

УДК 539.219.3

## ЯВЛЕНИЕ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В ОБЛАСТИ ЗАЛЕГАНИЯ $p$ - $n$ -ПЕРЕХОДА

О.И. ВЕЛИЧКО

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 15 июня 2016

В рамках микроскопического механизма диффузии посредством образования, миграции и распада пар «атом примеси–собственный точечный дефект» проведено исследование явления сегрегации примеси в области  $p$ - $n$ -перехода с учетом неоднородного распределения дефектов, ответственных за перенос примесных атомов.

*Ключевые слова:* примесь, диффузия, сегрегация,  $p$ - $n$ -переход.

### Введение

В настоящее время считается, что диффузия донорных и акцепторных примесей в кремнии осуществляется посредством пар «атом примеси–собственный точечный дефект». Уравнение диффузии примесных атомов в случае образования вакансионно-примесных комплексов и пар «атом примеси–межузельный атом кремния» было получено в [1]. Полученное уравнение описывает как выравнивание распределений примесных атомов при термообработках полупроводниковых подложек в результате стремления дефектно-примесной системы к состоянию равновесия, так и явление сегрегации примеси. Исследуем механизмы данного явления в области залегания  $p$ - $n$ -перехода.

### Теоретический анализ

Следует отметить, что процесс диффузии некоторых примесей может осуществляться преимущественно с помощью одного микроскопического механизма. Так, сурьма диффундирует в кремнии преимущественно посредством взаимодействия с вакансиями [2]. Более того, при определенных условиях термообработки для таких примесей как бор, мышьяк и фосфор один из механизмов диффузии может стать доминирующим. Действительно, процесс окисления поверхности кремния при определенной температуре может привести к сильному пересыщению объема полупроводника междузельными атомами кремния [3–5]. Аналогичного явления можно добиться имплантацией ионов кремния [6–8]. В этих условиях доминирующим механизмом будет не прямой механизм междузельной диффузии. С другой стороны, высокоэнергетическая имплантация ионов кремния способствует формированию области обогащенной вакансиями вблизи поверхности полупроводника [6, 9]. Диффузия в этой области будет осуществляться преимущественно по вакансионному механизму.

Для случая одного механизма диффузии и не слишком высоких уровней легирования уравнение, полученное в [1], примет более простой вид:

$$C_i^T = \nabla \left\{ D(\chi) \left[ \nabla (\tilde{C} \times C) + \tilde{C} \times C \frac{\nabla \chi}{\chi} \right] \right\}, \text{ где} \quad (1)$$

$$D(\chi) = D_i; D^C(\chi) = D_i \frac{1 + \beta_1 \chi + \beta_2 \chi^2}{1 + \beta_1 + \beta_2}, \quad (2)$$

$$\chi = \frac{(C - C^B) + \sqrt{(C - C^B)^2 + 4n_i^2}}{2n_i}, \quad (3)$$

$$\tilde{C}^{\times} = \frac{C^{\times}}{C_{eq}^{\times}}. \quad (4)$$

Здесь  $C^T$  и  $C$  – общая концентрация рассматриваемой примеси и концентрация атомов рассматриваемой примеси, находящихся в положении замещения, соответственно;  $C^B$  – концентрация второй примеси противоположного типа проводимости,  $\chi$  – концентрация носителей заряда, приведенная к величине собственной концентрации носителей заряда  $n_i$ ;  $D(\chi)$  и  $D_i$  – эффективный коэффициент диффузии примесных атомов и собственный коэффициент диффузии примеси в низколегированном кремнии;  $\beta_1$  и  $\beta_2$  – параметры, описывающие относительный вклад в процесс переноса примеси однократно и двукратно заряженных точечных дефектов соответственно;  $C^{\times}$  – приведенная к термически равновесной концентрации нейтральных дефектов, ответственных за перенос примесных атомов.

В полученном уравнении диффузии, описывающем эволюцию распределения концентрации примесных атомов в положении замещения  $C$ , фигурирует величина  $\nabla\chi/\chi$ . Это означает, что данное дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных является нелинейным дифференциальным уравнением. Поэтому для анализа особенностей диффузионного процесса имеет смысл преобразовать данное уравнение к линейному дифференциальному уравнению с нелинейными коэффициентами. Проведем с этой целью вычисление выражения  $\nabla\chi/\chi$ :

$$\frac{\nabla\chi}{\chi} = \frac{\nabla C}{\sqrt{(C - C^B)^2 + 4n_i^2}} - \frac{\nabla C^B}{\sqrt{(C - C^B)^2 + 4n_i^2}}. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (1), получим уравнение диффузии примесных атомов в виде

$$C_i^T = \nabla [D(\chi)h(C, C^B)\tilde{C}^{\times}\nabla C] + \nabla [D(\chi)(\nabla\tilde{C}^{\times})C] - \nabla [D(\chi)\tilde{C}^{\times}h^{CB}(C, C^B)(\nabla C^B)C], \quad (6)$$

$$\text{где } h(C, C^B) = 1 + h^B(C, C^B), \quad h^B(C, C^B) = \frac{C}{\sqrt{(C - C^B)^2 + 4n_i^2}}, \quad h^{CB}(C, C^B) = \frac{1}{\sqrt{(C - C^B)^2 + 4n_i^2}}.$$

