ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2020, том 84, № 5, с. 700–703

УДК 519.6,51-73,537.533.9

О ВОЗМОЖНОСТИ ПРИЛОЖЕНИЯ МАТРИЧНОГО МЕТОДА К МОДЕЛИРОВАНИЮ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ШИРОКИМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ В ПЛАНАРНОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ

© 2020 г. М. А. Степович[1], В. В. Калманович[1, *], Е. В. Серегина[2]

[1]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского", Калуга, Россия*

[2]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)", Калужский филиал, Калуга, Россия*

**E-mail: v572264@yandex.ru*

Поступила в редакцию 02.12.2019 г.
После доработки 23.12.2019 г.
Принята к публикации 27.01.2020 г.

Изложены результаты изучения возможностей приложения аналитического матричного метода к моделированию диффузии неравновесных неосновных носителей заряда и последующей катодолюминесценции, обусловленных широким электронным пучком в планарной многослойной структуре полупроводниковой оптоэлектроники с произвольным числом слоев. Предложенный метод позволяет проводить расчеты с точностью, достаточной для практического использования в электронно-зондовых технологиях.

DOI: 10.31857/S0367676520050397

ВВЕДЕНИЕ

Для материалов полупроводниковой оптоэлектроники одним из наиболее информативных является катодолюминесцентное (КЛ) излучение, интенсивность I которого на фиксированной длине волны пропорциональна концентрации $c(M(x,y,z),t)$ неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) в точке $M(x,y,z)$ мишени в момент времени t [1]. Для стационарного случая облучения полупроводниковой мишени, реализующегося в стандартной методике КЛ измерений, можно считать, что

$$I \approx \iiint\limits_V c(x,y,z)\exp(-\alpha z)dxdydz.$$

Здесь α – коэффициент поглощения монохроматического КЛ излучения в объеме полупроводника. В прямоугольной декартовой системе координат оси x и y обычно располагают на плоской поверхности мишени, а ось z направляют вглубь полупроводника.

При использовании широкого электронного пучка для возбуждения КЛ излучения задача вычисления распределений генерированных электронами неравновесных ННЗ и интенсивности КЛ, возникающей при излучательной рекомбинации ННЗ, сводится к одномерной. В то же время даже для одномерной модели трудности реализации необходимых вычислений позволили моделировать КЛ лишь в двухслойных [2–4] и трехслойных [5] структурах.

В настоящей работе рассмотрены некоторые возможности использования аналитического матричного метода для моделирования распределений ННЗ в многослойных полупроводниковых структурах и обсуждены некоторые возможности использования полученных результатов для моделирования КЛ, возбуждаемой в таких структурах.

Изначально матричный метод, предлагаемый к рассмотрению для расчетов КЛ, был описан применительно к задачам теплопроводности в составных пластинах в [6]. Он сводился к последовательному умножению функциональных матриц, описывающих процесс теплопроводности в рассматриваемых объектах. Однако для решения задач тепломассопереноса в многослойных средах он не получил распространения, возможно из-за того, что формулы аналитического решения получались исключительно сложными. Системы символьных вычислений в то время только начинали зарождаться и потому численные методы были предпочтительными. В частности, в [6] авторы указывают на ценность матричного метода, если использовать численные значения элементов матриц.

Ранее в наших работах аналитический матричный метод был применен совместно с аппаратом обобщенных степеней Берса [7], что позволило успешно описать в единой форме процесс тепломассопереноса в многослойных средах с различной геометрией (плоских, осесимметричных и слоев с центральной симметрией) [8–10]. Отметим, что как численный, матричный метод применялся ранее для нахождения распределений ННЗ, генерированных широким электронным пучком, после их диффузии в однородном полупроводнике [11].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В случае одномерной диффузии в конечный полупроводник вдоль оси OZ, перпендикулярной поверхности n-слойной полупроводниковой структуры $(z \in [0, l])$, распределение ННЗ по глубине находится как решение дифференциального уравнения

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

с граничными условиями

$$\left. D^{(1)}\frac{d\Delta p^{(1)}(z)}{dz}\right|_{z=0} = \nu_s^{(1)}\Delta p^{(1)}(0), \qquad \left. D^{(n)}\frac{d\Delta p^{(n)}(z)}{dz}\right|_{z=l} = -\nu_s^{(n)}\Delta p^{(n)}(l). \tag{2}$$

