

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

Физический факультет

На правах рукописи

УДК 535.34

Шабельникова Яна Леонидовна

АНАЛИЗ КЛЮЧЕВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДОВ ЛОКАЛЬНОЙ
ДИАГНОСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ — МЕТОДА НАВЕДЕННОГО
РЕНТГЕНОВСКИМ ПУЧКОМ ТОКА И РЕНТГЕНОВСКОГО
ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО МЕТОДА

Специальности: 01.04.07 – физика конденсированного состояния
05.27.01 – Твердотельная электроника,
радиоэлектронные компоненты, микро- и
наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Диссертация
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научные руководители:
доктор физико-математических наук,
профессор Бушуев В.А.,
кандидат физико-математических наук
Чукалина М.В.

Москва 2013

Оглавление

Введение.....	5
Глава I. Современное состояние проблемы применения методов наведенного тока и рентгенофлуоресцентного анализа для диагностики микроструктур. Литературный обзор.....	11
1.1. Проблема локальной диагностики полупроводниковых структур.....	11
1.2. Метод наведенного тока.....	12
1.2.1. Метод наведенного электронным пучком тока (ЕВІС, из истории вопроса).....	12
а) Физические основы метода.....	14
б) Обсуждение получаемых с помощью ЕВІС метода результатов.....	27
1.2.2. Метод индуцированного рентгеновским пучком тока (ХВІС).....	32
1.3. Методы рентгенофлуоресцентной диагностики элементного состава объектов.....	34
1.3.1. Рентгеновский флуоресцентный анализ.....	35
1.3.2. Рентгенофлуоресцентная томография 3D объектов.....	38
1.3.3. Аппаратный подход в рентгенофлуоресцентной томографии.....	41
1.4. Основные выводы главы I.....	44
Глава II. Сравнение функции сбора сигнала поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники, используемых в аппаратной рентгенофлуоресцентной томографии.....	45
2.1. Постановка задачи, определение функции сбора, применимость приближения геометрической оптики.....	46

2.2. Методика расчета функции сбора.....	50
а) Для коллиматора, созданного методами микроэлектроники.....	50
б) Для поликапиллярного коллиматора.....	54
2.3. Результаты расчета функций сбора для двух типов коллиматоров и их сравнение.....	58
2.4. Преимущества использования микроэлектронного коллиматора...	64
2.4.1. Независимость функции сбора коллиматора от энергии флуоресцентных квантов.....	67
2.4.2. Оценка доли излучения, проходящего через коллиматор в результате явления полного внешнего отражения.....	68
2.5. Основные результаты и выводы главы II.....	82

Глава III. Моделирование ХВИС контраста от протяженных дефектов

(дислокаций и границ зерен) и сравнение его с ЕВИС контрастом.....

3.1. Постановка задачи, преимущества метода ХВИС и вопросы, ожидающие решения.....	84
3.2. Модель расчета наведенного тока и определение контраста от дефекта.....	85
3.2.1. Вероятность собирания неравновесных носителей заряда....	87
а) Для границ зерен.....	87
б) Для дислокаций.....	94
3.2.2. Функция генерации электрон-дырочных пар.....	101
а) Функция генерации в методе ЕВИС.....	101
б) Функция генерации в методе ХВИС.....	101
3.3. Результаты расчета контраста от протяженных дефектов.....	103
3.3.1. Анализ и сравнение с ЕВИС контрастом.....	105
3.3.2. Сравнение с экспериментальными данными.....	111
3.4. Функция генерации в приближении гауссового распределения электрон-дырочных пар, рожденных фотоэлектроном.....	122
3.5. Основные результаты и выводы главы III.....	129

Выводы диссертации.....	131
Приложение I.....	132
Приложение II.....	135
Список литературы.....	138
Список публикаций по теме диссертации.....	152
Благодарности.....	155

Введение

Актуальность темы

В настоящее время минимальные размеры структурных элементов микросхем уменьшились до нескольких десятков нанометров, и стоит задача преодоления этого рубежа. Развитие современной микроэлектроники характеризуется все большим повышением степени интеграции и функциональной сложности микросхем, дальнейшим ростом числа элементов на одном кристалле, уменьшением характерных размеров элементов. Это, в свою очередь, требует повышения качества диагностических инструментов.

Среди методов локальной диагностики полупроводников лидирующее положение занимает растровая электронная микроскопия (РЭМ) с практически неразрушающим электронным зондом размером несколько нанометров. Разнообразие сигналов, получаемых в сканирующем микроскопе, позволяет контролировать широкий спектр электрофизических свойств микро- и наноэлектронных устройств, в том числе на разных стадиях их изготовления.

Современный уровень требований к методам анализа и контроля требует не только визуализировать структуру, но и количественно оценивать по электронным спектрам такие параметры композиции, как глубина залегания и толщина скрытых деталей и слоев, а также параметры различных дефектов кристаллической структуры. Помимо контроля топологического строения трехмерных микро- и наноструктур весьма актуальна проблема определения электрофизических параметров, таких как диффузионная длина, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации неравновесных носителей заряда в полупроводниковых компонентах микроэлектронных устройств.

Метод наведенного электронным пучком тока (EBIC – Electron Beam Induced Current) в РЭМ широко используется для исследования электрофизических свойств полупроводниковых материалов и приборов микроэлектроники сегодня. Определение концентрации точечных дефектов и

характеризация протяженных дефектов – одно из применений данного метода. Интерес к изучению свойств таких объектов особенно возрос и в связи с попытками реализации эффективных светоизлучающих приборов на основе искусственно созданных дислокационных структур в кремнии.

В некоторых задачах, например, в задачах анализа чистоты мультикристаллического кремния, кроме выявления и количественного описания влияния дефектов нужно определять химический состав в области дефекта. В этом случае метод наведенного рентгеновским пучком тока (ХВІС – X-ray Beam Induced Current) может быть использован для локализации дефектов, состав которых может уточняться с помощью одновременной регистрации рентгенофлуоресцентного сигнала. В первой главе диссертации представлен обзор текущего состояния дел в этой области, описаны достигнутые результаты и существующие подходы к интерпретации сигналов.

Метод ХВІС появился около десяти лет назад, однако применение его для измерения электрической активности отдельных дефектов ограничено тем, что модели формирования сигнала еще не созданы в полном объеме для этого метода. Третья глава диссертации посвящена анализу и решению данной проблемы.

Одним из основных достоинств ХВІС метода является то, что его несложно скомбинировать с другими рентгеновскими исследованиями. В частности, при размещении дополнительного детектора можно собирать флуоресцентный сигнал. Кроме того, с помощью коллиматора, помещенного перед детектором, можно контролировать область, из которой собирается сигнал. Такой подход уже нашел применение в других задачах и метод известен под названием аппаратной или конфокальной томографии. При использовании этого метода разрешение ограничено размером фокусного пятна коллиматора. Поэтому для дальнейшего развития конфокального подхода в рентгенофлуоресцентном анализе нужно двигаться в направлении улучшения характеристик (размер фокуса, эффективность) коллиматора.

Вторая глава диссертации посвящена построению численных оценок основных характеристик и анализу свойств рентгенооптических элементов, которые могут быть использованы в качестве коллиматоров при конфокальных измерениях флуоресцентного сигнала.

Цели и задачи

Основной **целью работы** являлась оценка возможностей и анализ ключевых характеристик (чувствительность, пространственное разрешение) методов конфокальной рентгеновской флуоресцентной томографии и наведенного рентгеновским пучком тока. В рамках этой цели были поставлены и решены следующие конкретные **задачи**:

- (i) Создание модели формирования сигнала в методе конфокальной томографии с учетом функции сбора флуоресцентных квантов.
- (ii) Моделирование функции сбора сигнала и оценка по его результатам основных характеристик двух типов коллиматоров.
- (iii) Создание модели формирования наведенного рентгеновским пучком тока и моделирование профилей контраста от протяженных дефектов в кремнии.

Научная новизна результатов

- Впервые в методе наведенного рентгеновским пучком тока был произведен расчет контраста протяженных дефектов – дислокаций и границ зерен. Показано, что для таких дефектов при достаточно большой диффузионной длине и (или) небольшом диаметре рентгеновского пучка может быть получен в 3-4 раза лучший контраст, чем в аналогичном методе тока, наведенного электронным пучком.
- Функции сбора рентгенофлуоресцентного сигнала впервые смоделированы для коллиматора нового типа, который может быть создан методами микроэлектроники, и для поликапиллярного коллиматора. Для нового типа коллиматора впервые получены оценки размеров фокуса и эффективности, а также показано, что этот коллиматор может иметь меньший фокальный объем, чем поликапиллярный коллиматор. Также

показано, что при определенном выборе функциональных параметров (ширина канала, длина микроэлектронного коллиматора, фокусное расстояние) характеристики нового коллиматора не зависят от энергии флуоресцентных квантов.

Практическая значимость работы

Построенные в диссертации модели формирования сигнала в методе наведенного рентгеновским пучком тока являются основой для решения обратных задач, в частности, для определения электрофизических характеристик полупроводников и скорости рекомбинации на отдельных дефектах в них. Количественная характеристика отдельных протяженных дефектов требуется, например, для кристаллов, используемых в солнечной энергетике.

Построенные оценки характеристик двух типов коллиматоров позволяют проводить корректную количественную интерпретацию измеряемых рентгенофлуоресцентных сигналов.

Положения, выносимые на защиту

1. При использовании нового типа коллиматора, созданного методами микроэлектроники, в конфокальной схеме рентгеновской флуоресцентной томографии может быть достигнуто более высокое пространственное разрешение, чем при использовании поликапиллярного коллиматора.
2. Определены условия, при которых коллиматор нового типа, в отличие от поликапиллярного коллиматора, позволяет получать карты распределения элементного состава образца с одинаковым для всех элементов пространственным разрешением.
3. Модель формирования сигнала в методе наведенного рентгеновским пучком тока для случая присутствия в полупроводниковом образце протяженных дефектов может быть построена аналогично случаю наведенного электронным пучком тока.
4. При зондировании рентгеновским пучком контраст наведенного тока от протяженных дефектов: границ зерен и дислокаций – может быть в

несколько раз больше, чем в методе EВIS.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием универсальных законов и уравнений классической физики для взаимодействия рентгеновского излучения с полупроводниковыми кристаллами, а также хорошим совпадением результатов измерения и компьютерного моделирования.

Апробация работы. Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались в ИПТМ РАН на научных семинарах «Рентгеновская оптика» и «Материаловедение и технология», а также на ученом совете ИПТМ РАН. Изложенные в работе результаты были доложены на следующих российских и международных конференциях:

1. Первой международной научной школе-семинаре “Современные методы анализа дифракционных данных”, Великий Новгород, май 2007;
2. XV Российском симпозиуме по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел РЕМ'2007, Черногловка, июнь 2007;
3. III Всероссийской научной конференции “Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB”, С.-Петербург, октябрь 2007;
4. VI Национальной конференции РСНЭ, Москва, ноябрь 2007;
5. 50-ой научной конференции МФТИ “Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук”, Москва, декабрь 2007;
6. Второй международной научной школе-семинаре “Современные методы анализа дифракционных данных”, Великий Новгород, сентябрь 2008;
7. 51-ой научной конференции МФТИ “Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук”, Москва, декабрь 2008;
8. European Conference on Metallobiomics, Берлин, декабрь 2008;
9. Всероссийской конференции молодых ученых "Микро-, нанотехнологии и их применение", Черногловка, декабрь 2010;
10. Пятом международном научном семинаре “Современные методы анализа дифракционных данных”, Великий Новгород, сентябрь 2011;

11. VIII Национальной конференции РСНЭ, Москва, ноябрь 2011;
12. XXIV Российской конференции по электронной микроскопии, май 2012.

Публикации

По результатам данной диссертационной работы опубликовано 15 печатных работ, из которых 3 статьи опубликованы в изданиях, входящих в утвержденный ВАК перечень ведущих рецензируемых научных изданий, и 12 тезисов и материалов докладов.

Личный вклад автора

Изложенные в диссертации результаты получены автором лично. Постановка задач исследований, определение методов их решения и интерпретация результатов выполнены совместно с научными руководителями М.В. Чукалиной и В.А. Бушуевым. Постановка задачи и обсуждение результатов для метода наведенного тока (глава 3) выполнены совместно с Е.Б. Якимовым.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа изложена на 155 страницах печатного текста и включает 53 рисунка и 5 таблиц. Диссертация состоит из введения, трех глав, выводов, двух приложений и списка цитируемой литературы из 140 наименований.

Глава I. Современное состояние проблемы применения методов наведенного тока и рентгенофлуоресцентного анализа для диагностики микроструктур. Литературный обзор

1.1. Проблема локальной диагностики полупроводниковых структур

Для успешного применения полупроводниковых материалов и структур на их основе в нано-, опто- и фотоэлектронике необходимо знать их электрофизические и оптические характеристики, такие как диффузионная длина, концентрация примесей, тип и размеры дефектов структуры и т.п. Поэтому измерения таких параметров имеют огромное практическое значение, причем методы их измерения должны обладать достаточным пространственным разрешением.

В методах, где применяется сканирование образца пучком частиц (электронов, ионов, оптических или рентгеновских квантов) разрешение, в некотором приближении, определяется диаметром пучка. Однако нельзя бесконечно повышать разрешение, уменьшая размер пучка. При достаточно тонком пучке пространственное разрешение будет определяться объемом среды, в котором поглощаются первичные частицы, а также размерами области проникновения наведенных частиц (т.е. их пробегом). Например, при диагностике электронным пучком фото- и Оже электроны выходят из области образца размером порядка глубины проникновения пучка, а в методе наведенного тока вторичные частицы (в случае кремния *n*-типа это дырки, неосновные носители заряда) могут пройти расстояние порядка диффузионной длины.

Таким образом, локальность методов исследования определяется фундаментальным характером взаимодействия с веществом первичных и наведенных частиц, и в ряде случаев принципиально не может быть улучшена аппаратным способом после достижения некоторого фундаментального предела. В других случаях аппаратные методы (например,

методы временного разрешения) слишком сложны или дороги в использовании. В этих условиях дальнейшее повышение разрешения и точности определения электрофизических параметров возможно только путем привлечения моделей формирования сигнала для решения обратных задач.

1.2. Метод наведенного тока

1.2.1. Метод наведенного электронным пучком тока (ЕВІС, из истории вопроса)

Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) – это чрезвычайно гибкий инструмент, способный давать информацию о самых разных процессах, происходящих при облучении образца электронным пучком. При таком облучении, в числе других процессов, происходит генерация тока в полупроводниках [1], на чем и сфокусировано внимание в данной работе. Общепринятая и популярная аббревиатура этого процесса - EBIC (electron beam induced current).

В методе EBIC электронный пучок, как показано на рис. 1.1, сканирует полупроводниковый образец, содержащий барьерную структуру какого-либо типа (*p-n* переход, барьер Шоттки). Энергия электронов в пучке обычно составляет от 1 до 50 кэВ, в то время как минимальная энергия, необходимая для образования электрон-дырочной пары в полупроводнике и определяемая шириной запрещенной зоны, имеет порядок 1 эВ. В результате облучения каждый электрон пучка производит в полупроводнике большое число (порядка 10^3 - 10^4) электрон-дырочных пар.

Эти электрон-дырочные пары генерируются в материале внутри ограниченного объема, так называемого «объема генерации». Важными здесь являются неосновные носители заряда – электроны для полупроводника *p*-типа, и дырки для полупроводника *n*-типа.

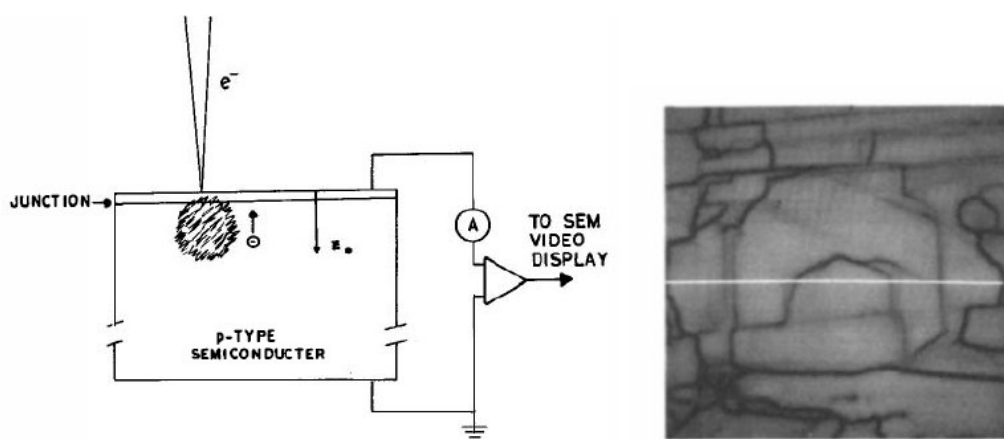


Рис. 1.1. Схематическое представление EBIC метода. Электрон-дырочные пары генерируются внутри заштрихованной области. В полупроводнике *p*-типа электроны диффундируют к переходу, собираются и, следовательно, формируют наведенный ток. Справа – пример EBIC микроснимка поликристаллического солнечного элемента. Повышенная рекомбинация вдоль границ зерен видна как темный контраст. Также видно, что контраст (= рекомбинация) изменяется вдоль некоторых границ [1].

Генерация неравновесных носителей заряда внутри полупроводника электронным пучком схематически показана на рис. 1.2. При столкновении высокоэнергетичного электрона пучка с кристаллической решеткой валентный электрон может быть выбит в зону проводимости, и в валентной зоне появится дырка. Возбужденные пучком электроны и дырки двигаются случайно, захватываются и аннигилируют друг с другом до тех пор, пока все неравновесные носители не исчезнут.

Если длина свободного пробега сгенерированных неосновных носителей достаточно велика, то они в процессе диффузии будут достигать области пространственного заряда (ОПЗ) и попадать под влияние сформированного там сильного электрического поля, образуя, таким образом, ток, который может быть измерен. Область пространственного заряда чаще всего создается *p-n*-переходом, находящимся внутри образца, но может обеспечиваться и с помощью внешних контактов или поверхностных барьерных структур.

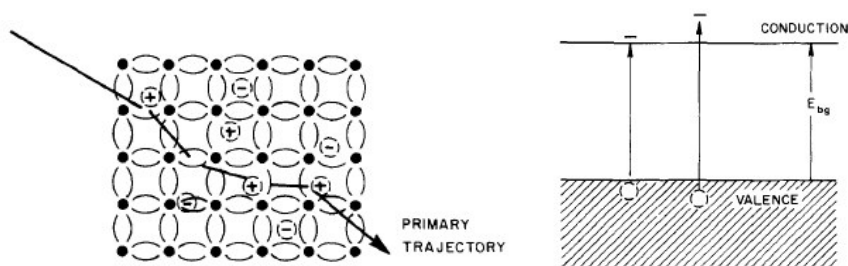


Рис. 1.2. Схематическое представление генерации носителей заряда при облучении электронами полупроводникового образца. Слева изображено смещение электрона из валентной зоны с образованием на его месте дырки. Справа – энергетическое представление этого процесса [2].

Результатом EBIC исследования является карта тока, собранного в каждой точке сканирования. Если в образце присутствуют дефекты, такие как границы зерен или дислокации, то в результате рекомбинации на них значение регистрируемого тока меньше, чем в области без дефектов.

а) Физические основы метода

Взаимодействие электронного пучка с полупроводником. Как уже было отмечено выше, энергия электронов в пучке значительно превышает энергию, необходимую для генерации одной электрон-дырочной пары. Огромная энергия бомбардирующего электрона расходуется на генерацию большого числа электрон-дырочных пар. Кроме этого, энергия расходуется на нагрев кристалла, а также часть ее уносится с отраженными от образца электронами, тратится на генерацию рентгеновских квантов, вторичных и Оже электронов. Эти вторичные процессы играют большую роль в других приложениях сканирующей электронной микроскопии [3, 4].

Падающий на полупроводник электрон испытывает множество актов упругого и неупругого рассеяния, так что он в итоге теряет представление о своем первоначальном направлении. Вероятность рассеяния пропорциональна Z^2 , где Z – атомный номер элементов, составляющих образец, а угол

рассеяния пропорционален Z^2/E_b^2 , где E_b – энергия электронного пучка. В образцах с большим Z доля электронов, рассеивающихся на большие углы и покидающих образец, больше, чем в образцах с небольшим Z . После достаточно большого числа актов рассеяния связь между движением электрона и его первоначальным направлением теряется, и, следовательно, оно становится случайным. Последующее движение может быть рассмотрено как диффузия. Глубина, на которой происходит полная потеря первоначального направления, называется транспортной длиной Z_d и иллюстрируется на рис. 1.3.

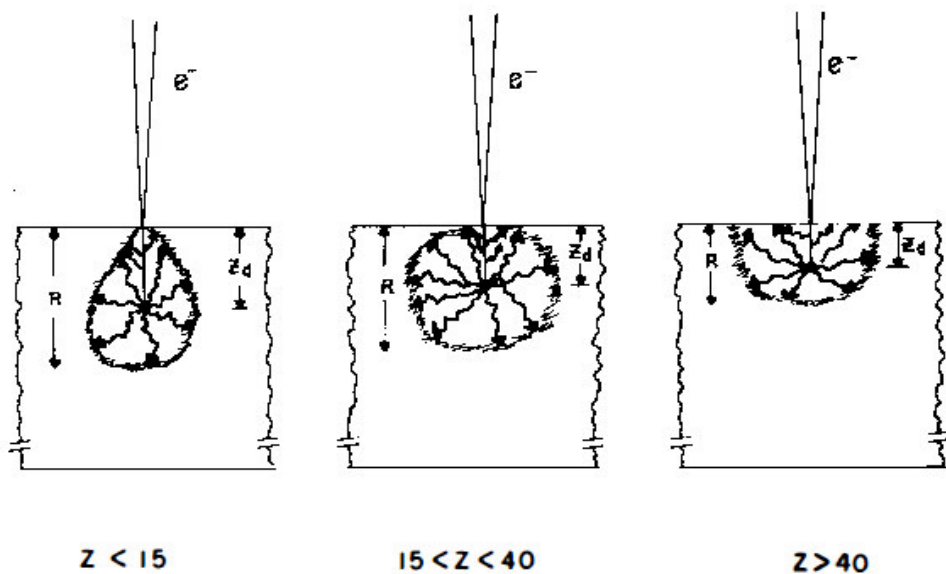


Рис. 1.3. Схематическое представление влияния атомного номера Z на объем генерации. Здесь Z_d – транспортная длина, R – глубина проникновения.

Транспортная длина меньше для больших атомных номеров, чем для маленьких. Это приводит к тому, что для маленьких Z объем генерации имеет специфическую «грушеподобную» форму, для средних Z ($15 < Z < 40$) он сферической формы, а для больших атомных номеров Z его форма напоминает полусферу. На рис. 1.3 показано, как электрон проникает в материал на определенное расстояние и там упруго рассеивается на ядрах материала образца, в результате чего меняется направление его движения, а энергия изменяется не сильно (толстые линии на рис. 1.3), или же

испытывает неупругое рассеяние на электронах. В последнем случае направление электрона меняется не сильно, но он теряет энергию, возбуждая электроны в зону проводимости. Для простоты на рис. 1.3 не рассматриваются обратно рассеянные электроны.

Поведение электрона высокой энергии ($E_b \gg E_g$, где E_g – ширина запрещенной зоны) в полупроводнике – процесс статистический. Однако средняя энергия генерации одной электрон-дырочной пары E_i – величина постоянная для данного типа полупроводника. Причем, согласно [5], эта энергия может быть оценена, как $E_i = 2.596E_g + 0.714eV$. То есть энергия, затрачиваемая на генерацию одной электрон дырочной пары, примерно в три раза превышает ширину запрещенной зоны. Этот факт следует понимать так: электрон, помимо генерации e-h пар, участвует также и в других вторичных процессах, и только около трети расходуемой электроном энергии идет на генерацию пар.

Для отдельно взятого электрона пучка вариация числа сгенерированных пар ΔN ($\Delta N = \sqrt{NF}$, где $N = E_b / E_i$, F – Фано-фактор, который для кремния имеет величину порядка 0.1) может быть большой. Однако для обычно используемых в EBIC токах пучка в 1 нА (или 6×10^9 электронов в секунду) эта вариация числа пар, генерируемых всеми электронами, пренебрежимо мала.

Пространственное распределение генерируемых носителей определяется так называемой функцией генерации $g(\vec{r})$, которая представляет собой число электрон-дырочных пар, генерируемых в единицу времени, в зависимости от координат внутри полупроводника (рис. 1.3). Для характеристики $g(\vec{r})$ часто используется такой параметр, как радиус действия R , который показывает, на какую глубину в образец проникает пучок. Радиус действия, или глубина проникновения, имеет несколько способов определения, однако часто эта величина выражается как функция энергии пучка в виде

$$R = \frac{1}{\rho} k E_b^n, \quad (1.1)$$

где ρ - плотность образца, k - коэффициент, а показатель степени n варьируется от 1.2 до 1.8 в зависимости от энергии электрона, атомного номера и способа определения R . Коэффициент k также зависит от энергии электрона и атомного номера. В частности, для кремния при расчетах используют выражение $R = 0.0171(E_b)^{1.75}$, где энергия пучка электронов выражена в кэВ.

Различные способы определения радиуса действия R , такие как средний радиус R_m , экстраполированный радиус R_{ex} , максимальный радиус R_{max} , теоретически выведенный радиус Бора-Бете R_{BB} и экспериментально введенный радиус Грюна R_G , рассмотрены в работах [4, 6, 7].

Конкретный вид функции генерации для данного материала может быть получен в результате моделирования методом Монте-Карло (см., например, в [8]), или же аппроксимирован аналитическим выражением вида [9]

$$g(x, y, z) = g_0 F(x, y, z, E_b) h(z, E_b), \quad (1.2)$$

где

$$g_0 = \frac{E_b I_b (1 - k)}{e E_i} \quad (1.3)$$

- общий уровень генерации, I_b - ток пучка электронов, k - часть энергии, уносимая отраженными от образца электронами, e - заряд электрона. Следует отметить, что в случае барьера Шоттки на облучаемой поверхности образца величина k сильно зависит от E_b , особенно для невысоких энергий электронного пучка и больших толщин металлического слоя [10-12].

Функция $F(x, y, z)$ в (1.2) описывает радиальное распределение генерируемых e-h пар. Для кремния она была выведена Донолато (Donolato) [13]:

$$F(x, y, z, E_b) = \frac{1.76}{2\pi\sigma^2 R} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}\right], \quad (1.4)$$

где $\sigma^2 = 0.36d^2 + 0.11z^3/R$, d - полуширина пучка электронов. Для GaAs приближение для функции $F(x, y, z, E_b)$ было получено Конниковым [14].

Функция $h(z, E_b)$ в (1.2) описывает распределение генерируемых носителей по глубине и может быть аппроксимирована нормированным полиномом, предложенным Эверхартом (Everhart) и Хоффом (Hoff) [15]:

$$h(z/R) = 0.6 + 6.21(z/R) - 12.40(z/R)^2 + 5.69(z/R)^3. \quad (1.5)$$

Другая аппроксимация распределения генерируемых носителей по глубине для кремния была предложена Фиттингом (Fitting) [16]:

$$h(z/R) = (1.76/R) \exp[-7.5(z/R - 0.3)^2], \quad (1.6)$$

а также в работе Ву и Витри [5] (Wu and Wittry) приведено приближение этой функции для арсенида галлия:

$$h(z/R) = \exp\left\{-\left[(z/R - 0.125)/0.35\right]^2\right\} - 0.4 \exp[-4z/(0.125R)]. \quad (1.7)$$

В целом же функция генерации имеет разное аналитическое представление для каждого типа полупроводникового материала, которое обычно получают путем подгонки аналитического выражения под результаты измерений или данные моделирования по Монте-Карло.

Движение неравновесных носителей. Генерируемые электронным пучком носители заряда в электрически нейтральном образце находятся в термическом равновесии с кристаллической решеткой и двигаются со скоростями v , определяемыми температурой T :

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}kT. \quad (1.8)$$

В этом выражении m - масса электрона, k - постоянная Больцмана.

Электроны и дырки испытывают случайные столкновения с решеткой, в результате чего меняется направление их движения. Траектория этого движения случайна и такое коллективное поведение носителей может быть

описано как диффузия с коэффициентами D_e для электронов и D_h для дырок. Рассмотрим полупроводник n -типа, то есть образец, в котором подавляющее большинство свободных носителей – электроны. При этом, если концентрация неравновесных электронов Δn много меньше концентрации свободных электронов n , неравновесные основные носители просто следуют за диффузионным движением сгенерированных неосновных носителей, чтобы обеспечить равномерное распределение заряда. Движение неравновесных носителей обоих типов, таким образом, определяется поведением неосновных неравновесных носителей (дырок) с концентрацией Δp . Механизм «следования» основных неравновесных носителей за равновесными называется «дрейф». Любая флуктуация распределения заряда для основных или неосновных носителей приводит к возникновению электрического поля E , которое вызовет перемещение основных носителей, компенсирующее дисбаланс. Дрейфовое движение происходит со скоростями $v = \mu E$, где μ – подвижность носителей заряда. Скорости дрейфа для Si, Ge и GaAs при поле E порядка 10^4 В/см составляют около 10^7 см/с.

В случае, если полупроводник собственный, то есть $n \approx p$, или плотность неравновесных носителей много больше плотности равновесных, зарядовая нейтральность выравнивается дрейфом обоих типов носителей и эффективный коэффициент диффузии при этом равен $2D_e D_h / (D_e + D_h)$.

В процессе диффузии рекомбинация противоположно заряженных носителей происходит в основном посредством промежуточной стадии, в которой тот или иной носитель «захватывается» специфической точкой кристалла (такой ловушкой является электрически активный дефект). Частота, с которой это происходит, зависит от поперечного сечения ловушки σ и плотности ловушек N_T . Расстояние, которое в среднем проходит электрон до захвата ловушкой, определяется как $1/(\sigma N_T)$. До захвата электрон свободно движется в течение времени

$$\tau = \frac{1}{\sigma N_T v_T}. \quad (1.9)$$

Для дырок верны аналогичные соотношения. Обычно τ называют временем жизни. Когда концентрация основных носителей значительно превышает концентрацию неосновных, время жизни пары носителей определяется временем жизни неосновных носителей, потому что имеется достаточное количество основных носителей, доступных для рекомбинации с захваченным ловушкой неосновным носителем. То есть для малых значений Δp темп рекомбинации будет просто $\Delta p / \tau$, где τ - время жизни дырок. Значения времен жизни для большинства полупроводников лежат в диапазоне от 10^{-3} сек до 10^{-9} сек, большие времена жизни наблюдались только в очень чистых образцах Ge и Si.

В образцах, имеющих равномерное распределение ловушек, неравновесные носители постоянно рекомбинируют со скоростью, пропорциональной их локальной плотности. Кроме того, носители покидают рассматриваемую область за счет диффузионного или дрейфового движения, и в ней появляются вновь сгенерированные пучком носители. Таким образом, в состоянии равновесия выполняется уравнение

$$g - \frac{\nabla J_h}{e} - \Delta p / \tau = \frac{d\Delta p}{dt} = 0, \quad (1.10)$$

где g - скорость генерации, J_h - поток, и темп рекомбинации полностью контролируется «захватом» ловушками неосновных носителей. Это основное уравнение и его аналог для основных носителей известны как уравнения непрерывности. В случаях, когда поток J_h определяется диффузией,

$$J_h = -eD_h \nabla(\Delta p). \quad (1.11)$$

Диффузионная длина неосновных носителей заряда $L = L_h = \sqrt{D_h \tau_h}$ задает среднее перемещение носителя от точки рождения до точки аннигиляции и является одним из важнейших характеристик полупроводниковых приборов. Для высокоочищенных образцов Si и Ge диффузионная длина может

достигать ≈ 1 см, в то время как в GaAs длина L редко превышает 10^{-2} см. В некоторых полупроводниках, однако, внедрение значительного числа ловушек носителей уменьшает величину L . То есть, диффузионная длина зависит не только от внутренних характеристик полупроводника, таких как ν , D , но и от плотности ловушек N_T , которая может варьироваться в процессе промышленного изготовления полупроводниковых материалов.

Решение уравнений непрерывности для практически интересных случаев требует, чтобы были заданы условия на различных физических границах. Эти условия задаются таким образом, чтобы, как и для объемного материала, темп рекомбинации на границе был пропорционален произведению поверхностной плотности ловушек (плотности на единицу площади границы), сечения захвата ловушки и скорости теплового движения. Эта величина (произведение) имеет размерность см/сек и, следовательно, известна как скорость поверхностной рекомбинации S . При этом поток неравновесных носителей, поглощаемый поверхностью, будет $+S\Delta p$, и соответствующее граничное условие, описывающее диффузию к границе, примет следующий вид:

$$S\Delta p = D_h \left. \frac{\partial \Delta p}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (1.12)$$

где ось z перпендикулярна границе. Величина S , как и L , является свойством образца и также может быть измерена методами электронной микроскопии.

Приближение слабой генерации

Следует отметить, что вышеописанное поведение генерируемых электронным пучком e-h пар основано на предположении, что темп их рекомбинации пропорционален Δp . Это соответствует так называемому приближению слабой генерации. Данное предположение и полученные с его помощью решения неверны, если не выполняется $\Delta p \ll n$. Также в рамках приближения слабой генерации предполагается, что диффузионная длина, или время жизни, не зависят от концентрации неосновных носителей заряда

(или, иными словами, от уровня генерации).

В EBIC эксперименте, когда сфокусированный пучок электронов облучает образец, локальная концентрация неравновесных носителей может быть довольно высокой по сравнению с равновесным состоянием. Ясно, что если $\Delta p > n$, то условия слабой генерации не выполнены, и нужно рассматривать зависимость времени жизни от уровня генерации [17]. В действительности же условия слабой генерации более сложные. Когда уровень генерации достаточно высок, чтобы существенно сдвигать квази-Ферми уровень электронов (дырок) к зоне проводимости (валентной зоне), происходит изменение времени жизни неравновесных носителей, поскольку участвующие в рекомбинации ловушки переполняются. Смещение квази-Ферми уровня для электронов может быть оценено как $\Delta E_F = kT / q \ln(N_c / n)$, где N_c - плотность состояний в зоне проводимости, n - концентрация равновесных электронов (для кремния при комнатной температуре $N_c \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$).

При весьма больших уровнях генерации при возрастании Δp время жизни τ экспоненциально убывает с ростом плотности неравновесных носителей (здесь τ - среднее из времен жизни, соответствующих положительно, отрицательно заряженным и нейтральным ловушкам). Кроме того, при очень больших уровнях генерации значительный вклад в уменьшение τ вносят Оже-электроны.

Таким образом, эксперименты по измерению наведенного тока можно подразделить на две категории. В экспериментах первой категории устанавливается как можно более низкий уровень генерации, так что выполняется приближение слабой генерации и возможны измерения S , L и τ . В экспериментах второго типа создают условия сильной генерации так, чтобы наблюдать контраст между областями с разной плотностью ловушек.

Для кремния было показано [18], что $\Delta p < n$ для большинства экспериментально достижимых условий. А для GaAs Лими (Leamy) и

Кимерлинг (Kimerling) продемонстрировали [19], что условия сильной генерации могут быть легко реализованы.

Ситуация может значительно усложниться, когда концентрация носителей является функцией координат. Уровень генерации может меняться от высокого до низкого в зависимости от того, где генерируется заряд. При увеличении времени жизни носителей плотность неравновесных $e-h$ пар стремится к постоянному значению и не зависит от диффузионной длины L . С другой стороны, при маленьких временах жизни концентрация неравновесных носителей сильно зависит от диффузионной длины.

В целом, сложно заранее предсказать, нужно ли рассмотрение уровня генерации. В большинстве случаев нужно провести экспериментальное варьирование уровня генерации, чтобы определить - сильная или слабая генерация преобладает [1].

Регистрация сигнала в методе наведенного тока

Сгенерированные электронным пучком носители заряда в полупроводнике могут попасть под влияние электрического поля, и тогда их движение уже не будет иметь чисто диффузионный характер. Если такое упорядоченное (дрейфовое) движение носителей реализуется, то результирующий ток или напряжение могут быть измерены. Различные способы, которыми это достигается на практике, проиллюстрированы на рис. 1.4. На этом рисунке схемы (a) и (b) представляют типичные геометрические вариации схем измерения для случая, когда сбор сигнала осуществляется электрическим полем, сформированным внутри образца $p-n$ переходом. Схемы (c) и (d) являются геометрическими эквивалентами схем (a) и (b), но электрическое поле в этом случае создается барьером Шоттки на одном из контактов внешней цепи.

На рис. 1.4(e) проиллюстрирован случай, когда поле приложено поперек всего образца с помощью двух омических контактов. Это схема метода β -проводимости [20-23]. В нем измеряется вариация проводимости, обусловленная неравновесными носителями, генерируемыми электронным

или другим лучом. Это традиционная схема измерений наведенного тока. Она была реализована раньше других, но в настоящее время ее редко используют. Одним из ее недостатков является то, что результаты измерений проводимости зависят от чистоты поверхности, на которой находятся контакты.

Свойства структур, обычно используемых для сбора тока (p - n перехода и барьера Шоттки), подробно описаны во многих работах (например, [24 - 26]).

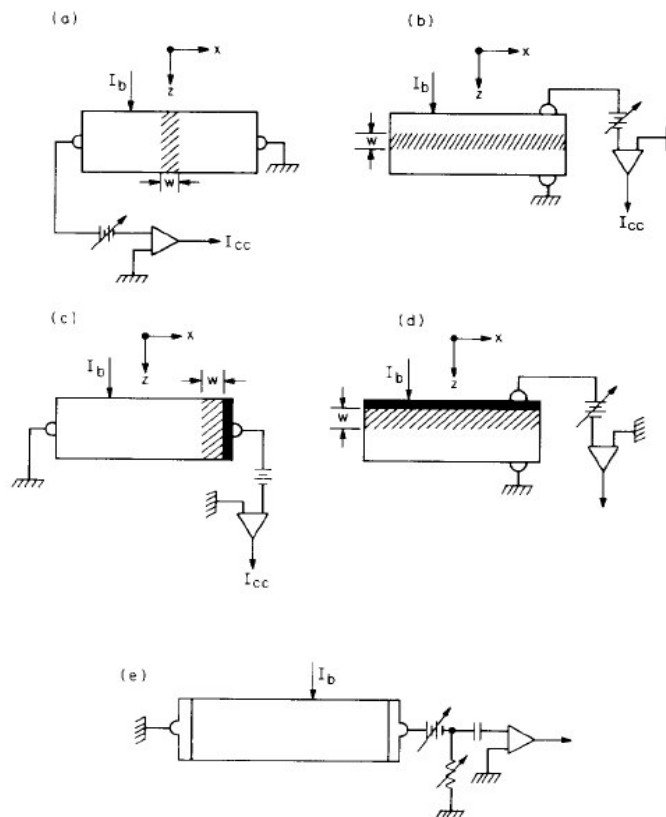


Рис. 1.4. Схемы регистрации сигнала в методе наведенного тока: (а) и (b) параллельный и перпендикулярный пучку p - n переход (область пространственного заряда заштрихована); (с) и (d) – барьер Шоттки параллельный и перпендикулярный пучку; (e) – схема измерения β -проводимости. Здесь I_b - ток пучка электронов, I_{cc} - регистрируемый ток.

Электронно-дырочный переход, или, сокращенно, p - n переход, - это тонкий переходный слой в полупроводниковом материале на границе между двумя областями с различными типами электропроводности: одна p -типа, другая n -типа. Электронно-дырочный переход получают в едином кристалле

полупроводника, вводя в одну область донорную примесь, а в другую – акцепторную. Атомы примесей при комнатной температуре оказываются ионизованными. При этом атомы акцепторов, присоединив к себе электроны, создают избыток дырок (получается p -область), а атомы доноров отдают электроны, становящиеся свободными (создается n -область).

Физические процессы в p - n переходе поясняет рис. 1.5. На границе p и n областей возникает разность концентраций одноименных носителей заряда, что приводит к диффузии основных носителей заряда через границу между областями. Электроны диффундируют в p -область, а дырки - в n -область. Уход основных носителей заряда из слоев вблизи границы в соседнюю область оставляет в этих слоях нескомпенсированный неподвижный объемный заряд ионизированных атомов примеси (положительный заряд ионов доноров в n -области и отрицательный заряд ионов акцепторов в p -области). То есть граница раздела будет окружена двумя областями пространственного заряда противоположного знака (рис. 1.5(b)), которые называют также обедненным слоем.

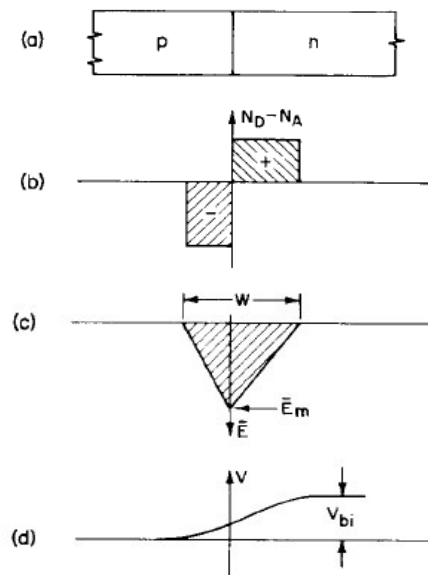


Рис. 1.5. (a) – Схема p - n перехода; (b) - распределение связанного, не скомпенсированного заряда, (c) – изменение электрического поля и (d) - потенциальный барьер в p - n переходе. Здесь N_a и N_D – концентрации акцепторов и доноров, W – ширина обедненного слоя, E_m – максимальное значение электрического поля, V_{bi} – высота потенциального барьера, создаваемого полем в переходе.

Электрическое поле, возникающее вследствие образования областей пространственного заряда, вызывает дрейфовый ток в направлении, противоположном диффузионному току. Когда между диффузионным и дрейфовым токами устанавливается динамическое равновесие, перетекание зарядов прекращается. Это поле препятствует дальнейшей диффузии основных носителей, создавая для них потенциальный барьер высотой V_{bi} , и в то же время способствует переходу через границу неосновных носителей. Электрическое поле (рис. 1.5(c)) максимально на краю перехода и спадает в полупроводнике пропорционально $N_b^{1/2}$, где N_b - концентрация ионизированных примесей.

Если полупроводник с одной стороны от перехода сильно допирован (несимметричный $p-n$ переход), ширина обедненного слоя может быть оценена как

$$W = \left[\frac{2\varepsilon(V_{bi} + V)}{eN_b} \right]^{1/2}, \quad (1.13)$$

где ε - диэлектрическая проницаемость, e - заряд электрона, V - приложенное к полупроводнику обратное напряжение. Оно берется со знаком «плюс», если минус подключен к p -области, а плюс - к n -области. Надо отметить, что ширина обедненного слоя может быть сравнима с глубиной проникновения электронного пучка R [27].

В структурах с барьером Шоттки, показанных на рис. 1.4 (c) и 1.4 (d), потенциальный барьер, равный разности работ выхода металла и полупроводника, образуется в приконтактном слое полупроводника, граничащего с металлом. Подобно случаю резкого несимметричного $p-n$ перехода вблизи барьера формируется область пространственного заряда. Выражение (1.13) для ширины ОПЗ можно применять и в этом случае, если V_{bi} заменить на высоту барьера. Для обеих структур максимальное значение электрического поля достигается на переходе или барьере. Его величина

$$E_m = 2(V_{bi} + V)/W. \quad (1.14)$$

Величина E_m на несимметричном $p-n$ переходе в кремнии может превышать 10^4 В/см [27]. При такой величине поля линейное соотношение между скоростью носителей и напряженностью E нарушается, и носители заряда в Ge, Si и GaAs достигают скоростей насыщения, имеющих порядок 10^7 В/см.

Таким образом, и $p-n$ переход, и барьер Шоттки обеспечивают необходимые для регистрации неосновных носителей электрические поля, которые сосредоточены в областях, размеры которых увеличиваются при приложении обратного напряжения и с уменьшением концентрации допирующей примеси.

б) Обсуждение получаемых с помощью EBIC метода результатов

Первые EBIC измерения в сканирующем электронном микроскопе были проделаны Эверхартом (Everhart) в 1958 году [28], им была измерена наведенная пучком проводимость с обеих сторон $p-n$ перехода в Ge, им же был введен термин EBIC [29]. В 1963 году Ланде (Lander) с соавторами опубликовали [30] первую карту EBIC контраста, которая изображала диффузионно наведенную сеть дислокаций на $\{111\}$ плоскостях скольжения в кремнии. А в следующем году Кзая (Czaja) и Ветли (Wheatley) [31] продемонстрировали изображения подобных дефектов с лучшим разрешением, и предположили связь между темными линиями на изображениях и дислокациями. Кзая и Пател (Patel) [32] впоследствии показали, что края дислокаций могут изображаться с помощью EBIC, и Кзая был сделан доклад [33] об изображении частичных петель дислокаций, окружающих дефекты упаковки. Было установлено, что контраст в этих первых EBIC микрофотографиях обусловлен повышенной рекомбинацией на дислокациях.

