

УДК 537.533.9:620.187:51-73

О МОДЕЛИРОВАНИИ И КАЧЕСТВЕННОМ АНАЛИЗЕ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ШИРОКИМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ПУЧКАМИ В ОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИШЕНЯХ

© 2022 г. М. А. Степович^{а, *}, Д. В. Туртин^б, В. В. Калманович^а

^аКалужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, Калуга, 248023 Россия

^бРоссийский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Ивановский филиал, Иваново, 153025 Россия

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

Поступила в редакцию 22.12.2021 г.

После доработки 22.02.2022 г.

Принята к публикации 25.02.2022 г.

Рассмотрены некоторые аспекты математического моделирования и качественного анализа стационарных процессов диффузии, обусловленной взаимодействием широких пучков электронов с однородными полубесконечными полупроводниковыми мишенями. Использование широких пучков электронов, падающих нормально на поверхность мишени, позволило свести задачу моделирования диффузии неравновесных неосновных носителей заряда к одномерной. Рассмотрение проведено для электронных пучков с энергией от нескольких единиц до нескольких сотен кэВ. Изучены две математические модели: классическая математическая модель так называемой коллективной диффузии и так называемая модель независимых источников. В первой модели рассматривается дифференциальное уравнение диффузии, решением которого является функция, описывающая распределение неравновесных носителей заряда в объеме полупроводника. Во второй модели рассматривается дифференциальное уравнение диффузии, описывающее распределение носителей заряда, генерированных в объеме полупроводника бесконечно тонкой плоскостью, параллельной поверхности мишени. Для второй модели искомое распределение носителей заряда по глубине находится путем суммирования распределений, полученных от каждой бесконечно тонкой плоскости. Для обеих математических моделей показано, что небольшое изменение условий эксперимента приводит к небольшому изменению распределения неосновных носителей заряда по глубине мишени. Для обеих моделей приведены оценки влияния условий проведения эксперимента на распределение неравновесных неосновных носителей заряда в результате их диффузии в полупроводнике.

Ключевые слова: широкий электронный пучок, полупроводниковая мишень, взаимодействие, неравновесные неосновные носители заряда, диффузия, качественные оценки.

DOI: 10.31857/S1028096022080179

ВВЕДЕНИЕ

При проектировании микро- и нанoeлектронных систем, работающих в условиях воздействия на них потоков заряженных частиц и/или электромагнитного излучения, или использовании этих явлений в электронно-зондовых технологиях, в том числе для диагностики таких объектов, одной из важных задач является оценка степени внешнего воздействия на эти системы. В некоторых случаях для решения таких задач используют методы математического моделирования, поскольку регистрация информативных сигналов от реальных объектов может быть затруднена. В материаловедении полупроводников при исследовании с использованием пучков электронов с энергией несколько кэВ наиболее часто (пожалуй, за исключением рентгеноспектрального микроанализа) в качестве информативного регистрируют сигнал,

связанный с генерацией и диффузией в полупроводниковой мишени неравновесных неосновных носителей заряда, и/или регистрируют сигналы, характеристики которых существенно зависят от распределения таких носителей: например ток, наведенный электронным зондом, или катодолюминесценция [1–3]. Ранее [4–6] вопросы оценки влияния условий внешнего воздействия на распределение неосновных носителей заряда в результате их диффузии в полупроводнике рассматривали лишь в случае остро сфокусированных пучков — изучали нестационарную диффузию носителей заряда методом временипролетной катодолюминесценции полупроводников [5, 7–9]. Для широких электронных пучков такая задача не решалась, за исключением частного случая [10]. В настоящей работе для решения подобной задачи рассмотрены математические модели диф-

фузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широким пучком электронов с энергией несколько кэВ в однородных полупроводниковых мишенях.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Математическая модель коллективной диффузии

Математическая модель одномерной коллективной диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерируемых широким электронным пучком в однородной полубесконечной полупроводниковой мишени, имеет вид [11–13]:

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

$$\frac{d\Delta p(0)}{dz} = v_s \Delta p(0), \quad \Delta p(\infty) = 0. \quad (2)$$

Здесь функция $\Delta p(z)$ описывает искомое распределение носителей заряда по глубине мишени в результате их диффузии, z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности вглубь полупроводника, $\rho(z)$ – концентрация генерированных неосновных носителей заряда на глубине z до их диффузии, а D , τ , v_s – коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации носителей заряда соответственно.

