

Дослідження нелінійної дифузії домішки у деформівному напівпровідниковому шарі

Олександра Фльорко

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3б, Львів, 79060, e-mail: ofliorko@gmail.com

Сформульовані початково-крайові задачі, які моделюють процеси дифузійної обробки напівпровідникових пластин з урахуванням впливу механічних напружень, зумовлених неоднорідним розподілом домішкових атомів у ґратці. Розроблено алгоритм розв'язування сформульованих нелінійних задач із використанням асимптотичного розвинення розв'язку за малим параметром. У рамках розробленої моделі досліджено кінетику дифузійного насичення та напруженого стану пластини кремнію за ізотермічного легування атомами бору.

Ключові слова: дифузія та напруження, нелінійна модель, метод малого параметра.

Вступ. Дифузійну обробку монокристалічних напівпровідникових пластин широко застосовують у виробництві приладів мікроелектроніки [1]. Її метою є формування в об'ємі напівпровідникових елементів заданих розподілів домішок. Впровадження у кристалічну ґратку чужорідних атомів супроводжується її деформацією та напруженнями, що змінюють дифузійні властивості матеріалу.

Результати вивчення впливу напружень на дифузійні процеси в напівпровідниках наведені, зокрема, в працях [2-4]. Деякі математичні задачі дослідження впливу напружень на формування дифузійних шарів у напівпровідниках розглянуті у публікаціях [5-8]. У праці [9] запропоновано нелінійну модель механотермодифузії домішки в напівпровіднику, що враховує вплив напружено-деформованого стану, зумовленого неоднорідним розподілом домішкових атомів у кристалічній ґратці.

Метою цієї статті є: математичне формулювання в рамках моделі, розробленої в [9], крайових задач кінетики дифузійного насичення монокристалічного напівпровідникового шару з урахування впливу напружень, зумовлених неоднорідним розподілом домішкових атомів; розроблення методу розв'язування сформульованих нелінійних задач і кількісне дослідження процесів дифузійної обробки напівпровідникових пластин.

1. Моделювання процесів дифузійної обробки напівпровідникових пластин

Основним матеріалом для так званої планарної технології виробництва напівпровідникових приладів та інтегральних схем є монокристалічні пластини різного діаметра [4]. Використовують пластини германію (Ge), кремнію (Si), арсеніду галію (GaAs) тощо.

Найбільшого поширення здобули пластини кремнію різного діаметра від 25,4 до 300 мм [10].

Процес дифузійної обробки пластин є двостадійний [1]. На першому етапі (заганяння) у тонкий приповерхневий шар впроваджують необхідну кількість домішкових атомів. На другому етапі (розганяння) відбувається дифузійний перерозподіл впроваджених атомів і формування легованих шарів із заданим розподілом концентрації.

Технологічний процес легування пластин із газової фази здійснюють за достатньо високої температури T у дифузійній печі, в яку поміщають циліндричний кварцовий реактор із партією регулярно розташованих уздовж її осі однотипних напівпровідникових пластин. Для заганяння домішки за легування з газової фази через реактор із фіксованою швидкістю продувають дифузанта у газоподібному стані. Внаслідок цього упродовж усього процесу в реакторі підтримується фіксована об'ємна концентрація дифузанта N_{out} . До того ж процес дифузійного насичення прагнуть здійснювати за максимально однорідної в об'ємі пластини температури T . Оскільки відношення товщини пластини до її діаметра є мале, то процес дифузії з достатньою точністю можна вважати одновимірним (параметри процесу залежать лише від координати x у напрямку товщини). На поверхні $x = 0$ пластини виконуються умови

$$N|_{x=0} = N_{out} . \quad (1)$$

На протилежній поверхні пластини приймають умову рівності нулю дифузійного потоку

$$J|_{x=L} = 0 . \quad (2)$$

Оскільки відношення товщини дифузійних шарів, які формують, до товщини пластини є мале ($\sim 10^{-4}$), густина домішкових атомів швидко згасає з віддаллю від поверхні, то замість умови (2) наближено приймають

