ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2022, том 86, № 11, с. 1560–1564

УДК 53.043:54-7:517.929.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ШИРОКИХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ИЛИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С МНОГОСЛОЙНЫМИ ПЛАНАРНЫМИ СТРУКТУРАМИ

© 2022 г. М. А. Степович[1, *], Д. В. Туртин[2], В. В. Калманович[1]

[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 “Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова”, Ивановский филиал, Иваново, Россия*

******E-mail: m.stepovich@mail.ru*

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.
После доработки 15.07.2022 г.
Принята к публикации 22.07.2022 г.

Изучены некоторые аспекты математического моделирования и качественной оценки одномерных процессов тепломассопереноса в многослойных планарных структурах. Рассмотрение проведено на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широкими пучками заряженных частиц или электромагнитным излучением в многослойных планарных полупроводниковых мишенях.

DOI: 10.31857/S036767652211028X

ВВЕДЕНИЕ

При проектировании микро- и наноэлектронных систем, работающих в условиях стационарного радиационного и/или контактного теплового воздействия: потоков заряженных частиц и/или электромагнитного излучения [1, 2] одной из важных задач является оценка степени внешнего воздействия на эти системы. Не менее важной является и задача оценки теплового, в т.ч. и радиационного, воздействия на такие системы. Поскольку экспериментальная регистрация информативных сигналов от реальных нанообъектов может быть затруднена, использование математического моделирования для решения таких задач является весьма актуальным. Ввиду того, что значительное число структур различной природы образованы планарными слоями, задача математического моделирования и качественной оценки одномерных процессов тепломассопереноса в многослойных планарных структурах, обусловленных воздействием различных видов радиации (нейтронов, протонов, электронов, электромагнитного излучения, в т.ч. рентгеновского и гамма-диапазонов) [1–5] и математическое описание таких процессов могут быть реализованы с использованием единого подхода, что и является предметом рассмотрения в настоящей работе. Рассмотрение математических моделей и их качественная оценка проведены на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных в многослойных планарных полупроводниковых структурах широким внешним источником.

КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА МОДЕЛИ НЕЗАВИСИМЫХ ИСТОЧНИКОВ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ ПРОЦЕСС ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ СТРУКТУРЕ

Диффузия ННЗ, генерированных в полупроводниковой мишени киловольтными электронами, моделируется с использованием так называемой модели независимых источников, согласно которой на диффузию генерированных электронным пучком неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияние другие электроны или дырки из других микрообластей материала [6, 7]. В этом случае для одномерной диффузии, реализующейся при использовании широкого пучка первичных электронов, сначала находится распределение ННЗ, продиффундировавших из бесконечно тонкого слоя полупроводника, расположенного на определенной глубине в объеме мишени, после чего искомое распределение находится как суперпозиция ННЗ от всех таких слоев мишени.

Для бесконечно тонкого планарного источника ННЗ, находящегося на глубине z_0, $z_0 \in [0,\infty)$, математическая модель диффузии может быть записана как [7]:

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

с граничными условиями

$$D\frac{d\Delta p(z,z_0)}{dz}\bigg|_{z=0} = \upsilon_s \Delta p(0,z_0), \quad \Delta p(\infty,z_0) = 0. \qquad (2)$$

Здесь $\Delta p(z,z_0)$ – распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника в однородной полупроводниковой мишени, z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности в глубь полупроводника, $\rho(z)$ – число ННЗ, генерированных электронным пучком в единицу времени на глубине z до их диффузии, а D, τ, υ_s – коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно. Для рассматриваемой математической модели диффузии ННЗ, генерированных киловольтными электронами, при проведении расчетов распределений ННЗ в объеме мишени для переменных и параметров модели наиболее удобным является использование микрометровой шкалы [8–10]. Отметим также, что зависимость от координаты концентрации ННЗ, генерированных электронным пучком в однородной полупроводниковой мишени в единицу времени $\rho(z)$ для широкого электронного пучка может быть найдена из выражения для плотности энергии электронного пучка, выделяемой в мишени в единицу времени до начала процесса диффузии [11], делением ее на энергию образования электронно-дырочной пары (она приблизительно равна трем ширинам запрещенной зоны полупроводника) [12].