Зависимость от координаты концентрации носителей заряда, генерированных широким электронным пучком в однородной полупроводниковой мишени $\rho(z)$, может быть найдена из выражения для плотности энергии электронного пучка $\rho^*(z)$, выделяемой в мишени в единицу времени до начала процесса диффузии, путем деления $\rho^*(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары (она приблизительно равна трем ширинам запрещенной зоны полупроводника). В случае широкого электронного пучка $\rho^*(z)$ можно найти по формуле [3, 14, 15]:

$$\rho^*(z) = \frac{1.085(1-\eta)P_0}{\sqrt{\pi}z_{ms}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})} \times \left\{ \exp\left[-\left(\frac{z-z_{ms}}{z_{ms}}\right)^2\right] + \frac{\eta}{1-\eta} \exp\left[-\left(\frac{z-z_{ss}}{z_{ss}}\right)^2\right] \right\}.$$

Здесь P_0 – мощность электронного пучка, рассеянная в мишени, z_{ms} – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние, z_{ss} – глубина максимальных потерь энергии обратного рассеянными электронами, $z_{ss} = Z^{-1/3}z_{ms}$, Z – атомный номер вещества мишени, η – коэффициент обратного рассеяния электронов пучка, $\eta = 0.24eZ^{1.67}/A$, A – относительная атомная масса вещества мишени.

Для зондирующих электронов с энергией E_0 [кэВ], падающих перпендикулярно поверхности мишени с плотностью ρ_0 [г/см³], z_{ms} можно выразить через полный путь электронов пучка R в твердом теле [16]:

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

$$R [\text{мкм}] = \frac{2.76 \times 10^{-2} A E_0^{5/3} (1 + 0.978 \times 10^{-3} E_0)^{5/3}}{0Z^{8/9} (1 + 1.957 \times 10^{-3} E_0)^{1/3}}.$$

Здесь $\gamma = 0.187Z$, $C \approx 1.1$. Решение задачи (1), (2) приведено в [12].

Отметим также, что использование широкого пучка электронов позволяет не рассматривать вопросы, связанные с нагревом полупроводниковой мишени, что может быть необходимо при использовании остро сфокусированного электронного зонда, даже при использовании электронов низких энергий [17–19].

Математическая модель независимых источников

Диффузию неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковой мишени электронным пучком, можно моделировать с использованием модели независимых источников, согласно которой на диффузию носителей из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияния другие электроны или дырки из других микрообластей материала. В этом случае при одномерной диффузии в полубесконечном полупроводнике распределение избыточных носителей заряда по глубине $\Delta p(z)$ дается выражением:

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

Функция $\Delta p(z, z_0)$ описывает распределение по глубине неосновных носителей заряда, генерированных плоским бесконечно тонким источником, находящимся на глубине z_0 , $z_0 \in [0, \infty)$; z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности вглубь полупроводника.

Распределение $\Delta p(z, z_0)$ находится как решение дифференциального уравнения

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z, z_0)}{\tau} = -(z) \delta(z - z_0) \quad (3)$$

с граничными условиями:

$$D \frac{d\Delta p(0, z_0)}{dz} = v_s \Delta p(0, z_0), \quad \Delta p(\infty, z_0) = 0. \quad (4)$$

Здесь $\rho(z)$ пропорционально плотности энергии первичного электронного пучка, рассеянной в тонком слое мишени, а D , τ и v_s – электрофизиче-

ческие параметры полупроводниковой мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации неосновных носителей заряда соответственно, $\delta(z - z_0)$ – дельта-функция.

Решение задачи (3), (4) приведено в [3, 20]. Отметим, что данный подход также использовался для нахождения распределений неосновных носителей заряда в результате их диффузии в двух- [21, 22] и трехслойных [23, 24] мишенях.

ОЦЕНКИ

Модель коллективной диффузии

Решение этой задачи приведено в [12]. Однако оно может быть записано и в ином виде, более удобном для получения оценок. Используя метод вариации произвольной постоянной, запишем решение задачи (1) в виде [10]:

$$\Delta p(z) = A_1 \exp(\sqrt{\sigma}z) + B_1 \exp(-\sqrt{\sigma}z) - \frac{1}{D\sqrt{\sigma}} \int_0^z \rho(\xi) \operatorname{sh}[\sqrt{\sigma}(z - \xi)] d\xi.$$

Здесь A_1 и B_1 – произвольные постоянные, которые могут быть определены из граничных условий.

Учтем влияние условий проведения эксперимента на распределение неравновесных неосновных носителей заряда в результате их диффузии в полупроводнике. При различных внешних воздействиях на изучаемый полупроводник в математической модели будем иметь различные функции

$\rho(z)$ в правой части дифференциального уравнения (1) и, соответственно, два различных его решения.

