



## ВРЕМЯ УСТАНОВЛЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ С ПЕРЕМЕННЫМ ВО ВРЕМЕНИ КОЭФФИЦИЕНТОМ ДИФФУЗИИ

*Е.Л. Панкратов*

В работе проводится анализ динамики процесса диффузии примеси в неоднородной среде с переменным во времени коэффициентом диффузии. В работе получены требования к пространственной структуре и закону изменения во времени коэффициента диффузии среды, при которых происходит наибольшее ускорение или замедление диффузии примеси.

### Введение

Внедрение примеси в исходную пластину (или в эпитаксиальный слой) путем диффузии при высокой температуре является исходным и одним из основных способов легирования полупроводников с целью создания диодных и транзисторных структур [1-3]. Широкое распространение диффузионных процессов в твердотельной электронике (применение диффузионной технологии изготовления полупроводниковых структур, необходимость замедления деградации готовых полупроводниковых структур и т.д.) привело к необходимости изучения динамики процесса диффузии примеси в различных средах. Хотя диффузии частиц в твердых телах посвящено множество работ [1-6], изменение свойств полупроводниковых структур в пространстве и времени учитывается редко. Целью данной работы является количественная оценка влияния пространственных и временных изменений коэффициента диффузии на динамику примеси в технологических процессах. Одновременно рассматривается вопрос о степени допустимости приближения коэффициента диффузии примеси его средним значением при вычислении временных характеристик диффузии [1].

### Постановка задачи

Рассмотрим неоднородную одномерную структуру длины  $L$  с переменным во времени коэффициентом диффузии. На поверхности структуры сформирован источник примеси. Концентрация примеси в источнике  $N_1$  многократно превышает предел растворимости в образце  $N_2$ . В момент времени  $t=0$  температура образца

повышается, и примесь начинает диффундировать в глубь образца. С течением времени устанавливается стационарное распределение концентрации примеси  $C(x, \infty) = N_2$ . Требуется определить время установления распределения примеси в заданной точке структуры  $x$  (так называемой точке наблюдения) и провести количественную оценку влияния пространственно-временных изменений коэффициента диффузии на динамику примеси в рассматриваемой структуре.

### Метод решения

Пространственно-временное распределение концентрации примеси  $C(x, t)$  описывается уравнением диффузии [1,2,5]

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

где  $G(x, t)$  - поток примеси. Уравнение диффузии дополняется начальным и граничными условиями  $C(0, t) = N_1$ ,  $G(L, t) = 0$ ,  $C(x > 0, 0) = 0$ .

Для количественного описания влияния пространственно-временных изменений коэффициента диффузии на динамику примеси рассмотрим время установления ее стационарной концентрации. Переходные процессы, описываемые уравнением диффузии, имеют достаточно сложную временную зависимость, и не представляется возможным дать в общем виде количественную оценку времени установления стационарной концентрации непосредственно из решения этого уравнения. В наиболее интересной с практической точки зрения ситуации, когда время установления определяется в точке  $x = L$ , расположенной на границе структуры, концентрация изменяется во времени практически по экспоненциальному закону. При таком законе изменения время установления удобно определять с помощью известного [7,8] асимптотически оптимального [9] интегрального критерия

$$\Theta(x) = N_2^{-1} \int_0^{\infty} [N_2 - C(x, t)] dt. \quad (2)$$

Для вычисления времени установления определим пространственно-временное распределение концентрации примеси из уравнения (1). Точное решение уравнения диффузии в общем виде неизвестно. По этой причине ограничимся далее случаем малых изменений коэффициента диффузии. Такое приближение позволяет найти аналитическое решение уравнения диффузии, что делает более наглядным физический анализ диффузионных процессов по сравнению со случаем их численного моделирования и позволяет определить время установления концентрации примеси, имеющее место при достаточно быстрых изменениях коэффициента диффузии.

