

Як видно із рисунку, для описаних умов дослідження збіг розрахованих та експериментальних даних можна вважати досить задовільним.

1. Варшава С.С., Островська А.С., Байцар Р.І. Морфологія, структура і деякі фізичні властивості голчастих кристалів твердого розчину кремній-германій// УФЖ, 1994. Т.39. N2.-С.230-233. 2. Локоть Г.П., Логуш О.І., Новіков О.О. Пристрій для визначення термо-е.р.с. НК// Вісник ЛОЛПІ N94. 1975.-С.101-105. 3. Варшава С.С., Курило І.В. Перепичка Т.Н., Пилат З.Б. Способ определения коэффициента термо-э.д.с. нитевидных кристаллов// А.с. СССР N1497541. Бюл. изобрет. 1989. N28. 4. Варшава С.С., Потапчук Г.М. Дослідження термоелектричних та теплообмінних ефектів в ниткоподібних кристалах телуру// Тези доп. I міжн. наук.-техн. конф. "Материаловедение алмазоподобных и халькогенидных полупроводников", Чернівці. 1994. С.62. 5. Budjak J.S., Rarenko A.I. Kinetic theory of Seebeck effect in crystals// Journal of Thermoelectricity, 1998. N3. P.40-47. 6. Буджак Я.С. Термодинамічні потенціали нерівноважного електронного газу в кристалах та їх кінетичні властивості// Деп. В ДНТБ України. 22.03.99. №615. Укр.99. 7. Кекула М.Г., Хуцишвили Э.В. Твердые растворы полупроводников системы германий-кремний. Тбилиси: Мецниербса. 1985. 175с. 8. Горлей П.Н., Шендеровский В.А. Вариационный метод в кинетической теории. К., 1992.

УДК 539.2

О.В. Фльорко, В.Ф. Чекурін

**Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача
НАН України**

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ДИФУЗІЇ В ДЕФОРМОВАНІЙ ГРАТЦІ

© О.В. Фльорко, В.Ф. Чекурін, 2000

Розглядається математична модель однокомпонентної дифузії в неоднорідно деформованій ґратці. Модель урахує деформаційні залежності коефіцієнта дифузії і хімічного потенціалу домішки. Наводяться результати числового аналізу одновимірної дифузії для випадку стаціонарного одновісного напруженого стану.

The paper deals with a mathematical model for one-component diffusion in non-uniformly strained lattice. The model takes into account strain dependence of the diffusion coefficient and chemical potential of the impurity atoms. The results of the numerical analysis of the one-component diffusion in case of one-axial stress state are presented.

Теоретичні дослідження впливу різних фізичних факторів на формування активних шарів твердотільних структур необхідні для оптимізації мікроелектронних технологій. Процеси дифузійного перерозподілу домішок та дефектів можуть робити істотний внесок у властивості прикладних структур на різних стадіях технологічних процесів їх виготовлення. Тому розробка адекватних математичних моделей для опису дифузійних процесів у

взаємозв'язку із іншими фізичними процесами, що виникають під час виготовлення приладів мікроелектроніки, має як теоретичне, так і практичне значення. Зокрема, виготовлення приладів часто супроводжується значними деформаціями та напруженнями, які можуть впливати на профіль розподілу домішкових атомів у дифузійній зоні, а відтак — на властивості приладів.

Розглянемо неоднорідно деформований напівпровідник, що містить домішкові атоми одного типу. Для фізично нескінченно малих елементів тіла виконуються умови локальної термодинамічної рівноваги. Його локальний термодинамічний стан визначається спряженими параметрами: температура T – густина ентропії s , тензор деформації ε_{ij} – тензор напружень σ_{ij} , хімічний потенціал μ – густина домішок n . Диференціал локальної густини вільної енергії f деформованого напівпровідника визначається співвідношенням Гіббса [1]

$$df = -sdT + \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + \mu dn. \quad (1)$$

Звідси, зокрема, випливає залежність

$$\mu = \mu(T, \varepsilon_{ij}, n) \quad (2)$$

Потік J_i домішкових атомів у напівпровіднику пропорційний до градієнта хімічного потенціалу, отже, для ізотермічних умов, з урахуванням (2), отримуємо

$$J_i = -D_{ij} \left(\partial n / \partial x_j + B_{kl} \partial \varepsilon_{kl} / \partial x_j \right) \quad (3)$$

Тут D_{ij} – тензор коефіцієнтів дифузії, $B_{kl} = (\partial \mu / \partial n)^{-1} (\partial \mu / \partial \varepsilon_{kl})$.

