

типа составлен с учетом корпускулярной структуры оптического излучения и статистических характеристик светового потока.

Полученные аналитические выражения для среднего значения и дисперсии сигнальной и помеховой компонент позволяют оценить вероятностные характеристики обнаружения (условные вероятности правильного обнаружения и ложной тревоги) и величину отношения сигнал/шум. Однако решение задачи определения характеристик обнаружения, потенциальных точностей измерения параметров измеряемых сигналов и сравнения предложенного алгоритма с известными алгоритмами требует отдельного рассмотрения и является предметом дальнейших исследований.

Авторы признательны д-ру техн. наук
А. И. Стрелкову (г. Харьков, Украина) за полезные

обсуждения подходов к данной проблеме и способов их практической реализации, в ходе которых определены практические направления изложенных теоретических исследований.

Литература

1. Москвитин С. В., Стрелков А. И. Теоретические основы оптической локации. — МО Украины, г. Харьков, 1992.
2. Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники. — М.: Сов. радио, 1968. Т. 2.
3. Гальярди Р., Карп Ш. Оптическая связь. — М.: Связь, 1978.
4. Стрелков А. И., Стрелкова Т. А., Лытюга А. П., Коротков В. В. Алгоритмы обнаружения сигналов в акустооптических анализаторах спектра/Радиотехника: Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 2003. Вып. 131.
5. Прикладная оптика/Под ред. Н. П. Закашова. — М.: Машиностроение, 1988.

Статья поступила в редакцию 19 июня 2008 г.

Algorithms of detection of signals in optical-electronic systems for monitoring the circumterrestrial space

A. B. Belsky, V. A. Sautkin

Zverev's Krasnogorsk Factory, Krasnogorsk, Russia

Developed are algorithms of detection of signals in a target plane of optical-electronic system in view of corpuscular and statistical properties of accepted signals. Analytical expressions for estimation of efficiency for such systems are received.

PACS: 06.30.-k; 85.60.+q

УДК 537.533.35;535.37;535.08

Проблема идентификации параметров прямозонных полупроводников по зависимости интенсивности монохроматической катодолюминесценции от энергии электронов пучка

А. Н. Поляков, М. А. Степович, Е. Н. Лапшинова

Калужский государственный педагогический университет им. К. Э. Циолковского, г. Калуга, Россия

Ю. Е. Гагарин

Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана, г. Калуга, Россия

Н. Н. Михеев

Научно-исследовательский центр "Космическое материаловедение" Института кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, г. Калуга, Россия

Рассмотрена проблема идентификации параметров прямозонных полупроводников при использовании зависимости интенсивности монохроматической катодолюминесценции от энергии электронов пучка и реализации низкого уровня возбуждения сигнала. Показано, что реализация метода наименьших квадратов приводит к системе нелинейных алгебраических уравнений, решение которой существенно зависит от выбора начального приближения. С учетом этого определены некоторые условия корректной обработки экспериментальных данных для идентификации искомых параметров полупроводников.

PACS: 85.60.-q

Введение

Ранее показано [1—4], что параметры прямозонных полупроводников могут быть определены из анализа зависимостей интенсивности монохроматической катодолуминесценции от энергии электронов пучка. Ввиду довольно сложного вида изучаемой зависимости эта задача решается численно. Результат, получаемый при этом, может сильно зависеть от выбранного способа решения [5]. Анализ одного из аспектов этой проблемы: выбор начального приближения, позволяющего получать корректные значения определяемых параметров, — составляет предмет рассмотрения настоящей работы.

Некоторые возможности оценки параметров функциональных зависимостей

Метод наименьших квадратов

Используемые в настоящее время методы оценивания параметров функциональных зависимостей часто сводятся к методу наименьших квадратов (МНК) [6—8]. При этом в качестве критерия сравнения экспериментальных результатов и результатов расчетов, проводимых согласно математической модели рассматриваемого явления, выступает сумма квадратов невязок. Оптимальные для данных экспериментальных результатов и рассматриваемой математической модели значения параметров определяются из условия минимума используемого критерия.

