

03.07.13

Диффузия в пористом карбиде кремния

© Е.Л. Панкратов¹, М.Г. Мынбаева², Е.Н. Мохов², К.Д. Мынбаев²¹ Нижегородский архитектурно-строительный университет,
Нижний Новгород, Россия² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: elp2004@mail.ru, mynkad@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 25 августа 2010 г.
В окончательной редакции 8 ноября 2010 г.)

На примере диффузии ванадия и эрбия в пористом карбиде кремния проведено моделирование модификации пористой структуры в полупроводнике при термическом отжиге и рассмотрено влияние этой модификации на диффузию примесей. Сопоставление расчетных и экспериментальных профилей распределения эрбия и ванадия в пористом карбиде кремния показывает, что учет модификации пористой структуры, происходящей путем перераспределения вакансий, позволяет удовлетворительно описать диффузию в пористом полупроводнике.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента России (проект № МК-548.2010.2) и внутривузовского гранта Нижегородского архитектурно-строительного госуниверситета в 2009 г. (приказ № 241).

1. Введение

Считается, что присутствие пор в твердом теле, в частности полупроводнике, способствует ускорению диффузии примесей благодаря наличию ее ускоренных путей: внутренних свободных поверхностей (стенок каналов пор) и самих пор, где возможен транспорт в газовой фазе [1–3]. Однако известно, что при сильном нагреве полупроводника с пористой структурой происходит ее модификация — рост крупных пор за счет исчезновения мелких; этот эффект изучался в пористом Si (см., например, [4–8]) и пористом SiC [9,10]. Эксперименты показали, что при низкотемпературной (900–1000°C) диффузии эффективные коэффициенты диффузии в пористом SiC существенно выше, чем в SiC, а при высокотемпературной (2000–2200°C) диффузии эти величины в пористом SiC и SiC близки [11]. Профили распределения примесей при высокотемпературной диффузии в пористом SiC не описывались erfс-функцией, что свидетельствовало о концентрационно-зависимом характере диффузии. На основании полученных данных был сделан вывод, что для интерпретации данных по высокотемпературной диффузии в пористом SiC необходимо рассмотрение вклада процесса модификации пористой структуры, происходящей под воздействием высоких температур. Необходимость подобного рассмотрения связана и с тем, что основным механизмом как миграции примесей, так и укрупнения пор при высокотемпературном отжиге SiC является вакансионный [12–14]. В настоящей работе проведено моделирование модификации пористой структуры в SiC при термическом отжиге и изучено влияние этой модификации на диффузию примесей на примере ванадия и эрбия.

2. Моделирование

Рассмотрим слой пористого SiC, в который через границу $x = 0$, начиная с момента времени $t = 0$, поступает примесь. Перераспределение примеси можно описать с помощью закона Фика в виде

$$\frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} = \text{div}\{D_C \text{grad}[C(x, y, z, t)]\} + \text{div}\left\{\frac{D_{CS}}{\bar{V}kt} \text{grad}[\mu(x, y, z, t)]\right\} \quad (1)$$

со следующими граничными и начальными условиями:

$$C(0, y, z, 0) = C_0, \quad C(x > 0, y, z, 0) = 0,$$

$$C(0, y, z, t) = C_0, \quad \frac{\partial C(L_x, y, z, t)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial C(x, 0, z, t)}{\partial y} = \frac{\partial C(x, L_y, z, t)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial C(x, y, 0, t)}{\partial z} = \frac{\partial C(x, y, L_z, t)}{\partial z} = 0.$$

В уравнении (1) введены следующие обозначения: T — температура, $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K — постоянная Больцмана, \bar{V} — молярный объем, $\mu(x, y, z, t) = RT \ln(V_2/V_1)$ — химический потенциал, V_1 и V_2 — начальный и конечный объемы пор, $R = 8.31$ J/(mol · K) — молярная газовая постоянная, $C(x, y, z, t)$ — концентрация примеси, D_C и D_{CS} — коэффициенты объемной и поверхностной (на стенках пор) диффузии примеси (см., например, [15]). Последние две величины зависят от концентрации примеси и вакансий, и эта зависимость может быть аппроксимирована следующей функцией (см. соответствен-

