МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ И ИХ РОЛЬ В ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Ж.Р.АЛИЕВА

В работе проанализированы различные способы решения задач, относящихся к распределению примесей в полупроводнике после диффузии, соответствующие выбранному механизму и принятым граничным условиям. Представлены возможные пути по использованию рассмотренных методов расчета распределения примесей в создании приборных структур и ИМС при определенных технологических условиях.

The work contains different ways of solving the problems dealing with the distribution of impurities in the semiconductors after diffusion which correspond to the chosen mechanism and adopted border conditions. The article represents possible ways of using methods of calculating distribution of impurities in the construction of instrument structures and IMS under definite technological conditions discussed here.

Высокотемпературная или низкотемпературная диффузия различных, в том числе легирующих примесей в объем полупроводника является традиционно развитым способом стимулирования их электропроводности, формирования областей противоположных типов проводимости, т.е. электронно-дырочных контактов или даже наноразмерных объемных структур [1-2]. Для достижения воспроизводимости параметров соответствующих слоев полупроводника и, следовательно, электронных приборов и интегральных микросхем (ИМС) требуются многочисленные эксперименты, сопровождающиеся неизбежными потерями дорогостоящего материала, энергии и т.п. Альтернативным способом выбора оптимальных технологических режимов термической диффузии примесей является предварительный расчет распределения примесей после термической диффузии. Для выполнения численных расчетов целесообразно выводить соответствующие уравнения и их приближенные решения, описывающие технологические процессы, учитывающие их физические механизмы и граничные условия, чему посвящена настоящая работа.

Для математического описания процессов диффузии традиционно используются два дифференциальных уравнения Фика. Первое уравнение записывается в виде [3-4]:

$$J = -D \operatorname{grad} N \qquad (1)$$

где J - плотность потока диффундирующего вещества, т.е. количество вещества, проходящего за единицу времени через единичную площадь поверхности, перпендикулярной направлению переноса вещества; N - концентрация атомов примеси; D - коэффициент диффузии.

Физический смысл уравнения (1) заключается в том, что первопричиной диффузионного массопереноса вещества является градиент его концентрации. А темп переноса пропорционален градиенту концентрации, в качестве коэффициента пропорциональности вводится коэффициент диффузии. Знак минус в правой части (1) указывает на то, что диффузия происходит в направлении убывания концентрации. Другими словами, диффузия идет в направлении системы достичь физико-химического равновесия. Процесс будет продолжаться до тех пор, пока химические потенциалы компонентов всей системы не станут равными. Уравнение (1) описывает стационарный процесс, параметры которого не зависят от времени.

Коэффициент диффузии определяет плотность потока вещества при единичном градиенте концентрации и является мерой скорости выравнивания градиента концентрации. В общем случае диффузия анизотропна и коэффициент диффузии - симметричный тензор второго ранга.

По микроскопическому определению, компонент D_x коэффициент диффузии D по координате x связан со среднеквадратичным смещением $\overline{\Delta x^2}$ диффундирующих атомов по координате x и интервалом времени Δt, в течение которого это смещение произошло соотношением

$$D_x = \overline{\Delta x^2} / \Delta t$$

Когда концентрация вещества изменяется только в одном направлении и при диффузии в изотропной среде первое уравнения Фика имеет следующий вид:

$$J = -D\frac{\partial N}{\partial x} \qquad (2)$$

В простейших моделях процессов легирования в технологии изготовления полупроводниковых приборов и ИМС предполагаются именно такие условия диффузии.

Второе уравнение диффузии получается путем сочетания первого закона и принципа сохранения вещества, согласно которому изменение концентрации вещества в данном объеме должно быть равно разности потоков этого вещества на входе в объем и выходе из него. В общем случае второе уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = grad(D \cdot gradN) \qquad (3)$$

Для одномерной диффузии в изотропной среде уравнение (3) можно записать как:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial N}{\partial x}\right) \qquad (4)$$

Второй закон Фика характеризует процесс изменения концентрации диффундирующей примеси во времени в различных точках среды и является математической моделью нестационарного состояния системы.

При постоянстве коэффициента диффузии *D* уравнение (4) упрощается:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \qquad (5)$$

Допущение о постоянстве коэффициента диффузии справедливо в большом количестве случаев, анализируемых в технологии ИМС.

Уравнения диффузии являются чисто феноменологическими, т.е. они не содержат никаких сведений о механизмах диффузии - о диффузионном процессе на атомном, уровне. Уравнения (1) - (5) не содержат информации о зарядовом состоянии диффундирующих частиц.