$$N|_{x=L} = 0 . \quad (3)$$

Для процесу заганяння початковий розподіл домішок можна вважати нульовим

$$N|_{t=0} = 0 . \quad (4)$$

Процес розганяння домішки здійснюють за відсутності атомів дифузанта в газовому середовищі. Щоб запобігти випаровуванню домішки назовні створюють тонкий шар окисла SiO_2 . Коефіцієнт дифузії домішки в окислі значно менший, ніж у напівпровіднику. Виходячи з цього, для опису процесу розганяння домішки застосовують так звану модель дифузії з обмеженого джерела [1]. У цій моделі поверхня пластини $x = 0$ є масоізолювана

$$J|_{x=0} = 0 , \quad (5)$$

а в об'ємі задано початковий розподіл домішок

$$N|_{t=0} = N_{\text{init}}(x). \quad (6)$$

Тут J — дифузійний потік, $N_{\text{init}}(x)$ — початковий розподіл домішкових атомів у пластині, створений на стадії заганання.

Загальна кількість домішкових атомів у пластині в процесі розганання залишається незмінною, змінюється лише їх просторовий розподіл $N = N(x, t)$. Тобто на етапі розганання виконується таке інтегральне співвідношення

$$\int_0^L N(x, t) dx = \int_0^L N_{\text{init}}(x) dx. \quad (7)$$

У моделі [9] вплив квазістатичного напружено-деформованого стану на процес дифузії враховано залежностями хімічного потенціалу μ домішки й енергії активації дифузії Q від першого інваріанта ε тензора деформації ε_{ij} , а також складовою дифузійного потоку, пропорційною градієнтові деформації (механодифузії). Тож за ізотермічних умов дифузійний потік визначається як

$$\mathbf{J} = -D\nabla N - D_\varepsilon \nabla \varepsilon, \quad (8)$$

де D та D_ε — коефіцієнти дифузії та термодифузії, що залежать від температури T та першого інваріанта тензора деформації ε .

Враховуючи одновимірний характер дифузійних процесів, які застосовують для обробки напівпровідникових пластин, у статті [9] деформацію ε виразили через концентрацію домішки та звели вираз (8) для густини дифузійного потоку до вигляду

$$j = -(1 - \gamma_n n + \gamma_{\bar{n}} \bar{n}) \frac{\partial n}{\partial \xi}. \quad (9)$$

У результаті прийшли до одновимірного нелінійного дифузійного рівняння, яке запишемо тут у вигляді

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[(1 - \gamma_n n + \gamma_{\bar{n}} \bar{n}) \frac{\partial n}{\partial \zeta} \right]. \quad (10)$$

Тут $j = J \Delta t N_0^{-1} l_D^{-1}$ — нормований дифузійний потік, $n \equiv N/N_0$ — безрозмірна густина домішкових атомів, $\bar{n} \equiv L^{-1} \int_0^L n dx$ — її середньоінтегральне значення, $\tau = t/\Delta t$ — безрозмірна часова змінна, Δt — тривалість процесу дифузійного насичення, $\zeta = x/l_D$ — безрозмірна координата, $l_D = \sqrt{D(T)(1+d)} \Delta t$ — дифузійна довжина, $d = \alpha_N g_n D_0/D_{\varepsilon 0}$, $D(T) = D_0 \exp(-Q_0/(k_B T))$, $D_\varepsilon(T) = D_{\varepsilon 0} \exp(-Q_0/(k_B T))$ — коефіцієнти дифузії та механодифузії у недеформованому напівпровіднику за температури T , Q_0 — енергія активації дифузії у недеформованому напівпровіднику, D_0 і $D_{\varepsilon 0}$ — характеристики матеріалу, k_B — стала Больцмана, $\gamma_n = \alpha_N N_0 g_n \gamma_0$, $\gamma_{\bar{n}} = \gamma_n g_{\bar{n}}/g_n$, α_N — коефіцієнт концентраційного розширення ґратки, $g_n = (C_{11} + 2 C_{12}) \times$

$\times (C_{11} - C_{12} - C_{44}) / (C_{11} C_{44})$, $g_{\bar{n}} = (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44}) / (C_{11} C_{44})$, C_{11} , C_{12} , C_{44} — пружні сталі напівпровідника з кубічною кристалічною ґраткою.

