

01;03

Эффективное время установления концентрации вещества в среде со слабо неоднородным коэффициентом диффузии

© А.А. Дубков, А.А. Мальцев, Е.Л. Панкратов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия
e-mail: dubkov@rf.unn.runnet.ru, maltsev@rf.unn.runnet.ru, elp@rf.unn.runnet.ru

(Поступило в Редакцию 23 января 2002 г. В окончательной редакции 6 мая 2002 г.)

На основе введенного ранее интегрального критерия и нового подхода к оценке временных характеристик диффузионных процессов определено время установления концентрации примеси в среде со слабо неоднородным коэффициентом диффузии. Найден профиль коэффициента диффузии, при котором время установления может быть уменьшено.

Введение

Математическая теория диффузии разработана достаточно подробно (см., например, [1–3]). Тем не менее ряд проблем, имеющих важное теоретическое и прикладное значение, остался нерешенным. Одной из таких проблем является задача нахождения времени установления примеси в среде с переменным в пространстве коэффициентом диффузии [4]. Актуальность решения таких задач вызвана широким применением диффузионной техники, особенно в производстве полупроводниковых приборов.

В данной работе рассматривается случай одномерной ограниченной среды со слабо неоднородным коэффициентом диффузии, что адекватно описывает ситуацию для ряда электронных приборов с различными значениями коэффициента диффузии в рабочей области [5–7]. С помощью введенного ранее интегрального критерия [8–12] и нового подхода к оценке временных характеристик диффузионных процессов определено время установления примеси в рассматриваемой среде. На основе полученного соотношения для времени установления проводится оптимизация пространственной зависимости коэффициента диффузии с целью ускорения „рассасывания“ примеси.

Постановка задачи и метод решения

Рассмотрим одномерную среду с отражающими границами $x = 0$, $x = L$ и слабо неоднородным коэффициентом диффузии $D = D(x)$. В момент времени $t = 0$ в среду помещается примесь единичной массы

$$\int_0^L C(x, t) dx = 1$$

с заданным распределением начальной концентрации $C(x, 0) = f(x)$. С течением времени распределение концентрации примеси будет стремиться к стационарному значению $C(x, \infty) = 1/L$. Определим эффективное

время установления концентрации примеси в заданной точке среды (точке наблюдения) и профиль коэффициента диффузии, позволяющий уменьшить это время.

Как известно, пространственно-временное распределение концентрации примеси $C(x, t)$ удовлетворяет уравнению диффузии

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right] = -\frac{\partial G(x, t)}{\partial x}, \quad (1)$$

где $G(x, t)$ — поток примеси; уравнение диффузии дополняется начальным $C(x, 0) = f(x)$ и граничными $G(0, t) = G(L, t) = 0$ условиями.

Пространственную зависимость коэффициента диффузии представим в виде суммы его среднего значения

$$D_0 = \frac{1}{L} \int_0^L D(x) dx$$

и небольшой поправки, учитывающей отличие закона изменения коэффициента диффузии от его среднего значения

$$D(x) = D_0(1 + \varepsilon g(x)), \quad 0 < \varepsilon \ll 1, \quad |g(x)| \leq 1.$$

С учетом такого представления уравнение диффузии примет вид

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \varepsilon g(x)) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (2)$$

Введение малого параметра ε позволяет искать решение уравнения (2) в виде степенного ряда по ε [12].

Переходные процессы установления равновесной концентрации вещества, описываемые уравнением диффузии (2), имеют достаточно сложную временную зависимость. Для определения времени установления концентрации необходимо использовать какой-либо критерий оценки, позволяющий по заданному переходному процессу находить величину искомого времени. Время

установления определим с помощью „равновеликого прямоугольника“ аналогично [8–12]

$$\Theta(x) = [C(x, 0) - C(x, \infty)]^{-1} \times \int_0^{\infty} [C(x, t) - C(x, \infty)] dt. \quad (3)$$

Такое определение времени установления применимо для монотонных во времени переходных процессов. Наиболее интересной с практической точки зрения является ситуация, при которой начальное распределение расположено на одной из границ среды, а время установления вычисляется в точке, находящейся на другой границе. В этом случае переходные процессы всегда монотонны во времени.