### Время установления в приближении малого изменения коэффициента диффузии

При малых изменениях коэффициента диффузии динамика диффузионных процессов описывается, главным образом, средним значением коэффициента диффузии  $D_0$ . Следуя работам [8,10,11], представим далее закон изменения коэффициента диффузии  $D(x, t)$  в виде:  $D(x, t) = D_0 [1 + \xi \eta(x, t)]$ ,  $0 \leq \xi < 1$ ,  $|\eta(x, t)| \leq 1$ . Введение малого параметра  $\xi$  и условие  $|\eta(x, t)| \leq 1$  позволяют использовать метод Пуанкаре и искать решение уравнения диффузии  $C(x, t)$  в виде степенного ряда по параметру  $\xi$

$$C(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi^k C_k(x,t). \quad (3)$$

Подстановка решения (3) в уравнение диффузии приводит к системе уравнений для функций  $C_k(x,t)$

$$\begin{cases} \frac{\partial C_0(x,t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C_0(x,t)}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial C_k(x,t)}{\partial t} = D_0 \left[ \frac{\partial^2 C_k(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \eta(x,t) \frac{\partial^2 C_{k-1}(x,t)}{\partial x^2} \right], \quad k \geq 1. \end{cases} \quad (4)$$

Начальные и граничные условия для функций  $C_k(x,t)$  с учетом разложения (3) определяются соотношениями

$$C_0(0,t) = N_1, \quad G_{k \geq 0}(L,t) = 0, \quad C_0(x > 0, 0) = 0, \quad C_{k \geq 1}(x, 0) = 0. \quad (5)$$

С учетом разложения (3) время установления (2) определяется степенным рядом по параметру  $\xi$

$$\Theta(x) = \Theta_0(x) \left( 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \xi^k \tau_k(x) \right), \quad (6)$$

где

$$\Theta_0(x) = N_2^{-1} \int_0^{\infty} [N_2 - C_0(x,t)] dt \quad (7)$$

есть нулевое приближение времени установления,

$$\tau_{k \geq 1}(x) = - \left[ \int_0^{\infty} [N_2 - C_0(x,t)] dt \right]^{-1} \int_0^{\infty} C_k(x,t) dt \quad (8)$$

являются множителями при  $\xi^k$  в разложении (6), которые в дальнейшем будем называть нормированными поправками к времени установления.

Для решения уравнений системы (4) воспользуемся операторным методом, базирующимся на преобразовании Лапласа [12]. В данном методе используется не пространственно-временное распределение концентрации и потока примеси, а их лапласовские образы  $Y(x,s) = \int_0^{\infty} C(x,t) e^{-st} dt$ ,  $\hat{G}(x,s) = \int_0^{\infty} G(x,t) e^{-st} dt$ . Ряд (3) в терминах преобразования Лапласа принимает вид

$$Y(x,s) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi^k Y_k(x,s). \quad (9)$$

Функции  $Y_k(x,s)$  являются решением системы уравнений

$$\begin{cases} \frac{d^2 Y_0(x,s)}{dx^2} - \beta^2 Y_0(x,s) = 0, \\ \frac{d^2 Y_k(x,s)}{dx^2} - \beta^2 Y_k(x,s) = - \frac{d}{dx} u_{k-1}(x,s), \quad k \geq 1 \end{cases} \quad (10)$$

с граничными условиями

$$Y_0(0,s) = N_1/s, \quad Y_{k \geq 1}(0,s) = 0, \quad \hat{G}_{k \geq 0}(L,s) = 0, \quad (11)$$

где  $u_k(x,s) = \int_0^{\infty} \eta(x,t) (\partial C_k(x,t) / \partial x) e^{-st} dt$ ,  $\beta^2 = s/D_0$ .

Не представляет труда получить нулевое приближение времени установления, соответствующее структуре с постоянным коэффициентом диффузии  $D_0$ , и первую нормированную поправку к нему

$$\Theta_0(x) = x(L-x/2)/D_0, \quad (12)$$

$$\tau_1(x) = [N_2 x(L-x/2)]^{-1} D_0 \int_0^x \int_0^\infty \eta(v,t) (\partial C_1(v,t)/\partial v) dt dv. \quad (13)$$

В силу малости параметра  $\xi$  и ограниченности по абсолютной величине функции  $\eta(x,t)$  вклад последующих членов рядов (3), (6) и (9) мал и ими можно пренебречь по сравнению с первым (линейным) приближением. Нулевое приближение времени установления (12) принимает свое максимальное значение в точке наблюдения  $x=L$ , находящейся на границе образца:  $\Theta_0(L)=L^2/(2D_0)$ . Максимальное значение времени установления при постоянном коэффициенте диффузии  $D_0$  для случая ограниченного источника примеси равно  $\Theta_0(L)=L^2/(6D_0)$  [10-13], то есть в три раза меньше.

