

Математична модель дифузії домішки в напівпровіднику з урахуванням напружено-деформованого стану

Василь Чекурін

Д. ф.-м. н., професор, Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3б, Львів, 79060, e-mail: chekurin@iapmm.lviv.ua; Лодзький політехнічний інститут, вул. Жеромського, 116, Лодзь, 90-924, Польща, e-mail: w.czekurin@kis.p.lodz.pl

Сформульовано математичну модель для опису у взаємозв'язку процесу однокомпонентної дифузії та напружено-деформованого стану в монокристалічних напівпровідниках із кубічною кристалічною ґраткою. Модель враховує температурні та дифузійні напруження, а також залежність коефіцієнта дифузії від температури та деформації. На одновимірній задачі досліджено вплив власних напружень на формування поверхневих дифузійних шарів у напівпровідниках за ізотермічних умов.

Ключові слова: механотермодифузія, нелінійна модель, дифузійні напруження.

Вступ. Дифузійні процеси застосовують у технологічних процесах виготовлення мікроелектронних приладів для формування в напівпровідниках приповерхневих шарів із заданим профілем розподілу домішкових атомів [1-5]. Процес дифузійного легування напівпровідника здійснюють за високих температур. Впровадження чужорідних атомів у кристалічну ґратку спричиняє її деформацію. Це, а також неоднорідності температурного поля, зумовлюють механічні напруження, які своєю чергою, впливають на процес дифузії, а відтак — на формування профілю розподілу домішки в напівпровіднику. Тому розробка математичних моделей для опису дифузійних процесів у напівпровідниках із врахуванням деформації ґратки має важливе теоретичне значення та практичну цінність для технологій мікроелектроніки. Актуальність цієї проблеми підтверджується, зокрема, значною кількістю публікацій, присвячених експериментальному вивченню впливу напружень на дифузійні процеси (див., наприклад [6, 7]).

Математичну модель взаємодії процесів дифузії та деформації у твердих тілах розробив Я. С. Підстригач [8]. Подальші дослідження були спрямовані, зокрема, на розвиток запропонованого у цій публікації підходу з урахуванням різних механізмів міграції атомів, впливу зарядової підсистеми твердого тіла на дифузійні процеси та напружено-деформований стан [8, 9], розв'язування конкретних задач визначення напружено-деформованого стану твердих тіл за наявності дифузійних процесів (див., наприклад [10]).

У статті [11] розглянуто математичну модель ізотермічної дифузії в неоднорідно деформованому напівпровіднику. Отримано аналітичний розв'язок сформульованої в рамках такої моделі одновимірної задачі. В результаті встановлено,

що наявність градієнтів деформації може істотно впливати на профіль розподілу домішки у напівпровіднику.

Мета цієї статті — побудова самоузгодженої математичної моделі для опису у взаємозв'язку процесів деформації й однокомпонентної дифузії домішки в напівпровіднику.

1. Вихідні термодинамічні співвідношення

Розглянемо напівпровідник, що перебуває в неоднорідному напружено-деформованому стані за умов неоднорідного нагріву та дифузійного насичення домішковими атомами. З урахуванням процесів теплопровідності, деформації й однокомпонентної дифузії рівняння Гіббса, записане для густини вільної енергії f , матиме вигляд [12]

$$df = -sdT + \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + \mu dN. \quad (1)$$

Тут s — густина ентропії, σ_{ij} та ε_{ij} — компоненти тензорів напружень і деформацій, μ — хімічний потенціал домішки в ґратці напівпровідника, N — густина домішкових атомів (кількість в одиниці об'єму).

