

УДК 621.382.28

В.М. ЛИТВИНЕНКО

Херсонський національний технічний університет

М.В. БОГАЧ

ТОВ «Конструкторське бюро комутаційної апаратури», м. Севастополь

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ГЕТЕРУВАННЯ ШВИДКОДИФУНДУЮЧИХ ДОМІШОК В ТЕХНОЛОГІЇ ДІОДІВ ШОТТКИ

У статті розглянуті проблеми технології виробництва кремнієвих діодів Шоттки, пов'язані з впливом дефектів і домішок в кремнії на вихід придатних приладів і характеристики різних методів гетерування. Наведено особливості відомих математичних моделей процесів гетерування швидкодіфундуючих домішок в активних областях напівпровідникових приладів, які, зазвичай, для розрахунку ємності гетеруючого шару обмежуються тільки розрахунками коефіцієнтів сегрегації на межі розподілу підкладка - гетеруючий шар і не враховують характеристики структури активної області та гетеруючого шару. У даній роботі розроблена математична модель, що описує реальний перерозподіл швидкодіфундуючих домішок з активних областей діода Шоттки в гетеруючий шар з урахуванням мікроскопічних характеристик структури, як активної області, так і гетеруючого шару. Результати моделювання дали можливість визначити основні шляхи підвищення ефективності гетерування. В першу чергу необхідно знижувати концентрацію центрів захоплення в планарних легованих областях (активні області діодів) і навпаки підвищувати їх концентрацію в гетеруючому шарі. Також з метою підвищення ефективності використання гетерування слід збільшувати граничну розчинність міжвузольних атомів швидкодіфундуючих домішок в планарних легованих областях і зменшувати її в межах гетеруючого шару. Крім того для поліпшення якості гетерування швидкодіфундуючих домішок необхідно підвищувати ефективність самих центрів захоплення домішок за рахунок введення в гетеруючий шар нітриду або окислів металів і знижувати температуру проведення процесу гетерування.

Ключові слова: швидкодіфундуючі домішки, планарні леговані області, гетеруючий шар, моделювання, центри захоплення.

В.Н. ЛИТВИНЕНКО

Херсонський національний технічний університет

М.В. БОГАЧ

ООО «Конструкторское бюро коммутационной аппаратуры», г. Севастополь

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕТТЕРИРОВАНИЯ БЫСТРОДИФФУНДИРУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ В ТЕХНОЛОГИИ ДИОДОВ ШОТТКИ

В статье рассмотрены проблемы технологии производства кремниевых диодов Шоттки, связанные с влиянием дефектов и примесей в кремнии на выход годных приборов и характеристики различных методов геттерирования. Приведены особенности известных математических моделей процессов геттерирования быстро диффундирующих примесей в активных областях полупроводниковых приборов, которые, как правило, для расчета емкости геттерирующего слоя ограничиваются только расчетами коэффициентов сегрегации на границе раздела подложка - геттерирующий слой и не учитывают характеристик структуры активной области и геттерирующего слоя. В данной работе разработана математическая модель, описывающая реальное перераспределение быстро диффундирующих примесей из активных областей диода Шоттки в геттерирующий слой с учетом микроскопических характеристик структуры, как активной области, так и геттерирующего слоя. Результаты моделирования дали возможность определить основные пути повышения эффективности геттерирования. В первую очередь необходимо снижать концентрацию центров захвата в планарных легированных областях (активные области диодов) и напротив повышать их концентрацию в геттерирующем слое. Также с целью повышения эффективности использования геттерирования следует увеличивать предельную растворимость междоузельных атомов быстро диффундирующих примесей в планарных легированных областях и уменьшать ее в пределах геттерирующего слоя. Кроме того для улучшения качества геттерирования быстро диффундирующих примесей необходимо повышать эффективность самих центров захвата примесей за счет введения в геттерирующий слой нитридов или окислов металлов и снижать температуру проведения процесса геттерирования.

Ключевые слова: быстро диффундирующие примеси, планарные легированные области, геттерирующий слой, моделирование, центры захвата.

V.N. LITVINENKO  
Kherson National Technical University  
N.V. BOHACH  
LLC «Design Bureau of switching equipment», Sevastopol

## SIMULATION OF FAST-DIFFUSING IMPACT DETECTION PROCESS IN SCOTTING DIODE TECHNOLOGY

*The article deals with the problems of the production technology of silicon Schottky diodes associated with the influence of defects and impurities in silicon on the output of suitable devices and the characteristics of various gettering methods. The features of well-known mathematical models of gettering fast-diffusing impurities in the active regions of semiconductor devices are given, which, as a rule, for calculating the capacity of the gettering layer are limited only by calculations of segregation coefficients at the interface between the substrate and the getter layer and do not take into account the characteristics of the structure of the active region and getter layer. In this paper, we developed a mathematical model that describes the real redistribution of fast-diffusing impurities from the active regions of the Schottky diode to the getter layer, taking into account the microscopic characteristics of the structure, both the active region and the getter layer. The simulation results made it possible to determine the main ways to improve the gettering efficiency. First of all, it is necessary to reduce the concentration of capture centers in planar doped regions (active regions of diodes) and, on the contrary, to increase their concentration in the gettering layer. Also, in order to increase the efficiency of using gettering, one should increase the limiting solubility of interstitial atoms of fast diffusing impurities in planar doped regions and reduce it within the gettering layer. In addition, to improve the quality of gettering fast-diffusing impurities, it is necessary to increase the efficiency of the impurity trapping centers themselves by introducing nitrides or metal oxides into the gettering layer and lowering the temperature of the gettering process.*

