

О совместном применении матричного метода и аппарата обобщённых степеней Берса для математического моделирования процессов тепломассопереноса в полупроводниковых материалах электронной техники

*В.В. Калманович, М.А. Степович

Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского, г. Калуга,

*v572264@yandex.ru, m.stepovich@rambler.ru

Аннотация — Для математического моделирования явлений тепломассопереноса, обусловленных взаимодействием заряженных частиц или электромагнитного излучения с поверхностью многослойной полупроводниковой мишени, разработан матричный метод, который используется совместно с методом обобщённых степеней Берса. Разработанный метод является аналитическим и позволяет получать решение задач тепломассопереноса для произвольного количества слоёв как в случае однородной, так и неоднородной среды внутри каждого слоя. Также рассматривается возможность использования метода в качестве численного для решения неоднородных уравнений тепломассопереноса.

Ключевые слова — математическое моделирование, заряженные частицы, электромагнитное излучение, полупроводник, явления тепломассопереноса, матричный метод, обобщённые степени Берса.

I. ВВЕДЕНИЕ

При проектировании микро- и нанoeлектронных систем, работающих в условиях воздействия на них потоков заряженных частиц и/или электромагнитного излучения или использования этих явлений для диагностики таких объектов, одной из решаемых задач является теоретическая оценка степени внешнего воздействия на эти системы. В некоторых случаях решение такой задачи может быть получено методами математического моделирования. В настоящей работе изложены математические основы нового подхода к решению задач тепломассопереноса в полупроводниковых структурах микро- и нанoeлектроники, позволяющие решить рассматриваемую задачу.

Для математического моделирования явлений тепломассопереноса в однородной или многослойной среде, обусловленных взаимодействием заряженных частиц или электромагнитного излучения с полупроводниковой мишенью, ранее было предложено использовать т.н. модель независимых источников, в которой искомое распределение диффундирующего вещества или тепла в объёме материала находится как суперпозиция от точечных источников, имеющихся в каждом микрообъёме конденсированного вещества.

Математически это отвечает наличию дельта-функции в правой части дифференциального уравнения тепломассопереноса. Интегрирование полученных распределений от каждого из микрообъёмов позволяет найти искомое распределение диффундирующего вещества или тепла в объёме материала. Такой подход использован нами при расчетах как для однородного материала [1], так и для двух- [2], [3] и трёхслойных планарных полупроводниковых структур [4], [5]. Однако в планарных структурах оптоэлектроники количество слоёв существенно больше, к тому же их параметры могут иметь различные значения в различных точках материала (например, в варизонных структурах). С увеличением числа слоёв значительно увеличивается трудоёмкость задачи, так как приходится решать большое число алгебраических уравнений с большим числом параметров – отчасти поэтому нам не удалось найти алгоритм решения рассматриваемых задач тепломассопереноса при наличии четырёх и более планарных полупроводниковых слоёв. Использование других методов (операционных, вариационных, совместного использования точных и приближённых аналитических методов) приводит к различным проблемам. В этом случае, как правило, приходится решать алгебраические уравнения высоких степеней и системы алгебраических уравнений, которые могут иметь плохую обусловленность матриц коэффициентов, а в случае, когда удаётся получить аналитическое решение в виде бесконечных рядов, имеется их плохая сходимость [6].

Отметим, что для однородных материалов проведено моделирование явлений тепломассопереноса и для остро сфокусированного электронного зонда [7]-[9], в т.ч. и с использованием численных методов [10], [11]. Для использования численного решения разработан алгоритм применения проекционного метода Галеркина и получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению стационарного уравнения диффузии [12]. Для однородного полупроводникового материала этот метод позволяет находить матрицу, определяющую приближенное решение рассматриваемой задачи, не прибегая к операциям дифференцирования и интегрирования, а исполь-

зую только алгебраические операции, что существенно сокращает время вычислений. Приближенное решение содержит небольшое число (10-12) членов разложения по базису из модифицированных функций Лагерра. В то же время для многослойных структур этот метод не применялся и можно предположить, что его реализация для таких объектов может быть весьма трудоёмкой.

Ранее нами показано, что для математического моделирования явлений теплопереноса в многослойной планарной среде с произвольным числом слоёв может быть использован разработанный нами матричный метод [13], [14], использующий аппарат обобщённых степеней Берса [15], [16]. Развитию такого подхода к решению задач теплопереноса и посвящена настоящая работа, а некоторые его возможности продемонстрированы на модельных задачах.

II. ОСНОВЫ МЕТОДА

A. Первая модель

Процесс остывания (нагрева) мишени может быть описан одномерным уравнением теплопереноса

$$a_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(a_1(x) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial t},$$

где $\Phi(x, t)$ – потенциал процесса переноса, направленного нормально к поверхности мишени и границам слоёв, t – время, функции $a_1(x)$ и $a_2(x)$ определены физическими и геометрическими параметрами мишени, плотность потока описывается выражением $J = -a_1(x) \partial \Phi / \partial x$, ось x направлена по потоку.