Правая часть уравнения (6) состоит из трех слагаемых. Соответственно, диффузионный поток атомов примеси  $\vec{j}$  складывается из трех потоков:

$$\vec{j} = -D(\chi)h(C, C^B)\tilde{C}^{\times}\nabla C - D(\chi)(\nabla\tilde{C}^{\times})C + D(\chi)\tilde{C}^{\times}h^{CB}(C, C^B)(\nabla C^B)C. \quad (7)$$

Как видно из правой части выражения (7), первый член представляет традиционный диффузионный поток, обусловленный градиентом концентрации примесных атомов, второй (дрейфовый) член – поток, вызванный градиентом концентрации точечных дефектов, находящихся в нейтральном зарядовом состоянии и третий (дрейфовый) член описывает поток, который возникает вследствие градиента примеси противоположного типа проводимости. С физической точки зрения последний поток связан с дрейфом заряженных пар под действием внутреннего электрического поля, которое изменилось в результате неоднородного распределения примеси противоположного типа проводимости. Если потоки, обусловленные градиентом концентрации нейтральных точечных дефектов и (или) градиентом концентрации примеси противоположного типа проводимости, направлены противоположно потоку, который связан с концентрацией примесных атомов, то будет наблюдаться явление сегрегации примеси, которое может привести к отчетливо выраженной «восходящей» диффузии, то есть диффузии в сторону возрастания концентрации примесных атомов. Отметим, что если распределение нейтральных точечных дефектов однородно в пределах зоны диффузии и равно термически равновесному значению концентрации этих частиц, то уравнение (6) преобразуется в более простое уравнение:

$$\frac{\partial C^T}{\partial t} = \nabla [D(x)h(C, C^B)\nabla C] - \nabla [D(x)h^{CB}(C, C^B)(\nabla C^B)C]. \quad (8)$$

Как видно из уравнения (8), явление сегрегации примеси связано в этом случае только с наличием градиента концентрации примеси противоположного типа проводимости.

### Результаты численных расчетов

На рис. 1 представлен модельный расчет процесса перераспределения бора в области  $p$ - $n$ -перехода, выполненный с использованием уравнения (8). Для большей наглядности предполагалось, что начальное распределение бора создавалось ионной имплантацией в сочетании с последующей термообработкой с целью обеспечить небольшой градиент концентрации примеси в рассматриваемой диффузионной зоне. Также предполагается, что примесь противоположного типа проводимости (мышьяк), формирующая эмиттер, является неподвижной в процессе отжига.

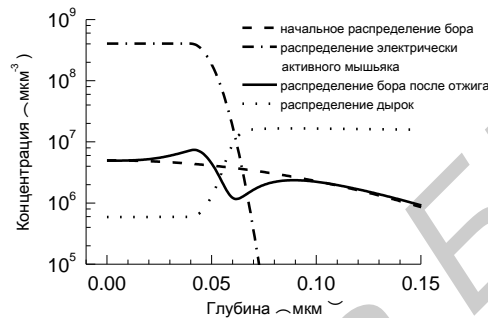


Рис. 1. Характерный вид профиля распределения примеси базы в области залегания  $p$ - $n$ -перехода, формируемый в результате дрейфа пар в электрическом поле, создаваемом примесью эмиттера

Профиль распределения атомов бора в положении замещения, представленный на рис. 1, был рассчитан для быстрого термического отжига в течение 10 с. Для выбранной температуры отжига 1100 °C собственная концентрация носителей заряда  $n_i = 1,538 \times 10^7$  мкм<sup>-3</sup>, а максимальная равновесная концентрация электронов при легировании мышьяком  $n_e = 4,144 \times 10^8$  мкм<sup>-3</sup> (предел растворимости мышьяка  $C_{sol} = 3,74 \times 10^9$  мкм<sup>-3</sup>) [10], что соответствует «плато» на профиле распределения концентрации электрически активной примеси противоположного типа проводимости.