Із формули (1) випливає, зокрема, що

$$\begin{aligned} s &= \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ij}, N} = s(T, \varepsilon_{ij}, N), & \sigma_{ij} &= \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_{T, N} = \sigma_{ij}(T, \varepsilon_{ij}, N), \\ \mu &= \left(\frac{\partial f}{\partial N} \right)_{T, \varepsilon_{ij}} = \mu(T, \varepsilon_{ij}, N). \end{aligned} \quad (2)$$

Тож, якщо функція $f(T, \varepsilon_{ij}, N)$ — відома, то за співвідношеннями (2) можемо отримати, так звані, рівняння стану — залежності виду

$$s = s(T, \varepsilon_{ij}, N), \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(T, \varepsilon_{ij}, N), \quad \mu = \mu(T, \varepsilon_{ij}, N). \quad (3)$$

Для встановлення математичної моделі напружено-деформованого стану виходитимемо з рівняння балансу імпульсу та рівняння стану, яке виражає функціональний зв'язок (2) між компонентами тензора напружень та іншими параметрами стану.

2. Модель напружено-деформованого стану

За реальних технологічних умов дифузійне насичення матеріалу відбувається надзвичайно повільно — процес триває декілька десятків годин [5]. За таких умов можна знехтувати силами інерції та розглядати процес деформування тіла внаслідок змін температури та перерозподілу домішкових атомів як квазістатичний. Виходячи з умови механічної рівноваги [13]

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad i, j = \overline{1,3}, \quad (4)$$

та використовуючи співвідношення Коші [13]

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

і друге співвідношення (2), отримуємо систему рівнянь стосовно компонент переміщень u_l

$$C_{ijkl} \left(\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \right) + \beta_{ij}^T \frac{\partial T}{\partial x_j} + \beta_{ij}^N \frac{\partial N}{\partial x_j} = 0. \quad (6)$$

Тут C_{ijkl} — компоненти тензора пружних модулів матеріалу; $\beta_{ij}^T, \beta_{ij}^N$ — компоненти тензорів другого рангу, які враховують вплив температури та концентрації домішок на напруження

$$C_{ijkl}^{\text{def}} = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_{T,N}, \quad \beta_{ij}^T = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{kl},N}, \quad \beta_{ij}^N = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial N} \right)_{\varepsilon_{kl},T}. \quad (7)$$

Компоненти тензорів β_{ij}^T і β_{ij}^N неважко виразити через компоненти тензорів температурного α_{ij}^T і концентраційного α_{ij}^N розширення. Маємо

$$\begin{aligned} \beta_{ij}^T &= \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{kl},N} = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_{T,N} \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial T} \right)_{\sigma_{mn},N} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^T, \\ \beta_{ij}^N &= \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial N} \right)_{\varepsilon_{kl},T} = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \right)_{T,N} \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial N} \right)_{\sigma_{mn},T} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^N. \end{aligned} \quad (8)$$

Найуживаніші монокристалічні напівпровідникові матеріали, такі як кремній (Si), германій (Ge), арсенід галію (GaAs) та інші, мають кубічну кристалічну ґратку. Для таких матеріалів, як відомо [13], матеріальні тензори четвертого рангу мають лише три незалежні компоненти, а тензори другого рангу є ізотропні. У поданні тензора пружних модулів C_{ijkl} у декартовій системі координат, осі якої співпадають із кристалографічними осями четвертого порядку, відмінні від нуля є лише компоненти $C_{1111} = C_{2222} = C_{3333} = C_{11}, C_{1122} = C_{1133} = C_{2233} = C_{12}, C_{1212} = C_{2323} = C_{3131} = C_{44}$, а тензори $\beta_{ij}^T, \beta_{ij}^N, \alpha_{ij}^T, \alpha_{ij}^N$ матимуть вигляд $\beta_{ij}^T = \beta_T \delta_{ij}, \beta_{ij}^N = \beta_N \delta_{ij}, \alpha_{ij}^T = \alpha_T \delta_{ij}, \alpha_{ij}^N = \alpha_N \delta_{ij}$, де δ_{ij} — символ Кронеккера; β_T та β_N — скалярні характеристики матеріалу, які пов'язані з об'ємними коефіцієнтами температурного α_T та

