ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 206 (2022). С. 133–137
DOI: 10.36535/0233-6723-2022-206-133-137

УДК 517.927.21, 517.911.5, 51-73

О КОРРЕКТНОСТИ ОДНОЙ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИШЕНЯХ

© 2022 г. Д. В. ТУРТИН, В. В. КАЛМАНОВИЧ, М. А. СТЕПОВИЧ

Аннотация. На основе методов качественной теории дифференциальных уравнений проведено исследование корректности математической модели одномерной диффузии неравновесных носителей заряда, генерированных электронным пучком, доказана непрерывная зависимость решения от входных данных, получены оценки влияния погрешностей исходных данных на распределение диффундирующей примеси. Полученные результаты могут быть использованы при планировании эксперимента в электроннозондовых технологиях.

Ключевые слова: математическая модель, дифференциальное уравнение диффузии, задача Коши, полупроводник, корректность.

ON THE WELL-POSEDNESS OF A MODEL PROBLEM OF HEAT AND MASS TRANSFER IN HOMOGENEOUS SEMICONDUCTOR TARGETS

© 2022 D. V. TURTIN, V. V. KALMANOVICH, M. A. STEPOVICH

Abstract. Based on the methods of the qualitative theory of differential equations, we examine the well-posedness of the mathematical model of one-dimensional diffusion of nonequilibrium charge carriers generated by an electron beam. We prove the continuous dependence of solutions on input data and obtain estimates of the influence of errors in the initial data on the distribution of the diffusing impurity. The results obtained can be used in electron probe technologies.

Keywords and phrases: mathematical model, diffusion equation, Cauchy problem, semiconductor, well-posedness.

AMS Subject Classification: 34B05, 34C60, 80A19

1. Введение. При математическом описании любых явлений и процессов необходимо решить ряд математических задач, наиболее важными из которых являются следующие: установление существования решения, доказательство единственности решения, обоснование непрерывной зависимости решения от данных задачи (начальных и граничных данных, свободного члена, коэффициентов операторного уравнения (см. [2]). Задачи, удовлетворяющие этим требованиям, называются корректно поставленными. В настоящей работе на примере диффузии носителей заряда, генерированных в однородном полупроводнике широким электронным пучком, рассмотрен вопрос о корректности одной модельной задачи тепломассопереноса. Эта математическая задача представляет интерес как с точки зрения изучения рассматриваемого класса дифференциальных

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проекты № 19-03-00271, № 18-41-400001).

уравнений, так и как задача, интересная для практического приложения в физическом материаловедении.

Выбор объекта исследования обусловлен следующим. Одними из немногих методов, позволяющими реализовать бесконтактную неразрушающую диагностику твёрдых тел, являются электроннозондовые методы, основанные на использовании остро сфокусированных пучков киловольтных электронов низких (примерно до 8—10 кэВ) и средних (от 8—10 до 50 кэВ) энергий (см. [8]). В полупроводниковом материаловедении при проведении локальных исследований материалов с использованием сфокусированных пучков электронов наиболее часто в качестве информативного регистрируется сигнал, связанный с генерацией и диффузией в полупроводниковой мишени неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) и/или регистрируются сигналы, характеристики которых существенно зависят от распределения ННЗ.

Регистрация информативных сигналов, возбуждаемых в полупроводниковой мишени и сравнение экспериментальных данных с математической моделью этого явления позволяют идентифицировать параметры полупроводника, которые весьма сложно или даже невозможно определить другими методами (см. [5, 6, 9]).

Однако математически корректное исследование математических моделей физических явлений, возникающих при взаимодействии электронных пучков с полупроводниковыми объектами и описываемых дифференциальными уравнениями тепломассопереноса, ранее практически не проводилось (см. [10–14]). Необходимость подобных математических исследований обусловлена также недостаточной изученностью физических явлений математическими методами: имеются лишь единичные публикации, посвящённые изучению корректности математических моделей, используемых в электроннозондовых технологиях. В частности, можно сказать, что ранее такая задача моделирования диффузии для рассматриваемого процесса в определённой степени носила полуколичественный характер. Она решалась только при использовании модели потерь энергии первичными низкоэнергетическими электронами в мишени в виде нормального распределения Гаусса (см. [**?**, 5, 7, 11]), что для широкого диапазона материалов и энергий электронов зонда (до 50 кэВ) является довольно грубым приближением, описывающим имеющиеся экспериментальные данные потерь энергии в конденсированном веществе во многом лишь качественно (см., например, [3, 4]). В настоящей работе использована математическая модель, наиболее полно описывающая потери энергии электронами пучка в конденсированном веществе и количественное рассмотрение проведено на основе этой модели, чего ранее не делалось.

2. Постановка задачи. Для количественного описания задачи тепломассопереноса необходимо построить математическую модель рассматриваемого явления. Для этого требуется описать процесс потерь энергии электронами пучка в твердом теле и, как следствие этого, генерацию электронно-дырочных пар в полупроводнике, а также процесс диффузии генерированных электронным пучком ННЗ. Анализ характерных времён вышеуказанных процессов показывает, что эти процессы можно описывать последовательно, а значит, моделировать каждый из них отдельно (см., например, [3, 9]).

