

УДК 517.927.2:517.925.44:538.93:537.533.9

О моделировании диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в многослойной полупроводниковой мишени

М.А. Степович^{1*}, Д.В. Туртин^{2**}, В.В. Калманович^{1***}

¹ Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, Калуга

² Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова,
Ивановский филиал, Иваново

[*m.stepovich@mail.ru](mailto:m.stepovich@mail.ru), [**turtin@mail.ru](mailto:turtin@mail.ru), [***v572264@yandex.ru](mailto:v572264@yandex.ru)

Аннотация

Изучены некоторые аспекты математического моделирования и качественного анализа стационарного процесса диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, обусловленного взаимодействием широкого пучка киловольтных электронов с многослойными планарными структурами конечной толщины с произвольным числом слоёв. Рассмотрены вопросы корректности этих математических моделей и приведён обзор результатов таких качественных исследований за последнее время.

Введение

В полупроводниковом материаловедении при проведении исследований материалов с использованием пучков киловольтных электронов наиболее часто (пожалуй, за исключением рентгено-спектрального микроанализа [1]) в качестве информативного регистрируется сигнал, обусловленный внешним воздействием и связанный с генерацией и диффузией в полупроводниковой мишени неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) и/или регистрируются сигналы, характеристики которых существенно зависят от ННЗ – например ток, наведённый электронным зондом или катодолюминесценция (КЛ) [2, 3]. Ранее вопросы количественной оценки влияния внешнего воздействия на распределение ННЗ в результате их диффузии в однородном полупроводнике в сочетании с рассмотрением единственности решения дифференциальных уравнений тепломассопереноса и корректности используемых математических моделей рассматривались весьма редко. Пожалуй, наиболее подробно такие задачи рассматривались для остро сфокусированных пучков: моделировалась нестационарная диффузия неравновесных ННЗ в методе времяпролётной КЛ полупроводников [4-7] и результаты математического моделирования сравнивались с результатами экспериментальных исследований [6-10]. Также для времяпролётной КЛ проводилась оценка влияния изменений во внешнем воздействии на распределение ННЗ после диффузии ННЗ, а для КЛ и излучательной рекомбинации в полупроводнике [11-14], в ряде работ проводилось доказательство единственности решения дифференциальных уравнений диффузии и оценка корректности рассматриваемых моделей [15-

17]. Для широких электронных пучков количественный анализ подобных задач не проводился, пожалуй, за исключением рассмотрения некоторых возможностей качественного анализа процессов диффузии ННЗ в многослойных планарных полупроводниковых структурах, образованных тонкими слоями в объёме толстой полупроводниковой подложки [18-22], а также рассмотрение корректности математической модели т.н. коллективной диффузии неосновных носителей заряда в однородной полупроводниковой мишени конечной толщины [23].

Постановка задачи

В настоящей работе методами математического моделирования продолжены исследования диффузионных процессов, обусловленных взаимодействием широких электронных пучков с полупроводниками. Объектами изучения являются математические модели, описывающие процессы диффузии неравновесных ННЗ, генерированных широким пучком киловольтных электронов в многослойных планарных структурах конечной толщины с произвольным числом слоёв.

Математическая модель одномерной диффузии неравновесных ННЗ, генерированных плоским бесконечно тонким источником, некоторые возможности её использования и оценки

Для тонкого планарного источника ННЗ, находящегося на глубине z_0 , $z_0 \in [0, \infty)$, рассматриваемая математическая модель может быть записана как [24, 25]:

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z, z_0)}{\tau} = -\rho(z) \delta(z - z_0) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$D \left. \frac{d \Delta p(z, z_0)}{dz} \right|_{z=0} = v_s \Delta p(0, z_0), \Delta p(\infty, z_0) = 0. \quad (2)$$

Здесь $\Delta p(z, z_0)$ – распределение ННЗ после их диффузии в однородной полупроводниковой мишени.

Искомое распределение по глубине неравновесных ННЗ $\Delta p(z)$ в однородной мишени может быть получено как

$$\Delta p(z) = \int_0^\infty \Delta p(z, z_0) dz_0. \quad (3)$$

Отметим, что данный подход может быть использован для нахождения распределений ННЗ в результате их диффузии как в однородных, так и в планарных двух- [26, 27] и трехслойных [28-30] полупроводниковых мишенях. В принципе решение может быть получено и для большего числа слоев многослойной полупроводниковой мишени, однако это сопряжено с существенными трудностями технического характера и потому этот способ к положительному результату не привёл: на основании рассмотрения решений для двух- и трёхслойных структур нам не удалось найти закономерность в формулах для решения дифференциальных уравнений и описать алгоритм решения задачи для произвольного числа слоёв многослойной структуры.

