

Об использовании метода Галеркина при математическом моделировании диффузии экситонов, вызванной пульсирующим электронным зондом в полупроводниковой мишени

М.А. Степович^{1,2}, Е.В. Серегина³, А.Н. Поляков¹, О.И. Лямина⁴
Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского¹
Ивановский государственный университет²
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет), Калужский филиал³
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН⁴
m.stepovich@rambler.ru^{1,2}, evfs@yandex.ru³, lyam@igic.ras.ru⁴

Степович М.А., Серегина Е.В., Поляков А.Н., Лямина О.И. Об использовании метода Галеркина при математическом моделировании диффузии экситонов, вызванной пульсирующим электронным зондом в полупроводниковой мишени. Рассмотрены некоторые возможности использования проекционного метода Галеркина для моделирования двумерной диффузии экситонов, возбуждаемых пульсирующим электронным зондом в полупроводниковой мишени. Задача решена в цилиндрической системе координат. Искомая концентрация экситонов найдена в виде частичной суммы двойного ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра. Получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения их диффузии. При моделировании использовались параметры, характерные для нитрида галлия.

Ключевые слова: метод Галеркина, ряд Фурье, диффузия, полупроводник.

Общая постановка проблемы

Сфокусированные электронные пучки (электронные зонды) широко используются для локальной диагностики различных объектов в физике, материаловедении, минералогии и в других областях науки и техники. При взаимодействии электронного зонда с мишенью в последней возникает ряд явлений, которые могут быть зарегистрированы и полученный информативный сигнал может быть использован для качественного анализа и количественных исследований облучаемой мишени. При проведении количественных исследований, как правило, экспериментально измеренный информативный сигнал сравнивается с математической моделью рассматриваемого явления или процесса, при этом результаты идентификации параметров мишени во многом определяются адекватностью используемой модели описываемому физическому явлению. В силу сложности математических моделей в задачах идентификации используются численные методы, удачный выбор и использование которых во многом определяют результаты исследований. При электроннозондовых исследованиях полупроводниковых мишеней особое значение имеют процессы, связанные с

диффузией и рекомбинацией неравновесных носителей заряда, генерированных в мишени электронным пучком. Некоторые аспекты использования численных методов для проведения количественных исследований таких объектов и составляют предмет рассмотрения в настоящей работе.

Анализ последних исследований и публикаций

При электроннозондовых исследованиях полупроводниковых объектов особое значение приобретает задача корректного количественного описания диффузионных процессов, возникающих при взаимодействии электронного пучка с полупроводниковой мишенью [1, 2]. Знание этих процессов позволяет построить математические модели, необходимые для количественного изучения полупроводников, в частности моделей наиболее информативных сигналов: тока, наведенного электронным зондом и катодoluminesценции. В силу сложности математических моделей таких процессов, для их количественного описания нередко возникает необходимость применения численных методов [3-6]. Видимо, в силу этого, а также некоторых проблем, возникающих при экспериментальной реализации этого метода, в

катодолюминесцентной микроскопии методы математического моделирования люминесцентного излучения, возникающего при взаимодействии электронов пучка с полупроводниковой мишенью, применяются довольно редко; ниже описаны некоторые возможности такой реализации, предлагаемые нами.

В последнее время особое значение приобретают исследования различных объектов с использованием электронных пучков низких (до 8...10 кэВ) энергий, поскольку использование такого режима работы электронно-зондового устройства позволяет получить информацию об объекте исследования, которую подчас бывает сложно получить с использованием электронных пучков средних (10...50 кэВ) энергий [7]. В ряде случаев при использовании низкоэнергетичных электронных пучков для проведения количественных исследований при моделировании процессов взаимодействия электронов с конденсированным веществом достаточно рассмотрения процессов, происходящих в приповерхностной области мишени. Математически это означает использование двумерных моделей, в которых описываются процессы, происходящие на поверхности мишени. Например, в работах [8, 9] рассмотрены математические модели, описывающие процесс возбуждения катодолюминесцентного излучения, обусловленного рекомбинацией экситонов и возникающего при взаимодействии электронного зонда с поверхностью прямого полупроводникового материала. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [10, 11] подтверждает обоснованность выбранного подхода к такому количественному описанию катодолюминесценции одного из перспективных материалов полупроводниковой опто- и СВЧ электроники – монокристаллического нитрида галлия. В то же время, как следует из анализа литературных данных, вопросы математической корректности предлагаемых моделей [12, 13], равно как и вопросы, связанные с численной реализацией этих моделей и оценки возникающих при этом погрешностей [3-6] рассмотрены недостаточно подробно. Отчасти задача восполнить этот пробел и является целью настоящей работы.

