

УДК 539.25:620.187:53.087—088

## Аппроксимация потерь энергии электронами пучка в однородных полупроводниковых материалах

М. А. Степович, А. А. Самохвалов, А. Г. Хохлов, М. М. Чайковский  
Калужский филиал Московского государственного технического  
университета им. Н. Э. Баумана, г. Калуга, Россия

*Показано, что модифицированные функции Лагерра могут быть использованы для решения задачи аппроксимации распределений плотности потерь энергии электронами пучка в полупроводниковых материалах при соответствующем выборе модифицирующего параметра.*

Использование электронных пучков для изучения материалов полупроводниковой электроники позволяет измерять их электрофизические параметры неразрушающим бесконтактным способом. Для аналитического описания плотности потерь энергии электронами пучка в мишени могут быть использованы различные подходы [1]. Авторами рассмотрен случай, когда такая зависимость описывается двумя функциями типа Гаусса с дисперсией, являющейся функцией энергии электронного пучка. Использование такой модели приводит к тому, что точное ре-

шение соответствующих дифференциальных уравнений тепломассопереноса (уравнения теплопроводности и уравнения диффузии неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в веществе) не может быть получено аналитически. В статье рассмотрены некоторые возможности решения первого этапа такой задачи — аппроксимации распределений потерь энергии электронами пучка в веществе для последующего нахождения приближенного решения уравнений тепломассопереноса.

### Постановка задачи

Явления тепломассопереноса математически могут быть описаны в виде

$$\hat{D}[f(z)] = u(z), \quad (1)$$

где  $\hat{D}$  — линейный дифференциальный оператор порядка  $p$  с переменными коэффициентами:

$$\hat{D} = \sum_{k=0}^p a_{i_1 i_2 \dots i_m}(z) \frac{\partial^{(k)}}{\partial z_1^{i_1} \partial z_2^{i_2} \dots \partial z_m^{i_m}},$$

$$i_1 + i_2 + \dots + i_m = k, \quad k = \overline{0, p},$$

$$z_i \in \Omega, \quad \Omega = [0, \infty),$$

$$f(z), \quad u(z) \in L_2(\Omega).$$

Функциональное пространство  $L_2(\Omega)$  представляет собой множество функций  $\{f(\mu)\}$  с интегрируемым квадратом на области  $\Omega$ , т. е. таких, что

$$\int_{\Omega} |f(\mu)|^2 d\mu < \infty.$$

Пространство  $L_2(\Omega)$  — полное линейное нормированное бесконечномерное (гильбертово) пространство.

Норма в  $L_2(\Omega)$  вводится следующим образом:

$$\|f\|_{L_2(\Omega)} = \left\{ \int_{\Omega} |f(\mu)|^2 d\mu \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Для рассматриваемых дифференциальных уравнений тепломассопереноса константы интегрирования в одномерном стационарном случае, реализуемом при облучении поверхности мишени широким пучком электронов, определяются из условий

$$T(z)|_{z=\infty} = T_0, \quad \int_0^{\infty} \rho(z) dz = G_0 = \text{const} \quad \text{— для урав-$$

нения теплопроводности

$$\text{и } D \frac{d}{dz} \Delta p(z) \Big|_{z=0} = v_s \Delta p(0), \quad \Delta p(\infty) = 0 \quad \text{— для}$$

уравнения диффузии,

где  $T(z)$  — температура материала на глубине  $z$  от поверхности мишени;

$T_0$  — температура мишени до облучения электронным пучком (или, что то же самое, температура мишени на достаточно большой глубине);

$G_0$  — мощность, рассеиваемая электронным пучком в веществе;

$D$  — коэффициент диффузии;

$v_s$  — скорость поверхностной рекомбинации;

$\Delta p(z)$  — распределение неосновных носителей заряда в полупроводнике в результате их диффузии.