В эти ранние годы развития EBIC было отмечено, что внешние факторы, такие как микротрещины [34], могут давать полосы контраста, обманчиво

похожие на дислокации; что некоторые особые типы морфологии поверхности [35] могут давать EBIC контраст, а также, что контраст и, следовательно, степень рекомбинации, существенно меняется вдоль некоторых дислокаций [35].

Благодаря аналогии с катодолюминисценцией и фотопроводимостью, в 1965 году было установлено, что EBIC можно использовать для измерения диффузионной длины и времени жизни неравновесных носителей [36-38]. Тогда же EBIC стал применяться при анализе интегральных схем [39, 40] и, особенно, для исследования структур металл-оксид-полупроводник с обращенными слоями [41, 42].

В работах [43-45] было показано, что дефекты в полупроводниках не обязательно проводят к уменьшению собираемого тока. Если дефект расположен внутри области пространственного заряда (ОПЗ), напряженность электрического поля вокруг него может быть повышена. Носители заряда, ускоряясь этим локально возросшим полем, могут получить энергию, достаточную для того, чтобы самостоятельно генерировать заряды. При сканировании электронным пучком этот эффект многократно усиливается из-за инжекции носителей, и измеряемый в результате скачок тока служит для обнаружения мест преждевременного пробоя (местоположений микроплазм) [35, 43, 44]. Более подробно механизм умножения носителей заряда обсуждался в работе [46], где по температурной зависимости наведенного тока определялся уровень энергии таких приповерхностных ловушек.

По анализу дефектов в кремнии и соединениях $A^{III}B^V$ огромная работа была проделана в Bell Telephone Laboratory и описана Кимерлингом [47, 48] и Лими [49, 50]. А в работе [51] Ханоки (Hanoка) представлен анализ результатов по характеристике границ зерен в поликристаллических солнечных элементах.

Теоретическое изучение контраста наведенного тока в результате влияния различных типов дефектов принадлежит в основном Донолато [52-54]. Им рассматривался полубесконечный однородный полупроводник с

бесконечной скоростью поверхностной рекомбинации. Дефект рассматривается как область, в которой время жизни носителей заряда отлично от остального полупроводника. В рамках этого формализма им были рассчитаны профили тока для точечных дефектов, дислокаций (дислокация рассматривалась как цепочка точечных дефектов [54]) и дефектов упаковки. Блумтритт (Blumtritt) [55] предложил модель для дислокаций, лежащих в плоскости коллектора, в которой дислокации приписывается конечная ширина. А в работе [56] Донолато рассматривалась перпендикулярная коллектору дислокация, моделируемая цилиндром с конечной скоростью поверхностной рекомбинации. Впоследствии Якимов в [9], рассматривая модели дислокации как серого цилиндра (дислокация, как цилиндр конечного радиуса с конечной скоростью рекомбинации) и черного цилиндра (конечный радиус и бесконечная скорость рекомбинации на поверхности), показал, что для корректного выбора модели, описывающей дислокацию, нужна информация о заряженности дислокации и состоянии окружающих ее примесей.

Моделирование наведенного тока от перпендикулярной границы зерна, а также алгоритм определения диффузионной длины и скорости рекомбинации на границе доложен в работах [57, 58].

К настоящему времени предложено достаточно много способов измерения диффузионной длины L с помощью наведенного тока [2, 9], и большинство из них разработаны для решения конкретных практических задач.

Измерение малых L . Для характеристики образцов с достаточно малой (меньше глубины проникновения пучка электронов) диффузионной длиной целесообразно использовать геометрию измерений с пучком, перпендикулярным плоскости коллектора (Рис. 1.4 (*d*)). В такой геометрии поверхностная рекомбинация мало влияет на результаты измерений, а также удобно исследовать латеральную неоднородность L .

Если энергия зонда E_b такова, что глубина проникновения электронов R больше, чем ширина ОПЗ W , и известна зависимость от глубины функции генерации, то сравнение измеренной зависимости наведенного тока $I_c(E_b)$ с рассчитанной [9] позволяет определить длину L и ширину W [59].

Так же путем подгонки измеренных зависимостей $I_c(E_b)$ может быть восстановлена и зависимость L от глубины в неоднородных образцах [60], однако для этого нужна предварительная информация о характере этой зависимости и точность такого восстановления, как правило, невелика. Более эффективным для такого восстановления является так называемый модулированный метод наведенного тока [61, 62].

В этом методе ширина ОПЗ модулируется небольшим синусоидальным напряжением U_{ac} , приложенным к коллекторному переходу. После токового предусилителя с помощью синхронного детектора выделяется первая гармоника сигнала на частоте модуляции, которая при достаточно малой амплитуде U_{ac} будет пропорциональна производной dI_c/dU . Если диффузионная длины L зависит только от глубины, то, как показано в [62], $L(W)$ может быть выражена через $I_c(W)$ и $\partial I_c(W)/\partial W$, которые являются измеряемыми величинами ($\partial I_c(W)/\partial W$ вычисляется из измеренной производной dI_c/dU). Если варьировать W путем изменения приложенного к коллектору напряжения, то можно восстановить распределение $L(z)$.

Следует отметить, что в этом методе разрешение по глубине при восстановлении $L(z)$ определяется в основном амплитудой модуляции U_{ac} и точностью измерений, а не глубиной проникновения электронов R , и может быть намного лучше, чем R [63, 64].

Измерение больших L . Диффузионная длина носителей заряда в пластинах кремния современного электронного качества приближается к 1 мм. При этом для используемых в ЕВИС энергиях пучка R не превышает 15 мкм и, следовательно, при $L > 30-50$ мкм величина I_c практически не зависит от E_b . Поэтому для характеристики таких совершенных материалов

используются методы определения L , основанные на измерении зависимости наведенного тока от расстояния между точкой падения пучка и краем ОПЗ на структурах с коллекторным переходом, параллельным пучку [18, 36, 65, 66] (рис.1.4 (с)), или от края перехода, перпендикулярного пучку [67-71].

В первом случае для точечного пучка и пренебрежимо малой скорости поверхностной рекомбинации S наведенный ток I_c будет изменяться с расстоянием от края ОПЗ x как $I_c(x) \sim \exp(-x/L)$. Во втором случае величина тока $I_c(x)$ пропорциональна $\sim \exp(-x/L)/x^n$, где $n = 3/2$ при $S \rightarrow \infty$ [68, 69] и $n = 1/2$ при $S = 0$ [71]. В обоих методах поверхностная рекомбинация, в общем случае неизвестная, приводит к заметному отклонению измеренных зависимостей от приведенных выше, что существенно усложняет определение диффузионной длины L . Вывод зависимости $I_c(x)$ в общем случае и способы вычисления L из измеренной зависимости $I_c(x)$ для переходов, параллельных пучку, представлены в [18, 65, 66]. Анализ зависимостей $I_c(x)$, позволяющий не только измерить L , но и оценить скорость поверхностной рекомбинации, был проведен в [72] и [73] для переходов, параллельных и перпендикулярных пучку, соответственно.

Измерение L в тонких пленках. Диагностика тонких полупроводниковых пленок, которые находят все более широкое применение в современной электронике, является сложной задачей, особенно для совершенных пленок, в которых L значительно превосходит толщину пленки d . В таких пленках повышение скорости поверхностной рекомбинации S приводит к тому, что определенное из измерений наведенного тока (НТ) значение L приближается к величине порядка d , независимо от истинного значения диффузионной длины L .

Измерения L в тонких пленках ($d < L$) проводят методом модулированного НТ, который обладает слабой чувствительностью к рекомбинации на границе раздела. Для случая, когда точность измерений этого метода недостаточна, в [64, 74] предложен способ обработки

экспериментальных результатов, требующий, априорной информации об S (эта информация может быть получена из измерений стандартным методом НТ). Оценки в [64, 74] показывают, что максимальная величина L , которая может быть измерена, составляет $\sim 100d$ для малых S и вряд ли превысит $10d$ для больших значений скорости поверхностной рекомбинации S .

Таким образом, можно сделать следующий важный для настоящей работы вывод, что хорошо разработаны различные аспекты метода EBIC, как для локальных измерений диффузионной длины, скорости поверхностной рекомбинации и ширины ОПЗ, так и для характеристики дефектов и других областей повышенной рекомбинации. Однако следует подчеркнуть, что ни одна из модификаций EBIC измерений не позволяет получать информацию о строении и свойствах образца на глубине, существенно превышающей глубину проникновения электронного зонда, которая обычно не превосходит десятка микрон.

В этом свете четко видно преимущество изучаемого в настоящей работе метода наведенного рентгеновским пучком тока, в котором глубина проникновения зонда (несколько сотен микрон) намного больше, чем в EBIC методе.

1.2.2. Метод тока, индуцированного рентгеновским пучком (XBIC)

Метод тока, индуцированного рентгеновским пучком (XBIC), был предложен и реализован в 2002 году на источнике синхротронного излучения [75, 76]. Этот метод аналогичен таким широко распространенным методам, как EBIC и LBIC, с той только разницей, что источником неравновесных носителей служит сфокусированный рентгеновский пучок (рис. 1.6), а не оптический лазер (как в LBIC) или электронный пучок (как в EBIC). Поэтому ясно, что приведенное выше описание поведения неравновесных носителей в полупроводнике и их регистрации относится также и к XBIC методу.

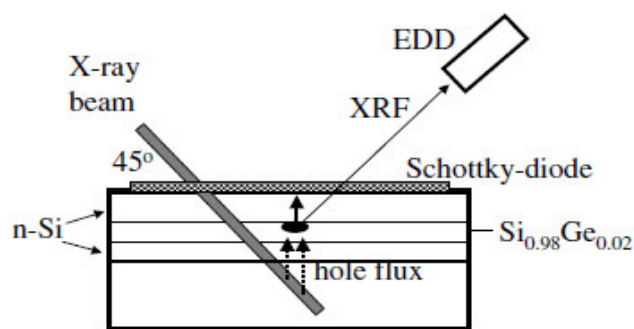


Рис. 1.6. Схема измерений наведенного рентгеновским пучком тока и рентгенофлуоресцентного сигнала, реализованная на синхротроне [76].

Огромным преимуществом ХВИС метода является то, что он может быть скомбинирован с другими рентгеновскими методами, такими как рентгенофлуоресцентный микроанализ (μ -XRF) и метод анализа тонкой структуры спектров поглощения (μ -XAFS), что позволяет дополнительно получать информацию о химическом составе примесей в исследуемом образце [77].

Задача определения состава материала в области дефекта возникает, в частности, при исследовании поликристаллического кремния для солнечной энергетики. В частности, в [75-82] образцы mc-Si исследовались ХВИС методом. Этот материал должен быть достаточно дешевым, поэтому он обычно содержит переходные металлы в высоких концентрациях, достаточных для заметного понижения эффективности солнечных элементов. Однако в большинстве случаев эти металлы присутствуют в виде преципитатов [78], электрическая активность которых существенно ниже, чем растворенных атомов, что может заметно понижать влияние таких примесей. Кроме того, как показано в [79, 80] атомы примесей и преципитаты могут декорировать обычно присутствующие в поликристаллическом кремнии протяженные дефекты (дислокации и границы зерен), усиливая их влияние на время жизни неравновесных носителей заряда, а значит и на эффективность солнечных элементов.

Поэтому один из путей повышения эффективности солнечных элементов

на основе поликристаллического кремния связан с понижением влияния примесей путем контролируемого перевода их в менее активное состояние [81, 82]. Развитие этого подхода основано на исследованиях электрических свойств отдельных преципитатов и структурных дефектов, декорированных атомами металлов.

В принципе, такие исследования могут проводиться и с помощью EBIC метода для выявления и исследования электрических свойств преципитатов и электронно-зондового микроанализа для изучения их элементного состава. Однако качество современного поликристаллического кремния достаточно высоко, и чувствительность электронно-зондового микроанализа, как правило, недостаточна для проведения таких исследований. Чувствительность рентгеновского флуоресцентного анализа (μ -XRF) на несколько порядков выше [77], и, кроме того, μ -XAFS позволяет определить не только элементный, но и химический состав.

Для количественной характеристики рекомбинационно-активных дефектов методом XBIC должны быть разработаны методы расчета наведенного тока для протяженных дефектов, чтобы из сравнения с измеренным контрастом определять параметры дефекта. Модели для такого расчета хорошо развиты для метода EBIC, однако для метода XBIC такие модели до сих пор не разработаны, что существенно ограничивает его применение.

1.3. Методы рентгенофлуоресцентной диагностики элементного состава объектов

Рентгеновский флуоресцентный анализ применяется для анализа элементного состава образцов в самых разных областях человеческой деятельности: от горного дела (составы минералов, руд) до экологии (содержание тяжелых металлов в почвах, воде, растительных и животных тканях), и от космических исследований (изучение метеоритов) до истории

(неразрушающие исследования произведений искусства). Особенно незаменим этот метод при анализе локализации элементов, содержащихся в образце в сверхмалых концентрациях (так называемые, trace elements). В настоящее время на синхротронах проводятся эксперименты по 3D визуализации распределения trace elements (Cu, Zn, Se и др.) в биологических образцах с разрешением ~500 нм для образцов размера ~10 мкм, и даже изучают строение отдельных клеток [83].

Ниже описаны физические основы рентгеноспектрального анализа, а также рассматриваются различные подходы, позволяющие получать двумерные (микроскопия) и трехмерные (томография) распределения элементов в исследуемом образце.

1.3.1. Рентгеновский флуоресцентный анализ

При взаимодействии атомов с коротковолновым излучением (рентгеновскими или гамма-лучами) кроме прочих процессов имеет место фотоэффект, то есть вырывание одного из электронов атома при поглощении им энергии кванта излучения. Энергия рентгеновского излучения достаточна для того, чтобы вырывать электроны и из внутренних (ближних к ядру) оболочек атома. Состояние атома с вакансией на одной из нижних оболочек нестабильно, и на место электрона, выбитого в результате фотоэффекта, переходит один из электронов внешней оболочки атома, испуская при этом рентгеновский квант (рис. 1.7). Это, так называемый, характеристический квант, его энергия равна разности энергий участвующих в процессе оболочек атома и, следовательно, однозначно связана с типом (атомным номером) облучаемого атома. То есть, анализируя энергию флуоресцентных квантов, можно определять, какие химические элементы содержатся в исследуемом образце, а по числу испущенных квантов (по площади под пиком данной энергии в измеренном спектре) - концентрацию этих элементов. При этом спектральные линии, соответствующие переходам с L-оболочки на K-

оболочку образуют серию K_α линий, переходы $M \rightarrow K$ образуют серию K_β , $M \rightarrow L$ переходы серию L_α и т.д. (рис. 1.7 (б)).

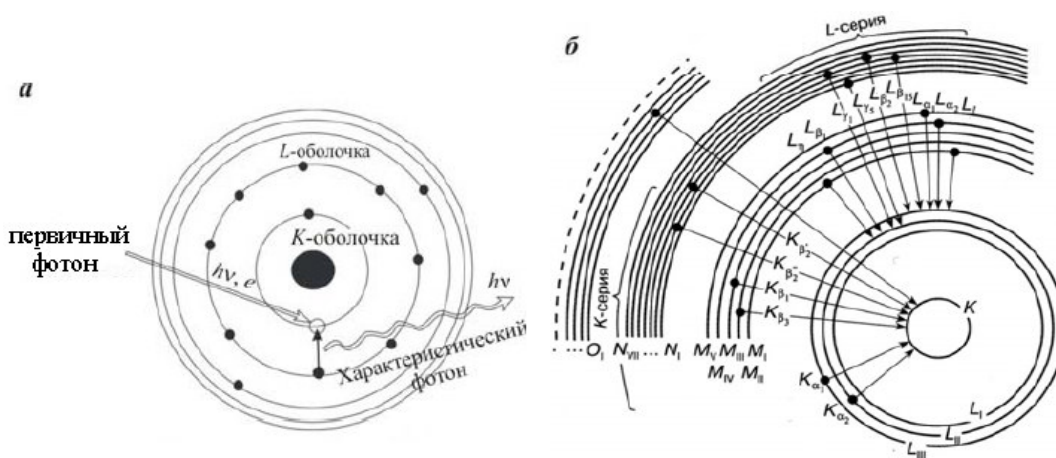


Рис. 1.7. (а) – Процесс испускания атомом характеристического кванта, (б) – диаграмма уровней энергии в атоме и переходов между ними [84].

Рентгенофлуоресцентный микроанализ (μ -XRF) подразумевает двумерное сканирование тонкого образца пучком рентгеновских лучей и измерение спектра характеристического излучения на каждом шаге сканирования с последующей его (спектра) обработкой. Об организации μ -XRF эксперимента можно судить по рис. 1.8 [85]. В данном случае в качестве зонда использовалось ондуляторное (Und) излучение синхротронного пучка, которое монохроматизировалось, пройдя два кристалла-монокроматора (DCM), и фокусировалось на образце с помощью зонной пластинки (ZP).

В принципе, для фокусировки пучка также могут использоваться зеркала Киркпатрика-Байеза [86], составные преломляющие линзы [87] или капиллярные линзы [88]. Глубина фокуса современных рентгеновских линз обычно превышает толщину исследуемого в μ -XRF объекта, поэтому можно считать, что он сканируется тонким не расходящимся рентгеновским пучком.

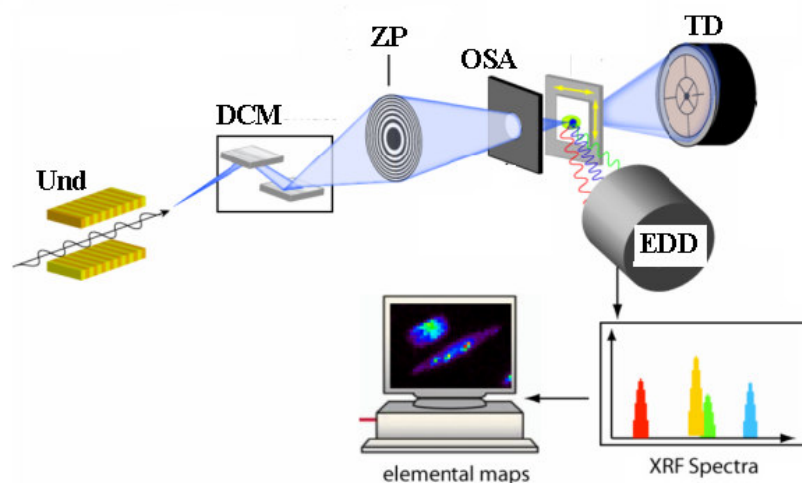


Рис. 1.8. Схема эксперимента по рентгенофлуоресцентной микроскопии [85].

Помещенный за образцом детектор (TD) регистрирует прошедшее излучение, а энерго-дисперсионный детектор (EDD), регистрирующий флуоресцентный спектр, расположен перпендикулярно первичному пучку, чтобы минимизировать комптоновское рассеяние. Энергия рентгеновского пучка выбирается таким образом, чтобы высвечивались характеристические линии всех исследуемых элементов, и флуоресцентные линии в спектре не перекрывались с пиками комптоновского рассеяния. Хотя, несмотря на это, некоторое количество рассеянных фотонов все равно содержится в спектре. Образец поступательно перемещается в плоскости, перпендикулярной пучку, и в результате обработки зарегистрированных в каждой точке сканирования спектров (XRF Spectra) одновременно получают 2D-карты (elemental maps) распределения 10-15 элементов.

Метод μ -XRF имеет большое число приложений, в том числе им проводился анализ trace elements в биологических образцах с чувствительностью порядка пикограмм на грамм для некоторых элементов [89]. Однако для исследования этим методом подходят только достаточно тонкие образцы. Для исследования объемных образцов и получения информации о трехмерном распределении элементов нужно использовать томографические методы.

1.3.2. Рентгенофлуоресцентная томография 3D объектов

Термин томография (от двух греческих слов *τομος* - сечение и *γραφος* - пишу) объединяет совокупность методов, подразумевающих получение информации о внутреннем строении слоя образца по набору интегральных характеристик, измеренных при различных значениях какого-либо параметра (например, угла поворота объекта). Так, в случае рентгенофлуоресцентной томографии трехмерное распределение элементного состава получается в результате математической обработки массива двумерных карт флуоресцентных данных, измеренных при разных углах поворота образца.

Организацию сбора данных в методе рентгенофлуоресцентной томографии может пояснить рис. 1.8, если в дополнение к представленной там схеме эксперимента организовано вращение образца.

Для записи уравнения флуоресцентного сигнала удобно ввести две системы координат (рис. 1.9): неподвижную систему (x, y) , и вращающуюся вместе с образцом систему (s, t) , которая наклонена на угол θ относительно (x, y) . Соответственно, эти координатные системы связаны соотношениями

$$\begin{aligned} s &= x \cos \theta + y \sin \theta \\ t &= -x \sin \theta + y \cos \theta \end{aligned} \quad (1.14)$$

Сканирующий образец рентгеновский пучок с интенсивностью I_0 проходит в образце от точки P (рис. 1.9) до рассматриваемой точки $Q = Q(s, t)$, где под его действием изотропно испускаются флуоресцентные кванты. Причем квант, испущенный в некотором направлении \mathbf{b} , пройдет в образце путь от точки Q до точки R .

Взаимодействие рентгеновского зонда с образцом можно описать в 3 этапа.

1. Рентгеновский пучок, проходя путь PQ , поглощается в образце, и его интенсивность в точке Q

$$I_1(s, t, \Theta) = I_0 \exp\left(-\int_{-\infty}^t \mu_l(s, t') dt'\right), \quad (1.15)$$

где $\mu_l(s, t')$ - коэффициент линейного поглощения для энергии зондирующего пучка.

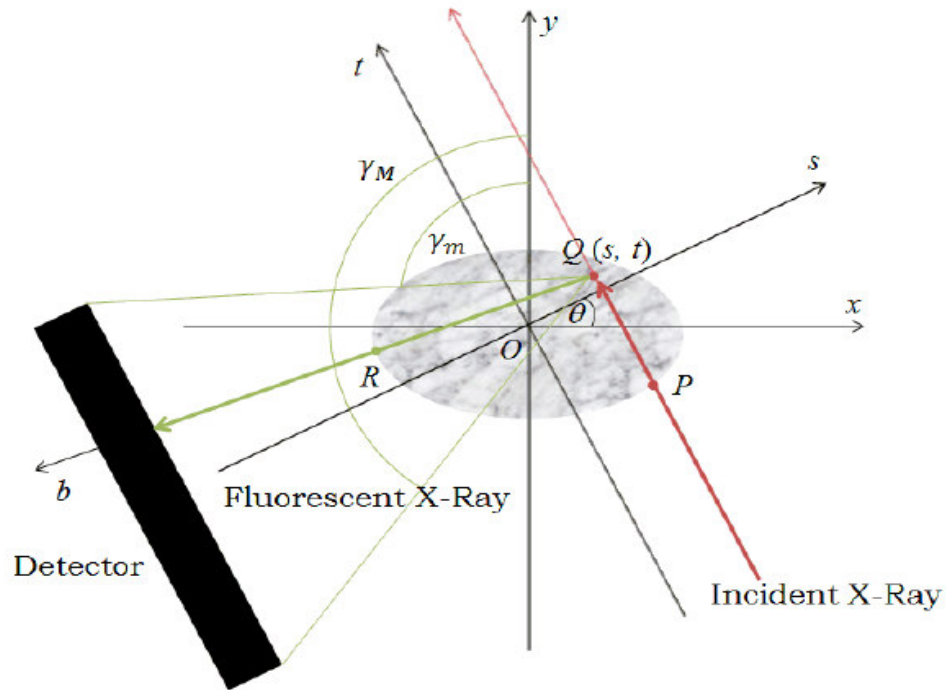


Рис. 1.9. Формирование сигнала в методе рентгенофлуоресцентной томографии [90].

2. Атомы образца в точке Q испускают флуоресцентные кванты, причем интенсивность флуоресценции I_2 энергии E пропорциональна концентрации $c(s, t)$ атомов, для которых эта энергия является характеристической ($E = E_{K\alpha}$). То есть

$$I_2 = \mu_{ph} \omega_{K\alpha} \Omega(s, t) c(s, t) I_0 \exp\left(-\int_{-\infty}^t \mu_l(s, t') dt'\right) \Delta t, \quad (1.16)$$

где μ_{ph} - линейный коэффициент фотоэлектронного поглощения, $\omega_{K\alpha}$ - флуоресцентный выход K_α линии, $\Omega(s, t)$ - угол, под которым виден детектор из точки $Q(s, t)$.

3. Флуоресцентные кванты по пути к детектору частично поглощаются в образце, поэтому интенсивность квантов, пришедших в детектор из точки $Q(s, t)$ по направлению \mathbf{b} , можно описать выражением

$$\mu_{ph}\omega_{K\alpha}\Omega(s,t)c(s,t)I_0 \exp\left(-\int_{-\infty}^t \mu_l(s,t')dt'\right) \exp\left(-\int_0^{\infty} \mu_F(s-b\cos\gamma, s+b\sin\gamma)db\right) \Delta t, \quad (1.17)$$

где γ - угол между направлением \mathbf{b} и осью t ($\gamma_m \leq \gamma \leq \gamma_M$), $\mu_F(s,t)$ - линейный коэффициент поглощения флуоресцентного излучения. В результате интегрирования по углу γ получается интенсивность флуоресцентных квантов, приходящих в детектор из точки Q :

$$I_3 = \mu_{ph}\omega_{K\alpha}\Omega(s,t)c(s,t)I_0 \exp\left(-\int_{-\infty}^t \mu_l(s,t')dt'\right) * \\ * \int_{\gamma_m}^{\gamma_M} \exp\left(-\int_0^{\infty} \mu_F(s-b\cos\gamma, s+b\sin\gamma)db\right) d\gamma \Delta t \quad (1.18)$$

Таким образом, полная интенсивность флуоресцентного излучения с энергией E , регистрируемая детектором при координате пучка s и угле θ , может быть получена интегрированием I_3 по всем точкам t , испускающим флуоресцентные кванты:

$$I(s, \theta) = \mu_{ph}\omega_{K\alpha}\Omega I_0 * \\ * \int_{-\infty}^{\infty} c(s,t) \exp\left(-\int_{-\infty}^t \mu_l(s,t')dt'\right) \int_{\gamma_m}^{\gamma_M} \exp\left(-\int_0^{\infty} \mu_F(s-b\cos\gamma, s+b\sin\gamma)db\right) d\gamma dt \quad (1.19)$$

В методе рентгенофлуоресцентной томографии задача восстановления изображения сводится к решению уравнения вида (1.19) относительно распределения концентрации $c(x, y)$.

Наиболее широко распространенным алгоритмом реконструкции проекционных данных является метод свертки и обратной проекции [91], традиционно используемый и в других томографических методах. Однако, флуоресцентные карты не эквивалентны проекциям в компьютерной томографии из-за эффектов самопоглощения. Эти эффекты, в частности, поглощение первичного пучка и перепоглощение флуоресценции атомами вещества, сильно проявляются при исследовании толстых образцов и реконструкции распределений легких элементов. Для реконструкции же распределения тяжелых элементов (Fe - As) может успешно применяться метод свертки и обратной проекции [92, 93].

Чтобы оценить и скорректировать эффекты самопоглощения для разных флуоресцентных линий, в работах [94-96] использовалась информация о коэффициенте поглощения первичного пучка. Этот подход был развит в [97], где использовались также данные упругого (Рэлеевского) и неупругого (Комптоновского) рассеяния, как дополнительные данные при восстановлении. Кроме того, эти сигналы способны давать информацию о распределении легких элементов в образце, которую сложно получить другими методами. Другие подходы к восстановлению данных флуоресцентной томографии коррекцией самопоглощения развиты Варгасом (Vargas) [98] и Де Пиэрро (De Pierro) [99].

В последнее время классические Фурье-методы обработки томографических данных, в том числе метод свертки и обратного проецирования, стали уступать позиции более гибким алгебраическим методам [100]. Значимый вклад в развитие алгебраических методов, применяемых для восстановления флуоресцентных данных, внесли Чукалина [101], Мигелес (Miqueles) [102] и La Riviere [103, 104]. Разработка новых алгебраических алгоритмов реконструкции позволяет использовать методы адаптивной обработки изображений, учитывать морфологию и априорную информацию об объекте. Кроме того, алгебраические методы требуют для реконструкции меньшее число проекций, чем метод свертки и обратного проецирования, и менее чувствительны к зашумленности экспериментальных данных.

1.3.3. Аппаратный подход в рентгенофлуоресцентной томографии

Альтернативой проекционной рентгенофлуоресцентной томографии, позволяющей избежать этапа реконструкции изображения с привлечением сложных алгоритмов и больших вычислительных мощностей, является конфокальный (аппаратный) подход.

Этот концептуально простой подход поясняет рис. 1.10. Сфокусированный рентгеновский пучок вызывает флуоресценцию атомов образца в

узком протяженном объеме вдоль направления своего распространения. Коллиматор ограничивает поле зрения энергодисперсионного детектора, так что в детектор попадает только малая часть флуоресцентного излучения, а именно та часть, что испущена атомами, находящимися в пересечении фокальных объемов коллиматора и фокусирующей первичный пучок линзы (так называемом «зондируемом объеме»). Исследуемый образец сканируется этим «зондируемым объемом» в трех измерениях, и в результате обработки зарегистрированных спектров получают трехмерные распределения концентраций элементов в образце.

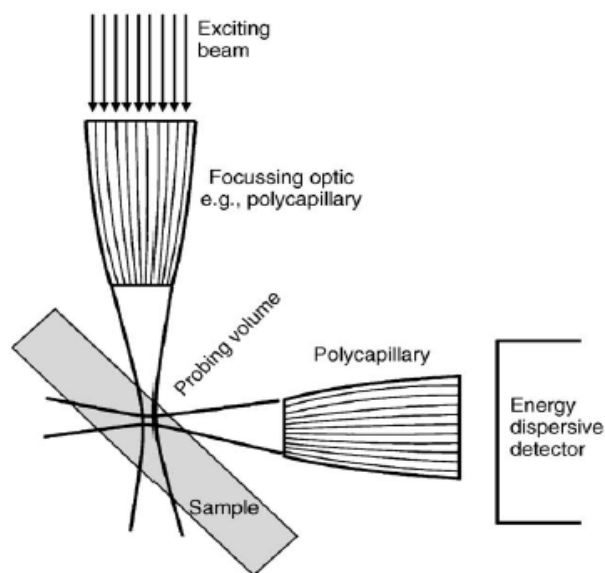


Рис. 1.10. Конфокальная схема рентгенофлуоресцентной томографии [105].

Конфокальная геометрия рентгенофлуоресцентной томографии дает прямой доступ к малому объему внутри исследуемого образца. Однако во многих экспериментах бывает нужно определить область интереса внутри исследуемого объекта и уже ее исследовать с высоким разрешением. В таких задачах группой авторов (Чукалина и др.) было предложено использовать смешанную схему [106]: использовать проекционную томографию для выявления области интереса и детально ее сканировать фокальным пятном коллиматора.

В настоящее время поперечный размер фокуса коллиматора ограничивает латеральное разрешение метода конфокальной томографии величиной порядка 5 мкм. Зависимость характеристик поликапиллярных линз от длины волны приводит к еще большему падению разрешения для легких элементов [105, 107]. Однако существующие линзы, способные давать лучшее разрешение, часто не подходят для использования в качестве коллиматоров из-за пространственных требований к организации эксперимента, хроматических свойств или ограниченной эффективности.

Таким образом, для дальнейшего развития конфокальной методики во флуоресцентной томографии на повестке дня стоит разработка нового типа коллиматора, имеющего меньший фокальный объем, чем традиционно используемый поликапилляр. В работе [106] была предложена идея использования коллиматора, состоящего из системы направленных в одну точку каналов в поглощающей матрице. Каналы микронного диаметра и длиной в несколько миллиметров можно получить с помощью хорошо развитых методов, используемых для создания объектов микроэлектроники, – электронно-лучевой литографии или травления. Огромный интерес представляет техническая реализация и моделирование характеристик нового типа коллиматора. Именно эта проблема и является одной из задач, исследуемой в настоящей работе.

1.4. Основные выводы главы I

1. Отсчитывающий свою историю с середины прошлого столетия метод наведенного электронным пучком тока является мощным средством локальной диагностики полупроводников и структур на их основе. Теория формирования сигнала и методы решения обратных задач детально разработаны для этого метода.

2. Возможности недавно появившегося метода наведенного рентгеновским пучком тока для выявления дефектов в полупроводниковых структурах не менее широки, чем у EBIC метода. Однако его применение для количественной характеристики отдельных дефектов и измерения электрофизических характеристик полупроводников в настоящее время ограничивает то, что модели формирования сигнала еще не разработаны для этого метода.

3. В рентгенофлуоресцентной томографии активно развиваются как алгоритмы реконструкции проекционных данных, так и конфокальный и смешанный подходы. Для повышения разрешения данных конфокальной томографии идет поиск новых рентгенооптических элементов, подходящих в качестве коллиматора. Поэтому большой интерес представляет оценка свойств и теоретическое изучение нового типа коллиматора, т.е. коллиматора, созданного методами микроэлектроники.

Глава II. Сравнение функции сбора сигнала поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники, используемых в аппаратной рентгенофлуоресцентной томографии

Информативность метода наведенного рентгеновским пучком тока значительно возрастает, если скомбинировать этот метод с рентгеновским флуоресцентным анализом. Действительно, в этом случае, кроме выявления электрически активных дефектов, можно получать информацию также и о распределении и химическом составе примесей, содержащихся в образце и скапливающихся на протяженных дефектах.

Вторая глава фокусируется на рентгеновской части эксперимента. В ней сравниваются характеристики двух типов коллиматоров, используемых для локального сбора флуоресцентных квантов в конфокальной схеме рентгенофлуоресцентной томографии.

В первом разделе описаны принципы действия рассматриваемых коллиматоров – поликапиллярного и коллиматора, созданного методами микроэлектроники, определена функция сбора коллиматора, которая является наиболее емкой характеристикой используемого в аппаратной томографии коллиматора, и обоснована применимость приближения геометрической оптики для описания прохождения излучения через коллиматор.

Во втором разделе описана методика расчета функции сбора сигнала.

В третьем разделе представлены результаты расчета (функции сбора и угла сбора отдельного канала), проведен анализ полученных результатов и сформулированы выводы, которые подчеркивают преимущества коллиматора, созданного методами микроэлектроники. Также в этом разделе дана оценка доли излучения, проходящего через микроэлектронный коллиматор за счет явления полного внешнего отражения.

2.1. Постановка задачи, определение функции сбора, применимость приближения геометрической оптики

Метод рентгеновской флуоресцентной томографии применим для исследования широкого класса объектов любой степени упорядоченности, что является одной из причин его растущей популярности. Действительно, этот инструмент способен давать информацию о распределении элементного состава объектов с пространственным разрешением порядка микрометров, и позволяет регистрировать низкие (порядка сотых долей процента) концентрации элементов [107-109].

В эксперименте локального рентгенофлуоресцентного анализа в конфокальной схеме образец освещается сфокусированным рентгеновским пучком (рис. 2.1). Под его действием атомы образца испускают флуоресцентные кванты. Фокус рентгеновского пучка совмещен с фокусом коллиматора, пересечение этих фокусов образует так называемый фокальный объем, из которого собирается сигнал. Образец перемещается. Схема перемещения и определяет схему сканирования.

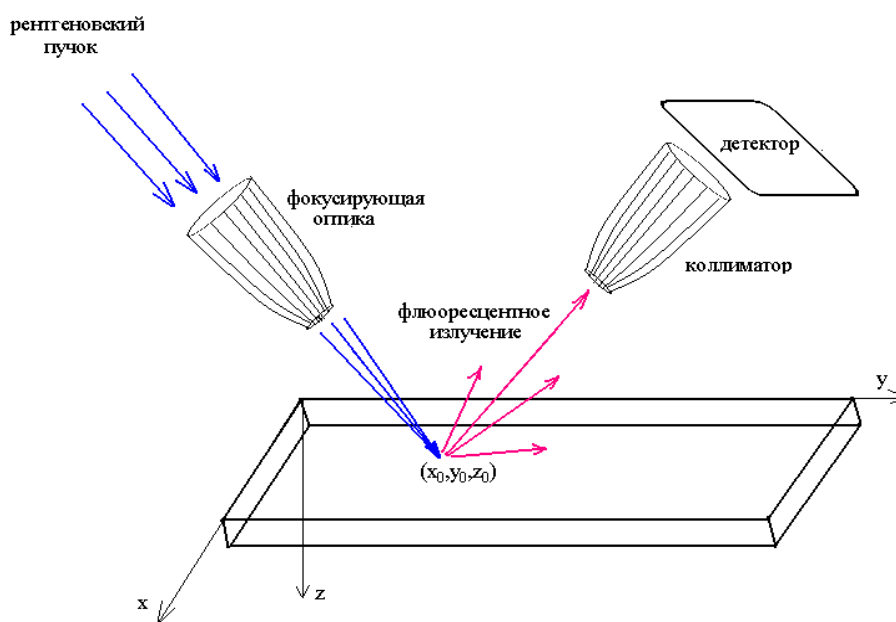


Рис. 2.1. Схема эксперимента по аппаратной рентгенофлуоресцентной томографии.

Флуоресцентное излучение из фокального объема собирается

коллиматором и попадает в энергодисперсионный детектор. В результате обработки зарегистрированного в детекторе спектра можно получить концентрации элементов в данном объеме образца.

Приведем выражение, которое связывает зарегистрированную детектором интенсивность рентгеновского излучения с интенсивностью испущенных флуоресцентных квантов. Рассмотрим сфокусированный монохроматичный рентгеновский пучок, который направлен в точку образца с координатами (x_0, y_0, z_0) (см. рис. 2.1). Пусть его интенсивность описывается функцией $J_0(x-x_0, y-y_0, z-z_0)$, и E_0 – энергия этого пучка. Интенсивность флуоресцентных квантов с энергией E , испущенных под действием рентгеновского пучка в точке с координатами (x, y, z) , обозначим как $J_1(x, y, z, E, E_0)$.

Определим функцию сбора $F = F(x, y, z, E)$ сигнала коллиматором как отношение интенсивности флуоресцентных квантов, попавших в детектор из точки (x, y, z) , к интенсивности испущенных в этой же точке флуоресцентных квантов. То есть, интенсивность зарегистрированного в детекторе излучения описывается выражением

$$I(x_0, y_0, z_0, E) = \int J_1(x, y, z, E, E_0) F(x, y, z, E) dx dy dz . \quad (2.1)$$

Функция сбора F является характеристикой коллиматора, полностью описывающей его свойства. Она не зависит от свойств источника рентгеновского излучения или исследуемого образца. Функции сбора сигнала сравниваются у коллиматоров двух типов – поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники.

Поликапиллярный коллиматор (поликапиллярная линза или полулинза) является одним из объектов оптики Кумахова. Его работа основана на эффекте полного внешнего отражения (ПВО) рентгеновских лучей. Такой коллиматор используют в экспериментах по конфокальной томографии на синхротронах (BESSY, DESY, ESRF) уже около десяти лет (см., например, [107, 110]).

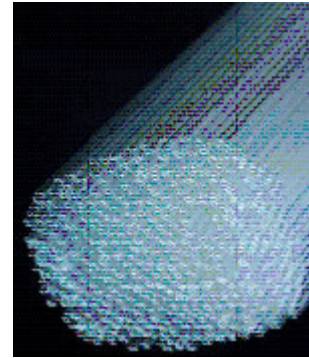


Рис. 2.2 (а). Поликапиллярные линзы, используемые в качестве коллиматоров (фото).
Справа – фотография стеклянных капилляров [111].

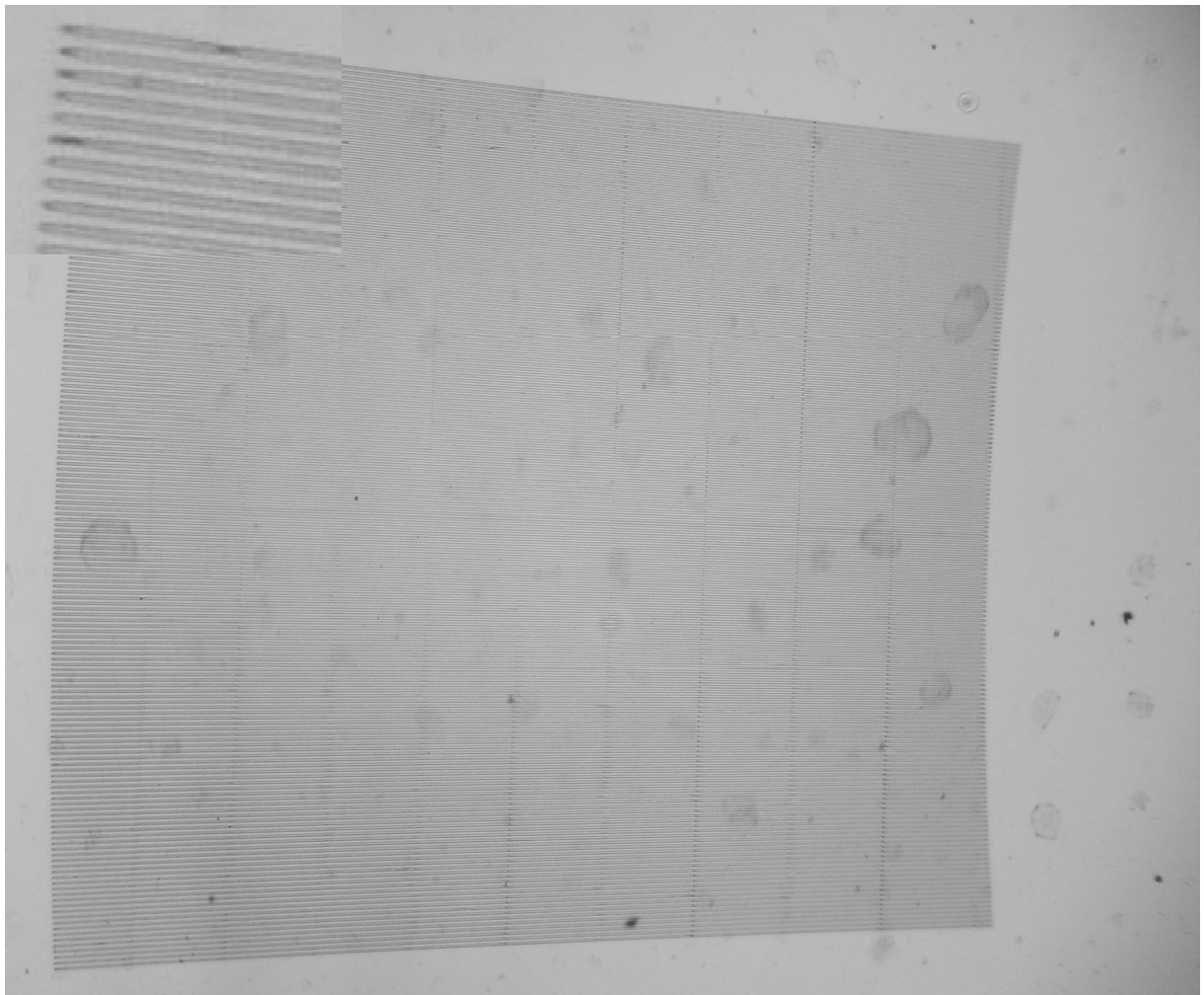


Рис. 2.2 (б). Фотография коллиматора, созданного методами микроэлектроники. Вверху слева на врезке – увеличенное изображение каналов. Коллиматор создан в ИПТМ РАН С.И. Зайцевым и М.А. Князевым.

Коллиматор, созданный методами микроэлектроники, представляет собой систему каналов в поглощающей матрице, направленных в одну точку – фокус коллиматора. Идея создания и реализация этого коллиматора появились сравнительно недавно [106]. И поэтому важно сравнить его возможности с широко используемым поликапилляром.

Приближение геометрической оптики

Транспортировка излучения в прямых и изогнутых лентообразных волноводах была исследована в [112-117]. В частности, в [117] рассмотрена тонкая структура рентгеновских пучков на выходе лентообразного волновода. В этой работе показано, что, когда число возбуждаемых волноводных мод большое ($N \geq 3 \div 5$), дифракционными эффектами можно пренебречь и перейти к рассмотрению транспортировки излучения в рамках геометрической оптики. Причем максимальное число волноводных мод оценивается как

$$N = \frac{2\Theta_c}{\lambda/d}, \quad (2.2)$$

где Θ_c – критический угол полного внешнего отражения, λ – длина волны, d – ширина волновода. Величина λ/d – полуширина дифракционной расходимости, обусловленная ограниченным размером канала волновода.

Стеклянные капилляры, входящие в состав современных поликапиллярных рентгенооптических элементов (например, [111]), имеют диаметр порядка единиц (или даже десятых долей) микрон. При этом длины волн рентгеновского флуоресцентного спектра, собираемого коллиматором, лежат обычно в пределах от десятых долей до единиц ангстрем, а критический угол ПВО для стекла составляет несколько мили радиан. В частности, для $\lambda = 1.9 \text{ \AA}$ (длина волны K_α линии железа, соответствующий критический угол ПВО для стекла $\Theta_c = 4.6 \text{ мрад}$) и $d = 1 \text{ мкм}$ можно оценить число волноводных мод в капилляре как:

$$N = \frac{2\Theta_c}{\lambda/d} = \frac{2 * 4.6 \text{ мрад}}{1.9 \text{ \AA} / 1 \mu\text{m}} \cong 48. \quad (2.3)$$

То есть, при рассмотрении поликапиллярного коллиматора допустимо использовать приближение геометрической оптики. Для микроэлектронного коллиматора, имеющего каналы диаметром порядка нескольких микрон, справедливы аналогичные рассуждения, показывающие допустимость рассмотрения в рамках геометрической оптики.

