Асимметричность плотности распределения объемного нескомпенсированного заряда на границе металлургического p-n перехода

А.С. Мазинов^{1,2}, А.И. Шевченко¹, М.А.Быков¹

¹ Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, просп. академика Вернадского, 4, Симферополь 95007, Крым, Украина ² Крымский научный центр НАН и МОН, просп. академика Вернадского, 2, Симферополь 95007, Крым, Украина

(Получено 31.08.2012; опубликована online 07.11.2012)

В работе рассмотрены особенности формирования мелкозалегающего перехода и его расчета для создания фотогальванического элемента на основе монокристаллического кремния с фронтальным легированным бором. Показана неоднозначность расчетных профилей перекомпенсирующей примеси, которая зависит от точности определения констант диффузионных уравнений.

Ключевые слова: Мелкозалегающий *p-n* переход, Профиль легирования кристалла, Коэффициент диффузии, Энергия активации диффузии, Плотность распределения заряда, Нескомпенсированный заряд *p-n* перехода.

PACS numbers: 71.22._i, 71.23.An

1. ВВЕДЕНИЕ

Формирование потенциальных барьеров полупроводниковых приборов посредством диффузионных процессов является одним из основных приемов современной микроэлектронной промышленности. Однако многовекторность процессов диффузии и зависимость определения его параметров от множества внешних условий требует более глубокого анализа.

Расхождение коэффициентов преобразования идеальных и реальных фотоэлектрических преобразователей во многом определяется точностью построения тянущего поля перехода, образованного объемным нескомпенсированным зарядом. Исходя именно из этих предпосылок, нами предпринята попытка проанализировать влияние отклонения условий проведения технологических циклов и исходных параметров в расчетных зависимостях на точность определения профиля распределения примесных атомов, плотности распределения заряда и геометрии нескомпенсированного заряда р-п перехода.

2. ФОРМИРОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

Специфика построения фотопреобразующих полупроводниковых структур диктует условия получения мелкозалегающего перехода глубиной в десятые доли микрона, при этом точность построения подобного прибора лежит на уровне десятков - сотен нанометров. В этом случае максимальное токособирание фотогенерированных носителей требует построение потенциального барьера с наименьшим градиентом для обеспечения протяженности области объемного заряда.

С другой стороны, условие широкомасштабного промышленного производства с низкой себестоимостью ватта готового фотоэлектрического преобразователя требуют работы по более упрощенной технологической схеме с как можно меньшими температурами диффузии, лежащие на уровне 700-850 °C [1].

Выбор оптимальных режимов технологических процессов создания тянущего поля в промышленных условиях диктует, с одной стороны, достаточно точ-

ных модельных подходов для определения глубины залегания *p-n* перехода, области объемного заряда, [2] и достаточно быстрых и упрощенных расчетов, с другой стороны.

Столь противоречивые требования вынуждают проводить расчеты исходя из среднестатистических констант процесса диффузии. А расчет напряженности поля и потенциала, при этом, практически не задействуется.

Быстрые аналитические методы опираются на средне статистические или подгоночные параметры, определяемые конкретным промышленным оборудованием и конкретными химическими составляющими. Численные методы, напротив громоздки, перегружены большим количественным расчетом элементарных процессов. Опираясь на «среднеарифметическое» двух методик, нами предпринята попытка оценки точности определения потенциального барьера и напряженности поля при упрощенном численно-аналитическом расчете. При этом были проанализированы точности измерения и расчета физических констант для детерминирования процесса диффузии фосфора в кристаллический кремний.

Само определение коэффициента диффузии в кристалле является неоднозначной задачей и, имея сложную интегральную зависимость [3, 4.] от концентрации, зависит как от внешних условий проведения процесса, так и от состояния самого кристалла. Две основные константы упрощенной модели [5, 6] позволяют относительно точно описать температурное изменение коэффициента диффузии. Однако основным остается определение этих констант для конкретных технологических условий. Неточности определения расчетных зависимостей приводят к достаточно широкому размытию расчетного профиля и как следствие пересечения n- и p- областей (рис.1).

Коэффициент диффузии при бесконечной температуре – предэкспоненциальная константа, обусловленная вероятностью перехода примесного атома, определяется в диапазоне от 3 [4] до 20 сm²/с [7]. Изменение в пределах одного порядка объясняется различными условиями проведения диффузии и



Рис. 1 – Размытие профиля диффузии и уровня начального легирования для мелкозалегающего *p-n* перехода



Рис. 2 – Влияние дифиации диффузионных констант на глубину залегания границы раздела *p*-*n*-перехода как функция от изменения: пунктирная линия - коэффициент диффузии при бесконечной температуры, сплошная линия – предел растворимости фосфора в кремнии

начальным состоянием кристалла, что в свою очередь дает отклонение глубины залегания в пределах 80%. Как пример расчёта, на рисунке 2 показано изменение глубины залегания в пределах от 0,04 мкм до 0,2 мкм при проведении диффузии фосфора в кристалле кремния при температуре 865 °C и энергии активации 3,6 эВ.

