ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 1 (2000) с. 73–77

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 1 (2000) p. 73–77

ТОЧНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ВОДНЕВОЇ ПАСИВАЦІЇ КРЕМНІЮ

П. М. Горлей, М. В. Возний
Чернівецький державний університет імені Ю. Федьковича, кафедра фізичної електроніки, вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна
(Отримано 13 серпня 1999 р.)

Для системи еволюційних рівнянь, що описують водневу пасивацію кремнію, отримано загальні розв'язки в стаціонарному випадку і при відсутності дифузії водневих атомів. З використанням апарату теорії груп Лі та методу синґулярних многовидів показано, що одним із розв'язків вихідної системи рівнянь є розв'язок типу біжучих хвиль; записано системи рівнянь для визначення автомодельних розв'язків. Проведено аналіз поведінки системи з урахуванням механізмів дифузії й дисоціяції. Установлено, що дифузія атомів вільного водню у зразку і дисоціяція комплексів "дефект–водень" ускладнюють пасивацію. Отримані аналітичні розв'язки дають змогу проґнозувати просторовий і часовий розподіл дефектів при пасивації кремнію воднем залежно від умов експерименту.

Ключові слова: воднева пасивація кремнію, дифузія вільного водню, розпад комплексів "дефект–водень", система еволюційних рівнянь, теорія груп Лі, метод синґулярних многовидів.

PACS number(s): 61.72.–y

ВСТУП

Пасивація структурних дефектів у напівпровідниках є одним з поширених методів поліпшення електрофізичних характеристик матеріялу [1]. Зокрема, для полікристалічного кремнію, який має розвинуту структуру дефектів різного типу, пасивація зразків в атмосфері атомарного водню значно поліпшує його електрофізичні параметри [2]. Відомо [3], що для одержання матеріялу із заданими характеристиками суттєве значення мають як внутрішні (початковий розподіл дефектів по товщині зразка, тип дефектів), так і зовнішні (температура, режим пасивації) параметри процесу. У багатьох випадках для визначення оптимальних умов пасивації необхідно проводити на основі адекватної моделі комп'ютерне моделювання процесів, що протікають у системі. Задачу пасивації кремнію чисельно розв'язували в [4], де, проте, не було враховано механізму розпаду комплексів "дефект–водень" і залежности початкової концентрації дефектів від координати. Метою нашої праці є дослідження процесу водневої пасивації кремнію в найбільш загальному випадку на основі точних розв'язків системи нелінійних диференціяльних рівнянь, що описують цей процес. Для розв'язання такої задачі в роботі використано апарат теорії груп Лі [5] і метод синґулярних многовидів [6], [7].

I. АНАЛІТИЧНЕ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ВОДНЕВОЇ ПАСИВАЦІЇ КРЕМНІЮ

Одновимірна модель водневої пасивації кремнію в безрозмірних змінних має вигляд такої системи еволюційних рівнянь [2]:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} - u[A(x) - v] + \beta v, \\ v_t = u[A(x) - v] - \beta v, \end{cases} \tag{1}$$

де $u = K_T L^2 C_H / D_H$, $v = K_T L^2 C_{HT} / D_H$, $K_T = 4\pi R D_H$, $t = D_H \tau L^{-2}$, $x = X/L$, $A(x) = 4\pi R L^2 N_T(x) > 0$, $\beta = 4\pi R L^2 C_{max} \exp[-Q/(kT)] \geq 0$, C_H і C_{HT} — концентрації вільного і зв'язаного водню, D_H — коефіцієнт дифузії водню при відсутності дефектів–пасток, K_T — константа захоплення водню (R — радіус ефективного перерізу захоплення), Q — енерґія зв'язку "дефект–водень", $N_T(x)$ — початкова концентрація дефектів, X — координата, τ — час, L — характерна довжина (наприклад, довжина зразка), індекси t і xx позначають відповідні похідні.

