

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

**Факультет електроніки
Кафедра мікроелектроніки**

«На правах рукопису»
УДК _____

До захисту допущено:
Завідувач кафедри
_____ Дмитро ТАТАРЧУК
«__» _____ 20__ р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра
за освітньо-професійною програмою «Мікро- та наноелектроніка»
зі спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка»
на тему: «Моделювання процесів дифузії в мікроелектроніці»**

Виконав:

студент II курсу, групи ДП-21мп
Кореневський Нікіта Вадимович _____

Науковий керівник: проф.каф.МЕ, д.ф.-м.н., проф.,
Короліук Дмитро Володимирович _____

Консультант з нормоконтролю: доц.каф.МЕ, к.ф.-м.н., с.н.с.,
Свечніков Георгій Сергійович _____

Консультант з інформаційних питань: доц.каф.МЕ, к.т.н., доц.,
Діденко Юрій Вікторович _____

Рецензент: Посада, науковий ступінь, вчене звання,
Прізвище, ім'я, по батькові _____

Засвідчую, що у цій магістерській
дисертації немає запозичень з праць
інших авторів без відповідних
посилань.

Студент _____

Київ – 2024 року

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

Факультет електроніки

Кафедра мікроелектроніки

Рівень вищої освіти – перший (бакалаврський)

Спеціальність – 153 «Мікро- та наносистемна техніка»

Освітньо-професійна програма «Мікро- та наноелектроніка»

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри

_____ Дмитро ТАТАРЧУК

«___» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студенту

Кореневського Нікіти Вадимовича

1. Тема дисертації «Моделювання процесів дифузії в мікроелектроніці», науковий керівник дисертації Корольок Дмитро Володимирович проф.каф.МЕ, д.ф.-м.н., проф., затверджені наказом по університету від «___» _____ 20__ р. № _____

2. Термін подання студентом дисертації _____

3. Об'єкт дослідження

Півпровідникові матеріали, процеси дифузії в оксидних шарах, дифузія домішок, теплові ефекти

4. Вихідні дані

5. Перелік завдань, які потрібно розробити

Пошук та ознайомлення з літературними джерелами за темою роботи, розгляд методів дослідження дифузійних процесів, вивчення експериментальних даних, моделювання процесів _____

6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу

Презентація _____

7. Дата видачі завдання 09.10.12

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Пошук та ознайомлення з літературними джерелами за темою роботи		
2	Розгляд методів дослідження дифузійних процесів		
3	Вивчення експериментальних даних		
4	Моделювання процесів		
5	Оформлення магістерської дисертації		

Студент

Нікіта КОРЕНЕВСЬКИЙ

Науковий керівник

Дмитро КОРОЛЮК

ЗМІСТ

ВСТУП	7
РОЗДІЛ 1. МОДЕЛІ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ.....	13
1.1 Рівняння дифузії Фіка.....	13
1.2 Моделі коефіцієнтів дифузії основних домішок у кремнії.....	14
1.3 Аналітичні моделі розподілу домішок під час дифузії в необмеженій, напівобмежених і обмежених підкладках	18
1.4 Моделювання процесу дифузії на стадіях загонки і розгонки домішок	21
1.5 Багатовимірні задачі дифузії.....	24
1.6 Сегрегація домішок на межі оксид-напівпровідник	26
1.7 Дифузійний перерозподіл домішок в окислювальному середовищі.....	27
1.8 Чисельні методи розв'язання рівнянь Фіка	29
РОЗДІЛ 2. ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ІОННОЇ ІМПЛАНТАЦІЇ.....	34
2.1 Основи теорії ЛШШ	34
2.2 Розподіл іонно-імпантованих домішок: гаусовські розподіли, спряжена гаусіана, розподіл Пірсон-4	36
2.3 Розподілу іонно-імпантованих домішок при легуванні розорієнтованих мішеней	41
2.4 Методи моделювання розподілу іонно-імпантованих домішок у багат шарових структурах.....	43
2.5. Локальне легування методом іонної імпантациї	47
2.6. Похила імпантация.....	50
2.7 Дифузійний перерозподіл іонно-імпантованих домішок	54
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ.....	58
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ.....	60

РЕФЕРАТ

Роботу викладено на 59 сторінці, вона містить 2 розділи, 22 ілюстрацій, 2 таблиці та джерела в переліку посилань.

Об'єкт роботи – процеси дифузії в оксидних шарах напівпровідників.

Предмет роботи – дослідження дифузії на різних стадіях виробництва мікроелектронних пристроїв, таких як загонка, розгонка, та інші етапи. Моделювання процесів іонної імплантації, яка використовується для введення домішок у матеріали з використанням іонів.

Мета роботи – поглиблене вивчення та розуміння дифузійних процесів у мікроелектроніці з метою покращення технологій та оптимізації виробництва електронних пристроїв.

В першому розділі представлені опис основного рівняння, що характеризує процес дифузії в речовині за законами Фіка, дослідження моделей, які визначають коефіцієнти дифузії для основних домішок у кремнії, вивчення моделей, що описують дифузію на різних етапах, таких як загонка і розгонка домішок, а також вивчення перерозподілу домішок у процесі дифузії в окислювальному середовищі.

В другому розділі досліджено розподілу домішок, які вводяться за допомогою іонної імплантації, з використанням різних типів розподілу, таких як гаусовські розподіли, спряжені гаусіани, розподіл Пірсона-4. Розглянуто локальне легування за допомогою іонної імплантації, процеси похилої імплантації іонів, а також проведений аналіз дифузійного перерозподілу іонно-імплантованих домішок.

ABSTRACT

The work is presented on 59 pages and consists of 2 chapters, 22 illustrations, 2 tables, and references in the bibliography.

The object of the study is the diffusion processes in the oxide layers of semiconductors.

The subject of the research is the investigation of diffusion at various stages of the production of microelectronic devices, such as annealing, doping, and other stages. Modeling of ion implantation processes, which is used to introduce impurities into materials using ions.

The aim of the work is in-depth study and understanding of diffusion processes in microelectronics with the goal of improving technologies and optimizing the production of electronic devices.

In the first chapter, there is a description of the basic equation characterizing the diffusion process in a substance according to Fick's laws. The study includes models determining diffusion coefficients for major impurities in silicon, examination of models describing diffusion at different stages such as annealing and doping, as well as investigation of impurity redistribution during diffusion in an oxidizing environment.

In the second chapter, the distribution of impurities introduced by ion implantation is explored using various distribution types, such as Gaussian distributions, conjugate Gaussians, and Pearson-4 distribution. The chapter also covers local doping through ion implantation, inclined ion implantation processes, and an analysis of the diffusion redistribution of ion-implanted impurities.

ВСТУП

Нанотехнології в даний час розвиваються швидкими темпами і вносять воістину революційний внесок у різні галузі, включаючи мікро- та оптоелектроніку, де вивчаються можливості широкого використання нанорозмірних матеріалів. Різко збільшений інтерес до наноструктур останніми роками викликаний прагненням до мініатюризації матеріалів, технологій, пристроїв від мікро- до наномасштабів і можливістю значної модифікації і навіть принципової зміни електрофізичних властивостей відомих матеріалів при переході в нанокристалічний стан. Фізикохімічні та енергетичні особливості наноматеріалів істотно впливають на їх властивості. [1]

Факторами, що визначають унікальні властивості наноматеріалів, є розмірні, електронні та квантові ефекти наночастинок, що їх утворюють, а також дуже розвинена поверхня. Численними дослідженнями показано, що значні та технічно цікаві зміни фізико-механічних властивостей наноматеріалів (міцність, твердість, електропровідність та ін.) відбуваються в інтервалі розмірів частинок від кількох нанометрів до 100 нм. У зв'язку з цим важливим стає вивчення властивостей аналогів нанорозмірних кристалічних матеріалів при зазначених розмірах нанокристалів.

Для дослідження електронних, оптичних та емісійних властивостей твердого тіла використовуються як теоретичні, так і експериментальні методи. Використання експериментальних методів призводить до великих тимчасових, фінансових та трудових витрат. Тому застосування методів моделювання властивостей наноструктур дозволить суттєво скоротити зазначені витрати. Використання комп'ютерного моделювання для наносистем має важливі проблеми.

- Відсутній далекий порядок, властивий кристалам, що дозволяє зменшити кількість незалежних ступенів свободи системи.

- Близький порядок, характерний для рідини, не дозволяє визначити всі функціональні властивості наноматеріалів.

- Існують технічні труднощі, пов'язані з моделюванням на атомному рівні макрооб'єктів. Пряме моделювання таких систем у наближенні молекулярної динаміки і, тим більше, квантової механіки важко навіть із використанням сучасної суперкомп'ютерної техніки. Рішенням може бути використання у моделюванні ієрархічного багатомасштабного підходу, коли на кожному нижньому рівні обчислюються параметри та змінні, необхідні для побудови моделей верхнього рівня.

В даний час при розробці наноматеріалів із заданими властивостями використовуються переважно експериментальні методи, що не завжди дозволяє знайти оптимальне рішення і збільшує вартість розробки, тому доцільно активніше залучати методи математичного моделювання, які дають можливість прогнозу складу, характеристик і властивостей майбутніх наноматеріалів.

Для реалізації математичного моделювання фізико-хімічних процесів необхідно мати математичні моделі на базі тих чи інших теоретичних підходів.

[2]

Обчислювальна нанотехнологія є вкрай важливою для створення прототипів наноматеріалів, пристроїв, систем та різноманітних додатків. У той же час вона може бути використана не тільки для того, щоб зрозуміти та охарактеризувати системи, отримані в результаті експериментів, а й щоб прогнозувати властивості нових матеріалів, оскільки між структурними, механічними, хімічними та електричними властивостями в нанорозмірній галузі існує сильний взаємозв'язок.

Обчислювальна нанотехнологія поряд з теорією та експериментом є в даний час самостійним і дуже ефективним методом пізнання закономірностей наносвіту, в той же час вона включає фундаментальні знання та досвідчені

дані. Основою обчислювальної нанотехнології стає комп'ютерне моделювання наносистем. Обчислювальні методи нанотехнології можуть бути використані різними способами. Найрезультативніший полягає в тому, щоб змодельовати нанооб'єкт до того, як він буде синтезований у лабораторних умовах. Позитивним чинником і те, що обчислювальна нанотехнологія може скористатися досягненнями нового наукового напрямку у хімії - молекулярним моделюванням.

Розглянемо деякі математичні моделі динаміки наносистем. Їх можна розділити на три великі групи:

1. Методи математичного опису динаміки взаємодіючих частинок.
2. Математичні моделі кінетики кластеризації та зростання кластерів у нерівноважних умовах.
3. Математичні моделі транспортно-дифузійного перенесення.

Завдання проведення комп'ютерного моделювання наносистем надзвичайно складне і трудомістке, оскільки на молекулярному рівні вже перестають діяти традиційні макроскопічні закони фізики, механіки, опору матеріалів, гідравліки та ін. .

Якщо спробувати позначити основні чисельні методи для систем, що містять велику кількість частинок, то вони зводяться до чотирьох: квантово-теоретичні розрахунки «з перших принципів» (*ab initio*), молекулярна механіка, молекулярна динаміка та методи Монте-Карло. Кожен із чотирьох зазначених методів розрахунку має свої переваги та обмеження. Результати обчислень повинні якомога ближче відображати реальність. Серед зазначених методів виділяють такі:

- квантовомеханічні «з перших принципів»:
 - метод Хартрі – Фока;
 - теорія функціоналу густини;

- метод валентних схем;
- метод молекулярних орбіталей;
- модель поверхні потенційної енергії;
- молекулярні:
 - Молекулярна механіка;
 - Молекулярна динаміка;
- методи Монте-Карло.

Оскільки вирішити квантове рівняння Шредінгера для системи багатьох частинок неможливо, квантотеоретичний підхід полягає у знаходженні обґрунтованих наближень і можливостей поділу змінних, дозволяють спростити схему обчислень без залучення експериментальних даних. Найбільш поширеними методами розрахунку «з перших принципів» є моделі самоузгодженого поля (метод Хартрі – Фока), лінійної комбінації атомних та молекулярних орбіталей, теорії функціоналу щільності, поверхні потенційної енергії та ін. Розрахунки «з перших принципів» без додаткових апріорних припущень щодо потенціалів взаємодії частинок враховують, залежно від ступеня спрощення, використовуюваного цим методом різні квантові ефекти. Однак через величезні обчислювальні труднощі можливий розгляд лише систем, що містять не більше ніж кілька сотень атомів. Проте, такі методи стимулювали прискорений розвиток хімії, дали можливість проводити комп'ютерний розрахунок молекул та сприяли створенню напівемпіричних методів розрахунку великих молекулярних систем.

Методи молекулярної механіки та молекулярної динаміки ґрунтуються на класичній фізиці систем багатьох частинок і не можуть описувати квантові ефекти. Більш того, ці методи для отримання чисельних результатів потребують детального знання взаємодії між частинками, тому в кожному окремому випадку потрібне використання різних моделей. Квантова механіка

вводиться у своїй неявним чином (використання потенціалів взаємодії, одержуваних, наприклад, шляхом розрахунку «з перших принципів»). Для отримання реалістичних результатів у більшості випадків потрібне додаткове припасування зазначених потенціалів до експериментальних даних. Таким чином, неоднозначність потенціалів взаємодії, що використовуються в молекулярній механіці та молекулярній динаміці, обмежує широке застосування цих методів. У той самий час вони дозволяють розглядати великі наносистеми, які у залежність від проведеного дослідження 10⁵—10⁷ атомів.

Мета молекулярної механіки (як і розрахунків «з перших принципів») - знаходження стійких змін для систем багатьох частинок, т. е. визначення сідлових точок (локальних мінімумів) лежить на поверхні потенційної енергії. Однак на відміну від розрахунків «з перших принципів», методи молекулярної механіки та молекулярної динаміки ґрунтуються на класичних уявленнях. Частинки розглядають у випадках як матеріальні точки, взаємодіючі через силові поля, які, своєю чергою, визначаються потенціалами взаємодії. У той час як у квантовомеханічних розрахунках поняття хімічних зв'язків апріорі відсутнє, у методах молекулярної механіки залежно від виду зв'язків вибирають потенціали взаємодії, а також енергію та параметри, що відповідають певним локальним конфігураціям атомів. Однак методи молекулярної механіки можуть успішно застосовуватися лише для порівняно вузького класу молекулярних структур у конфігураціях, близьких до рівноважного стану.

