На правах рукописи

Серегина Елена Владимировна

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТОХАСТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

2014

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского».

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

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Галкин Валерий Алексеевич,
директор политехнического института
Сургутского государственного университета

кандидат физико-математических наук,
старший преподаватель
Задорожный Сергей Сергеевич,
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова

Ведущая организация: Институт проблем управления РАН

Защита состоится “29” __января_ 2015 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.03 при Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д.4, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и на сайте www.keldysh.ru.

Автореферат разослан “____” ______________ 2014 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
д-р физ.-мат. наук Н.В. Змитренко

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы. Электронные и световые пучки широко используются для решения различных физических и технологических задач. При этом в исследованиях поверхностных свойств полупроводниковых материалов и структур для получения количественной информации об объектах исследования часто необходимо знать распределение неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных внешним энергетическим воздействием, после их диффузии в мишени. На практике локальные значения электрофизических параметров полупроводниковых материалов в силу ряда причин могут иметь случайный разброс относительно своих усредненных по объему значений, и не исключено, что наличие разброса в значениях локальных параметров может оказать существенное влияние на процесс диффузии, а значит, и на распределение неравновесных ННЗ в объеме полупроводника.

Количественное описание влияния разброса в значениях локальных параметров полупроводников на распределение ННЗ в результате их диффузии может быть проведено методами математического моделирования. Однако задача анализа моделей стохастических процессов, подобных процессу диффузии ННЗ, с учетом случайного изменения электрофизических параметров исследуемого полупроводникового материала, является достаточно сложной проблемой, для решения которой существует сравнительно мало методов. Большинство таких методов являются либо слишком сложными для использования на практике, либо требуют принятия слишком грубых упрощающих допущений, например, о малости случайных возмущений параметров; при этом далеко не всегда удается найти точное аналитическое решение. В силу вышеизложенного разработка новых приближенно-аналитических методов моделирования стохастических процессов диффузии, ориентированных на использование ЭВМ, и создание эффективных вычислительных алгоритмов, является актуальной.

В данной диссертационной работе для исследования результатов стохастических процессов диффузии ННЗ в полупроводниках предлагается использовать проекционный метод, основанный на теории матричных операторов. Суть данного подхода состоит в развитии и обосновании этого метода с целью использования его для определения статистических характеристик распределения неравновесных ННЗ. Возможности метода иллюстрируются результатами вычислительного эксперимента для параметров, характерных для классических полупроводниковых материалов микро- и наноэлектроники.

Цель работы и задачи исследования. Целью работы является решение задачи статистического анализа диффузии ННЗ проекционным методом с учетом случайной составляющей в электрофизических параметрах полупроводника (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) и проведение вычислительного эксперимента по выявлению закономерностей в результатах развития стохастического процесса диффузии ННЗ по глубине полупроводникового материала. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи исследования:

1) разработать схему проекционной аппроксимации стохастической модели диффузии ННЗ; дать порядковую оценку погрешности и получить условие вычислительной устойчивости предложенного проекционного метода исходной задачи;

2) построить сходящиеся матричные ряды и рассмотреть оптимизацию скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характери-

стики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине;

3) в рамках вычислительного эксперимента исследовать влияние случайной составляющей в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) на распределение неравновесных ННЗ в полупроводниковых материалах.

Достоверность полученных результатов обеспечена корректным использованием методов функционального анализа, линейной алгебры, теории вероятности, спектральной теории случайных матриц, теории матричных операторов и подтверждается сравнением статистических характеристик распределения ННЗ, рассчитанных с использованием двух моделей (т.н. модели коллективного движения ННЗ и модели независимых источников).

Научная новизна работы. В процессе решения поставленной задачи были получены следующие новые результаты:

1) построена стохастическая математическая модель, описывающая распределение ННЗ по глубине в результате их одномерной диффузии в полупроводниковом материале;

2) предложена схема проекционной аппроксимации, основанная на применении метода наименьших квадратов, для дифференциального уравнения диффузии со случайной составляющей в электрофизических параметрах полупроводника (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ); дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы;

3) разработан универсальный подход к решению задачи статистического анализа для математической модели, описываемой уравнением диффузии со случайными электрофизическими параметрами проекционным методом; построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена задача оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих искомые проекционные характеристики, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности; даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы;

4) разработано программное обеспечение для эффективного компьютерного моделирования стохастического явления диффузии с учетом возможности параллельных вычислений.

Практическая значимость работы.

Результаты работы могут быть использованы при проектировании изделий электронной техники, для которых разброс в локальных параметрах полупроводника имеет существенное значение и может повлиять на их характеристики.

Работа является частью исследований, проведенных в рамках грантов Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (№ 07-02-96406, № 09-02-99027 и № 12-02-97519), а также работ, проводимых в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (проект № 1.6107.2011).

На защиту выносятся:

1) метод построения стохастической математической модели одномерной диффузии неравновесных ННЗ в полупроводниковых материалах;

2) схема проекционной аппроксимации, основанная на применении метода наименьших квадратов, для математической модели диффузии ННЗ по глубине в полупроводниках;

3) метод решения задачи анализа диффузии ННЗ со случайными электрофизическими параметрами, основанный на использовании проекционной модели;

4) результаты статистического анализа диффузии ННЗ в полупроводнике, полученные путем проведения вычислительного эксперимента.