2.2. Методика расчета функции сбора

а) Для коллиматора, созданного методами микроэлектроники

Микроэлектронный коллиматор рассмотрен как система цилиндрических каналов в матрице из поглощающего (тяжелого) материала. Каналы направлены в одну точку – фокус коллиматора.

При расчетах полагалось, что вклад в угол сбора дает только излучение, проходящее через каналы “на просвет”. Излучение, попадающее на боковую поверхность и стенки каналов коллиматора, поглощается. Доля излучения, проходящего через каналы коллиматора в результате ПВО, мала по сравнению с количеством квантов, проходящих “на просвет”, и ею можно пренебречь.

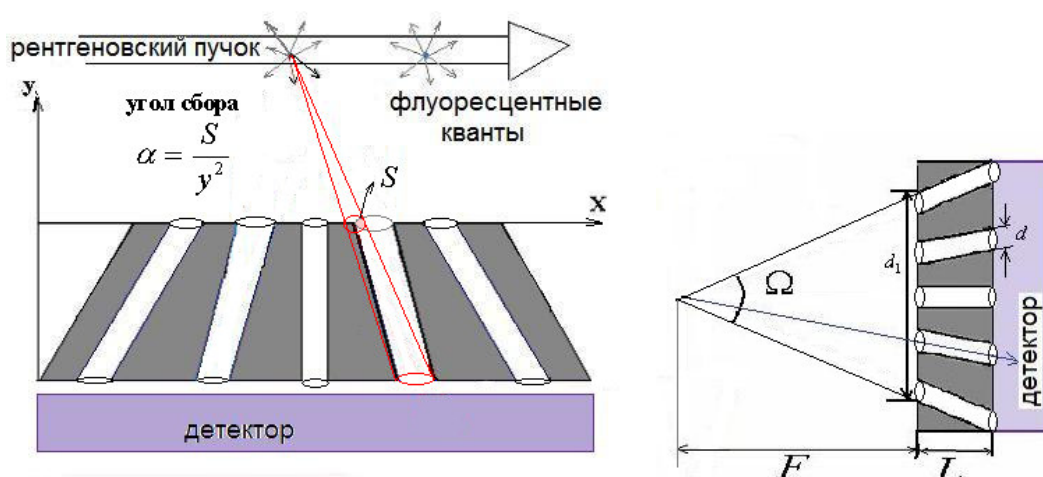


Рис. 2.3. Схематическое представление микроэлектронного коллиматора, поясняющее расчет угла сбора (слева), и пояснение введенных обозначений (справа).

Функция сбора $F(x, y)$ микроэлектронного коллиматора рассчитывалась как суммарное распределение углов сбора всех каналов. Под углом сбора $\alpha(x, y)$ одного канала понимается угол, флуоресцентное излучение из которого может пройти через этот канал.

Введены следующие обозначения: d - диаметр канала, L - длина коллиматора, F - фокусное расстояние, d_1 - входной диаметр, Ω - угол раствора коллиматора. Из рис. 2.3 видно, что угол сбора определяется площадью пересечения окружностей S , а именно,

$$\alpha = \frac{S}{y^2}. \quad (2.4)$$

Общая площадь двух кругов

Рассмотрим два круга с радиусами R_1 и R_2 и расстоянием δ между центрами.

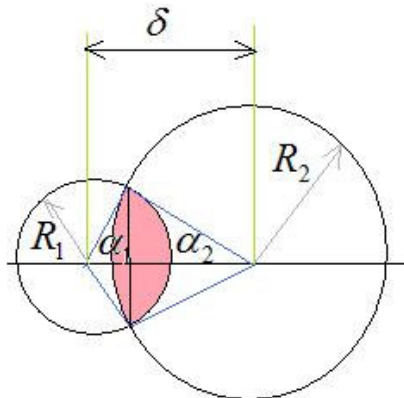


Рис. 2.4. Схема, поясняющая расчет общей площади пересекающихся кругов.

Обозначенные на рис. 2.4 углы α_1 и α_2 могут быть найдены по теореме косинусов:

$$R_2^2 = R_1^2 + \delta^2 - 2R_1\delta \cos \alpha_1 \Rightarrow \cos \alpha_1 = \frac{R_1^2 + \delta^2 - R_2^2}{2R_1\delta}, \quad (2.5)$$

$$R_1^2 = R_2^2 + \delta^2 - 2R_2\delta \cos \alpha_2 \Rightarrow \cos \alpha_2 = \frac{R_2^2 + \delta^2 - R_1^2}{2R_2\delta} \quad (2.6)$$

Искомую общую площадь S двух кругов (на рис. 2.4 закрашена малиновым цветом) прямая, проходящая через точки пересечения

окружностей, делит на S_1 и S_2 . Площади S_1 и S_2 могут быть найдены как разность площадей сектора и треугольника:

$$S_1 = \frac{R_1^2(2\alpha_1 - \sin(2\alpha_1))}{2}, \quad (2.7)$$

$$S_2 = \frac{R_2^2(2\alpha_2 - \sin(2\alpha_2))}{2}. \quad (2.8)$$

Очевидно, что при этом искомая общая площадь рассматриваемых кругов

$$S = S_1 + S_2. \quad (2.9)$$

Рассмотрим канал микроэлектронного коллиматора, имеющий угол наклона Θ к оси Oy . (оси координат и другие обозначения в соответствии с рис. 2.5).

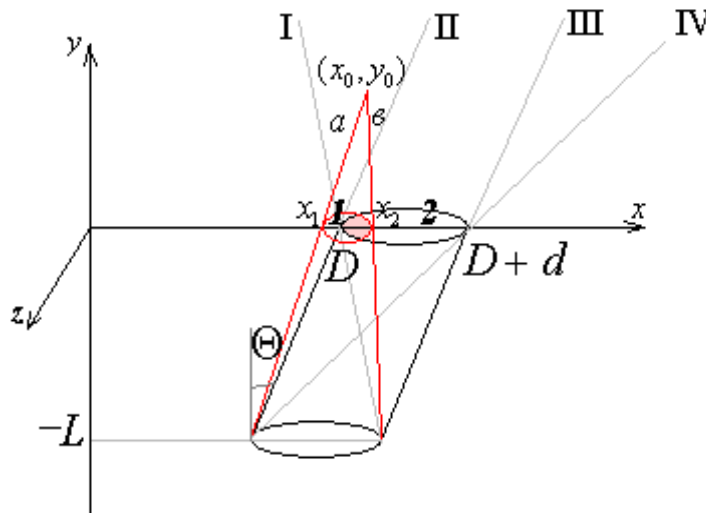


Рис. 2.5. Пояснение к расчету угла сбора отдельного канала микроэлектронного коллиматора.

Отталкиваясь от введенной на рис. 2.5 системы координат, несложно вывести уравнения отмеченных на этом рисунке прямых:

$$\text{I: } y = \frac{x - D}{\text{tg}\Theta - d/L}, \quad (2.10)$$

$$\text{II: } y = \frac{x - D}{\text{tg}\Theta}, \quad (2.11)$$

$$\text{III: } y = \frac{x - D - d}{\text{tg}\Theta}, \quad (2.12)$$

$$\text{IV: } y = \frac{x - D - d}{\text{tg}\Theta + d/L}, \quad (2.13)$$

$$a: y = \frac{L(x - x_0) + y_0(x - D + L\text{tg}\Theta)}{x_0 - D}, \quad (2.14)$$

$$b: y = \frac{L(x - x_0) + y_0(x - D - d + L\text{tg}\Theta)}{x_0 - D - d}. \quad (2.15)$$

Прямые a и b пересекаются с осью Ox в точках x_1 и x_2 :

$$x_1 = \frac{Lx_0 + y_0(D - L\text{tg}\Theta)}{L + y_0}, \quad (2.16)$$

$$x_2 = \frac{Lx_0 + y_0(D + d - L\text{tg}\Theta)}{L + y_0}. \quad (2.17)$$

Угол сбора рассматриваемого канала $\alpha = \frac{S}{y_0^2}$ определяется площадью S

пересечения кругов 1 и 2 . Круг 2 имеет центр в точке $(D + \frac{d}{2})$, а его радиус

$$R = \frac{d}{2}. \quad (2.18)$$

Центр круга 1 :

$$x_c = \frac{x_2 + x_1}{2} = \frac{Lx_0 + y_0(D + d/2 - L\text{tg}\Theta)}{L + y_0}, \quad (2.19)$$

а его радиус

$$r = \frac{x_1 - x_2}{2} = \frac{dy_0}{2(L + y_0)}. \quad (2.20)$$

Расстояние между центрами кругов 1 и 2 :

$$\delta = \left| x_c - D - \frac{d}{2} \right| = \left| \frac{L(x_0 - D - d/2 - y_0\text{tg}\Theta)}{L + y_0} \right|. \quad (2.21)$$

Таким образом, для вычисления угла сбора α (2.4) нужно найти общую площадь кругов с радиусами R (2.18) и r (2.20) и расстоянием между центрами δ (2.21).

Заметим, что когда точка (x_0, y_0) находится между прямыми I и II или между III и IV , то реализуется описанный выше сценарий расчетов угла сбора. Если же точка (x_0, y_0) находится между прямыми II и III , то круг 1

целиком находится внутри 2, и, следовательно,

$$S = \pi r^2 = \frac{\pi d^2 y_0^2}{4(y_0 + L)^2}, \quad (2.22)$$

а угол сбора

$$\alpha = \frac{S}{y_0^2} = \frac{\pi d^2}{4(y_0 + L)^2}. \quad (2.23)$$

Когда точка (x_0, y_0) лежит ниже прямой I или IV, круги 1 и 2 не пересекаются и угол сбора равен нулю.

Таким образом, угол сбора рассчитывался согласно приведенным выше выражениям с помощью кода, реализованного в программе *Matlab*. Функция сбора F рассчитывалась как результат сложения углов сбора каналов, имеющих углы наклона Θ_n , равномерно распределенные в интервале от $-\Omega/2$ до $\Omega/2$, и расстояние $D_n = F * \text{tg}\Theta_n$.

б) Для поликапиллярного коллиматора

Поликапиллярный коллиматор рассматривался как система плотно упакованных стеклянных изогнутых капилляров. Принцип действия этого коллиматора основан на эффекте полного внешнего отражения (ПВО). Излучение, падающее на стенки капилляров под углом, меньшим критического угла ПВО Θ_c , в результате многократных отражений проходит коллиматор и попадает в детектор. Капилляры изогнуты так, что их передние концы направлены в одну точку (фокус коллиматора), а задние - параллельны друг другу.

Функция сбора $F(x, y)$ поликапиллярного коллиматора рассчитывалась как суммарное распределение углов сбора отдельных капилляров. Под углом сбора $\alpha(x, y)$ одного капилляра подразумевался угол, флуоресцентное излучение из которого может пройти через этот канал. Ослабление интенсивности при многократных отражениях в капилляре не учитывалось.

Введем обозначения (см. рис. 2.6 (а)): d – диаметр капилляра, Θ_c –

критический угол ПВО, F – фокусное расстояние, Ω – угол раствора коллиматора, $d_1 = 2F * tg(\Omega/2)$ – входной диаметр.

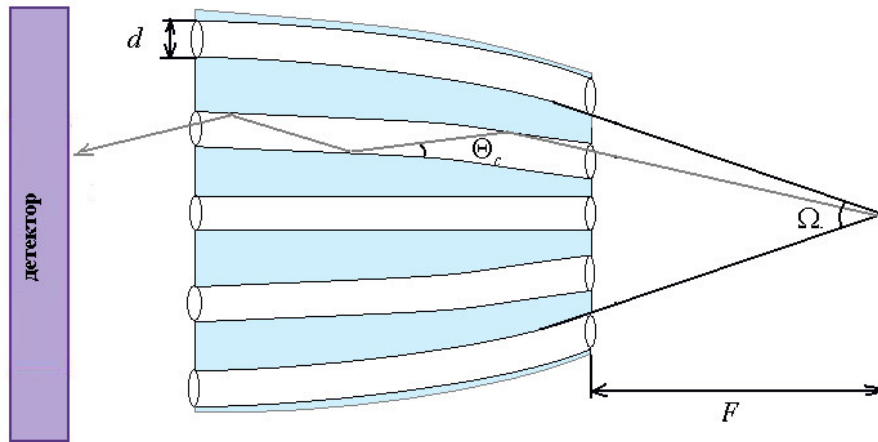


Рис.2.6 (а). Схематическое представление поликапиллярного коллиматора.

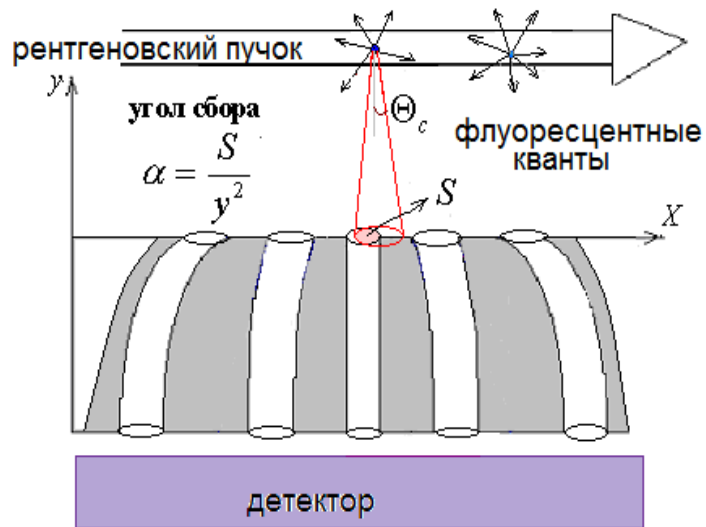


Рис. 2.6 (б). Схема, поясняющая расчет угла сбора поликапиллярного коллиматора.

При условии эффективного захвата излучения (когда радиус кривизны капилляров больше критического $R_{cr} = \frac{2d}{\Theta_c^2}$), можно считать, что сбор излучения изогнутым капилляром аналогичен случаю неизогнутого наклонного капилляра. При этом за угол наклона неизогнутого капилляра

берется угол наклона переднего края изогнутого капилляра.

Для точки наблюдения (x_0, y_0) лучи, для которых может быть выполнено условие ПВО на стенках капилляра, сосредоточены внутри конуса (изображен красным на рис. 2.6 (б)). Вершина конуса находится в точке (x_0, y_0) , ось конуса наклонена к оси Oy под тем же углом, что и капилляр, угол раствора конуса $2\Theta_c$. Угол сбора определяется площадью пересечения кругов S (см. рис. 2.6 (Б)), а именно:

$$\alpha = \frac{S}{y_0^2}. \quad (2.24)$$

Рассмотрим капилляр, имеющий угол наклона Θ (рис. 2.7).

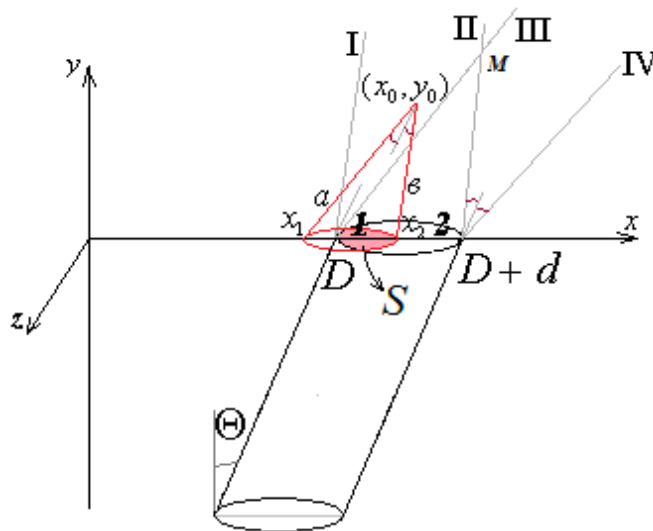


Рис. 2.7. Пояснение к расчету угла сбора отдельного капилляра поликапиллярного коллиматора.

Введя систему координат, как показано на рис. 2.7, нетрудно вывести уравнения отмеченных на этом рисунке прямых:

$$\text{I: } y = \frac{x - D}{\operatorname{tg}(\Theta - \Theta_c)}, \quad (2.25)$$

$$\text{II: } y = \frac{x - D - d}{\operatorname{tg}(\Theta - \Theta_c)}, \quad (2.26)$$

$$\text{III: } y = \frac{x-D}{\text{tg}(\Theta + \Theta_c)}, \quad (2.27)$$

$$\text{IV: } y = \frac{x-D-d}{\text{tg}(\Theta + \Theta_c)}, \quad (2.28)$$

$$a: y = \frac{x-x_0}{\text{tg}(\Theta + \Theta_c)} + y_0, \quad (2.29)$$

$$b: y = \frac{x-x_0}{\text{tg}(\Theta - \Theta_c)} + y_0. \quad (2.30)$$

Прямые a и b пересекаются с осью Ox в точках x_1 и x_2 :

$$x_1 = x_0 - y_0 \text{tg}(\Theta + \Theta_c) \cong x_0 - y_0 \Theta_c - y_0 \text{tg} \Theta, \quad (2.31)$$

$$x_2 = x_0 - y_0 \text{tg}(\Theta - \Theta_c) \cong x_0 + y_0 \Theta_c - y_0 \text{tg} \Theta. \quad (2.32)$$

Угол сбора $\alpha = \frac{S}{y_0^2}$ определяется площадью S пересечения кругов 1 и 2 . Круг

2 , как и в рассмотренном выше случае, имеет центр в точке $(D + \frac{d}{2})$, а его

радиус $R = \frac{d}{2}$. Центр круга 1 :

$$x_c = \frac{x_2 + x_1}{2} = x_0 - y_0 \text{tg} \Theta, \quad (2.33)$$

а радиус этого круга

$$r = \frac{x_1 - x_2}{2} = y_0 \Theta_c. \quad (2.34)$$

Расстояние между центрами окружностей 1 и 2 :

$$\delta = |x_c - D - d/2| = |x_0 - D - d/2 - y_0 \text{tg} \Theta|. \quad (2.35)$$

Таким образом, для вычисления угла сбора α (2.24) нужно найти общую площадь кругов с R (2.18) и r (2.34) и расстоянием между центрами δ (2.35).

Когда точка (x_0, y_0) находится между прямыми I и II, но выше прямой III, или между III и IV, но выше прямой II, то реализуется описанный выше сценарий расчетов угла сбора. Если точка (x_0, y_0) находится между прямыми

II и III ниже точки их пересечения $M\left(D + \frac{d}{2} + \frac{d \text{tg} \Theta}{2\Theta_c}, \frac{d}{2\Theta_c}\right)$, то круг 1 целиком

находится внутри **2**, и, следовательно, общая площадь кругов **1** и **2**

$$S = \pi r^2 = \pi y_0^2 \Theta_c^2, \quad (2.36)$$

а угол сбора

$$\alpha = \frac{S}{y_0^2} = \pi \Theta_c^2. \quad (2.37)$$

Если же точка (x_0, y_0) находится между прямыми II и III выше точки их пересечения **M**, то круг **2** целиком находится внутри **1**, и, следовательно,

$$S = \pi R^2 = \frac{\pi d^2}{4}, \quad (2.38)$$

а угол сбора

$$\alpha = \frac{S}{y_0^2} = \frac{\pi d^2}{4 y_0^2}. \quad (2.39)$$

Когда точка (x_0, y_0) лежит ниже прямой I или ниже IV, окружности **1** и **2** не пересекаются и угол сбора равен нулю.

Таким образом, угол сбора рассчитывался согласно описанному выше алгоритму с помощью реализованного в программе *Matlab* кода. Функция сбора F рассчитывалась как результат сложения углов сбора капилляров, имеющих углы наклона Θ_n , равномерно распределенных в интервале от $-\Omega/2$ до $\Omega/2$, для которых расстояние $D_n = F * \text{tg} \Theta_n$.

2.3. Результаты расчета функций сбора для двух типов коллиматоров и их сравнение

Расчеты проводились для коллиматоров с одинаковым углом раствора $\Omega \approx 0.24$ рад, входным диаметром $d_1 = 1.17$ мм, фокусным расстоянием $F = 4.8$ мм и числом каналов (капилляров) $N = 100$. При расчетах для диаметра канала микроэлектронного коллиматора, как и для ширины капилляра поликапиллярного, использовалось значение $d = 10$ мкм. Для всех представленных результатов длина микроэлектронного коллиматора $L = 12.4$ мм.

Результаты расчета угла сбора микроэлектронного коллиматора и поликапиллярного коллиматора с критическим углом ПВО $\Theta_c = 3.7$ мрад, что соответствует энергии K_α -линии меди 8 кэВ, представлены на рисунке 2.8. Профили этих распределений при $y = 4.8$ мм показаны на рис. 2.9. На нем же приведены выражения, описывающие ширину и высоту этих кривых. Следует отметить, что приведенные для профиля поликапилляра выражения верны только при $y \geq \frac{d}{2\Theta_c}$.

В случае же, когда $y \leq \frac{d}{2\Theta_c}$ (этому условию удовлетворяет область, лежащая выше прямой $y = 1.4$ мм на рис. 2.8.), высота профиля будет $\pi\Theta_c^2$, ширина «плоской верхушки» $d - 2y\Theta_c$, а ширина отличной от нуля части останется $d + 2y\Theta_c$. Не изменится и ширина профиля на половине высоты, она, как и при $y \geq \frac{d}{2\Theta_c}$, будет равна $2y\Theta_c$.

Функции сбора сигнала микроэлектронного коллиматора и поликапиллярного коллиматора для $\Theta_c = 3.7$ мрад показаны на рис. 2.10. На рис. 2.11 показаны срезы вдоль оси Ox этих функций сбора (при значениях y точно равном и близких к значению фокусного расстояния 4.8 мм). На рис. 2.12 показаны продольные (вдоль оси Oy) профили функций сбора.

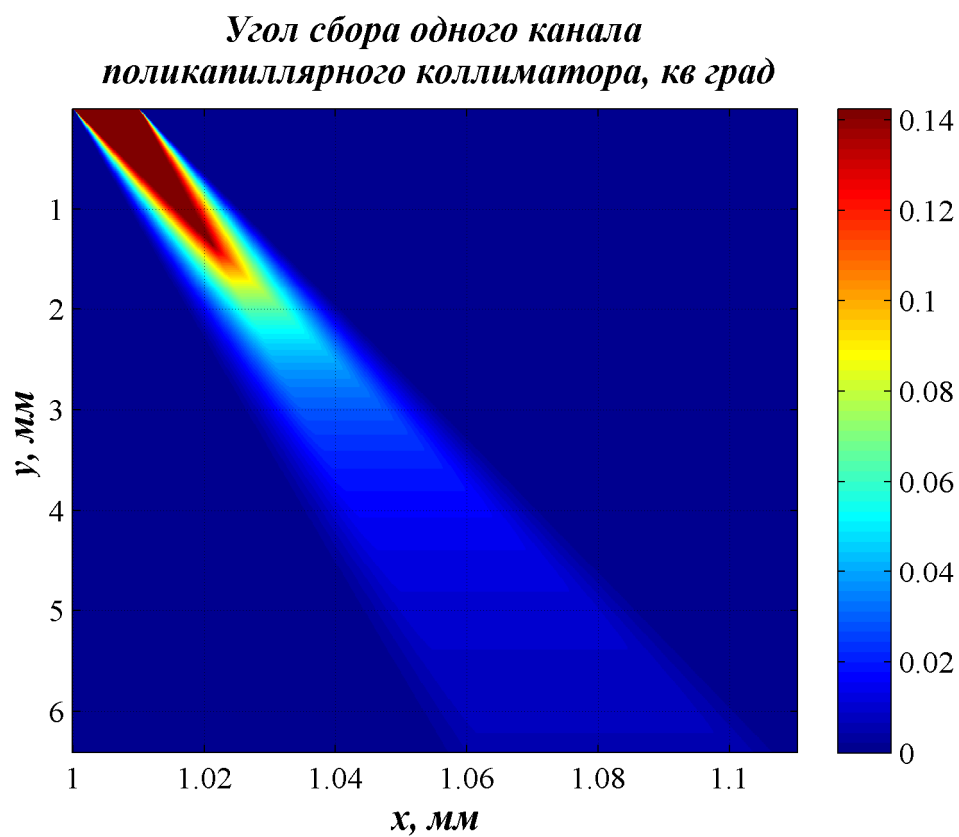
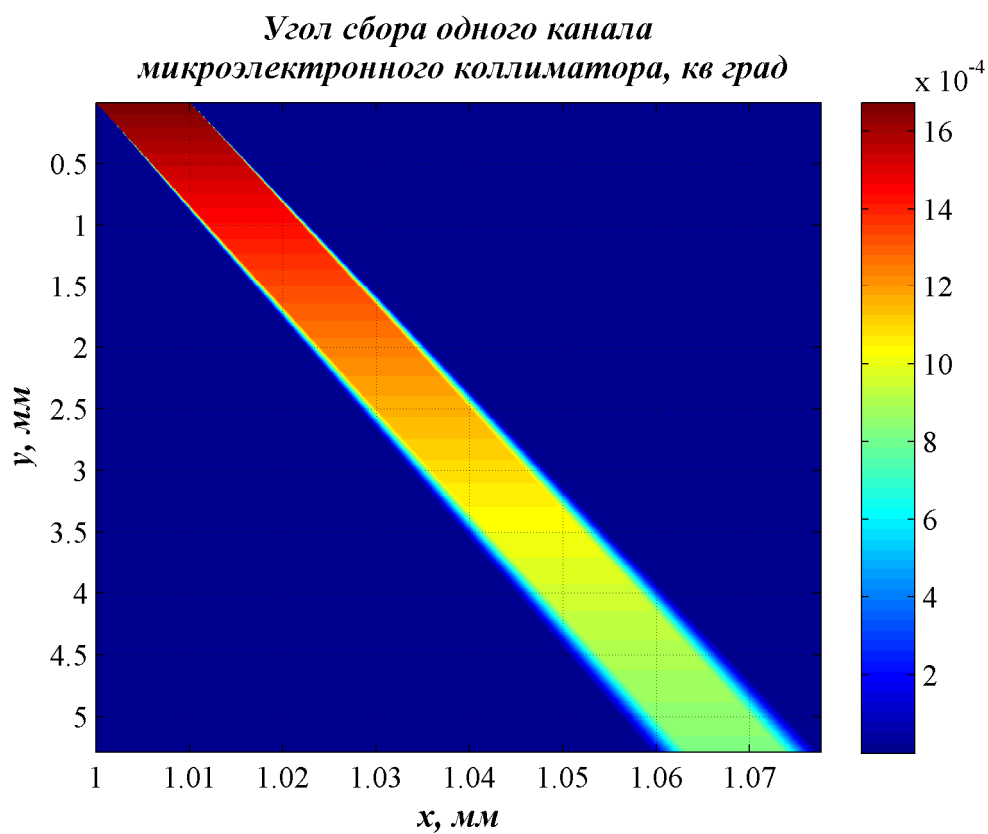


Рис. 2.8. Угол сбора одного канала микроэлектронного коллиматора (вверху) и отдельного капилляра поликапиллярного коллиматора (внизу); $\Theta = 0.01$ рад.

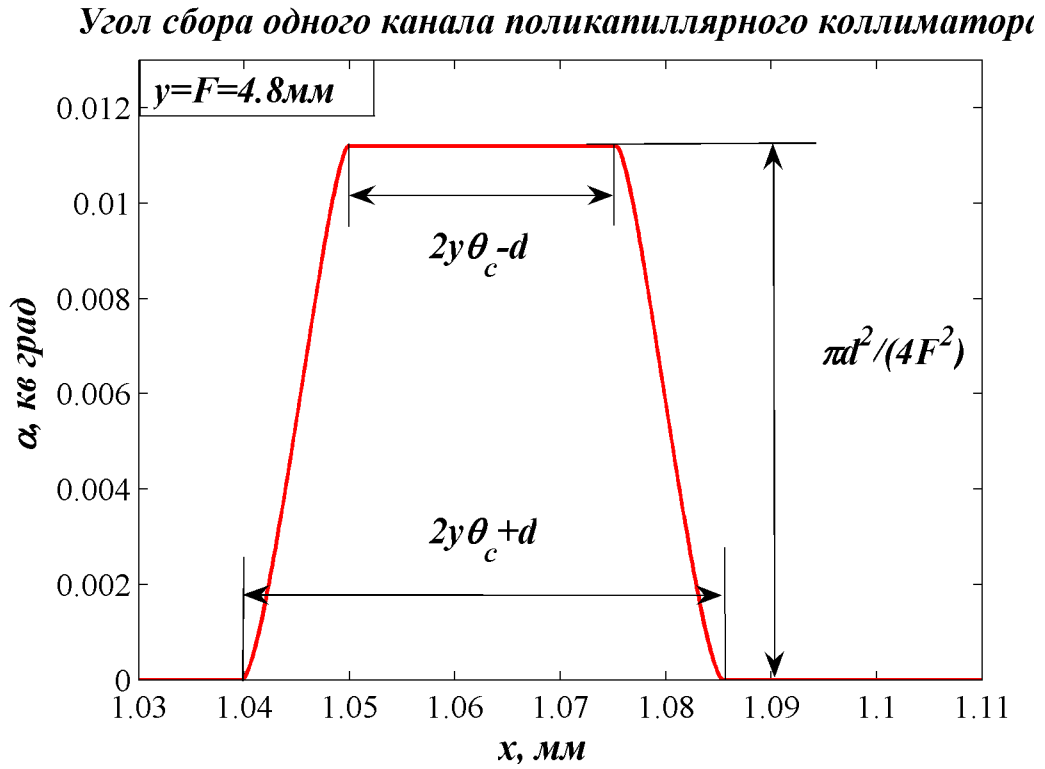
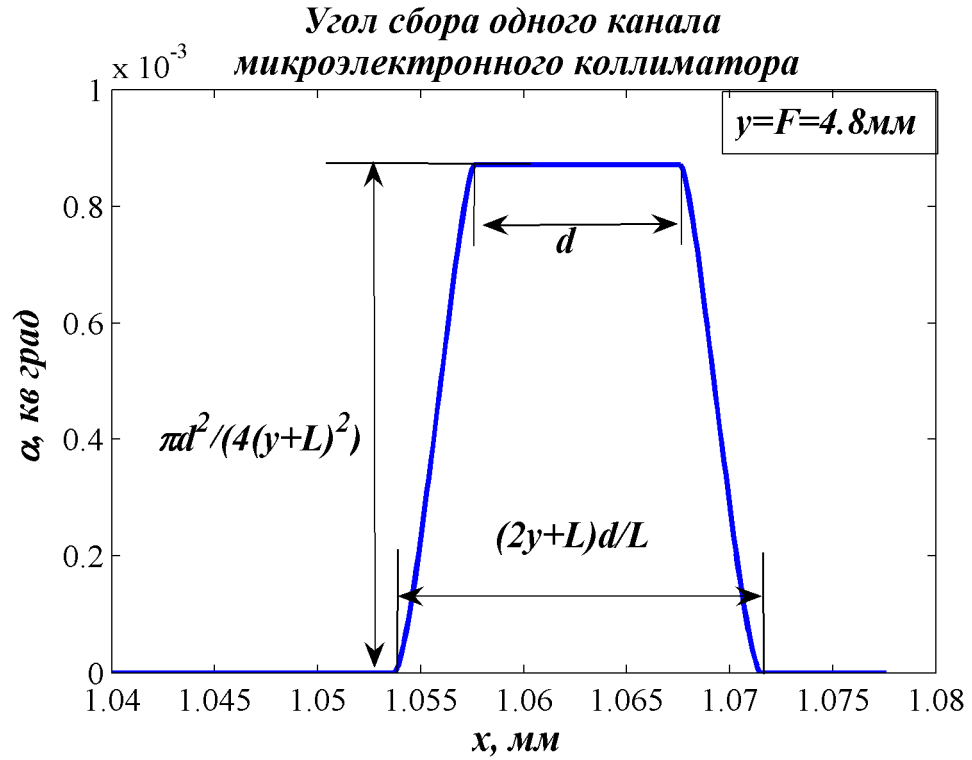
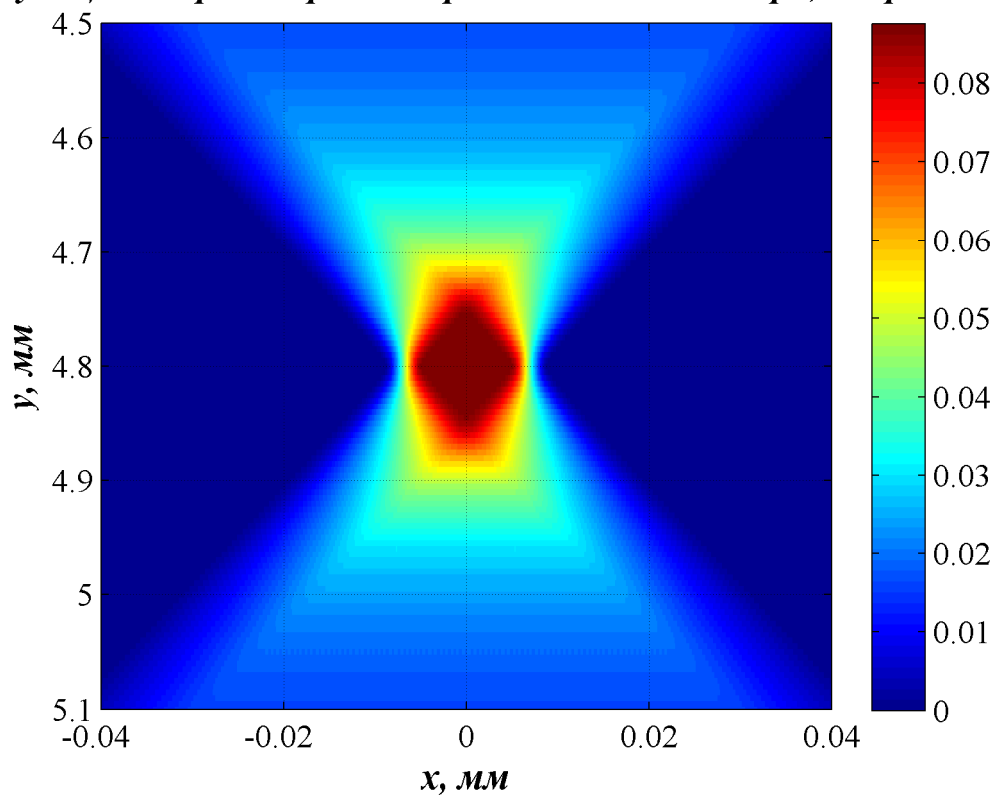


Рис. 2.9. Профиль при $y = 4.8$ мм угла сбора одного канала микроэлектронного коллиматора (вверху) и отдельного капилляра поликапиллярного (внизу).

Функция сбора микроэлектронного коллиматора, кв град



Функция сбора поликапиллярного коллиматора, кв град

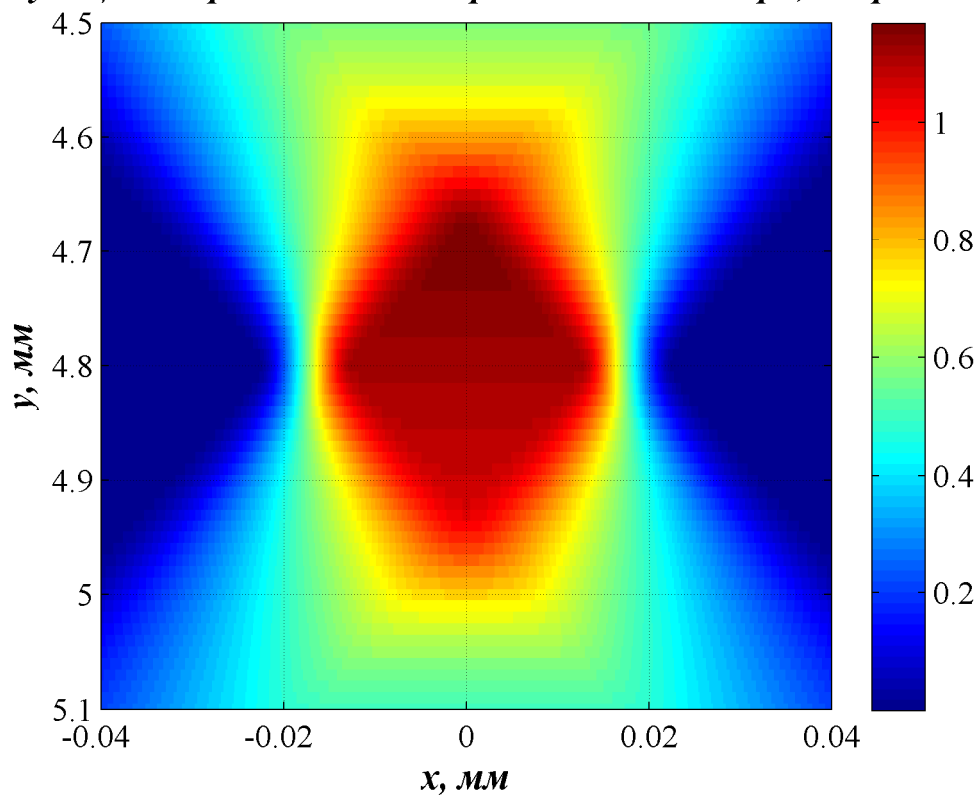


Рис. 2.10. Функция сбора сигнала микроэлектронного коллиматора (вверху) и поликапиллярного коллиматора (внизу).

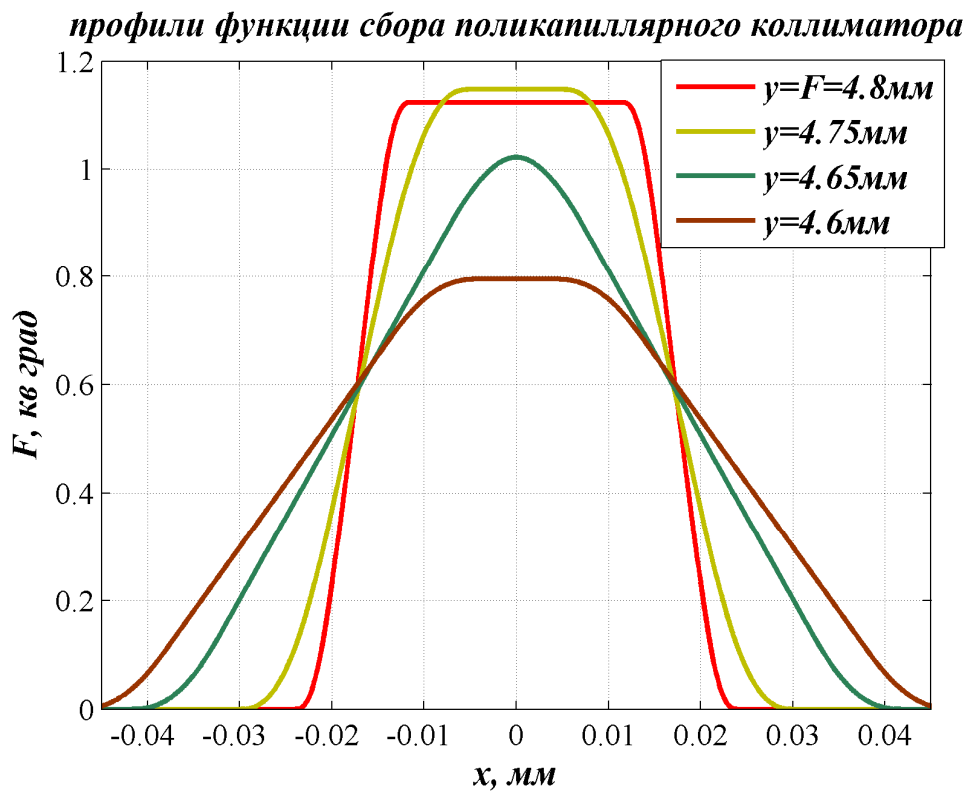
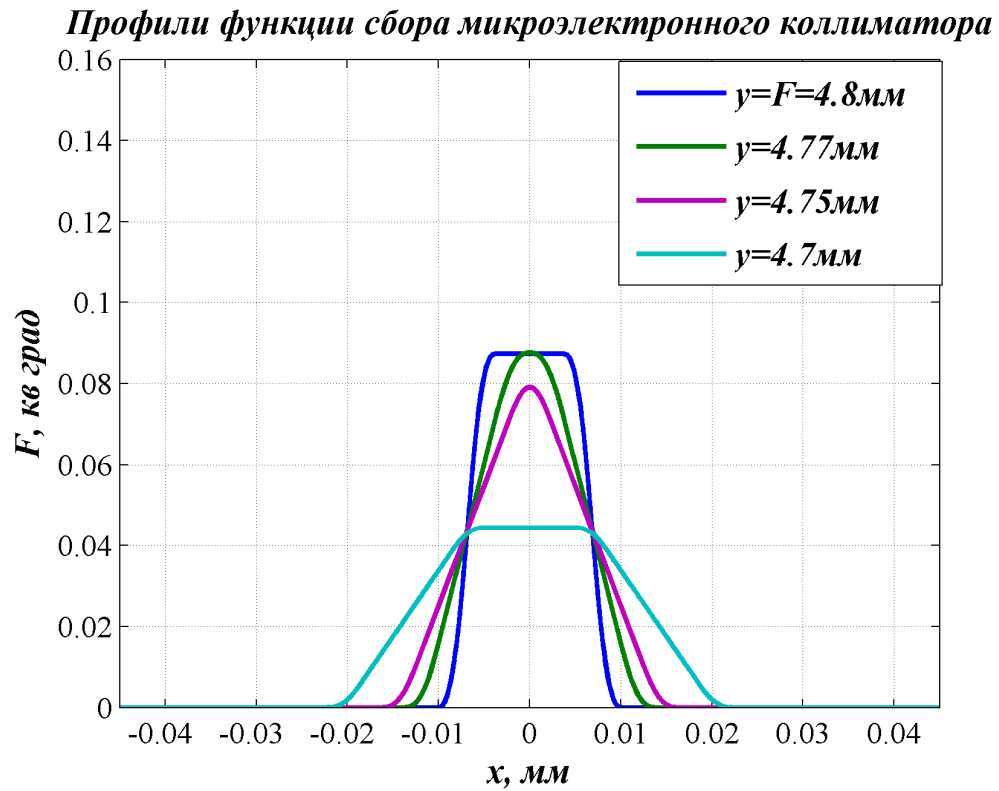


Рис. 2.11. Профили (срезы вдоль оси Ox) функции сбора микроэлектронного коллиматора (вверху) и поликапиллярного (внизу) коллиматора.

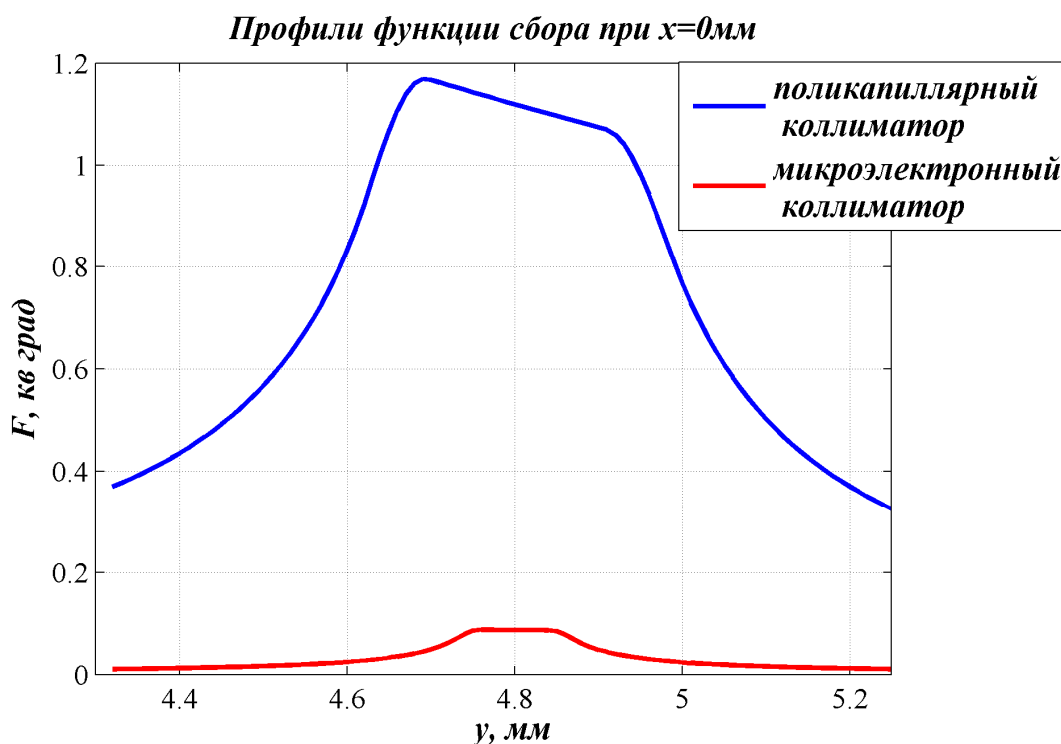


Рис. 2.12. Профили (срезы вдоль оси Oy) при $x = 0.005$ мм функции сбора микроэлектронного (синяя кривая) и поликапиллярного (красная кривая) коллиматоров.