Постановка задачи

В настоящей работе изложены результаты использования проекционного метода Галеркина для моделирования двумерного распределения экситонов в полупроводниковом материале, облученном остро сфокусированным пучком электронов.

Физическое обоснование решаемой задачи следующее: при катодолюминесцентных исследованиях полупроводников для повышения отношения «сигнал-шум» используется пульсирующий электронный пучок. В результате в начале электронного импульса происходит разгорание люминесценции, а при прекращении облучения – спад излучения. Отметим, что в катодолюминесцентной микроскопии облучение образца может привести к повышению его локальной температуры [14, 15] и, как следствие, к изменению энергетических характеристик полупроводника (ширины запрещенной зоны и т.п.). В результате может измениться спектр катодолюминесцентного излучения, что может привести к необходимости учёта этого явления при проведении количественных измерений. На характер спектра катодолюминесценции может оказать влияние и поглощение излучения в объеме полупроводника [16-18]. Поскольку предметом рассмотрения в настоящей работе является двумерная диффузия, реализуемая при низких энергиях электронов пучка, то учет этих объемных явлений здесь не проводится.

Экспериментально измеренный сигнал катодолюминесценции, отвечающий одному импульсу облучения, представлен на рисунке 1.

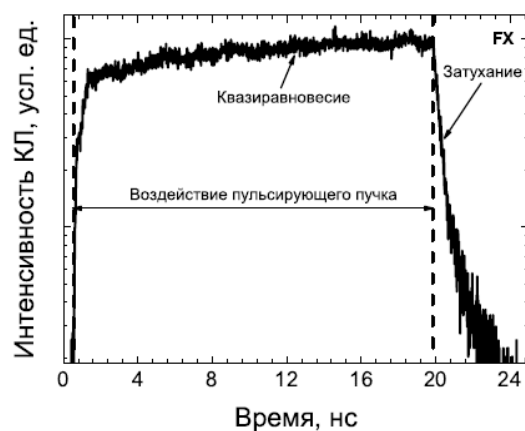


Рисунок 1 – Экспериментально измеренный сигнал катодолюминесценции нитрида галлия, отвечающий одному импульсу облучения. Пунктиром показано время начала и конца электронного импульса. Энергия электронов 5 кэВ, температура мишени 5 К

Для количественного описания процесса диффузии экситонов в полупроводнике необходимо вначале найти распределение генерированных экситонов в состоянии квазиравновесия (разгорание люминесценции), после чего описать их распределение при отключении электронного пучка (затухание люминесценции). Математически это приводит к необходимости вначале решить стационарную задачу диффузии, после чего использовать

полученные результаты для решения нестационарной задачи.

Исходная задача может быть решена в цилиндрической системе координат, при этом искомое распределение экситонов находится в виде частичной суммы двойного ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра. В работах [19, 20] была получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению стационарного уравнения диффузии проекционным методом Галеркина. Настоящая работа продолжает такие исследования и ставит задачу дать оценку погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения диффузии.