Для удобства использования математического аппарата введём операторы

$$D_1 = a_1(x) \frac{\partial}{\partial x}, \quad D_2 = a_2(x) \frac{\partial}{\partial x}.$$

Рассмотрим многослойную среду из n плоских слоёв, расположенных от начальной координаты x_1 до конечной x_{n+1} , слои занумерованы левой координатой. Будем номер слоя ставить для данной величины сверху в скобках. Тогда процесс переноса в каждом слое определён потенциалом $\Phi^{(i)}(x, t)$ и потоком $J^{(i)}(x, t)$, которые удовлетворяют уравнениям

$$D_2^{(i)} D_1^{(i)} \Phi^{(i)} = \frac{\partial \Phi^{(i)}}{\partial t}, \quad i = \overline{1, n}, \quad (1)$$

$$J = -D_1^{(i)} \Phi, \quad i = \overline{1, n}.$$

Поставим первую краевую задачу с заданным начальным условием для многослойной среды. На границах требуем

$$\Phi^{(1)}(x_1, t) = 0, \quad \Phi^{(n)}(x_{n+1}, t) = 0.$$

Известно начальное распределение потенциала во всей среде

$$\Phi^{(i)}(x, 0) = g(x), \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = \overline{1, n}.$$

Функция $g(x)$, которая может быть разрывной, задана для всей многослойной среды. На границах слоёв примем условия идеального контакта, выраженного в непрерывности потенциала и потока во всех точках x_2, \dots, x_n .

$$\Phi^{(i)}(x_{i+1}, t) = \Phi^{(i+1)}(x_{i+1}, t), \quad J^{(i)}(x_{i+1}, t) = J^{(i+1)}(x_{i+1}, t), \\ i = \overline{1, n-1}.$$

Решение задачи будем искать методом Фурье. Частное решение уравнений (1) запишем в виде

$$\Phi^{(i)}(x, t) = u^{(i)}(x) e^{-\lambda^2 t}, \quad j^{(i)} = -D_1^{(i)} u^{(i)}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Амплитудная функция $u^{(i)}(x)$ удовлетворяет уравнению

$$D_2^{(i)} D_1^{(i)} u^{(i)}(x) + \lambda^2 u^{(i)}(x) = 0$$

и граничным условиям

$$u^{(1)}(x_1) = 0, \quad u^{(n)}(x_{n+1}) = 0, \quad (2)$$

$$u^{(i)}(x_{i+1}) = u^{(i+1)}(x_{i+1}), \quad i = \overline{1, n}.$$

Следовательно, для $u^{(i)}(x)$ поставлена задача Штурма-Лиувилля при разрывных коэффициентах в основном уравнении.

В работе [17] было получено решение задачи Коши для каждого слоя

$$u^{(i)}(x) = u^{(i)}(x_i) \cos \lambda X_i(x, x_i) - \frac{1}{\lambda} j^{(i)}(x_i) \sin \lambda X(x, x_i), \quad (3) \\ j^{(i)}(x) = u^{(i)}(x_i) \lambda \sin \lambda \tilde{X}_i(x, x_i) + j^{(i)}(x_i) \cos \lambda \tilde{X}(x, x_i).$$

Здесь функции, входящие в решения, представлены в форме Берса [15], [16].

Введём вектор-столбцы $V^{(i)}(x)$, $V^{(i)}(x_i)$ и матрицу K

$$V^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} u^{(i)}(x) \\ j^{(i)}(x) \end{pmatrix}, \quad V^{(i)}(x_i) = \begin{pmatrix} u^{(i)}(x_i) \\ j^{(i)}(x_i) \end{pmatrix},$$

$$K^{(i)}(x, x_i) = \begin{pmatrix} \cos \lambda X_i(x, x_i) & -\frac{1}{\lambda} \sin \lambda X_i(x, x_i) \\ \lambda \sin \lambda \tilde{X}_i(x, x_i) & \cos \lambda \tilde{X}_i(x, x_i) \end{pmatrix}.$$

Тогда решение (3) запишем в виде

$$V^{(i)}(x) = K^{(i)}(x, x_i) V^{(i)}(x_i).$$

Для крайней точки i -го слоя получим

$$V^{(i)}(x_{i+1}) = K^{(i)}(x_{i+1}, x_i) V^{(i)}(x_i). \quad (4)$$

Выражение (4), учитывая контактные условия

$$V^{(i)}(x_{i+1}) = V^{(i+1)}(x_{i+1}),$$

будем применять последовательно, начиная с первого слоя, тогда получим:

$$V^{(i)}(x) = K^{(i)}(x, x_1)V^{(1)}(x_1), \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \quad (5)$$

где $K^{(i,1)}(x, x_1) = K^{(i)}(x, x_i)K^{(i-1)}(x_i, x_{i-1}) \dots K^{(1)}(x_2, x_1)$.

