

УДК 519.6:51-73:537.533.9

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЙ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ С МНОГОСЛОЙНЫМИ ПЛАНАРНЫМИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ СТРУКТУРАМИ

© 2020 г. В. В. Калманович¹ *, Е. В. Серегина², М. А. Степович¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского”, Калуга, Россия

²Федеральное 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 18.02.2020 г.

После доработки 16.03.2020 г.

Принята к публикации 27.03.2020 г.

Изложен аналитический матричный метод математического моделирования явлений теплопереноса, обусловленного взаимодействием широких электронных пучков с многослойными планарными полупроводниковыми структурами. Рассмотрены некоторые возможности использования метода для оценки распределений неравновесных неосновных носителей заряда в многослойных планарных полупроводниковых структурах. Показано, что предложенный матричный метод позволяет проводить расчеты распределений неравновесных неосновных носителей заряда за сравнительно короткое время с точностью, достаточной для практического использования в электронно-зондовых технологиях.

DOI: 10.31857/S0367676520070133

ВВЕДЕНИЕ

Одними из немногих методов, позволяющими реализовать бесконтактную неразрушающую диагностику твердых тел, являются электронно-зондовые методы, основанные на использовании пучков киловольтных электронов низких (примерно до 8–10 кэВ) или средних (от 8–10 до 50 кэВ) энергий. Регистрация информативных сигналов, возбуждаемых в мишени, и сравнение экспериментальных данных с математической моделью изучаемого явления позволяют идентифицировать параметры мишени, которые весьма сложно или даже невозможно определить другими методами [1, 2]. Однако математическое моделирование процессов взаимодействия киловольтных электронов с конденсированным веществом нередко сопряжено с проблемами как чисто математического характера, так и с трудностями проверки разрабатываемых моделей. В полупроводниковом материаловедении при проведении исследований материалов с использованием пучков киловольтных электронов наиболее часто (пожалуй, за исключением рентгеноспектрального микроанализа) в качестве информативного регистрируется

сигнал, связанный с генерацией и диффузией в полупроводниковой мишени неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) и/или регистрируются сигналы, характеристики которых существенно зависят от распределения ННЗ – например ток, наведенный электронным зондом или катодолюминесценция. При этом экспериментальное определение локальных характеристик мишени, облучаемой остро сфокусированным электронным пучком (электронным зондом), в области возбуждения локального сигнала сильно осложнено малым размером этой области (единицы микрометра и менее) [1–3]. Во многом задача электронно-зондовых исследований упрощается при использовании широкого электронного пучка. Это позволяет свести задачу моделирования распределений генерированных киловольтными электронами неравновесных ННЗ к одномерной. Не менее важно и то, что при таких исследованиях реализуется низкий уровень возбуждения изучаемых процессов, что позволяет проще описать их количественно. Такие исследования весьма актуальны для планарных структур, широко используемых в полупроводниковой микро- и нанoeлектронике.

В настоящей работе рассмотрены некоторые возможности аналитического матричного метода математического моделирования распределений неравновесных ННЗ в полупроводниковых структурах. Этот метод применительно к задачам теплопроводности в составных пластинах описан в [4]. Однако для решения задач теплопереноса в многослойных средах он не получил распространения, возможно, из-за того, что формулы аналитического решения в то время получались исключительно сложными, системы символьных вычислений в то время только начинали зарождаться и потому численные методы были предпочтительными. В работах [5, 6] применены близкие по своей идее методы к описанию явлений переноса на графах в системах контактирующих оболочек и тел вращения, в системах контактирующих стержней, где тепловые потоки определяются матрицей проводимости системы. Ранее в наших работах аналитический матричный метод, предложенный в [4], был применен совместно с аппаратом обобщенных степеней Берса [7–9], что позволило успешно описать в единой форме процесс теплопереноса в многослойных средах с различной геометрией: плоских, осесимметричных или слоев с центральной симметрией [10–13].

Отметим также, что, используя классические методы математического моделирования, ранее была решена задача нахождения распределений ННЗ в планарных двух- [14, 15] и трехслойных [16, 17] полупроводниковых структурах для случая постоянства всех электрофизических параметров внутри каждого слоя. В то же время, ввиду сложностей технического характера, распространить этот метод на произвольное число слоев не удалось.