Аппроксимируем закон изменения коэффициента диффузии  $\eta(x,t)$  функциями  $\cos\omega t \cos v_k x$ ,  $\cos\omega t \sin v_k x$ ,  $\sin\omega t \cos v_k x$  и  $\sin\omega t \sin v_k x$ ,  $v_k=2\pi k/L$ . В этом случае при  $x=L$  первые относительные поправки ко времени установления  $\tau_1(L)$  определяются следующими соотношениями:

для  $\eta(x,t)=\sin v_k x \sin \omega t$

$$\tau_{1ss}(L) = -\pi k [2\pi^2 k^2 (\text{sh}2\Omega^{1/2} - \sin 2\Omega^{1/2}) + \Omega (\text{sh}2\Omega^{1/2} + \sin 2\Omega^{1/2})] / (2\psi \Omega^{1/2}); \quad (14)$$

для  $\eta(x,t)=\sin v_k x \cos \omega t$

$$\tau_{1sc}(L) = -\pi k [2\pi^2 k^2 (\text{sh}2\Omega^{1/2} + \sin 2\Omega^{1/2}) + \Omega (\text{sh}2\Omega^{1/2} - \sin 2\Omega^{1/2})] / (2\psi \Omega^{1/2}); \quad (15)$$

для  $\eta(x,t)=\cos v_k x \sin \omega t$

$$\tau_{1cs}(L) = [2\pi^2 k^2 \text{sh}\Omega^{1/2} \sin\Omega^{1/2} - \Omega (\text{ch}^2\Omega^{1/2} - \sin^2\Omega^{1/2} - \text{ch}\Omega^{1/2} \cos\Omega^{1/2})] / \psi; \quad (16)$$

для  $\eta(x,t)=\cos v_k x \cos \omega t$

$$\tau_{1cc}(L) = -[\Omega \text{sh}\Omega^{1/2} \sin\Omega^{1/2} + 2\pi^2 k^2 (\text{ch}^2\Omega^{1/2} - \sin^2\Omega^{1/2} - \text{ch}\Omega^{1/2} \cos\Omega^{1/2})] / \psi. \quad (17)$$

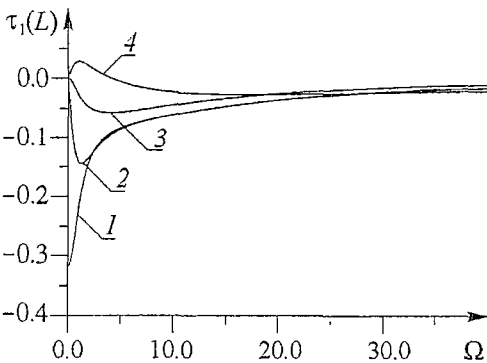


Рис. 1. Частотные зависимости поправок  $\tau_1(L)$  для следующих гармонических законов  $\eta(x,t)$  изменения коэффициента диффузии: 1 -  $\sin(2\pi x/L)\cos(\omega t)$ ; 2 -  $\sin(2\pi x/L)\sin(\omega t)$ ; 3 -  $\cos(2\pi x/L)\cos(\omega t)$ ; 4 -  $\cos(2\pi x/L)\sin(\omega t)$

Здесь  $\Omega=\omega L^2/(2D_0)$  - безразмерная частота изменений коэффициента диффузии во времени,  $\psi=(4\pi^4 k^4 + \Omega^2)[\text{ch}^2\Omega^{1/2} - \sin^2\Omega^{1/2}]$ .

Зависимости поправок  $\tau_1(L)$  (14)-(17), нормированных на время установления, от безразмерной частоты изменений коэффициента диффузии во времени для  $k=1$  представлены на рис. 1. Увеличение параметра  $k$  приводит к монотонному уменьшению по абсолютной величине поправок  $\tau_1(L)$  [8,10].

