

УДК 621.315.592

# Моделирование диффузии алюминия в кремнии в инертной и окислительной средах

© О.В. Александров<sup>¶</sup>, А.А. Криворучко, Н.А. Соболев<sup>\*¶</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197376 Санкт-Петербург, Россия<sup>\*</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 27 июня 2005 г. Принята к печати 23 сентября 2005 г.)

Показано, что накопление примеси Al вблизи поверхности кремния, наблюдающееся при диффузии из поверхностного источника в инертной среде, не может быть объяснено в рамках обычного для примесей замещения непрямого вакансионно-межузельного (vacancy-interstitialcy) механизма. Особенности диффузии Al как в инертной, так и в окислительной среде удовлетворительно описываются в рамках механизма вытеснения (kick-out), характерного для примесей быстро диффундирующих металлов в кремнии.

PACS: 68.35.Fx, 68.35.Dv

## 1. Введение

Принято считать, что основные легирующие примеси III и V групп в кремнии, к которым относятся Al, являющиеся примесями замещения, диффундируют по вакансионному (vacancy), непрямому междузельному (interstitialcy), или смешанному вакансионно-межузельному непрямому механизму. Это происходит при посредстве собственных точечных дефектов (СТД): вакансий, собственных междузельных атомов (СМА) или и тех, и других соответственно [1,2]. При вакансионном механизме перемещение атома замещения из одного узла кристаллической решетки в другой происходит путем его обмена с подошедшей вакансией. При непрямом междузельном механизме перемещение атома замещения происходит путем его выталкивания подошедшим собственным междузельным атомом в неустойчивое для него междузельное положение, из которого атом примеси переходит в другой (соседний) узел путем выталкивания из него собственного атома кремния в междоузлие.

Установлено, что отжиг в окислительной среде (сухой  $O_2$ ) приводит к увеличению глубины диффузии Al по сравнению с отжигом в инертной среде [3–6], а отжиг в хлорсодержащей среде ( $O_2 + 0.3$  мол % трихлорэтилена) [3,7], а также в среде аммиака [6] — к ее уменьшению по сравнению с отжигом в окислительной среде. Поскольку при термическом окислении кремния генерируются СМА, при отжиге в хлорсодержащей среде к ним добавляются вакансии, а при термическом азидировании кремния повышается концентрация вакансий (см., например, [2]), был сделан вывод, что примесь Al в кремнии диффундирует при посредстве СМА, т.е. преимущественно по непрямому междузельному механизму [1,3–6]. Доля непрямого междузельного меха-

низма  $f_I$  в диффузии Al оценивалась как  $f_I > 0.85$  [1] (по данным [4]),  $f_I > 0.95$  [3] и  $f_I = 0.75–1.0$  [6].

В работах [3,8] было обнаружено, что диффузия Al при повышенных температурах ( $T = 1250^\circ C$ ) в шлифованную поверхность кремния в инертной среде ( $Ar, N_2$ ) сопровождается накоплением Al в приповерхностной области. Попытка описать экспериментальные профили Al, полученные при диффузии в инертной среде, на основе вакансионно-межузельного непрямого механизма предпринималась в работе [3], однако, как показано далее, ее нельзя признать удовлетворительной. В то же время накопление вблизи поверхности (U-образные профили) является характерным для примесей быстро диффундирующих металлов (Au, Pt, Zn, Ni), располагающихся в решетке кремния как в узлах, так и в междоузлиях. Диффузия этих металлических примесей в кремнии происходит либо по диссоциативному (dissociative) механизму [9,10], либо по механизму вытеснения (kick-out) [11,12]. В основе диссоциативного механизма диффузии, предложенного авторами [13], лежит реакция диссоциации узельного атома примеси ( $A_s$ ) на междузельный атом примеси ( $A_i$ ) и вакантный узел решетки кремния (вакансию  $V$ ):  $A_s \leftrightarrow A_i + V$ . В основе механизма вытеснения, предложенного авторами [14], лежит реакция вытеснения узельного атома примеси собственным междузельным атомом кремния ( $I$ ) в междоузлие с образованием междузельного атома примеси:  $A_s + I \leftrightarrow A_i$ . В обоих этих механизмах междузельные атомы примеси полагаются способными к самостоятельной диффузии в решетке кремния по прямому (т.е. без посредства СТД) междузельному механизму до тех пор, пока не произойдут соответствующие обратные реакции.

