

О НЕКОТОРЫХ АСПЕКТАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КИЛОВОЛЬТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ МИШЕНЬЮ

М. А. Степович¹, В. В. Калманович¹, Е. В. Серегина²

¹) *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, ул. Степана Разина, 26, 248023 Калуга, Россия, e-mail: m.stepovich@rambler.ru, v572264@yandex.ru*

²) *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (Национальный исследовательский университет), Калужский филиал, ул. Баженова, 2, 248000 Калуга, Россия, e-mail: evfs@yandex.ru*

Рассмотрены некоторые возможности использования матричного метода для математического моделирования процессов взаимодействия килвольтных электронов с многослойной полупроводниковой мишенью. Модельные расчёты проведены для процессов тепломассопереноса в двухслойной структуре: в монокристаллическом нитриде галлия на различных полупроводниковых подложках. Показано, что решение дифференциальных уравнений тепломассопереноса с правой частью, отвечающей электрофизическим параметрам плёнки нитрида галлия, в т.ч. и при проведении расчётов в ином подложечном материале, может дать лишь оценочные значения распределений неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широким пучком электронов, в результате их диффузии в такой двухслойной структуре.

Ключевые слова: матричный метод; математическое моделирование; тепломассоперенос; нитрид галлия; двухслойные полупроводниковые структуры.

SOME ASPECTS OF MATHEMATICAL MODELING OF INTERACTION OF KV ELECTRONS WITH A MULTILAYER SEMICONDUCTOR TARGET

M. A. Stepovich¹, V. V. Kalmanovich¹, E. V. Seregina²

¹) *Tsiolkovsky Kaluga State University, Stepan Razin Street 26, 248023 Kaluga, Russia*

²) *Bauman Moscow State Technical University (National Research University), Kaluga Branch, Bazhenov Street 2, 248000 Kaluga, Russia*

Corresponding author: M. A. Stepovich (m.stepovich@rambler.ru)

Some possibilities of using the matrix method for mathematical modeling of the processes of interaction of kilovolt electrons with a multilayer semiconductor target are considered. Model calculations were carried out for heat and mass transfer processes in a two-layer structure: in single-crystal gallium nitride on various semiconductor substrates. It is shown that the solution of the differential equations of heat and mass transfer with the right-hand side corresponding to the electrophysical parameters of a gallium nitride film, including when performing calculations in a different substrate material, can only give estimated values of the distributions of nonequilibrium minority charge carriers generated by a wide electron beam as a result of their diffusion in such a two-layer structure.

Key words: matrix method; mathematical modeling; heat and mass transfer; gallium nitride; two-layer semiconductor structures.

ВВЕДЕНИЕ

В полупроводниковом материаловедении при проведении исследований материалов с использованием пучков электронов наиболее часто 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, катодолюминесцентное излучение, возникающее при излучательной рекомбинации ННЗ, генерированных в полупроводниковой мишени пучком киловольтных электронов [1, 2]. Регистрация информативных сигналов, возбуждаемых в полупроводниковой мишени и сравнение экспериментальных данных с математической моделью этого явления позволяют идентифицировать параметры полупроводника, которые весьма сложно или даже невозможно определить другими методами [2–4]. Для многослойных полупроводниковых структур такие исследования могут быть проведены с использованием широких пучков электронов. При этом реализуются одномерные процессы тепломассопереноса, что в определённой степени позволяет упростить задачу математического моделирования, сведя её к одномерной, хотя даже в этом случае иногда для решения задач идентификации приходится использовать численные методы [5–8].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Кратко опишем изучаемую математическую модель. В случае 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

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

с граничными условиями

$$D^{(1)} \frac{d\Delta p^{(1)}(z)}{dz} \Big|_{z=0} = v_s^{(1)} \Delta p^{(1)}(0), \quad D^{(n)} \frac{d\Delta p^{(n)}(z)}{dz} \Big|_{z=l} = -v_s^{(n)} \Delta p^{(n)}(l). \quad (2)$$

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, \dots, 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 $z = l$) приведённые 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. 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. Для широкого электрон-

ного 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 [9], делением $\rho^{*(i)}(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары:

$$\rho^{*(i)}(z) = \frac{1.085(1 - \eta^{(i)})E_0}{\sqrt{\pi} z_{ms}^{(i)} (1 - \eta^{(i)} + \eta^{(i)} z_{ss}^{(i)} / z_{ms}^{(i)})} \left\{ \exp \left[- \left(\frac{z - z_{ms}^{(i)}}{z_{ms}^{(i)}} \right)^2 \right] + \frac{\eta^{(i)}}{1 - \eta^{(i)}} \exp \left[- \left(\frac{z - z_{ss}^{(i)}}{z_{ss}^{(i)}} \right)^2 \right] \right\}.$$