но [16] и [17,18]):

$$D_C = D_{CL}(T) \left[1 + \xi_V \frac{C^\eta(x, y, z, t)}{P^\eta(x, y, z, T)} \right] \left[1 + \xi_V \frac{V(x, y, z, t)}{V_\infty} \right],$$

$$D_{CS} = D_{CSL}(T) \left[1 + \xi_S \frac{C^\eta(x, y, z, t)}{P^\eta(x, y, z, T)} \right] \left[1 + \xi_S \frac{V(x, y, z, t)}{V_\infty} \right], \quad (2)$$

где V_∞ — равновесное распределение концентрации вакансий, ξ_V , ξ_S , ξ_V , ξ_S (индекс V соответствует объемной диффузии, индекс S — поверхностной диффузии) и η (принимает целые значения, обычно равные 1, 2 или 3 [16]) — параметры, зависящие от легируемого материала и примеси, $P(x, y, z, T)$ — предел растворимости примеси. Распределение концентрации вакансий опишем с помощью следующего уравнения:

$$\frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial t} = \text{div} \{ D_V(T) \text{grad} [V(x, y, z, t)] \} + \text{div} \left\{ \frac{D_{VS}(T)}{\bar{V}kT} \text{grad} [\mu(x, y, z, t)] \right\} \quad (3)$$

с начальными и граничными условиями

$$V(x, y, z, t) \Big|_{S_1 + V_n} = V_\infty \left(1 + \frac{2\gamma\omega}{kT \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} \right),$$

$$V(x, y, z, t) \Big|_{S_2} = V_\infty,$$

$$V(x, y, z, 0) = f_V(x, y, z)$$

$$= V_\infty \left(\frac{2\gamma\omega}{kT \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} e^{-\frac{x}{x_1}} e^{-\frac{y}{y_1}} e^{-\frac{z}{z_1}} - 1 \right),$$

где S_1 — исходные поверхности пор, S_2 — поверхность внешней границы пористой области, V_n — модуль нормальной скорости движения поверхности растущей или уменьшающейся поры [15], γ — удельная поверхностная энергия [1], $\omega = a^3$, a — межатомное расстояние. Целесообразность использования уравнения (3) для описания

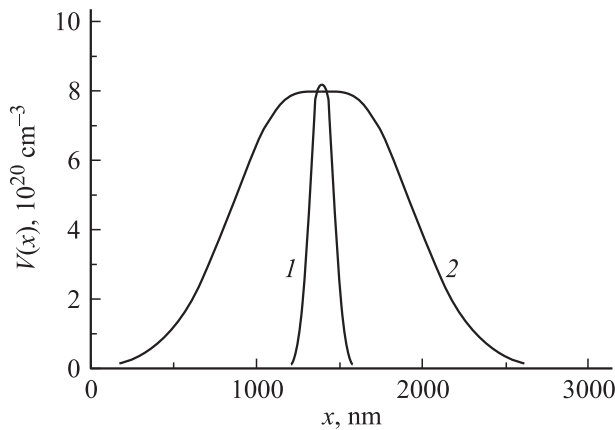


Рис. 1. Типичное распределение концентрации вакансий в окрестности поры в пористом SiC до (1) и после (2) отжига длительностью 120 min при температуре 1700°C.

процесса эволюции формы вакансионной поры под действием отжига подробно рассмотрена в [15]. Граничные и начальные условия для данного уравнения являются трехмерным обобщением граничных условий, подробно разобранных в [1], с учетом увеличения или уменьшения размера пор.

Типичное распределение вакансий в окрестности пор, полученное в результате моделирования с использованием уравнения (3), приведено на рис. 1. Здесь в качестве исходной принималась цилиндрическая пора радиусом 40 nm [14]. Как видно из данного рисунка, в результате отжига произошло увеличение радиуса поры. Полученный результат хорошо соответствует данным [9,10], где увеличение радиуса пор в SiC в результате отжига наблюдалось экспериментально средствами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии.