*Keywords: fast-diffusing impurities, planar doped regions, heterogeneous layer, modeling, trapping centers.*

### Постановка проблеми

Сучасні напівпровідникові прилади і інтегральні мікросхеми є надзвичайно складними пристроями, окремі компоненти яких мають розміри не більше за долю мікрметра. Виготовлення таких пристроїв здійснюється на монокристалічних напівпровідникових пластинах. Найважливіші властивості напівпровідникових матеріалів і структур на їх основі визначаються наявністю домішок і структурної недосконалості в кристалах. Причому небажані домішки і дефекти можуть з'являтися не лише на стадії отримання матеріалів, але і в технологічних процесах виготовлення напівпровідникових приладів і інтегральних мікросхем на їх основі.

Структурні дефекти і домішки в кремнії негативно впливають на експлуатаційні характеристики діодів Шоттки, стабільність їх характеристик і, отже, на відсоток виходу придатних приладів і їх надійність при експлуатації. З плином часу експлуатації починається деградація характеристик приладів, тобто вони змінюються, виходять за встановлені стандартом допуски, і прилад виходить з ладу.

Для зменшення щільності структурних дефектів в кремнії використовуються різні методи гетерування [1]. Не зважаючи на різноманіття методів гетерування структурно-домішкових дефектів, які наводяться в літературі, багато з них, наприклад, механічне введення порушень у зворотний бік пластини абразивною обробкою, нетехнологічні, що утрудняє їх впровадження у виробництво. В зв'язку з цим з'явилась актуальна необхідність розробки ефективних технологічних методів гетерування структурних дефектів і домішок в кремнії. Підтвердження ефективності впровадженого в технологію виробництва приладу методу гетерування найбільш просто одержати з математичної моделі процесу гетерування. Також математична модель процесу гетерування дає можливість оптимізувати сам процес гетерування.

### Аналіз останніх досліджень і публікацій

Напівпровідникова промисловість гостро потребує детального розуміння явищ, пов'язаних з поведінкою дефектів, оскільки виявляється, що робочі характеристики і вихід придатної продукції у виробництві напівпровідникових приладів тісно пов'язані з присутністю в них дефектів і домішок. Для підвищення ефективності сучасного виробництва напівпровідникових приладів необхідно знати особливості кожного з використовуваних методів гетерування структурних дефектів і домішок. Математичні моделі якнайповніше характеризують процеси перерозподілу швидкодифундуючих домішок з активних областей приладів до стоків області гетера.

У роботі [2] для кількісного опису процесу гетерування домішки заліза  $p^+$  - шаром та  $n^+$  - шаром в кремнії розроблена математична модель, яка описується системою диференціальних рівнянь, що дозволяють визначити концентрацію домішки, що гетерується, з урахуванням процесів дифузії домішки в гетеруючий шар і її преципітації в об'ємі зразка. Використовуючи порівняння експериментальних

даних з результатами розрахунків на основі розробленої моделі, показано, що основним механізмом гетерування генераційно-рекомбінаційних центрів при дифузії фосфору є формування іонних пар  $P^+ - Fe^{2-}$ . При дифузії бору основним гетером є шар боросилікатного скла. Визначені залежності ефективності гетерування від параметрів процесу.

В результаті проведених досліджень [3], показано ефективне гетерування золота в кремнії при сумісній або послідовній дифузії самарію або гадолінію в кремній, в при поверхневих шарах кремнію, де є область високої концентрації елементів IIIA групи – самарію і гадолінію, а також в об'ємі кремнію. Радіографічним методом також встановлено локальне гетерування – екстракція золота із об'єму за допомогою локально осадженого на поверхню кремнію шару самарію або гадолінію.

Розроблена модель процесу гетерування домішок металів в структурах "кремній на ізоляторі" (КНІ) з урахуванням "kick-out" - процесу і дисоціативного процесу дифузії на прикладі атомів золота в шарах кремнію [4]. Розглянуто асимптотичні випадки процесу гетерування: низькотемпературний ( $<1050^\circ\text{C}$ ), при якому процес визначається дифузійною і захопленням домішок, і високотемпературний ( $>1050^\circ\text{C}$ ), при якому процес визначається захопленням домішок. У цьому випадку вдається отримати наближене аналітичне рішення для профілю концентрації домішки в пластині кремнію, що дає можливість оцінити час і ефективність гетерування.