Решив (1), (2), найдем искомое распределение по глубине неравновесных ННЗ $\Delta p(z)$ в однородной мишени как

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

Отметим, что данный подход может быть использован для нахождения распределений ННЗ в результате их диффузии как в однородных, так и в планарных двух- [13, 14] и трехслойных [15, 16] 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 привел: на основании рассмотрения решений для двух- и трехслойных структур нам не удалось найти закономерность в формулах для решения дифференциальных уравнений и описать алгоритм решения задачи для произвольного числа слоев многослойной структуры.

При наличии различных, в том числе и неконтролируемых, внешних воздействий на изучаемый полупроводник для рассматриваемой 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, и различные функции $\Delta p_1(z)$ и $\Delta p_2(z)$. Можно показать [17], что для однородной мишени при выполнении условия

$$\left|\rho_2(z) - \rho_1(z)\right| \le \varepsilon \qquad (4)$$

справедливы оценки

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

и

$$\left|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)\right| \le \varepsilon\tau.$$

Отсюда следуют существование и единственность решения дифференциального уравнения (1) с граничными условиями (2), корректность [18, 19] математической модели (1)–(3), а также и многослойных математических моделей, которые могут быть построены на основе модели (1)–(3).

КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ ПРОЦЕСС ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В МИШЕНИ КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ СЛОЕВ

Для одномерной диффузии в конечный полупроводник вдоль оси z, перпендикулярной поверхности n-слойной полупроводниковой структуры $(z \in [0,l])$, распределение ННЗ по глубине находится как решение дифференциального уравнения [20]

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

с граничными условиями

$$\begin{aligned} D^{(1)}\frac{d\Delta p^{(1)}(z)}{dz}\bigg|_{z=0} &= \upsilon_s^{(1)}\Delta p^{(1)}(0), \\ D^{(n)}\frac{d\Delta p^{(n)}(z)}{dz}\bigg|_{z=l} &= -\upsilon_s^{(n)}\Delta p^{(n)}(l). \end{aligned} \qquad (6)$$

Верхний индекс в скобках указывает номер слоя. Для многослойной структуры $z_1 = 0$, $z_{n+1} = l$ – координаты внешних границ полупроводника, $z_2, z_3, \ldots, z_n$ – 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 $S^{(1)} = L^{(1)}\nu_s^{(1)} / D^{(1)}$, $S^{(n)} = L^{(n)}\nu_s^{(n)} / D^{(n)}$, где $\upsilon_s^{(1)}$ и $\upsilon_s^{(n)}$ – скорости поверхностной рекомбинации ННЗ на поверхности первого и n-го слоев, соответственно. Функция $\Delta p^{(i)}(z)$ описывает распределение неравновесных ННЗ по глубине в i-м слое после их диффузии в полупроводнике. Функция $\rho^{(i)}(z)$ – зависимость от координаты плотности ННЗ, генерированных широким электронным пучком в i-м слое полупроводниковой мишени в единицу времени.

Рассмотрим диффузию ННЗ в многослойной мишени, в которой внутри каждого слоя коэффициент диффузии и время жизни ННЗ – величины постоянные. В этом случае дифференциальное уравнение диффузии ННЗ примет вид

$$D^{(i)}(z)\frac{d^2\Delta p^{(i)}(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p^{(i)}(z)}{\tau^{(i)}(z)} = -\rho^{(i)}(z), \quad i = \overline{1,n}.$$

Перепишем это уравнение в виде:

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

или

$$y_i''(z) - b_i^2 y_i(z) = f_i(z), \quad i = \overline{1,n}, \tag{7}$$

где $y_i(z) = \Delta p^{(i)}(z)$, а

$$b_i^2 = \frac{1}{\tau^{(i)}(z)\,D^{(i)}(z)}, \quad f_i(z) = -\frac{\rho^{(i)}(z)}{D^{(i)}(z)}$$

есть постоянные величины.