Исходная аналитическая модель

Концентрация экситонов $c(x, y, t)$ в точке с координатами (x, y) может быть найдена как решение нестационарного дифференциального уравнения диффузии

$$c_t = D\Delta c - c/\tau \quad (1)$$

с начальным условием

$$c(x, y, 0) = n(x, y) \quad (2)$$

Здесь $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ — двумерный оператор Лапласа, D — коэффициент диффузии и τ — время жизни экситонов, а функция $n(x, y)$ может быть найдена, как решение стационарного дифференциального уравнения, описывающего диффузию экситонов в состоянии квазиравновесия:

$$D\Delta n - n/\tau = -\Phi(x, y) \quad (3)$$

где $\Phi(x, y)$ — функция источника генерации экситонов, которая определяется характером возбуждения и свойствами материала. В случае узкого электронного пучка, электронного зонда, область генерации экситонов может быть приближенно описана функцией распределения Гаусса, что дает для правой части (3) соотношение $G_0\varphi(x, y)$. Здесь $\varphi(x, y)$ — плотность двумерного нормального распределения Гаусса, а G_0 — частота генерации экситонов.

Переходя к цилиндрической системе координат, получим следующее уравнение:

$$r \frac{\partial^2 c(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\partial c(r, t)}{\partial r} - \frac{1}{D} r \frac{\partial c(r, t)}{\partial t} - \frac{1}{\lambda^2} r c(r, t) = 0, \quad (4)$$

с граничными условиями

$$c(r, 0) = n(r), \quad c(\infty, \infty) = 0, \quad (5)$$

где $\partial^2 c(r, t)/\partial \varphi^2 = 0$, поскольку

$c(r, \varphi, t) \equiv c(r, t)$, $\lambda = \sqrt{D\tau}$ — диффузионная длина экситонов. Тогда уравнение (3) примет вид:

$$r \frac{d^2 n(r)}{dr^2} + \frac{dn(r)}{dr} - \frac{1}{\lambda^2} r n(r) = -\frac{1}{D} r \Phi(r) \quad (6)$$

Проекционная аппроксимация исходной модели, основанная на применении метода Галеркина

Для реализации проекционного метода Галеркина выберем двумерный базис из модифицированных функций Лагерра с параметрами, ускоряющими сходимость ряда [21]:

$$\varphi_{i,j}(r, t) = \varphi_i(r) \varphi_j(t) = \exp(-\gamma_1 r/2) L_i(\gamma_1 r) \exp(-\gamma_2 t/2) L_j(\gamma_2 t),$$

которые определяются через многочлены Чебышева-Лагерра $L_i(\gamma_1 r)$ по переменной r и многочлены $L_j(\gamma_2 t)$ по переменной t с параметрами $\alpha_1 = 0$ и $\alpha_2 = 0$ соответственно [21], $i, j = 0, 1, 2, \dots$. Здесь параметры $\gamma_1 > 0$ и $\gamma_2 > 0$ используются для оптимизации вычислительной схемы.

В методе Галеркина предполагается, что неизвестная функция $c(r, t)$ может быть достаточно точно представлена приближенным решением:

$$c_{m+1}(r, t) = c_m(r, t) + c_0(r, t), \quad (7)$$

где

$$c_m(r, t) = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} c_{ij} \varphi_i(r) \varphi_j(t) \quad - \text{прямоугольная}$$

частичная сумма двойного ряда Фурье-Лагерра порядка $m \times m$ функции $c(r, t)$, а

$$c_0(r, t) = p_0(r) \varphi_m(t),$$

$$c_0(r) = \sum_{i=0}^{m-1} c_i^n \varphi_i(r) - \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} c_{ij} \varphi_i(r) \varphi_j(0) / \varphi_m(0).$$

Функция $c_0(r, t)$ введена, чтобы удовлетворить

граничным условиям, c_i^n — коэффициенты

разложения функции $n(r)$, которые находятся из решения уравнения (6), а неизвестные коэффициенты разложения

$$c_{ij} = \frac{i!j!}{\Gamma(i+1)\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \int_0^\infty c(r, t) \varphi_i(r) \varphi_j(t) d(\gamma_1 r) d(\gamma_2 t)$$

искомой функции $c(r, t)$ согласно методу Галеркина определяются из решения следующей системы уравнений:

$$(R, \varphi_k(r)\varphi_l(t))=0, k, l=\overline{0, m-1}. \quad (8)$$

Здесь

$$R = r \frac{\partial^2 c_{m+1}(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\partial c_{m+1}(r, t)}{\partial r} - \frac{1}{D} r \frac{\partial c_{m+1}(r, t)}{\partial t} - \frac{1}{\lambda^2} r c_{m+1}(r, t)$$

— невязка исходного уравнения (4).

