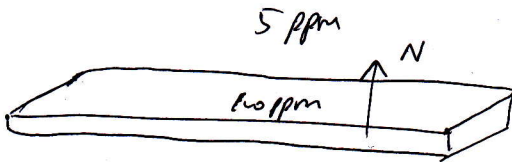


1.

(a)

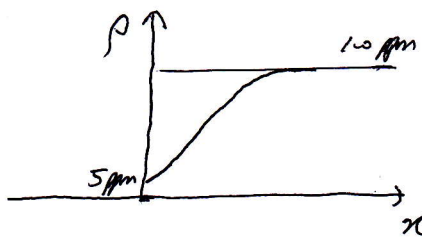


N 이 N_2 가 되는 과정은 빠르게, 바닥과 가장자리에서의 N 손실이 없으므로 위를 통과 N 이 확산되는 것만 고려. (Diffusion out process - Semi Infinite Source)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

(x : 윗면을 기준으로 하여 시편의 두께 방향)

$$0 \leq x < 1 \text{ cm}, t \geq 0$$

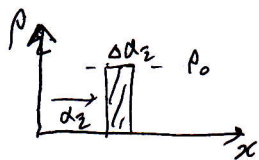


$$\rho(x > 0, t = 0) = 100 \text{ ppm}$$

$$\rho(x = 0, t) = 5 \text{ ppm}$$

(b) Thin film source (planar source)에서 $\rho(x, t) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$

1cm는 충분히 두꺼우므로 ∞ 로 간주 (semi-infinite source)



무한개의 thin film을 중첩시 $\rho(x, t)$

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \sum_{-\infty}^{\infty} \rho_2 = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{P_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-\alpha)^2}{4Dt}\right) \Delta \alpha_2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-\alpha)^2}{4Dt}\right) d\alpha \end{aligned}$$

$$\frac{x-\alpha}{\sqrt{4Dt}} = k, \quad -d\alpha = \sqrt{4Dt} dk$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \rho(x, t) &= -\frac{P_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^{-\infty} \exp(-k^2) dk \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}} \exp(-k^2) dk \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{\pi}} \left\{ \int_{-\infty}^0 \exp(-k^2) dk + \int_0^{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}} \exp(-k^2) dk \right\} \\ &= \frac{P_0}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) \right\} \\ &= \frac{P_0}{2} + \frac{P_0}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) \end{aligned}$$

$$x=0 \text{ 일 때 } \rho(0, t) = \frac{P_0}{2} \text{ 인 것임.}$$

$p(x,t) = A + B \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$ 에 boundary condition 대입해 구한다.

$$\begin{cases} p(x=0, t=0) = A + B = 100 \\ p(x=0, t) = A = 5 \end{cases}$$

$$\Rightarrow A = 5, B = 95$$

$$\therefore p(x,t) = 5 + 95 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad [\text{ppm}]$$

(c) N의 농도가 서서히 줄어들어 시편 한 지점에서의 농도를 평균 값으로 간주.

$$p(0.5, t) = 5 + 95 \operatorname{erf}\left(\frac{0.5}{2\sqrt{Dt}}\right) = \frac{1}{2} \cdot 100 = 50$$

$$\rightarrow \operatorname{erf}\left(\frac{0.5}{2\sqrt{Dt}}\right) = \frac{45}{95}$$

$z < 0.6$ 일 때 $\operatorname{erf}(z) \approx z$ 이므로

$$\operatorname{erf}\left(\frac{0.5}{2\sqrt{Dt}}\right) \approx \frac{0.5}{2\sqrt{Dt}} = \frac{45}{95}$$

$$\rightarrow \sqrt{t} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{4 \times 10^{-11}}} \cdot \frac{95}{45}$$

$$\rightarrow t = 6963145 = 193.4 \text{ hr}$$

(d) 50% 농도로 강조하는데 걸리는 시간은 짧아질 것이다.