концентраційного α_N розширення співвідношеннями $\beta_T = \alpha_T (C_{11} + 2C_{12})$ та $\beta_N = \alpha_N (C_{11} + 2C_{12})$. З урахуванням цього отримуємо такі рівняння рівноваги стосовно компонент вектора переміщення

$$C_{44}\Delta u_i + (C_{12} + C_{44})\delta_{kl}\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})\delta_{il}\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j^2} + (C_{11} + 2C_{12})\left(\alpha_T \frac{\partial T}{\partial x_i} + \alpha_N \frac{\partial N}{\partial x_i}\right) = 0. \quad (9)$$

Під час процесу легування, щоб досягнути заданих параметрів розподілу домішок, прагнуть забезпечити стаціонарні умови нагрівання й однорідну температуру T_0 в об'ємі напівпровідника. Тому можливі відхилення температури $T - T_0$ від фіксованого однорідного значення T_0 можна вважати достатньо малими: $\theta = (T - T_0)/T_0 \ll 1$. Обмежимося достатньо малими концентраціями домішок, щоб $N/N_0 \ll 1$ (де N_0 — густина насичення). Тоді деформації ε_{ij} , що виникатимуть внаслідок неоднорідностей температурного поля та розподілу домішкових атомів, не перевищуватимуть межу пружності, тобто $\varepsilon_{ij} \ll 1$. За таких умов залежність $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(T, \varepsilon_{ij}, N)$ достатньо точно визначається лінійними співвідношеннями

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} + \beta_{ij}^T (T - T_0) + \beta_{ij}^N N. \quad (10)$$

З урахуванням співвідношень (8) і властивостей симетрії тензорів $C_{ijkl}, \beta_{ij}^T, \beta_{ij}^N$, формулу (10) можна переписати у вигляді

$$\sigma_{ii} = (C_{11} - C_{12})\varepsilon_{ii} + C_{12}\varepsilon + (C_{11} + 2C_{12})[\alpha_T (T - T_0) + \alpha_N N], \sigma_{ij} = 2C_{44}\varepsilon_{ij}, i \neq j, \quad (11)$$

де $\varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$.

Рівняння (9) слід доповнити відповідними крайовими умовами, які можна отримати з умов навантаження чи закріплення точок поверхні Γ тіла [12]

$$\sigma_{ij}|_{\Gamma_\sigma} n_j = f_i, \quad u_i|_{\Gamma_u} = w_i, \quad (12)$$

де n_j — компоненти зовнішньої одиничної нормалі до Γ ; f_i, w_i — задані на відповідних частинах поверхні $\Gamma = \Gamma_\sigma \cup \Gamma_u$ функції. За відсутності зовнішніх навантажень і закріплення функції f_i та w_i тотожно дорівнюють нулеві. Тоді модель описує дифузійні напруження.

Отже, якщо розподіли густини домішок N і температури T в об'ємі та на поверхні тіла відомі, то, розв'язавши відповідну крайову задачу для системи рівнянь (9), можна знайти розподіл компонент переміщень u_i в об'ємі тіла, відтак за формулами (5), (11) обчислити компоненти тензорів деформації та напружень.

3. Рівняння дифузії

Для встановлення математичної моделі процесу дифузії у напівпровіднику виходитимемо з рівняння балансу кількості домішкових атомів у його об'ємі [14]

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (13)$$

де \mathbf{J} — потік домішкових атомів у напівпровіднику.

За прийнятої термодинамічної моделі потік \mathbf{J} визначають градієнти хімічного потенціалу та температури [14]

$$\mathbf{J} = -L_\mu \nabla \left(\frac{\mu}{T} \right) - L_T \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \quad (14)$$

де L_μ , L_T — скалярні феноменологічні коефіцієнти, які, у загальному випадку, є залежні від параметрів стану T , ε_{ij} , N .