Здесь E_0 – энергия электронного пучка, рассеянная в мишени в единицу времени, $z_{ms}^{(i)}$ – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытывавшими малоугловое рассеяние и поглощёнными мишенью; $z_{ss}^{(i)}$ – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, испытывавшими в мишени рассеяние на большие углы и вышедшими из мишени; $\eta^{(i)}$ – коэффициент обратного рассеяния электронов пучка.

АЛГОРИТМ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ МАТРИЧНЫМ МЕТОДОМ

Введём вектор-столбцы V , W и матрицу K на каждом слое [7, 8, 10]:

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

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

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

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

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

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

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

В конечной точке системы слоёв, по (4), получим

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

Формула (5) связывает значения потенциала $\Delta p^{(i)}(z)$ и потока $J^{(i)}(z)$ в первой и последней точке системы слоёв, что позволяет в общем случае сводить решение краевой задачи первого, второго или третьего типа при любом конечном числе слоёв 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 (3) в многослойной среде с любым конечным числом слоев. Однако для этого необходимо знать частное решение уравнения (1). В случае, если частное решение найти не удастся или оно имеет очень сложный вид, можно по данному алгоритму получить численное решение задачи (1)–(2).

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При получении слоёв нитрида галлия с заданными свойствами большое значение имеет выбор материала подложки [11]. Технологические трудности получения объемных кристаллов III-N являются причиной того, что массовое производство подложек из этих материалов во всем мире на данный момент отсутствует. Практически все ранние прикладные разработки нитридных приборов основаны на использовании чужеродных подложек, в той или иной мере рассогласованных с III-N по параметру решетки и коэффициенту термического расширения. Эти различия во многом могут влиять и на процессы взаимодействия изначально моноэнергетических электронов с многослойной структурой. Так, в таблице приведены данные о параметрах, характерных для электронной диагностики нитрида галлия и возможных подложечных материалов.

Отличие параметров приводит к весьма существенным различиям в распределении потерь энергии электронами по глубине в этих монокристаллических материалах (см. рисунок) – и, как следствие, к существенным различиям в распределении ННЗ или температуры в результате процессов тепломассопереноса.

Математическое моделирование процессов диффузии ННЗ показало, что существенное различие в параметрах плёнки нитрида галлия и подложечного материала при проведении расчётов не позволяют использовать в правой части дифференциального уравнения (1) одно и то же значение $\rho(z)$ для точных расчётов распределений ННЗ или температуры в рассматриваемых двухслойных структурах. По-видимому, лучшие результаты могут быть получены при учёте нарушения монохроматичности первичных электронов при прохождении ими слоёв мишени [13, 14]. В то же время, даже без учёта этого явления, получаемые оценочные значения позволяют использовать описываемый метод при расчётах в многослойных мишенях.

**Параметры, характеризующие рассеяние электронов с энергией $E_0 = 20$ кэВ
в монокристаллических GaN, SiC, Si [9, 12]**

Параметры материала	GaN	SiC	Si
Коэффициент обратного рассеяния электронов пучка η	0,213	0,152	0,191
Полный пробег электронов пучка в мишени R^* , мкм	2,061	3,345	4,788
Глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощёнными мишенью Z_{ms} , мкм	0,615	1,215	1,583
Глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, испытавшими в мишени рассеяние на большие углы и вышедшими из мишени Z_{ss} , мкм	0,230	0,564	0,657