Поскольку при определенных условиях диффузии (в инертной среде при повышенных температурах) наблюдается накопление Al вблизи поверхности, характерное для примесей переходных металлов, а также поскольку СМА кремния оказывают ускоряющее, а вакансии замедляющее действие на диффузию Al, можно

<sup>¶</sup> E-mail: Aleksandrov@svs.ru<sup>¶¶</sup> E-mail: nick@sobolev.ioffe.rssi.ru

предположить, что примесь Al в кремнии может, по крайней мере частично, диффундировать по механизму вытеснения. В связи со сказанным целью настоящей работы является попытка описания особенностей диффузии Al в кремнии в инертной и окислительной средах как в рамках вакансионно-межузельного непрямого механизма, характерного для основных легирующих примесей, так и в рамках механизма вытеснения, характерного для примесей переходных металлов в кремнии.

## 2. Диффузия Al по вакансионно-межузельному непрямоу механизму

При смешанном вакансионно-межузельном непрямом механизме диффузия примеси замещения A описывается обычным уравнением диффузии с коэффициентом диффузии, равным сумме коэффициентов диффузии посредством вакансий ( $D_{AV}$ ) и посредством СМА ( $D_{AI}$ ) [1,2]:

$$D_A = D_{AV} + D_{AI}, \quad (1)$$

каждый из которых зависит от относительной концентрации соответствующих СТД,

$$D_{AV} = D_{AV}^* a_V, \quad D_{AI} = D_{AI}^* a_I, \quad (2)$$

где  $a_V = C_V/C_V^*$ ,  $a_I = C_I/C_I^*$ ;  $C_V$  и  $C_V^*$ ,  $C_I$  и  $C_I^*$  — текущие и термодинамически равновесные концентрации вакансий и СМА соответственно;  $D_{AV}^*$  и  $D_{AI}^*$  — коэффициенты диффузии посредством вакансий и СМА в условиях равновесия по СТД (при  $a_V = a_I = 1$ ). Результирующий коэффициент диффузии примеси замещения в соответствии с (1) и (2) можно представить в виде

$$D_A = D_A^*(f_V a_V + f_I a_I), \quad (3)$$

где  $D_A^*$  — равновесный коэффициент диффузии примеси,  $D_A^* = D_{AV}^* + D_{AI}^*$ ;  $f_V$  и  $f_I$  — относительные доли диффузии примеси посредством вакансий и СМА соответственно,  $f_V = D_{AV}^*/D_A^*$ ,  $f_I = D_{AI}^*/D_A^*$ ,  $f_V + f_I = 1$ .

При отсутствии объемных стоков имеется возможность прямой взаимной рекомбинации вакансий и СМА ( $V + I \leftrightarrow S$ , где  $S$  — собственный атом кремния в узле). Диффузия Al по вакансионно-межузельному непрямоу механизму описывается следующей системой уравнений для примеси, вакансий и СМА с учетом их взаимной рекомбинации:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = D_V \frac{\partial^2 C_V}{\partial x^2} - k_0 (C_I C_V - C_I^* C_V^*), \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 C_I}{\partial x^2} - k_0 (C_I C_V - C_I^* C_V^*), \quad (6)$$

где  $t$  — время диффузии,  $x$  — координата, отсчитываемая от поверхности кремния,  $D_A$  — коэффициент

диффузии Al в отсутствие равновесия по СТД (см. (3));  $D_V$  и  $D_I$  — коэффициенты диффузии вакансий и СМА соответственно,  $k_0$  — константа скорости взаимной рекомбинации вакансий и СМА.

