

Распределение неосновных носителей заряда после их диффузии от тонкого планарного источника в полубесконечном полупроводниковом материале с дефектами на поверхности

© В.В. Калманович¹, М.А. Степович¹,
Е.В. Серегина², А.К. Горбунов²

¹Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского,
Калуга, 248023, Россия

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, Калуга, 248000, Россия

С помощью методов математического моделирования рассмотрена задача диффузии неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных в полупроводнике широким электронным пучком. Изучено влияние дефектов на поверхности полупроводника на распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника в полубесконечном полупроводнике. Расчеты проведены для различных материалов полупроводниковой электроники.

Ключевые слова: *распределение неосновных носителей заряда, дефект, полупроводниковые материалы, электронный пучок.*

Введение. Согласно так называемой модели независимых источников, на диффузию генерированных электронным пучком неравновесных ННЗ из любого микрообъема проводника не оказывают влияния электроны или дырки из других микрообластей материала. В этом случае для одномерной диффузии в полубесконечный полупроводник распределение избыточных ННЗ по глубине описывается выражением

$$\Delta p(z) = \int_0^{\infty} \Delta p(z, z_0) dz_0,$$

где функция $\Delta p(z, z_0)$ показывает распределение по глубине ННЗ, генерированных плоским бесконечно тонким источником, находящимся на глубине z_0 , $z_0 \in [0, \infty)$; z — координата, отсчитываемая от плоской поверхности в глубь проводника.

Распределение $\Delta p(z, z_0)$ находят как решение дифференциального уравнения

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z, z_0)}{\tau_0} = -\rho(z) \delta(z - z_0)$$

с граничными условиями

$$D \frac{d\Delta p(z, z_0)}{dz} \Big|_{z=0} = v_s \Delta p(0, z_0), \quad \Delta p(\infty, z_0) = 0.$$

Здесь $\rho(z)$ — число ННЗ, генерируемых вследствие внешнего воздействия в единицу времени в тонком слое мишени на глубине z (значения $\rho(z)$ могут быть определены из соотношения для плотности энергии $\rho^*(z)$, выделяемой в этом слое мишени в единицу времени, т. е. делением $\rho^*(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары); D , τ_0 и v_s — коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно; $\delta(z - z_0)$ — дельта-функция.

Идея решения этого уравнения для однородного полупроводникового материала приведена в [1–3], а различные варианты ее использования применительно к планарным полупроводниковым структурам — в [4–9]. В рассматриваемом случае для однородного материала

$$\Delta p(z, z_0) = \begin{cases} \frac{\tau_0}{2L} \rho(z_0) \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right] & \forall z \in [0, z_0]; \\ \frac{\tau_0}{2L} \rho(z_0) \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right] & \forall z \in [z_0, \infty]. \end{cases}$$

Здесь $L = \sqrt{D\tau_0}$ — диффузионная длина ННЗ; $S = v_s L / D$ — приведенная скорость поверхностной рекомбинации.

В реальных полупроводниках существуют как собственные, так и несобственные дефекты. Ранее в основном исследовались единичные дефекты в приповерхностной области [10–12], в этих ситуациях задачу диффузии решали с помощью трехмерной модели. Случаи, когда дефекты концентрируются в основном на поверхности, не рассматривались.

В полупроводниковом материале возможно большое число дефектов как на поверхности, так и в объеме. В данной работе рассмотрен случай, когда концентрация дефектов на поверхности существенно выше и концентрацией дефектов в объеме при моделировании можно пренебречь. Тогда возможно использование модели независимых источников.

Постановка задачи. Рассмотрим влияние на распределение ННЗ $\Delta p(z, z_0)$ дефектов на поверхности полупроводника после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0 .

В этом случае время жизни ННЗ описывается соотношением, указанным в [10], которое в рамках модели независимых источников можно записать в виде

$$\frac{1}{\tau(z)} = \frac{1}{\tau_0} + \frac{b}{\tau_1} \delta(z),$$

где τ_0 — время жизни ННЗ в области без дефекта; τ_1 — время жизни ННЗ внутри дефекта; b — физический размер дефекта; $\delta(z)$ — дельта-функция.

