

Н.И. СЛИПЧЕНКО, В.А. АНТОНОВА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДИФФУЗИОННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ**

Диффузия, как самостоятельный технологический процесс, положена в основу наиболее широко применяемого метода введения легирующих примесей в полупроводниковые пластины или в выращенные на них эпитаксиальные слои. Этот метод позволяет получить области противоположного (по отношению к проводимости исходного полупроводника) типа проводимости либо с более низким электросопротивлением.

Связь концентрации легирующей примеси с глубиной и временем диффузии для одномерного случая описывается основным уравнением диффузии (вторым законом Фика) [1—3]

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \quad (1)$$

При заданном коэффициенте диффузии оно отражает характер распределения концентрации легирующей примеси: концентрацию вводимой примеси в любой момент времени на любом расстоянии от поверхности при данной температуре диффузии. Температура входит в данное выражение не явно, а через коэффициент диффузии:

$$D = D_0 e^{-\frac{E}{kT}} \quad (2)$$

Здесь  $D_0$  — постоянная, численно равная коэффициенту диффузии при бесконечно большой температуре и зависящая от геометрии элементарной ячейки кристалла, постоянной решетки и конкретного механизма диффузии;  $E$  — энергия активации процесса диффузии примеси;  $k$  — постоянная Больцмана;  $T$  — температура процесса, К.

Для решения уравнения (1) необходимо знать начальные и граничные условия, которые зависят от разновидности способа проведения диффузии.

В случае использования неограниченного (постоянного) источника примеси диффундирующие примеси поступают в полубесконечное тело через плоскость  $x = 0$ , так что поверхностная концентрация

примеси поддерживается постоянной и равной  $N_S$ . Тогда граничные условия можно представить в виде [2; 6]

$$\begin{aligned} N(0, t) &= N_S; \\ N(\infty, t) &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

и решение уравнения диффузии (1) [2; 5]

$$N(x, t) = N_S \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}. \quad (4)$$

Из выражения (4) следует, что заданное распределение примеси можно получить при различных сочетаниях значений температуры и времени.

Дозу легирования  $Q$ , т.е. число атомов примеси, введенное в кристалл за время диффузии через единичную площадку, можно определить по формуле

$$Q = \int_0^t I(0, t) dt, \quad (5)$$

где  $I(0, t)$  — поток диффузанта в объем тела через плоскость  $x = 0$ ; на основе первого закона Фика

$$I(0, t) = -D \left. \frac{\partial N}{\partial x} \right|_{x=0}. \quad (6)$$

Подставив (4) в (6), получим

$$I(0, t) = N_S \sqrt{\frac{D}{\pi t}}. \quad (7)$$

Проинтегрировав выражение (7) по времени, найдем

$$Q = \int_0^t N_S \sqrt{\frac{D}{\pi t}} dt = 2 N_S \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}. \quad (8)$$

При диффузии из конечного (ограниченного) источника примеси, например, созданного в тонком приповерхностном слое пластины и защищенного маскирующей пленкой от диффузии примесей в окружающее пространство, граничные условия можно записать в виде [1—4; 6]

$$N(\infty, t) = 0; \quad \int_0^{\infty} N(x) dx = Q. \quad (9)$$

Решение уравнения диффузии (1) для этого случая — функция распределения Гаусса [1; 4; 6]

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (10)$$

Особенностью приведенных распределений примеси, соответствующих дополнительной функции к интегралу ошибок (4) и функции Гаусса (10), является монотонное убывание концентрации примеси от поверхности вглубь полупроводника. Максимальная концентрация примеси соответствует поверхности пластины, причем поверхностная концентрация при диффузии из неограниченного источника постоянна независимо от времени диффузии, а при диффузии из ограниченно источника уменьшается с течением времени.

Чтобы получить воспроизводимые параметры диффузионных слоев и сравнительно невысокие поверхностные концентрации, которые почти всегда требуются при изготовлении ИС, большинство диффузионных процессов ведется в две стадии. На первой в тонкий приповерхностный слой полупроводниковой пластины вводится определенное количество легирующей примеси из неограниченного источника. Тем самым на данной стадии, часто называемой «загонкой», создается тонкий приповерхностный слой, насыщенный примесью. Первая стадия протекает быстро и при сравнительно низких температурах.