Выражение (5) определяет значения потенциала $u^{(i)}(x)$ и потока $j^{(i)}(x)$ в i -ом слое через значения $u^{(1)}(x_1)$ и $j^{(1)}(x_1)$ в начальной точке системы. В конечной точке системы слоёв получим

$$V^{(n)}(x_{n+1}) = K^{(n,1)}(x_{n+1}, x_1)V^{(1)}(x_1). \quad (6)$$

Обозначив элементы матрицы $K^{(n,1)}$ в формуле (6) как $k_{ij}^{(n,1)}$, запишем

$$\begin{aligned} u^{(n)}(x_{n+1}) &= k_{11}^{(n,1)}u^{(1)}(x_1) + k_{12}^{(n,1)}j^{(1)}(x_1), \\ j^{(n)}(x_{n+1}) &= k_{21}^{(n,1)}u^{(1)}(x_1) + k_{22}^{(n,1)}j^{(1)}(x_1). \end{aligned} \quad (7)$$

Для задачи Штурма-Ливуилля, когда выполняется условие (2), согласно системе (7), получим

$$k_{12}^{(n,1)} = 0. \quad (8)$$

Условие (8) определяет собственные значения λ_k , соответствующее ему решение обозначим $u_k^{(i)}(x)$.

Чтобы нормализовать базисные функции, найдём

$$N_k^2 = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{a_2^{(i)}} (u_k^{(i)})^2 dx,$$

тогда соответствующие собственные функции найдём по формулам $f_k^{(i)} = u_k^{(i)}/N_k$.

Коэффициенты в разложении Фурье определяются из скалярного произведения

$$c_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} g(x) \frac{1}{a_2^{(i)}} u_k^{(i)} dx.$$

Таким образом, решение уравнения запишется в виде

$$\Phi^{(i)}(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k f_k^{(i)}(x) e^{-\lambda_k^2 t}.$$

Для расчетов была взята модельная задача теплопроводности с постоянными коэффициентами в каждом слое. Коэффициенты уравнения (1) имеют вид $a_1^{(i)} = \lambda_c^{(i)}(x)$, $a_2^{(i)} = 1/(c^{(i)}(x)\rho^{(i)}(x))$, где $\lambda_c^{(i)}$, $c^{(i)}(x)$, $\rho^{(i)}(x)$ – коэффициент теплопроводности, теплоёмкость и плотность среды соответственно на i -м

слое. В случае, когда в каждом слое значения физических параметров постоянны, матрица K имеет вид

$$K^{(i)}(x, x_1) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\lambda(x-x_1)}{\sqrt{a_1^{(i)}a_2^{(i)}}} & -\frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{a_2^{(i)}}{a_1^{(i)}}} \sin \frac{\lambda(x-x_1)}{\sqrt{a_1^{(i)}a_2^{(i)}}} \\ \lambda \sqrt{\frac{a_1^{(i)}}{a_2^{(i)}}} \sin \frac{\lambda(x-x_1)}{\sqrt{a_1^{(i)}a_2^{(i)}}} & \cos \frac{\lambda(x-x_1)}{\sqrt{a_1^{(i)}a_2^{(i)}}} \end{pmatrix}.$$

В. Вторая модель

В общем виде одномерный стационарный процесс тепломассопереноса в многослойной среде может быть задан уравнением

$$D_2^{(i)} D_1^{(i)} \Phi^{(i)}(x) - m_i^2 \Phi^{(i)}(x) = \mu^{(i)}(x), \quad i = \overline{1, n}, \quad (9)$$

где $\mu^{(i)}(x)$ – величина, пропорциональная объёмной плотности мощности распределения источников. В точке контакта слоёв задаются условия непрерывности потенциала и потока.

Если значения потенциала $\Phi^{(1)}(x_1)$ и потока $J^{(1)}(x_1)$ заданы, то для уравнения (9) поставлена задача Коши.

Введём вектор-столбцы V , W и матрицу K

$$V^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} \Phi^{(i)}(x) \\ J^{(i)}(x) \end{pmatrix}, \quad W^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} w^{(i)}(x) \\ -D_1^{(i)} w^{(i)}(x) \end{pmatrix},$$

$$K^{(i)}(x, x_1) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} mX_i(x, x_1) & -m^{-1} \operatorname{sh} mX_i(x, x_1) \\ -m \operatorname{sh} m\tilde{X}_i(x, x_1) & \operatorname{ch} m\tilde{X}_i(x, x_1) \end{pmatrix},$$

где $w^{(i)}(x)$ – частное решение уравнения (9) для i -ого слоя.

В работе [18] было показано, что

$$V^{(i)}(x) = L^{(i,1)}(x, x_1)V^{(1)}(x_1) + \sum_{j=1}^i L^{(i,j)}(x, x_j) (W^{(j-1)}(x_j) - W^{(j)}(x_j)) + W^{(i)}(x), \quad (10)$$

где $L^{(i,j)}(x, x_j) = K^{(i)}(x, x_i)K^{(i-1)}(x_i, x_{i-1}) \dots K^{(j)}(x_{j+1}, x_j)$ при $i \geq j$, $W^{(0)}(x_1) = 0$.