Методи молекулярної динаміки дозволяють вирішувати ньютонівські рівняння руху частинок. У зв'язку з чим може бути розрахована еволюція системи багатьох частинок протягом певної кількості тимчасових кроків, причому на кожному кроці доступна інформація про положення частинок, їх швидкість, кінетичну та потенційну енергію тощо. Усі термодинамічні характеристики системи можуть бути визначені без використання якихось або додаткових параметрів.

У методах Монте-Карло, які широко використовуються в статистичній фізиці, випадково генеруються різні варіанти конфігурації системи, що утворюють статистичний ансамбль, що описується розподілом Больцмана з температурою як зовнішній параметр. Таким чином, молекулярна механіка дозволяє визначити енергетично вигідну просторову будову молекули шляхом знаходження локального мінімуму її потенційної енергії. Молекулярна динаміка дозволяє знайти траєкторію руху атомів у силовому полі молекули. За допомогою методів Монте-Карло розглядається вся статистична сукупність енергетичних станів атомів у молекулі, що дозволяє визначити найвигіднішу в енергетичному відношенні просторову будову молекул, а також оцінити їх термодинамічні характеристики.

Серед моделей кластерних систем виділяють:

- модель зростання кластерів у вільному обсязі;
- моделі нуклеації та зростання кластерів у нанопорах речовини та на поверхні.

Серед математичних моделей транспортно-дифузійного перенесення виділяють:

- механізми перенесення та трансформації речовини та енергії в системі;
- особливості процесів у неекстенсивних системах.

РОЗДІЛ 1. МОДЕЛІ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

1.1 Рівняння дифузії Фіка

В кремнієвої планарної технології процеси створення дифузійних областей описуються за допомогою законів Фіка. Згідно з першим законом Фіка потік J домішки, що дифундує, складається з дифузійної та дрейфової компонент[3]:

$$J = -D\nabla C - Z\mu NE, \quad (1.1.1)$$

де D - коефіцієнт дифузії атомів домішки; ∇ - оператор градієнта; $C \equiv C(x, y, z, t)$ - концентрація домішки, залежна від координат x, y, z та часу дифузії t ; Z - зарядовий стан іонів домішки (+1 - для акцепторів, -1 - для донорів); μ - рухливість заряджених іонів; $N \equiv N(x, y, z, t)$ - концентрація іонізованих атомів домішки; E - напруженість внутрішнього електростатичного поля, створеного градієнтом концентрації іонізованих атомів домішки.

Із закону збереження речовини випливає другий закон Фіка:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C + Z\mu NE). \quad (1.1.2)$$

Розв'язання цього диференціального рівняння в приватних похідних другого порядку проводиться за різних початкових і граничних умов, вид яких залежить від обраних наближень.

Сучасні моделі дифузії розглядають цей процес на атомістичному рівні, що дає змогу пояснити та змодельовати основні фізичні ефекти, які виникають. Генерація вакансій (наприклад, під час іонної обробки мішеней) і нерівноважні процеси (наприклад, на межі розділу $SiO_2 - Si$ під час окиснення) визначають "далекодійні" ефекти. "Локальні" ефекти зумовлені концентрацією домішки: кулонівська взаємодія атомів домішки із зарядженими вакансіями; виникнення внутрішніх електростатичних полів, які

прискорюють дифузію; кластеризація та преципітація домішок; генерація заряджених вакансій внаслідок деформації ґратки.

Зазначені ефекти сильно впливають на дифузію домішок у кремнії, причому при моделюванні розподілів домішок необхідно для кожної домішки та умов процесу встановити фактори, що впливають на коефіцієнт дифузії.

Одним із найважливіших чинників є наявність внутрішніх електростатичних полів, вплив яких призводить до збільшення ефективного коефіцієнта дифузії в h разів:

$$h = 1 + \frac{N}{2n_i} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{N}{2n_i}\right)^2 + 1}}, \quad (1.1.3)$$

де n_i - власна концентрація електронів при температурі дифузії, що визначається з трансцендентного рівняння

$$n_i^2 = 1,5 \cdot 10^{33} T^3 \exp \left(- \frac{1,21 + 7,1 \cdot 10^{-10} \sqrt{\frac{n_i}{T}}}{kT} \right), \text{ см}^{-6},$$

Аналіз формули (1.1.3) показує, що внутрішнє електростатичне поле збільшує ефективний коефіцієнт дифузії максимально вдвічі за $N \gg n_i$.

1.2 Моделі коефіцієнтів дифузії основних домішок у кремнії

В У загальному випадку дифузія домішок у кремнії відбувається за нейтральними V^x , акцепторними V^- , V^{2-} і донорними V^+ вакансіями. У чисельних розрахунках використовується узагальнена форма запису коефіцієнта дифузії[4]:

$$D = D_i \frac{1 + \beta^- \eta + \beta^{2-} \eta^2 + \beta^+ \eta^{-1}}{1 + \beta^- + \beta^{2-} + \beta^+}$$

де $D_i = D^x + D^- + D^{2-} + D^+$ – власний коефіцієнт дифузії, що дорівнює сумі коефіцієнтів дифузії за різними вакансіями; $\beta^r = D^r/D^x$ ($r = -, 2-, +$) – коефіцієнти, що описують ефективність заряджених вакансій щодо нейтральних; $\eta = n/n_i$; n – концентрація електронів.

Урахування специфіки механізмів дифузії кожної домішки дає змогу побудувати моделі температурно-концентраційних залежностей коефіцієнтів дифузії.

Дифузія бору. Дифузія бору відбувається по нейтральних і донорних вакансіях. За низьких і середніх концентрацій коефіцієнт дифузії бору D_{B0} має вигляд

$$D_{B0} = D_{Bi} \frac{1 + \beta_B(T) \frac{1}{\eta}}{1 + \beta_B(T)} \quad (1.2.1)$$

За низьких температур дифузії ($< 900^\circ\text{C}$) і високих концентрацій ($> 3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) необхідно враховувати утворення кластерів $B_{12}Si$, що призводить до аномального перебігу температурно-концентраційної залежності $D_B(T, C)$.

Узагальнена залежність коефіцієнта дифузії бору задається як

$$D_B = \begin{cases} \frac{D_{B0}}{1 + 144 \left(\frac{C_A}{C^*}\right)^{11}}, & C = C_A + 12C_C \\ D_{B0}, & C = C_A \end{cases} \quad (1.2.2)$$

де $C^* = 4,9 \cdot 10^{23} \exp(-0,9 / (kT))$ – рівноважна концентрація кластероутворення, см^{-3} ; C_A – концентрація активної домішки бору, яка визначається зі співвідношення $C = C_A \left[1 + 144 \left(\frac{C_A}{C^*}\right)^{11}\right]$; C_C – концентрація кластерів.

Дифузія фосфору. Дифузія фосфору в кремнії відбувається за нейтральними й акцепторними вакансіями:

$$D_{P0} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^- \eta + D_{Pi}^{2-} \eta^2 \quad (1.2.3)$$

де $D_{Pi}^x = 3,85 \cdot \exp(-3,66/(kT))$, $\text{см}^2/\text{с}$

$D_{Pi}^- = 4,44 \cdot \exp(-4,00/(kT))$, $\text{см}^2/\text{с}$

$D_{Pi}^{2-} = 44,2 \cdot \exp(-4,37/(kT))$, $\text{см}^2/\text{с}$

За високих рівнів легування ($> 10^{20} \text{ см}^{-3}$) спостерігається утворення кластерів P_3Si , що призводить до виникнення сильних пружних напружень у кристалічній решітці та, як наслідок, зменшення ширини забороненої зони.

В області I високої концентрації (рис. 1.2.1), де утворюються Е – комплекси $P + V^{2-} = (PV)^-$, відбувається дифузія фосфору по двозарядних вакансіях акцепторного типу, і коефіцієнт дифузії фосфору в цій ділянці є

$$D_{PI} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^{2-} \left(\frac{n}{n_{ie}}\right)^2 \quad (1.2.4)$$

де n_{ie} - ефективна концентрація власних носіїв у кремнії, що враховує ефект звуження ширини забороненої зони внаслідок сильного легування і дорівнює

$$n_{ie} = n_i \exp\left(\frac{1,5 \cdot 10^{-22}(C_S - 3 \cdot 10^{20})}{kT}\right), \text{ при } C_S > 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3},$$

де C_S – повна поверхнева концентрація фосфору; n – концентрація електрично активного фосфору, яка визначається за загальною концентрацією фосфору в діапазоні температур $900 \div 1050^\circ\text{C}$ із рівняння $C = n + 2,4 \cdot 10^{-41} n^3$.

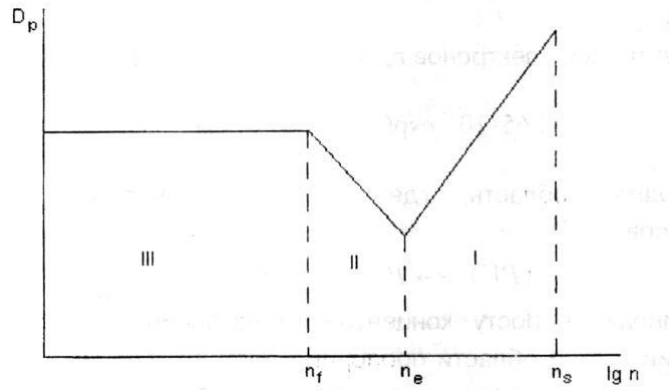


Рисунок. 1.2.1 Залежність коефіцієнта дифузії фосфору від концентрації електронів.

I - область високої концентрації; II - перехідна область;

III- область низької концентрації

Поблизу перехідної області II, коли концентрація електронів n_e становить величину $n_e = 4,65 \cdot 10^{21} \exp(-0,39/(kT)) \text{ см}^{-3}$, починається швидкий розпад $(PV)^-$ комплексів, і відбувається дифузія надмірних вакансій V^- обидва боки від межі x_e . Коефіцієнт дифузії фосфору D_{PII} у перехідній області розраховується за формулою

$$D_{PII} = \left[D_{Pi}^x + D_{Pi}^{2-} \left(\frac{n}{n_{ie}} \right)^2 \right] \left(\frac{n_{ie}}{n} \right)^2. \quad (1.2.5)$$

Область низької концентрації, де визначальним механізмом дифузії є дифузія за нейтральними та однозарядними акцепторними вакансіями, починається з концентрації n_f :

$$n_f = 10^{(0,5 \cdot 10^{-3} T + 19,4)}, \text{ см}^{-3}.$$

Коефіцієнт дифузії D_{PIII} у цій хвостовій області III апроксимується виразом

$$D_{PIII} = D_{Pi}^x + D_{Pi}^- \frac{n_s^3}{n_e^2 n_{ie}} \left(1 + e^{\frac{0,3}{kT}} \right) \cdot e^{\frac{3\Delta E_{gm}}{kT}} e^{-\frac{x-x_e}{L_v}} \quad (1.2.6)$$

де ΔE_{gm} — звуження ширини забороненої зони, зумовлене головним чином механічними напруженнями кристалічної ґратки; L_v - характеристична

дифузійна довжина вакансій V^- , що становить за температур $900 \div 1100^\circ\text{C}$ величину ~ 25 мкм.

Графік залежності коефіцієнта дифузії фосфору в кремнії від концентрації електронів наведено на рис. 1.2.2.

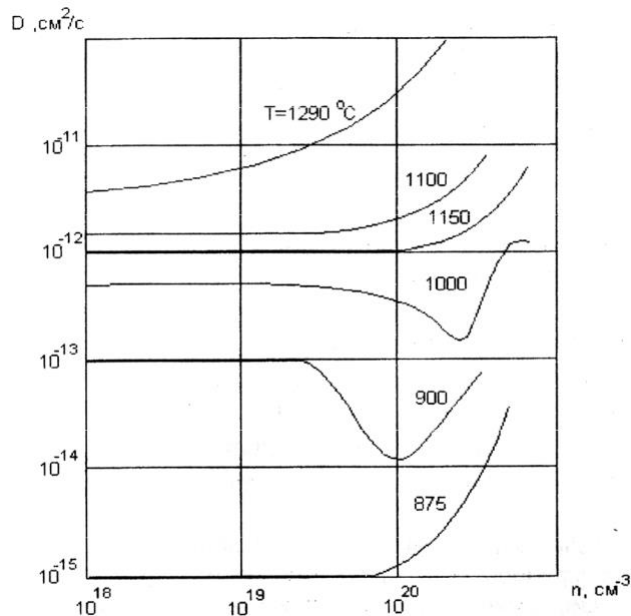


Рисунок 1.2.2 Залежність коефіцієнта дифузії фосфору в кремнії від концентрації електронів

1.3 Аналітичні моделі розподілу домішок під час дифузії в необмеженій, напівобмежених і обмежених підкладках

Велику групу розв'язків може бути отримано в наближенні постійного коефіцієнта дифузії. Тоді друге рівняння Фіка в одновимірному випадку запишеться у вигляді [3]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1.3.1)$$

Для необмеженого тіла за довільного початкового розподілу домішки $C(x,0)$ розв'язок рівняння (1.3.1) має вигляд

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x, 0) e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} d\xi$$

У більшості випадків дифузію розглядають у напівнескінченному тілі, обмеженому площиною $x = 0$, із заданими граничними умовами.

Прикладом відбивної межі, потік домішки через яку в будь-який момент часу дорівнює нулю, у першому наближенні вважають межу розділу $SiO_2 - Si$, оскільки для традиційних домішок (бор, фосфор, миша-Як, сурма) коефіцієнти дифузії в оксиді на два порядки менші за коефіцієнти дифузії в кремнії.