Для решения диффузионной задачи поставим в соответствие уравнениям (1) и (3) следующие интегральные уравнения с учетом граничных и начальных условий:

$$C(x, y, z, t) = C(x, y, z, t)$$

$$+ \left\{ \int_0^t \int_0^y \int_0^z D_C(x, v, w, T) C(x, v, w, \tau) dw dv d\tau \right.$$

$$- \int_0^t \int_{L_x}^x \int_0^y \int_0^z \frac{\partial D_C(u, v, w, T)}{\partial u} C(u, v, w, \tau) dw dv du d\tau$$

$$+ \int_0^t \int_0^x (x - u) \int_0^z D_C(u, y, w, T) \frac{\partial C(u, y, w, \tau)}{\partial y} dw du d\tau$$

$$- \int_0^t \int_0^{L_x} \int_0^z D_C(u, y, w, T) \frac{\partial C(u, y, w, \tau)}{\partial y} (L_x - u) dw du d\tau$$

$$+ \int_0^t \int_0^x (x - u) \int_0^y D_C(u, v, z, T) \frac{\partial C(u, v, z, \tau)}{\partial z} dv du d\tau$$

$$- \int_{L_x}^x \int_0^y \int_0^z C(u, v, w, t) dw dv du$$

$$- \int_0^t \int_0^{L_x} \int_0^y D_C(u, v, z, T) \frac{\partial C(u, v, z, \tau)}{\partial z} dv (L_x - u) du d\tau$$

$$- C_0 \int_0^t \int_0^y \int_0^z D_L(x, v, w, T) \left[1 + \xi \frac{V(x, v, w, \tau)}{V_\infty} \right]$$

$$\times \left[\frac{\xi C_0^\eta}{P^\eta(x, v, w, T)} + 1 \right] dw dv d\tau \left. \right\} (L_x L_y L_z)^{-\frac{4}{3}}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned}
 V(x, y, z, t) = & V(x, y, z, t) + \left\{ \int_0^t \int_0^y (y-v) \right. \\
 & \times \int_0^z (z-w) D_V(T) V(x, v, w, \tau) dw dv d\tau \\
 & - \int_0^t \int_0^x \int_0^y (y-v) \int_0^z (z-w) V(u, v, w, \tau) \\
 & \times \frac{\partial D_V(T)}{\partial u} dw dv dud\tau + \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^z (z-w) \\
 & \times D_V(T) V(u, y, w, \tau) dw dv d\tau - \int_0^t \int_0^x \int_0^y \int_0^z (z-w) \\
 & \times V(u, v, w, \tau) \frac{\partial D_V(T)}{\partial v} dw dv (x-u) dud\tau \\
 & + \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^y (y-v) D_V(T) V(u, v, z, \tau) dv dud\tau \\
 & - \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^y (y-v) \int_0^z V(u, v, w, \tau) \\
 & \times \frac{\partial D_V(T)}{\partial w} dw dv dud\tau + \int_0^t \int_0^y (y-v) \\
 & \times \int_0^z \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \frac{D_{VS}(T)}{\bar{V}kT} (z-w) dw dv d\tau \\
 & + \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^z (z-w) \frac{D_{VS}(T)}{\bar{V}kT} \frac{\partial \mu(u, y, w, \tau)}{\partial y} dv dud\tau \\
 & + \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^y (y-v) \frac{\partial \mu(u, v, z, \tau)}{\partial z} \frac{D_{VS}(T)}{\bar{V}kT} dv dud\tau \\
 & - \int_0^t \int_0^x (x-u) \int_0^y \int_0^z V(u, v, w, \tau) (z-w) dw (y-v) dv dud\tau \\
 & \left. + \psi + \varphi(xy + xz + yz) \right\} / L_x^2 L_y^2 L_z^2. \quad (5)
 \end{aligned}$$

Параметры φ и ψ приведены в Приложении из-за их громоздкости. Решение уравнений (4) и (5) осуществлялось методом осреднения функциональных поправок [19,20]. В рамках данного метода первые при-

