

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ**  
**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ**  
**Кафедра вычислительной математики**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ МНОГОЗАРЯДНОЙ ПРИМЕСИ В  
ПОЛУПРОВОДНИКЕ**

Курсовая работа

Парфененко            Максима  
Александровича  
студента 4 курса 6 группы  
специальности «прикладная  
математика»  
Научный руководитель:  
доцент                    кафедры  
вычислительной  
математики,            кандидат  
физико-математических  
наук    Макаренко    Леонид  
Фёдорович

Минск, 2024

## **АННОТАЦИЯ**

Парфененко М. А. Моделирование диффузии многозарядной примеси в полупроводнике: Курсовая работа / Минск: БГУ, 2024. – 24 с.

Рассматривается задача диффузии многозарядной примеси в полупроводниках, анализ математических моделей, описывающих этот процесс, и разработка эффективных численных методов их решения.

## **АНАТАЦЫЯ**

Парфяненка М. А. Мадэляванне дыфузіі шматзараднай прымесі ў паўправадніку: Курсавая работа / Мінск: БДУ, 2024. – 24 с.

Разглядаецца задача дыфузіі шматзараднай прымесі ў паўправадніках, аналіз матэматычных мадэляў, якія апісваюць гэты працэс, і распрацоўка эфектыўных лікавых метадаў для іх вырашэння.

## **ANNOTATION**

Parfenenka M. A. Modeling the diffusion of multi-charged impurities in semiconductors: Course project / Minsk: BSU, 2024. – 24 pages.

The paper addresses the problem of diffusion of multi-charged impurities in semiconductors, analyzes mathematical models describing this process, and develops effective numerical methods for solving them.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ.....</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. АНАЛИЗ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ.....</b>	<b>5</b>
<b>1.1. Введение .....</b>	<b>5</b>
<b>1.2 Диффузия в собственном полупроводнике .....</b>	<b>7</b>
<b>Глава 2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ .....</b>	<b>10</b>
<b>2.1. Решение задачи диффузии в неограниченном теле .....</b>	<b>10</b>
<b>2.2 Решение задачи диффузии в полуограниченном теле .....</b>	<b>12</b>
2.2.1 Решение задачи диффузии с поглощающей границей .....	13
2.2.2 Решение задачи диффузии с постоянной поверхностной концентрацией .....	13
<b>Глава 3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ ....</b>	<b>15</b>
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>19</b>
<b>ПРИЛОЖЕНИЯ .....</b>	<b>21</b>

## **ВВЕДЕНИЕ**

Процесс диффузии многозарядной примеси в полупроводниках является ключевым для понимания поведения материалов, применяемых в современных электронных устройствах. Исследование данного процесса позволяет более точно описывать распределение зарядов в полупроводниковых структурах и прогнозировать их свойства в зависимости от внешних условий.

Цель данной работы — моделирование процесса диффузии ионов примеси с учетом квазиравновесного состояния носителей заряда и внутреннего электрического поля. Основной задачей является анализ математических моделей, описывающих этот процесс, и разработка эффективных численных методов их решения. Особое внимание уделено явной конечно-разностной схеме, как базисному инструменту для численного моделирования.

Научная значимость исследования заключается в разработке и анализе численных схем, которые обеспечивают устойчивость и точность при моделировании нелинейных процессов, возникающих при диффузии примеси в полупроводниках.

# Глава 1. АНАЛИЗ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

## 1.1. Введение

Рассмотрим процесс одномерной диффузии полностью ионизованной примеси донорного типа в невырожденном полупроводнике, который также может содержать неподвижную полностью ионизованную легирующую примесь. Аналогичный анализ можно применить и к акцепторной примеси.

Предположим, что коэффициент диффузии  $D_c$  остается постоянным, а примесные ионы не участвуют в образовании комплексов ни с другими примесями, ни с собственными дефектами кристалла. В таком случае поток примеси  $j$  можно представить как сумму двух составляющих: диффузионной, связанной с градиентом концентрации, и дрейфовой, обусловленной внешним электрическим полем.

$$j = -D_c \frac{\partial C}{\partial x} + vC,$$

где  $C$  – концентрация примеси. Воспользуемся тем, что скорость дрейфа  $v = \mu E$ , где  $\mu$  – подвижность примесных частиц, является постоянной величиной, а  $E$  – напряженность внутреннего электрического поля, которая выражается через электростатический потенциал  $\Phi$  формулой  $E = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}$ , запишем формулу в следующем виде:

$$j = -D_c \frac{\partial C}{\partial x} - \mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} C. \quad (1.1)$$

Учитывая уравнение непрерывности  $\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$  и уравнение (1.1), запишем уравнение диффузии примесных ионов таким образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} C \right). \quad (1.2)$$

Для дальнейшей работы стоит прояснить следующие определения.