Наибольшее влияние изменения коэффициента диффузии в пространстве и времени на установление концентрации примеси достигается при законе  $\eta(x,t)=\sin v_k x \cos \omega t$  (кривая 1). В

этом случае поправка  $\tau_1(L)$  принимает свое максимальное по абсолютной величине значение и время установления изменяется наиболее сильно. Отрицательный знак поправки свидетельствует об уменьшении времени установления стационарного распределения примеси. На частоте  $\Omega=0$  поправка  $\tau_1(L)$  принимает свое максимальное по абсолютной величине значение, равное  $-1/\pi$ . Полоса частот эффективного влияния изменений коэффициента диффузии на время установления концентрации на уровне 3 дБ ограничена сверху значением  $\Omega_c=0.8$ . Поправка убывает по мере роста частоты изменений коэффициента диффузии, на частотах  $\Omega>3.4$  ее величина достаточно мала и усредненный коэффициент диффузии дает приемлемое по точности описание динамики диффузионного процесса.

Поправка  $\tau_1(L)$ , соответствующая закону изменения коэффициента диффузии вида  $\eta(x,t)=\sin\nu_1x \sin\omega t$  (кривая 2), имеет частотную зависимость резонансного вида. Похожая частотная зависимость была получена для времени установления концентрации примеси в среде с постоянным коэффициентом диффузии, находящейся под периодическим во времени внешнем воздействием [13]. Поправка  $\tau_1(L)$  принимает свое максимальное по абсолютной величине значение, равное  $\tau_1(L)\approx-0.144$ , на частоте  $\Omega_1=1.3$ . Полоса частот наибольшего влияния изменений коэффициента диффузии на время установления распределения примеси ограничена снизу и сверху значениями  $\Omega_{1c}=0.53$  и  $\Omega_{2c}=3.6$ . В области частот  $\Omega>14.6$  значение поправки мало и описание динамики процесса с помощью усредненного коэффициента диффузии оказывается вполне приемлемым.

Поправка  $\tau_1(L)$ , соответствующая аппроксимации коэффициента диффузии вида  $\eta(x,t)=\cos\nu_1x \cos\omega t$  (кривая 3), также имеет частотную зависимость резонансного вида. Максимальное по абсолютной величине значение поправки, равное  $\tau_1\approx-0.057$ , достигается на частоте  $\Omega_2=4$ . Полоса частот наибольшего влияния изменений коэффициента диффузии на время установления концентрации ограничена снизу и сверху значениями  $\Omega_{3c}=1.5$  и  $\Omega_{4c}=11.45$ . В области частот  $\Omega>24$  значение поправки мало и процесс диффузии также описывается с помощью усредненного коэффициента диффузии.

Минимальный вклад в значение времени установления дает поправка, соответствующая аппроксимации коэффициента диффузии  $\eta(x,t)=\cos\nu_1x \sin\omega t$  (кривая 4). Максимальное и минимальное значения поправки, равные  $\tau_{1\max}\approx 0,029$  и  $\tau_{1\min}\approx-0.026$ , достигаются соответственно на частотах  $\Omega_3\approx 1.05$  и  $\Omega_4=17.2$ . Полосы частот наибольшего влияния изменений коэффициента диффузии на время установления концентрации ограничены снизу и сверху парами значений  $\Omega_{5c}=0.45$  и  $\Omega_{6c}=2.05$ ;  $\Omega_{7c}=8.0$  и  $\Omega_{8c}=45.0$ . В области частот  $\Omega>53.3$  значение поправки мало.

Линейная связь между поправкой (13) и законом изменения коэффициента диффузии  $\eta(x,t)$  позволяет воспользоваться методами спектрального анализа. Представление закона изменения коэффициента диффузии  $\eta(x,t)$  в виде разложения в гармонический ряд Фурье

$$\eta(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos\omega_k t \cos\nu_k x + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \cos\omega_k t \sin\nu_k x + \\ + \sum_{k=1}^{\infty} c_k \sin\omega_k t \cos\nu_k x + \sum_{k=1}^{\infty} d_k \sin\omega_k t \sin\nu_k x$$

позволяет представить поправку как сумму поправок для отдельных спектральных составляющих

$$\tau_1(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \tau_{1cc}(x, \omega_k, \nu_k) + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \tau_{1sc}(x, \omega_k, \nu_k) + \\ + \sum_{k=1}^{\infty} c_k \tau_{1cs}(x, \omega_k, \nu_k) + \sum_{k=1}^{\infty} d_k \tau_{1ss}(x, \omega_k, \nu_k),$$