Начальные распределения концентраций собственных междоузлий и вакансий считаем однородными по глубине и равными термодинамически равновесным значениям:

$$C_V(x, 0) = C_V^*; \quad C_I(x, 0) = C_I^*. \quad (7)$$

При проведении диффузии в инертной среде при повышенной температуре на поверхности происходит генерация вакансий вследствие испарения кремния со скоростью, зависящей от температуры,

$$[C_V(0, t) - C_V^*]/C_V^* = \beta_V(0, t), \quad (8)$$

где  $\beta_V(0, t)$  — относительное пересыщение по вакансиям на поверхности кремния,  $\beta_V(0, t) = 15$  при 1250°C [3]. Для СМА в этом случае граница полагается непроницаемой:

$$\left. \frac{\partial C_I(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0. \quad (9)$$

При проведении диффузии в окислительной среде на поверхности кремния происходит генерация СМА, граничное условие имеет вид

$$[C_I(0, t) - C_I^*]/C_I^* = \beta_I(0, t), \quad (9)$$

где  $\beta_I(0, t)$  — относительное пересыщение по СМА на поверхности кремния,  $\beta_I(0, t) = 6.6 \cdot 10^{-9} \times \exp(2.52/kT)t^{-0.25}$  [15], где  $T$  — абсолютная температура,  $k$  — постоянная Больцмана,  $kT$  взято в эВ, а время  $t$  в секундах. Для вакансий в этом случае граница полагается непроницаемой:

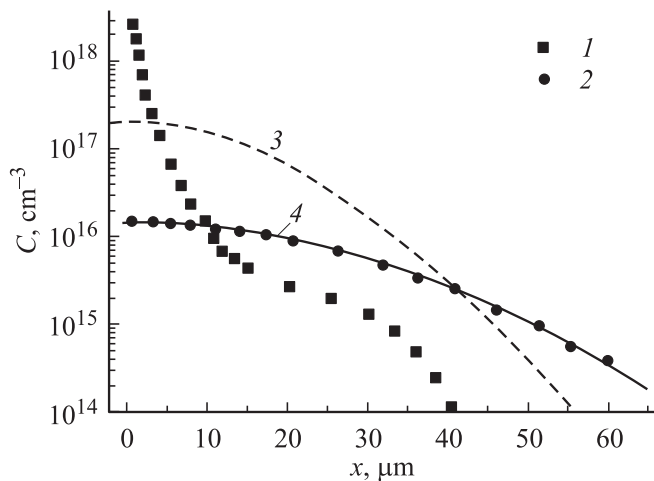
$$\left. \frac{\partial C_V(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0. \quad (11)$$

При диффузии Al из ограниченного источника в отсутствие испарения примеси выполняется также условие сохранения количества примеси в слое:

$$\left. \frac{\partial C_A(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \int_0^{\infty} C_A(x, t) dx = Q, \quad (12)$$

где  $Q$  — исходное количество Al в диффузионном слое.

Уравнения (3)–(6) с начальными и граничными условиями (7)–(12) решались численно для экспериментальных условий диффузии работы [3]. В этой работе диффузия Al проводилась в шлифованную поверхность кремния из ограниченного поверхностного источника (из Al-содержащих пленок) при температуре 1250°C в течение 16 ч в инертной ( $N_2$ ) или окислительной ( $O_2$ ) атмосферах. Значения параметров СТД брались такими же, как и в работе [3], на основе литературных данных (при 1250°C):  $C_I^* = 3.3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$  [16,17],  $D_I = 2 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$  [18,19],  $k_0 = 7.5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3/\text{с}$  [20].



**Рис. 1.** Профили распределения концентрации Al ( $C$ ) по глубине ( $x$ ) при диффузии в инертной ( $N_2$ ) (1, 3) и окислительной (сухой  $O_2$ ) (2, 4) средах: 1, 2 — эксперимент [3]; 3, 4 — расчет по вакансионно-межузельному непрямоу механизму ( $f_I \geq 0.9$ ).

Как и в работе [3], принималось:  $C_V^* = 10C_I^*$ ,  $D_V = 0.1D_I$ . Значение равновесного коэффициента диффузии Al  $D_A^* = 4 \cdot 10^{-11}$  см<sup>2</sup>/с соответствовало современным [6], а также и более ранним [21] экспериментальным данным по диффузии Al в Si при равновесных условиях по СТД.