*Электроны* — это отрицательно заряженные элементарные частицы, присутствующие в атомах. В полупроводниках они могут двигаться, если получают дополнительную энергию (например, от тепла, света или внешнего электрического поля). Когда электрон переходит в зону проводимости, он оставляет за собой незанятое место в валентной зоне. Это место называют *дыркой*. По сути, это квазичастица, ведущая себя как положительно заряженная частица, хотя физически она всего лишь отражает отсутствие электрона. Другие электроны из валентной зоны могут заполнять эту дырку, создавая эффект, будто дырка "перемещается" через кристалл.

Запишем уравнения для электронов и дырок по аналогии с (1.2):

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \mu_n \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} N \right), \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \mu_p \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} P \right), \quad (1.4)$$

где  $N, P, D_n, D_p, \mu_n, \mu_p$  – концентрации, коэффициенты диффузии и подвижности электронов и дырок соответственно. Для получения полной системы уравнений, которая представляла бы собой одновременное перемещение и ионизованной примеси, и электронов с дырками, добавим к уравнениям (1.2)–(1.4) уравнение Пуассона

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{4\pi}{\varepsilon} e(N - P - zC + z_s S),$$

где  $S$  – концентрация легирующей примеси,  $e$  – абсолютная величина заряда электрона,  $\varepsilon$  – диэлектрическая постоянная среды,  $z$  и  $z_s$  – заряд диффундирующей и легирующей примесей (в абсолютных величинах заряда электрона) соответственно. Значение  $z$  положительно,  $z_s$  является положительным в случае акцепторной легирующей примеси, отрицательным – в случае донорной легирующей примеси.

Воспользуемся квазиравновесным приближением. Суть приближения заключается в том, что времена релаксации для носителей заряда (электронов и дырок) существенно меньше времён, характерных для процесса диффузии ионов примеси. Это означает, что при любых изменениях концентрации примесных ионов распределение носителей заряда (электронов и дырок) успевает мгновенно прийти в квазистационарное состояние. При таком допущении пренебрегают производными по времени для концентраций носителей, что выражается в условиях  $\frac{\partial N}{\partial t} = 0, \frac{\partial P}{\partial t} = 0$ . Учитывая также отсутствие потоков носителей, то есть  $j_n = j_p = 0$ , можно получить выражения, описывающие их квазиравновесное распределение в создаваемом электрическом поле.

Принимая во внимание эти условия, получается квазиравновесное распределение концентраций электронов и дырок, которое можно описать через функцию Больцмана:

$$N = N_i \exp\left(\frac{e\Phi}{kT}\right), P = N_i \exp\left(-\frac{e\Phi}{kT}\right),$$

где  $N_i$  — собственная концентрация носителей,  $\Phi$  — электростатический потенциал,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. Здесь предполагается, что при  $\Phi = 0$  концентрации электронов и дырок равны  $N = P = N_i$ .

Далее используется соотношение Эйнштейна для подвижности и коэффициентов диффузии:

$$\frac{\mu_n}{D_n} = \frac{\mu_p}{D_p} = \frac{e}{kT}.$$

С учётом этих выражений и соотношения Эйнштейна  $\frac{\mu}{D_c} = \frac{ze}{kT}$  для ионов примеси можно преобразовать систему уравнений, описывающую процесс диффузии ионов и внутреннее электрическое поле. Она принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_c \frac{ze}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left( C \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} &= \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( 2N_i sh \frac{e\Phi}{kT} - zC + z_s S \right).\end{aligned}$$

Полученная система уравнений описывает распределение ионов примеси в присутствии внутреннего электрического поля, создаваемого носителями заряда и примесными ионами. Эти уравнения позволяют учитывать как диффузионный процесс, так и влияние дрейфового движения под воздействием электрического поля, возникающего вследствие разделения зарядов.

## 1.2 Диффузия в собственном полупроводнике

Будем рассматривать диффузию ионизованной примеси в полупроводнике, в котором отсутствует легирующая примесь. Тогда систему запишем так:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= D_c \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{ze}{kT} \frac{\partial \Phi}{\partial x} C \right), \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} &= \frac{4\pi}{\varepsilon} \left( 2N_i sh \frac{e\Phi}{kT} - zC \right).\end{aligned}$$

Полученная система сводится к уравнению концентрационно-зависимой диффузии в асимптотической области локальной электронейтральности (хотя правильнее в данном случае было бы сказать квазиэлектронейтральности). Плотность объёмного заряда пренебрежимо мала по сравнению с плотностью положительного и отрицательного зарядов [2], тогда если плотность объёмного заряда

$$p = e(N - P - zC),$$

то пренебрегая ей, получаем:

$$N \approx P + zC.$$

При этом приближение локальной электронейтральности позволяет упростить уравнение Пуассона и выразить потенциал как функцию концентрации  $C$ , что приводит к упрощенному уравнению диффузии с учетом зависимости коэффициента диффузии от концентрации. В этом случае условие локальной нейтральности принимает вид:

$$2N_i sh\left(\frac{e\Phi}{kT}\right) = zC.$$

Выразим потенциал  $\Phi$  как функцию концентрации  $C$ :

$$\Phi = \frac{kT}{e} arsh \frac{zC}{2N_i},$$

где функция  $arsh(y)$  определяется следующим образом:

$$arsh(y) = \ln(y + \sqrt{y^2 + 1}).$$

Далее, найдем производную потенциала по координате:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{kT}{e} \frac{z}{\sqrt{(zC)^2 + 4N_i^2}} \frac{\partial C}{\partial x}.$$