Для окончательного формирования диффузионной области введенную примесь подвергают перераспределению. Эта вторая стадия диффузии, называемая иногда «разгонкой», соответствует диффузии из неограниченного источника примеси и, как правило, совмещается с термическим оксидированием. Поступление примеси в кристалл извне и испарение из кристалла отсутствуют, происходит перераспределение введенной на первой стадии примеси на определенную глубину.

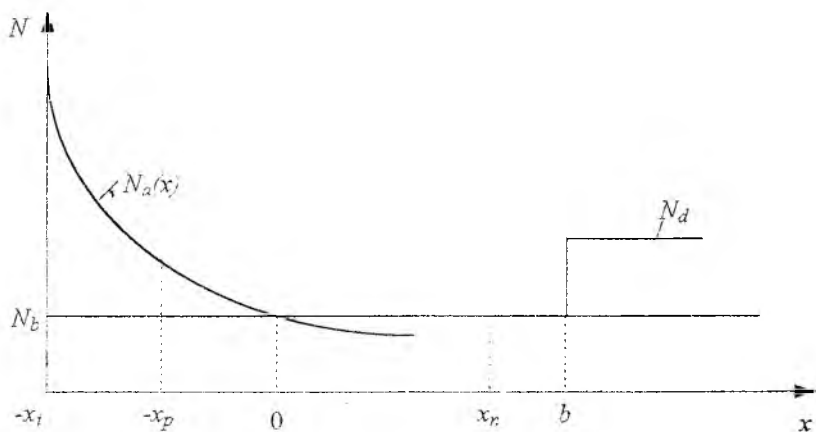
Если в объеме образца имеется недиффундирующая основная примесь с концентрацией  $N_v$ , то суммарная остаточная концентрация (с учетом компенсации доноров и акцепторов) при ограниченном источнике диффузии составляет

$$N_{\text{ост}}(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) - N_v, \quad (11)$$

а при постоянном источнике —

$$N_{\text{ост}}(x, t) = N_a \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} - N_g. \quad (12)$$

Приведем расчет параметров  $p$ - $n$ -перехода для случая, когда распределение акцепторов подчиняется экспоненциальному закону, а распределение доноров однородное. Схематически такой  $p$ - $n$ -переход в эпитаксиальной пленке отражен на рисунке. Здесь  $N_d$  — концентрация донорной примеси в подложке (или в  $n^+$ -скрытом слое);  $N_a(x)$  — концентрация акцепторной примеси в диффузионном слое;  $H = |x_f| + e$  — толщина эпитаксиальной пленки;  $(-x_p)$ ,  $x_n$  — координаты границ слоя объемного заряда.



Для рассматриваемого случая распределение концентрации примеси в эпитаксиальном слое можно выразить так:

$$N(x) = N_a(x) - N_g = N_g e^{-\alpha x} - N_g = N_g(e^{-\alpha x} - 1), \quad (13)$$

где  $\alpha$  — характеристический параметр распределения.

Распределение потенциала в области объемного заряда можно оценить с помощью уравнения Пуассона [3; 5]

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (14)$$

Здесь  $\rho$  — плотность объемного заряда;  $\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника;  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная.

Доноры и акцепторы будем считать полностью ионизированными. Тогда плотность заряда в каждой из частей  $p$ - $n$ -перехода одинакова:

$$\text{в } p^+ \text{-слое } \rho_p = -e(N_a - N_g) = -eN_g(e^{-\alpha x} - 1);$$

$$\text{в } n \text{-слое } \rho_n = e(N_a - N_g) = +eN_g(e^{-\alpha x} - 1),$$

где  $e$  — заряд электрона.

Подставив эти значения в уравнение (14) и проинтегрировав его дважды для каждой из двух частей перехода при граничных условиях

$$\begin{aligned} x = -x_p: \quad \varphi = \varphi_p; \quad \frac{d\varphi}{dx} = 0; \\ x = -x_n: \quad \varphi = \varphi_n; \quad \frac{d\varphi}{dx} = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

получим распределение напряженности  $E(x)$  и электрического потенциала  $\varphi(x)$ .