При наличии внешних воздействий на изучаемый полупроводник для математической модели будем иметь различные функции $\rho_1(z)$ и $\rho_2(z)$ в правой части дифференциального уравнения (1) и, соответственно, два различных его решения $\Delta p_1(z, z_0)$ и $\Delta p_2(z, z_0)$, а, следовательно, для $\Delta p_1(z)$ и $\Delta p_2(z)$. Можно показать, что для однородной мишени при выполнении условия

$$|\rho_2(z) - \rho_1(z)| \leq \varepsilon \quad (4)$$

справедливы оценки

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \varepsilon \tau / L$$

и

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq \varepsilon \tau.$$

Отсюда следуют существование и единственность решения дифференциального уравнения (1) с граничными условиями (2), т.е. корректность математической модели (1)-(3) и многослойных математических моделей, построенных на основе модели (1)-(3).

Математическая модель одномерной диффузии неравновесных ННЗ в многослойной планарной мишени конечной толщины, некоторые возможности её использования и оценки

Рассматриваемая математическая модель может быть записана как [32-34]

$$\frac{d}{dz} \left(D^{(i)}(z) \frac{d \Delta p^{(i)}(z)}{dz} \right) - \frac{\Delta p^{(i)}(z)}{\tau^{(i)}(z)} = -\rho^{(i)}(z), \quad i = \overline{1, n}, \quad (5)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} D^{(1)} \left. \frac{d \Delta p^{(1)}(z)}{dz} \right|_{z=0} = v_s^{(1)} \Delta p^{(1)}(0), \\ D^{(n)} \left. \frac{d \Delta p^{(n)}(z)}{dz} \right|_{z=l} = -v_s^{(n)} \Delta p^{(n)}(l). \end{cases} \quad (6)$$

Верхний индекс в скобках указывает номер слоя. Для многослойной структуры используются обозначения: $z_1 = 0$, $z_{n+1} = l$ – внешние границы полупроводника, z_2, z_3, \dots, z_n – координаты границ раздела слоев; $D^{(i)}$, $L^{(i)}$, $\tau^{(i)}$ – электрофизические параметры: коэффициент диффузии, диффузионная длина и время жизни ННЗ в i -м слое соответственно, при этом $L^{(i)} = \sqrt{D^{(i)} \tau^{(i)}}$. На границах полупроводника (при $z = 0$ и при $z = l$) приведенные скорости поверхностной рекомбинации $S^{(1)} = L^{(1)} v_s^{(1)} / D^{(1)}$, $S^{(n)} = L^{(n)} v_s^{(n)} / D^{(n)}$, где $v_s^{(1)}$ и $v_s^{(n)}$ – скорости поверхностной рекомбинации ННЗ в первом и n -ом слоях соответственно.

В отличие от модели (1)-(3), такой подход позволяет получить точное аналитическое решение для произвольного числа слоёв [32-34]. Для постоянных коэффициента диффузии и времени жизни ННЗ в каждом слое дифференциальное уравнение (5) может быть записано в виде

$$y_i''(z) - b_i y_i(z) = f_i(z), \quad i = \overline{1, n}, \quad (7)$$

с граничными условиями

$$y_1(0) = g_1, \quad (8)$$

$$y_i'(z_i) = a_i y_i(z_i), \quad i = \overline{1, n}, \quad (9)$$

$$y_i(z_i) = y_{i+1}(z_i) \quad i = \overline{1, n-1}. \quad (10)$$

В результате для рассматриваемой задачи получим:

1) решением (7) являются функции

$$y_i(z) = a_{1i} \exp(b_i z) + a_{2i} \exp(-b_i z) +$$

$$+ \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_i(t) \operatorname{sh}[b_i(z-t)] dt, i = \overline{1, n};$$