На рис. 1 представлены экспериментальные [3] и расчетные профили распределения концентрации Al по глубине для случаев термообработки в инертной ( $N_2$ ) (точки 1, кривая 3) и окислительной (сухой  $O_2$ ) (точки 2, кривая 4) средах. Как видно из рис. 1, в случае термообработки в окислительной среде расчетный (кривая 4) и экспериментальный (данные 2) профили имеют вид гауссова распределения и показывают удовлетворительное согласие друг с другом при значении относительной доли диффузии примеси Al посредством СМА  $f_I \geq 0.9$  ( $f_V \leq 0.1$ ). Однако при термообработке в инертной среде расчет (кривая 3) не позволяет описать экспериментальный профиль (данные 1), который показывает накопление примеси вблизи поверхности кремния.

Таким образом, в рамках вакансионно-межузельного непрямого механизма может быть описана диффузия Al только в окислительной среде — при небольшом отклонении концентрации СТД от термодинамически равновесной ( $\beta_I(0, t) \approx 1.09$ ).

### 3. Диффузия Al по механизму вытеснения

Как отмечалось во введении, избыточные СМА кремния оказывают ускоряющее, а избыточные вакансии замедляющее действие на диффузию Al. Поэтому можно предположить, что примесь Al в кремнии может, по крайней мере частично, диффундировать по механизму

вытеснения. Диффузия примеси по механизму вытеснения происходит при посредстве СМА, вытесняющих атомы примеси из узлов, в которых они неподвижны, в междоузлия, в которых они подвижны, в соответствии с квазихимической реакцией вытеснения [1,11,14]:



где  $k_1$  и  $k_2$  — константы скоростей прямой и обратной реакций (13). В отличие от диссоциативного механизма, в механизме вытеснения вакансии непосредственно не участвуют в переносе примеси, реакция замещения межузельным атомом примеси вакансии по обратной реакции диссоциации ( $A_s \leftrightarrow A_i + V$ ) не учитывается. Равновесие между концентрациями вакансий и СМА поддерживается посредством реакции взаимной рекомбинации, а также рекомбинации избыточных СТД на объемных дефектах—стоках. Диффузия Al по механизму вытеснения с учетом рекомбинации СТД описывается следующей системой уравнений для атомов примеси в междоузлиях и узлах, СМА и вакансий:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + k_1 C_s C_I - k_2 C_i, \quad (14)$$

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = -k_1 C_s C_I + k_2 C_i, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 C_I}{\partial x^2} - k_0(C_I C_V - C_I^* C_V^*) \\ - k_1 C_s C_I + k_2 C_i - k_I(C_I - C_I^*), \end{aligned} \quad (16)$$

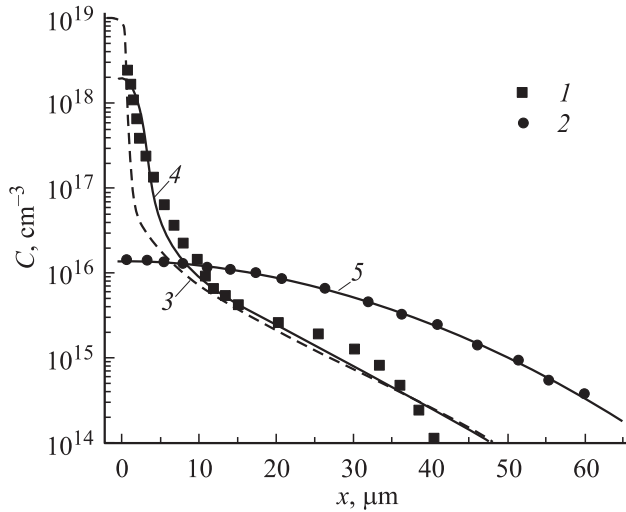
$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = D_V \frac{\partial^2 C_V}{\partial x^2} - k_0(C_I C_V - C_I^* C_V^*) - k_V(C_V - C_V^*), \quad (17)$$

где  $C_i$ ,  $C_s$  — концентрации межузельных и узельных атомов Al соответственно,  $D_i$  — коэффициент диффузии межузельных атомов примеси Al,  $k_I$  и  $k_V$  — скорости рекомбинации избыточных собственных междоузлий и вакансий соответственно на объемных дефектах—стоках,  $k_{I,V} = 4\pi R D_{I,V} N$ ,  $R$  — радиус захвата,  $N$  — плотность объемных стоков. Константа скорости обратной реакции (13)  $k_2$  может быть выражена через константу скорости прямой реакции  $k_1$ , термодинамически равновесную концентрацию СМА ( $C_I^*$ ) и отношение равновесных узельной ( $C_s^*$ ) и межузельной ( $C_i^*$ ) концентраций Al:  $k_2 = k_1 C_s^* C_I^* / C_i^*$ .