Апробация работы. Апробация результатов работы проведена на ряде научных конференций, в т.ч.: на VI национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (г. Москва, 2007 г.); VI международной научно-технической конференции «Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии» (г. Пенза, 2007 г.); IV и V международных конференциях «Математические идеи П.Л. Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания» (г. Обнинск, 2008 и 2011 гг.); XXII, XXIII, XXIV и XXV Российских конференциях по электронной микроскопии (г. Черноголовка, 2008, 2010, 2012 и 2014 гг.); VII национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наносистем и материалов (г. Москва, 2009 г.); XXI, XXII и XXIII международных научно-технических конференциях по фотоэлектронике и приборам ночного видения (г. Москва, 2010, 2012 и 2014 гг.); XVII и XVIII Российских симпозиумах по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твёрдых тел (г. Черноголовка, 2011 и 2013 гг.); X и XI Всероссийских семинарах «Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики» (г. Москва, 2011 и 2013 гг.), XIX международной научно-технической конференции «Прикладные задачи математики и механики» (г. Севастополь, 2011 г.), международной конференции «Моделирование, управление и устойчивость» (г. Севастополь, 2012 г.), XXI международной научно-технической конференции «Прикладные задачи математики» (г. Севастополь, 2013 г.), а также на научных семинарах физико-технологического института Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского (2010-2012 гг.) и Института математического моделирования РАН (2011 и 2013 гг.).

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 19 статьях, из них 8 статей ([1-8]) опубликованы в журналах и изданиях из перечня ВАК Минобрнауки РФ.

Личный вклад автора заключается в построении и обосновании схемы проекционной аппроксимации стохастической модели диффузии ННЗ в полупроводниковых материалах, в разработке универсального подхода к решению задачи анализа уравнения диффузии ННЗ со случайными электрофизическими параметрами с использованием проекционной модели, в создании алгоритмов для определения статистических характеристик распределения ННЗ по глубине полупроводника и их реализации в виде соответствующего программного обеспечения.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа изложена на 171 странице, в том числе основного текста 126 страниц, библиографический список из 144 наименований на 14 страницах и приложения на 31 странице.

Содержание работы.

В первой главе приводится обзор методов исследования случайных явлений, определяются их достоинства и недостатки. Особое внимание уделяется построению стохастической математической модели распределения ННЗ по глубине в полупроводниках. На основе анализа литературных данных формулируется постановка задачи диссертационной работы.

Вторая глава посвящена построению проекционной аппроксимации модели коллективного движения ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием в полупроводнике. В модели коллективного движения ННЗ, на диффузию генерированных внешним энергетическим воздействием неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника оказывают влияние другие электроны или дырки из других микрообластей материала. При этом для одномерного движения ННЗ, реализующегося при использовании широкого внешнего источника, распределение по глубине ННЗ находится как решение дифференциального уравнения диффузии

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

с граничными условиями

$$D\frac{d\Delta p(z)}{dz}\bigg|_{z=0}=\nu_s\Delta p(0),\quad \Delta p(\infty)=0. \qquad (2)$$

Здесь $\Delta p(z)$ – распределение по глубине ННЗ, генерированных внешним энергетическим воздействием, после их диффузии в однородном полупроводниковом материале; z – координата, отсчитываемая от плоской поверхности вглубь полупроводника. Входными данными являются $\rho(z)$ – число ННЗ, генерируемых вследствие внешнего воздействия в единицу времени в тонком слое мишени на глубине z, а D, τ и ν_s – электрофизические параметры мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно.

Значения $\rho(z)$ могут быть определены из соотношения для плотности энергии $\rho^*(z)$, выделяемой в этом слое мишени в единицу времени (делением $\rho^*(z)$ на энергию образования электронно-дырочной пары); для широкого электронного пучка справедлива полуэмпирическая формула:

$$\rho^*(z)=\frac{1{,}085(1-\eta)E_0}{\sqrt{\pi}z_{ms}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})}\left\{\exp\left[-\left(\frac{z-z_{ms}}{z_{ms}}\right)^2\right]+\frac{\eta}{1-\eta}\exp\left[-\left(\frac{z-z_{ss}}{z_{ss}}\right)^2\right]\right\}.$$

Здесь z_{ms} – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние; z_{ss} – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами; η – коэффициент обратного рассеяния электронов зонда, E_0 - энергия электронного пучка, рассеянная в мишени.

Для аппроксимации непрерывной исходной задачи конечномерной в диссертационной работе используется проекционный метод, основанный на теории матричных операторов, и сведении начальной и краевой задачи к задаче минимизации квадратичного функционала, вбирающего в себя как невязку уравнений, так и начальные и граничные условия.

При реализации проекционного метода был выбран базис из модифицированных функций Лагерра $\varphi_i(z)=\exp\left(-\gamma z/2\right)L_i\left(\gamma z;\alpha\right)$ в функциональном пространстве $L_2\left[0,\infty\right)$, которые определяются через многочлены Чебышева-Лагерра $L_i\left(\gamma z;\alpha\right)$, $i=0,1,2,\ldots$. Здесь параметры γ и α используются для оптимизации вычислительной схемы. Тогда каждая функция от переменной z, входящая в систему уравнений (1), (2), аппроксимируется частичной суммой порядка m ее ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра, а затем последовательно к каждому уравнению системы применяется оператор проектирования Q^m на подпространство с базисом из m первых модифицированных функций Лагерра.