Математично умову границі, що відбиває, записують у вигляді

$$J(0, t) = -D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0,$$

де $J(0, t)$ - потік дифузанта через границю $x = 0$ у будь-який момент часу t . Тоді розв'язок рівняння дифузії Фіка для напівобмеженого тіла з границею, що відбиває, має вигляд

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} C(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} + e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] dt.$$

Друга гранична умова реалізується, наприклад, під час випаровування домішки з попередньо насиченого нею кристала. Цей процес являє собою зворотну дифузію, або дифузію назовні. Математично умова зв'язуючої межі записується у вигляді $C(0, t) = 0$.

Тоді розв'язок рівняння дифузії Фіка для напівобмеженого тіла зі зв'язуючою межею має вигляд:

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} C(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] dt$$

Задача про дифузію домішок з обмеженого тіла актуальна під час розгляду домішок, що швидко дифундують, характеристична дифузійна довжина яких порівнянна з товщиною підкладок.

Розв'язок другого рівняння Фіка у випадку зв'язувальних границь (рис. 1.3.1) знаходиться за таких умов:

- початкова умова (рівномірний початковий розподіл)

$$C(x, 0) = C_0, 0 \leq x \leq l$$

де $0, l$ - координати меж твердого тіла; C_0 - початкова концентрація;

- граничні умови (умови зв'язувальних меж) $C(0, t) = 0; C(l, t) = 0$.

Рішення в цьому випадку виходить у вигляді нескінченного ряду

$$C(x, t) = \frac{4}{\pi} C_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \cdot e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} x$$

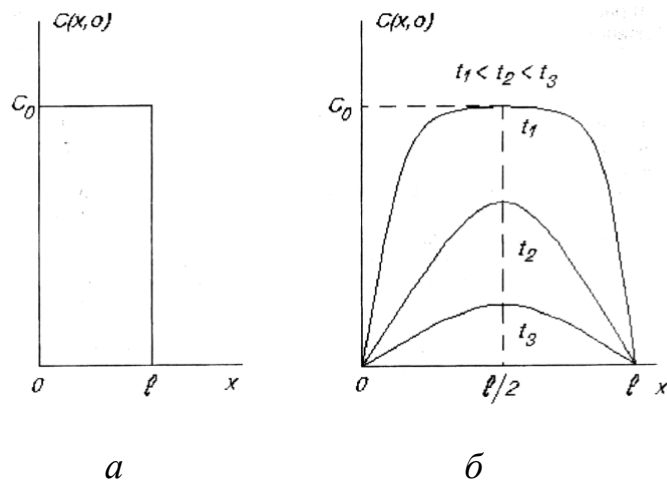


Рисунок 1.3.1 - Розподіл домішки під час дифузії з обмеженого тіла зі зв'язувальними межами:

а - початковий розподіл; *б* - концентраційні профілі за різних часів дифузії

У випадку, коли дифузانت надходить в обмежене тіло через обидві межі (рис. 1.3.2, а), на яких підтримують постійну концентрацію C_0 , що дорівнює в більшості випадків граничній розчинності дифузанта в матеріалі підкладки при температурі дифузії, початкові та граничні умови мають вигляд:

- початкова умова

$$C(x, 0) = \begin{cases} C_0, & x \leq 0; x \geq l \\ 0, & 0 < x < l \end{cases}$$

де $0, l$ – координати меж твердого тіла;

– граничні умови (умови сполучних кордонів)

$$C(0, t) = C_0; C(l, t) = C_0$$

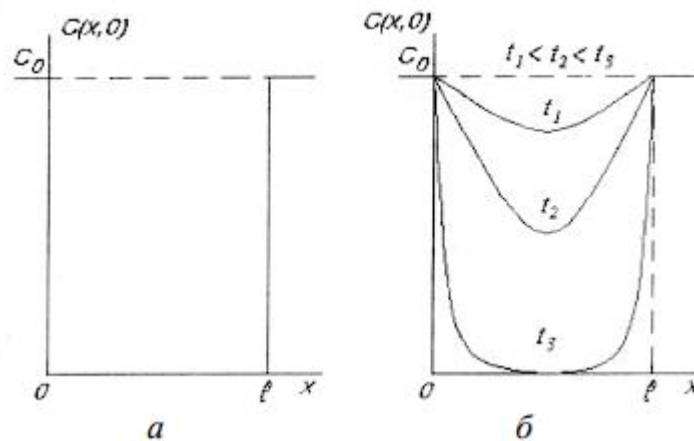


Рисунок 1.3.2. Розподіл домішки під час дифузії з постійного (нескінченного) джерела в обмежене тіло: *a* - початковий розподіл; *б* - концентраційні профілі за різних часів дифузії

Розв'язок другого рівняння Фіка за даних початкових і граничних умов (рис. 1.3.2, б) виходить у вигляді нескінченного ряду

$$C(x, t) = C_0 \left[1 - \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \cdot e^{-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} x \right]$$

Отриманий ряд має хорошу збіжність, причому краще, чим більше t . За умови $t > 4,5 \cdot 10^{-2} \frac{l^2}{D}$ можна обмежитися першим членом ряду, враховуючи похибку трохи більше 1 %:

$$C(x, t) = C_0 \left[1 - \frac{4}{\pi} e^{-\frac{\pi^2 D t}{l^2}} \cdot \sin \frac{\pi}{l} x \right]$$

1.4 Моделювання процесу дифузії на стадіях загонки і розгонки домішок

У планарної технології дифузія проводиться у дві стадії, перша з яких - загартування здійснюється з джерела з постійною поверхневою концентрацією C_s . Поверхнева концентрація визначається або граничною розчинністю домішки, або концентрацією домішки в джерелі дифузанта.

У одновимірному випадку розподіл домішки за глибиною x можна знайти з розв'язку другого рівняння Фіка в наближенні постійного коефіцієнта дифузії D

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}$$

за заданих початкової та граничної умов (рис. 1.4.1, а)

$$C(x > 0, 0) = 0, C(0, t \geq 0) = C_s$$

Якщо вихідна концентрація в об'ємі твердого тіла нехтувано мала, то рішення є (рис. 1.4.1, б)

$$C(x, t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

де $\operatorname{erfc} z = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy$ - функція доповнення інтеграла помилок

Гауса.

Потік $F(0, t)$ домішки через границю $x = 0$, який визначається з першого рівняння Фіка

$$F(0, t) = -D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=0} = C_s \sqrt{\frac{D}{\pi t}}$$

дає змогу розрахувати дозу Q легування як кількість дифузанта, що надійшла в тверде тіло за час дифузії:

$$Q = \int_0^t F(0, t) dt = 2C_s \sqrt{\frac{D}{\pi t}}$$

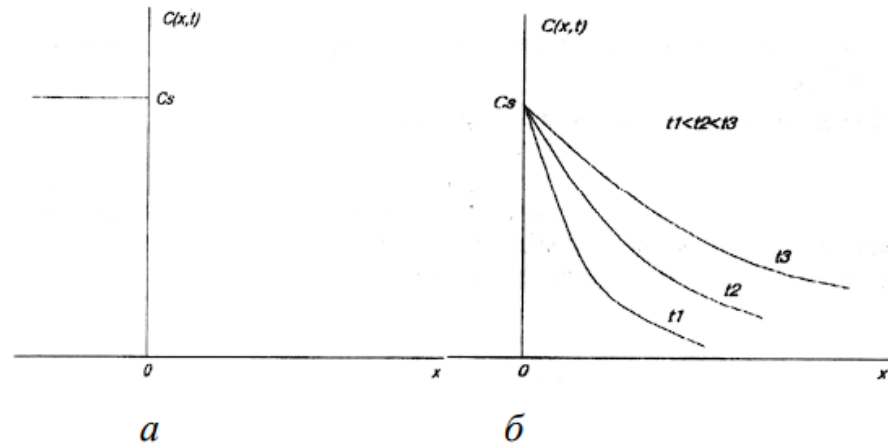


Рисунок 1.4.1 Розподіл домішки в разі дифузії з постійного (нескінченного) джерела в напівобмежене тіло (стадія загонки):

а- початковий розподіл; б - концентраційні профілі за різних часів дифузії

За наявності в підкладці вихідної домішки $C_{\text{вих}}$ протилежного типу глибина x_j залягання сформованого р-п-переходу визначається з умови $C(x_j, t) = C_{\text{вих}}$; $x_j = 2\sqrt{Dt} \cdot \operatorname{erfc}^{-1}\left(\frac{C_{\text{вих}}}{C_s}\right)$

Під час дифузії з попередньо нанесеного джерела дифузанта з обмеженим вмістом домішки Q друге рівняння Фіка вирішується за таких початкових і граничних умов:

$$C(x, 0) = 0, x > 0;$$

$$\int_0^{\infty} C(x, t) dx = Q$$

Розподіл домішки в цьому випадку має вигляд (рис. 1.4.2)

$$C(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

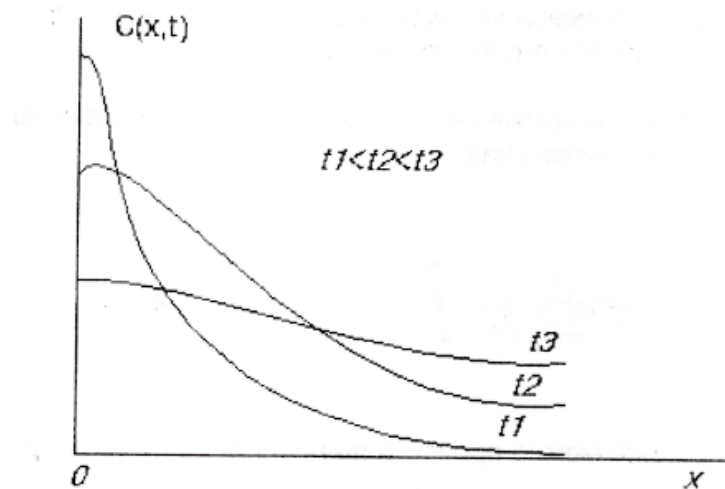


Рисунок 1.4.2 Концентраційні профілі під час дифузії з нескінченно тонкого шару з відбивною межею

Якщо пластина має вихідну домішку протилежного типу про-водимості з концентрацією $C_{\text{вих}}$, то можливе формування р-п-переходу, глибина залягання якого визначається з умови $C(x_j, t) = C_{\text{вих}}$:

$$x_j = 2 \sqrt{Dt \cdot \ln \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt} \cdot C_{\text{вих}}}}$$

1.5 Багатовимірні задачі дифузії

Зменшення розмірів елементів інтегральних схем вимагає врахування крайових ефектів біля кордонів захисних шарів окису кремнію[5].

У загальному випадку для нескінченного двовимірного твердого тіла із заданим початковим розподілом $C(x, 0)$ домішки за глибиною бічна ізотропна дифузія описується скруткою

$$C(x, y, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x, \xi, 0) \cdot e^{-\frac{(\xi-y)^2}{4Dt}} d\xi$$

При цьому процеси дифузії вглиб і під край захисної маски вважаються незалежними й адитивними.

Для двостадійної дифузії нормований розподіл домішки з урахуванням дифузії під край захисної маски (рис. 1.5.1) описується виразами:

- на стадії загонки домішки

$$C(x, y, t) = \frac{C_s}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \operatorname{erfc} \frac{y}{2\sqrt{Dt}}$$

- на стадії розгонки домішки

$$C(x, y, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \operatorname{erfc} \frac{y}{2\sqrt{Dt}}$$

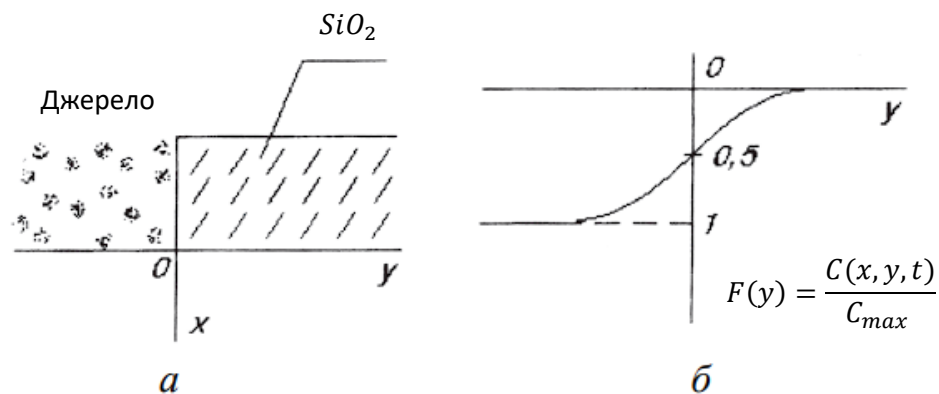


Рисунок 1.5.1 Дифузія під край захисної маски:

a - край окисної маски; *б* - нормований розподіл домішки

Для двостадійної дифузії нормований розподіл домішки під край щілини розміром $2a$ в захисній масці описується виразами:

- на стадії загонки домішки

$$C(x, y, t) = \frac{C_s}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

- на стадії розгонки домішки

$$C(x, y, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

Для двостадійної дифузії нормований розподіл домішки через прямокутне вікно розміром $2a \times 2b$ у захисній масці описується виразами:

- на стадії загонки домішки

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_s}{4} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

- на стадії розгонки домішки

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{2\sqrt{Dt}} \right] \cdot \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{2\sqrt{Dt}} \right];$$

1.6 Сегрегація домішок на межі оксид-напівпровідник

Під час дифузії в окислювальному середовищі необхідно враховувати сегрегацію домішки на рухомій межі розділу і поглинання кремнію шаром оксиду.

В стані термодинамічної рівноваги на межі розділу двох матеріалів концентрації домішок пов'язані через рівноважний коефіцієнт сегрегації m_0 :

$$m_0 = \frac{C_s}{C_0}; C_0 = \frac{C}{m_0}$$

де C_0 - концентрація домішки на межі розділу $SiO_2 - Si$ в шарі оксиду; C_s - концентрація домішки на межі розділу $SiO_2 - Si$ в шарі кремнію.

Якщо рівновага порушується, $C_0 \neq \frac{C}{m_0}$, то через межу $SiO_2 - Si$ починає протікати сегрегаційний потік домішки J_s (рис. 1.6.1), що прагне відновити рівновагу:

$$J_s = -v_s (C_0 - C_s/m_0), \quad (1.6.1)$$

де v_s - сегрегаційний коефіцієнт масопереносу.

