

На правах рукописи

Поляков Андрей Николаевич

РАЗРАБОТКА КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ МЕТОДОВ
ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРЯМОЗОННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2011

Работа выполнена в государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования „Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского”

Научный руководитель доктор физико-математических наук,
профессор Степович Михаил Адольфович

Официальные оппоненты: доктор технических наук,
профессор Стрельченко Станислав Сергеевич

доктор физико-математических наук,
профессор Якимов Евгений Борисович

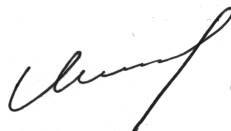
Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе РАН

Защита состоится 14 сентября 2011 г. в 14 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 при ГОУ ВПО „Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана” по адресу: 248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, Калужский филиал МГТУ им. Н.Э. Баумана.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Калужского филиала МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Автореферат разослан 01 августа 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета, канд. техн. наук, доцент



С.А. Лоскутов

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Особенностью современного этапа развития микро- и нанoeлектроники является переход к промышленному использованию микроструктур с размерами элементов в десятые, а в некоторых измерениях и в сотые доли микрометра. Существующие в настоящее время наиболее совершенные методы изучения и локальной диагностики физических свойств таких материалов (растровая электронная микроскопия, рентгеноспектральный микроанализ, масс-спектрометрия вторичных ионов и некоторые др.) базируются на физических явлениях взаимодействия заряженных частиц и жёсткого электромагнитного излучения с твёрдым телом. Возможности дальнейшего совершенствования этих методов во многом ограничиваются физическими параметрами этих процессов (длинами пробегов частиц, глубиной выхода вторичных излучений и т.д.), а размер области, из которой регистрируется информативный сигнал, по порядку величины совпадает с минимальными размерами элементов, свойства которых следует изучить. В силу этого для получения корректных результатов измерений физических параметров таких материалов важную роль играют как условия реализации экспериментальных измерений, так и способы обработки полученных при этом данных.

При изучении материалов полупроводниковой микро- и нанoeлектроники одним из наиболее широко применяемых методов электроннозондового анализа является метод катодолуминесцентной (КЛ) микроскопии, позволяющий получать информацию (как качественную — состав материала, наличие или отсутствие определённых центров излучательной или безызлучательной рекомбинации, кристаллическая структура, степень деформации и др.; так и количественную — значения физических параметров материала, толщины слоев, температура и др.) о физических свойствах объекта исследования, которую зачастую затруднительно или невозможно получить иными способами. Дополнительными преимуществами этого метода являются относительная простота реализации измерений (например, нет необходимости в установке на образец дополнительных электрических контактов) и во многих случаях низкий уровень деформации и разрушения образцов ввиду малости испытываемого воздействия. Поэтому совершенствование КЛ методов изучения физических свойств материалов микро- и нанoeлектроники является актуальной задачей как в научном, так и в прикладном аспектах, поскольку это не только способствует расширению наших знаний о фундаментальных физических свойствах новых полупроводниковых соединений, перспективных для прикладных приложений, но и содействует разработке технологии получения высококачественных материалов с заданными свойствами.

Целью работы является развитие и разработка количественных методов изучения свойств прямозонных полупроводниковых материалов и структур на основе анализа их КЛ сигнала. Для достижения этой цели были решены следующие задачи:

- рассмотрены информативные возможности математической модели, описывающей КЛ излучение, возбуждаемое в прямозонном полупроводниковом материале, для случая генерации неосновных носителей заряда (ННЗ) широким электронным пучком и их последующей линейной излучательной рекомбинации. С использованием этой модели проведено сравнение теоретических и экспериментальных результатов для классических прямозонных материалов (GaAs, CdTe и др.) и оценены возможности ее применения для одновременной идентификации нескольких электрофизических параметров мишеней. Показано, что модель физически адекватно позволяет провести одновременную оценку диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда;
- разработана и исследована математическая модель КЛ излучения экситонов, генерированных в прямозонном полупроводниковом материале остро сфокусированным электронным пучком, основанная на количественном описании их двумерной диффузии. Показано, что эта модель позволяет провести оценку коэффициента диффузии и подвижности экситонов в прямозонных полупроводниковых материалах. На основе результатов проведенных экспериментальных измерений получены оценки этих электрофизических параметров в перспективных прямозонных полупроводниковых материалах (GaN и ZnO), для которых реализуются условия разработанной модели;
- выполнена программная реализация полученных моделей, позволяющая оптимизировать условия эксперимента и получать оценки электрофизических параметров материалов в КЛ микроскопии прямозонных полупроводников.