Обозначим $K^{(u)}(x_{n+1}) = L^{(n,1)}(x_{n+1}, x_1)$ – общую K -матрицу всей системы слоёв, а вектор дополнительных потоков

$$W^{(u)}(x_{n+1}) = W^{(n)}(x_{n+1}) + \sum_{j=1}^n L^{(n,j)}(x_{n+1}, x_j) (W^{(j-1)}(x_j) - W^{(j)}(x_j)),$$

тогда в конечной точке системы слоёв получим

$$V(x_{n+1}) = K^{(u)}(x_{n+1})V^{(1)}(x_1) + W^{(u)}(x_{n+1}).$$

Формула (10) даёт аналитическое решение задачи Коши для уравнения (9) при произвольном количестве слоёв.

Например, применяя метод для решения дифференциального уравнения, описывающего диффузию неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных широким электронным пучком в многослойной полупроводниковой мишени [14]

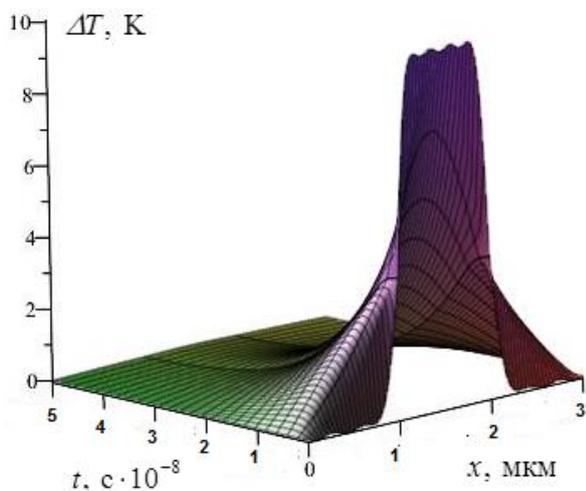
$$D^{(i)} \frac{d^2 \Delta p^{(i)}(x)}{dz^2} - \frac{\Delta p^{(i)}(x)}{\tau^{(i)}} = -\rho^{(i)}(x), \quad i = \overline{1, n} \quad (11)$$

с граничными условиями

$$D^{(1)} \frac{d\Delta p^{(1)}(z)}{dz} \Big|_{z=0} = v_s \Delta p^{(1)}(0), \quad \Delta p^{(n)}(\infty) = 0, \quad (12)$$

где v_s – скорость поверхностной рекомбинации ННЗ, получим, что $a_1^{(i)}(x)$ равно коэффициенту диффузии $D^{(i)}$ в i -м слое, и $a_2^{(i)}(x)$ равно времени жизни $\tau^{(i)}$ ННЗ в i -ом слое, $m = 1$, а $\mu^{(i)}(x) = -\tau^{(i)} \cdot \rho^{(i)}(x)$, где $\rho^{(i)}(x)$ – плотность ННЗ, генерированных в полупроводнике в i -м слое. При постоянных коэффициентах уравнения на i -м слое матрица K принимает вид

$$K^{(i)}(x, x_i) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} \frac{x-x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & -\sqrt{\frac{\tau^{(i)}}{D^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{x-x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \\ -\sqrt{\frac{D^{(i)}}{\tau^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{x-x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & \operatorname{ch} \frac{x-x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \end{pmatrix}.$$



III. РЕЗУЛЬТАТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ниже на модельных задачах проиллюстрированы некоторые возможности разрабатываемого подхода.

A. Первая модель

Для иллюстрации некоторых возможностей разработанного метода на рис. 1 рассмотрена модельная трёхслойная полупроводниковая структура Si-Ge-Si, обладающая симметрией относительно середины среды по последовательности слоёв, их толщине и нагреву.

Толщина каждого слоя принималась равной 1 мкм. К моменту отключения источника нагрева внутренний слой нагрет на $\Delta T = 10K$, внешние слои не нагреты ($\Delta T = 0K$). Полученное распределение температуры, как и следовало ожидать, обладает симметрией, на границах слоёв имеются изломы графика температуры, с увеличением времени температура убывает до нуля для всех точек полупроводника.

Корректность получаемых результатов при использовании разработанного метода проверялась также при моделировании нагрева и остывания однородных сред – см. рис. 2.

Здесь представлены результаты моделирования процесса остывания однородного полупроводника, кремния, который условно был разбит также на три слоя толщиной каждый по 1 мкм, при этом внутренний слой считался нагретым на $\Delta T = 10K$, а внешние слои не нагреты ($\Delta T = 0K$). Как и ожидалось, для однородного материала распределение температуры обладает симметрией, на границах условных слоёв график температуры гладкий, что соответствует однородности среды, с увеличением времени температура убывает до нуля для всех точек полупроводника.