Нерівність концентрацій виникає під час окиснення кремнію, коли відбувається рух межі розділу $SiO_2 - Si$. При цьому виникає потік домішки, пов'язаний зі збільшенням об'єму оксиду V_0 і зі зменшенням об'єму кремнію V_s , витраченого на утворення шару SiO_2 . При цьому $V_s = \beta V_0$, β (або α) $\approx 0,44$. Тоді ефективний коефіцієнт сегрегації дорівнює

$$m_s = \frac{C_s}{C_0} = m_0 \frac{1 + \frac{v}{v_s}}{1 + m_0 \beta \frac{v}{v_s}} \quad (1.6.2)$$

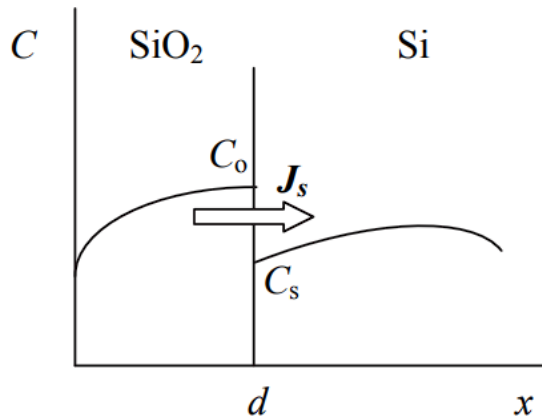


Рисунок 1.6.1 Формування сегрегаційного потоку домішки J_s

Аналіз виразу (1.6.2) показує, що величина m_s змінюється від m_0 до $1/\beta$ (~ 2) залежно від швидкості окислення. Сегрегаційний потік домішки J_s на рухомій межі розділу $SiO_2 - Si$ дорівнює:

$$J_s = C_s \left(\beta - \frac{1}{m_0} \right) \frac{v}{1 + \frac{v}{v_s}}$$

1.7 Дифузійний перерозподіл домішок в окислювальному середовищі

У планарної технології часто проводять дифузійний перерозподіл домішок з одночасним окисленням. Наявність рухомої межі розділу $SiO_2 - Si$ навіть в одновимірному наближенні значно ускладнює математичне моделювання процесу дифузії. Такі задачі являють собою нелінійні диференціальні рівняння в приватних похідних параболічного типу і розв'язуються на ЕОМ методом кінцевих різниць[6].

У низці випадків розв'язок про дифузію в окислювальному середовищі має аналітичне подання. Розв'язок одновимірного рівняння Фіка для дифузії в

умовах перерозподілу домішки між кремнієм і окисом, що розтікає, можна розглядати в рамках таких припущень.

По-перше, для більшості традиційних дифузантив, таких як бор, фосфор, сурма, арсен, миш'як, коефіцієнт дифузії в окисній плівці D_{SiO_2} у $10 \div 1000$ разів менший за коефіцієнт дифузії в кремнії D_{Si} . Тому дифузією цих домішок в окисній плівці можна знехтувати.

По-друге, розглядаються великі часи окислення, за яких формується значний шар оксиду $X(t) \approx \sqrt{Bt}$.

По-третє, на рухомій межі розділу $SiO_2 - Si$ виникає потік домішки внаслідок сегрегації та перерозподілу домішки з кремнію в зростаючий оксид. У міру зростання оксиду, який утворюється за рахунок матеріалу підкладки, межа розділу $SiO_2 - Si$ всувається в кремній (рис. 1.7.1).

Виходячи зі значень густин і молекулярних ваг SiO_2 і Si , можна показати, що для формування шару оксиду завтовшки $X(t)$ поглинається шар кремнію завтовшки $\alpha X(t)$, де коефіцієнт використання кремнію при окисненні $\alpha \cong 0,44$.

Сегрегаційний перерозподіл описується оберненим m_s коефіцієнтом сегрегації k_s , що дорівнює відношенню концентрації C_{SiO_2} домішок, які впровадилися в оксид, до концентрації C_{Si} домішок у кремнії на кордоні $SiO_2 - Si$:

$$k_s = C_{SiO_2} / C_{Si}$$

Потік домішки J , що діє в цьому разі на рухомій межі розділу, дорівнює:

$$J = C_{Si}(\alpha - k_s) \frac{v}{1 + v/v_s}$$

де v - швидкість окиснення; v_s - сегрегаційний коефіцієнт масопереносу. За малих швидкостей окиснення, коли $v \ll v_s$, потік домішки на межі буде $J = C_{Si}(\alpha - k_s)v$.

При параболічному законі швидкість росту оксиду є

$$v = \frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B}{t}},$$

тоді потік домішки на межі $x = x_0$ ($x_0 = \sqrt{Bt}$) дорівнює

$$J = -D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=x_0} = \frac{-k_s + \alpha}{2} \sqrt{\frac{B}{t}} C(x_0, t)$$

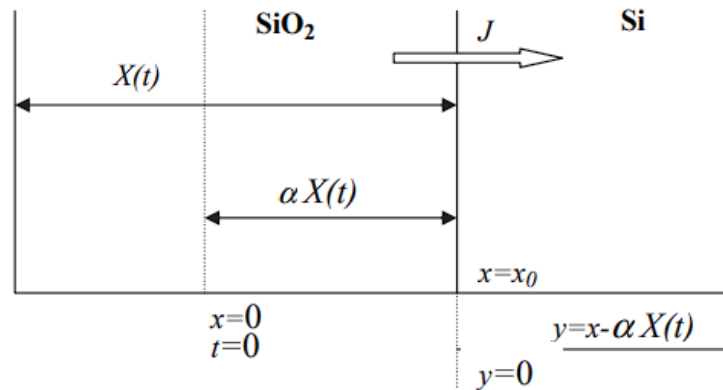


Рис. 1.7.1 Система координат під час росту оксиду на поверхні кремнію

При дослідженні дифузійного перерозподілу в окислювальному середовищі початок координат пов'язується з межею розділу $SiO_2 - Si$.

Переходячи до системі координат зі змінною $y = x - \alpha\sqrt{Bt}$ і зробивши заміну змінної інтегрування $\eta = \frac{\xi}{2}\sqrt{Dt}$, отримаємо

$$C(y, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty C(\eta, 0) \left\{ e^{-\left(\eta - M - \frac{y}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} - \frac{\frac{k_s M}{\alpha} - \eta}{\frac{k_s M}{\alpha} + \eta} \cdot e^{4M\eta} \cdot e^{-\left(\eta - M - \frac{y}{2\sqrt{Dt}}\right)^2} \right\} d\eta$$

де $M = \frac{\alpha\sqrt{Bt}}{2\sqrt{Dt}}$ – коефіцієнт відносної швидкості переміщення поверхні кремнію при окисненні.

1.8 Чисельні методи розв'язання рівнянь Фіка

У загальному випадку розв'язання рівнянь дифузії Фіка (1.1.1) і (1.1.2) здійснюється методами скінченних різниць на нерівномірній дискретній сітці

з вузловими точками, розташованими в межах меж приладу або області моделювання, що розглядається.

Для апроксимації за часом лівої частини рівняння (1.1.2) можуть бути використані явний або неявний методи Ейлера, метод формул диференціювання назад (ФДН), інші методи, а також складові алгоритми на основі зазначених вище методів.

Розглядаючи друге рівняння Фіка (1.1.2) з урахуванням нелінійного коефіцієнта дифузії $D(N)$, запишемо його у вигляді

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D\nabla C) = \Omega(C) \quad (1.8.1)$$

де $\Omega(C)$ - диференціальний оператор.

Рівняння (1.8.1) розв'язується в загальному вигляді методом кінцево-різницевих апроксимацій.

Просторова апроксимація

Запишемо одновимірний різницевий аналог $L(C_i)$ диференціального оператора $\Omega(C)$ на триточковому шаблоні з просторовою нерівномірною сіткою розбиття $\{x_i\}$, де $i = 1, 2, 3, \dots, n - 1$ (рис. 1.8.1).

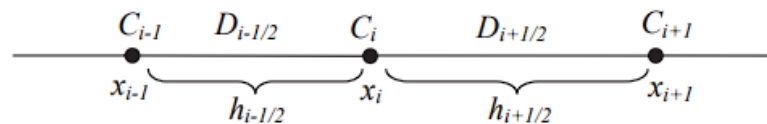


Рисунок 1.8.1 Триточковий шаблон із трьома крапками із просторовою нерівномірною сіткою розбиття

Ліва $\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_л$ і права $\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_пр$ перші різницеві похідні будуть представлені у вигляді

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_л \cong \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_пр \cong \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i}$$

Тоді різницевий аналог $L(C_i)$ буде у вигляді

$$L(C_i) \cong \frac{D_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i} - D_{i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}{(x_{i+1} - x_{i-1})/2}$$

Позначивши крок $h_{i-1/2} = x_i - x_{i-1}$ і $h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$, отримуємо

$$L(C_i) \cong \frac{2}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}} \left[D_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{h_{i+1/2}} - D_{i-1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{h_{i-1/2}} \right]$$

Розв'язання отриманої системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) дає розподіл домішки на кожному часовому кроці. При цьому для кожної домішки необхідно використовувати свою сітку з числом вузлів не менше 100. Показано, що краще використовувати рівномірну або кусочно-рівномірну сітку. Динамічно перебудовувані сітки через часту їх зміну вимагають значних витрат часу. При цьому необхідно чітко стежити за локальною похибкою апроксимації.

Інше джерело помилки просторової апроксимації зумовлене наближенням обчисленням коефіцієнта дифузії $D_{i+1/2}$ в інтервалі $x_{i+1} - x_i$. Для визначення

$D_{i+1/2}$ розглянемо перший закон Фіка $J = -D(C) \frac{dC}{dx}$

Проінтегруємо його в інтервалі $x_i < x < x_{i+1}$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} J dx = - \int_{x_i}^{x_{i+1}} D(C) \frac{dC}{dx} dx = - \int_{C_i}^{C_{i+1}} D(C) dC = -D'_{i+1/2} (C_{i+1} - C_i),$$

звідки

$$D'_{i+1/2} = \frac{1}{(C_{i+1} - C_i)} \int_{C_i}^{C_{i+1}} D(C) dC$$

або

$$D''_{i+1/2} = \frac{D(C_{i+1}) + D(C_i)}{2} \text{ або } D'''_{i+1/2} = D\left(\frac{C_{i+1} + C_i}{2}\right)$$

Очевидно, що всі три формули дають один і той самий результат за постійного коефіцієнта дифузії або за коефіцієнта дифузії, прямо пропорційного концентрації домішки.

Апроксимація за часом

Для апроксимації за часом лівої частини другого рівняння Фіка (1.1.2) використовують кілька методів. При цьому весь часовий інтервал розбивається з кроком $\tau^{j+1} = t^{j+1} - t^j$, де j - номер кроку за часом (рис. 1.8.1).

Згідно з явним методом Ейлера виходить система лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР)

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \Omega(C^j)$$

Якщо крок порядку $\tau^* = \min_i(h_i^2/D_i)$ схема стає нестійкою і хороша апроксимація за часом досягається лише за умови інтегрування з кроком $(0,01 \div 0,001)\tau^*$, тому явна схема практично не використовується.

Неявний метод Ейлера

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \Omega(C^{j+1})$$

стійкий за кроку інтегрування за часом $(0,5 \div 1)\tau^*$.

Як середнє між двома попередніми апроксимаціями за часом може розглядатися метод трапецій

$$\frac{C^{j+1} - C^j}{\tau^{j+1}} = \frac{1}{2}[\Omega(C^{j+1}) + \Omega(C^j)]$$

Цей метод стійкіший, точніший, але для реалізації потребує або збільшення у 2 рази машинного часу, або одного додаткового масиву.

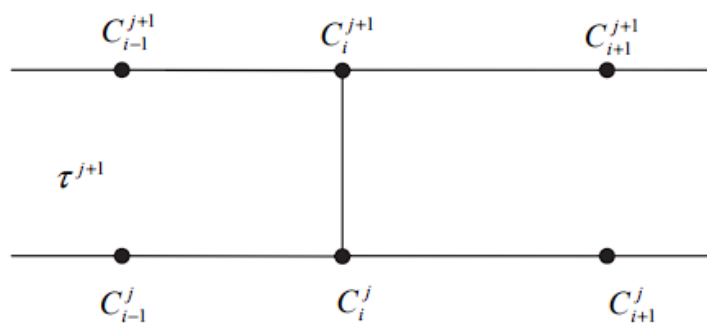


Рисунок 1.8.1 Просторово-часова нерівномірна
нерівномірна сітка розбиття за координатою x і часом t

Одним зі значних недоліків вищенаведених методів є велика (до 10 %) помилка у визначенні концентрації на поверхні модельованої структури. Цього недоліку за великого кроку інтегрування за часом $\sim (10 \div 15)\tau^*$ позбавлений метод, що використовує формули диференціювання назад порядку m .

РОЗДІЛ 2. ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ПРОЦЕСУ ІОННОЇ ІМПЛАНТАЦІЇ

2.1 Основи теорії ЛШШ

Іонна імплантація - це процес впровадження іонізованих атомів домішки з енергією, достатньою для проникнення іонів у приповерхневі шари мішені[7].

Молекулярні іони, впроваджуючись у кристал, розпадаються на атомні іони. При цьому енергії атомних іонів є

$$E_i = E_0 \cdot \frac{M_i}{M_0},$$

де E_i, M_i - енергія і маса атомного йона; E_0, M_0 - енергія і маса молекулярного йона.

Доза опромінення Q - кількість іонів, що падають на одиницю поверхні мішені за час імплантації t : $Q = J \cdot t$, де J - щільність іонного струму.

Поверхнева концентрація N_s іонів, що падають, визначається дозою опромінення $N_s = \frac{Q}{q} = \frac{J \cdot t}{n \cdot e} = 6,25 \cdot 10^{12} Q/n$, іон/см², якщо доза Q у мкКл/см².

Основною теорією, що описує процеси під час руху іонів у твердих тілах, є теорія Ліндхарда, Шарфа і Шиотта - теорія ЛШШ. Теорія дає змогу розрахувати енергетичні втрати, параметри пробігів, профілі розподілу радіаційних дефектів і впроваджуваних домішок.