Значения параметров эффективного коэффициента диффузии бора  $D_i = 1,551 \times 10^{-5}$  мкм<sup>2</sup>/с,  $\beta_1 = 14,09$  и  $\beta_2 = 0,353$  для температуры 1100 °C были взяты из [4]. Как видно из рис. 1, в случае механизма диффузии посредством образования, миграции и распада равновесных пар имеет место «восходящая» диффузия примеси базы в области залегания  $p$ - $n$ -перехода в результате дрейфа заряженных комплексов «атом примеси–собственный точечный дефект» в электрическом поле, создаваемом примесью эмиттера. Этот дрейф приводит к образованию локального минимума концентрации примеси, формирующей базу, а уменьшение концентрации дырок в области с высокой концентрацией мышьяка имеет следствием явление замедления диффузии базовой примеси в области эмиттера. Результаты проведенного расчета качественно согласуются с данными измерений [11]. Следует отметить, что в рамках простого вакансионного механизма (обмен местами атома примеси с подошедшей вакансией) влияние электрического поля, создаваемого одной примесью, на процесс диффузии примеси противоположного типа проводимости, которая также вносит вклад в распределение внутреннего электрического поля, было исследовано в [12]. В этой работе при описании диффузии базовой примеси, имеющей существенно меньшие значения концентрации, использовался постоянный коэффициент диффузии. Таким образом, влияние электрического поля на базовую примесь сводилось только к дрейфу примесных атомов в этом электрическом поле с постоянным значением их подвижности. Влияние изменения концентрации заряженных вакансий на диффузию примеси, создающую область базы, не учитывалось [13]. Тем не менее, расчеты, проведенные в [12], качественно правильно описали трансформацию профиля

распределения базовой примеси на границе с эмиттером. Так, согласно [12], в окрестности металлургического перехода происходит образование локального минимума концентрации примеси, формирующей базу, и наблюдается «восходящая» диффузия этой примеси в направлении поверхности кремния. Действительно, если предположить, что эмиттер формируется термической диффузией мышьяка, то электрическое поле, возникающее в результате неоднородного распределения атомов мышьяка, будет направлено в объем полупроводника. Атомы бора или галлия, диффузия которых формирует область базы, имеют отрицательный заряд, если они находятся в положении замещения. Это означает, что под действием электрического поля, создаваемого эмиттером, они будут дрейфовать, обмениваясь местами с вакансиями, в направлении противоположном направлению поля, то есть к поверхности полупроводника. В результате область вблизи  $p-n$ -перехода, где начинает действовать электрическое поле эмиттера, обедняется атомами базовой примеси. В работе [11] представлены экспериментальные данные, подтверждающие существование этого явления. Модельные представления [12] были усовершенствованы в дальнейшем в работе [13]. С этой целью учитывалась концентрационная зависимость коэффициента диффузии примеси, формирующей область базы, а также эффект образования пар в результате кулоновского взаимодействия атома донорной примеси с атомом акцепторной примеси, который имеет противоположный заряд, находясь в положении замещения, и другие сопутствующие эффекты. В результате проведенных расчетов, было обнаружено явление замедления диффузии базовой примеси в области эмиттера. Причиной данного явления является уменьшение в области эмиттера концентрации заряженных вакансий, ответственных за диффузию примеси, формирующей область базы. Результаты проведенных расчетов также подтвердили образование в окрестности металлургического перехода локального минимума концентрации базовой примеси. К сожалению все эти исследования были выполнены в рамках простого вакансионного механизма диффузии, который не реализуется в кремнии.

На рис. 2 представлен модельный расчет процесса перераспределения бора в области  $p-n$ -перехода, выполненный на основе уравнения (6) с учетом неоднородного распределения нейтральных точечных дефектов.

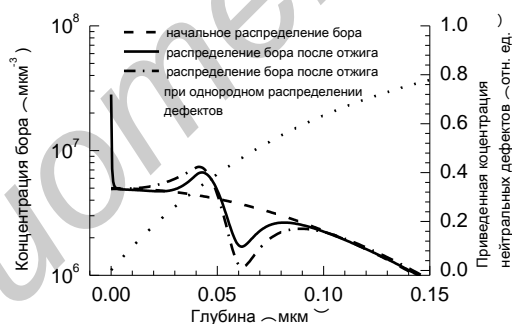


Рис. 2. Характерный вид профиля распределения примеси базы в области залегания  $p-n$ -перехода, формируемый в результате дрейфа пар в электрическом поле, создаваемом примесью эмиттера в условиях неоднородного распределения нейтральных точечных дефектов (пунктирная кривая)

Учет последнего явления очень важен при формировании мелкозалегających  $p-n$ -переходов, используемых в технологии современных полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. Действительно, поверхность служит эффективным стоком межузельных атомов кремния [14], что имеет следствием формирование неоднородных распределений точечных дефектов. При расчете предполагалось, что средняя длина пробега нейтральных точечных дефектов равна 0,1 мкм. Как и в предыдущем расчете, предполагалось, что отсутствует поток примеси через поверхность полупроводника.