Верхний индекс в скобках указывает номер слоя. Для многослойной структуры обозначим: $z_1 = 0$, $z_{n+1} = l$ – внешние границы полупроводника, $z_2, z_3, \ldots, z_n$ – координаты границ раздела слоёв; $D^{(i)}$, $L^{(i)}$, $\tau^{(i)}$ – 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 $S^{(1)} = L^{(1)}\nu_s^{(1)}/D^{(1)}$, $S^{(n)} = L^{(n)}\nu_s^{(n)}/D^{(n)}$, где $\nu_s^{(1)}$ и $\nu_s^{(n)}$ – скорости поверхностной рекомбинации ННЗ в первом и n-ом слоях соответственно. Функция $\Delta p^{(i)}(z)$ описывает распределение по глубине в i-м слое неравновесных ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием, после их диффузии в полупроводнике. Функция $\rho^{(i)}(z)$ – зависимость от координаты плотности ННЗ, генерированных электронным пучком в полупроводниковой мишени до их диффузии. Для широкого электронного пучка $\rho^{(i)}(z)$ может быть найдена из выражения для плотности энергии электронного пучка $\rho^{*(i)}(z)$, выделяемой в мишени в единицу времени до начала процесса диффузии [12–14].

АЛГОРИТМ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ МАТРИЧНЫМ МЕТОДОМ

Введем вектор-столбцы V, W и матрицу K на каждом слое [8–11]:

$$V^{(i)}(z) = \begin{pmatrix} \Delta p^{(i)}(z) \\ J^{(i)}(z) \end{pmatrix}, \quad W^{(i)}(z) = \begin{pmatrix} w^{(i)}(z) \\ -D^{(i)}\dfrac{dw^{(i)}(z)}{dz} \end{pmatrix},$$

$$K^{(i)}(z, z_i) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch}\dfrac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & -\sqrt{\dfrac{\tau^{(i)}}{D^{(i)}}}\operatorname{sh}\dfrac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \\ -\sqrt{\dfrac{D^{(i)}}{\tau^{(i)}}}\operatorname{sh}\dfrac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & \operatorname{ch}\dfrac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \end{pmatrix},$$

где $J^{(i)}(z) = -D^{(i)}\Delta p^{(i)}(z)$ – поток, $w^{(i)}(z)$ – некоторое частное решение уравнения (1) для i-го слоя. Тогда решение уравнения (1) для i-го слоя при известных $\Delta p^{(i)}(z_i)$ и $J^{(i)}(z_i)$ имеет вид

$$V^{(i)}(z) = K^{(i)}(z, z_i)\left(V^{(i)}(z_i) - W^{(i)}(z_i)\right) + W^{(i)}(z), \quad z_i \le z \le z_{i+1}. \tag{3}$$

Применяя с первого слоя последовательно формулу (3) и, считая контакт слоев идеальным, т.е. $V^{(i)}(z_{i+1}) = V^{(i+1)}(z_{i+1})$, получим

$$V^{(i)}(z) = L^{(i,1)}(z, z_1)V^{(1)}(z_1) + \sum_{j=1}^{i} L^{(i,j)} \times (z, z_j)\left(W^{(j-1)}(z_j) - W^{(j)}(z_j)\right) + W^{(i)}(z), \tag{4}$$

где $W^{(0)}(z_1) = 0$, $L^{(i,k)}(z, z_j) = K^{(i)}(z, z_i)K^{(i-1)}(z_i, z_{i-1})\ldots \ldots K^{(k)}(z_{k+1}, z_k)$, $i \ge k$, $z_i \le z \le z_{i+1}$.

В конечной точке системы слоев согласно (4) получим

$$V^{(n)}(z_{n+1}) = L^{(n,1)}(z_{n+1}, z_1)V^{(1)}(z_1) + \sum_{k=1}^{n} L^{(n,k)}(z_{i+1}, z_k)\left(W^{(k-1)}(z_k) - W^{(k)}(z_k)\right) + W^{(n)}(z_{n+1}). \tag{5}$$