Процессы диффузии, используемые для изготовления ИМС, обычно анализируются с помощью частных решений уравнения (5) т.к., в отличие от (2), именно оно содержит важный параметр - время установления некоторого анализируемого состояния системы. Основная цель решения уравнения - найти распределение примеси *N(x,t)* в полупроводнике после диффузии в течение определенного времени *t* при различных условиях осуществления процесса.

Общее решение уравнения (5) для бесконечного твердого тела при заданном в общем виде начальном распределении примеси *N(x,0) = f(x)* может быть найдено методом разделения переменных. Оно имеет вид:

$$N(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi)\exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right]d\xi \ , \qquad (6)$$

где ξ текущая координата интегрирования.

Бесконечным в одномерном представлении называют тело, простирающееся от *x = 0* до *x* = - ∞ и до *x* = + ∞. При поиске распределения концентрации примеси в полупроводнике необходимо решение уравнения (5) для полубесконечного твердого тела. Полубесконечным в одномерном представлении называют тело, простирающееся от *x = 0* до *x* = + ∞. Для этого случая выражение (6) принимает вид:

$$N(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi)\left\{\exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] \pm \exp\left[-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right]\right\}d\xi \qquad (7)$$

Знак плюс в выражении (7) относится к ситуации, когда граница твердого тела *(x = 0)* является непроницаемой для диффундирующего вещества, находящегося в области *x > 0,* а знак минус - к случаю, когда на границе твердого тела в любой момент времени концентрация диффундирующего вещества, также находящегося в области *x > 0,* равна нулю.

Указанные решения позволяют находить распределение примеси в твердом теле при любых начальных условиях. Решение конкретной задачи сводится к подстановке в (6) или (7) соответствующих ситуации начальных условий с последующими очень громоздкими преобразованиями.

Существуют различные способы решения уравнений, учитывающие соответствующие механизмы и позволяющие выполнять численные расчеты. Целесообразно анализировать наиболее распространенные из них.

Рассмотрим распределение примеси при диффузии из полубесконечного пространства. Диффундирующая примесь поступает в полубесконечное тело через плоскость $x = 0$ из второго полубесконечного тела с равномерным распределением примеси. Концентрация примеси в источнике - N_o. Полагается, что в объеме материала нет рассматриваемой примеси. Начальное распределение концентраций для этого случая задается в виде

$$N(x,0) = N_o \text{ для } x<0$$
$$N(x,0) = 0 \text{ для } x>0$$

Решением уравнения (5) для этого случая можно получить выражение:

$$N(x,t) = \frac{N_o}{2}\left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\frac{x}{2\sqrt{Dt}}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) d\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)\right] \quad (8)$$

Второе слагаемое в квадратных скобках называют интегралом ошибок Гаусса или, иначе, функцией ошибок и сокращенно обозначают *erf (z).* В соответствии с сокращением это распределение называют *erf* - распределением.

$$\operatorname{erf} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z \exp\left(-y^2\right) dy \quad (9)$$

В математике часто используют как самостоятельную и другую функцию

$$erfc\ (z) = 1 - erf\ (z)\ , \quad (10)$$

которая называется дополнением функции ошибок до единицы или дополнительной функцией ошибок.

Так, выражение (8) можно записать в виде:

$$N(x,t) = \frac{N_o}{2}\left(1 - \operatorname{erf}\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) = \frac{N_o}{2}\operatorname{erfc}\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (11)$$

Величина $\sqrt{Dt}$ имеет размерность длины и носит название диффузионной длины или длины диффузии.

Рассмотренное решение можно использовать как простейшую модель, представляющую распределение примеси в автоэпитаксиальной структуре. При этом, в качестве независимых источников примеси выступает как подложка, так и эпитаксиальный слой. Процессы диффузии с каждой стороны рассматриваются в этом случае как не зависящие друг от друга, а реальное распределение примесей на границе раздела будет представлять собой сумму отдельных решений.

Рассмотрим распределение примеси при диффузии из постоянного источника в полубесконечное тело. Диффузант поступает в полубесконечное тело через плоскость $x = 0$ из источника, обеспечивающего постоянную концентрацию примеси N_o на поверхности раздела твердое тело - источник в течение любого времени. Такой источник называют бесконечным или источником бесконечной мощности. При этом считается, что в материале тела нет рассматриваемой примеси. Начальное распределение концентраций и граничные условия для этого случая задаются в виде

$$N(x,t) = N_o \text{ для } x=0$$

$N(x,0) = 0$ для $x>0$

Решением уравнения (11) для данных условий является выражение:

$$N(x,t) = N_o \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \qquad (12)$$

Если в объеме полупроводникового материала до диффузии имелась примесь противоположного типа по отношению к диффундирующей, эта примесь распределена по объему равномерно и её концентрация равна N_b, то в этом случае в полупроводнике образуется электронно-дырочный переход. Его положение (глубина залегания) x_j определяется условием $N(x,t)=N_b$, откуда

$$\frac{N_b}{N_o} = \operatorname{erfc} \frac{x_j}{2\sqrt{Dt}} \qquad (13)$$

и

$$x_j = 2\sqrt{Dt} \cdot \operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{N_b}{N_o}\right) \qquad (14)$$

здесь запись erfc^{-1} обозначает аргумент z функции erfc.