Коефіцієнт дифузії домішки у напівпровідник змінюється з його температурою за законом [2]

$$D_{ij} = D_{ij}^0 \exp(-Q/k_B T). \quad (4)$$

Перебудова кристалічної ґратки, викликана її деформацією, приводить до зміни енергії активації дифузії Q . Залежність Q приймемо у вигляді

$$Q = Q_0 + \gamma_{ij} \varepsilon_{ij}, \quad (5)$$

де Q_0 – значення енергії активації дифузії за відсутності деформації, γ_{ij} – матеріальний тензор другого рангу, який визначає зміну енергії Q зі зміною деформації.

Використовуючи рівняння балансу домішкових атомів

$$\partial n / \partial t = -\partial J_i / \partial x_i \quad (6)$$

та співвідношення (2) – (5), доходимо до рівняння

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_{ij} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x_i \partial x_j} + \left(\frac{\beta_{kl}}{k_B T} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j} \frac{\partial n}{\partial x_i} - \frac{\gamma_{kl}}{k_B T} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i} \frac{\partial n}{\partial x_j} \right) + \frac{\beta_{kl}}{k_B T} n \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_{kl}}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\gamma_{mn}}{k_B T} \frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial x_i} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j} \right) \right) \quad (7)$$

Отримуючи це рівняння, обмежились випадком достатньо малих значень густини n , за яких залежність (2) хімпотенціалу від густини можна апроксимувати логарифмічною функцією, а від деформації – лінійною. У формулі (7) β_{kl} – матеріальний тензор другого рангу, що враховує залежність хімічного потенціалу від деформації.

Рівняння (7) описує однокомпонентну дифузію домішок у деформованій кристалічній ґратці за ізотермічних умов. Тензор деформації ε_{ij} , що входить у це рівняння ε , у за-

гальному випадку, функцією просторових координат x_i і часу t . Для знаходження деформації рівняння (7) слід доповнити відповідними рівняннями механіки [3]. За певних умов неоднорідний розподіл домішкових атомів приводить до напруженого стану ґратки. У такому разі математична модель дифузії стає нелінійною. Якщо деформація не залежить від координат, то рівняння (7) переходить у класичне рівняння дифузії.

Розглянемо одновимірну дифузію $n = n(x, t)$ в одновимірному стаціонарному полі деформації

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon(x), \quad \varepsilon_{xx} = -v_{yx}\varepsilon(x), \quad \varepsilon_{zz} \equiv -v_{yz}\varepsilon(x), \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = 0, \quad (8)$$

Рівняння (7) для цього випадку набуває вигляду

$$\partial n / \partial t = D \partial^2 n / \partial x^2 + V \partial n / \partial x + Bn \quad (10)$$

Тут прийнято $D = D_{xx}$, $V = D(\beta - \gamma) \partial \varepsilon(x) / \partial x$, $B = D\beta \left(\partial^2 \varepsilon(x) / \partial x^2 - \gamma (\partial \varepsilon(x) / \partial x)^2 \right)$,

$$\beta \equiv (\beta_{yy} - v(\beta_{xx} + \beta_{zz})) / k_B T, \quad \gamma \equiv (\gamma_{yy} - v(\gamma_{xx} + \gamma_{zz})) / k_B T$$

Коефіцієнти рівняння (10) залежать від деформації $\varepsilon(x)$ та її похідних, а відтак – від просторової координати x . Розглядаючи частковий випадок лінійного розподілу деформації $\varepsilon(x) \sim ax$. Тоді $\partial \varepsilon(x) / \partial x = a$, $\partial^2 \varepsilon(x) / \partial x^2 = 0$. Для достатньо малих деформацій у першому наближенні можна знехтувати координатною залежністю коефіцієнта D_{xx} , прийнявши $D_{xx} \approx D_{xx}^0 \exp(-Q_0/k_B T)$. У такому наближенні коефіцієнти рівняння (10) є сталими.

Уведемо безрозмірні змінні: час $\tau = t/t_0$, віднесений до деякого характерного часу t_0 , та координату $\xi = x/l_0$, нормовану до характерної довжини $l_0 = \sqrt{Dt_0}$. У нових змінних рівняння (10) набуває вигляду

$$\partial n / \partial \tau = \partial^2 n / \partial \xi^2 + v \partial n / \partial \xi - bn, \quad (11)$$

де $v = (\beta - \gamma)al_0$, $b = \beta\gamma a^2 l_0^2$.