Функция  $E(x)$  имеет вид

$$E(x) = \frac{eN_g}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \frac{1}{\alpha} (e^{-\alpha x} - e^{\alpha x_p}) + (x + x_p) \right\}, \quad x \leq 0; \quad (16)$$

$$E(x) = \frac{eN_g}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \frac{1}{\alpha} (e^{-\alpha x} - e^{-\alpha x_n}) + (x - x_n) \right\}, \quad x \geq 0. \quad (17)$$

Приравняв значения  $E(x)$  при  $x = 0$  (на металлургической границе), установим соотношение между составляющими ширины перехода в  $n$ - и  $p$ -слоях:

$$x_n + x_p = \frac{1}{\alpha} (e^{\alpha x_p} - e^{-\alpha x_n}). \quad (18)$$

Функция  $\varphi(x)$  имеет вид

$$\varphi(x) = \varphi_p + \frac{eN_g}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \frac{1}{\alpha^2} (e^{-\alpha x} - e^{\alpha x_p}) + \frac{1}{\alpha} e^{\alpha x_p} (x + x_p) - \frac{(x + x_p)^2}{2} \right\}, \quad x \leq 0; \quad (19)$$

$$\varphi(x) = \varphi_n + \frac{eN_g}{\varepsilon\varepsilon_0} \left\{ \frac{1}{\alpha^2} (e^{-\alpha x} - e^{-\alpha x_n}) + \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha x_n} (x - x_n) - \frac{(x - x_n)^2}{2} \right\}, \quad x \geq 0. \quad (20)$$

Приравняем значения  $\varphi(x)$  при  $x = 0$  и примем во внимание, что  $\varphi_n - \varphi_p = \varphi_k - V$ , т.е. полное напряжение на переходе складывается из контактной разности потенциалов  $\varphi_k$  и напряжения источника (при обратном смещении  $V < 0$ ). Тогда запишем

$$\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_k - V)}{eN_g} = \left\{ -\frac{2}{\alpha}(x_n + x_p) + \frac{2}{\alpha}(x_p e^{\alpha x_p} + x_n e^{-\alpha x_n}) - (x_n^2 - x_p^2) \right\}. \quad (21)$$

После преобразований выражения (21) получим уравнение

$$(x_n + x_p)^2 - \frac{2}{\alpha}(x_n + x_p)(1 - e^{-\alpha x_n}) - \frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_k - V)}{eN_g} = 0. \quad (22)$$

Его решение

$$d = x_n + x_p = \frac{1}{\alpha}(1 - e^{-\alpha x_n}) + \sqrt{\frac{1}{\alpha^2}(1 - e^{-\alpha x_n})^2 + \frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_k - V)}{eN_g}}. \quad (23)$$

Уравнение (23) дает возможность выразить в явном виде зависимость ширины заборного слоя и емкости  $p$ - $n$ -перехода от смещения в случае экспоненциального распределения акцепторной примеси.

Если градиент акцепторной примеси  $a = \frac{dN_a(x)}{dx} = -\alpha N_g e^{-\alpha x} |_{x=0}$  велик, то из выражения (23) для ширины заборного слоя выводим соотношение

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_k - V)}{eN_g}}, \quad (24)$$

т.е. найдена формула для резкого  $p$ - $n$ -перехода.

Если градиент концентрации примеси  $a$  в переходе мал, то после преобразований имеем

$$d = \frac{N_g}{a} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{2\varepsilon\varepsilon_0(\varphi_k - V)a^2}{eN_g^3}} \right]. \quad (25)$$

Используя представленные соотношения, можно определить оптимальные параметры  $p$ - $n$ -перехода. Полупроводниковый диод может быть охарактеризован тремя основными параметрами: пробивным напряжением  $V_{пр}$ , начальной удельной емкостью  $C_0$  и предельной частотой работы  $f_{пред}$ .