Подставляя эту производную в уравнение диффузии, получаем:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(C) \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (1.5)$$

где  $D(C)$  — концентрационно-зависимый коэффициент диффузии, определяемый выражением:

$$D(C) = D_c F(C),$$

а функция  $F(C)$  принимает вид:

$$F(C) = 1 + \frac{z^2 C}{\sqrt{(zC)^2 + 4N_i^2}}.$$

Функция  $F(C)$  фактически учитывает влияние дрейфа в электрическом поле, создаваемом заряженными частицами. Это приводит к зависимости коэффициента диффузии от концентрации примеси.

Для случая однозарядной примеси ( $z = 1$ ) уравнение принимает вид:

$$D(C) = D_c \left( 1 + \frac{C}{\sqrt{C^2 + 4N_i^2}} \right).$$



Для упрощения анализа введем безразмерные переменные:

$$\varepsilon = \frac{x}{L}, \quad \tau = \frac{D_c t}{L^2}, \quad \varphi = \frac{e\Phi}{kT},$$

$$c = \frac{C}{N_i}, \quad n = \frac{N}{N_i}, \quad p = \frac{P}{N_i},$$

где  $L = \left( \frac{\varepsilon kT}{4\pi e^2 N_i} \right)^{1/2}$  – дебаевская длина. Используя эти переменные, система уравнений принимает вид:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\partial c}{\partial \xi} + zc \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right), \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} = 2sh(\varphi) - zc. \quad (1.7)$$

Нас интересует случай полуограниченного тела с исходным равномерным распределением примеси и постоянной поверхностной концентрацией. Для этого случая начальные и граничные условия (1.6) и (1.7) записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} c(\xi, 0) &= 0, \forall \xi \geq 0, \\ c(0, \tau) &= c_0, c(\infty, \tau) = 0, \forall \tau > 0, \\ \varphi(\infty) &= 0, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Сложность решения задачи с начальными и граничными условиями (1.8) заключается в том, что уравнение (1.7) нелинейное с гиперболическим синусом. Решить систему точными численными методами (например, методом прогонки) не получится, так как система не является системой линейных уравнений, а также не получится решить систему явными методами из-за нехватки начального условия для  $\varphi$  (подробнее в Главе 3).

Однако уравнение (1.5) может быть сведено к обыкновенному дифференциальному уравнению посредством подстановки Больцмана [1, 5]

$$\lambda = \frac{x}{\sqrt{D_c t}}.$$

Запишем дифференциальное уравнение:

$$-\frac{\lambda}{2} \frac{dc}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \left( D(c) \frac{dc}{d\lambda} \right). \quad (1.9)$$

Для решения уравнения (1.9) можно использовать конечно-разностные методы.

## Глава 2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ

Распределение концентрации частиц может быть найдено аналитическими методами, например, методом разделения переменных, методом интегральных преобразований и другими.

Начальное условие заключается в том, чтобы задать значение концентрации  $c(x, t)$  в исходный момент времени  $t_0$ . Граничные условия описывают, как концентрация будет вести себя на концах интервала значений  $x$ .

В рассматриваемом случае диффузии в полуограниченном теле, изначально не содержащем частиц и с постоянной поверхностной концентрацией, целесообразно начать с получения аналитического решения для общего случая. Поэтому в первую очередь мы сформулируем общее решение для неограниченного тела, а затем перейдем к специфике нашего случая.

### 2.1. Решение задачи диффузии в неограниченном теле

Рассмотрим неограниченное тело ( $-\infty \leq x \leq \infty$ ) с заданным начальным распределением концентрации

$$c(x, t)|_{t=0} = c(x, 0) = f(x).$$

Вычислим установившееся в теле к моменту времени  $t > 0$  распределение концентрации  $c(x, t)$ .