ближения концентраций примеси и вакансий получены путем замены функций $C(x, y, z, t)$ и $V(x, y, z, t)$ на их пока неизвестные средние значения (соответственно α_{1C} и α_{1V}) в правых частях уравнений (4) и (5). Данная замена не вызывает математических трудностей и не приводится из-за громоздкости. Параметры α_{1C} и α_{1V} определяются следующими соотношениями [19,20]:

$$\alpha_{1C} = \frac{1}{L_x L_y L_z \Theta} \int_0^\Theta \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C_1(x, y, z, t) dz dy dx dt, \quad (6)$$

$$\alpha_{1V} = \frac{1}{L_x L_y L_z \Theta} \int_0^\Theta \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} V_1(x, y, z, t) dz dy dx dt, \quad (7)$$

где Θ — длительность диффузионного отжига.

Подстановка первых приближений концентраций примеси и вакансий позволяет получить уравнения для параметров α_{1C} и α_{1V} . Решения данной системы опущены из-за их громоздкости.

Приближения концентраций примеси и вакансий более высоких порядков могут быть получены заменой в правой части данных уравнений: $C(x, y, z, t) \rightarrow \alpha_{iC} + C_{i-1}(x, y, z, t)$ и $V(x, y, z, t) \rightarrow \alpha_{iV} + V_{i-1}(x, y, z, t)$, где $i \geq 2$ — порядок приближения. В результате простых преобразований получены вторые приближения искомых концентраций, они не приводятся из-за громоздкости. Параметры α_{iC} и α_{iV} при $i \geq 2$ определяются следующими соотношениями [19,20]:

$$\begin{aligned}
 \alpha_{iC} = & \frac{1}{L_x L_y L_z \Theta} \int_0^\Theta \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} [C_i(x, y, z, t) \\
 & - C_{i-1}(x, y, z, t)] dz dy dx dt, \quad i \geq 2, \quad (8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \alpha_{iV} = & \frac{1}{L_x L_y L_z \Theta} \int_0^\Theta \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} [V_i(x, y, z, t) \\
 & - V_{i-1}(x, y, z, t)] dz dy dx dt, \quad i \geq 2. \quad (9)
 \end{aligned}$$

Подстановка первых и вторых приближений концентраций примеси и вакансий в соотношения (8) и (9) позволяет получить уравнения для определений параметров α_{2C} и α_{2V} . Решение данных уравнений не приводит к математическим трудностям, поэтому значения параметров α_{2C} и α_{2V} опущены из-за их громоздкости. Хотя концентрации примеси и вакансий могут быть получены более точно, однако приближения второго порядка обычно оказывается вполне достаточно для получения качественных и некоторых количественных результатов [20–22].

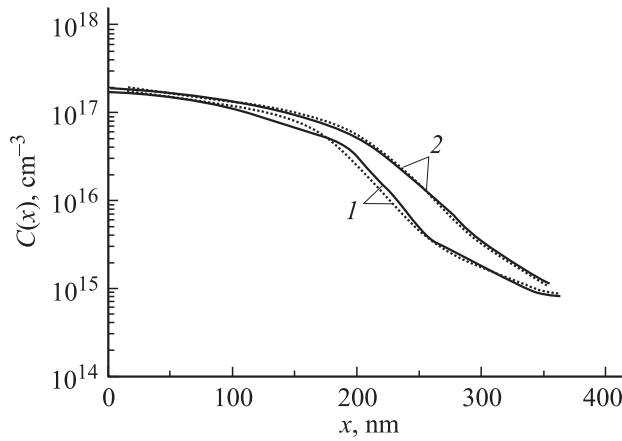


Рис. 2. Распределение ванадия в непористом (1) и пористом (2) SiC. Температура отжига 2200°C, длительность отжига 120 min. Сплошные кривые — решение уравнения (4) с учетом решения уравнения (5), пунктирные — экспериментальные данные [11].