Беручи до уваги третє рівняння стану (3), перепишемо співвідношення (14) у вигляді

$$\mathbf{J} = -D \nabla N - D_T \nabla T - D_\varepsilon \nabla \varepsilon. \quad (15)$$

Тут D , D_T та D_ε — коефіцієнти дифузії, термодифузії та механодифузії відповідно

$$D = \frac{L_\mu}{T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T, \varepsilon_{ij}}, \quad D_T = \frac{L_\mu}{T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ij}, N} - \frac{L_\mu \mu}{T^2} - \frac{L_T}{T^2}, \quad D_\varepsilon = \frac{L_\mu}{T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \varepsilon} \right)_{T, N}.$$

Процес дифузії є активізаційний за своєю природою, залежність коефіцієнта дифузії D від температури T визначається, в деякому наближенні, відомим законом Арреніуса [14]

$$D(T) = D_0 \exp \left(-\frac{Q}{k_B T} \right), \quad (16)$$

де D_0 , Q — сталі матеріалу (Q має зміст енергії активації дифузії), k_B — стала Больцмана.

Передекспоненціальний множник у формулі (16) слабко залежить від температури T , а за високих концентрацій домішки — ще й від N [14]. За прийнятих обмежень щодо малих варіацій температурного поля та достатньо низьких концентрацій домішки можна знехтувати залежністю множника D_0 від збурення температури й N , вважаючи $D_0 = D_0(T_0) = \text{const}$.

Деформація ґратки змінює енергію активації Q , а відтак і коефіцієнт дифузії D . За малих збурень температури та достатньо низьких концентрацій домішки N коефіцієнт дифузії D визначатиметься функцією виду

$$D(T, \varepsilon_{ij}) = D_0(T_0) \exp \left[-\frac{Q(\varepsilon_{ij})}{k_B T} \right]. \quad (17)$$

У лінійному наближенні $Q = Q_0 + \gamma_{ij}\varepsilon_{ij}$. Тут Q_0 — енергія активації дифузії за відсутності деформації ґратки; γ_{ij} — матеріальний тензор другого рангу, що враховує вплив деформації ґратки на зміну енергії активації Q . Для кристалів кубічної симетрії цей тензор є кульовий: $\gamma_{ij} = \gamma\delta_{ij}$, тож матимемо $Q = Q_0 + \gamma\varepsilon$, де γ — стала матеріалу.

За деформацій, що не перевищують межу пружності, доданок $\gamma\varepsilon$ є достатньо малий порівняно з Q_0 . За даними статті [6] для дифузії бору (В) у кремнії (Si) отримано такі значення $Q_0 \sim 3 \text{ eV}$, $\gamma = -17 \text{ eV}$ (eV — електрон-вольт, $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж). За деформацій $\varepsilon \sim 10^{-3}$ відношення $\gamma\varepsilon$ до Q_0 складає $5,667 \cdot 10^{-3}$. З урахуванням цього, беручи до уваги малість збурення температури, подамо залежність (17) коефіцієнта дифузії від температури та деформації у лінійному вигляді

$$D(T, \varepsilon_{ij}) = D(T_0)(1 + q_0\theta - \gamma_0\varepsilon). \quad (18)$$

Тут $D(T_0)$ — значення коефіцієнта дифузії за фіксованої температури T_0 і відсутності деформації $D(T_0) = D_0(T_0)\exp(-Q_0/k_B T_0)$, q_0, γ_0 — безрозмірні значення матеріальних констант Q_0 і γ : $q_0 = Q_0/(k_B T_0)$, $\gamma_0 = \gamma/(k_B T_0)$.

Процеси термо- та механодифузії також активізаційні. Залежності коефіцієнтів D_T та D_ε від температури та деформації можна розглядати у вигляді, аналогічному (17)

$$D_T(T, \varepsilon_{ij}) = D_T^0(T_0)\exp\left[-\frac{Q(\varepsilon_{ij})}{k_B T}\right], \quad D_\varepsilon(T, \varepsilon_{ij}) = D_\varepsilon^0(T_0)\exp\left[-\frac{Q(\varepsilon_{ij})}{k_B T}\right], \quad (19)$$