Будем искать решение уравнения (2) в виде разложения

$$C(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k C_k(x, t). \quad (4)$$

Подставляя (4) в (2) и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях параметра ε в левой и правой частях уравнения диффузии, получим систему уравнений для функций $C_k(x, t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_0(x, t)}{\partial t} &= D_0 \frac{\partial^2 C_0(x, t)}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial C_k(x, t)}{\partial t} &= D_0 \frac{\partial^2 C_k(x, t)}{\partial x^2} + D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[g(x) \frac{\partial C_{k-1}(x, t)}{\partial x} \right], \quad k \geq 1. \end{aligned} \quad (5)$$

Аналогично, подставляя (4) в граничные и начальные условия, приходим к системе условий для функций $C_k(x, t)$

$$\frac{\partial C_k(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial C_k(L, t)}{\partial x} = 0, \quad k \geq 0. \quad (6)$$

$$C_0(x, 0) = f(x), \quad C_k(x, 0) = 0, \quad k \geq 1. \quad (7)$$

Линейность времени установления, определяемого с помощью (3), по отношению к концентрации $C(x, t)$ позволяет вычислять время установления в виде суммы

$$\Theta(x) = \Theta_0(x) \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \tau_k(x) \right), \quad (8)$$

где

$$\Theta_0(x) = [Lf(x) - 1]^{-1} \int_0^{\infty} [LC_0(x, t) - 1] dt \quad (9)$$

— нулевое приближение для времени установления (3).

Функции $\tau_k(x)$, входящие в (8) и определяемые выражением

$$\tau_k(x) = \int_0^{\infty} C_k(x, t) dt / \int_0^{\infty} [C(x, t) - C(x, \infty)] dt \quad \text{для } k \geq 1, \quad (10)$$

будем в дальнейшем называть относительными поправками к времени установления в однородной среде (нулевому приближению). С учетом первого уравнения системы (5) и соотношения (3) нулевое приближение времени установления может быть представлено в виде

$$\Theta_0(x) = [6D_0d(x)(1 - Lf(x))]^{-1}, \quad (11)$$

где

$$d(x) = [6Lx F_0(x) - 3F_2(L) + 6L(F_1(L) - F_1(x)) - 2L^2 - 3x^2]^{-1},$$

$$F_i(x) = \int_0^x y^i f(y) dy.$$

Первую поправку к времени установления можно получить подстановкой решений первого и второго уравнений системы (5) в соотношение (10)

$$\begin{aligned} \tau_1(x) &= \\ &= \frac{6 \left[\int_x^L g(v)[v - LF_0(v)] dv - \int_0^L g(v)v(vL^{-1} - F_0(v)) dv \right]}{3F_2(L) - 6L[F_1(L) - F_1(x)] + 2L^2 + 3x^2 - 6Lx F_0(x)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Малость параметра ε и ограниченность по абсолютной величине функции изменения коэффициента диффузии $g(x)$ позволяют пренебречь нелинейными по ε членами разложения в (4) и (8) и ограничиться лишь линейным приближением.

Примеры вычисления поправок к времени установления

Пусть в начальный момент времени вся примесь сосредоточена в одной точке на левой границе среды $f(x) = \delta(x)$. Следует заметить, что в силу начальных условий (7) дельта-функция $\delta(x)$ должна рассматриваться здесь как односторонняя [13]. При этом наибольший практический интерес имеет значение поправки $\tau_1(x)$ в точке $x = L$, которое легко получается из (12). Переноса начало координат в точку $x = L/2$, нетрудно получить

$$\tau_1(L) = 6L^{-3} \int_{-L/2}^{L/2} g(z + L/2)(z^2 - L^2/4) dz. \quad (13)$$

Из этого соотношения видно, что вклад в поправку $\tau_1(L)$ дает только четная (относительно середины среды)

Значения поправок к времени установления для некоторых функций Уолша четных порядков

Функция	Первая поправка к времени установления, τ_1
$Wal(2, L)$	3/8
$Wal(4, L)$	3/32
$Wal(6, L)$	3/128

составляющая пространственной зависимости коэффициента диффузии.