В настоящей работе рассмотрены некоторые возможности использования матричного подхода для моделирования двухслойных полупроводниковых структур конечной толщины. Проведено сравнение аналитических результатов, полученных с использованием матричного метода, с результатами расчетов, полученных с помощью численного метода конечных разностей. Модельные расчеты проведены для электрофизических параметров, характерных для твердого раствора кадмий–ртуть–теллур–теллурид кадмия, широко используемого при производстве приборов инфракрасной техники [18, 19].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В случае одномерной диффузии в конечный полупроводник вдоль оси OZ , перпендикулярной поверхности двухслойной полупроводниковой структуры ($z \in [0, l]$), распределение ННЗ по глу-

бине находится как решение дифференциального уравнения

$$\frac{d}{dz} \left(D(z) \frac{d\Delta p(z)}{dz} \right) - \frac{\Delta p(z)}{\tau(z)} = -\rho(z) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} D_1 \frac{d\Delta p(z)}{dz} \Big|_{z=0} &= v_{s_1} \Delta p(0), \\ D_2 \frac{d\Delta p(z)}{dz} \Big|_{z=l} &= -v_{s_2} \Delta p(l). \end{aligned} \quad (2)$$

Для двухслойной структуры введем обозначения: $D_1, D_2, L_1, L_2, \tau_1, \tau_2$ – электрофизические параметры первого и второго слоев: коэффициенты диффузии, диффузионные длины и времена жизни ННЗ, соответственно; v_{s_1} и v_{s_2} – скорости поверхностной рекомбинации ННЗ в первом и втором слоях, а S_1 и S_2 – приведенные скорости поверхностной рекомбинации, соответственно, на поверхностях первого (при $z = 0$) и второго (при $z = l$) материалов. При этом $L_1 = \sqrt{D_1 \tau_1}$, $L_2 = \sqrt{D_2 \tau_2}$, и $S_1 = L_1 v_{s_1} / D_1$, $S_2 = L_2 v_{s_2} / D_2$. Функция $\Delta p(z)$ описывает распределение по глубине неравновесных ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием, после их диффузии в полупроводнике, при этом z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности облучаемой мишени вглубь полупроводника. Функция $\rho(z)$ – зависимость от координаты плотности ННЗ, генерированных электронным пучком в полупроводниковой мишени. Для широкого электронного пучка $\rho(z)$ может быть найдена из выражения для плотности энергии электронного пучка $\rho^*(z)$:

$$\begin{aligned} \rho^*(z) &= \frac{1,085(1-\eta)E_0}{\sqrt{\pi}z_{ms}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})} \times \\ &\times \left\{ \exp \left[-\left(\frac{z-z_{ms}}{z_{ms}} \right)^2 \right] + \frac{\eta}{1-\eta} \exp \left[-\left(\frac{z-z_{ss}}{z_{ss}} \right)^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3)$$

выделяемой в мишени в единицу времени до начала процесса диффузии [2, 20–22], делением $\rho^*(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары. Здесь E_0 – энергия электронного пучка, рассеянная в мишени в единицу времени, z_{ms} – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощенными мишенью; $z_{ss} = Z^{-1/3} z_{ms}$ – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, испытавшими в мишени рассеяние на большие углы и вышедшими из мишени, Z – атомный номер вещества мишени; η – коэффициент обратного рассеяния электронов пучка, $\eta = 0.024eZ^{1.67}/A$,

A – относительная атомная масса вещества мишени. Отметим, что для электронов с энергией E_0 [кэВ] значение z_{ms} для мишени плотности ρ_0 [г/см³] может быть определено из диффузионной модели [23]:

$$z_{ms} \text{ [МКМ]} = \frac{R^*}{2} \left[1 - \left(\frac{C\gamma}{1 + \gamma} \right)^2 \right],$$

$$R^* \text{ [МКМ]} = \frac{2.76 \cdot 10^{-2} A E_0^{5/3}}{\rho_0 Z^{8/9}} \times$$

$$\times \frac{(1 + 0.978 \cdot 10^{-3} E_0)^{5/3}}{(1 + 1.957 \cdot 10^{-3} E_0)^{1/3}}.$$

Здесь R^* – полный пробег электронов пучка в мишени.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Опишем кратко суть совместного применения аппарата обобщенных степеней Берса и аналитического матричного метода.

