

УДК 517.9:517.28:51-7:53.09

## О НЕКОТОРЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЯВЛЕНИЙ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ОДНОРОДНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

М.А. Степович<sup>1</sup>, Е.В. Серегина<sup>2</sup>, В.В. Калманович<sup>3</sup>

1 *m.stepovich@rambler.ru*; Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского

2 *evfs@yandex.ru*; Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), Калужский филиал

3 *v572264@yandex.ru*; Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского

*Описаны основные математические модели и узловые моменты их использования для моделирования процессов теплопереноса, обусловленного киловольтными электронами в полупроводниковых материалах. Дифференциальные уравнения теплопереноса записаны для одномерных процессов, реализующихся при использовании широких электронных пучков, и трёхмерных процессов, реализующихся при использовании сфокусированных электронных пучков — электронных зондов. Проведена оценка возможности использования трёхмерной модели для моделирования распределения тепла в полупроводниковых мишенях при низких энергиях электронного зонда. Рассмотрены некоторые возможности использования предлагаемых подходов для математического моделирования явлений теплопереноса в многослойных структурах.*

**Ключевые слова:** математическое моделирование, дифференциальные уравнения, электронные пучки, полупроводники, явления теплопереноса, многослойные структуры.

В полупроводниковом материаловедении при проведении локальных исследований материалов с использованием сфокусированных пучков электронов — электронных зондов — наиболее часто (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, катодолюминесценция). На характеристики информативного сигнала также существенное влияние может оказывать температура микрообъёма, в котором этот сигнал генерируется [1, 2]; при использовании математического моделирования это приводит к необходимости решения уравнений теплопереноса. В настоящей работе рассмотрены некоторые возможности математического моделирования явлений теплопереноса в однородных и многослойных планарных структурах.

Для одномерной диффузии ННЗ в полупроводник, которая реализуется при использовании светового или широкого электронного пучка, уравнение диффузии имеет следующий вид:

1) для т. н. модели коллективного движения ННЗ (см. [3, 4])

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

с граничными условиями

$$D d\Delta p(z=0)/dz = v_s \Delta p(z=0), \quad \Delta p(\infty) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $D$ ,  $\tau$ ,  $v_s$  — постоянные для однородного полупроводника величины: диффузионная длина, время жизни и скорость их поверхностной рекомбинации ННЗ, соответственно.

Эта модель используется в электронно-зондовых технологиях достаточно давно, однако её применение ограничивается однородными полупроводниками. Отметим также, что эта математическая модель позволила провести статистический анализ коллективного движения ННЗ и оценить влияние разброса в электрофизических параметрах полупроводника на распределение ННЗ [5, 6], что может представлять интерес при моделировании полупроводниковых устройств;

2) для т. н. модели независимых источников (см. [12–14])

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

с граничными условиями

$$D d\Delta p(z=0, z_0)/dz = v_s \Delta p(z=0, z_0), \quad \Delta p(\infty, z_0) = 0, \quad (4)$$

при этом искомое распределение ННЗ после их диффузии в однородном полупроводнике  $\Delta p(z)$  находится интегрированием  $\Delta p(z, z_0)$  по  $z_0$  от нуля до бесконечности, а для многослойных мишеней интегрирование проводится в пределах слоёв с учётом непрерывности  $\Delta p(z, z_0)$  на их границе.

Задача (1) и (2) позволяет найти распределение ННЗ в однородном полупроводнике, а, с использованием (3), (4), ранее была решена задача нахождения распределения ННЗ в планарной двух- [7, 8] и трёхслойной [9–11] полупроводниковых структурах для случая постоянства  $D$ ,  $\tau$  и  $v_s$  внутри каждого слоя.

При использовании электронного зонда реализуется трёхмерная диффузия ННЗ (тепла). Соответствующее уравнение для ННЗ имеет вид:

$$a^2 \operatorname{div} [\operatorname{grad} \Delta p(M)] - \Delta p(M) = -\rho(M) \quad (5)$$

с граничными условиями  $D d\Delta p(x, y, z=0)/dz = v_s \Delta p(x, y, z=0)$ ,  $\Delta p(\infty, \infty, \infty) = 0$ .

Уравнение (5) описывает распределение частиц вследствие диффузии или перераспределение температуры мишени в результате теплопроводности. Здесь функция  $\Delta p(M)$  — распределение диффундирующего вещества (тепла);  $M(x, y, z)$  — произвольная точка мишени;  $x, y \in (-\infty, \infty)$ ,  $z \in [0, \infty)$ ,  $a = \text{const}$ . В уравнении (5) функция  $\rho(M)$  описывает источники вещества (тепла) аналогично правым частям уравнений (1) и (3).

В настоящей работе в качестве источника ННЗ и/или тепла используется модель, основанная на возможности раздельного количественного описания вклада энергии поглощенных в мишени и обратно рассеянных электронов [12–14]. Отметим, что при моделировании процесса диффузии в правых частях уравнений (1), (3), (5) должна находиться концентрации генерированных в полупроводнике ННЗ, что достигается делением выражений в правой части этих формул, описывающих выделяемую в полупроводнике энергию, на энергию образования электронно-дырочной

пары. Ранее [2, 13, 14] было показано, что эта модель может быть успешно использована для проведения количественных расчётов для широкого класса материалов в широком диапазоне энергий первичных электронов. В то же время при проведении расчётов распределений ННЗ по глубине было установлено, что в реальном вычислительном процессе ошибки округления при больших  $z$  не стремятся к нулю и это служит источником сильной вычислительной неустойчивости решения [15]. Неясно также, как это может отразиться на статистической модели тепломассопереноса (см. [6]).