В роботі [5] розглянуто особливості гетерування рекомбінаційно-активних домішок у полікристалічному кремнії за допомогою методу, що включає послідовне формування шару пористого кремнію товщиною 0,5 - 2 мкм на зворотному боці кремнієвої пластини, осадження шару алюмінію товщиною 0,5 - 1 мкм і термічний відпал за температури 700 – 950 $^\circ\text{C}$  протягом 30...60 хв. Запропоновано модель гетерування даним методом, яка включає дифузійну атомів заліза по двох найбільш імовірних незалежних каналах - в об'ємі пластини та по межах зерен. Із зіставлення результатів моделі з експериментальними даними встановлено, що 30 % атомів відгетерованої домішки дифундують прискорено по межах зерен, а 70 % - в об'ємі зерен.

Проведені експериментальні дослідження впливу гетерування цинком на суцільність плівок  $\text{SiO}_2$  [6]. Показано, що введення цинку в парогазове середовище в процесі термічного окислення кремнію приводить до покращання суцільності плівок. Експериментально підтверджена модель процесу гетерування тримірних дефектів плівок термічного діоксиду кремнію, яка полягає у зниженні рухливості дислокацій приповерхневої області кремнієвих пластин і зменшення внаслідок цього локальних напружень плівок в процесі росту.

#### Формування мети дослідження

Метою даної роботи є розробка математичної моделі процесу гетерування швидкодіфундуючих домішок в структурі діода Шотткі.

#### Викладення основного матеріалу дослідження

Планарні леговані області (ПЛО), розташовані на робочій стороні напівпровідникових пластин, є основою конструкції сучасних інтегральних схем і дискретних напівпровідникових приладів і являються їх активними областями.

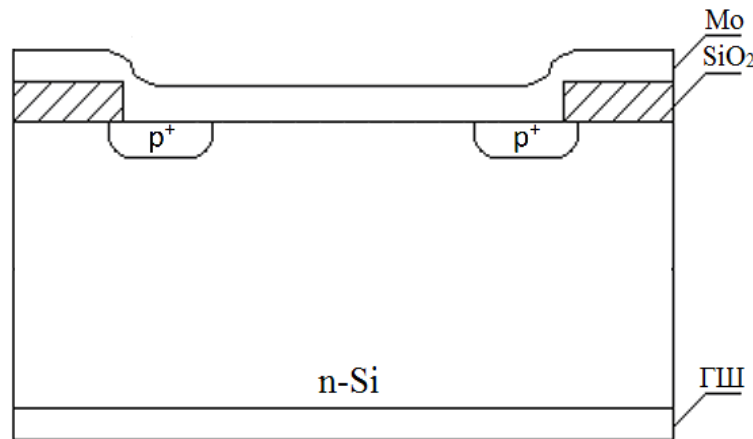
У випадку, коли концентрація основних легуючих домішок в ПЛО перевищує рівень  $5 \cdot 10^{19} \text{см}^{-3}$  починають інтенсифікуватися процеси дефектоутворення, а самі області проявляють гетеруючі властивості стосовно швидкодіфундуючих домішок (ШДД). Нагромадження домішок важких металів у легованих областях веде до деградації часу життя неосновних носіїв заряду й параметрів напівпровідникових приладів [1]. Для запобігання деградації рекомбінаційних властивостей ПЛО в процесі їх формування використовують операції гетерування шарами, розташованими на зворотному боці пластин.

Процес очищення ПЛО в таких багатозарових структурах має ряд істотних особливостей у порівнянні з процесом гетерування об'єму нелегованих вихідних підкладок. У зв'язку із цим для формування ПЛО з малими рекомбінаційними втратами необхідно розглянути ефекти перерозподілу швидкодіфундуючих домішок (ШДД) у підкладці, обґрунтувати вимоги до параметрів гетеруючого шару (ГШ) і режимів гетерування.

У діодах Шотткі середньої потужності з охоронними кільцями (рис.1) мають місце всі перераховані проблеми (слід відмітити, що в сучасному виробництві діодів Шотткі у якості вихідного матеріалу, зазвичай, використовують n-p<sup>+</sup> епітаксійні структури, але для спрощення процесу моделювання на рис.1 представлена структура діода Шотткі, виготовлена на основі монокристалічного кремнію). Насамперед концентрація бору в охоронних областях перебуває на рівні  $10^{20} \text{см}^{-3}$ , і, тому ці області проявляють гетеруючі властивості [7]. Швидкодіфундуючі домішки будуть накопичуватися в об'ємі охоронних кілець і приводити до деградації їх параметрів. Границя розділу молибден-кремній також містить певну щільність центрів захоплення домішок. Крім того, структурні дефекти монокристалічної підкладки здатні захоплювати й утримувати ШДД. Два останні фактори будуть приводити до зміни (погіршення) вольт-амперної характеристики бар'єра Шотткі. При використанні гетеруючого шару на зворотній стороні підкладки буде відбуватися очищення робочого об'єму діодів

Шотткі від рекомбінаційно-активних домішок. Однак ступінь такого очищення залежить від режимів гетерування і її необхідно кількісно оцінити.