В уравнении (1) функция  $u(z)$  определяется плотностью потерь энергии электронами пучка в твердом теле  $\rho(z)$ . В нашем случае [1, 2]

$$\rho(z) = \frac{1,085(1-\eta)E_0}{\sqrt{\pi}z_m} \times$$

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

где  $E_0$ , кэВ — энергия электронов пучка;

$z_m$ , мкм — глубина максимальных потерь энергии пучком первичных электронов, испытавших малоугловое рассеяние, для данного вещества мишени;

$z_s$ , мкм — глубина максимальных потерь энергии обратнорассеянных электронов для данного вещества мишени;

$\eta$  — коэффициент обратного рассеяния электронов зонда.

Значения  $z_m$  и  $z_s$  определяются следующим образом [1, 2]:

$$z_m = \frac{1,38 \cdot 10^{-2} A E_0^{5/3}}{\rho_0 Z^{8/9}} \left[ 1 - \frac{0,042 Z^{4/3}}{(1 + 0,187 Z^{2/3})^2} \right],$$

$$z_s = Z^{-1/3} z_m,$$

где  $\rho_0$  — удельная плотность вещества мишени;

$Z$  — атомный номер;

$A$  — атомный вес вещества мишени.

Величина поглощенной в мишени энергии [2]

$$E_A = E_0 [1 - \eta(1 - Z^{-1/3})].$$

### Распределение плотности потерь энергии электронами пучка в веществе

Физически представление  $\rho(z)$  по формуле (2) отвечает разделному описанию вклада обратнорассеянных и поглощенных мишенью электронов в функцию потерь энергии.

Сопоставим результаты расчетов, проведенных на основе формулы (2), с полученными в работе [4] экспериментальными данными. Результаты сравнения одномерных функций распределений потерь энергии по глубине для меди ( $Z = 29$ ) и золота ( $Z = 79$ ) для различных энергий электронов приведены, соответственно, на рис. 1, а и б. Следует отметить хорошее сов-

падение экспериментальных данных с расчетными кривыми, что указывает на удовлетворительное соответствие выражения (2) реальным процессам рассеяния электронов.

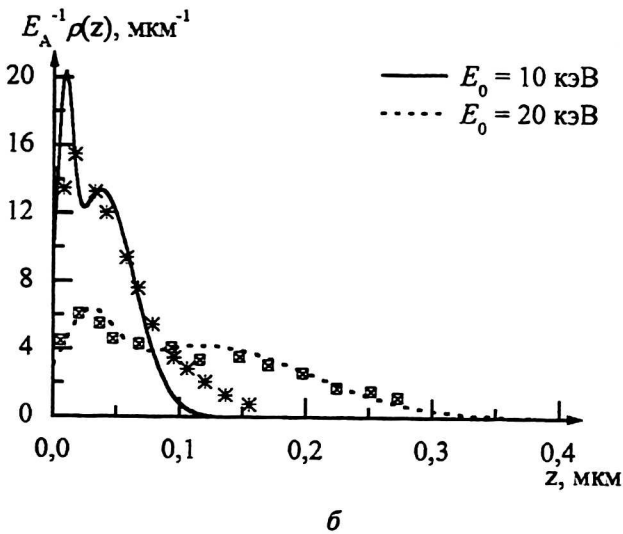
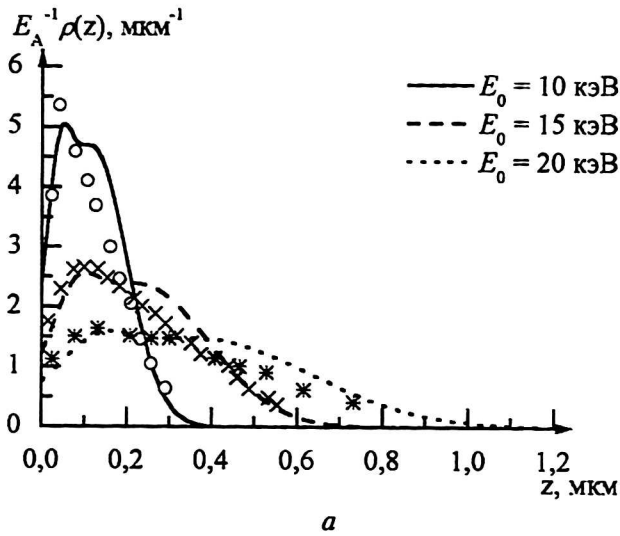