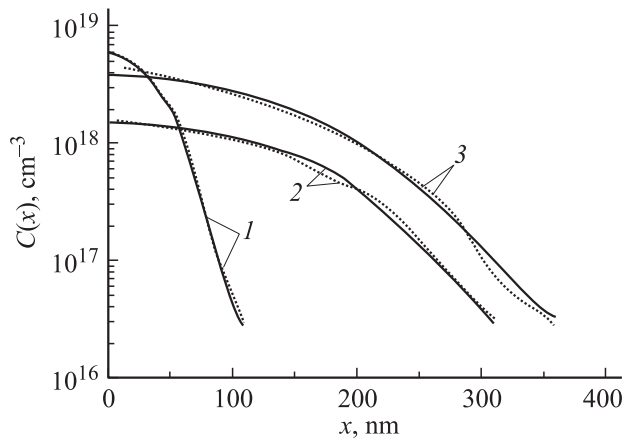


Рис. 3. Распределение эрбия в непористом (1), нанопористом (2) и микропористом (3) SiC. Температура отжига 1700°C, длительность отжига 120 min. Сплошные кривые — решение уравнения (4) с учетом решения уравнения (5), пунктирные — экспериментальные данные [11].

3. Анализ результатов

С помощью полученных в предыдущем разделе соотношений можно провести анализ распределения примесей при их диффузии в пористом и непористом карбиде кремния. До достижения примесью границ раздела пористой области распределения их концентраций, а также распределения концентраций вакансий во всех направлениях являются качественно одинаковыми. По этой причине в настоящей работе приведем распределения концентраций примесей и вакансий только в одном направлении — в глубь легируемой структуры. На рис. 2 приведены экспериментальные распределения ванадия в пористом SiC и SiC после отжига в течение

120 min при $T = 2200^\circ\text{C}$, полученные в [11], и соответствующие расчетные профили при следующих значениях параметров: для вакансий $D_V \approx 9.34 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$; $D_{VS} \approx 2.43 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{s}$; для ванадия $\xi_V \approx 0.32$, $\xi_S \approx 0.43$, $\xi'_V \approx 0.21$, $\xi'_S \approx 0.33$, $D_{CL}(T) = 1.30 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_{CSL}(T) = 2.40 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $P(T) \approx 2.61 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

На рис. 3 приведены экспериментальные распределения эрбия в пористом SiC и SiC после отжига в течение 120 min при $T = 1700^\circ\text{C}$ [11] и соответствующие расчетные профили при следующих значениях параметров: для вакансий $D_V \approx 2.50 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$; $D_{VS} \approx 1.30 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$; для эрбия (в непористом карбиде кремния) $\xi_V \approx 0.31$, $\xi_S \approx 0.24$, $\xi'_V \approx 0.10$, $\xi'_S \approx 0.27$, $D_{CL}(T) = 2.30 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_{CSL}(T) = 2.15 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$, $P(T) \approx 1.62 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; для эрбия (в нанопористом карбиде кремния) $\xi_V \approx 0.33$, $\xi_S \approx 0.30$, $\xi'_V \approx 0.22$, $\xi'_S \approx 0.19$, $D_{CL}(T) = 3.56 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_{CSL}(T) = 2.63 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $P(T) \approx 1.93 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; для эрбия (в микропористом карбиде кремния) $\xi_V \approx 0.36$, $\xi_S \approx 0.28$, $\xi'_V \approx 0.29$, $\xi'_S \approx 0.26$, $D_{CL}(T) = 4.32 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $D_{CSL}(T) = 3.27 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$, $P(T) \approx 2.07 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Как при внедрении ванадия, так и при внедрении эрбия глубина диффузии в пористом SiC превышает глубину диффузии в непористом SiC. Основной причиной различия в глубине диффузии рассмотренных примесей при фиксированной температуре является, по-видимому, концентрационная зависимость коэффициентов диффузии, проявившаяся более сильно при диффузии эрбия. Трансформация пористости легируемого материала в обоих случаях проходила без существенных качественных различий для обеих примесей. С увеличением температуры отжига происходит ускорение диффузии примеси за счет ускорения трансформации пор.

Отметим, что полученные при подгонке экспериментальных данных значения коэффициентов диффузии вакансий, эрбия и ванадия по порядку величины согласуются с литературными данными для большинства примесей в SiC [12], как и значение предела растворимости ванадия в этом материале [23].

