

01;05

Моделирование процесса нелинейной высокоградиентной диффузии в полупроводниках

© Л.А. Кондраченко, А.Э. Рассадин, А.С. Чистяков

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Федеральное государственное унитарное предприятие
<<Научно-производственное предприятие „Полет“>>, Нижний Новгород
ООО „НКС“, Нижний Новгород

Поступило в Редакцию 5 августа 2004 г.

Предложено нелинейное феноменологическое уравнение для описания неглубокой ($\leq 1 \mu\text{m}$) диффузии примесей в полупроводниках. На примере диффузии мышьяка в кремний получено хорошее количественное согласие экспериментов и численных расчетов.

Хорошо известно, что при неглубокой (менее одного микрона) диффузии примесей в полупроводниках их распределения концентрации существенно отличаются от тех, что дают решения линейного уравнения диффузии [1]. С другой стороны, в первых, ранних работах концентрационные кривые в опытах по диффузии из постоянного источника являлись обычной *erfc*-функцией [2,3]. Отличие этих опытов от более поздних в одном — в глубине диффузии, в градиентах концентрации. Поэтому разумно предположить, что часть аномалий в поведении концентрационных кривых обусловлена тем, что термодинамическая система при диффузии на малую глубину все время находится далеко от положения равновесия и линейные соотношения термодинамики необратимых процессов [4] могут оказаться недостаточными для количественного описания подобных систем. На наш взгляд, для описания неглубокой диффузии естественно использовать нелинейную теорию, учитывающую градиентную зависимость потока вещества.

Представим поток вещества в виде разложения по градиенту концентрации. С учетом тензорной размерности и ограничиваясь первым

неисчезающим членом разложения, получим [5]:

$$\mathbf{J} = -D \cdot \nabla C - F \cdot (\nabla C)^3, \quad (1)$$

где D — коэффициент диффузии, C — концентрация, F — коэффициент нелинейности.

Видно, что если $F > 0$, то диффузионный поток возрастает, а при $F < 0$ — уменьшается.

В отсутствие источников и стоков уравнение непрерывности для случая одномерной диффузии имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left[D + 3 \cdot F \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 \right] \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (2)$$

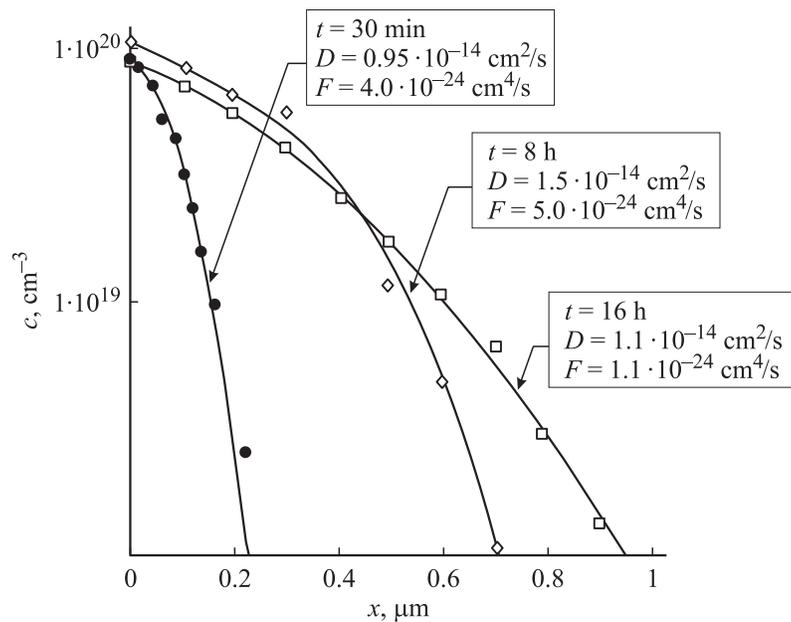
где выражение в квадратных скобках представляет собой некоторый эффективный коэффициент диффузии, приближающийся к D при $\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow 0$.

Точное решение уравнения (2) неизвестно, поэтому его поведение для задачи диффузии из постоянного источника ($C(0, t) = C_s$; $C(x, 0) = 0$; $x > 0$, $t > 0$) было исследовано численными методами. Рассчитанные на ЭВМ концентрационные кривые имеют монотонный характер и по мере увеличения времени диффузии приближаются к *erfc*-функции.

На опыте можно обнаружить эффект градиента концентрации, если проводить эксперименты в достаточно широком временном интервале. При сравнительно малых временах отжига (небольшой глубине диффузии) нелинейный член может дать значительный вклад и будет заметен при сопоставлении опытов с малыми и большими временами диффузии для одной и той же температуры и поверхностной концентрации.

Экспериментальное исследование проводилось в системе Si–As. Диффузия мышьяка в кремний, легированный бором (КДБ-0.005), происходила из пленкообразующего окисла. Послойный анализ концентрации мышьяка производился стандартным методом определения слоевого сопротивления, время диффузии менялось от пяти минут до нескольких часов, температура отжига составляла 1273 и 1423 К. Содержание мышьякового ангидрида в источнике позволило поддерживать поверхностную концентрацию мышьяка около 10^{20} cm^{-3} .

Выбор мышьяка в качестве примеси был продиктован теми соображениями, что ионный радиус его практически равен ионному радиусу



Распределение концентрации мышьяка при $T = 1273$ К и различных временах диффузии.

кремния, и при концентрации меньше 10^{20} cm^{-3} отсутствуют эффекты, связанные с комплексообразованием, неполной ионизацией и т. п. [6,7]. Это позволяет полагать, что замеченные отклонения от линейного поведения в наших опытах обусловлены градиентной зависимостью диффузии.

На рисунке в полулогарифмическом масштабе приводятся распределения концентрации мышьяка при $T = 1273$ К и трех временах диффузии. Сплошные кривые на нем являются визуализацией численного решения уравнения (2), точками нанесены полученные на опыте значения концентрации мышьяка. Параметры D и F определялись методом подбора, причем начальные значения коэффициента диффузии были взяты из обзора [1]. Из рисунка видно, что результаты эксперимента (точки) и теоретические кривые практически совпадают.

С использованием формулы диффузионной длины $l_D = 2 \cdot \sqrt{D \cdot t}$ была произведена оценка эффективного коэффициента диффузии (квадратная скобка в уравнении (2)), который, как оказалось, убывает примерно в два раза с увеличением времени продолжительности отжига с 30 min до 8 h, что также согласуется с теорией. Более детальное описание экспериментов будет приведено в следующей публикации.

В целом можно отметить хорошее согласие предложенной теории и эксперимента, получены первые значения коэффициента нелинейности F , который для диффузии мышьяка в кремний оказался больше нуля.

Список литературы

- [1] *Атомная диффузия в полупроводниках* / Под ред. Д. Шоу. М.: Мир, 1971. 684 с.
- [2] Fuller C.S., Ditzenberger J.T. // J. Appl. Phys. 1956. V. 27. N 5. P. 544–553.
- [3] Kurtz A.D., Gravel C.L. // J. Appl. Phys. 1958. V. 29. N 10. P. 1456–1459.
- [4] Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.
- [5] Кондраченко Л.А. Низкотемпературное легирование полупроводников и многослойных структур микроэлектроники. // Тез. докл. I Всесоюзного семинара. Устинов, 1987. С. 28.
- [6] Deppe D.C., Holonyak N. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64. N 12. P. 1293–1297.
- [7] Antoncik E. // J. Appl. Phys. 1994. V. A58. P. 117–123.