При известном типе зависимости $y = \varphi(x, \theta)$ МНК дает возможность так выбрать ее числовые параметры θ , что кривая $y = \varphi(x, \theta)$ наилучшим в определенном смысле образом отобразит экспериментальные данные. В случае выбора в качестве критерия суммы квадратов невязок оптимальными считают расчетные данные, минимизирующие квадратичный функционал F вида

$$F = \sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(x_i, \theta)]^2, \quad (1)$$

где x_i, y_i — наблюдаемое значение x и y в i -м эксперименте;

$\theta = (\theta_1, \dots, \theta_k)$ — вектор параметров.

Оптимальные значения параметров находят, решая систему уравнений

$$\frac{\partial F}{\partial \theta_i} = 0, \quad i = \overline{1, k}. \quad (2)$$

С геометрической точки зрения при таком подходе оптимальными считают такие параметры функциональной зависимости $y = \varphi(x, \theta)$, для ко-

торых минимальным является сумма квадратов расстояний от наблюдаемых экспериментальных точек с фиксированными абсциссами x_i до кривой $y = \varphi(x, \theta)$.

Метод ортогональной регрессии

Недостатком оценивания функциональных зависимостей с использованием МНК можно считать то, что последний не позволяет учитывать в полной мере ошибки измерения исходных данных, и это может привести к смещенным оценкам параметров и неверным результатам.

Влияние ошибок измерения на результаты определения параметров функциональных зависимостей может быть устранено за счет использования метода ортогональной регрессии (МОР) [9, 10].

Исходная модель оценивания параметров с использованием МОР и учетом погрешностей измеряемых величин имеет вид

$$\begin{cases} X_i = x_i + \delta_i, \\ Y_i = y_i + \varepsilon_i. \end{cases}$$

Точки (X_i, Y_i) — неизвестные (истинные) значения, принадлежащие кривой регрессии $Y = \varphi(X)$, δ_i и ε_i — погрешности величин X_i и Y_i .

Примем, что ошибки измерений δ_i и ε_i — нормально распределенные случайные величины с нулевыми средними дисперсиями $\sigma(x_i)$, $\sigma(y_i)$ и коэффициентом корреляции $\rho_i = 0$. Исходя из принципа максимального правдоподобия при условии нормального и независимого распределения x_i, y_i , критерием оптимальности становится минимальное значение функционала [2]

$$F(x, y, X, \varphi(X)) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{(x_i - X_i)^2}{\sigma^2(x_i)} + \frac{(y_i - \varphi(X_i))^2}{\sigma^2(y_i)} \right], \quad (3)$$

где n — число измерений.

Функционал (3) учитывает сумму квадратов невязок двух величин: значения функции и значения аргумента. В аналогичном функционале, полученном традиционными статистическими методами, например МНК, учитывается невязка одной величины — чаще всего функции.

В качестве оценки X_i параметра функционала (3) выбирают те значения, которые обращают в нуль частные производные $\partial F / \partial X_i$, $i = \overline{1, n}$, тогда решение системы

$$\frac{\partial F}{\partial X_i} = \frac{x_i - X_i}{\sigma^2(x_i)} + \frac{y_i - \varphi(X_i)}{\sigma^2(y_i)} \frac{\partial \varphi(X_i)}{\partial X_i} \Big|_{X_i = \overline{X}_i} = \quad (4)$$

$= 0, i = \overline{1, n}$ — это приближение истинных значений X_i к значениям \overline{X}_i .

Если $\sigma(x_i) = \sigma(y_i) = 1$, то геометрический смысл этого выражения — условие ортогональности векторов $\mathbf{a} = \{(x_i - \bar{X}_i) : (y_i - \varphi(\bar{X}_i))\}$ и

$$\mathbf{b} = \left\{ 1; \frac{\partial \varphi(X_i)}{\partial X_i} \Big|_{X_i = \bar{X}_i} \right\}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Отметим, что вектор \mathbf{b} направлен по касательной к линии регрессии в точке $(\bar{X}_i, \varphi(\bar{X}_i))$, т. е. из всех возможных точек кривой регрессии выбирают точку, ближайшую к экспериментальной.

Таким образом, минимизация функционала приводит к минимизации суммы квадратов кратчайших расстояний от точек (x_i, y_i) до кривой регрессии (тогда как в МНК минимизируется сумма квадратов отклонений при фиксированных значениях X_i).