Тогда дифференциальное уравнение принимает вид

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \left(\frac{1}{\tau_0} + \frac{b}{\tau_1} \delta(z) \right) \Delta p(z, z_0) = -\rho(z) \delta(z - z_0)$$

с граничными условиями

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

В работе [13] получено решение этого уравнения:

$$\Delta p(z, z_0) = \begin{cases} \frac{L}{2DS_1} \rho(z_0) \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[S_1 \exp\left(\frac{z}{L}\right) + \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \right] & \forall z \in [0, z_0]; \\ \frac{L}{2DS_1} \rho(z_0) \left[S_1 \exp\left(\frac{z_0}{L}\right) + \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \right] \exp\left(-\frac{z}{L}\right) & \forall z \in [z_0, \infty]. \end{cases}$$

Здесь $L = \sqrt{D\tau_0}$ — диффузионная длина ННЗ; $S_1 = (D/L + v_s + b/\tau_1) / (D/L - v_s - b/\tau_1)$ — коэффициент.

Для расчетов распределений ННЗ в случаях однородного полупроводника и полупроводника с дефектами на поверхности были взяты следующие значения электрофизических параметров: $L = 1$ мкм, $\tau_0 = 10^{-8}$ с, $\tau_1 = 10^{-11}$ с, $D = 10^8$ мкм²/с, $v_s = 10^7$ мкм/с, энергия первичных электронов пучка $E_0 = 20$ кэВ, мощность пучка первичных электронов $P_0 = 10$ Вт, размер дефекта принимали равным 10^{-2} мкм. Значения $\rho(z_0)$ рассчитывали с помощью полученных для диффузионной модели формул, указанных в [1]:

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

где $\eta = 0,024eZ^{5/3}/A$ — коэффициент обратного рассеяния электронов пучка; Z и A — соответственно атомная масса и порядковый номер элемента в периодической таблице; z_{ms} — глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытывавшими малоугловое рассеяние и поглощенных мишенью; z_{ss} — глубина максимальных потерь энергии обратнорассеянными электронами.

Значения z_{ms} и z_{ss} вычисляли (в микрометрах) по формулам [9]

$$z_{ms} = \frac{1,38 \cdot 10^{-2} A E_0^{5/3}}{\rho(z_0) Z^{8/9}} \left(1 - \frac{0,042 Z^{4/3}}{(1 + 0,187 Z^{2/3})^2} \right);$$

$$z_{ss} = Z^{-1/3} z_{ms},$$

где E_0 — в килоэлектрон-вольтах.

Результаты расчетов при различных значениях z_0 для разных материалов представлены на рис. 1–3.

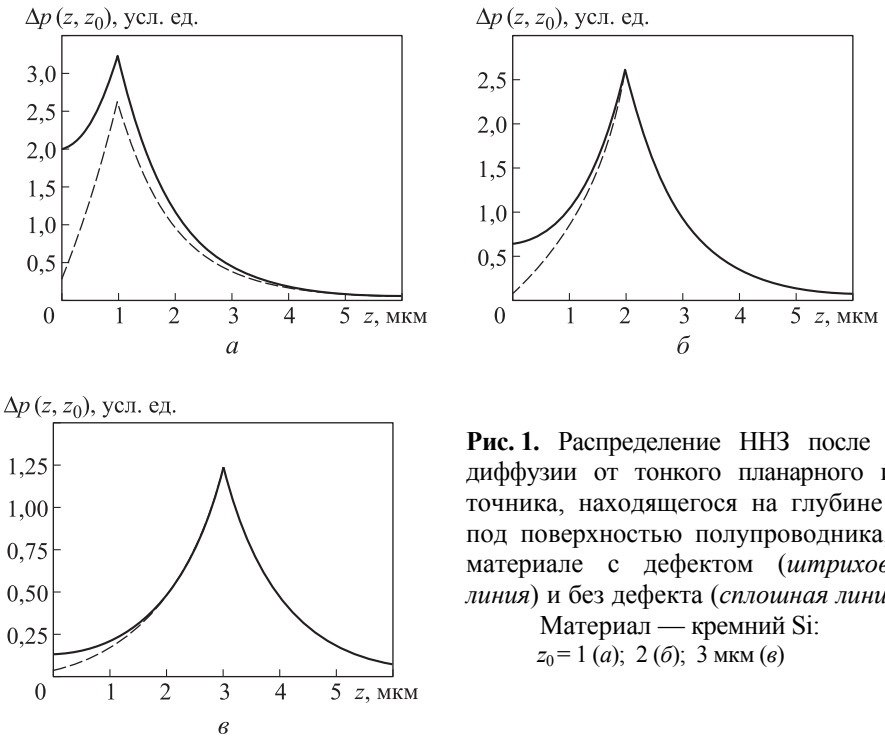


Рис. 1. Распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0 под поверхностью полупроводника, в материале с дефектом (штриховая линия) и без дефекта (сплошная линия).

