01;05

Приближенные аналитические решения нелинейного уравнения диффузии

© *Р.Ш. Малкович*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
E-mail: Malkovich@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 21 мая 2006 г.

Получены приближенные аналитические решения нелинейного уравнения диффузии $\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(c)\,\frac{\partial c}{\partial x}\right)$ в практически важном случае постоянных краевых условий — диффузии в равномерно легированном полупространстве при нулевой поверхностной концентрации для зависимостей $D(c) = ac$, ac^2 и $a\sqrt{c}$ $(a > 0)$.

Точность приближения для указанных зависимостей в интервале $(1 \div 2) \cdot 10^{-3}$–$(0.92 \div 0.99)$ не хуже 1–2%.

PACS: 66.30.Dn

Нелинейное уравнение диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(c)\,\frac{\partial c}{\partial x}\right) \tag{1}$$

(c — концентрация диффундирующих частиц, x — координата, t — время, D — коэффициент диффузии) описывает целый ряд задач диффузии, связанных как с зависимостью параметров элементарного диффузионного акта от концентрации диффундирующих частиц, так и с изменением состояния диффундирующих частиц — при диссоциативной диффузии, диффузии с вытеснением, диффузии с комплексообразованием [1,2]. К уравнению (1) зачастую сводятся также задачи диффузии заряженных частиц и диффузии по ионизованным вакансиям [1,2].

Характер зависимости $D(c)$ определяется конкретной ситуацией, складывающейся при диффузии в твердом теле. Так, при диффузии мышьяка и фосфора в кремнии, бора в кремнии [1,2], хрома в окиси никеля [3] наблюдается зависимость $D(c) = ac$, а при диффузии цинка в арсениде галлия — зависимость $D(c) = ac^2$ [1]. При диффузии цинка в арсениде галлия отмечалась также зависимость $D(c) = a\sqrt{c}$ [4]. Всюду $a > 0$.

При известной зависимости $D(c)$ концентрация $c(x,t)$ может быть найдена численным решением уравнения (1). Однако в практически важном случае постоянных краевых условий — диффузия в равномерно легированном полупространстве при постоянной поверхностной концентрации, а также диффузия в пространстве при исходном ступенчатом распределении концентрации — нелинейное уравнение в частных производных (1) подстановкой Больцмана $\lambda = x/\sqrt{t}$ сводится к обыкновенному нелинейному уравнению [5]

$$-\frac{\lambda}{2}\frac{dc}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda}\left(D(c)\frac{dc}{d\lambda}\right). \tag{2}$$

Численные методы решения уравнения (2) позволяют находить профиль концентрации при весьма произвольном характере зависимости $D(c)$. Однако применение этих методов нередко сопряжено с известными трудностями, в связи с чем представляет интерес нахождение приближенных аналитических соотношений, позволяющих с достаточной для экспериментатора точностью определять концентрационный профиль для конкретного вида зависимости $D(c)$. Такие соотношения были получены нами на основе предложенных ранее методов приближенного решения уравнения (2) [5].

Рассматривалась диффузия из равномерно легированного полупространства

$$c(x,0) = \text{const} = c_0, \quad x \geqslant 0$$

со связывающей границей

$$c(0,t) = 0, \qquad t > 0.$$

Соответствующие краевые условия для уравнения (2) записывались в виде

$$c(0) = 0, \qquad c(\infty) = c_0. \tag{3}$$

Полагалось для простоты $c_0 = 1$. Отметим, что концентрационный профиль определяется в виде $\lambda(c)$, а не $c(\lambda)$.

Нами получены приближенные аналитические решения уравнения (2) для следующих зависимостей $D(c)$: 1) ac, 2) ac^2, 3) $a\sqrt{c}$.

1. Зависимость $D(c) = ac$

В интервале $10^{-3} \leqslant c \leqslant 0.3$

$$\lambda(c) = 0.752 \ln\left(\frac{1+c^2}{1-c^2}\right)\sqrt{a}. \qquad (4)$$

Как показывает сравнение значений λ, полученных с использованием этого соотношения, с численными значениями, найденными методом Филипа [5], различие между аналитическими и численными значениями λ во всем указанном интервале не превосходит 1%.

В интервале $0.3 \leqslant c \leqslant 0.92$

$$\lambda(c) = \left(0.773 \ln\frac{1+c^2}{1-c^2} - b\right)\sqrt{a}, \qquad (5)$$

где $b = 3.642 \cdot 10^{-3}$. Во всем интервале различие между аналитическими и численными значениями λ не превышает 1.15%.

2. Зависимость $D(c) = ac^2$

В интервале $10^{-3} \leqslant c \leqslant 0.6$

$$\lambda(c) = 1.05\left(\ln\frac{1+c}{1-c} - 2\,\mathrm{arctg}\right)\sqrt{a}. \qquad (6)$$

Отклонение аналитических значений от численных во всем интервале меньше 1%.

В интервале $0.6 \leqslant c \leqslant 0.97$

$$\lambda(c) = \left(0.746 \ln\frac{1+c^3}{1-c^3} - b\right)\sqrt{a}, \qquad (7)$$

где $b = 9.879 \cdot 10^{-3}$. Отклонение аналитических значений от численных во всем интервале меньше 2%.

3. Зависимость $D(c) = a\sqrt{c}$

В интервале $2 \cdot 10^{-3} \leqslant c \leqslant 0.8$

$$\lambda(c) = 0.8032 \ln\left(\frac{1+c\sqrt{c}}{1-c\sqrt{c}}\right)\sqrt{a}. \qquad (8)$$

Во всем интервале точность аппроксимации не хуже 1%.

В интервале $0.8 \leqslant c \leqslant 0.99$

$$\lambda(c) = \left[0.5787\left(\ln\frac{1+c\sqrt{c}}{1-c\sqrt{c}} + 2\,\mathrm{arctg}\,c\sqrt{c}\right) - b\right]\sqrt{a}, \qquad (9)$$

где $b = 0.3154$. Точность аппроксимации для данного соотношения — не хуже 1%.

Список литературы

[1] *Atomic* diffusion in semiconductors / Ed. D. Shaw. London, New York: Plemun Press, 1973. (Пер.: Атомная диффузия в полупроводниках. М.: Мир, 1975).
[2] *Frank W., Gösele U., Mehrer H., Seeger A.* // Diffusion in crystalline solids / G.E. Murch and A.S. Nowick, eds. Orlando et al. 1984.
[3] *Perkins R.A., Rapp R.A.* // Metal. Trans. 1973. V. 4. N 1. P. 193.
[4] *Gâiseanu F.* // Phys. St. Sol. (a) 1983. V. 77. N 1. K59.
[5] *Малкович Р.Ш.* Математика диффузии в полупроводниках. СПб.: Наука, 1999.