де D_T^0 і D_ε^0 — матеріальні сталі. Звідси отримуємо лінеаризовані залежності коефіцієнтів термодифузії та механодифузії від температури та деформації, аналогічні (18)

$$D_T(T, \varepsilon_{ij}) = D_T(T_0)(1 + q_0\theta - \gamma_0\varepsilon), \quad D_\varepsilon(T, \varepsilon_{ij}) = D_\varepsilon(T_0)(1 + q_0\theta - \gamma_0\varepsilon). \quad (20)$$

Використовуючи рівняння (13), співвідношення (15), (18), (19), та нормуючи густину домішок N на деяке фіксоване її значення N_0 , а час t на деякий проміжок t_0 , отримаємо

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \tilde{\nabla} \cdot [(1 + q_0\theta - \gamma_0\varepsilon)\tilde{\nabla}(n + d_T\theta + d_\varepsilon\varepsilon)]. \quad (21)$$

Тут $n = N/N_0$ — безрозмірна густина домішок, $\tau = t/t_0$ — безрозмірна часова змінна, $\tilde{\nabla} = l_D^{-1}\nabla$ — оператор градієнта в безрозмірних координатах, $l_D = \sqrt{D(T_0)t_0}$ — довжина дифузії, $d_T = [D_T(T_0)T_0]/[D(T_0)N_0]$ і $d_\varepsilon = [D_\varepsilon(T_0)]/[D(T_0)N_0]$ — характеристики матеріалу, які визначають значення безрозмірних коефіцієнтів термо- та механодифузії за фіксованої температури.

Отримали рівняння (21), яке описує дифузію домішкових атомів у напівпровіднику кубічної симетрії з урахуванням впливу пружної деформації ґратки та температури. Обмін тіла домішковими атомами із зовнішнім середовищем визначають граничні умови. Зокрема, можна розглядати умови, що визначають густину домішкових атомів на поверхні тіла

$$n|_{\Gamma} = f(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r} \in \Gamma, \quad (22)$$

де $f(\mathbf{r}, t)$ — задана функція координат точок поверхні та часу.

За заданих збурень температури $\theta = \theta(x_1, x_2, x_3, t)$ система співвідношень (5), (9), (11), (12), (21), (22) описує взаємозв'язок напружено-деформованого стану та процесу дифузії у напівпровіднику.

4. Напружено-деформований стан і дифузія за ізотермічних умов

Як зазначалося, під час реалізації технологічних процесів дифузійного насичення напівпровідників температуру тіла ретельно контролюють. Тому обмежимося випадком ізотермічної дифузії, за якого рівняння (21) запишемо так

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \tilde{\nabla} \cdot [(1 - \gamma_0 \varepsilon) \tilde{\nabla} (n + d_\varepsilon \varepsilon)], \quad (23)$$

а рівняння (9), зведене до безрозмірної форми, матиме вигляд

$$\tilde{\Delta} v_i + \frac{C_{12} + C_{44}}{C_{44}} \delta_{kl} \frac{\partial^2 v_k}{\partial \xi_i \partial \xi_l} + \frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{C_{44}} \delta_{il} \frac{\partial^2 v_l}{\partial \xi_i^2} + \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{44}} \frac{\partial n}{\partial \xi_i} = 0, \quad (24)$$

де $\xi_i = x_i / l_D$ — безрозмірні координати, $\tilde{\Delta} = l_D^2 \Delta$ — безрозмірний оператор Лапласа, $v_i = u_i / u_D$ — безрозмірні компоненти вектора переміщень, $u_D = l_D \alpha_N N_0$ — переміщення на відстані l_D , зумовлені дифузійною деформацією $\varepsilon_D = \alpha_N N_0$, що виникає у тілі насиченому домішковими атомами до густини N_0 .

Дослідимо процес дифузії в одновимірному випадку, що відповідатиме у деякому наближенні процесові формування дифузійних шарів у напівпровідникових пластинах [1, 4], який широко використовують у технології напівпровідникових і мікроелектронних приладів.