Диффузию ННЗ, генерированных в полупроводниковой мишени электронным пучком, будем описывать с использованием модели независимых источников, согласно которой на диффузию генерированных электронным пучком неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияния другие электроны или дырки из других микрообластей материала (см. [1]). В этом случае для одномерной диффузии в полубесконечном полупроводнике распределение избыточных ННЗ по глубине $\Delta p(z)$ дается выражением

$$\Delta p(z) = \int\limits_0^\infty \Delta p(z, z_0) dz_0.$$

Здесь функция $\Delta p(z, z_0)$ описывает 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 полупроводника. Распределение $\Delta p(z, z_0)$ является решением дифференциального уравнения

$$D\frac{d^2\Delta p(z,z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z,z_0)}{\tau} = -\rho(z)\delta(z-z_0) \tag{1}$$

с граничными условиями

$$D\left.\frac{d\Delta p(z,z_0)}{dz}\right|_{z=0} = v_s\Delta p(0,z_0), \quad \Delta p(\infty,z_0)=0. \tag{2}$$

Здесь $\rho(z)$ — концентрация ННЗ, пропорциональная плотности энергии первичного электронного пучка, рассеянной в тонком слое мишени на глубине z, а постоянные D, τ и v_s — коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно; $\delta(z-z_0)$ — дельта-функция.

3. О существовании и единственности решения рассматриваемой задачи. Следующая теорема посвящена установлению решения задачи (1)—(2) на луче $z \geqslant 0$.

Теорема 1. *Задача* (1)—(2) *на луче* $z \geqslant 0$ *имеет решение, которое определяется следующей формулой*:

$$\Delta p(z,z_0) = \begin{cases} \dfrac{\rho(z_0)\tau}{2L}\exp\left(-\dfrac{z_0}{L}\right)\left[\exp\left(\dfrac{z}{L}\right) - \dfrac{S-1}{S+1}\exp\left(-\dfrac{z}{L}\right)\right] & \forall z\in[0,z_0], \\ \dfrac{\rho(z_0)\tau}{2L}\exp\left(-\dfrac{z}{L}\right)\left[\exp\left(\dfrac{z_0}{L}\right) - \dfrac{S-1}{S+1}\exp\left(-\dfrac{z_0}{L}\right)\right] & \forall z\in[z_0,\infty). \end{cases} \tag{3}$$

Здесь $L=\sqrt{D\tau}$ — *диффузионная длина ННЗ, а* $S=v_sL/D$ — *приведённая скорость поверхностной рекомбинации ННЗ.*

Доказательство теоремы 1, т.е. решение задачи (1)—(2) в виде (3), приведено в [1,9].

В следующей теореме устанавливается единственность решения задачи (1)—(2).

Теорема 2. *Решение задачи* (1)—(2) *единственно на луче* $z \geqslant 0$.

Доказательство. Предположим противное. Пусть n_1 и n_2 — два различных решения задачи (1)—(2) на луче $z \geqslant 0$. Рассмотрим функцию $u = n_2 - n_1$, которая удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению

$$D\frac{d^2u}{dz^2} - \frac{u}{\tau} = 0.$$

и стремится к 0 в бесконечности. Применив к полученной задаче формулу (3) с $\rho(z_0)=0$, получим $u=0$, откуда следует $n_2=n_1$. Полученное противоречие и доказывает единственность решения задачи (1)—(2) на луче $z\geqslant 0$. Теорема 2 доказана. □

4. Теоремы об оценках решения рассматриваемой задачи. Следующие теоремы устанавливают непрерывную зависимость решения задачи (1)—(2) от члена в правой части дифференциального уравнения (1).

Теорема 3. *Пусть* $\Delta p_1(z,z_0)$ — *решение уравнения*

$$D\frac{d^2\Delta p_1(z,z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p_1(z,z_0)}{\tau} = -\rho_1(z)\delta(z-z_0)$$

с граничными условиями (2), $\Delta p_2(z,z_0)$ — *решение уравнения*

$$D\frac{d^2\Delta p_2(z,z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p_2(z,z_0)}{\tau} = -\rho_2(z)\delta(z-z_0)$$

с граничными условиями (2) *и для всех* $z\geqslant 0$

$$|\rho_2(z)-\rho_1(z)| \leqslant \varepsilon. \tag{4}$$

Тогда для всех $z \geqslant 0$ *справедлива оценка*

$$|\Delta p_2(z,z_0) - \Delta p_1(z,z_0)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L}.$$

Доказательство. На отрезке $z \in [0, z_0]$ решение задачи (1)—(2) определяется формулой (3). Тогда для функций $\Delta p_1(z, z_0)$ и $\Delta p_2(z, z_0)$ имеем

$$\Delta p_1(z, z_0) = \frac{\rho_1(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right)\right],$$
$$\Delta p_2(z, z_0) = \frac{\rho_2(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right)\right],$$

откуда

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{|\rho_2(z_0) - \rho_1(z_0)|\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z}{L}\right)\right].$$

