01;05

Диффузия в твердом теле с образованием и распадом неподвижных комплексов

© Р.Ш. Малкович

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 23 декабря 2002 г.

Получена формула для распределения концентрации примеси при диффузии в твердом теле с образованием и распадом неподвижных комплексов.

При выводе формулы использовано преобразование решения для случая свободной диффузии для тех же начального и граничных условий задачи.

Диффузия в твердом теле зачастую сопровождается образованием комплексов между диффундирующей примесью и различными ловушками (другими примесями, дефектами и т. д.) [1]. Ловушки, а также комплексы могут быть при этом как подвижными, так и неподвижными.

Т.И. Кучер [2] рассмотрела для случаев неограниченного и полуограниченного тела линейную задачу одновременной диффузии примеси и комплексов, описываемую системой уравнений

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - k_1 c_1 + k_2 c_2, \tag{1а}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + k_1 c_1 - k_2 c_2, \tag{1б}$$

где c_1 — концентрация свободной (диффундирующей) примеси, c_2 — концентрация связанной примеси (комплексов), D_1 — коэффициент диффузии примеси, D_2 — коэффициент диффузии комплексов, k_1 и k_2 — вероятности образования и распада комплексов в единицу времени соответственно, x — координата, t — время.

Задача диффузии в нелинейной области, описываемая системой уравнений:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - k_1 q c_1 + k_2 c_2,$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + k_1 q c_1 - k_2 c_2,$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_q \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - k_1 q c_1 + k_2 c_2, \tag{2}$$

где q и D_q — концентрация и коэффициент диффузии ловушек, — решалась для случая неподвижных комплексов ($D_2 = 0$) методом последовательных интервалов в работе Р.Ш. Малковича и В.А. Покоевой [3]. Независимое аналитическое решение может быть получено при этом в частном случае неподвижных ловушек ($D_q = 0$) — в приближении локального равновесия [3,4], $k_1 q c_1 = k_2 c_2$, и в приближении полного связывания. В случае подвижных ловушек аналитические решения были получены в приближении локального равновесия в случаях слабого или сильного связывания в работах В.В. Васькина и В.А. Ускова [5,6] и В.И. Фистуля, М.И. Синдера и Д.М. Рейна [7]. Диффузия с образованием и распадом подвижных комплексов рассматривалась в работах В.И. Фистуля и М.И. Синдера [8–10]. Аналитические решения были при этом получены лишь в предельных случаях — сильного и слабого связывания, близких коэффициентов диффузии и т.д. Возможность аналитического рассмотрения существует и в случае, когда примесь в свободном состоянии неподвижна: $D_1 = 0$, а ее перемещение обеспечивается исключительно за счет диффузии комплексов [11,12].

В настоящей работе найдено явное аналитическое решение линейной задачи диффузии в твердом теле с образованием и распадом неподвижных комплексов. Указанное решение получено преобразованием решения задачи свободной диффузии.

Рассмотрим решение системы уравнений (1а), (1б) в случае неподвижных комплексов, т.е. при условии $D_2 = 0$. Будем при этом считать, что в начальный момент времени комплексы в теле отсутствуют: $c_2(x, 0) = 0$.

Решение рассматриваемой задачи получим методом преобразования Лапласа. Будем при этом искать распределение концентрации свободной (диффундирующей) примеси $c_1(x, t)$, поскольку распределение концентрации комплексов $c_2(x,t)$ может быть найдено из уравнения (1б), решение которого при $D_2 = 0$ имеет вид

$$c_2(x,t) = k_1 \exp(-k_2 t) \int_0^t c_1(x,\tau) \exp(k_2\tau) d\tau. \tag{3}$$

Уравнение (1а) в изображении

$$v(x) = \int_0^\infty \exp(-pt) c_1(x,t) dt \tag{4}$$

принимает вид

$$\frac{d^2 v}{dx^2} - \frac{1}{D} s v + \frac{c_1(x,0)}{D} = 0, \tag{5}$$

где $c_1(x,0)$ — начальное распределение концентрации свободной (диффундирующей) примеси, $D = D_1$,

$$s = p + k_1 - \frac{k_1 k_2}{p + k_2}. \tag{6}$$

Решение уравнения (5) для рассматриваемых случаев конечного тела $0 \leqslant x \leqslant l$ с поглощающими, $c_1(0,t) = c_1(l,t) = 0$, $t > 0$, и с непроницаемыми границами, $\frac{\partial c_1}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial c_1}{\partial x}(l,t) = 0$, $t > 0$, как можно показать, выражается соотношением