Далее осуществляется переход от системы уравнений (1), (2) к приближенной системе уравнений:

$$\begin{cases} D\tau\, Q^m\left(\dfrac{d}{dz}Q^m\left(\dfrac{d\Delta p^m\left(z\right)}{dz}\right)\right)-\Delta p^m\left(z\right)=-\tau\,\rho^m\left(z\right), \\ Q^m\left(\dfrac{d\Delta p^m\left(z\right)}{dz}\right)\Bigg|_{z=0}-D^{-1}\nu_s\Delta p^m\left(0\right)=0. \end{cases} \tag{3}$$

и вместо задачи (3) ставится в рассмотрение функционал:

$$J_m\left(\Delta p^m\left(z\right)\right)=\left\|\tilde{L}_1^{(\Delta p)}\left(\Delta p^m\left(z\right)\right)+\tau\,\rho^m\left(z\right)\right\|_{L_2}^2+\left(\tilde{L}_2^{(\Delta p)}\left(\Delta p^m\left(z\right)\right)\Big|_{z=0}\right)^2,$$

где $\tilde{L}_1^{(\Delta p)}$ и $\tilde{L}_2^{(\Delta p)}$ - операторы, стоящие в левых частях уравнений системы (3) соответственно. Приближенное решение $\Delta p^m\left(z\right)$ ищется из требования, чтобы оно доставляло минимум функционалу $J_m\left(\Delta p^m\left(z\right)\right)$. Затем осуществляется переход к алгебраической векторно-матричной системе уравнений

$$A_{p(m+1)\times m}\,C_m^p=G_{(m+1)\times 1}, \tag{4}$$

где A_p – матрица переопределенной системы (4) , которая имеет вид

$$A_{p\,(m+1)\times m}=\begin{bmatrix} D\tau\,D_m^2-E \\ \left(\varphi^m\left(0\right)\right)^T D_m-D^{-1}\nu_s\left(\varphi^m\left(0\right)\right)^T \end{bmatrix}.$$

Здесь D_m – матрица дифференцирования в базисе $\varphi_i(z)$ из m первых модифицированных функций Лагерра по переменной z, а C_m^p – столбец из коэффициентов разложения функции $\Delta p\left(z\right)$. Столбец, стоящий в правой части системы уравнений (4) определяется как:

$$G_{(m+1)\times 1}=\left[-\tau\,C_m^\rho \quad 0\right]^T.$$

Здесь C_m^ρ – столбец из коэффициентов разложений известной функции $\rho\left(z\right)$ по базису $\varphi_i(z)$.

С другой стороны, в силу ортогональности функций Лагерра на полуоси $\left[0,\infty\right)$, функционал $J_m\left(\Delta p^m\left(z\right)\right)$ можно представить в виде:

$$J_m\left(\Delta p^m(z)\right)=J_m\left(C^p\right)=\left(A_p C^p-G\right)^T\left(A_p C^p-G\right).$$

Далее, находится столбец C^p, который минимизирует сумму квадратов невязок всех уравнений, входящих в эту систему:

$$J_m\left(C^p\right)=\left(A_p C^p-G\right)^T\left(A_p C^p-G\right)\to \inf,$$

т.е. система решается по методу наименьших квадратов (МНК), тогда нормальное псевдорешение переопределенной системы уравнений (4) можно найти с помощью псевдообратной матрицы, т.е.

$$C^{p^+}=\left(A_p^T A_p\right)^{-1}A_p^T G. \qquad (5)$$

Приближенное решение исходной задачи (1), (2) восстанавливается по формулам:

$$\Delta p(z)\approx \Delta p^m(z)=\left(\varphi^m(z)\right)^T C^{p^+}, \quad z\in[0,\infty).$$

Если погрешности в исходных данных и погрешности вычислений отсутствуют, а учитываются лишь погрешности аппроксимаций, тогда имеет место

Теорема 1. *Пусть функция* $\rho(z)$ *имеет непрерывные производные до порядка* n. *Для* $m\geq 4$ *обозначим через* $C_m^{p^+}$ *нормальное псевдорешение – решение задачи минимизации функционала* $J\left(C^p\right)$, *построенного с помощью проектирования на подпространство с базисом из первых* m *модифицированных функций Лагерра. Тогда последовательность* $\left\{C_m^{p^+}\right\}$ *будет минимизирующей для функционала* $J\left(C^p\right)$ *и*

$$J\left(C_m^{p^+}\right)\leq\begin{cases}C(n;\alpha;\gamma)m^{-n+\alpha+5/2}\omega^2\left(m^{-1}\right), & \alpha\geq 1/2,\ n>\alpha+3/2,\\ C(n;\alpha;\gamma)m^{-n+3}\omega^2\left(m^{-1}\right), & -1/2<\alpha<1/2,\quad n>2,\ m\to\infty.\end{cases}$$

а положительная постоянная $C(n;\alpha;\gamma)$ *не зависит от* m *и обычно возрастает при увеличении* n. *Здесь* ω *– заданный модуль непрерывности.*

В этой главе также дана оценка для функционала $J\left(C_m^{p^+}\right)$ для смещенных на интервал $[-a,\infty)$, $a>0$ функций Лагерра, а также и для более узкого класса функций $\tilde{W}_\omega^n(D)$, описанного в работе.

