

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 катодолюминесцирующим веществом. Выполнены расчеты светового транспорта в материале объекта и в эллипсоидальной системе, коллектирующей свет. Показана возможность пространственной сепарации излучающих микрообъемов люминесцирующих тел.**

Режим катодолюминесценции (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 микрофотографии 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.

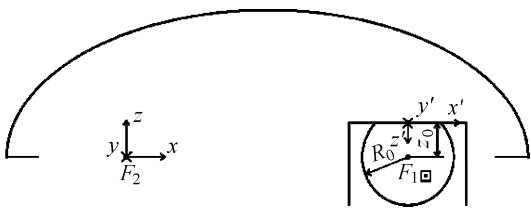


Рис. 1. Схема КЛ-микротомографии

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  $a_{el} = 25\,000$  мкм и размерами других полуосей  $b_{el} = 12\,500$  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  $\phi$  и телесному  $\theta$  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.

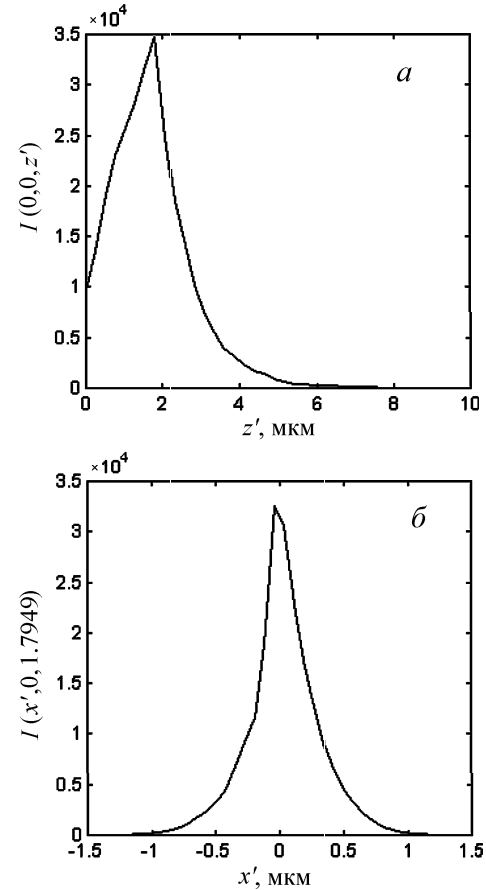


Рис. 2. Зависимость интенсивности прошедшего через диафрагму излучения, создаваемого светящейся точкой, от ее координат  $z'$  (а) и  $x'$  (б)

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