4. Заключение

Результаты проведенного моделирования модификации пористой структуры в SiC при термическом отжиге показывают, что этот процесс хорошо описывается диффузией вакансий, из которых формируются поры. Рассмотрение перераспределения вакансий при отжиге позволяет удовлетворительно описать диффузию в пористом полупроводнике и определить основные параметры этого процесса: коэффициенты объемной и поверхностной (по стенкам пор) диффузии примесей и предел их растворимости. Авторы считают, что разработанный подход может оказаться полезным при анализе процессов, происходящих в пористых полупроводниках под влиянием внешних воздействий.

Приложение. Параметры φ и ψ для уравнения (5)

$$\begin{aligned} \varphi = & \left[V_{\infty} \left(1 + \frac{2\gamma\omega}{kT\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} \right) \right. \\ & \times \int_0^t \int_0^{y_1+V_n\tau} (y_1 + V_n\tau - v) \int_0^{z_1+V_n\tau} D_V(T(x_1 + V_n\tau, v, w, \tau)) \\ & \times (z_1 + V_n\tau - w) dw dv d\tau - \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} \int_0^{y_1+V_n\tau} (y_1 + V_n\tau - v) \\ & \times \int_0^{z_1+V_n\tau} \frac{\partial D_V T(u, v, w, \tau)}{\partial u} (z_1 - w + V_n\tau) \\ & \times V(u, v, w, \tau) dw dv d\tau + \left(1 + \frac{2\gamma\omega}{kT\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} \right) \\ & \times \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) V_{\infty} \int_0^{z_1+V_n\tau} (z_1 + V_n\tau - w) D_V \\ & \times (T(u, y_1 + V_n\tau, w, \tau)) dw dv d\tau - \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) \\ & \times \int_0^{y_1+V_n\tau} \int_0^{z_1+V_n\tau} (z_1 + V_n\tau - w) \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial v} \\ & \times V(u, v, w, \tau) dw dv d\tau + V_{\infty} \left(1 + \frac{2\gamma\omega}{kT\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} \right) \\ & \times \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} \int_0^{y_1+V_n\tau} \int_0^{z_1+V_n\tau} D_V(T(u, v, z_1 + V_n\tau, \tau)) \\ & \times (y_1 - v + V_n\tau) dv (x_1 + V_n\tau - u) dud\tau \\ & - \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) \int_0^{y_1+V_n\tau} (y_1 + V_n\tau - v) \\ & \times \int_0^{z_1+V_n\tau} V(u, v, w, \tau) \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial w} dw dv d\tau \\ & + \int_0^t \int_0^{y_1+V_n\tau} (y_1 + V_n\tau - v) \int_0^{z_1+V_n\tau} (z_1 + V_n\tau - w) \\ & \times \frac{D_{VS}(T(u, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_1+V_n\tau} dw dv d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) \int_0^{z_1+V_n\tau} \frac{D_{VS}(T(u, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} \\ & \times \frac{\partial \mu(u, y, w, \tau)}{\partial y} \Big|_{y=y_1+V_n\tau} (V_n\tau + z_1 - w) dv d\tau \\ & + \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) \int_0^y (y - v) \frac{D_{VS}(T(u, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} \\ & \times \frac{\partial \mu(u, v, z, \tau)}{\partial z} \Big|_{z=z_1+V_n\tau} dv d\tau - \int_0^t \int_0^{x_1+V_n\tau} (x_1 + V_n\tau - u) \\ & \times \int_0^{y_1+V_n\tau} (y_1 + V_n\tau - v) \int_0^{z_1+V_n\tau} (z_1 + V_n\tau - w) \\ & \times V(u, v, w, \tau) dw dv d\tau - V_{\infty} \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \\ & \times \int_0^{z_2} (z_2 - w) D_V(T(x_2, v, w, \tau)) dw dv d\tau \\ & + \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial u} \\ & \times V(u, v, w, \tau) dw dv d\tau - V_{\infty} \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} \int_0^{z_2} (z_2 - w) \\ & \times D_V(T(u, y_2, w, \tau)) dw (x_2 - u) dud\tau \\ & + \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} \int_0^{z_2} (z_2 - w) V(u, v, w, \tau) \\ & \times \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial v} dw dv (x_2 - u) dud\tau - V_{\infty} \\ & \times \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} (y_2 - v) D_V(T(u, v, z_2, \tau)) dv d\tau \\ & + \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} V(u, v, w, \tau) \\ & \times \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial w} dw dv d\tau \\ & - \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} \\ & \times \frac{D_{VS}(T(x_2, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} dw dv d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} \\