Надо заметить, что профили функции сбора при $y = F$ (синяя и красная кривые на рис. 2.11) имеют тот же вид, что и срезы угла сбора, и их ширина описывается теми же выражениями, что приведены на рис. 2.9 (для высоты профилей верно то же, но с точностью до множителя N , равного числу каналов).

Из рис. 2.10-2.12 видно, что при рассматриваемых значениях характеристик коллиматоров область сбора сигнала (т.е. область, где функция сбора отлична от нуля) у поликапиллярного коллиматора больше, чем у микроэлектронного. То же самое верно и для максимального значения функции сбора.

2.4. Преимущества использования микроэлектронного коллиматора

Выражения, описывающие основные характеристики фокального пятна коллиматоров (а по сути, фокальное пятно и является областью сбора сигнала), приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Сравнение основных параметров функций сбора коллиматоров.

	Поликапиллярный коллиматор		Микроэлектронный коллиматор	
Поперечный размер зоны максимального влияния	$2F\Theta_c - d$	25.5 мкм	d	10 мкм
Поперечный размер зоны полного влияния	$2F\Theta_c + d$	45.5 мкм	$\frac{d}{L}(2F + L)$	18 мкм
Продольный размер зоны максимального влияния	$\frac{2F\Theta_c - d}{\Omega}$	210 мкм	$\frac{d}{\Omega}$	80 мкм
Максимальное значение	$\frac{\pi d^2 N}{4F^2}$	1.12 град ²	$\frac{\pi d^2 N}{4(F + L)^2}$	0.087 град ²

Там же приведены численные значения этих характеристик для таких же параметров коллиматоров, что и результаты на рис. 2.8 - 2.12.

В таблице 2.1 под поперечным размером зоны максимального (или полного) влияния понимается ширина плоской (или, соответственно, ненулевой) части профиля функции сбора при $y = F = 4.8$ мм. Под продольным размером зоны максимального влияния понимается ширина плоского участка профиля при $x = d/2 = 0.005$ мм.

Если поперечный размер фокуса оценивать как ширину на полувысоте профиля функции сбора при $y = F$, то для микроэлектронного коллиматора получится $\frac{d}{L}(F + L)$, а для поликапиллярного $2F\Theta_c$, что совпадает с часто встречающейся в статьях (например, в [118, 119]) оценкой размера фокуса

поликапиллярных линз.

Из данных табл. 2.1 следует, что при одинаковых d , F , Ω и N микроэлектронный коллиматор имеет *меньший* поперечный размер фокуса, чем поликапилляр, если выполняется условие

$$\frac{d}{L}(F + L) < 2F\Theta_c, \quad (2.40)$$

а продольный размер зоны максимального влияния меньше при

$$d < 2F\Theta_c - d. \quad (2.41)$$

Условия (2.40) и (2.41) удобнее привести к виду

$$\frac{d}{L} < \Theta_c \frac{2F}{(F + L)}, \quad (2.42)$$

$$d < F\Theta_c. \quad (2.43)$$

В выражении (2.42) множитель $\frac{2F}{(F + L)}$ меньше единицы при $F < L$. Поэтому

удобно условие (2.42) заменить более строгим (но менее громоздким) условием

$$\frac{d}{L} < \Theta_c, \quad (2.44)$$

дополнив его условием

$$F < L. \quad (2.45)$$

При выполнении двух неравенств (2.44) и (2.45) условие (2.43) заведомо выполнится.

Таким образом, можно сделать такой важный вывод, что микроэлектронный коллиматор имеет меньший размер фокуса, чем поликапилляр, если $d/L < \Theta_c$ и $F < L$. В то же время, при равных d , F и N , максимальное значение функции сбора у него меньше, чем у поликапилляра, при любом значении L , однако это максимальное значение увеличивается с уменьшением L , чего можно добиться, используя сильно поглощающие материалы для матрицы. Также этот недостаток может быть скомпенсирован за счет увеличения числа каналов.

2.4.1. Независимость функции сбора коллиматора от энергии флуоресцентных квантов

Еще одним преимуществом микроэлектронного коллиматора по сравнению с поликапиллярным является то, что его функция сбора не зависит от длины волны излучения. Функция сбора поликапиллярного коллиматора зависит от критического угла ПВО, а значит, и от энергии флуоресцентных квантов (для стекла $\Theta_c \approx 30 \text{ эВ}/E$, где E – энергия излучения). Зависимость функции сбора поликапилляра от энергии иллюстрирует рис. 2.13, на котором показаны профили угла сбора для коллиматора данного типа при $y = 4.8 \text{ мм}$ (y – расстояние от края коллиматора) для энергий, соответствующих K_α -линиям железа, меди и селена, а также приведен результат для коллиматора, созданного методами микроэлектроники.

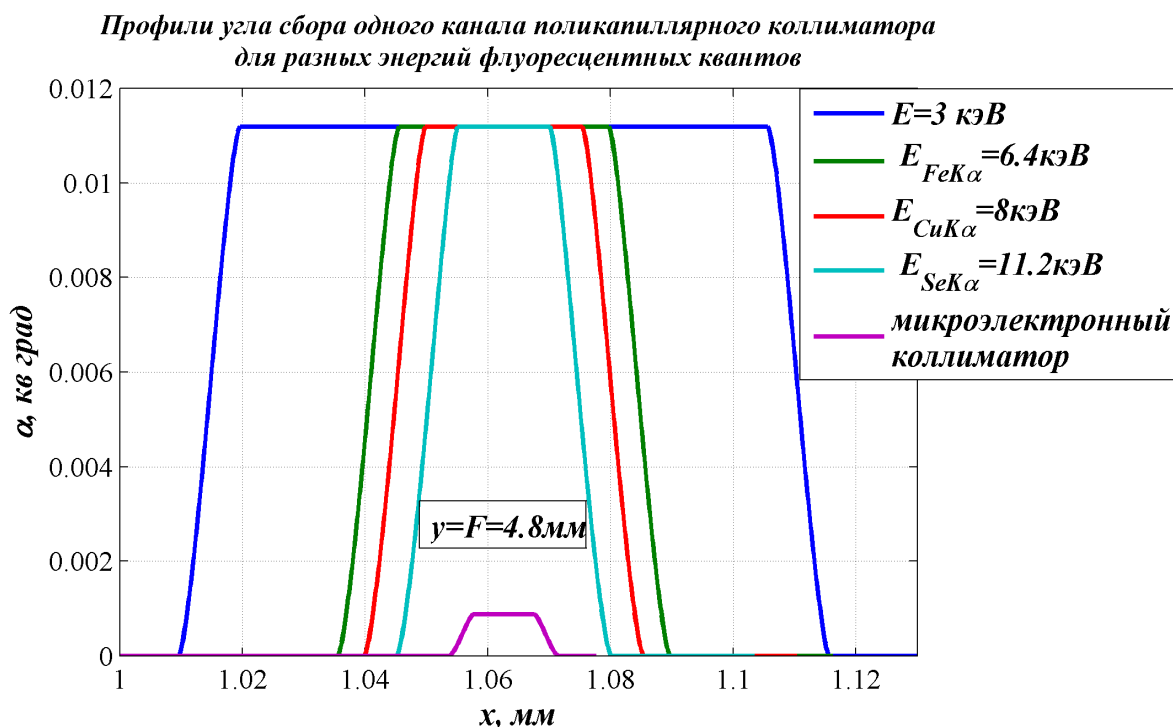


Рис. 2.13. Профили (срезы вдоль оси Oy) угла сбора поликапиллярного коллиматора, рассчитанные для разных энергий флуоресцентных квантов. Синяя кривая – профиль угла сбора микроэлектронного коллиматора.

Значения критического угла ПВО, соответствующие энергиям K_{α} -линий этих элементов, приведены в таблице 2.2.

Таблица 2.2. Значения критического угла ПВО для некоторых энергий флуоресцентных квантов.

	E , кэВ	Θ_c , мрад
$FeK\alpha$	6.46	4.6
$CuK\alpha$	8	3.7
$SeK\alpha$	11.2	2.6

Поэтому в рентгенофлуоресцентном эксперименте, когда с использованием коллиматора регистрируется протяженный (например, 3-23 кэВ в [107]) энергетический спектр, требуется знать функцию сбора поликапиллярного коллиматора и вносить поправки в анализ регистрируемого спектра. Важно подчеркнуть, что в случае коллиматора, созданного методами микроэлектроники, функция сбора сигнала не зависит от энергии излучения. Это верно только в том случае, если доля квантов, проходящих через коллиматор за счет явления ПВО, пренебрежимо мала.

2.4.2. Оценка доли излучения, проходящего через коллиматор в результате явления полного внешнего отражения

Оценим, какой вклад в угол сбора микроэлектронного коллиматора вносят кванты, проходящие через коллиматор в результате явления ПВО от стенок каналов. Чтобы оценить относительный вклад ПВО, достаточно рассмотреть угол сбора одного канала. Для простоты будем рассматривать центральный канал.

В коллиматоре, созданном методами микроэлектроники (методы создания обсуждаются в первой главе), отражение от стенок каналов сильно подавлено из-за рассеяния на шероховатостях. Среднеквадратичный размер шероховатостей может достигать величины $\sigma \approx 10-50$ нм.

Рассеяние на шероховатостях описывает фактор Дебая-Валлера (рис. 2.14). При этом коэффициент отражения выражается следующим образом:

$$R = R_F \exp\left(-\left(\frac{4\pi\sigma\theta}{\lambda}\right)^2\right). \quad (2.46)$$

Здесь R_F - френелевский коэффициент отражения, который описывает отражение от гладкой (но поглощающей) поверхности.

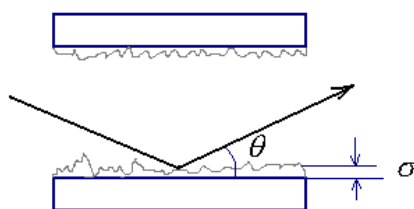


Рис. 2.14. Пояснение величин в факторе Дебая-Валлера.

Когда поглощение мало, можно приближенно считать, что $R_F = 1$, если угол падения $\theta \leq \Theta_c$ (Θ_c - критический угол ПВО) и $R_F = 0$ при $\theta > \Theta_c$.

Множитель $\exp\left(-\left(\frac{4\pi\sigma\theta}{\lambda}\right)^2\right)$ есть фактор Дебая-Валлера, где λ - длина волны излучения, θ - угол падения по отношению к поверхности, σ - среднеквадратичная высота шероховатостей.

Обозначим через Θ_m угол, при котором коэффициент отражения R (2.46) уменьшается в 10 раз за счет влияния фактора Дебая-Валлера:

$$\exp\left(-\left(\frac{4\pi\sigma\Theta_m}{\lambda}\right)^2\right) = 0.1 \Rightarrow \Theta_m = \frac{\sqrt{\ln 10} \lambda}{4\pi\sigma}. \quad (2.47)$$

Поскольку угол Θ_m зависит от λ , разные длины волн протяженного ($\lambda = 4.1 \div 0.5 \text{ \AA}$) флуоресцентного спектра будут по-разному рассеиваться на шероховатостях. Значения Θ_m для разных длин волн приведены в таблице 2.3. В этой же таблице приведены значения критического угла ПВО для стекла, и видно, что угол Θ_m меньше критического угла ПВО Θ_c для всего

рассматриваемого диапазона длин волн.

Материал поглощающей матрицы коллиматора должен быть более тяжелым (т.е. с большим номером Z в таблице Менделеева), чем материалы, содержащиеся в исследуемом образце. Критический угол ПВО растет с увеличением номера Z , поэтому можно ожидать, что критический угол ПВО для материала коллиматора будет больше приведенных в таблице 2.3 значений Θ_c и превысит значения Θ_m для всего рассматриваемого диапазона длин волн.

Таблица 2.3. Значения Θ_m и критического угла ПВО для некоторых длин волн; $\sigma = 50$ нм.

Е, кэВ	$\lambda, \text{Å}$	Θ_m , мрад	Θ_c для стекла, мрад
3	4.1	0.99	10
6.46	1.9	0.46	4.68
8	1.54	0.37	3.7
11.2	1.1	0.26	2.6
23	0.5	0.12	1.3

Таким образом, при учете доли квантов, прошедших через коллиматор в результате ПВО, основную роль играет угол Θ_m , а не критический угол ПВО.

При оценках будем считать, что излучение, попавшее на стенки канала коллиматора под углом $\theta \leq \Theta_m$, отражается (с коэффициентом отражения 1) и попадает в детектор, а излучение, падающее под углом $\theta > \Theta_m$, рассеивается и в детектор не попадает.

Для случая, когда ширина каналов d и длина коллиматора L удовлетворяют соотношению $\frac{d}{L} < \Theta_m$, расчет угла сбора с учетом ПВО полностью аналогичен расчету угла сбора для центрального канала поликапиллярного коллиматора (с точностью до замены Θ_c на Θ_m). Подробно об этом написано в пункте 2.2. настоящей главы. Там же

содержится описание расчетов для микроэлектронного коллиматора без учета ПВО. Для случая $\frac{d}{L} < \Theta_m$ на рис. 2.15 показан профиль угла сбора центрального канала микроэлектронного коллиматора. Профиль рассчитан для следующих параметров: $d = 10$ мкм, $L = 12.4$ мм ($d/L = 0.8$ мрад) и $\Theta_m = 0.99$ мрад.

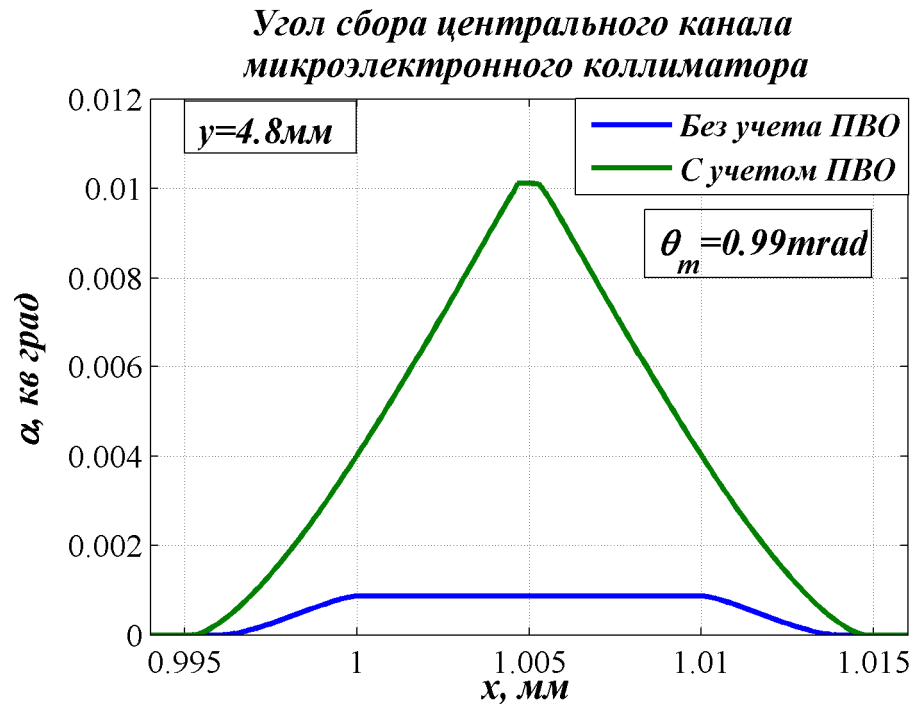


Рис. 2.15. Профиль угла сбора центрального канала микроэлектронного коллиматора.
Случай $d/L < \Theta_m$.

Будем обозначать через $\alpha_{+ter}(x, y)$ угол сбора центрального канала с учетом ПВО, $\alpha(x, y)$ — угол сбора без учета ПВО, а также интегральный по координате x угол сбора:

$$a(y) = \int \alpha(x, y) dx, \quad (2.48)$$

и относительный интегральный по x угол сбора:

$$A = \frac{a_{+ter}(y) - a(y)}{a_{+ter}(y)}. \quad (2.49)$$

По аналогии с выражениями на рис. 2.8, профиль угла сбора с учетом ПВО (зеленая кривая на рис. 2.15) имеет высоту $\frac{\pi d^2}{4y^2}$, ширину плоской

верхушки $(2y\Theta_m - d)$ и полную ширину $(2y\Theta_m + d)$. А при $y < \frac{d}{2\Theta_m}$ его высота $\pi\Theta_m^2$, ширина плоской верхушки $(d - 2y\Theta_m)$.

Профиль угла сбора без учета ПВО (синяя кривая на рис. 2.15) имеет высоту $\frac{\pi d^2}{4(y+L)^2}$, ширину плоской верхушки d и полную ширину $(2y\frac{d}{L} + d)$.

Поэтому относительный интегральный по x вклад ПВО в угол сбора можно оценить следующим образом (считая оба профиля на рис. 2.15. трапециями):

$$A = \frac{2y\Theta_m * \frac{\pi d^2}{4y^2} - (y\frac{d}{L} + d)\frac{\pi d^2}{4(y+L)^2}}{2y\Theta_m * \frac{\pi d^2}{4y^2}} = 1 - \frac{d/L}{2\Theta_m} \frac{y}{y+L}, \quad \text{при } y \geq \frac{d}{2\Theta_m}, \quad (2.50)$$

$$A = \frac{d * \pi\Theta_m^2 - (y\frac{d}{L} + d)\frac{\pi d^2}{4(y+L)^2}}{d * \pi\Theta_m^2} = 1 - \left(\frac{d/L}{2\Theta_m}\right)^2 \frac{L}{(y+L)}, \quad \text{при } y < \frac{d}{2\Theta_m}. \quad (2.51)$$

Величина A схематически показана на рис. 2.16. Она возрастает с увеличением y при $y < \frac{d}{2\Theta_m}$ и убывает при $y \geq \frac{d}{2\Theta_m}$.

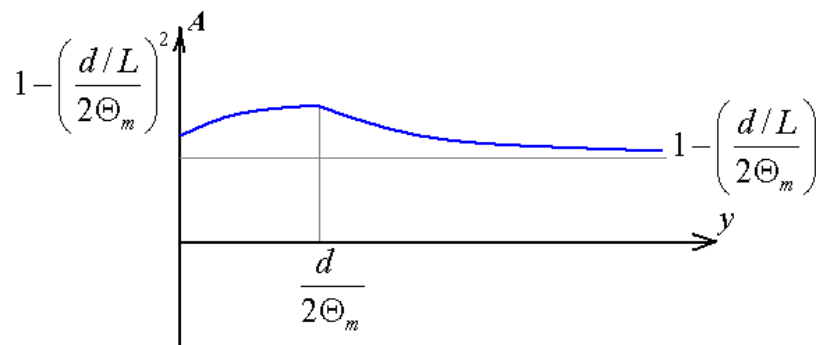


Рис. 2.16. Относительный интегральный по x вклад ПВО в угол сбора в зависимости от y . Случай $d/L < \Theta_m$.

Проанализируем выражения (2.50)-(2.51). При $y = 0$ величина относительного

интегрального по x угла сбора $A = 1 - \left(\frac{d/L}{2\Theta_m} \right)^2 \geq 75\%$, поскольку $\frac{d/L}{\Theta_m} < 1$. И при

$y \rightarrow \infty$ величина A стремится к $A = 1 - \left(\frac{d/L}{2\Theta_m} \right)^2 \geq 50\%$.

Отсюда следует, что в случае $\frac{d}{L} < \Theta_m$ относительный интегральный по x вклад ПВО в угол сбора никак не меньше 50% и полным внешним отражением пренебрегать нельзя.

Однако для коллиматора с каналами ширины $d = 10$ мкм и длины $L = 12.4$ мм ($d/L = 0.8$ мрад) для большей части приведенных в табл. 2.3 значений Θ_m реализуется случай $d/L > \Theta_m$. Этот случай требует дополнительных (по сравнению с приведенными в п. 2.2 этой главы) расчетов.

Для этих расчетов снова потребуется оперировать с кругами, подобным тем, что были описаны в п. 2.2. Угол сбора для точки (x_0, y_0) определяется взаимным расположением кругов **1**, **2** и **3**. (см рис. 2.17). А именно, угол сбора $\alpha = \frac{S}{y_0^2}$, где S - площадь объединения кругов **2** и **3**, лежащая внутри круга **1**.

Круг **1** имеет центр в точке $(D + \frac{d}{2})$, и его радиус $R = \frac{d}{2}$. Круг **2** является местом пересечения с плоскостью xOz лучей, исходящих из точки (x_0, y_0) , которые могут пройти через канал «на просвет». Круг **3** является местом пересечения с плоскостью xOz лучей, исходящих из точки наблюдения (x_0, y_0) , которые могут испытать ПВО на стенках канала.

Центр круга **2** $x_c = \frac{Lx_0 + y_0(D + d/2)}{L + y_0}$, а его радиус $r = \frac{dy_0}{2(L + y_0)}$. Круг **2** имеет

центр в точке x_0 , его радиус $r_1 = y_0 \Theta_m$.

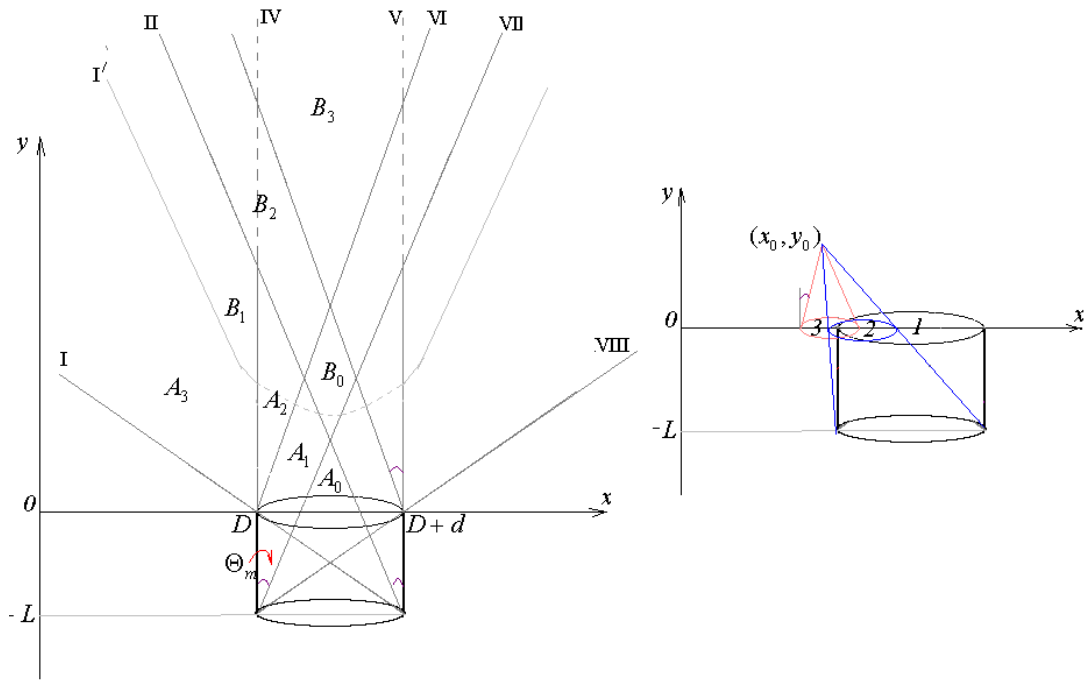


Рис. 2.17. Пояснения с расчету угла сбора центрального канала для случая $\frac{d}{L} > \Theta_m$.

Прямые *I* - *VIII* на рис. 2.17 делят область сбора на подобласти $A_0, A_1, A_2, A_3, B_0, B_1, B_2, B_3$, для каждой из которых расчет угла сбора будет различаться. Будем рассматривать расчеты только для полуплоскости $x \leq D+d/2$, так как ясно, что для $x > D+d/2$ решение симметрично.

Уравнения прямых *I* – *VIII*:

$$\text{I: } y = \frac{D-x}{d/L}, \quad (2.52)$$

$$\text{II: } y = \frac{D+d-x}{\Theta_m} - L, \quad (2.53)$$

$$\text{III: } y = \frac{D+d-x}{\Theta_m}, \quad (2.54)$$

$$\text{IV: } x = D, \quad (2.55)$$

$$\text{V: } x = D+d, \quad (2.56)$$

$$\text{VI: } y = \frac{x-D}{\Theta_m}, \quad (2.57)$$

$$\text{VII: } y = \frac{x-D}{\Theta_m} - L, \quad (2.58)$$

$$\text{VIII: } y = \frac{x-D-d}{d/L}. \quad (2.59)$$

На рис. 2.18 показано взаимное расположение кругов **1**, **2** и **3** для каждой из областей $A_0 - B_3$.

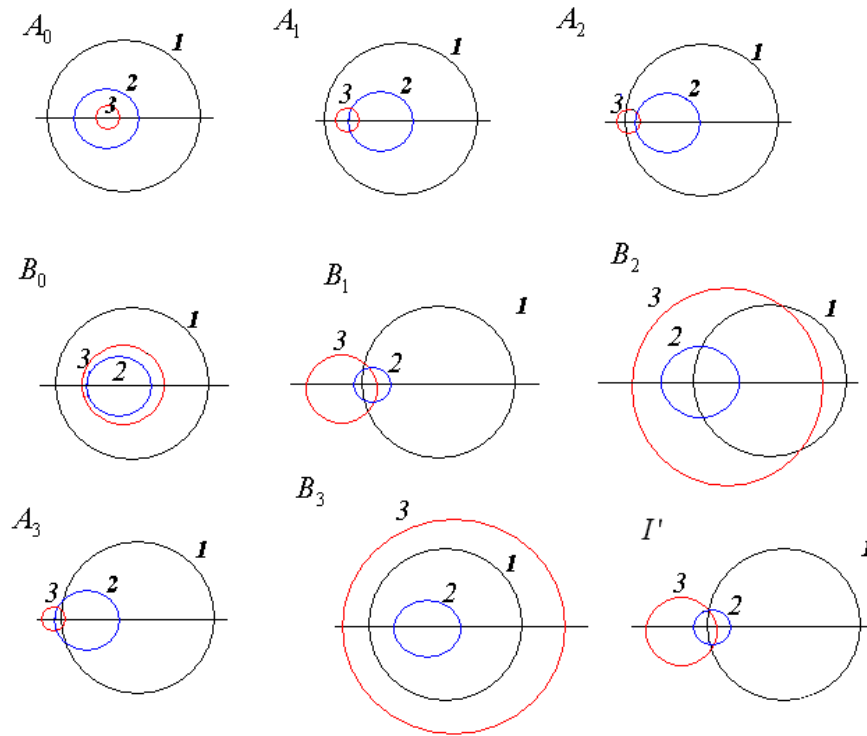


Рис. 2.18. Взаимное расположение кругов **1**, **2** и **3** для разных областей.

Пусть S_{13} - общая площадь кругов **1** и **3**, S_{12} - общая площадь кругов **1** и **2**, S_{23} - общая площадь кругов **2** и **3**, а S_{123} - общая площадь всех трех кругов.

Тогда из поясняющего рис. 2.18 ясно, как определяется S и угол сбора $\alpha = S/y_0^2$ для каждой из подобластей:

$$A_0: S = \pi r^2 \Rightarrow \alpha = \frac{\pi d^2}{4(y_0 + L)^2}, \quad (2.60)$$

$$A_1: S = \pi r^2 + \pi r_1^2 - S_{23}, \quad (2.61)$$

$$A_2: S = \pi r^2 + S_{13} - S_{23}, \quad (2.62)$$

$$A_3: S = S_{12}, \quad (2.63)$$

$$B_0: S = \pi r_1^2 \Rightarrow \alpha = \pi \Theta_c^2, \quad (2.64)$$

$$B_1: S = S_{12} + S_{13} - S_{123}, \quad S_{123} = S_{23} - (\pi r^2 - S_{12}), \quad (2.65)$$

$$B_2: S = S_{13}, \quad (2.66)$$

$$B_3: S = \pi R^2 \Rightarrow \alpha = \frac{\pi d^2}{4y_0^2}. \quad (2.67)$$

И, наконец, отметим, что кривая I' соответствует случаю, когда все три круга I , 2 и 3 пересекаются в одной точке. Уравнение этой кривой находится из системы уравнений:

$$\begin{cases} (x - x_1)^2 + z^2 = r_1^2 \\ (x - x_2)^2 + z^2 = r^2 \\ (x - D - d/2)^2 + z^2 = R^2 \end{cases}. \quad (2.68)$$

Откуда получается, что

$$\frac{(x - D - d/2)^2}{\Theta_m^2} - (y + L/2)^2 = \frac{L^2}{4} \left(\left(\frac{d/L}{\Theta_m^2} \right)^2 - 1 \right), \quad (2.69)$$

то есть кривая I' представляет собой гиперболу, ее асимптоты

$$y_{1,2} = -L/2 \pm \frac{x - D - d/2}{\Theta_m}. \quad (2.70)$$

Результаты расчета представлены на рис. 2.19 для угла сбора микроэлектронного коллиматора с учетом (α_{+ter}) и без учета ПВО (α). Ширина канала $d = 10$ мкм, длина коллиматора $L = 12.4$ мм и угол $\Theta_m = 0.26$ мрад, что соответствует длине волны $\lambda = 1.1 \text{ \AA}$ и $\sigma = 50$ нм. На рис. 2.20 показана разность α_{+ter} и α , а также относительный вклад ПВО в угол сбора $\frac{\alpha_{+ter}(x, y) - \alpha(x, y)}{\alpha_{+ter}(x, y)}$. Видно, что для значения $\Theta_m = 0.26$ мрад относительный вклад ПВО в угол сбора не превышает 60%.

Вклад явления ПВО для разных длин волн удобнее характеризовать, рассматривая интегральный по x угол сбора $a_{+ter}(y) = \int \alpha_{+ter}(x, y) dx$ (рис. 2.21). Относительный вклад ПВО в интегральный по x угол сбора $(a_{+ter} - a)/a_{+ter}$ показан на рис. 2.22 для значений Θ_m , равных 0.46, 0.37, 0.26 и 0.12 мрад,

что соответствует энергиям 6.4 , 8, 11.2 и 23 кэВ и высотам шероховатостей $\sigma = 50$ нм.

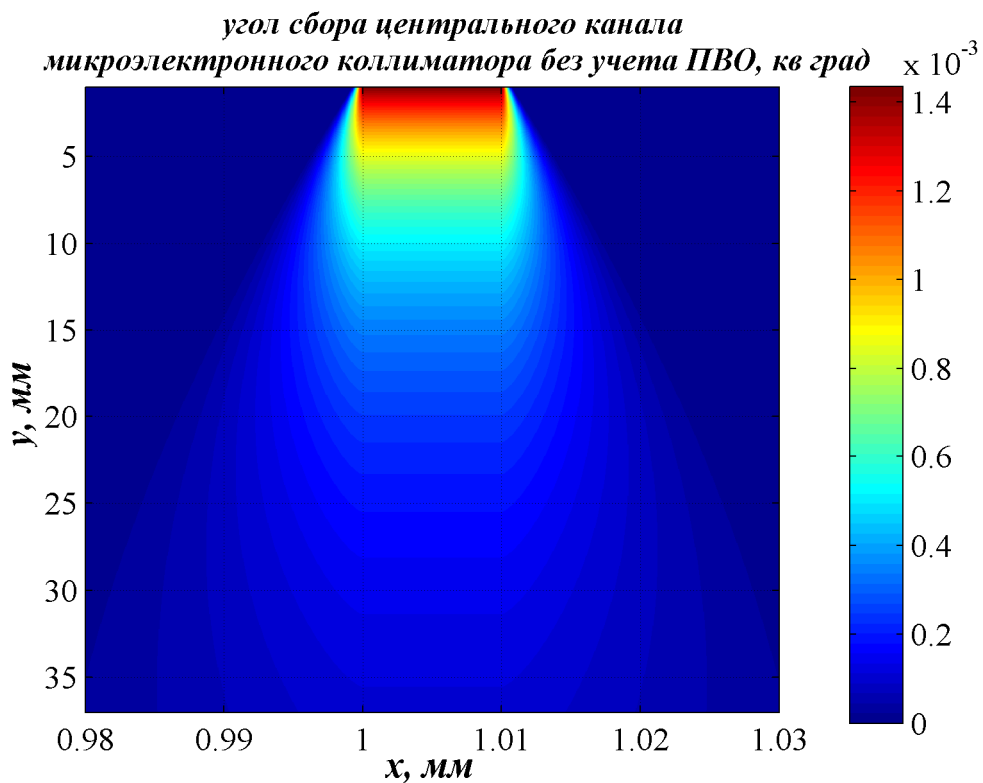
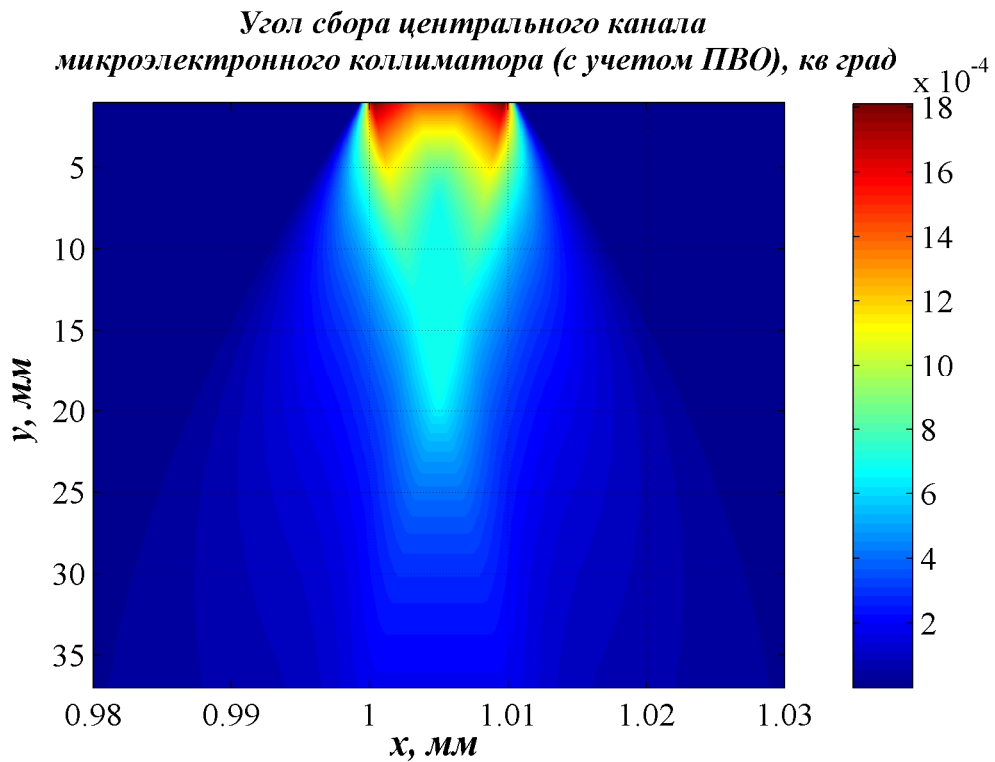


Рис. 2.19. Угол сбора $\alpha_{+ter}(x, y)$ центрального канала микроэлектронного коллиматора с учетом явления ПВО (вверху) и угол $\alpha(x, y)$ без учета ПВО (внизу).

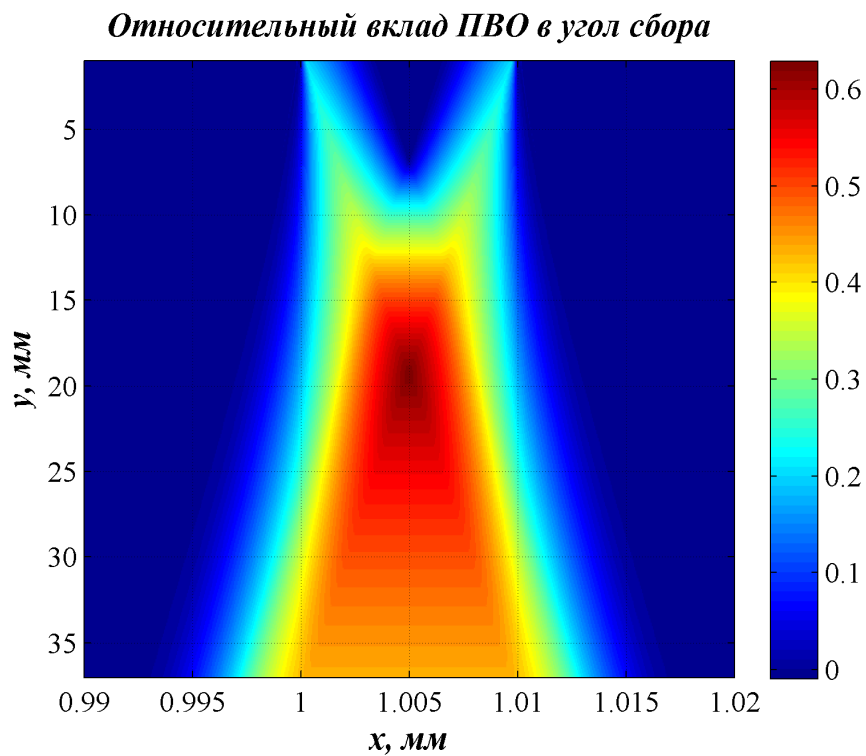
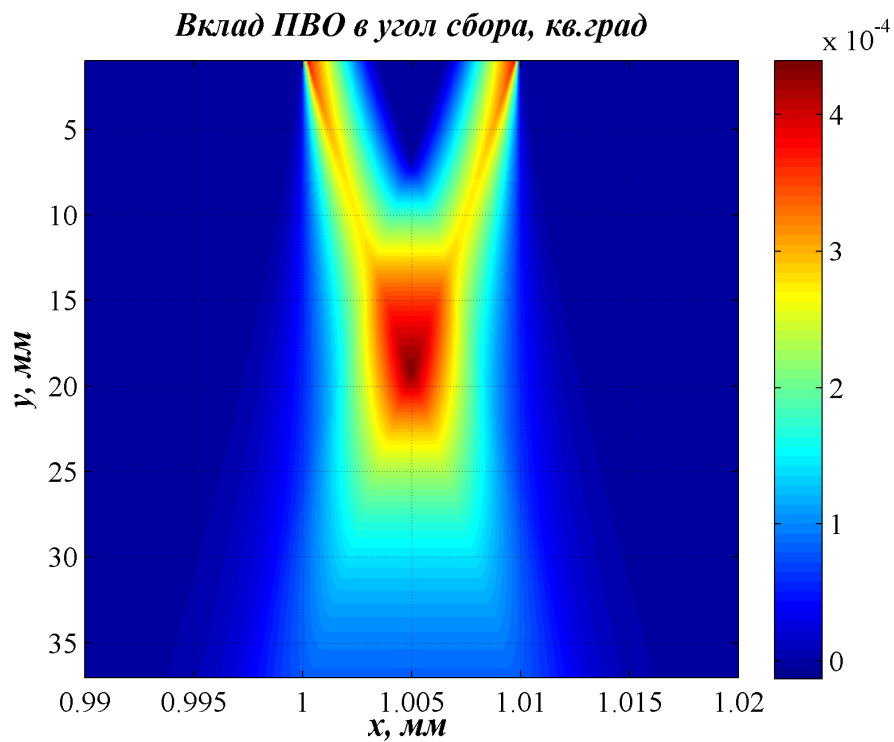


Рис. 2.20. Разность углов сбора $\alpha_{+ter}(x, y) - \alpha(x, y)$ с учетом ПВО и без учета (вверху) и относительный вклад $\frac{\alpha_{+ter}(x, y) - \alpha(x, y)}{\alpha_{+ter}(x, y)}$ явления ПВО в угол сбора микроселектронного коллиматора (внизу).

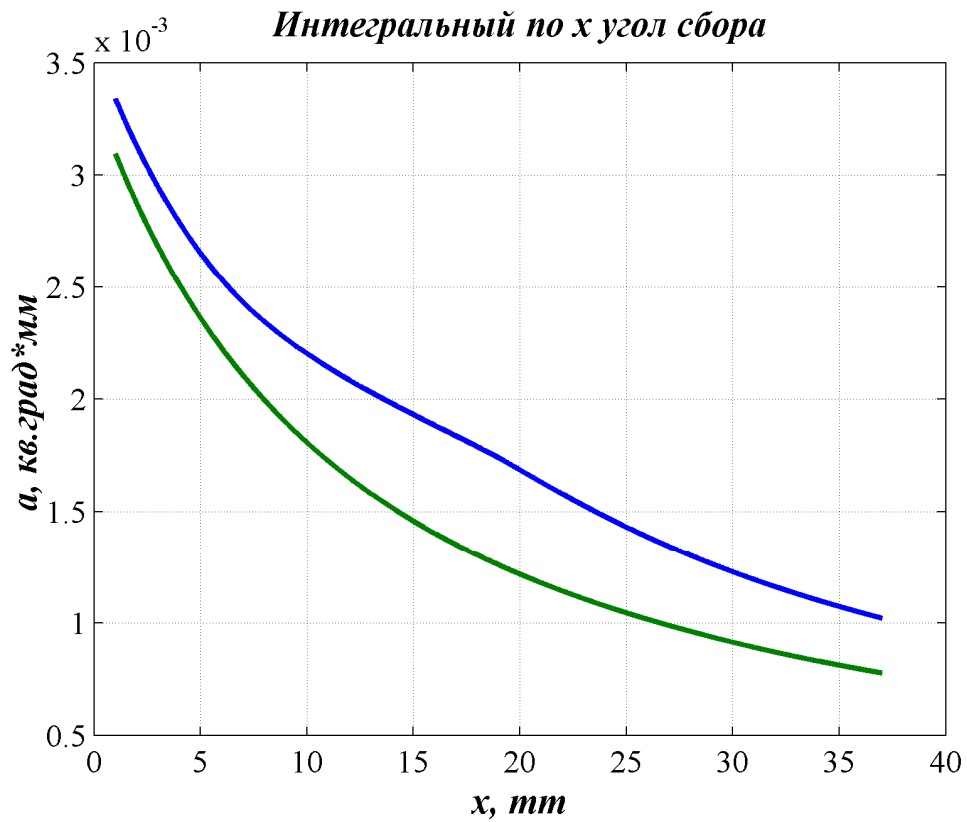


Рис. 2.21. Интегральный по координате x угол сбора $a(y)$ с учетом явления ПВО и без учета ПВО; $\Theta_m = 0.26$ мрад.

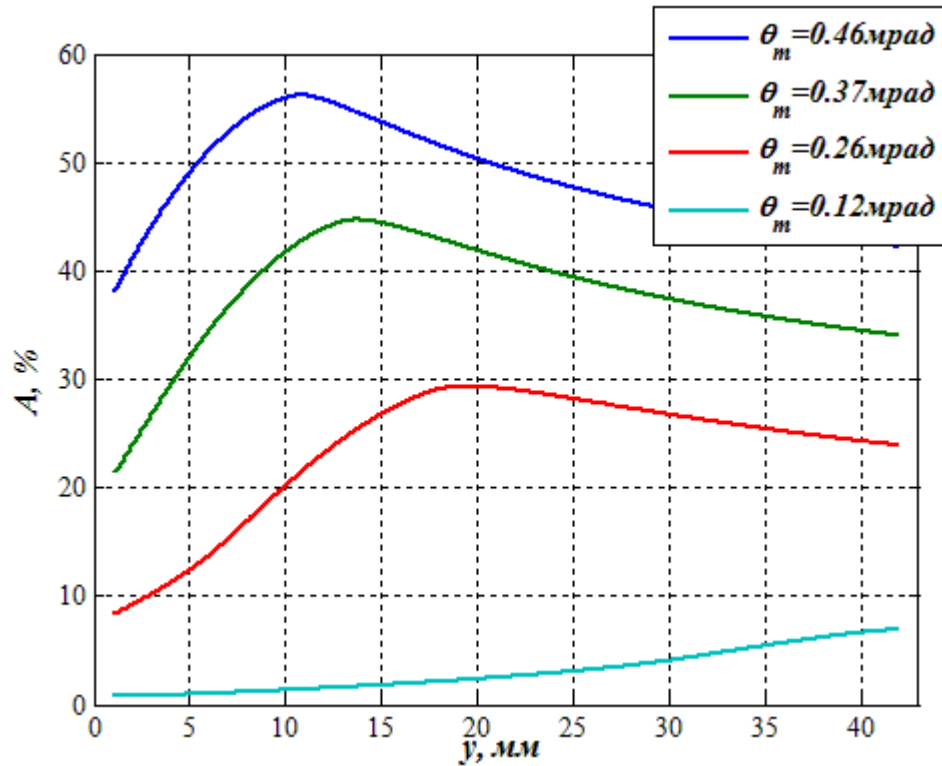


Рис. 2.22. Относительный вклад ПВО в интегральный по x угол сбора $A = \frac{a_{+тер}(y) - a(y)}{a_{+тер}(y)}$ для разных значений Θ_m .