Рис. 1. Сравнение экспериментальных результатов по изучению потерь энергии электронами пучка из работы [4] с расчетными кривыми, полученными с использованием формулы (2) для различных энергий электронов: а — в медной мишени; б — в золотой мишени

Среднее отклонение экспериментальных точек от расчетных значений определим как

$$F = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ \left[ E_A^{-1} \rho(z) \right]_i - E_A^{-1} \rho(z_i) \right\}^2},$$

где  $n$  — количество экспериментальных точек;

$E_A^{-1} \rho(z_i)$  — рассчитанное значение в точке  $z_i$ ;

$[E_A^{-1} \rho(z)]_i$  — экспериментальное значение в  $i$ -й точке.

Отклонения экспериментальных точек от расчетных значений для меди при энергиях элект-

тронов пучка 10, 15, 20 кВ составляют, соответственно, 0,567; 0,259; 0,221  $\mu\text{км}^{-1}$ . Данные отклонения в основном обусловлены тем, что результаты эксперимента в работе [4] получены по прострелу тонких пленок и потому не учитывают потери энергии части поглощенных электронов, движущихся в массивных мишенях после многократного малоуглового рассеяния в сторону поверхности из более глубоких слоев. Отклонения для золота при энергиях электронов 10 и 20 кВ составляют, соответственно, 2,32 и 0,473  $\mu\text{км}^{-1}$ . Достаточно большое значение отклонения для  $E_0 = 10$  кВ в основном определяется отклонением первой экспериментальной точки от расчетного значения. В золоте при  $E_0 = 10$  кВ полуширина пика энергетических потерь обраторассеянных электронов составляет 10 нм, поэтому очевидны трудности его экспериментальной регистрации. При вычислении среднего отклонения без учета первой экспериментальной точки получим результат 1,42  $\mu\text{км}^{-1}$ , что составляет 7 % от максимального значения функции  $E_A^{-1} \rho(z)$ .

### Методика решения задачи

При построении решения уравнений (1) с использованием степенных рядов Тейлора предполагается приближенное представление правой части в виде частичной суммы ряда Тейлора. В рассматриваемом случае

$$\rho_n(z) = \frac{1,085(1-\eta)E_0}{\sqrt{\pi z_m}} \left[ \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{k!} \left( \frac{z-z_m}{z_m} \right)^{2k} + \frac{\eta}{1-\eta} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{k!} \left( \frac{z-z_s}{z_s} \right)^{2k} \right], \quad (3)$$

где  $\rho_n(z)$  — приближение функции  $\rho(z)$ .

Теоретически такой подход позволяет аппроксимировать рассматриваемую функцию  $\rho(z)$  с любой точностью, а использование теоремы Лейбница — определять число членов ряда, позволяющих реализовать заданную точность. Оценку точности вычислений проведем по формуле

$$\delta_n(z) = |\rho_n(z) - \rho_{n+1}(z)|.$$

При этом выполняется неравенство

$$|\rho(z) - \rho_n(z)| \leq \delta_n(z).$$

При решении уравнений (1) с использованием модифицированных функций Лагерра предполагается приближенное представление  $\rho(z)$  в виде частичной суммы ряда Фурье по ортого-

нальному базису  $\{\varphi_m^k(z)\}$  пространства  $L_2(\Omega)$ . В данном случае

$$\rho(z) \approx \rho_n(z) = \sum_{m=0}^n a_m \varphi_m^k(z), \quad (4)$$

$$a_m = \int_0^{\infty} \rho(z) \varphi_m^k(z) dz,$$

где  $a_m$  — коэффициенты Фурье-функции  $\rho(z)$  по ортогональной системе  $\{\varphi_m^k(z)\}$ .