В общем виде одномерный стационарный процесс тепломассопереноса в многослойной среде может быть задан уравнением

$$D_2^{(i)} D_1^{(i)} \Phi^{(i)}(z) - m_i^2 \Phi^{(i)}(z) = \mu^{(i)}(z), \quad i = \overline{1, n}, \quad (4)$$

где потенциал $\Phi^{(i)}(z)$ – искомая функция, $D_1^{(i)} = a_1^{(i)}(z) d/dz$ и $D_2^{(i)} = a_2^{(i)}(z) d/dz$ – дифференциальные операторы, $a_1^{(i)}(z)$ и $a_2^{(i)}(z)$ – положительные функции, определенные физическими и геометрическими параметрами слоев, $\mu^{(i)}(z)$ – величина, пропорциональная объемной плотности энергии источников, i – номер слоя, который совпадает с номером левой координаты этого слоя. Поток задается формулой $J^{(i)}(z) = -D_1^{(i)} \Phi^{(i)}(z)$. В точке контакта слоев выполняются условия типа идеального контакта, т.е. справедливы условия непрерывности потенциала и потока:

$$\Phi^{(i)}(z_{i+1}) = \Phi^{(i+1)}(z_{i+1}),$$

$$J^{(i)}(z_{i+1}) = J^{(i+1)}(z_{i+1}), \quad i = \overline{1, n-1}. \quad (5)$$

Введем вектор-столбцы V, W и матрицу K

$$V^{(i)}(z) = \begin{pmatrix} \Phi^{(i)}(z) \\ J^{(i)}(z) \end{pmatrix}, \quad W^{(i)}(z) = \begin{pmatrix} w^{(i)}(z) \\ -D_1^{(i)} w^{(i)}(z) \end{pmatrix},$$

$$K^{(i)}(z, z_i) =$$

$$= \begin{pmatrix} \text{ch } m_i X_i(z, z_i) & -m_i^{-1} \text{sh } m_i X_i(z, z_i) \\ -m_i \text{sh } m_i \tilde{X}_i(z, z_i) & \text{ch } m_i \tilde{X}_i(z, z_i) \end{pmatrix}.$$

Здесь $w^{(i)}(z)$ – некоторое частное решение уравнения (3) для i -го слоя, $X_i(z, z_i)$ и $\tilde{X}_i(z, z_i)$ – обобщен-

ная степень Берса и присоединенная обобщенная степень Берса на интервале (z_i, z_{i+1}) соответственно.

При заданных $\Phi^{(1)}(z_1)$ и $J^{(1)}(z_1)$ с учетом условий (5), получим [24]

$$V^{(i)}(z) = L^{(i,1)}(z, z_1) V^{(1)}(z_1) +$$

$$+ \sum_{j=1}^i L^{(i,j)}(z, z_j) (W^{(j-1)}(z_j) - W^{(j)}(z_j)) + W^{(i)}(z), \quad (6)$$

где $W^{(0)}(z_1) = 0$, $L^{(i,j)}(z, z_j) = K^{(i)}(z, z_i) K^{(i-1)}(z_i, z_{i-1}) \dots K^{(j)}(z_{j+1}, z_j)$, $i \geq j$, $z_i \leq z \leq z_{i+1}$.

Формула (6) дает точное аналитическое решение задачи Коши для уравнения (4) при произвольном количестве слоев.

В конечной точке системы слоев, следуя (6), получим

$$V^{(i)}(z_{n+1}) = L^{(n,1)}(z_{n+1}, z_1) V^{(1)}(z_1) +$$

$$+ \sum_{j=1}^n L^{(i,j)}(z_{i+1}, z_j) (W^{(j-1)}(z_j) - W^{(j)}(z_j)) +$$

$$+ W^{(n)}(z_{n+1}). \quad (7)$$

Формула (7) связывает значения потенциала и потока 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.

Таким образом, аналитический матричный метод можно применять к решению краевых задач тепломассопереноса первого, второго или третьего типов для системы (4) в многослойной среде с любым конечным числом слоев.