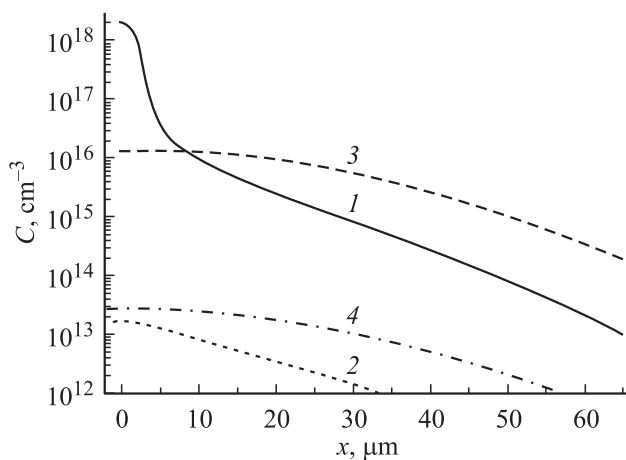
Уравнения (14)–(17) с начальными и граничными условиями, аналогичными (7)–(12), и с границей, непроницаемой как для межузельных, так и для узельных атомов Al, решались численно для условий эксперимента работы [3] (см. разд. 2). Значения параметров СТД и константы скорости их взаимной рекомбинации брались такими же, как и в разд. 2, за исключением значения  $D_V$ , которое составляло  $D_V = 1.25 \cdot 10^{-9}$  см<sup>2</sup>/с и соответствовало данным [12,16]. Величина  $R$  принималась равной межатомному расстоянию в решетке кремния,  $R = 2.35 \cdot 10^{-8}$  см,

плотность объемных дефектов—стоков соответствовала концентрации остаточных загрязняющих примесей в кремнии  $N \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ . Значения параметров для межузельных примесных атомов Al определялись из сопоставления расчета с экспериментальными профилями Al из [3]:  $D_i = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $C_i^*/C_s^* = 2 \cdot 10^{-3}$  и  $k_1 = 1.1 \cdot 10^{-17} \text{ см}^3/\text{с}$ .

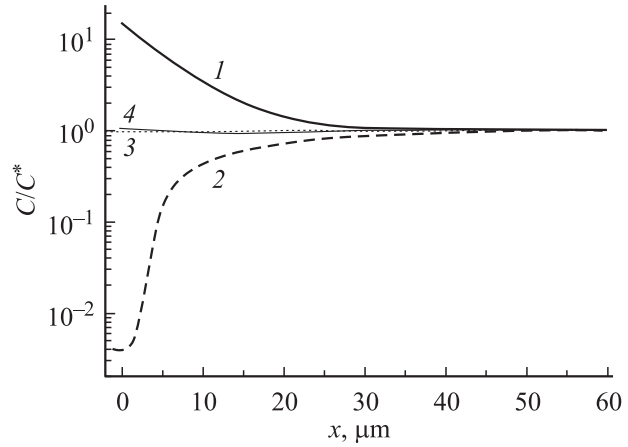
На рис. 2 (кривая 3) представлен профиль распределения концентрации Al по глубине при диффузии в инертной среде, рассчитанный по механизму вытеснения. Как видно из рисунка, расчет не вполне удовлетворительно описывает экспериментальный профиль (кривая 1) вблизи поверхности. Можно предположить, что примесь Al, как и другие примеси замещения, диффундирует, по



**Рис. 2.** Профили распределения концентрации Al ( $C$ ) по глубине ( $x$ ) при диффузии в инертной ( $N_2$ ) (1, 3, 4) и окислительной (сухой  $O_2$ ) (2, 5) средах: 1, 2 — эксперимент [3]; 3 — расчет по механизму вытеснения; 4, 5 — расчет по механизму вытеснения с участием вакансионного механизма ( $f_V = 4.8 \cdot 10^{-4}$ ).