Материал — кремний Si:
 $z_0 = 1$ (а); 2 (б); 3 мкм (в)

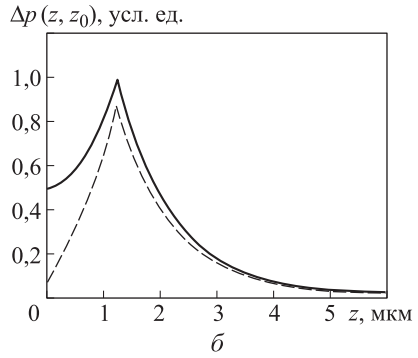
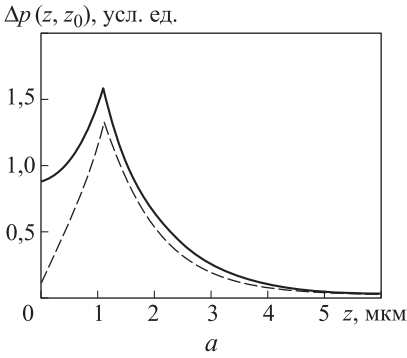


Рис. 2. Распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0 под поверхностью полупроводника, в материале с дефектом (*штриховая линия*) и без дефекта (*сплошная линия*).

Материал — арсенид галлия GaAs:
 $z_0 = 1,1$ (а); 1,25 (б); 1,4 мкм (в)

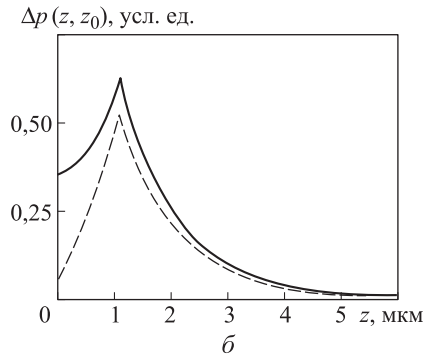
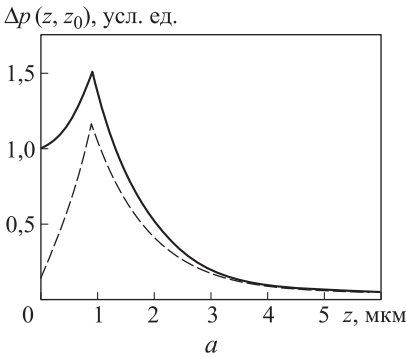
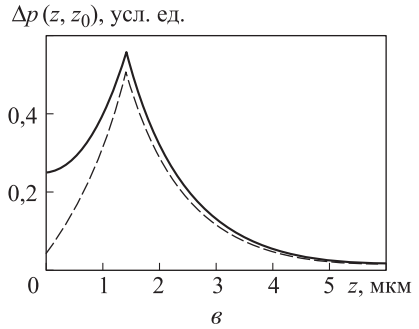
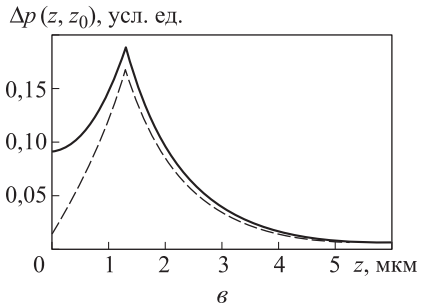


Рис. 3. Распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0 под поверхностью полупроводника, в материале с дефектом (*штриховая линия*) и без дефекта (*сплошная линия*).

Материал — теллурид кадмия CdTe:
 $z_0 = 0,9$ (а); 1,1 (б); 1,3 мкм (в)



Влияние дефекта на распределение ННЗ по глубине полупроводника достаточно заметно уже при значении $v_s \leq 10^9$ мкм/с. В частности, при $v_s = 10^7$ мкм/с и $z = 0$ отношение

$$\frac{|\Delta p_{\text{деф}}(z, z_0) - \Delta p(z, z_0)|}{|\Delta p(z, z_0)|} \cdot 100\%$$

составляет 47,6 % для любого материала и при любом значении z_0 [14].

Также можно оценить влияние точечного дефекта на поверхности полупроводника на распределение ННЗ по глубине:

$$\delta = \frac{\|\Delta p_{\text{деф}}(z, z_0) - \Delta p(z, z_0)\|}{\|\Delta p(z, z_0)\|} \cdot 100\%.$$

Значение δ убывает с увеличением z_0 и при фиксированном z_0 будет одинаковым для любого материала (рис. 4).