Применяя данный метод для решения дифференциального уравнения (1), (2), описывающего диффузию ННЗ, генерированных широким электронным пучком в многослойной полупроводниковой мишени, получим, что $a_1^{(i)}(z) = D^{(i)}$ в i -ом слое, и $a_2^{(i)}(z) = \tau^{(i)}$ ННЗ в i -ом слое, $m = 1$, а $\mu^{(i)}(z) = -\tau^{(i)} \rho^{(i)}(z)$, где $\rho^{(i)}(z)$ – плотность ННЗ, генерированных в полупроводнике в i -ом слое. При постоянных коэффициентах уравнения на i -ом слое матрица K принимает вид

$$K^{(i)}(z, z_i) =$$

$$= \begin{pmatrix} \text{ch } \frac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)} \tau^{(i)}}} & -\sqrt{\frac{\tau^{(i)}}{D^{(i)}}} \text{sh } \frac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)} \tau^{(i)}}} \\ -\sqrt{\frac{D^{(i)}}{\tau^{(i)}}} \text{sh } \frac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)} \tau^{(i)}}} & \text{ch } \frac{z - z_i}{\sqrt{D^{(i)} \tau^{(i)}}} \end{pmatrix}.$$

При проведении расчетов матричным методом в рассматриваемой задаче использовалось следующее частное решение для уравнения диффузии ННЗ (1):

$$w^{(i)}(z) = K_1 \exp\left(\frac{z_{ms}^2}{4L^2}\right) \left[\exp\left(\frac{z - z_{ms}}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 + \frac{z_{ms}}{2L}\right) - \exp\left(-\frac{z - z_{ms}}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 - \frac{z_{ms}}{2L}\right) \right] + K_2 \exp\left(\frac{z_{ss}^2}{4L^2}\right) \times \left[\exp\left(\frac{z - z_{ss}}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 + \frac{z_{ss}}{2L}\right) - \exp\left(-\frac{z - z_{ss}}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 - \frac{z_{ss}}{2L}\right) \right],$$

где $K_1 = -\frac{1.085(1-\eta)E_0L}{4D(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})}$, $K_2 = -\frac{1.085z_{ss}E_0L\eta}{4Dz_{ms}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})}$.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ МАТРИЧНЫМ МЕТОДОМ

Разобьем длину l полупроводниковой структуры на m отрезков и обозначим точки разбиения z_j , где j – номер точки, $j = \overline{1, m+1}$, причем $z_1 = 0$ и $z_{m+1} = l$. Правую часть уравнения (1) аппроксимируем некоторой функцией $f^{(j)}(z)$ на каждом отрезке разбиения $z \in [z_j, z_{j+1}]$. Обозначим $w^{(j)}(z)$ – частное решение уравнения (1) на отрезке $z \in [z_j, z_{j+1}]$ с $f^{(j)}(z)$ в правой части.

В каждой точке z_j найдем числовые значения матриц W и K , учитывая номер слоя i , на который попадает точка z_j :

$$K^{(j)}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} \frac{z_{j+1} - z_j}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & -\sqrt{\frac{\tau^{(i)}}{D^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{z_{j+1} - z_j}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \\ -\sqrt{\frac{D^{(i)}}{\tau^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{z_{j+1} - z_j}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & \operatorname{ch} \frac{z_{j+1} - z_j}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \end{pmatrix},$$

$$W^{(j)}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} w^{(j)}(z_j) \\ -D^{(i)} \left. \frac{dw^{(j)}(z)}{dz} \right|_{z=z_j} \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$V^{(j)}(z_j) = L^{(j,1)}(z_j, z_1)V^{(1)}(z_1) + \sum_{k=1}^j L^{(j,k)}(z_j, z_k) \left(W^{(k-1)}(z_k) - W^{(k)}(z_k) \right) + W^{(j)}(z_j), \quad j = \overline{1, m+1}.$$

В данной формуле элементы $V^{(1)}(z_1)$ при решении задачи (1), (2) изначально неизвестны. Связав $V^{(1)}(z_1)$ и $V^{(m+1)}(z_{m+1})$ и решив систему линейных уравнений с двумя неизвестными, найдем $V^{(1)}(z_1)$, а затем и $V^{(j)}(z_j)$ для всех $j = \overline{1, m+1}$.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