Обозначим столбцы (растянутые в столбцы матрицы) из коэффициентов разложения неизвестной функции $c(r, t)$ и функции $n(r)$ по выбранному базису через C_{mm} и C_m^n соответственно. Используя кронекерово произведение, введём матрицу D_{mm}^r дифференцирования по переменной r $D_{mm}^r = D_m^{\gamma_1} \otimes E_m$ и по переменной t — $D_{mm}^t = E_m \otimes D_m^{\gamma_2}$, где E_m — единичная матрица, а D_m^{γ} — матрица дифференцирования в одномерном базисе из модифицированных функций Лагерра, элементы которой находятся с помощью элементарных алгебраических операций [22]:

$$d_{ij} = \begin{cases} -\gamma/2, & \text{если } i = j, \\ -\gamma, & \text{если } i < j, \\ 0, & \text{если } i > j. \end{cases}$$

Обозначим через B_1 матрицу, элементы которой находятся по формуле:

$$b_{ij}^1 = \begin{cases} -\gamma_1(j-1)/4, & \text{если } i+1=j, \\ \gamma_1(1-(i-1)/4), & \text{если } j+1=i, \\ \gamma_1(3/4-i/2), & \text{если } i=j, \\ 0, & \text{если } i+1 < j, \\ \gamma_1, & \text{если } j+1 < i, \end{cases}$$

и через B_2 матрицу с элементами:

$$b_{ij}^2 = \begin{cases} -i/\gamma_1, & \text{если } i+1=j, \\ -(i-1)/\gamma_1, & \text{если } j+1=i, \\ (2i-1)/\gamma_1, & \text{если } i=j, \\ 0, & \text{если } i+1 < j, \\ 0, & \text{если } j+1 < i, \end{cases}$$

которые устанавливаются на основании следующих рекуррентных соотношений для функций Лагерра:

$$\begin{aligned} r\varphi_i''(r) &= -(\gamma_1/4)(i+1)\varphi_{i+1}(r) + ((\gamma_1/4)(2i+1) - \gamma_1 i)\varphi_i(r) + \\ &+ (i(-3\gamma_1/4) + (1/\gamma_1)(1-i))\varphi_{i-1}(r) + (1/\gamma_1) \sum_{k=0}^{i-2} \varphi_k(r), \\ r\varphi_i(r) &= (1/\gamma_1)[-(i+1)\varphi_{i+1}(r) - i\varphi_{i-1}(r) + (2i+1)\varphi_i(r)]. \end{aligned}$$

Последние соотношения легко выводятся из известных рекуррентных соотношений для многочленов Лагерра [21]:

$$(i+1)L_{i+1}(r) + (r-2i-1)L_i(r) + iL_{i-1}(r) = 0,$$

$$rL_i'(r) = iL_i(r) - iL_{i-1}(r) = 0$$

и формул:

$$rL_i''(r) + (1-r)L_i'(r) + iL_i(r) = 0,$$

$$\sum_{k=0}^i L_k(r) = L_i(r; 1),$$

где $L_i(r; 1)$ — многочлены Чебышева-Лагерра по переменной r с параметром $\alpha_1 = 1$.