Будем искать частное решение уравнения диффузии (уравнения Фика)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

в виде произведения двух функций: одна из них будет зависеть исключительно от координаты  $X(x)$ , вторая – только от временной координаты  $T(t)$ :

$$c(x, t) = X(x)T(t).$$

Подставим это выражение в уравнение Фика и путём разделения переменных получим:

$$\frac{1}{D} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2}.$$

Левая часть данного равенства не зависит от  $x$ , а правая часть – от  $t$ . Это имеет место исключительно в том случае, если обе части тождественно равны некоторой отрицательной и вещественной константе  $-\lambda^2$ . Данная постоянная в обязательном порядке должна являться отрицательной, поскольку в ином случае

решение уравнения  $\frac{dT}{dt} = \lambda^2 DT$ , выступающее в роли функции  $\exp(\lambda^2 Dt)$ , возрастала бы неограниченно со временем, следовательно, возрастала бы и концентрация диффундирующих частиц. Тогда

$$\frac{dT}{dt} + \lambda^2 DT = 0,$$

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \lambda^2 X = 0.$$

Проинтегрируем данные уравнения, тогда получим:

$$T(t) = \gamma \exp(-\lambda^2 Dt),$$

$$X(x) = \alpha \cos(\lambda x) + \beta \sin(\lambda x),$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  – произвольные константы интегрирования. Значит, частное решение уравнения диффузии имеет следующий вид:

$$c(x, t) = \exp(-\lambda^2 Dt) (A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x)), \quad (2.2)$$

где  $A = \alpha \gamma, B = \beta \gamma$ .

Представим решение уравнения в виде суперпозиции частных решений (2.2), причём суммирование производится по целочисленному индексу:

$$c(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \exp(-\lambda_m^2 Dt) [A(\lambda_m) \cos(\lambda_m x) + B(\lambda_m) \sin(\lambda_m x)]. \quad (2.3)$$

Так как в рассматриваемой задаче параметр  $\lambda \in (-\infty, \infty)$ , то целесообразно заменить сумму по дискретным значениям  $\lambda$  интегралом по данному параметру от  $-\infty$  до  $\infty$ . Заметим, что он также является решением уравнения (2.1).

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda^2 Dt) [A(\lambda) \cos(\lambda x) + B(\lambda) \sin(\lambda x)] d\lambda. \quad (2.4)$$

Чтобы вычислить неизвестные функции  $A(\lambda)$  и  $B(\lambda)$ , воспользуемся начальным условием, а также разложением функции  $f(x)$  в ряд Фурье, тогда

$$c(x, 0) = f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [A(\lambda) \cos(\lambda x) + B(\lambda) \sin(\lambda x)] d\lambda,$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \cos(\lambda \xi) d\xi \right] \cos(\lambda x) + \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin(\lambda \xi) d\xi \right] \sin(\lambda x) \right\} d\lambda,$$

откуда получаем функции:

$$A(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \cos(\lambda \xi) d\xi,$$

$$B(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \sin(\lambda \xi) d\xi.$$

Подставляя данные функции в (2.4), а также меняя порядок интегрирования, имеем следующий результат:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda^2 Dt) \cos(\lambda(\xi - x)) d\lambda \right] d\xi. \quad (2.5)$$

Поскольку [1]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda^2 Dt) \cos(\lambda(\xi - x)) d\lambda = \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right],$$

тогда получим общее решение задачи для неограниченного тела:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] d\xi. \quad (2.6)$$

## 2.2 Решение задачи диффузии в полуограниченном теле

В данном случае главное отличие по сравнению с вышеизложенным заключается в том, что здесь концентрация зависит не только от начального распределения, но и от условия на границе тела.

Поскольку в данной задаче рассматриваются значения ( $0 \leq x \leq \infty$ ), использовать решение (2.6) не представляется возможным. Однако, возможно свести задачу для полуограниченного тела к задаче, рассмотренной выше.

Возьмём и продолжим начальное условие за пределы граничной плоскости. Положим, что данное условие представляется в виде какой-то неизвестной нам функции  $c_1(\xi, 0)$ . Тогда запишем формулу (2.6) в виде

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \left\{ \int_{-\infty}^0 c_1(\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] d\xi + \int_0^{\infty} c(\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] d\xi \right\}.$$

Произведя замену  $z = -\xi$ , тогда получим общее решение уравнения диффузии для полуограниченного тела:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} \left\{ c(\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] + c_1(-\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi. \quad (2.7)$$

Неизвестную нам функцию  $c_1(-\xi, 0)$  можно определить, используя необходимое граничное условие.

### 2.2.1 Решение задачи диффузии с поглощающей границей

Пусть на границе тела концентрация в любой момент времени равна нулю. Тогда, пользуясь (2.7), получаем:

$$c(0, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty [c(\xi, 0) + c_1(-\xi, 0)] \exp\left(-\frac{\xi^2}{4Dt}\right) d\xi = 0.$$

Для того, чтобы интеграл был равен нулю, требуется выполнение следующего уравнения:

$$-c(\xi, 0) = c_1(-\xi, 0) \quad \forall t > 0.$$

Тогда получим общее решение уравнения диффузии для полуограниченного тела с поглощающей границей:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty c(\xi, 0) \left\{ \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] - \exp\left[-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi. \quad (2.8)$$

Рассмотрим вариант начального распределения концентрации, когда распределение равномерное.