Для дифференциальной задачи (1), (2) построена консервативная разностная схема на равномерной сетке $\bar{D}_h = \{z_i = ih, i = 0, \dots, N, h = l/N\}$ [25]:

$$\frac{1}{h} \left(a_{i+1} \frac{\Delta p_{i+1} - \Delta p_i}{h} - a_i \frac{\Delta p_i - \Delta p_{i-1}}{h} \right) - d_i \Delta p_i = -\varphi_i,$$

$$1 \leq i \leq N-1, \quad \left(1 + \frac{h^2}{2L_1^2} + \frac{S_1}{L_1} h \right) \Delta p_0 - \Delta p_1 = \frac{\tau_1 h^2 \rho_0}{2L_1^2}, \quad \left(1 + \frac{h^2}{2L_2^2} + \frac{S_2}{L_2} h \right) \Delta p_N - \Delta p_{N-1} = \frac{\tau_2 h^2 \rho_N}{2L_2^2},$$

где $a_i = \left(\frac{1}{h} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{D(z)} \right)^{-1} = \left(\int_{-1}^0 \frac{ds}{D(z_i + sh)} \right)^{-1}$, $d_i = \int_{-0.5}^{0.5} \frac{ds}{\tau(z_i + sh)}$, $\varphi_i = \int_{-0.5}^{0.5} \rho(z_i + sh) ds$. Здесь Δp_i – приближенное значение точного решения $\Delta p(z_i)$, $\rho_i = \rho(z_i)$, а интегралы заменены их приближенными выражениями:

$$\frac{1}{h} \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{dz}{D(z)} \sim \frac{1}{D_{i-1/2}}, \quad d_i \sim \frac{1}{\tau_i}, \quad \varphi_i \sim \rho_i.$$

Систему (8) решали методом прогонки.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты математического моделирования явлений тепломассопереноса, обусловленного взаимодействием электронных пучков с однородными полупроводниками или многослойными планарными полупроводниковыми структурами, во многом будут определяться характером потерь энергии электронами пучка в мишени. Рассмотрим этот вопрос для диапазона энергий электронов 10–50 кэВ, широко используемых в электронно-зондовых технологиях.

Зависимости от координаты плотности ННЗ, генерированных электронным пучком в классических монокристаллических мишенях: в кремнии (легкий полупроводник), арсениде галлия (полупроводник со средними значениями параметров) и теллуриде кадмия (тяжелый полупроводник), рассчитанные для энергии электронов

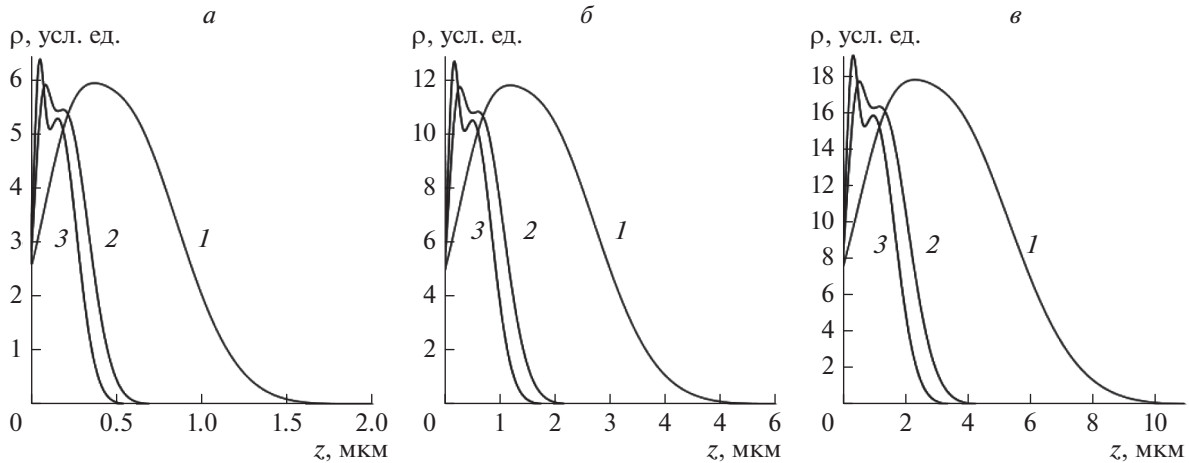


Рис. 1. Распределения по глубине относительных величин плотности потерь энергии электронами пучка в монокристаллических Si (1), GaAs (2), CdTe (3), рассчитанные для энергии электронов 10 (а), 20 (б), 30 (в) кэВ.