Из рис. 2 видно, что имеет место явно выраженная «восходящая» диффузия примесных атомов вблизи поверхности полупроводника. Это подтверждает тот факт, что поток атомов бора, вызванный градиентом концентрации точечных дефектов, находящихся в нейтральном зарядовом состоянии, также как и поток, который возникает вследствие градиента концентрации примеси противоположного типа проводимости, направлен к поверхности полупроводника. Однако этот поток реализуется по всей диффузионной зоне, тогда как

дополнительный поток примеси в результате дрейфа пар во внутреннем электрическом поле возникает только в области  $p-n$ -перехода. Поэтому неоднородное распределение нейтральных точечных дефектов вызывает сегрегацию примесных атомов только у поверхности кремния. В области же  $p-n$ -перехода явление сегрегации наоборот становится менее интенсивным, так как концентрация собственных точечных дефектов уменьшается в этой области приблизительно в 2 раза. Соответственно уменьшается величина потока примесных атомов, обусловленная градиентом концентрации примеси противоположного типа проводимости.

### Заключение

На основе микроскопического механизма диффузии посредством образования, миграции и распада пар «атом примеси–собственный точечный дефект» проведено исследование явления сегрегации атомов примеси, формирующей область базы полупроводникового прибора, которое возникает в процессе последующей термообработки при создании эмиттера. Сегрегация атомов бора в области  $p-n$ -перехода происходит в результате дрейфа заряженных пар во внутреннем электрическом поле, которое возникает в результате сильно неоднородного распределения мышьяка, используемого для формирования области эмиттера. Показано, что явление поглощения на поверхности кремния точечных дефектов, ответственных за перенос примесных атомов, которое приводит к формированию неоднородного распределения этих дефектов в диффузионной зоне, имеет следствием уменьшение интенсивности сегрегации примеси в области залегания  $p-n$ -перехода. С другой стороны, эта неоднородность распределения точечных дефектов приводит к явлению сегрегации примесных атомов у поверхности полупроводника в слое нанометровых размеров.

## THE PHENOMENON OF IMPURITY SEGREGATION IN THE VICINITY OF P–N-JUNCTION

O.I. VELICHKO

### Abstract

On the basis of the microscopic diffusion mechanism due to formation, migration, and dissolution of «impurity atom–intrinsic point defect» pairs, the investigation of phenomenon of impurity segregation in the vicinity of  $p-n$ -junction was carried out. The nonuniform distribution of point defects responsible for impurity diffusion has been taken into account.

*Keywords:* impurity, diffusion, segregation,  $p-n$ -junction.

### Список литературы

1. Величко О.И. // Матер. VII Всесоюзн. конф. Часть 2. Минск, 1984. С. 180–181.
2. Faney P., Dutton R.W., Hu S.M. // Appl. Phys. Lett. 1984. Vol. 44, № 8. P. 777–779.
3. Fair R.B. // Silicon integrated circuits / Ed. Kahng Dawon. New York. Acad.Press, 1981. Pt.B. P. 1–56.
4. Pichler P. // Computational Microelectronics / Ed. S. Selberherr. Wien, New York, 2004.
5. Bonar J.M., Willoughby A.F.W., Dan A.H. et al // J. Mat. Sci.: Materials in Electronics. 2001. Vol.12. P. 219–221.
6. Servidori M., Angelucci R., Cembali F. et al. // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 61, № 5. P. 1834–1840.
7. Mannino G., Solmi S., Privitera V. et. al. // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 79, № 23. P. 3764–3766.
8. Crosby R.T., Jones K.S., Law M.E. et al. // Mat. Sci. Semicond. Process. 2007. Vol. 10. P. 1–5.
9. Shao L., Thompson P.E., van der Heide P.A.W. et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. 2004. Vol. 22 (1). P. 302–305.
10. Encyclopedia of Materials: Science and Technology / Ed. Buschow K.H.J., Cahn R.W., Flemings M.C. et al. Elsevier Science Ltd., 2001.
11. Willoughby A.F.W. // J. Phys. D.: Appl. Phys. 1977. Vol. 10. № 4. P. 455–480.
12. Hu S.M., Shmidt S. // J. Appl. Phys. 1968. Vol. 39. № 9. P. 4272–4283.
13. Fair R.B. // J. Appl. Phys. 1973. Vol. 44. № 1. P. 283–291.
14. Lamrani Y., Cristiano F., Colombeau B. et al. // Nuclear Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. 2004. Vol. 216. P. 281–285.