Пусть в начальный момент времени диффундирующие частицы распределены равномерно по всей области  $0 \leq x \leq \infty$ :

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

тогда из (2.8) получим [1]:

$$\begin{aligned} c(x, t) &= \frac{c_0}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty \left\{ \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] - \exp\left[-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi = \\ &= \frac{c_0}{\sqrt{\pi}} \left( \int_{-\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^\infty \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] d\xi - \int_{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}}^\infty \exp\left[-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right] d\xi \right) = \\ &= c_0 \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

### 2.2.2 Решение задачи диффузии с постоянной поверхностной концентрацией

Рассматриваем полуограниченное тело, в котором в начальном состоянии не было частиц, а через плоскость  $x = 0$  проникают диффундирующие частицы. В этой же плоскости поддерживается не зависящая от времени, постоянная

концентрация  $c_0$ . Таким образом, имеем начальные и граничные условия рассматриваемой нами задачи:

$$\begin{cases} c(x, 0) = 0, \forall x \geq 0 \\ c(0, t) = c_0 \\ c(\infty, t) = 0, \forall t > 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

Есть возможность свести данную задачу к рассмотренной выше задаче 2.2.1. Для этого потребуется ввести функцию, полностью удовлетворяющую уравнению диффузии и следующим начальным и граничным условиям:

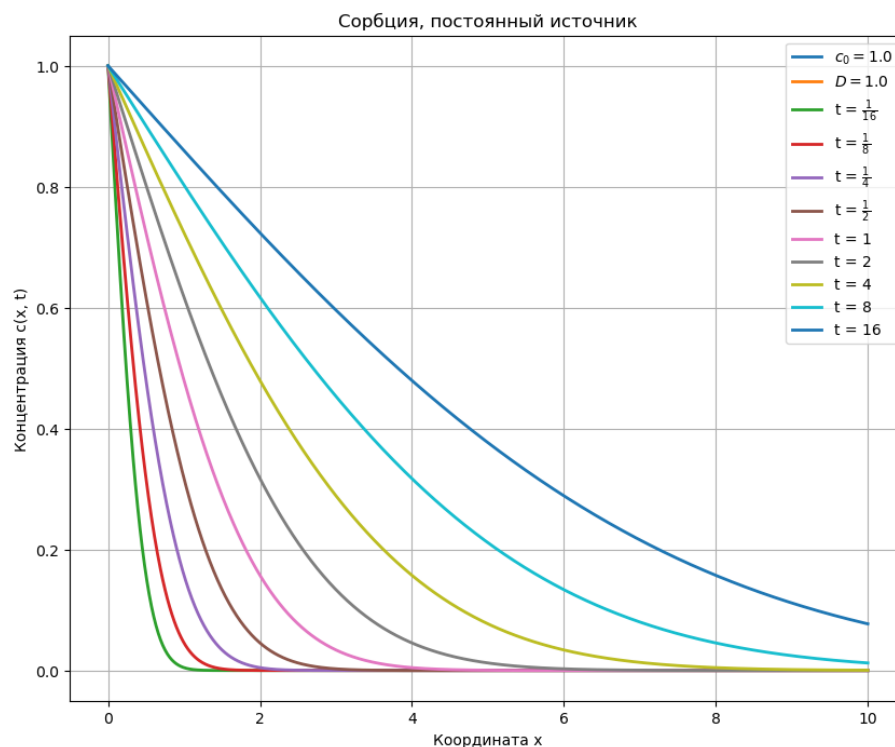
$$\tilde{c}(x, t) = c_0 - c(x, t).$$

$$\begin{cases} \tilde{c}(x, 0) = c_0, \forall x \geq 0 \\ \tilde{c}(0, t) = 0 \\ \tilde{c}(\infty, t) = c_0, \forall t > 0. \end{cases}$$

Решение данной задачи задаётся выражением (2.9) и имеет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{c}(x, t) &= c_0 \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \\ c(x, t) &= c_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Построим график полученного аналитического решения. Полный код программы расположен в Приложении А.



(Рисунок 1. График аналитического решения для разных значений времени,  $c_0 = D = 1.0$ )

### Глава 3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ

С учётом (1.6)–(1.8) запишем постановку задачи:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\partial c}{\partial \xi} + zc \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right) \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} = 2sh\varphi - zc \\ c(\xi, 0) = 0, \forall \xi \geq 0 \\ c(0, \tau) = c_0 \\ c(\infty, \tau) = 0, \forall \tau > 0 \\ \varphi(\infty) = 0 \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Для того, чтобы данную задачу можно было решить, требуется произвести преобразования дифференциальных уравнений с граничными условиями на бесконечности, поскольку в терминах точных численных методов задача, имеющая условия с бесконечностями, некорректна.

