

№ 1631

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ИНСТИТУТ СТАЛИ И СПЛАВОВ
Технологический университет

В. А. Никоненко

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Моделирование в среде MathCAD

Практикум

МОСКВА 2001

УДК 681.382

Н62

- Н62** В.А. Никоненко. Математическое моделирование технологических процессов: Моделирование в среде MathCAD. Практикум / Под ред. Г.Д. Кузнецова.
- М: МИСиС, 2001. —48с.

В практических работах рассматриваются процессы формирования функциональных слоев полупроводниковых приборов. Приводятся необходимые сведения по физическим основам процессов и методам математического моделирования этих процессов. Целью практикума является освоение студентами методов математического моделирования технологических процессов с использованием современных персональных компьютеров и математической системы MathCAD.

Предназначено для студентов специальности 550700 и 200100.

♥ Московский государственный институт стали и сплавов (Технологический университет) (МИСиС), 2001

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
Практическая работа 1	
Модель кольцевого испарителя.....	5
1.1. Теоретическое введение.....	5
1.2. Порядок выполнения работы.....	12
1.3. Контрольные вопросы.....	13
1.4. Варианты заданий.....	13
Практическая работа 2	
Моделирование процессов диффузии.....	14
2.1. Теоретическое введение.....	14
2.2. Порядок выполнения работы.....	20
2.3. Контрольные вопросы.....	21
2.4. Варианты заданий.....	21
Практическая работа 3	
Формирование биполярного транзистора с помощью диффузии.....	24
3.1. Теоретическое введение.....	24
3.2. Порядок выполнения работы.....	28
3.3. Контрольные вопросы.....	28
3.4. Варианты заданий.....	29
Практическая работа 4	
Моделирование процесса ионной имплантации.....	30
4.1. Теоретическое введение.....	30
4.2. Порядок выполнения работы.....	36
4.3. Контрольные вопросы.....	38
4.4. Варианты заданий.....	38
Практическая работа 5	
Двумерное распределение ионов под краем маски.....	39
5.1. Теоретическое введение.....	39
5.2. Порядок выполнения работы.....	42
5.3. Контрольные вопросы.....	42
5.4. Варианты заданий.....	43
Литература.....	44

ВВЕДЕНИЕ

Практикум содержит пять работ по математическому моделированию некоторых технологических процессов производства полупроводниковых приборов и интегральных схем. 10-15 лет назад в США стоимость экземпляра программного комплекса для моделирования технологических процессов изготовления и характеристик приборов достигала сотен тысяч долларов [1]. В настоящее время техника и программное обеспечение персональных компьютеров достигла такого уровня, когда каждый грамотный специалист может самостоятельно строить модели различные процессов и явлений. Математические расчеты с применением систем высокого уровня (MathCAD, MatLAB, Mathematica и др.) не требуют знаний системного программирования [2]. Эти системы позволяют в формализованном виде строить математические модели физических процессов и явлений. Подготовленные студенты легко осваивают MathCAD и в состоянии самостоятельно моделировать физические явления и процессы, применяемые в производстве полупроводниковых приборов.

В настоящем практикуме все работы выполнены в математической системе MathCAD 7,0 Pro. Для их выполнения достаточно владеть общими навыками работы на персональном компьютере. Процесс вычисления в работах автоматизирован не полностью, поэтому при выполнении работ приходится неоднократно проводить некоторые вычисления для достижения оптимума. Работа считается выполненной, если полученный оптимальный результат удовлетворяет требованиям задания.

Работы выполняются студентами индивидуально и рассчитаны на два часа. При защите работы от студента требуются знания в объеме теоретической части описания работы и наличие отчета с результатом, удовлетворяющим требованиям поставленной задачи.

Практическая работа 1

МОДЕЛЬ КОЛЬЦЕВОГО ИСПАРИТЕЛЯ

1.1. Теоретическое введение

Одним из наиболее эффективных методов нанесения пленок в планарной технологии является метод магнетронного распыления материалов [3]. Этот метод является разновидностью ионно-плазменного распыления. Распыление материала в этих системах происходит за счет бомбардировки поверхности мишени ионами рабочего газа. Скорость распыления в магнетронной системе в 50...100 раз выше по сравнению с обычным ионно-плазменным распылением. Высокая скорость распыления материала в магнетронной системе распыления определяется высокой плотностью ионного тока на мишень. Высокая плотность ионного тока достигается за счет локализации плазмы у поверхности мишени с помощью сильного поперечного магнитного поля.

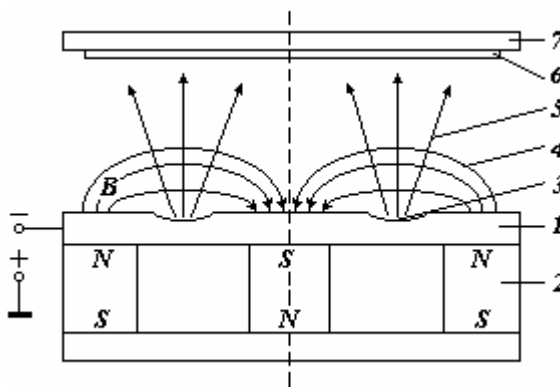


Рис. 1.1. Схема магнетронной системы распыления:

1 - мишень; 2 – магнитная система; 3 – зона распыления; 4 – магнитные силовые линии; 5 – поток распыляемого вещества; 6 – подложка; 7 – подложкодержатель.

Схема магнетронной системы распыления показана на рисунке 1.1. Основными элементами системы являются мишень 1 и магнитная система 2. Магнитные силовые линии 4 замкнуты между полюсами магнитной системы. Между мишенью 1 и подложкодержателем 7 прикладывается электрическое поле и возбуждается аномальный тлеющий разряд. Замкнутое магнитное поле у поверхности мишени локализует разряд вблизи этой поверхности. Положительные ионы из плазмы аномального тлеющего разряда ускоряются электрическим полем и бомбардируют

мишень (катод). Под действием ионной бомбардировки происходит распыление мишени. Электроны, эмитированные с катода под действием ионной бомбардировки, попадают в область скрещенных электрического и магнитного полей и оказываются в ловушке. Траектории движения электронов в ловушке близки к циклоидальным. Эффективность ионизации и плотность плазмы в этой области значительно увеличивается. Это приводит к повышению концентрации ионов у поверхности мишени, увеличению интенсивности ионной бомбардировки мишени и к значительному росту скорости распыления мишени.

При построении модели скорости осаждения пленки путем распыления материала из кольцевого испарителя сделаем следующие допущения:

- распыленные атомы распределяются в пространстве по закону косинуса;
- распыленные атомы не сталкиваются друг с другом и с атомами рабочего газа;
- распыленные атомы осаждаются в точке соударения с подложкой.

В общем случае толщина пленки в произвольной точке подложки описывается выражением:

$$h = \frac{V}{\pi r^2} \cos \varphi \cos \phi \cdot t, \quad (1.1)$$

где V – скорость распыления по толщине;

φ – угол между нормалью к поверхности распыления и направлением распыления;

ϕ – угол между нормалью к поверхности подложки и направлением осаждения;

r – расстояние от элемента распыления до точки осаждения;

t – время распыления.

Модель процесса напыления будем строить для случая, показанного на рисунке 1.1., когда мишень и подложка параллельны и соосны. В этом случае угол распыления равен углу конденсации, т.е. $\varphi = \phi$. Рассмотрим геометрическую схему модели мишень – подложка, которая представлена на рисунке 1.2.

Распределение распыленного материала по подложке является центрально-симметричным, и описываться одной переменной – расстоянием от центра I . Бесконечно тонкий кольцевой элемент поверхности мишени можно представить в виде $dS = R \cdot d\alpha \cdot dR$, где α - угол между I и проекцией R на плоскость подложки $X'Y'$.

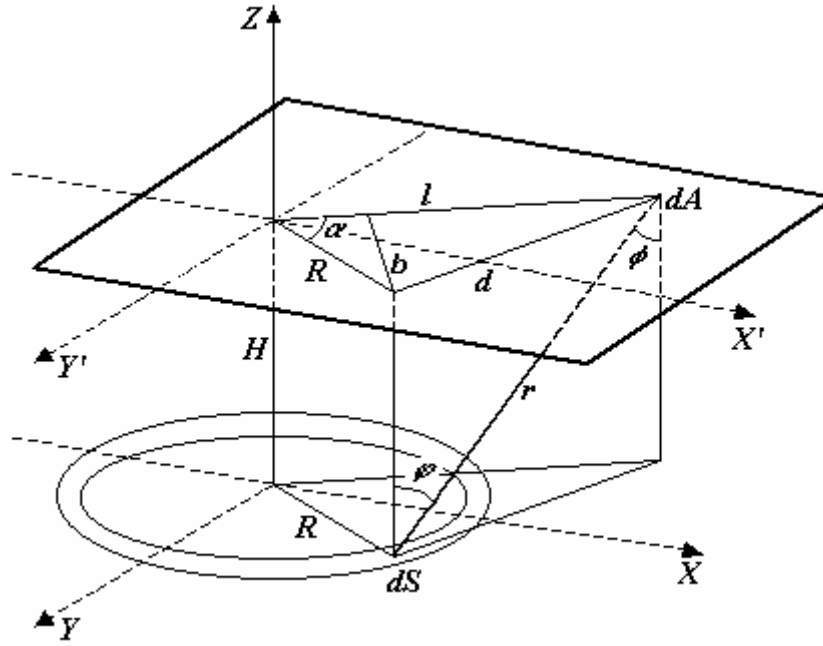


Рис. 1.2. Геометрическая схема модели мишень-подложка.

