

**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

Основы метода

Первая модель (нестационарная задача)

Уравнение процесса остывания
$$a_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(a_1(x) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = \frac{\partial \Phi}{\partial t}.$$

Поток
$$J = -a_1(x) \frac{\partial \Phi}{\partial x}.$$

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

Процесс теплопереноса в многослойной среде

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

Первая краевая задача

$$\Phi^{(1)}(x_1, t) = 0, \quad \Phi^{(n)}(x_{n+1}, t) = 0.$$
$$\Phi^{(i)}(x, 0) = g(x), \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = \overline{1, n}.$$

Условия идеального контакта на границах слоев

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

Частное решение уравнений

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

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

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

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

Решение задачи Коши для каждого слоя

$$u^{(i)}(x) = u^{(i)}(x_i) \cos \lambda X_i(x, x_i) - \frac{1}{\lambda} j^{(i)}(x_i) \sin \lambda X(x, x_i),$$

$$j^{(i)}(x) = u^{(i)}(x_i) \lambda \sin \lambda \tilde{X}_i(x, x_i) + j^{(i)}(x_i) \cos \lambda \tilde{X}(x, x_i).$$

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

Решение задачи Коши в матричной форме

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

Решение задачи Коши в матричной форме $V^{(i)}(x) = K^{(i)}(x, x_i)V^{(i)}(x_i)$.

Идеальный контакт слоев в матричной форме

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

Решение для первого слоя

$$V^{(1)}(x) = K^{(1)}(x, x_1)V^{(1)}(x_1), \quad x_1 \leq x \leq x_2.$$

Для крайней точки 1-го слоя получим

$$V^{(1)}(x_2) = K^{(1)}(x_2, x_1)V^{(1)}(x_1) = V^{(2)}(x_2),$$

тогда решение для второго слоя

$$V^{(2)}(x) = K^{(2)}(x, x_2)V^{(2)}(x_2) = K^{(2)}(x, x_2)K^{(1)}(x_2, x_1)V^{(1)}(x_1).$$

Выполняя далее по слоям последовательную подстановку, получим

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

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

В конечной точке системы слоёв получим

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

Условие определения собственных значений λ_k

$$k_{12}^{(n,1)} = 0,$$

соответствующие собственные функции

$$f_k^{(i)} = \frac{u_k^{(i)}}{N_k},$$

где $u_k^{(i)}(x)$ – базисные функции, $N_k^2 = \sum_{i=1}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{a_2^{(i)}} (u_k^{(i)})^2 dx$.

Коэффициенты в разложении Фурье

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

Решение уравнения

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

Результаты моделирования (первая модель)

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

Коэффициенты уравнения имеют вид $a_1^{(i)} = \lambda_c^{(i)}(x)$, $a_2^{(i)} = \frac{1}{c^{(i)}(x)\rho^{(i)}(x)}$.