Выполним преобразование переменных, чтобы привести граничные условия к более удобному и допустимому виду. Воспользуемся заменой для координатной переменной  $\xi = \frac{x}{1-x}, x \in [0, 1]$  и для временной  $\tau = \frac{t}{1-t}, t \in [0, 1]$ . Тогда

$$\xi = \frac{x}{1-x} = \frac{1}{1-x} - 1 \leftrightarrow x = 1 - \frac{1}{1+\xi}, \tau = \frac{t}{1-t} = \frac{1}{1-t} - 1 \leftrightarrow t = 1 - \frac{1}{1+\tau}.$$

$$\Rightarrow \frac{\partial x}{\partial \xi} = (1-x)^2, \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} = -2(1-x)^3, \frac{\partial t}{\partial \tau} = (1-t)^2, \frac{\partial^2 t}{\partial \tau^2} = -2(1-t)^3.$$

Перезапишем систему (3.1):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} (1-t)^2 = (1-x)^4 \left[ -\frac{2}{1-x} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + z \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + zc(2sh(\varphi) - zc) \right] \\ -2(1-x)^3 \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} (1-x)^4 = 2sh(\varphi) - zc \\ c\left(\frac{x}{1-x}, 0\right) = 0, c\left(0, \frac{t}{1-t}\right) = c_0, c\left(\infty, \frac{t}{1-t}\right) = 0 \\ \varphi(\infty) = 0, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0 \end{array} \right.$$

Сделаем следующую замену:

$$\begin{cases} c\left(\frac{x}{1-x}, \frac{t}{1-t}\right) = \bar{c}(x, t) \\ \varphi\left(\frac{x}{1-x}, \frac{t}{1-t}\right) = \bar{\varphi}(x, t) \end{cases},$$

тогда

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t}(1-t)^2 = (1-x)^4 \left[ -\frac{2}{1-x} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + z \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x} + z \bar{c}(2sh(\bar{\varphi}) - z\bar{c}) \right] \\ (1-x)^4 \left[ \frac{\partial^2 \bar{\varphi}}{\partial x^2} - \frac{2}{1-x} \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x} \right] = 2sh(\bar{\varphi}) - z\bar{c} \\ \bar{c}(x, 0) = 0, \bar{c}(0, t) = c_0, \bar{c}(1, t) = 0 \\ \bar{\varphi}(x, 1) = \bar{\varphi}(1, t) = 0, \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x}(1-x)^2|_{x=0} = 0 \end{cases}$$

Решаем разностную задачу:

$$\begin{cases} \bar{c}_t(1-t)^2 = (1-t)^4 \left[ -\frac{2}{1-x} \bar{c}_x + \bar{c}_{xx} + z \bar{c}_x \bar{\varphi}_x \right] + z \bar{c}(2sh(\bar{\varphi}) - z\bar{c}) \\ (1-x)^4 \left[ \bar{\varphi}_{xx} - \frac{2}{1-x} \bar{\varphi}_x \right] = 2sh(\bar{\varphi}) - z\bar{c} \end{cases}$$

Далее для удобства заменим переменные  $\bar{c}$  и  $\bar{\varphi}$  на  $c$  и  $\varphi$  соответственно, а шаги аппроксимации обозначим за  $h$  и  $\tau$ . Выполним некоторые преобразования и таким образом разностная схема будет построена.

$$\begin{aligned} c_{i+1}^j &= \tau \frac{(1-x_i)^4}{(1-t_j)^2} \left[ -\frac{2}{1-x_i} \frac{1}{h} (c_{i+1}^j - c_i^j) + \frac{1}{h^2} (c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j) + \right. \\ &+ z \frac{1}{h^2} (c_{i+1}^j - c_i^j)(\varphi_i^j - \varphi_{i-1}^j) \left. \right] + \tau z \frac{c_i^j}{(1-t_j)^2} (2sh(\varphi_i^j) - zc_i^j) + \frac{c_i^j}{(1-t_j)^2}. \\ (1-x_i)^4 \left[ -\frac{2}{1-x_i} \frac{1}{h} (\varphi_{i+1}^j - \varphi_i^j) + \frac{1}{h^2} (\varphi_{i+1}^j - 2\varphi_i^j + \varphi_{i-1}^j) \right] &= 2sh(\varphi_i^j) - zc_i^j \\ \Rightarrow \varphi_{i+1}^j \left( -\frac{1}{h} \frac{2}{(1-x_i)} \right) &= \\ = \left( -\frac{2}{h^2} \varphi_i^j + \frac{1}{h} \varphi_{i-1}^j + \frac{2}{h} \frac{\varphi_i^j}{(1-x_i)} \right) \frac{1}{(1-x_i)^3} \frac{h}{2} + sh(\varphi_i^j) h(1-x_i) - zc_i^j \frac{h(1-x_i)}{2} \\ \begin{cases} c_i^0 = 0, c_0^j = c_0, c_N^j = 0 \\ \varphi_i^M = 0, \varphi_N^1 = 0, \frac{\varphi_1^j - \varphi_0^j}{h} = 0 \end{cases} \leftrightarrow \begin{cases} c_i^0 = 0, c_0^j = 0, c_N^j = 0 \\ \varphi_1^j - \varphi_0^j = 0 \end{cases} \end{aligned}$$



Однако, как уже было упомянуто ранее, из-за нелинейности применение метода прогонки невозможно. Поэтому будем рассматривать постановку задачи с дифференциальным уравнением, к которому сведена первоначальная задача.