У відомих математичних моделях процесів гетерування ємність ГШ визначається за допомогою рівноважного коефіцієнта сегрегації на межі розподілу підкладки - ГШ. Даний коефіцієнт є феноменологічним параметром і не відбиває особливості структури ГШ або ПЛЮ. Крім того, тривалість процесу гетерування у відомих моделях визначається дифузійним переносом ШДД через об'єм підкладки. У даній роботі пропонується математична модель процесу гетерування, що враховує мікроскопічні характеристики структури ГШ і ПЛЮ.



**Рис. 1. Структура діода Шотткі з p<sup>+</sup>-n охоронним кільцем після формування випрямляючого контакту n-Si - Mo на робочій стороні пластини: SiO<sub>2</sub> – захисний шар двоокису кремнію; Mo – шар молібдену, який формує бар'єр Шотткі; ГШ – гетеруючий шар, сформований на звороній стороні пластини**

Реальні ГШ і ПЛЮ містять дислокації або домішки, що забезпечують підвищення розчинності ШДД. Вільна енергія ШДД у таких шарах нижча, чим у бездефектній підкладці. Будь-який структурний дефект, здатний понизити вільну енергію ШДД, може бути представлений як один або декілька центрів захоплення [8]. Енергетична діаграма такого центру захоплення (рис.2) включає енергію активації дифузії по міжвузлях ШДД -  $E_i$ , енергетичні бар'єри для переходу атомів домішки з міжвузлія на центр захоплення -  $E_1$  і назад -  $E_2$ . Центр, що захопив атом ШДД є практично нерухливим при температурах гетерування [9]. Процес переходу атомів ШДД із міжвузлія на центр захоплення й назад є імовірнісним кінетичним процесом і за певних умов може виявитися визначальним тривалості процесу гетерування.

Відповідно квазіхімічного підходу [10], потік атомів ШДД із міжвузлія на центри захоплення пропорційний концентрації міжвузольних атомів ШДД ( $N_{ni}$ ), концентрації вільних центрів захоплення ( $N_{nc}$ ) з коефіцієнтом пропорційності  $K_1$  [11]:

$$K_1 = a^3 \nu \cdot \exp\left(-\frac{E_1 + E_i}{kT}\right),$$

де  $a$  – параметр кристалічної решітки;  $\nu$  – дебаєвська частота коливань атомів;  $k$  – постійна Больцмана;  $T$  – температура.

Потік атомів ШДД з центрів захоплення в міжвузля пропорційний концентрації атомів ШДД, захоплених на центри, і концентрації міжвузлія, дозволених для заповнення атомами ШДД, з коефіцієнтом пропорційності  $K_2$  [12]:

$$K_2 = a^3 \nu \cdot \exp\left(-\frac{E_2 + E_i}{kT}\right).$$

Максимальна концентрація міжвузольних атомів ШДД визначається їхньою граничною розчинністю -  $N_{rp}$ . Тому, концентрація міжвузлія, дозволених для заповнення, у реальних умовах дорівнює різниці між  $N_{rp}$  і наявною концентрацією міжвузольних атомів ШДД. Два розглянуті потоки визначають темп зміни концентрації атомів ШДД на центрах захоплення в ПЛЮ й ГШ.

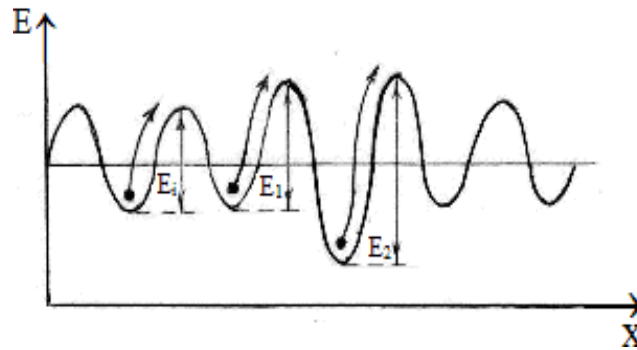


Рис. 2. Енергетична діаграма центра захоплення атомів ШДД

Темп зміни міжвузольних атомів ШДД у межах ПЛО визначається як розглянутими двома потоками, так і відводом атомів за межі ПЛО за допомогою міжвузольної дифузії через підкладку в ГШ.

Розглянемо напівпровідникову монокристалічну підкладку товщиною  $H$  (рис.3), з робочої сторони якої сформовані ПЛО, товщиною  $X_A$ . Рекомбінаційно-активні ШДД, які знаходились в підкладці, перерозподілилися в ПЛО в процесі її формування. При цьому частина атомів ШДД захоплена дефектами ПЛО. Надалі на зворотній стороні пластини створюють ГШ товщиною  $X_{гш}$ , що також містить центри захоплення, і підкладки піддають термообробці. Між ПЛО і ГШ знаходиться монокристалічна підкладка. Перерозподіл ШДД із ПЛО в ГШ визначається в цьому випадку наступними фізичними процесами: перехід атомів ШДД із центрів захоплення в межах ПЛО в міжвузля, дифузія атомів ШДД по міжвузлях через підкладку до ГШ, захоплення міжвузольних атомів ШДД стоками в ГШ.