где  $\tau_{1cc}(x, \omega_k, \nu_k)$ ,  $\tau_{1sc}(x, \omega_k, \nu_k)$ ,  $\tau_{1cs}(x, \omega_k, \nu_k)$  и  $\tau_{1ss}(x, \omega_k, \nu_k)$  - нормированные поправки к времени установления, соответствующие гармоническим законам изменения коэффициента диффузии  $\cos \nu_k x \cos \omega_k t$ ,  $\sin \nu_k x \cos \omega_k t$ ,  $\cos \nu_k x \sin \omega_k t$  и  $\sin \nu_k x \sin \omega_k t$ . Постоянная составляющая функции  $\eta(x, t)$  равна нулю в силу ранее наложенного на нее условия. Аддитивное свойство поправок существенно упрощает расчет времени установления стационарной концентрации примеси. Смена знака закона изменения коэффициента диффузии  $\eta(x, t)$  приводит к замене ускорения процесса диффузии на замедление или наоборот.

### Пример расчета поправки к времени установления

В полупроводниковой электронике получили широкое распространение многослойные структуры [1-3,14], коэффициент диффузии которых с приемлемой степенью точности можно аппроксимировать функциями Уолша  $wal(m, t)$  [15], приведенными на рис. 2. Наибольший вклад во время установления дают функции Уолша младших порядков. С ростом порядка  $m$  функции Уолша (то есть с ростом

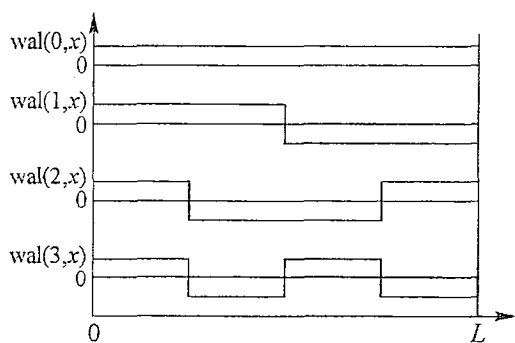


Рис. 2. Функции Уолша младших порядков

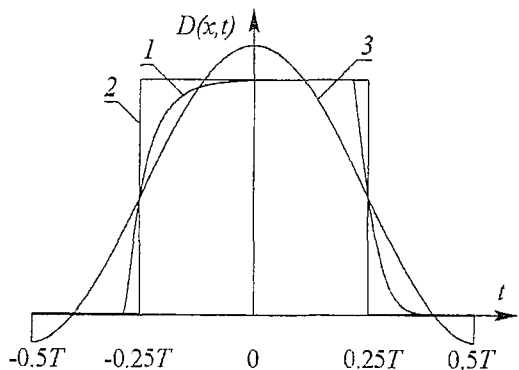


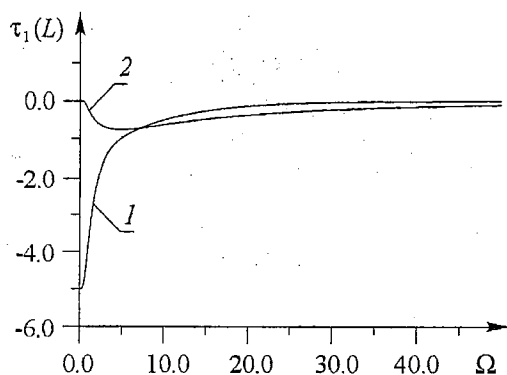
Рис. 3. Временная зависимость коэффициента диффузии в фиксированной точке образца  $x_0$  (кривая 1); аппроксимации временной зависимости коэффициента диффузии функциями:  $\varphi(t) = D_0 [1 - \xi wal(2, t)]$  (кривая 2) и  $\varphi(t) = D_0 [1 - \xi \cos(2\pi t/T)]$  (кривая 3)

числа слоев в структуре) первая нормированная поправка быстро спадает по абсолютной величине [8,10].

Коэффициент диффузии примеси в твердом теле является экспоненциальной функцией его температуры [1,8,16]:  $D(T) = D \exp[-E/(kT(t))]$ , где  $D$  и  $E$  - постоянные (зависящие от материала образца),  $T(t)$  - температура образца,  $k$  - постоянная Больцмана. Температура образца при нагреве и охлаждении меняется практически по экспоненциальному закону при условии постоянного коэффициента температуропроводности. При данных ограничениях зависимость коэффициента диффузии от времени имеет вид, представленный на рис. 3, кривая 1. Учет непостоянства коэффициента температуропроводности приводит к несколько более сложным функциональным зависимостям температуры и коэффициента диффузии от времени.