При решении практических задач, связанных с анализом диффузионных процессов необходимо знать количество примеси Q, накопленной в твердом теле при диффузии в течение времени t. Эта величина определяется по формуле:

$$Q = \int_o^t J(0,t)dt \qquad (15)$$

где $J(0,t)$ - поток диффузии примесей в объем через плоскость $x=0$

$$J(0,t) = -D\frac{\partial N}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \frac{DN_o}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)^2\bigg|_{x=0} = N_o\sqrt{\frac{D}{\pi t}} \qquad (16)$$

отсюда

$$Q = \int_o^t N_o\sqrt{\frac{D}{\pi t}}dt = 2N_o\sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \qquad (17)$$

Следует обратить внимание на возрастающее со временем значение накопленной в диффузионном слое примеси при диффузии с данными граничными условиями.

Данная модель диффузионного процесса с постоянным источником описывает процесс диффузионного легирования полупроводникового материала из газовой или паровой фазы. Этот процесс используется при создании сильно легированных диффузионных слоев с поверхностными концентрациями N_o, близкими к значениям предельной твердой растворимости примеси в данном полупроводниковом материале.

Твердое тело можно считать полубесконечным (или бесконечным) в том случае, если его размеры в направлении движения диффузанта много больше длины диффузии.

Рассмотрим распределение примеси при диффузии из слоя конечной толщины в полубесконечное тело с отражающей границей. Диффундирующая примесь поступает в полубесконечное тело из источника, который представляет собой примыкающий к границе тела слой толщиной h, примесь в котором распределена равномерно. Такой источник называют ограниченным, концентрация примеси в нем - N_o. При этом полагается, что в материале нет рассматриваемой примеси.

При абсолютно непроницаемой для диффузанта границе поток примеси через поверхность $x = 0$ должен обращаться в нуль при всех $t \geq 0$

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial x}\bigg|_{x=0} = 0 \qquad \text{для } t \geq 0 \qquad (18)$$

Начальное распределение концентраций для рассматриваемого случая задаётся в виде

$$N(x,0) = N_o \text{ для } 0 \le x \le h$$
$$N(x,0) = 0 \text{ для } x>h$$

Граничным условием является, определяемое условием (18), постоянство количества примеси в источнике и полупроводнике $\int_0^\infty N(x,t)dx = Q$

Для реализации начального распределения такого типа диффундирующая примесь должна быть введена в полупроводник до начала диффузии.

Решением уравнения (11) в данной ситуации является выражение

$$N(x,t) = \frac{N_o}{2}\left(\operatorname{erfc}\frac{h-x}{2\sqrt{Dt}} + \operatorname{erfc}\frac{h+x}{2\sqrt{Dt}}\right) \qquad (19)$$

В отличие от диффузии из постоянного источника, при диффузии из слоя конечной толщины количество диффундирующих примесей ограничено значением $Q=N_oh$. В процессе диффузии происходит только его перераспределение и, следовательно, уменьшение со временем концентрации примеси на поверхности твердого тела.

Примером диффузии примеси из слоя конечной толщины в полубесконечное тело с отражающей границей является диффузия в кремниевую пластину из эпитаксиального, имплантированного или диффузионного слоя и покрытую слоем двуокиси кремния SiO_2 или нитрида кремния Si_3N_4. Границу пластины и пленки можно с большой долей правдоподобия принять отражающей, т.к. коэффициенты диффузии большинства примесей в кремнии на несколько порядков больше, чем в двуокиси и нитриде кремния. Однако, равномерность распределения примеси в источнике, особенно при его создании методом диффузии или имплантации - весьма грубое и вынужденное приближение.

Рассмотрим распределение примеси при диффузии из бесконечно тонкого слоя в полубесконечное тело с отражающей границей. Решение диффузионного уравнения при этих условиях выводится из предыдущего при $h \to 0$ и условии, что количество диффундирующих примесей в источнике $Q=N_oh$.

$$N(x,t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \qquad (20)$$

Приведенное выражение представляет собой Гауссово распределение.