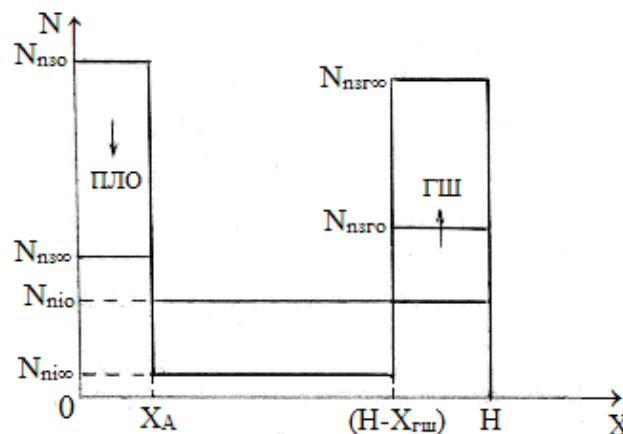


Рис. 3. Схема розподілу ШДД в тришаровій структурі (ПЛО – монокристалічна підкладка - гетеруючий шар):  $N_{nio}$  - початкова концентрація міжвузольних атомів ШДД в ПЛО;  $N_{nico}$  - кінцева концентрація міжвузольних атомів ШДД в ПЛО;  $N_{nzo}$  – початкова концентрація атомів ШДД, захоплених на центри в ПЛО;  $N_{nzoo}$  - кінцева концентрація атомів ШДД, захоплених на центри в ПЛО;  $N_{nzgo}$  - початкова концентрація атомів ШДД, захоплених на центри в ГШ;  $N_{nzgoo}$  - кінцева концентрація атомів ШДД, захоплених на центри в ГШ ;  $(H- X_{гш})$  – межа підкладка – гетерошар;  $X_A$ - товщина ПЛО;  $X_{гш}$  – товщина ГШ

Розглянуте завдання є нестационарним, причому для ПЛО не виконується умова термодинамічної рівноваги між захопленими й міжвузольними атомами ШДД. З метою одержання аналітичних співвідношень, що описують процес очищення ПЛО, приймемо ряд допущень:

- через малу товщину шарів відносно товщини підкладки й підвищеної рухливості ШДД у сильнолегованому шарі, вважаємо, що розподіл концентрації ШДД у межах ПЛО й ГШ не залежить від координати;

- враховуючи, що швидкість зміни потоку ШДД із центрів захоплення мала в порівнянні зі швидкістю встановлення дифузійного потоку ШДД у підкладці, можна зневажити тривалість початкової (нелінійної) стадії процесу гетерування й вважати дифузійний потік у підкладці незалежним від координати;

- внаслідок високої концентрації центрів захоплення в ГШ малої величини енергетичного бар'єра для переходу міжвузольних атомів ШДД на центр захоплення гетерошару  $E_1$  (рис.2) міжвузольні й захоплені на центри атоми ШДД у межах ГШ перебувають у кількостях, близьких до термодинамічно рівноважних;

- ПЛО займають практично всю робочу поверхню підкладки, що виключає необхідність розгляду двовимірних процесів дифузії;

- будемо розглядати ШДД одного сорту, а також однотипні центри захоплення;

- гетеруючий шар формують при низьких температурах, коли ШДД у підкладці можна вважати нерухливими (іонна імплантація, газорозрядна обробка, шліфування і т. ін.), причому концентрація центрів захоплення в процесі гетерування зберігається незмінною;

- загальний вміст ШДД у системі ПЛО - підкладка - ГШ зберігається незмінним.

Грунтуючись на зроблених допущеннях, використовуючи квазіхімічний підхід [12], можна записати наступну систему рівнянь (1-5):

$$\frac{dN_{n3}}{dt} = K_1 N_{вц} N_{ni} - K_2 N_{n3} (N_{zp} - N_{ni}); \quad (1)$$

$$\frac{dN_{ni}}{dt} = K_2 N_{n3} (N_{zp} - N_{ni}) - K_1 N_{вц} N_{ni} - \frac{D_{ni} (N_{ni} - N_{ni2})}{x_A (H - x_A - x_{zu})}; \quad (2)$$

$$\theta_{no} = N_{n3} x_A + 0,5(N_{ni} + N_{ni2}) + N_{n32} x_{zu}; \quad (3)$$

$$N_{цз} = N_{зц} + N_{вц}; \quad (4)$$

$$N_{цз2} = N_{зц2} + N_{вц2}; \quad (5)$$

Початкові умови:

