

2. Борисов С. С., Грачев Е. А., Зайцев С. И. Моделирование поляризации диэлектрика в процессе облучения электронным пучком// Там же. № 1. С. 118.
3. Конников С. Г., Соловьев В. А., Уманский В. Е., Чистяков В. М. Функция генерации электронно-дырочных пар в полупроводниках $A^{III}B^V$ при возбуждении электронным пучком// ФТП. 1987. Т. 21. Вып. 11. С. 2028—2032.
4. Phys. Status Solidi (a). 1985. 87(1). P. 383.
5. Oelgart G., Scholz H.// Ibid. 1983. 75(2). P. 547.
6. Oelgart G., Werner U.// Ibid. 1984. 85(1). P. 205.
7. J. Phys. D// Appl. Phys. 1988. 21. P. 116—124.
8. Бакалейников Л. А., Галактионов Е. В. и др. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия// Физика твердого тела. 2001. Т. 43. Вып. 5.

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

Computation of charge and energy deposited during electron beam irradiation depth distributions in discrete looses approximation

S. S. Borisov, E. A. Grachev

M. V. Lomonosov State University, Physical Facility, Moscow, Russia

S. I. Zaitsev

Institute of Problems of Microelectronic Technology, Russian Academy of Science, Chernogolovka, Moscow region, Russia

Problems of simulation of deposited during beam irradiation charge and energy (dose) simulation. Results obtained using Monte-Carlo method in discrete and continuous looses. Analytical approximations for depth-dose and charge-dose for Si, Au, Ag, Cu, GaN obtained.

УДК 537.533.35; 535.37; 535.08

Математическое моделирование зависимостей интенсивности монохроматической катодолюминесценции от энергии электронов пучка для двухслойной полупроводниковой структуры

М. Г. Снопина

Калужский филиал Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана, Калуга, Россия

А. Г. Хохлов

Факультет физики и геологии Лейпцигского университета, г. Лейпциг, Германия

Н. Н. Михеев

Научно-исследовательский центр "Космическое материаловедение" Института кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Калуга, Россия

М. А. Степович

Калужский государственный педагогический университет им. К. Э. Циолковского, Калуга, Россия

Рассмотрены возможности моделирования зависимости интенсивности монохроматической катодолуминесценции от энергии электронов пучка для двухслойной полупроводниковой структуры на основе GaAs, диффузия неосновных носителей заряда в которой описана с использованием модели независимых источников.

Использование катодолуминесцентного (КЛ) излучения, возникающего при взаимодействии пучка электронов с полупроводниковой мишенью, в ряде случаев позволяет получать информацию об объекте исследования, которую нельзя либо весьма сложно получить другими способами [1]. В частности, использование зависимости электронов интенсивности монохроматической КЛ, генерированной широким электронным пучком в прямозонной планарной двухслойной структуре, от энергии может позволить реализовать бесконтактную неразрушающую диагностику таких структур. В отличие от версии в [2] при проведении расчетов распределения неосновных носителей заряда (ННЗ) в мишени предлагается использовать модель независимых источников [3], согласно которой на диффузию генерированных электронным пучком неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияние электроны и дырки из других областей мишени. Это позволило получить искомое распределение от тонких планарных источников в аналитическом виде [4].

Постановка задачи

Рассмотрим структуру типа “эпитаксиальная пленка–подложка”, созданную на базе одного и того же полупроводникового материала. Плотности первого слоя (пленки) и второго материала (подложки) будем считать одинаковыми, а значения диффузионной длины L и коэффициента диффузии ННЗ D — разными и постоянными в каждом из слоев структуры. В этом случае процесс рассеяния электронов пучка в структуре можно описывать как для однородной мишени, после чего рассматривать диффузию генерированных ННЗ отдельно в пленке и подложке и, зная распределение ННЗ, описать возникающую в полупроводнике КЛ.

Методика решения задачи

Для количественного описания зависимости от энергии электронов пучка E_0 интенсивности монохроматической КЛ-пленки $I_1(E_0)$ и подложки $I_2(E_0)$ в прямозонном полупроводниковом материале в случае линейной излучательной рекомбинации использованы выражения, полученные ранее [5]

$$I_1(E_0) = \left\{ 1 + 1,155 \left[1 - \exp\left(-\frac{z_{c1}}{L_1}\right) \right] \right\} \times \int_0^{z_1} dz_0 \int_{I_s}^{z_1} \Delta\rho(z, z_0) e^{-\alpha_1(\lambda)z} dz,$$

$$I_2(E_0) = \left\{ 1 + 1,155 \left[1 - \exp\left(-\frac{z_{c2}}{L_2}\right) \right] \right\} \times \int_{z_1}^{\infty} dz_0 \int_{z_1}^{\infty} \Delta\rho(z, z_0) e^{-\alpha_2(\lambda)z} dz,$$

