

Lösungen zur Übung 4.2-2:

Anwendung des 2. Fickschen Gesetzes

Zeige, dass der folgende Ausdruck die Lösung des Diffusionsproblems: Eindiffusion von außen; "unendliche Quelle ist

$$n(x, t) = (n_{\infty} - n_0) \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2(D \cdot t)^{1/2}} \right) \right) + n_0$$

Illustration

- Der Ausdruck "**erf**" steht dabei für "**Errorfunction**" oder **Gaußsche Fehlerfunktion**; eine tabellierte Funktion mit folgender Definition:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \cdot \int_0^x \exp -x'^2 \cdot dx'$$

Erstmal definieren wir das Problem etwas schärfer und allgemeiner:

- Wir betrachten $n(x, t)$, d. h. wir werden das 2. Ficksche Gesetz benötigen:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta n$$

- In n_{∞} und n_0 "verstecken" sich die Randbedingungen. Offenbar (nachdenken!) ist ihre Bedeutung wie folgt:
 - $n_0 = n(x, t = 0)$; d.h. es beschreibt die örtlich konstante **As**-Grundkonzentration im **Si** zu Beginn der Diffusion (muss ja nicht unbedingt = 0 sein).
 - $n_{\infty} = n(x = , t)$; d.h. es beschreibt die **As**-Konzentration auf der Oberfläche zu allen Zeiten. Da es konstant ist, haben wir eine unerschöpfliche Quelle.
- Damit ist alles klar, die Lösung erhalten wir wie folgt:

Lösungen

a) Diffusionsgleichung

zu zeigen sind zwei Bedingungen:

- i) Die gegebene Gleichung $c(x, t)$ erfüllt die Diffusionsgleichung und
- ii) die gegebenen Randbedingungen werden von $c(x, t)$ erfüllt.

zu i)

$$\text{Hinweis I: } \frac{d}{dz} \int_0^{g(z)} f(y) dy = f(g(z)) \cdot \frac{dg}{dz}(z)$$

$$\text{mit } g(z) = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad \text{und} \quad f(y) = \exp(-y^2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(c_\infty - c_0) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \cdot \frac{x}{2\sqrt{D}} \left(-\frac{1}{2}t^{-\frac{3}{2}}\right) \right)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = -(c_\infty - c_0) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \cdot \frac{1}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = (c_\infty - c_0) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \cdot \frac{1}{2\sqrt{Dt}} \cdot \frac{2x}{4Dt} \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} &= -\frac{2}{\sqrt{\pi}} (c_\infty - c_0) \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \cdot \left[-\frac{x}{4\sqrt{D}t^{\frac{3}{2}}} - D \frac{-2x}{8D^{\frac{3}{2}}t^{\frac{3}{2}}} \right] \\ &= 0 \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

zu ii) Randbedingungen:

$$\text{I: } c_0 = c(x, t = 0)$$

$$c(x, t = 0) = (c_\infty - c_0) \cdot \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-y^2) dy \right) + c_0 \quad - \text{ mit Hinweis II}$$

$$= (c_\infty - c_0) \cdot \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) + c_0$$

$$= c_0 \quad \text{q.e.d.}$$

$$\text{II: } c_\infty = c(x = 0, t)$$

$$c(x = 0, t) = (c_\infty - c_0) \cdot \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^0 \exp(-y^2) dy \right) + c_0$$

$$= c_\infty \quad \text{q.e.d.}$$