УДК 517.983:519.2:519.6

Модифицированная модель диффузии неосновных носителей заряда в полупроводниковых материалах

Е.В. Серегина, М.А. Степович, А.М. Макаренков

Предложена модифицированная модель одномерной диффузии неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковых материалах, в которой в правой части дифференциального уравнения диффузии используется аппроксимация узкого источника малой ширины, основанная на использовании тригонометрических выражений в виде рекурсивных функций.

PACS: 572.10.Bg;72.20.Jv;72.40.+w;78.56.— a.
Ключевые слова: математическое моделирование, полупроводники, широкий электронный пучок, неосновные носители заряда, диффузия, рекурсивные функции.

Введение

Для количественного описания диффузии неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) в полупроводнике может быть использована т.н. модель независимых источников, согласно которой на диффузию генерированных внешним энергетическим воздействием неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияния другие электроны или дырки из других микрообластей материала. Математически это выражается в том, что сначала решается уравнение диффузии для каждого из точечных источников ННЗ, после чего посредством интегрирования по объему, занимаемому источниками носителей, находится концентрация ННЗ в полупроводнике в результате их диффузии. Идея такого подхода заимствована нами из классической работы [1] и широко использовалась при математическом моделировании различных аспектов стохастического процесса одномерной диффузии ННЗ, генерированных широким электронным пучком в однородном полупроводниковом материале [2–5].

В настоящей работе предложена модификация этой модели, в которой в правой части вместо дельта-функции используется аппроксимация узкого источника малой ширины, основанная на использовании тригонометрических выражений в виде рекурсивных функций [6]:

$$\begin{aligned}&\left\{f_n(z,z_0)\,\middle|\,f_n(z,z_0)=(h/2)\left(1+\sin\left(\varphi_n(z,z_0)\right)\right),\varphi_n(z)=(\pi/2)\sin\left(\varphi_{n-1}(z,z_0)\right),\right.\\&\left.\varphi_1(z,z_0)=(\pi/2)f_1(z,z_0),\ n-1\in N\right\}.\end{aligned} \quad (1)$$

В качестве начальной функции была взята функция вида $f_1(z,z_0)=\exp\left(1-(az+b)^2\right)-1$. Из условия $f_1(z_0-\delta)=f_1(z_0+\delta)=0$ находятся $a=-1/\delta$; $a=z_0/\delta$. При этих значениях коэффициентов a и b последовательность $\{f_n(z,z_0)\}$ сходится к ступенчатой функции $f(z)$:

$$f(z,z_0)=\begin{cases}h, & z\in(z_0-\delta,z_0+\delta),\\0, & z\notin(z_0-\delta,z_0+\delta).\end{cases}$$

В этом случае для одномерной диффузии в конечный полупроводник концентрация ННЗ по глубине находится как решение дифференциального уравнения

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

с граничными условиями

$$D\left.\frac{d\Delta p(z,z_0)}{dz}\right|_{z=0}=\nu_s\Delta p(0,z_0),\quad \Delta p(l,z_0)=0. \quad (3)$$

Функция $\Delta p(z,z_0)$ описывает концентрацию по глубине ННЗ, генерированных узким источником с центром, находящимся на глубине z_0, шириной 2δ и амплитудой h; z — координата, от-

Серегина Елена Владимировна, преподаватель.
Степович Михаил Адольфович, зав. кафедрой, профессор.
Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского
Россия, 248023, г. Калуга, ул. Степана Разина, 26.
Тел.: 8–909–2501433. E-mail: evfs@yandex.ru
Макаренков Александр Михайлович, доцент.
Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана.
Россия, 248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2.
Тел.: 8–985–4407309. E-mail: amm2005@rambler.ru

Статья поступила в редакцию 19 августа 2013 г.

считываемая от плоской поверхности вглубь полупроводника.