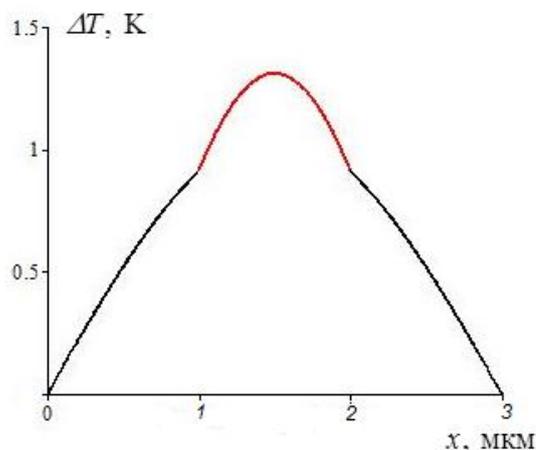


Рис. 1. Слева – график остывания трехслойной симметричной структуры Si-Ge-Si. Справа – соответствующее распределение температуры по глубине при $t = 10^{-8}$ с. В начальный момент времени нагрет только средний слой, толщина каждого слоя 1 мкм

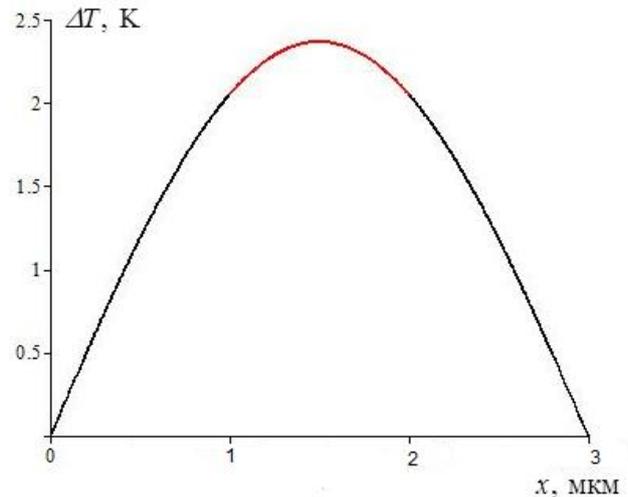
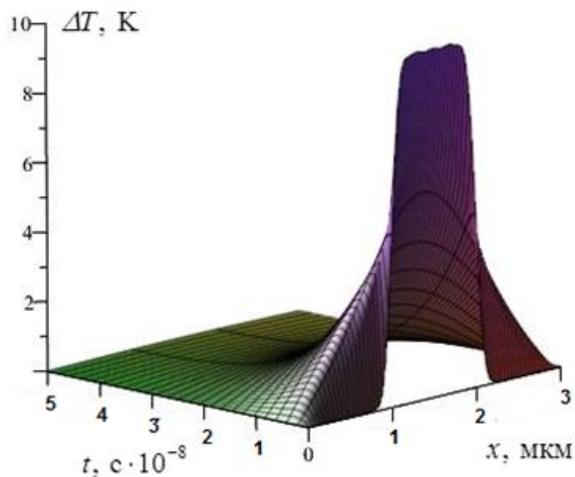


Рис. 2. Слева – график остывания однородного полупроводника Si. Справа – соответствующее распределение температуры по глубине при $t = 10^{-8}$ с. В начальный момент времени нагрета только средняя часть – от 1 до 2 мкм

В. Вторая модель

На рис. 3 представлено распределение плотностей потерь энергии электронами пучка в кремнии, арсениде галлия и теллуриде кадмия, нормированные на величину энергии, выделяемой в мишенях в единицу времени – см. [7], [19], [20]. При проведении расчетов использованы параметры мишени, характерные для указанных полупроводниковых материалов. При падении киловольтных электронов на полупроводниковый материал в последнем генерируются неосновные носители заряда (ННЗ), распределение концентрации которых по глубине описывается уравнениями (11), (12).

Правая часть уравнения (11) представляет собой сумму двух функций гауссовского типа, поэтому аналитическое решение (11), (12) имеет довольно сложный вид. В подобных ситуациях или когда аналитическое решение задачи найти вообще не удаётся, разрабатываемый матричный метод можно использовать как численный. Для этого материал разбивается на большое число планарных слоёв, на каждом из которых правая часть заменяется, например, на константу. Чтобы исследовать такую возможность применения матричного метода, мы сравнивали

результаты аналитического решения с результатами матричного метода. Графики распределений концентрации ННЗ для кремния при разбиении глубины полупроводника в пределах 10 мкм на 20 слоёв одинаковых размеров представлены на рис. 4. Расчёты проводились для электрофизических параметров материала, характерных для выбранного типа мишени: скорости поверхностной рекомбинации $v_s = 10^{10}$ мкм/с, коэффициента диффузии $D = 10^8$ мкм²/с, времени жизни ННЗ $\tau = 10^{-8}$ с, диффузионной длины $L = \sqrt{D\tau} = 1$ мкм. В выбранном масштабе кривые, полученные численно матричным методом, совпадают с кривыми, построенными по аналитическому решению. Однако оценка относительной погрешности результатов показала, что в приповерхностном слое погрешность очень высока, и наибольшее значение имеет при $z = 0$ мкм. Это может объясняться неизбежностью округлений при вычислении аналитического результата, недостаточным количеством слоёв разбиения и др. При увеличении числа слоёв относительная погрешность уменьшается, при этом сохраняя наибольшие значения близко к поверхности полупроводника.