Конфлюентный анализ

Метод конфлюентного анализа (МКА) — это сравнительно новый метод идентификации параметров функциональных зависимостей, позволяющий находить оценки свободных (неизвестных) параметров функций при наличии погрешностей в значениях аргумента и функции [10], а также получать более корректные значения как точечных, так и интервальных оценок идентифицируемых параметров функциональных зависимостей, чем традиционно используемые методы (например МНК).

Постановка задачи остается той же, что и для МОР, и критерием оптимального выбора параметров функции регрессии является тот же функционал.

Параметр θ и значение абсциссы точки кривой регрессии X_i в функционале F неизвестны. Для минимизации F по параметру θ МНК необходимо знание значений x_i , а для уточнения истинных значений x_i МОР необходимо знание значений θ . Чтобы разрешить это противоречие, сочетают оба метода — МНК и МОР, постепенно приближаясь к истинным значениям X_i и оптимальному параметру θ [10, 11].

Задача решается по следующей схеме [9].

1-й шаг. Используя МНК, находят первое приближение θ' в предположении, что $X_i = x_i$.

2-й шаг. Используя МОР, находят приближение истинных значений $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ значениями $\bar{X} = (\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_n)$. Их необходимо проверить на принадлежность области возможных значений D_i , которая является областью неопределенности для соответствующей точки (x_i, y_i) . Так

как закон распределения значения x_i является нормальным законом, то область неопределенности задают доверительным интервалом с помощью следующего неравенства: $|x_i - \bar{X}_i| < k\sigma(x_i)$, где $k = 1, 2, 3$ — выбираемый уровень доверия.

Если вычисленное на данном шаге значение \bar{X}_i не принадлежит этой области, то приближение x_i оставляют значением \bar{X}_i , найденным на предыдущем шаге итерации.

3-й шаг. Используя МНК, находят новые значения θ исходя из новых значений $X_i = \bar{X}_i$.

Шаги 2 и 3 повторяются до тех пор, пока не выполнится условие конца итерации. Например, на соседних шагах итерации значения оценок параметров θ или значения функционала F отличаются несущественно.

При решении задачи идентификации параметров функциональных зависимостей с использованием МНК начальные приближения искомых параметров θ на первой итерации определяют методом наименьших квадратов, который используется и на последующих итерациях.

Известно, что в случае сложного вида исследуемой функциональной зависимости и решения системы уравнений (4) численными методами корректность полученных в результате применения МНК оценок может существенно зависеть от выбора начального приближения для искомых параметров. Поэтому важным вопросом оценки параметров функциональных зависимостей с использованием МНК является определение наилучшего приближения для идентифицируемых параметров, позволяющего получить их корректные оценки.

Возможность идентификации параметров прямозонных полупроводниковых материалов из анализа зависимостей интенсивности монохроматической катодолуминесценции от энергии электронов пучка

Функциональную зависимость, связывающую интенсивность I монохроматической катодолуминесценции (КЛ) с энергией электронов пучка E_0 и искомыми параметрами θ , запишем в виде $I = I(E_0, \theta)$. Для количественного описания этой зависимости при использовании модели независимых источников для случая широкого электронного пучка и низкого уровня возбуждения, часто реализующегося на практике [1—4, 12], используем выражение [12]

$$I(E_0, \theta) \cong \left\{ 1 + 0,155 \left[1 - \exp\left(-\frac{z_c}{L}\right) \right] \right\} \times \int_0^\infty dz_0 \int_{l_s}^\infty \Delta p(z, z_0) \exp[-\alpha(\lambda)z] dz, \quad (5)$$

- где z — координата, отсчитываемая от поверхности вглубь полупроводника;
 z_c — центр тяжести области рассеяния энергии электронами пучка;
 $\Delta p(z, z_0)$ — распределение по глубине z генерированных в полупроводнике неосновных носителей заряда (ННЗ) после их диффузии от планарного источника, находящегося на глубине z_0 ;
 l_s — толщина приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда;
 $\alpha(\lambda)$ — коэффициент поглощения излучения;
 L — диффузионная длина ННЗ.
 С учетом выражения (5) запишем (1) в следующем виде

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[(I_i - I(E_0^i, \theta)) \right]^2. \quad (6)$$

Оценка параметров функциональной зависимости (6) приводит к системе уравнений вида (2). В связи с нелинейностью уравнений системы и довольно сложным видом исследуемой функциональной зависимости задачу идентификации параметров решают обычно численно.

