УДК 539.2: 517.9

© 1999р. П.М. Горлей, М.В. Возний

Чернівецький державний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

ІНВАРІАНТНІ РОЗВ'ЯЗКИ ЗАДАЧІ ПРО ВОДНЕВУ ПАСИВАЦІЮ КРЕМНІЮ

У роботі представлені результати дослідження системи еволюційних рівнянь, що описують процес водневої пасивації кремнію. З використанням теорії груп Лі визначено явний вигляд інфінітезимальних операторів, що допускаються системою при постійному коефіцієнті дифузії атомів водню у зразку. Проведено класифікацію інваріантних розв'язків і редукцію вихідної системи до систем звичайних диференціальних рівнянь. Продемонстровано можливість аналітичного розв'язання задачі про пасивацію.

In the given paper results of investigations of evolution equations' system describing hydrogen passivation of silicon are presented. Using Lie group theory the explicit form of infinitesimal operators admitted by the system under constant hydrogen atom diffusivity in the sample is determined. Invariant solutions' classification and given system's reduction to the systems of ODEs are carried out. Possibility of analytical solution of passivation problem is shown.

Пасивація структурних дефектів у напівпровідниках є одним з поширених методів поліпшення електрофізичних характеристик матеріалів сонячної енергетики [1]. Зокрема, для полікристалічного кремнію, який володіє розвинутою структурою дефектів різного типу, пасивація в атмосфері атомарного водню значно покращує його електрофізичні параметри [2]. У багатьох випадках для визначення оптимальних умов пасивації необхідно проводити на основі адекватної моделі комп'ютерне моделювання процесів, що протікають у системі. Задача про пасивацію кремнію чисельно розв'язувалася в [3], проте не було враховано механізму розпаду комплексів "дефект-водень" [2], можливості участі в елементарному акті взаємодії декількох атомів водню [4] і залежності початкової концентрації дефектів від координати. Метою даної роботи є дослідження системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описують процес водневої пасивації кремнію в найбільш загальному випадку, з використанням математичного апарату теорії груп Лі [5].

Розглянемо квазіхімічну реакцію водневої пасивації кремнію у вигляді:

$$mH+T_1 \xleftrightarrow[b]{a} pT_2, \tag{1}$$

де H – атомарний водень, T_1 – складний дефект (взагалі кажучи, багатовалентний і такий, що вміщує також атоми H як складові), T_2 – пасивований дефект (не обов'язково електронейтральний), $a>0$, $b\geq 0$ – константи швидкості прямої і зворотної реакції відповідно, $m>0$, $p>0$ – раціональні стехіометричні коефіцієнти.

Одномірна диференціальна модель, що відповідає (1), має вигляд наступної системи еволюційних рівнянь:

$$\begin{cases} u_t = F + [Ku_x]_x - au^m[N(x) - v/p] + bv^p, \\ v_t = au^m[N(x) - v/p] - bv^p, \end{cases} \tag{2}$$

де u, v – концентрації вільного водню і пасивованих дефектів, $K=K(x,u,v)$ – коефіцієнт дифузії водню, $N(x)$ – початкова концентрація дефектів, $F=F(x,t,u,v)$ – швидкість надходження водню у зразок, нижні індекси t і x позначають часткові похідні по часу і координаті.

Координати (ξ,τ,φ,η) інфінітезимального оператора

$$X = \xi\partial_x + \tau\partial_t + \varphi\partial_u + \eta\partial_v, \tag{3}$$

що утворює групу, яка допускається системою (2), можуть бути знайдені згідно [5]. При цьому вигляд функції F не завжди довільниq і може бути визначеним на основі групової класифікації (2) по F [5,6].

Результати такої класифікації для різних значень вхідних параметрів (b, m, p, N, F) системи (2) при

$$K = \text{const} \neq 0 \tag{4}$$

наведені в таблиці 1, де використано такі позначення:

Таблиця 1. Координати (ξ,τ,φ,η) інфінітезимального оператора X в залежності від параметрів (b, m, p, N, F) системи (2).