Здесь входными данными являются ρ(z) — число ННЗ, генерируемых вследствие внешнего воздействия в единицу времени в тонком слое мишени на глубине z, а D, τ и v_s — электрофизические параметры полупроводниковой мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно. Значения ρ(z) могут быть определены из соотношения для плотности энергии ρ*(z), выделяемой в этом слое мишени в единицу времени (делением ρ*(z) на энергию образования электронно-дырочной пары); для широкого электронного пучка справедлива полуэмпирическая формула работ [7, 8]:

$$\rho^*(z)=\frac{1,085(1-\eta)P_0}{\sqrt{\pi}\left(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms}\right)}\left\{\exp\left[-\left(\frac{z-z_{ms}}{z_{ms}}\right)^2\right]+\frac{\eta}{1-\eta}\exp\left[-\left(\frac{z-z_{ss}}{z_{ss}}\right)^2\right]\right\}. \quad (4).$$

Здесь z_{ms} — глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние; z_{ss} — глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами; значение z_{ms} может быть получено из диффузионной модели [9], а z_{ss} определяется как $z_{ss}= Z^{-1/3}\, z_{ms}$ (см. [7, 10]); η — коэффициент обратного рассеяния электронов зонда, $\eta=0,024eZ^{1,67}/A$, где Z и A — порядковый номер и атомный вес вещества соответственно.

Постановка задачи

Решение одномерного дифференциального уравнения диффузии для точечного источника ННЗ и некоторые возможности его использования приведены в работе [11]. Настоящая работа продолжает такие исследования и ставит перед собой задачу найти аналитическое решение уравнения (2), (3) с использованием аппроксимации ступенчатой функции $f_n(z,z_0)$, стоящей в правой части уравнения (2), обосновать предложенный метод решения и провести практические расчеты концентраций ННЗ, генерированных широким электронным пучком в полупроводниковом материале.

Обоснование метода

Аналитическое решение задачи (2), (3) с использованием аппроксимации ступенчатой функцией $f_n(z,z_0)$, стоящей в правой части уравнения (2), получено нами в виде:

$$\Delta p_n(z,z_0)=c_1\exp\left(\frac{z}{L}\right)+c_2\exp\left(-\frac{z}{L}\right)+\frac{L\tau}{2}\left[\exp\left(-\frac{z}{L}\right)\int_0^z\rho(z)f_n(z,z_0)\exp\left(\frac{z}{L}\right)dz-\right.$$
$$\left.-\exp\left(\frac{z}{L}\right)\int_0^z\rho(z)f_n(z,z_0)\exp\left(-\frac{z}{L}\right)dz\right], \quad (5)$$

где

$$c_1=-c_2\frac{S+1}{S-1},\ c_2=\frac{L\tau}{2k}\left[\exp\left(\frac{l}{L}\right)\int_0^l\rho(z)f_n(z,z_0)\exp\left(-\frac{z}{L}\right)dz-\right.$$
$$\left.-\exp\left(-\frac{l}{L}\right)\int_0^l\rho(z)f_n(z,z_0)\exp\left(\frac{z}{L}\right)dz\right],\ k=\exp\left(-\frac{l}{L}\right)-\frac{S+1}{S-1}\exp\left(\frac{l}{L}\right).$$

Здесь $L=\sqrt{D\tau}$ — диффузионная длина, а $S=\nu_s L/D$ — приведенная скорость поверхностной рекомбинации ННЗ. В этом случае для одномерной диффузии в полупроводник концентрация избыточных ННЗ по глубине дается выражением

$$\Delta p_n(z)=\int_\delta^{l-\delta}\Delta p_n(z,z_0)\,dz_0\ . \quad (6)$$

В решение (5) и (6) входят интегралы, которые находятся приближенно, методом квадратур.

Перейдем к обоснованию метода.

В работе С.В. Алюкова [6] было установлено, что в гильбертовых пространствах измеримых функций L_1 и L_2 последовательность аппроксимирующих функций $f_n(z,z_0)$ сходится по норме к исходной функции $f(z,z_0)$, т.е.

$$\left\|f(z,z_0)-f_n(z,z_0)\right\|\xrightarrow[n\to\infty]{}0.$$

Далее, опираясь на этот результат, с учетом того, что оператор

$$A(f) = \exp\left(-\frac{z}{L}\right)\int_0^z \rho(z) f(z,z_0)\exp\left(\frac{z}{L}\right)dz - \exp\left(\frac{z}{L}\right)\int_0^z \rho(z) f(z,z_0)\exp\left(-\frac{z}{L}\right)dz$$

и функционал

$$F(f) = \exp\left(\frac{l}{L}\right)\int_0^l \rho(z) f(z,z_0)\exp\left(-\frac{z}{L}\right)dz - \exp\left(-\frac{l}{L}\right)\int_0^l \rho(z) f(z,z_0)\exp\left(\frac{z}{L}\right)dz$$

являются ограниченными в пространствах L_1 и L_2, легко установить, что

$$\left\|\Delta p(z,z_0) - \Delta p_n(z,z_0)\right\| \xrightarrow[n\to\infty]{} 0 .$$

Таким образом, решения исходной задачи $\Delta p_n(z,z_0)$ являются устойчивыми, что позволяет применять предложенную выше методику (1).