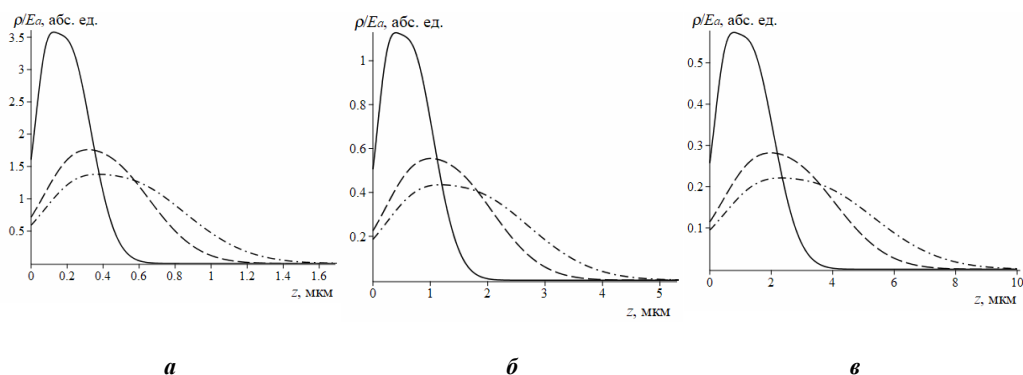


Рисунок – Нормированные на мощность E_a , выделяемую в мишенях электронным пучком, потери энергии электронами в монокристаллических нитриде галлия (сплошные кривые), карбиде кремния (пунктирные линии) и кремнии (штрих-пунктирные линии) для различных энергий электронов пучка: 10 (а), 20 (б) и 30 кэВ (в)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При математическом моделировании процессов тепломассопереноса, обусловленных взаимодействием киловольтных электронов с полупроводниковыми мишенями, решение дифференциальных уравнений тепломассопереноса с правой частью, отвечающей электрофизическим параметрам плёнки нитрида галлия, в т.ч. и при проведении расчётов в ином подложечном материале, может дать лишь оценочные значения распределений неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широким пучком электронов, в результате их диффузии в такой двухслойной структуре.

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

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Yacobi, B.G. Cathodoluminescence microscopy of inorganic solids / B.G. Yacobi, D.B. Holt – New York: Plenum Press, 1990. – 354 pp.
2. Степович, М.А. Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники: Дис. д-ра физ.-мат. наук (01.04.07). / М.А. Степович. – М.: Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 2003. – 351 с.
3. Катодолюминесцентные экспериментальные исследования транспорта экситонов в нитриде галлия / А.Н. Поляков [и др.] // Известия РАН. Серия физическая. – 2012. – Т. 76, № 9. – С. 1082–1085.
4. Двумерная диффузия и катодолюминесценция экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале: результаты математического моделирования / А.Н. Поляков [и др.] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 11. – С. 35–40.
5. О возможности реализации стохастической модели распределения неравновесных неосновных носителей заряда в полупроводниковом материале / Е.В. Серегина, А.М. Макаренко, М.А. Степович // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2009. – № 10. – С. 75–86.
6. On a Modified Projection Scheme of the Least-Squares Method for the Modeling of the Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Beam in a Homogeneous Semiconductor Material / E.V. Seregina, M.A. Stepovich, A.M. Makarenkov // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2013. – Vol. 7, No. 6. – P. 1077–1080.
7. On the Possibility of a Numerical Solution of the Heat and Mass Transfer Problem with the Combined Matrix&Generalized Powers of Bers Method / V.V. Kalmanovich, E.V. Seregina, M.A. Stepovich // J. of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1163. – 012012.
8. Comparison of analytical and numerical modeling of nonequilibrium minority charge carriers generated by a wide beam of medium-energy electrons in a two-layer semiconductor structure / V.V. Kalmanovich, E.V. Seregina, M.A. Stepovich // Journal of Physics: Conf. Series. – 2020. – Vol. 1479. – 012116.
9. Михеев, Н.Н. Распределение энергетических потерь при взаимодействии электронного зонда с веществом / Н.Н. Михеев, М.А. Степович // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 1996. – Т. 62, № 4. – С. 20–25.
10. Математическое моделирование явлений тепломассопереноса, обусловленных взаимодействием электронных пучков с многослойными планарными полупроводниковыми структурами / В.В. Калманович, Е.В. Серегина, М.А. Степович // Известия РАН. Серия физическая. – 2020. – Т. 84, № 7. – С. 1027–1033.
11. Балакирев, А. Развитие технологии нитрида галлия и перспективы его применения в СВЧ-электронике / А. Балакирев, А. Туркин // Современная электроника. – 2015. – № 4. – С. 28–32.
12. Group III nitride semiconductor compounds / Ed. by B. Gil. – Oxford: Oxford University Press, 1998. – 492 p.
13. Энергетический спектр электронов, прошедших плёночную мишень / Н.Н. Михеев, В.И. Петров, М.А. Степович // Известия РАН. Серия физическая. – 1993. – Т. 57, № 9. – С. 7–11.
14. Mikheev, N.N. The Energy Spectrum of Electrons Passing through Film Targets and some of its Applications to Electron Beam Engineering / N.N. Mikheev, M.A. Stepovich // Materials Science and Engineering B. – 1995. – Vol. 32, Nos. 1–4. – P. 11–16.