Результаты и их обсуждение

Анализировалась зависимость функционала (6) от диффузионной длины L ННЗ и толщины l_s приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, для хорошо изученного полупроводникового материала — GaAs. Целью исследования являлось определение такого начального приближения, которое позволяет получить корректные значения указанных параметров при их идентификации в соответствии с вышеуказанным. Анализ проводили следующим образом. Задавались значения $\bar{\theta}_0(L_0, l_{s0})$, которые считались действительными, точно измеренными для исследуемого материала. В этом случае функционал (6) принимает значение, равное нулю ($F = 0$). Затем исследовалась зависимость функционала $F(L, l_s)$ при условии $I_i = I(E_0^i, \theta_0)$, $i = \overline{1, n}$.

При расчетах использованы следующие параметры: атомный номер $A = 72$, заряд ядра $Z = 32$, плотность $\rho = 5,32 \text{ г·см}^{-3}$, коэффициент поглощения

$\alpha(\lambda) = 0$, что на практике выполняется для длинноволнового участка спектра, время жизни ННЗ $\tau = 10^{-8}$ с. Расчеты проводились с использованием ЭВМ на базе процессора INTEL Core 2 Duo E6300 с тактовой частотой каждого ядра 1,87 ГГц и 2 Гб ОЗУ. В связи с тем, что исследуемая функциональная зависимость имеет довольно сложный вид, алгоритм расчета значений функционала (5) обладает большой временной емкостью. Поэтому было выбрано только девять значений для энергии электронов пучка E_0 в диапазоне от 10 до 30 кэВ с шагом 2,5 кэВ. И даже в этом случае время расчета одного значения функционала составляет 6,53 с.

Результаты расчетов зависимости минимизируемого функционала МНК $F(L, l_s)$ от диффузионной длины ННЗ L и толщины l_s приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, для $L_0 = 1 \text{ мкм}$ и $l_{s0} = 0,065 \text{ мкм}$ приведены на рис. 1, а. Данный вид поверхности является типичным для малых значений исследуемых параметров ($l_s < 0,1 \text{ мкм}$ и $L \leq 1 \text{ мкм}$).

На рис. 1, б приведены результаты для $L_0 = 3 \text{ мкм}$ и $l_{s0} = 0,5 \text{ мкм}$. Данный вид поверхности является типичным для больших значений исследуемых параметров ($l_s < 0,5 \text{ мкм}$ и $L > 1 \text{ мкм}$). Угол обзора поверхности и, соответственно, расположение осей на рис. 1, а, б были выбраны так, чтобы наиболее наглядно отобразить характер изменения исследуемого функционала в каждом из случаев.

В обоих случаях в области малых значений диффузионной длины L ННЗ и толщины l_s приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, исследуемый функционал имеет несколько локальных экстремумов (см. рис. 1, а, б). Ширина этой области по оси L_0 зависит от выбора точки $\bar{\theta}_0(L_0, l_{s0})$.

С увеличением L_0 область становится шире, но даже для больших значений L ($L > 3 \text{ мкм}$) ширина не превышает 1,5 мкм по оси L . Вне указанной области значения функционала F изменяются монотонно, и поверхность имеет только один локальный минимум в точке $\bar{\theta}_0(L_0, l_{s0})$, которая и соответствует решению задачи идентификации параметров L и l_s .

Найденные локальные экстремумы в области малых значений параметров могут привести к неверным решениям задачи идентификации искомых параметров. Для определения того, какими свойствами должны обладать начальные приближения параметров для корректного решения задачи их идентификации, исследовались сечения поверхности $F = F(L, l_s)$ плоскостями $L = \text{const}$ и $l_s = \text{const}$ для $L_0 = 3 \text{ мкм}$ и $l_{s0} = 0,5 \text{ мкм}$.