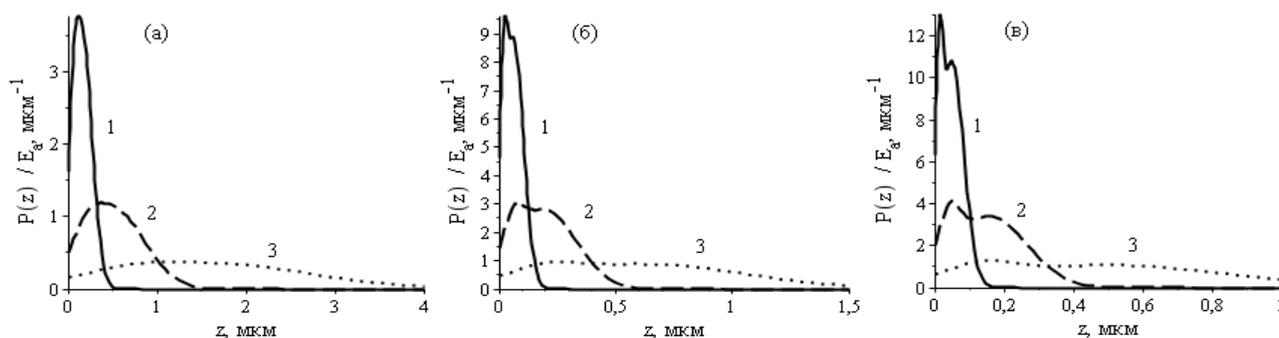


Рис. 3. Распределение плотностей потерь энергии электронами пучка $P(z)$ в Si (а), GaAs (б) и CdTe (в), нормированные на величину мощности E_d , выделяемой в мишени, и рассчитанные для энергии электронов 5 (кривая 1), 10 (кривая 2), 20 (кривая 3) кэВ

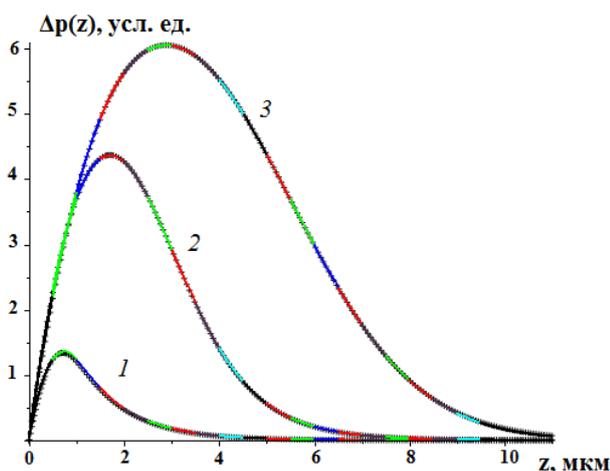


Рис. 4. Результаты численного моделирования распределения НЗ в кремнии матричным методом при разбиении участка от 0 мкм до 10 мкм на 20 слоёв (участки на кривых выделены разными цветами). Энергия электронов пучка $E_0 = 10$ кэВ (кривая 1), $E_0 = 20$ кэВ (кривая 2), $E_0 = 30$ кэВ (кривая 3)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основное достоинство совместного использования матричного метода и метода обобщенных степеней Берса для моделирования тепломассопереноса состоит в возможности его применения к произвольному числу слоёв среды. Результаты расчетов показывают перспективность развития предлагаемого подхода для моделирования процесса переноса в полупроводниковых материалах, в том числе для численного моделирования, как в случае однородной, так и неоднородной среды.

ПОДДЕРЖКА

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00515) и гранта РФФИ и правительства Калужской области (проект № 18-42-400001).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А. Использование модели независимых источников для расчета распределения неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317-1322.
- [2] 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.
- [3] Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G. Model of independent sources used for calculation of distribution of minority charge carriers generated in two-layer semiconductor by electron beam // Proc. SPIE. 2004. V. 5398. P. 159-165.
- [4] Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A. Mathematical simulation of distribution of minority charge carriers, generated in multi-layer semiconducting structure by a wide electron beam // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. Вып. 4. С. 458-461.
- [5] Снопина М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А. Анализ модели распределений неосновных носителей заряда, генерированных в трёхслойной полупроводниковой структуре широким электронным пучком // Поверхность. Рентген, синхротрон. и нейтрон. исследования. 2007. № 7. С.1-6.
- [6] Кузнецова А.Э. Разработка численно-аналитических методов решения задач тепломассопереноса и термоупругости для однослойных и многослойных тел: Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.18. – Самара: СГТУ, 2014. 145 с.
- [7] 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 // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 10. С. 1448-1452.
- [8] Амрастанов А.Н., Кузин А.Ю., Митюхляев В.Б., Серегина Е.В., Степович М.А., Тодуа П.А., Филиппов М.Н. Тепловое воздействие электронного зонда при рентгеноспектральном наноанализе // Измерительная техника. 2017. № 6. С. 13-15.
- [9] Stepovich M.A., Amrastanov A.N., Seregina E.V., and Filippov M.N. On one peculiarity of the model describing the interaction of the electron beam with the semiconductor surface // Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 955. P. 012040 (6 p.).