Сформулюємо задачі дослідження кінетики дифузійної обробки напівпровідникових пластин з урахуванням взаємовпливу напружено-деформованого стану. Рівняння (10) описує процес дифузійного перерозподілу домішки з урахуванням впливу напружень на стадіях заганняння та розганняння. Процеси заганняння та розганняння здійснюються послідовно за фіксованих, взагалі кажучи, різних температур T_0 і T_1 відповідно, їх тривалості Δt_0 і Δt_1 є теж різні. Тому нормувальні множники для безрозмірних просторової та часової змінних будуть різні для цих двох процесів. Розв'язок рівняння (10) для процесу заганняння позначатимемо $n_0 = n_0(\zeta_0, \tau_0)$, а для розганняння $n_1 = n_1(\zeta_1, \tau_1)$. Тут $\zeta_0 = x / (l_{D0} \sqrt{1+d})$, $\tau_0 = t / \Delta t_0$, $\zeta_1 = x / (l_{D1} \sqrt{1+d})$, $\tau_1 = t / \Delta t_1$, l_{D0} , l_{D1} — дифузійні довжини для цих процесів: $l_{D0} = \sqrt{(1+d)D(T_0)\Delta t_0}$, $l_{D1} = \sqrt{(1+d)D(T_1)\Delta t_1}$.

Беручи до уваги, що $D(T_0)/D(T_1) = \exp[-Q_0/k_B(T_0^{-1} - T_1^{-1})]$, отримуємо

$$\zeta_0 = a\zeta_1, \quad \tau_0 = b\tau_1, \quad a = \exp\left[\frac{Q_0}{2k_B}(T_0^{-1} - T_1^{-1})\right], \quad b = \Delta t_1 / \Delta t_0. \quad (11)$$

Як уже зазначалося, товщини дифузійних шарів є набагато менші за товщину пластини, тому можна наближено покласти $L/l_{D0} \rightarrow \infty$, $L/l_{D1} \rightarrow \infty$. Це дозволяє розглядати дифузійне рівняння (10) у півбезмежній області, як для моделі заганняння $0 < \zeta_0 < \infty$, так і розганняння $0 < \zeta_1 < \infty$. При цьому моделлю процесу заганняння буде крайова задача для рівняння (10), в якому $n = n_0$, $\zeta = \zeta_0$, $\tau = \tau_0$, з крайовими

$$n_0(\zeta_0, \tau_0) \Big|_{\zeta_0=0} = n_{\text{out}}, \quad \lim_{\zeta_0 \rightarrow \infty} n_0(\zeta_0, \tau_0) = 0 \quad (12)$$

та початковими

$$n_0(\zeta_0, \tau_0) \Big|_{\tau_0=0} = 0 \quad (13)$$

умовами, які впливають зі співвідношень (1), (3) та (4). Тут $n_{\text{out}} = N_{\text{out}}/N_0$.

Натомість моделлю процесу розганняння є крайова задача для рівняння (10), в якому $n = n_1$, $\zeta = \zeta_1$, $\tau = \tau_1$, з крайовими

$$\frac{\partial n_1(\zeta_1, \tau_1)}{\partial \zeta_1} \Big|_{\zeta_1=0} = 0, \quad \lim_{\zeta_1 \rightarrow \infty} n_1(\zeta_1, \tau_1) = 0 \quad (14)$$

та початковими

$$n_1(\zeta_1, \tau_1) \Big|_{\tau_1=0} = n_0(a\zeta_1, 1) \quad (15)$$

умовами, які впливають із (5), (3) та (6).