При длительном отжиге (время отжига  $t_0$  превышает постоянную времени прогрева образца в несколько раз) закон изменений коэффициента диффузии во времени с хорошей степенью точности может быть аппроксимирован функцией Уолша второго порядка  $wal(2, t)$  (рис. 3, кривая

Рис. 4. Частотные зависимости поправки  $\tau_1(L)$  при аппроксимации коэффициента диффузии следующими функциями Уолша: 1 -  $\eta(x,t)=\text{wal}(2,t)\text{wal}(1,x)$ ; 2 -  $\eta(x,t)=\text{wal}(2,t)\text{wal}(2,x)$



2). Частотная зависимость поправок при такой аппроксимации представлена на рис. 4. Небольшая асимметрия закона изменения коэффициента диффузии (рис. 3, кривая 1) учитывается функциями Уолша нечетных порядков, но их относительный вклад невелик и быстро убывает по мере увеличения продолжительности отжига.

### Область применимости полученных результатов

Область применимости линейного по параметру  $\xi$  приближения времени установления можно получить с помощью расчета поправок  $\tau_{\xi 2}(x)$  или с помощью численного моделирования процесса установления концентрации примеси. В результате анализа было получено, что линейное приближение времени установления применимо при  $0 \leq \xi$  (приблизительно 0.09). При этом максимальное ускорение и замедление диффузии достигает примерно 6% по сравнению со случаем диффузии в среде с постоянным коэффициентом диффузии  $D_0$ .

### Время установления в приближении большого изменения коэффициента диффузии

Точное решение уравнения диффузии (1) в общем виде для произвольной глубины изменения коэффициента диффузии от координаты и времени не известно. Однако наибольшее изменение времени установления концентрации примеси достигается при изменении коэффициента диффузии по закону  $\eta(x,t)=\text{wal}(1,x)\text{wal}(2,t)$  в пределе низких временных частот. Рассмотрим стационарный закон изменения коэффициента диффузии  $D(x,t) \approx D(x) = D_0[1 + \xi\eta(x)]$ . В этом случае возможно получение точного соотношения для времени установления

$$\Theta(x) = \Theta_0(x)(1 + [x(L-x)/2])^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} [(-1)^k \xi^k / k!] \int_0^x \eta^k(v)(L-v)dv.$$

Суммирование членов последнего соотношения позволяет получить аналитическое значение суммы ряда

$$\Theta(x) = \int_0^x \{(L-v) / [D_0(1 + \xi\eta(v))]\}. \quad (18)$$

Соотношение (18) позволяет исследовать зависимость времени установления от величины  $\xi$  отклонения коэффициента диффузии от среднего значения. В случае двухслойного образца с коэффициентом диффузии вида  $D(x) = D_0[1 \pm \xi\text{wal}(1,x)]$  и точки наблюдения, расположенной на границе образца  $x=L$ , зависимость времени установления от параметра  $\xi$  представлена на рис. 5. Кривая 1 соответствует коэффициенту диффузии  $D(x) = D_0[1 - \xi\text{wal}(1,x)]$ . В этом случае время установления монотонно растет с ростом  $\xi$  и в пределе  $\xi \rightarrow 1$  процесс диффузии практически останавливается из-за почти тождественного равенства нулю коэффициента

диффузии в части образца. При реально существующих значениях параметра  $\xi$  [1,2] процесс диффузии может быть замедлен почти до 4 раз по сравнению со случаем постоянного коэффициента диффузии  $D_0$ . Кривая 2 на рис. 5 соответствует коэффициенту диффузии  $D(x)=D_0[1+\xi\text{wal}(1,x)]$ . В этом случае при  $\xi\sim 0.25$  происходит наибольшее уменьшение времени установления распределения примеси, примерно на 6.65% от  $\Theta_0(L)$ . При данной зависимости коэффициента диффузии от координаты время установления слабо зависит от величины параметра  $\xi$  (меняется менее чем на 10% от  $\Theta_0(L)$ ) в широком диапазоне ее изменения ( $0\leq\xi\leq 0.58$ ). В пределе  $\xi\rightarrow 1$  процесс диффузии также практически останавливается. При реально существующих значениях параметра  $\xi$  процесс диффузии может быть замедлен почти в 1.5 раза по сравнению со случаем постоянного коэффициента диффузии  $D_0$ .