Далее введем матрицы: $D_{mm}^{r2} = B_1^T \otimes E_m$, $D_{mm}^{t2} = B_2^T \otimes D_m^{\gamma_2}$, $I_{mm} = B_2^T \otimes E_m$. Перепишем систему (8) в матричном виде

$$\left(D_{mm}^{r2} - \frac{1}{D} D_{mm}^{t2} + D_{mm}^r + \frac{1}{D} D_{mm}^{\gamma} - \frac{1}{\lambda^2} I_{mm} \right) C_{mm} = \frac{1}{D} C_{mm}^{\Phi_1}, \quad (9)$$

где $D_{mm}^{\gamma} = B_2^T \otimes B_3$, B_3 — матрица с элементами $b_{ij}^3 = -\gamma_2$, а столбец $C_{mm}^{\Phi_1}$ находится путем растяжения матрицы: $C^{\Phi_1} = B_2^T C_m^n (-\gamma_2 \varphi^m(0))^T$.

Подстановка величин c_{ij} , определяемых из решения системы уравнений (9), в формулу (7), дает искомое приближенное решение.

Исследуем сходимость невязки R и покажем, что R сходится к нулю в среднем (в пределе при $m \rightarrow \infty$).

Следуя [23], введем обозначения:

$$D = r \frac{d^2}{dx^2} + (1-r) \frac{d}{dr} + t \frac{d^2}{dt^2} + (1-t) \frac{d}{dt};$$

$L_2^n(D)$ ($n=0, 1, \dots$) — класс функций f таких, что функции

$\mathcal{F}(r, t) = f(r, t) \exp(\gamma_1 r/2) \exp(\gamma_2 t/2) \in L_2$ и имеющие обобщенные частные производные в смысле Леви $\partial^k \mathcal{F}(r, t) / \partial r^i \partial t^j$, $i+j=k$, $k=0, 1, \dots$, принадлежащие пространству L_2 , для которых $D^n \mathcal{F} \in L_2$, $n=0, 1, \dots$, где $D^0 \mathcal{F} = \mathcal{F}$, $D^n \mathcal{F} = D(D^{n-1} \mathcal{F})$, $n=1, 2, \dots$, $L_2^0(D) = L_2$.

Если погрешности в исходных данных и погрешности вычислений отсутствуют, а учитываются лишь погрешности аппроксимаций, то, опираясь на результаты работ [24-28], можно установить оценку для невязки уравнения (4). Мы не будем останавливаться на этом подробно, а приведем без доказательства следующий результат.

Пусть функция $c(r, t) \in L_2^{n+1}(D)$, $n > 2$ и имеет непрерывные частные производные до порядка $2n+2$ по обоим пространственным направлениям, тогда справедлива оценка:

$$\|R\|_{L_2} < \left[3\sqrt{2}/\gamma_1 + 2 + 2\sqrt{2}/(D\gamma_1) + \sqrt{2}/(\lambda^2\gamma_1) \right] \left[1 - (1 - m^{-1/2})^m \right]^k \times \\ \times (m)^{-n} \Omega(m^{-1/2}) + O\left(m^{-\frac{n+7}{4}}\right) \omega(m^{-1/2}), \quad m \rightarrow \infty.$$

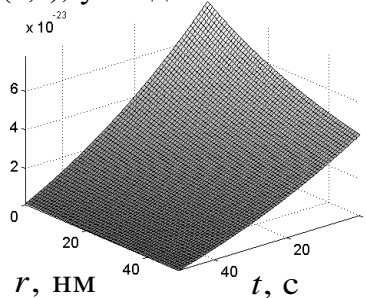
Здесь $\Omega(m^{-1/2})$ — мажоранта обобщенных модулей непрерывности для функций из пространства L_2 [23], а $\omega(m^{-1/2})$ — заданная мажоранта модулей непрерывности дифференцируемых функций [29]. Последнее выражение означает, что невязка R уравнения (3) сходится к нулю в среднем.

Результаты расчетов

Было проведено математическое моделирование диффузии экситонов для параметров полупроводника, характерных для нитрида галлия, который является перспективным материалом для создания устройств опто-, микро- и нанoeлектроники, а также СВЧ-устройств, способных работать в том числе и в неблагоприятных условиях внешней среды и при высоких напряжениях. Частота генерации экситонов принималась равной $G_0 = 10^{-13} \text{ с}^{-1}$, а профиль распределения энергии электронов в пучке задавался функцией Гаусса с нулевым математическим ожиданием и дисперсией 60 нм, что соответствует условиям реальных экспериментальных катодолуминесцентных измерений.