Рассмотрим в качестве примера среду с плоско-слоистой пространственной структурой [5,6]. Пространственную зависимость коэффициента диффузии такой среды удобно аппроксимировать с помощью функций Уолша $Wal(k, x)$, где k — порядок функции Уолша [14]. Вклад в поправку $\tau_1(L)$ дают лишь функции Уолша четных порядков.

Можно показать, что применение спектральных методов представления профилей возмущения коэффициента диффузии позволяет вычислить поправку к времени установления $\tau_1(x)$ для любых профилей $g(x)$. При этом процедура вычисления поправки может быть существенно упрощена. Представим пространственную зависимость коэффициента диффузии в виде ряда по некоторому ортогональному базису функций $\{g_m(x)\}$

$$D(x) = D_0 \left[1 + \varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m g_m(x) \right], \quad (14)$$

где β_m — коэффициенты разложения функции $g(x)$ по ортогональному базису.

В этом случае в силу линейности (12) по $g(x)$ поправка $\tau_1(x)$ является суперпозицией поправок $\tau_{1m}(x)$, определяемых функциями $g_m(x)$,

$$\tau_1(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m \tau_{1m}(x). \quad (15)$$

Каждая из поправок $\tau_{1m}(x)$ вычисляется с помощью соотношения (12) при условии $g(x) = g_m(x)$. Например, для тригонометрического базиса $\{\cos 2\pi m x/L, \sin 2\pi m x/L\}$ из (13) легко находятся величины поправок $\tau_{1m}(L)$ для отдельных пространственных гармоник

$$\tau_{1 \cos m}(L) = 3/(\pi m)^2, \quad \tau_{1 \sin m} = 0, \quad (16)$$

где $\tau_{1 \cos m}(L)$ и $\tau_{1 \sin m}(L)$ — поправки, соответствующие функциям $g(x) = \cos 2\pi m x/L$ и $g(x) = \sin 2\pi m x/L$.

Зависимость величины поправки $\tau_1(L)$ от номера косинусоидальной пространственной гармоники m показана на рис. 1. Видно, что с ростом частоты профиля возмущения коэффициента диффузии (см., например, таблицу и рис. 1) происходит уменьшение влияния неоднородности на время установления из-за процесса его усреднения. Быстрая сходимость спектральных разложений

позволяет не учитывать мелкие детали профиля возмущения коэффициента диффузии при оптимизации его структуры и аппроксимировать функцию $g(x)$ одной-двумя первыми спектральными компонентами.

Ускорение диффузии примеси путем выбора оптимальной пространственной структуры среды

Проведенный выше анализ показал, что вклад в поправку $\tau_1(L)$ дают четные относительно середины среды профили $g(x)$. Если закон изменения коэффициента диффузии аппроксимируется несимметричными (относительно середины среды) функциями типа синуса или функций Уолша нечетных порядков, то в этом случае процесс диффузии определяется средним значением функции $D(x)$. Максимальное различие между временем установления, соответствующим неоднородной среде, и его нулевым приближением достигается в трехслойной среде (см. таблицу и рис. 1). На время установления существенное влияние оказывает порядок чередования слоев, что соответствует зависимости поправки $\tau_1(L)$ от знака функции $g(x)$ в (13). Так, на рис. 2 приведены профили коэффициента диффузии, соответствующие ускорению диффузии по сравнению со случаем однородной среды. Смена знака этого профиля приводит к замедлению диффузии. Значение поправки (13) для слоистой среды, показанной на рис. 2, равно $\tau_1(L) = -3/8$.