Внаслідок співвідношення (7) середнє значення густини домішки \bar{n}_1 у пластині залишається незмінним упродовж усього процесу розганання, тобто в рівнянні (10)

$$\bar{n}_1 = \frac{1}{l_1} \int_0^{\infty} n_1(\zeta_1, \tau_1) d\zeta_1 = \frac{1}{l_0} \int_0^{\infty} n_0(\zeta_0, 1) d\zeta_0 = \text{const}, \quad l_0 = L/l_{D0}, \quad l_1 = L/l_{D1}. \quad (16)$$

Зазначимо, що крайові умови (14) дозволяють розглядати як модель процесу задачу Коші для рівняння (10), заданого на прямій $-\infty < \zeta < \infty$, з початковою умовою

$$n_1(\zeta_1, \tau_1) \Big|_{\tau_1=0} = n_{10}(\zeta_1) \equiv \begin{cases} n_0(a\zeta_1, 1), & \zeta_1 > 0, \\ n_0(-a\zeta_1, 1), & \zeta_1 < 0, \end{cases} \quad (17)$$

та умовою на безмежності

$$\lim_{\zeta_1 \rightarrow \pm\infty} n_1(\zeta_1, \tau_1) = 0. \quad (18)$$

2. Розв'язування задач із застосуванням методу малого параметра

Подамо шуканий розв'язок $n_0(\zeta_0, \tau_0)$ нелінійної задачі (10), (12), (13) у вигляді асимптотичного розвинення за малим параметром γ_n

$$n_0(\zeta_0, \tau_0) = n_0^{(0)}(\zeta_0, \tau_0) + \gamma_n n_0^{(1)}(\zeta_0, \tau_0) + (\gamma_n)^2 n_0^{(2)}(\zeta_0, \tau_0) + \dots \quad (19)$$

Звідси впливає таке подання для середньо-інтегрального значення $\bar{n}_0 = \bar{n}_0(\tau_0)$

$$\bar{n}_0(\tau_0) = \bar{n}_0^{(0)}(\tau_0) + \gamma_n \bar{n}_0^{(1)}(\tau_0) + (\gamma_n)^2 \bar{n}_0^{(2)}(\tau_0) + \dots \quad (20)$$

Тут $\bar{n}_0^{(\lambda)}(\tau_0) = \frac{1}{l_0} \int_0^{\infty} n_0^{(\lambda)}(\zeta_0, \tau_0) d\zeta_0$; $\lambda = 0, 1, \dots$

У результаті приходимо до послідовності лінійних дифузійних рівнянь

$$\frac{\partial n_0^{(0)}}{\partial \tau_0} = \frac{\partial^2 n_0^{(0)}}{\partial \zeta_0^2}, \quad \frac{\partial n_0^{(\lambda)}}{\partial \tau_0} = \frac{\partial^2 n_0^{(\lambda)}}{\partial \zeta_0^2} + f_0^{(\lambda)}, \quad \lambda = 1, 2, \dots \quad (21)$$

Тут

$$f_0^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(0)})^2, \quad f_0^{(3)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(1)})^2 - \frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(0)} \tilde{n}_0^{(2)}),$$

$$f_0^{(2)} = -\frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(0)} \tilde{n}_0^{(1)}), \quad f_0^{(4)} = -\frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(0)} \tilde{n}_0^{(3)}) - \frac{\partial^2}{\partial \zeta_0^2} (\tilde{n}_0^{(1)} \tilde{n}_0^{(2)}),$$

де

$$\tilde{n}_0^{(\lambda)}(\zeta_0, \tau_0) \equiv n_0^{(\lambda)}(\zeta_0, \tau_0) - (\gamma_n / \gamma_{\bar{n}}) \bar{n}_0^{(\lambda)}(\tau_0). \quad (22)$$

Нульове наближення $n_0^{(0)}(\zeta_0, \tau_0)$ підпорядкуємо крайовим умовам (12), а всі вищі наближення — нульовим крайовим умовам. У результаті отримаємо [11]

$$n_0^{(0)}(\zeta_0, \tau_0) = n_{\text{out}} \operatorname{erfc}(\zeta_0 / 2\sqrt{\tau_0}), \quad (23)$$

$$n_0^{(\lambda)}(\zeta_0, \tau_0) = \int_0^{\tau_0} \int_0^{\infty} f_0^{(\lambda)}(\zeta, \tau) G_0(\zeta_0, \zeta, \tau_0 - \tau) d\zeta d\tau, \quad (24)$$

де
$$G_0(\zeta_0, \zeta, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\tau}} \left\{ \exp\left[-(\zeta_0 - \zeta)^2 / (4\tau)\right] - \exp\left[-(\zeta_0 + \zeta)^2 / 4\tau\right] \right\}.$$