Далее выводится утверждение о вычислительной устойчивости данного алгоритма с использованием базиса из модифицированных функций Лагерра. Справедлива

Теорема 2. *Предположим, что при увеличении числа* m *погрешность* σ_m *в вычислении коэффициентов Фурье-Лагерра функции* $\rho(z)$ *можно неограниченно уменьшать так, что*

$$\lim_{m\to\infty}\sigma_m m^{(\alpha+1)/2}=0.$$

Тогда, если для $m\geq 4$ *обозначить через* $\tilde{C}_m^{p^+}$ *решение задачи минимизации возмущенного функционала* $\tilde{J}\left(C^p\right)$, *построенного с помощью проектирования на подпростран-*

ство с базисом из первых m модифицированных функций Лагерра, в котором точное разложение $\rho^m(z)$ заменено на приближенное $\tilde{\rho}^m(z)$, то последовательность $\left\{\tilde{C}_m^{p^+}\right\}$ будет минимизирующей и для функционала $J\left(C^p\right)$.

Третья глава посвящена решению задачи анализа диффузии со случайными электрофизическими параметрами (временем жизни, коэффициентом диффузии и скоростью поверхностной рекомбинации ННЗ по глубине) с использованием проекционной модели (4). Была принята гипотеза о нормальности закона распределения этих параметров.

Если полученная выше проекционная модель (4) включает случайный параметр τ, то решение $\Delta p(z)$ будет случайной функцией. Таким образом, возникает задача статистического анализа, которая в диссертационной работе формулируется следующим образом: необходимо определить статистические характеристики распределения ННЗ $\Delta p(z)$, а именно, математическое ожидание и автокорреляционную функцию, при условии, что время жизни τ является случайной величиной, которая распределена по нормальному закону, с математическим ожиданием m_τ, дисперсией D_τ и средним квадратическим отклонением σ_τ.

Осуществляется переход от системы (4) к равносильной системе

$$W_p(r)C^p = Y_p \tag{6}$$

где $W_p = A_p^T A_p$, $Y_p = A_p^T G$. Матрицы W_p и Y_p имеют следующую структуру: $W_p = \tau^2(r)W_1 + \tau(r)W_2 + W_3$, $Y_p = \tau^2(r)Y_1 + \tau(r)Y_2$, где W_1, W_2, W_3, Y_1 и Y_2 - детерминированные матрицы, а r – непрерывная случайная величина, распределенная по нормальному закону, и имеющая нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию.

Из уравнения (6) находится проекционная характеристика математического ожидания решения задачи (1), (2):

$$C^{m_{p^+}} = M\left[C^{p^+}(\tau)\right] = \int_{\tau_1}^{\tau_2} C^{p^+}(\tau) f(\tau)\, d\tau = M\left[\left(W_p(\tau)\right)^{-1} Y_p(\tau)\right],$$

где функция $f(\tau)$ представляет собой плотность нормального усеченного закона распределения случайной величины τ, ее возможные значения принадлежат промежутку $\tau \in [\tau_1, \tau_2]$. Символ $M[\cdot]$ обозначает операцию нахождения математического ожидания.

Матрицу $\tilde{W}_p = E - W_p$ можно представить в виде суммы известной неслучайной матрицы $\bar{W}_p$ и случайной матрицы $W_p^{сл}$:

$$\tilde{W}_p = \bar{W}_p + W_p^{сл},$$

что соответствует представлению случайного параметра τ в виде суммы неслучайной и случайной составляющей, тогда:

$$M\left[\left(W_p\right)^{-1} Y_p\right] = M\left[\left(E - W_{p^0} W_p^{сл}\right)^{-1} W_{p^0} Y_p\right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} M\left[\left(W_{p^0} W_p^{сл}\right)^{\nu} W_{p^0} Y_p\right] \tag{7}$$

где $W_{p^0} = \left(E - \bar{W}_p\right)^{-1}$, – детерминированная матрица.

Ряд (7) не во всех случаях является сходящимся уже с первых номеров приближений, поэтому требуемая точность приближения не обеспечивается. Это связано с тем, что все собственные значения матриц $W_{p0} W_p^{сл}$ далеко не всегда по модулю меньше единицы. Однако в ряде случаев частичные суммы расходящегося ряда (7) могут служить хорошими приближениями матрицы, породившей этот ряд.

Для решения указанной проблемы осуществляется переход от системы (6) к равносильной системе

$$H W_{p_0}(r) W_p(r) C^p = H W_{p_0}(r) Y_p,$$

где $W_{p_0}(r) = \exp\left(-r^2/\mu\right) \cdot \left(W_p(0)\right)^{-1}$, $\mu > 0$; H – некоторая неособенная матрица, которая выбирается следующим образом:

$$H = 2E \Big/ \left(\widehat{M} + \widehat{m}\right),$$

где $\widehat{m} = \min\limits_j \left(\min\limits_r \left(\lambda_j \left(W_{p_0}(r) W_p(r)\right)\right)\right)$, $\widehat{M} = \max\limits_j \left(\max\limits_r \left(\lambda_j \left(W_{p_0}(r) W_p(r)\right)\right)\right)$, а $\lambda_j \left(W_{p_0}(r) W_p(r)\right)$, $j = \overline{1,m}$ – собственные значения матрицы $W_{p_0}(r) W_p(r)$, т.е. спектр $\mathrm{Sp}\left(W_{p_0}(r) W_p(r)\right) \in \left[\widehat{m}, \widehat{M}\right]$.