Теорія ЛШШ справедлива для аморфних однорідних середовищ, тому виникають певні труднощі, наприклад, під час теоретичного розгляду імплантації багат шарових структур на кшталт $SiO_2 - Si, Si_3N_4 - SiO_2 - Si$ тощо. Реальні підкладки є кристалічними, тому навіть під час імплантації розорієнтованих мішеней проявляється ефект каналювання.

При впровадженні прискорених іонів у тверде тіло іони в процесі свого руху втрачають енергію і розсіюються. Згідно з теорією ЛШШ, основними механізмами енергетичних втрат прискорених іонів у твердому тілі є втрати за рахунок пружних зіткнень із ядрами атомів мішені і взаємодії зі зв'язаними електронами. Ці два механізми припускають незалежними й адитивними.

При впровадженні прискорених іонів у тверде тіло траєкторії іонів складаються з окремих ламаних ліній (рис. 1.2.1).

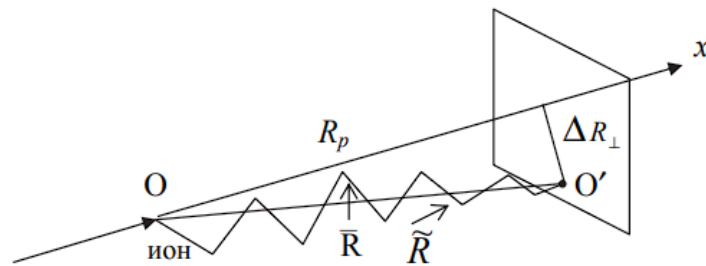


Рисунок 2.2.1 Зв'язок між траєкторним $\tilde{R}$, проєктованим R_p , поперечним

$\Delta R_{\perp}$ і векторним $\bar{R}$ пробігами:

O і O' – точка початку руху іона від поверхні і точка його зупинки в твердому тілі відповідно

У загальному випадку профілі розподілів іонно-імплантованих домішок описуються функцією розподілу $p(x, E) \equiv p(x)$ – густини ймовірності того, що іон з енергією E зупиниться на глибині x .

Симетричні профілі досить добре описуються гаусовським розподілом з першим початковим і другим центральним моментами:

- нормальний пробіг, або перший початковий момент,

$$R_p = \mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx$$

- середньоквадратичне відхилення нормального пробігу, або другий центральний момент

$$\Delta R_p^2 = \mu_2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 p(x) dx$$

Більшість реальних профілів асиметричні, і для їхньої апроксимації використовують функції розподілів, що враховують вищі моменти за R_p :

– нормований коефіцієнт асиметрії γ , або третій центральний нормований момент,

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x - R_p)^3}{\Delta R_p^3} p(x) dx$$

– нормований коефіцієнт затухання β , або четвертий центральний нормований момент,

$$\beta = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x - R_p)^4}{\Delta R_p^4} p(x) dx$$

Для симетричних профілів $\gamma = 0$, а для несиметричних γ може бути як позитивним, так і негативним.

Ексцес характеризує розподіл поблизу максимуму. Розподіли з $|\beta| > 3$ мають високу й гостру вершину порівняно з гаусовим розподілом, а з $|\beta| < 3$ – нижчу й плоскішу.

Вихідні передумови сучасних теорій не дають змоги одержати значення β розрахунковим шляхом, і його задають апроксимувальною функцією, сконструйованою з коефіцієнта асиметрії:

$$\beta = 3,28\gamma^2 + 0,39\gamma + 3,08$$

Параметри розподілів іонно-імплантованих домішок можуть бути розраховані, виходячи з теорії ЛШШ, або визначені з таблиць.

2.2 Розподіл іонно-імплантованих домішок: гаусовські розподіли, спряжена гаусіана, розподіл Пірсон-4

У першому наближенні для аморфних і полікристалічних мішеней розподіл густини ймовірності $p(x, E)$ є функцією двох основних параметрів:

нормального пробігу R_p і страгглінгу ΔR_p , і являє собою симетричну функцію Гауса[8].

Під час опромінення однорідної аморфної або полікристалічної мішені моноенергетичним пучком з енергією E розподіл концентрації $N(x)$ впроваджених атомів описується функцією

$$N(x) = Q p(x, E) = N_m \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (2.2.1)$$

де Q - доза імплантованих іонів, що дорівнює числу іонів, які пройшли крізь одиницю поверхні мішені за час опромінення; N_m - передекспоненціальний множник, який визначається з умови нормування на дозу

$$Q = \int_0^{\infty} N(x) dx \quad (2.2.2)$$

Для визначення нормуючого множника N_m на практиці розглядають два випадки.

У першому випадку практично вся гаусіана розташована в мішені (рис. 2.2.1, а), що, згідно з положеннями теорії ймовірностей і математичної статистики (правило "трьох сигм"), з імовірністю 0,997 є правильним за умов $R_p \geq 3\Delta R_p$.

Розподіл домішки у випадку нерозсіченої гаусіани є

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (2.2.3)$$

У випадку усіченої гаусіани (рис. 2.2.1, б), коли $R_p < 3\Delta R_p$, ление домішки буде у вигляді

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \Delta R_p (1 + \operatorname{erf} \frac{R_p}{\sqrt{2}\Delta R_p})} \cdot \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (2.2.4)$$

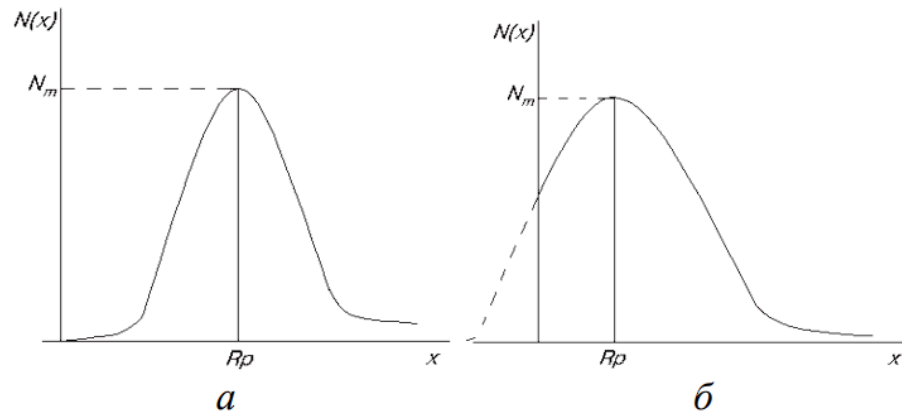


Рисунок 2.2.1. Розподіл іонно-імплантованих домішок у наближенні двох параметрів: *a* - не усічена гауссіана; *б* - усічена гауссіана

Якщо підкладка легована вихідною домішкою протилежного типу з концентрацією $N_{\text{вх}}$, то можливе виникнення одного або двох р-п-переходів, глибини залягання яких виходять з умови $N(x_{j1,2}) - N_{\text{вх}} = 0$.

У разі несіченої гаусіани з рівності

$$\frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cdot e^{-\frac{(x_{j1,2}-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}} = N_{\text{вх}}$$

знаходимо $x_{j1,2} = R_p \pm \Delta R_p \sqrt{2 \ln \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p N_{\text{вх}}}}$

У більшості випадків реальні профілі іонно-імплантованих домішок мають значну асиметрію, і їхня апроксимація симетричними розподілами на кшталт гаусових значною мірою незадовільна.

Фізичною причиною асиметрії профілів є характер передачі імпульсу під час руху прискорених іонів у твердому тілі. Так, під час зіткнення легких іонів з атомами мішені відносно велика величина зворотного розсіювання. Це призводить до збільшення концентрації в приповерхневій ділянці профілю, що характерно, наприклад, для іонів бору (рис. 2.2.2, а).

Для важких іонів, що мають значну інерцію, розсіювання у зворотному напрямку незначне, і вони проникають на більшу глибину, призводячи до збільшення концентрації в глибині підкладки (рис. 2.2.2, б), що характерно, наприклад, для миш'яку.

Для опису несиметричних профілів використовується третій центральний нормований момент γ (коефіцієнт асиметрії).

У наближенні, що враховує три параметри, використовують два гауссовські розподіли, які мають свої нормальні пробіги R_{p1} і R_{p2} і страгглінги ΔR_{p1} і ΔR_{p2} . Гауссовські розподіли об'єднуються при модальній довжині пробігу R_m :

$$N(x) = \begin{cases} \frac{2Q}{\sqrt{2\pi}(\Delta R_{p1} + \Delta R_{p2})} \cdot \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right], & 0 \leq x \leq R_m \\ \frac{2Q}{\sqrt{2\pi}(\Delta R_{p1} + \Delta R_{p2})} \cdot \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\Delta R_{p1}^2}\right], & x \geq R_m \end{cases} \quad (2.2.5)$$

Наведена апроксимація правильна тільки для слабо скошених профілів з $0,5 \leq |\gamma| \leq 1$.

По початковій енергії E визначаються R_p , ΔR_p і γ . Модальний пробіг R_m розраховується за формулою $R_m = R_p + 0,8(\Delta R_{p2} - \Delta R_{p1})$, а зв'язок між ΔR_{p1} , ΔR_{p2} , γ і ΔR_p наведено у вигляді таблиці (табл. 2.2.1).

Таблиця 2.2.1

Параметри розподілів у спряжених напівгаусіанах

$\gamma > 0$	0,0	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
ΔR_{p1} / ΔR_p	1,000	1,062	1,123	1,241	1,360	1,486	1,633
ΔR_{p2} / ΔR_p	1,000	0,936	0,871	0,729	0,570	0,373	0,081

Якщо $\gamma < 0$, то $\Delta R_{p1} \Leftarrow \Delta R_{p2}$, $\Delta R_{p2} \Leftarrow \Delta R_{p1}$.

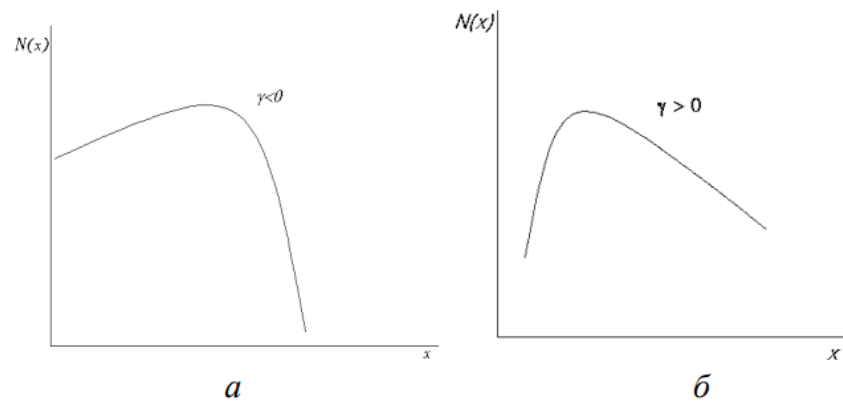


Рисунок 2.2.2. Асиметричні концентраційні профілі:

a - для легких іонів з $\gamma < 0$; *б* - для важких іонів з $\gamma > 0$

Застосування цього наближення трьох параметрів обмежене умовою $|\gamma| < \gamma_0$, що не дає змоги описувати профілі впровадження легких іонів із досить високою енергією.

Під час легування кремнію іонами бору діапазон допустимих енергій обмежений зверху величиною 70 кеВ, у той час як для фосфору вона становить 700 кеВ, а для іонів миш'яку і сурми - понад 1000 кеВ.

Більшість профілів мають значну асиметрію, тому необхідно обирати функції, які добре апроксимують такі розподілення і враховують більш високі моменти за нормальним пробігом.

Одним із найвдаліших варіантів такої апроксимації є розподіл Пірсона в наближенні чотирьох параметрів - Пірсон-4 [9]. Розподіл Пірсон-4 враховує чотири параметри: нормальний пробіг R_p , страгглінг ΔR_p , параметр асиметрії γ і загасання β .

Розподіл Пірсон-4 є розв'язанням диференціального рівняння

$$\frac{dh(x)}{dx} = \frac{(x - a)h(x)}{b_2x^2 + b_1x' + b_0} \quad (2.2.6)$$

де $h(x)$ - функція розподілу, що задовольняє умову нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x)dx = 1; a, b_0, b_1, b_2 - \text{константи}; x' = x - R_p$$

Константи a, b_0, b_1, b_2 можуть бути виражені через інтегральні параметри розподілу:

$$a = -\gamma \mu_2^{1/2} (\beta + 3) / A; b_0 = -\mu_2 (4\beta - 3\gamma^2) / A$$

$$b_1 = a; b_2 = -(2\beta - 3\gamma - 6) / A,$$

де $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$.

Нормоване загасання апроксимується квадратичним многочленом.

$$\beta = 3,28\gamma^2 + 0,39\gamma + 3,08.$$

Розподіл Пірсон-4 концентрації іонно-імпантованих домішок матиме вигляд

$$N(x) = N_0 |b_2 x'^2 + b_1 + b_0|^{\frac{1}{2b_2}} \exp \left[-\frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{|4b_0b_2 - b_1^2|}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2x' + b_1}{\sqrt{|4b_0b_2 - b_1^2|}} \right] \quad (2.2.7)$$

2.3 Розподілу іонно-імпантованих домішок при легуванні розорієнтованих мішеней

Якщо кристал орієнтований точно за напрямком із низькими кристалографічними і
індексами, то для рухомого іона ряди атомів кристала утворюють канал (рис. 2.3.1, а), а траєкторія іона збігається з віссю каналу (рис. 2.3.1, б).