№	b	m	p	$N(x)$	F	ξ	τ	φ	H
1	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$\forall F(x,u,v)$	0	C_3	0	0
2	$\forall$	$\forall$	$\forall$	C_6	$\forall F(t)$	C_2	0	0	0
3	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$\forall F(t)$	C_2	0	0	pC_2N_x
4	$\forall$	$\forall$	$\forall$	C_6	$\forall F(u,v)$	C_2	C_3	0	0
5	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$\forall F(u)$	C_2	C_3	0	pC_2N_x
6	$\forall$	$\forall$	m+1	N_0	$C_5\xi_0^{-2(m+1)/m}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_2
7	$\forall$	$\forall$	m+1	N_0	$C_5\,\tau_0^{-(m+1)/m}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_0
8	$\forall$	$\forall$	m+1	N_0	$C_5\,u^{m+1}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_0
9	$\forall$	$\forall$	m+1	N_0	$C_5\,v^{m+1}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_0
10	$\forall$	1	1	N_1	$C_5\,\xi_0^{-4}$	ξ_0	τ_0	φ_1	η_1
11	$\forall$	1	1	N_1	$C_5\,\tau_0^{-2}$	ξ_0	τ_0	φ_1	η_1
12	$\forall$	1	1	N_1	$C_5\,(u+b/a)^2$	ξ_0	τ_0	φ_1	η_1
13	$\forall$	1	1	N_1	$C_5(N_1-v)^2$	ξ_0	τ_0	φ_1	η_1
14	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$C_5\,\xi_0^{-2(m+1)/m}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_2
15	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$C_5\,\tau_0^{-(m+1)/m}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_2
16	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$C_5\,u^{m+1}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_2
17	0	$\forall$	$\forall$	$\forall$	$C_5(pN-v)^{m+1}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_2
18	0	$\forall$	$\forall$	N_0	$C_5\,v^{m+1}$	ξ_0	τ_0	φ_0	η_0

$$
\begin{aligned}
&\xi_0 = C_1x + C_2,\quad \tau_0 = 2C_1t + C_3,\\
&\varphi_0 = -2C_1u/m,\quad \varphi_1 = -2C_1(u + b/a),\\
&\eta_0 = -2C_1v/m,\quad \eta_1 = -2C_1[v + N(x)],\\
&N_0 = C_4\xi_0^{-2/m},\quad N_1 = C_4\xi_0^{-4},\\
&\eta_2 = p\xi N_x - 2C_1[v - pN(x)]/m,
\end{aligned}
\tag{5}
$$

де $C_1...C_6$ - деякі постійні.

Знання координат інфінітезимального оператора (3) для конкретного набору вхідних параметрів гарантує зведення (2) до системи звичайних диференціальних рівнянь шляхом процедури редукції [5]. Це означає, що за допомогою даних таблиці 1 може бути отримана скінчена кількість інваріантних розв'язків задачі про водневу пасивації при умові незмінного коефіцієнту дифузії атомів водню (4).

З аналізу таблиці 1 також випливає, що для вихідної системи рівнянь існують стаціонарні, бездифузні, автомодельні розв'язки та розв'язки типу біжучої хвилі.

Система для знаходження стаціонарних (при $t\to\infty$) розв'язків визначається згідно оператора №1 і має вигляд:

$$
\begin{cases} u_{xx} = -F(x,u,v)/K, \\ bv^p + (v/p - N(x))au^m = 0. \end{cases} \tag{6}
$$

Бездифузні ($K\to 0$) розв'язки (2) визначаються згідно операторів №2-5 таблиці 1:

а) для N=const, $\forall b$:

$$
\begin{cases} u_t = F(t,u,v) - au^m(N - v/p) + bv^p, \\ v_t = au^m(N - v/p) - bv^p; \end{cases} \tag{7}
$$

б) для N=$N(x)$, b=0:

$$
\begin{cases} u_t = F(t,u,q) - au^m q, \\ -pq_t = au^m q; \end{cases} \tag{8}
$$

де $q=N(x)-v/p$ – диференціальний інваріант.

Біжучі хвилі для вихідної системи – це розв'язки (№ 4,5 таблиці 1), залежні від інваріанту $z=x-ct$, де $c\neq 0$ – швидкість біжучої хвилі [5].

Система для їх визначення має вигляд:

а) при N=const, $\forall b$:

$$
\begin{cases} -cu_z - cv_z = F(z,u,v) + Ku_{zz}, \\ -cv_z = au^m(N - v/p) - bv^p; \end{cases} \tag{9}
$$

б) при N=$N(x)$, b=0, $q=N(x)-v/p$:

$$
\begin{cases} -cu_z = F(z,u,q) + Ku_{zz} - au^m q, \\ cpq_z = au^m q. \end{cases} \tag{10}
$$