Diffusivity가 질소 농도에 따라 증가하면, x에 따라 Diffusivity가 달라져 지금까지 구한 $p(x,t)$ 를 사용할 수 없게만 그로 인한 error는 작을 것이므로 (c)의

$p(x,t)$ 사용.

(c)에서 $\sqrt{t} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{4 \times 10^{-11}}} \cdot \frac{95}{45}$ 이므로 D가 클수록 t가 줄어든다.

결과 100 ppm 에서 50 ppm 으로 줄어드는 것은 Diffusivity가 커서 시간이 줄어든다. 질소 농도가 높을 지점이므로

2.

$$D = 4.529 \times 10^{-1} \exp(-141123/RT) \text{ [m}^2/\text{s]} \\ = 4.529 \times 10^{-3} \exp(-141123/RT) \text{ [cm}^2/\text{s]}$$

Target 조성 0.03일때의 거리: Injection distance

T = 1173 K	→ D = 1.19541 × 10 ⁻⁹ cm ² /s
1273	3.92924 × 10 ⁻⁹
1373	1.08593 × 10 ⁻⁸
1473	2.61426 × 10 ⁻⁸

20 시간 (72000s) 에 대해 시뮬레이션 진행.

Injection distance는 확산 거리 개념 ($\sqrt{Dt}$)와 유사하므로 다음 관계가 예상됨.
(L)

① $L \propto \sqrt{t}$

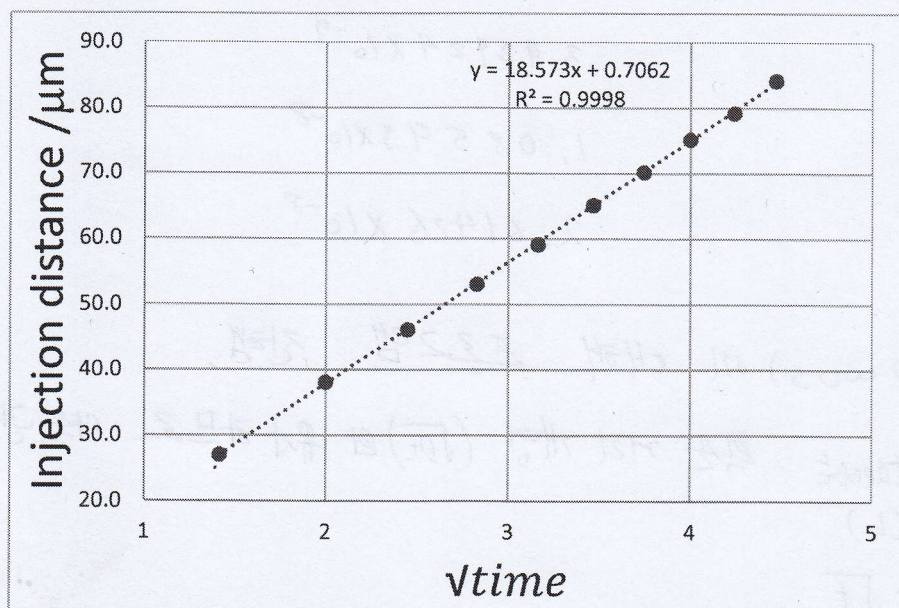
② $L \propto \sqrt{D} = \sqrt{D \cdot \exp(-Q/RT)}$