$$v(x) = \frac{1}{2\sqrt{sD}\sinh\left(\sqrt{\frac{s}{D}}\,l\right)} \left\{ \int_0^x c_1(\xi,0) \cosh\left[\sqrt{\frac{s}{D}}\,(l - x + \xi)\right] d\xi \right.$$

$$+ \int_x^l c_1(\xi,0) \cosh\left[\sqrt{\frac{s}{D}}\,(l + x - \xi)\right] d\xi$$

$$\left. \mp \int_0^l c_1(\xi,0) \cosh\left[\sqrt{\frac{s}{D}}\,(l - x - \xi)\right] d\xi \right\}, \tag{7}$$

где верхний знак соответствует случаю поглощающих, а нижний — непроницаемых границ.

Как следует из соотношения (7), изображение $v(x)$ является в рассматриваемом случае функцией величины s, определяемой равенством (6). Нетрудно видеть, что это утверждение справедливо также в случае полуограниченного тела, $0 \leqslant x \leqslant \infty$, с поглощающей, $c_1(0, t) = 0$, $t > 0$, и с непроницаемой границей, $\frac{\partial c_1}{\partial x}(0, t) = 0$, $t > 0$, и в случае неограниченного тела, $-\infty \leqslant x \leqslant \infty$. Это обстоятельство дает возможность находить решение для случая диффузии с образованием и распадом неподвижных комплексов, используя решение для случая свободной диффузии при тех же начальном и граничных условиях задачи.

Действительно, будем искать концентрацию примеси $c_1(x, t)$ по ее изображению $v(s, x)$: $v(s, x) = v(x)$, см. (4).

В интеграле Лапласа

$$v(p, x) = \int\limits_0^\infty \exp(-p\tau)c(x, \tau)dt \tag{8}$$

заменим p на s. Принимая во внимание (6), получим:

$$v(s, x) = \int\limits_0^\infty \exp\bigl[-(p + k_1)\tau\bigr] \exp\left(\frac{k_1 k_2 \tau}{p + k_2}\right) c(x, \tau)d\tau. \tag{9}$$

Воспользуемся формулой [13]

$$\int\limits_0^\infty \exp\bigl[-(p + a)\eta\bigr] I_1\left(2\sqrt{\frac{\eta}{b}}\right) \frac{d\eta}{\sqrt{a\eta}} = \exp\left(\frac{1}{b(p + a)}\right) - 1,$$

где I_1 — модифицированная функция Бесселя первого порядка [14], и представим равенство (9) в виде

$$v(s, x) = \int\limits_0^\infty \exp\bigl[-(p + k_1)\tau\bigr]\left\{1 + \sqrt{k_1 k_2}\int\limits_0^\infty \exp\bigl[-(p + k_2)\tau\bigr]\right.$$
$$\left.\times I_1\bigl(2\sqrt{k_1 k_2 \eta\tau}\bigr)\sqrt{\frac{\tau}{\eta}}\, d\eta\right\} c(x, \tau)d\tau.$$

Во внутреннем интеграле положим $\eta = t - \tau$: Тогда получим

$$v(s,x) = \int_0^\infty \exp\left[-(p+k_1)\tau\right] c(x,\tau)d\tau$$

$$+ \sqrt{k_1k_2}\int_0^\infty \exp\left[-(p+k_1)\tau\right]\sqrt{\tau}\int_\tau^\infty \exp\left[-(p+k_2)(t-\tau)\right]$$

$$\times I_1\left(2\sqrt{k_1k_2\tau(t-\tau)}\right)\frac{dt}{\sqrt{t-\tau}}c(x,\tau)d\tau. \tag{10}$$

Изменим порядок интегрирования, а в первом интеграле заменим τ на t. Тогда из (10) получим изображение (4), в котором искомый оригинал $c_1(x,t)$ описывается выражением

$$c_1(x,t) = \exp(-k_1t)c(x,t) + \sqrt{k_1k_2}\exp(-k_2t)$$

$$\times \int_0^t \exp\left[-(k_1-k_2)\tau\right] I_1\left(2\sqrt{k_1k_2\tau(t-\tau)}\right)\sqrt{\frac{\tau}{t-\tau}}c(x,\tau)d\tau. \tag{11}$$

Таким образом, если для изображения $v(p,x)$, см. (8), оригиналом является функция $c(x,t)$, то для изображения $v(s,x) = v(x)$, см. (4), оригиналом будет функция $c_1(x,t)$, определяемая выражением (11). Следовательно, если известно распределение концентрации $c(x,t)$ при свободной диффузии, то распределение концентрации диффундирующей примеси $c_1(x,t)$ при диффузии с образованием и распадом неподвижных комплексов для тех же начального и граничных условий может быть найдено из выражения (11).

