

УДК 621.385.833:519.6

О ВОЗМОЖНОСТИ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ

К.Ю. Дорофеев, Э.И. Рау, Р.А. Сеннов, А.Г. Ягола

(кафедра физической электроники; кафедра математики)

E-mail: k.dorofeev@mail.ru

Проведено моделирование взаимодействия сфокусированного электронного зонда с катодолуминесцирующим веществом. Выполнены расчеты светового транспорта в материале объекта и в эллипсоидальной системе, коллектирующей свет. Показана возможность пространственной сепарации излучающих микрообъемов люминесцирующих тел.

Режим катодолуминесценции (КЛ) в растровой электронной микроскопии (РЭМ) в настоящее время широко используется для изучения локальных свойств оптоэлектронных материалов [1]. При этом получают информацию из всего объема генерации оптического излучения, составляющего, как правило, несколько микрометров. Но современный уровень развития нанотехнологии и микроскопии требует пространственного разрешения в доли микрометра.

Для того чтобы добиться такого разрешения, необходимо решать обратную задачу, которая может оказаться некорректной [2]. Например, для случая микротомографии полей рассеяния такая задача была решена в работе [3]. Наша задача более сложная в силу ее трехмерности, и система уравнений, описывающая ее, может быть получена лишь численно, но в принципе решение получить возможно. Сначала необходимо решить прямую задачу и выбрать оптимальную схему эксперимента. Этой проблеме и посвящена настоящая работа.

Для описания распределения неравновесных носителей в области генерации введем систему координат x', y', z' , как показано на рис. 1. Рассматривалась следующая модель генерации зондом неравновесных носителей в исследуемом объекте [4]. Распределение генерированных зондом неравновесных носителей зарядов выбиралось в виде

$$G(x', y', z') = G_0 F(x', y', z', E_0) h(z'/R_0),$$

где $G_0 = E_0 I_0 (1 - f) / (q E_i)$ — скорость генерации, E_0 и I_0 — энергия и ток электронного пучка, q — заряд электрона, $E_i = 3 E_g$ — энергия рождения носителей, E_g — ширина запрещенной зоны материала, f — часть энергии, унесенная отраженными электронами.

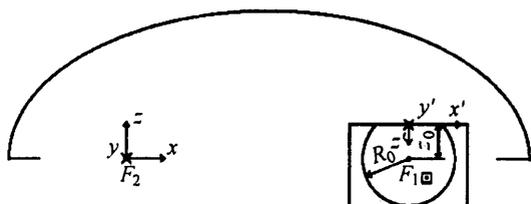


Рис. 1. Схема КЛ-микротомографии

При расчетах задавались следующие величины: $E_0 = 30$ кэВ, $I_0 = 10^{-8}$ А, $f = 0.2$, $E_g = 5$ эВ.

В качестве радиального распределения неравновесных носителей использовалась следующая функция:

$$F(x', y', z', E_0) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp(-(x'^2 + y'^2)/(2\sigma^2)),$$

где $\sigma^2 = 0.36d^2 + 0.11z'^3/R_0$, $d = 0.5$ мкм — диаметр пучка, R_0 — максимальный пробег электронов в глубину. При расчетах выбиралось значение $R_0 = 10$ мкм, что соответствует материалу типа антрацена.

Функция $h(z', E_0)$, описывающая распределение неравновесных носителей по глубине, задавалась в виде [4]

$$h(z'/R_0) = 0.6 + 6.21(z'/R_0) - 12.40(z'/R_0)^2 + 5.69(z'/R_0)^3.$$

Концентрация неравновесных носителей $\Delta n(x', y', z')$ рассчитывалась как $\Delta n(x', y', z') = G_0 F(x', y', z', E_0) h(z'/R_0) \tau$, где $\tau = 10^{-8}$ с — время жизни неравновесных носителей.

Функция $\Delta n(0, 0, z')$ имеет несколько экстремумов как функция z' , но подходит только один из них: $z_0 = 1.0313$, так как только этот экстремум z_0 удовлетворяет условию $0 \leq z_0 \leq R_0$.