Пусть

$$|\rho_2(z) - \rho_1(z)| \leq \varepsilon. \tag{5}$$

Тогда для решений $\Delta p_1(z)$, $\Delta p_2(z)$ получим:

$$\begin{aligned} \Delta p_1(z) &= A_1 \exp(\sqrt{\sigma}z) + B_1 \exp(-\sqrt{\sigma}z) - \frac{1}{D\sqrt{\sigma}} \int_0^z \rho_1(\xi) \operatorname{sh}[\sqrt{\sigma}(z - \xi)] d\xi, \\ \Delta p_2(z) &= A_1 \exp(\sqrt{\sigma}z) + B_1 \exp(-\sqrt{\sigma}z) - \frac{1}{D\sqrt{\sigma}} \int_0^z \rho_2(\xi) \operatorname{sh}[\sqrt{\sigma}(z - \xi)] d\xi. \end{aligned}$$

Вычитая первое равенство из второго и учитывая оценку (5), имеем:

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq \varepsilon \frac{1}{D\sqrt{\sigma}} \int_0^z \operatorname{sh}[\sqrt{\sigma}(z - \xi)] d\xi.$$

Тогда для всех $0 \leq z \leq l$ справедлива оценка:

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq c\varepsilon, \quad c = \frac{1}{D\sigma} [\operatorname{ch}(l\sqrt{\sigma}) - 1].$$

Здесь l – толщина реальной мишени.

Модель независимых источников

Решение этой задачи имеет вид [3, 20]:

$$\begin{aligned} \Delta p(z, z_0) &= \\ &= \begin{cases} \frac{(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right] \quad \forall z \in [0, z_0], \\ \frac{(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right] \quad \forall z \in [z_0, \infty). \end{cases} \end{aligned}$$

Здесь $L = (D\tau)^{1/2}$ – диффузионная длина неосновных носителей заряда, а $S = v_s L / D$ – приведенная скорость их поверхностной рекомбинации.

Пусть $\Delta p_1(z, z_0)$ – решение уравнения

$$D \frac{d^2 \Delta p_1(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p_1(z, z_0)}{\tau} = -\rho_1(z) \delta(z - z_0),$$

с граничными условиями (4), $\Delta p_2(z, z_0)$ – решение уравнения

$$D \frac{d^2 \Delta p_2(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p_2(z, z_0)}{\tau} = -\rho_2(z) \delta(z - z_0),$$

с граничными условиями (4), и, аналогично рассмотренной выше модели коллективного движения, пусть для всех $z \geq 0$ справедливо (5). Тогда для функций $\Delta p_1(z, z_0)$ и $\Delta p_2(z, z_0)$ имеем:

$$\begin{aligned} \Delta p_1(z, z_0) &= \frac{\rho_1(z_0)\tau}{2L} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right], \\ \Delta p_2(z, z_0) &= \frac{\rho_2(z_0)\tau}{2L} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right], \end{aligned}$$

откуда

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{|\rho_2(z_0) - \rho_1(z_0)|\tau}{2L} \times \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right].$$

Применив оценку (5) для $z \in [0, z_0]$, получим:

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{z_0 - z}{L}\right). \quad (6)$$

Тогда для функций $\Delta p_1(z, z_0)$ и $\Delta p_2(z, z_0)$ имеем:

$$\begin{aligned} \Delta p_1(z, z_0) &= \frac{\rho_1(z_0)\tau}{2L} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right], \\ \Delta p_2(z, z_0) &= \frac{\rho_2(z_0)\tau}{2L} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right], \end{aligned}$$

откуда

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{|\rho_2(z_0) - \rho_1(z_0)|\tau}{2L} \times \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right].$$

Применив оценку (5) для $z \in [z_0, \infty)$, получим:

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{z - z_0}{L}\right). \quad (7)$$

Объединяя оценки (6) и (7), получим, что при всех $z \geq 0$

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right), \quad (8)$$

откуда вытекает:

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \frac{\varepsilon\tau}{L}.$$

Оценим выражение:

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| = \int_0^{\infty} |\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| dz_0.$$

Применив оценку (8), получим:

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq \frac{\varepsilon\tau}{L} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right) dz_0. \quad (9)$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right) dz_0 &= \int_0^z \exp\left(\frac{z - z_0}{L}\right) dz_0 + \\ &+ \int_z^{\infty} \exp\left(\frac{z_0 - z}{L}\right) dz_0 = L \exp\left(-\frac{z}{L}\right), \end{aligned}$$

из (9) имеем:

