляризации по невязке. Заданный уровень невязки: a — $\delta = \|e\|_2 = 1.5363 \cdot 10^{-2}$, b — 10^{-5} . Значение параметра регуляризации: a — $\lambda = 2.5 \cdot 10^{-1}$, b — $\lambda = 2.3842 \cdot 10^{-7}$.

и горизонтальную части кривой. Вертикальная часть L -кривой соответствует решениям, в которых величина $\|Lx_{\text{reg}}\|_2$ наиболее чувствительна к изменениям параметра регуляризации. Горизонтальная часть соответствует решениям, в которых норма невязки $\|Ax_{\text{reg}} - b\|_2$ 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 $b = \bar{b} + e$, очевидно, существует значение параметра регуляризации, обеспечивающее оптимальную степень регуляризации решения x_{reg} . Одним их 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.

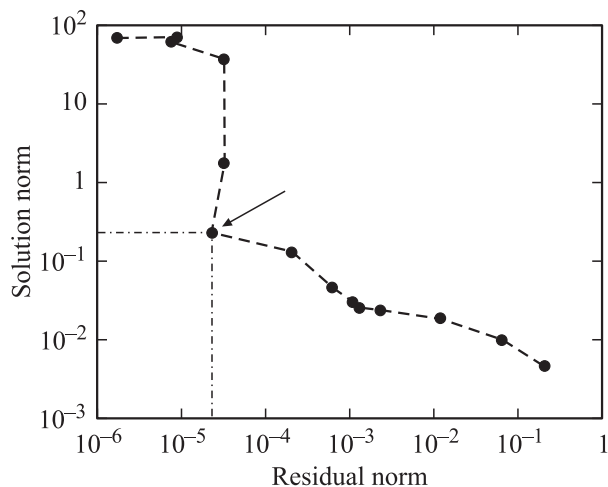


Рис. 2. График L -кривой в логарифмических координатах. Значение параметра регуляризации, соответствующее наиболее близкому решению к углу кривой: $\lambda = 5.1795 \cdot 10^{-7}$.

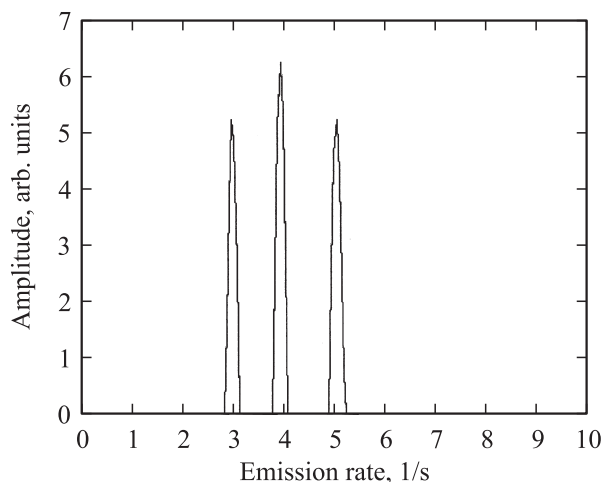


Рис. 3. Спектр Laplace-DLTS с выбором параметра регуляризации методом L -кривой. Значение параметра регуляризации: $\lambda = 5.1795 \cdot 10^{-7}$.

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, a изображено сильно регуляризованное решение с боль-

шими 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, b), 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 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] D.V. Lang. J. Appl. Phys., **45** (7), 3023 (1974).
- [2] D.D. Nolte, E.E. Haller. J. Appl. Phys., **62** (3), 900 (1987).
- [3] H. Stehfest. Commun. ACM, **13** (1), 47 (1970).
- [4] D.P. Gaver. Oper. Res., **14** (3), 444 (1966).
- [5] L. Dobaczewski, P. Kaczor, I.D. Hawkins, A.R. Peaker. J. Appl. Phys., **76** (1), 194 (1994).
- [6] L. Dobaczewski, A.R. Peaker, K. Bonde Nielsen. J. Appl. Phys., **96** (9), 4689 (2004).
- [7] S.W. Provencher. Computer Phys. Communications, **27**, 213 (1982).
- [8] А.П. Тихонов, В.Я. Арсенин. *Методы решения некоторых задач* (М., Наука, 1979).
- [9] В.А. Морозов. *Регулярные методы решения некорректно поставленных задач* (М., Наука, 1987).

- [10] C.L. Lawson, R.J. Hanson. *Solving Least Squares Problems* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974).
[11] P.C. Hansen. *SIAM Rev.*, **34**, 561 (1992).

Редактор Т.А. Полянская

Method of Laplace-DLTS with selection of regularization parameter by the L -curve

M.N. Levin, A.V. Tatarintzev, A.E. Akhkubekov

Voronezh State University,
394006 Voronezh, Russia

Abstract We propose to use the L -curve approach for choosing the regularisation parameter in the Laplace-DLTS in order to exclude uncontrolled mistakes and increase the reliability of results. The possibilities of the method are demonstrated by numerical analysis of relaxation of the model signal containing three close exponents and a noise component. It is shown that the proposed version of Laplace DLTS with the L -curve approach or the LL-DLTS is more reliable in comparison with the well-known Laplace-DLTS with choosing the regularization parameter by residual.