Р. Т. Сибатов, В. В. Учайкин (Ульяновск, УлГУ). **Дробно-дифференциальная модель диффузии водорода в неупорядоченных полупроводниках и диэлектриках.**

Дисперсионный характер диффузии нейтральных атомов и ионов водорода (H, H^+) в структурах, содержащих неупорядоченные полупроводники и диэлектрики, обусловлен энергетическим распределением центров захвата [1]–[3]. Примером таких систем могут служить: аморфный гидрированный кремний ($a - Si : H$) в солнечных батареях, оксид кремния (SiO_2) в МОП-транзисторах (металл-окисел-полупроводник) и др. Как отмечается в [1], коэффициент диффузии водорода D_H в $a - Si : H$ уменьшается по степеннному закону с ростом времени отжига. В теории нестабильности отрицательного смещения полевых МОП-транзисторов сдвиг порогового напряжения объясняется [3] образованием заряженных поверхностных состояний. Процесс управляется дисперсионной диффузией в окисле SiO_2 нейтральных атомов водорода H. Сдвиг порогового напряжения ΔV_{th} пропорционален плотности поверхностных состояний $N_i(t)$ на границе Si/SiO_2. Плотность поверхностных состояний, в свою очередь, связана с концентрацией атомов водорода $f(x,t)$ соотношением: $N_i(t) = \int_0^L f(x,t)\,dx$, где L — толщина окисла.

Дисперсионная диффузия водорода в [1] описывается гауссовым пакетом частиц и обычным уравнением диффузии, но с переменным коэффициентом $D_H(t)$. В этом случае встает вопрос о физическом смысле изменения со временем коэффициента диффузии; $D_H(t)$ уже не является только параметром среды, но и характеризует сам процесс переноса. Авторы [3] рассматривают диффузию водорода в SiO_2 как процесс, управляемый захватом на распределенные по энергии локализованные состояния. Этот подход, по сути, аналогичен модели многократного захвата при описании дисперсионного переноса носителей заряда в неупорядоченных полупроводниках. В [3] применяется «основное уравнение дисперсионного переноса» теории Архипова и Руденко, плотность локализованных состояний водорода считается экспоненциальной. Для применимости используемого в [3] уравнения необходимо привлекать предположение о том, что большинство частиц H или H^+ оказываются захваченными на достаточно глубокие состояния (ниже демаркационного уровня), термическое освобождение с которых к моменту t остается маловероятным.

В работе, представленной данным сообщением, из балансных уравнений захвата и высвобождения H и H^+ в модели термоактивированных прыжков (см., например, [2]) получено *дробно-дифференциальное уравнение* дисперсионного переноса водорода с постоянным коэффициентом диффузии:

$$\frac{1}{K}\frac{\partial^\alpha f(\mathbf{r},t)}{\partial t^\alpha} = -\mathbf{v}\nabla f(\mathbf{r},t) + D_H \nabla^2 f(\mathbf{r},t) + \delta(\mathbf{r})\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}, \qquad 0<\alpha<1,$$

где

$$\frac{\partial^\alpha f(\mathbf{r},t)}{\partial t^\alpha} = \Gamma(1-\alpha)\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t f(\mathbf{r},\tau)(t-\tau)^{-\alpha}\,d\tau$$

есть дробная производная Римана–Лиувилля, α — дисперсионный параметр, $f(\mathbf{r},t)$ — нормированная на единицу концентрация водорода, $\mathbf{v}$ и D_H — дрейфовая скорость и коэффициент диффузии делокализованных H или H^+, K — постоянная, выражающаяся через параметры распределения ловушек. При выводе уравнения плотность локализованных состояний H и H^+ считалась экспоненциальной. Такая плотность приводит к степенным распределениям времен ожидания. Дробная производная в уравнении дисперсионного переноса, по существу, является следствием распределения по закону со степенной асимптотикой времен пребывания H и H^+ в локализованных состояниях.