Когда фокусное пятно коллиматора не сильно вытянуто вдоль оси ou , можно считать, что величина $A(y) = (a_{+тер} - a) / a_{+тер}$ характеризует вклад ПВО в функцию сбора коллиматора при фокусном расстоянии $F = y$. То есть для энергий выше 8 кэВ вклад в районе фокальной плоскости (4.8 мм) не превышает 50% для коллиматора с $d = 10$ мкм, $L = 12.4$ мм и $\sigma = 50$ нм.

Чтобы понять общую тенденцию изменения вклада ПВО в угол сбора, обратимся к рис. 2.20-2.21. Показанные на рис. 2.20 распределения достигают своего максимального значения, когда y лежит в области от $d / (2\Theta_m) - L$ ($y = 6.8$ мм) до $d / (2\Theta_m)$ ($y = 19.2$ мм). Величина угла сбора с учетом ПВО при этом достигает максимального значения $\pi\Theta_c^2$. При дальнейшем увеличении y вклад ПВО медленно убывает (рис. 2.20 (внизу) и рис. 2.22) и, по-видимому, выходит на постоянное значение. Такую же тенденцию показывает и рис. 2.21.

Особенно хорошо видно, как при увеличении y изменяется вклад ПВО в угол сбора на рис. 2.23, где приведены срезы (профили) показанного на рис. 2.19 угла сбора для $y < d / (2\Theta_m) - L$ (1), $d / (2\Theta_m) - L < y < d / (2\Theta_m)$ (3) и $y > d / (2\Theta_m)$ (5). Пунктирными линиями (2), (4) и (6) показаны соответствующие профили угла сбора без учета явления ПВО.

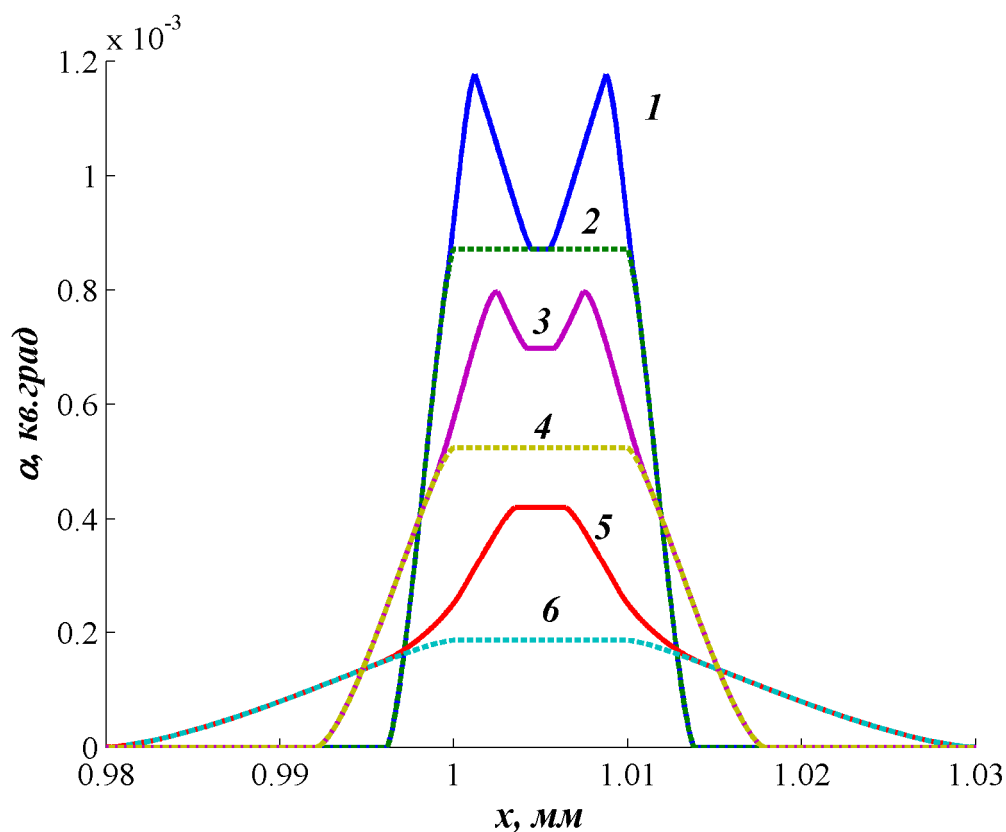


Рис. 2.23. Профили угла сбора с учетом ПВО при $y = 4.8$ (1), 9.8 (3) и 24.8 мм (5); пунктирные линии (2), (4) и (6) – профили угла сбора без учета явления ПВО при соответствующих значениях координаты y .

Таким образом, можно сделать вывод, что вкладом явления ПВО в функцию сбора микроэлектронного коллиматора можно пренебречь, если $d/L > \Theta_m$ и фокусное расстояние $F < d/(2\Theta_m) - L$. Последнее условие означает, что фокусное пятно лежит в области $y < d/(2\Theta_m) - L$, когда профиль добавки к углу сбора в силу учета ПВО имеет характерный вид «кошачьих ушек», типа кривой (1) на рис. 2.23. Следует также отметить, что вклад явления ПВО в функцию сбора тем меньше, чем меньше фокусное расстояние коллиматора.

2.5. Основные результаты и выводы главы II

Во второй главе диссертации получены следующие основные результаты:

1. Рассчитаны функции сбора сигнала для двух типов коллиматоров: поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники, используемых в конфокальной схеме рентгено-флуоресцентной томографии.

2. Исследована зависимость размеров области сбора сигнала и максимального значения функции сбора от величин, характеризующих коллиматор (диаметр канала, его длина, угол раствора и т.д.).

3. Определены и проанализированы условия, при которых значения характерной ширины функции сбора сигнала для коллиматора, созданного методами микроэлектроники, меньше, чем для поликапиллярного коллиматора.

4. Получена зависимость размеров фокуса и максимального значения функции сбора сигнала поликапиллярного коллиматора от критического угла ПВО и, следовательно, от энергии флуоресцентных квантов.

5. Для коллиматора, созданного методами микроэлектроники, проведены оценочные расчеты доли квантов, проходящих через коллиматор за счет полного внешнего отражения. Построены соотношения, связывающие характеристики коллиматора (диаметр канала, длина коллиматора, фокусное расстояние) и максимальный угол ПВО, при которых можно пренебречь вкладом явления ПВО, и функция сбора коллиматора, созданного методами микроэлектроники, не зависит от энергии собираемых флуоресцентных квантов.

На основании полученных результатов можно сделать следующие **ВЫВОДЫ:**

1. Размер области сбора сигнала, определяющий пространственное разрешение при конфокальном подходе в рентгенофлуоресцентной томографии, у коллиматора, созданного методами микроэлектроники, может быть меньше, чем у поликапиллярного коллиматора.

В частности, если сравнить коллиматоры, имеющие одинаковую ширину канала d , угол раствора Ω и фокусное расстояние F , то меньший размер фокального пятна будет у микроэлектронного коллиматора, если его длина L выбрана таким образом, что $d/L < \Theta_c$ и $F < L$.

2. Максимальное значение функции сбора у микроэлектронного коллиматора меньше, чем у поликапиллярного коллиматора, при равных значениях d , F и числе каналов N . Однако это значение можно повысить за счет уменьшения длины коллиматора L , используя при этом тяжелые элементы для поглощающей матрицы, и увеличения числа каналов.

3. У поликапиллярного коллиматора размер области сбора сигнала обратно пропорционален энергии флуоресцентных квантов, что следует учитывать для корректного восстановления распределения элементного состава в исследуемых объектах.

4. При использовании коллиматора, созданного методами микроэлектроники, пространственное разрешение, определяемое размером фокального пятна, одинаково для всех энергий измеряемого спектра, поскольку основная часть излучения проходит через микроэлектронный коллиматор «на просвет». В этом заключается основное преимущества микроэлектронного коллиматора по сравнению с поликапиллярным. При определенном выборе параметров микроэлектронного коллиматора вкладом флуоресцентных квантов, проходящих через коллиматор за счет явления ПВО, можно пренебречь.

Глава III. Моделирование ХВИС контраста от протяженных дефектов (дислокаций и границ зерен) и сравнение его с ЕВИС контрастом

Третья глава посвящена теоретическому изучению формирования наведенного рентгеновским пучком тока в образце с протяженными дефектами. Необходимость решения этой задачи обосновывается в первом разделе третьей главы. Во втором разделе строятся модели формирования ХВИС контраста, в которых транспорт и регистрация носителей описывается аналогично случаю ЕВИС метода, а функция генерации предполагается пропорциональной интенсивности рентгеновского зонда. Результаты расчета контраста обсуждаются в третьем разделе, где проводится их анализ в сравнении с ЕВИС контрастом и экспериментальными профилями. В четвертом разделе рассматривается модель генерации носителей рентгеновским пучком, и на ее основе получено более строгое выражение, описывающее функцию генерации.

3.1. Постановка задачи, преимущества метода ХВИС и вопросы, ожидающие решения

Метод тока, индуцированного сфокусированным рентгеновским пучком (ХВИС), был предложен для выявления электрически активных протяженных дефектов в рентгеновском микроскопе [75]. Этот метод аналогичен известному ранее методу наведенного электронным пучком тока (ЕВИС) в растровой электронной микроскопии (РЭМ) [2, 120].

Метод ХВИС позволяет не только выявлять и характеризовать электрически активные протяженные дефекты в полупроводнике, но и, будучи дополнен методами рентгенофлуоресцентного анализа, давать информацию о химическом составе и распределении примесей в образце.

Ранее ХВИС метод использовался только на синхротронных источниках, но недавно этот метод был реализован и на лабораторном источнике

рентгеновского излучения [121, 122], что может позволить существенно расширить область его применения. Однако для эффективного использования метода необходимо разработать методы расчета контраста протяженных дефектов. Это позволило бы оценить возможности метода ХВИС, в частности, его чувствительность и пространственное разрешение, сформулировать требования к источнику излучения. Кроме того, модель расчета контраста протяженных дефектов в методе ХВИС требуется, чтобы проводить измерения рекомбинационной активности протяженных дефектов путем сравнения модельного контраста с измеренным.

Модели расчета контраста хорошо развиты для метода ЕВИС [54, 120], а для метода ХВИС такие модели до сих пор не разработаны, что существенно ограничивает его применение. До настоящего времени попытка такого расчета была предпринята только в [123, 124], где был рассчитан ХВИС контраст квазиточечных дефектов и проведено его сравнение с контрастом в методе ЕВИС. Было получено, что для таких дефектов ХВИС контраст значительно ниже, чем контраст в ЕВИС.

3.2. Модель расчета наведенного тока и определение контраста от дефекта

В методе ХВИС образец (полупроводниковая структура с барьером Шоттки или *p-n*-переходом) сканируется сфокусированным рентгеновским пучком (рис. 3.1).

Рентгеновские кванты выбивают фотоэлектроны, которые, в свою очередь, являются источником неравновесных электрон-дырочных (e-h) пар. Затем эти неравновесные носители заряда диффундируют внутри образца, и часть из них достигает границы области пространственного заряда (ОПЗ) коллектора (барьера Шоттки или *p-n*-перехода). Электрическое поле внутри ОПЗ разделяет e-h пары, что приводит к появлению тока во внешней цепи. Ток, собираемый коллектором при сканировании исследуемой структуры,

является детектируемым сигналом в методе наведенного тока. Для определенности предполагаем, что коллектор расположен перпендикулярно пучку, что соответствует геометрии экспериментов, проводимых на лабораторном источнике рентгеновского излучения.

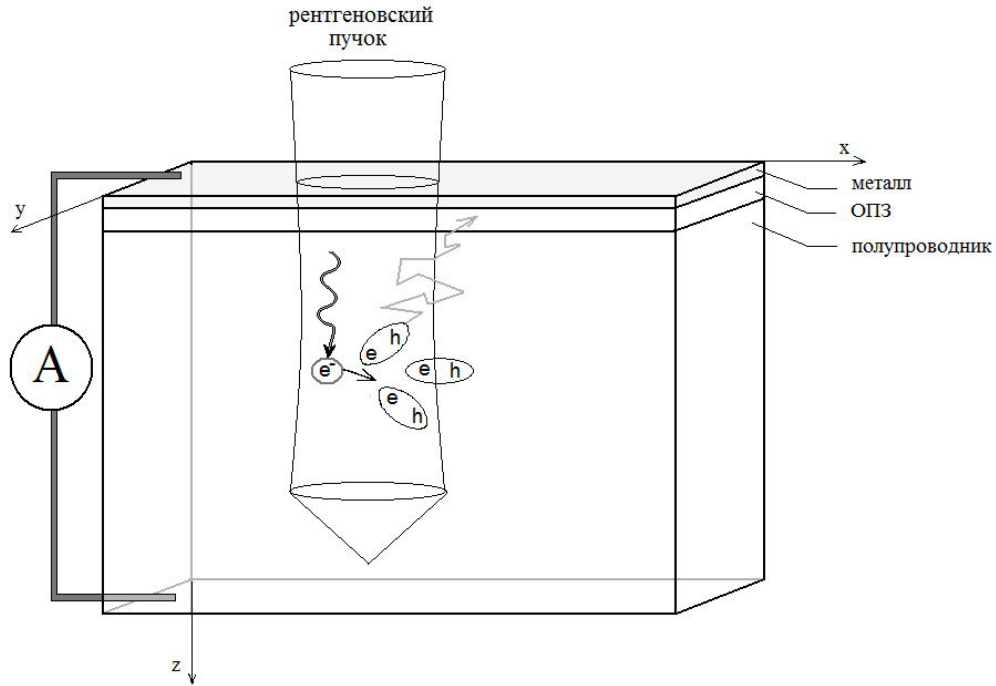


Рис. 3.1. Схема измерений в методе наведенного рентгеновским пучком тока

Пусть пучок светит в точку с координатами (x_0, y_0) . Ток, собираемый коллектором, может быть представлен в виде [120, 125]

$$I_c(x_0, y_0) = \int_0^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy g(x - x_0, y - y_0, z) \psi(x, y, z), \quad (3.1)$$

где $g(x, y, z)$ - функция, описывающая генерацию e-h пар, и $\psi(x, y, z)$ - вероятность собирания неравновесных носителей заряда, которая представляет собой ток, собираемый коллектором от единичного заряда, помещенного в точку (x, y, z) . Функция $\psi(x, y, z)$ может быть получена из решения диффузионного уравнения

$$\Delta\psi(x, y, z) - \psi(x, y, z)/L^2(x, y, z) = 0 \quad (3.2)$$

с граничными условиями $\psi(x, y, z=W) = 1$ и $\psi \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$. Здесь W – ширина ОПЗ коллекторного перехода, L – диффузионная длина неравновесных носителей заряда.

Для однородных бездефектных (когда L не меняется от точки к точке) планарных структур с латеральными размерами (по x и по y), существенно превышающими толщину структуры и диффузионную длину L , из (3.2) легко получить, что в области $z \geq W$

$$\psi(x, y, z) = \exp[-(z-W)/L]. \quad (3.3)$$

При $z < W$ обычно предполагается, что $\psi(x, y, z) = 1$. Таким образом, в планарных структурах $\psi(x, y, z)$ определяется расстоянием от точки рождения неравновесного носителя заряда до края ОПЗ и диффузионной длиной.

Контраст наведенного тока от дефекта рассчитывается как

$$C = 1 - I_c / I, \quad (3.4)$$

где I – величина наведенного тока в бездефектном образце.

3.2.1. Вероятность собирания неравновесных носителей заряда

а) Для границ зерен

Вывод функции вероятности собирания для перпендикулярной поверхности образца границы зерна рассмотрен в [57]. Граница зерна рассматривается как плоскость, характеризующаяся скоростью рекомбинации $e-h$ пар ν_s , внедренная в полупроводник с постоянной диффузионной длиной неравновесных носителей заряда L .

Рис. 3.2 демонстрирует схему, выбранную для описания наблюдения наведенного тока от границы зерна в поликристаллическом кремнии. В такой постановке задачи основное предположение, также используемое при расчете наведенного тока от линейных дефектов [126], состоит в том, что основной вклад в генерируемый пучком ток дают носители из нейтральной части

образца, а не из ОПЗ. Это приближение хорошо работает, если неравновесные носители заряда генерируются достаточно глубоко в полупроводнике. Также выполнение этого условия необходимо, чтобы величина наведенного тока на границе зерна была существенной [127].

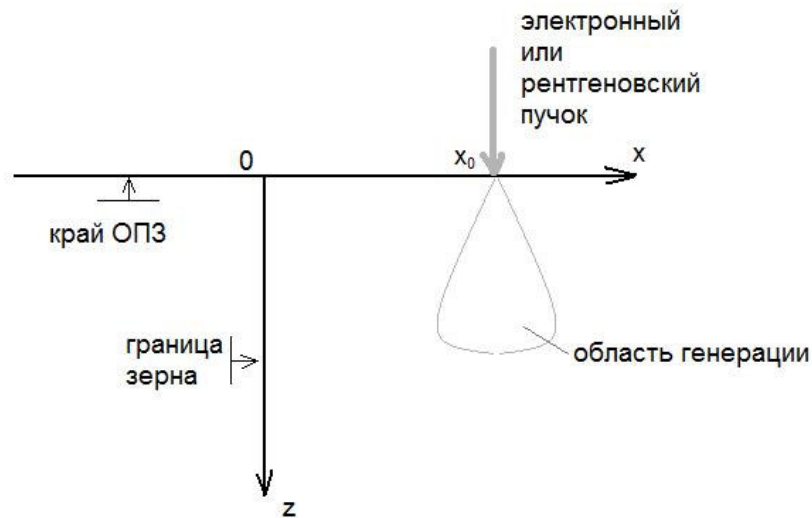


Рис. 3.2. Схема анализа наведенного тока от границы зерна в кремнии. Ось u перпендикулярна плоскости рисунка.

Таким образом, нужно описать процесс диффузии сгенерированных неравновесных носителей заряда (для определенности будем считать, что это дырки в полупроводнике n -типа) и записать уравнение диффузии для их плотности $p(\vec{r})$:

$$D\nabla^2 p(\vec{r}) - \frac{1}{\tau} p(\vec{r}) = -g(\vec{r}). \quad (3.5)$$

Здесь D – коэффициент диффузии дырок, τ – время их жизни и $g(\vec{r})$ – число дырок, генерируемых электронным или рентгеновским пучком в единицу времени в единице объема образца. Эффект собирания неравновесных носителей, достигших области пространственного заряда, описывается как бесконечная скорость рекомбинации на краю ОПЗ, который отождествляется с плоскостью $z = 0$ согласно сделанным выше допущениям. Соответствующее граничное условие имеет вид

$$p(\vec{r})\Big|_{z=0} = 0. \quad (3.6)$$

Рекомбинация носителей на границе зерна описывается только скоростью поверхностной рекомбинации v_s , то есть граница зерна вместе с прилегающим обедненным слоем рассматривается как единое целое [127-129] и отождествляется с плоскостью $x = 0$. Такое приближение приемлемо, поскольку размер области генерации в обычных экспериментальных условиях (несколько микрон) существенно больше, чем толщина обедненной области вблизи границы (≤ 5 мкм для обычных уровней легирования полупроводника [130]). Соответствующее граничное условие предложено Мартинесом (Martinez) в [129]; оно отражает непрерывность $p(\vec{r})$ на границе зерна:

$$p(\vec{r})\Big|_{x=0^+} = p(\vec{r})\Big|_{x=0^-}. \quad (3.7)$$

Второе граничное условие связывает поток неравновесных носителей, падающий на границу, с их локальной плотностью:

$$D \frac{\partial p}{\partial x}\Big|_{x=0^+} - D \frac{\partial p}{\partial x}\Big|_{x=0^-} = v_s p\Big|_{x=0}. \quad (3.8)$$

Если найти решение уравнения (3.5) с граничными условиями (3.6)-(3.8), то ток (или число неравновесных носителей), собираемый барьером Шоттки, вычисляется интегрированием нормального градиента $p(\vec{r})$ по плоскости $z = 0$:

$$I_c = D \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial p}{\partial z}\Big|_{z=0} dx dy. \quad (3.9)$$

Однако для вычисления наведенного тока не обязательно решать трехмерное уравнение (3.5), а можно, вследствие симметрии задачи, ограничиться его двумерным эквивалентом. Действительно, пусть $G(\vec{r}, \vec{r}')$ – функция Грина уравнения (3.5), удовлетворяющая граничным условиям (3.6)-(3.8); тогда решение уравнения может быть представлено как [131]

$$p(\vec{r}) = \int_{V'} g(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') dV', \quad (3.10)$$

где V' – полупространство $z' \geq 0$. При подстановке этого выражения в (3.9) получается, что

$$I_c = D \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \int_{V'} g(\vec{r}) \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{z=0} dV', \quad (3.11)$$

или, изменяя порядок интегрирования по поверхности и по объему,

$$I_c = \int_{V'} g(\vec{r}') \psi(\vec{r}, \vec{r}') dV', \quad (3.12)$$

где

$$\psi(\vec{r}') = D \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{z=0}. \quad (3.13)$$

Функция $\psi(\vec{r}')$ представляет собой ток, собираемый от точечного единичного источника, находящегося в точке \vec{r}' , или, иными словами, вероятность собирания носителей, сгенерированных в этой точке. Соответственно, выражение (3.12) показывает, что ток, генерируемый неточечным источником, получается суммированием значений функции генерации $g(\vec{r}')$ с весом $\psi(\vec{r}')$.

Теперь заметим, что схема на рис. 3.2 обладает трансляционной инвариантностью относительно оси y , а значит, распределение тока от точечного источника, находящегося в точке $\vec{r}' = (x', y', z')$, не будет зависеть от y' . Другими словами, функция Грина $G(\vec{r}, \vec{r}')$ может зависеть только от разности y и y' . С учетом этого факта соотношение (3.13) принимает вид

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}') &= D \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial z} G(x, x', y - y', z, z') \Big|_{z=0} \right] dx dy = \\ &= D \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x', y - y', z, z') dy \Big|_{z=0} \right] dx. \end{aligned} \quad (3.14)$$

В этом выражении учтена возможность изменения порядка интегрирования по y и дифференцирования по z . Результатом интегрирования функции Грина по y является функция $G_2(x, x', z, z')$. Она не зависит и от y' , что становится ясно, если в (3.14) сделать замену переменных $\eta = y - y'$. Легко убедиться, что функция G_2 представляет собой распределение

неравновесных носителей от линейного источника, параллельного оси y , находящегося в точке (x', z') . То есть, G_2 – функция Грина двумерного аналога диффузионного уравнения (3.5) с граничными условиями (3.6)-(3.8). Таким образом, можно записать, что

$$\psi = \psi(x', z') = D \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial G_2}{\partial z} \Big|_{z=0} \right] dx. \quad (3.15)$$

Поскольку функция ψ не зависит от y' , выражение (3.12) для наведенного тока может быть упрощено:

$$I_c = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} \psi(x', z') h(x', z') dz', \quad (3.16)$$

где $h(x', z') = \int_{-\infty}^{\infty} g(x', y', z') dy'$. Следовательно, собираемый ток зависит только от $h(x', z')$ – проекции функции генерации на плоскость $x'z'$; распределение $g(\vec{r})$ в плоскости y не влияет на результирующее значение тока I_c .

Для вычисления вероятности собирания $\psi(x', z')$, согласно выражению (3.15), нужно найти двумерную функцию Грина задачи (3.5)-(3.8) в полупространстве $z \geq 0$. Удобно рассмотреть диффузионную задачу отдельно в каждом из подпространств, на которые делит полупроводник граница зерна, и ввести «сужения» G_2^+ и G_2^- функции G_2 в областях $x \geq 0$ и $x \leq 0$, соответственно. Двумерный аналог уравнения (3.5) для точечного источника в точке (x', z') приводит к таким уравнениям для G_2^+ и G_2^- (для определенности предполагаем, что $x' \geq 0$)

$$\frac{\partial^2 G_2^\pm}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 G_2^\pm}{\partial z^2} - \lambda^2 G_2^\pm = \begin{cases} -\frac{1}{D} \delta(x-x') \delta(z-z') & (x \geq 0) \\ 0 & (x \leq 0) \end{cases}, \quad (3.17)$$

где индекс (+) относится к подпространству $x \geq 0$, а индекс (-) - к $x \leq 0$. Кроме того, в уравнении (3.7) $\lambda = 1/L$, $L = \sqrt{D\tau}$ – диффузионная длина неравновесных носителей заряда, и δ – дельта-функция Дирака. Граничные условия (3.6)-(3.8) соответственно преобразуются в

$$G_2^\pm \Big|_{z=0} = 0, \quad (3.18)$$

$$G_2^+ \Big|_{x=0} = G_2^- \Big|_{x=0} \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial G_2^+}{\partial x} \Big|_{x=0} - \frac{\partial G_2^-}{\partial x} \Big|_{x=0} = s G_2 \Big|_{x=0}, \quad (3.20)$$

где $s = v_s / D$. Решение уравнения (3.17) с граничными условиями (3.18)-(3.20) можно представить в виде синус-преобразования Фурье [132]:

$$G_2^\pm(x, z) = \int_0^\infty b^\pm(k, x) \sin(kz) dk. \quad (3.21)$$

В этом выражении зависимость G_2^\pm от x', z' для простоты опущена. Проводя интегральные преобразования (3.17) с учетом выражения (3.21) и свойств дельта-функции в правой части (согласно [131])

$$\delta(z - z') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sin(kz) \sin(kz') dk, \quad (3.22)$$

получим обыкновенное дифференциальное уравнение для b^\pm :

$$\frac{\partial^2 b^\pm}{\partial x^2} - (\lambda^2 + k^2) b^\pm = \begin{cases} -\frac{2}{\pi D} \sin(kz') \delta(x - x') & (x \geq 0) \\ 0 & (x \leq 0) \end{cases}. \quad (3.23)$$

Подобным образом граничные условия (3.19) и (3.20) преобразуются к виду

$$b^+ \Big|_{x=0} = b^- \Big|_{x=0}, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial b^+}{\partial x} \Big|_{x=0} - \frac{\partial b^-}{\partial x} \Big|_{x=0} = s b \Big|_{x=0}. \quad (3.25)$$

С учетом (3.21) функция вероятности собирания (3.15) может быть выражена через b^\pm следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi = \psi(x', z') &= D \left[\int_{-\infty}^0 \frac{\partial G_2^-}{\partial z} \Big|_{z=0} dx + \int_0^\infty \frac{\partial G_2^+}{\partial z} \Big|_{z=0} dx \right] = \\ &= D \int_{-\infty}^\infty \left[\int_{-\infty}^0 b^-(k, x) dx + \int_0^\infty b^+(k, x) dx \right] k dk \end{aligned} \quad (3.26)$$

Решение дифференциального уравнения (3.23) с граничными условиями (3.24)-(3.25) может быть найдено стандартным методом в виде экспоненциальной функции от x . Поэтому эта функция легко интегрируется при подстановке в (3.26), что в результате дает решение для любого x' :

$$\psi = \psi(x', z') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \left[1 - \frac{s}{2\mu + s} \exp(-\mu|x'|) \right] \frac{k}{\mu^2} \sin(kz') dk, \quad (3.27)$$

где $\mu = \sqrt{k^2 + \lambda^2}$. Такое выражение с точностью до постоянного множителя и замены s на $2s$ было получено в [132] как решение немного другой, но схожей краевой задачи. Решение (3.27) можно привести к более удобному виду, используя соотношение [133]

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{k^2 + \lambda^2} \sin(kz') dk = \exp(-\lambda z'). \quad (3.28)$$

В результате получится, что

$$\psi(x', z') = \exp(-\lambda z') - u(x', z'), \quad (3.29)$$

где

$$u(x', z') = \frac{2s}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k}{\mu^2(2\mu + s)} \exp(-\mu|x'|) \sin(kz') dk. \quad (3.30)$$

Для данного значения z' выражение (3.29) описывает наведенный ток от точечного источника в точке $z = z'$. Поскольку при $|x'| \rightarrow \infty$ функция $u(x', z') \rightarrow 0$, ясно, что $\exp(-\lambda z')$ представляет собой фоновое значение наведенного тока (или ток в образце без дефекта, что согласуется с (3.3), когда, согласно сделанным предположениям, $W = 0$). При этом функция $u(x', z')$ описывает уменьшение тока из-за присутствия границы, или, иными словами, сигнал, который «изображает» границу зерна.

Для удобства проведения расчетов наведенного тока выражение (3.30) следует представить в виде

$$u(x', z') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} v(k, x') \sin(kz') dk, \quad (3.31)$$

где

$$v(x', z') = \frac{ks}{\mu^2(2\mu + s)} \exp(-\mu|x'|). \quad (3.32)$$

На рис. 3.3 показана функция $u(x', z')$, описывающая вклад в вероятность собирания от границы зерна, рассчитанная согласно (3.30). Ненулевая часть этой функции (то есть, область влияния границы зерна)

сосредоточена в интервале от $-3L$ до $3L$ по оси x и от 0 до $5L$ по z .

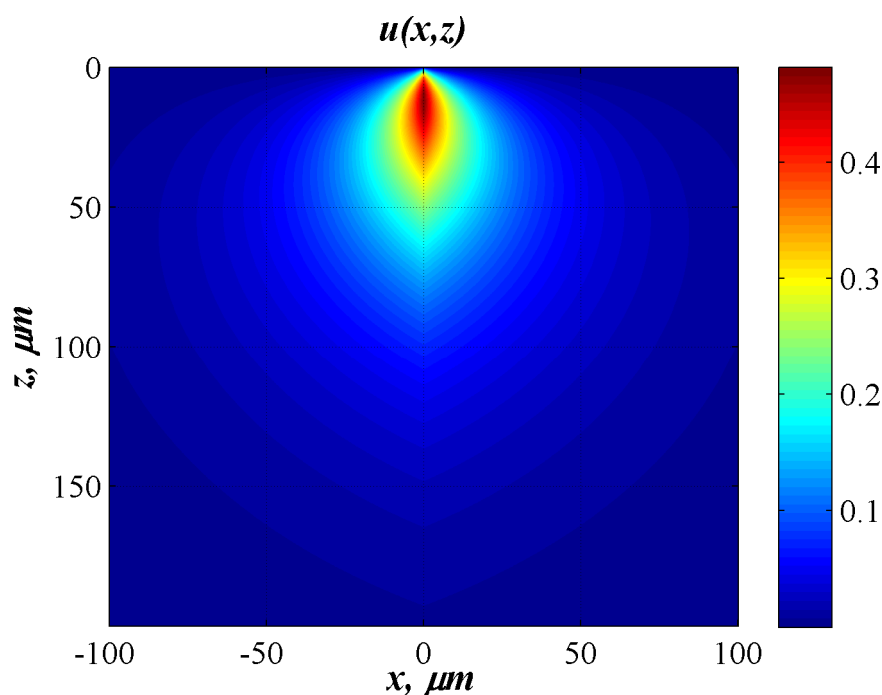


Рис. 3.3. Вклад в функцию вероятности собирания от границы зерна для образца с $D = 36 \text{ см}^2/\text{с}$, $L = 40 \text{ мкм}$ и скорости рекомбинации на дефекте $v_s = 10^5 \text{ см/с}$.

б) Для дислокаций

Вероятность собирания неравновесных носителей заряда для уединенной перпендикулярной поверхности образца дислокации, рассчитывается по аналогии с моделью, представленной в работе [56]. В этой работе рассмотрена диффузия неравновесных носителей заряда для образца, содержащего периодический массив прямых дислокаций, перпендикулярных поверхности. Материал поделен на гексагональные ячейки, в центре каждой из которых находится дислокация. Поясняющая схема приведена на рис. 3.4, где d – расстояние между дислокациями, \mathcal{E} – радиус дислокации. Предполагается, что полупроводник заполняет полупространство $z \geq 0$, а край области пространственного заряда совпадает с его поверхностью.

Чтобы перейти к задаче, которую можно трактовать в цилиндрических

координатах, ячейка-шестиугольник аппроксимируется кругом площадью $\pi a^2 = \frac{1}{\rho_d}$, где ρ_d – число дислокаций на единицу площади поверхности образца.

Дислокация описывается как линия, характеризуемая скоростью линейной рекомбинации γ_d . Эта величина определяется как отношение попадающего на единицу длины дислокации потока неравновесных e-h пар к их плотности. Также еще величину γ_d называют рекомбинационной силой дефекта. Предполагается, что она не зависит от плотности неравновесных носителей заряда, что соответствует приближению слабой генерации [56].

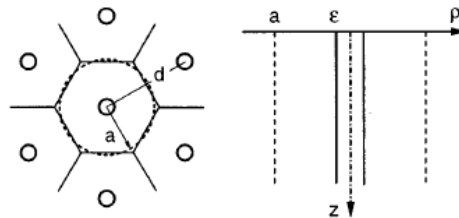


Рис. 3.4. Схематическое представление расположения дислокаций в полубесконечном образце. Слева – массив гексагональных ячеек и аппроксимация отдельной ячейки цилиндром. Справа – цилиндрическая ячейка радиуса a , содержащая дислокацию, которая рассматривается как цилиндр радиуса ε .

Как было показано в работе [125], на основании теоремы взаимности (Reciprocity Theorem) функция вероятности собирания $\psi(\vec{r})$ подчиняется уравнению диффузии. Когда дислокация направлена вдоль оси z , в цилиндрических координатах уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{L^2} \psi = 0, \quad (3.33)$$

где $L = \sqrt{D\tau}$ – диффузионная длина, D – коэффициент диффузии, τ – время жизни неравновесных носителей заряда. Уравнение (3.33) дополняют граничные условия:

$$\psi(r, z \rightarrow \infty) \rightarrow 0, \quad (3.34)$$

и на границе области пространственного заряда

$$\psi(r, z = 0) = 1. \quad (3.35)$$

На боковых гранях рассматриваемой гексагональной ячейки нормальный градиент ψ должен быть равен нулю, поскольку ψ симметрична относительно этих граней и дифференцируема. Соответствующее условие на границе цилиндрической ячейки такое:

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \Big|_{r=a} = 0. \quad (3.36)$$

Записанное граничное условие (3.35) соответствует нулевой ширине области пространственного заряда W . Однако решение, полученное с таким граничным условием, несложно будет обобщить на случай ненулевой ширины W , сделав замену $z \rightarrow z - W$.

Наличие дислокации с рекомбинационной силой γ_d описывает граничное условие

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(2\pi r D \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \gamma_d \psi(r = 0, z). \quad (3.37)$$

Таким образом, для нахождения функции вероятности собирания $\psi(\vec{r})$ требуется решить уравнение (3.33) с граничными условиями (3.34)-(3.37).

Поскольку функция $\exp\left(-\frac{z}{L}\right)$ удовлетворяет уравнению (3.33) и граничному условию (3.35), то, сделав замену

$$\psi = \exp\left(-\frac{z}{L}\right) - u, \quad (3.38)$$

получим сопряженную (3.35)-(3.37) задачу с однородными граничными условиями. В (3.38) экспоненциальный член соответствует вероятности собирания в бездефектном полупроводнике, а функция u описывает уменьшение этой вероятности вследствие рекомбинации на дислокации.

Удобно функцию $u(r, z)$ представить в виде интеграла Фурье:

$$u(r, z) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} v(r, k) \sin(kz) dk, \quad (3.39)$$

$$v(r, k) = \int_0^{\infty} u(r, z) \sin(kz) dz. \quad (3.40)$$

В результате из (3.33) получится обыкновенное дифференциальное уравнение для функции $v(r, k)$:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \mu^2 v = 0, \quad (3.41)$$

где $\mu = \sqrt{k^2 + \frac{1}{L^2}}$, с граничными условиями

$$\left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) \Big|_{r=a} = 0, \quad (3.42)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(-2\pi r \frac{\partial v}{\partial r} \right) = \frac{\gamma_d}{D} \left[\frac{k}{\mu^2} - v(0, k) \right]. \quad (3.43)$$

Общим решением уравнения (3.41) является линейная комбинация модифицированных функций Бесселя (в литературе их также называют функциями Инфельда и Макдональда, или функциями Бесселя и Неймана мнимого аргумента) нулевого порядка [134,135]:

$$v(r, k) = AI_0(\mu r) + BK_0(\mu r). \quad (3.44)$$

Коэффициенты A и B , зависящие от k , определяются из граничных условий (3.42) и (3.43).

Сложность возникает с граничным условием (3.43), поскольку функция $K_0(\mu r)$ имеет сингулярность при $r \rightarrow 0$. Это приводит к расходимости $v(0, k)$, в то время, как левая часть уравнения (3.43) конечна, поскольку $K'_0(x) \propto -\frac{1}{x}$ при малых значениях x [134]. Однако, так как произведение $rK_0(\mu r)$ интегрируемо в окрестности точки $r=0$, можно заменить $v(0, k)$ ее средним значением в круге малого радиуса ε :

$$v(0, k) \Rightarrow \frac{1}{\pi \varepsilon^2} \int_0^{\varepsilon} v(r, k) 2\pi r dr. \quad (3.45)$$

Такой математический ход соответствует тому, что дислокации приписывается поперечное сечение конечного размера.

Чтобы вычислить интеграл в (3.45), куда $v(r, k)$ подставлено из (3.44), нужно воспользоваться соотношениями $(xI_1(x))' = xI_0(x)$ и $(xK_1(x))' = -xK_0(x)$ [136, 137], и учесть асимптотику модифицированных функций Бесселя при малых x : $K_1(x) \approx \frac{1}{x}$ и $I_1(x) \approx \frac{x}{2}$ [137].

В результате получается:

$$v(0, k) \Rightarrow \frac{1}{\pi \varepsilon^2} \int_0^\varepsilon v(r, k) 2\pi r dr = \frac{1}{\varepsilon^2 \mu^2} [A \varepsilon \mu I_1(\varepsilon \mu) - B(\varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu) + 1)]. \quad (3.46)$$

При преобразовании левой части (3.43) надо воспользоваться соотношениями $I_0'(x) = I_1(x)$ и $K_0'(x) = -K_1(x)$, что приведет к

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(-2\pi r \frac{\partial v}{\partial r} \right) = \lim_{r \rightarrow 0} \left(-2\pi r \frac{\partial}{\partial r} (A I_0(\mu r) + B K_0(\mu r)) \right) = \frac{2\pi B}{\mu}. \quad (3.47)$$

Таким образом, если подставить (3.46) и (3.47) в (3.45), то это граничное условие принимает вид

$$\frac{2\pi B}{\mu} = \frac{\gamma_d}{D} \left[\frac{k}{\mu^2} - \frac{1}{\varepsilon^2 \mu^2} [A \varepsilon \mu I_1(\varepsilon \mu) - B(\varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu) + 1)] \right], \quad (3.48)$$

или, после преобразований,

$$B \left[\frac{\pi D}{\gamma_d} + \frac{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon^2 \mu^2} \right] + A \frac{I_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon \mu} = \frac{k}{2\mu^2}. \quad (3.49)$$

В то же время граничное условие (3.42) при подстановке в него $v(r, k)$ из (3.44) даст следующее уравнение:

$$A I_1(a\mu) - B K_1(a\mu) = 0. \quad (3.50)$$

Выражая коэффициенты A и B из (3.49) и (3.50), и подставляя это в (3.44), получаем:

$$v(r, k) = \frac{k}{2\mu^2} \frac{K_0(\mu r) + I_0(\mu r) \frac{K_1(\mu a)}{I_1(\mu a)}}{\left[\frac{\pi D}{\gamma_d} + \frac{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon^2 \mu^2} \right] + \frac{I_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon \mu} \frac{K_1(\mu a)}{I_1(\mu a)}}. \quad (3.51)$$

Таким образом, функция вероятности собирания для отдельной цилиндрической ячейки радиуса a , в центре которой находится дислокация с радиусом ε и силой рекомбинации γ_d , может быть вычислена согласно соотношениям (3.51), (3.38) и (3.39).

Вид функции вероятности собирания для случая единственной дислокации можно получить, устремив в (3.51) радиус единичной ячейки a к бесконечности, и учесть асимптотику функций Инфельда и Макдональда при больших x : $I_n(x) \approx \frac{\exp(x)}{\sqrt{2\pi x}} [1 + O(x^{-1})]$ и $K_n(x) \approx \frac{\exp(-x)}{\sqrt{2\pi x}} [1 + O(x^{-1})]$. То есть, для уединенной дислокации:

$$v(r, k) = \frac{k}{2\mu^2} \frac{K_0(\mu r)}{\left[\frac{\pi D}{\gamma_d} + \frac{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon^2 \mu^2} \right]}. \quad (3.52)$$

Выражение (3.52) описывает функцию $v(r, k)$ при $r > \varepsilon$. Как уже было отмечено, при $r \leq \varepsilon$ функцию $v(r, k)$ надо заменить ее средним значением в круге радиуса ε , которое равно:

$$v(k) = \frac{k}{\mu^2} \frac{1}{\left[1 + \frac{\pi D}{\gamma_d} \frac{\varepsilon^2 \mu^2}{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)} \right]}. \quad (3.53)$$

Вклад от дислокации в вероятность собирания $u(r, z)$, рассчитанный согласно (3.39) и (3.52)-(3.53), демонстрирует рис. 3.5. Ненулевая часть этой функции (то есть, область влияния дислокации) сосредоточена в интервале от 0 до $3L$ по r и от 0 до $5L$ по оси z .

В итоге, резюмируя проделанные выкладки, приведем следующие окончательные выражения для расчетов функции вероятности собирания для дислокации, перпендикулярной поверхности:

$$\begin{cases}
 \psi = \exp\left(-\frac{z}{L}\right) - u(r, z) \\
 u(r, z) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} v(r, k) \sin(kz) dk \\
 v(r \leq \varepsilon, k) = \frac{k}{\mu^2} \frac{1}{\left[1 + \frac{\pi D}{\gamma_d} \frac{\varepsilon^2 \mu^2}{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)}\right]} \\
 v(r > \varepsilon, k) = \frac{k}{2\mu^2} \frac{K_0(\mu r)}{\left[\frac{\pi D}{\gamma_d} + \frac{1 - \varepsilon \mu K_1(\varepsilon \mu)}{\varepsilon^2 \mu^2}\right]}
 \end{cases} \quad (3.54)$$

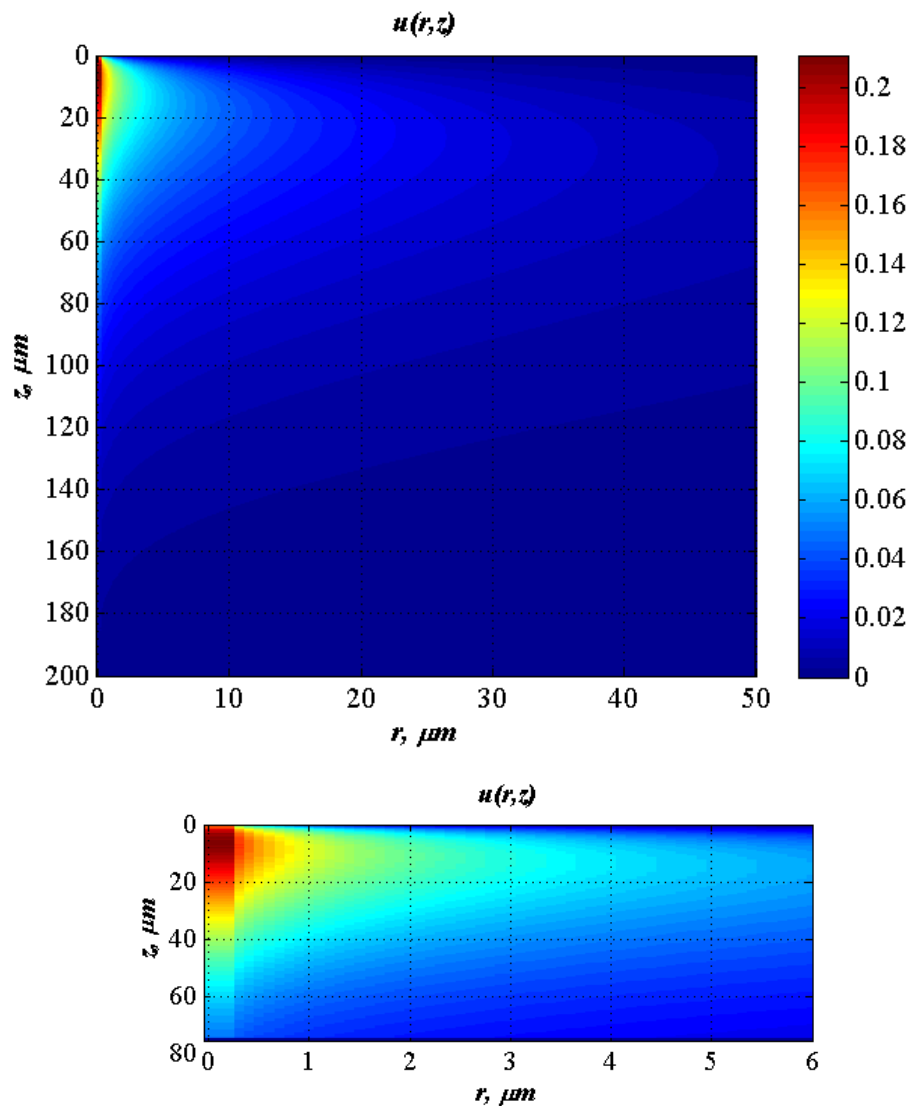


Рис. 3.5. Вклад в функцию вероятности собирания от дислокации для образца с $D = 36 \text{ см}^2/\text{с}$, $L = 40 \text{ мкм}$ и скорости рекомбинации на дефекте $v_s = 10^5 \text{ см/с}$.