10, 20 и 30 кэВ, — представлены на рис. 1. Характер кривых во многом зависит от значений глубины максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощенными мишенью z_{ms} , и глубины максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, испытавшими в мишени рассеяние на большие углы и вышедшими из мишени z_{ss} . При рассматриваемых энергиях электронов первичного пучка для легких материалов (Si) разница в значениях z_{ms} и z_{ss} небольшая. Как следствие этого, суммарная зависимость плотно-

сти потерь энергии электронами пучка со средними энергиями (от 8–10 до 50 кэВ) — а, значит, и зависимость $\rho(z)$, имеют вид, близкий к классической функции Гаусса (см. рис. 1а, кривые 1). Иной вид имеют подобные зависимости для полупроводников со средними и большими значениями параметров: значениями плотности ρ_0 , порядкового номера Z и относительной атомной массы A (см. рис. 1, кривые 2 и 3). В этом случае значения z_{ms} и z_{ss} отличаются довольно сильно, так что при сложении двух функций типа Гаусса (3) это приводит к появлению в зависимостях $\rho^*(z)$ второго локального максимума, обусловленного вкладом в функцию $\rho^*(z)$ обратно рассеянных электронов. Отметим, что учет влияния обратно рассеянных электронов оказался весьма важным и при оценке нагрева полупроводниковых мишеней электронным зондом [26–28].

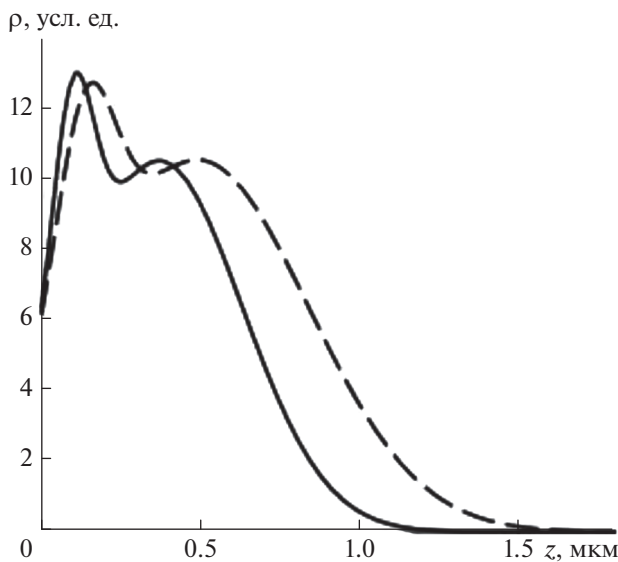


Рис. 2. Распределения по глубине относительных величин плотности потерь энергии электронами пучка, рассчитанные для однородных монокристаллических $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$ (сплошная кривая) и CdTe (пунктирная кривая). Энергия электронов пучка 20 кэВ.

Из результатов расчетов, проведенных для различных полупроводниковых мишеней, следует, что для тяжелых полупроводниковых мишеней при энергии электронов, большей примерно 20 кэВ, величина плотности поглощенной энергии при значениях z до примерно 0.6 мкм меняется незначительно. В качестве иллюстрации на рис. 2 представлен вид распределений плотностей потерь энергии электронами пучка в монокристаллических CdTe и $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$, широко используемых при производстве приборов инфракрасной техники [18, 19]. Расчеты проведены для энергии электронов пучка $E_0 = 20$ кэВ. Это позволяет для оценки распределений неравновесных ННЗ в многослойных планарных полупроводниковых материалах не учитывать изменения спектров энергии электронов, прошедших пленочную мишень заданной толщины [29, 30].