- [10] Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренко А.М., Филиппов М.Н. О возможности использования проекционного метода Галеркина для моделирования пространственного распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным зондом в полупроводнике // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исследования. 2017. № 9. С. 91-97.
- [11] Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренко А.М. Анализ трехмерной модели диффузии неосновных носителей заряда, генерированных электронным зондом в однородном полупроводниковом материале, с использованием проекционных методов // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исследования. 2018. № 1. С. 93-100.
- [12] Макаренко А.М., Серегина Е.В., Степович М.А. Проекционный метод Галеркина решения стационарного дифференциального уравнения диффузии в полубесконечной области // Журнал вычислительной математики и мат. физики. 2017. Т. 57. № 5. С. 801-813.
- [13] Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. О возможности приложения аппарата Берса к моделированию процессов тепломассопереноса, обусловленного электромагнитным излучением, в планарной многослойной среде // Тр. XXIV международ. науч.-техн. конф. по фотоэлектронике и приборам ночного видения (24-27 мая 2016 г., г. Москва, Гос. науч. центр РФ-АО «НПО «Орион»). – М.: АО «НПО «Орион», 2016. С. 471-474.
- [14] Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. О возможности приложения аппарата Берса к моделированию процессов тепломассопереноса, обусловленного электронами в планарной многослойной среде // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исследования. 2017. № 10. С. 105-110.
- [15] Bers L., Gelbart A. On a Class of Functions Defined by Partial Differential Equations // Transactions of the American Mathematical Society. 1944. V. 56. P. 67-93.
- [16] Гладышев Ю.А. Метод обобщенных степеней Берса и его приложение в математической физике. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2011. 204 с.
- [17] Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. Приложение методов аппарата Берса к задачам процессов переноса в многослойной среде // Вестник Калужского университета. 2015. №3. С. 5-10.
- [18] Калманович В.В. О построении решений задач теории переноса в многослойной среде при наличии распределённых источников // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий: Сборник трудов VIII международной конференции. Воронеж: Научная книга, 2015. С. 166-169.
- [19] Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А. Количественный анализ материалов полупроводниковой оптоэлектроники методами растровой электронной микроскопии // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. № 8. С. 1474-1482.
- [20] 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.

On the Joint Application of the Matrix Method and the Apparatus of Generalized Powers of Bers for Mathematical Modeling of Heat and Mass Transfer in Semiconductor Materials of Electronic Engineering

*V.V. Kalmanovich, M.A. Stepovich

Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga,
*v572264@yandex.ru, m.stepovich@rambler.ru

Abstract — The paper presents some possibilities for the joint use of the matrix method and the method of generalized powers of Bers for mathematical modeling of heat and mass transfer caused by the interaction of charged particles or electromagnetic radiation with the surface of a multilayer semiconductor target. The proposed matrix method is analytical, it is applicable to solve the problems of heat and mass transfer in a homogeneous or multilayered medium with shift, axial or central symmetry for an arbitrary number of layers, including the case when the parameters of the layers are variable, i.e. the layers are not homogeneous. Such a generality is achieved by using the apparatus of generalized powers of Bers. Simulation is reduced to the sequential multiplication of second-order functional matrices whose components at each point are determined by the physical and geometric parameters of the current layer.

The solution of nonstationary problems of heat and mass transfer is based on the classical Fourier method, and its

combination with the proposed matrix method makes it possible to find a solution of the problem relatively easily in the case of a multilayered medium. Some possibilities of this approach are demonstrated by the example of solving a nonstationary homogeneous heat conduction equation (cooling process) for a three-layer material.

When the stationary inhomogeneous problem of heat and mass transfer is solved, it is necessary to know its any particular solution. In cases where the analytic expression of a particular solution is difficult to find or fails, the matrix method can be applied as a numerical method. In this case, the entire material is divided into a large number of thin layers and the right side on each layer is assumed to be equal, for example, to a constant. The possibility of such approach is demonstrated by the example of solving a stationary inhomogeneous diffusion problem for a homogeneous material with segmentation into 20 layers.

Keywords — mathematical modeling, charged particles, electromagnetic radiation, semiconductor, heat and mass transfer phenomena, matrix method, generalized powers of Bers.