Рассматриваем диффузию однократно ионизированной донорной примеси из постоянного источника,  $C(0, t) = C_0$ , в полуограниченное тело  $x \geq 0$ , в исходном состоянии не содержащее примеси. Граничные условия для (1.9) записываются так:

$$\begin{cases} c(0, t) = c_0 \\ c(\infty, t) = 0, \end{cases}$$

где  $c_0 = \frac{C_0}{N_i}$ .

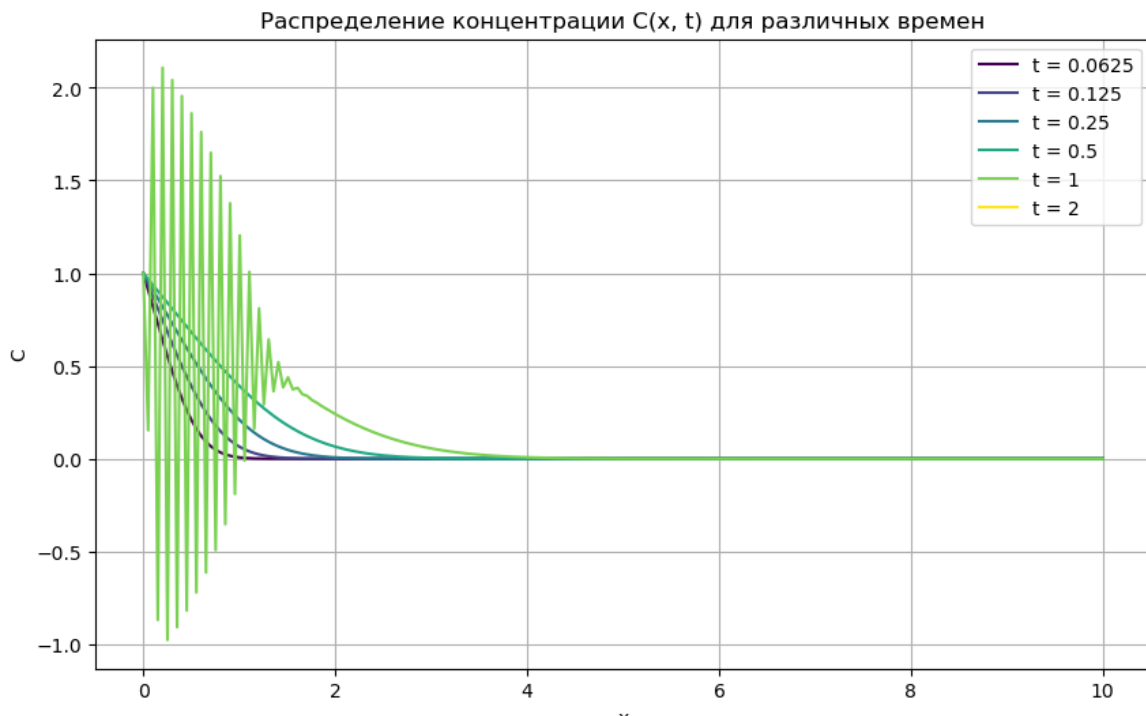
Построим явную конечно-разностную схему для решения данной задачи. Полагаем, что  $C(\infty, t) \approx C(L, t) = 0$ , где  $L$  – конечная граница области.

Полный код программы расположен в Приложении Б.

Отметим, что явная схема является условно устойчивой, то есть, должно выполняться условие устойчивости:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}.$$

Это требуется для избежания колебаний и взрывного роста решения.



(Рисунок 2. Численное решение задачи для разных значений времени)

Заметим, что для значений  $t = \frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$  график отображается корректно (рис. 2), как мы и получили в случае с аналитическим решением. При  $t = 1$  появляются колебания, поскольку условие устойчивости уже не выполняется:

$$1 \leq \frac{\Delta x^2}{2}, \quad \Delta x^2 \geq 2 \leftrightarrow \Delta x \geq \sqrt{2} \approx 1.414,$$

что и соответствует области графика, где колебания прекращаются.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В работе рассмотрен процесс диффузии многозарядной примеси в полупроводниках, разработаны математические модели и численные методы для его описания. Аналитические решения позволяют получить точные результаты для упрощенных условий, в то время как численные схемы, включая явные конечно-разностные методы, предоставляют возможность моделирования более сложных задач с нелинейной зависимостью.