Угол α можно выразить через радиус кольца и расстояние между мишенью и подложкой - $\cos\phi = H/r$. Подставляя эти соотношения в уравнение (1.1) и суммируя дифференциальные элементы кольца мишени путем интегрирования, получим:

$$h = \int_t \int_R \int_\alpha \frac{V}{\pi r^2} \frac{H^2}{r^2} R d\alpha dR dt. \quad (1.2)$$

Выразим расстояние r через элементы призмы l, R, d, H, α :

$$r = \sqrt{H^2 + l^2 + R^2 - 2lR \cos \alpha}, \quad (1.3)$$

где $l^2 + R^2 - 2lR \cos \alpha = d^2$. Подставим выражение (1.3) в уравнение (1.2):

$$h = \int_t \int_R \int_\alpha \frac{V}{\pi} \frac{H^2 R}{(H^2 + l^2 + R^2 - 2lR \cos \alpha)^2} d\alpha dR dt. \quad (1.4)$$

Проинтегрировав это выражение по времени получим полное количество распыленного вещества. В нашем случае полагаем, что скорость распыления постоянна во времени и не зависит от радиуса кольца распыления, тогда:

$$h = \frac{V_t}{\pi} \int_R \int_\alpha \frac{H^2 R}{(H^2 + l^2 + R^2 - 2lR \cos \alpha)^2} dR d\alpha. \quad (1.5)$$

Для интегрирования выражения (1.5) по углу делаем замену $b = H^2 + l^2 + R^2$, $c = -2lR$, получаем:

$$h = \frac{Vt}{\pi} \int_R \int_{\alpha} \frac{H^2 R}{(b + c \cdot \cos \alpha)^2} dR d\alpha. \quad (1.6)$$

Интегрирование проводим от 0 до 2π , делаем обратную подстановку, получаем:

$$h = 2Vt \int_R \frac{H^2 R}{[(H^2 + R^2 - l^2)^2 + (2lR)^2]^{3/2}} dR. \quad (1.7)$$

Можно провести дальнейшее интегрирование, но результат будет очень громоздким. Поэтому при расчете будем использовать численное интегрирование выражения (1.7).

Количественной характеристикой процесса ионного распыления материалов является скорость распыления, которая определяется как:

$$V = \frac{h}{t}, \quad (1.8)$$

где h – толщина распыленного материала;

t – время распыления.

Для расчета скорости распыления материалов при нормальном падении ионов можно пользоваться выражением:

$$V = \frac{j_u \cdot S \cdot Ma}{e \cdot N_A \cdot \rho}, \quad (1.9)$$

где j_u – плотность ионного тока в сечении, перпендикулярном направлению падения ионов, А/см²;

S – коэффициент распыления материала, атом/ион;

Ma – атомная масса атомов мишени, г/моль;

e – заряд электрона ($1,6 \times 10^{-19}$ Кл);

Na – число Авогадро ($6,023 \times 10^{23}$ атом/моль);

ρ – плотность материала, г/см².

На практике наблюдается хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов. В таблице 1.1 приведены расчетные и экспериментальные значения коэффициента распыления S , скорости распыления V некоторых материалов ионами аргона с энергией 1 кэВ ($1,6 \times 10^{-16}$ Дж) при плотности ионного тока $j_u = 1$ мА/см².

Сравнение экспериментальных и расчетных данных (теория Зигмунда) по скорости распыления некоторых материалов.

Распыляемый материал	V_p , нм/с	
	Расчет	Эксперимент
Cu	1,3	1,7
Ag	2,9	3,4
Au	2,65	2,7
Al	1,25	0,75
Fe	1,36	1,4
Mo	1,03	1,1

Если распыление материалов проводится в диапазоне давлений, при котором возможен возврат распыленных частиц на мишень из-за процессов обратной диффузии и рассеяния, то значение выбранного или рассчитанного коэффициента распыления должно быть скорректировано.

Коэффициент распыления S характеризует эффективность распыления и определяется как среднее число атомов, удаляемых с поверхности твердого тела одной падающей частицей:

$$S = \frac{\text{число удаленных атомов}}{\text{число падающих частиц}}. \quad (1.10)$$

Падающими частицами могут быть ионы, нейтральные атомы, нейтроны, электроны или фотоны с большой энергией.

Для коэффициента распыления типичны значения 1...5, хотя он может изменяться от 0 до 100. Это зависит от энергии и массы первичных частиц и угла их падения на поверхность, массы атомов мишени, кристаллического состояния твердого тела и ориентации кристалла, от поверхностной энергии связи атомов мишени.

Для реализации распыления атомам мишени должна быть сообщена энергия, превышающая энергию их связи в твердом теле. Эта энергия обозначается как пороговая энергия распыления $E_{пор}$. Величина ее колеблется в пределах 10...40 эВ. При энергиях меньше пороговой распыление отсутствует. При больших энергиях коэффициент распыления растет с увеличением энергии первичных частиц, достигает максимума, а затем опять падает. Уменьшение коэффициента распыления при более

высоких энергиях связано с большой глубиной проникновения частиц в твердое тело и меньшим выделением энергии в поверхностном слое.

Согласно теории Зигмунда для аморфных и поликристаллических материалов для низких энергий ионов до 1 кэВ коэффициент распыления определяется следующим выражением:

$$S = \frac{3}{\pi^2} \alpha \frac{M_u M_a}{(M_u + M_a)^2} \cdot \frac{E_u}{2E_{суб}}, \quad (1.11)$$

где M_u и M_a – атомные массы ионов и атомов мишени, г/моль;

E_u - энергия падающих ионов, эВ;

$E_{суб}$ – энергия сублимации атомов мишени, эВ;

α - безразмерный параметр, зависящий от M_a/M_u .

Зависимость параметра α от отношения M_a/M_u при нормальном падении пучка ионов показана на рисунке 1.3.

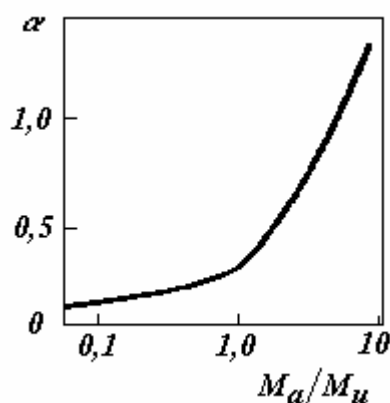


Рис. 1.3. Зависимость коэффициента α от отношения массы атома распыляемого материала M_a к массе иона M_u .

Поскольку энергия ионов при распылении в магнетронной системе при работе на аргоне лежит в диапазоне 350...450 эВ, то при расчете коэффициента распыления будет использоваться выражение (1.11). Справочные данные по характеристикам распыляемых материалов приведены в таблице 1.2.

Характеристики некоторых материалов, необходимые для расчета.

Материал	Атомный номер Z	Атомная масса M , г/моль	Энергия сублимации E_s , эВ	Плотность ρ , г/см ³
Be	4	9	3,48	1,85
Mg	12	24,3	1,59	1,76
Al	13	27	3,26	2,7
Si	14	28	3,91	2,42
Ti	22	47,9	4,34	4,52
V	23	51	3,7	6,11
Cr	24	52	3,68	7,19
Mn	25	54,9	3,15	7,44
Fe	26	55,9	4,15	7,87
Ni	28	58,7	4,41	8,9
Cu	29	63,5	3,56	8,96
Ge	32	72,6	3,77	5,32
Nb	41	92,9	7,5	8,57
Mo	42	96	6,9	10,2
Ag	47	107,8	2,7	10,5
Ta	73	181	8,7	16,6
W	74	183	8,76	19,3
Pt	78	195	5,56	21,5
Au	79	197	3,92	19,32

Расчеты проводятся в обратном порядке. Вначале рассчитывается коэффициент распыления и скорость распыления материала мишени. Затем проводится построение контурного изображения распределения толщины напыляемой пленки в зависимости от радиуса пластины и расстояния до испарителя. Контурный график представлен на рисунке 1.4. После этого рассчитывается распределение толщины напыленной пленки по пластине и неравномерность этого распределения. С учетом выданного задания проводится оптимизация положения подложкодержателя с пластиной относительно мишени.

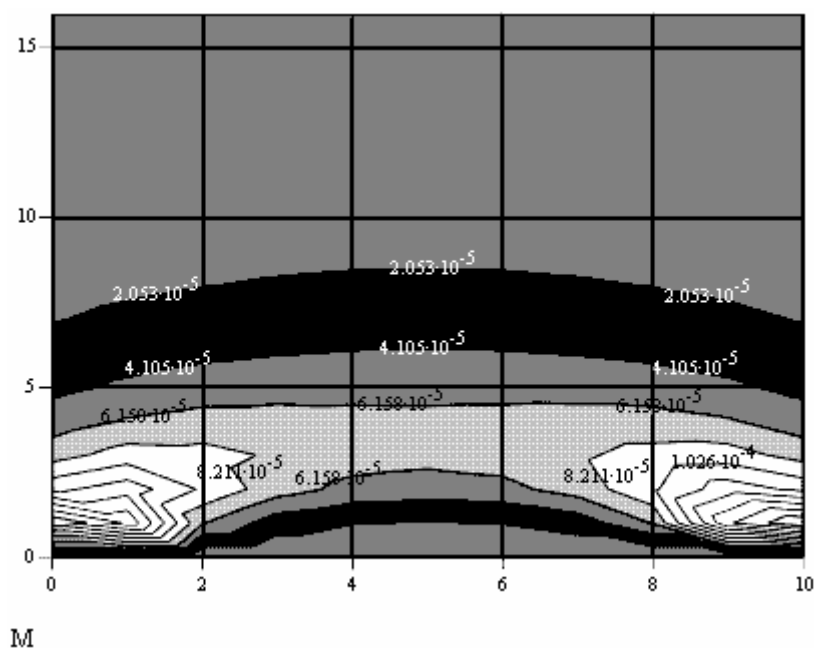


Рис. 1.4. Контурный график распределения толщины напыляемой пленки в зависимости от радиуса пластины и расстояния до испарителя.

1.2. Порядок выполнения работы

1. Получить задание у преподавателя.
2. Запустить программу MathCAD 7.0 PRO щелкнув указателем мыши по соответствующей пиктограмме.
3. Открыть файл «Кольцевой испаритель».
4. Выбрать из приложения 1 необходимые для расчета параметры.
5. Определить коэффициент α по графику графическим способом. Для этого нужно активировать график щелчком мыши и вызвать функцию “Trace” из меню “Format”. График находится в правой части рабочего стола.
6. Ввести выбранные параметры в соответствующие ячейки входных данных.
7. Получить контурное изображение профиля распределения напыляемой пленки в зависимости от радиуса пластины и расстояния до испарителя.
8. Определить среднюю, максимальную и минимальную толщину напыленной пленки по двумерному графику распределения толщины пленки графическим способом. Ввести полученные данные в соответствующие ячейки и получить значение неравномерности толщины пленки по пластине.
9. Добиться требуемой неравномерности толщины пленки меняя расстояние до испарителя (H). Ячейка задания расстояния до испарителя H находится перед двумерным графиком распределения толщины пленки.

10. Добиться требуемой средней толщины напыленной пленки с помощью параметра «время напыления».
11. Занести в отчет все входные данные, полученные результаты и график распределения примеси.