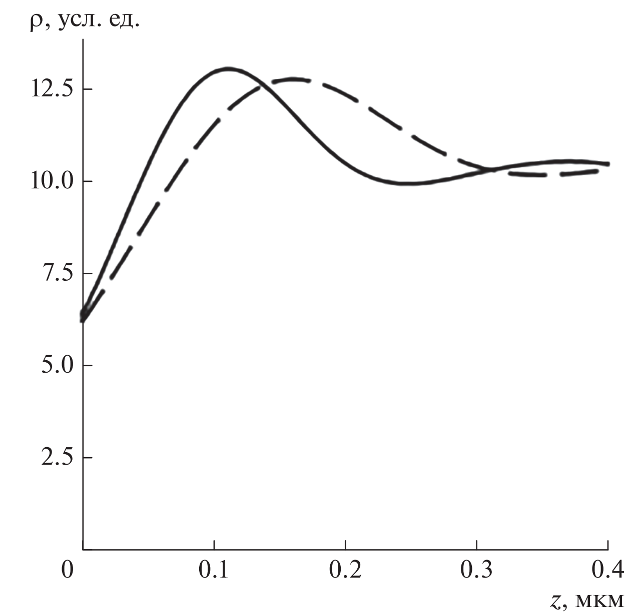

Рис. 1. Распределение по глубине относительных величин плотности потерь энергии электронами пучка, рассчитанные для однородных монокристаллических $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ (сплошная кривая) и CdTe (пунктирная кривая). Энергия электронов пучка 20 кэВ.

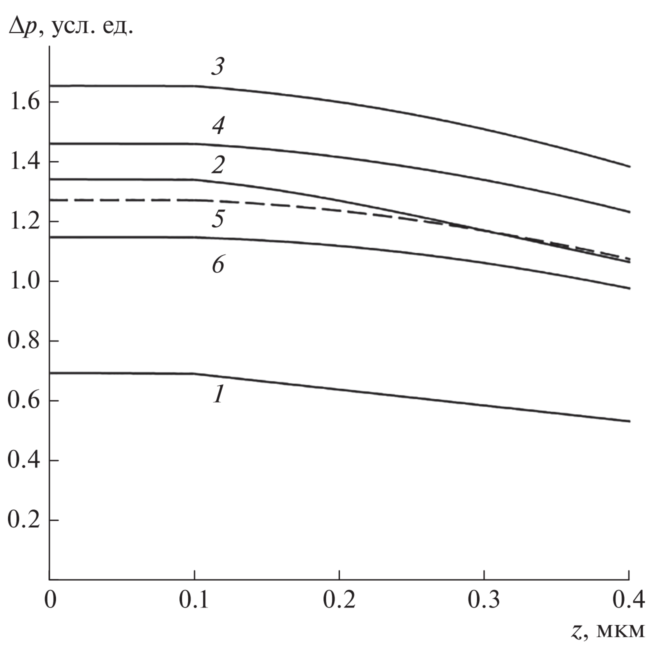

Рис. 2. Распределения ННЗ, генерированных электронным пучком в двухслойной полупроводниковой структуре $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te/CdTe$ толщиной 0.4 мкм (0.1 мкм – $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ и 0.3 мкм – CdTe) для различных энергий электронов пучка: 5 кэВ (кривая *1*), 10 (*2*), 15 (*3*), 20 (*4*), 25 (*5*), 30 (*6*). Результаты расчетов аналитическим методом и численным методом практически совпадают и потому на рисунке отдельно не выделены.

Формула (5) связывает значения потенциала $\Delta p^{(i)}(z)$ и потока $J^{(i)}(z)$ в первой и последней точке системы слоев, что позволяет в общем случае сводить решение краевой задачи первого, второго или третьего типа при любом конечном числе слоев к решению системы двух линейных уравнений с двумя неизвестными, после чего рассчитывается КЛ от многослойной структуры.

Отметим, что для аналитического решения рассматриваемой задачи диффузии ННЗ в многослойной среде необходимо знать частное решение уравнения (1). В случае, если частное решение найти не удается или оно имеет очень сложный вид, можно по данному алгоритму получить приближенное решение задачи (1), (2), аппроксимировав правую часть, например линейными функциями [11].

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Некоторые возможности предлагаемого метода показаны на рис. 1–3. На рис. 1 представлены результаты расчетов по глубине относительных величин плотности потерь энергии электронами пучка, рассчитанные для однородных монокристаллических $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ (кривая *1*) и CdTe (кривая *2*) при энергии электронов пучка 20 кэВ. На рис. 2 представлены распределения ННЗ, генерированных электронным пучком в двухслойной полупроводниковой структуре $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te/CdTe$ толщиной 0.4 мкм (0.1 мкм – $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ и