REFERENCES

- [1] Belov A.A., Petrov V.I., Stepovich M.A. Ispol'zovaniye modeli nezavisimyykh istochnikov dlya raschyota raspredeleniya neosnovnykh nositeley zaryada, generirovannykh v poluprovodnikovom materiale elektronnyim puchkom (The use of the model of independent sources for the calculation of the dispersion of minority charge carriers, generated in a semiconductor material by an electron beam) // *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya*. 2002. T. 66. N. 9. S. 1317-1322.
- [2] Khokhlov A.G., Snopova M.G., Stepovich M.A. Simulation of the Distribution of Minority Carriers, Generated in a Two-Layer Semiconductor Structure by a Wide Electron Beam. // *Crystallography Reports*. 2004. V. 49. Suppl. 1. P. S114-S117.
- [3] Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G. Model of independent sources used for calculation of distribution of minority charge carriers generated in two-layer semiconductor by electron beam // *Proc. SPIE*. 2004. V. 5398. P. 159-165.
- [4] 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. V. 41. No. 4. P. 444-447.
- [5] Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A. Analysis of a Model of Minority Charge-Carrier Distributions Generated in a Three-Layer Semiconductor Structure by a Wide Electron Beam // *J. of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2007. V. 1, No. 4. P. 406-410.
- [6] Kuznetsova A.E. Razrabotka chislenno-analiticheskikh metodov resheniya zadach teplomassoperenosa i termouprugosti dlya odnosloynnykh i mnogoslouynnykh tel (Development of numerical and analytical methods for solving heat and mass transfer and thermoelasticity problems for single-layer and multilayer bodies): Dissertatsiya ... kandidata tekhnicheskikh nauk: 05.13.18. – Samara: SGTU, 2015. 145 s.
- [7] Amrastanov A.N., Ginzgheymer S.A., Stepovich M.A., Filippov M.N. On Possibility of Mathematically Modeling the Thermal Effect of a Finely Focused Electron Beam on a Homogeneous Semiconductor // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2016. V. 80. Issue 10. P. 1290-1294.
- [8] Amrastanov A.N., Kuzin A.Yu., Mityukhlyayev V.B., Seregina E.V., Stepovich M.A., Todua P.A., Filippov M.N. Thermal Action of an Electronic Probe with X-ray Spectral Nanoanalysis // *Measurement Techniques*. 2017. V. 60. Issue 6. P. 534-537.
- [9] Stepovich M.A., Amrastanov A.N., Seregina E.V., and Filippov M.N. On one peculiarity of the model describing the interaction of the electron beam with the semiconductor surface // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2018. V. 955. P. 012040 (6 p.).
- [10] Seregina E.V., Stepovich M.A., Makarenkov A.M., and Filippov M.N. On the Possibility of Using the Galerkin Projection Method to Model the Spatial Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Probe in a Semiconductor // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2017. V. 11. Issue 5. P. 981-986.
- [11] Seregina E.V., Stepovich M.A., and Makarenkov A.M. Analysis of the Three-Dimensional Model of Diffusion of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Probe in a Heterogeneous Semiconductor Material by Means of Projection Methods // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2018. V. 12. Issue 1. P. 80-86.
- [12] Makarenkov A.M., Seregina E.V., Stepovich M.A. The Projection Galerkin Method for Solving the Time-Independent Differential Diffusion Equations in a Semi-Infinite Domain // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2017. V. 57. No. 5. P. 802-814.
- [13] Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., Stepovich M.A. O vozmozhnosti prilozheniya apparata Bersa k modelirovaniyu protsessov teplomassoperenosa, obuslovlennogo elektromagnitnym izlucheniym, v planarnoy mnogoslouynnoy srede (On the possibility of application of Bers's apparatus to the modeling of heat and mass transfer processes, which is caused by electromagnetic radiation, in a planar multilayer environment) // *Trudy XXIV mezhdunarodnoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii po fotoelektronike i priboram nochnogo videniya (24-27 maya 2016 goda, Moskva, Gosudarstvennyy nauchnyy tsentr Rossiyskoy Federatsii-AO "NPO "Orion")*. – Moskva: AO "NPO "Orion", 2016. S. 471-474.
- [14] Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., and Stepovich M.A. On the Possibility of Applying the Bers Apparatus to Modeling the Processes of Heat and Mass Transfer Caused by Electrons in a Planar Multilayer Medium // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2017. V. 11. Issue 5. P. 1096-1100.
- [15] Bers L., Gelbart A. On a Class of Functions Defined by Partial Differential Equations // *Transactions of the American Mathematical Society*. 1944. V. 56. P. 67-93.
- [16] Gladyshev Yu.A. Metod obobshyonnikh stepeney Bersa i yego prilozheniye v matematicheskoy fizike (The method of generalized powers of Bers and its application in mathematical physics). Kaluga: KGU im. Tsiolkovskogo, 2011. 204 s.
- [17] Gladyshev Yu.A., Kalmanovich V.V., Stepovich M.A. Prilozheniye metodov apparata Bersa k zadacham protsessa perenosa v mnogoslouynnoy srede (The application of methods of Bers' theory to solution of the problem of transport processes in a multilayer medium) // *Vestnik Kaluzhskogo universiteta*. 2015. N. 3. P. 5-10.
- [18] Kalmanovich V.V. O postroyenii resheniy zadach teorii perenosa v mnogoslouynnoy srede pri nalichii raspredelyonnykh istochnikov (On the construction of solutions to the problems of transport theory in a multilayered medium in the presence of distributed source) // *Sovremennyye metody prikladnoy matematiki, teorii upravleniya i kompyuternykh tekhnologiy: Sbornik trudov VIII mezhdunarodnoy konferentsii*. Voronezh: Nauchnaya kniga, 2015. P. 166-167.
- [19] Mikheev N.N., Petrov V.I., Stepovich M.A. Quantitative Analysis of Semiconductor Optoelectronic Materials by Raster Electron Microscopy // *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Physical Series*. 1991. V. 55. No. 8. P. 1-9.
- [20] Mikheev N.N., Stepovich M.A. Distribution of Energy Losses in Interaction of an Electron Probe with Material // *Industrial Laboratory*. 1996. V. 62. No. 4. P. 221-226.