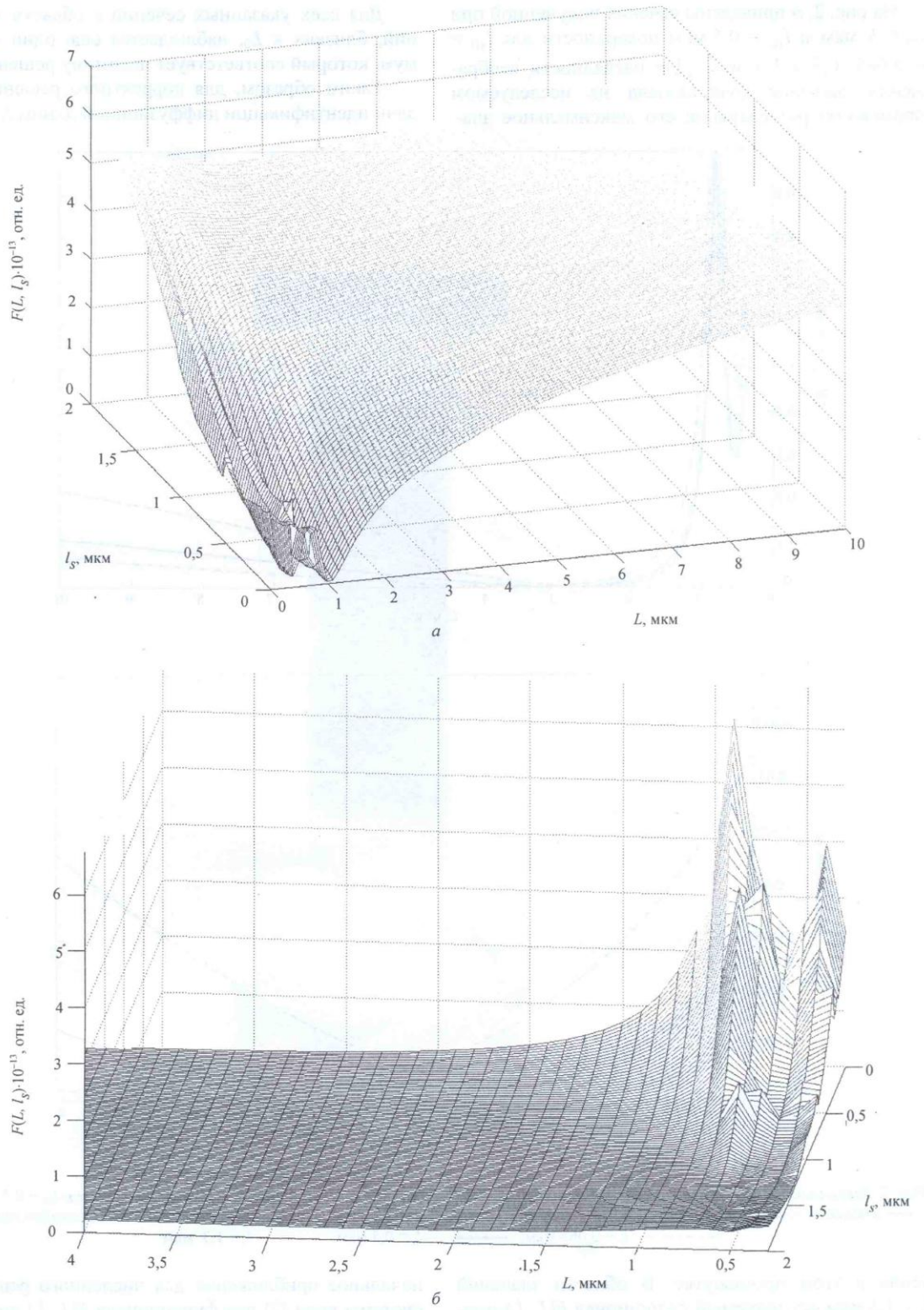


Рис. 1. Зависимость минимизируемого функционала F МНК от диффузионной длины L ННЗ и глубины l_s приповерхностной области:
 а — $L_0 = 1$ мкм, $l_{s0} = 0,065$ мкм; б — $L_0 = 3$ мкм, $l_{s0} = 0,5$ мкм

На рис. 2, а приведены сечения полученной при $L_0 = 3$ мкм и $l_{s0} = 0,5$ мкм поверхности для $l_{s0} = 0,065; 0,5$ и $1,3$ мкм. Для наглядности изображения значения функционала на исследуемом промежутке разделены на его максимальное зна-

Для всех указанных сечений в области значений, близких к L_0 , наблюдается еще один минимум, который соответствует искомому решению.