Оскільки на стадії розганяння \bar{n}_1 не змінюється з часом, то, вводячи змінну

$$\tilde{n}_1(\zeta_1, \tau_1) = n_1(\zeta_1, \tau_1) - (\gamma_n / \gamma_{\bar{n}}) \bar{n}_1, \quad (25)$$

перепишемо рівняння (10) і початкову умову (17) у вигляді

$$\frac{\partial \tilde{n}_1}{\partial \tau_1} = \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \left((1 - \gamma_n \tilde{n}_1) \frac{\partial \tilde{n}_1}{\partial \zeta_1} \right), \quad (26)$$

$$\tilde{n}_1(\zeta_1, \tau_1) \Big|_{\tau_1=0} = \tilde{n}_{10}(\zeta_1) \equiv n_{10}(a\zeta_1) - (\gamma_n / \gamma_{\bar{n}}) \bar{n}_1. \quad (27)$$

Розв'язок $n_1(\zeta_1, \tau_1)$ задачі Коші (26), (27) для моделі заганняння домішки подамо у вигляді асимптотичного розвинення

$$\tilde{n}_1(\zeta_1, \tau_1) = \tilde{n}_1^{(0)}(\zeta_1, \tau_1) + \gamma_n \tilde{n}_1^{(1)}(\zeta_1, \tau_1) + (\gamma_n)^2 \tilde{n}_1^{(2)}(\zeta_1, \tau_1) + \dots \quad (28)$$

Це приводить до послідовності дифузійних рівнянь

$$\frac{\partial \tilde{n}_1^{(0)}}{\partial \tau_1} = \frac{\partial^2 \tilde{n}_1^{(0)}}{\partial \zeta_1^2}, \quad \frac{\partial \tilde{n}_1^{(\lambda)}}{\partial \tau_1} = \frac{\partial^2 \tilde{n}_1^{(\lambda)}}{\partial \zeta_1^2} + f_1^{(\lambda)}, \quad \lambda = 1, 2, \dots, \quad (29)$$

де

$$f_1^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(0)})^2, \quad f_1^{(3)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(1)})^2 - \frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(0)} \tilde{n}_1^{(2)}),$$

$$f_1^{(2)} = -\frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(0)} \tilde{n}_1^{(1)}), \quad f_1^{(4)} = -\frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(0)} \tilde{n}_1^{(3)}) - \frac{\partial^2}{\partial \zeta_1^2} (\tilde{n}_1^{(1)} \tilde{n}_1^{(2)}).$$

Підпорядковуючи нульове наближення $\tilde{n}_1^{(0)}(\zeta_1, \tau_1)$ початковій умові (27), а всі наступні — нульовій початковій умові, отримаємо

$$\tilde{n}_1^{(0)}(\zeta_1, \tau_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{n}_{10}(\zeta) G_1(\zeta_0, \zeta, \tau) d\zeta, \quad (30)$$

$$\tilde{n}_1^{(\lambda)}(\zeta_1, \tau_1) = \int_0^{\tau_1} \int_{-\infty}^{\infty} f_1^{(\lambda)}(\zeta, \tau) G_1(\zeta_0, \zeta, \tau_1 - \tau) d\zeta d\tau, \quad (31)$$

де $G_1(\zeta_1, \zeta, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\tau}} \exp\left[-(\zeta_1 - \zeta)^2 / (4\tau)\right]$.

3. Оцінка матеріальних характеристик моделі

Розглянемо процеси заганняння та розганняння атомів бору (В) у пластини кремнію діаметром $2R = 300$ мм і товщиною $h = 0,775$ мм. Значення пружних модулів кремнію $C_{11} = 16,60 \cdot 10^{10}$, $C_{12} = 6,40 \cdot 10^{10}$, $C_{44} = 7,96 \cdot 10^{10}$ (Па). Розраховані за ними коефіцієнти $g_n = 0,498$, $g_{\bar{n}} = 3,498$. Коефіцієнт концентраційного розширення оцінимо, виходячи з відношення атомних радіусів бору та кремнію за формулою $\alpha_N = (r_B/r_{Si} - 1)/N_{Si}$, де $r_B/r_{Si} = 0,74$; $N_{Si} = 4,995 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ — рівноважна густина атомів кремнію в ґратці. Розрахунок дає значення $\alpha_N = -5,205 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$.