Рассмотрим в качестве примера диффузию из равномерно-легированного полуограниченного тела, $c_1(x,0) = c(x,0) = c_0$, с поглощающей границей. Распределение концентрации примеси при свободной диффузии имеет в этом случае вид [15]

$$c(x,t) = c_0 \operatorname{erf}\frac{x}{2\sqrt{Dt}}.$$

Подставляя это соотношение в формулу (11), находим искомое выражение для распределения концентрации диффундирующей примеси

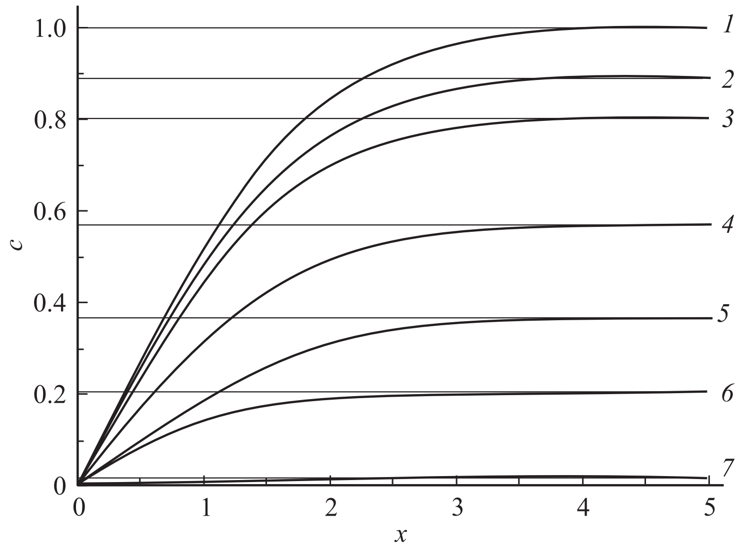

Рис. 1. Распределение концентрации диффундирующей примеси при диффузии из равномерно-легированного полуограниченного тела с поглощающей границей при образовании и распаде неподвижных комплексов: $c_1(x,0) = 1$, $D = 1$, $t = 1$; *1* — свободная диффузия ($k_1 = 0$); *2* — $k_1 = 1$, $k_2 = 8$; *3* — $k_1 = 1$, $k_2 = 4$; *4* — $k_1 = 1$, $k_2 = 1$; *5* — $k_1 = 1$, $k_2 = 0$; *6* — $k_1 = 4$, $k_2 = 1$; *7* — $k_1 = 4$, $k_2 = 0$.

$c_1(x,t)$ при диффузии в условиях образования и распада неподвижных комплексов. Кривые $c_1(x,t)$ для ряда соотношений коэффициентов k_1 и k_2 представлены на рис. 1.

Рассмотрим далее представляющий существенный практический интерес случай диффузии в полуограниченное тело с постоянной поверхностной концентрацией диффундирующей примеси: $c_1(0,t) = \text{const} = c_0$, $t > 0$, в исходном состоянии не содержащее примеси. В этом случае изображение концентрации диффундирующей примеси при диффузии с образованием и распадом неподвижных комплексов имеет вид

$$v(x) = \frac{c_0}{p} \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}}\,x\right). \tag{12}$$