где $z_{c1} = \int_0^{z_1} z\rho(z) dz \left[\int_0^{z_1} \rho(z) dz \right]^{-1}$

и

$$z_{c2} = \int_{z_1}^{\infty} z\rho(z) dz \left[\int_{z_1}^{\infty} \rho(z) dz \right]^{-1}.$$

Здесь $\Delta\rho(z, z_0)$ — распределение по глубине z генерированных в полупроводнике ННЗ после их диффузии от планарного источника, находящегося на глубине z_0 ;

z_1 — координата границы раздела двух слоев;

l_s — толщина приповерхностной области, обедненной основными носителями заряда;

$\alpha_1(\lambda)$ и $\alpha_2(\lambda)$ — спектральная зависимость коэффициента поглощения для пленки и подложки, соответственно;

$\rho(z)$ — распределение плотности потерь энергии электронами пучка по глубине;

$L_1 = \sqrt{D_1\tau_1}$ и $L_2 = \sqrt{D_2\tau_2}$ — диффузионные длины ННЗ в пленке и подложке, соответственно.

Распределение плотности потерь энергии электронами пучка по глубине описывалось в виде суммы двух функций типа функций Гаусса [6]

$$\rho(z) \sim \left\{ \exp\left[-\left(\frac{z-z_m}{z_m}\right)^2\right] + \frac{\eta}{1-\eta} \exp\left[-\left(\frac{z-z_m}{z_m}\right)^2\right] \right\},$$

где z_m — глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощенными мишенью;

z_s — глубина максимальных потерь энергии обратнорассеянными электронами;

η — коэффициент обратного рассеяния электронов пучка.

Распределение ННЗ для двухслойной модели в простейшем случае записывается как [4]:

- для $z_0 < z_1$

$$\Delta\rho(z, z_0) = \begin{cases} \Delta\rho_{11}(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_1}{2L_1} \exp\left(-\frac{z_0}{L_1}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L_1}\right) - \frac{S_1-1}{S_1+1} \exp\left(-\frac{z}{L_1}\right) \right], & \forall z \in [0, z_0], \\ \Delta\rho_{12}(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_1}{2L_1} \exp\left(-\frac{z}{L_1}\right) \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{z_0}{L_1}\right) - \frac{S_1-1}{S_1+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L_1}\right) \right], & \forall z \in [z_0, z_1], \\ \Delta\rho_{22}(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_1}{2L_1} \exp\left(\frac{z_1-z}{L_2} - \frac{z_1}{L_1}\right) \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{z_0}{L_1}\right) - \frac{S_1-1}{S_1+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L_1}\right) \right], & \forall z \in [z_1, \infty); \end{cases}$$

• для $z_0 > z_1$

$$\Delta\rho(z, z_0) = \begin{cases} \Delta\rho_{11}(z, z_0) = C_1(z_0) \exp\left(\frac{z}{L_1}\right) + C_2(z_0) \times \\ \times \exp\left(-\frac{z}{L_1}\right), & \forall z \in [0, z_1], \\ \Delta\rho_{21}(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_2}{2L_2} \exp\left(-\frac{z_0}{L_2}\right) \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{z}{L_2}\right) - \frac{S_2-1}{S_2+1} \exp\left(-\frac{z}{L_2}\right) \right], & \forall z \in [z_1, z_0], \\ \Delta\rho_{22}(z, z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_2}{2L_2} \exp\left(-\frac{z}{L_2}\right) \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{z_0}{L_2}\right) - \frac{S_2-1}{S_2+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L_2}\right) \right], & \forall z \in [z_0, \infty), \end{cases}$$

где

$$C_1(z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_2}{2L_2} \exp\left(-\frac{z_0}{L_2}\right) \left[\exp\left(\frac{z_1}{L_2}\right) - \frac{S_2-1}{S_2+1} \exp\left(-\frac{z_1}{L_2}\right) \right] \times \\ \times \left[\exp\left(\frac{z_1}{L_1}\right) - \frac{S_1-1}{S_1+1} \exp\left(-\frac{z_1}{L_1}\right) \right]^{-1}, \\ C_2(z_0) = \frac{\rho(z_0)\tau_2}{2L_2} \left[\exp\left(\frac{z_1-z_0}{L_2}\right) - \frac{S_2-1}{S_2+1} \exp\left(-\frac{z_1+z_0}{L_2}\right) \right] \times \\ \times \left[\exp\left(-\frac{z_1}{L_1}\right) - \frac{S_1+1}{S_1-1} \exp\left(\frac{z_1}{L_1}\right) \right]^{-1}.$$