**Рис. 3.** Профили распределения концентрации ( $C$ ) узельных (1, 3) и межузельных (2, 4) атомов Al при диффузии в инертной (1, 2) и окислительной (3, 4) средах.



**Рис. 4.** Профили распределения концентрации относительно равновесных значений ( $C/C^*$ ) вакансий (1, 3) и СМА (2, 4) при диффузии в инертной (1, 2) и окислительной (3, 4) средах.

крайней мере частично, по вакансионному механизму. В этом случае в уравнение (15) необходимо добавить диффузионный член с коэффициентом диффузии примеси по узлам ( $D_s$ ), пропорциональным относительной концентрации вакансий,  $D_s = D_A^* f_V a_V$  (см. разд. 2):

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_s \frac{\partial C_s}{\partial x} \right) - k_1 C_s C_I + k_2 C_i. \quad (18)$$

При доле вакансионного механизма  $f_V = 4.8 \cdot 10^{-4}$  имеем удовлетворительное согласие расчетных профилей Al с экспериментальными [3] при диффузии как в инертной (рис. 2, кривые 1, 4), так и в окислительной (рис. 2, кривые 2, 5) средах. На рис. 3 приведены отдельно концентрации узельных (кривые 1, 3) и межузельных атомов Al (кривые 2, 4), а на рис. 4 — концентрации вакансий (кривые 1, 3) и собственных межузельных атомов (кривые 2, 4) для случая термообработки в инертной и окислительной средах.

Таким образом, профили распределения Al как в инертной, так и в окислительной средах могут быть описаны в рамках механизма вытеснения с учетом вклада малой доли вакансионного механизма.

## 4. Обсуждение

Образование межузельных атомов путем вытеснения в междоузлия атомов примеси замещения собственными межузельными атомами было обнаружено для примесей III группы Al, B, Ga в опытах по низкотемпературному облучению кремния быстрыми электронами в работах [22,23]. Возможность высокотемпературной диффузии примеси замещения с образованием промежуточного межузельного состояния обсуждалась в работах [24–26]. Была предложена обобщенная модель диффузии примеси замещения двумя потоками — по узлам и по междоузлиям — с обменом между этими

состояниями по реакциям вытеснения и диссоциации. Обобщенная модель [24] включает в себя вакансионный механизм диффузии по узлам (показано, что вклад обменного механизма мал) и механизмы диффузии по междоузлиям — диссоциативный и вытеснения с участием СМА и вакансий соответственно. Показано, что в состоянии равновесия по СТД (при  $C_I C_V = C_I^* C_V^*$ ) невозможно отличить непрямой межузельный механизм диффузии от механизма вытеснения или диссоциативного. Однако в условиях значительного нарушения равновесия по СТД — при отжиге легированного бором  $\delta$ -слоя в сухом кислороде при пониженных температурах [25], а также при отжиге слоев кремния, имплантированных бором [26], — профили примеси бора в кремнии имели особенности, объясняемые авторами в рамках обобщенной модели диффузии [24] при преобладании механизма вытеснения.

Аналогичная ситуация, по-видимому, имеет место и при диффузии Al в кремний в инертной среде — в условиях интенсивной генерации вакансий ( $a_V = 15$ ). В этом случае происходит нарушение равновесия по СТД и появляется особенность — накопление примеси вблизи поверхности, которая может быть описана только в рамках преобладания механизма вытеснения. Из рис. 2 видно, что при термообработке в инертной среде происходит накопление примеси вблизи поверхности и профиль значительно отличается от функции Гаусса, характерной для диффузии из ограниченного источника при постоянном коэффициенте диффузии. За счет генерации вакансий на поверхности образца вследствие испарения кремния при высокой температуре в приповерхностной области образуется избыточная концентрация вакансий (рис. 4, кривая 1), а за счет взаимной рекомбинации вакансий и СМА происходит обеднение приповерхностной области собственными межузельными атомами (рис. 4, кривая 2). Кроме того, в области высокой концентрации Al идет интенсивное образование межузельных атомов Al в соответствии с прямой реакцией (13). Последние диффундируют в глубь образца, где вновь переходят в узлы с образованием собственных межузельных атомов в соответствии с обратной реакцией (13). За счет этого происходит дополнительное обеднение приповерхностной области собственными межузельными атомами, т.е. скорость, с которой идет прямая реакция (13), значительно снижается в приповерхностной области. При этом, поскольку Al диффундирует главным образом за счет своего межузельного компонента, диффузия основной массы Al в глубь образца значительно замедляется и вблизи поверхности происходит накопление. В то же время в глубине образца, где нет обеднения собственными межузельными атомами, диффузия идет значительно быстрее, чем в приповерхностной области, за счет чего на профиле распределения Al образуется перегиб. Отметим, что быстрый спад концентрации на хвосте экспериментального профиля (рис. 2, точки 2) может означать близость  $p$ - $n$ -перехода.