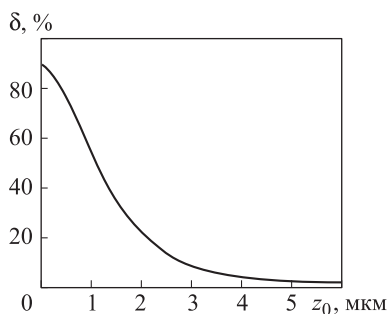


Рис. 4. Оценка δ влияния дефекта на поверхности полупроводника на распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0

Выводы. В работе на примере различных полупроводниковых материалов показано влияние дефекта на поверхности на распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника, находящегося на глубине z_0 , а также дана оценка этого влияния. Выполнен первый этап задачи о распределении избыточных ННЗ по глубине после их диффузии в полупроводник с дефектами на поверхности.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011), а также Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 14-42-03062).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Михеев Н.Н., Никоноров И.М., Петров В.И., Степович М.А. Определение электрофизических параметров полупроводников в растровом электронном микроскопе методами наведенного тока и катодоллюминесценции. *Известия АН СССР. Серия физическая*, 1990, т. 54, № 2, с. 274–280.
- [2] 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. *Известия АН. Серия физическая*, 2002, т. 66, № 9, с. 1317–1322.
- [3] Степович М.А. Оценка точности расчета распределений неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком. *Известия РАН. Серия физическая*, 2003, т. 67, № 4, с. 588–592.
- [4] Степович М.А., Снопова М.Г., Хохлов А.Г. Использование модели независимых источников для расчета распределения неосновных носителей заряда, генерированных в двухслойном полупроводнике электронным пучком. *Прикладная физика*, 2004, № 3, с. 61–65.
- [5] 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, vol. 49, suppl. 1, pp. S114–S117.
- [6] 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, vol. 5398, pp. 159–165.
- [7] 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.
- [8] Снопова М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А. Анализ модели распределений неосновных носителей заряда, генерированных в трехслойной полупроводниковой структуре широким электронным пучком. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2007, № 7, с. 1–6.
- [9] 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.
- [10] Hsu J.W.P. Near-Field Scanning Optical Microscopy Studies of Electronic and Photonic Materials and Devices. *Materials Science and Engineering*, 2001, vol. 33, pp. 1–50.
- [11] Xu Q., Gray M.H., Hsu J.W.P. Resolution and Contrast in Near-Field Photocurrent Imaging of Defects on Semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 82 (2), 1997, pp. 748–755.
- [12] Donolato C., Klann H. Computer Simulation of SEM Electron Beam Induced Current Images of Dislocations and Stacking Faults. *Journal of Applied Physics*, 51 (3), 1980, pp. 1624–1623.

- [13] Калманович В.В., Серегина Е.В., Степович М.А. Нахождение распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале с дефектом на поверхности. *Научные труды Калужского государственного университета имени К.Э. Циолковского. Серия Естественные науки*, 2014. Калуга, Изд-во КГУ им. К.Э. Циолковского, 2014, с. 39–42.
- [14] Калманович В.В., Серегина Е.В., Степович М.А. О влиянии точечного дефекта на поверхности полупроводника на распределение неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковых материалах. *Вестник Калужского университета*, 2014, № 1, с. 23–26.

Статья поступила в редакцию 16.04.2015

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Калманович В.В., Степович М.А., Серегина Е.В., Горбунов А.К. Распределение неосновных носителей заряда после их диффузии от тонкого планарного источника в полубесконечном полупроводниковом материале с дефектами на поверхности. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2015, вып. 4.

URL: <http://engjournal.ru/catalog/msm/hidden/1387.html>

Калманович Вероника Валерьевна — старший преподаватель кафедры высшей математики Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского. Область научных интересов: математическое моделирование физических явлений.
e-mail: veronique@ukr.net

Серегина Елена Владимировна — канд. физ.-мат. наук, ассистент кафедры «Системы автоматического управления» Калужского филиала Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: приближенные методы решения задач математической физики. Награждена Почетным знаком им. Е.Р. Дашковой второй степени (2013 г.). e-mail: evfs@yandex.ru

Степович Михаил Адольфович — д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры высшей математики Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского, Область научных интересов: математическое моделирование и экспериментальное изучение физических явлений, связанных с взаимодействием заряженных частиц и электромагнитного излучения с конденсированным веществом. Обладатель премии им. К.Э. Циолковского правительства Калужской области за научную работу (2004 г.), премии им. А.Я. Хинчина правительства Калужской области за научную работу (2007 г.). e-mail: m.stepovich@rambler.ru

Горбунов Александр Константинович окончил МФТИ в 1971 г. Д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой «Физика» Калужского филиала МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: исследование процессов переноса в полупроводниках. e-mail: kf.mgtu_fiz@mail.ru

The distribution of minority carriers in semi-infinite semiconductor material with defects on the surface after their diffusion from a thin planar source

© V.V. Kalmanovich¹, M.A. Stepovich¹, E.V. Seregina², A.K. Gorbunov²

¹Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga, 248023, Russia

²Bauman Moscow State Technical University, Kaluga branch, Kaluga, 28000, Russia

The article considers application of mathematical modeling methods for solving the problem of diffusion of minority carriers (MC), generated in the semiconductor by wide electron beam. The influence of defects on the semiconductor surface on the distribution of MC after their diffusion from a thin planar source into a semi-infinite semiconductor was investigated. The calculations were performed for various materials of semiconductor electronics.