1.3. Контрольные вопросы

1. Какой эффект лежит в основе магнетронного распыления материалов?
2. Из каких основных элементов состоит магнетронная система распыления?
3. От чего зависит скорость распыления материала при ионной бомбардировке?
4. От каких параметров зависит коэффициент распыления в теории Зигмунда?
5. Какие допущения делаются при построении модели кольцевого испарителя?

1.4. Варианты заданий

Примерные варианты заданий приведены в табл. 1.3.

Оптимизировать процесс напыления материала в магнетронной системе распыления: определить расстояние от поверхности мишени, на котором можно получить заданную толщину напыляемой пленки с требуемой неравномерностью при максимально возможной скорости напыления.

Таблица 1.3

Примерные варианты заданий

№ варианта	Материал	Толщина пленки, мкм	Диаметр пластины, мм	Неравномерность, $\pm$ %	Радиус распыления, см	Ток разряда, А
1	Al	1,0	100	5	5,5	6
2	Si	0,5	76	5	5	5
3	Cr	0,1	100	5	5,5	6
4	Cu	0,3	100	3	6,5	7
5	Ti	0,1	76	2	5	5,5
6	Mo	0,2	76	3	4,5	5

Примечание: 1. Рабочий газ – Ar. 2. Ширина кольца распыления – 0,5 см.

Практическая работа 2

Моделирование процессов диффузии

2.1. Теоретическое введение

Диффузией называется перенос атомов вещества (примеси), обусловленный хаотическим тепловым движением атомов, возникающий при наличии градиента концентрации данного вещества, и направленный в сторону убывания этой концентрации [1, 3, 5]. С помощью диффузии можно управлять типом проводимости и концентрацией примеси в локальных областях полупроводниковой пластины, изменять тем самым электрические свойства этих областей. Диффузия является детально изученным методом легирования и наиболее широко применяется на практике.

Диффузия используется для введения в полупроводник некоторого заданного количества легирующей примеси. Примесные атомы могут располагаться в кремнии в узлах кристаллической решетки, замещая основные атомы, и между основными атомами (междоузельные примеси). Соответственно и перемещение примесных атомов может происходить по двум механизмам: вдоль дефектов кристаллической решетки (вакансиям) и по междоузлиям. При высокой температуре ($\sim 1000^\circ\text{C}$) наблюдается активация процесса диффузии. При диффузии по первому механизму после охлаждения кристалла вакансии исчезают, а примесные атомы, занимающие узлы кристаллической решетки, фиксируются. При диффузии по второму механизму после охлаждения кристалла междоузельные атомы могут вернуться в узлы, замещая основные атомы, и стать электрически активными.

Перемещение атомов вещества (примеси) в решетке кристалла происходит скачками. Эти скачки происходят в трех измерениях, и суммарный поток определяется статистическим усреднением за определенный период времени. Механизм скачков состоит в следующем. Атомы в кристалле образуют последовательность потенциальных барьеров (рис. 2.1, а), препятствующих перемещению примесей. Высота потенциальных барьеров для большинства материалов имеет порядок 1 эВ, расстояние между соседними потенциальными барьерами одного порядка с постоянной решетки, т.е. лежит в интервале 0,1...0,3 нм. При приложении постоянного электрического поля распределение потенциала имеет наклон, как это показано на рис. 2.1, б. Это облегчает перемещение положительно заряженных частиц по направлению поля и затрудняет их движение против поля.

Рассчитаем поток F в точке z . Этот поток будет равен среднему значению потока в точках $z-a/2$ и $z+a/2$, которые, согласно рисунку 2.1, б, соответственно равны F_1-F_2 и F_3-F_4 .

Рассмотрим составляющую F_1 . Она равна произведению 1) плотности примесей на единицу площади в плоскости потенциальной ямы при $z-a$, 2) вероятности перескока любой из этих примесей в яму с координатой z , 3) частоты скачков ν . В соответствии с этим можно записать:

$$F_1 = [aC(z-a)] \cdot \exp\left[-\frac{q}{kT}\left(W - \frac{aE}{2}\right)\right] \cdot \nu, \quad (2.1)$$

где $aC(z-a)$ – плотность частиц на единицу площади, расположенных в яме с координатой $z-a$;

$\exp$ - экспоненциальный член – вероятность перескока частиц из ямы $z-a$ в яму z .

Аналогичные формулы могут быть записаны для потоков F_2 , F_3 и F_4 . Объединяя полученные соотношения для вычисления результирующего потока F в точке z , в предположении, что $C(z \pm a)$ равно $C(z) \pm a(\partial C / \partial z)$, получим:

$$F(z) = -(\nu a^2 e^{-qW/kT}) \frac{\partial C}{\partial z} \times ch \frac{qaE}{2kT} + (2a \nu e^{-qW/kT}) C \times sh \frac{qaE}{2kT}. \quad (2.2)$$

Частный предельный случай этого соотношения, имеющий важное практическое значение, получается для относительно малого электрического поля, когда $E \ll kT/qa$ (рис. 2.1, а). В этом случае, используя разложения функций ch и sh в ряд и полагая $chz=1$ и $shz \approx z$ при $z \rightarrow 0$, получаем выражение для предельного потока положительно заряженных частиц в следующем:

$$F(z) = -D \frac{\partial C}{\partial z} + \mu EC, \quad (2.3)$$

где

$$D = \nu a^2 e^{-qW/kT}; \quad (2.4)$$

$$\mu = \frac{\nu a^2 e^{-qW/kT}}{kT/q}. \quad (2.5)$$

Как следует из формул (2.4) и (2.5), коэффициент диффузии D и подвижность μ связаны между собой хорошо известным соотношением Эйнштейна:

$$D = \frac{kT}{q} \mu. \quad (2.6)$$

Составляющую полного потока, пропорциональную градиенту концентрации, принято называть диффузионным членом, а составляющую, пропорциональную концентрации, - дрейфовым. На основании формулы (2.3) получаются уравнения Фика, описывающие процесс диффузии:

для положительных зарядов

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \mu_+ E \frac{\partial C}{\partial z}; \quad (2.7)$$

для отрицательных зарядов

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \mu_- E \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (2.8)$$

Диффузия имеет междоузельный характер, когда атомы в кристаллической решетке перемещаются из одного междоузельного состояния в соседнее с ним. Диффузия примесей замещения, т.е. примесных атомов, занимающих места в узлах кристаллической решетки, обычно происходит за счет перескока примесей на место вакансий. В этом случае энергия активации включает энергию, необходимую для образования вакансии, и энергию, требуемую для перемещения примеси. Обычно диффузия через междоузлия представляет собой более быстрый процесс по сравнению с диффузией примесей замещения.

В некоторых кристаллах энергия атома, являющегося атомом замещения, имеет примерно одинаковое значение, когда атом находится в узле или междоузлии. В этом случае возможен еще один механизм диффузии, называемый диссоциативным. Согласно этому механизму, атом замещения, возбуждаясь, занимает междоузельное положение, и на его месте появляется вакансия. После этого междоузельный атом диффундирует до тех пор, не встретит другую вакансию, где он снова становится атомом замещения. При этом диффузионные уравнения в одномерном приближении принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} S = D_s \frac{\partial^2}{\partial z^2} S - R_s + Q_I; \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} I = D_I \frac{\partial^2}{\partial z^2} I + R_s - Q_I, \quad (2.10)$$

где S – концентрация атомов замещения;

I – концентрация междоузельных атомов;

R_s – скорость убывания атомов замещения;

Q_I – скорость убывания атомов в междоузлиях.

До тех пор пока не выполняется условие $R_S=Q_I$ (обмен между вакансиями и междоузлиями находится в равновесном состоянии), диффузия не подчиняется закону Фика. Существует несколько систем примесь-кристалл, в которых закон Фика не выполняется.

Кроме нормального термоактивируемого процесса диффузии существуют диффузионные механизмы, стимулируемые облучением. Бомбардировка частиц вызывает ионизацию и смещение атомов, что может улучшить условия диффузии. Если энергия атомов отдачи достаточна для образования вакансий и междоузельных атомов, то эти дефекты также ускоряют диффузионный процесс. Через вакансии и междоузлия в кристалле могут осуществляться один и более диффузионных механизмов, поэтому для полного описания диффузионного процесса требуется несколько пар уравнений, аналогичных тем, которые используются для описания диссоциативного механизма. Кроме того, часто процессы, соответствующие дополнительным членам в уравнениях, не находятся в термически равновесном состоянии, поэтому диффузия не подчиняется закону Фика.

Диффузия может возникать под действием электрического поля, давления и т.п. Такой механизм показан на рисунке 2.1,б. При наличии градиента потенциала преодоление диффундирующими частицами потенциальных барьеров вызывает направленный дрейфовый поток. Этот вид диффузии имеет место, как правило, на поверхности. Так, например электронная эмиссия, стимулированная облучением частиц, с поверхности материала, обладающего низкой проводимостью, создает электрическое поле, а испарение одного из компонентов сплава приводит к возникновению на поверхности поля механических напряжений. Стимулирование диффузии может происходить также за счет передачи энергии диффундирующим атомам при столкновении их с высокоэнергетичными частицами.

Диффузия, стимулированная ионизацией, возникает, когда диффундирующие частицы имеют зарядовые состояния, в одном из которых потенциальный барьер при миграции меньше, чем в другом. На рисунке 2.1, в показано изменение потенциальной энергии по координате в кристалле, где существует возможность диффузии по двум каналам в соответствии с зарядовым состоянием частицы.

Для диффузионного механизма, стимулированного высвобождением энергии, можно рассмотреть несколько разных случаев. Возникновение электронно-дырочной пары в кристалле с запрещенной зоной эквивалентно временному накоплению энергии, так как энергия электрона выше, чем энергия дырки. Рекомбинация электрона и дырки приводит к высвобождению энергии, которая может стимулировать диффузию,

особенно если акт рекомбинации происходит в месте расположения диффундирующих частиц, как показано на рисунке 2.1, г. Конечно, если в результате высвобождения энергии появляется фонон, то он может покинуть окрестность диффундирующей частицы, не дав вклада в стимулирование процесса диффузии. Этот механизм высвобождения энергии часто наблюдается в сложных полупроводниках групп III-V.