В процессе диффузии тонкий слой на поверхности полупроводниковой пластины быстро истощается, наблюдается постоянное понижение поверхностной концентрации примеси в полупроводнике. Эту особенность данного процесса используют в полупроводниковой технологии для получения контролируемых значений низкой поверхностной концентрации примеси, например, для создания базовых областей кремниевых транзисторных структур дискретных приборов или ИМС.

На первом этапе процесса проводится кратковременная диффузия при пониженных температурах из постоянного источника, распределение примеси после которой описывается выражением (8). Значение N_o при этом велико и определяется в основном пределом растворимости данной примеси в полупроводнике. Этот этап часто называют загонкой. После окончания первого этапа пластины помещают в другую печь для последующей диффузии, обычно, при более высоких температурах. Таким образом, тонкий слой, полученный на первом этапе, является источником перераспределяемой примеси при проведении второй стадии процесса. Для создания отражающей границы второй этап, называемый разгонкой проводят в окислительной атмосфере, при этом на поверхности растет слой SiO_2.

На практике наблюдается заметное несоответствие между распределением примеси в источнике, сформированном при загонке, с вытекаемым из выражений (19) и (20) - ступенчатым. Несоответствие должно отразиться на точности описания реального распределения примеси после второй стадии диффузии выражением (20).

При моделировании двухстадийной диффузии и анализе результатов процесса предполагается, что выражение (20) достаточно точно соответствует реальному при условии, если величина произведения D_1t_1 для первого этапа процесса легирования значительно меньше, чем D_2t_2 для второго, т.е. $(D_2t_2 / D_1t_1) \geq 100$. Это условие быстрой истощаемости источника. В этом случае, учитывая, что количество накопленной при первом этапе примеси определяется соотношением

$$Q = 2N_o\sqrt{\frac{D_1t_1}{\pi}}$$

из (20) получим:

$$N(x,t) = \frac{2N_o}{\pi}\sqrt{\frac{D_1t_1}{D_2t_2}}\exp\left(-\frac{x^2}{4D_2t_2}\right) \qquad (21)$$

Если продолжительность второй стадии не очень велика по сравнению с первой, или, иными словами, $D_2t_2 << D_1t_1$, предположение о том, что диффузионный слой, образовавшийся в результате загонки, будет вести себя как тонкий источник, неверно. В этом случае решение диффузионного уравнения будет выглядеть следующим образом:

$$N(x,t_1,t_2) = N_o\frac{2}{\pi}\int_b^\infty \exp(-m^2)\cdot\operatorname{erf}(a\cdot m)dm \qquad (22)$$

где $a = \sqrt{\frac{D_1t_1}{D_2t_2}}$ и $b = \frac{x}{2\sqrt{D_1t_1 + D_2t_2}}$.

Поверхностная концентрация примеси после второй стадии диффузии выражается при данных условиях соотношением

$$N_s = \frac{2N_o}{\pi}\operatorname{arctg}\sqrt{\frac{D_1t_1}{D_2t_2}} \qquad (23)$$

Выражение (19) используется для представления распределения при условии, что $D_1t_1 > D_2t_2$, а именно – $(D_2t_2 / D_1t_1) < 0{,}06$. При этом полагают, что $h = \sqrt{D_1t_1}$.

Таким образом, проанализированы различные способы решения задач о распределении примесей в полупроводнике после диффузии, соответствующие выбранному механизму и граничным условиям. Для получения количественного распределения примесей требуются соответствующие компьютерные расчеты при помощи уравнений (8), (11), (12), (19) или (20) – (23) с введением физических параметров материала и параметров выбранных технологических режимов. Показаны возможные пути использования рассмотренных методов расчета распределения примесей в создании приборных структур и ИМС при определенных технологических условиях.

Литература:

1. Барыбин, А.А. Электроника и микроэлектроника. Физико-технологические основы.- М.: Физматлит, 2006. - 424 с.
2. Бахадырханов М.К., Мавлонов Г.Х., Исамов С.Б., Илиев Х.М., Аюпов К.С., Сапарниязова З.М., Тачилин С.А. Электрофизические свойства кремния, легированного марганцем методом низкотемпературной диффузии. // Неорганические материалы, 2011, том 47, № 5, с. 545–550.
3. Болтакс, Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках.- Л.: Наука, 1972.- 384 с.
4. Колобов, Н.А. Диффузия и окисление полупроводников.- М.: Металлургия, 1975.- 456 с.

Андижон давлат университети,
2012 йил 5 сентябрда қабул қилинган
(Тақризчи: проф.)