3.2.2. Функция генерации электрон-дырочных пар

а) Функция генерации в методе EBIC

Для моделирования наведенного электронным пучком тока была выбрана функция генерации, использованная Донолато в [13], которую для кремния можно представить в виде

$$g(x, y, z) = \frac{1.76 E_b I_b (1 - \chi)}{\sigma_E^2 R e E_i} \exp\left[-7.5\left(\frac{z}{R} - 0.3\right)^2\right] \exp\left[-\frac{(x^2 + y^2)}{\sigma_E^2}\right], \quad (3.55)$$

где I_b и E_b – соответственно, ток и энергия пучка электронов, χ – часть энергии, уносимой обратно рассеянными электронами, E_i – средняя энергия, необходимая для генерации одной e-h пары (для кремния примерно 3.6 эВ), R – глубина проникновения первичных электронов, d – ширина пучка, для кремния

$$\sigma_E = \sqrt{0.36d^2 + 0.11\frac{z^3}{R}}. \quad (3.56)$$

Рассчитанная согласно формуле (3.55) функция генерации в методе EBIC для электронного пучка шириной $d = 10$ нм и энергией $E_e = 35$ кэВ (для этой энергии глубина проникновения $R = 8.6$ мкм) приведена на рис. 3.6 (с точностью до не зависящего от координат множителя).

б) Функция генерации в методе XVIC

Функция генерации электрон-дырочных пар рентгеновским пучком предполагалась пропорциональной интенсивности сфокусированного рентгеновского пучка. При этом считается, что пучок в сечении плоскостью xu (оси координат выбраны в соответствии со схемой на рис. 3.1) представляет собой функцию Гаусса и экспоненциально затухает по глубине

$$g(x, y, z) = I_0 \exp(-\mu z) \exp\left[-\frac{(x^2 + y^2)}{2\sigma^2}\right]. \quad (3.57)$$

Здесь σ – ширина рентгеновского пучка, μ – коэффициент ослабления

рентгеновских лучей, I_0 – нормировочный множитель, зависящий от потока квантов и не зависящий от координат. Точное значение коэффициента I_0 для проводимых расчетов не важно, поскольку при вычислении контраста этот коэффициент сокращается.

Выбранное приближение функции генерации работает, когда размер рентгеновского зонда намного превышает длину свободного пробега фотоэлектронов. В этом случае электрон-дырочные пары генерируются в основном внутри рентгеновского пучка. Для энергии фотоэлектронов в диапазоне 10-20 кэВ (и, следовательно, такой же энергии зонда) их длина свободного пробега в кремнии составляет от 1 до 3 мкм. То есть, когда ширина рентгеновского пучка больше ~ 10 мкм, обсуждаемая функция генерации применима, по крайней мере, в качестве первого приближения.

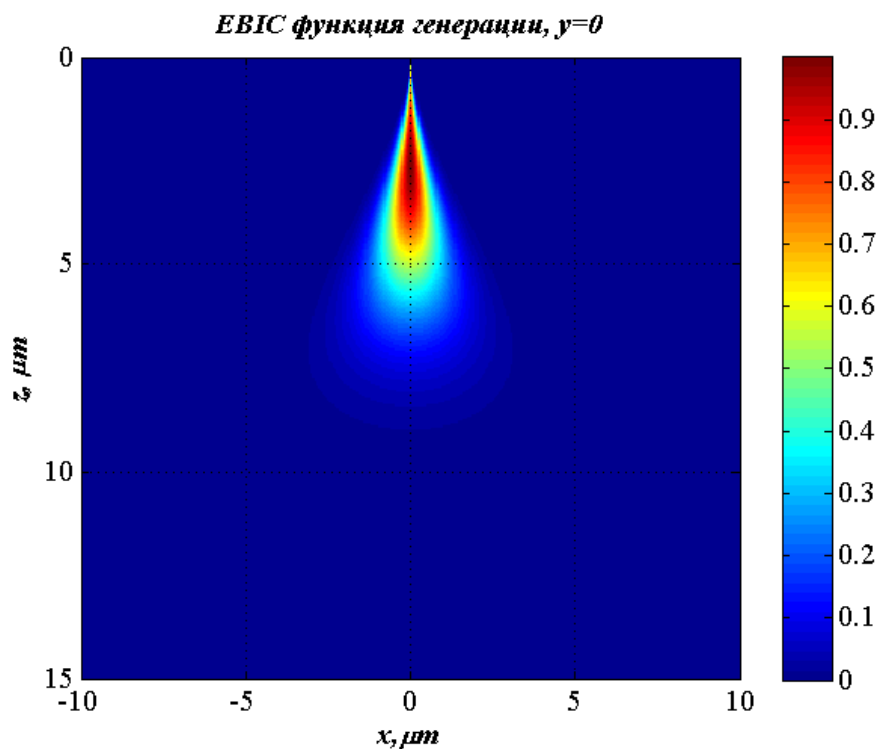


Рис. 3.6. Функция генерации в методе EBIC. Глубина проникновения $R = 8.6$ мкм, ширина пучка $d = 10$ нм.

Рассчитанная согласно (3.57) функция генерации в методе XVIC для рентгеновского пучка с шириной $\sigma = 5$ мкм и энергией $E_{MoK\alpha} = 17.4$ кэВ,

показана на рис. 3.7. Для кремния и излучения K_{α} -линии молибдена коэффициент ослабления $\mu = 15.6 \text{ см}^{-1} = 15.6 \times 10^{-4} \text{ мкм}^{-1}$.

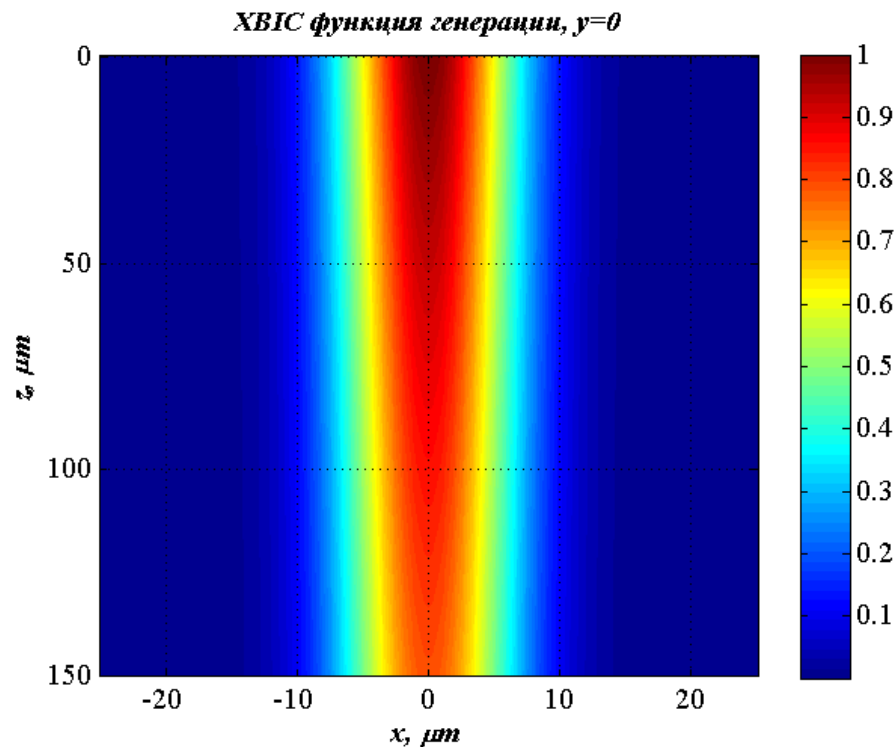


Рис. 3.7. Функция генерации в методе ХВИС (с точностью до коэффициента I_0). Ширина пучка $\sigma = 5 \text{ мкм}$, коэффициент поглощения $\mu = 15.6 \text{ см}^{-1}$.

3.3. Результаты расчета контраста от протяженных дефектов

В работе приведены выражения для расчета контраста (3.4) и величины наведенного тока (3.1), где функция генерации в ЕВИС задается соотношением (3.55), а в ХВИС - (3.57); вероятность собирания для дислокаций описывается формулой (3.54), а для границ зерен - (3.29)-(3.30). Однако для индуцированного рентгеновским пучком тока следует рассмотреть более простой сценарий расчета. Для этого надо выражение для определения контраста представить в виде

$$C = \Delta I_c / I, \quad (3.58)$$

где ΔI_c - уменьшение тока вследствие рекомбинации на дефекте:

$$\Delta I_c(x_0, y_0) = \int_0^\infty dz \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dx dy g(x - x_0, y - y_0, z) u(x, y, z). \quad (3.59)$$

Вклад от дефекта в вероятность собирания $u(x, y, z)$, как для дислокаций, так и для границ зерен, является синус-Фурье преобразованием от функции $v(x, y, k)$ (3.31), (3.40). Поэтому вклад в ток от дефекта можно представить, как

$$\begin{aligned} \Delta I_c(x_0, y_0) &= \int dz \iint g(x_0 - x, y_0 - y, z) dx dy \frac{2}{\pi} \int_0^\infty v(x, y, k) \sin(kz) dk = \\ &= \int_0^\infty dk \iint dx dy v(x, y, k) \frac{2}{\pi} \int g(x_0 - x, y_0 - y, z) \sin(kz) dz \end{aligned} \quad (3.60)$$

Если Фурье преобразование функции генерации обозначить как

$$G_k(x, y, k) = \frac{2}{\pi} \int g(x, y, z) \sin(kz) dz, \quad (3.61)$$

то получится, что

$$\Delta I_c(x_0, y_0) = \int_0^\infty dk \iint dx dy G_k(x_0 - x, y_0 - y, k) v(x, y, k). \quad (3.62)$$

Вид функции генерации (3.57) позволяет вычислить аналитически преобразование Фурье от нее, в результате чего получится:

$$G_k(x, y, k) = \frac{2}{\pi} \frac{k}{k^2 + \mu^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.63)$$

Вычисление ХВІС контраста по формулам (3.62)-(3.63) позволяет избежать численного расчета дискретного синус-Фурье преобразования, что значительно сокращает время расчетов.

Для того чтобы учесть ненулевую ширину области пространственного заряда W , надо в (3.59) сделать замену $z \rightarrow z - W$. В результате этого ΔI_c будет вычисляться согласно (3.62), а функция G_k (3.63) примет вид

$$G_k(x, y, k) = \frac{2}{\pi} \frac{k \exp(-\mu W)}{k^2 + \mu^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.64)$$

Ток от образца без дефекта, согласно (3.1) и (3.3), представляет собой

$$I = \int_0^W dz \iint g(x, y, z) dx dy + \int_W^\infty \exp\left(-\frac{z}{L}\right) dz \iint g(x, y, z) dx dy. \quad (3.65)$$

Для выбранной функции генерации рентгеновским пучком (3.57) этот интеграл берется аналитически, что приводит к

$$I = 2\pi\sigma^2 \left(\frac{1 - \exp(-\mu W)}{\mu} + \frac{L \exp(-W(L\mu + 1)/L)}{L\mu + 1} \right). \quad (3.66)$$

В методе EBIC, когда функция генерации задается соотношениями (3.55)-(3.56), ток от бездефектного образца

$$I = \pi \int_0^W \left(0.36d^2 + 0.11 \frac{z^3}{R} \right) \exp\left[-7.5 \left(\frac{z}{R} - 0.3 \right)^2\right] dz + \\ + \pi \int_W^\infty \exp\left(-\frac{z}{L_0}\right) \exp\left[-7.5 \left(\frac{z}{R} - 0.3 \right)^2\right] \left(0.36d^2 + 0.11 \frac{z^3}{R} \right) dz. \quad (3.67)$$

Последний интеграл рассчитывался численно методом прямоугольников. Для численных расчетов наведенного тока и контраста код был реализован с помощью программы *Матлаб*.

3.3.1. Анализ и сравнение с EBIC контрастом

Модельные расчеты наведенного тока и контраста проводились для образца с областью пространственного заряда $W = 0.3$ мкм, коэффициентом диффузии $D = 36$ см²/с, диффузионная длина L варьировалась от 5 до 100 мкм. Параметры дислокации принимали значения: $\varepsilon = 0.1$ мкм, $\gamma_d = 2\pi\varepsilon v_s = 6.28 \times 10^8$ мкм²/с, что соответствует $v_s = 10^5$ см/с. Контраст в методе EBIC был рассчитан для электронного пучка с энергией 25 и 35 кэВ, что соответствует глубине проникновения электронов 4.78 и 8.6 мкм, и шириной $d = 10$ нм. Расчет XBIC контраста производился для рентгеновского пучка с энергией 17.4 кэВ ($Mo_{K\alpha}$, коэффициент поглощения в кремнии $\mu = 15.6$ см⁻¹), ширина пучка варьировалась в пределах 1÷30 мкм. При расчете контраста границы зерна предполагалось, что $v_s = 10^4$ см/с.

Для диффузионной длины неосновных носителей заряда $L = 100$ мкм

ХВИС контраст дислокации показан на рис. 3.8 (а), а для границы зерна - на рис. 3.8 (b). На рис. 3.8(c, d) приведены профили контраста этих дефектов, рассчитанные для диффузионных длин 20, 40 и 100 мкм. Видно, что максимум ХВИС контраста для обоих типов дефектов увеличивается с ростом диффузионной длины, увеличивается также и ширина профиля контраста.

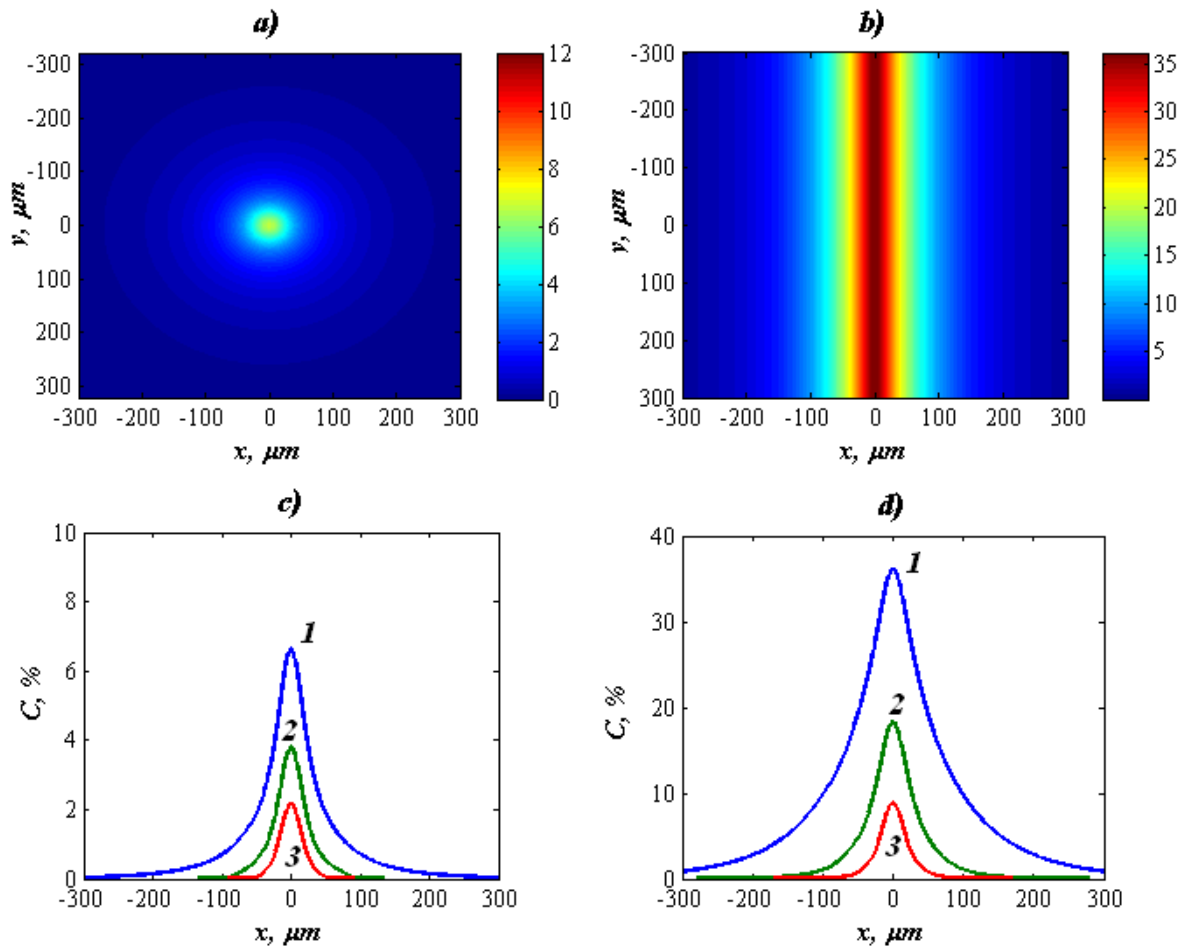


Рис. 3.8. Контраст от (a) дислокации и (b) границы зерна для $L = 100$ мкм. А также профили контраста вдоль оси $y = 0$ от (c) дислокации и (d) границы зерна для $L = 100$ (1), 40 (2) и 20 мкм (3) при следующих параметрах: $v_s = 10^4$ см/с для границы, $\gamma_d = 6.28 \times 10^8$ мкм²/с для дислокации, $\sigma = 10$ мкм, $W = 0.3$ мкм.

Поведение контраста наведенного тока в зависимости от характеристик дефекта демонстрирует рис. 3.9. Видно, что для обоих типов дефектов

максимум контраста растет с увеличением скорости рекомбинации v_s , но ширина профиля практически не изменяется. Для дислокации при увеличении радиуса ε контраст растет (кривые 4 и 1 на рис. 3.9).

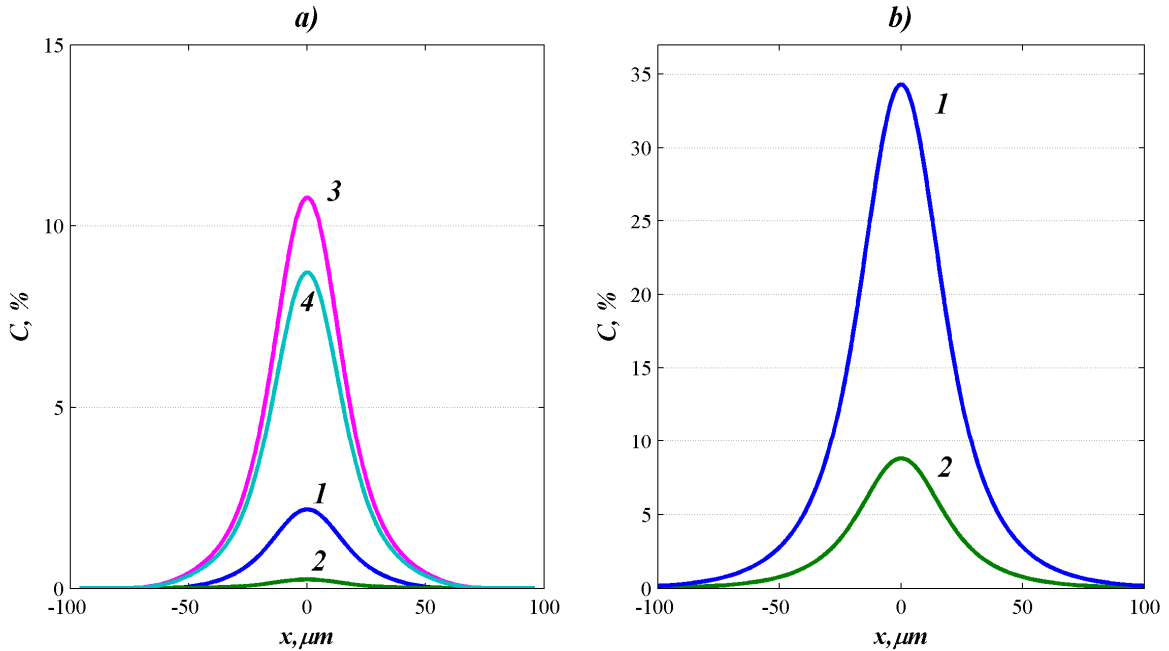


Рис. 3.9. Профили контраста вдоль оси $y = 0$ от (a) дислокации и (b) границы зерна для $v_s = 10^5$ (1), 10^4 (2) и 10^6 см/с (3). На рис. 3.9(a) кривые (1)–(3) рассчитаны для $\varepsilon = 0.1$ мкм, кривая (4) – для $\varepsilon = 0.5$ мкм и $v_s = 10^5$ см/с. Расчеты проводились для $L = 20$ мкм, $\sigma = 10$ мкм, $W = 0.3$ мкм.

На рис. 3.10 приведены профили контраста дислокации, перпендикулярной к поверхности образца, в методах ХВИС и ЕВИС для диффузионной длины 60 мкм. Видно, что в ХВИС методе максимум профиля контраста уменьшается при увеличении ширины пучка, а его ширина, наоборот, увеличивается. Видно, что для такой диффузионной длины ХВИС контраст превышает контраст в режиме ЕВИС уже при $\sigma < 10$ мкм.

На рис. 3.11 построена зависимость максимума контраста дислокации от диффузионной длины в методах ХВИС и ЕВИС. Контраст в методе ЕВИС растет при диффузионных длинах меньших, чем глубина проникновения

электронов, и практически не изменяется при больших диффузионных длинах. ХВИС контраст растет с увеличением диффузионной длины и не выходит на насыщение, поскольку диффузионная длина меньше глубины проникновения рентгеновского зонда рассматриваемой энергии.

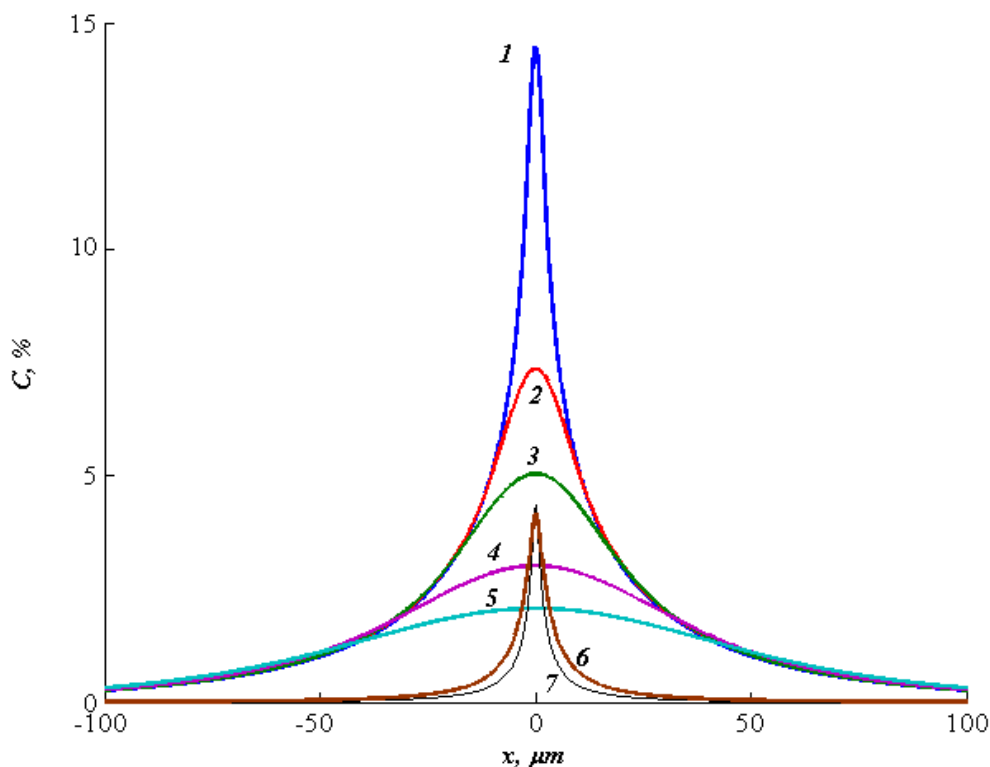


Рис. 3.10. Профили контраста от дислокации, перпендикулярной к поверхности, в методах ХВИС (кривые 1-5) и ЕВИС (кривые 6-7) для $L = 60$ мкм. Кривые 1-5 соответствуют различной ширине рентгеновского зонда: $\sigma = 1$ (1), 5 (2), 10 (3), 20 (4) и 30 мкм (5). Кривые 6-7 соответствуют разным энергиям пучка электронов: $E = 25$ (6) и 35 кэВ (7).

Из рис. 3.11 видно, что для тонкого ($\sigma = 1$ мкм) рентгеновского пучка ХВИС контраст превышает ЕВИС контраст для всех значений диффузионной длины в диапазоне $5 \div 100$ мкм. Значение диффузионной длины, при котором ХВИС контраст становится больше ЕВИС контраста, зависит от ширины рентгеновского пучка. В частности, для $\sigma = 5$ мкм это значение составляет

примерно 20 мкм, а для $\sigma = 20$ мкм – около 100 мкм. Из рисунков 3.10 и 3.11 видно, что ХВІС контраст дислокации может превышать контраст в режиме ЕВІС в 3-4 раза.

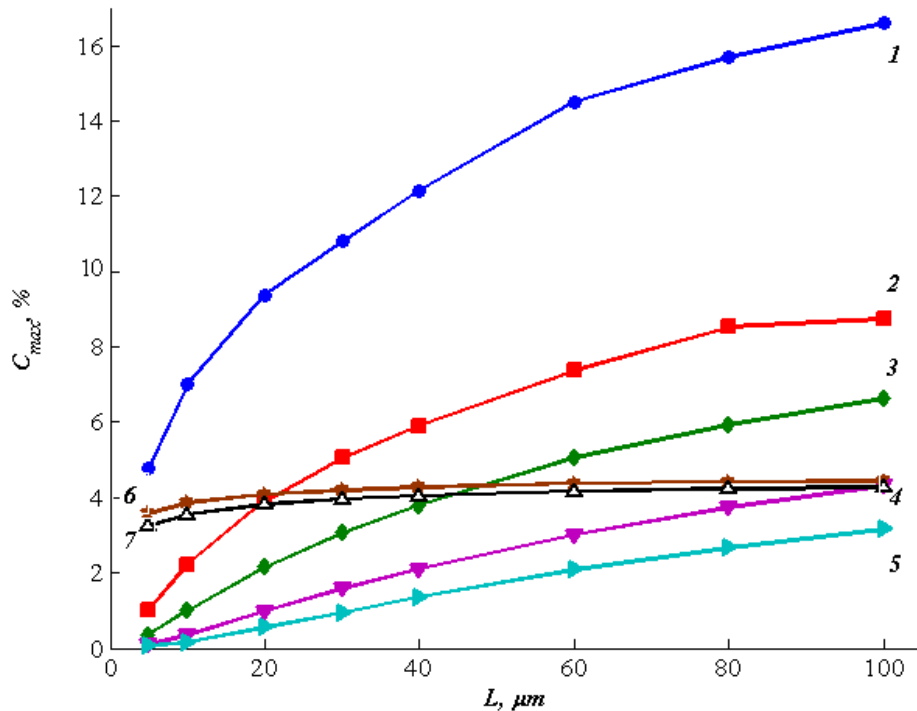


Рис. 3.11. Зависимость максимума контраста от диффузионной длины в методах ХВІС (кривые 1–5) и ЕВІС (кривые 6–7) для дислокации. Кривые 1–5 соответствуют различной ширине рентгеновского зонда: $\sigma = 1$ (1), 5 (2), 10 (3), 20 (4) и 30 мкм (5). Кривые 6–7 соответствуют разным энергиям пучка электронов: $E = 25$ (6) и 35 кэВ (7).

Для границы зерна различие между ХВІС контрастом и контрастом в режиме ЕВІС может быть таким же большим, как и для дислокации. Рис. 3.12 показывает убывание максимума C_{max} профиля контраста границы зерна (кривые 1-3) и дислокации (кривые 4-6) с увеличением ширины рентгеновского зонда σ . Также нужно отметить, что для дислокаций и границ зерен (с теми же значениями ν_s , γ_d и ϵ , что и на рис. 3.8, 3.12) ЕВІС контраст для диффузионных длин $L \sim 20-100$ мкм составляет $\sim 4\%$ и $\sim 5-10\%$ соответственно. То есть, для границ зерен чувствительность метода ХВІС выше, чем метода ЕВІС для $L > 20$ мкм и $\sigma < 30$ мкм. Для дислокаций ХВІС-

контраст также превышает контраст EBIC при достаточно большой диффузионной длине (например, $L = 100$ мкм для $\sigma = 25$ мкм) и достаточно малой ширине рентгеновского зонда ($\sigma = 5$ мкм для $L = 20$ мкм).

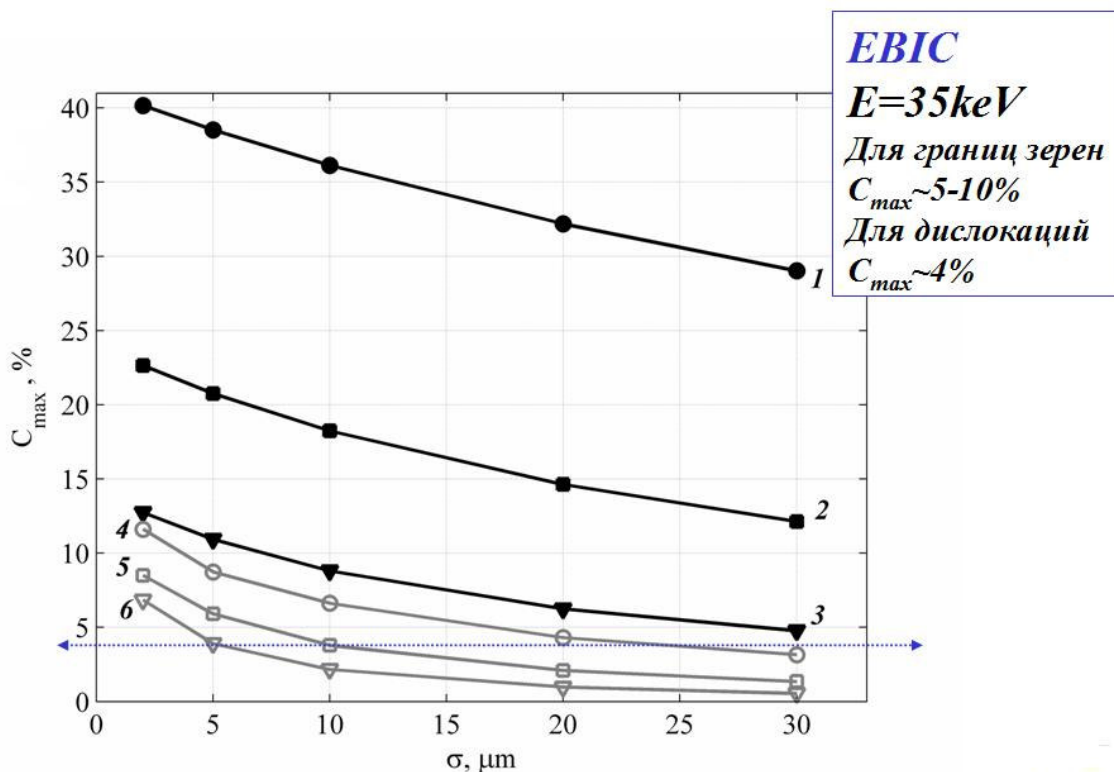


Рис. 3.12. Зависимость максимума XВІС контраста границы зерна от ширины рентгеновского пучка σ , рассчитанная для диффузионных длин $L = 100$ (1), 40 (2) и 20 мкм (3). Аналогичная зависимость для дислокации показана кривыми 4–6 для тех же значений диффузионных длин.

Для границ зерен при достаточно большой диффузионной длине ($L > 20$ мкм) XВІС контраст всегда больше контраста в режиме EBIC, и это различие увеличивается при увеличении диффузионной длины и уменьшении ширины рентгеновского пучка. То есть, при исследовании одномерных и двумерных дефектов и использовании рентгеновского пучка, перпендикулярного поверхности, метод XВІС обладает определенными преимуществами по сравнению с методом EBIC.

При использовании наклонного пучка, как в работе [75], XВІС контраст

дислокации будет существенно уменьшаться. Для границы зерна, параллельной пучку, он будет примерно таким же, как и рассчитанный в данной работе, а при наклоне пучка к плоскости границы контраст будет уменьшаться.

Таким образом, контраст в методе ХВИС, как для границ зерен, так и для дислокаций может в несколько раз превышать контраст в методе ЕВИС при достаточно малой ширине рентгеновского пучка. В полупроводниках с большой диффузионной длиной ХВИС контраст превышает ЕВИС контраст даже при достаточно большой ширине рентгеновского зонда. Таким образом, следует подчеркнуть, что при исследовании протяженных дефектов чувствительность метода ХВИС может быть в несколько раз выше, чем у метода ЕВИС.

3.3.2. Сравнение с экспериментальными данными

ХВИС метод был реализован в ИПТМ РАН на лабораторном рентгеновском источнике с вращающимся молибденовым анодом [120, 121]. Рентгеновский пучок фокусировался с помощью поликапиллярных полулинз с фокусом ~ 10 мкм и ~ 30 мкм. Исследуемый образец располагался в фокальной плоскости поликапиллярной полулинзы на платформе, автоматически перемещаемой в плоскости X-Y (см. рис. 3.13). Последовательные сканы посредством горизонтальных и вертикальных перемещений в плоскости, перпендикулярной направлению сфокусированного рентгеновского пучка, позволяли получить 2D карту тока. Величина индуцированного тока измерялась пикоамперметром *Keithley6485*. Для устранения влияния видимого света на результаты измерений часть установки с исследуемым образцом была помещена в темный кожух. И, таким образом, образец облучался только рентгеновским излучением. Управление сканированием производилось посредством специально разработанной в среде LABVIEW программы, которая позволяла регулировать параметры сканирования, такие

как направление и шаг, а также размер области сканирования.

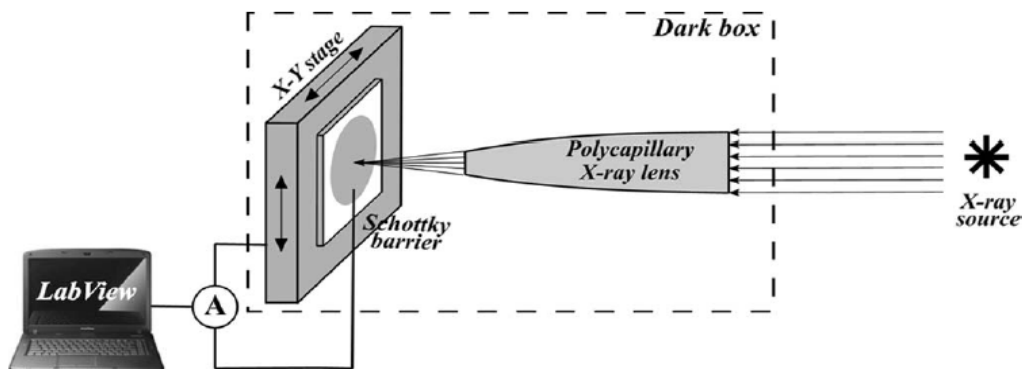


Рис. 3.13. Схема эксперимента по измерению наведенного рентгеновским пучком тока на лабораторном источнике [121].

Исследуемым объектом был образец из мультикристаллического кремния (*mc-Si*), допированного железом. Известно [138, 139], что допирование железом увеличивает контраст наведенного тока от протяженных дефектов. Для ХВИС и ЕВИС исследований на образец был термически осажден слой алюминия, который служил барьером Шоттки.

Измеренная поликапилляром с фокусом ~ 10 мкм двумерная ХВИС карта приведена на рис. 3.14. Стрелками отмечен участок, содержащий две близкорасположенные границы зерен.

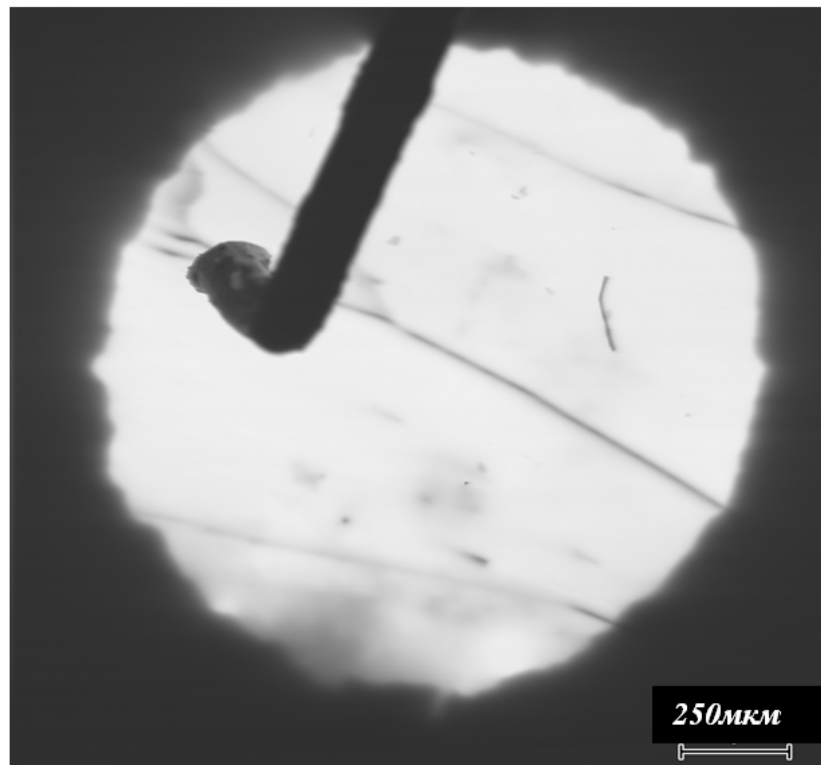
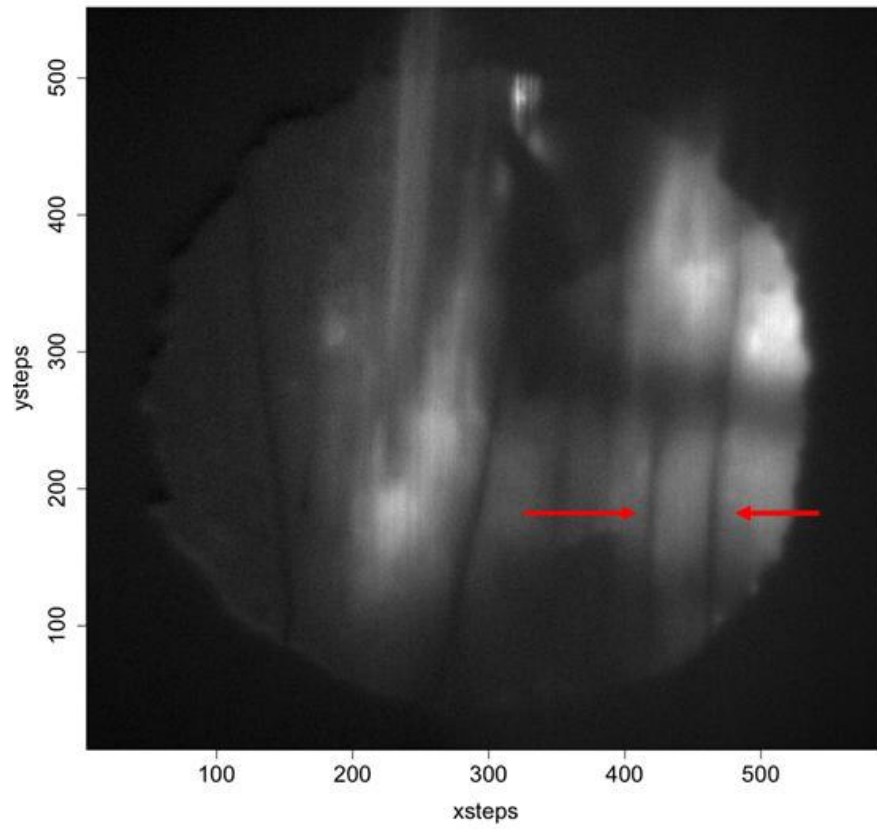


Рис. 3.14. Вверху – ХВЭС-изображение диода Шоттки на мультикристаллическом кремнии (шаг по осям равен 3.3 мкм); внизу – ЕВЭС-карта этого же образца [121].

Для сравнения EBIC исследование этого образца проводилось при комнатной температуре в сканирующем электронном микроскопе Jeol JSM 840 при энергии пучка 35 кэВ. Использовался ток пучка 10^{-10} А, что дает полную интенсивность генерации электрон-дырочных пар $5.5 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Токоусилитель Keithley 428 использовался для регистрации сигнала в EBIC измерениях.

Один из срезов приведенной на рис. 3.14 (вверху) карты наведенного тока, содержащий профили двух границ зерен, был выбран для сравнения результатов измерения и расчета. Анализируемый профиль показан на рис. 3.15(a). Зеленая кривая на этом рисунке – фон наведенного тока. Появление его связано с тем, что поликапилляр фокусирует в пятно шириной ~ 10 мкм около 50% проходящего через него излучения, а оставшаяся часть излучения распределена в области размера порядка 1 мм. Ток от этих не попавших в основной фокус квантов и является фоном. Он аппроксимировался функцией Гаусса $I_{bg} = 55 \exp\left(-\frac{(x-135)^2}{2(1250)^2}\right)$.

Профиль, за вычетом этого «Гауссова» фона, демонстрирует рис. 3.15(b), где стрелками отмечен участок, содержащий две близко расположенные границы зерен. Этот участок более подробно показан на рис. 3.15(c), где зеленой изображена кривая, которой аппроксимируется ток бездефектного образца I . Из рис. 3.14 видно, что ток, собираемый в областях, не содержащих протяженных дефектов (границ зерен), весьма значительно различается в разных точках образца, поэтому нельзя бездефектный ток описать одним независимым от координат значением. На рис. 3.15(c) кривая, описывающая бездефектный ток, задается полиномом второй степени. Величина контраста $C = 1 - I_c / I$ для рассматриваемого участка профиля показана на рис. 3.15(d).

Отдельно профили контраста левой и правой границ зерен приведены на рис. 3.16(a, b). На этом же рисунке показаны модельные профили контраста, наилучшим образом соответствующие экспериментальным. Кривые расчи-

таны для следующих значений параметров: $D = 36 \text{ см}^2/\text{с}$, $L = 25 \text{ мкм}$,
 $v_s = 10^5 \text{ см/с}$, $\mu = 15.6 \text{ см}^{-1}$ и $\sigma = 10 \text{ мкм}$.

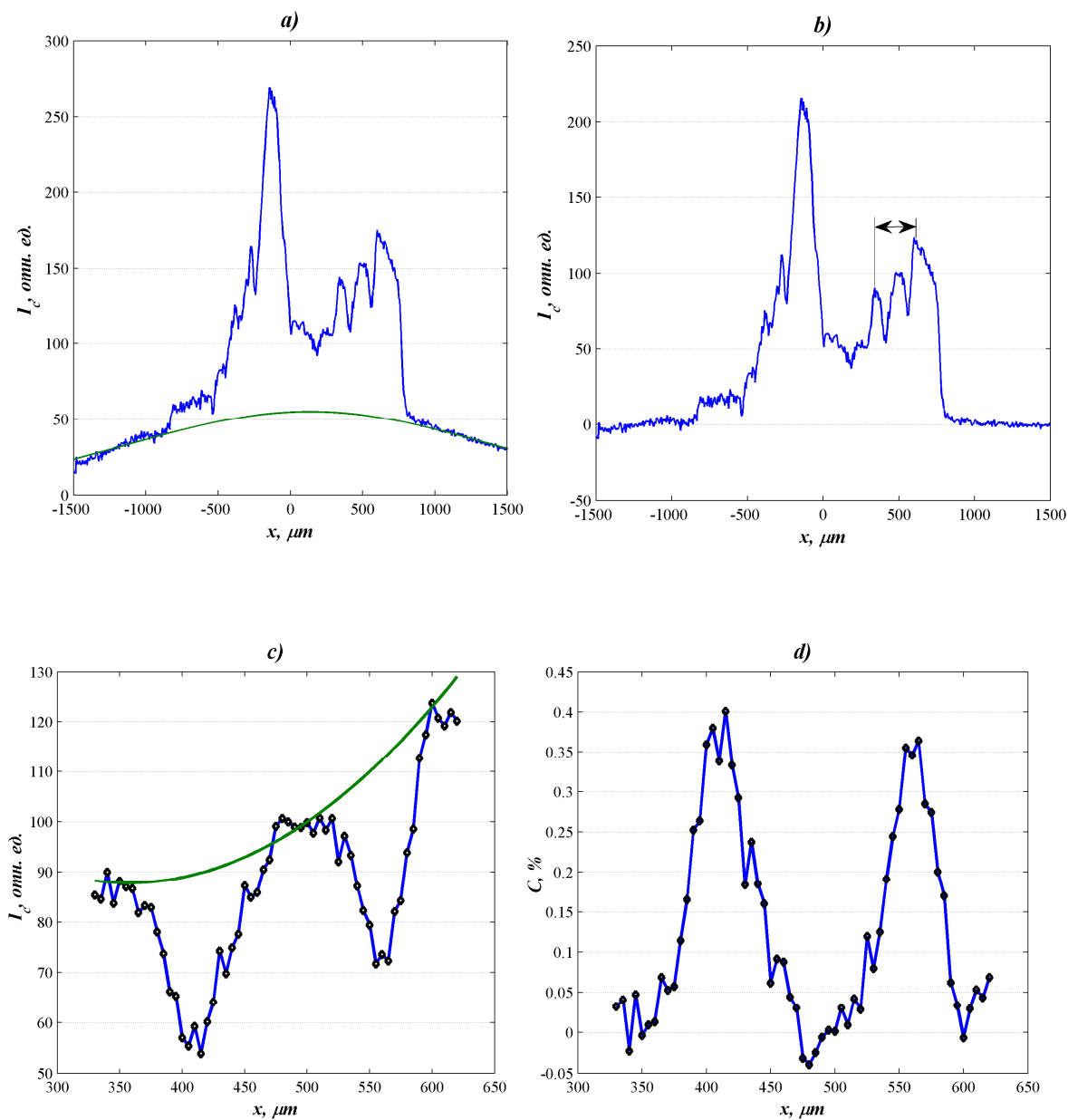


Рис. 3.15. (a, b) – Анализируемый срез ХВИС карты; (c) – участок среза, состоящий из профилей двух границ зерен; (d) – контраст этого участка; $\sigma = 10 \text{ мкм}$.

