

УДК. 519.85:537.311.32

Степанов П.Ю. (5 курс, каф. Прикладной математики),
Родионова Е.А. к.ф.-м.н., доц.

ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДЕФЕКТОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ

Высокоомные полупроводники и диэлектрики в настоящее время широко распространены в электронике, электротехнике и других отраслях науки и техники и поэтому являются чрезвычайно актуальным объектом исследования. Среди термоактивационных методов исследования диэлектрика выделяют в первую очередь токовые методы – термостимулированный ток проводимости (ТСТП), термостимулированная поляризация (ТСП) и термостимулированная деполяризация (ТСД).

Целью данной работы — создание на основе описанного далее алгоритма, универсальной программы для анализа экспериментальных результатов измерения тока ТСД, позволяющей без изменения структурной части проводить изменение содержательной части.

В общем случае двумерной задачи выражение для зависимости термостимулированного тока от температуры имеет вид [1]:

$$j(T) = \iint g(W, \omega) \cdot \xi(W, \omega, T) dW d\omega \quad (1)$$

где W_d - энергия релаксации, ω_d - частотный фактор ориентации диполей.

Уравнение типа (1) является интегральным уравнением Фредгольма первого рода. Для уравнений данного типа характерно отсутствие устойчивости его решения к малым изменениям правой части. Таким образом, задача термоактивационной спектроскопии (т.е. задача нахождения g) в данной постановке является некорректной по Адамару [2].

В данной работе предполагалось, что зависимость тока ТСД от температуры описывается с помощью модели Дебайи и поэтому в одном из частных случаев может быть записана в виде:

$$j^{pacч}(T_k) = j_k^{pacч} = a_0 \exp \left[a_1 \cdot d \left(\frac{1}{a_2} - \frac{1}{T_k} \right) \right] \cdot \exp \left[- \frac{a_1 d}{a_2} \int_{a_2}^{T_k} \exp \left(a_1 d \left(\frac{1}{a_2} - \frac{1}{z} \right) \right) dz \right], \quad (2)$$

где a_0 - высота максимума плотности тока ТСД, А/м²; a_1 - энергия активации, эВ; a_2 - температура максимума.

Вместо решения прямой задачи, предложено минимизировать квадрат отклонения теоретической кривой от полученных экспериментальных данных. Введем функцию:

$$\Phi(\bar{a}) = \Phi(a_1, a_2, a_3) = \sum_{k=1}^n (j_k^{pacч} - j_k)^2. \quad (3)$$

Получим в простейшем случае следующую задачу математического программирования:

$$\begin{aligned} & \min_{\bar{a} \in S} \Phi(\bar{a}) \\ & S = \{ \bar{a} \in R^3 : A_i \leq a_i \leq B_i; i = 1, \dots, 3 \} \end{aligned} \quad (4)$$

Решение данной задачи в разработанном пакете производилось с использованием методов условного градиента и метода штрафных функций. Для оценки величины погрешности

определения была использована величина линейной относительной ошибки.

Применение метода условного градиента обусловлено, прежде всего, тем, что ограничения рассматриваемой задачи МП в большинстве случаев – линейные (см.[2]). В ходе работы были произведены расчеты экспериментальных кривых с одним и несколькими максимумами, при этом были получены значения параметров с максимальной относительной погрешностью 7,5%. Были также произведены расчеты тех же кривых с использованием метода штрафных функций. Практическое совпадение результатов в обоих случаях позволяет судить о целесообразности применения данной методики для анализа экспериментальных данных.

Кроме того, было апробировано применение пакета для обработки данных, полученных в результате проведения серии однотипных экспериментов для данного материала. При этом была сделана попытка установления коридора для неизвестных величин параметров (в первую очередь, для энергии релаксации).

Выводы. В ряде случаев полученные результаты были признаны удовлетворительными и адекватно отражающими реально происходящие в диэлектрике физические явления. Тем не менее ясно, что применение данного подхода возможно лишь при решении узкого круга задач, описываемых с помощью модели Дебайи. При этом необходим тесный контакт с экспериментатором для уточнения характера явлений, происходящих в диэлектрике, а значит и для определения ограничений задачи в рассматриваемой постановке.

При этом был разработан пакет прикладных программных средств, который уже сегодня можно применять для обработки и анализа экспериментальных результатов измерения тока ТСД. В настоящее время проводится дальнейшая доработка пакета, и также исследование возможности использования для решения более широкого круга задач обработки экспериментальных данных измерения тока ТСД.

В ходе разработки пакета был также разработан ряд вспомогательных программных средств, облегчающих ученому-экспериментатору обработку полученных данных и их интерпретацию.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Гороховатский Ю.А., Бордовский Г.А. Термоактивационная токовая спектроскопия высокоомных полупроводников и диэлектриков. М.: НАУКА, 1991.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: НАУКА, 1979.