Методы исследований, реализованные для достижения цели работы, основаны на развитии существующих и создании новых, адекватных рассматриваемым физическим явлениям и процессам, математических моделей, связанных с количественной КЛ микроскопией прямозонных полупроводниковых материалов.

Основой экспериментальных исследований явились методы количественной КЛ микроскопии прямозонных полупроводниковых материалов.

Для анализа экспериментальных данных, количественных соотношений и моделей использованы математические методы решения поставленных задач, опирающиеся на теорию аппроксимации, аппарат решения дифферен-

циальных уравнений в частных производных, методы интерполирования с наименьшей квадратичной погрешностью, численное и аналитическое интегрирование.

В качестве объектов исследований были выбраны прямозонные полупроводниковые материалы: однородные GaAs и GaN, многослойная гетероструктура ZnMgO/ZnO с ZnO квантовой ямой.

Достоверность полученных результатов обеспечена детальным рассмотрением физических процессов, связанных с возбуждением сигнала КЛ в прямозонных полупроводниковых материалах, корректностью постановки решаемых задач и их физической обоснованностью, применением современных методов расчёта, хорошим согласием между результатами расчётов и проведёнными экспериментальными исследованиями.

Часть исследований проведена в рамках грантов Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (проекты № 09-02-99027, № 07-02-96406).

Научная новизна работы определяется следующими основными результатами:

- для случая генерации ННЗ широким электронным пучком и реализации их линейной рекомбинации разработана методика одновременного определения оценок электрофизических параметров полупроводникового материала с использованием математической модели, описывающей зависимость интенсивности КЛ от энергии электронов пучка;
- получена математическая модель кинетики спада КЛ излучения экситонов, генерированных остро сфокусированным электронным пучком в прямозонном полупроводниковом материале, основанная на количественном описании их двумерной диффузии, а также исследованы её информативные возможности для изучения физических свойств прямозонных полупроводников и разработана методика определения оценок электрофизических параметров полупроводниковых мишеней;
- основываясь на результатах экспериментальных КЛ исследований, с применением разработанных методик получены оценки электрофизических параметров полупроводниковых материалов: диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда (GaAs), коэффициента диффузии и подвижности экситонов (GaN и ZnO).

Практическая значимость работы. Выполненная программная реализация полученных моделей позволяет оптимизировать проведение эксперимента в КЛ микроскопии прямозонных полупроводниковых материалов, для которых осуществляются условия применения этих моделей. Разработанные методы изучения электрофизических свойств прямозонных

полупроводниковых объектов могут быть использованы для создания физических основ промышленной технологии получения новых материалов с определёнными свойствами для опто-, микро- и наноэлектроники (фотоприёмных и светоизлучающих структур, сверхвысокочастотных (СВЧ) полевых транзисторов и др.).

На защиту выносятся:

- разработанные КЛ методы изучения электрофизических свойств прямозонных полупроводниковых материалов опто- и микроэлектроники, основанные на использовании зависимости интенсивности КЛ от энергии электронов пучка (для широкого электронного пучка) и кинетики спада КЛ (для остро сфокусированного электронного пучка);
- результаты использования разработанных моделей и методов для оценки электрофизических параметров полупроводниковых материалов: диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда (GaAs, CdTe и др.), коэффициента диффузии и подвижности экситонов (GaN и ZnO);
- программная реализация разработанных методов и моделей.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были доложены на следующих научных конференциях: VIII–X всероссийских семинарах „Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики“ (г. Москва, 2007, 2009 и 2011 гг.); VII международной научно-технической конференции „Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии“ (г. Пенза, 2007 г.); XV–XVII российских симпозиумах по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твёрдых тел (г. Черноголовка, 2007, 2009 и 2011 гг.); XVIII–XXI международных совещаниях „Радиационная физика твёрдого тела“ (г. Севастополь, 2008–2011 гг.); 15–18-ой всероссийских научно-технических конференциях студентов и аспирантов „Микроэлектроника и информатика“ (г. Зеленоград, 2008, 2009 и 2011 гг.); 4-й и 5-й международных конференциях „Математические идеи П. Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания“ (г. Обнинск, 2008 и 2011 гг.); XXII и XXIII российских конференциях по электронной микроскопии (г. Черноголовка, 2008 и 2010 гг.); 3rd international conference „Physics of electronic materials“ (г. Калуга, 2008 г.); 3-й всероссийской научно-практической конференции „Математика в современном мире–2008“ (г. Калуга, 2008 г.); XVI международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых „Ломоносов“ (г. Москва, 2009 г.); II всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению „Нanomатериалы“ (г. Рязань,