При диффузии из поверхностного источника бесконечной мощности, обеспечивающего постоянство поверхностной концентрации C_0 начальное и граничные условия для решения дифференциального уравнения диффузии имеет вид:

$$C_{z,t} = 0 \quad \text{при} \quad t = 0,$$

$$C_{0,t} = C_0 \quad \text{при} \quad t = 0 \quad \text{и} \quad z = 0.$$

При этих условиях распределение концентрации примеси по глубине диффузионного слоя в момент времени t описывается выражением:

$$C_{z,t} = C_0 \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{Dt}}. \quad (2.11)$$

В случае двухстадийной диффузии в слаболегированный полупроводник одной и той же примеси распределение имеет вид:

$$C_{z,t} = C_{01} \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{D_1 t_1 + D_2 t_2}} + (C_{02} - C_{01}) \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{D_2 t_2}}, \quad (2.12)$$

где C_{01}, D_1, t_1 и C_{02}, D_2, t_2 относятся соответственно к первой и второй стадиям диффузии.

При одностадийной диффузии примеси в полупроводник с противоположным типом проводимости, т.е. при формировании р-п перехода, положение р-п перехода определяется точкой инверсии типа проводимости:

$$\operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{Dt}} = \frac{C_B}{C_0}, \quad (2.13)$$

где C_B – концентрация примеси в исходном полупроводнике.

При диффузии из поверхностного источника ограниченной мощности, если в начальный момент процесса легирующая примесь сосредоточена на поверхности полупроводника в исчезающе тонком слое, ее концентрация равна Q , а ее приток извне отсутствует, то начальное и граничные условия можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{при } t=0 \text{ и } z>0 \quad C_{x,t} &= 0; \\ \text{при } t>0 \text{ и } z \rightarrow \infty \quad C_{x,t} &= 0; \\ \text{при } z=0 \text{ и } 0 \leq t \leq \infty \quad \frac{dC}{dz} &= 0; \\ \text{при } 0 \leq t \leq \infty \quad \int_0^\infty C_{x,t} dx &= Q. \end{aligned}$$

В этом случае при решении уравнения диффузии распределение концентрации примеси получается в виде функции Гаусса:

$$C_{z,t} = C_0 \exp\left(-\frac{z^2}{4Dt}\right); \quad (2,14)$$

$$C_0 = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}}. \quad (2,15)$$

При диффузии примеси из поверхностного источника ограниченной мощности в полупроводник с противоположным типом проводимости, положение р-п перехода можно рассчитать по следующему выражению:

$$z_j = 2\sqrt{Dt} \sqrt{\ln \frac{C_0}{C_B}}. \quad (2,16)$$

Температурная зависимость коэффициента диффузии имеет вид:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right), \quad (2,17)$$

где D_0 – постоянная, численно равная коэффициенту диффузии при бесконечно большой температуре, $\text{см}^2/\text{с}$; ΔE – энергия активации диффузии, эВ.

Значения этих величин для некоторых примесей в кремнии приведены в таблице 2.1.

Таблица 2.1.

Коэффициенты диффузии и энергии активации для некоторых примесей в кремнии.

Акцепторы			Доноры		
Элемент	D_0 , $\text{см}^2/\text{с}$	E_a , эВ	Элемент	D_0 , $\text{см}^2/\text{с}$	E_a , эВ
Бор	5,1	3,7	Фосфор	3,85	3,66
Алюминий	1,385	3,39	Мышьяк	24	4,08
Индий	0,785	3,63	Сурьма	12,9	3,98
Галлий	0,374	3,41	Висмут	1,08	3,85

При выполнении работы следует учесть одно обстоятельство. Это то, что растворимость примесей в кремнии имеет предел. Поэтому при проведении диффузии максимальная поверхностная концентрация примеси C_0 не может превышать ее максимальную растворимость в кремнии. Обычно считают, что если при температуре диффузии имеется избыток примеси, то поверхностная концентрация примеси равна ее максимальной растворимости. Данные по максимальной растворимости примесей в кремнии представлены в таблице 2.2.

Таблица 2.2.

Максимальная растворимость некоторых примесей в кремнии.

Элемент	Максимальная растворимость, ат/см ³	Температура максимальной растворимости, °С
Алюминий	$2 \cdot 10^{19}$	1150
Бор	$4 \cdot 10^{20}$	1200
Висмут	$8 \cdot 10^{17}$	1300
Галлий	$4 \cdot 10^{19}$	1250
Индий	10^{19}	1300
Мышьяк	$2 \cdot 10^{21}$	1150
Сурьма	$8 \cdot 10^{19}$	1300
Фосфор	$1,3 \cdot 10^{21}$	1150

2.2. Порядок выполнения работы.

1. Получить задание у преподавателя.
2. Запустить программу MathCAD 7.0 PRO щелкнув указателем мыши по соответствующей пиктограмме.
3. Открыть файл «Диффузия».
4. Выбрать из приложения 2 необходимые для расчета параметры.
5. Ввести в соответствующие ячейки необходимые для расчета константы.
6. Получить график зависимости коэффициента диффузии от температуры, рассчитать коэффициент диффузии примеси для заданной температуры.
7. Выбрать раздел программы для вида источника диффузии в соответствии с заданием.
8. Получить график распределения концентрации примеси в полупроводнике.
9. Рассчитать глубину залегания p-n перехода.

10. Внести в отчет входные данные, полученные результаты, включая графики.

2.3. Контрольные вопросы

1. Что такое диффузия и для чего она применяется?
2. Как происходит перемещение атомов примеси в решетке кристалла?
3. Что такое коэффициент диффузии и от каких параметров он зависит?
4. Как выглядит распределение концентрации примеси по глубине при диффузии из источника бесконечной мощности?
5. Как выглядит распределение концентрации примеси по глубине при диффузии из источника ограниченной мощности?

2.4. Варианты заданий

Варианты заданий приведены в табл. 2.3.

1. Рассчитать характеристики распределения заданной примеси в кремнии при одностадийной диффузии из источника бесконечной мощности (примесь 1).

2. Определить параметры двухстадийной диффузии той же примеси в кремнии для получения р-п перехода на заданной глубине и требуемой ее поверхностной концентрации (примеси 1 и 2).

Таблица 2.3

№ варианта	Примесь	Температура диффузии, °С	Время диффузии, с	Глубина р-п перехода, мкм	Поверхностная концентрация примеси, см ⁻³		
					1	2	в исходном кремнии
1	P	1200	600	1	10^{21}	10^{18}	10^{15}
2	In	1100	1200	0,8	10^{18}	10^{17}	10^{15}
3	B	1100	600	1,5	4×10^{21}	10^{20}	10^{16}
4	Sb	1200	600	1	10^{19}	10^{18}	10^{15}
5	As	1200	1000	1,5	10^{20}	10^{19}	10^{17}
6	Ga	1200	1200	2	10^{18}	10^{17}	10^{15}

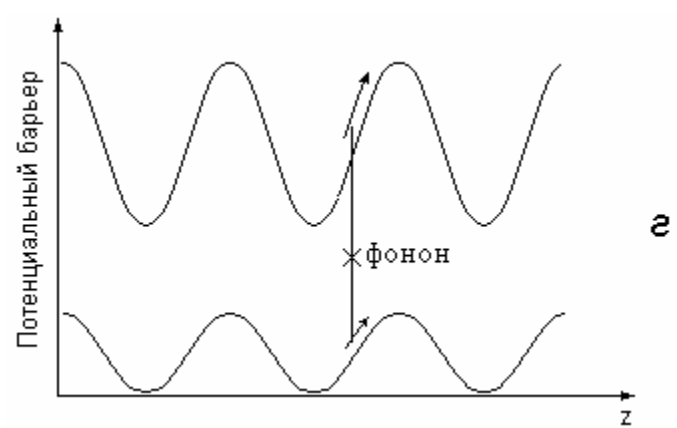
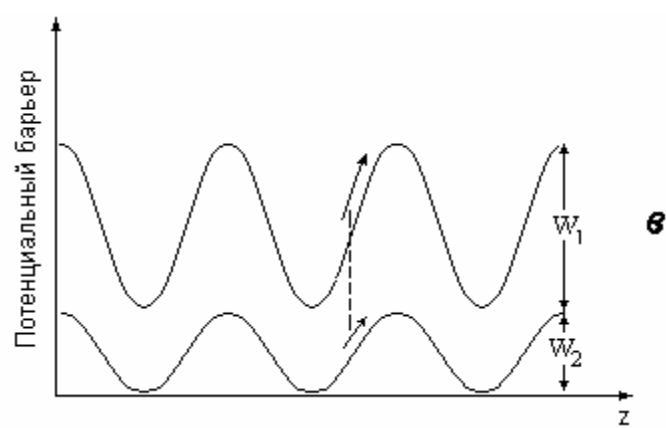
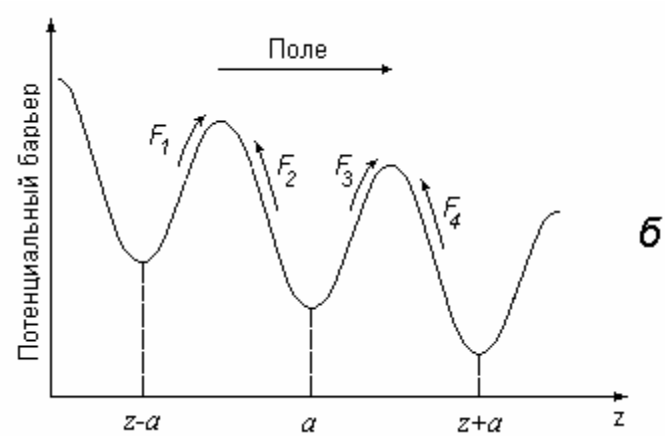
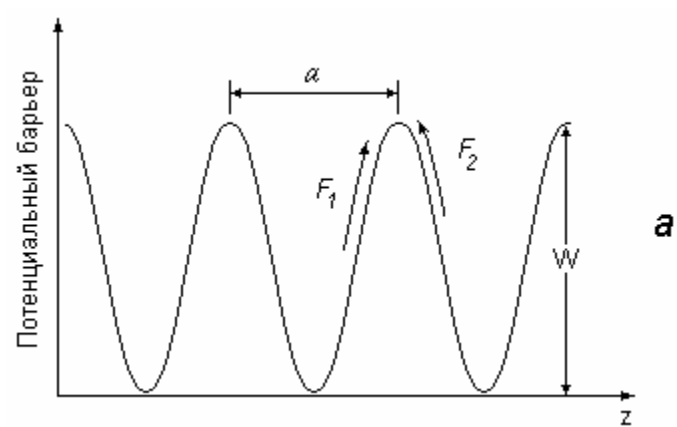


Рис. 2.1. Механизмы диффузии: а – термостимулированная диффузия; б – диффузия, стимулированная полем (электрическая, механических напряжений); в – диффузия по двум каналам (диссоциативная, стимулированная ионизацией); г – диффузия, стимулированная высвобождением энергии (фотон, фонон).