Таким образом, для корректного решения задачи идентификации диффузионной длины L ННЗ

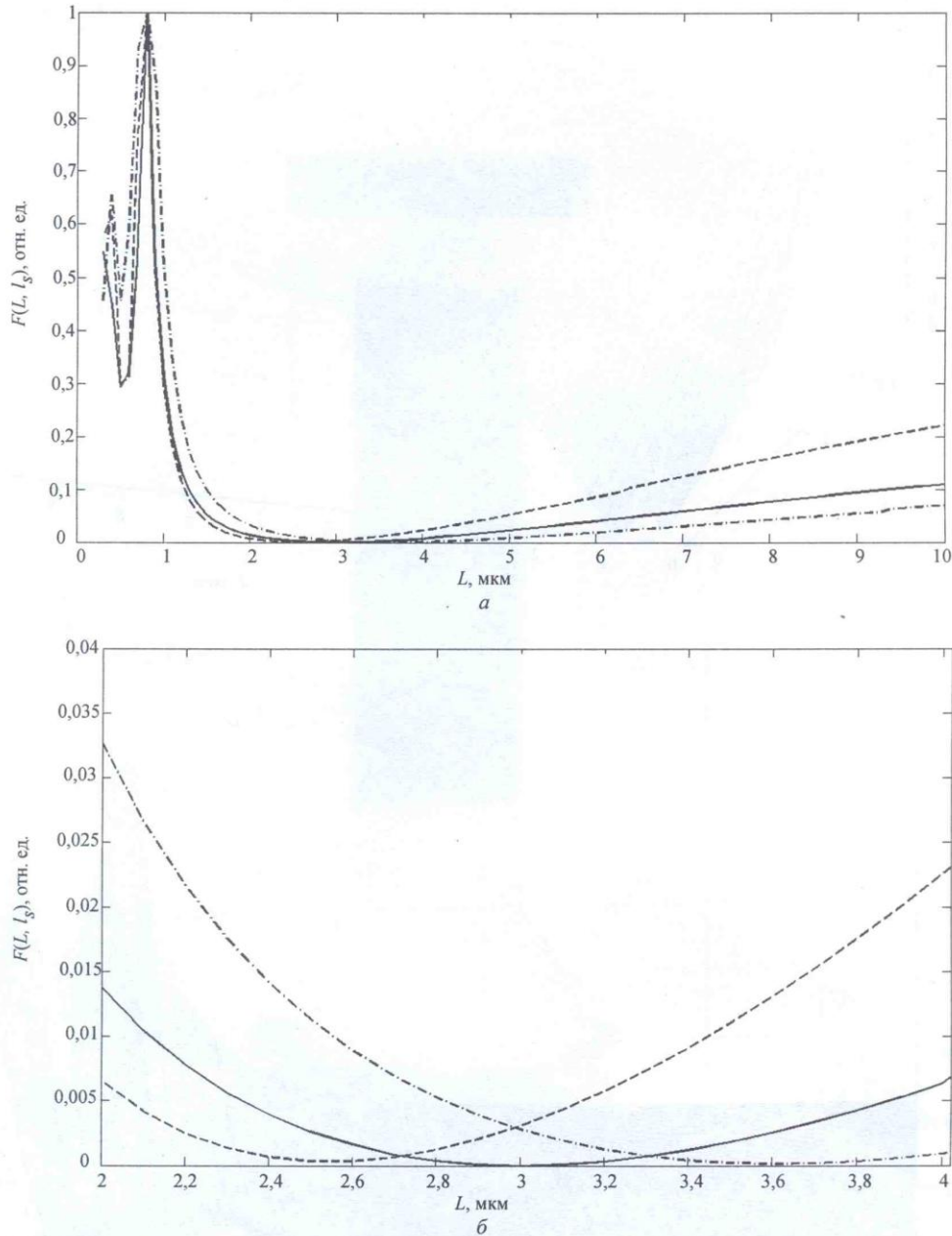


Рис. 2. Зависимость минимизируемого функционала F МНК от диффузионной длины L ННЗ при $L_0 = 3$ мкм и $l_{s0} = 0,5$ мкм: а — в области локальных экстремумов; б — в области его минимума, соответствующего решению задачи идентификации L ; — · — · — $l_s = 0,065$ мкм; — — — — $l_s = 0,5$ мкм; — — — — $l_s = 1,3$ мкм

чение в этом промежутке. В области значений $L < 1,5$ мкм исследуемый функционал $F(L, l_s)$ имеет несколько локальных экстремумов, среди которых есть как максимумы, так и минимумы.