$$N_{n3}(t=0) = N_{n30} \quad (6)$$

$$N_{ni}(t=0) = N_{ni0}. \quad (7)$$

Тут  $N_{n3}$ ,  $N_{n32}$  – концентрації атомів ШДД, захоплених відповідно на центри в ПЛО та ГШ;  $N_{ni}$ ,  $N_{ni2}$  – концентрації міжвузольних атомів ШДД відповідно в ПЛО та ГШ;  $N_{zp}$  – концентрація, відповідна граничній розчинності міжвузольних атомів ШДД у ПЛО;  $N_{зц}$ ,  $N_{зц2}$  – концентрації заповнених атомами ШДД центрів захоплення відповідно в ПЛО й ГШ;  $N_{вц}$ ,  $N_{вц2}$  – концентрації вільних центрів відповідно в ПЛО й ГШ;  $N_{цз}$ ,  $N_{цз2}$  – загальна концентрація центрів захоплення і вільних центрів відповідно в ПЛО й ГШ;  $\theta_{no}$  – сумарна кількість ШДД на одиниці площі тришарової структури;  $D_{ni}$  – коефіцієнт міжвузольної дифузії ШДД у підкладці;  $N_{n30}$  – концентрація атомів ШДД, захоплених на центри в ПЛО в початковий момент часу, тобто при  $t=0$ ;  $N_{ni0}$  – концентрація атомів ШДД, які знаходяться в міжвузлях в ПЛО в початковий момент часу, тобто при  $t=0$ ;  $t$  – час;  $K_1$ ,  $K_2$  – коефіцієнти, що визначають швидкості захоплення й викиду атомів ШДД центрами захоплення.

Рівняння (1) описує зміну в часі коцетрації ШДД, захоплених на центри в ПЛО; рівняння (2) описує зміну в часі концентрації міжвузольних атомів в тришаровій структурі (ПЛО – монокристалічна підкладка -гетеруючий шар); рівняння (3) виражає сумарну кількість ШДД на одиниці площі тришарової структури; рівняння (4) і (5) виражають сумарну концентрацію центрів захоплення і вільних центрів відповідно в ПЛО й ГШ; початкові умови (6) і (7) виражають відповідно концентрацію атомів ШДД, захоплених на центри в ПЛО і концентрацію атомів ШДД, які знаходяться в міжвузлях в ПЛО в початковий момент часу, тобто при  $t=0$ .

Концентрація ШДД в міжвузлях не досягає межі розчинності ( $N_{zp}$ ) при температурі гетерування, ні в ПЛО, ні в ГШ, що цілком виправдане при сучасному рівні розвитку напівпровідникової технології й низькому рівні концентрації сторонніх ШДД у напівпровідникових підкладках:

$$N_{ni} \ll N_{zp}; \quad N_{ni2} \ll N_{zp2},$$

де  $N_{zp2}$  – гранична розчинність атомів ШДД в ГШ;  $N_{zp}$  - гранична розчинність атомів ШДД в ПЛО.

ПЛО, що розглядаються, проявляють гетеруючі властивості і тому концентрація центрів захоплення в них висока. Реальний ГШ, що володіє помітною ефективністю, містить надлишкову кількість центрів захоплення. У цих умовах можна вважати, що ступінь заповнення центрів захоплення в ПЛО, а, виходить, і в ГШ, мала:

$$N_{zu} \ll N_{eu}; \quad N_{eu} \approx N_{uz}.$$

З урахуванням цих допущень із рівняння (1) виразимо концентрацію міжвузольних атомів ШДД у межах ПЛО:

$$N_{ni} = \tau_{u1} \frac{dN_{n3}}{dt} + (K_2 N_{zp}) \tau_{u1} N_{n3}, \quad (8)$$

де  $\tau_{u1} = (k_1 N_{uz})^{-1}$  - постійна часу захоплення ШДД на центри захоплення в ПЛО.

Використовуючи рівняння (8) і (3), знаходимо залежність концентрації міжвузольних атомів ШДД у ГШ від концентрації атомів ШДД, захоплених на центри в ПЛО:

$$N_{ni2} = \frac{2\theta_{no}}{H(1+\theta_{zu})} - \frac{\tau_{u1}}{(1+2\theta_{zu})} \frac{dN_{n3}}{dt} - \frac{(1+2\theta_{\infty})}{(k_{\infty}-1)(1+2\theta_{zu})} N_{n3}, \quad (9)$$

де  $\theta_{zu} = (k_{zu} - 1)x_{zu} / H$  - критерій гетерування, який характеризує гетеруючу властивість ГШ;

$\theta_{\infty} = (k_{\infty} - 1)x_A / H$  - критерій гетерування для ПЛО в рівновазі;

$k_{zu} = \frac{N_{n3z}}{N_{n3}(H - x_{zu})}$  - коефіцієнт сегрегації ШДД на межі ГШ - підкладка;

$k_{\infty} = 1 + \frac{K_1 N_{uz}}{K_2 N_{zp}}$  - рівновісний коефіцієнт сегрегації ШДД на межі ПЛО - підкладка.