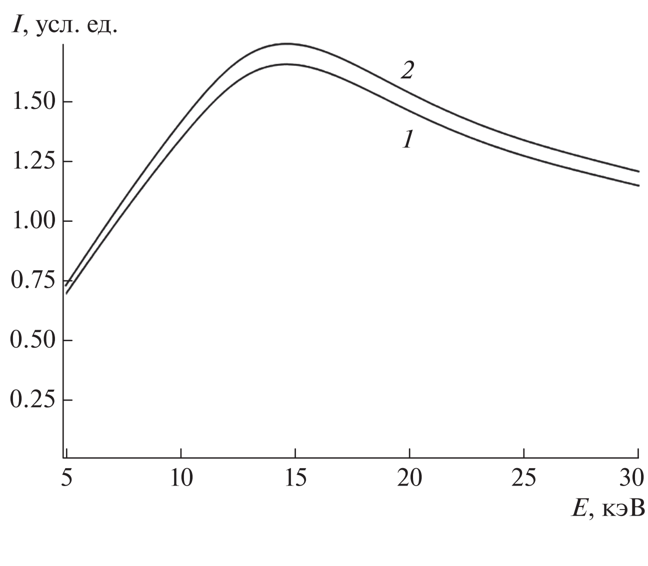

Рис. 3. Зависимости интенсивности монохроматической КЛ твердого раствора $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ толщиной 0.1 мкм двухслойной структуры $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te/CdTe$ от энергии *E* электронов пучка для различных коэффициентов поглощения в пленке КРТ: 10 (кривая *2*) и 10^4 см$^{-1}$ (кривая *1*).

0.3 мкм – CdTe) для различных энергий электронов пучка: 5 (кривая *1*), 10 (*2*), 15 (*3*), 20 (*4*), 25 (*5*) и 30 кэВ (*6*). Расчеты проведены для электрофизических параметров, характерных для твердого раствора кадмий-ртуть-теллур (КРТ). Результаты расчетов аналитическим методом и численным методом конечных разностей практически совпадают и потому на рисунке не выделены. На рис. 3 представлены зависимости интенсивности монохроматической КЛ твердого раствора $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ толщиной 0.1 мкм двухслойной структуры $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te/CdTe$ от энергии электронов пучка для различных коэффициентов поглощения в пленке КРТ: 10 (кривая *2*) и 10^4 $см^{-1}$ (кривая *1*).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описаны результаты изучения возможностей приложения аналитического матричного метода к моделированию КЛ, обусловленной широким электронным пучком в планарной многослойной полупроводниковой структуре с произвольным числом слоев. Предложенный матричный метод позволяет проводить расчеты распределений неравновесных неосновных носителей заряда и монохроматической КЛ с точностью, достаточной для практического использования в электронно-зондовых технологиях.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Степович М.А.* Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники. Дис. ... докт. физ.-мат. наук. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 351 с.
2. *Bresse J.F.* // Mater. Sci. Engin. 1996. V. B 24. № 1. P. 199.
3. *Хохлов А.Г., Петров В.И., Снопова М.Г., Степович М.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. иссл. 2005. № 9. С. 64; *Khokhlov A.G., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A.* // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2005. № 9. P. 64.
4. *Snopova M.G., Khokhlov A.G., Mikheev N.N., Stepovich M.A.* // Proc. SPIE. 2006. V. 6278. Art. № 627800.
5. *Снопова М.Г., Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2008. Т. 72. № 11. С. 1534; *Snopova M.G., Mikheev N.N., Petrov V.I., Stepovich M.A* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2008. V. 72. № 11. P. 1451.
6. *Carslaw H.S., Jaeger J.C.* Conduction of heat in solids. Oxford: Oxford University Press, 1959. 517 p.
7. *Bers L., Gelbart A.* // Trans. Am. Math. Soc. 1944. V. 56. P. 67.
8. *Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А.* // Поверхность. Рент., синхротр. нейтр. иссл. 2017. № 10. С. 105; *Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., and Stepovich M.A.* // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2017. V. 11. № 5. P. 1096.
9. *Калманович В.В., Степович М.А.* // Пробл. разраб. персп. микро- и наноэл. сист.-2018. Сб. тр. М.: ИППМ РАН, 2018. С. 194.
10. *Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Серегина Е.В., Степович М.А.* // Вопр. атом. науки и тех. Яд-реакт. констр. 2018. № 3. С. 158.
11. *Kalmanovich V.V., Seregina E.V., Stepovich M.A.* // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1163. Art. № 012012.
12. *Михеев Н.Н., Никоноров И.М., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 2. С. 274; *Mikheev N.N., Nikonorov I.M., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // Bull. Acad. Sci. USSR. Phys. 1990. V. 54. № 2. P. 82.
13. *Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. № 8. С. 1474; *Mikheev N.N., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // Bull. Acad. Sci. USSR. Phys. 1991. V. 55. № 8. P. 1.
14. *Михеев Н.Н., Степович М.А.* // Завод. лаб. диагн. матер. 1996. Т. 62. № 4. С. 20; *Mikheev N.N., Stepovich M.A.* // Indust. Lab. 1996. V. 62. № 4. P. 221.