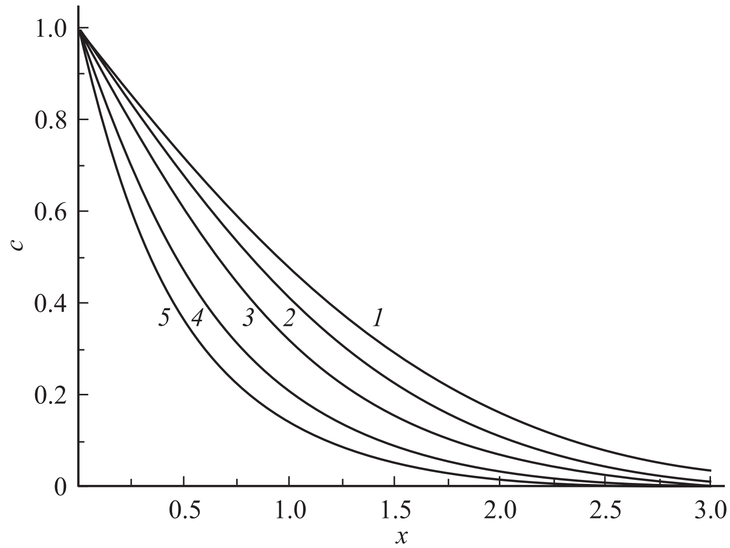

Рис. 2. Распределение концентрации диффундирующей примеси при диффузии в полуограниченное тело с постоянной поверхностной концентрацией в условиях образования и распада неподвижных комплексов: $c_1(0,t) = c_0 = 1$, $t > 0$, $D = 1$, $t = 1$, $c_1(x,0) = 0$; *1* — свободная диффузия ($k_1 = 0$); *2* — $k_1 = 1$, $k_2 = 12$; *3* — $k_1 = 1$, $k_2 = 4$; *4* — $k_1 = 1$, $k_2 = 1$; *5* — $k_1 = 4$, $k_2 = 12$.

Изображение концентрации в рассматриваемом случае не является функцией одной только величины s, а зависит как от s, так и от p. Нетрудно видеть, что величина $c_1(x,t)$ может быть при этом найдена с использованием теоремы интегрирования оригинала из соотношения

$$c_1(x,t) = \int_0^t \tilde{c}_1(x,\tau)d\tau, \tag{13}$$

где $\tilde{c}_1(x,\tau)$ — оригинал для изображения

$$v^*(s,x) = c_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D}}\,x\right).$$

В рассматриваемом случае оригинал для изображения

$$v^*(p,x) = c_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{p}{D}}\,x\right)$$

может быть представлен выражением [15]

$$\tilde{c}(x,t) = \frac{c_0 x}{2t\sqrt{\pi D t}}\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right).$$

Подставляя $\tilde{c}(x,t)$ в формулу (11), находим функцию $\tilde{c}_1(x,t)$, а затем, вычисляя интеграл (13), определяем искомое распределение концентрации $c_1(x,t)$. Результаты вычислений для ряда соотношений коэффициентов k_1 и k_2 представлены на рис. 2.

Список литературы

[1] *Atomic* diffusion in semiconductors / Ed. D. Shaw. London–New York: Plenum Press, 1973. (Пер.: Атомная диффузия в полупроводниках. М.: Мир, 1975).
[2] *Кучер Т.И.* // ФТТ. 1964. Т. 6. С. 801.
[3] *Malkovich R.Sh., Pokoeva V.A.* // Phys. stat. sol. (b). 1977. V. 82. P. 421.
[4] *Reiss H., Fuller C., Morin F.* // Bell. Syst. Tech. J. 1956. V. 35. P. 535.
[5] *Васькин В.В., Усков В.А.* // ФТТ. 1968. Т. 10. С. 1239.
[6] *Васькин В.В., Усков В.А.* // ФТТ. 1969. Т. 11. С. 1763.
[7] *Фистуль В.И., Синдер М.И., Рейн Д.М.* // ФТП. 1981. Т. 15. С. 1867.
[8] *Фистуль В.И., Синдер М.И.* // Электронная техника. Сер. Материалы. 1981. Т. 8. № 157. С. 35.
[9] *Фистуль В.И., Синдер М.И.* // ФТП. 1983. Т. 17. С. 1995.
[10] *Фистуль В.И., Синдер М.И.* // ФТП. 1983. Т. 15. С. 2003.
[11] *Lidiard A.* Ionic Conductivity. Handbuch der Physik. Bd 20. T1.2. Berlin u.a.: Springer Verlag, 1957.
[12] *Andersen J.R., Gibbons J.F.* // Appl. Phys. Lett. 1976. V. 28. P. 184.
[13] *Диткин В.А., Прудников А.П.* Справочник по операционному исчислению. М.: Высш. школа, 1965.
[14] *Handbook* of mathematical functions / Eds M. Abramowitz, I. Stegun. Nat. Bureau of Standards, Appl. Math. 1964. Ser. 55. (Пер.: Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979).
[15] *Grank J.* The mathematics of diffusion. Oxford: Clarendon Press, 1956.