Тогда выражение для определения проекционной характеристики математического ожидания решения задачи (1), (2):

$$C^{m_{p^+}} = \sum_{\nu=0}^{\infty} M\left[\left(\widehat{W}_p(r)\right)^{\nu} H W_{p_0}(r) Y_p(r)\right], \tag{8}$$

здесь $\widehat{W}_p(r) = E - H W_{p_0}(r) W_p(r)$.

Выражение для определения проекционной характеристики автокорреляционной функции решения задачи (1), (2):

$$C^{R_{p^+}} = \sum_{\nu_1=0}^{\infty} \sum_{\nu_2=0}^{\infty} M\left[\left(\widehat{W}_p\right)^{\nu_1} H W_{p_0} Y_p Y_p^T W_{p_0}^T H^T \left(\left(\widehat{W}_p\right)^T\right)^{\nu_2}\right] - C^{m_{p^+}} \left(C^{m_{p^+}}\right)^T. \tag{9}$$

Построены сходящиеся матричные ряды (8), (9), аппроксимирующие проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ по глубине.

В данной главе также рассмотрена оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания и автокорреляционной функции распределения ННЗ, которая укладывается в общую схему итерационных процессов с нарушением стационарности.

Итерационный процесс, определяющий проекционную характеристику математического ожидания решения уравнения диффузии ННЗ по глубине:

$$\begin{aligned} C_i^{m_{p^+}} &= M\left[C_i^{p^+}(r)\right] = M\left[C_{i-1}^{p^+}(r)\right] - h_i^k M\left[\breve{W}_p(r) C_{i-1}^{p^+}(r)\right] + \\ &+ h_i^k M\left[W_{p_0}(r) Y_p(r)\right], \quad i = 1, 2, ..., \end{aligned} \tag{10}$$

$$h_i^k = 2\Big/\left(\widehat{M} + \widehat{m} + \left(\widehat{M} - \widehat{m}\right)\cos\frac{\pi(2i-1)}{2k}\right), \quad i = \overline{1, k}. \tag{11}$$

Итерационный процесс, определяющий проекционную характеристику автокорреляционной функции решения задачи (1), (2):

$$\begin{gathered} C_i^{R_{p^+}} = M\left[\left(C_{i-1}^{p^+} - h_i^k\left(\breve{W}_p(r)C_{i-1}^{p^+} - W_{p_0}(r)Y_p(r)\right)\right)\times\right. \\ \left.\times\left(C_{i-1}^{p^+} - h_i^k\left(\breve{W}_p(r)C_{i-1}^{p^+} - W_{p_0}(r)Y_p(r)\right)\right)^T\right] - C_i^{m_{p^+}}\left(C_i^{m_{p^+}}\right)^T, \ i = 1, 2, \dots . \end{gathered} \tag{12}$$

Здесь $M\left[C_0^{p^+}\right] = h \cdot M\left[W_{p_0}(r)Y_p(r)\right]$ – начальное приближение, а $h = 2\Big/\left(\widehat{M} + \widehat{m}\right)$ и $\breve{W}_p(r) = W_{p_0}(r)W_p(r)$.

Даны оценки быстроты сходимости итерационных процессов (10)-(12) в терминах нормы:

$$\left\|C^{m_{p^+}} - C_{ik}^{m_{p^+}}\right\|_3 \le C_1\int_{r_1}^{r_2}\frac{\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3^i \exp\left(-(\mu+2)r^2/2\mu\right)}{1-\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3}dr + C_2\int_{r_1}^{r_2}\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3^i \exp\left(-(\mu+2)r^2/2\mu\right)dr,$$

$$\left\|C^{R_{p^+}} - C_{ik}^{R_{p^+}}\right\|_3 \le C_3(k)\int_{r_1}^{r_2}\frac{\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3^i \exp\left(-(\mu+4)r^2/2\mu\right)}{\left(1-\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3\right)^2}dr + C_4(k)\int_{r_1}^{r_2}\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3^i \exp\left(-(\mu+4)r^2/2\mu\right)dr.$$

Здесь $\left\|\tilde{W}_p^k(r)\right\|_3 \le \left(\frac{M(r) - m_1(r)}{M(r) + m_1(r)}\right)^k < 1$ для всех r, а $m_1(r)$ и $M(r)$ такие функции, что выполняется неравенство: $m_1(r) \le \lambda_j\left(\breve{W}_p(r)\right) \le M(r) \quad \forall j = \overline{1, m}$; C_1, C_2, $C_3(k)$ и $C_4(k)$ - положительные постоянные, которые не зависят от i, причем $C_3(k)$, и $C_4(k)$ с ростом k убывают.