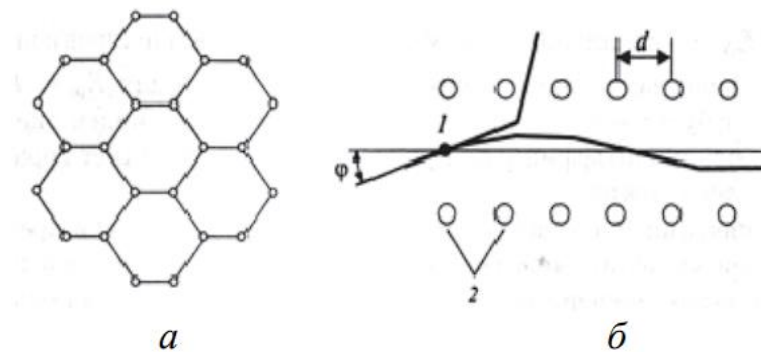


Рисунок 2.3.1 Ефект каналювання:

a - розташування атомів у кремнії в площині, перпендикулярній напрямку [110]; *б* - рух упродовженого іона вздовж каналу 1, утвореного атомами мішені 2

Розподіл іонно-імпантованих домішок в однорідних розорієнтованих монокристалічних мішенях з урахуванням ефекту каналювання (рис. 2.3.2) апроксимується в такому вигляді:

$$N'(x) = \begin{cases} N(x), & 0 \leq x \leq R_0 \\ N(R_0) \cdot e^{-\frac{x-R_0}{\lambda}}, & x > R_0 \end{cases}$$

де $N(x)$ - будь-який з відомих розподілів; R_0 - координата точки сполучення заданого розподілу з експоненціальним "хвостом", при цьому $R_0 > R_m$ (R_m - координата точки максимуму концентрації); λ - характерна довжина експоненціального "хвоста".

Аналіз експериментальних даних і чисельні розрахунки показують, що в першому наближенні величина λ не залежить від дози й енергії імплантації. Значення координати R_m залежить від дози та енергії іонів і може бути знайдене зі співвідношення

$$F^* = \frac{N'(R_m)}{N'(R_0)}$$

яке суттєво залежить тільки від дози для заданої комбінації іон-мішень. Значення λ і F^* для іонів бору, фосфору та миш'яку при їх впровадженні в монокристалічний кремній наведено в табл. 2.3.1

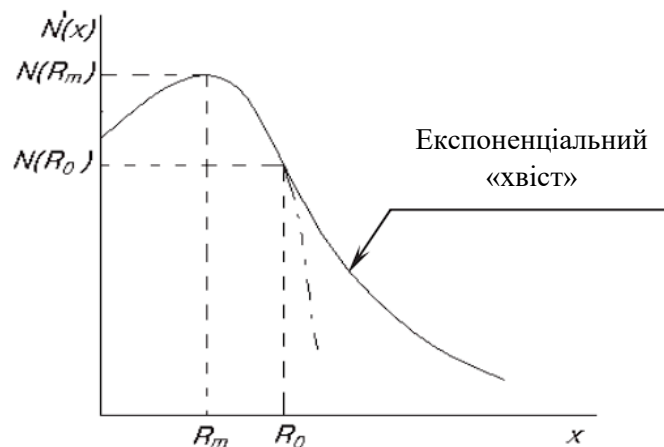


Рисунок 2.3.2 Розподіл іонно-імпантованої домішки в розорієнтованій кристалічній мішені (розподіл Пірсон-4) з урахуванням ефекту каналізування

Таблиця 2.3.1

Значення параметрів λ і F^*

Доза, см^{-2}	Тип домішки		
	бор $\lambda = 0,045 \text{ мкм}$	фосфор $\lambda = 0,067 \text{ мкм}$	миш'як $\lambda = 0,022 \text{ мкм}$
$< 10^{13}$	2,0	5	2,0
10^{13}	2,3	17	2,3
$5 \cdot 10^{13}$	2,6	40	5,0
10^{14}	6,0	44	5,3
$5 \cdot 10^{14}$	10,2	51	12,4
10^{15}	12,5	55	16,7
$5 \cdot 10^{15}$	13,0	62	20,0
10^{16}	14,3	71	33,0
$5 \cdot 10^{16}$	21,0	150	42,3

2.4 Методи моделювання розподілу іонно-імплантованих домішок у багат шарових структурах

В У процесі іонного легування пасивувальні плівки SiO_2 дають змогу вберегти поверхню підкладок від забруднення та пошкоджень, а також аморфізувати поверхневий шар з метою усунення ефекту каналювання. Крім того, пасивувальні плівки запобігають зворотній дифузії і випаровуванню імплантованих іонів, що мають високу летючість.

Метод підбору доз має високу ефективність при моделюванні профілів іонно-імплантованих домішок у багат шарових структурах. За допомогою цього методу можна отримати прийнятну адекватність модельного розподілу і профілю розподілу домішки з мінімальними обчислювальними витратами. Метод підбору доз заснований на статистичних розподілах домішок і

чисельному інтегруванні доз у кожному шарі. Метод підбору доз реалізується за таким алгоритмом.

Нехай задано багат шарову структуру, що містить N шарів (рис. 2.4.1) з глибинами залягання меж розділу d_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Розподіл іонно-імплантованих домішок у кожному i -му шарі описується функцією $f_i(x)$ з відповідним нормувальним множником N_{mi} , як яку можна вибрати будь-яку з відомих функцій розподілу (гаусівські, Пірсон-4 тощо).

Розподіл впровадженої домішки $n_1(x)$ у першому шарі є

$$n_1(x) = N_{m1} f_1(x).$$

Доза Q_1 , тобто кількість іонів, що зупинилися в першому шарі, дорівнює

$$Q_1 = \int_0^{d_1} N_{m1} f_1(x) dx$$

В припущенні, що вся структура виконана з матеріалу шару 2, визначається глибина d_1' , на якій зупинилося число іонів Q_1' , що дорівнює дозі Q_1 , з умови

$$Q_1' = Q_1 = \int_0^{d_1} N_{m2} f_2(x) dx$$

Таким чином, для визначення профілю в другому шарі необхідно зрушити вихідний профіль другого середовища на $\Delta d_1 = d_1' - d_1$ до межі розділу на глибині d_1 :

$$n_2(x) = N_{m2} f_2(x + \Delta d_1)$$

Перейшовши до третього шару, визначимо кількість іонів, впроваджених у перші два шари,

$$Q_2' = Q_1 = \int_0^{d_1} N_{m2} f_2(x + \Delta d_1) dx$$

В припущенні, що вся структура виконана з речовини шару 3, визначають глибину d_2' , на якій зупинилося те саме число іонів Q_2' , що і в попередніх шарах:

$$Q'_2 = \int_0^{d'_2} N_{m3} f_3(x) dx$$

З умови $Q_2 = Q'_2$ знаходиться d'_2 і, відповідно, величина зсуву $\Delta d_2 = d'_2 - d_2$, на яку слід змістити вихідний профіль третього середовища $N_{m3} f_3(x)$ до межі d_2 . Тоді розподіл домішки в третьому шарі буде

$$n_3(x) = N_{m3} f_3(x + \Delta d_2).$$

Аналогічно розраховуються профілі у всіх наступних шарах на основі рекурентних співвідношень:

$$n_i(x) = N_{mi} f_i(x + \Delta d_{i-1}),$$

де $\Delta d_{i-1} = d'_{i-1} - d_{i-1}$ знаходиться з умов $Q_{i-1} = Q'_{i-1}$:

$$\int_0^{d'_{i-1}} N_{mi} f_i(x) dx = Q_{i-2} + d \int_{d_{i-2}}^{d_{i-1}} N_{m(i-1)} f_{i-1}(x + \Delta d_{i-2}) dx$$

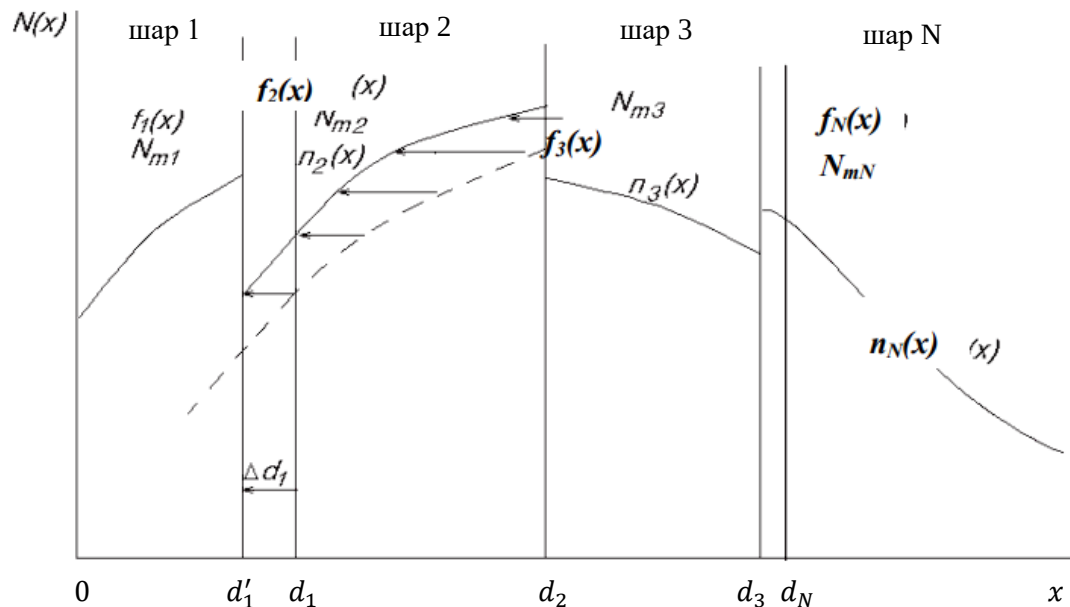


Рисунок 2.4.1 Розподіл іонно-імплантованої домішки в багатошаровій структурі

Наведені вище міркування узагальнюються на випадок i -го шару, і отримані рекурентні співвідношення дають змогу обчислити концентраційні профілі іонно-імплантованих домішок у будь-якій багатошаровій структурі з будь-яким числом шарів:

$$Q_{i-1} = Q_{i-2} + \frac{Q}{2} \left[\operatorname{erf} \frac{d_{i-1} - R_{p(i-1)}}{\sqrt{2}\Delta R_{p(i-1)}} - \operatorname{erf} \frac{d_{i-2} - R_{p(i-1)}}{\sqrt{2}\Delta R_{p(i-1)}} \right]$$

$$R_{p(i-1)} = R_{p(i-1)} - (d'_{i-2} - d_{i-2});$$

$$\operatorname{erf} \frac{d_{i-1} - R_{pi}}{\sqrt{2}\Delta R_{pi}} = \frac{2}{Q} Q_{i-1} - 1$$

$$\Delta d_{i-1} = d'_{i-1} - d_{i-1}$$

$$n_i(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{pi}} \exp \left[-\frac{(x + \Delta d_{i-1} - R_{pi})^2}{2\Delta R_{pi}^2} \right], d_{i-1} < x < d_i$$

Для теоретичної побудови профілів у двошарових структурах може бути використано метод складених профілів.

Нехай окремо відомі профілі розподілу іонів у шарах діоксида кремнію SiO_2 і кремнію Si за легування дозою Q (рис. 2.4.2, а).

На профілі SiO_2 проводиться переріз на глибині d_1 , що дорівнює товщині шару SiO_2 . Дози імплантованих іонів ліворуч і праворуч від перерізу дорівнюють відповідно Q_1 і Q_2 . На профілі в кремнії проводиться переріз на глибині d_2 так, щоб кількість іонів зліва Q'_1 дорівнювала Q_1 , а кількість іонів праворуч $Q'_2 = Q_2$. Після з'єднання частин профілів Q_1 і Q'_2 отримуємо шуканий профіль (рис. 2.4.2, б).

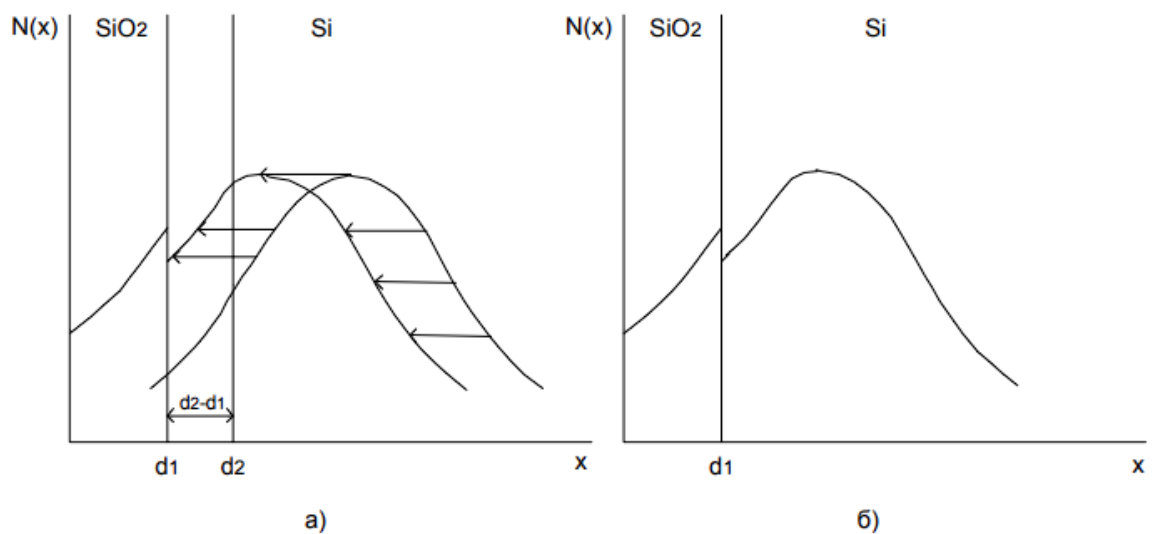


Рисунок 2.4.2 Розподіл імплантованих іонів у структурі $Si - SiO_2$:

а - профілі розподілу в середовищах SiO_2 і Si ; б – результуючий профіль

У ділянці SiO_2 профіль описується гаусіаною

$$N_1(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p1}} \exp\left[-\frac{(x - R_{p1})^2}{2\Delta R_{p1}^2}\right], 0 < x < d_1$$

В області кремнію внаслідок зсуву вихідного розподілу на відрізок $d_2 - d_1$ розподіл має вигляд

$$\begin{aligned} N_2(x) &= \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p2}} \exp\left[-\frac{(x + (d_2 - d_1) - R_{p2})^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right] = \\ &= \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{p2}} \exp\left[-\frac{\left(x - d_1 + (d_2 - R_{p1})\frac{\Delta R_{p2}}{\Delta R_{p1}}\right)^2}{2\Delta R_{p2}^2}\right], x \geq d_1 \end{aligned}$$

2.5. Локальне легування методом іонної імплантації

Бічне розсіювання іонів, що характеризується бічним середньоквадратичним відхиленням $\Delta R_{\perp}$, значно менше за глибини проникнення іонів у напрямі первісного руху, але в технології ВБІС ефекти бічного розсіювання відіграють роль основного лімітуючого фактора.