Підставивши (8) і (9) в (2), одержимо лінійне неоднорідне рівняння другого порядку відносно  $N_{n3}$ :

$$\frac{d^2 N_{n3}}{dt^2} + \left( \frac{A_1}{\tau_{u1}} \right) \frac{dN_{n3}}{dt} + \left( \frac{B_1}{\tau_{u1}^2} \right) N_{n3} = \frac{2D_{ni}(1+\theta_o)N_{nio}}{x_A(H - x_A - x_{zu})\tau_{u1}(1+2\theta_{zu})}, \quad (10)$$

де  $A_1 = \frac{k_{\infty}}{k_{\infty}-1} + \frac{2D_{ni}\tau_{u1}(1+\theta_{zu})}{x_A(H - x_A - x_{zu})(1+2\theta_{zu})}$ ,

$B_1 = \frac{2(1+\theta_{zu} + \theta_{\infty})D_{ni}\tau_{u1}}{(1+2\theta_{zu})(k_{\infty}-1)x_A(H - x_A - x_{zu})}$ ,

$\theta_o = \frac{(k_o - 1)x_A}{H}$  - критерій гетерування для планарної легованої області на попередній термічній операції;

операції;

$k_o$  - коефіцієнт сегрегації ШДД на межі розділу ПЛО - підкладка на попередній термічній операції, що характеризує вміст ШДД в ПЛО у вихідному стані.

Рішення рівняння (10) [13] з урахуванням початкових умов (6) і (7) має вигляд:

$$N_{n3} = \left[ \frac{(k_{\infty} - 1)(1 + \theta_o)}{(1 + \theta_{zu} + \theta_{\infty})} + M_1 e^{\alpha_1 t} + M_2 e^{\alpha_2 t} \right] N_{nio}, \quad (11)$$

де  $M_1 = \frac{1 - \frac{k_o - 1}{k_{\infty} - 1} + \tau_{y1} \alpha_2 \left[ \frac{(k_{\infty} - 1)(1 + \theta_o)}{(1 + \theta_{zu} + \theta_{\infty})} - (k_o - 1) \right]}{\tau_{y1} (\alpha_2 - \alpha_1)},$

$$M_2 = \frac{1 - \frac{k_o - 1}{k_{\infty} - 1} + \tau_{y1} \alpha_1 \left[ \frac{(k_{\infty} - 1)(1 + \theta_o)}{(1 + \theta_{zu} + \theta_{\infty})} - (k_o - 1) \right]}{\tau_{y1} (\alpha_2 - \alpha_1)},$$

$$\alpha_{1,2} = -\frac{1}{\tau_{y1}} (0,5A_1 \pm \sqrt{0,25A_1 - B_1}).$$

Для аналізу ефективності гетерування зручно використовувати поняття ступеня очищення ( $\delta_N$ ), який являється безрозмірною величиною і показує, у скільки разів знизився вміст ШДД у ПЛО в результаті гетерування:

$$\delta_N = \frac{N_{n3o} + N_{nio}}{N_{n3} + N_{ni}},$$

або з урахуванням одержаних вище співвідношень (9) та (11):

$$\delta_N = k_o (k_{\infty} - 1) \left\{ \frac{k_{\infty} (k_{\infty} - 1)(1 + \theta_o)}{(1 + \theta_{zu} + \theta_{\infty})} + [k_{\infty} + \tau_{y1} \alpha_1 (k_{\infty} - 1)] M_1 e^{\alpha_1 t} + [k_{\infty} + \tau_{y1} \alpha_2 (k_{\infty} - 1)] M_2 e^{\alpha_2 t} \right\}^{-1}.$$

Дане співвідношення описує кінетику зниження концентрації ШДД у межах ПЛО в процесі гетерування. З ростом часу ступінь очищення росте. Так як обидва кореня ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) характеристичного рівняння від'ємні, то при  $t \rightarrow \infty$  ступінь очищення ПЛО ( $\delta_N$ ) прагне до постійної величини:

$$\delta_{N\infty} = \frac{k_o (1 + \theta_{zu} + \theta_{\infty})}{k_{\infty} (1 + \theta_o)}.$$

У тих випадках, коли вихідна концентрація ШДД в ПЛО досить велика

$$\left( \frac{N_{n3o} x_A}{N_{nio} H} \geq 10 \right),$$

а також при великих значеннях відповідних коефіцієнтів сегрегації ( $k_{zu} \gg 1$  і  $k_{\infty} \gg 1$ ),

вираження для кінцевого значення ступеня очищення може бути записане в наступному вигляді:

$$\delta_{N\infty} \approx 1 + \frac{N_{y3z} N_{zp} x_{zu}}{N_{y3} N_{zpz} x_A} \exp \left[ \frac{E_{2z} - E_{1z} + E_{zpz}}{kT_{zu}} - \frac{E_{2A} - E_{1A} + E_{zpzA}}{kT_A} \right], \quad (12)$$

де  $k$  – постійна Больцмана;  $T_{zu}$  – температура в ГШ;  $T_A$  – температура в ПЛО;  $E_{1z}$  - енергетичний бар'єр для переходу атомів домішки з міжвузлів на центр захоплення в ГШ;  $E_{2z}$  - енергетичний бар'єр для переходу атомів домішки з центру захоплення в міжвузля в ГШ;  $E_{1A}$  - енергетичний бар'єр для переходу атомів домішки з міжвузлів на центр захоплення в ПЛО;  $E_{2A}$  - енергетичний бар'єр для



переходу атомів домішки з центру захоплення в міжвузля в ПЛО;  $E_{epA}$  - енергія граничної розчинності атомів ШДД в ПЛО;  $E_{epz}$  - енергія граничної розчинності атомів ШДД в ГШ;

#### Висновки

Отримане аналітичне співвідношення для кінцевого значення ступеня очищення дозволяє визначити основні шляхи підвищення ефективності гетерування, а, отже, і зниження концентрації рекомбінаційно-активних ШДД у ПЛО.