При постоянных значениях физических параметров матрица K имеет вид

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

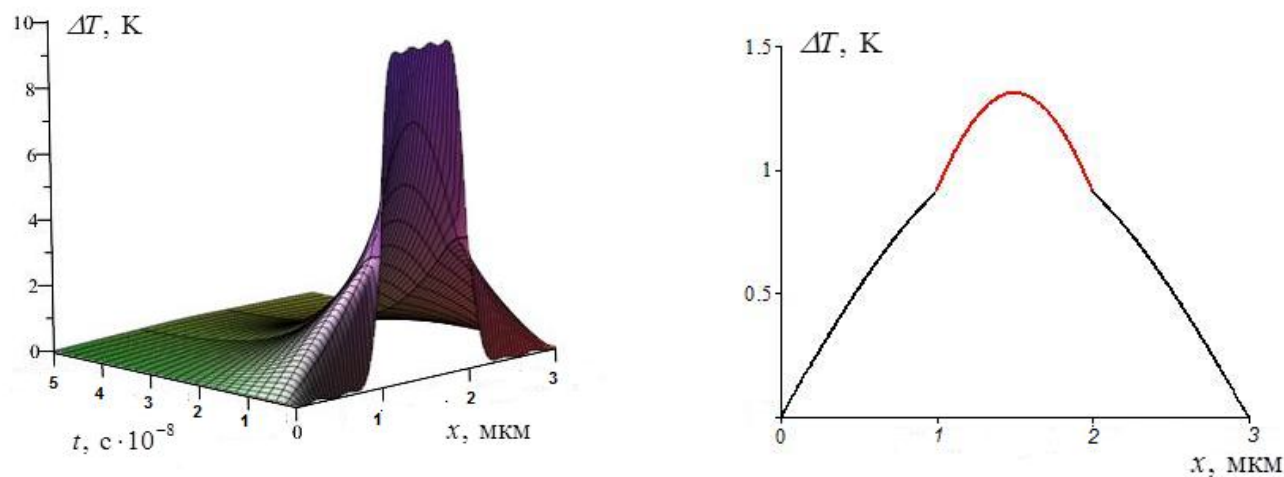


Рис. 1. Слева – график остывания *трехслойной* симметричной структуры Si-Ge-Si. Справа – соответствующее распределение температуры по глубине при $t = 10^{-8} c$.

В начальный момент времени нагрет только средний слой, толщина каждого слоя 1 мкм.

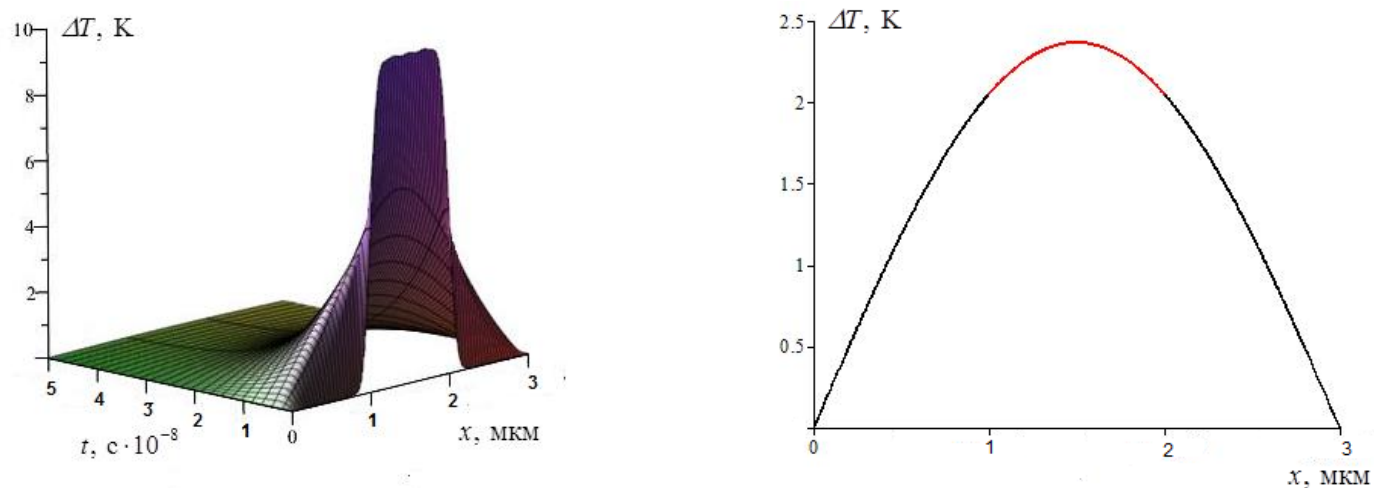


Рис. 2. Слева – график остывания *однородного* полупроводника Si. Справа – соответствующее распределение температуры по глубине при $t = 10^{-8} c$.

В начальный момент времени нагрева только средняя часть – от 1 до 2 мкм.

ОСНОВЫ МЕТОДА

Вторая модель (стационарная задача)

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

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

$$V^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} \Phi^{(i)}(x) \\ J^{(i)}(x) \end{pmatrix}, \quad W^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} w^{(i)}(x) \\ -D_1^{(i)} w^{(i)}(x) \end{pmatrix}, \quad K^{(i)}(x, x_i) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} mX_i(x, x_i) & -\frac{1}{m} \operatorname{sh} mX_i(x, x_i) \\ -m \operatorname{sh} m\tilde{X}_i(x, x_i) & \operatorname{ch} m\tilde{X}_i(x, x_i) \end{pmatrix},$$

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

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 $i \geq j$, $W^{(0)}(x_1) = 0$.