Результаты расчетов и их обсуждение

Ниже представлены результатов расчётов, проведённых для параметров мишени, характерных для монокристаллического кремния с помощью математического пакета Matlab (MathWorks, Inc.). Приемлемое для проведения практических расчетов приближение функции $\Delta p(z,z_0)$ для электронного пучка с энергией E_0 = 20 кэВ было получено уже для n = 5:

$$\Delta\left(\delta p(z,z_0),\ \delta p_n(z,z_0)\right) = \\ = \frac{\left\|\Delta p(z,z_0) - \Delta p_n(z,z_0)\right\|_{L_2}}{\left\|\Delta p(z,z_0)\right\|_{L_2}} \cdot 100\ \% = \\ = 0{,}0818\ \%$$

Результаты выполненных расчетов приведены на рис. 1. Видно, что кривые точных и приближенных (формула (5)) представлений функции $\Delta p(z,z_0)$ в выбранном масштабе практически совпадают.

Оценка относительной погрешности между $\Delta p(z)$ и $\Delta p_n(z)$ для n = 5 следующая:

$$\Delta(\delta p,\ \delta p_5) = 0{,}0914\ \% .$$

Таким образом, погрешность результатов является невысокой даже для относительно небольшого n = 5, что говорит о хорошей сходимости используемой аппроксимирующей процедуры.

Результаты моделирования явления диффузии неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале из кремния для выбранных значений электрофизических параметров полупроводника представлены на рис. 1—3.

На рис. 1 изображена концентрация по глубине ННЗ, генерированных узким источником с центром, находящимся на глубине 1 мкм и шириной 0,2 мкм (график отмечен непрерывной линией) и ее приближение с использованием 5 рекурсивных функций (график крестиками). На рис. 2 изображена концентрация избыточных ННЗ после их диффузии, полученная с помощью предлагаемой модели (1), (2) (график отмечен непрерывной линией) и ее приближение с использованием 5 рекурсивных функций (график отмечен крестиками). На рис. 3 изображены относительные погрешности вычислений $E = \left|\Delta p(z,z_0) - \Delta p_n(z,z_0)\right| / \left|\Delta p_n(z,z_0)\right|$ для данных рис. 1 (кривая 1) и $E = \left|\Delta p(z) - \Delta p_n(z)\right| / \left|\Delta p_n(z)\right|$ для данных рис. 2 (кривая 2).

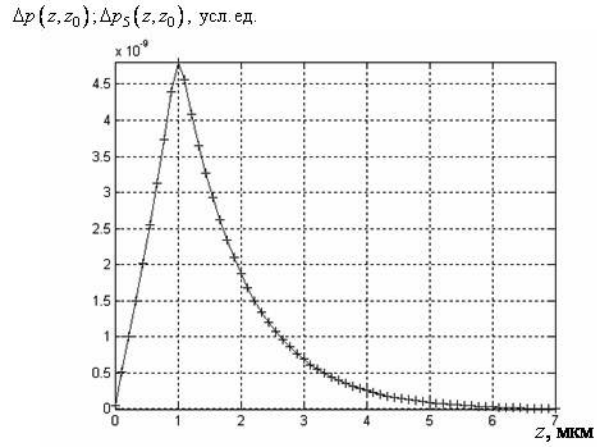

Рис. 1. Концентрация по глубине ННЗ, генерированных узким источником с центром, находящимся на глубине 1 мкм и шириной 0,2 мкм (график отмечен непрерывной линией) и ее приближение с использованием 5 рекурсивных функций (график крестиками).