начальное приближение для численного решения системы вида (2) для функционала $F(L, l_s)$ должно быть выбрано так, чтобы исключить из рассмотрения локальные минимумы в области других значений идентифицируемого параметра.

На рис. 2, б изображено местоположение минимума исследуемого функционала, определяющего решение задачи идентификации диффузионной длины L ННЗ, для $l_s = 0,065; 0,5$ и $1,3$ мкм. Здесь $L_0 = 3$ мкм и $l_{s0} = 0,5$ мкм.

Изображение, представленное на рис. 2, б, дано в увеличенном масштабе. В случае $l_s < l_{s0}$ указанный минимум смещается по оси L в область $L > L_0$, в противном случае в область $L < L_0$.

Таким образом, для точной идентификации L лучше выбирать начальное приближение для l_s в области $l_s \geq l_{s0}$, так как в этом случае смещение минимума может быть ограничено шириной области, содержащей локальные экстремумы для малых L .

На рис. 3 показаны сечения поверхности $F = F(L, l_s)$ плоскостями $L = 1,5; 3; 4$ и 5 мкм.

Для наглядности значение функционала для каждого сечения было разделено на максимальное

и следовало ожидать, влияние величины толщины l_s приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, на общую величину интенсивности КЛ-излучения, мало. Это связано с тем, что в случае $L \sim l_s$ ширина области, вносящей наибольший вклад в интенсивность монохроматической КЛ, гораздо больше, чем толщина l_s приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, в которой происходят более интенсивные процессы рекомбинации ННЗ, ведущие к уменьшению значения интенсивности КЛ.

Итак, корректное решение задачи идентификации l_s может быть получено в случае выбора начального приближения для диффузионной длины L ННЗ, как можно более близкого к L_0 .

Выводы

Рассмотрена проблема идентификации диффузионной длины неосновных носителей заряда и