Практическая работа 3

Формирование биполярного транзистора с помощью диффузии

3.1. Теоретическое введение

При формировании структуры биполярного транзистора необходимо создать два р-п перехода [3, 5, 6]. Схема дискретного вертикального биполярного транзистора, сформированного по стандартной планарной технологии, показана на рисунке 1.3. Такой транзистор можно сформировать, например, если в кремний ввести сначала акцепторную примесь, а затем донорную примесь.

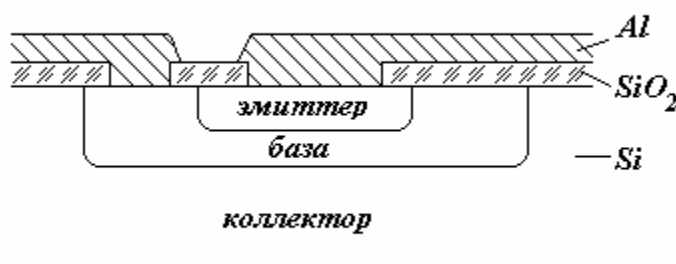


Рис. 3.1. Схема биполярного транзистора, сформированного по стандартной планарной технологии.

Так как донорные и акцепторные примеси диффундируют в полупроводник с различными скоростями, можно, создав надлежащую поверхностную концентрацию этих элементов, получить электронно-дырочную структуру путем одновременной диффузии обоих элементов из паровой фазы. Так, в германии при одинаковой температуре донорные примеси имеют большие коэффициенты диффузии, чем акцепторные примеси из того же ряда периодической системы. Например, коэффициент диффузии мышьяка при 845°C равен $4 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{сек}$, а индия – $4 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{сек}$. Поэтому при одновременной диффузии мышьяка и индия в германий дырочной проводимости с необходимым удельным сопротивлением получаются *p-n-p* структуры.

Для получения диффузионных переходов в кремнии, наряду с методом одновременной диффузии примесей, например, из соединений III—V групп, применяют метод последовательной диффузии донорных и акцепторных примесей или их сплавов или соединений, в особенности окислов.

Первый метод, хотя и отличается простотой, не допускает отдельного регулирования концентрации примесей или температуры. Поэтому обычно предпочитают второй метод, допускающий отдельное регулирование концентрации и температуры. Сначала в полупроводник вводят медленно диффундирующую примесь (донор), так как иначе будет трудно управлять распределением быстро диффундирующей примеси (акцептора). Для лучшего контроля процесса нужно, чтобы оба примесных элемента присутствовали в полупроводнике только во время второй диффузии. В том случае, когда можно задавать концентрации независимо от температуры, проведение обоих диффузионных циклов при различных температурах обеспечивает большую гибкость процесса. Даже когда коэффициенты диффузии донора и акцептора одинаковы, то можно управлять процессом путем различной продолжительности первого и второго цикла.

Как уже упоминалось, в случае многокомпонентных систем полагают, что каждая примесь диффундирует независимо от другой. Это согласуется с опытными данными. Чтобы показать соотношение между концентрациями примесей в полупроводнике при различных коэффициентах их диффузии и поверхностных концентрациях, рассмотрим одновременную диффузию двух примесей при постоянных поверхностных концентрациях C_s . Распределение примесей для этого случая показано на рис. 3.2. Концентрация донора представлена кривой C_D . Предполагается, что донор более растворим и менее подвижен, чем акцептор (кривая C_A). Прямая C_D^0 соответствует постоянной концентрации донора в исходном полупроводнике. Первый p - n переход b_1 возникает, когда кривая, отвечающая суммарной концентрации донора $C_D + C_D^0$, пересечет акцепторную кривую, а второй переход b_2 , когда кривая C_A пересечет прямую C_D^0 . Зависимость разности концентраций $C_D - C_A$ от расстояния показана для этого случая на рисунке 3.2, а. Наклон кривой $C_D - C_A = f(x)$ в p -области или в базовой области характеризует внутреннее электрическое поле, возникающее в базовой области транзистора. Это поле ускоряет перемещение электронов к переходу b_2 в той части базовой области, которая лежит правее минимума на кривой; наличие такого поля является одним из важных преимуществ диффузионных структур. Тормозящее поле, которое имеется в левой половине базовой области, должно быть возможно меньшим.

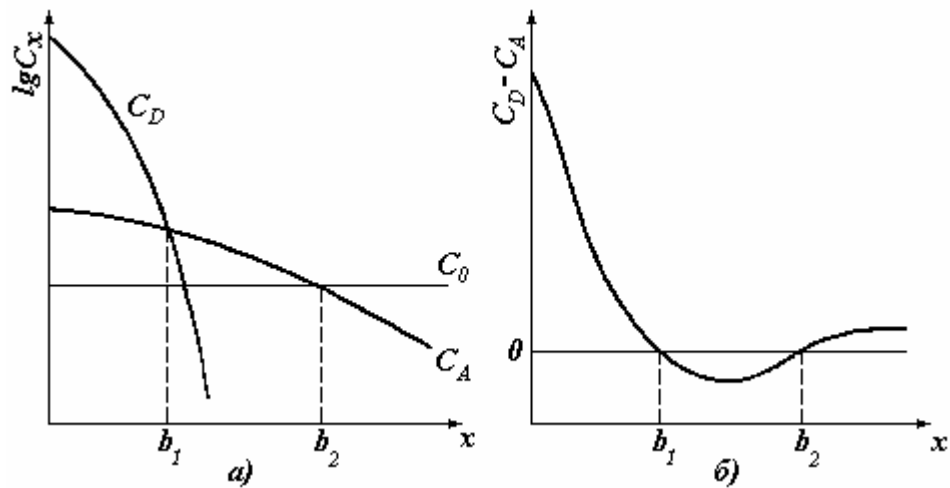


Рис. 3.2 Распределение примесей при одновременной диффузии донора C_D и акцептора C_A в полупроводник с исходной концентрацией донора C_0 (а) и зависимость разности концентраций $C_D - C_A$ от глубины (б): р-п переходы возникают на глубине b_1 и b_2 от поверхности.

Базовую диффузию обычно осуществляют в две стадии: первая стадия – стадия загонки, вторая стадия – стадия разгонки. Стадию загонки проводят в течение короткого времени, при этом количество примеси строго регламентируется. Распределение концентрации примеси описывается erfc -функцией:

$$C(x) = C_0 \text{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt_1}}. \quad (3.1)$$

Концентрация примесных атомов, введенных во время первой стадии описывается выражением:

$$Q = C_0 \cdot \sqrt{\pi \cdot D_1 \cdot t_1}, \quad (3.2)$$

где Q – поверхностная концентрация введенной примеси;

C_0 – поверхностная концентрация примеси при загонке;

D_1 – коэффициент диффузии примеси;

t_1 – время загонки примеси.

Вторую стадию проводят более длительное время, а распределение примеси при этом подчиняется экспоненциальному распределению:

$$C(x) = \frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D_2 \cdot t_2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot D_2 \cdot t_2}\right), \quad (3.3)$$

где D_2 – коэффициент диффузии примеси при разгонке;

t_1 – время разгонки примеси.

Глубина залегания р-п перехода рассчитывается с помощью выражения:

$$X_i = 2\sqrt{D_2 \cdot t_2} \cdot \sqrt{\ln\left(\frac{\frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D_2 \cdot t_2}}}{C_s}\right)}, \quad (3.4)$$

где C_s – концентрация примеси в исходном полупроводнике.

Диффузию эмиттерной области обычно проводят из источника с постоянной поверхностной концентрацией, поэтому распределение примеси описывается *erfc*-функцией:

$$C_2(x) = C_o \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_3 t_3}} \quad (3.5)$$

где D_3 – коэффициент диффузии эмиттерной примеси;

t_3 – время диффузии эмиттерной примеси.

Глубина залегания эмиттерного р-п перехода определяется точкой инверсии типа проводимости. Для расчета глубины залегания р-п перехода необходимо решить уравнение

$$C_2(x) + C_s = C_1(x). \quad (3.6)$$

Точный расчет в аналитическом виде весьма затруднителен, поэтому в работе глубина залегания р-п перехода вычисляется численным методом.

Одним из важных параметров биполярного транзистора является максимальная концентрация примеси в базе и глубина ее залегания. Эти параметры рассчитываются также численным методом.

При расчете распределения концентрации базовой примеси и определении положения р-п переходов необходимо учесть перераспределение примеси в базовой области при диффузии эмиттерной примеси. При многократном воздействии на полупроводник повышенной температуры в расчете используется эффективное значение произведения Dt :

$$Dt_{эфф} = D_1 \cdot t_1 + D_2 \cdot t_2 + D_3 \cdot t_3. \quad (3.7)$$

Как и в лабораторной работе № 2 при проведении диффузии следует учесть, что максимальная поверхностная концентрация легирующей примеси не может превышать ее максимальную растворимость в кремнии. Распределение концентрации примесей после проведения всех стадий диффузии показано на рисунке 3.3.

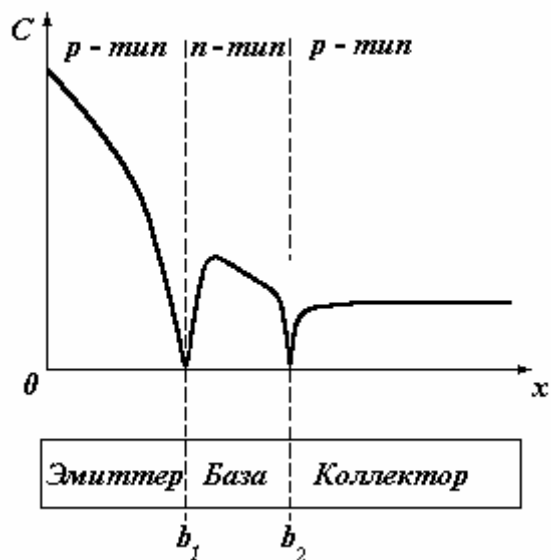


Рис. 3.3. Распределение концентрации примесей в р-п-р транзисторе.

3.2. Порядок выполнения работы.