Энергия активации E_a , в еще большей степени влияющая на изменение коэффициента диффузии, даже при 5% отклонения от среднестатистической величины [4, 8], дает отклонение глубины залегания потенциального барьера в сотни нанометров. Например, при изменении энергии активации от 3,4 до 3,6 эВ глубина увеличивается на 200 нм (рис.3 пунктирная линя). В процентном отношении данное изменение составляет 60% от общей глубины перехода.

Аналогичным образом высокая погрешность нахождения геометрии перехода вводится неточностью выбора и поддержания температурного режима (рис. 3, сплошная линия). При изменении выбора рабочей температуры в пределах от 800 до 900 °C расположение перехода, изменяясь от 50 нм до 0,2 мкм, давая 60% девиацию расположения границы раздела.



Рис. 3 – Изменение глубины залегания границы раздела между *р*- и *п*-областями в зависимости от определения расчетных констант: пунктирная линия - как функции от трансформации энергии активации; сплошная линия –при изменении рабочей температуры

Менее чувствительна точность к определению начальной концентрации фосфора в фосфоросиликатном стекле C_s , численное значение, которой зависит от концентрации вакансий и энергий связей основных и примесных атомов [8, 9, 10]. Связь данного параметра с проведение окислительного процесса достаточно сложна [11, 12], в силу чего численные значения колеблются в пределах 10^{19} - 10^{20} см⁻³. В этих пределах глубина залегания барьера лежит в пределах 12% и составляет десятки нанометров (рис.2).

3. ОБЩЕЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДА

Приведенные выше неопределенности и несимметричность в еще большей степени усложняют расчеты распределения заряда p-n перехода и размеров области объемного заряда, требующая специальных модельных подходов [13].

Для точного определения залегания p-n перехода и геометрии области объемного заряда необходимо решить одномерное уравнение Пуассона [2, 4, 14]: Асимметричность плотности распределения ...

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = -\frac{\rho_{\Sigma}(x)}{\varepsilon_{r}\varepsilon_{0}},\tag{1}$$

с суммарной плотностью стационарных и подвижных зарядов:

$$\rho_{\Sigma}(x) = \rho_s^+(x) + \rho_m^-(x) + \rho_s^-(x) + \rho_m^+(x) .$$
 (2)

При этом в каждой из областей приповерхностного перехода имеются как положительные стационарный ρ_{s}^{*} и подвижный ρ_{m}^{*} , так и отрицательные стационарный ρ_{s}^{-} и подвижный ρ_{m}^{-} заряды, образованные донорной N_{P} и акцепторной N_{B} примесями с соответствующими основными n_{n} , p_{p} , и неосновными p_{n} , p_{n} . электронами и дырками При условии полной ионизации примесных атомов и перекомпенсации базовой примеси равенство (2) можно заменить на два:

$$\rho_n(x) = \rho_n^+(x) + \rho_n^-(x), \ \partial n \pi \ 0 < x < L_n
u
\rho_n(x) = \rho_n^+(x) + \rho_n^-(x), \ \partial n \pi \ 0 < x < L_n$$
(3)

соответственно для n и p области объемного заряда. Полученное распределение примесных атомов дает ассиметричную зависимость плотности стационарного и подвижного зарядов фотогальванического элемента (рис. 3).



Рис. 4 – Зависимости плотности распределения стационарного и подвижного заряда по глубине приповерхностной области

Здесь положительный стационарный заряд будет определяться разностью донорной и акцепторной примесей при $0 < x < L_n$:

$$\rho_{a}^{+}(x) = e \cdot (N_{d}(x) + N_{a}(x)) \tag{4}$$

А принимая во внимание, что $N_a = \text{const}$, равенство (4) можно определить как:

$$\rho_{n}^{+}(x) = e \cdot \left(C_{s} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} - N_{a} \right).$$
(5)

При переходе металлургического перехода при $0 < x < L_p$, когда $N_a > N_d$, отрицательный стационарный заряд удобно представить как:

$$\rho_p^-(x) = e \cdot \left(N_a - C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$
(6)

Приведенный выше анализ учета девиаций параметров выражений (5) и (6), приводит 50 % размытию области объемного заряда получаемой при интегрировании плотности распределения (рис. 4).



Рис. 5 – Распределение нескомпенсированного заряда в области объемного заряда на нормированного на единицу площади фотогальванического перехода

4. ВЫВОДЫ

Для построения мелкозалегающего перехода с глубинами в несколько сотен нанометров необходимо четко просчитывать профиль диффундирующей примеси, профиль которого и определяет рабочие параметры получения фотогальванического элемента. При этом на точность расчета профиля распределения влияют точности определения диффузионных и профильных констант, а также режимов задания технологических процессов.

Коэффициент диффузии, при бесконечной температуре, определяется в диапазоне от 3 до 20 cm²/с, что дает отклонение глубины залегания в пределах 80% и как показано изменение глубины залегания в пределах от 0,04 мкм до 0,2 мкм при проведении диффузии фосфора в кристалл кремния при температуре 865 $^{\rm 0}$ С и энергии активации 3,6 эВ.