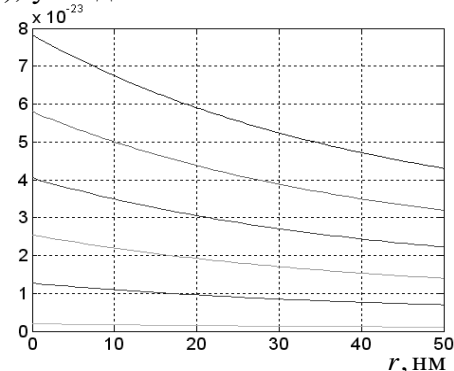
На рисунке 2а представлены результаты математического моделирования полученного решения нестационарного уравнения диффузии экситонов (4), (5). Время жизни экситонов принималось равным $\tau = 271 \text{ пс}$, коэффициент их диффузии $D = 9 \text{ см}^2/\text{с}$. На рисунке 2б представлены результаты математического моделирования для различных значений времени $t = 0, 10, 20, 30, 40, 50 \text{ с}$.

$c(r, t)$, усл. ед.



а)

$c(r)$, усл. ед.



б)

Рисунок 2 – а) – рассчитанная концентрация экситонов $c(r, t)$; б) – сечения поверхности $c(r, t)$ - зависимости $c(r)$, полученные для различных значений времени $t = 0, 10, 20, 30, 40, 50 \text{ с}$ (сверху вниз); (вычисления проведены в 12-м приближении для параметров, характерных для нитрида галлия, энергия электронов зонда 5 кэВ)

Затраты машинного времени на расчет концентрации экситонов с использованием проекционного Галеркина составили приблизительно 7 с, что говорит о вычислительной эффективности предложенного метода. Вычисления выполнялись в системе MATLAB (The MathWorks, Inc.) версии 7.5.0.342 на персональном компьютере со следующими характеристиками: процессор Intel Pentium E5400 (2 x 2.70 GHz, 2MB Cache), объем оперативной памяти 2 GB.

Выводы

Построена двумерная математическая модель диффузии экситонов в полупроводнике, основанная на использовании проекционного метода Галеркина. Получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения диффузии. Предлагаемый критерий качества приближения позволяет довольно просто находить матрицу, определяющую

приближенное решение рассматриваемой задачи, не прибегая к операциям дифференцирования и интегрирования и используя только алгебраические операции, что существенно сокращает время вычислений. При моделировании использовались параметры, характерные для нитрида галлия.

Перспективы последующих исследований в данном направлении

В последующих исследованиях полученные результаты будут использованы для моделирования катодолуминесценции, возникающей в приповерхностной области нитрида галлия при рекомбинации экситонов, генерированных электронным зондом. Ожидается, что использование предлагаемого подхода позволит провести корректную оценку погрешности метода, что необходимо для катодолуминесцентной идентификации параметров прямозонных полупроводниковых материалов.

Благодарность и информация о финансовой поддержке

Экспериментальные исследования катодолуминесценции экситонов в нитриде галлия, представленные на рис. 1, проведены в университете г. Магдебурга, ФРГ, в научной группе под руководством профессора Ж. Христена (J. Christen), за что авторы настоящей работы им глубоко благодарны.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00515).