В конечной точке системы слоёв получим

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

где $K^{(u)}(x_{n+1}) = L^{(n,1)}(x_{n+1}, x_1)$, $W^{(u)}(x_{n+1}) = W^{(n)}(x_{n+1}) + \sum_{j=1}^n L^{(n,j)}(x_{n+1}, x_j) \left(W^{(j-1)}(x_j) - W^{(j)}(x_j) \right)$.

Результаты моделирования по второй модели

$$a_2(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(a_1(x) \frac{\partial}{\partial x} \Phi^{(i)}(x) \right) - m_i^2 \Phi^{(i)}(x) = \mu^{(i)}(x), \quad i = \overline{1, n}.$$

$$a_1^{(i)}(x) = D^{(i)}, \quad a_2^{(i)}(x) = \tau^{(i)}, \quad m = 1, \quad \mu^{(i)}(x) = -\tau^{(i)} \cdot \rho^{(i)}(x).$$

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

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

При постоянных коэффициентах уравнения на i -м слое матрица K принимает вид

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

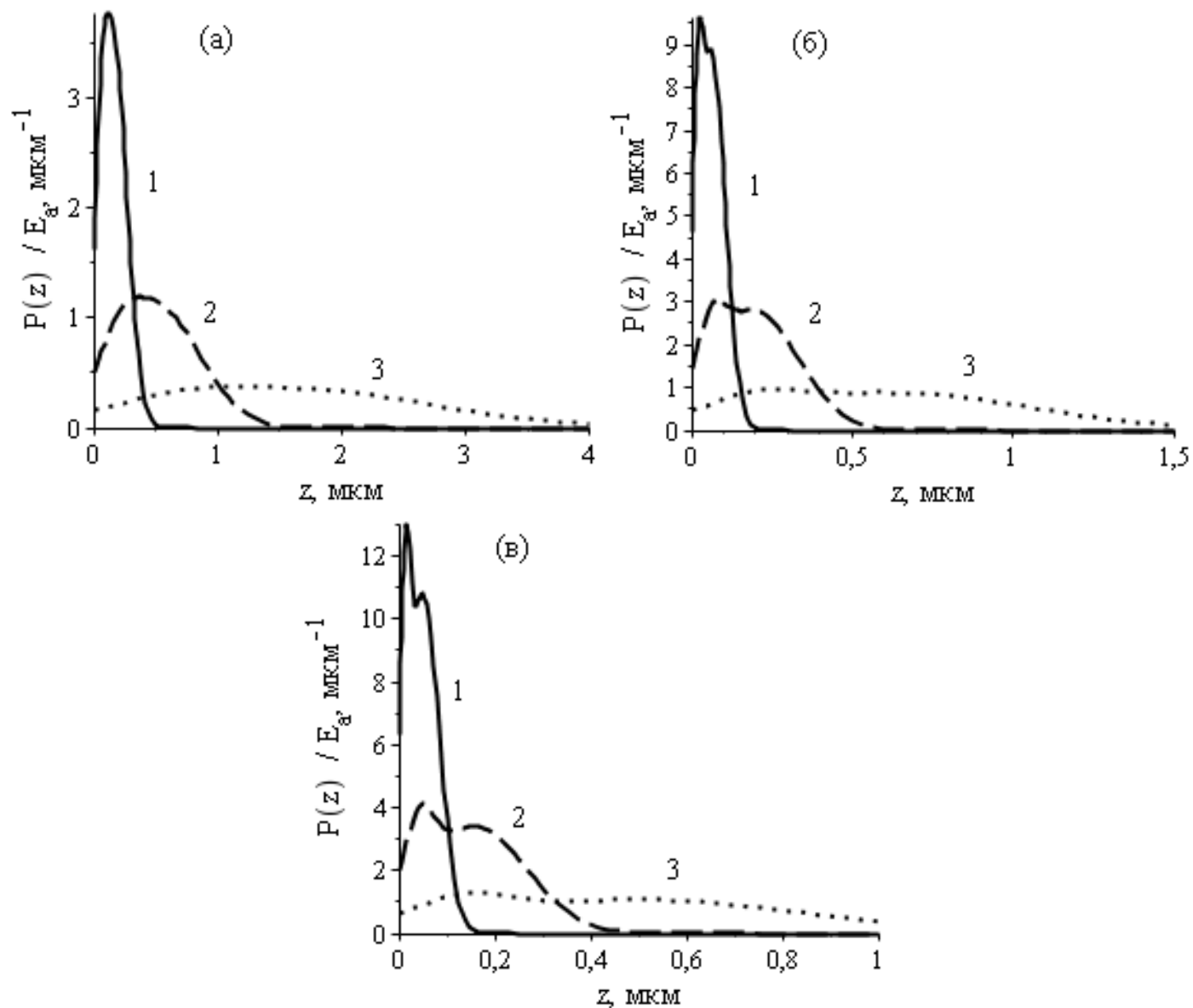


Рис. 3. Распределение плотностей потерь энергии электронами пучка $P(z)$ в Si (а), GaAs (б) и CdTe (в), нормированные на величину мощности E_a , выделяемой в мишени, и рассчитанные для энергии электронов 5 (кривая 1), 10 (2), 20 (3) кэВ.

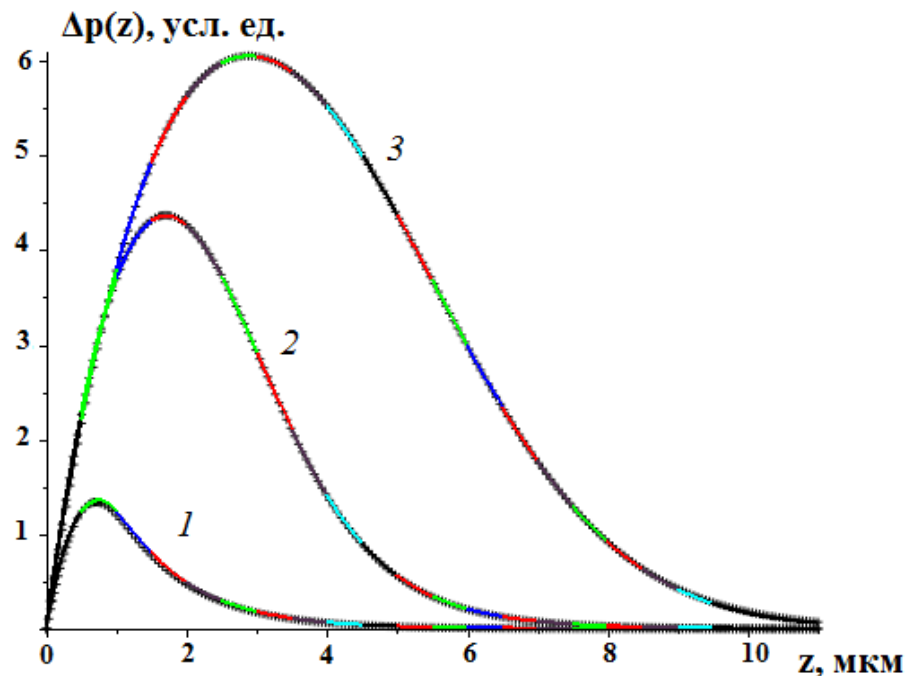