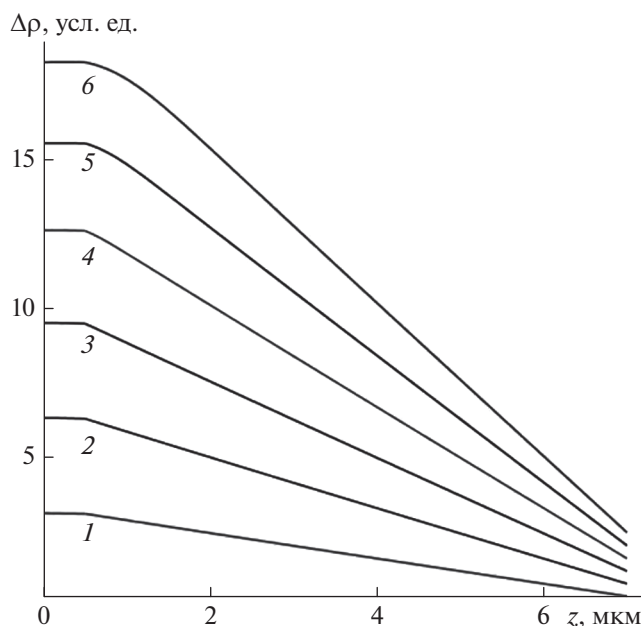


Рис. 3. Распределения по глубине ННЗ, генерированных электронным пучком в двухслойной полупроводниковой структуре $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}/\text{CdTe}$ толщиной 7 мкм (0.5 мкм — $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$ и 6.5 мкм — CdTe) для различных энергий электронов пучка: 5 кэВ (кривая 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.

Результаты оценки распределений ННЗ, генерированных электронным пучком в двухслойной полупроводниковой структуре $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}/\text{CdTe}$ толщиной 7 мкм (0.5 мкм — $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$ и 6.5 мкм — CdTe) для различных энергий электронов пучка: 5 (кривая 1), 10 (2), 15 (3), 20 (4), 25 (5) и 30 кэВ (6) — представлены на рис. 3. Используются следующие значения параметров: $L_1 = 35$ мкм, $\tau_1 = 10^{-6}$ с, $S_1 = 0.0857$ для первого материала (пленки); $L_2 = 30$ мкм, $\tau_2 = 10^{-5}$ с, $S_2 = 10$ — для второго материала (подложки). Значение $z_1 = 0.5$ мкм, $l = 7$ мкм. Толщина пленки в рассматриваемом случае довольно большая, поэтому при повышении энергии первичного пучка электронов центр тяжести распределений потерь энергии смещается в объем полупроводника, при этом влияние первой поверхности (при $z = 0$) уменьшается, а влияние второй поверхности (при $z = l$) на процесс потерь энергии практически отсутствует (см. рис. 1 и 2). Как следствие этого увеличивается количество ННЗ, участвующих в диффузионном процессе, что наблюдается на зависимостях $\Delta\rho(z)$. Поскольку расчеты проводились для пленочной структуры, характер спада распределений ННЗ в объеме

пленки отличается от аналогичных зависимостей, характерных для полубесконечных полупроводников (см., например, [14, 17]): на второй поверхности пленки (при $z = l$) концентрации ННЗ отличны от нуля.

Проведено сравнение применения аналитического матричного метода и численного метода конечных разностей для нахождения распределений ННЗ, генерированных электронным пучком в рассматриваемой двухслойной полупроводниковой структуре $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}/\text{CdTe}$. Численное решение рассчитано на сетке из 450 ячеек с шагом $h = 0.0067$ мкм. Результаты расчетов аналитическим методом и численным методом конечных разностей практически совпадают и потому на рисунке не выделены.