1. Получить задание у преподавателя.
2. Запустить программу MathCAD 7.0 PRO щелкнув указателем мыши по соответствующей пиктограмме.
3. Открыть файл «Биполярный транзистор».
4. Выбрать из приложения 2 необходимые для расчета параметры.
5. Подобрать параметры стадий загонки и разгонки бора, необходимых для формирования базы транзистора. Получить требуемую глубину залегания коллекторного р-п перехода.
6. Подобрать параметры стадии диффузии мышьяка: необходимо получить требуемую глубину залегания базового р-п перехода и требуемую поверхностную концентрацию в эмиттерной области.
7. Уточнить глубину залегания коллекторного р-п перехода (он может сместиться).
8. Рассчитать максимальную концентрацию примеси в базе и глубину ее залегания.
9. Занести в отчет все входные данные, полученные результаты и график распределения примесей.

3.3. Контрольные вопросы

1. Какие примеси являются донорами, а какие акцепторами в кремнии?
2. Как сформировать биполярный транзистор с помощью диффузии примесей?
3. Чем определяется положение р-п переходов в биполярном транзисторе?

4. Как выглядит распределение концентрации примесей в биполярном транзисторе?

3.4. Варианты заданий

Сформировать биполярный транзистор с требуемой шириной базы и эмиттера используя раздельную диффузию заданных примесей (табл. 3.1).

Таблица 3.1

№ варианта	Примесь		Концентрация примеси, см ⁻³		Ширина, мкм	
	базовая	эмиттерная	Максимальная в эмиттере	в исходном кремнии	базы	эмиттера
1	B	P	10^{21}	10^{15}	1,5	1
2	P	B	5×10^{20}	10^{16}	1,5	1
3	B	As	5×10^{20}	10^{16}	0,5	1,5
4	As	B	10^{21}	10^{17}	0,5	1
5	B	Sb	8×10^{19}	10^{16}	1	1
6	Sb	B	5×10^{19}	10^{15}	1,5	0,5

Практическая работа 4

Моделирование процесса ионной имплантации

4.1. Теоретическое введение

При ионной имплантации заряженные частицы ионного пучка внедряются в твердое тело, изменяя различные его свойства [1, 3, 5, 6].

При внедрении в решетку твердого тела ионы теряют свою энергию, как вследствие неупругих, так и упругих столкновений. Неупругими столкновениями считаются такие, в результате которых часть энергии иона теряется на возбуждение или ионизацию атома мишени (взаимодействие с электронами решетки). Энергия при упругих столкновениях передается ядрам атомов мишени. Кроме того, вклад в энергетические потери дает обмен зарядами между ионом и атомом мишени.

Если энергия, переданная атому при упругом столкновении, превышает энергию связи атомов в твердом теле, то атом покидает узел. В результате образуется пара Френкеля – вакансия+междоузельный атом. Атомы, находящиеся в поверхностном слое, получив энергию иона, могут отрываться от кристалла – происходит процесс распыления и образуется вакансия – дефект Шоттки. Энергия первично смещенного атома, называемого атомом отдачи, сравнительно велика, поэтому на пути своего движения атом отдачи образует целый ряд каскад смещений, вследствие чего в кристалле возникают отдельные разупорядоченные зоны размером $3 \dots 10$ нм. По мере имплантации ионов идет накопление радиационных дефектов. Когда плотность ионов, внедренных на единицу поверхности, превосходит критическую величину, называемую дозой аморфизации, образуется сплошной аморфный слой.

Внедренный ион может попасть в вакантный узел, став донором или акцептором, но вероятность замещения узлов мала. Большинство внедренных ионов находится в междоузлиях, где они не являются электрически активными. Для перевода их в узлы и восстановления кристаллической структуры полупроводника производят отжиг. В процессе отжига происходит распад и аннигиляция радиационных дефектов, а внедренные примеси занимают вакантные узлы, в результате чего образуется слой p- или n- типа проводимости.

В упрощенной классической модели ЛШШ (Линхарда-Шарфа-Шютта) для изотропной или аморфной полубесконечной мишени принимается, что рассеяние ионов

в мишени носит случайный характер, а распределение их пробегов описывается функцией Гаусса.

Полный пробег иона с начальной энергией E_0 описывается формулой

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_n + S_e}, \quad (4.1)$$

где S_n – поперечное сечение ядерного торможения (ядерная тормозная способность);

S_e – поперечное сечение электронного торможения (электронная тормозная способность).

С достаточно хорошим приближением сечение ядерного торможения описывается выражением

$$S_n = 0,278 \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}} \cdot \frac{M_1}{M_1 + M_2} \cdot N = \frac{1}{2k}, \quad (4.2)$$

где Z – заряд ядра;

M – атомная масса, индексы 1 и 2 относятся соответственно к иону и атому мишени;

N – собственная концентрация атомов вещества;

k – коэффициент ядерной замедляющей способности. Как видно из формулы (4.2), замедляющая способность вещества не зависит от энергии.

Поперечное сечение электронного торможения в соответствии с моделью ЛШШ

$$S_e = 3,28 \cdot 10^{-3} \frac{Z_1 + Z_2}{\sqrt{M_1}} \cdot N \sqrt{E} = k_1 \sqrt{E}, \quad (4.3)$$

где k_1 – коэффициент электронной замедляющей способности.

При вычислении длины пробега иона принято предполагать, что потери энергии на ядерные и электронные взаимодействия не связаны друг с другом. Тогда выражение (4.1) может быть проинтегрировано, в результате чего получаем:

$$R = 2 \frac{\sqrt{E}}{k_1} - \frac{1}{k \cdot k_1^2} \ln(1 + 2k \cdot k_1 \sqrt{E}). \quad (4.4)$$

Траектория внедряемого атома до полной остановки представляет собой ломаную линию. Полное расстояние, на которое он проникает в кристалл, называется полным пробегом. Полный пробег R характеризуется продольным распределением ΔR . С точки зрения практического использования важное значение имеет не полный пробег, а проекция пробега (проективный пробег) R_p , т. е. пробег в направлении первоначальной траектории движения иона. Проекция пробега R_p характеризуется продольным распределением ΔR_p и поперечным распределением ΔR_T относительно

полного пробега. Между полным пробегом R и проекцией пробега R_p существует приближенное соотношение:

$$R_p = \frac{R}{1 + \frac{1}{3\mu}}, \quad (4.5)$$

где $\mu = M_1/M_2$.

Среднее квадратическое отклонение пробега (дисперсия)

$$\frac{\Delta R_p^2}{R_p^2} \approx \frac{\Delta R^2}{R^2} = \frac{2}{3} \cdot \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}. \quad (4.6)$$

Интервал $R_p \pm 3\Delta R_p$ включает 99,7% внедренных ионов. Необходимые для расчета сведения по проективному пробегу и его дисперсии для некоторых элементов в кремнии приведены в таблице 4.1.

Таблица 4.1

Проективный пробег и дисперсия проективного пробега некоторых элементов в кремнии, нм

Элемент		Е, кэВ									
		20	40	60	80	100	120	140	160	180	200
В	R _p	78,4	161	243,8	323,8	397,7	468,8	537,4	603	665,4	725,3
	ΔR _p	32,1	53,8	70,8	83,9	93,9	102,5	109,8	116	121,3	125,9
Р	R _p	26	49	73,2	98	123,3	149,1	175,2	201,4	227,7	253,8
	ΔR _p	9,4	16,4	23,1	29,5	35,4	41,1	46,6	51,8	56,6	61
As	R _p	15,9	27,1	37,7	48,1	58,4	68,6	78,9	89,1	99,5	110,1
	ΔR _p	3,7	6,2	8,4	10,5	12,5	14,5	16,3	18,2	20	21,9
Sb	R _p	14	22,9	30,8	38,4	45,7	52,8	59,9	66,9	73,9	80,9
	ΔR _p	2,4	3,8	5,1	6,3	7,4	8,4	9,5	10,5	11,5	12,5

Энергия облучения определяется разностью потенциалов, под действием которой ионы ускоряются, она равна

$$E_0 = qU = enU. \quad (4.7)$$

На практике принято выражать энергию в электронвольтах (эВ) или килоэлектронвольтах (кэВ).

Доза облучения D (мкКл/см²)

$$D = enQ = jt, \quad (4.8)$$

где e – единичный заряд, $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл;

n – кратность заряда иона;

Q – поверхностная плотность внедренных ионов, 1/см²;

j – плотность ионного тока в мкА/см²;

t – длительность облучения, с.

На практике распространено измерение плотности ионного тока.

Максимальная концентрация примеси $C_{\text{макс}}$, соответствующая проекции пробега R_p

$$C_{\text{макс}} = \frac{D}{\sqrt{2\pi} \cdot en\Delta R_p}. \quad (4.9)$$

Распределение концентрации примеси в полупроводнике с исходной концентрацией C_B , легированном ионным внедрением,

$$C_x = \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta R_p} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - R_p}{\Delta R_p} \right)^2 \right] \pm C_B. \quad (4.10)$$

Глубина залегания р-п перехода при условии полной активации примеси определяется инверсией типа проводимости, т.е. равенством $C_x = C_B$:

$$x_j = R_p \pm \Delta R_p \sqrt{2 \ln \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta R_p C_B}}. \quad (4.11)$$

При извлечении корня следует учитывать оба знака. Поскольку максимум распределения залегает в объеме полупроводника, то возможно одновременное образование двух р-п переходов, разделенных базовым слоем.

Наиболее старым описанием профиля внедренной примеси, согласно классической теории ЛШШ, является симметричная гауссиана. Однако уже ранние экспериментальные исследования показали, что данное описание существенно не адекватно экспериментально снятым профилям для большинства ионов, как в кремнии, так и в других полупроводниках. Было найдено, что профили большинства внедренных ионов асимметричны в аморфных и кристаллических мишенях, причем асимметрию можно отразить введением третьего центрального момента распределения σ_2 к двум прежним σ_1 , R_p (рисунок 4.1, а, б). Большинство экспериментальных данных по распределениям ионов фосфора, мышьяка, сурьмы хорошо аппроксимируется теоретическими расчетами с использованием третьего центрального момента в распределении типа «сдвоенная гауссиана» – гауссианы с различными дисперсиями на левом и правом плечах распределения (рисунок 4.1, б).