2) из граничных условий (9) и (10) получаем систему рекурсивных уравнений, позволяющих сделать заключение о существовании и единственности рассматриваемой задачи:

$$\begin{aligned} a_{1i}(b_i - a_i) \exp(b_i z_i) &= a_{2i}(a_i + b_i) \exp(-b_i z_i), \\ a_{1i} \exp(b_i z_i) + a_{2i} \exp(-b_i z_i) &= \\ a_{1,i+1} \exp(b_{i+1} z_i) + a_{2,i+1} \exp(-b_{i+1} z_i) + \\ + \frac{1}{b_i} \int_{z_{i+1}}^{z_i} f_{i+1}(t) \operatorname{sh}[b_{i+1}(z_i - t)] dt, i &= \overline{1, n-1}; \end{aligned}$$

3) решение задачи (7)-(10) существует и оно единственно;

4) предварительное рассмотрение показало, что, используя описанный подход, могут быть получены оценки, аналогичные полученным оценкам в задаче одномерной коллективной диффузии неравновесных ННЗ, генерируемых широким электронным пучком в однородной полупроводниковой мишени конечной толщины.

Заключение

Изучены математические модели стационарной диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерируемых широким электронным пучком в планарных многослойных полупроводниковых материалах.

Получены оценки решений рассматриваемых задач, позволяющие использовать их в электронно-зондовых технологиях.

Перспективы дальнейшего развития в данном направлении

По мнению авторов, основная проблема в развитии данного направления состоит в количественном описании правой части дифференциальных уравнений (5). Для многослойных структур, состоящих из слоёв материалов с близкими параметрами, прежде всего – близкими постоянными решёток слоёв – в правой части всех дифференциальных уравнений (5) (т.е. $\forall i = \overline{1, n}$) можно использовать одну и ту же функцию $\rho(z)$, рассчитываемую для параметров, характерных для подложки. Такой подход может быть использован, например, для твёрдых растворов замещения, широко используемых в полупроводниковой оптоэлектронике [35, 20-21, 36]. Однако в общем случае необходимо учитывать немонохроматичность электронного пучка после прохождения первого и каждого из последующих слоёв структуры [37-39], что само по себе до сих пор является непростой задачей.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-03-00271), а также РФФИ и правительства Калужской области (проект № 18-41-400001).

Литература

1. Llovet Xavier, Moy Aurelien, Pinar Philippe T., Fournelleb John H. Electron probe microanalysis: a review of recent developments and applications in materials science and engineering // Progress in Materials Science. 2021. V. 116. Art. No. 100673. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100673>
2. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применение / Под ред. Жу У., Уанга Ж.Л. М.: БИНОМ, 2013. 582 с.
3. Yacobi B.G., Holt D.B. Cathodoluminescence microscopy of inorganic solids. New York: Plenum Press, 1990. 354 p.
4. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Двумерная диффузия и катодолуминесценция экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале: результаты математического моделирования // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2012. № 11. С. 35-40.
5. Polyakov A.N., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Stepovich M.A. Two Dimensional Diffusion and Cathodoluminescence of Excitons Generated by an Electron Beam in a Semiconductor Material: Results of Mathematical Modelling // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2012. V. 6. No. 6. P. 901.
6. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Оценка значений электрофизических параметров полупроводниковых материалов по результатам измерений катодолуминесценции экситонов // Прикладная физика. 2012. № 6. С. 41-46.
7. Поляков А.Н., Степович М.А., Туртин Д.В. Трёхмерная диффузия экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале: результаты математического моделирования // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2015. № 12. С. 48-52. DOI: [10.7868/S0207352815120148](https://doi.org/10.7868/S0207352815120148)
8. Polyakov A.N., Stepovich M.A., Turtin D.V. Three-Dimensional Diffusion of Excitons Generated by an Electron Beam in a Semiconductor Material: Results of Mathematical Modeling // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2015. V. 9. No. 5. P. 1251-1255. DOI: [10.1134/S1027451015060361](https://doi.org/10.1134/S1027451015060361)
9. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Катодолуминесцентные экспериментальные исследования транспорта экситонов в нитриде галлия // Известия РАН. Серия физическая. 2012. Т. 76. № 9. С. 1082-1085.