Характерной особенностью алгоритмов (8), (9), (10) -(12) является то, что быстрота сходимости данных процессов не зависит от порядка матриц, а определяется лишь их обусловленностью в промежутке, в котором осуществлена подготовка; кроме того, предложенный метод можно считать достаточно универсальным, поскольку его применение не ограничивается гипотезой о нормальности закона распределения указанных параметров; данный метод также можно распространить на любую корректную краевую задачу для любого линейного дифференциального уравнения в частных производных.

При использовании т.н. модели независимых источников сначала рассматривается диффузионный процесс носителей, генерированных в каждом отдельном микрообъеме полупроводника, а результирующее распределение ННЗ находится суммированием полученных распределений от каждого из микрообъемов; такой подход позволяет проводить вычисления как для однородных материалов, так и для многослойных структур. Математически это выражается в том, что сначала решается уравнение диффузии для каждого из точечных источников ННЗ, после чего посредством интегрирования по объему, занимаемому ННЗ, находится их распределение в полупроводнике в результате диффузии. Идея такого подхода была заимствована из классической работы Ван Русбрека (1955 г.) Получено аналитическое выражение для статистических характеристик распределения ННЗ по всему объему полупроводника с использованием степенных рядов.

Четвертая глава посвящена проведению вычислительного эксперимента проекционным методом по исследованию влияния случайных составляющих в электрофизических параметрах (времени жизни, коэффициенте диффузии и скорости поверхностной рекомбинации ННЗ) на распределение неравновесных ННЗ для параметров, характерных для полупроводниковых материалов из кремния ($A = 28,\ Z = 14$), арсенида галлия ($A = 72,\ Z = 32$) и теллурида кадмия ($A = 120,\ Z = 50$).

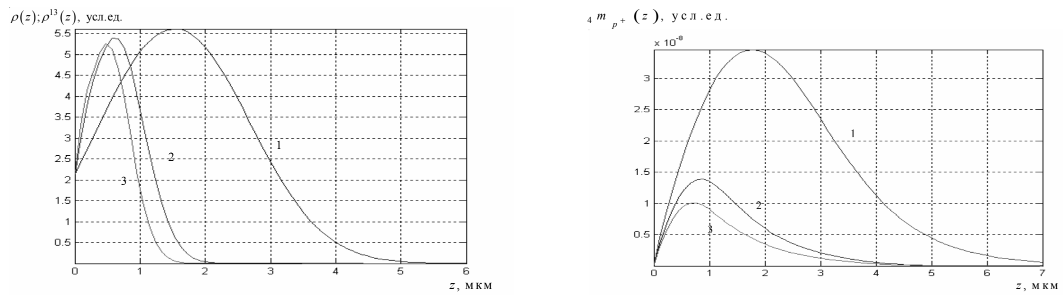
Проведен сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников). Результат такого анализа показал, что использование 13 членов в разложении функции $\Delta p(z)$ по базису из модифицированных функций Лагерра оказалось достаточным для получения приближенного решения с достаточно хорошей точностью.

Результаты статистического анализа модели коллективного движения ННЗ, генерируемых широким электронным пучком с энергией $E_0 = 20$ кэВ в кремнии, арсениде галлия и теллуриде кадмия представлены на рис. 1-2. Расчеты проведены для следующих параметров: $m_{v_s} = 10^{10}$ мкм/с, $\sigma_{v_s} = \sqrt{D_{v_s}} = 10^{10}$ мкм/с; $m_D = 10^8$ мкм**²**/с, $\sigma_D = \sqrt{D_D} = 2 \cdot 10^7$ мкм**²**/с; $m_\tau = 10^{-8}$ с и $\sigma_\tau = \sqrt{D_\tau} = 2 \cdot 10^{-9}$ с.

На рис. 1 (а) изображено распределение плотности потерь энергии электронным пучком в кремнии (кривая 1), арсениде галлия (кривая 2) и теллуриде кадмия (кривая 3) и результат его аппроксимации для этих мишеней с использованием 13 модифицированных функций Лагерра. Значения модифицирующих параметров равны: $\gamma = 5,\ \alpha = 0$ (кривая 1); $\gamma = 10,\ \alpha = 0$ (2); $\gamma = 10,\ \alpha = 0$ (3). В выбранном масштабе кривые $\rho(z)$, построенные по аналитическому выражению, совпадают с кривыми приближений.

На рис. 1 (б) изображены средние значения распределения ННЗ по глубине (математические ожидания) в кремнии (кривая 1), арсениде галлия (2) и теллуриде кадмия (3) при случайном изменении параметра τ.

На рис. 2 показана дисперсия и автокорреляционная функция распределения ННЗ по глубине при случайном изменении параметров τ, D и v_s соответственно.



а) б)

Рис. 1. Распределения плотности потерь энергии электронным пучком и математические ожидания распределения ННЗ по глубине, вычисленные в 13-м приближении при случайном изменении τ в кремнии (а), (б) (кривая 1), арсениде галлия (а), (б) (2) и теллуриде кадмия (а), (б) (3).