& \times \frac{D_{VS}(T(x_2, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} dw dv d\tau \\
& - \int_0^t \int_0^{y_2} \int_0^{z_2} \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} \left[1 + \frac{\xi C_0^\eta}{P^\eta(x, y, z, T)} \right] \\
& \times \left[1 + \xi \frac{V(x, y, z, t)}{V_\infty} \right] dz dy dx dt + \int_0^\Theta \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} x \int_0^{L_z} (L_y - y) \\
& \times \int_0^{L_z} (L_z - V_n \tau) \int_0^{z_1 + V_n \tau} (z_1 + V_n \tau - w) D_{VS} \\
& \times (T(x_1 + V_n \tau, v, w, \tau)) dw dv d\tau \\
& - \int_0^t \int_0^{x_1 + V_n \tau} (x_1 + V_n \tau - u) D_V(T(u, y_2, w, \tau)) dw dv d\tau \\
& + \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{\partial D_{VS}(T(u, v, w, \tau))}{\partial y} \\
& \times (y_2 - v) dv (x_2 - u) dud\tau \\
& + \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} \frac{D_{VS}(T(u, v, z_2, \tau))}{\bar{V}kT} \frac{\partial \mu(u, v, z, \tau)}{\partial z} \Big|_{z=z_2} \\
& \times (y_2 - v) dv (x_2 - u) dud\tau + \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} (y_2 - v) \\
& \times \int_0^{z_2} (z_2 - w) V(u, v, w, \tau) dw dv (x_2 - u) dud\tau \Big] \\
& \times [x_2 y_2 + x_2 z_2 + y_2 z_2 - (x_1 + V_n t)(y_1 + V_n t) \\
& - (x_1 + V_n t)(z_1 + V_n t) - (y_1 + V_n t)(z_1 + V_n t)]^{-1}, \\
\psi = & \int_0^t \int_0^{x_2} \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) V(u, v, w, \tau) \\
& \times \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial x} dw dv dud\tau - V_\infty \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \\
& \times \int_0^{z_2} (z_2 - w) D_V(T(x_2, v, w, \tau)) dw dv d\tau \\
& + V_\infty \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{z_2} (z_2 - w) D_V(T(u, y_2, w, \tau)) dw dv d\tau
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} \int_0^{z_2} V(u, v, w, \tau) \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial v} \\
& \times (z_2 - w) dw dv dud\tau + V_\infty \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \\
& \times \int_0^{y_2} (y_2 - v) D_V(T(u, v, z_2, \tau)) dv dud\tau \\
& - \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} V(u, v, w, \tau) \\
& \times \frac{\partial D_V(T(u, v, w, \tau))}{\partial w} dw dv dud\tau \\
& + \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{D_{VS}(T(x_2, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} \\
& \times \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} dw dv d\tau \\
& + \int_0^t \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{D_{VS}(T(x_2, v, w, \tau))}{\bar{V}kT} \\
& \times \frac{\partial \mu(x, v, w, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=x_2} dw dv d\tau \\
& + \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \frac{\partial \mu(u, y, w, \tau)}{\partial y} \Big|_{y=y_2} \\
& \times \frac{D_{VS}(T(u, y_2, w, \tau))}{\bar{V}kT} dv dud\tau + \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \\
& \times \int_0^{y_2} (y_2 - v) \frac{D_{VS}(T(u, v, z_2, \tau))}{\bar{V}kT} \frac{\partial \mu(u, v, z, \tau)}{\partial z} dv dud\tau \\
& - \int_0^t \int_0^{x_2} (x_2 - u) \int_0^{y_2} (y_2 - v) \int_0^{z_2} (z_2 - w) \\
& \times V(u, v, w, \tau) dw dv dud\tau + \varphi(x_2 y_2 + x_2 z_2 + y_2 z_2).
\end{aligned}$$