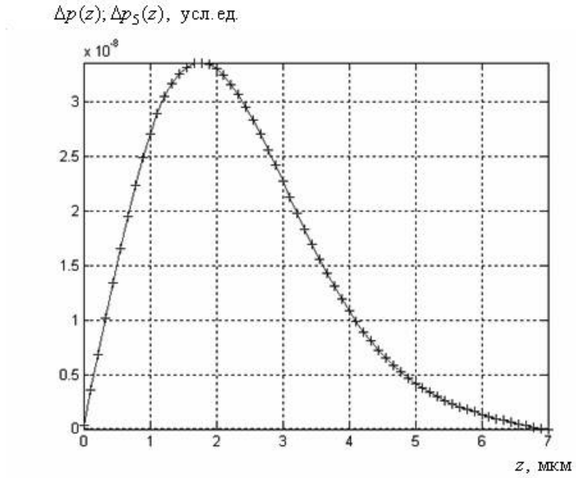

Рис. 2. Концентрация избыточных ННЗ после их диффузии, полученная с помощью предлагаемой модели (1), (2) (график отмечен непрерывной линией) и ее приближение с использованием 5 рекурсивных функций (график отмечен крестиками).

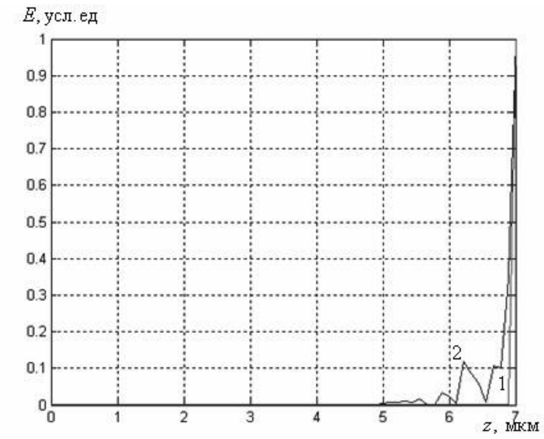

Рис. 3. Относительные погрешности вычислений для данных рис. 1 (кривая 1) и для данных рис. 2 (кривая 2).

Заключение

В работе предложена модифицированная модель диффузии ННЗ по глубине полупроводника с использованием аппроксимации узкого источника малой ширины, основанной на использовании тригонометрических выражений в виде рекурсивных функций.

Аппроксимирующие функции являются непрерывными и аналитическими, они в большей степени, чем дельта-функция и ступенчатая функция отвечают реальному источнику, кроме того, в действительности тонкий источник имеет хоть и малую, но не нулевую ширину с нечеткими расплывчатыми границами.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011), а также Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 12–02–97519).

Литература

1 *Van Roosbroeck W.* // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. No. 1. P. 380

2 *Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 6. С. 80

3 *Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 10. С. 75.

4 *Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. № 8. С. 41.

5 *Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2012. № 4. С. 47

6 *Алюков С.В.* // Математическое моделирование. 2011. Т. 23. № 3. С. 75.

7 *Михеев Н.Н., Никоноров И.М., Петров В.И., Степович М.А.* // Известия АН СССР. Серия физическая. 1990. Т. 54. № 2. С. 274

8 *Степович М.А. //* Известия РАН. Серия физическая. 2003. Т. 67. № 4. С. 588.

9 *Kanaya K., Okayama S.* // J. Phys. D. 1972. V. 5. No. 1. P. 43.

10 *Степович М.А., Самохвалов А.А., Хохлов А.Г., Чайковский М.М.* // Прикладная физика. 2004. № 2. С. 39

11 *Степович М.А.* // Вестник Калужского университета. 2008. № 1–2. С.124

The modified model of diffusion of minority charge carriers in semiconductor materials

E.V. Seregina[1], *M.A. Stepovich*[1], *and A.M. Makarenkov*[2]

[1]Tsiolkovsky Kaluga State University,
26 Stepan Razin str., Kaluga, 248023, Russia
E-mail: evfs@yandex.ru
[2]Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch,
2 Bazhenov str., Kaluga, 248000, Russia
E-mail: amm2005@rambler.ru

The modified model of an one-dimensional diffusion of minority charge carriers generated by an electronic beam in a semiconductor materials in which in a right member of a differential diffusion equation approximation of a narrow radiant of the small breadth is used, based on use of trigonometric expressions as recursive functions is offered.

PACS: 72.10.Bg;72.20.Jv;72.40.+w;78.56.— a.
Keywords: mathematical model operation, semiconductors, wide electronic beam, minority charge carriers, diffusion, recursive functions.

Bibliography ─ 11 references *Received August 19, 2013*