Для полученных дробно-дифференциальных уравнений дисперсионного переноса водорода найдены фундаментальные решения, которые выражаются через устойчивые и дробно-устойчивые плотности распределения. Например, в одномерном случае решение дробно-дифференциального уравнения дисперсионной диффузии имеет вид:

$$f(x,t) = \frac{t}{\alpha(C|x|)^{1+2/\alpha}} g^{(\alpha/2)}\Big(t(C|x|)^{-2/\alpha}\Big), \tag{1}$$

где C — определенная константа, $g^{(\alpha)}(t)$ — односторонняя устойчивая плотность с характеристическим показателем α, трансформанта Лапласа которой имеет вид: $\exp\{-s^{\alpha}\}$. Сама плотность $f(x,t)$ является дробно-устойчивой (подробнее см. [5]).

Отметим, что во всех трех подходах (применяемых в работах [1], [2], [3] и настоящей) ширина диффузионного пакета, изменяется со временем по степенному закону $\Delta \propto t^{\alpha/2}$, $0 < \alpha \leqslant 1$. Параметр α обычно определяется из экспериментальных данных. Форма пакета в модели Архипова и Руденко и гауссова форма в подходе Джексона и Какалиоса не зависят от дисперсионного параметра, от α зависит только скорость диффузионного расширения.

Графики плотностей (1), приведенных к одинаковой (равной 2) дисперсии, представлены на рис. В пределе $\alpha \to 1$ форма пакета (1) приобретает гауссов вид, характерный для упорядоченных (кристаллических) структур; в другом пределе $\alpha \to 0$ она переходит в решение Архипова и Руденко. В этой способности описания возможных промежуточных структур заключается одно из достоинств дробно-дифференциальной модели. Другое ее достоинство — не зависящий от времени и координат «коэффициент диффузии», позволяющий представить решение через хорошо изученные дробно-устойчивые распределения.

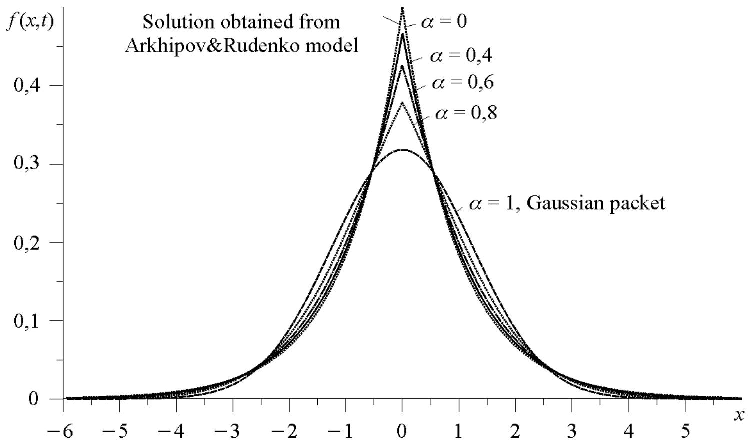

Рис. Плотности распределения $f(x,t)$ для различных значений дисперсионного параметра

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 07–01–00517.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Какалиос Дж.*, *Джексон У.* Модель водородного стекла. — В кн.: Аморфный кремний и родственные материалы. /Под ред. Х. Фрицше. М.: Мир, 1991, 544 с.
2. *Джексон У.*, *Какалиос Дж.* Кинетика образования метастабильных дефектов, индуцированных носителями, в гидрированном аморфном кремнии. — В кн.: Аморфный кремний и родственные материалы. /Под ред. Х. Фрицше. М.: Мир, 1991, 544 с.
3. *Kaczer B.*, *Arkhipov V.*, *Degraeve R.*, *Gollaert N.*, *Groeseneken G.*, *Goodwin M.* Temperature dependence of the negative bias temperature instability in the framework of dispersive transport. — Appl. Phys. Lett, 2005, v. 86, 143506.

4. *Сибатов Р. Т.*, *Учайкин В. В.* Дробно-устойчивые распределения в теории дисперсионного переноса заряда в неупорядоченных полупроводниках. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2005, т. 12, в. ?, с. 1085–1087.
5. *Учайкин В. В.* Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы. — Успехи физ. наук, 2003, т. 173, с. 847–876.