Проводячи стандартну процедуру обчислення груп симетрій [5], легко переконатися, що (1) допускає групи Лі з такими інфінітезимальними операторами:

$$\begin{cases} X_1 = \partial_t, & (\forall\beta, \forall A(x)), \\ X_2 = \partial_x + A_x \partial_v, & (\beta A_x = 0), \\ X_3 = x\partial_x + 2t\partial_t - 2u\partial_u + \{2[A(x) - v] + xA_x\}\partial_v, & (\beta = 0, \forall A(x)), \\ X_4 = (x+b)\partial_x + 2t\partial_t - 2(u+\beta)\partial_u - 2[v + A(x)]\partial_v, & (\beta > 0, A(x) = a(x+b)^{-4}), \end{cases} \tag{2}$$

де a, b — деякі постійні ($a > 0$).

1.1. У найбільш загальному випадку ($A(x) \neq a(x+b)^{-4}, \beta > 0$) система (1) допускає тільки групу зсувів у часі з оператором X_1. Розв'язком (1) тут є:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} u(x) & = & C_1 x + C_2, \\ v(x) & = & A(x)u(x)/[u(x)+\beta], \end{array} \right. \tag{3}$$

де C_1, C_2 — сталі, що визначаються з крайових умов.

1.2. Коли $A(x) = a(x+b)^{-4}, \beta > 0$, алґебра Лі двовимірна з оптимальною системою підалґебр, що породжується операторами X_1 і X_4. При цьому групі зсувів (X_1) відповідає розв'язок (3) із $A(x) = a(x+b)^{-4}$. Розв'язки, що визначаються оператором розтягу (X_4), можуть бути знайденими із системи звичайних диференціальних рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} 2w_{zz} + zw_z + 2w(1-q) + 2a\beta z^{-4} = 0, \\ zq_z + 2q(1-w) + 2a\beta z^{-4} = 0, \end{array} \right. \tag{4}$$

де $z = (x+b)t^{-1/2}$, $w = (u+\beta)t$, $q = [a(x+b)^{-4} - v]t$.

Відзначимо, що в цьому випадку розв'язок системи (4) є необмеженим при $z \to 0$ ($t \to \infty$), оскільки $a\beta > 0$.

1.3. Коли $A(x) = \alpha = const, \beta > 0$, алґебра Лі двовимірна і породжується операторами зсувів по незалежних змінних (X_1 і X_2). При цьому оптимальна система підалґебр породжується операторами X_2 і

$$X_5 = X_1 + cX_2, \tag{5}$$

де c — деяка стала.

Розв'язок, що відповідає зсувам у часі (X_1), має вигляд (3) із $A(x) = \alpha$.

Розв'язки, що відповідають зсувам у просторі (X_2), визначаються із системи рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t + v_t = 0, \\ v_t - u(A-v) + \beta v = 0. \end{array} \right. \tag{6}$$

З (6) випливає, що:

$$u + v = n, \tag{7}$$

де n — стала інтеґрування, що визначається з початкових умов.

Загальним розв'язком (6) є:

$$\left\{ \begin{array}{l} u(t) = u_2 + (u_2 - u_1)\{C_3 exp[(u_2 - u_1)t] - 1\}^{-1}, \\ v(t) = n - u(t), \end{array} \right. \tag{8}$$

де u_1 і u_2 ($u_2 > u_1$) - корені квадратного рівняння $u^2 + (A + \beta - n)u - \beta n = 0$, C_3 — стала, що залежить від виду початкових умов.

Розв'язки типу біжучих хвиль (X_5) визначаються із системи звичайних диференціальних рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{zz} + c(u_z + v_z) = 0, \\ -cv_z - u(A-v) + \beta v = 0, \end{array} \right. \tag{9}$$

де $z = x - ct$.