Применив оценку (4) и учитывая условие $z \in [0, z_0]$, получим

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{z_0 - z}{L}\right). \tag{5}$$

На полуинтервале $z \in [z_0, \infty)$ решение задачи (1)—(2) также определяется формулой (3). Тогда для функций $\Delta p_1(z, z_0)$ и $\Delta p_2(z, z_0)$ имеем

$$\Delta p_1(z, z_0) = \frac{\rho_1(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right)\right],$$
$$\Delta p_2(z, z_0) = \frac{\rho_2(z_0)\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right)\right],$$

откуда

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{|\rho_2(z_0) - \rho_1(z_0)|\tau}{2L} \exp\left(-\frac{z}{L}\right) \left[\exp\left(\frac{z_0}{L}\right) - \frac{S-1}{S+1} \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right)\right].$$

Применив оценку (4) и учитывая условие $z \in [z_0, \infty)$, получим

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{z - z_0}{L}\right). \tag{6}$$

Объединяя оценки (5) и (6), получим, что при всех $z \geqslant 0$

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L} \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right),$$

откуда вытекает

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L}.$$

Теорема 3 доказана. □

Теорема 4. *Пусть выполнены условия теоремы 3. Тогда при всех $z \geqslant 0$ справедлива оценка*

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leqslant \varepsilon\tau.$$

Доказательство. Оценим выражение

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| = \int_0^\infty |\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| dz_0.$$

Применив оценку (5), получим

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leqslant \frac{\varepsilon\tau}{L} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right) dz_0. \tag{7}$$

Поскольку

$$\int_0^\infty \exp\left(-\frac{|z - z_0|}{L}\right) dz_0. = \int_0^{z_0} \exp\left(\frac{z - z_0}{L}\right) dz_0 + \int_{z_0}^\infty \exp\left(\frac{z_0 - z}{L}\right) dz_0 = L \exp\left(-\frac{z}{L}\right),$$

из (7) получим

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leqslant \varepsilon\tau.$$

Теорема 4 доказана. □

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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. — *66*, № 9. — С. 1317–1322.
2. *Владимиров В. С., Жаринов В. В.* Уравнения математической физики. — М.: Физматлит, 2004.
3. *Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А.* Количественный анализ материалов полупроводниковой оптоэлектроники методами растровой электронной микроскопии// Изв. РАН. Сер. физ. — 1991. — *55*, № 8. — С. 1474–1482.
4. *Михеев Н. Н., Степович М. А.* Распределение энергетических потерь при взаимодействии электронного зонда с веществом// Завод. лаб. Диагн. мат. — 1996. — *62*, № 4. — С. 20–25.
5. *Поляков А. Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А.* Двумерная диффузия и катодолюминесценция экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале: результаты математического моделирования// Поверхность. Рентген. синхротр. нейтрон. исслед. — 2012. — № 11. — С. 35–40.
6. *Поляков А. Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М. А.* Катодолюминесцентные экспериментальные исследования транспорта экситонов в нитриде галлия// Изв. РАН. Сер. физ. — 2012. — *76*, № 9. — С. 1082–1085.
7. *Поляков А. Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М. А.* Оценка значений электрофизических параметров полупроводниковых материалов по результатам измерений катодолюминесценции экситонов// Прикл. физ. — 2012. — № 6. — С. 41–46.
8. Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применение. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.
9. *Степович М. А.* Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники/ Дисс. на соиск. уч. сте. д-ра физ.-мат. наук — М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2003.
10. *Туртин Д. В., Серегина Е. В., Степович М. А.* Качественный анализ одного класса дифференциальных уравнений тепломассопереноса в конденсированном веществе// Пробл. мат. анал. — 2020. — № 104. — С. 149–156.
11. *Polyakov A. N., Smirnova A. N., Stepovich M. A., Turtin D. V.* Qualitative properties of a mathematical model of the diffusion of excitons generated by electron probe in a homogeneous semiconductor material// Lobachevskii J. Math. — 2018. — *39*, № 2. — P. 259–262.
12. *Stepovich M. A., Turtin D. V., Seregina E. V., Polyakov A. N.* On the qualitative characteristics of a two–dimensional mathematical model of diffusion of minority charge carriers generated by a low-energy electron beam in a homogeneous semiconductor material// J. Phys. Conf. Ser. — 2019. — *1203*. — 012095.
13. *Stepovich M. A., Turtin D. V., Seregina E. V., Kalmanovich V. V.* On the correctness of mathematical models of time-of-flight cathodoluminescence of direct-gap semiconductors// ITM Web Conf. — 2019. — *30 estimates*. — 07014.
14. *Turtin D. V., Seregina E. V., Stepovich M. A.* Qualitative analysis of a class of differential equations of heat and mass transfer in a condensed material// J. Math. Sci. — 2020. — *250*, № 1. — P. 166–174.

Туртин Дмитрий Витальевич
Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, Ивановский филиал
E-mail: `turtin@mail.ru`

Калманович Вероника Валерьевна
Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского
E-mail: `v572264@yandex.ru`

Степович Михаил Адольфович
Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского
E-mail: `m.stepovich@rambler.ru`