Тогда граничные условия можно записать в виде:

$$y_1(0) = g_1, \tag{8}$$

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

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

Здесь g_1 и a_i – постоянные, $i = \overline{1,n}$.

Для нахождения решений (7) используем метод вариации произвольной постоянной. Решение будем искать в виде

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

где $C_{1i}(z)$ и $C_{2i}(z)$ – искомые функции, удовлетворяющие системе уравнений

$$\begin{cases} C_{1i}'(z)\exp(b_i z) + C_{2i}'(z)\exp(-b_i z) = 0, \\ C_{1i}'(z)\,b_i\exp(b_i z) - C_{2i}'(z)\,b_i\exp(-b_i z) = f_i(z). \end{cases} \tag{11}$$

Из (11) получим $C_{1i}'(z) = f_i(z)\exp(-b_i z)/2b_i$ и $C_{2i}'(z) = -f_i(z)\exp(b_i z)/2b_i$, откуда

$$C_{1i}(z) = \frac{1}{2b_i}\int_{z_i}^{z} f_i(t)\exp(-b_i t)dt + a_{1i}, \quad i = \overline{1,n},$$

$$C_{2i}(z) = -\frac{1}{2b_i}\int_{z_i}^{z} f_i(t)\exp(b_i t)dt + a_{2i}, \quad i = \overline{1,n}.$$

Тогда

$$y_i(z) = a_{1i}\exp(b_i z) + a_{2i}\exp(-b_i z) + \frac{1}{b_i}\int_{z_i}^{z} f_i(t)\,\mathrm{sh}\left[b_i(z-t)\right]dt, \quad i = \overline{1,n}, \tag{12}$$

где a_{1i} и a_{2i} ($i = \overline{1,n}$) – произвольные постоянные.

Подставив функцию (12) в граничные условия (8)–(10), получим систему рекурсивных уравнений для нахождения постоянных a_{1i} и a_{2i}, $i = \overline{1,n}$. При вычислении производной от функции $y_i(z)$, $i = \overline{1,n}$, используя формулу дифференцирования интеграла с переменным верхним пределом, получим:

$$y_i'(z) = a_{1i}b_i\exp(b_i z) - a_{2i}b_i\exp(-b_i z) + \frac{1}{b_i}f_i(z)\,\mathrm{sh}(0) + \frac{1}{b_i}\int_{z_i}^{z} f_i(t)\,b_i\,\mathrm{ch}\left[b_i(z-t)\right]dt = a_{1i}b_i\exp(b_i z) - a_{2i}b_i\exp(-b_i z) + \int_{z_i}^{z} f_i(t)\,\mathrm{ch}\left[b_i(z-t)\right]dt, \quad i = \overline{1,n}.$$

Подставив $y_i(z)$ и $y_i'(z)$, $i = \overline{1,n}$, последовательно в (8)–(10), получим:

1) из (8):

$$a_{11} + a_{21} = g_1,$$

2) из (9):

$$a_{1i}b_i\exp(b_i z) - a_{2i}b_i\exp(-b_i z) = a_i\left[a_{1i}\exp(b_i z_i) + a_{2i}\exp(-b_i z_i)\right],$$

откуда

$$a_{1i}(b_i - a_i)\exp(b_i z) = a_{2i}(a_i + b_i)\exp(-b_i z) = \\ = [a_{1i}\exp(b_i z_i) + a_{2i}\exp(-b_i z_i)],$$

3) из (10):

$$a_{1i}\exp(b_i z) + a_{2i}\exp(-b_i z) = a_{1,i+1}\exp(b_{i+1} z_i) + \\ + a_{2,i+1}\exp(-b_{i+1} z_i) + \frac{1}{b_i}\int\limits_{z_{i+1}}^{z_i} f_{i+1}(t)\,\mathrm{sh}[b_{i+1}(z_i - t)]dt.$$

Из этих соотношений следует единственность решения задачи (7)–(10).