2009 г.); второй и третьей всероссийских школах-семинарах студентов, аспирантов, молодых ученых по направлению „Нанотехнологии“ (г. Москва, 2009 и 2010 гг.); XVIII международной научно-технической конференции „Прикладные задачи математики и механики“ (г. Севастополь, 2010 г.); 74–75. Jahrestagung der Deutsche Physikalische Gesellschaft und Deutsche Physikalische Gesellschaft Frühjahrstagung (Германия, г. Регенсбург, 2010 г. и г. Дрезден, 2011 г.), International workshop „Functionality of oxide interface and multiferroic materials“ (г. Аугсбург, Германия, 2010 г.); the 11th edition of the international conference „Physics of light-matter coupling in nanostructures“ (г. Куернавака (Мехико), Мексика, 2010 г.); научном семинаре кафедры физики твёрдого тела и кафедры полупроводниковой эпитаксии Университета им Отто фон Герике (г. Магдебург, Германия, 2010 г.); на научном семинаре кафедры полупроводниковых материалов Университета г. Лейпцига (г. Лейпциг, Германия, 2010 г.); 53-й научной конференции Московского физико-технического института „Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук“ (г. Долгопрудный, 2010 г.); 8-й всероссийской конференции „Нитриды галлия, индия и алюминия — структуры и приборы“ (г. Санкт-Петербург, 2011 г.), XXXXI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, 2011 г.); на научном семинаре лаборатории диффузии и дефектообразования в полупроводниках и лаборатории диагностики материалов и структур твёрдотельной электроники Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург, 2011 г.).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 25 работ. Основные результаты диссертационной работы изложены в 17 статьях, из них 4 статьи опубликованы в журналах из Перечня ВАК Минобрнауки РФ.

Личный вклад автора заключается в участии в постановке целей, задач и в выборе методов исследования; в получении новых и доработке имеющихся математических моделей, описывающих процессы диффузии носителей заряда и экситонов и процесс формирования КЛ излучения, возбуждаемого зондом растрового электронного микроскопа (РЭМ), а также анализе и исследовании этих моделей; в реализации математических моделей и методов идентификации параметров функциональных зависимостей в виде алгоритмов, программ и программных модулей; в получении оценок электрофизических параметров прямозонных полупроводниковых материалов с использованием полученных моделей и программ; в участии в проведении необходимых экспериментальных исследований и в интерпретации их результатов; в анализе и обобщении полученных результатов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка цитируемой литературы из 152 наименований. Работа изложена на 120 страницах машинописного текста и содержит 26 рисунков.

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы, научная новизна и практическая значимость полученных результатов, сформулированы основные защищаемые положения.

Первая глава диссертации носит обзорный характер. В ней рассмотрены основные представления о физической природе взаимодействия электронов с конденсированным веществом и модели, описывающие эти процессы, а также особенности использования метода КЛ для изучения физических свойств твёрдого тела. На основании анализа литературных данных сформулированы задачи исследования.

Во второй главе диссертации рассматриваются некоторые вопросы, касающиеся изучения физических свойств мишеней в КЛ микроскопии прямозонных полупроводников с использованием зависимости интенсивности КЛ I от энергии электронов зонда РЭМ E_0 в случае возбуждения КЛ излучения широким электронным пучком. Исследуются информативные возможности применения этой модели для одновременной оценки нескольких электрофизических параметров материала мишени.

Зависимость интенсивности КЛ I от энергии пучка электронов E_0 и параметров материала Θ описывалась на основе так называемой модели независимых источников¹. Согласно этой модели интенсивность КЛ в случае широкого электронного пучка и низкого уровня возбуждения при реализации линейной рекомбинации может быть получена как сумма вкладов от рекомбинации ННЗ, генерированных бесконечно тонкими источниками, находящимися на глубине z_0 , для всех $z_0 \in (0, \infty)$ ²:

$$I(E_0, \Theta) \cong 0,155 \left[1 - \exp\left(-\frac{z_c}{L}\right) \right] \int_0^\infty dz_0 \int_{l_s}^\infty \Delta p(z, z_0) \exp(-\alpha z) dz. \quad (1)$$

Здесь z_c — центр тяжести области генерации; z — координата, отсчитываемая от поверхности вглубь полупроводника; $\Delta p(z, z_0)$ — функция, описыва-

¹Van Roosbroeck W. Injected current carrier transport in a semi-infinite semiconductor and the determination of lifetimes and surface recombination velocities // J. Appl. Phys. 1955. Vol. 26, № 4. P. 380–391.