Розглянемо шар $0 \leq \xi_1 \leq L$, $-\infty < \xi_2 < \infty$, $-\infty < \xi_3 < \infty$ за відсутності зовнішніх силових навантажень, який піддають ізотермічному дифузійному насиченню за температури T_0 . Процес здійснюють упродовж проміжку часу t_0 , підтримуючи на поверхнях $\xi_1 = 0$ і $\xi_1 = L$ однорідні умови

$$N|_{\xi_1=0} = N_0 \theta(t), \quad N|_{\xi_1=L} = 0, \quad (25)$$

де $\theta(t)$ — одинична функція Гевісайда.

За таких умов густина n і параметри напружено-деформованого стану ε_{ij} і σ_{ij} залежать лише від координати $\xi_1 = \xi$, з яких відмінні від нуля є лише ε_{11} , $\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$ та σ_{11} , $\sigma_{22} = \sigma_{33}$. Тоді з рівнянь (24) випливає

$$\frac{d^2 v_1}{d\xi^2} + \frac{C_{12} + C_{44}}{C_{11} - C_{12} - C_{44}} \frac{de}{d\xi} + \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11} - C_{12} - C_{44}} \frac{dn}{d\xi} = 0, \quad (26)$$

звідки отримуємо

$$\frac{dv_1}{d\xi} = e_{11} = -\frac{C_{12} + C_{44}}{C_{11} - C_{12} - C_{44}} e - \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11} - C_{12} - C_{44}} n + C, \quad (27)$$

де $e_{11} = \varepsilon_{11}/\varepsilon_D$, $e = \varepsilon/\varepsilon_D$, C — стала інтегрування.

Із рівнянь рівноваги випливає, що $d\sigma_{11}/d\xi = 0$, а з умов відсутності навантаження — що $\sigma_{11}|_{\xi=0} = 0$, звідки $\sigma_{11} \equiv 0$. З урахуванням цього та беручи до уваги умови самозрівноваженості напружень

$$\int_0^L \sigma_{22} d\xi = \int_0^L \sigma_{33} d\xi = 0, \quad (28)$$

отримуємо такі вирази для компонент деформації та напружень

$$e_{11} = \frac{-(C_{11} + 2C_{12})(C_{12} + C_{44})n + C_{12}(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})\bar{n}}{C_{11}C_{44}}, \quad (29)$$

$$e_{22} = e_{33} = \frac{1}{2} \frac{(C_{11} + 2C_{12})n - (C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})\bar{n}}{C_{44}}, \quad (30)$$

$$e = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} - C_{44})n - (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})\bar{n}}{C_{11}C_{44}}, \quad (31)$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{33} = \frac{1}{2} \frac{\alpha_N N_0 (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})(n - \bar{n})}{C_{11}C_{44}}. \quad (32)$$

Тут \bar{n} — середнє інтегральне значення густини домішкових атомів

$$\bar{n} = \frac{1}{L} \int_0^L n d\xi. \quad (33)$$

З урахуванням формули (31) рівняння дифузії (23) для одновимірного випадку, що розглядається, набуває вигляду

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = (1 + d) \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 - \gamma_{\bar{n}} \bar{n} + \gamma_n n) \frac{\partial n}{\partial \xi} \right], \quad (34)$$

$$\text{де } d = d_\varepsilon \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} - C_{44})}{C_{11}C_{44}}, \quad \gamma_{\bar{n}} = -\gamma_0 \varepsilon_D \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})}{C_{11}C_{44}},$$

$$\gamma_n = -\gamma_0 \varepsilon_D \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} - C_{44})}{C_{11}C_{44}}.$$

Параметр \bar{n} у цьому рівнянні виражається через означений інтеграл від шуканої функції $n(\xi, \tau)$ формулою (33), тобто рівняння є інтегродиференціальне. Проте, за реальних умов формування дифузійних шарів у напівпровідникових пластинах товщина дифузійного шару часто є набагато менша від товщини пластини [1], тож доданком $\gamma_n \bar{n}$ у такому випадку можна знехтувати