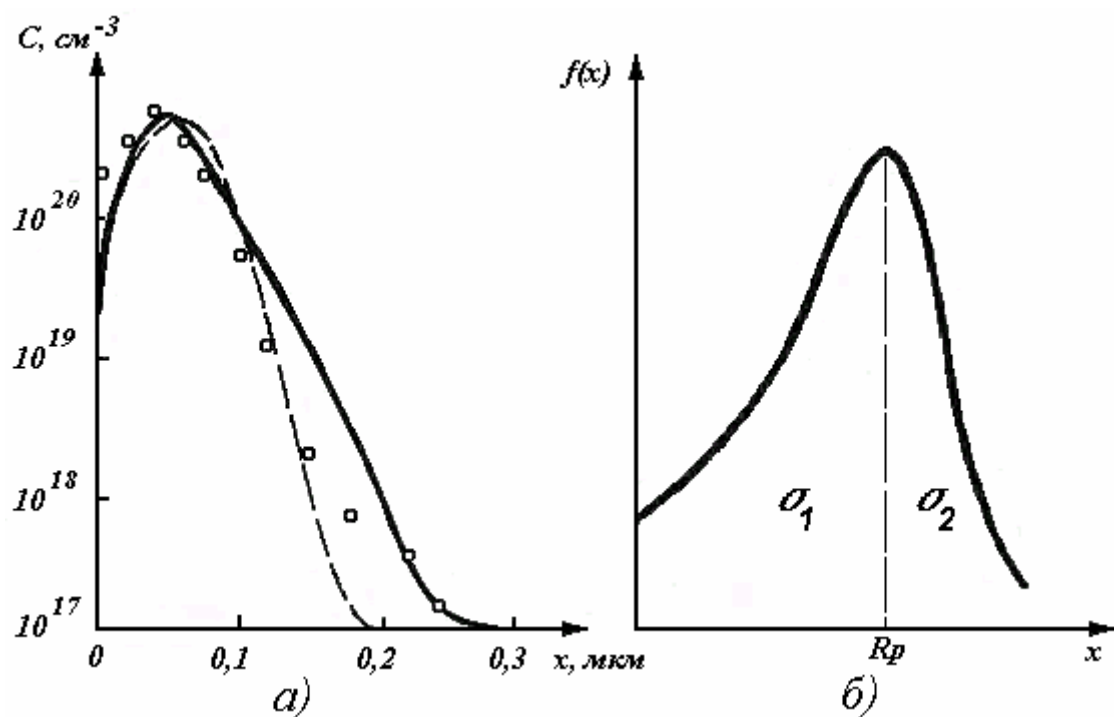


Рис. 4.1. Модели ионного легирования мышьяком с энергией 150 кэВ, дозой $3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ через SiO_2 толщиной 50 нм (а); распределение типа «сдвоенная гауссиана» (б); о - эксперимент; — распределение PEARSON; - - - - распределение Гаусса

Таким образом, в рассматриваемом методе моделирования профиль внедренной примеси задается аналитически с помощью формулы

$$C(x) = \frac{Q \cdot f(x)}{\int_0^{\infty} f(x) dx}, \quad (4.12)$$

где $f(x)$ – функция распределения примеси.

Функция распределения для фосфора, мышьяка, сурьмы имеет вид сдвоенной полугауссианы:

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{(x - Rp)^2}{2\sigma_1^2}\right], & x \leq Rp \\ \exp\left[-\frac{(x - Rp)^2}{2\sigma_2^2}\right], & x > Rp \end{cases}. \quad (4.13)$$

Значения коэффициентов Rp , σ_1 , σ_2 приведены в таблице 4.2.

**Параметры асимметричного распределения в кремнии имплантированных ионов
фосфора, мышьяка, сурьмы**

Примесь		E, кэВ									
		20	40	60	80	100	200	400	600	800	1000
R_p , нм	P	21.8	44.34	68.94	94.95	122	263.6	545.7	810	1060	1295
	As	19.00	31.60	44.32	35.25	72.8	134.7	253.2	344.7	484.6	609.2
	Sb	12.36	20.67	27.84	-	41.45	174.1	140.5	210.7	284.3	360.3
σ_1 , нм	P	7.343	15.66	24.7	34	43.35	87.54	161	220	270	316.5
	As	9.11	14.44	19.864	25.484	31.50	55.08	86.96	96.55	133.5	157.3
	Sb	2.07	4.21	5.622	-	8.53	15.55	29.83	45.33	61.43	77.53
σ_2 , нм	P	15.6	25.8	34.35	41.63	47.8	68.97	81.39	50	13.5	15.6
	As	7.957	13.04	17.17	20.17	22.55	39.16	81.36	135.7	161.3	192.6
	Sb	5.925	9.543	12.78	-	18.65	31.83	55.85	77.25	96.84	115

Распределение ионов бора, а также некоторых других ионов в Si, SiO₂, Si₃N₄ лучше всего описывается распределением PEARSON IV. Более того, с помощью семейства распределения PEARSON IV имеется потенциальная возможность в некотором приближении описать эффекты каналирования, когда зависимость избыточного количества примеси при каналировании от координаты может быть полуэмпирически включена в соответствующие моменты распределения PEARSON.

В общем виде распределение PEARSON определяется дифференциальным уравнением

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{(x - a_0) \cdot f(x)}{b_0 + b_1 x + b_2 x^2}, \quad (4.14)$$

где функция распределения $f(x)$ удовлетворяет соотношению

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (4.15)$$

Четыре константы a_0 , b_0 , b_1 , b_2 в уравнении (4.14) могут быть выражены четырьмя центральными моментами функции распределения (4.15). Первый момент μ_1 характеризует среднюю проекцию пробега ионов:

$$\mu_1 = Rp \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx. \quad (4.16)$$

Три других высших момента задаются соотношением

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - Rp)^i f(x)dx, \quad i = 2, 3, 4. \quad (4.17)$$

С учетом соотношений (4.15)–(4.16) для четырех констант в выражении (4.14) получаются следующие выражения:

$$\left. \begin{aligned} a_0 &= -\frac{\Delta Rp \cdot \gamma(\beta + 3)}{A}, \\ b_0 &= -\frac{\Delta Rp(4\beta - 3\gamma^2)}{A}, \\ b_1 &= a_0, \quad b_2 = -\frac{2\beta - 12\gamma^2 - \Delta Rp}{A}, \\ A &= 10\beta - 12\gamma^2 - 18. \end{aligned} \right\} \quad (4.18)$$

Таким образом, профиль распределения внедренной примеси задается выражением (4.12), где аналитическое распределение PEARSON IV имеет вид

$$f(x) = k[b_2(x - Rp)^2 + b_1(x - Rp) + b_0]^{1/b_2} \cdot \exp\left[-\frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \cdot \arctg \frac{2b_2(x - Rp) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}}\right] \quad (4.19)$$

Здесь a_0, b_0, b_1, b_2 – коэффициенты, определяемые согласно (4.18);

k – константа нормализации распределения;

$Rp, \Delta Rp, \beta, \gamma$ – коэффициенты, значения которых выбираются из таблицы в соответствии с энергией и типом иона.

Различные распределения типа PEARSON классифицируются поведением корней уравнения $b_0 + b_1x + b_2x^2 = 0$. Для случая $b_1 = b_2 = 0$, соответствующего $\gamma = 0, \beta = 3$, решение уравнения (4.14) является функцией гауссова распределения, что представляет предельный вариант для всех распределений типа PEARSON.

Характеристики мишеней, необходимые для расчета приведены в таблице 4.3. Характеристики имплантируемых примесей, необходимые для расчета размещены в таблице 1.2.

Характеристики кремния и германия, необходимые для расчета.

Материал	Атомный номер Z	Атомная масса M, г/моль	Число атомов в ед. объема, $\times 10^{22}$ 1/см ³
Si	14	28	5,04
Ge	32	72,6	4,53

4.2. Порядок выполнения работы.

1. Получить задание у преподавателя.
2. Запустить программу MathCAD 7.0 PRO щелкнув указателем мыши по соответствующей пиктограмме.
3. Открыть файл «Имплантация».
4. Выбрать из таблицы необходимые для расчета характеристики мишени и имплантируемой примеси. Чтобы увидеть таблицу необходимо переместить экран в правую часть рабочего.
5. Ввести в соответствующие ячейки следующие данные: атомные номера и массы мишени и имплантируемой примеси, число атомов в единице объема для мишени, исходную концентрацию примеси в мишени, энергию ионов и дозу имплантации.
6. Получить промежуточные константы: коэффициенты ядерной и электронной замедляющих способностей, полный пробег иона и его дисперсию, проективный пробег иона и его дисперсию.
7. Получить профиль распределения примеси в 2-d координатах.
8. Графическим способом рассчитать глубину залегания p-n перехода при условии полной активации примеси. Для этого из меню «Format» вызвать функцию «Trace». Сравнить полученные результаты с расчетными.
9. Рассчитать величину максимальной концентрации примеси и глубину ее залегания.
10. Подобрать дозу и энергию имплантации, необходимые для получения требуемой глубины залегания p-n перехода и поверхностной концентрации примеси, в соответствии с заданием.
11. Занести в отчет все полученные результаты и график распределения примеси.

4.3. Контрольные вопросы

1. Что такое полный пробег иона, проекция пробега и их дисперсии?
2. В чем заключается метод расчета по типу «сдвоенная гауссиана»?
3. Что такое распределение Пирсона?
4. Как получить скрытый p-n переход?

4.4. Варианты заданий

Рассчитать характеристики замедления ионов при имплантации, параметры распределения заданной примеси в кремнии используя симметричное распределение Гаусса. Примерные варианты заданий приведены в табл.4.4.

Таблица 4.4

№ варианта	Примесь	Энергия, кэВ	Доза, мкКл/см ²	Концентрация примеси в исходном кремнии
1	B	40	100	10 ¹⁶
2	P	100	150	10 ¹⁵
3	As	150	100	10 ¹⁶
4	Sb	500	400	10 ¹⁷
5	In	60	100	10 ¹⁵
6	Ga	120	200	10 ¹⁶

Практическая работа 5

Двумерное распределение ионов под краем маски

5.1. Теоретическое введение

Боковым отклонением имплантируемых ионов обычно пренебрегают, поскольку оно значительно меньше их пробегов [1, 6]. Однако для СБИС с микронными и субмикронными размерами элементов боковое отклонение становится очень важным, поскольку двумерные эффекты вблизи края маски сильно влияют на выходные характеристики приборов. Как и разброс пробегов, боковое отклонение является результатом рассеяния ионов, и поэтому оба эти эффекта одинаковы по порядку величины. Существенной становится и геометрия края маски, которая вносит свой вклад в распределение примеси.