Keywords: *distribution of minority carriers, defect, semiconductor materials, electron beam.*

REFERENCES

- [1] Mikheev N.N., Nikonorov I.M., Petrov V.I., Stepovich M.A. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya — Proceedings of the USSR AS. Series: Physics*, 1990, vol. 54, no. 2, pp. 82–88.
- [2] Belov A.A., Petrov V.I., Stepovich M.A. *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya — Proceedings of the RAS. Series: Physics*, 2002, vol. 66, no. 9, pp. 1317–1322.
- [3] Stepovich M.A. *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya — Proceedings of the RAS. Series: Physics*, 2003, vol. 67, no. 4, pp. 588–592.
- [4] Stepovich M.A., Snopova M.G., Khokhlov A.G. *Prikladnaya fizika — Applied Physics*, 2004, no. 3, pp. 61–65.
- [5] 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, vol. 49, suppl. 1, pp. S114–S117.
- [6] 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, vol. 5398, pp. 159–165.
- [7] 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* [In Russian: *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*], 2007, vol. 41, no. 4, pp. 458–461.
- [8] Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A. *Poverkhnost. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neitronnye issledovaniya — Surface. X-Ray, Synchrotron and Neutron Research*, 2007, no. 7, pp. 1–6.
- [9] Mikheev N.N., Petrov V.I., Stepovich M.A. *Izvestiya AN SSSR. Seriya fizicheskaya — Proceedings of the USSR AS. Series: Physics*, 1991, vol. 55, no. 8, pp. 1–9.
- [10] Hsu J.W.P. Near-field scanning optical microscopy studies of electronic and photonic materials and devices. *Materials Science and Engineering*, 2001, vol. 33, pp. 1–50.

- [11] Xu Q., Gray M.H., Hsu J.W.P. Resolution and contrast in near-field photocurrent imaging of defects on semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 82 (2), 1997, pp. 748–755.
- [12] Donolato C., Klann H. Computer simulation of SEM electron beam induced current images of dislocations and stacking faults. *Journal of Applied Physics*, 51 (3), 1980, pp. 1624–1623.
- [13] Kalmanovich V.V., Seregina E.V., Stepovich M.A. *Nauchnye Trudy kaluzhskogo gosudarstvennogo universiteta im. K.E. Tsiolkovskogo. Seriya: Estestvennye nauki — Proceedings of the Tsiolkovsky Kaluga State University. Series: Natural sciences*, 2014, pp. 39–42.
- [14] Kalmanovich V.V., Seregina E.V., Stepovich M.A. *Vestnik Kaluzhskogo universiteta — Bulletin of Kaluga University*, 2014, no.1, pp. 23–26.

Kalmanovich V.V., senior lecturer of the Department of Higher Mathematics at Tsiolkovsky Kaluga State University. Research interests: mathematical modeling of physical phenomena. e-mail: veronique@ukr.net

Seregina E.V., candidat of sciences (Phys.-Math), assistante lecturer at the Department of Automatic Control Systems at Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch. Research interests: approximate methods for solving problems in mathematical physics. Awarded by E.R. Dashkova honor badge, second degree (2013). e-mail: evfs@yandex.ru

Stepovich M.A., Dr. Sci. (Phys.-Math.), professor at the Department of Higher Mathematics at Tsiolkovsky Kaluga State University. Winner of the Tsiolkovsky Prize of The Government of the Kaluga region for scientific work (2004.), of the Khinchin Prize of Government of the Kaluga region for scientific work (2007). Research interests: mathematical modeling and experimental investigations of physical phenomena associated with the interaction of charged particles and electromagnetic radiation with condensed matter. e-mail: m.stepovich@rambler.ru

Gorbunov A.K. graduated from Moscow Institute of Physics and Technology in 1971. Dr. Sci. (Phys.-Math.), professor, Head of the Department of Physics at Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch. Research interests: transport processes in semiconductors. e-mail: kf.mgtu_fiz@mail.ru