Автомодельні розв'язки для системи (2) знаходяться після переходу до набору інваріантів (C_1=1, C_3=0):

$$
z = (x + C_2)t^{-1/2}, \tag{11}
$$

а) № 7-9, 18 таблиці 1:

$$
w = ut^{1/m},\quad q = vt^{1/m}, \tag{12}
$$

б) № 6, 14-17 таблиці 1:

$$w = ut^{1/m}, \quad q = [pN(x) - v]t^{1/m}, \qquad (13)$$

в) № 10-13 таблиці 1:

$$w = (u + b/a)t, \quad q = [N(x) - v]t. \qquad (14)$$

Наприклад, після редукції системи (2) інваріантами оператора №17 маємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{cases} -zw_z - 2w/m - zq_z - 2q/m = 2C_5 q^{m+1} + 2Kw_{zz}, \\ -zq_z - 2q/m = 2aw^m (C_4 z^{-2/m} - q/p). \end{cases}$$

Отримані після редукції системи звичайних диференціальних рівнянь у багатьох випадках можуть бути розв'язані аналітично.

Так, наприклад, загальний розв'язок (8) при m=1 має вигляд:

$$\begin{cases} u(t) = R(t) + Q_t/(kQ + C_8), \\ v(t) = pN(x) - Q_t/(kQ + C_8), \end{cases} \qquad (15)$$

де $R(t) = \int F(t)dt + C_7$, $Q = \int \exp(-k\int R(t)dt)dt$, C_7, C_8 – постійні, що визначаються з початкових умов, k=a/p.

Загальний розв'язок системи (10) при m=1 для $F(z)$, що задовольняє умові

$$\int F(z)dz = 2c^3 p/(aK) - KF(z)/(2c), \qquad (16)$$

для функцій u і v може бути представлений у параметричному виді:

$$\begin{cases} F(k) = 2cF_0 I^2(k), \\ z(k) = -K\ln[\pm I(k)]/c \equiv x - ct, \\ u(k) = -c^2 p[2 + E^{-1}(k)I(k)]/(aK), \\ v(k) = pN(x) - K\exp(k)I^2(k)/c, \\ I(k) = \int E(k)dk + C_9, \\ E(k) = -\dfrac{c}{K}\sqrt{\dfrac{cp}{2a}}[\exp(k) + F_0 k + C_{10}]^{-1/2}, \end{cases} \qquad (17)$$

де k – параметр, F_0=const – величина, яка характеризує потужність джерела атомів водню, C_9, C_{10} – постійні, що визначаються з початкових умов.

У випадку F=$F(z)$ система (6) може бути безпосередньо проінтегрована:

$$\begin{cases} u(x) = -K^{-1}\int\int_0^x (F(s)ds)dx + C_{11}x + C_{12}, \\ bv^p(x) + [v(x)/p - N(x)]au^m(x) = 0, \end{cases} \qquad (18)$$

де C_{11}, C_{12} – постійні, які визначаються з граничних умов, а точний вигляд загального розв'язку для $v(x)$ залежить від конкретних значень постійних a, b, m, p і вигляду функції $N(x)$.

Отже, в роботі проведено аналіз системи еволюційних рівнянь, що описують процес водневої пасивації кремнію, за допомогою теорії груп Лі. Визначені координати допустимих інфінітезимальних операторів, на основі яких проведено класифікацію інваріантних розв'язків. Для всіх типів інваріантності виконано процедуру редукції вихідної системи до систем звичайних диференціальних рівнянь, для яких продемонстровано можливість існування аналітичних розв'язків.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *De Pauw P.*, *Mertens R.*, *Van Overstraeten R.* Effects of grain boundaries and intragrain defects in silicon for photovoltaic applications // In Silicon processing for photovoltaics II. V.6. Materials processing, theory and practices / Edited by C.P.Khattak, K.V.Ravi. - Amsterdam: North-Holland Physics Publishing, 1987.
2. *Katz E.*, *Koltun M.*, *Polyak L.* Polycrystalline Silicon solar cells: Improvements in efficiency through hydrogen passivation // Solid State Phenomena. - 1996. - **51**-**52**. - P.479-484.
3. *Kalejs J.P.*, *Rajendran S.* Model for diffusion trapping of hydrogen in crystalline silicon // Appl. Phys. Lett. - 1989. - **55**. - P.2763-2765.
4. *Андрюшин Е.А.*, *Силин А.П.* Физические проблемы солнечной энергетики // УФН. - 1991. - **161**,вып. 8. - С.129.
5. *Олвер П.* Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям. - М.: Мир, 1989.
6. *Овсянников Л.В.* Групповой анализ дифференциальных уравнений. - М.: Наука, 1978.