В случае переменного во времени однородного образца также возможно точно определить время установления

$$\Theta(x) = 2\pi^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}(n + 1/2)^{-1}\sin[\pi(n + 1/2)x/L] \times \int_0^{\infty} \exp\{-\pi^2(n + 1/2)^2L^{-2}\int_0^t D(u)du\}dt. \quad (19)$$

Для закона изменения коэффициента диффузии вида  $D(t)=D_0[1\pm\xi\text{wal}(1,t)]$  с частотой  $\Omega\ll 1$  при условии  $x=L$  зависимость времени установления от параметра  $\xi$  представлена на рис. 6. Кривая 1 соответствует зависимости изменения коэффициента диффузии вида  $D(x)=D_0[1-\xi\text{wal}(2,t)]$ . В этом случае время установления монотонно растет с ростом  $\xi$  и в пределе  $\xi\rightarrow 1$  процесс диффузии практически останавливается из-за почти тождественного равенства нулю коэффициента диффузии. Изменение коэффициента диффузии вида  $D(x)=D_0[1+\xi\text{wal}(2,t)]$  в пределе  $\xi\rightarrow 1$  приводит к почти двукратному ускорению диффузии.

В результате численного моделирования процесса диффузии при одновременном изменении коэффициента диффузии в пространстве и во времени показано, что выбором закона изменения коэффициента диффузии время установления может быть уменьшено на несколько процентов или увеличено на

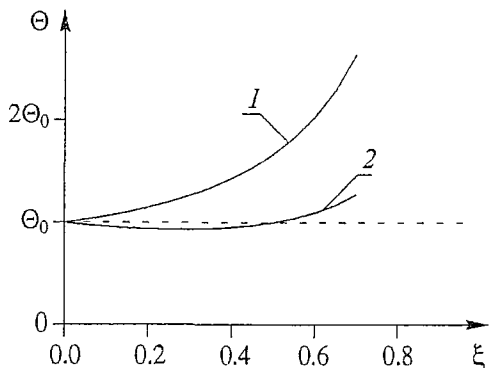


Рис. 5. Зависимость времени установления концентрации примеси в точке наблюдения  $x=L$  от величины параметра  $\xi$  при следующих зависимостях коэффициента диффузии  $D$  от координаты  $x$ : 1 -  $D_0[1-\xi\text{wal}(1,x)]$ ; 2 -  $D_0[1+\xi\text{wal}(1,x)]$

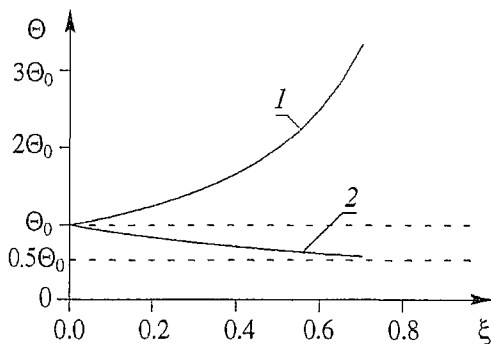


Рис. 6. Зависимость времени установления концентрации примеси в точке наблюдения  $x=L$  от величины параметра  $\xi$  при следующих зависимостях коэффициента диффузии  $D$  от времени  $t$ : 1 -  $D_0[1-\xi\text{wal}(1,t)]$ ; 2 -  $D_0[1+\xi\text{wal}(1,t)]$  и условии  $\Omega\ll 1$



несколько сотен процентов относительно времени установления при усредненном коэффициенте диффузии.

### Заключение

Исследования влияния пространственных и временных изменений коэффициента диффузии на динамику установления стационарного распределения примеси показали, что при быстрых изменениях коэффициента диффузии процесс установления описывается в основном средним значением коэффициента диффузии. Медленные изменения требуют анализа динамики примеси с учетом мгновенных значений и пространственной структуры коэффициента диффузии. Соответствующим выбором закона изменений коэффициента диффузии (порядок чередования слоев многослойной структуры, величина отклонения коэффициента диффузии от среднего значения и т.д.) можно ускорить или замедлить процесс диффузии примеси по сравнению со случаем диффузии при среднем значении коэффициента диффузии. При этом время установления распределения примеси может быть уменьшено на несколько процентов или увеличено на несколько сотен процентов относительно времени установления при усредненном коэффициенте диффузии. Показано, что время установления примеси для случая ее неограниченного источника в несколько раз превышает время установления примеси в случае ограниченного источника.