Энергия активации E_a , в еще большей степени влияющая на изменение коэффициента диффузии, даже при 5% отклонения от среднестатистической величины дает отклонение глубины залегания потенциального барьера в сотни нанометров, при изменении энергии активации от 3,4 до 3,6 эВ глубина увеличивается на 200 нм. В процентном отношении данное изменение составляет 60% от общей глубины перехода.

При изменении выбора рабочей температуры в пределах от 800 до 900 °C расположение перехода, изменяясь от 50 нм до 0,2 мкм, давая 60% девиацию расположения границы раздела.

Менее чувствительна точность к определению начальной концентрации фосфора в фосфоросиликатном стекле C_s , численные значения колеблются в пределах $10^{19} - 10^{20}$ см⁻³. В этих пределах глубина залегания барьера лежит в пределах 12 % и составляет десятки нанометров.

Для расчета объемного заряда мелкозалегающего перехода, при условии полной ионизации примесных атомов и перекомпенсации базовой примеси, плотность заряда можно разбить на составляющие и провести интегрирование по двум областям

Приведенный выше анализ учета дивиаций параметров выражений (5) и (6), приводит 50 % размытию области объемного заряда получаемой при интегрировании плотности распределения.

The Asymmetry of the Distribution Density Volume Uncompensated Charge at the Metallurgical p-n Junction

A.S. Mazinov^{1,2}, A.I. Shevchenko¹, M.A. Bykov¹

¹ National Taurida V.I. Vernadsky University, 4 Vernadsky av., Simferopol 95007, Crimea, Ukrane ² Crimean Scientific Center of NAS and MES, 2 Vernadsky av., Simferopol 95007, Crimea, Ukrane

The features of the formation of shallow junction and its calculation for a solar cell based on singlecrystal silicon with front boron were considered. The ambiguity of the calculated profiles recompensating impurity, which is dependent on the accuracy of the constants of diffusion equations, was shown.

Keywords: Shallow p-n junction, Doping profile of the crystal, Diffusion activation energy for diffusion, Density of the charge distribution, Uncompensated charge p-n junction.

Асиметричність щільності розподілу об'ємного нескомпенсованого заряду на кордоні металургійного p-n переходу

А.С. Мазінов^{1,2}, А.І. Шевченко¹, М.О.Биков¹

 ¹ Таврійський національний університет ім. В.І. Вернадського, просп. Академіка Вернадського, 4, Сімферополь, Крим 95007, Україна
 ² Кримський науковий центр НАН і МОН, просп. Академіка Вернадського, 2, Сімферополь, 95007, Україна

У роботі розглянуто особливості формування мілкозалягаючого переходу і його розрахунку для створення фотогальванічного елемента на основі монокристалічного кремнію з фронтальним легованим бором. Показана неоднозначність розрахункових профілів перекомпенсуючої домішки, яка залежить від точності визначення констант дифузійних рівнянь.

Ключові слова: Мілкозалягаючий p-n перехід, Профіль легування кристала, Коефіцієнт дифузії, Енергія активації дифузії, Щільність розподілу заряду, Нескомпенсований заряд *p-n* переходу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Solar Cells: Materials, Manufacture and Operation (Ed. T. Markvart, L. Castafier) (Elsevier: 2005).
- Моделирование полупроводниковых приборов и технологических процессов. Последнии достижения (Пер. с англ. / Под ред. Д. Миллера). (Москва: Радио и связь: 1989).
- А.Н. Бубенников, Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем: Учеб. пособие для спец. Физика и технология материалов и компонентов электронной техники (Москва: Высшая школа: 1989).
- К. Пирс, А. Адамс, Л. Кац, Дж. Цай, Технология СБИС. Кн. 1 (Пер. с англ./ Под ред С. Зи) (Москва: Мир: 1986).
- З.Ю. Готра, Справочник по технологии микроэлектрнных устройств (Львов: Каменяр: 1986).
- 6. Б.И. Болтакс, Диффузия в полупроводниках (Москва: Физмат-гиз: 1961).

- А.П. Бабичев, Физические величины. Справочник (Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова) (Москва: Энергоатомиздат: 1991).
- А.С. Березин, Технология и конструирование интегральных микросхем (Москва: Радио и связь: 1992).
- С. Зи, Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1 (Пер. с англ./ С. Зи) (Москва: Мир: 1984).
- З.Ю. Готра, Технология микроэлектронных устройств: Справочник (Москва: Радио и связь: 1991).
- О.В. Александров, Н.Н. Афонин, *ФТП* **39** № 6, 647 (2005) (О.V. Aleksandrov, N.N. Afonin, *Semiconductors* **39**, 615 (2005)).
- Л.С. Палатник, В.К. Сорокин, Материаловедение в микроэлектронике (Москва: Энергия: 1977).
- 13. D. Redfield, Appl. Phys. Lett. 35, 182 (1979).
- 14. Л. Росадо, Физическая электоника и микроэлектроника (Пер. с испан. С.И. Баскакова / Под ред. В.А. Терехова) (Москва: Высшая школа: 1991).