Как и для так называемой модели независимых источников, аналогично неравенству (4) положим, что $\forall z$: $z_i \le z \le z_{i+1}$ в i-м слое справедлива оценка

$$\left|f_i^{(2)}(z) - f_i^{(1)}(z)\right| \le \delta. \qquad (13)$$

Из (12) получим

$$y_i^{(2)}(z) = a_{1i}\exp(b_i z) + a_{2i}\exp(-b_i z) + \\ + \frac{1}{b_i}\int\limits_{z_i}^{z} f_i^{(2)}(t)\,\mathrm{sh}[b_i(z - t)]dt,$$

$$y_i^{(1)}(z) = a_{1i}\exp(b_i z) + a_{2i}\exp(-b_i z) + \\ + \frac{1}{b_i}\int\limits_{z_i}^{z} f_i^{(1)}(t)\,\mathrm{sh}[b_i(z - t)]dt.$$

Отсюда

$$y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z) = \\ = \frac{1}{b_i}\int\limits_{z_i}^{z}\left[f_i^{(2)}(t) - f_i^{(1)}(t)\right]\mathrm{sh}[b_i(z - t)]dt.$$

С учетом оценки (13) получим

$$\left|y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z)\right| = \\ = \frac{1}{|b_i|}\int\limits_{z_i}^{z}\left|f_i^{(2)}(t) - f_i^{(1)}(t)\right|\mathrm{sh}[b_i(z - t)]dt \le \\ \le \frac{1}{|b_i|}\int\limits_{z_i}^{z}\delta\,\mathrm{sh}[b_i(z - t)]dt = \delta\{-1 + \mathrm{ch}[b_i(z - z_i)]\} \le \\ \le \delta\{\mathrm{ch}[b_i(z_{i+1} - z_i)] - 1\}.$$

Таким образом

$$\left|y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z)\right| \le C_i\delta, \qquad (14)$$

где $C_i = \mathrm{ch}[b_i(z_{i+1} - z_i)] - 1$.

Следовательно, для рассматриваемой задачи тепломассопереноса в многослойной мишени имеет место существование и единственность решения дифференциального уравнения (7) с граничными условиями (8)–(10), т.е. рассматриваемая математическая модель корректна.

Возвращаясь к исходным обозначениям, получим, что если

$$\left|\rho_i^{(2)}(z) - \rho_i^{(1)}(z)\right| \le \frac{1}{D^{(i)}(z)}\delta,$$

то для любого $i\left(i = \overline{1,n}\right)$ справедлива оценка

$$\left|\Delta p^{(i)(2)}(z) - \Delta p^{(i)(1)}(z)\right| \le C_i\delta,$$

где $C_i = \mathrm{ch}\left[(z_{i+1} - z_i)\Big/\sqrt{\tau^{(i)}(z)\,D^{(i)}(z)}\right] - 1$.

Поскольку при моделировании вид функции в правой части дифференциальных уравнений не конкретизировался, полученные результаты справедливы для любого внешнего источника: широкого пучка заряженных частиц или широкого потока квантов электромагнитного излучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изложены результаты качественного анализа математических моделей, описывающих процессы тепломассопереноса, обусловленного взаимодействием широких пучков заряженных частиц или электромагнитного излучения с многослойными планарными структурами. Рассмотрение проведено на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широкими пучками заряженных частиц или электромагнитным излучением в многослойных планарных полубесконечных полупроводниковых мишенях и в полупроводниковых мишенях конечной толщины при произвольном, но конечном, числе слоев. Получены оценки влияния изменений в условиях проведения эксперимента на распределение неравновесных неосновных носителей заряда в объеме таких структур.