Інтеґруючи перше рівняння системи (9) і роблячи нескладну заміну змінних, одержуємо рівняння Абеля II роду, для якого відомо частковий розв'язок [8]. Він може бути отриманим також за допомогою методу синґулярних многовидів [6], [7] і матиме вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} u(x,t) & = & -cd - c^2 - \beta + 2cdp\{\exp[d(x-ct)] + p\}^{-1}, \\ & & \\ v(x,t) & = & A + cd - c^2 + 2dp\dfrac{(d-c)\exp[d(x-ct)] - cp}{\{\exp[d(x-ct)] + p\}^2}, \end{array} \right. \tag{10}$$

де p — стала, що визначається з початкових умов,

$$d^2 = c^2 + \beta A/c^2. \tag{11}$$

1.4. У випадку $\beta = 0$, $\forall A(x)$, алґебра Лі для вихідної системи рівнянь тривимірна і породжується операторами X_1, X_2 та X_3. Оптимальна система підалґебр при цьому складається з підалґебр, що породжені операторами X_2, X_3 та X_5.

Розв'язки, що відповідають зсувам у часі (X_1), мають вигляд (3), де $\beta = 0$.

Розв'язки, що відповідають зсувам у просторі (X_2), мають вигляд (8), де також $\beta = 0$. У випадку $A(x) \neq$ const у формулах (6), (7), (8) необхідно враховувати залежність функцій $u(t)$, $v(t)$ та величин u_1, u_2, C_3 і n від координати x як від параметра.

Слід зауважити, що існує частковий розв'язок (6) при $\beta = 0$, $n(x) = A(x)$:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} u(x,t) & = & [t + C_4(x)]^{-1}, \\ & & \\ v(x,t) & = & A(x) - [t + C_4(x)]^{-1}, \end{array} \right. \tag{12}$$

де $C_4(x)$ — величина, що визначається з початкових умов і залежить від x як від параметра.

Розв'язки типу біжучих хвиль (X_5) мають вигляд (10)-(11), де необхідно прийняти $\beta = 0$. При $A(x) \neq \mathrm{const}$ у формулах (9), (10), (11) існує параметрична залежність функцій $u(x,t)$, $v(x,t)$ і величини p від координати x.

Відзначимо, що для системи рівнянь (9) у випадку $\beta = 0$ ми отримали ще декілька точних розв'язків. Проте всі вони або необмежені, або від'ємні на деяких проміжках области визначення. Таким чином, зазначені розв'язки не мають фізичного змісту і тому тут опущені.

Розв'язки, що відповідають групі розтягів (X_3), визначаються з системи (4) при врахуванні, що $\beta = 0$, $z = xt^{-1/2}$, $w = ut$, $q = [A(x) - v]t$, $\forall A(x)$, і є обмеженими при $z \to 0$ ($t \to \infty$), оскільки $\beta = 0$.

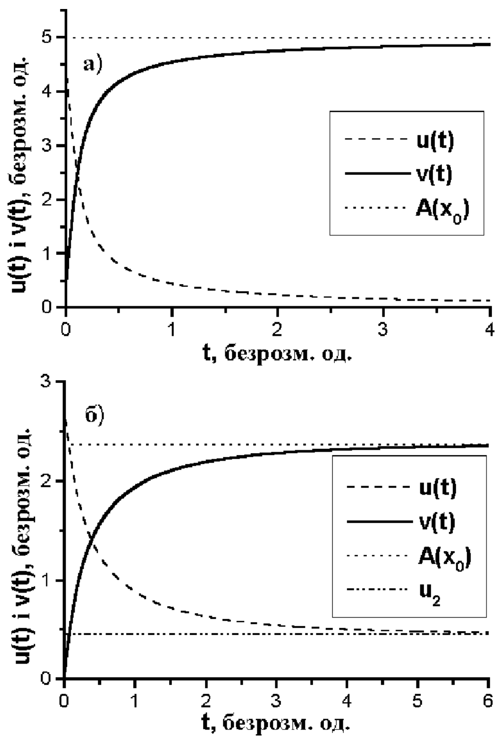

Рис. 1. Типовий вигляд розв'язків системи (1) при $D_H = 0$, $\beta = 0$: а) $n(x_0) = A(x_0)$; б) $n(x_0) > A(x_0)$.

II. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вираз (3), очевидно, є стаціонарним (при $t \to \infty$) розв'язком (u^0, v^0) для моделі (1). Урахування крайових умов:

$$u^0_x|_{x=0} = u^0_x|_{x=L} = v^0_x|_{x=0} = v^0_x|_{x=L} = 0 \qquad (13)$$

приводить до таких профілів стаціонарних концентрацій:

$$u^0(x) = C_2, \quad v^0(x) = A(x)C_2(C_2 + \beta)^{-1}. \qquad (14)$$

Система (6) відповідає моделі (1) без урахування дифузії водневих атомів у зразку. Співвідношення (7) є законом збереження для повного числа атомів водню (вільного і зв'язаного). Відзначимо, що у випадку $A(x) = \alpha = \mathrm{const}$ цей закон збереження є інтеґральним (для числа атомів в усьому зразку), тоді як при $A(x) \neq \mathrm{const}$ — диференціяльним (для точки зразка з координатою x). Типовий графічний вигляд залежностей (8), (12) подано на рис. 1. Відзначимо, що у випадку заданої залежности $A(x)$ графіки функцій $u(t), v(t)$ подані для точки з координатою $x = x_0$ зразка і нормовані на конкретне значення $A(x_0)$ у цій точці.

Аналіз розв'язків (8), (12) дозволяє зробити такі висновки:

1. При відсутності дисоціяції комплексів "дефект–водень" (рис. 1) концентрація вільного водню монотонно спадає за рахунок утворення комплексів. Після завершення експерименту ($u = u^0$, $v = v^0$) водень залишається в зразку у вільному стані в кількості $u_2 \geq 0$. Концентрація пасивованих центрів прямує до рівноважного значення $v^0 = A(x_0)$ і за достатньої кількисти вихідного водню завжди його досягає. При цьому розв'язок (12) описує профілі концентрацій, коли кількість водню є необхідною і достатньою для повної пасивації (рис. 1а).

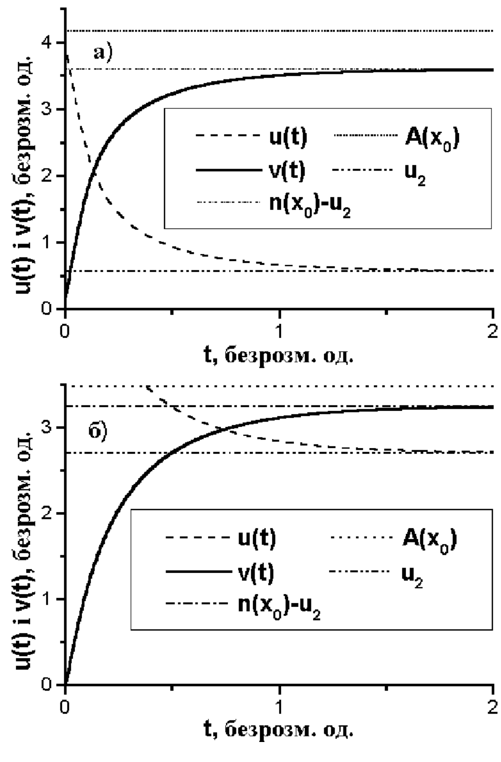

Рис. 2. Типовий вигляд розв'язків системи (1) при $D_H = 0$, $\beta > 0$: а) $n(x_0) = A(x_0)$; б) $n(x_0) \gg A(x_0)$.

2. За наявности дисоціяції комплексів (рис.2) частина водню завжди залишається у вільному стані ($u_2 > 0$). Концентрація пасивованих дефектів ніколи не досягає рівня $A(x_0)$, навіть при значній початковій концентрації атомів вільного водню ($u(x_0)|_{t=0} \gg A(x_0)$) (рис.2б). Чим активніше проходить дисоціяція комплексів (тобто, чим більше β), тим більша частина вільного водню залишається у зразку і тим складніше пасивувати дефекти.

