ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭМПИРИЧЕСКИХ ДАННЫХ ОСНОВНЫХ ДИФФУЗИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ АТОМОВ НЕТРАДИЦИОННЫХ ПРИМЕСЕЙ В КРЕМНИИ

Ж.Алиева

Мақолада кремнийда ноанъанавий ҳисобланган 3d ўтиш элементлари атомларининг тажрибада аниқланган диффузия параметрларининг атомлар физик-кимёвий параметрларига боғланиши бўйича маълумотлар дифференциал таҳлил этилган.

Калит сўзлар: атомлар диффузияси, кремний, ўтиш элементлари, фаоллашиш энергияси, диффузия коэффициенти.

Выполнен дифференциальный анализ известных экспериментальных зависимостей диффузионных параметров от физико-химических параметров примесного атома в кремнии.

Ключевые слова*:*диффузия атомов, кремний, переходные элементы, энергия активации*, коэффициент диффузии.*

A differential analysis of the known experimental dependences of the diffusion parameters on the physicochemical parameters of the impurity atom in silicon is performed.

Key words: *atom diffusion, silicon, transition elements, activation energy, diffusion coefficient.*

Современные технологии полупроводникового приборостроения и разработка инновационных функциональных структур наноэлектроники нуждаются в более точных измерениях диффузионных параметров и новых физических моделях описания процесса. Изучение диффузионных про-

цессов в полупрводниковых структурах с различными наноразмерными включенияминаходится на стадии интенсивного развития [1, 2].

Анализ процессов диффузии развивается в направлении разработки более точных моделей, позволяющих реально оценивать механизм диффузионногопроцесса. Спектрометры способствуют достижению необходимой точности измерения профилей распределения внедренных в полупрводник-примесей. Известно, что, используя экспериментальные данные распределения примесных атомов в кристалле и соответствующие кинетические кривые, можно определить коэффициенты диффузии примесных атомов в данном материале [1].

Традиционно для анализа диффузионных параметров примесного атома в кремнии используются различные модификации метода наименьших квадратов [1.4]. Используются эмпирические данные, измеренные для определенного атома и условия выполнения эксперимента. Физический синтезэкспериментальных данных для одной группы или периода системы химических элементов позволяло построить обобщенные логические представления о процессах диффузии рассмотренных атомов в кремнии.

В данной статье в качестве нетрадиционных примесейрассмотрены атомы 3*d*переходных элементов. На основе дифференциального анализа известных экспериментальных зависимостей диффузионных параметров от физических параметров примесного атома в кремнии построены эмпирические уравнения для целого ряда 3*d*переходных элементов [4.6].

При этом предполагалось, что такой подход прояснит физическоесодержание процесса диффузии атомов. Необходимо выяснить основную роль известных физических параметров примесных атомов таких, как масса, порядковый номер, орбитальный радиус, валентность и электронная конфигурация внешних оболочек в определении их основных диффузионных параметров в кремнии.

Результаты расчета показали, что значения коэффициента диффузии D_o(x) и энергии активации E(x) уменьшаются с ростом порядкового номера имассы атомов 3*d* переходных элементов (*Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co* и *Ni*) в кремнии. Некоторое отклонение от проявленной закономерности уменьшения D_o(x) и E(x) с ростом порядкового номера наблюдается для атомов *Cu* и *Zn*.

Это означает, что в процессах диффузии порядковый номер и масса атомов не оказывают существенного влияния на параметры диффузии примесных атомов 3*d* переходных элементов в кремнии. Обнаруженные отклонения от проявленной закономерности по уравнениям (1) и (2) наблюдается для атомов *Cu* и *Zn*, по-видимому, связаны с отличающейся величиной их орбитального радиуса и валентностью.

Из результатов также следует, что наблюдается непосредственное влияние значений радиусов атомов 3*d* переходных элементов на их основные диффузионные параметры – коэффициента диффузии D_o (а) и энергии активации E (б) в кремнии.

Если обратить внимание на механизм диффузии указанных атомов в кремнии надо учитывать, что традиционно атомы III и V группы элементов диффундируются по вакансионному механизму. Атомы II, VI, VII, VIII групп элементов диффундируют по междоузельному механизму.

Таблица 1.