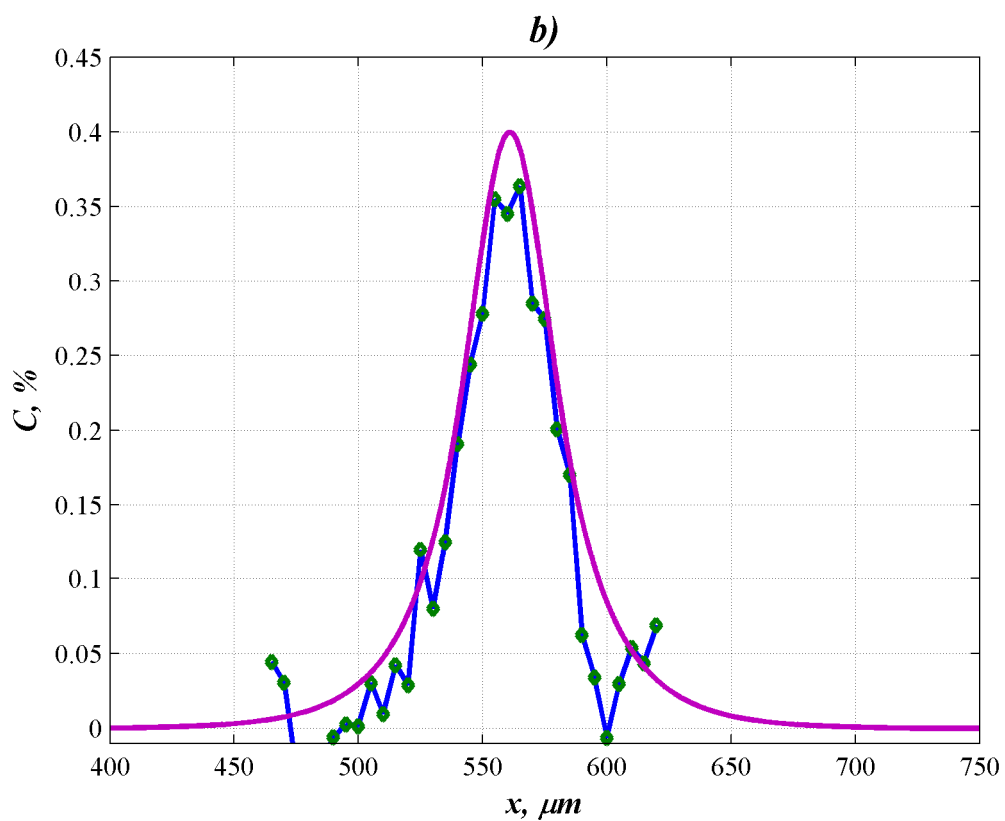
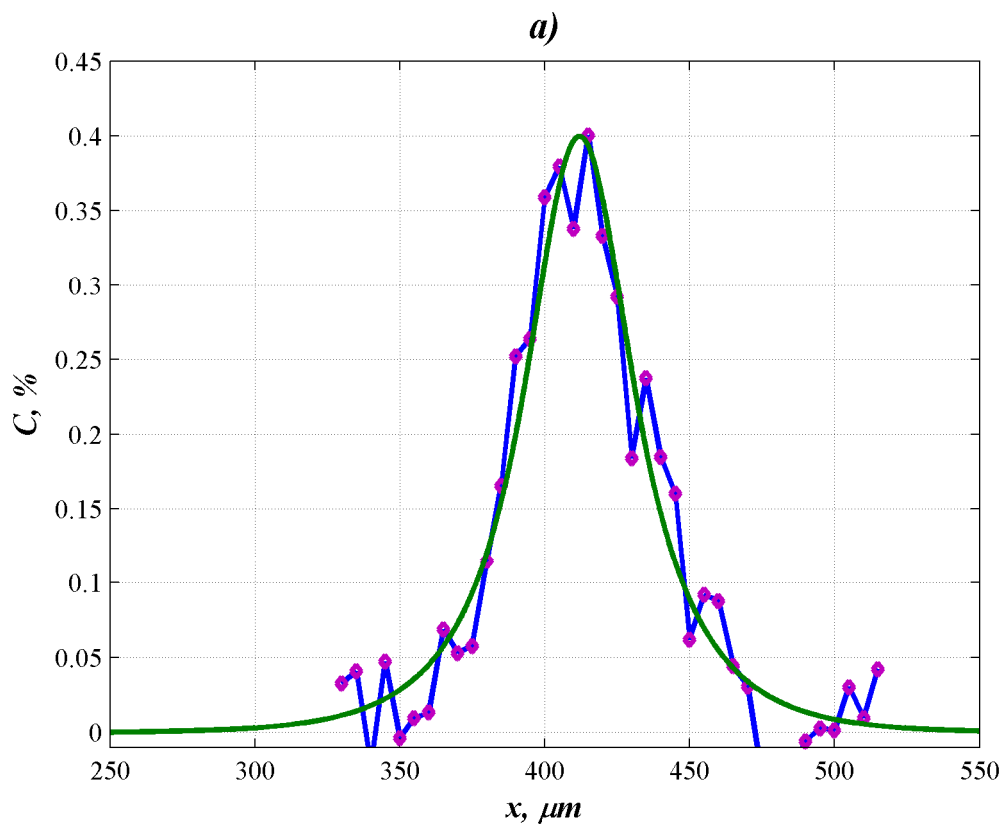


Рис. 3.16. Профили контраста (a) левой и (b) правой границ зерна, показанных на рис. 3.15. Зеленая и сиреневая кривые – расчетные значения контраста; $\sigma = 10$ мкм.

По измерениям образца в электронном микроскопе было известно, что диффузионная длина L составляет $\sim 20 - 25$ мкм. Подгонялись значения ширины пучка σ и скорости рекомбинации v_s .

Кривые на рис. 3.16 позволяют визуально оценить согласие результатов моделирования и экспериментальных данных. Однако, кроме этого, нужно еще и количественно оценить их соответствие. Оценивать суммарный модуль разности экспериментального и модельного профилей контраста не очень информативно, так как вдали от максимума профиля там, где абсолютное значение контраста мало, ошибка будет очень большой. Вместо этого удобно сравнивать значения первого момента (центра кривой):

$$M = \frac{\sum_i C_i x_i}{\sum_i C_i}, \quad (3.68)$$

и полуширины профиля, или дисперсии:

$$D = \frac{\sum_i C_i (x_i - M)^2}{\sum_i C_i}. \quad (3.69)$$

Здесь $\{C_i\}$ – значения контраста в точках с координатами $\{x_i\}$.

Для показанных на рис. 3.16 профилей характеризующие их величины (максимальное значение, центр, дисперсия) приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Сравнение экспериментального и модельного профилей контраста от границ зерен; $\sigma = 10$ мкм.

	Левая граница		Правая граница	
	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет
Максимальное значение	40%	40%	36.4%	40%
Центр	414 мкм	412 мкм	556.8 мкм	559 мкм
Полуширина	30.7 мкм	30.3 мкм	28.6 мкм	30.3 мкм

Для левой границы зерна приведенные в таблице 3.1. характеристики экспериментального и модельного профилей различаются меньше, чем на ~1%. В частности, различие значений первого момента составляет 0.5%. Полуширина модельного профиля составляет 30.3 мкм, а экспериментально измеренного профиля – 30.7 мкм, то есть их различие около 1.3%.

Для правой границы соответствие характеристик модельного экспериментального профилей несколько хуже: разница максимальных значений 9%, центров 0.4%, полуширины 5.6%. Однако рассматриваемые характеристики различаются не более чем на 10%, что не превышает флуктуаций тока рентгеновской трубки. Кроме того, для правой границы большее расхождение модельного и экспериментального профилей может быть связано с тем, что значение скорости рекомбинации несколько различается для каждой из границ.

Аналогичным образом проводилось сравнение результатов измерений, полученных для пучка шириной ~30 мкм на этом же образце, и модельных профилей. Рассматриваемый профиль наведенного тока демонстрирует рис. 3.17(a), а на рис. 3.17(b) – этот же профиль за вычетом «Гауссова» фона

$$I_{bg} = 45 \exp\left(-\frac{(x-1133)^2}{2(1650)^2}\right) \quad (\text{зеленая кривая на рис. 3.17(a)}).$$

Фон является следствием того, что около 40% рентгеновского излучения сфокусировано в пятно ~ 30 мкм, оставшаяся часть излучения распределена в области размера порядка 1.5 мм. Стрелками отмечен участок, содержащий профили границ зерен. Более подробно этот участок показан на рис. 3.17(c), где зеленая кривая – приближение тока, собираемого в отсутствие дефекта. Как и в рассмотренном выше случае, ток бездефектного образца аппроксимируется полиномом второй степени. Контраст $C = 1 - I_c / I$ содержащего две границы зерен участка профиля (рис. 3.17(c)) демонстрирует рис. 3.17(d). Профили контраста отдельно левой (a) и правой (b) границ демонстрирует рис. 3.18, на котором также показаны модельные профили контраста, наилучшим образом соответствующие экспериментальным. Кривые рассчитаны для значений

параметров $D = 36 \text{ см}^2/\text{с}$, $L = 25 \text{ мкм}$, $v_s = 10^5 \text{ см/с}$, $\mu = 15.6 \text{ см}^{-1}$ и $\sigma = 25 \text{ мкм}$.

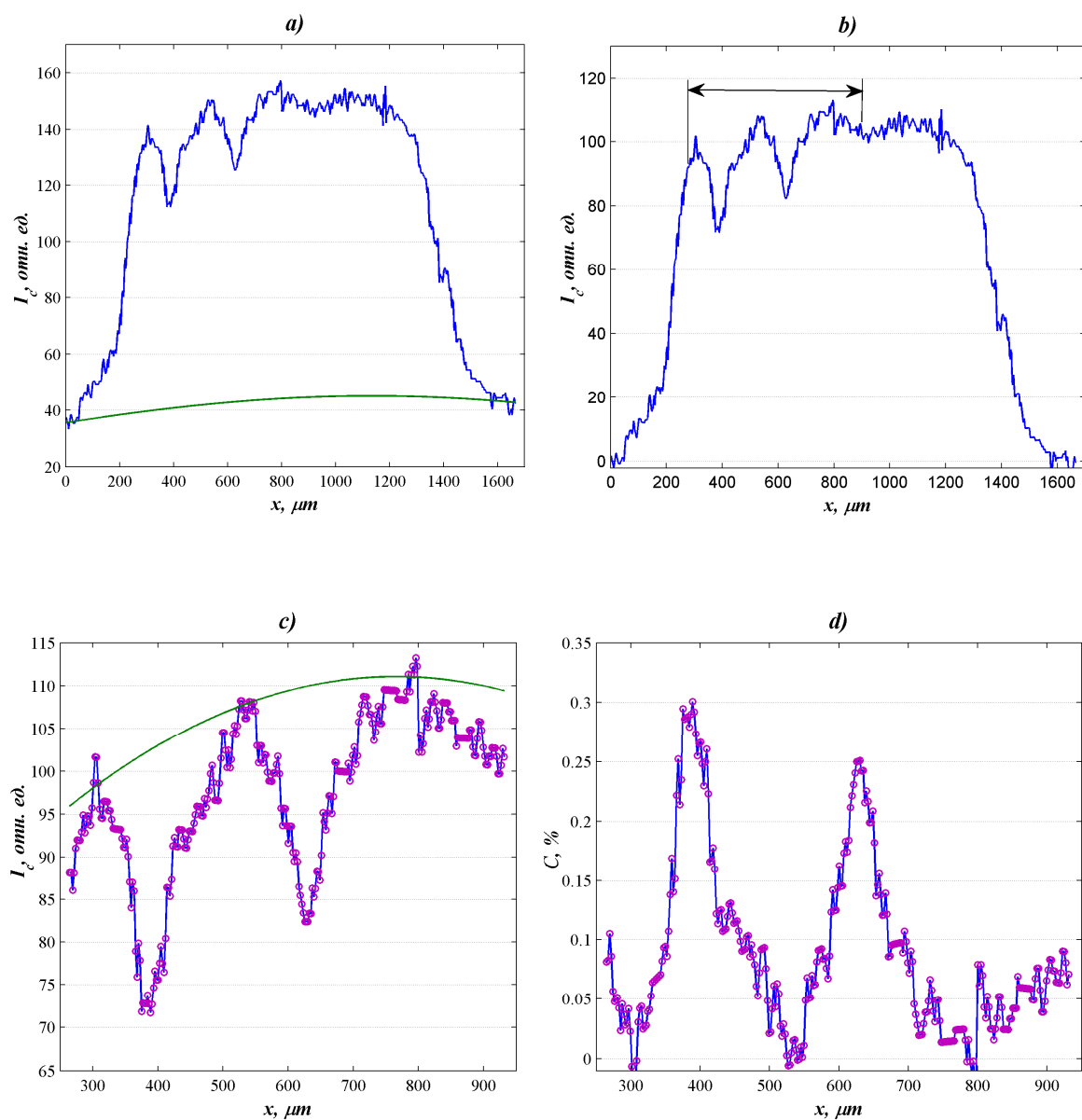


Рис. 3.17. (a, b) – анализируемый срез ХВИС карты; (c) – участок среза, состоящий из профилей двух границ зерен; (d) – контраст этого участка; $\sigma = 30 \text{ мкм}$.

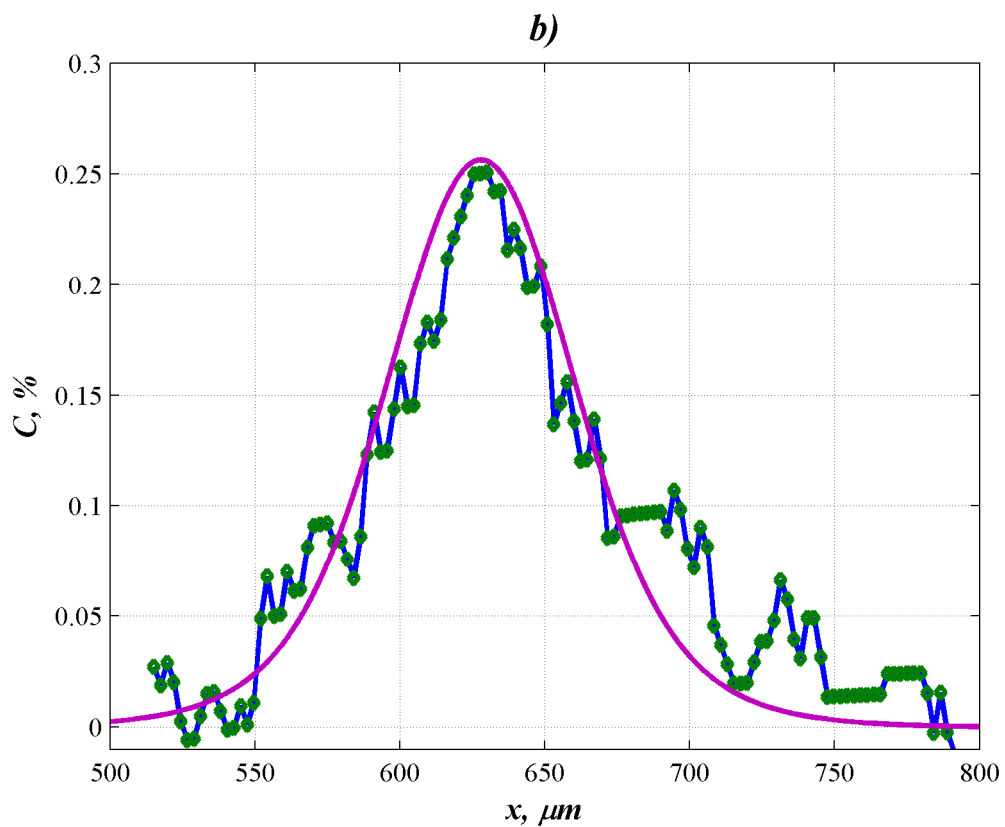
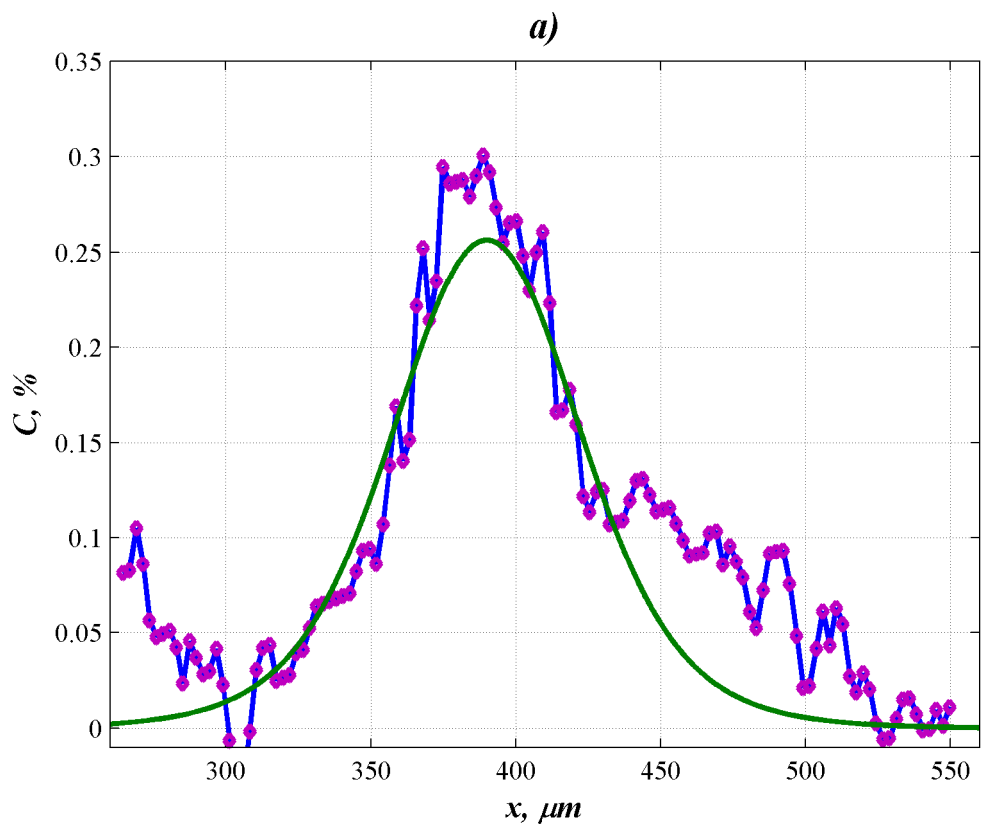


Рис. 3.18. Профиль контраста (а) левой и (б) правой границы зерна. Зеленая и сиреневая кривые – расчетные значения контраста; $\sigma = 30$ мкм.

В дополнение к визуальному сравнению экспериментальных и модельных профилей границ зерен, которое дает рис. 3.18, численные характеристики показанных на этом рисунке профилей приведены в таблице 3.2.

Таблица 3.2. Сравнение экспериментального и модельного профилей контраста от границ зерен; $\sigma = 30$ мкм.

	Левая граница		Правая граница	
	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет
Максимальное значение	30%	25.6%	25%	25.6%
Центр	398.5 мкм	390 мкм	640 мкм	628 мкм
Полуширина	55.6 мкм	38 мкм	50.1 мкм	38 мкм

По данным таблицы 3.2 видно не очень хорошее соответствие значений максимума для левой границы, а также полуширин для обеих границ. Основная причина несовпадения экспериментального и модельного профилей заключается в зашумленности измеренных данных, что является следствием флуктуаций анодного тока рентгеновской трубки. Еще одной причиной может быть не совсем корректный учет тока в отсутствии дефекта, что, вероятно, и является причиной «выбросов» на правых склонах экспериментальных профилей. В самом деле, если у профилей на рис. 3.18 сравнить полуширину на полувысоте (примерно 40 мкм для обоих экспериментальных и модельных профилей), то соответствие полученных значений будет намного лучше.

Таким образом, для метода наведенного рентгеновским пучком тока предложена и реализована модель расчета контраста от дислокаций и границ зерен. Удовлетворительное соответствие модельных профилей контраста и экспериментальных данных, показанное для различных значений ширины

рентгеновского пучка, говорит о допустимости использования предложенной модели функции генерации, по крайней мере, при ширине рентгеновского пучка большей, чем ~ 10 мкм.

Для более узких рентгеновских пучков нужно рассматривать функцию генерации, учитывающую процесс формирования электрон-дырочных пар таким рентгеновским пучком.

3.4. Функция генерации в приближении гауссового распределения электрон-дырочных пар, рожденных фотоэлектроном

Функция генерации электрон-дырочных пар рассматривается в рамках следующей модели взаимодействия рентгеновского пучка с материалом образца. Считается, что рентгеновские кванты выбивают фотоэлектроны из атомов полупроводникового кристалла-образца. Энергия фотоэлектронов того же порядка, что и энергия рентгеновских квантов ($\sim 10-20$ кэВ) и намного превышает энергию, необходимую для генерации одной e-h пары (для кремния 3.6 эВ). Далее фотоэлектрон при многократных столкновениях с кристаллической решеткой теряет энергию и генерирует электрон-дырочные пары.

Считается, что точки поворота фотоэлектрона (то есть места, где он сталкивается с решеткой и выбивает e-h пары) подчиняются распределению Гаусса с центром на расстоянии l , равном транспортной длине фотоэлектрона от точки его вылета, и шириной σ_e . Такая модель взаимодействия электрона с решеткой была предложена в работе [140], где методом Монте-Карло моделировался сигнал обратно рассеянных электронов, и с его помощью решалась задача реконструкции рельефа поверхности образца. В этой работе для электрона энергии ~ 10 кэВ в кремнии были получены оценки транспортной длины $l \approx 0.38R$ и $\sigma_e \approx 0.3R$, где $R = 0.017E^{1.75}$ - глубина проникновения электрона.

Вывод функции генерации сначала рассматривается для бесконечно

тонкого рентгеновского зонда. Затем полученный результат обобщается на случай рентгеновского пучка конечной ширины.

Поясняет используемую модель и демонстрирует систему координат рис. 3.19. Пусть рентгеновский пучок светит в точку с координатами (x_1, y_1) . Интенсивность этого бесконечно тонкого пучка экспоненциально убывает с глубиной и описывается выражением

$$I_{X\text{-ray}}(x, y, z) = I_0 \exp(-\mu z) \delta(x - x_1) \delta(y - y_1), \quad (3.70)$$

где I_0 – величина интенсивности, μ – коэффициент поглощения рентгеновских лучей, δ – дельта-функция Дирака. Интенсивность фотоэлектронов, выбиваемых рентгеновскими квантами в точке (x, y, z) , пропорциональна интенсивности рентгеновского пучка

$$I_{e\text{-photo}}(x, y, z, \Theta) = I_{X\text{-ray}}(x, y, z) \sin^2 \Theta. \quad (3.71)$$

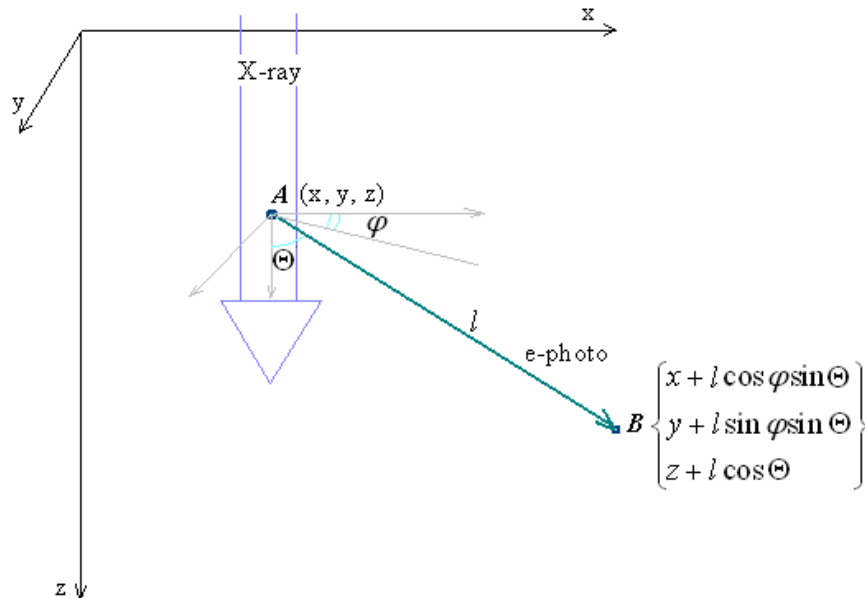


Рис. 3.19. Поясняющая схема к выводу функции генерации.

Согласно рассматриваемой модели, для фотоэлектрона, выбитого в точке $A(x, y, z)$, и летящем в направлении, характеризуемом углами (φ, Θ) , распределение сгенерированных им электрон-дырочных пар максимально в точке B с координатами $(x + l \cos \varphi \sin \Theta, y + l \sin \varphi \sin \Theta, z + l \cos \Theta)$ (см. рис. 3.19).

При удалении от точки \mathbf{B} распределение спадает по гауссовому закону. То есть, для такого фотоэлектрона количество сгенерированных в точке (x_0, y_0, z_0) электрон-дырочных пар

$$\rho = \rho(x_0, y_0, z_0, x, y, z, \Theta, \varphi) = c \exp\left(-\frac{(x + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2 + (z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right), \quad (3.72)$$

где c – нормировочная постоянная.

Чтобы получить величину функции генерации в точке (x_0, y_0, z_0) , нужно проинтегрировать распределения e - h пар по всем фотоэлектронам, вылетающим из точек с координатами (x, y, z) , и по всем элементам телесного угла $d\Omega = \sin \Theta d\Theta d\varphi$, куда может вылететь фотоэлектрон:

$$G(x_0, y_0, z_0) = \int dx dy dz \int d\Omega I_{e-photo}(x, y, z, \Theta) \rho(x, y, z, x_0, y_0, z_0, \Theta, \varphi). \quad (3.73)$$

При подстановке в (3.73) выражений для интенсивности фотоэлектронов (3.71), рентгеновского пучка (3.70), распределения e - h пар ρ (3.72), а также выражение для элемента телесного угла $d\Omega$, получается:

$$G(x_0, y_0, z_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \Theta d\Theta * \\ * I_0 \exp(-\mu z) \delta(x - x_1) \delta(y - y_1) \sin^2 \Theta * \\ * c \exp\left(-\frac{(x + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2 + (z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \quad (3.74)$$

Подробное описание преобразования этого выражения вынесено в Приложение I, где показано, что функцию генерации (3.74) можно упростить к следующему виду:

$$G(r, z_0) = c I_0 \sqrt{2\pi} \pi \sigma_e \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right) \exp(-\mu z_0) \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_e^2}\right) * \\ * \int_0^{\pi} \sin^3 \Theta \exp(\mu l \cos \Theta) \Phi_c\left(\frac{l \cos \Theta - z_0 + \mu \sigma_e^2}{\sqrt{2\sigma_e^2}}\right) I_0\left(\frac{r l \sin \Theta}{\sigma_e^2}\right) \exp\left(-\frac{l^2 \sin^2 \Theta}{2\sigma_e^2}\right) d\Theta, \quad (3.92)$$

где радиальная переменная $r = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$. Интеграл по переменной Θ взять аналитически не представляется возможным, поэтому он вычислялся численно.

Теперь несложно обобщить функцию генерации на случай рентгеновского пучка конечной ширины σ . Интенсивность такого пучка, который направлен в точку с координатами (x_1, y_1) :

$$I_{x-ray}(x, y, z) = I_0 \exp(-\mu z) \exp\left[-\frac{(x-x_1)^2 + (y-y_1)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (3.93)$$

Выражение для функции генерации (3.73), куда подставлено распределение e-h пар (3.72), интенсивность фотоэлектронов (3.71) и рентгеновского пучка (3.93), примет вид

$$\begin{aligned} G(x_0, y_0, z_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \Theta d\Theta * \\ &* I_0 \exp(-\mu z) \exp\left[-\frac{(x-x_1)^2 + (y-y_1)^2}{2\sigma^2}\right] \sin^2 \Theta * \\ &* c \exp\left(-\frac{(x+l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y+l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2 + (z+l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \end{aligned} \quad (3.94)$$

В приложении II показано, что это выражение после взятия интегралов по x, y, z и φ , принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} G(r, z_0) &= A \exp(-\mu z_0) \exp\left(-\frac{r^2}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \int_0^{\pi} d\Theta \sin^3 \Theta \exp(\mu l \cos \Theta) * \\ &* \Phi_c \left(\frac{l \cos \Theta + \mu \sigma_e^2 - z_0}{\sqrt{2}\sigma_e}\right) I_0 \left(\frac{r \sin \Theta}{\sigma^2 + \sigma_e^2}\right) \exp\left(-\frac{l^2 \sin^2 \Theta}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \end{aligned} \quad (3.95)$$

где введены обозначения для константы $A = c I_0 \frac{2^{3/2} \pi^{5/2} \sigma^2 \sigma_e^3}{\sigma^2 + \sigma_e^2} \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right)$ и радиальной переменной $r = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$.

Сравнивая выражения (3.92) и (3.95), можно отметить, что полученные функции генерации имеют одинаковую зависимость от переменной z . И функция генерации пучком конечной ширины (3.95) повторяет радиальную зависимость $G(r, z_0)$ для бесконечно тонкого пучка (3.92) с точностью до замены $\sigma_e^2 \rightarrow \sigma^2 + \sigma_e^2$.

На рис. 3.20 представлен результат расчета согласно (3.92) функции генерации электрон-дырочных пар бесконечно тонким рентгеновским пучком. При расчетах использовались значения, соответствующие энергии

зонда $E = 17.4$ кэВ. То есть, глубина проникновения $R = 2.5$ мкм, проекционная длина $l \approx 0.38R = 0.96$ мкм, $\sigma_e \approx 0.3R = 0.76$ мкм, а также $\mu = 15.6 \times 10^{-4}$ мкм и $c = 1$. Значение I_0 было выбрано таким образом, чтобы выполнялось $cI_0 \sqrt{2\pi} \pi \sigma_e \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right) = 1$.

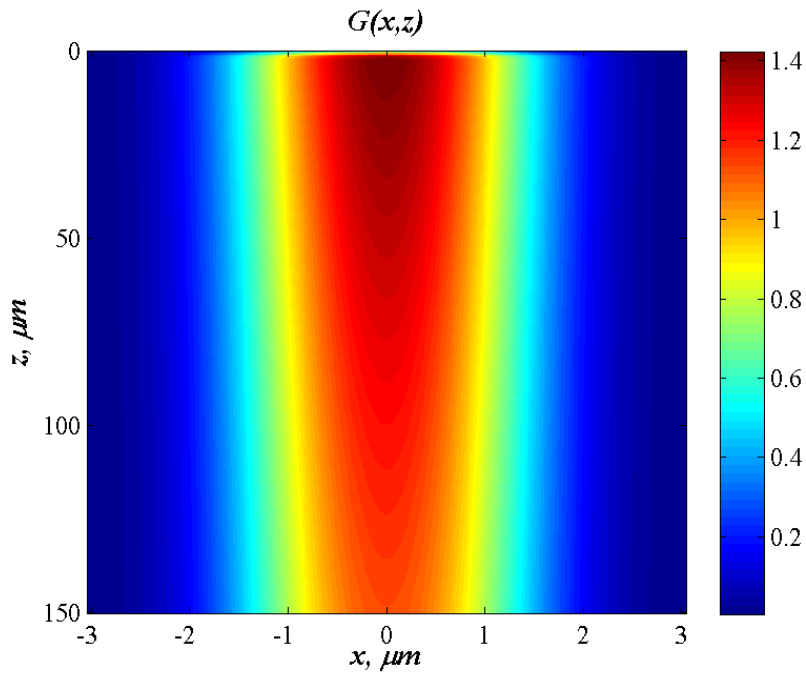


Рис. 3.20. Функция генерации электрон-дырочных пар бесконечно тонким рентгеновским пучком энергии 17.4 кэВ.

Об изменении функции генерации по глубине z можно судить по рис. 3.21(а), на котором показан срез функции генерации (3.92) при $x = 0$. Из анализа кривых на этом рисунке можно сделать вывод, что функция генерации экспоненциально (как функция $\exp(-\mu z)$) убывает при больших z , а возрастание ее при маленьких z описывается функцией ошибок $\Phi_c \left[\frac{l-z}{\sqrt{2}\sigma_e} \right]$.

Причем участок, на котором $G(x = 0, z)$ возрастает, примерно равен $\sqrt{2}\sigma_e$.

Поведение функции генерации при постоянном z демонстрирует рис. 3.21(б), где показаны профили при $z = 10$ мкм функции генерации для

случая бесконечно тонкого пучка (синяя кривая) и пучка ширины 2 мкм (красная кривая), которые нормированы таким образом, чтобы их максимумы были равны единице. Эти профили на рис. 3.21(б) сравниваются с функциями $\exp\left(-\frac{x^2}{2(\sigma_e^2 + (0.8l)^2)}\right)$ и $\exp\left(-\frac{x^2}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2 + (0.8l)^2)}\right)$ для $\sigma = 2$ мкм (зеленая и бирюзовая кривая соответственно). Из этого сравнения можно заключить, что профиль функции генерации на некоторой глубине z можно аппроксимировать функцией Гаусса с дисперсией $(\sigma^2 + \sigma_e^2 + (0.8l)^2)^{1/2}$.

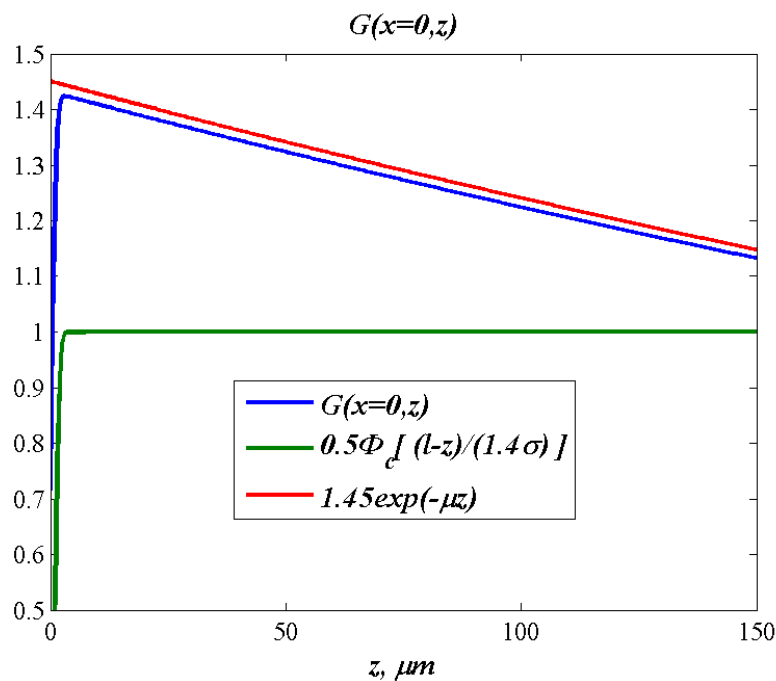


Рис. 3.21 (a) - профиль при $x = 0$ функции генерации бесконечно тонким рентгеновским пучком, а также экспоненциально убывающая функция и функция ошибок, хорошо описывающие $G(x = 0, z)$ при больших и маленьких z .

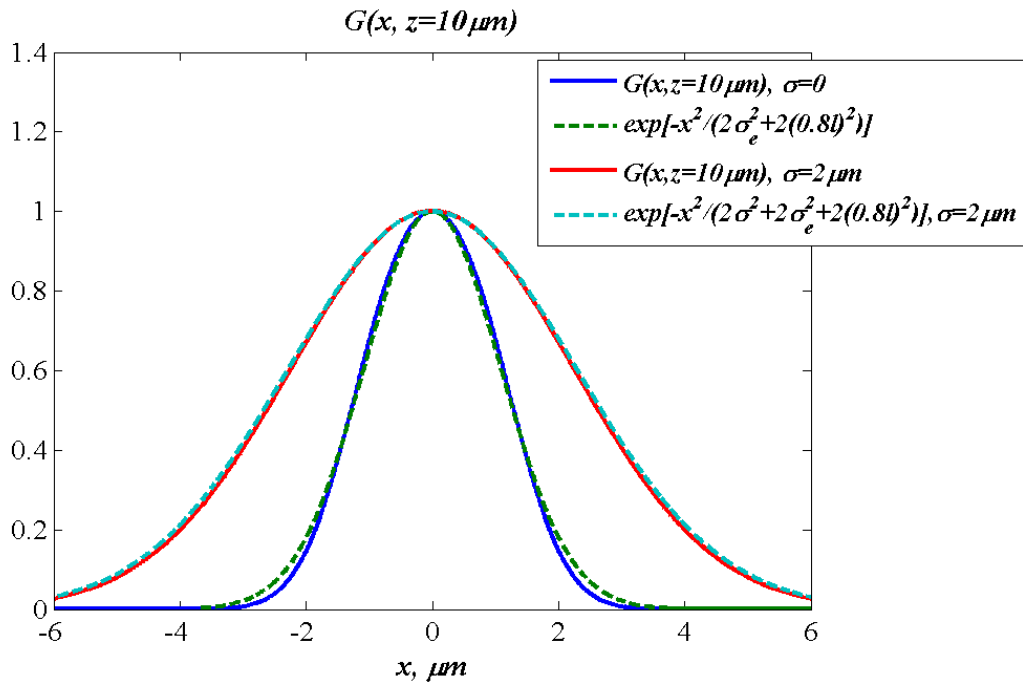


Рис. 3.21. (б) - профили при $z = 10$ мкм функции генерации бесконечно тонким рентгеновским пучком и пучком ширины $\sigma = 2$ мкм.

В результате анализа показанных на рис. 3.21 профилей, можно сделать вывод, что при большой ширине рентгеновского зонда $\sigma \gg \sigma_e, l$, зависимость функции генерации от пространственных координат будет близка к $\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right)\exp(-\mu z)$, то есть, пропорциональна интенсивности рентгеновского пучка.

3.5. Основные результаты и выводы главы III

В третьей главе диссертации получены следующие основные результаты:

1. Построены модели и проведены вычисления на их основе контраста наведенного рентгеновским пучком тока от дислокаций и границ зерен, перпендикулярных поверхности образца.

2. Исследована зависимость ХВИС контраста протяженных дефектов (дислокаций и границ зерен) от диффузионной длины неравновесных носителей заряда, ширины рентгеновского зонда и скорости рекомбинации на дефекте.

3. Проведено сравнение модельных профилей контраста с результатами измерений для двух значений ширины рентгеновского зонда. Результаты сравнения свидетельствуют о применимости предложенной модели расчета контраста.

4. Выведена уточненная функция генерации неравновесных e - h пар в предположении, что выбиваемый рентгеновскими квантами фотоэлектрон рождает e - h пары, распределенные в пространстве по гауссову закону с максимумом на расстоянии, равном транспортной длине от точки вылета.

5. Проведено сравнение ХВИС контраста от протяженных дефектов с контрастом от аналогичных дефектов в методе наведенного электронным пучком тока. Определены условия, при которых чувствительность метода ХВИС при исследовании протяженных дефектов выше, чем метода ЕВИС для таких же дефектов.

На основании полученных в главе III результатов можно сделать следующие основные **выводы**:

1. Модели формирования сигнала в методе наведенного рентгеновским пучком тока могут быть построены аналогично случаю EBIC метода.

2. Построенные модели наведенного рентгеновским пучком тока, в которых транспорт, регистрация носителей и влияние дефектов описываются по аналогии с EBIC методом, а темп генерации считается пропорциональным интенсивности рентгеновского пучка, дают результаты, согласующиеся с экспериментом для пучков с шириной более десяти микрон. Для более тонких пучков предложена более строгая модель генерации неравновесных носителей.

3. Вычисления в рамках построенных моделей наведенного тока показывают, что контраст от границ зерен и дислокаций может превышать измеряемый в EBIC контраст от аналогичных дефектов. То есть чувствительность метода XBIC при измерении образцов с протяженными дефектами может быть выше, чем чувствительность метода наведенного тока с помощью электронного пучка.

Выводы диссертации

1. Впервые проведены расчеты функции сбора сигнала для двух типов коллиматоров, используемых в конфокальной схеме рентгенофлуоресцентной томографии. Показано, что пространственное разрешение коллиматора, созданного методами микроэлектроники, выше, чем у поликапиллярного коллиматора при одинаковых геометрических параметрах (диаметр канала, угол раствора, фокусное расстояние).

2. Показано, что, в отличие от поликапиллярного коллиматора, у коллиматора, созданного методами микроэлектроники, функция сбора сигнала не зависит от энергии флуоресцентных квантов, поскольку основная часть излучения, собираемого коллиматором, проходит через его каналы «на просвет». Сформулированы рекомендации по выбору параметров микроэлектронного коллиматора, при которых можно пренебречь вкладом флуоресцентных квантов, проходящих через коллиматор за счет явления полного внешнего отражения.

3. Для метода наведенного рентгеновским пучком тока впервые предложена и реализована модель расчета контраста изображений дислокаций и границ зерен. Удовлетворительное соответствие модельных профилей контраста и экспериментальных данных, показанное для различных значений ширины рентгеновского зонда, свидетельствует о допустимости использования предложенной модели формирования сигнала.

4. Показано, что контраст изображений дислокаций и границ зерен, полученный в методе наведенного рентгеновским пучком тока при достаточно малой ширине рентгеновского пучка, может в 3-4 раза превышать контраст в методе тока, наведенного электронным пучком.

5. При исследовании протяженных дефектов в полупроводниках с большой диффузионной длиной чувствительность метода ХВИС может быть в несколько раз выше, чем у метода ЕВИС, даже при достаточно большой ширине рентгеновского зонда.