Для оценки основных параметров структуры можно предложить следующий алгоритм:

1. Так как пробивные напряжения для диффузионных  $p-n$ -переходов связаны с градиентом концентрации примеси соотношением

$$V_{пр} = \frac{10^{12,08}}{a^{0,36}}, \quad (26)$$

градиент концентрации примеси находится из выражения

$$a = \left[ \frac{10^{12,08}}{V_{пр}} \right]^{1/0,36}. \quad (27)$$

2. Значение  $N_{\sigma \text{ опт}}$  на основании выражений (24) и (25) определяется из формулы

$$N_{\sigma \text{ опт}} = \sqrt[3]{\frac{2\epsilon\epsilon_0 a^2 (\varphi_k - V_{пр})}{e}}, \quad V_{пр} < 0. \quad (28)$$

Для всех значений  $N_{\sigma} \geq N_{\sigma \text{ опт}}$  дальнейшее повышение концентрации не приводит к существенному снижению последовательного сопротивления  $R_S$  и увеличению предельной частоты работы  $f_{пред}$ . Возрастание концентрации свыше  $N_{\sigma \text{ опт}}$  невыгодно и в технологическом отношении, поскольку для высоких концентраций практически невозможно обеспечить в  $p-n$ -переходе значение градиента  $a$ , соответствующее заданному  $V_{пр}$ .

3. Глубина залегания  $p-n$ -перехода устанавливается из соотношения [3]

$$x_i = \frac{N_{\sigma \text{ опт}}}{a} \ln \frac{N_S}{N_{\sigma \text{ опт}}}. \quad (29)$$

4. Толщина слоя объемного заряда вычисляется по формуле

$$x_n = \frac{N_{\sigma \text{ опт}}}{a} \left[ 1 + \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 (\varphi_k - V) a^2}{e N_{\sigma}^3} + 1} \right]. \quad (30)$$

5. Толщина эпитаксиального слоя определяется выражением

$$H = x_i + x_n. \quad (31)$$

Основным требованием при выборе структуры диода является требование получения максимального  $V_{пр}$  при минимальном значении  $R_S C$ . Считается, что при  $V = V_{пр}$  слой пространственного заряда распределяется по всей области базы.

6. Удельная емкость  $p$ - $n$ -перехода  $C_0 = C/S$  рассчитывается по формуле

$$C_0 = \frac{\epsilon\epsilon_0}{d} = \frac{\epsilon\epsilon_0 a}{N_{в\text{ опт}} \left[ 1 + \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\phi_k - V)a^2}{eN_e^3} + 1} \right]} \quad (32)$$

7. Предельное значение частоты

$$f_{\text{пред}} = \frac{1}{2\pi R_S C_0 S} \quad (33)$$

где величина последовательного сопротивления  $R_S$  включает в себя сопротивление эпитаксиального слоя пленки по обе стороны от границы слоя объемного заряда. Поскольку толщина области меняется с изменением напряжения, то величина  $R_S$  также может меняться в широких пределах.

Анализ современных тенденций развития технологий ИС показывает, что из многих вариантов схемотехники и методов изготовления применяются лишь самые эффективные. Чтобы данная конкретная технология оказалась жизнеспособной, она должна обеспечивать не только требуемое качество продукции, но и изготовление именно такой аппаратуры и такого программного обеспечения, на которые есть спрос на рынке.

**Список литературы:** 1. Болтокс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках: Пер. с англ. Л.: Наука, 1972. 375 с. 2. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллизацию полупроводников. М.: Высш. шк., 1982. 528 с. 3. Бонч-Бруевич В.Л., Калашиков С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1977. 672 с. 4. Глазов В.М., Земсков В.С. Физико-химические основы легирования полупроводников. М.: Наука, 1967. 364 с. 5. Зи С.М. Физика полупроводниковых приборов. М.: Энергия, 1973. 655 с. 6. Тилл У., Лаксон Д.Ж. Интегральные схемы. Материалы, приборы, изготовление: Пер. с англ. М.: Мир, 1985. 501 с.

Харьковский государственный технический  
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 23.03.98