Базуючись на даних дифузійних властивостей бору в кремнії [2, 3], виберемо: $D_0 = 0,8 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$, $Q_0 = 3,46 \text{ еВ} = 5,54 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$, $\gamma = -150 \text{ еВ} = -2,40 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}$. Нехай поверхнева концентрація дифузанта $N_{\text{out}} = 10^{26} \text{ м}^{-3}$, а температури і тривалості процесів заганняння та розганняння $T_0 = 1100^\circ\text{C}$ і $T_1 = 1250^\circ\text{C}$ та $\Delta t_0 = 3,6 \cdot 10^3 \text{ с}$ і $\Delta t_1 = 2,16 \cdot 10^4 \text{ с}$ відповідно. На цій підставі отримуємо оцінку безрозмірних коефіцієнтів, які враховують вплив напружень на дифузію, $\gamma_n = 0,41$; $\gamma_{\bar{n}} = 2,88$ для процесу заганняння та $\gamma_n = 0,36$; $\gamma_{\bar{n}} = 2,51$ — для процесу розганняння. Параметр $l_D = \sqrt{D\Delta t}$, що визначає товщину дифузійного шару на стадіях заганняння та розганняння, складає $2,4 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ та $9,61 \cdot 10^{-6} \text{ м}$ відповідно.

4. Результати розрахунку

Кількісне дослідження проводили, обмежуючись першим наближенням. На рис. 1 показані розподіли безрозмірної густини N/N_{out} атомів домішки на стадії заганняння у моменти часу $\tau_1 = 0,3$ (штрих-пунктирні лінії), $0,5$ (штрихові лінії) й 1 (суцільні лінії). Криві 1 і 2 відповідають нульовому та першому наближенню асимптотичного розкладу, а криві 3 — першій поправці.

На рис. 2 наведені графіки напружень $\sigma_{22} = \sigma_{33} \equiv \sigma$ на стадії заганняння, розраховані за знайденими розподілами концентрації домішки у нульовому (криві 1) і першому (криві 2) наближеннях за формулою [9]

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{\alpha_N N_0 (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44})(n - \bar{n})}{C_{11} C_{44}}$$

Було встановлено, що на стадії розганняння концентрація домішки швидко падає з часом. Внаслідок чого вплив нелінійності у рівнянні (10) також зменшується. Функція у правій частині $f_1^{(1)}$ рівняння (29) для першого наближення

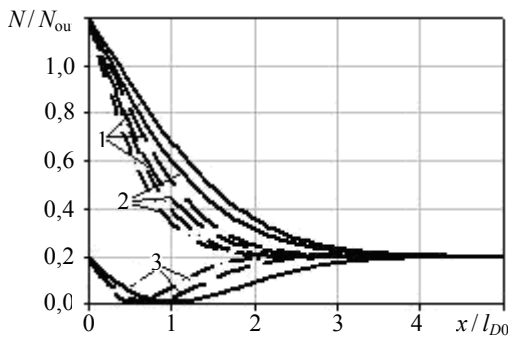


Рис. 1. Профілі розподілу домішки, розраховані для трьох моментів часу на стадії заганняння

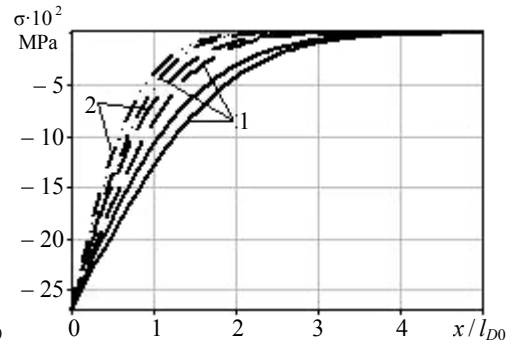


Рис. 2. Розподіли напружень, розраховані для трьох моментів часу на стадії заганняння