Задача адекватного теоретического описания одномерного распределения примеси после имплантации решена. Неоднократно получены экспериментальные подтверждения этого описания. Для двумерного распределения концентрации имплантируемой примеси надежные экспериментальные методы отсутствуют. Поэтому теория и модели двумерного распределения имплантируемых примесей являются основой для изучения двумерных эффектов.

Самый простой метод описания двумерного распределения примеси заключается в использовании гауссовой формы профиля распределения. Рассмотрим имплантацию примеси через окно в маске шириной $2a$. Геометрия окна и система координат для моделирования показаны на рисунке 5.1. Считаем, что маска имеет вертикальный край и абсолютно непрозрачна для падающих ионов. В силу симметрии будем строить модель только для половины окна в сторону положительной координаты x . Длину маски примем бесконечной, поэтому распределение примеси будем считать двумерным в координатах x - y .

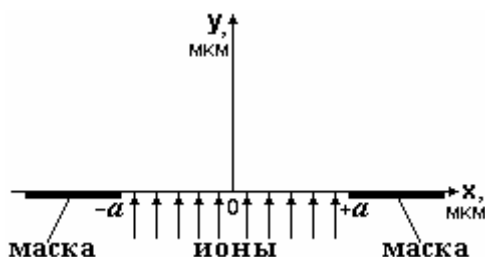


Рис. 5.1. Геометрия окна и система координат для моделирования

Распределение примеси в случае гауссовой формы профиля распределение концентрации ионов описывается выражением

$$C(x, y) = \frac{N}{\sqrt{2\pi} \cdot Rp} \exp\left(-\frac{(y - Rp)^2}{2\Delta Rp^2}\right) \cdot \left(\operatorname{erf} \frac{x + a}{\sqrt{2} \cdot \Delta Rx} - \operatorname{erf} \frac{x - a}{\sqrt{2} \cdot \Delta Rx}\right), \quad (5.1)$$

где y – координата в глубь образца в направлении падения ионного пучка, нм;

x – координата в направлении поверхности образца, нм;

N – доза имплантации, ион/см²;

Rp – проективный пробег, нм;

ΔRp – разброс или стандартное отклонение проективного пробега, нм;

ΔRx – разброс боковых пробегов ионов, нм; a – полуширина окна в маске, нм.

В случае когда край маски имеет произвольную форму расчет двумерного распределения примеси можно производить по формуле

$$C(x, y) = \frac{N}{2\pi \cdot \Delta Rp \cdot \Delta Rx} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{(y - \xi)^2}{2\Delta Rp^2}\right) - \frac{(y - d(\xi) - Rp)^2}{2\Delta Rx} \right] \cdot d\xi, \quad (5.2)$$

где $d(\xi)$ – толщина маски.

Более сложный метод описания двумерного распределения примеси заключается в разбиении структуры на множество тонких вертикальных зон, каждая из которых достаточно узка, чтобы можно было считать поверхность каждой такой зоны между левой и правой ее границами плоской. Такая плоская зона называется сегментом. Далее определяется профиль концентрации примеси, полученный в результате имплантации в каждом сегменте, и путем суперпозиции находится общий профиль распределения.

Построение трехмерных графиков в логарифмическом масштабе в MathCAD 7 затруднительно, получаемое трехмерное изображение может дать только общее представление о распределении примеси под краем маски. Чтобы увидеть картину, пригодную для расчетов, сделаем преобразование уравнения (5.1), что позволит строить контуры концентрации в двухмерной системе координат:

$$f(x, No) = Rp \pm \sqrt{2\Delta Rp^2 \ln \left[\frac{N}{No \sqrt{2\pi} \cdot \Delta Rp} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - a}{\Delta Rx} \right) \right) \right]}. \quad (5.3)$$

Теперь возможно построение эквипотенциальных зависимостей с любым шагом, например, через порядок, начиная с концентрации $N=No$.

Вычисляем глубину залегания p-n перехода в центре окна ($x=0$, $N=No$):

$$f(0, N_0) = Rp + \sqrt{2\Delta Rp^2 \ln \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta Rp} \left(1 - \operatorname{erf} \left(-\frac{a}{\Delta Rx} \right) \right) \right]}. \quad (5.4)$$

Вычисляем максимальную концентрацию примеси в центре окна и глубину ее залегания, т.е. концентрацию при $x=0$ на глубине Rp :

$$C(0, Rp) = \frac{N}{\sqrt{2\pi} \cdot Rp} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{-a}{\sqrt{2} \cdot \Delta Rx} \right) \right). \quad (5.5)$$

Вычисляем положение р-п перехода под краем маски численным методом с помощью функции «root» ($y=0$, $N=N_0$).

Аналогично вычисляем положение р-п перехода на глубине с максимальной концентрацией примеси ($y=Rp$, $N=N_0$).

Делаем проверку полученных результатов: вычисляем $C(x1, 0)$ и $C(x2, Rp)$.

Необходимые для расчета данные по проективному пробегу Rp и его дисперсии ΔRp приведены в таблице 4.1. Разброс боковых пробегов ионов ΔR_T определяем расчетным путем по уравнению, приведенному в программе. Боковой пробег также является функцией энергии иона.

Получаемые эквиконцентрационные зависимости распределения бора в кремнии после имплантации показан на рис. 5.2.

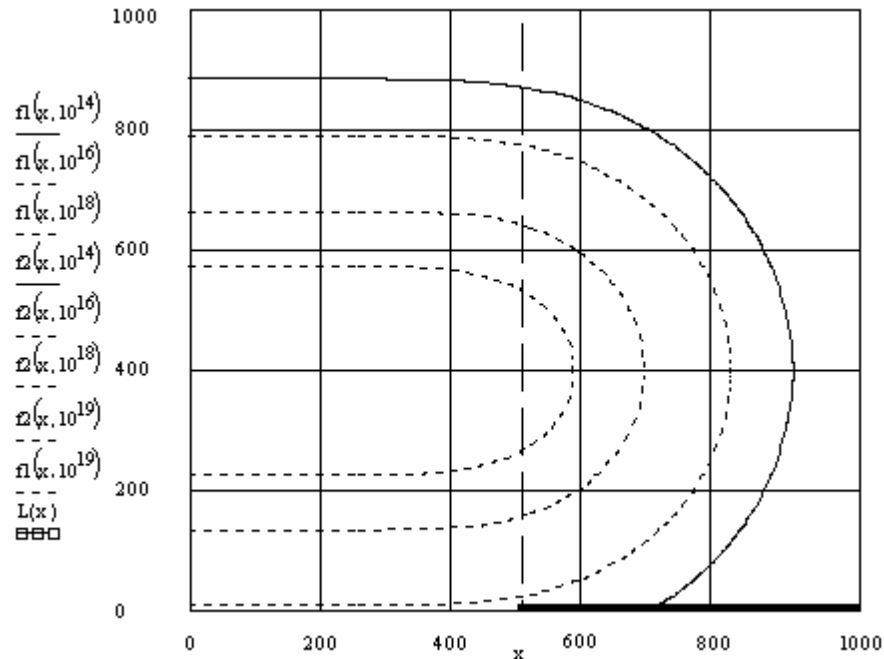


Рис. 5.2. Эквиконцентрационные зависимости распределения бора в кремнии после имплантации

5.2. Порядок выполнения работы.

1. Получить задание у преподавателя.
2. Запустить программу MathCAD 7 Pro щелкнув указателем мыши по соответствующей пиктограмме.
3. Открыть файл «Двумерная имплантация». Ввести в соответствующие ячейки следующие данные: энергию иона, дозу имплантации, ширину окна и концентрацию примеси в исходном кремнии.
4. Выбрать из таблицы и рассчитать по соответствующим уравнениям параметры R_p , ΔR_p , ΔR_x для заданной энергии и примеси и ввести их в соответствующие ячейки.
5. Получить профиль распределения примеси в 3-d координатах, а также эквиперцентрационные зависимости в 2-d координатах с шагом через один порядок.
6. Графическим способом рассчитать максимальную глубину залегания p-n перехода и положение p-n перехода под краем маски. Для этого из меню «Format» вызвать функцию «Trace».
7. Сделать проверку полученных результатов путем сравнения с расчетными.
8. В соответствии с заданием получить скрытый слой требуемой толщины и максимальной концентрации.
9. Внести график распределения эквиперцентрационных зависимостей и полученные результаты в отчет.

5.3. Контрольные вопросы.

1. В чем отличие методов расчета двумерного распределения имплантированной примеси, преимущества и недостатки?
2. В чем заключается расчет двумерного распределения имплантированной примеси по методу моментов?
3. Как рассчитать максимальную глубину залегания p-n перехода и смещение p-n перехода под край маски?
4. Как рассчитать максимальную концентрацию примеси в имплантированном слое и глубину ее залегания?

5.4. Варианты заданий

1. Рассчитать характеристики распределения заданной примеси под краем маски при имплантации в кремний.
2. Подобрать параметры имплантации той же примеси в кремний для создания скрытого слоя на требуемой глубине и заданной толщины.

Примерные варианты заданий приведены в табл.5.1.

Таблица 5.1

Примерные варианты заданий

№ варианта	Примесь	Энергия, кэВ	Доза, мкКл/см ²	Глубина слоя, мкм	Толщина слоя, мкм	Концентрация примеси в исходном кремнии, см ⁻³
1	B	20	100	0,2	0,7	10 ¹⁵
2	P	60	100	0,1	0,2	10 ¹⁵
3	As	80	100	0,05	0,15	10 ¹⁵
4	B	60	200	0,3	0,6	10 ¹⁷
5	P	100	400	0,1	0,3	10 ¹⁷
6	As	140	1000	0,03	0,15	10 ¹⁶

Литература

1. МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов/ Под ред. П. Антонетти, Д. Антониадиса, Р. Даттона, У. Оулдхема: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988.
2. Дьяконов В.П. Справочник по MathCAD PLUS 7.0 PRO. –М.: СК Пресс, 1998.
3. Броудай И., Меррей Дж. Физические основы микротехнологии: Пер. с англ. - М.: Мир, 1985.
4. Технология тонких пленок. Справочник: Пер. с англ. /Под ред. М. И. Елинсона, Г. Г. Смолко. -М., Сов. Радио, 1977. Т. 1.
5. Курносов А.И., Юдин В.В. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных микросхем: Учеб. пособие. -2-е изд., перераб. и доп. -М.: Высш. шк., 1979.
6. Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем: Учеб. пособие. -М.: Высш. шк., 1989.