Литература

1. Конников С.Г., Сидоров А.Ф. Электроннозондовые методы исследования полупроводниковых материалов и приборов. – М.: Энергия, 1978. – 136 с.
2. Микроанализ и растровая электронная микроскопия / Под ред. Ф. Морис, Л. Мени, Р. Тиксье. – М.: Металлургия, 1985. – 408 с.
3. Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М. О модифицированной проекционной схеме метода наименьших квадратов для моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в однородном полупроводниковом материале // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 11. – С.65-69.
4. Seregina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. On a Modified Projection Scheme of the Least_Squares Method for the Modeling of the Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Beam in a Homogeneous Semiconductor Material // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2013. – Vol. 7, No. 6. – P. 1077-1080.
5. Макаренков А.М., Серегина Е.В., Степович М.А. Проекционный метод Галеркина решения стационарного дифференциального уравнения диффузии в полубесконечной области // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2017. – Т. 57, № 5. – С. 57-69.
6. Makarenkov A.M., Seregina E.V., Stepovich M.A. The Projection Galerkin Method for Solving the Time-Independent Differential Diffusion Equations in a Semi-Infinite Domain // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2017, Vol. 57, No. 5. – P. 802-814.
7. Фрей Д. Низковольтная растровая электронная микроскопия / Растровая электронная микроскопия для нанотехнологий. Методы и применения / Под. ред. У. Жу, Ж.Л. Уанга; пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – С. 137-158.
8. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Двумерная диффузия и катодолуминесценция экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале: результаты математического моделирования // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 11. – С.35-40.
9. Polyakov A.N., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Stepovich M.A. Two Dimensional Diffusion and Cathodoluminescence of Excitons Generated by an Electron Beam in a Semiconductor Material: Results of Mathematical Modelling // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2012. – Vol. 6, No. 6. – P. 901-905.
10. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Катодолуминесцентные экспериментальные исследования транспорта экситонов в нитриде галлия // Известия РАН. Серия физическая. – 2012. – Т. 76, № 9. – С.1082-1085.
11. Polyakov A.N., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Stepovich M.A. Experimental Cathodoluminescence Studies of Exciton Transport in Gallium Nitride // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2012. – Vol. 76, No. 9. – Pp. 970-973.
12. Поляков А.Н., Степович М.А., Туртин Д.В. Математическое моделирование катодолуминесценции экситонов, генерированных узким электронным пучком в полупроводниковом материале // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80, № 12. – С. 1629-1633.