Список литературы

- [1] П.Г. Черемской, В.В. Слезов, В.И. Бетехтин. Поры в твердом теле. Энергоатомиздат, М. (1990). С. 274.
- [2] Е.В. Астрова, В.Б. Воронков, И.В. Грехов, А.В. Нашекин, А.Г. Ткаченко. Письма в ЖТФ **25**, 23, 72 (1999).

- [3] S.I. Soloviev, T.S. Sudarshan. In: Porous silicon carbide and gallium nitride: epitaxy, catalysis, and biotechnology applications / Eds R.M. Feenstra, C.E.C. Wood. John Wiley and Sons, London (2008). P. 31.
- [4] J. Schmelzer, J. Möller, V.V. Slezov, I. Gutzow, R. Pascova. *Quimica Nova* **21**, 529 (1998).
- [5] G. Müller, K. Brendel. *Phys. Status Solidi A* **182**, 313 (2000).
- [6] N. Ott, M. Nerding, G. Müller, K. Brendel, H.P. Strunk. *J. Appl. Phys.* **95**, 497 (2004).
- [7] V. Depauw, I. Gordon, G. Beaucarne, J. Poortmans, R. Mertens, J.-P. Celis. *J. Appl. Phys.* **106**, 033 516 (2009).
- [8] J. Salonen, E. Mäkilä, J. Riikonen, T. Heikkilä, V.-P. Lehto. *Phys. Status Solidi A* **206**, 1313 (2009).
- [9] J. Bai, G. Dhanaraj, P. Gouma, M. Dudley, M. Mynbaeva. *Mater. Sci. Forum* **457–460**, 1479 (2004).
- [10] M. Mynbaeva, A. Lavrent'ev, I. Kotousova, A. Volkova, K. Mynbaev, A. Lebedev. *Mater. Sci. Forum* **483–485**, 269 (2005).
- [11] М.Г. Мынбаева, А.А. Лаврентьев, Е.Н. Мохов, К.Д. Мынбаев. *Письма в ЖТФ* **34**, 17, 13 (2008).
- [12] Yu.A. Vodakov, E.N. Mokhov. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **137**, 197 (1994).
- [13] Y. Gao, S.I. Soloviev, T.S. Sudarshan. *J. Appl. Phys.* **83**, 905 (2003).
- [14] М.Г. Мынбаева, Д.А. Бауман, К.Д. Мынбаев. *ФТТ* **47**, 1571 (2005).
- [15] M. Kitayama, T. Narushima, W.C. Carter, R.M. Cannon, A.M. Glaeser. *J. Am. Ceram. Soc.* **83**, 2561 (2000); M. Kitayama, T. Narushima, A.M. Glaeser. *J. Am. Ceram. Soc.* **83**, 2572 (2000).
- [16] З.Ю. Готра. *Технология микроэлектронных устройств. Радио и связь*, М. (1991). 528 с.
- [17] Е.И. Зорин, П.В. Павлов, Д.И. Тетельбаум. *Ионное легирование полупроводников*, Энергия, М. (1975). 130 с.
- [18] H. Ryssel, I. Ruge. *Ion implantation*. B.G. Teubner, Stuttgart (1978). 360 p.
- [19] Ю.Д. Соколов. *Прикл. механика* **1**, 23 (1955).
- [20] E.L. Pankratov. *J. Appl. Phys.* **103**, 064 320 (2008).
- [21] E.L. Pankratov. *Eur. Phys. J. B* **57**, 251 (2007).
- [22] E.L. Pankratov. *Mod. Phys. Lett. B* **22**, 2779 (2008).
- [23] S.A. Reshanov, V.P. Rastegaev. *Diam. Relat. Mater.* **10**, 2035 (2001).