Приложение I

В этом приложении приведены преобразования интегрального выражения (3.74), описывающего функцию генерации:

$$G(x_0, y_0, z_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \Theta d\Theta * \\ * I_0 \exp(-\mu z) \delta(x - x_1) \delta(y - y_1) \sin^2 \Theta * \\ * c \exp\left(-\frac{(x + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2 + (z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \quad (П.1)$$

В исходном выражении (П.1) интегралы по x и y от дельта-функции взять легче всего, что приводит к

$$G(x_0, y_0, z_0) = c I_0 \int_0^{\pi} \sin^3 \Theta d\Theta \int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{(z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2} - \mu z\right) * \\ * \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{(x_1 + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y_1 + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \quad (П.2)$$

В выражении (П.2) рассмотрим сначала интеграл по z . Преобразуем выражение, являющееся аргументом экспоненты в этом интеграле, к виду

$$-\frac{(z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2} - \mu z = \\ = -\frac{(z + l \cos \Theta - z_0 + \mu \sigma_e^2)^2}{2\sigma_e^2} + \mu l \cos \Theta - \mu z_0 + \frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2} \quad (П.3)$$

При этом интеграл по z примет следующий вид:

$$\int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{(z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2} - \mu z\right) = \\ = \exp\left(\mu l \cos \Theta - \mu z_0 + \frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right) \int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{(z + l \cos \Theta - z_0 + \mu \sigma_e^2)^2}{2\sigma_e^2}\right) \quad (П.4)$$

В интеграле (П.4) нужно сделать замену $t = \frac{z + l \cos \Theta - z_0 + \mu \sigma_e^2}{\sqrt{2}\sigma_e}$, что позволит

свести его к дополнительной функции ошибок $\Phi_e(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\xi}^{\infty} \exp(-t^2) dt$ (см.,

например, в [133]). Таким образом,

$$\int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{(z+l\cos\Theta-z_0)^2}{2\sigma_e^2}-\mu z\right) =$$

$$= \exp(\mu l \cos\Theta - \mu z_0 + \frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}) \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_e}{2} \Phi_c\left(\frac{l\cos\Theta - z_0 + \mu\sigma_e^2}{\sqrt{2}\sigma_e}\right) \quad (\text{П.5})$$

При подстановке результата интегрирования по z (П.5) в (П.2) получается:

$$G(x_0, y_0, z_0) = cI_0 \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_e}{2} \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right) \exp(-\mu z_0) *$$

$$* \int_0^{\pi} \sin^3 \Theta d\Theta \exp(\mu l \cos\Theta) \Phi_c\left(\frac{l\cos\Theta - z_0 + \mu\sigma_e^2}{\sqrt{2}\sigma_e}\right) *$$

$$* \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{(x_1+l\cos\varphi\sin\Theta-x_0)^2 + (y_1+l\sin\varphi\sin\Theta-y_0)^2}{2\sigma_e^2}\right)$$

$$\quad . \quad (\text{П.6})$$

Теперь рассмотрим в (П.6) интеграл по переменной φ , который путем несложных преобразований можно упростить:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{(x_1+l\cos\varphi\sin\Theta-x_0)^2 + (y_1+l\sin\varphi\sin\Theta-y_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{(x_1-x_0)^2 + (y_1-y_0)^2 + l^2 \sin^2 \Theta}{2\sigma_e^2}\right) *$$

$$* \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{l\sin\Theta((x_1-x_0)\cos\varphi + (y_1-y_0)\sin\varphi)}{\sigma_e^2}\right)$$

$$\quad . \quad (\text{П.7})$$

Далее введем радиальную переменную

$$r = \sqrt{(x_1-x_0)^2 + (y_1-y_0)^2} \quad (\text{П.8})$$

и угол α такой, что $\sin\alpha = \frac{x_1-x_0}{r}$. При этом очевидно, что $\cos\alpha = \frac{y_1-y_0}{r}$.

Применив формулу синуса суммы, выражение (П.7) приведем к виду

$$\exp\left(-\frac{r^2 + l^2 \sin^2 \Theta}{2\sigma_e^2}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{rl\sin\Theta\sin(\varphi+\alpha)}{\sigma_e^2}\right). \quad (\text{П.9})$$

В полученном выражении интеграл по φ можно свести к соотношению, известному как интегральное представление функций Бесселя, а именно:

$$J_0(a) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(a \sin \beta) d\beta, \quad (\text{П.10})$$

где $J_0(a)$ – функция Бесселя нулевого порядка. Этот интеграл можно найти,

например, в справочнике [133] на стр. 321. Действительно, рассмотрим интеграл

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{rl \sin \Theta \sin(\varphi + \alpha)}{\sigma_e^2}\right) \quad (\text{П.11})$$

и введем обозначения $a = \frac{irl \sin \Theta}{\sigma_e^2}$ и $\beta = \varphi + \alpha$, которые подставим в (П.11), и перейдем к интегрированию по β :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{rl \sin \Theta \sin(\varphi + \alpha)}{\sigma_e^2}\right) = \int_{\alpha}^{2\pi+\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta). \quad (\text{П.12})$$

Получившийся интеграл (П.12) разобьем на три части:

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{2\pi+\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta) &= -\int_0^{\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta) + \int_0^{2\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta) + \\ &+ \int_{2\pi}^{2\pi+\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta) \end{aligned} \quad (\text{П.13})$$

Первое и третье слагаемое в (П.13) равны по величине и противоположны по знаку, что можно показать, сделав замену в третьем слагаемом $\beta_1 = \beta - 2\pi$:

$$\int_{2\pi}^{2\pi+\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta) = \int_0^{\alpha} d\beta_1 \exp(ia \sin \beta_1). \quad (\text{П.14})$$

Поэтому в (П.13) первое и третье слагаемые в сумме дают ноль и

$$\int_{\alpha}^{2\pi+\alpha} d\beta \exp(ia \sin \beta) = \int_0^{2\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta). \quad (\text{П.15})$$

Получившийся интеграл (П.15) разобьем на два интеграла с пределами интегрирования от 0 до π и от π до 2π . Во втором интеграле сделаем замену $\beta_2 = \beta - \pi$:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta) &= \int_0^{\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta) + \int_{\pi}^{2\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta) = \\ &= \int_0^{\pi} d\beta \exp(ia \sin \beta) + \int_0^{\pi} d\beta_2 \exp(-ia \sin \beta_2) = \\ &= 2 \int_0^{\pi} d\beta \cos(a \sin \beta) = 2\pi J_0(a) \end{aligned} \quad (\text{П.16})$$

В последнем равенстве подставлен интеграл (П.10). Таким образом,

интеграл (П.11) равен

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{rl \sin \Theta \sin(\varphi + \alpha)}{\sigma_e^2}\right) = 2\pi I_0\left(\frac{irl \sin \Theta}{\sigma_e^2}\right) = 2\pi I_0\left(\frac{rl \sin \Theta}{\sigma_e^2}\right), \quad (\text{П.17})$$

где I_0 – функция Бесселя чисто мнимого аргумента (также называемая функцией Инфельда и модифицированной функцией Бесселя). Результат интегрирования по φ получается при подстановке (П.17) в (П.9):

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{(x_1 + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y_1 + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) = \\ & = 2\pi \exp\left(-\frac{r^2 + l^2 \sin^2 \Theta}{2\sigma_e^2}\right) I_0\left(\frac{rl \sin \Theta}{\sigma_e^2}\right) \end{aligned} \quad (\text{П.18})$$

Подставляя (П.18) в (П.6), окончательно получаем функцию генерации в следующем виде:

$$\begin{aligned} G(r, z_0) = & c I_0 \sqrt{2\pi} \pi \sigma_e \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right) \exp(-\mu z_0) \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_e^2}\right) * \\ & * \int_0^{\pi} \sin^3 \Theta \exp(\mu l \cos \Theta) \Phi_c\left(\frac{l \cos \Theta - z_0 + \mu \sigma_e^2}{\sqrt{2}\sigma_e}\right) I_0\left(\frac{rl \sin \Theta}{\sigma_e^2}\right) \exp\left(-\frac{l^2 \sin^2 \Theta}{2\sigma_e^2}\right) d\Theta \end{aligned} \quad (\text{П.19})$$

где радиальная переменная r определяется в (П.8). Интеграл по переменной Θ взять аналитически не представляется возможным, поэтому он вычислялся численно.

Приложение II

В этом приложении рассматривается преобразование интегрального выражения (3.94) для функции генерации электрон-дырочных пар рентгеновским пучком конечной ширины:

$$\begin{aligned} G(x_0, y_0, z_0) = & \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \Theta d\Theta * \\ & * I_0 \exp(-\mu z) \exp\left[-\frac{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}{2\sigma^2}\right] \sin^2 \Theta * \\ & * c \exp\left(-\frac{(x + l \cos \varphi \sin \Theta - x_0)^2 + (y + l \sin \varphi \sin \Theta - y_0)^2 + (z + l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

Интеграл по переменной x в выражении (ПП.1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{(x+l\cos\varphi\sin\Theta-x_0)^2}{2\sigma_e^2}-\frac{(x-x_1)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\text{ПП.2})$$

вычислить несложно, нужно только преобразовать выражение, являющееся аргументом экспоненциальной функции:

$$\begin{aligned} &-\frac{(x+l\cos\varphi\sin\Theta-x_0)^2}{2\sigma_e^2}-\frac{(x-x_1)^2}{2\sigma^2}= \\ &= -\frac{\left(x-\frac{(x_0-l\cos\varphi\sin\Theta)\sigma^2+x_1\sigma_e^2}{\sigma^2+\sigma_e^2}\right)^2}{2\sigma_e^2\sigma^2/(\sigma^2+\sigma_e^2)}-\frac{(x_0-x_1+l\cos\varphi\sin\Theta)^2}{2(\sigma^2+\sigma_e^2)}. \end{aligned} \quad (\text{ПП.3})$$

В итоге результат взятия интеграла (ПП.2) будет следующий:

$$\frac{\sqrt{2\pi}\sigma_e\sigma}{\sqrt{\sigma^2+\sigma_e^2}} \exp\left(-\frac{(x_0-x_1+l\cos\varphi\sin\Theta)^2}{2(\sigma^2+\sigma_e^2)}\right). \quad (\text{ПП.4})$$

Интеграл по переменной y в (ПП.1) берется путем полностью аналогичных выкладок, и в результате получается, что

$$\frac{\sqrt{2\pi}\sigma_e\sigma}{\sqrt{\sigma^2+\sigma_e^2}} \exp\left(-\frac{(y_0-y_1+l\sin\varphi\sin\Theta)^2}{2(\sigma^2+\sigma_e^2)}\right). \quad (\text{ПП.5})$$

Что касается интегрирования по z в (ПП.1), то оно повторяет выкладки (П.3)-(П.5), сделанные для случая бесконечно тонкого рентгеновского пучка.

Таким образом, с учетом результатов интегрирования по x (ПП.4), по y (ПП.5) и по z (П.5) функция генерации (ПП.1) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} G(x_0, y_0, z_0) &= cI_0 \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_e}{2} \frac{2\pi\sigma^2\sigma_e^2}{\sigma^2+\sigma_e^2} \exp\left(\frac{\mu^2\sigma_e^2}{2}\right) \exp(-\mu z_0) * \\ &* \int_0^\pi \sin^3\Theta d\Theta \exp(\mu l \cos\Theta) \Phi_c\left(\frac{l\cos\Theta-z_0+\mu\sigma_e^2}{\sqrt{2}\sigma_e}\right) * \\ &* \int_0^{2\pi} d\varphi \exp\left(-\frac{(x_1+l\cos\varphi\sin\Theta-x_0)^2+(y_1+l\sin\varphi\sin\Theta-y_0)^2}{2(\sigma^2+\sigma_e^2)}\right) \end{aligned} \quad (\text{ПП.6})$$

В выражении (ПП.6) интеграл по угловой переменной φ повторяет аналогичный интеграл в (П.6) с точностью до выражения, стоящего в знаменателе экспоненты. Значит, и результат взятия этого интеграла будет

аналогичен (П.18) с точностью до замены $\sigma_e^2 \rightarrow \sigma^2 + \sigma_e^2$. Это приводит к следующему выражению для функции генерации:

$$G(r, z_0) = A \exp(-\mu z_0) \exp\left(-\frac{r^2}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \int_0^\pi d\Theta \sin^3 \Theta \exp(\mu l \cos \Theta) * \\ * \Phi_c\left(\frac{l \cos \Theta + \mu \sigma_e^2 - z_0}{\sqrt{2} \sigma_e}\right) I_0\left(\frac{rl \sin \Theta}{\sigma^2 + \sigma_e^2}\right) \exp\left(-\frac{l^2 \sin^2 \Theta}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \quad , \quad (\text{ПП.7})$$

где введены обозначения для константы $A = c I_0 \frac{2^{3/2} \pi^{5/2} \sigma^2 \sigma_e^3}{\sigma^2 + \sigma_e^2} \exp\left(\frac{\mu^2 \sigma_e^2}{2}\right)$ и

радиальной переменной $r = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$.

Список литературы

- [1]. *Hanoka J.I., Bell R.O.* Electron –beam-induced currents in semiconductors // *Ann. Rev. Mater. Sci.* 1981. V. 11. P. 353-380.
- [2]. *Leamy H.J.* Charge collection scanning electron microscopy // *J. Appl. Phys.*, 1982. V. 53. No. 6, P. 51-80.
- [3]. *Holt D.B., Muir M.D., Grant P.R., Boswarva I.M.* Quantitative Scanning Electron Microscopy // *New York: Academic* 1974. Ch. 2. P. 715.
- [4]. *Goldstein J.I., Yakowitz H., eds.* Practical Scanning Electron Microscopy // *New York: Plenum.* 1977. Ch. 2. P. 582.
- [5]. *Wu C.J., Wittry D.V.* Investigation of minority carrier diffusion lengths by electron bombardment of Schottky barriers // *J. Appl. Phys.* 1978. V. 49. P. 2827-2836.
- [6]. *Thronton P.R.* Scanning Electron Microscopy // *London: Chapman&Hall* 1968. Ch. 9. P. 652.
- [7]. *Holt D.B., Muir M.D., Grant P.R., Boswarva I.M.* Quantitative Scanning Electron Microscopy // *New York: Academic.* 1974. Ch. 8. P. 715.
- [8]. *Napchan E.* Electron and photon – mater interaction: energy dissipation and injection level // *Revue Phys. Appliq.* 1981. V. 24. P. 6-29.
- [9]. *Yakimov Eu.,* Electron beam induced current investigations of electrical inhomogeneities with high spatial resolution // *Scanning Microscopy.* 1992. V. 6. N.1. P. 81-96.
- [10]. *Niedrig H.* Electron backscattering from thin films // *J. Appl. Phys.* 1982. V. 53. P15-49.
- [11]. *Joy D.C.* The interpretation of EBIC images using Monte Carlo simulation // *J. Microscopy.* 1986. V. 143. P. 233-248.
- [12]. *Аристов В.В., Дремова Н.Н., Лихарев С.К., Рау Э.И.* Физические основы трехмерного неразрушающего метода исследования многослойных структур в отраженных электронах РЭМ // *Электронная промышленность.* 1990. № 2. С. 26-28.

- [13]. *Donolato C.* An analytical model of SEM and STEM charge collection images of dislocations in thin semiconductor layers // *Phys. Stat. Sol.* 1981. V. 65. P. 649-658.
- [14]. *Конников С. Г., Соловьев В. А., Уманский В. Е., Чистяков В.М.* Определение времени жизни неосновных носителей в полупроводниках при возбуждении электронным пучком в РЭМ // *Физика и Техника Полупроводников.* 1987. Т. 21. Вып. 11. С.2028-2032.
- [15]. *Everhart T.E., Hoff P.H.* Determination of kilovolt electron energy dissipation vs penetration distance in solid materials // *J. Appl. Phys.* 1971. V. 42. P. 5837-5846.
- [16]. *Fitting H.-G., Glaefcke H., Wild W.* Electron penetration and energy transfer in solid targets // *Phys. Stat. Sol.* 1977. V. 43. P. 185-190.
- [17]. *Van Roosbroeck W.* Injected current carrier transport in semi infinite semiconductor and the determination of lifetimes and surface recombination velocities // *J. Appl. Phys.* 1955. V. 26. P. 380-391.
- [18]. *Berz F., Kuiken H.K.* Theory of lifetime measurements with scanning electron microscope: steady state // *Solid State Electron.* 1976. V. 19. P. 437-445.
- [19]. *Leamy H.J. and Kimerling L.C.* Electron beam induced annealing of defects in GaAs // *J. Appl. Phys.* 1977. V. 48. P. 2795-2803.
- [20]. *Munakata C.* Measurement of the homogeneity of a semiconductor with an electron beam // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1965. V. 4. P. 815-816.
- [21]. *Munakata C.* Scanning electron micrograph using beta conductive signal // *J. Sci. Instrum. (J. Phys. E).* 1969. V. 2. P. 738-738.
- [22]. *Munakata C., Everhart T.E.* Frequency dependence of the diffusion length for excess minority carriers generated with a pulsed electron beam // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1972. V. 11. P. 913-914.
- [23]. *Gopinath A., deMonts de Savasse T.* On scanning electron microscope conduction mode signals in bulk semiconductor devices: annular geometry // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1971.V. 4. P. 2031-2038.

- [24]. *Ашкрофт Н., Мермин. Н.* Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. 399 с.
- [25]. *Куммель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
- [26]. *Горелик С.С., Дашевский М.Я.* Материаловедение полупроводников и диэлектриков: Учебник для вузов. М.: МИСиС, 2003. 480 с.
- [27]. *Sze S.M.* Physics of semiconductor devices. Wiley, New York. 1969. P. 812.
- [28]. *Everhart T. E.* Contrast formation in the scanning electron microscope // PhD thesis. 1958. Cambridge University, quoted in *Proc. Microbeam Analysis Soc., 13th Ann. Conf.* Pap. N. 33. 1978.
- [29]. *Everhart T.E., Wells O.C., Matta R.K.* A novel method semiconductor device measurements // *Proc. IEEE.* 1964. V. 52. P. 1642-1647.
- [30]. *Lander J.J., Schreiber H.Jr., Buck T.M., Mathews J.R.* Microscopy of internal crystal imperfections in Si p-n junction diodes by use of electron beams // *Appl. Phys. Lett.* 1963. V. 3. P. 206-207.
- [31]. *Czaja W., Wheatley G.H.* Simultaneous observation of diffusion-induced dislocation slip patterns in silicon with electron beam scanning and optical means // *J. Appl. Phys.* 1964. V. 35. P. 2782-2783.
- [32]. *Czaja W., Patel J.R.* Observations of individual dislocations and Oxygen precipitates in silicon with a scanning electron beam method // *J. Appl. Phys.* 1965. V. 36. P. 1476-1782.
- [33]. *Czaja W.* Detection of partial dislocations in silicon with the scanning electron beam technique // *J. Appl. Phys.* 1966. V. 37. P. 918-919.
- [34]. *Neve N.F.B., Thronton P.R.* Electrical effects of crystal imperfections studied by SEM // *Solid State Electron.* 1966. V. 9. P. 900-901.
- [35]. *Davies I.G., Hughes K.A., Sulway D.V., Thronton P.R.* The direct observation of electrical leakage paths due to crystal defects by use of the SEM // *Solid State Electron.* 1966. V. 9. P. 275-279.
- [36]. *Higuchi H., Tamura H.* Measurement of the lifetime of minority carriers in semiconductors with SEM // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1965. V. 4. P. 316-317.
- [37]. *Wittry D.B., Kyser D.F.* Cathodoluminescence at p-n junctions in GaAs // *J. Appl. Phys.* 1965. V. 36. P. 1387-1389.

- [38]. Davidson S.M., Dimitriadis C.A. Advances in the electrical assessment of semiconductors using the scanning electron microscope // *J. Microsc.* 1980. V. 118. P. 275-290.
- [39]. Everhart T.E., Wells O.C., Matta R.K. Evaluation of passivated integrated circuits using the scanning electron microscope // *J. Electrochem. Soc.* 1964. V. 111. P. 929-936.
- [40]. Bresse J.F. Quantitative use of the electron beam induced current (EBIC) for the characterization of semiconductor devices // *Scanning Electron Microsc.* 1977. V. 1. P. 683-693.
- [41]. Green D., Nathanson H.C. Observation of inversion layers under insulated-gate electrodes using scanning electron microscope // *Proc. IEEE.* 1965. V. 53. P. 183-184.
- [42]. Higuchi H., Maki M. Observation of channels of MOS FET's using a SEM // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1965. V. 4. P. 1021-1022.
- [43]. Neve N.F.B., Hughes K.A., Thronton P.R. Scanning Electron Microscopy as a means of studying microplasmas at high resolution // *J. Appl. Phys.* 1966. V. 37. P. 1704-1709.
- [44]. Neve N.F.B., Sulway D.V., Hughes K.A., Thronton P.R. The SEM as a means of investigating Second Breakdown and similar phenomena // *IEEE Trans. Electron Dev.* 1966. V. 13. N 8-9. P. 639-642.
- [45]. Gaylord J.W. Microplasma observations in silicon junctions using a scanning electron beam // *J. Electrochem. Soc.* 1966. V. 113. P. 753-754.
- [46]. Kimerling L.G., Leamy H.J., and Patel J.R., The electrical properties of stacking faults and precipitates in heat-treated dislocation free Czochralski silicon // *Appl. Phys. Lett.* 1977. V. 30. P. 217-219.
- [47]. Kimerling L.C., Leamy H.J., Benton J.L., Ferris S.D., Freeland P.E., Rubin J.J. Analysis of impurity distributions and defect structures in semiconductors by SEM charge collection microscopy // *Semiconductor Silicon.* 1977. P. 468-480.
- [48]. Kimerling L.C. Defect state microscopy // *Inst.Phys.Conf.* 1979. V. 43.

P. 113-121.

- [49]. *Leamy H.J., Kimerling L.C., Ferris S.D.* Electron beam induced current // *Scanning Electron Microscopy*, 1978. V. 1. P. 717-725.
- [50]. *Leamy H.J., Kimerling L.C., Ferris S.D.* Silicon single crystal characterization by SEM // *Scanning Electron Microsc.* 1976. Pt. 4. V. 1. P. 529-538.
- [51]. *Hanoka J.I.* Electron beam induced current characterization of polycrystalline silicon solar cells // *Solar Cells*. 1979/1980. V. 1. P. 123-139.
- [52]. *Donolato C.* Contrast formation in SEM charge-collection images of semiconductor defects // *Scanning Electron Microscopy*. 1979. V. 1. P. 257-260.
- [53]. *Donolato C.* Contrast and resolution of SEM charge-collection images of dislocations // *Appl. Phys. Lett.* 1979. V. 1. P. 80-81.
- [54]. *Donolato C.* A theoretical study of the charge collection contrast of localized semiconductor defects with arbitrary recombination activity // *Semicond Sci Technol.* 1992. V. 7. P. 37-43.
- [55]. *Blumtritt H., Gleichmann R., Heydenreich J., Johansen H.* Combined scanning (EBIC) and transmission electron microscopic investigation of dislocations in semiconductors // *Phys. Status Solidi A*. 1979. V. 55. P. 611-620.
- [56]. *Donolato C.* Modeling the effect of dislocations on the minority carrier diffusion length // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 84. N 5. P.2656-2664.
- [57]. *Donolato C.* Theory of beam induced current characterization of grain boundaries in polycrystalline solar cells // *J. Appl. Phys.* 1982. V. 54. N 3. P. 1314-1322.
- [58]. *Donolato C.* Relation between EBIC contrast and recombination velocity of a grain boundary // *Materials Science and Engineering*. 1994. V. 24. P. 61-63.

- [59]. *Frigeri C.* An EBIC method for the quantitative determination of dopant concentration at striations in LEC GaAs // *Inst. Phys. Conf. Sect. II.* 1987. N 87. P. 745-750.
- [60]. *Possin G.E., Kirkpatrick C.G.* Electron-beam measurements of minority-carrier lifetime distributions in ion-beam-damaged silicon // *J. Appl. Phys.* 1979. V. 50. P. 4033-4041.
- [61]. *Bondarenko I.E., Koveshnikov S.V., Yakimov E.B., Yarykin N.A.* Investigation of electrical property inhomogeneities formed by plasma etching // *J. Phys. IV France.* 1991. V. 1. N. C6. P. 217-222.
- [62]. *Kononchuk O.V., Yakimov E.B.* Mapping of diffusion length and depletion region width in Schottky diodes // *Semicond. Sci. Technol.* 1992. V. 7. P. A 171-A 174.
- [63]. *Yakimov E.* Modulated electron-beam-induced current and cathodoluminescence // *Mater. Sci. and Engineering B.* 1994. V. 24. P. 23-27.
- [64]. *Kononchuk O.V., Yakimov E.B.* Processes of Defect Formation and Gettering under Dry Etching of Si and GaAs and Measurements of Diffusion Length Profile // *Solid State Phenomena.* 1993. V. 32-33. P. 99-104.
- [65]. *Leedy K.O.* A bibliography on electron beam induced current analysis of semiconductor devices // *Solid State Technol.* 1977. V. 19. P. 45-48.
- [66]. *van Opdorp C.* Methods of evaluating diffusion length and near-junction luminescence-efficiency profiles from SEM scans // *Philips Res. Reports.* 1977. V. 32. P. 192-249.
- [67]. *Ioannou D.E., Davidson S.M.* Diffusion length evaluation of boron-implanted silicon using the SEM-EBIC Schottky diode technique // *J. Phys. D.* 1979. V. 12. P. 1339-1344.
- [68]. *Ioannou D.E., Dimitriadis C.A.* A SEM-EBIC minority-carrier diffusion length measurement technique // *IEEE Trans. Electron Devices.* 1982. ED 29. P. 445-450.
- [69]. *Kuiken H.K, van Opdorp C.* Evaluation of diffusion length and surface-

- recombination velocity from a planar-collector-geometry electron-beam-induced current scan // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. P. 2077-2089.
- [70]. Artz B.E. Electron-beam-induced current determination of minority-carrier diffusion length and surface recombination velocity in mercury-cadmium telluride // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. P. 2886-2891.
- [71]. Donolato C. Charge collection in a Schottky diode as a mixed boundary-value problem // *Solid-State Electron.* 1985. V. 28. P. 1143-1151.
- [72]. Luke K.L. The evaluation of surface recombination velocity from normal-collector geometry electron-beam-induced current line // *J. Appl. Phys.* 1994. V. 75. P. 1623-1631.
- [73]. Luke K.L. Evaluation of diffusion length from a planar-collector-geometry electron-beam-induced current profile // *J. Appl. Phys.* 1996. V. 80. P. 5775-5785.
- [74]. Конончук О.В., Якимов Е.Б. Измерения больших диффузионных длин методом наведенного тока с модуляцией ОПЗ // *Известия РАН. сер. физ.* 1995. Т. 59. № 2. С. 82-86.
- [75]. Vyvenko O.F., Buonassisi T., Istratov A.A. X-ray beam induced current - a synchrotron radiation based technique for the *in situ* analysis of recombination properties and chemical nature of metal clusters in silicon // *J. Appl. Phys.* 2002. V. 91. N 6. P. 3614-3617.
- [76]. Vyvenko O.F., Buonassisi T., Istratov A.A., Weber E.R., Kittler, M., Seifer, W. Application of synchrotron-radiation-based x-ray microprobe techniques for the analysis of recombination activity of metals precipitated at Si/SiGe misfit dislocations // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. V. 14. P. 13079-13086.
- [77]. Buonassisi T., Istratov A.A., Marcus M.A., Heuer M., Pickett M.D., Lai B., Cai Z., Heald S.M., Weber E.R. Local measurements of diffusion length and chemical character of metal clusters in multicrystalline silicon // *Solid State Phenomena.* 2005. V. 108-109. P. 577-584.

- [78]. *Buonassisi T., Istratov A.A., Heuer M., Marcus M.A., Jonczyk R., Isenberg J., Zhonghou Cai, Heald S., Warta W., Schindler R., Willeke G., Weber E.R.* Synchrotron-based investigations of the nature and impact of iron contamination in multicrystalline silicon solar cells // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 97. P. 74-91.
- [79]. *Seifert W., Vyvenko O.V., Arguirov T., Erko A., Kittler M., Rudolf C., Salome M., Trushin M., Zizak I.* Synchrotron microscopy and spectroscopy for analysis of crystal defects in silicon // *Phys. Status Solidi.* 2009. V. 6. N 3. P. 765-771.
- [80]. *Trushin M., Vyvenko O.V., Seifert W., Kittler M., Zizak I., Erko A., Seibt M., Rudolf C.* Combined XBIC/ μ -XRF/ μ -XAS/DLTS investigation of chemical character and electrical properties of Cu and Ni precipitates in silicon // *Phys. Status Solidi.* 2009. V. 6. N 8. P. 1868-1873.
- [81]. *Seifert W., Vyvenko O., Arguirov T., Kittler M., Salome M., Seibt M., Trushin M.* Synchrotron-based investigation of iron precipitation in multicrystalline silicon // *Supperlattices and Microstructures.* 2009. V. 45. P. 168-176.
- [82]. *Trushin M., Vyvenko O., Seifert W., Jia G., Kittler M.,* Iron–oxygen interaction in silicon: A combined XBIC/XRF-EBIC-DLTS study of precipitation and complex building // *Physica B,* 2009. V. 404. P. 4645-4648.
- [83]. *Jonge M., and Vogt S.* Hard X-ray fluorescence tomography – an emerging tool for structural visualization // *Current opinion in structural biology.* 2010. V. 20. P. 606-614.
- [84]. *Лосев Н.Ф., Смагунова А.Н.* Основы рентгеноспектрального флуоресцентного анализа. М.: Химия, 1982. 208с.
- [85]. Palmer laboratory. [Электронный ресурс]. URL: <http://physiology.uvm.edu/palmer/techniques.php> (дата обращения

25.05.2012)

- [86]. *Mosselmans J.F.W., Quinn P.D., Dent A.J., Cavill S.A., Moreno S.D., Peach A., Leicester P.J., Keylock S.J., Gregory S.R., Atkinson K.D.* I18-the microfocus spectroscopy beamline at the Diamond Light Source // *J. Synchrotr. Radiat.* 2009. V. 16. P. 818-824.
- [87]. *Bohic S., Simionovici A., Snigirev A., Ortega R., Deves G., Heymann D., Schroer C.G.* Synchrotron hard X-ray microprobe: fluorescence imaging of single cells // *Appl Phys Lett.* 2001. V. 78. P. 3544-3546.
- [88]. *Revenko A.G.*, Specific features of X-ray fluorescence analysis techniques using capillary lenses and synchrotron radiation // *Spectroc. Acta B: Atom. Spectr.* 2007. V. 62. P. 567-576.
- [89]. *Iida A, Gohshi Y.* Tracer element analysis by X-ray fluorescent // *Handbook on Synchrotron Radiation* 1991. V. 4. P. 307–348.
- [90]. *B. Beckhoff, B. Kanngiesser, N. Langhoff, R. Wedell, H. Wolff (Eds.).* Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis. Springer. Berlin. Heidelberg. New York. 2006. P 863.
- [91]. *Kak A.C., Slaney M.* Principles of Computerized Tomographic Imaging. IEEE Press. 1988. P. 331.
- [92]. *Jonge M.D., Holzner C., Baines S.B., Twining B.S., Ignatyev K., Diaz J., Howard D.L., Miceli A., McNulty I., Jacobsen C.J.* Quantitative 3-D elemental microtomography of whole *Cyclotella meneghiniana* at 400-nm resolution // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2010. V. 107. P. 15676-15680.
- [93]. *Kim S.A., Punshon T., Lanzirotti A., Li L.T., Alonso J.M., Ecker J.R., Kaplan J., Guerinot M.L.* Localization of iron in Arabidopsis seed requires the vacuolar membrane transporter VIT1 // *Science.* 2006. V. 314. P. 1295-1298.
- [94]. *Hogan J.P., Gonsalves R.A., Krieger A.S.* Fluorescent computer tomography: a model for correction of X-ray absorption // *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 1991. V. 38. P. 1721-1727.

- [95]. *Schroer C.G.*, Reconstructing X-ray fluorescence microtomograms // *Appl. Phys. Lett.* 2001. V. 79. P. 1912-1914.
- [96]. *McNear D.H., Peltier E., Everhart J., Chaney R.L., Sutton S., Newville M., Rivers M., Sparks D.L.* Application of quantitative fluorescence and absorption-edge computed microtomography to image metal compartmentalization in *Alyssum murale* // *Environ. Sci. Technol.* 2005. V. 7. P. 2210-2218.
- [97]. *Golosio B., Simionovici A., Somogyi A., Lemelle L., Chukalina M., Brunetti A.* Internal elemental microanalysis combining X-ray fluorescence, Compton and transmission tomography // *J Appl. Phys.* 2003. V. 94. P. 145-156.
- [98]. *La Rivie`re P.J., Vargas P.A.* Monotonic penalized-likelihood image reconstruction for X-ray fluorescence computed tomography // *IEEE Trans. Med. Imaging.* 2006. V. 25. P. 1117-1129.
- [99]. *Miqueles E.X., De Pierro A.R.* Exact analytic reconstruction in X-ray fluorescence CT and approximated versions // *Phys. Med. Biol.* 2010. V. 55. P. 1007-1024.
- [100]. *Mueller K.* Fast and accurate three-dimensional reconstruction from cone-beam projection data using algebraic methods. The Ohio State University. Dissertation. 1998. P 273.
- [101]. *Chukalina M., Simionovici A., Snigirev A., and Jeffries T.* Quantitative characterization of microsamples by x-ray fluorescence tomography // *X-ray Spectrometry.* 2002. V. 31. N 6. P. 448-450.
- [102]. *Miqueles E. X., and De Pierro A. R.,* Iterative Reconstruction in X-ray Fluorescence Tomography Based on Radon Inversion // *IEEE Trans. Medical Imaging.* 2011. V. 30. N 2. P. 438-450.
- [103]. *La Riviere P., Vargas P., Xia D, and Pan X. C.* Region of Interest Reconstruction in X-ray Fluorescence Computed Tomography for Negligible Attenuation // *IEEE Trans. Nuclear Science.* 2010. V. 57. N.1. P. 234-241.
- [104]. *La Rivie`re P.J., Vargas P., Newville M., Sutton S.R.* Reduced-scan schemes

- for X-ray fluorescence computed tomography // *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 2007. V. 54. P. 1535-1542.
- [105]. *Malzer W., Kanngiesser B.* A model for the confocal volume of 3D micro X-ray fluorescence spectrometer // *Spectroc. Acta. B: Atom. Spectr.* 2005. V. 60. P. 1334-1341.
- [106]. *Chukalina M., Simionovici A., Zaitsev S., Vanegas C.J.* Quantitative comparison of X-ray fluorescence microtomography setups: standard and confocal collimator apparatus // *Spectroc. Acta. B: Atom. Spectr.* 2007. V. 62. P. 544-548.
- [107]. *Vincze L., Vekemans B., Brenker F.E., Falkenberg G., Rickers K., Somogyi A., Kersten M., Adams F.* Three-dimensional trace element analysis by confocal X-ray microfluorescence imaging // *Anal. Chem.* 2004. V. 76. P. 6786-6791.
- [108]. *Janssens K., Proost K., Falkenberg G.* Confocal microscopic X-ray fluorescence at the HASYLAB microfocus beamline: characteristics and possibilities 2004. *Spectrochim. Acta Part A*, V. 59. N 533. P.1637-1645.
- [109]. *Malzer W.* 3D mirco X-ray fluorescence analysis // *The Rigaku Journal*, 2006. V. 23. P. 40-47.
- [110]. *Wilke M., Appel K., Vincze L., Schmidt C., Borchertb M. Pascarellie S.* A confocal set-up for micro-XRF and XAFS experiments using diamond-anvil cells // *Journal of Synchrotron Radiation*, 2010. N 17. P. 669–675.
- [111]. Institute for Scientific Instruments GmbH. [Электронный ресурс]. URL: www.ifg-adlershof.de/ (дата обращения 16.02.2012).
- [112]. *Бушуев В.А., Оруджалиев М.Н., Кузьмин Р.Н.* Коэффициент пропускания изогнутых рентгеновских волноводов // *ЖТФ*. 1989. Т. 59. № 11. С. 153-155.
- [113]. *Бушуев В.А., Оруджалиев М.Н., Кузьмин Р.Н.* Коэффициент пропускания равномерно изогнутых рентгеновских волноводов в режиме шепчущих мод // *Вестн. Моск. ун-та*. 1990. Сер. 3. Т. 31. № 1. С. 76-80.
- [114]. *Оруджалиев М.Н., Бушуев В.А.,* Распространение рентгеновского

- излучения в изогнутых капиллярах // *ЖТФ*. 1991. Т. 61. № 2. С. 51-57.
- [115]. Бушуев В.А., Оруджалиев М.Н., Саркисов С.Р., Саркисов Э.Р. Особенности транспортировки рентгеновского излучения в изогнутом лентообразном волноводе // *Поверхность*. 1992. № 4. С. 69-75.
- [116]. Бушуев В.А., Оруджалиев М.Н. Структура электромагнитного поля в равномерно изогнутых лентообразных волноводах рентгеновского диапазона // *ЖТФ*. 1993. Т. 63. № 9. С. 89-98.
- [117]. Бушуев В.А., Оруджалиев М.Н. Тонкая структура рентгеновских пучков на выходе лентообразного волновода // *Вестн. Моск. ун-та*. 1993. Сер. 3. Т. 34. № 3. С. 46-52.
- [118]. Романов А.Ю., Дмитриев И.В., Акулов А.Ю. Экспериментальное исследование оптических свойств поликапиллярной оптики Кумахова в энергетическом диапазоне рентгеновского излучения 5-70 кэВ // *Поверхность: рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2005. № 2. С. 17-22.
- [119]. Романов А.Ю. Рентгенооптические параметры среднефокусной линзы Кумахова для жесткого рентгеновского диапазона // *Письма в ЖТФ*. 2005. Т. 31. № 5. С. 47-51.
- [120]. Якимов Е.Б. Определение локальных электрических параметров полупроводниковых материалов методами растровой электронной микроскопии // *Заводская лаборатория*. 2002. Т. 68. № 1. Р. 63-69.
- [121]. Fahrtdinov R.R., Feklisova O.V., Grigoriev M.V., Irzhak D.V., Roshchupkin D.V., and Yakimov E.B. XBIC Investigation of the Grain Boundaries in Multicrystalline Si on the Laboratory X-ray Source // *Solid State Phenomena*. 2011. V. 178-179. P. 226-229.
- [122]. Fahrtdinov R.R., Feklisova O.V., Grigoriev M.V., Irzhak D.V., Roshchupkin D.V., and Yakimov E.B. X-ray beam induced current method at the laboratory x-ray source // *Rev. Sci. Instr.* 2011. V. 82. P. 70-93.
- [123]. Yakimov E.B. Simulation of XBIC Contrast of Precipitates in Si // *Solid State Phenomena*. 2010. V. 156-158. P. 247-250.

- [124]. *Якимов Е.Б.* Сравнение контраста протяженных дефектов в методах ХВИС и наведенного тока // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2010. № 9. С. 10-12.
- [125]. *Donolato C.* A reciprocity theorem for charge collection // *Appl. Phys. Lett.* 1985. V. 46. N 3. P. 270-272.
- [126]. *Donolato C., and Klann H.* Computer simulation of SEM electron beam induced current images of dislocations and stacking faults // *J. Appl. Phys.* 1980. V. 51. N 3. P. 1624-1633.
- [127]. *Marek J.* Scanning electron microscope charge collection images of grain boundaries // *J. Appl. Phys.* 1982. V. 53. N 3. P. 1454-1460.
- [128]. *Zook J.D.* Effects of grain boundaries in polycrystalline solar cells // *Appl. Phys. Lett.* 1980. V. 37. N 2. P. 223-226.
- [129]. *Martinez J., Criado A., and Piqueras J.* Grain boundary potential determination in polycrystalline silicon by the scanning light spot technique // *J. Appl. Phys.* 1981. V. 52. N 3. P. 1301-1305.
- [130]. *Seager C.H.* Grain boundary recombination: theory and experiment in silicon // *J. Appl. Phys.* 1981. V. 52. N 6. P. 3960-3968.
- [131]. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. М: Изд-во Московского ун-та, 1999. 742 с.
- [132]. *Lax M.* Junction current and luminescence near a dislocation or a surface // *J. Appl. Phys.* 1978. V. 49. N 5. P. 2796-2810.
- [133]. *Бронштейн И.Н., Семендяев К.А.* Справочник по математике для инженеров и учащихся ВТУЗов. М.: ГРФМЛ, 1980. 704 с.
- [134]. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 832 с.
- [135]. *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. 1108 с.
- [136]. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: ГРФМЛ. 1978. 832 с.

- [137]. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. Формулы, графики, таблицы. 2 изд., пер. с нем. М.: Наука, 1968. 344 с.
- [138]. Chen J., Sekiguchi T., Yang D., Yin F., Kido K., Tsurekawa S. Electron-beam-induced current study of grain boundaries in multicrystalline silicon // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 96. N 10. P. 5490-5495.
- [139]. Feklisova O.V, Yakimov E.B. Electrical properties of plastically deformed silicon due to its interaction with an iron impurity // *Phys. Solid State.* 2011. V. 53. N 6. P. 1240-1243.
- [140]. Firsova A.A., Reimer L., Ushakov N.G., Zaitsev S.I. Comparison of a Simple Model of BSE Signal Formation and Surface Reconstruction with Monte Carlo Calculations // *Scanning.* 1991. V. 13. P. 363-368.

Список публикаций по теме диссертации

- [1]. *Шабельникова Я.Л., Чукалина М.В.* Сравнение функции сбора рентгенофлуоресцентного сигнала для двух типов коллиматоров // Письма в Журнал Технической Физики. 2012. Т. 38. № 10. С. 6-13.
- [2]. *Шабельникова Я.Л., Якимов Е.Б.* Сравнение контраста дислокаций и границ зерен в методах ХВИС и наведенного тока // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2012. № 11. С. 27-30.
- [3]. *Шабельникова Я.Л., Якимов Е.Б., Григорьев М.В., Фахртдинов Р.Р., Бушуев В.А.* Расчет контраста протяженных дефектов в методе наведенного рентгеновским пучком тока // Письма в Журнал Технической Физики. 2012. Т. 38. № 20. С. 1-7.
- [4]. *Шабельникова Я. Л., Чукалина М. В.* Разработка программного обеспечения для моделирования работы лабораторного рентгеновского микротомографа // Первая международная научная школа-семинар Современные методы анализа дифракционных данных. Великий Новгород. 2007. С. 157-158.
- [5]. *Шабельникова Я. Л., Чукалина М.В.* Создание пакета программ, имитирующего работу лабораторного микротомографа // XV российский симпозиум по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел. РЕМ'2007. С. 264-265.
- [6]. *Чукалина М.В., Шабельникова Я.Л.* Моделирование работы лабораторного рентгеновского микротомографа в среде Matlab 7.3 // III Всероссийская научная конференция. Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB. 2007. С. 858-861.
- [7]. *Шабельникова Я.Л., Чукалина М.В.* К задаче томографической реконструкции методом свертки и обратной проекции в условиях сильного шума // VI Национальная конференция РСНЭ. 2007. С. 468.

- [8]. *Шабельникова Я. Л., Чукалина М. В.* Анализ изображений в томографии // 50-ая научная конференция МФТИ. Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук. Часть IX Инновации и высокие технологии. 2007. С. 116.
- [9]. *Шабельникова Я. Л., Чукалина М. В.* Вейвлет преобразование для анализа томографических проекций: к вопросу о корректном выборе материнского вейвлета // Вторая международная научная школа-семинар Современные методы анализа дифракционных данных. Великий Новгород. 2008. С. 160-162.
- [10]. *Шабельникова Я. Л., Чукалина М. В.* Об одном методе фильтрации проекций в компьютерной томографии // 51-ая научная конференция МФТИ. Современная проблема фундаментальных и прикладных наук. Часть IX. Инновации и высокие технологии. 2008. С. 45–47.
- [11]. *Shabelnikova Ya., Chukalina M.* Signal and noise separation in computer tomography using wavelet analysis // European Conf. on Metallobiolumics, Helmholtz Centre Berlin for materials and energy. 2008. P. 12.
- [12]. *Шабельникова Я.Л., Чукалина М.В.* Сравнение характеристик поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники // Всероссийская конференция молодых ученых. Микро-нанотехнологии и их применение. 2010. С. 85.
- [13]. *Шабельникова Я.Л., Чукалина М.В.* Конфокальная рентгенофлюоресцентная томография: моделирование области сбора сигнала для двух типов коллиматоров. //Пятый международный научный семинар Современные методы анализа дифракционных данных. Великий Новгород. 2011. С. 189.
- [14]. *Шабельникова Я.Л., Чукалина М.В.* Расчет функции сбора рентгенофлюоресцентного сигнала для двух типов коллиматоров //VIII Национальная конференция РСНЭ. 2011. С. 486.
- [15]. *Шабельникова Я.Л., Григорьев М.В., Иржак Д.В., Рошупкин Д.В., Фахртдинов Р.Р., Феклисова О.В., Якимов Е.Б.* Метод наведенного

тока на лабораторном рентгеновском источнике: измерение и расчет контраста протяженных дефектов // XXIV Российская конференция по электронной микроскопии. 2012. С. 199.

Благодарности

В заключение мне хотелось бы выразить искреннюю благодарность моим научным руководителям Марине Валерьевне Чукалиной и Владимиру Алексеевичу Бушуеву за ценные наставления и поддержку в течение всего времени выполнения работы.

Также я хочу поблагодарить Евгения Борисовича Якимова за постановку задачи и интересные обсуждения результатов, которым посвящена третья глава диссертации. Сергею Ивановичу Зайцеву я благодарна за ценные замечания и дискуссии об особенностях генерации носителей заряда в полупроводниках высокоэнергетичными частицами.

Сотрудникам лаборатории Рентгеновской Акустооптики ИПТМ РАН Д.В. Рошупкину, Д.В. Иржаку, М.В. Григорьеву и Р.Р. Фархтдинову я признательна за предоставление результатов измерений наведенного тока и интересные дискуссии.

Коллегам из лаборатории Теоретической Физики ИПТМ РАН А.А. Свинцову, И.С. Степанову, И.Г. Степановой, В.Н. Павлову, а также М.А. Князеву и Е.В. Емелину я благодарна за дружеское отношение и участие в обсуждениях.

Моих друзей О.В. Вышиванную и С.Е. Козлова я хочу поблагодарить за внимательное прочтение рукописи диссертации и за то, что они есть.

Особую благодарность мне хочется выразить моим родным: маме Эльвине, сестре Светлане и племяннице Машеньке, без помощи и понимания которых эта работа могла бы существенно затянуться или не быть выполнена вовсе, и, разумеется, моему маленькому сыну Мишутке, который служил мне самым большим источником вдохновения.