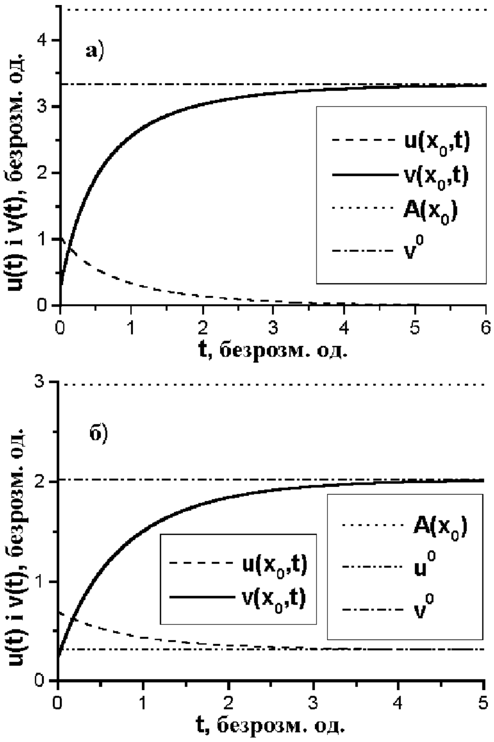

Рис. 3. Типовий вигляд розв'язків системи (1) при $D_H > 0$: а) $\beta = 0$; б) $\beta > 0$.

3. Розв'язок (10) являє собою біжучі хвилі для моделі (1). Типовий вигляд залежностей $u(x,t)$, $v(x,t)$ у цьому випадку подано на рис. 3. Аналогічно наведеним вище розв'язкам при $A(x) \neq \text{const}$ графіки функцій нормовані на конкретне значення $A(x_0)$ у точці $x = x_0$. Згідно з (10) і (11) маємо:

$$u(x)|_{t\to\infty} = |cd| - c^2 - \beta \equiv u^0(x),$$
$$v(x)|_{t\to\infty} = A(x) - |cd| - c^2 \equiv v^0(x), \qquad (15)$$

з чого випливає, що концентрація пасивованих атомів не досягає рівня $A(x_0)$ навіть за відсутности дисоціяції (рис. 3а). Причиною цього, очевидно, є врахування в (9) порівняно з (6) механізму дифузії вільних атомів водню.

Особливо відзначимо, що біжучі хвилі, які мають фізичний зміст для цієї задачі (обмежені й невід'ємні в усій області визначення), можуть бути отримані з (10) тільки при значеннях $c < 0$. Водночас аналіз системи (9) на стійкість у розумінні Ляпунова [9] показує, що тут рівноважне положення системи нестійке. Це означає, що, хоча система (9) і має точний математичний розв'язок, виявлення біжучих хвиль у ній у реальному фізичному експерименті є дуже ускладненим.

Визначення загального аналітичного розв'язку системи (4) пов'язане зі значними труднощами, тому інтеґрування системи (4) при різних початкових умовах проведено методом Рунґе–Кутта IV порядку. Типовий вигляд графіків тут якісно збігається з залежностями, поданими на рис. 1 при $n(x) = A(x)$. Відсутність дисоціяції комплексів і вигляд редукційних зв'язків між незалежними й залежними змінними пояснює в цьому випадку рівності $u^0(x) = 0$, $v^0(x) = A(x)$. Очевидно, що така ситуація не завжди відповідає реальному фізичному експериментові (дефекти не завжди пасивуються цілком, навіть за відсутности дисоціяції комплексів). Отже, розв'язки, отримані з (4), доцільніше віднести не до модельних (придатних для опису реальних явищ і процесів), а до еталонних (придатних для якісного аналізу поведінки системи) [8]. Аналіз числових розв'язків (4) дозволяє зробити висновок про те, що наближення концентрації зв'язаного водню до необхідного рівня $A(x)$ знаходиться в прямій залежності від кількости вільного водню, яка присутня у зразку на початку експерименту.