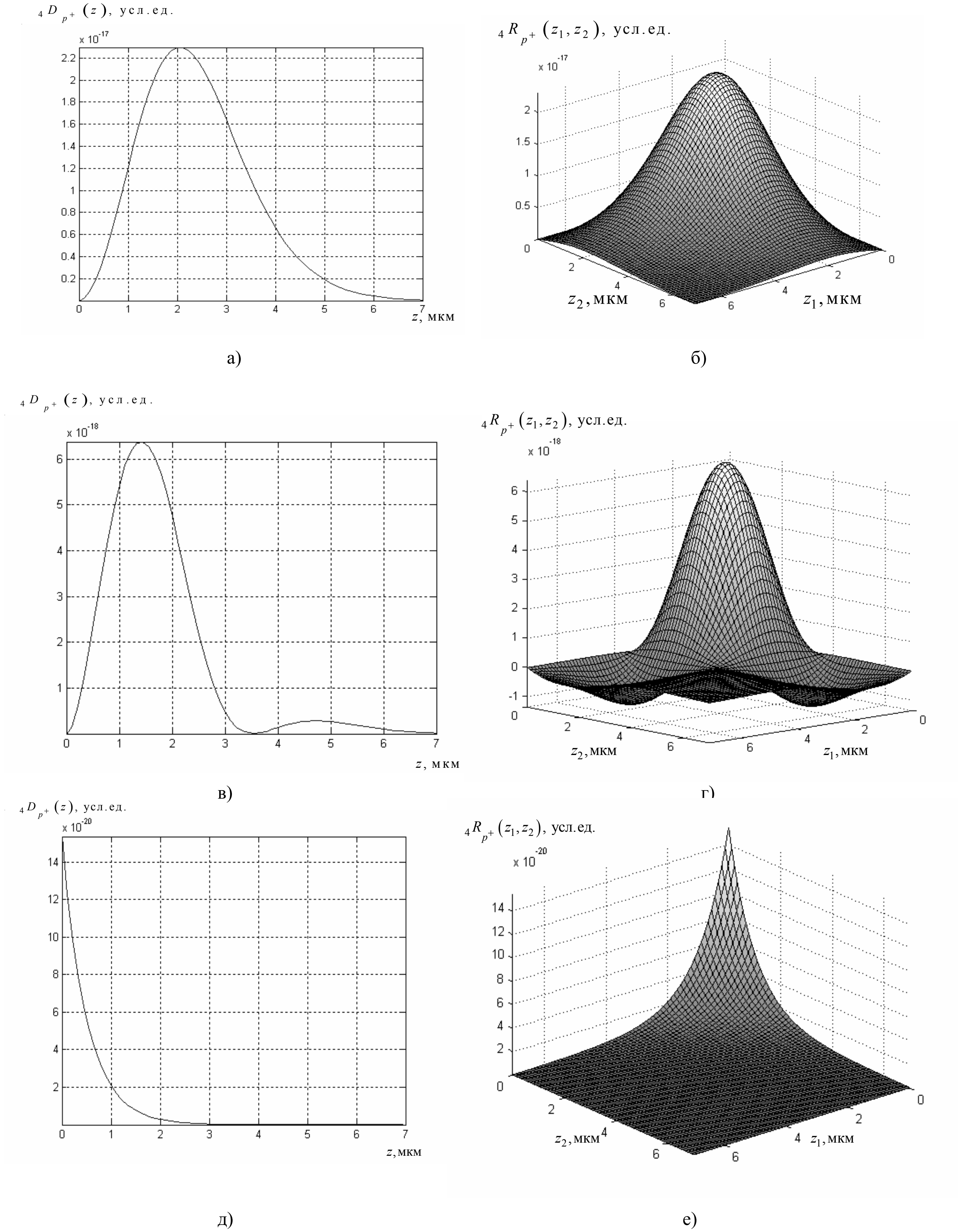


Рис. 2. Дисперсии и автокорреляционные функции распределения ННЗ по глубине, вычисленные в 13-м приближении в полупроводнике из кремния: при случайном изменении τ (а), (б), при случайном изменении D (в), (г), при случайном изменении ν_S (д), (е) соответственно.

В данной главе также проведен сравнительный анализ результатов моделирования распределения ННЗ, генерированных электронным и световым пучком в полупроводниковых материалах с некоторыми экспериментальными данными.

Основные результаты и выводы

Для случая возбуждения электронным и световым пучком процесса диффузии в полупроводниковых материалах проведено математическое моделирование, учитывающее случайный характер изменения электрофизических параметров мишени.

Получены следующие результаты:

1) построена стохастическая модель диффузии ННЗ в полупроводниках;

2) предложена модифицированная проекционная схема аппроксимации дифференциального уравнения диффузии со случайными электрофизическими параметрами, основанная на применении МНК, позволяющая эффективно решать различные задачи анализа и параметрической идентификации; дана порядковая оценка погрешности и получено условие вычислительной устойчивости для этой проекционной схемы в виде предельного соотношения;

3) решена задача статистического анализа диффузии со случайной составляющей в электрофизических параметрах; построены сходящиеся матричные ряды и рассмотрена оптимизация скорости сходимости итерационных процессов, аппроксимирующих проекционные характеристики математического ожидания (10), (11) и автокорреляционной функции (12) распределения ННЗ; даны оценки быстроты сходимости этих итерационных процессов в терминах нормы;

4) на примере разных полупроводниковых материалов проведен сравнительный анализ использования двух моделей распределения ННЗ (модели коллективного движения и модели независимых источников);

5) разработано программное обеспечение для эффективного компьютерного моделирования стохастического явления диффузии в полупроводниках с учетом возможности параллельных вычислений.