Некоторые возможности численного моделирования для трёхмерной модели изучены на примере уравнения диффузии ННЗ [16]. Проведена оценка возможности использования трёхмерной модели для моделирования распределения тепла в полупроводниковых мишенях при низких энергиях электронного зонда. Стационарное уравнение тепломассопереноса в полубесконечной области решено с использованием проекционного метода Галёркина. Установлена сходимости невязки, соответствующей приближенному решению уравнения диффузии с использованием модифицированных функций Лагерра. Проведена оценка возможности использования трёхмерной модели для моделирования распределения тепла в полупроводниковых мишенях при низких энергиях электронного зонда.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16–03–00515).

## Литература

1. Гвоздовер Р. С., Петров В. И., Подтяжкин Е. Я., Степович М. А., Филиппов М. Н. *Определение электрофизических параметров полупроводников по зависимости катодолюминесценции от ускоряющего напряжения* // Известия АН СССР. Серия физическая. — 1984. — Т. 48. — № 12. — С. 2378–2383.
2. Амрастанов А. Н., Гинзгеймер С. А., Степович М. А., Филиппов М. Н. *Об одной возможности математического моделирования теплового воздействия остро сфокусированного электронного пучка на однородный полупроводник* // Известия РАН. Серия физическая. — 2016. — Т. 80. — № 10. — С. 1448–1452.
3. Everhart T. E. *Kilovolt electron energy dissipation in solids* // J. Appl. Phys. — 1960. — V. 31. — No. 10. — P. 1483–1492.
4. Kanaya K., Okayama S. *Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets* // J. Phys. D. — 1972. — V. 5. — No. 1. — P. 43–58.
5. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. *Статистический анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале, с использованием проекционного метода* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2011. — № 8. — С. 41–49.
6. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. *Статистический анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда с использованием проекционного метода* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2012. — № 4. — С. 47–55.
7. Степович М. А., Снопина М. Г., Хохлов А. Г. *Использование модели независимых источников для расчёта распределения неосновных носителей заряда, генерированных в двухслойном полупроводнике электронным пучком* // Прикладная физика. — 2004. — № 3. — С. 61–65.
8. Stepovich M. A., Khokhlov A. G., Snopina M. G. *Model of independent sources used for calculation of distribution of minority charge carriers generated in two-layer semiconductor by electron beam* // Proceedings SPIE. — 2004. — Vol. 5398. — P. 159–165.

9. Burylova I. V., Petrov V. I., Snopova M. G., Stepovich M. A. *Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multy-layer semiconducting structure by a wide electron beam* // Физика и техника полупроводников. — 2007. — Т. 41. — Вып. 4. — С. 458–461.
10. Burylova I. V., Petrov V. I., Snopova M. G., Stepovich M. A. *Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multy-layer semiconducting structure by a wide electron beam* // Semiconductors. — 2007. — Vol. 41. — No. 4. — P. 444–447.
11. Снопова М.Г., Burylova I. V., Петров В. И., Степович М. А. *Анализ модели распределений неосновных носителей заряда, генерированных в трёхслойной полупроводниковой структуре широким электронным пучком* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2007. — № 7. — С. 1–6.
12. Михеев Н. Н., Никонов И. М., Петров В. И., Степович М. А. *Определение электрофизических параметров полупроводников в растровом электронном микроскопе методами наведенного тока и катодолюминесценции* // Известия АН СССР. Серия физическая. — 1990. — Т. 54. — № 2. — С. 274–280.
13. Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А. *Количественный анализ материалов полупроводниковой оптоэлектроники методами растровой электронной микроскопии* // Известия АН СССР. Серия физическая. — 1991. — Т. 55. — № 8. — С. 1474–1482.
14. Михеев Н. Н., Степович М. А. *Распределение энергетических потерь при взаимодействии электронного зонда с веществом* // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 1996. — Т. 62. — № 4. — С. 20–25.
15. Серегина Е.В., Макаренков А. М., Степович М. А., Филиппов М. Н. *О некоторых проблемах моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2016. — № 4. — С. 88–93.
16. Макаренков А. М., Серегина Е. В., Степович М. А. *Проекционный метод Галеркина решения стационарного дифференциального уравнения диффузии в полубесконечной области* // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017. — Т. 57. — № 5. — С. 57–69.

#### ON SOME POSSIBILITIES OF MATHEMATICAL MODELING OF HEAT AND MASS TRANSFER PHENOMENA IN SEMICONDUCTING HOMOGENEOUS AND MULTILAYER STRUCTURES

M.A. Stepovich, E.V. Seregina, V.V. Kalmanovich

*The basic mathematical models and nodal moments of their usage for mathematical modeling of heat and mass transfer processes, caused by kilovolt electrons in semiconductor materials are described. Differential heat and mass transfer equations are written down for one-dimensional processes realized by the use of wide electron beams, and three-dimensional processes use of focused electron beams — electron probes. An assessment the possibility of using a three-dimensional models for modeling the heat distribution in semiconductor targets at low electron probe energies carried out. Some possibilities of using the proposed approaches for mathematical modeling of the phenomena of heat and mass transfer in multilayer structures are examined.*

Keywords: mathematical modeling, differential equations, electron beams, semiconductors, heat and mass transfer phenomena, multilayer structures.