Основные физико-химические показатели и диффузионные параметры атомов 3*d* переходных элементов в кремнии

	Sc	***Ti***	***V***	***Cr***	***Mn***	***Fe***	***Co***	***Ni***	***Cu***	***Zn***
№	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Группа	*IIIa*	*IVa*	*Va*	*VIa*	*VIIa*	*VIIIa*	*VIIIa*	*VIIIa*	*Ib*	*IIb*
Валентность	3	4	5	6	7	8	8	8	1	2
Радиус атомаr_a, A°	1,62	1,46	1,31	1,27	1,30	1,26	1,25	1,24	1,28	1,37
Ионный радиусr_i, A°	0,81 (+3)	0,68 (+4)	0,59 (+5)	0,52 (+6) 0,69 (+3)	***0,80***(+2) **0,66** (+3)	***0,76*** (+2) **0,64** (+3)	***0,74***(+2)	***0,72*** (+2)	0,96 (+1)	0,74 (+2)
E_i, эВ	6,561	6,82	6,74	6,766	7,434	7,902	7,86	7,637	7,726	9,394

E, *эВ*	3,17	2,15	1,36	0,93	***0,71***	***0,58***	***0,56***	***0,73***	0,86	1,496
D_o, см^2/с	0,089	0,093	0,038	***0,005***	***0,009***	***0,005***	***0,006***	***0,004***	0,016	0,09
Внешняя электронная формула	$3d^1 4s^2$	$3d^2 4s^2$	$3d^3 4s^2$	$3d^5 4s^1$	$3d^5 4s^2$	$3d^6 4s^2$	$3d^7 4s^2$	$3d^8 4s^2$	$3d^{10} 4s^1$	$3d^{10} 4s^1$

Для выполнения анализа механизма диффузии атомов 3*d* переходных элементов приведем их физико-химические показатели и определенные основные диффузионные параметры в таблице 1.

Известно, что 3*d* переходные элементы металлов – это элементы с порядковым номером в таблице Д.И.Менделеева с 21 до 30: *Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn*. В отличие от других им характерно переменная валентность и ковалентная связь.

Анализ физико-химических показателей атомов 3*d* переходных элементов в сравнении с традиционными элементами позволяет заключить о нижеследующем:

- внешняя электронная оболочка состоит из двух 4*s* ва 3*d* подуровней;

- 3*d*подуровень с орбитальным числом 5 и квантовым числом 2 имеет электроны, вращающиеся по эллиптической орбите, представляющей собой электронное облако в форме взаимоперепендикулярно расположенных гантелей;

- 4*s*подуровень сорбитальным числом 1 и квантовым числом 0 имеет электронную орбиталь в форме сферы;

- 3*d* подуровень расположен выще 4*s* подуровня, валентность проявляет электроны 3*d* подуровня;

- валентность атомов для *Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni* проявляет электроны 3*d* подуровня, а для атомов *Cu, Zn* проявляет электроны 4*s*подуровня;

- атомы группы железа *Fe, Co, Ni*, расположенные в VIII группе элементов имеют сходные свойства, их атомные радиусы близки атомному радиусу кремния по значению.

Когда речь идёт об атомном или ионном радиусе атома надо учитывать, что с квантово-механической точки зрения электронная оболочка неимеет точного значения. Если представить атом в форме шара, то половина расстояния между двумя соседными ядрами принимается за атомный радиус.

С ростом порядкового номера атомов, периодически возрастает радиус атома. В пределах одного периода радиус уменьшается, в пределах группы атомов он возрастает.

Когда атом теряет один электрон, он превращается в положительный ион и при этом радиус уменьшается. Атом, привлекший один электрон, превращается на отрицательный иони при этом его радиус увеличивается.

Радиусы ионизованных атомов *Fe, Co, Ni* до 40 % уменьшаются и при этом ускоряется диффузионные процессы. Другими словами, диффузия атомов происходит быстрее на порядок, чем самодиффузия атомов кремния. При этом наблюдается междоузельная диффузия атомов.

Вытекающие из последних графиков отклонения основных диффузионных параметров (особенно коэффициента диффузии) атомов 3*d* переходных элементов в кремнии от выше проявленных закономерностей можно связать с различием проявления их валентности. Если обратим внимание на электронную формулу атомов (таблицы 1) можно заметить, что для атомов *Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co* и *Ni* валентность проявляется за счет электронов 3*d* оболочки с орбитальным квантовым числом 2, а для атомов *Cu* и *Zn* за счет электронов 4*s* оболочки с орбитальным квантовым числом 0. Указанные электронные оболочки различаются как энергией, так и формой орбиты.