В случае окислительной среды на границе Si–SiO<sub>2</sub> происходит генерация собственных межузельных атомов кремния, за счет чего образуется их некоторая избыточная концентрация вблизи поверхности ( $\beta_I(0, t) \approx 1.09$ , — рис. 4, кривая 4). Межузельные атомы примеси Al (рис. 3, кривая 4), образующиеся в соответствии с прямой реакцией (13), проникают в глубь образца. Превращаясь в узельные атомы в соответствии с обратной реакцией (13), они обогащают собственными межузельными атомами также и внутреннюю область диффузионной зоны (слабо выраженный максимум при  $x \approx 40$  мкм на кривой 4 рис. 4). Вследствие повышенной концентрации СМА доля атомов Al в междоузлиях увеличивается и диффузия всего Al ускоряется, т.е. имеем диффузию, ускоренную окислением. Поскольку концентрация собственных междоузлий превышает равновесную незначительно ( $\beta_I(0, t) \approx 1.09$ ), профиль Al имеет вид, близкий к гауссовому распределению (рис. 2, кривая 5).

При малом пересыщении по СМА диффузия Al в окислительной среде может быть описана в рамках как преобладания механизма вытеснения, так и преобладания непрямого межузельного механизма. В состоянии равновесия доля межузельных атомов Al составляет  $C_i^*/C_s^* = 2 \cdot 10^{-3}$ , а коэффициент диффузии Al по междоузлиям  $D_i$  примерно в 500 раз превышает равновесный коэффициент диффузии Al  $D_A^*$ , т.е.  $D_i C_i \approx D_A^* C_s^*$ . Это свидетельствует о том, что львиная доля узельных атомов Al переносится путем механизма вытеснения. О значительном преобладании механизма вытеснения в диффузии Al свидетельствует и малая доля вакансионного механизма, определенная в разд. 2 ( $f_V \leq 0.1$ ) и в разд. 3 ( $f_V = 4.8 \cdot 10^{-4}$ ).

## 5. Заключение

Проведен анализ диффузии Al в Si в инертной и окислительной средах по смешанному вакансионно-межузельному непрямому механизму, а также по механизму вытеснения. Показано, что модель диффузии по вакансионно-межузельному непрямому механизму дает удовлетворительное согласие с экспериментом только в случае окислительной среды, но не позволяет описать профили Al при диффузии в инертной среде. Модель диффузии Al по механизму вытеснения с участием небольшой доли вакансионного механизма позволяет получить достаточно хорошее согласие расчета с экспериментальными профилями Al как в инертной среде — при значительном пересыщении по вакансиям ( $\beta_V(0, t) = 15$ ), так и в окислительной среде — при незначительном пересыщении по СМА ( $\beta_I(0, t) \approx 1.09$ ). В случае инертной среды модель диффузии с преобладанием механизма вытеснения позволяет описать накопление примеси вблизи поверхности, а в случае окислительной среды — диффузию, ускоренную окислением.

Авторы выражают благодарность Р.Ш. Малковичу за интерес к работе и полезное обсуждение.