Переходячи у рівнянні (11) до нової функції $u(x, t)$, що пов'язана із густиною співвідношенням

$$n(\xi, \tau) = u(\xi, \tau) \exp\left(-v\xi/2 - (v^2 + 4b^2)\tau/4\right), \quad (12)$$

зведемо це рівняння до вигляду

$$\partial u / \partial \tau = \partial^2 u / \partial \xi^2 \quad (13)$$

Використовуючи отриману математичну модель дослідження впливу градієнта деформації на форму дифузійних кривих, розглянемо задачу про перерозподіл атомів домішки, зосередженої в малій області, що розташовані достатньо далеко від поверхні. Вибираючи початок координат у точці зосередження домішки, приймемо початкові умови у вигляді

$$n(\xi, 0) = n_0 \varphi(\xi), \quad (14)$$

де $\varphi(\xi)$ – задана функція, локалізована в малій області

Згідно із формулою (12) за початкові умови для рівняння (13) слід узяти

$$u(\xi, 0) = n_0 \varphi(\xi) \exp(v\xi/2) \quad (15)$$

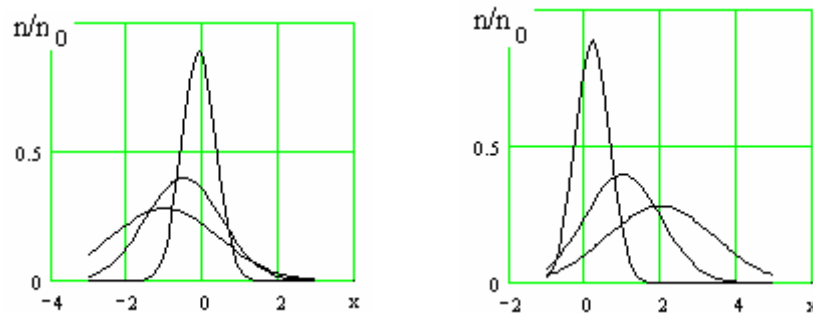
Розв'язком рівняння (13) для умов (15) є функція [4]

$$u(\xi, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\eta) / (2\sqrt{\pi\tau}) \exp\left(-(\xi - \eta)^2 / (4\tau)\right) d\eta \quad (16)$$

натомість профіль розподілу домішки в будь-який момент часу матиме, відповідно до формули (12), вигляд

$$n(\xi, \tau) = \exp\left(-v\xi/2 - (v^2 + 4b^2)\tau/4\right) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\eta) / (2\sqrt{\pi\tau}) \exp\left(-(\xi - \eta)^2 / (4\tau)\right) d\eta \quad (17)$$

На рисунку наведені криві розподілу домішкових атомів для моментів часу $\tau = 0.1, 0.5, 1$ для різних значень параметра $v = 1$ та -2 , що відповідають різним абсолютним значенням та різним напрямкам градієнта деформації. Під час розрахунків початковий розподіл густини приймали у вигляді $\varphi(\xi) = n_0 \delta(\xi)$, n_0 – задана початкова концентрація, $\delta(\xi)$ – дельта-функція Дірака. Обчислення провели для випадку, коли переважальний внесок має деформаційна залежність коефіцієнта дифузії, а впливом деформації на хімпотенціал можна знехтувати. Для цього приймали $\beta = 0$.



Криві розподілу домішкових атомів для моментів часу $\tau = 0.1; 0.5; 1$ для різних значень параметра v

Отже, неоднорідна деформація є істотним фактором для формування профілю розподілу домішкових атомів у ґратці. Контролюючи розподіл деформації в напівпровіднику в процесі його легування чи відпалу можна у певних межах керувати параметрами дифузійних шарів і таким чином впливати на параметри приладів, що створюються на їх основі.

1. Гроот де С., Мазур П. *Неравновесная термодинамика*. М., 1964. 456с. 2. Ормонт Б.Ф. *Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников*. М., 1973. 3. Бурак Я.И., Чекурин В.Ф. *Физико-механические поля в полупроводниках. Математические основы теории*. К., 1987. 4. Бутковский А.Г. *Характеристики систем с распределенными параметрами*. М., 1979.