Таким образом, для определения более точных закономерностей зависимости основных диффузионных параметров примесных атомов 3*d* переходных элементов в кремниот их физических показателей, необходимо учитывать квантово-химическую природу взаимодействия между примесными и кремниевыми атомами.

Выполненное автором исследование процессов диффузии 3*d* элементов в кремнии позволили формировать важные научные заключения.

Во-первых, атомы малого периода 3*d* элементов одновременно расположены в (вертикальных) группах I, II, III, IV, V, VI, VII, VIII периодической системы Д.И.Менделеева. В опубликованных работах автора разработаны полуэмпирические уравнения для определения основных диффузионных параметров атомов I, III – V групп элементов. Результаты расчета настоящей работы, выполненные при помощи уравнений (1) - (4), полученных для 3*d* элементов, близки значениям расчетных данных, полученных для основных диффузионных параметров соответствующих элементов при помощи уравнений для атомов I, III – V групп элементов.

Во-вторых, уравнения для атомов I, III – V групп элементов позволяли определить оценочные диффузионные параметры атомов других нетрадиционных элементов периодической системы. Результаты такой оценки приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Результаты расчета основных диффузионных параметров в кремнии атомов других нетрадиционных элементов (II, III, IV и V) периодической системы

Гуруҳ	**Элемент**	*Z*	D_o, *см²/В*×**с**	*E, эВ*
I	Rb	37	0,314	0,97
I	Cs	55	0,69	1,3
I	Fr	87	0,2	1,6
IV	Zr	40	1,47E+05	16,56
IV	Hf	72	-1,60E+06	115
IV	Pb	82	-3,51E+06	122
V	Nb	41	410	4,27
V	Ta	73	0,003	0,714
V	Db	105	2910	44,6
III	Cd	39	5,300	3,400
III	La	57	29,000	4,570
III	Ac	89	0,004	19,900

Предполагаем, что,используяприведенные в таблице 2 результаты расчета основных диффузионных параметров в кремнии различных нетрадиционных примесей, возможно проектировать новые функциональные приборные структуры.

Аналогичная статистическая обработка результатов подобных экспериментальных или расчетных данных может также определить степень растворимости примесей [7]. Экспериментальное подтверждение в будущем приведенных в таблице 2 численных значений основных диффузионных параметров различных примесей в кремнии может служить инструментом выявления более точных механизмов их диффузии.

Литература:

1. Люев В.К., Кармоков А.М. Коэффициент диффузии и энергии активации диффузии легирующих элементов в поверхностном слое монокристалла кремния // Современные наукоемкие технологии. – 2016. – №5 (Часть 2). – С. 262 – 265.

2. Матвеев А.В. Моделирование поверхностной сегрегации атомов в бинарных системах // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2012. – Т. 14. – № 3. – С. 358 – 376.

3. Эрвье Ю.Ю. О накоплении примеси в адсорбционном слое в процессе легирования при молекулярно – лучевой эпитаксии // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2013. – № 2. – С. 4 – 10.

4. Зайнабидинов С., Носиров М., Алиева Ж. О коэффициентах диффузии 3d элементов в кремнии // Узбекский физический журнал. – 2003. – №1. – С. 69 – 71.

5. Fisher D. J. Diffusion in Silicon: 10 years of research. – Zuerich-Uetikon, Switzerland: Scitec Publications, 1998 // https://www.worldcat.org/title/diffusion-in-silicon-10-years-of-research/oclc/827009415.

6. Алиева Ж.Р., Носиров М., Абдукаххорова М.А., Аббосова Н. О¥¥sion3 диффузионных параметрах примесных атомов V группы элементов в кремнии // Молодой ученый. – 2018. – №51 (237). – С. 1 – 3.

7. Рахимбаева М. Исследование закономерностей распределения примесей в кристаллах кремния методом математической статистики. Дисс... канд.физ.-мат.наук. – Ургенч, УрГУ имени Аль-Хорезми.– 2002.– 140 с.

Андижон давлат университети,
2019 йил 14 январда қабул қилинган
(Тақризчи: проф. И.Каримов)