13. Polyakov A.N., Stepovich M.A., Turtin D.V. Mathematical modeling of the cathodoluminescence of excitons generated by a narrow electron beam in a semiconductor material // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* – 2016. – Vol. 80, Issue 12. – Pp. 1436–1440.
14. Амрастанов А.Н., Гинзгеймер С.А., Степович М.А., Филиппов М.Н. Об одной возможности математического моделирования теплового воздействия остро сфокусированного электронного пучка на однородный полупроводник // *Известия РАН. Серия физическая.* – 2016. – Т. 80, № 10. – С. 1448-1452.
15. Amrastanov A.N., Ginzgeyer S.A., Stepovich M.A., Filippov M.N. On Possibility of Mathematically Modeling the Thermal Effect of a Finely Focused Electron Beam on a Homogeneous Semiconductor // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* – 2016. – Vol. 80, Issue 10. – Pp. 1290-1294.
16. Вавилов В.С., Макаров С.И., Чукичев М.В., Четверикова И.Ф. Католюминесценция нелегированного нитрида галлия // *Физика и техника полупроводников.* – 1979. – Т. 13, вып. 11. – С. 2153-2159.
17. Lipchak A.I., Mikhailov S.G., Sokolov V.I., Solomonov V.I., Kiselev I.V. Luminescence of ZnSe: Mn single crystals at room temperature // *Optics and Spectroscopy.* – 1997. – Vol. 83, no. 6. – P. 854-859.
18. Гвоздовер Р.С., Петров В.И., Подтяжкин Е.Я., Степович М.А., Филиппов М.Н. Определение электрофизических параметров полупроводников по зависимости католюминесценции от ускоряющего напряжения // *Известия АН СССР. Серия физическая.* – 1984. – Т. 48, № 12. – С. 2378-2383.
19. Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М., Филиппов М.Н. О возможности использования проекционного метода Галеркина для моделирования пространственного распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным зондом в полупроводнике // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* – 2017. – № 9. – С. 78-84.
20. Seragina E.V., Stepovich M.A., Makarenkov A.M., and Filippov M.N. On the Possibility of Using the Galerkin Projection Method to Model the Spatial Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Probe in a Semiconductor // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* – 2017. – Vol. 11, Issue 5. – P. 981-986.
21. Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены. – М.: Физматлит, 2005. – 480 с.
22. Лапин С.В., Егупов Н.Д. Теория матричных операторов и ее приложение к задачам автоматического управления. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. 1997. – 496 с.
23. Абилов В.А., Абилов М.В., Керимов М.К. Точные оценки скорости сходимости двойных рядов Фурье по классическим ортогональным многочленам // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* – 2015. – Т. 55, № 7. – С. 1109-1117.
24. Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А. Использование проекционного метода для определения статистических характеристик решения дифференциального уравнения диффузии неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале широким электронным пучком // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* – 2009. – № 6. – С. 80-95.
25. Seragina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. Use of the Projective Method for Determining Statistical Characteristics of the Solution to the Differential Diffusion Equation of Minority Carriers Generated in the Semiconductor Material by a Wide Electron Beam // *J. of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* – 2009. – Vol. 3, No. 3. – P. 468-482.
26. Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М. О модифицированной проекционной схеме метода наименьших квадратов для моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в однородном полупроводниковом материале // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* – 2013. – № 11. – С. 65-69.
27. Seragina E.V., Makarenkov A.M., Stepovich M.A. On a Modified Projection Scheme of the Least Squares Method for the Modeling of the Distribution of Minority Charge Carriers Generated by an Electron Beam in a Homogeneous Semiconductor Material // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* – 2013. – Vol. 7, No. 6. – P. 1077-1080.
28. Серегина Е.В., Макаренков А.М., Степович М.А. О сходимости некоторой проекционной схемы дифференциального уравнения тепломассопереноса // *Прикладні завдання математики: Матеріали XXI міжнародної науково-технічної конференції (16-20 вересня 2013 року, м. Севастополь, Україна, Севастопольський національний технічний університет).* – Севастополь: Севастопольський національний технічний університет, 2013. – С. 122-126.
29. Лашенов В.К. Приближение дифференцируемых функций частными суммами

ряда Фурье-Лагерра // Известия вузов.
Математика. – 1981. – № 1 (224). – С. 44-57.

Степович М.А., Серегина Е.В., Поляков А.Н., Лямина О.И. *Об использовании метода Галеркина при математическом моделировании диффузии экситонов, вызванной пульсирующим электронным зондом в полупроводниковой мишени.* Рассмотрены некоторые возможности использования проекционного метода Галеркина для моделирования двумерной диффузии экситонов, возбуждаемых пульсирующим электронным зондом в полупроводниковой мишени. Задача решена в цилиндрической системе координат. Искомая концентрация экситонов найдена в виде частичной суммы двойного ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра. Получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения их диффузии. При моделировании использовались параметры, характерные для нитрида галлия.

Ключевые слова: метод Галеркина, ряд Фурье, диффузия, полупроводник.

Stepovich M.A., Seregina E.V., Polyakov A.N., Lyamina O.I. *On the use of the Galerkin method for mathematical modeling of diffusion of excitons caused by a pulsing electron beam in a semiconductor target.* Some possibilities of using the Galerkin projection method to simulate two-dimensional diffusion of excitons excited by a pulsing electron beam in a semiconductor target are considered. The problem is solved in a cylindrical coordinate system. The wanted concentration of excitons is found in the form of a partial sum of a double Fourier series in the system of modified Laguerre functions. An order-of-magnitude estimate of the discrepancy error corresponding to the approximate solution of the nonstationary equation of their diffusion is obtained. In the simulation, parameters typical of gallium nitride were used.

Keywords: Galerkin method, Fourier series, diffusion, semiconductor.

Статья поступила в редакцию 22.02.2018
Рекомендована к публикации д-ром физ.-мат. наук А.С. Миненко