УДК 621.38

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИФФУЗИЯ ПРИМЕСЕЙ ПО ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

И. Б. Снапиро, Н. Н. Ткаченко

Рассмотрен процесс зернограничной диффузии примесей в полупроводниках с учетом концентрационной зависимости коэффициента диффузии. Нелинейность связана с влиянием внутреннего ускоряющего электрического поля в условиях вырождения носителей тока. Получено асимптотически точное решение задачи диффузии в бикристалле.

В работе [1] нами была предложена простая модель для объяснения концентрационной зависимости коэффициента диффузии ионизованных атомов примеси в полупроводниках. Эта модель основана на учете влияния внутреннего ускоряющего электрического поля в условиях вырождения носителей тока $N \gg N_{c,v}$ (N — концентрация примеси; $N_{c,v}$ — эффективные плотности состояний в c-, v-зонах). Для потока атомов донорной примеси при сильном вырождении, когда выполняется неравенство

$$N \gg N_c, \tag{1}$$

было получено выражение

$$j = -(\pi/6)^{1/3} (N/N_c)^{2/3} D_0 \nabla N, \tag{2}$$

где D_0 — коэффициент диффузии при низкой концентрации.

В данной работе будет рассмотрено влияние указанной нелинейности на процесс зернограничной диффузии. При вычислениях использована известная модель Фишера [2], отражающая главное физическое содержание процесса диффузии по границам зерен (ГЗ): одновременный учет опережающей диффузии примеси по границе и ухода ее с границы в объем. Граница в этой модели представляется однородной изотропной пластиной шириной δ, расположенной перпендикулярно поверхности между двумя полубесконечными зернами (см. рисунок). Коэффициент диффузии по ГЗ D' много больше соответствующего объемного коэффициента, который, согласно (2), равен

$$D(N) = (\pi/6)^{1/3} (N/N_c)^{2/3} D_0. \tag{3}$$

Концентрация на ГЗ $N'(y, t)$ находится из уравнения баланса вещества в границе. Если ширина «диффузионного клина» (см. рисунок) превосходит ширину ГЗ, то можно ограничиться квазистационарным приближением, и уравнение баланса вещества на ГЗ принимает вид

$$D' \frac{\partial^2 N'}{\partial y^2} - \frac{2}{\delta} j_x (y=0) = 0. \tag{4}$$

Для нахождения плотности потока от ГЗ j_x ($y=0$) необходимо решить объемное уравнение диффузии. Если высота «диффузионного клина» намного больше его ширины, то это уравнение является одномерным

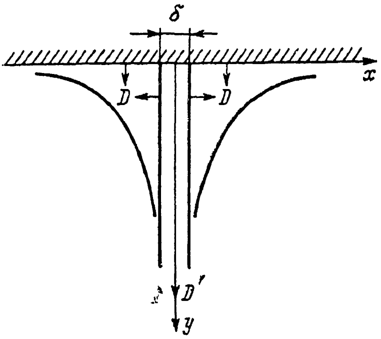
$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[D(N) \frac{\partial N}{\partial x}\right]. \tag{5}$$

В граничном условии к (5)

$$N(0,\ y,\ t) = N'(y,\ t) \tag{6}$$

можно пренебречь зависимостью N' от времени (это допустимо в том же приближении, в котором записано уравнение (4)).

Таким образом, необходимо решить задачу диффузии в полубесконечный образец с постоянной концентрацией на поверхности. Как и в линейном случае, решение зависит от автомодельной переменной $z = x/\sqrt{t}$ и уравнение (5) записывается в виде



Модель границы зерен по Фишеру и форма диффузионного фронта.

$$\frac{d}{dz}\left[D(N)\frac{dN}{dz}\right] + \frac{z}{2}\frac{dN}{dz} = 0. \tag{7}$$

Уравнение (7) с $D(N)$, определяемым согласно (3), и граничными условиями

$$N(0) = N', \quad N(\infty) = 0 \tag{8}$$

не имеет точного аналитического решения. Поэтому применим вариационный метод. Нетрудно проверить, что (7) соответствует следующий функционал:

$$I = \int_0^\infty dz\left[D(N)\frac{dN}{dz}\ln\left(\frac{dN}{dz}\right) + \frac{z^2}{4}\frac{dN}{dz}\right]. \tag{9}$$

Одномерное уравнение диффузии, соответствующее току (2), допускает точное решение для задачи о диффузии из бесконечно тонкого источника [3]. Основное свойство этого решения — наличие резкого диффузионного фронта, распространяющегося с конечной скоростью. Рассмотрение решения, приведенного в [3], позволяет предложить для нашей задачи следующую разумную пробную функцию:

$$N = N'(1 - \alpha z)^{3/2}\,\Theta(\alpha z - 1), \quad \Theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0. \end{cases} \tag{10}$$

Тогда вычисление функционала $I(\alpha)$ (9) приводит к такому результату (оставлены только члены, зависящие от α):

$$I(\alpha) = \left(\frac{3}{5}\right)\left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} D_0 N'\left(\frac{N'}{N_c}\right)^{2/3}\ln\alpha + \frac{N'}{8\alpha^2}. \tag{11}$$

Экстремум этого функционала достигается при

$$\alpha = (5/12)^{1/2}\,(6/\pi)^{1/6}\,D_0^{-1/2}\,(N_c/N')^{1/6}. \tag{12}$$

Следовательно, плотность потока атомов примеси от ГЗ, которую необходимо подставить в уравнение (4), равна

$$j_x(y=0) = {}^3/_2\,(5/12)^{1/2}\,(\pi/6)^{1/6}\,(D_0/t)^{1/2}\,N_c^{-1/3}N'^{4/3} \tag{13}$$

и диффузия по ГЗ с учетом оттока примеси от границы в зерна описывается уравнением

$$\frac{d^2N'}{dy^2} = \beta N'^{4/3}, \quad \beta = 3\left(\frac{5}{12}\right)^{1/2}\left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/6}\frac{D_0^{1/2}}{\delta D' t^{1/2} N_c^{1/3}}. \tag{14}$$

Решение этого уравнения с граничными условиями $N'(0) = N_0$, $N'(\infty) = 0$ есть

$$N'(y) = N_0/(1 + y/L)^6. \tag{15}$$

Глубина проникновения примеси по границе равна

$$L = 4.9\,(\delta D' \sqrt{t}\,/\sqrt{D_0})^{1/2}\,(N_c/N_0)^{1/6}. \tag{16}$$

Из соотношений (10), (11), (15) нетрудно получить следующее выражение для формы диффузионного фронта:

$$x/\sqrt{t} = (^{12}/_5)^{1/2}\,(\pi/6)^{1/6}\,D_0^{1/2}\,(N_0/N_c)^{1/6}\,(1 + y/L)^{-1}. \tag{17}$$

В заключение следует подчеркнуть, что основные результаты настоящей работы (формулы (15)—(17)) являются асимптотически точными. Более точное решение нелинейного уравнения (7) может привести лишь к небольшим изменениям числовых коэффициентов в (16), (17).

Список литературы

[1] Снапиро И. Б., Ткаченко Н. Н. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 50. № 3. С. 111—112.

[2] Fisher J. C. // J. Appl. Phys. 1951. V. 22. P. 74—79.

[3] Зельдович Я. Б., Компанеец А. С. // Сборник, посвященный семидесятилетию А. Ф. Иоффе. М., 1950. С. 61—64.

Запорожский индустриальный институт

Поступило в Редакцию
1 декабря 1989 г.