Насамперед необхідно знижувати концентрацію центрів захоплення в ПЛО. Це досягається шляхом зниження концентрації основних легуючих домішок в активних областях напівпровідникових приладів, зменшення товщини цих областей і шляхом використання низькотемпературних методів легування, що виключають можливість генерації сітки дислокацій у ПЛО. Одночасно із цим необхідно підвищувати вміст центрів захоплення в ГШ. Для цього необхідно розробляти нові методи гетерування, які дозволяють формувати ГШ великої товщини й з високою концентрацією центрів захоплення.

Другий шлях підвищення ефективності очищення ПЛО полягає в зміні граничної розчинності міжвузольних атомів ШДД в ПЛО й ГШ. Величина ступеня очищення росте при підвищенні граничної розчинності міжвузольних атомів ШДД у межах ПЛО й при її зниженні в межах ГШ. Зниження граничної розчинності міжвузольних атомів ШДД у ГШ досягається шляхом використання комбінованих методів створення ГШ, що включають генерацію структурних дефектів і введення спеціальних домішок, що не декорують структурні дефекти.

Третя можливість підвищення ефективності гетерування пов'язана з енергетичними характеристиками центрів захоплення в ГШ. Щонайкраще це завдання вирішується шляхом введення в ГШ спеціальних домішок, що утворюють із атомами ШДД хімічні сполуки, температура дисоціації яких перевищує температуру процесу гетерування. Цій умові відповідають нітриди й окиси металів.

Нарешті, процес гетерування можна проводити в низькотемпературних умовах. Якщо температура ГШ буде нижчою, чим в ПЛО, то граничне значення ступеня очищення буде вище. Через високу теплопровідність кремнію й інших напівпровідників забезпечити виконання даної умови в стаціонарному режимі практично неможливо. Тут може бути використана імпульсна фотонна обробка робочої поверхні підкладки з ПЛО. При цьому середня температура підкладки повинна бути рівною температурі гетерування.

#### Список використаної літератури

1. Литвиненко В.Н., Богач Н.В. Дефекты и примеси в кремнии и методы их геттерирования / Вестник ХНТУ, г. Херсон. – №1(60), 2017. – С.32-42.
2. Якимов Ю.А. Моделирование процессов геттерирования генерационно-рекомбинационных центров в кремнии при диффузии фосфора и бора / Ю. А. Якимов, Е. А. Климанов // Прикладная физика, 2015. - № 5. – С.15-20.
3. Назыров Д.Э. Геттерирование золота самарием и гадолинием в кремнии / Д.Э. Назыров // Электронная обработка материалов, 2007. - №3. – С. 77-82.
4. Прокопьев Е.П. Модель геттерирования примесей металлов в структурах кремний на изоляторе / Е.П. Прокопьев, С.П. Тимошенко // Материаловедение, 2006. - №3. - С.2-7.
5. Литовченко В.Г. Двоканальне гетерування рекомбінаційно-активної домішки в сонячному полікристалічному кремнії / В. Г. Литовченко, В. М. Насека, А. А. Євтух // Український фізичний журнал. - 2012. - Т. 57, № 1. - С. 76-82.
6. Логуш О.І., Павлиш В.А. Стабілізація параметрів МОН-структур при гетеруванні дефектів кремнієвої підкладки цинком / Логуш О.І., Павлиш В.А. // Видавництво Національного університету „Львівська політехніка” . - №646 (2009). – С. 95-103.
7. Литовченко В.Г. Эффект планарного геттерирования при эпитаксиальном наращивании пленок кремния / В.Г. Литовченко, В.Н. Романюк, В.П. Шаповалов и др. // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника, 1986. – Вып. 10. – С. 84-92.
8. Baldi L. Gold solubility in silicon and gettering by phosphorus / L. Baldi, G.F. Cerofolini, G. Ferla, G. Friderio // Phys. Stat. Sol. – 1978. - V. 48.- №3. - P. 523-532.
9. Tseng W.F. Simultaneous gettering of Au in silicon by phosphorus and dislocations / W.F. Treng, T. Koji, J.W. Mayer // Appl. Phys. Lett.– 1978. – V.33. - №5. – P. 442-444.
10. Фистуль В.И. Распад перенасыщенных твердых растворов. – М.: Металлургия, 1977. - 240с.
11. Емцев В.В., Машовец Т.В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М.: Радио и связь, 1981. – 248с.
12. Гусев В.А. Перераспределение точечных дефектов в кремниевых пластинах при геттерировании слоев / В.А. Гусев, Н.В. Богач, В.Л. Каменский // Диэлектрики и полупроводники, 1984. – Вып. 25. – С. 88-94.
13. Арамович И.Г., Левин В.И. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1969. – 288с.