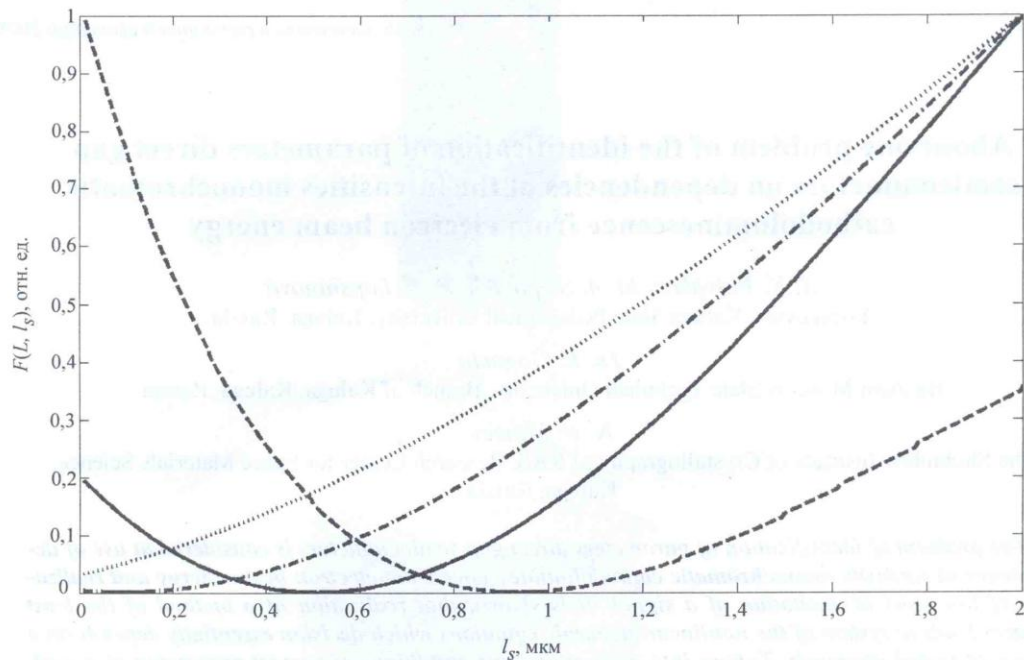


Рис. 3. Зависимость минимизируемого функционала F МНК от глубины l_s приповерхностной области при $L_0 = 3$ мкм и $l_{s0} = 0,5$ мкм: — — — — $L = 1,5$ мкм; — — — — $L = 3$ мкм; - · - · - $L = 4$ мкм; · · · · $L = 5$ мкм

значение функционала на исследуемом промежутке. В случае $L < L_0$ единственный минимум, соответствующий решению задачи идентификации l_s , смещается по оси l_s в область $l_s > l_{s0}$, в противном случае в область $l_s < l_{s0}$.

В последнем случае функционал не имеет минимума для всех положительных значений l_s , и, как

глубины приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда, в прямозонных полупроводниках при использовании зависимости интенсивности монохроматической катодолюминесценции от энергии электронов пучка и реализации низкого уровня возбуждения сигнала.

Показано, что использование подхода, характерного для метода наименьших квадратов, может

приводить к функционалу, имеющему несколько локальных минимумов. В таких случаях численное решение задачи идентификации и получение точных оценок идентифицируемых параметров требует корректного выбора начального приближения, как можно более близкого к искомому оптимальному значению. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации экспериментальных исследований в КЛ-микроскопии.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской обл. (грант № 07-02-96406).

Л и т е р а т у р а

1. Wittry D. B., Kyser D. F. // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. No. 1. P. 375—382.
2. Rao-Sahib T. S., Wittry D. B. // Ibid. 1969. V. 40. No. 9. P. 3745—3750.
3. Михеев Н. Н., Дорогова Ю. Г. // Электронная техника. Сер. Материалы. 1988. Вып. 4. С. 44—48.
4. Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. № 8. С. 1472—1482.
5. Гетманская И. В., Степович М. А. // Приборостроение-2002: Сб. трудов Междунар. науч.-техн. конф. — Винница: Винницкое представительство ВМУРоЛ "Украина", 2002. С. 209—213.
6. Варга Р. С. Функциональный анализ и теория аппроксимаций в численном анализе. — М.: Мир, 1974. — 128 с.
7. Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач. — М.: Наука, 1988. — 552 с.
8. Айвазян С. А., Енюков И. И. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных. — М.: Финансы и статистика, 1983. — 428 с.
9. Грешилов А. А., Стакун В. А., Стакун А. А. Математические методы построения прогнозов. — М.: Радио и связь, 1997. — 112 с.
10. Грешилов А. А. Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конъюнктный анализ. — М.: Радио и связь, 1990. — 320 с.
11. Смирнов Н. В., Дунин-Барковский И. В. Курс теории вероятностей и математической статистики для технических приложений. — М.: Наука, 1969. — 512 с.
12. Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А. // Изв. РАН. Сер. физ. 1992. Т. 56. № 3. С. 176.

Статья поступила в редакцию 6 сентября 2008 г.

About one problem of the identification of parameters direct gap semiconductors on dependencies of the intensities monochromatic cathodoluminescence from electron beam energy

A. N. Polyakov, M. A. Stepovich, E. N. Lapshinova
Tsiolkovsky Kaluga State Pedagogical University, Kaluga, Russia

Yu. E. Gagarin
Bauman Moscow State Technical University, Branch of Kaluga, Kaluga, Russia

N. N. Miheev
The Shubnikov Institute of Crystallography of RAS, Research Center for Space Materials Science, Kaluga, Russia

The problem of identification of parameters direct gap semiconductors is considered at use of dependence of intensity monochromatic cathodoluminescence from electron beam energy and realization of low level of excitation of a signal. It is shown, that realization of a method of the least squares leads to system of the nonlinear algebraic equations which decision essentially depends on a choice of initial approach. Taking into account it some conditions of correct processing of experimental data for identification of required parameters of semiconductors are defined.

PACS: 85.60.-q

* * *