Анализ явной схемы показал её пригодность для начальных исследований и сравнительно простых задач, однако при моделировании сложных процессов в полупроводниках её применение ограничено из-за жестких требований к шагу времени. Для повышения точности и устойчивости могут быть использованы неявные схемы или их комбинации с явными методами.

Полученные результаты имеют практическую ценность для изучения процессов в полупроводниках и могут быть применены при разработке новых материалов и устройств.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Малкович, Р. Ш. Математика диффузии в полупроводниках / Р. Ш. Малкович. – Санкт-Петербург : Наука, 1999. – 389 с.
2. Шоу Д. Атомная диффузия в полупроводниках : пер. с англ. / под ред.: Д. Шоу, Г. Ф. Воронина. – Москва : Мир, 1975. – 686 с.
3. Коздоба Л. А. Методы решения нелинейных задач теплопроводности / Л. А. Коздоба. – Москва : Наука, 1975. – 227 с.
4. [Электрон. ресурс – <https://edufpmi.bsu.by/> Численные методы (5 семестр, 1 поток) / Лекции], лекции «Метод прогонки»
5. Boltzmann L. Annalen der Physik und Chemie / L. Boltzmann – Leipzig, 1894, с. 959
6. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – Москва.: Наука, 1989. – 616 с.

## ПРИЛОЖЕНИЯ

### ПРИЛОЖЕНИЕ А

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.special import erfc

# Параметры задачи
c0 = 1.0      # начальная концентрация
D = 1.0      # коэффициент диффузии
t_values = [1/16, 1/8, 1/4, 1/2, 1, 2, 4, 8, 16] # значения времени
x = np.linspace(0, 10, 1000) # координата x от 0 до 10

# Построение графика
plt.figure(figsize=(10, 8))

# Добавление меток для c0 и D
plt.plot([], [], label=f'$c_0 = {c0}$', linewidth=2) # Пустой график для c0
plt.plot([], [], label=f'$D = {D}$', linewidth=2)    # Пустой график для D

for t in t_values:
    # Аналитическое решение
    c = c0 * erfc(x / (2 * np.sqrt(D * t)))
    # Форматирование времени в виде рациональной дроби
    if t == 1/16:
        t_label = r'$\frac{1}{16}$'
    elif t == 1/8:
        t_label = r'$\frac{1}{8}$'
    elif t == 1/4:
        t_label = r'$\frac{1}{4}$'
    elif t == 1/2:
        t_label = r'$\frac{1}{2}$'
    elif t == 1:
        t_label = '1'
    elif t == 2:
        t_label = '2'
    elif t == 4:
```

```

        t_label = '4'
    elif t == 8:
        t_label = '8'
    elif t == 16:
        t_label = '16'

plt.plot(x, c, label=f't = {t_label}', linewidth=2)

plt.xlabel('Координата x')
plt.ylabel('Концентрация c(x, t)')
plt.title('Сорбция, постоянный источник')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

```

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Параметры задачи
L = 10.0      # Длина области ( $x \in [0, L]$ )
Nx = 200      # Число узлов по пространству

D_e = 1.0     # Коэффициент диффузии
z = 1.0       # Заряд
N_i = 1.0     # Концентрация носителей
c_0 = 1.0     # Начальная концентрация

# Сетка
x = np.linspace(0, L, Nx)
dx = x[1] - x[0]

# Функция F(C)
def F(C):
    return 1 + (z**2 * C) / np.sqrt((z * C)**2 + 4 * N_i**2)

# Функция D(C)
def D(C):
    return D_e * F(C)

# Функция для решения уравнения

def solve_diffusion(T, Nt):
    dt = T / Nt
    C = np.zeros(Nx) # Концентрация на начальный момент времени
    C[0] = c_0       # Начальное условие:  $c(0, t) = c_0$ 

    C_new = np.zeros_like(C)

    for n in range(Nt):
        for i in range(1, Nx - 1):
            D_plus = D((C[i] + C[i + 1]) / 2)

```

```

D_minus = D((C[i] + C[i - 1]) / 2)

flux_plus = D_plus * (C[i + 1] - C[i]) / dx
flux_minus = D_minus * (C[i] - C[i - 1]) / dx

C_new[i] = C[i] + dt / dx * (flux_plus - flux_minus)

# Применение граничных условий
C_new[0] = c_0
C_new[-1] = 0.0

# Обновление значений концентрации
C[:] = C_new

return C

# Временные промежутки
time_intervals = [1/16, 1/8, 1/4, 1/2, 1, 2]
colors = plt.cm.viridis(np.linspace(0, 1, len(time_intervals)))

plt.figure(figsize=(10, 6))
for T, color in zip(time_intervals, colors):
    Nt = 1000 # Фиксированное число шагов по времени для точности
    C = solve_diffusion(T, Nt)
    plt.plot(x, C, label=f't = {T}', color=color)

plt.title('Распределение концентрации C(x, t) для различных времен')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('C')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()

```