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).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Филачев А.М., Таубкин И.И., Тришенков М.А.* Твердотельная фотоэлектроника. Фотодиоды. М.: Физматкнига, 2011. 448 с.
2. *Филачев А.М., Таубкин И.И., Тришенков М.А.* Твердотельная фотоэлектроника. Фоторезисторы и фотоприемные устройства. М.: Физматкнига, 2012. 368 с.
3. *Алоян Р.М, Федосов С.В., Мизонов В.Е.* Теоретические основы математического моделирования механических и тепловых процессов в производстве строительных материалов. Иваново: Ивановский

гос. архитектурно-строительный университет, 2011. 255 с.

4. *Кожухов М.В.* Разработка и исследование моделей радиационных воздействий для расчета характеристик кремниевых и кремний-германиевых биполярных транзисторов с помощью системы TCAD. Дис. ... канд. техн. наук. М.: ВШЭ, 2016. 149 с.
5. *Близнюк У.А., Студеникин Ф.Р., Борщеговская П.Ю. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 10. С. 1418; *Bliznyuk U.A., Studenikin F.R., Borshchegovskaya. P.Yu. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 10. P. 1097.
6. *Van Roosbroeck W.* // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. No. 1. P. 380.
7. *Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317; *Belov A.A., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2002. V. 66. No. 9. P. 1317.
8. *Wittry D.B., Kyser D.F.* // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 375.
9. *Конников С.Г., Сидоров А.Ф.* Электронно-зондовые методы исследования полупроводниковых материалов и приборов. М.: Энергия, 1978. 135 с.
10. *Михеев Н.Н., Захаров Б.Г.* // Электрон. техн. Сер. матер. 1982. № 2(163). С. 55.
11. *Михеев Н.Н., Степович М.А.* // Завод. лаб. и диагн. матер. 1996. Т. 62. № 4. С. 20; *Mikheev N.N., Stepovich M.A.* // Industrial Laboratory. 1996. V. 62. No. 4. P. 221.
12. *Dmitruk N.L., Litovchenko V.G., Talat G.N.* // Surf. Sci. 1978. V. 72. No. 2. P. 321.
13. *Степович М.А., Снопова М.Г., Хохлов А.Г.* // Прикл. физика. 2004. № 3. С. 61.
14. *Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G.* // Proc. SPIE. 2004. V. 5398. P. 159.
15. *Снопова М.Г., Бурылова И.В., Петров В.И., Степович М.А.* // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. иссл. 2007. № 7. С. 1; *Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Techn. 2007. V. 1. No. 4. P. 406.
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.* // Semiconductors. 2007. V. 41. No. 4. P. 444.
17. *Туртин Д.В., Калманович В.В., Степович М.А.* // Итоги науки и техн. Совр. матем. прилож. Тем. обзоры. 2022. Т. 206. С. 133.
18. *Петровский И.Г.* Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений М.: Изд-во МГУ, 1984. 296 с.
19. *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, ГРФМЛ, 1967. 436 с.
20. *Stepovich M.A., Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Filippov M.N.* // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1740. Art. No. 012035.

Modeling and qualitative assessment of heat and mass transfer processes due to interaction of wide beams of charged particles or electromagnetic radiation with multilayer planar structures

M. A. Stepovich[a, *], **D. V. Turtin**[b], **V. V. Kalmanovich**[a]

[a] *Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga, 248023 Russia*

[b] *Plekhanov Russian University of Economics, Ivanovo Branch, Ivanovo, 153025 Russia*

**e-mail: m.stepovich@rambler.ru*

Some aspects of mathematical modeling and qualitative assessment of one-dimensional heat and mass transfer processes in multilayer planar structures are studied. The consideration is carried out on the example of diffusion of nonequilibrium minority charge carriers generated by wide beams of charged particles or electromagnetic radiation in multilayer planar semiconductor targets.