## Список литературы

- [1] W. Frank, U. Gösele, H. Mehrer, A. Seeger. In: *Diffusion in crystalline solids*, ed. by G.E. Murch, A.S. Nowick (Academic Press, 1984) p. 63.
- [2] P.M. Fahey, P.B. Griffin, J.D. Plummer. *Rev. Mod. Phys.*, **61**, 289 (1989).
- [3] Б.Н. Грессеров, Н.А. Соболев, Ю.В. Выжигин, В.В. Елисе-ев, В.М. Ликунова. *ФТП*, **25**, 807 (1991).
- [4] S. Muzio, H. Higuchi. *Jap. Appl. Phys.*, **21**, 56 (1982).
- [5] Ch. Ortiz, D. Mathiot, Ch. Dubois, R. Jerisian. *J. Appl. Phys.*, **87**, 2661 (2000).
- [6] O. Krause, H. Ryssel, P. Pichler. *J. Appl. Phys.*, **91**, 5645 (2002).
- [7] Н.А. Соболев, В.Е. Челноков, Е.И. Шек. *Электротехн. пром. Сер. Преобр. техн.*, вып. 9 (176), 15 (1984).
- [8] И.В. Грехов, Л.Н. Крылов, И.А. Линийчук и др. *Современные диффузионные методы получения кремниевых элементов силовых неуправляемых и управляемых вентелей* (М., 1966).
- [9] W.R. Wilcok, T.J. La Chapelle. *J. Appl. Phys.*, **35**, 240 (1964).
- [10] M. Yoshida, K. Saito. *Japan. J. Appl. Phys.*, **6**, 573 (1967).
- [11] U. Gösele, F.F. Morehead, W. Frank, A. Seeger. *Appl. Phys. Lett.*, **38**, 157 (1981).
- [12] H. Bracht, N.A. Stolwijk, K.H. Metrer. *Phys. Rev. B*, **52**, 16 542 (1995).
- [13] F.C. Frank, D. Turnbull. *Phys. Rev.*, **104**, 617 (1956).
- [14] U. Gösele, W. Frank, A. Seeger. *Appl. Phys.*, **23**, 361 (1980).
- [15] T.Y. Tan, U. Gösele. *J. Appl. Phys.*, **53**, 4667 (1982).
- [16] U. Gösele, T.Y. Tan. *Impurity Diffusion and Gettering in Silicon*, ed. by R.B. Fair, C.W. Rearce, J. Washburn (Materials Research Soc., Pittsburg, 1985) p. 105.
- [17] G.B. Bronner, J.D. Plummer. *J. Appl. Phys.*, **61**, 5286 (1987).
- [18] W. Taylor, B.P.R. Marioton, T.Y. Tan, U. Gösele. *Rad. Eff. Def. Sol.*, **111-112**, 131 (1989).
- [19] H.-J. Gossman, C.S. Rafferty, H.S. Luftman, F.C. Unterwald, T. Boone, J.M. Poate. *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 639 (1993).
- [20] S.M. Hu. *J. Appl. Phys.*, **57**, 1069 (1985).
- [21] R.C. Miller, A. Savage. *J. Appl. Phys.*, **27**, 1430 (1956).
- [22] G.D. Watkins. *IEEE Trans.*, **NS-16**, 13 (1969).
- [23] В.В. Емцев, Т.В. Машовец. *Примеси и дефекты в полупроводниках* (М., Радио и связь, 1981).
- [24] N.E.B. Cowern. *J. Appl. Phys.*, **64**, 4484 (1988).
- [25] N.E.B. Cowern, K.T.F. Janssen, G.F.A. van der Walle, D.J. Gravesteijn. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 2434 (1990).
- [26] N.E.B. Cowern, G.F.A. van der Walle, D.J. Gravesteijn, C.J. Vriezema. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 212 (1991).

Редактор Л.В. Шаронова

## Simulation of aluminum diffusion in silicon in inert and oxidizing ambients

O.V. Aleksandrov, A.A. Krivoruchko, N.A. Sobolev\*

St. Petersburg State Electrotechnical University „LETI“,  
197376 St. Petersburg, Russia

\* Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** It is shown, that the accumulation of Al impurity near the silicon surface in the process of diffusion from a surface source in an inert ambient can not be explained within the framework of the vacancy–interstitial mechanism used for substitutional impurities. The peculiarities of Al diffusion both in the inert and in the oxidizing ambients are satisfactorily described within the framework of the kick-out mechanism, characteristic for fast difusing metal impurities in silicon.