Здесь $S_1 = v_{s1}L_1/D_1$ — приведенная скорость поверхностной рекомбинации ННЗ на поверхности пленки; $S_2 = v_{s2}L_2/D_2$ — приведенная скорость рекомбинации ННЗ на границе "пленка—подложка", где D_1, D_2 и τ_1, τ_2 — коэффициенты диффузии и времени жизни ННЗ, соответственно, в первом и втором слоях, и v_{s1} и v_{s2} — скорости рекомбинации ННЗ на поверхности структуры (пленки) и на границе раздела "пленка—подложка".

Полученные результаты и их обсуждение

Математическое моделирование зависимостей $I(E_0)$ проведено для параметров, характерных для двухслойной полупроводниковой структуры типа "эпитаксиальная пленка GaAs — монокристаллическая подложка GaAs". При расчетах использованы следующие значения параметров: атомный номер $A = 72,32$, заряд ядра $Z = 32$, плотность $\rho = 5,37 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$, $l_s = 0,065 \text{ мкм}$.

Следуя данным работ [7—9] для пленки, сильно легированной донорной примесью (например, Te или Se) при температуре 300 К, имеем: для $N_{\text{Te, Se}} \approx 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ энергия максимума КЛ-излучения составляет примерно 1,44 эВ, а коэффициент поглощения $\alpha_1 \approx 9 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$. Для средне- и слабелегированного материала подложки примем $E \approx 1,425 \text{ эВ}$, что выполняется при $N_{\text{Te, Se}} \leq 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ [8], при этом $\alpha_2 \leq 3 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$, $\tau_1 \approx 9 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ и $\tau_2 \approx 3 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ [9].

Поскольку максимальная интенсивность КЛ наблюдается при концентрациях доноров около $(1,2—2) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [7, 8], для данной модели примем, что одинаковой мощности плотности потерь энергии электронами пучка отвечает одинаковое число квантов излучения и в пленке, и в подложке.

Распределения ННЗ $\Delta\rho(z, z_0)$, получающихся в результате диффузии от бесконечно тонких планарных источников, находящихся на глубине $z_0 = 1 \text{ мкм}$ (в первом материале), $z_0 = z_1 = 1,5 \text{ мкм}$ (на границе материалов), $z_0 = 2 \text{ мкм}$ (во втором материале), представлены на рис. 1; здесь $L_1 = 0,69 \text{ мкм}$, $L_2 = 0,4 \text{ мкм}$.

$\Delta\rho(z, z_0)$, усл. ед.

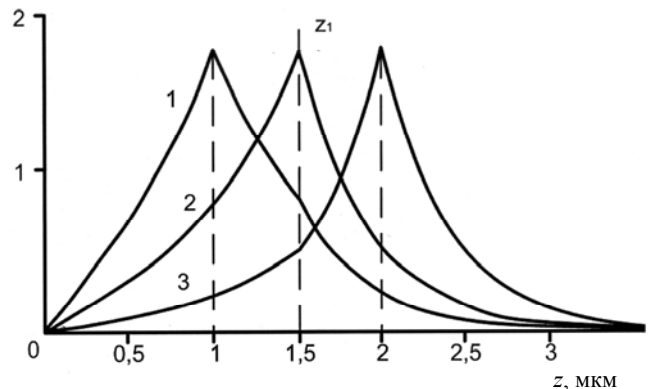


Рис. 1. Распределения ННЗ, генерированных электронным пучком в двухслойной полупроводниковой структуре "эпитаксиальная пленка GaAs — монокристаллическая подложка GaAs".

Расчеты проведены с использованием модели независимых источников для энергий электронов пучка $E_0 = 10$ (1), 15 (2) и 20 (3) кэВ. Толщина пленки: $z_1 = 1,5 \text{ мкм}$. Максимальные значения $\Delta\rho(z, z_0)$ для всех трех кривых приняты одинаковыми

Результаты моделирования зависимостей интенсивностей КЛ-пленки I_1 при этих же толщинах материала пленки представлены на рис. 2. При увеличении толщины последней увеличиваются излучающий объем и

интенсивность КЛ для одних и тех же значений энергии пучка E_0 . По этой же причине для пленок большей толщины спад КЛ-излучения начинается при меньших значениях E_0 , поэтому происходит смещение максимума зависимости $I(E_0)$ в сторону больших значений энергии электронов пучка. Положение максимума КЛ-пленки оказывается чувствительным к толщине данного слоя двухслойной структуры.