Рис. 4. Результаты моделирования распределения ННЗ в кремнии. Энергия электронов пучка $E_0 = 10$ кэВ (кривые 1), $E_0 = 20$ кэВ (кривые 2), $E_0 = 30$ кэВ (кривые 3). В выбранном масштабе кривые, полученные приближенно матричным методом при разбиении участка от 0 мкм до 10 мкм на 20 слоёв (участки на кривых выделены разными цветами), совпали с соответствующими кривыми, построенными по аналитической формуле.

Расчёты проводились для электрофизических параметров материала, характерных для выбранного типа мишени: времени жизни ННЗ $\tau = 10^{-8}$ с, скорости поверхностной рекомбинации $v_s = 10^{10}$ мкм/с, коэффициента диффузии $D = 10^8$ мкм²/с, диффузионной длины $L = \sqrt{D\tau} = 1$ мкм.

ПОДДЕРЖКА

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00515) и гранта РФФИ и правительства Калужской области (проект № 18-41-400001).

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 multy-layer semiconducting structure by a wide electron beam // Физика и техника полупроводников. 2007. Т. 41. Вып. 4. С. 458-461.
- [5] Снопина М.Г., Бурылова 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 нанонализе // 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., Макаренков 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., Макаренков 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] Макаренков 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 междунар. 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. // 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.