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = (1+d) \frac{\partial^2 n}{\partial \xi^2} + (1+d) \gamma_n \left(\frac{\partial n}{\partial \xi} \right)^2. \quad (35)$$

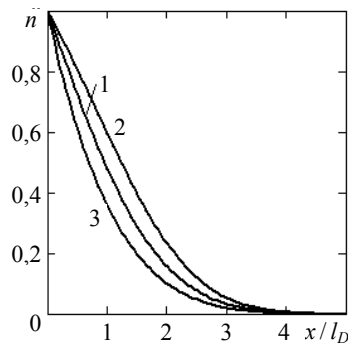
Отримане рівняння описує одновимірний процес ізотермічної дифузії домішки в напівпровіднику за умови, що товщина дифузійного шару значно менша від товщини тіла, тобто виконується співвідношення $l_D \ll L$. Рівняння (35) відрізняється від класичного дифузійного рівняння

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 n}{\partial \xi^2} \quad (36)$$

множником $(1+d)$, який враховує додатковий потік домішок, зумовлений градієнтом деформації ґратки, та нелінійним доданком $(1+d)(\partial n / \partial \xi)^2$, який враховує залежність енергії активації дифузії від деформації.

Зазначимо, що вводячи функцію $\eta = 1 + \gamma_n n$ і перенормовуючи просторову змінну $\zeta = \xi / \sqrt{1+d}$, рівняння (35) легко звести до вигляду

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 (\eta^2)}{\partial \zeta^2}. \quad (37)$$



На рисунку показані профілі розподілу домішок у напівпровіднику розраховані за класичною моделлю (36) (крива 1) і моделлю (35) для значень коефіцієнта $\gamma_n = 1$ (крива 2) та $\gamma_n = -1$ (крива 3). За малих значень коефіцієнта γ_n ($|\gamma_n| < 0,1$) криві концентраційних залежностей, розрахованих за моделлю (35), практично співпадають із кривою 1.

Висновки. Сформульовано математичну модель для опису у взаємозв'язку процесу однокомпонентної дифузії та напружено-деформованого стану в монокристалічних напівпровідниках із кубічною кристалічною ґраткою. Модель враховує складові дифузійного потоку, зумовлені градієнтами температури та деформації, температурні та дифузійні напруження, а також залежність коефіцієнта дифузії від температури та деформації. Система рівнянь моделі складається з трьох рівнянь: рівноваги в переміщеннях (9), нелінійного дифузійного рівняння (21),

лінійних диференціальних (5) та алгебраїчних (11) співвідношень. Враховуючи малий вплив деформації на коефіцієнт дифузії, нелінійну задачу механотермодифузії можна звести до ітераційної послідовності відповідних лінеаризованих задач.

В одновимірному випадку систему рівнянь рівноваги зведено до рівняння (26), його інтеграл дозволив встановити аналітичні залежності, що пов'язують параметри напружено-деформованого стану з розподілом густини домішок у тілі, а відтак виключити деформацію ε із рівняння дифузії (21). У результаті отримали нелінійне інтегродиференціальне рівняння дифузії, яке в ізотермічному випадку має вигляд (34). З умови, що товщина дифузійного шару достатньо мала порівняно з товщиною тіла L , це рівняння зводиться до нелінійного диференціального рівняння дифузії (35).

Насичення напівпровідника домішковими атомами спричиняє деформацію ґратки та дифузійні напруження, компоненти яких у одновимірному випадку визначаються формулами (29)-(32). Вплив дифузійних напружень на процес дифузії визначається коефіцієнтом γ_n . Якщо $\gamma_n > 0$, то дифузійний потік інтенсифікується, а якщо $\gamma_n < 0$, швидкість дифузії зменшується порівняно з класичною моделлю.

Напруження, зумовлені зовнішнім навантаженням, накладаючись на власні (дифузійні), впливають на процес дифузії домішок у напівпровіднику. Це явище можна використовувати для цілеспрямованого керування процесом формування в технологічних процесах легування напівпровідників. Математичну модель можна застосовувати для вибору параметрів зовнішнього навантаження, що забезпечуватимуть заданий профіль розподілу домішки.