Ортонормированные на полуоси  $[0, \infty)$  функции Лагерра с модифицирующим параметром  $k$ , ускоряющим сходимость ряда Фурье, определяются формулой [5]

$$\varphi_m^k(z) = \sqrt{k} \sum_{v=0}^m C_m^v \frac{1}{v!} (-1)^v (kz)^v \exp\left(-\frac{kz}{2}\right).$$

Увеличение модифицирующего параметра  $k$  линейно изменяет значение независимой переменной, что существенно влияет на свойства функций Лагерра. Изменение масштаба по оси абсцисс при увеличении  $k$  приводит к ускоренному затуханию этих функций при одновременном росте их значений по оси ординат.

Погрешности приближений  $\rho(z)$  оцениваются по норме пространства  $L_2(\Omega)$  для отдельных (дискретных) значений  $k$  при фиксированном числе базисных функций

$$E = \|\rho(z) - \rho_n(z)\|_{L_2(\Omega)} = \left\{ \int_{\Omega} |\rho(z) - \rho_n(z)|^2 dz \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Таким образом, проблема построения решения дифференциальных уравнений (1) описанным методом во многом сводится к приближенному представлению функций  $\rho(z)$  с определенной точностью.

### Полученные результаты и их обсуждение

Результаты исследования показали, что использование степенных рядов Тейлора для решения задачи аппроксимации функции  $\rho(z)$  является неприемлемым. Это проиллюстрировано на рис. 2.

Вычисления проведены для параметров мишени, характерных для GaAs и  $E_0 = 20$  кэВ. В выбранном масштабе график функции  $\rho(z)$  на начальном этапе практически совпадает с графиками частичных сумм ряда Тейлора, приближающими функцию  $\rho(z)$ . При числе используемых членов ряда, равном примерно 100 (и более), проведение вычислений становится практически нереализуемым вследствие достижения ограничений, связанных с возможностями используемой персональной ЭВМ при обработке больших (более  $10^{307}$ ) чисел, которые

получаются в основном при вычислении факториала в формуле (3). На графиках это проявляется в появлении осцилляционной структуры на кривых  $\rho_n(z)$  (см. рис. 2, кривая 6).

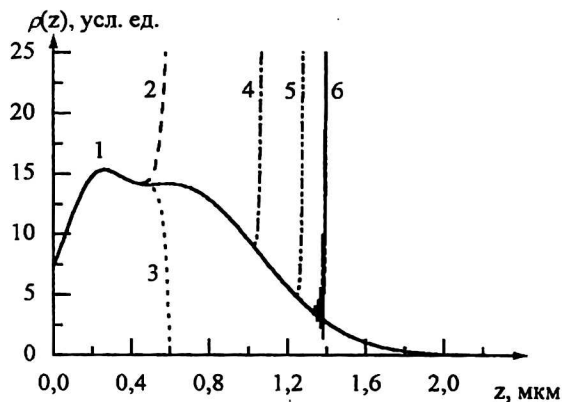


Рис. 2. Графики приближений функции  $\rho(z)$  (кривая 1) рядом Тейлора для различного числа членов ряда:  $n = 6$  (2), 7 (3), 50 (4), 80 (5), 100 (6)

При использовании системы модифицированных функций Лагерра для приближения  $\rho(z)$  установлено, что для любого числа базисных функций существует оптимальное значение модифицирующего параметра  $k$ , при котором приближение будет наилучшим в смысле нормы пространства  $L_2(\Omega)$ . Для  $E_0 = 20$  кэВ и параметров мишени, характерных для GaAs, разумное с физической точки зрения приближение функции  $\rho(z)$  было получено уже для 11 членов ряда.

На рис. 3 приведены результаты аппроксимации функции потерь энергии электронов пучка для параметров мишени, характерных для GaAs и  $E_0 = 20$  кэВ при оптимальных значениях модифицирующего параметра  $k$ . Графики точного и приближенного представления функции  $\rho(z)$  при использовании в разложении (4) значений  $n = 10$  и  $k = 20$  в выбранном масштабе практически совпадают.