В качестве приближенной области генерации был выбран урезанный шар (см. рис. 1). При заданной энергии зонда E_0 глубина проникновения электронов равна R_0 , а в качестве глубины, на которой находится центр шара, выбиралось значение z_0 , т. е. точка (x', y', z') принадлежит области генерации, если $x'^2 + y'^2 + (z' - z_0)^2 \leq R^2$, где $R = R_0 - z_0$ — радиус шара.

Суммарная по всем направлениям интенсивность dI излучения от элементарного объема dV , находящегося в точке с координатой (x', y', z') , рассчитывалась следующим образом: $dI = \Delta n(x', y', z') \eta(x', y', z') dV$, где концентрация $\Delta n(x', y', z')$ вычислялась описанным выше способом, а квантовая эффективность $\eta(x', y', z')$ опре-

деляла локальные свойства исследуемого объекта в данной точке.

В качестве отражающей поверхности моделировалось эллипсоидальное зеркало [5] с размером большой полуоси $a_{el} = 25000$ мкм и размерами других полуосей $b_{el} = 12500$ мкм. Исследуемый объект помещался в окрестность первого фокуса эллипсоида F_1 , диафрагма с детектором — во второй фокус F_2 . Кратко опишем предлагаемый расчет хода лучей в такой системе. Введем систему координат x, y, z с центром в F_2 , как показано на рис. 1.

Пусть луч пересекает поверхность объекта в точке с координатами (x_1, y_1, z_1) , а направляющий единичный вектор этого луча относительно системы координат x, y, z будет $\mathbf{r}_1 = (a_1, b_1, c_1)$, тогда координаты x_2, y_2, z_2 пересечения этого луча с зеркалом (верхним полуэллипсоидом) будут определяться по формулам

$$x_2 = \frac{a_1}{c_1}(z_2 - z_1) + x_1, \quad y_2 = \frac{b_1}{c_1}(z_2 - z_1) + y_1,$$

где

$$z_2 = \frac{-b_d + \sqrt{d}}{2a_d}, \quad d = b_d^2 - 4a_dc_d,$$

$$a_d = \frac{a_1^2}{c_1^2 a_{el}^2} + \frac{b_1^2}{c_1^2 b_{el}^2} + \frac{1}{b_{el}^2},$$

$$b_d = \frac{2a_1}{a_{el}^2} c_1 \left(-\frac{f}{2} + x_1 - \frac{a_1}{c_1} z_1 \right) + \frac{2b_1}{b_{el}^2} c_1 \left(y_1 - \frac{b_1}{c_1} z_1 \right),$$

$$c_d = \frac{1}{a_{el}^2} \left(-\frac{a_1}{c_1} z_1 + x_1 - \frac{f}{2} \right)^2 + \frac{1}{b_{el}^2} \left(-\frac{b_1}{c_1} z_1 + y_1 \right)^2 - 1,$$

f — расстояние между F_1 и F_2 . Приведем формулы для координат точки пересечения x_3, y_3, z_3 рассматриваемого луча с горизонтальной плоскостью (xy): $x_3 = \frac{a_2}{c_2} z_2 + x_2$, $y_3 = \frac{b_2}{c_2} z_2 + y_2$, $z_3 = 0$, где $\mathbf{r}_2 = (a_2, b_2, c_2)$ — направляющий вектор луча после отражения.

Для расчета интенсивности излучения в окрестности второго фокуса вводилась равномерная двумерная сетка $\{\theta_i, \phi_j\}$ по полярному ϕ и телесному θ углам, $\phi \in [0, 2\pi]$, $\theta \in [0, \theta_{cr}]$, где $\theta_{cr} = \arcsin(1/n)$ — угол полного внутреннего отражения, $n = 1.5$ — показатель преломления, $i = 1, 2, \dots, n_\theta$, $j = 1, 2, \dots, n_\phi$, $n_\theta \times n_\phi = 50 \times 20$. Были построены распределения интенсивности в окрестности второго фокуса в плоскостях xy и yz , из анализа которых был сделан вывод о том, что оптимальный диаметр диафрагмы $d_d = 10$ мкм, а ее центр при положении как в плоскости xy , так и в плоскости yz следует поместить во второй фокус.