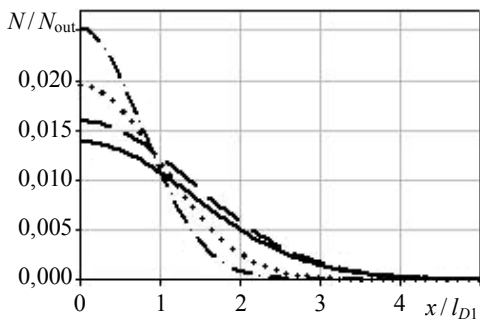


Рис. 3. Профілі розподілу домішки, розраховані для трьох моментів часу на стадії розганяння

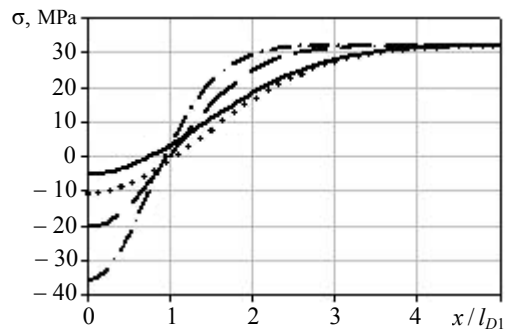


Рис. 4. Розподіли напружень, розраховані для трьох моментів часу на стадії розганяння

відмінна від нуля лише безпосередньо біля поверхні, її значення різко згасє з часом. Так, за час $\tau_1 = 0,01$ значення функції $f_1^{(1)}$ безпосередньо біля поверхні зменшується на три порядки. Тож, можна обмежитися нульовим наближенням, обчисленим за формулою (30). На рис. 3 показані графіки розподілу концентрації домішки за товщинною координатою у фіксовані моменти часу процесу розганяння $\tau_1 = 0,3$ (штрих-пунктирні лінії), $0,5$ (штрихові лінії) та 1 (суцільні лінії). Суцільна крива на цьому рисунку визначає остаточний профіль розподілу домішки в пластині після двох стадій дифузійної обробки. Для порівняння тут побудовано залежність, розраховану за класичною моделлю, що не враховує впливу напружень (пунктирна лінія). На рис. 4 наведені розподіли дифузійних напружень у ці ж моменти часу процесу розганяння, а також напруження, розраховані за класичною лінійною моделлю (пунктирна лінія), у якій не враховано вплив напружень.

Висновки. На стадії заганняння в околі поверхні напівпровідника створюється висока концентрація, яка, залежно від концентрації дифузанта N_{out} , що підтримується зовні, може сягати межі розчинності атомів домішки в кристалічній ґратці. Внаслідок відмінності атомних радіусів домішки й основного матеріалу в дифузійній зоні виникають несумісні деформації, які спричиняють напруження доволі високого рівня. Напруження істотно впливають на процес дифузії. Оскільки атомний

радіус бору є менший, ніж кремнію, то ці напруження є стискаючі, що спричиняє зменшення дифузійного потоку.

На стадії розганяння, яку реалізують за вищої температури, ніж заганняння, концентрація атомів домішки в ґратці швидко спадає з часом. Тому для часів $t > 0,01\Delta t_1$ дифузійні напруження малі та істотно не впливають на процес дифузії домішки. На цій стадії процес дифузії достатньо точно описується класичною лінійною моделлю. Проте, власні напруження все ж впливають на формування остаточного розподілу концентрації атомів домішки в пластині після двох стадій.

Слід підкреслити, що, залежно від умов проведення дифузійного насичення, напруження у приповерхневій області напівпровідника можуть сягати значень, що перевищують межу його пружності. Це супроводжуватиметься виникненням великої кількості дефектів кристалічної ґратки — дислокацій, що, своєю чергою, істотно впливатиме на дифузійні властивості напівпровідника у цій зоні. Тож доцільно було б провести моделювання процесів дифузійного насичення напівпровідників з урахуванням пружно-пластичної поведінки матеріалу.