Таким чином, у нашій праці для системи рівнянь, що описують водневу пасивацію кремнію, визначено групи Лі симетрій, які характеризуються операторами точкових перетворень. Для кожного окремо розглянутого випадку визначена оптимальна система однопараметричних підалґебр. На основі цього отримано загальний стаціонарний розв'язок системи і загальний розв'язок при відсутності дифузії водневих атомів. Наведено частковий розв'язок типу біжучих хвиль. Показано, що визначення загальних розв'язків цього типу еквівалентне до інтеґрування системи звичайних диференціяльних рівнянь (9). Відзначено нестійкий стан біжучих хвиль у системі. Записано систему звичайних диференціяльних рівнянь (4) для визначення автомодельних розв'язків цієї задачі. Зроблено висновки про якісну поведінку системи, що допускає групу розтягів.

Проведено аналіз поведінки системи (1) з урахуванням механізмів дифузії й дисоціяції. Відзначено, що дифузія атомів вільного водню в зразку й дисоціяція комплексів "дефект–водень" ускладнюють пасивацію, не дозволяючи пасивувати всі наявні дефекти в зразку.

Уперше отримані точні розв'язки системи (1) дають змогу прогнозувати просторовий і часовий розподіли дефектів при пасивації кремнію воднем залежно від параметрів задачі (роду дефектів, їхньої початкової концентрації, температури зразка і т.д.) Вони можуть бути використані також для аналізу еволюції інших динамічних систем, що описуються системою рівнянь (1).

[1] P. De Pauw, R. Mertens, R. Van Overstraeten, in *Silicon processing for photovoltaics II. V. 6. Materials processing, theory and practices*, edited by P. Chandra Khattak, K. V. Ravi (North–Holland Physics Publishing, Amsterdam, 1987), p. 1.

[2] E. Katz, M. Koltun, L. Polyak, Solid State Phenomena, **51**–**52**, 479 (1996).

[3] Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, Усп. физ. наук **161**, 129 (1991).

[4] J. P. Kalejs, S. Rajendran, Appl. Phys. Lett. **5**, 2763 (1989).

[5] П. Олвер, *Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям* (Мир, Москва, 1989); Peter J. Olver, *Applications of Lie groups to differential equations, Graduate texts in mathematics* (Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1986).

[6] J. Weiss, M. Tabor, G. Carnevale, J. Math. Phys. **24**, 522 (1983).

[7] Р. Сахадеван, Теор. мат. физ. **99**, 528 (1994).

[8] В. Ф. Зайцев, А. Д. Полянин, *Справочник по нелинейным дифференциальным уравнениям* (Физматлит, Москва, 1993).

[9] Е. Камке, *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям* (Наука, Москва, 1971); E. Kamke, *Differentialgleichungen Lösungmethoden und Lösungen* (Chelsea, New York, 1971).

EXACT SOLUTION OF HYDROGEN PASSIVATION OF SILICON PROBLEM

P. M. Gorley, M. V. Voznyy
Yuriy Fed'kovych Chernivtsi State University, Chair of Physical Electronics, 2 Kotsiubyns'kyi St., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine

General solutions in the stationary case and in the absence of hydrogen atoms diffusion have been obtained for the system of evolution equations describing the hydrogen passivation of silicon. Using Lie groups theory and the singular manifold method the travelling waves type solution was defined analytically; the systems of equations for scale–invariant solutions determination have been obtained. The analysis of the system have been carried out taking into account diffusion and dissociation mechanisms. It was established that free hydrogen diffusion in the sample and the "defect–hydrogen" complexes dissociation spoil passivation. The exact results obtained make it possible to predict the spatial and temporal defects distribution during the hydrogen passivation of silicon depending on the experimental conditions.