Література

- [1] *Jaeger, R. C.* Introduction to Microelectronic Fabrication. — 2nd Ed. — Prentice Hall, 1987. — 230 P.
- [2] *Campbell, S.* The Science and Engineering of Microelectronic Fabrication. — 2nd Ed. — Oxford University Press, 2001. — 624 p.
- [3] *Крапухин, В. В.* Технология материалов электронной техники (Теория процессов полупроводниковой технологии) / *В. В. Крапухин, И. А. Соколов, Г. Д. Кузнецов.* — Москва: МИСиС, 1995. — 493 с.
- [4] *Шангереева, Б. А.* Диффузия фосфора с применением твердого планарного источника в производстве интегральных схем / *Б. А. Шангереева* // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. — 2008. — № 1. — С. 54-56.
- [5] Boron and phosphorus diffusion in strained and relaxed Si and SiGe / *N. R. Zangenberg, J. Fage-Pedersen, J. L. Hansen, A. N. Larsen* // J. of Applied Physics. — 2003. — Vol. 94, No 6. — P. 3883-3890.
- [6] *Antonelli, A.* Pressure effects on self-diffusion in silicon / *A. Antonelli, J. Berthold* // Phys. Rev. B. — 1989-II. — Vol. 40, No 15. — P. 10643-10646.
- [7] *Подстригач, Я. С.* Диффузионная теория неупругости металлов / *Я. С. Подстригач* // Журнал прикладной механики и технической физики. — 1965. — № 2. — С. 67.
- [8] *Бурак, Я. И.* Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц / *Я. И. Бурак, Б. П. Галапац, Е. Я. Чапля* // Физ.-хим. механика материалов. — 1980. — № 5. — С. 8-14.
- [9] *Чапля, С. Я.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузійного масопереносу / *С. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха.* — Львів: Сполом, 2003. — 128 с.

Василь Чекурін

Математична модель дифузії домішки в напівпровіднику з урахуванням ...

- [10] *Еремеев, В. С.* Диффузия и напряжения. — Москва: Энергоатомиздат, 1984. — 184 с.
- [11] *Фльорко, О. В.* Математична модель дифузії в деформованій ґратці / *О. В. Фльорко, В. Ф. Чекурін* // Вісник ДУ «Львівська Політехніка». Елементи теорії та прилади твердотілої електроніки. — 2000. — № 393. — С. 64-67.
- [12] *Новацкий, В.* Теория упругости / *В. Новацкий*. — Москва: Мир, 1975. — 872 с.
- [13] *Гроот де, С.* Неравновесная термодинамика / *С. де Гроот, П. Мазур*. — Москва: Наука, 1964. — 456 с.
- [14] *Болтакс, Б. И.* Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках / *Б. И. Болтакс*. — Ленинград: Наука, 1972. — 384 с.

Mathematical model for impurity diffusion in a semiconductor with accounting of stress-strained state influence

Vasyl Chekurin

The mathematical model for describing the interconnected impurity diffusion and stress-strained state kinetics in a semiconductor with cubic lattice has been considered. The model takes into account thermal and diffusion stresses, diffusion coefficient dependence on temperature and strain. The influence on the diffusion stresses on impurity distribution in the surface diffusion layer in semiconductors has been studied on one-dimensional problem.

Математическая модель диффузии примеси в полупроводнике с учетом влияния напряженно-деформированного состояния

Василь Чекурин

Сформулирована математическая модель для описания во взаимосвязи процесса однокомпонентной диффузии и кинетики напряженно-деформированного состояния в полупроводнике с кубической кристаллической решеткой. Модель учитывает температурные и диффузионные напряжения, а также зависимость коэффициента диффузии от температуры и деформации. На одномерной задаче исследовано влияние диффузионных напряжений на формирование поверхностных диффузионных слоев в полупроводниках при изотермических условиях.

Отримано 21.07.09