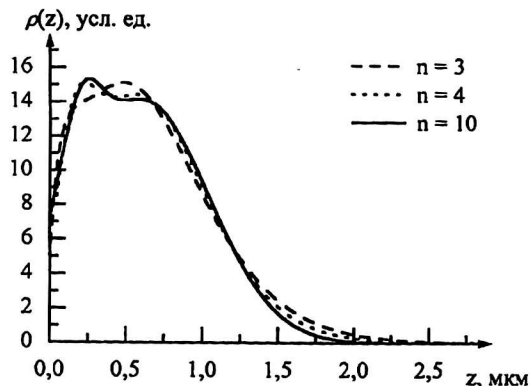


Рис. 3. Результаты аппроксимации функции  $\rho(z)$  для GaAs мишени при  $E_0 = 20$  кэВ с использованием модифицированных функций Лагерра.

Для каждого числа базисных функций выбраны оптимальные значения модифицирующего параметра  $k$ . В выбранном масштабе график функции  $\rho(z)$ , построенный по аналитическому выражению (2), совпадает с графиком приближения при  $n = 10$

Зависимость среднеквадратичных отклонений  $E$  для 15 модифицированных функций Лагерра, рассчитанных по формуле (5), от значений модифицирующего параметра  $k$  приведены на рис. 4 для Si, GaAs и CdTe при значениях энергии электронов 10 кэВ. Для системы функций Лагерра характерным является наличие довольно широкого интервала значений параметра  $k$ , для которых  $E$  принимает весьма малые значения. С увеличением атомного номера мишени этот диапазон увеличивается, одновременно смещаясь в область больших значений  $k$ .

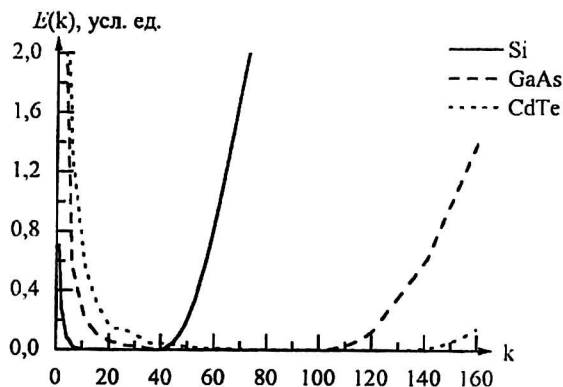


Рис. 4. Графики зависимостей среднеквадратичных отклонений  $E$  для 15 модифицированных функций Лагерра, рассчитанных по формуле (5), от значений модифицирующего параметра  $k$

На рис. 5 показана зависимость погрешностей приближений по норме пространства  $L_2(\Omega)$  от значений числа базисных функций при оптимальном значении модифицирующего параметра  $k$  для каждого числа базисных функций. Значение оптимального параметра  $k$  определено с точностью до целого значения. Расчеты проведены при энергии электронов пучка 20 кэВ. Из рис. 5 видно, что с увеличением числа базисных функций Лагерра при соответствующем выборе модифицирующего параметра можно получить практически любую точность приближения функции  $\rho(z)$ . Значения модифицирующего параметра установлены эмпирически.

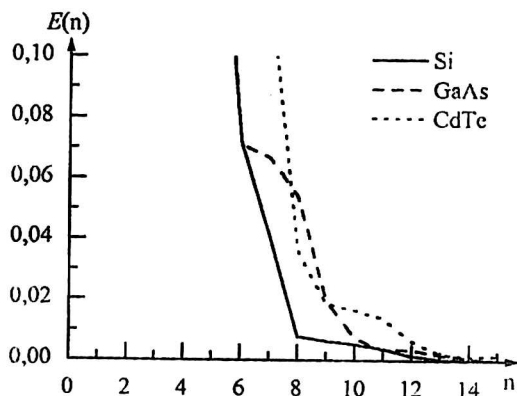


Рис. 5. Графики зависимостей погрешностей приближений по норме пространства  $L_2(\Omega)$  от значений числа базисных функций при оптимальном значении модифицирующего параметра  $k$  для каждого числа базисных функций Лагерра

Зависимость значений модифицирующего параметра  $k$ , при котором наблюдается минимум погрешностей приближения  $\rho(z)$ , от числа базисных функций изображена на рис. 6, где значения  $k$  определены с точностью до 1 и соединены прямыми линиями. Расчеты проведены при энергии электронов пучка 20 кэВ.