²Михеев Н. Н., Петров В. И., Степович М. А. Об использовании модели независимых источников неравновесных носителей заряда при расчёте интенсивности катодолюминесценции, возбуждаемой в полупроводниковом материале // Изв. РАН. Сер. физ. 1992. Т. 56. №3. С. 176–182.

яющая распределение по глубине z генерированных в полупроводнике ННЗ после их диффузии от планарного бесконечного источника, находящегося на глубине z_0 . В качестве параметров Θ в формулу (1) (с учетом выражения для $\Delta p(z, z_0)$) входят l_s — глубина приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда, α — коэффициент поглощения излучения, L — диффузионная длина ННЗ, τ — время жизни ННЗ, S — приведённая скорость поверхностной рекомбинации ННЗ, а также средний заряд ядра мишени Z и его средний атомный вес A .

Математическое моделирование, проведённое в данной работе, выявило ряд проблем, проявляющихся при реализации численного интегрирования при вычислении выражения (1). Прежде всего это значительная величина времени, затрачиваемого на проведение расчёта $I(E_0)$ на персональной электронно-вычислительной машине (ПЭВМ) (порядка десятков секунд на одно значение $I(E_0)$), а также вопросы устойчивости и точности численного приближения. Анализ результатов моделирования позволил определить некоторые возможности и предложить способы решения возникающих проблем. Для $I(E_0)$ путем аналитического интегрирования (1) было получено выражение, содержащее функции ошибки, которые при реализации расчётов было предложено аппроксимировать степенными рядами, что позволяет достигнуть относительной погрешности вычислений не более 10^{-7} при использовании только десяти первых членов ряда. Показано, что применение такого подхода для вычисления $I(E_0)$ даёт возможность значительно (на порядок) снизить затрачиваемое при расчётах время и избавиться от некоторых проблем, характерных для численного интегрирования выражения (1).

Исследовались информативные возможности применения модели, описывающей зависимость $I(E_0)$, для одновременной оценки нескольких электрофизических параметров полупроводниковых мишеней как с применением стандартного метода наименьших квадратов (МНК), так и при помощи сравнительно нового метода конфлюэнтного анализа (МКА)³. По результатам проведённого математического моделирования и сравнения полученных теоретических результатов с экспериментальными для классических прямозонных материалов (GaAs, CdTe и др.) установлено, что разработанная модель в случае применения МКА позволяет физически корректно провести одновременную оценку двух электрофизических параметров материала (диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда) с учетом погрешности измерения как в значении интенсивности КЛ, так и в значении энергии электронов пучка. Некоторые результаты математического моделирования, получен-

³Грешников А. А. Анализ и синтез стохастических систем. Параметрические модели и конфлюэнтный анализ. М.: Радио и связь, 1990. 320 с.

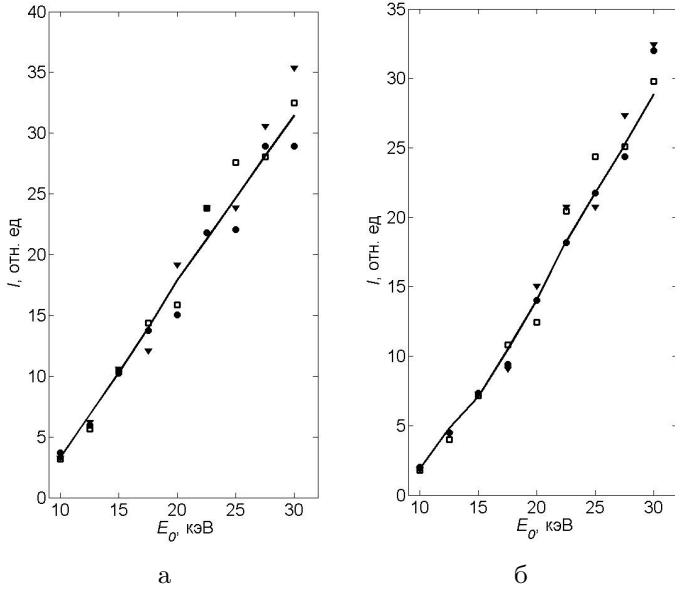


Рис. 1. Результаты математического моделирования для зависимости $I(E_0)$ (а — для GaAs, б — для CdTe). Точки — значения интенсивности КЛ, полученные в результате наложения случайных ошибок с нулевым математическим ожиданием и дисперсией $\sigma(I_i) = 0,1I_i$ на вычисленные значения $I(E_0)$. Для квадратов точность измерения энергии электронов пучка E_0 при расчётах принималась 0,1 кэВ, для треугольников — 0,3 кэВ, для кружков — 0,5 кэВ. Сплошная линия — оптимальная зависимость $I(E_0)$, полученная в результате применения МКА

ные с использованием МКА, представлены на рис. 1.