$L \propto \sqrt{e^{-Q/RT}}$

$\ln(L^2) \propto 1/T$

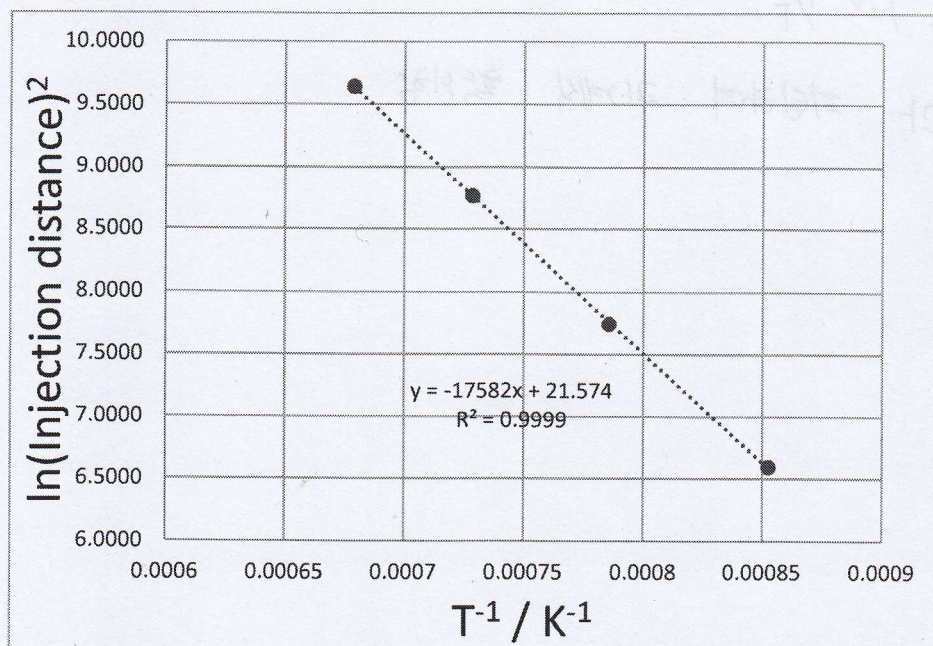
시뮬레이션 결과 피팅하여 관계식 확인함.

(a)	time /s	time /hr	time^(1/2)	Injection distance / μm
1173K	7199.589	2.0	1.414173198	27.1
	14399.178	4.0	1.999942916	38.1
	21598.767	6.0	2.449419829	46.1
	28798.356	8.0	2.828346396	53.1
	35997.945	10.0	3.162187402	59.1
	43197.534	12.0	3.464002742	65.1
	50397.123	14.0	3.741550592	70.1
	57596.712	16.0	3.999885832	75.2
	64796.301	18.0	4.242519593	79.2
	71995.89	20.0	4.472008311	84.2



Injection distance $\propto \sqrt{t}$

(b)	Temperature / K	Injection distance / μm	1/Temperature	$\ln(\text{Injection distance})^2$
2hr	1173	27.1	0.000852515	6.5954
	1273	48.1	0.000785546	7.7466
	1373	80.16	0.000728332	8.7680
	1473	124.25	0.000678887	9.6446



$\ln(\text{Injection distance})^2$
 $\propto 1/T$

$$(c) \quad \tilde{l} \propto \sqrt{Dt} \rightarrow l = k \sqrt{Dt}$$

$$\text{Injection distance} = k \sqrt{D_0 \exp(-Q/RT) t}$$

$$l^2 = k^2 D_0 \exp(-Q/RT) t$$

$$\ln l^2 = \ln k^2 D_0 t - Q/RT$$

(b)의 데이터 $t = 7200 \text{ s}$, $T_1 = 1173 \text{ K}$ 일 때 $l_1 = 27.1$ 사용
 " $T_2 = 1213$ " $l_2 = 48.1$

$$\begin{cases} \ln l_1^2 = \ln k^2 D_0 t - Q/RT_1 \\ \ln l_2^2 = \ln k^2 D_0 t - Q/RT_2 \end{cases}$$

$$\ln l_1^2 - \ln l_2^2 = \frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$Q = \frac{R}{\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} (\ln l_1^2 - \ln l_2^2)$$

$$= 142917 \text{ J}$$

약 3%의 오차가 있지만, 이렇게 구한 Q는 affinity 실험 내 141123 J이라 볼 수 있다.
 활성화 에너지인