У загальному випадку проводиться імплантація нескінченної підкладки з на-несеним захисним шаром товщиною $d(y)$ (рис. 2.5.1).

Розподіл іонно-імплантованої домішки за глибиною x є функція, залежна від $d(y)$, тобто $\tilde{N}(x, d(y))$, а концентраційний профіль з урахуванням бічного розсіювання описується згорткою

$$N(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{\perp}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{N}(x, d(\xi)) e^{-\frac{(y-\xi)^2}{2\Delta R_{\perp}^2}} d\xi \quad (2.5.1)$$

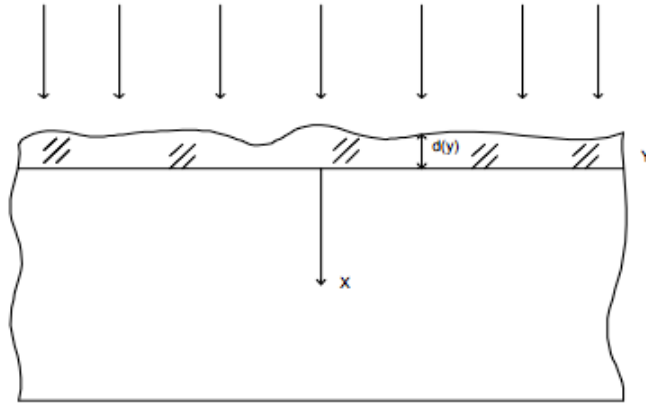


Рисунок 2.5.1 Нескінченна підкладка із захисним шаром товщиною $d(y)$

Розглянемо бічне розсіювання нормально імплантованих іонів під прямокутний край захисної маски (рис. 2.5.2). Через захисний шар товщиною d іони не проникають ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незахищеній ділянці розподіл за глибиною описується за допомогою будь-якого з розподілу $N(x)$, розглянутих у розділах 1.3.2-1.3.3. Бічне розсіювання іонів під край захисної маски описується згортокою (2.5.1) з урахуванням підінтегральної функції $\tilde{N}(x, y)$:

$$\tilde{N}(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 \leq y < \infty \\ N(x), & -\infty \leq y \leq 0 \end{cases}$$

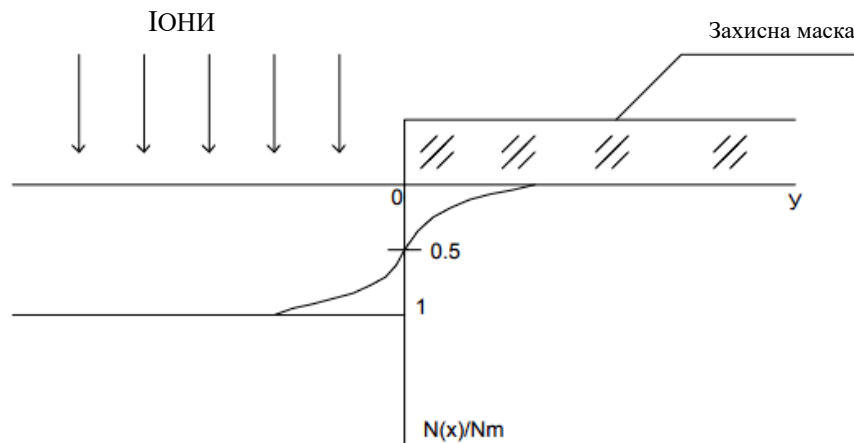


Рисунок 2.5.2 Прямокутний край захисної маски та нормований розподіл домішки з урахуванням бокового розсіювання

Підставивши $\tilde{N}(x, y)$ в згортку (2.5.1), отримаємо

$$N(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta R_{\perp}} \int_{-\infty}^0 N(x) e^{-\frac{(y-\xi)^2}{2\Delta R_{\perp}^2}} d\xi$$

Після заміни змінної $z = \frac{y-\xi}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}}$ і відповідних перетворювань розподілу з урахуванням бокового розсіювання буде мати вигляд

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{y}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} \quad (2.5.2)$$

Аналіз отриманого виразу (2.5.2) показує, що розсіювання іонно-імплантованих іонів під прямокутний край оксидної маски можна описати з використанням моделі дифузії в необмежене тіло з напівнескінченного простору.

За нормальної імплантації іонів під краї щілини в захисній масці (рис. 2.5.3) через захисний шар завтовшки d іони не проникають ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незахищеній ділянці розподіл іонів за глибиною описується функцією $\tilde{N}(x, y)$:

$$\tilde{N}(x, y) = \begin{cases} 0, & y < -a, y > a \\ N(x), & -a \leq y \leq a \end{cases}$$

Розподіл у цьому випадку матиме вигляд

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} \right]$$

Розглянемо бічне розсіювання нормально імплантованих іонів під краї прямокутного вікна розміром $2a \times 2b$ у захисній масці (рис. 2.5.3).

Якщо через захисний шар завтовшки d іони не проникають ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$), а в незахищеній ділянці розподіл іонів за глибиною описується функцією $N(x, y)$, то початковий розподіл має вигляд

$$\tilde{N}(x, y, z) = \begin{cases} 0, & y < -a, y > a, z < -b, z > b \\ N(x), & -a \leq y \leq a, -b \leq z \leq b \end{cases}$$

то розподіл матиме вигляд

$$N(x, y) = \frac{N(x)}{4} \left[\operatorname{erfc} \frac{y-a}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} - \operatorname{erfc} \frac{y+a}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} \right] \left[\operatorname{erfc} \frac{z-b}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} - \operatorname{erfc} \frac{z+b}{\sqrt{2}\Delta R_{\perp}} \right]$$

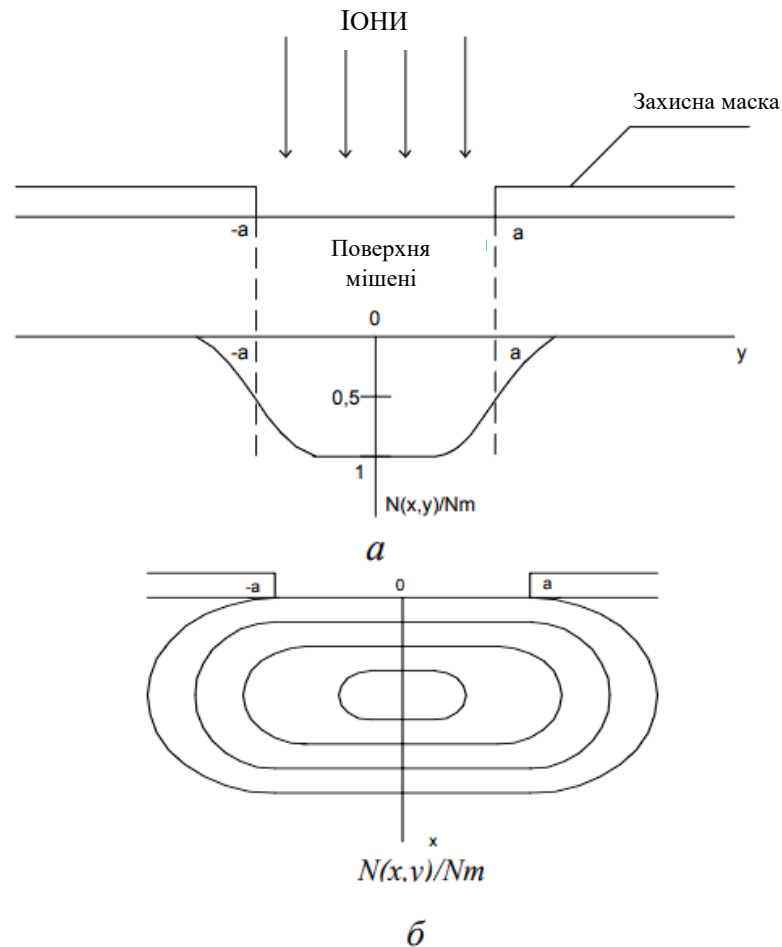


Рисунок 2.5.3 Утворення бічних профілів розподілу нормально імпантованої домішки:

a - розподіл нормованої концентрації вздовж осі y для щілини розміром $2a$ в захисній масці; b - лінії рівної концентрації

2.6. Похила імплантація

При впровадженні прискорених іонів у напівнескінченну підкладку під кутом θ до нормалі максимум розподілу зміщується до поверхні. При цьому в значення середньоквадратичного відхилення ΔR робить внесок як продольне середньоквадратичне відхилення ΔR_p , так і середньоквадратичне поперечне відхилення $\Delta R_{\perp}$. У результаті розподіл домішки $N(x)$ за нормаллю до поверхні при похилій імплантації має вигляд:

- у випадку неусіченої гаусіани, коли $R_p \geq 3\Delta R_p$,

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R} e^{-\frac{(x-R_p \cos\theta)^2}{2\Delta R^2}}; \quad (2.6.1)$$

- у випадку усіченої гауссіани, коли $R_p < 3\Delta R_p$,

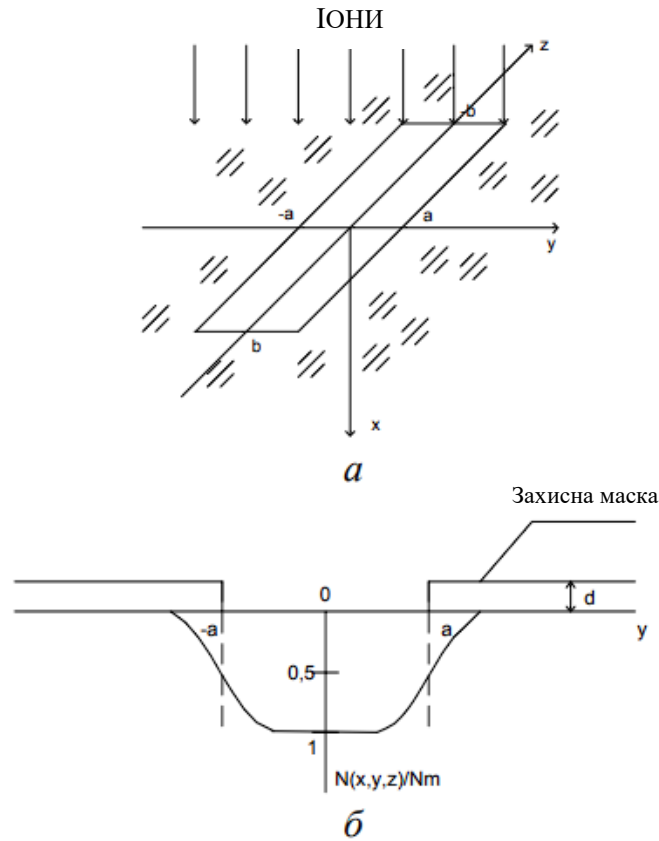


Рисунок 2.6.1 Утворення бічних профілів розподілу нормально імплантованої домішки:

a - прямокутне вікно розміром $2a \times 2b$ у захисній масці;

b - нормований розподіл імплантованої домішки під краї захисної маски в перерізі xOy

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Delta R(1 + \operatorname{erf}\frac{R_p \cos\theta}{\sqrt{2}\Delta R})} e^{-\frac{(x-R_p \cos\theta)^2}{2\Delta R^2}} \quad (2.6.2)$$

де $\Delta R^2 = \Delta R_p^2 \cos^2 \theta + \frac{1}{2}\Delta R_{\perp}^2 \sin^2 \theta$.

Якщо вихідна підкладка легована домішкою протилежного типу з концентрацією $N_{\text{вх}}$, то можливе формування одного або двох р-п-переходів, глибини $x_{j1,2}$ залягання яких виходять з умови $N(x_{j1,2}) - N_{\text{вх}} = 0$.

Для випадку неусіченої гаусіани за похилої імплантації глибини залягання р-п-переходів розраховуються за формулою

$$x_{j1,2} = R_p \cos \theta \pm \Delta R \sqrt{2 \ln \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \Delta R N_{\text{вх}}}}.$$

За похилої імплантації поблизу краю захисної маски товщиною d ($d \gg R_p + 3\Delta R_p$) залежно від орієнтації пучка іонів і його кута відхилення від нормалі можуть бути два випадки: імплантація під край захисної маски (рис. 2.6.2, а) та імплантація з утворенням тіньової ділянки біля краю захисної маски (рис. 2.6.2, б).