Экспериментальная проверка полученных результатов моделирования осуществлялась для хорошо изученного монокристаллического GaAs⁴. Впервые в КЛ микроскопии с использованием МКА была проведена одновременная оценка диффузионной длины ННЗ L и глубины l_s приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда. Обработка экспериментальных данных при помощи МКА для доверительного интервала $\gamma = 0,95$ дала следующие значения искомых параметров: $L =$

⁴Эксперименты проводились М. А. Степовичем в лаборатории кафедры физической электроники физического факультета Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова.

$0,4 \pm 0,03$ мкм и $0 \leq l_s \leq 0,007$ мкм. Абсолютная ошибка в измерении E_0 составляла не более 0,5 кэВ, а для $I - 0,15I_i, i = \overline{1, n}$. Анализ полученных результатов показал хорошее согласие с экспериментальными данными классических работ, что позволило сделать вывод о перспективности использования предложенного метода для изучения электрофизических свойств полупроводниковых прямозонных материалов.

В третьей главе диссертации рассматриваются возможности оценки коэффициента диффузии D и подвижности μ экситонов, генерированных остро сфокусированным электронным пучком в полупроводниковом материале. Была разработана модель кинетики спада интенсивности КЛ излучения и проведены экспериментальные исследования⁵ широкозонных полупроводниковых материалов и гетероструктур (GaN и ZnMgO/ZnO), часто применяющихся (GaN) или являющихся наиболее перспективными кандидатами (ZnO) для создания новых устройств опто- и микроэлектроники, которые могут работать, в том числе, при высоких напряжениях и в неблагоприятных условиях внешней среды. Работа была направлена на изучение специфических механизмов рассеяния, вызванных наличием границ гетеропереходов, в гетероструктурах с одиночными квантовыми ямами (КЯ). Такие гетероструктуры находят свое применение, например, в современных СВЧ полевых транзисторах, фотоприемных и светоизлучающих устройствах, поэтому полученная информация интересна не только с точки зрения изучения свойств конденсированного вещества, но и может быть использована для совершенствования промышленной технологии создания новых материалов и гетероструктур для производства подобных устройств.

Информация о механизмах рассеяния, характерных для данного исследуемого материала, может быть получена из анализа температурной зависимости подвижности носителей заряда и экситонов. В этом случае могут быть непосредственно выделены рассеяние на ионизированных примесях, фононах, границах доменов и рассеяние за счет влияния границ гетеропереходов (механические шероховатости, дипольные моменты, поляризация) и др. Механизмы рассеяния, характеризующие влияние границы гетероперехода, наиболее выпукло проявляют себя при низких температурах (до десятков Кельвинов), когда фононы „замерзают”. Для носителей заряда при таких температурах доминирует рассеяние на ионизированных примесях, поэтому при анализе результатов их исследований четко выделить влияние рассеяния на границах становится затруднительно или невозможно. Такая информация может быть получена при изучении (с последующим опреде-

⁵Эксперименты, описанные в третьей главе, проводились М. Нолтемаером (M. Noltmeyer) в Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg (Магдебург, Германия) под руководством профессора Ю. Христена (J. Christen). Автор диссертации принимал непосредственное участие в некоторых из описанных экспериментов.

лением корреляции с результатами, полученными для носителей заряда) транспорта экситонов, которые испытывают рассеяние на ионах примесей в гораздо меньшей мере из-за своей электрической нейтральности. В силу последнего, электрические измерения, традиционно применяющиеся для исследований носителей заряда, в этом случае не могут быть использованы, а так как экситоны рекомбинируют излучательно, то для их исследования можно эффективно применять КЛ измерения.

Для экспериментальных исследований рассеяния экситонов предлагается использовать образцы, покрытые непроницаемой для КЛ излучения маской, имеющей круглые отверстия различного диаметра. КЛ излучение возбуждается в центре такого отверстия при помощи пульсирующего электронного пучка и регистрируется в области спектра, характерной для рекомбинации свободных экситонов. После того, как в образце установится равновесие между процессами генерации и рекомбинации, возбуждение прекращается: электронный пучок отклоняется системой бланкирования. Характер следующего за этим спада кинетики КЛ зависит в общем случае только от известного радиуса отверстия R , времени жизни экситонов τ , которое может быть получено из измерений в открытой области образца вдали от края маски, и коэффициента диффузии D , характеризующего их движение под маску.