Расчеты проведены с помощью математических пакетов Maple и Matlab (MathWorks, Inc.) версии 7.5.0.342 на персональном компьютере со следующими характеристиками: процессор Intel Pentium E5400 (2×2.70 ГГц, 2 МБ Cache), объем оперативной памяти — 2 Гб. Затраты машинного времени на расчет распределений ННЗ аналитическим и численным методами составили около 2 с, что говорит о практической применимости предложенного аналитического матричного метода для решения рассматриваемой задачи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложен аналитический матричный метод математического моделирования явлений тепломассопереноса, обусловленного взаимодействием широких электронных пучков с многослойными планарными полупроводниковыми структурами. Рассмотрены некоторые возможности использования этого метода для оценки распределений неравновесных неосновных носителей заряда в многослойных планарных полупроводниковых структурах. Для электрофизических параметров, характерных для двухслойной структуры $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}/\text{CdTe}$, проведено сравнение результатов расчетов с использованием аналитического матричного метода с результатами расчетов с помощью численной консервативной разностной схемы. Показано, что предложенный матричный метод позволяет проводить расчеты распределений ННЗ за сравнительно короткое время 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. Жу У., Ванг Ж.Л. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применение. М.: Бином, 2013. 582 с.
2. Степович М.А. Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники. Дис. ... докт. физ.-мат. наук. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 351 с.
3. Everhart T.E. // J. Appl. Phys. 1960. V. 31. № 10. P. 1483.
4. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
5. Афанасенкова Ю.В., Гладышев Ю.А. // Изв. СГУ. Нов. сер. Сер. Матем. Мех. Информ. 2013. Т. 13. № 1–2. С. 11.
6. Гинзгеймер С.А. Математическое моделирование процессов теплопередачи в системах контактирующих стержней. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Калуга: КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2006. 163 с.
7. Bers L., Gelbart A. // T. Am. Math. Soc. 1944. V. 56. P. 67.
8. Гладышев Ю.А. // Мат. зам. 1994. Т. 55. № 3. С. 21.
9. Гладышев Ю.А. Метод обобщенных степеней Берса и его приложения в математической физике. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2011. 204 с.
10. Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. // Поверх. Рентг., синхротр. нейтр. иссл. 2017. № 10. С. 105; Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., Stepovich M.A. // J. Surf. Invest. X-ray Synchrotr. Neutron Techniq. 2017. V. 11. № 5. P. 1096.
11. Калманович В.В., Степович М.А. // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем-2018. М.: ИППМ РАН. 2018. С. 194.
12. Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Серегина Е.В., Степович М.А. // Вопр. ат. науки и техн. Сер. Яд.-реакт. конст. 2018. № 3. С. 158.
13. Kalmanovich V.V., Seregina E.V., Stepovich M.A. // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1163. Art № 012012.
14. Степович М.А., Снопина М.Г., Хохлов А.Г. // Прикл. физ. 2004. № 3. С. 61.
15. Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G. // Proc. SPIE. 2004. V. 5398. P. 159.
16. Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A. // ФТП. 2007. Т. 41. № 4. С. 458; Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A. // Semicond. 2007. V. 41. № 4. P. 444.
17. Снопина М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А. // Поверх. Рентг., синхротр. нейтр. иссл. 2007. № 7. С. 1; Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A. // J. Surf. Invest. X-ray Synchrotr. Neutron Techniq. 2007. V. 1. № 4. P. 406.
18. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фотодиоды. М.: Физматкнига, 2011. 448 с.
19. Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фоторезисторы и фотоприемные устройства. М.: Физматкнига, 2012. 368 с.
20. 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.
21. 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.
22. 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.
23. Kanaya K., Okayama S. // J. Phys. D. 1972. V. 5. № 1. P. 43.
24. Калманович В.В. // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий. Воронеж: Научная книга, 2015. С. 166.
25. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
26. Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Степович М.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 9. С. 1304; Amrastanov A.N., Seregina E.V., Stepovich M.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. № 9. P. 1187.
27. Stepovich M.A., Amrastanov A.N., Seregina E.V., Filipov M.N. // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 955. Art. № 012040.
28. Stepovich M.A., Amrastanov A.N., Seregina E.V., Filipov M.N. // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1163. Art. № 012014.
29. Михеев Н.Н., Степович М.А., Петров В.И. // Изв. РАН. Сер. физ. 1993. Т. 57. № 9. С. 7; Mikheev N.N., Stepovich M.A., Petrov V.I. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 1993. V. 57. № 9. P. 1494.
30. Mikheev N.N., Stepovich M.A. // Mat. Sci. Engin. B. 1995. V. 32. № 1–4. P. 11.