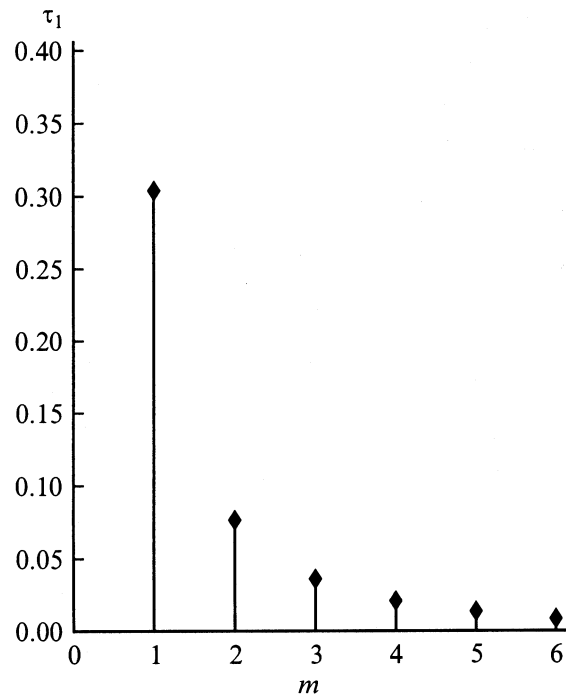


Рис. 1. Зависимость величины первой поправки к времени установления, соответствующей неоднородному коэффициенту диффузии вида $D(x) = D_0[1 + \varepsilon \cos(2\pi m x/L)]$, от частоты его пространственной зависимости m .

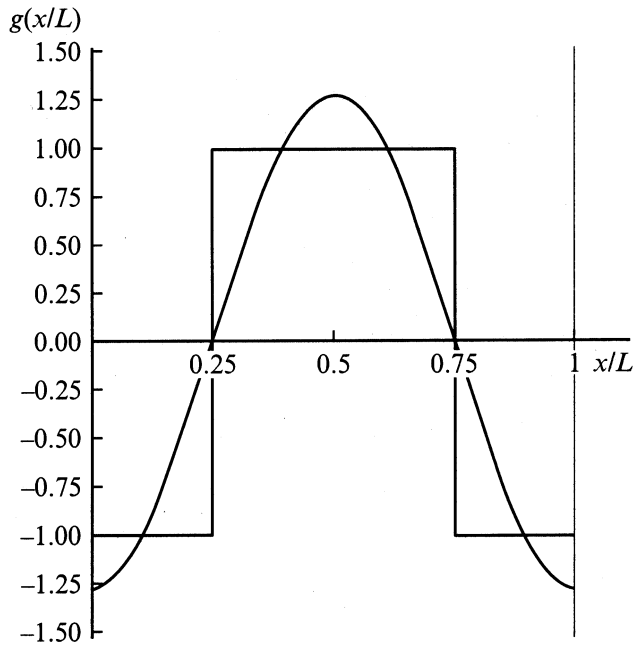


Рис. 2. Трехслойная и гармоническая структуры, соответствующие ускорению диффузионного процесса.

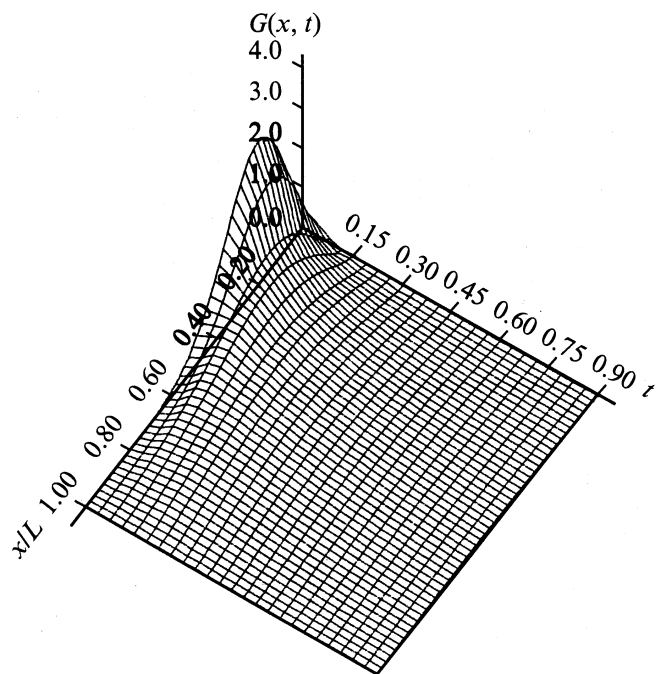


Рис. 3. Пространственно-временное распределение потока примеси $G(x, t)$ при начальном распределении следующего вида: $f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi W}} \exp\left(-\frac{x^2}{2W}\right)$ при малой величине параметра W ($W = 0.04$).