Влияние толщины пленки z_1 на распределение суммарной интенсивности КЛ из пленки и подложки $I(E_0) = I_1(E_0) + I_2(E_0)$ при значениях параметров $L_1 = 1$ мкм, $L_2 = 10$ мкм и $S_1 = 50, S_2 = 0$ показано на рис. 3. Видно, что с увеличением толщины пленки происходит увеличение суммарной интенсивности КЛ. Более низкая интенсивность КЛ при больших z_1 объясняется тем, что значительное число генерированных в пленке ННЗ вследствие сравнительно малой диффузионной длины пленки $L_1 \ll z_1$ рекомбинирует вблизи места их генерации, и в этом случае сильное влияние оказывает поглощение КЛ в объеме полупроводника. Если же z_1 мало ($z_1 \ll L_1$), то основная часть генерированных ННЗ оказывается в подложке, где поглощение излучения существенно ниже, при этом вследствие большей диффузионной длины ННЗ в подложке на эти носители поверхностные эффекты влияют слабее. К тому же при малых z_1 КЛ-излучение первым слоем поглощается слабо.

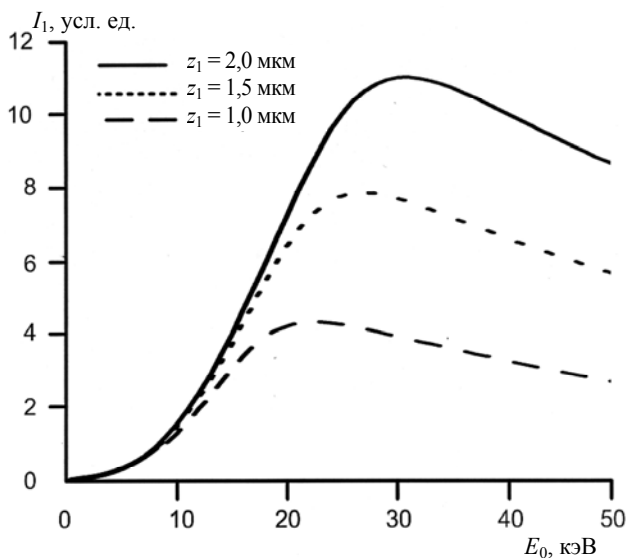


Рис. 2. Результаты математического моделирования зависимостей от энергии электронов пучка E_0 интенсивностей монохроматического катодолумinesцентного излучения из пленки при различных значениях ее толщины z_1

I_1 , усл. ед.

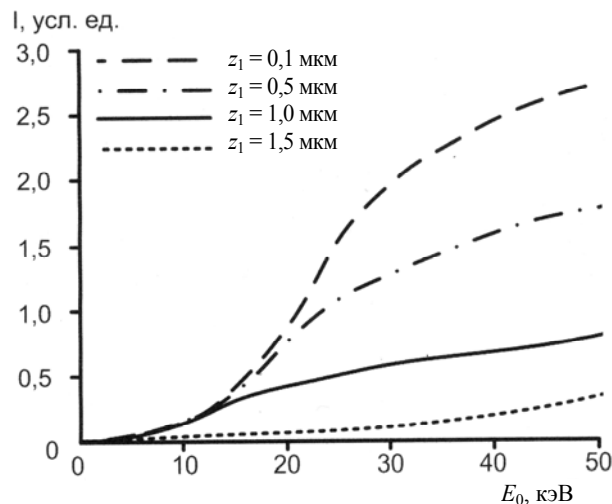


Рис. 3. Распределение суммарной интенсивности КЛ-пленки и подложки от энергии электронов пучка при различных значениях ее толщины z_1 и значениях параметров $L_1=1$ мкм, $L_2=10$ мкм и $S_1 = 50, S_2 = 0$

Влияние поверхностной рекомбинации на интенсивность КЛ для различных толщин первого слоя показано на рис. 4. Расчеты проведены для каждой из структур при значениях приведенной скорости поверхностной рекомбинации $S_1 = 0$ (рекомбинация ННЗ на поверхности отсутствует) и $S_1 = 50$ (что фактически соответствует бесконечно большой скорости поверхностной рекомбинации); значение $S_2 = 0$.