В результате аналитического решения двумерного уравнения диффузии экситонов было получено следующее выражение для кинетики КЛ, регистрируемой из круглого отверстия в непроницаемой для излучения маске:

$$I(t) \cong \frac{\pi \exp(-t/\tau)}{Dt} \int_0^R \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r^2 + \xi^2}{4Dt}\right) I_0\left(\frac{r\xi}{2Dt}\right) n(\xi) r \xi dr d\xi, \quad (2)$$

где

$$n(r) = K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \int_0^r \Phi(r_0) I_0\left(\frac{r_0}{\lambda}\right) r_0 dr_0 + I_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \int_r^\infty \Phi(r_0) K_0\left(\frac{r_0}{\lambda}\right) r_0 dr_0. \quad (3)$$

Здесь r — полярный радиус; t — время, прошедшее с момента отклонения электронного пучка; $I_0(x)$, $K_0(x)$ — модифицированные функции Бесселя нулевого порядка первого и второго рода; $\lambda = \sqrt{D\tau}$ — диффузионная длина экситонов; $\Phi(x, y) = G_0\phi(x, y)$ — функция источника генерации экситонов, которая определяется характером возбуждения и свойствами материала, где G_0 — частота генерации экситонов, а $\phi(x, y)$ в нашем случае плотность двумерного нормального распределения Гаусса; ξ, r_0 — переменные интегрирования. В предельном случае при $R \rightarrow \infty$ формула (2) переходит в выражение $I(t) \cong N_0 \exp(-t/\tau)$, где N_0 — общее число генерированных экситонов, характерное для открытой области образца.

Было проведено математическое моделирование, которое показало, что эта модель корректно описывает изучаемые явления и позволяет определять значения коэффициента диффузии экситонов в широком диапазоне температур. Также показано, что в силу зашумлённости регистрируемого сигнала и особенностей эксперимента (применение бланкирования) для получения корректных оценок желательно использовать методы, позволяющие учесть ошибки измерения (например, МКА). Искомая температурная зависимость подвижности экситонов $\mu(T)$ может быть непосредственно получена при помощи соотношения Эйнштейна из температурной зависимости $D(T)$.

Экспериментальная проверка модели проводилась для довольно хорошо изученного монокристаллического нитрида галлия, покрытого золотой маской. При выбранных условиях эксперимента (низкое ускоряющее напряжение равное $E_0 = 5$ кэВ) с учетом коэффициента поглощения излучения в исследуемой части спектра вклад от излучательной рекомбинации экситонов, диффундирующих вглубь образца, был сравнительно малым и результаты измерений характеризовали преимущественно их транспорт, протекающий параллельно поверхности образца.

Результаты расчётов и экспериментальные данные, полученные при температуре 5 K и 300 K, очень хорошо согласуются между собой (см. рис. 2). Интервальные оценки коэффициента диффузии экситонов ($D(5\text{ K}) = 1,22 \pm 0,21\text{ см}^2/\text{с}$ и $D(300\text{ K}) = 1,45 \pm 0,18\text{ см}^2/\text{с}$) и подвижности экситонов ($\mu(5\text{ K}) = 2361 \pm 487\text{ см}^2/\text{Вс}$ и $\mu(300\text{ K}) = 56 \pm 7\text{ см}^2/\text{Вс}$) соответствуют характерным значениям этих величин в GaN, что позволяет сделать вывод о возможности использования описанной модели кинетики спада КЛ для оценки коэффициента диффузии и подвижности экситонов при изучении физических свойств прямозонных полупроводниковых материалов.

Были проведены исследования широкозонной полупроводниковой гетероструктуры ZnMgO/ZnO с ZnO квантовой ямой. Образец был покрыт титановой маской. Потенциальный барьер КЯ в данном случае обеспечивает диффузию экситонов только в горизонтальном направлении, параллельном поверхности образца. Экспериментальные КЛ измерения проводились в широком диапазоне температур: от 4,8 до 180 K. Полученная по результатам оценки коэффициента диффузии зависимость $D(T)$ возрастает от $D = 0,25\text{ см}^2/\text{с}$ при 4,8 K до $D = 1,4\text{ см}^2/\text{с}$ при 180 K. Показано, что соответствующая ей зависимость $\mu(T)$ (см. рис. 3) имеет вид, типичный для КЯ полупроводниковых материалов, и хорошо описывается кривой $\mu \sim T^{-1/2}$, что характерно для рассеяния на акустических фононах (пьезоэлектрический механизм).