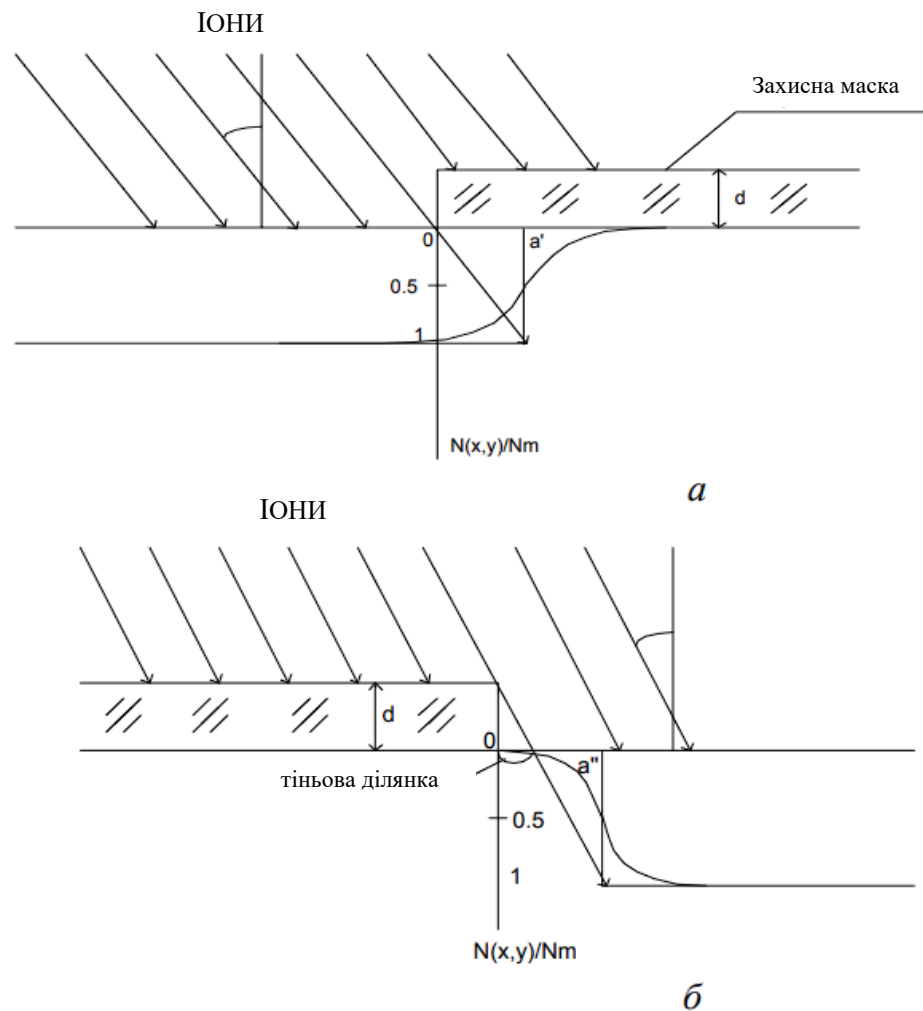


Рисунок 2.6.2 Формування нормованих бічних профілів розподілу похило-імплантованих домішок:

а - імплантація під край захисної маски;

б - імплантація з утворенням тіньової ділянки біля краю захисної маски

В обох випадках за похилої імплантації під кутом θ відносно нормалі до поверхні розподіл іонно-імпантованих домішок за глибиною $N(x)$ описується не усіченою або усіченою гаусіанами.

На заданій глибині x перерозподіл іонно-імпантованих домішок за рахунок бічного розсіювання буде описуватися за моделлю дифузії в необмежене тіло з напівбезмежного простору:

- під час імплантації під край захисної маски

$$N(x, t) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{y - a'}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} \quad (2.6.3)$$

- у разі імплантації з утворенням тіньової ділянки біля краю захисної маски

$$N(x, t) = \frac{N(x)}{2} \operatorname{erfc} \frac{a'' - y}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} = \frac{N(x)}{2} (2 - \operatorname{erfc} \frac{y - a''}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp}) \quad (2.6.4)$$

У формулах (2.6.3) і (2.6.4) з геометричних міркувань

$$a' = x \cdot \operatorname{tg} \theta; \quad a'' = (x + d) \operatorname{tg} \theta$$

У разі легування підкладки з протилежним типом провідності та вихідною концентрацією домішки $N_{\text{вих}}$ з умови $N(x_{j1,2}, y) = N_{\text{вих}}$ можна знайти глибини залягання $x_{j1,2}(y)$ сформованих р-п-переходів.

Під час похилої імплантації через щілину в захисній масці (рис. 2.6.3) під кутом θ відносно нормалі до поверхні біля правого краю щілини впровадження іонів відбувається під захисний шар, а біля лівого краю щілини утворюється тіньова область.

З огляду на результати, отримані під час моделювання локальної імплантації, можна побудувати розподіл домішок з урахуванням бічного розсіювання іонів, похило імпантованих через щілину в захисній масці розміром $2a$:

$$N(x, t) = \frac{N(x)}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{a' - y}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} - \operatorname{erfc} \frac{a'' - y}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} \right] \quad (2.6.5)$$

де $a' = -a + (d + x) \operatorname{tg} \theta$; $a'' = a + x \operatorname{tg} \theta$.

У разі легування підкладки з протилежним типом провідності та вихідною концентрацією домішки $N_{\text{вих}}$ з умови $N(x_{j1,2}, y) = N_{\text{вих}}$ глибини залягання $x_{j1,2}(y)$ сформованих р-п-переходів можна знайти розв'язанням трансцендентного рівняння

$$N_{\text{вих}} = \frac{Q}{2\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Delta R \left(1 + \operatorname{erf}\frac{R_p \cos \theta}{\sqrt{2}\Delta R}\right)} e^{\frac{(x_{j1,2}(y) - R_p \cos \theta)^2}{2\Delta R^2}} \cdot \left[\operatorname{erfc}\frac{a'(x_{j1,2}(y)) - y}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} - \operatorname{erfc}\frac{a''(x_{j1,2}(y)) - y}{\sqrt{2}\Delta R'_\perp} \right] \quad (2.6.6)$$

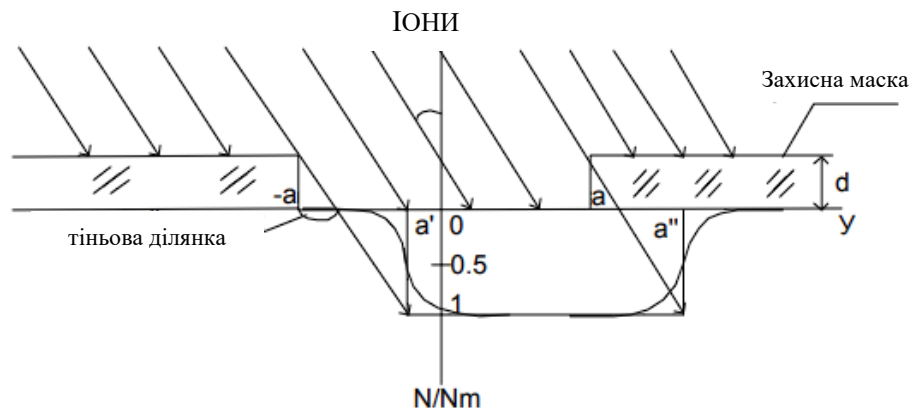


Рисунок 2.6.3 Формування нормованих профілів розподілу домішок під час похилої імплантації через щілину завширшки $2a$ в захисній масці

2.7 Дифузійний перерозподіл іонно-імплантованих домішок

Для напівобмеженого кристала особливе значення під час дифузійного перерозподілу мають умови на межі, які визначають вид розв'язку другого рівняння Фіка.

На практиці в низці випадків умови на поверхні напівпровідникової підкладки можна звести до двох граничних варіантів: відбивної межі або зв'язувальної межі.

Під час дифузії з іонно-імплантованого шару з початковим розподілом $N(\xi, 0)$ у напівобмеженій напівпровідниковій підкладці з відбивною межею потік J домішки через неї відсутній упродовж усього процесу дифузії. Згідно з першим рівнянням Фіка

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$$

де C – концентрація домішки; D – коефіцієнт дифузії за даної температури; t – час дифузії.

Розподіл домішки в цьому випадку може бути представлений у вигляді

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} N(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} + e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] d\xi$$

де $N(\xi, 0)$ - початковий розподіл іонно-імплантованої домішки.

Якщо ж межа є зв'язуючою, концентрація домішки на ній протягом усього процесу дифузії дорівнює нулю, тобто $C(0, t) = 0$, то розподіл домішки має вигляд

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^{\infty} N(\xi, 0) \left[e^{-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}} \right] d\xi$$

За малих часів дифузії з іонно-імплантованого шару, що коли дифузійна довжина $\sqrt{Dt}$ порівнянна із середньоквадратичним відхиленням ΔR_p , форма вихідного профілю впливає на кінцевий розподіл, і розрахунок домішкового профілю після дифузії проводять за наведеними вище формулами з використанням методів чисельного інтегрування.

Якщо початковий розподіл може бути описаний неусіченою гаусіаною, розподіл домішки після дифузійної розгонки описується виразом

$$C(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p \sqrt{1 + \frac{2Dt}{\Delta R_p^2}}} \left(e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \left[1 + \operatorname{erf} \frac{\frac{R_p\sqrt{4Dt}}{\sqrt{2}\Delta R_p} + \frac{x\sqrt{2}\Delta R_p}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right] \pm \right. \\ \left. \pm e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \left[1 + \operatorname{erf} \frac{\frac{R_p\sqrt{4Dt}}{\sqrt{2}\Delta R_p} - \frac{x\sqrt{2}\Delta R_p}{\sqrt{4Dt}}}{\sqrt{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} \right] \right)$$

де знак "+" відповідає умові відбивної межі, а знак "-" - умові зв'язувальної межі.

Якщо імплантацію проводять у підкладку з протилежним типом провідності стосовно типу домішки, що легує, то можливе виникнення одного або двох р-п-переходів. У даній моделі аналітичний вираз для глибин залягання р-п-переходів відсутній, тому величини x_{j1} та/або x_{j2} визначають як точки, де відповідно $N_i \leq 0$ і $N_{i+1} \geq 0$ та/або $N_i \geq 0$ і $N_{i+1} \leq 0$. Тоді $x_{j1,2} = (x_i + x_{i+1})/2$.

За низьких доз імплантації $Q < 100$ мкКл/см² дифузія домішок з іонно-імплантованого шару йде як дифузія з обмеженого джерела, і розподіл концентрації $N(x, t)$ можна оцінити за допомогою комбінованого розподілу

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi}\sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt}} e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}}$$

Цей розподіл при великих часах розгонки ($R_p, \Delta R_p \ll \sqrt{Dt}$), коли визначальним є не форма профілю, а доза легування, переходить у розподіл під час дифузії з нескінченно тонкого шару з відбивною межею

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

За малих часів розгону, коли $(R_p, \Delta R_p)$ можна порівняти з $\sqrt{Dt}$, комбінований розподіл переходить у непересічену гаусіану.

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}}$$

Якщо підкладка легована вихідною домішкою протилежного типу з концентрацією $N_{\text{вих}}$, то можливе виникнення одного або двох р-п-переходів, глибини залягання яких перебувають з умови $N(x_{i1,2}) - N_{\text{вих}} = 0$

$$\frac{Q}{\sqrt{\pi}\sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt}} e^{-\frac{(x_{j1,2}-R_p)^2}{2\Delta R_p^2 + 4Dt}} - N_{\text{вих}} = 0,$$

$$x_{j1,2} = R_p \pm \sqrt{2(\Delta R_p^2 + 2Dt) \ln \frac{Q}{\sqrt{\pi}\sqrt{2\Delta R_p^2 + Dt} N_{\text{вих}}}}$$

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У ході вивчення різноманітних моделей дифузійних процесів та фізико-математичних моделей іонної імплантації в напівпровідникових матеріалах були докладно розглянуті та проаналізовані ключові аспекти, пов'язані з властивостями та процесами розподілу домішок в напівпровідникових структурах.

У роботі було проведено дослідження моделей дифузійних процесів, розглянуто рівняння дифузії Фіка та його застосування для аналізу дифузійного перерозподілу домішок в окислювальному середовищі та на межах оксид-напівпровідник. Також були вивчені аналітичні моделі розподілу домішок в необмежених, напівобмежених і обмежених підкладках, моделювання процесу дифузії на стадіях загонки і розгонки домішок, а також чисельні методи розв'язання рівнянь Фіка. Цей розділ становить важливий внесок у розуміння та контроль дифузійних процесів в напівпровідникових матеріалах.

Вивчалися фізико-математичні моделі іонної імплантації, зокрема теорія Леннарда-Джонса та її застосування для опису розподілу іонно-імплантованих домішок. Були детально розглянуті різноманітні розподіли домішок, такі як гаусовські розподіли, спряжені гаусіани та розподіл Пірсона-4, зокрема їх застосування при легуванні розорієнтованих мішеней. Досліджено методи моделювання розподілу іонно-імплантованих домішок у багат шарових структурах, локальне легування методом іонної імплантації та похилу імплантацію. Цей розділ роботи виявляє великий потенціал застосування отриманих знань у вирішенні завдань сучасної мікроелектроніки.

Зазначено, що експериментальні методи вивчення властивостей наноматеріалів вимагають значних трудових та фінансових витрат. Тут обчислювальна нанотехнологія стає важливою, дозволяючи прогнозувати властивості нових матеріалів та оптимізувати їх розробку. Висвітлено важливість математичного моделювання фізико-хімічних процесів та використання чисельних методів у створенні нових наноматеріалів.

Також можна врахувати те, що незважаючи на успіхи обчислювальних методів, вони мають свої обмеження, такі як неоднозначність потенціалів взаємодії та обмеження в обчислювальній потужності для деяких методів.

Отже можна визначити, що досліджені моделі та методи є важливим інструментарієм для прогнозування та контролю розподілу домішок у напівпровідникових матеріалах. Знання, отримане в ході роботи, може бути успішно використане для подальшого вдосконалення технологічних процесів в сучасній напівпровідниковій промисловості, сприяючи розвитку

електроніки та мікроелектроніки. Враховуючи велику складність та високі вимоги до точності у виробництві напівпровідникових пристроїв, вивчені моделі та методи мають велике значення для науковців і інженерів, які займаються проектуванням та виробництвом напівпровідникових компонентів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Поплавко Ю. Електрофізика твердих тіл/ К: КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – 756 с.
2. Поплавко Ю., Воронов С. Фізичне матеріалознавство/ К: КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2015. – 699 с.
3. Atkins P, de Paula J. Physical Chemistry for the Life Science/ New York: «W. H. Freeman and Company», 2006. – 724 с.
4. William D. Callister, Jr. Fundamentals of Materials Science and Engineering/ New York: «John wiley & sons», 2012 – 910 с.
5. C.Carey, T.J.Scanlon and S.M.Fraser. «SUCCA- An alternative scheme to reduce the effects of multidimensional false diffusion»/ Glasgow, 1993
6. Schubert F. Doping in III-V Semiconductors/ New York, 1993 – 632 с.
7. Kunihiro S. Ion Implantation and Activation/Tokio, 2013
8. Squires G. Practical Physics/ New York, 2001 – 102 с.
9. David E. Bock, Paul F. Velleman, Richard D. Stats, Modeling the World/ Boston, 2007 – 794 с.