По направлениям $\{\theta_i, \phi_j\}$ запускались лучи. Рассчитывались координаты точки пересечения лучей с плоскостями по формулам, приведенным выше, затем анализировалось, попадет луч в диафрагму или нет. Если луч попадал в диафрагму, то к энергии, прошедшей через диафрагму, добавлялась энергия этого луча.

На рис. 2, а приведена зависимость интенсивности $I(x', y', z')$ излучения, создаваемого точкой с координатами (x', y', z') и попавшего в диафрагму (при $x' = 0, y' = 0$), как функция глубины z' . Эта функция имеет максимум при $z' = 1.79$ мкм, т. е. точка, расположенная на данной глубине, а не на глубине z_0 дает наибольший вклад в интенсивность.

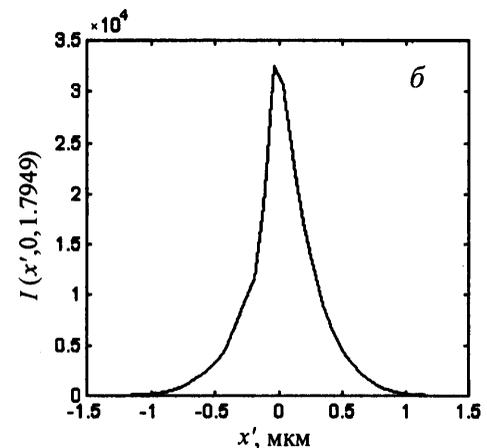
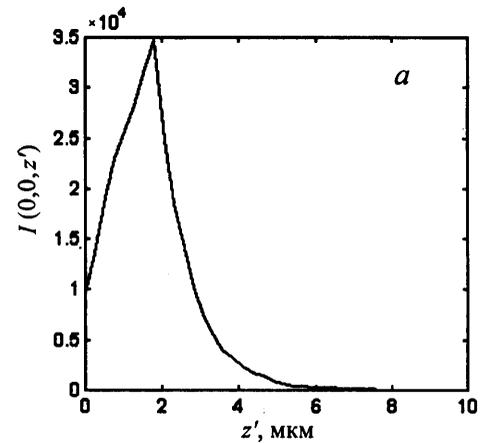


Рис. 2. Зависимость интенсивности прошедшего через диафрагму излучения, создаваемого светящейся точкой, от ее координат z' (а) и x' (б)

Зависимость интенсивности $I(x', y', z')$ при $y' = 0, z' = 1.7949$ мкм как функция x' отображена на рис. 2, б. Функция быстро спадает к нулю по мере удаления от точки $x' = 0$.

Из рис. 2, а, б видно, что, как и планировалось, существует точка, которая дает доминирующий вклад в интенсивность, т. е. существует пространственная сепарация излучающих точек объема генерации. Как и ожидалось, вклад в интенсивность дают только точки, расположенные не очень далеко от фокуса F_1 . Точки, удаленные от вертикальной оси зонда по оси x' на расстояние более 1 мкм, уже не дают вклада в интенсивность. Точки, отстоящие от точки, дающей доминирующий вклад в излучение, на расстояние, большее 2 мкм по глубине, практически не дают вклада в интенсивность, так как детектируемый сигнал уменьшается приблизительно на порядок.

Полученные результаты решения прямой задачи окажут существенную помощь в решении обратной

задачи микротомографии — в реконструировании внутренней микроструктуры объекта.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 01-01-06168 и 99-01-00447).

Литература

1. Петров В.И. // Изв. РАН, сер. физ. 1992. **56**, № 3. С. 2.
2. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990.

3. Антонюк В.А., Рау Э.И., Ягола А.Г. и др. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1987. **51**, № 3. С. 475.
4. Obyden S.K., Saparin G.V., Spivak G.V. // Scanning. 1980. **3**, No. 3. P. 181.
5. Phang J.C.H., Chan D.S.H., Chim W.K., Liu Y.Y. // Solid State Phenomena. 1998. **63**, No. 1. P. 159.

Поступила в редакцию
21.11.01