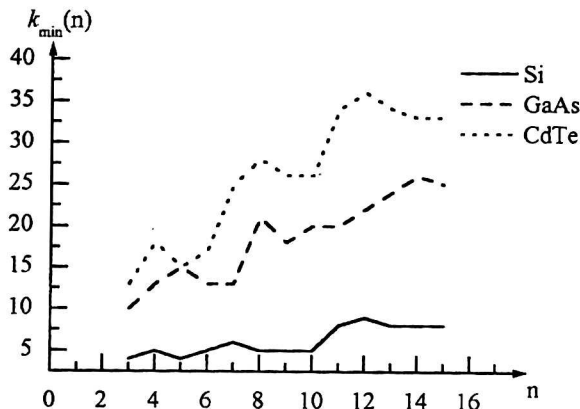


Рис. 6. Графики зависимостей значений модифицирующего параметра  $k$ , при котором наблюдается минимум погрешностей приближения  $\rho(z)$ , от числа базисных функций Лагерра

В процессе исследования были выполнены построения и аппроксимация функций одномерных плотностей распределения энергетических потерь электронов зонда для параметров мишени, характерных для Si, GaAs, CdTe. Полученные результаты показали, что модифицированные функции Лагерра могут быть использованы для решения задачи аппроксимации при соответствующем выборе необходимого числа членов ряда (4) и значения параметра  $k$ . С уменьшением атомного номера мишени повышается точность приближения  $\rho(z)$ , достигаемая для фиксированного числа базисных функций при оптимальных значениях параметра  $k$ . При увеличении энергии электронов пучка происходит смещение оптимальных значений модифицирующего параметра  $k$  для различных материалов в сторону уменьшения значений. Например, для Si, GaAs и CdTe для 15 базисных функций оптимальные значения  $k$  для энергий электронов пучка 10, 20, 30 кэВ составляют, соответственно, для: Si — 27, 8, 4; GaAs — 80, 25, 14; CdTe — 130, 33, 17.

### Заключение

Рассмотрены некоторые возможности использования степенных рядов Тейлора и модифицированных функций Лагерра для аппроксимации распределений плотности потерь энергии электронами пучка в веществе. Показано, что использование степенных рядов Тейлора для аппроксимации рассматриваемой функции является неприемлемым. При использовании модифицированных функций Лагерра с соответствующим выбором модифицирующего параметра

возможна реализация приближения, наилучшего в смысле нормы пространства  $L_2(\Omega)$ .

#### Литература

1. Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А.// Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. №8. С. 1474.

2. Михеев Н. Н., Степович М. А.// Заводская лаборатория. 1996. Т. 62. № С. 20.

3. Степович М. А., Самохвалов А. А., Чайковский М. М.// Поверхность. 2002. №. С. 46–52.

4. Cosslet V. E., Thomas P. N.// Brit. J. Appl. Phys. 1965. V. 16. P. 779.

5. Синтез регуляторов и теория оптимизации систем автоматического управления: Учебн. пособие/ Под ред. Н. Д. Егупова. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2000. — 186 с.

## Approximation of beam's electron energy loss in homogeneous semiconductors

*M. A. Stepovich, A. A. Samokhvalov, A. G. Khokhlov, M. M. Tchaikovsky*  
N. E. Bauman Moscow State Technical University (Kaluga branch), Kaluga, Russia

*It's shown that modified Laguerre's functions can be used for approximation of electron beam energy loss distribution function in semiconductors at appropriate choice of the modifying parameter.*