Числова реалізація методу малого параметра пов'язана з необхідністю обчислення подвійних інтегралів виду (31). Кількість таких інтегрувань швидко зростає з номером наближення. Тож, застосування вищих наближень вимагатиме значних обчислювальних ресурсів і часу реалізації алгоритму. Розроблення чисельних алгоритмів розв'язування нелінійних задач механодифузії у напівпровідниках із використанням проєкційних методів дозволило б істотно знизити вимоги до обчислювальних ресурсів, необхідних для реалізації таких задач, і зменшити затрати машинного часу.

Література

- [1] *Jaeger, R. C.* Introduction to Microelectronic Fabrication; 2nd Ed / *R. C. Jaeger*. — Prentice Hall, 2002. — 320 p.
- [2] 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.
- [3] *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.
- [4] *Toncheva, L. T.* The bending of silicon wafers by thin polycrystalline silicon film deposition and by film doping using boron diffusion / *L. T. Toncheva, I. S. Vassilev* // *Thin Solid Films*. — 1979. — Vol. 60, No 3. — P. 353-359.
- [5] Вплив напружень на дифузію домішок під час лазерного твердофазного легування кремнію / *О. Ю. Бончик, С. Г. Кияк, Г. В. Похмурська* й ін. // *Фізико-хімічна механіка матеріалів*. — 2000. — Т. 36, № 3. — С. 21-26.
- [6] *Кияк, С. Г.* Математичне моделювання впливу температурних напружень на дифузію домішок у субмікронних приповерхневих шарах при лазерному твердофазному легуванні пластин кремнію / *С. Г. Кияк, О. В. Фльорко, В. Ф. Чекурін* // *Тези доповідей 7 Міжнародної конференції «Фізика і технологія тонких плівок»*. — Івано-Франківськ, 2000. — С. 145.
- [7] *Фльорко, О. В.* Математична модель дифузії в деформованій ґратці / *О. В. Фльорко, В. Ф. Чекурін* // *Вісник Державного університету «Львівська політехніка»*. Елементи теорії та прилади твердотільної електроніки. — 2000. — № 393. — С. 64-67.
- [8] *Фльорко, О. В.* Математичне моделювання впливу напружень на формування поверхневих дифузійних шарів у напівпровідниках / *О. В. Фльорко, В. Ф. Чекурін* // *Тез. доп. III Міжнародної конференції «Сучасні проблеми фізики напівпровідників»*, Дрогобич, 25-30 червня 2001. — С. 105.

- [9] Чекурін, В. Ф. Математична модель дифузії домішки в напівпровіднику з урахуванням напружено-деформованого стану / В. Ф. Чекурін // Фіз.-мат. моделювання та інформаційні технології. — 2009. — № 9. — С. 145-159.
- [10] Wapedia. Wiki: Wafers (electronics) [http://wapedia.mobi/en/Wafer_\(electronics\)](http://wapedia.mobi/en/Wafer_(electronics)).
- [11] Бутковский, А. Г. Характеристики систем с распределенными параметрами. Справочное пособие / А. Г. Бутковский. — Москва: Наука, 1979. — 224 с.

Study of nonlinear impurity diffusion in a semiconductor layer

Oleksandra Fliorko

Processes of diffusion treatment of semiconductor wafers with accounting of mechanical stresses caused by inhomogeneous distributions of the impurity atoms in the crystal lattice have been considered in the paper. Nonlinear boundary-value problems which model these processes have been formulated and an algorithm for their solving has been developed. The algorithm is based on the asymptotic expansion of the solution by a small parameter. Kinetics of diffusion saturation by boron and stress state of monocrystalline silicon wafer have been studied in the frame of developed model.

Исследование нелинейной диффузии примеси в полупроводниковом слое

Александра Фльорко

Сформулированы нелинейные краевые задачи, моделирующие процессы диффузионной обработки полупроводниковых пластин с учетом влияния механических напряжений, обусловленных неоднородным распределением примесных атомов в решетке. Разработан алгоритм решения сформулированных задач с использованием асимптотического разложения искомого решения по малому параметру. В рамках разработанной модели исследована кинетика диффузионного насыщения и напряженного состояния пластины монокристаллического кремния при изотермическом легировании его атомами бора.

Представлено доктором фізико-математичних наук В. Кондратом

Отримано 29.07.09