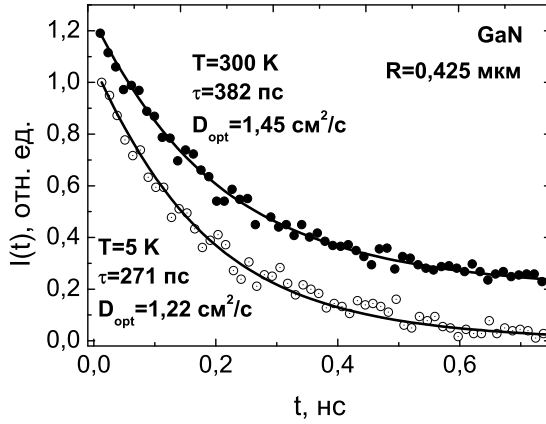


Рис. 2. Кинетика спада КЛ GaN из отверстия радиусом $R = 0,425$ мкм в непроницаемой для КЛ излучения маске при температуре 5 К и 300 К (сдвинута вверх на 0,2 усл. ед.). Точки — экспериментальные данные, кривые — рассчитанные оптимальные зависимости $I(t)$

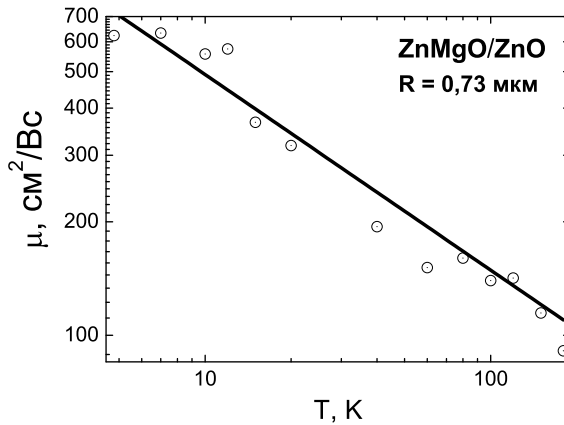


Рис. 3. Зависимость подвижности экситонов от температуры в ZnO КЯ. Точки получены в результате обработки экспериментальных данных, кривая соответствует зависимости $\mu \sim T^{-1/2}$

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы.

Основные результаты и выводы

1. Определены возможности и предложены способы реализации вычислений зависимости интенсивности КЛ от энергии электронов зонда РЭМ для случая генерации ННЗ широким электронным пучком и их последующей линейной рекомбинации, позволяющие получать математически корректные результаты расчётов и значительно (на порядок) снизить затрачиваемое на них время. Методами математического моделирования изучены информативные возможности этой модели для получения оценок одновременно нескольких электрофизических параметров материала мишени на основе применения МКА. Установлено, что разработанная модель позволяет физически адекватно провести одновременную оценку диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда, для прямозонных полупроводников, описана методика получения таких оценок, а также рассмотрены некоторые возможности применения математического моделирования для оптимизации необходимых для этого КЛ измерений;
2. Разработана и исследована математическая модель КЛ излучения экситонов, генерированных в прямозонном полупроводниковом материале остро сфокусированным электронным пучком, основанная на количественном описании их двумерной диффузии. Решение двумерного уравнения диффузии экситонов было получено аналитически. Показано, что эта модель позволяет проводить корректную оценку коэффициента диффузии и подвижности экситонов;
3. С использованием предложенных методов и моделей определены значения некоторых электрофизических параметров прямозонных полупроводниковых материалов и гетероструктур: а) для однородного GaAs впервые проведена совместная оценка диффузионной длины ННЗ и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда; б) для однородного GaN получены оценки коэффициента диффузии и подвижности экситонов; в) для гетероструктуры ZnMgO/ZnO впервые определены температурные зависимости (для $T = 4,8 \dots 180$ К) коэффициента диффузии и подвижности экситонов и сделано предположение о доминирующих механизмах рассеяния в ZnO КЯ. Полученные результаты могут быть использованы для создания и совершенствования промышленной технологии получения

новых прямозонных полупроводниковых материалов и гетероструктур опто- и микроэлектроники.