*Данная работа поддержана грантами РФФИ (№ 02-02-17517), НШ-1729.2003.2 и INTAS № 2001-0450.*

### Библиографический список

1. Степаненко И.П. Основы микроэлектроники. М.: Советское радио, 1980.
2. Тугов Н.М., Глебов Б.А., Чарыков Н.А. Полупроводниковые приборы. М.: Энергоатомиздат, 1990.
3. Шишияну Т.С., Шишияну Т.С., Райлян С.К. Мелкие  $p$ - $n$ -переходы в Si, изготовленные методом импульсного фотонного отжига // ФТП. 2002. Т. 36, № 5. С. 611.
4. Ваулина О.С. Диффузия макрочастиц и критерий фазовых переходов для пылевых структур в слабоионизированной плазме // ЖЭТФ. 2002. Т. 121, № 1. С. 35.
5. Зон Б.А., Ледовский С.Б., Лихолет А.Н. Ускорение диффузии примеси в твердом теле гетерогенной реакцией на его поверхности // ЖТФ. 2000. Т. 70, № 4. С.38.
6. Долбак А.Е., Жачук Р.А., Ольшанецкий Б.А. Механизм диффузии Cu вдоль поверхности Si(110) // ФТП. 2002. Т. 36, № 9. С. 1031.
7. Coffey V.T., Crothers D.S.F., Kalmykov Yu.P. Effect of uniform bias force of the Brownian movement in double-well potential // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 55, № 4. P. 4812.
8. Дубков А.А., Мальцев А.А., Панкратов Е.Л. Эффективное время установления концентрации вещества в среде со слабо неоднородным коэффициентом диффузии // ЖТФ. 2002. Т. 72, № 11. С.14.
9. Малахов А.Н., Панкратов Е.Л. Время установления концентрации вещества в среде с произвольно меняющимися в пространстве коэффициентом диффузии и потенциалом // Известия вузов. Радиофизика. 2001. Т. 44, № 4. С. 367.

10. Мальцев А.А., Панкратов Е.Л. Эффективное время установления концентрации вещества в среде со слабо неоднородным коэффициентом диффузии // Труды 5-й научной конференции по радиофизике / Ред. А.В. Якимов. Нижний Новгород: ННГУ, 2001. С. 211.

11. Панкратов Е.Л. Ускорение и замедление диффузии в среде путем временной модуляции коэффициента диффузии // Известия вузов. ПНД. 2003. Т. 11, № 2. С. 96.

12. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1977.

13. Malakhov A.N., Pankratov A.L. Evolution times of probability distribution and averages-exact solutions of the Kramers' problem // Adv. in Chem. Phys. 2002. Vol. 121. P. 356.

14. Zhang A.P., Dang G.T., Ren F. et al. Direct-current characteristics of *pnp* AlGaIn/GaN heterojunction bipolar transistor // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 76, № 20. P. 2943.

15. Гоноровский И.С. Радиотехнические цепи и сигналы. М.: Наука, 1977.

16. Gillin W.P., and Dunstan D.J. Strain and interdiffusion in semiconductor heterostructure // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50, № 11. P. 7495.

Нижегородский государственный  
университет

Поступила в редакцию 22.12.2003  
после доработки 11.03.2004

## RELAXATION TIME OF DOPANT CONCENTRATION IN INHOMOGENEOUS MEDIUM WITH TIME-VARYING DIFFUSION COEFFICIENT

*E.L. Pankratov*

In this paper the dynamics of dopant diffusion in an inhomogeneous medium with time-varying diffusion coefficient is analyzed. The conditions on spatial and temporal varying of diffusion coefficient, which correspond to maximal acceleration and deceleration of dopant diffusion time, have been determined.



Панкратов Евгений Леонидович - родился в Горьком (1977), окончил радиофизический факультет Нижегородского государственного университета (2001). После окончания поступил в аспирантуру ННГУ по специальности «Радиофизика». Опубликовал 11 научных работ по направлению своих исследований.

E-mail: elp@rf.unn.ru