Основные публикации по теме диссертации

1. Серегина Е. В., Макаренков А. М. Проекционные методы решения некоторых задач идентификации и синтеза распределенных стохастических систем // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2007. – № 4. – С 133–137.

2. Серегина Е. В., Макаренков А. М. Повышение точности моделирования стохастических систем // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. – 2008. – № 4. – С. 120–123.

3. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Использование проекционного метода для определения статистических характеристик решения дифференциального уравнения диффузии неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале широким электронным пучком // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. –2009. – № 6. – С. 80–95. Перевод: Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Use of the Projective Method for Determining Statistical Characteristics of the Solution to the Differential Diffusion Equation of Minority Carriers Generated in a Semiconductor Material by a Wide Electron Beam // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. –2009. –Vol. 3. – No. 3. – P. 468–482.

4. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О возможности реализации стохастической модели распределения неравновесных неосновных носителей заряда в полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2009. – № 10. – С. 75–86. Перевод: Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. On the Possibilities of Implementing a Stochastic Model for the Distribution of Nonequilibrium Minority Charge Carriers in a Semiconductor Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2009. –Vol. 3. – No. 5. – P. 809–819.

5. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Проекционная аппроксимация стохастической модели коллективного движения неосновных носителей заряда, генерированных широким электронным пучком в полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – № 8. – С. 41–49. Перевод: Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Projective Approximation of the Stochastic Model of Collective Motion of Minority Charge Carriers Generated by a Broad Electron Beam in Semiconducting Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. –2011. –Vol. 5. – No. 4. – P. 746–753.

6. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Статистический анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда с использованием проекционного метода // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 4. – С. 47– 55. Перевод: Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Statistical Analysis of a Model of Collective Motion of Minority Charge Carriers Using the Projection Method. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. –2012. –Vol. 6. – No. 2. – P. 330–337.

7. Серегина Е. В., Степович М. А., Макаренков А. М. Об одной возможности статистического анализа распределения неосновных носителей заряда, генерированных электромагнитным излучением в полупроводниковом материале // Прикладная физика. – 2012. – № 3. – С. 24–31.

8. Серегина Е. В., Степович М. А., Макаренков А. М. О модифицированной проекционной схеме метода наименьших квадратов для моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в однородном полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 11. – С. 65–69. Перевод: Seregina E.V., Stepovich M.A., Makarenkov A.M. On a Modified Projection Scheme of the Least-Squares Method for the Modeling of the Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Beam in a Homogeneous Semiconductor Material. // Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. –2013. –Vol. 7 – No. 6. – P. 1077–1080.

9. Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М. Модифицированная проекционная схема метода наименьших квадратов для моделирования концентрации неосновных носителей заряда в полупроводниковых материалах // Успехи прикладной физики. – 2013. – Т. 1. – № 3. – С. 354–358.

10. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Применение проекционного метода для моделирования процесса диффузии в полупроводнике под воздействием электронного пучка // Математическое моделирование, обратные задачи, информационно-вычислительные технологии: Материалы VI международной научно-технической конференции. – Пенза, 2007. – С. 118–121.

11. Серегина Е.В., Макаренков А.М. Решение некоторых задач идентификации и синтеза распределенных стохастических систем с использованием проекционных аппроксимаций // Труды Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. – 2007.– № 594. – С. 219–228.

12. Серегина Е.В. Разработка проекционных методов синтеза оптимального программного управления распределенными стохастическими системами // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2007. – Т. 1. – С. 28–32.

13. Серегина Е. В. Разработка методов параметрической идентификации распределенных случайных параметров // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2007. – Т. 1. – С. 33–38.

14. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. Исследование стохастического уравнения тепломассопереноса проекционным методом // Научные труды Калужского государственного педагогического университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2008. – С. 26–30.

15. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О применении проекционного метода к решению задачи статистического анализа диффузии неосновных носителей заряда в полупроводниковых солнечных элементах // Научные труды Калужского государственного педагогического университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2009. – С. 59–63.

16. Серегина Е. В. Анализ модели коллективного движения неосновных носителей заряда при случайных электрофизических параметрах // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – М.: Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 2010. – Т. 1. – С .128.

17. Серегина Е. В., Степович М. А. О некоторых возможностях использования проекционного метода в задачах математического моделирования явлений тепломассопереноса // Прикладные задачи математики и механики: Материалы XIX международной научно-технической конференции. – Севастополь: Севастопольский национальный технический университет, 2011. – С. 105–109.

18. Серегина Е. В., Макаренков А. М., Степович М. А. О сходимости некоторой проекционной схемы дифференциального уравнения тепломассопереноса // Прикладные задачи математики: Материалы XXI международной научно-технической конференции. – Севастополь: Севастопольский национальный технический университет, 2013. – С. 122–126.

19. Серегина Е. В., Степович М. А. О вычислительной устойчивости проекционной аппроксимации, основанной на применении модифицированного метода наименьших квадратов, для математической модели коллективного движения неравновесных неосновных носителей заряда в однородном полупроводнике // Научные труды Калужского государственного университета им. К.Э. Циолковского. Естественные науки. – Калуга, КГУ им. К.Э. Циолковского, 2013. – С. 60–65.