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

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучены математические модели стационарной диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерируемых широким электронным пучком в однородных полупроводниковых материалах. Рассмотрены модели коллективного движения и независимых источников. Использование широких электронных пучков позволяет свести рассматриваемые задачи к одномерным и описать эти математические модели обыкновенными дифференциальными уравнениями. Получены оценки решений рассматриваемых задач, позволяющие использовать их в электронно-зондовых технологиях.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-03-00271).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применение / Ред. Жу У., Уанга Ж.Л. М.: БИНОМ, 2013. 582 с.
2. *Yacobi B.G., Holt D.B.* Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids. N.Y.: Plenum Press, 1990. 354 p.
3. *Степович М.А.* Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 351 с.
4. *Polyakov A.N., Smirnova A.N., Stepovich M.A., Turtin D.V.* // Lobachevskii J. Math. 2018. V. 39. № 2. P. 259. <https://doi.org/10.1134/S199508021802021X>
5. *Stepovich M.A., Turtin D.V., Seregina E.V., Kalmanovich V.V.* // ITM Web Conf. 2019. V. 30. P. 07014. <https://doi.org/10.1051/itmconf/20193007014>
6. *Stepovich M.A., Turtin D.V., Seregina E.V., Polyakov A.N.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1203. P. 012095. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1203/1/012095>
7. *Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2012. № 11. С. 35.
8. *Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. № 9. С. 1082.
9. *Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А.* // Прикладная физика. 2012. № 6. С. 41.
10. *Степович М.А., Туртин Д.В., Калманович В.В.* // Науч. тр. Калужского гос. ун-та им. К.Э. Циолковского. Естеств. и тех. науки. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2021. С. 219.

11. *Wittry D.B., Kyser D.F.* // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 375.
12. *Kyser D.F., Wittry D.B.* // J. Proc. IEEE. 1967. V. 55. № 3. P. 733.
13. *Rao-Sahib T.S., Wittry D.B.* // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. № 9. P. 3745.
14. *Мухеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. № 8. С. 1474.
15. *Мухеев Н.Н., Степович М.А.* // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 1996. Т. 62. № 4. С. 20.
16. *Капуа К., Окаята С.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 1972. V. 5. № 1. P. 43.
17. *Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 9. С. 1304. <https://doi.org/10.1134/S036767651809003X>
18. *Амрастанов А.Н., Серегина Е.В., Степович М.А., Филиппов М.Н.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 8. С. 48. <https://doi.org/10.1134/S0207352818080036>
19. *Stepovich M.A., Amrastanov A.N., Seregina E.V., Filipov M.N.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 955. P. 012040. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/955/1/012040>
20. *Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 13172.
21. *Степович М.А., Снопина М.Г., Хохлов А.Г.* // Прикладная физика. 2004. № 3. С. 61.
22. *Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopina M.G.* // Proc. SPIE. 2004. V. 5398. P. 159.
23. *Снопина М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. № 7. С. 1.
24. *Burylova I.V., Petrov V.I., Snopina M.G., Stepovich M.A.* // Semiconductors. 2007. V. 41. № 4. P. 444. <https://doi.org/10.1134/S1063782607040161>

On Simulation and Qualitative Analysis of Diffusion Processes Due to Wide Electron Beams in Homogeneous Semiconductor Targets

M. A. Stepovich^{1, *}, D. V. Turtin², V. V. Kalmanovich¹

¹*Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga, 248023 Russia*

²*Plekhanov Russian University of Economics, Ivanovo Branch, Ivanovo, 153025 Russia*

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

Some aspects of mathematical modeling and qualitative analysis of stationary diffusion processes caused by the interaction of wide electron beams with homogeneous semi-infinite semiconductor targets are considered. The use of wide electron beams incident normally on the target surface makes it possible to reduce the problem of modeling the diffusion of nonequilibrium minority charge carriers to a one-dimensional one. The consideration is carried out for electron beams with energies from several units to several hundreds of keV. Two mathematical models are studied: the classical mathematical model of the so-called collective diffusion and the so-called model of independent sources. The first model considers a differential diffusion equation, the solution of which is a function that describes the distribution of nonequilibrium charge carriers in the volume of a semiconductor. The second model considers a differential diffusion equation that describes the distribution of charge carriers generated in the volume of a semiconductor by an infinitely thin plane parallel to the target surface. For the second model, the desired depth distribution of charge carriers is found by summing the distributions obtained from each infinitely thin plane. For both mathematical models, it is shown that a small change in the experimental conditions leads to a small change in the distribution of minority charge carriers over the target depth. For both models, estimates are given for the influence of the experimental conditions on the distribution of nonequilibrium minority charge carriers as a result of their diffusion in the semiconductor.

Keywords: wide electron beam, semiconductor target, interaction, nonequilibrium minority charge carriers, diffusion, qualitative estimates.