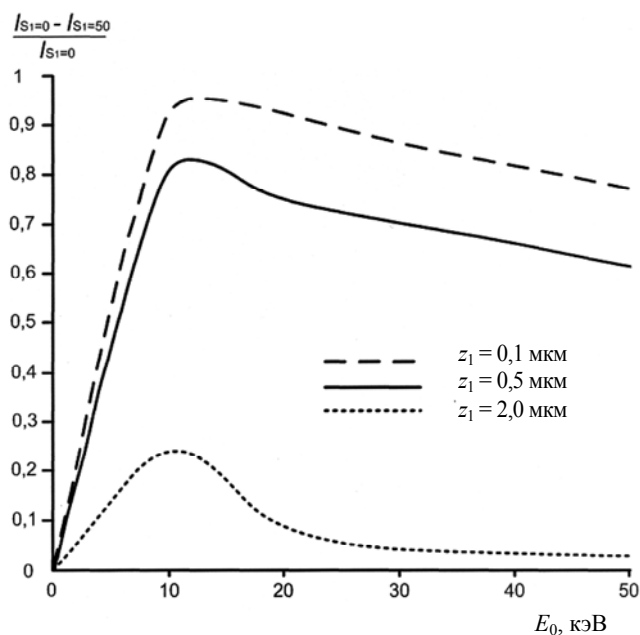


Рис. 4. Зависимости $(I_{S_1=0} - I_{S_1=50}) / I_{S_1=0}$ от энергии электронов пучка при различных толщинах z_1 материала пленки

Интенсивности КЛ I при $S_1 = 0$ ($I_{S_1=0}$) и $S_1 = 50$ ($I_{S_1=50}$) рассчитаны как суперпозиция КЛ-излучения из пленки и подложки: $I = I_1 + I_2$. При низких значениях энергии электронов пучка ННЗ рождаются вблизи поверхности, где влияние поверхностной рекомбинации велико, и потому скорость увеличения интенсивности

$I_{S_1=0}$ выше, чем скорость увеличения $I_{S_1=50}$. По мере возрастания E_0 происходит увеличение значений $(I_{S_1=0} - I_{S_1=50})/I_{S_1=0}$ вплоть до значений $E_0 \approx (10 - 12)$ кэВ. При дальнейшем увеличении энергии электронов пучка влияние поверхностной рекомбинации ослабевает, и зависимости $(I_{S_1=0} - I_{S_1=50})/I_{S_1=0}$ монотонно убывают. Абсолютные значения рассматриваемой функции зависят от z_1 так же, как и кривые на рис. 3.

Заключение

Рассмотрены некоторые возможности моделирования зависимости от энергии электронов интенсивности монохроматической катодолуминесценции, генерированной широким электронным пучком в прямозонной планарной двухслойной полупроводниковой структуре. Полученные результаты показали, что использованная простейшая модель расчета катодолуминесценции может быть применена для получения оценочных значений электрофизических параметров, а также толщины верхнего слоя, и может являться базовой при построении физически адекватных более сложных моделей.

Исследования проведены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проект № 04-03-97210).

Л и т е р а т у р а

1. Петров В. И. // УНФ. 1996. Т. 166. Вып. 8. С. 859.
2. Breese J. F. // Materials Sci. and Engineering. 1996. V. B24. № 1. P. 199.
3. Белов А. А., Петров В. И., Степович М. А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317—1322.
4. Хохлов А. Г., Снопина М. Г., Степович М. А. // Прикладная физика. 2004. № 3. С. 61.
5. Хохлов А. Г., Петров В. И., Снопина М. Г., Степович М. А. Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования (в печати).
6. Михеев Н. Н., Степович М. А. // Заводская лаборатория. 1996. Т. 62. № 4. С. 20—25.
7. Мосс Т., Баррел Г., Эллис Б. // Полупроводниковая оптоэлектроника. — М.: Мир, 1976. — 431 с.
8. Панков Ж. // Оптические процессы в полупроводниках. — М.: Мир, 1973. — 384 с.
9. Уханов Ю. И. // Оптические свойства полупроводников. — М.: Наука, 1997. — 368 с.

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

Mathematical modeling of dependences of intensity monochromatic cathodoluminescence from electron beam energy for two-layer semiconductor structure

M. G. Snopova

Kaluga Branch Moscow of Bauman State Technical University, Kaluga, Russia

A. G. Khokhlov

Fakultät für Physik und Geowissenschaften Universität Leipzig, Leipzig, Germany

N. N. Mikheev

Research-and-development center "Space Materials Science" of Shubnikov State Institute of Crystallography RAS, Kaluga, Russia

M. A. Stepovich

Kaluga Tsiolkovsky State Pedagogical University, Kaluga, Russia

New opportunities of modelling of dependence of intensity monochromatic cathodeluminescence from electron beam energy for two-layer semiconductor structure on the basis of GaAs are considered, diffusion of nonbasic carriers of a charge in which is described with use of model of independent sources.