10. Polyakov A.N., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Stepovich M.A. Experimental Cathodoluminescence Studies of Exciton Transport in Gallium Nitride // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*. 2012. V. 76. No. 9. P. 970-973.
11. Polyakov A.N., Smirnova A.N., Stepovich M.A., Turtin D.V. Qualitative properties of a mathematical model of the diffusion of excitons generated by electron probe in a homogeneous semiconductor material // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2018. V. 39. No. 2. P. 259-262. DOI: 10.1134/S199508021802021X.
12. Туртин Д.В., Серегина Е.В., Степович М.А. Качественный анализ одного класса дифференциальных уравнений теплопереноса в конденсированном веществе // *Проблемы математического анализа: Межвузовский сборник*. 2020. Вып. 104. С. 149-156.
13. Turtin D.V., Seregina E.V., Stepovich M.A. Qualitative Analysis of a Class of Differential Equations of Heat and Mass Transfer in a Condensed Material // *Journal of Mathematical Sciences (United States)*. 2020. V. 250. Issue 1. P. 166-174. DOI: 10.1007/s10958-020-05008-4
14. Туртин Д.В., Степович М.А., Калманович В.В. // *Таврический вестник информатики и математики*. 2020. № 1 (46). С. 92-107. DOI: 10.37279/1729-3901
15. Stepovich, Mikhail A., Turtin Dmitry V., Seregina Elena V., Kalmanovich Veronika V. On the correctness of mathematical models of time-of-flight cathodoluminescence of direct-gap semiconductors // *ITM Web of Conferences*. 2019. V. 30. Art. No. 07014. DOI: <https://doi.org/10.1051/itmconf/20193007014>
16. Stepovich M.A., Turtin D.V., Seregina E.V., Polyakov A.N. On the qualitative characteristics of a two-dimensional mathematical model of diffusion of minority charge carriers generated by a low-energy electron beam in a homogeneous semiconductor material // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2019. V. 1203. Art. No. 012095. DOI: 10.1088/1742-6596/1203/1/012095
17. Turtin D.V., Stepovich M.A., Kalmanovich V.V., Seregina E.V. The Use of the Hankel Transform to Solve Nonstationary Diffusion Problem // *Journal of Mathematical Sciences (United States)*. 2021. V. 255. No. 6. P. 773-778. DOI: 10.1007/s10958-021-05414-2
18. Серегина Е.В., Калманович В.В., Степович М.А. О моделировании распределений неосновных носителей заряда, генерированных широким электронным пучком в многослойных планарных полупроводниковых структурах // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2020. № 7. С. 69-74. DOI: 10.31857/S102809602007016X
19. Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Stepovich M.A. On Modeling the Distributions of Minority Charge Carriers Generated by a Wide Electronic Beam in Planar Multilayer Semiconductor Structures // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2020. V. 14. No. 4. P. 713-717. DOI: 10.1134/S1027451020040163.
20. Калманович В.В., Серегина Е.В., Степович М.А. Математическое моделирование явлений теплопереноса, обусловленных взаимодействием электронных пучков с многослойными планарными полупроводниковыми структурами // *Известия РАН. Серия физическая*. 2020. Т. 84. № 7. С. 1020-1026. DOI: 10.31857/S0367676520070133
21. Kalmanovich V.V., Seregina E.V., Stepovich M.A. Mathematical Modeling of Heat and Mass Transfer Phenomena Caused by Interaction between Electron Beams and Planar Semiconductor Multilayers // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2020. V. 84. No. 7. P. 844-850. DOI: 10.3103/S1062873820070138
22. Stepovich M.A., Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Filippov M.N. On some problems of mathematical modeling of diffusion of non-equilibrium minority charge carriers generated by kilovolt electrons in semiconductors // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2021. V. 1740. Art. No. 012035. DOI: 10.1088/1742-6596/1740/1/012035
23. Степович М.А., Туртин Д.В., Калманович В.В. О корректности математической модели коллективной диффузии неосновных носителей заряда в однородной полупроводниковой мишени конечной толщины // *Научные труды Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского. Естественные и технические науки*. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2021. С. 219-225.
24. Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А. Использование модели независимых источников для расчета распределений неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком // *Известия РАН. Серия физическая*. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317-1322.
25. Belov A.A., Petrov V.I., Stepovich M.A. Model of independent sources used in calculation of minority charge carriers generated by electron beam in semiconductor // *Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Ser. Fizicheskaya*. 2002. V. 66. No. 9 P. 1317-1323.
26. Степович М.А., Снопова М.Г., Хохлов А.Г. Использование модели независимых источников для расчёта распределения неосновных носителей заряда, генерированных в двухслойном полупроводнике электронным пучком // *Прикладная физика*. 2004. № 3. С. 61-65.
27. Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G. Model of independent sources used for calculation of distribution of minority charge carriers generated in two-layer semiconductor by electron beam // *Proc. SPIE*. 2004. V. 5398. P. 159-165.
28. Снопова М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А. Анализ модели распределений неосновных носителей заряда, генерированных в трехслойной полупроводниковой

структуре широким электронным пучком // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. № 7. С. 1-6.

29. Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A. Analysis of a Model of Minority Charge-Carrier Distributions Generated in a Three-Layer Semiconductor Structure by a Wide Electron Beam // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2007. V. 1. No. 4. P. 406-410.

30. Burylova I. V., Petrov V. I., Snopova M. G., Stepovich M. A. Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multi-layer semiconducting structure by a wide electron beam // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. Вып. 4. С.458-461.

31. Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A. Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multi-layer semiconducting structure by a wide electron beam // Semiconductors. 2007. V. 41. No. 4. P.444-447. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063782607040161>

32. Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. О возможности приложения аппарата Берса к моделированию процессов тепломассопереноса, обусловленного электронами в планарной многослойной среде // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017. № 10. С. 105-110. DOI: 10.7868/S020735281710016X

33. Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., Stepovich M.A. On the Possibility of Applying the Bers Apparatus to Modeling the Processes of Heat and Mass Transfer Caused by Electrons in a Planar

Multilayer Medium // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2017. V. 11. Issue 5. P. 1096-1100. DOI: 10.1134/S1027451017050263

34. Stepovich M.A., Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Filippov M.N. On some problems of mathematical modeling of diffusion of non-equilibrium minority charge carriers generated by kilovolt electrons in semiconductors // Journal of Physics: Conf. Series. 2021. V. 1740. Art. No. 012035. DOI: 10.1088/1742-6596/1740/1/012035

35. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фоторезисторы и фотоприемные устройства. М.: Физматкнига, 2012. 368 с.

36. Seregina E.V., Stepovich M.A., Kalmanovich V.V. Modeling of heating in the epitaxial structure $Cd_xHg_{1-x}Te/CdTe$ with the projection least squares method // Journal of Physics: Conf. Series. 2019. V. 1163. Art. No. 012013. DOI: 10.1088/1742-6596/1163/1/012013.

37. Михеев Н.Н., Степович М.А., Петров В.И. Энергетический спектр электронов, прошедших плёночную мишень // Известия РАН. Серия физическая. 1993. Т. 57. № 9. С. 7-11.

38. Mikheev N.N., Stepovich M.A., Petrov V.I. Energy Spectrum of Electrons Passing through a Film Target // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 1993. V. 57. No. 9. P. 1494-1497.

39. Mikheev N.N., Stepovich M.A. The Energy Spectrum of Electrons Passing through a Film Targets and some of its Applications to Electron Beam Engineering // Materials Science and Engineering B. 1995. V. 32. Nos. 1-4. P. 11-16.

Степович М.А., Туртин Д.В., Калманович В.В. О моделировании диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в многослойной полупроводниковой мишени. Изучены некоторые аспекты математического моделирования и качественного анализа стационарного процесса диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, обусловленного взаимодействием широкого пучка киловольтных электронов с многослойными планарными структурами конечной толщины с произвольным числом слоёв. Рассмотрены вопросы корректности этих математических моделей и приведён обзор результатов таких качественных исследований за последнее время.

Ключевые слова: математическое моделирование, широкий электронный пучок, полупроводниковая мишень, взаимодействие, неравновесные неосновные носители заряда, диффузия, корректность.

Stepovich M.A., Turtin D.V., Kalmanovich V.V. On modeling the diffusion of nonequilibrium minority charge carriers generated by an electron beam in a multilayer semiconductor target. Some aspects of mathematical modeling and qualitative analysis of the stationary diffusion process of nonequilibrium minority charge carriers caused by the interaction of a wide beam of kilovolt electrons with multilayer planar structures of finite thickness with an arbitrary number of layers are studied. The questions of the correctness of these mathematical models are considered and an overview of the results of such qualitative studies in recent years is given.

Key words: mathematical modeling, wide electron beam, semiconductor target, interaction, nonequilibrium minority charge carriers, diffusion, correctness.

Статья поступила в редакцию 22.11.2021
Рекомендована к публикации профессором Федяевым О. И.