Основные результаты работы отражены в следующих статьях

1. О выборе начального приближения в задаче идентификации параметров прямозонных полупроводников методом катодoluminesцентной микроскопии / А. Н. Поляков [и др.] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. № 9. С. 35–41.
2. Проблема идентификации параметров прямозонных полупроводников по зависимости интенсивности монохроматической катодoluminesценции от энергии электронов пучка / А. Н. Поляков [и др.] // Прикладная физика. 2009. № 3. С. 119–126.
3. Михеев Н. Н., Поляков А. Н., Степович М. А. О возможности использования конфлюэнтного анализа в катодoluminesцентной микроскопии для интервального оценивания диффузионной длины неосновных носителей заряда и глубины приповерхностной области, обеднённой основными носителями заряда. Результаты математического моделирования // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 10. С. 87–93.
4. Об одной возможности математического моделирования зависимости интенсивности катодoluminesценции от энергии электронов пучка при идентификации параметров полупроводниковых материалов с использованием аппроксимации степенными рядами / А. Н. Поляков [и др.] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 9. С. 95–100.
5. О некоторых аспектах использования методов конфлюэнтного анализа для оценивания параметров функции / А. Н. Поляков [и др.] // Научные труды КГПУ им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. Калуга, 2007. С. 51–55.
6. Поляков А. Н., Степович М. А. Об одной математической проблеме, возникающей при расчётах катодoluminesценции, возбуждаемой в планарной полупроводниковой структуре широким электронным пучком // Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии: Сборник статей VII международной научно-технической конференции. Пенза, 2007. С. 48–51.
7. Polyakov A. N., Stepovich M. A. About a choice of initial approach in a problem of identification of parameters of homogeneous direct-gap semiconductors on dependencies of the intensities monochromatic cathodolumines-

cence from electron beam energy // Physics of electronic materials: Proc. 3rd International Conference. Kaluga, 2008. Vol. 1. P. 248–252.

8. Поляков А. Н., Степович М. А. Об одной проблеме оценивания электрофизических параметров прямозонных полупроводников методом катодолюминесцентной микроскопии // Радиационная физика твердого тела: Труды XVIII международного совещания. М., 2008. С. 483–490.
9. Поляков А. Н., Степович М. А. О выборе допустимого отклонения адаптивных квадратурных формул при расчёте распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале // Математика в современном мире — 2008: Труды 3-й всероссийской научно-практической конференции. Калуга, 2008. С. 65–70.
10. Поляков А. Н. О математическом моделировании зависимости интенсивности катодолюминесценции от энергии электронов зонда растрового электронного микроскопа в задачах идентификации параметров полупроводниковых материалов с субмикронным разрешением // Наноматериалы-2009: Сборник трудов II всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению „Наноматериалы“. Рязань, 2009. Т. I. С. 64–69.
11. Костенко А. В., Ковтунова Т. И., Поляков А. Н. Об одной возможности интегрирования функции типа Гаусса с переменным аргументом в задаче вычисления интенсивности катодолюминесценции // Научные труды КГПУ им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. Калуга, 2009. С. 56–62.
12. Ковтунова Т. И., Поляков А. Н., Степович М. А. О некоторых возможностях математического моделирования зависимости интенсивности катодолюминесценции от энергии электронов пучка для однородных полупроводниковых материалов // Радиационная физика твердого тела: Труды XIX международного совещания. М., 2009. С. 209–216.
13. Поляков А. Н. Одно решение стационарного уравнения диффузии экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале // Наноинженерия-2010: Сборник трудов третьей всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов, молодых ученых по направлению „Наноинженерия“. М., 2010. С. 359–365.
14. Поляков А. Н., Степович М. А. Исследование некоторых свойств математической модели катодолюминесценции экситонов, возбуждаемой в круглой области на поверхности нитрида галлия // Сборник научных работ лауреатов областных премий и стипендий. Выпуск 6. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2010. С. 127–133.

15. Математическое моделирование катодолуминесценции, возбуждаемой в круглой области на поверхности нитрида галлия / А. Н. Поляков [и др.] // Радиационная физика твердого тела: Труды XX международного совещания. М., 2010. Т. 1. С. 118–125.
16. Оценивание коэффициента диффузии в нитриде галлия по результатам катодолуминесцентных измерений / А. Н. Поляков [и др.] // Научные труды КГУ им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. Калуга, 2011. С. 102–106.
17. Ковтунова Т. И., Поляков А. Н., Серегина Е. В. О некоторых особенностях вычисления зависимости интенсивности катодолуминесценции от энергии электронов пучка // Научные труды КГУ им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. Калуга, 2011. С. 46–50.

Поляков Андрей Николаевич

Разработка катодолюминесцентных методов изучения физических свойств
прямоугольных полупроводниковых материалов

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 14.06.2011 г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская №2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Тираж 100 экз. Зак. № 75/13

Отпечатано „Наша полиграфия“,
г. Калуга, Грабцевское шоссе, д. 126.
Лиц. ПЛД № 42-29 от 23.12.1999.