Поправка, соответствующая гармоническому профилю коэффициента диффузии, приведенному на рис. 2, имеет меньшее значение $\tau_{1 \cos m}(m = 1) \approx -3/\pi^2$. Физически полученная зависимость времени установления от фа-

зы гармонического профиля возмущения коэффициента диффузии φ и смещения функции Уолша a связана с пространственно-временным распределением потока примеси. В начальный момент времени самый большой по величине поток примеси находится в окрестности точки $x = 0$. Из-за большой величины своего потока примесь проходит интервал $0 \leq x \approx L/4$, не замечая различия между текущим коэффициентом диффузии и его средним значением. В процессе дальнейшей диффузии примеси максимальное значение потока за время $T \ll \Theta_0$ смещается к середине среды, уменьшаясь по абсолютной величине. В дальнейшем диффузия протекает наиболее интенсивно в центре среды. Поэтому для ускорения установления примеси необходимо увеличивать значение коэффициента диффузии в интервале $L/4 \leq x \leq 3L/4$. В окрестности границы среды $x = L$ начинает сказываться отражение примеси от границы. По этой причине в интервале $3L/4 \leq x \leq L$ результирующий поток (суперпозиция прямого и отраженного) мал и происходит постепенное заполнение данного интервала примесью, слабо влияющее на время установления. Пример пространственно-временного распределения потока примеси, полученного с помощью численного моделирования представлен на рис. 3.

Область применимости линейного по параметру ε приближения для расчета времени установления можно получить путем численного моделирования диффузионного процесса. Проведенный анализ показал, что для рассмотренных в работе примеров начального распределения и профилей коэффициента диффузии возможно вычисление времени установления в линейном по ε приближении вплоть до $\varepsilon \approx 0.1$.

Заключение

В настоящей работе на основе нового подхода к нахождению временных характеристик диффузионных процессов исследована зависимость времени установления концентрации примеси в слабо неоднородной среде от характера изменений в пространстве коэффициента диффузии. Использована линейная по коэффициенту диффузии оценка времени установления. Применение такой оценки позволило получить простые и наглядные соотношения для вычисления времени установления, существенно упростить оптимизацию пространственной зависимости коэффициента диффузии, основанную на его спектральном представлении. Проведенная оптимизация пространственной структуры коэффициента диффузии позволила установить его профиль, наиболее ускоряющий диффузию примеси по сравнению со случаем однородной среды с коэффициентом диффузии D_0 .

Данная работа поддержана грантами РФФИ (№ 00-15-96620 и 02-02-17517) и INTAS (№ 01-0450).

Список литературы

- [1] Райченко А.И. Математическая теория диффузии в приложениях. Киев: Наукова думка, 1981. 396 с.
- [2] Crank J. The Mathematics of Diffusion. Oxford University Press, 1975. 279 с.
- [3] Старк Дж.П. Диффузия в твердых телах. М.: Энергия, 1980. 239 с.
- [4] Зон Б.А., Ледовский С.Б., Лихолет А.Н. // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 4. С. 38–41.
- [5] Степаненко И.П. Основы микроэлектроники. М.: Сов. радио, 1980. 423 с.
- [6] Гусев В.Г., Гусев Ю.М. Электроника. М.: Высшая школа, 1991. 622 с.
- [7] Шалимова К.В. Физика полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1985. 391 с.
- [8] Garanin D.A // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 54. N 4. P. 3250–3256.
- [9] Coffey V.T., Crothers D.S.F., Kalmykov Yu.P. // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 55. N 4. P. 4812–4815.
- [10] Malakhov A.N. // Chaos. 1997. Vol. 7. N 3. P. 488–504.
- [11] Малахов А.Н., Панкратов Е.Л. // Изв. вузов. Радиофизика. 2001. Т. 44. № 4. С. 367–373.
- [12] Мальцев А.А., Панкратов Е.Л. // Тр. 5-й научной конф. по радиофизике / Под ред. А.В. Якимова. Нижний Новгород: Талам, 2001. С. 211–212.
- [13] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1977. 832 с.
- [14] Гоноровский И.С. Радиотехнические цепи и сигналы. М.: Наука, 1977. 607 с.