

1. Теоретическое введение

1.1 Диффузия бора в кремнии

Диффузией называется перенос атомов вещества, обусловленный их хаотическим тепловым движением, в направлении уменьшения концентрации. Диффузия атомов в кристаллической решетке осуществляется отдельными скачками из одного положения равновесия в другое, причем длины таких элементарных перемещений имеют порядок межатомных расстояний и составляют несколько десятых долей нанометра. За счет элементарных скачков атомы могут перемещаться на большие расстояния.

Уравнения, описывающие диффузионные процессы, называются законами Фика. Первый закон Фика характеризует поток частиц:

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$

где F – поток частиц (диффузионный поток); C – плотность частиц (концентрация).

Отрицательный знак в уравнении на противоположные направления диффузионного потока и градиента концентрации. Диффузия – процесс, который приводит к выравниванию концентрации. Коэффициент пропорциональности D называют коэффициентом диффузии рассматриваемого элемента.

Двумерное уравнение диффузии представляется в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(C) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(C) \frac{\partial C}{\partial y} \right)$$

Бор диффундирует по нейтральным и положительно заряженным вакансиям. Поэтому эффективный коэффициент диффузии бора описывается выражением:

$$D_B = D^x + D^+ \cdot \frac{C_A}{n_i} = \left[\left(0.037 + 0.72 \cdot \frac{C_A}{n_i} \right) \cdot e^{\frac{3.46}{k \cdot T}} \right], \text{ см}^2/\text{с},$$

где C_A - концентрация атомов примеси в активном состоянии. В ходе работы будем считать, что все примесные атомы являются активными.

1.2 Диффузия бора в кремнии

Для решения уравнения диффузии методом конечных разностей формируется двумерная сетка (которая может быть составлена на основе пяти- или девятиточечного шаблона

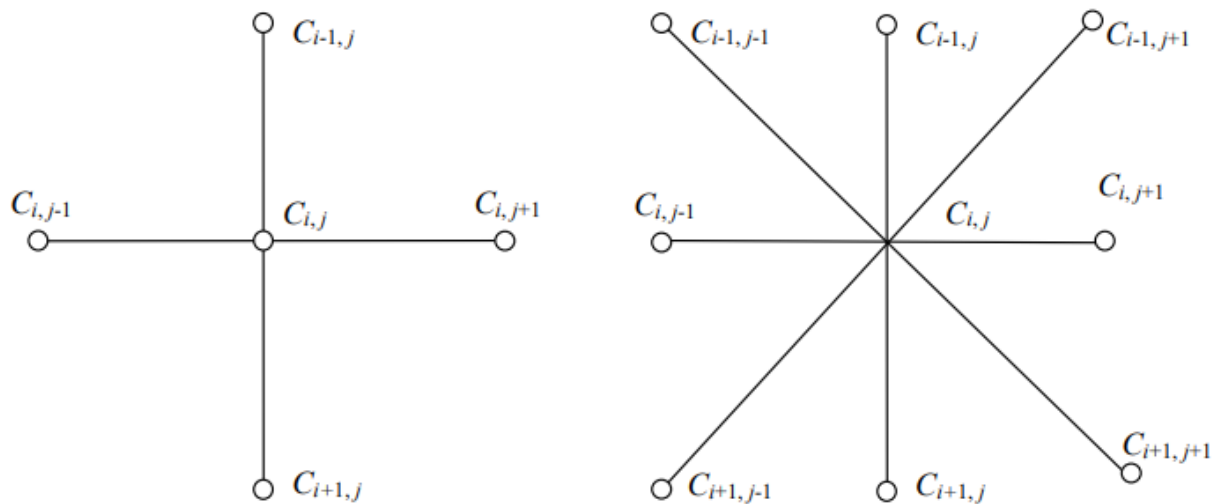


Рисунок 1 – Шаблоны разбиения

Для решения двумерного уравнения диффузии может быть использован метод переменных направлений.

В схеме метода переменных направлений (МПН), как и во всех методах расщепления, шаг

по времени τ разбивается на число независимых пространственных переменных (в двумерном

случае - на два). На каждом дробном временном слое один из пространственных дифференциальных операторов аппроксимируется неявно (по соответствующему координатному направлению осуществляются скалярные прогонки), а остальные явно. На следующем дробном шаге следующий по порядку дифференциальный оператор аппроксимируется неявно, а остальные – явно и т.д

Можно показать, что в двумерном случае схема МПН абсолютна устойчива. К достоинствам метода переменных направлений можно отнести высокую точность, поскольку метод имеет второй порядок точности по времени. К недостаткам можно отнести условную устойчивость при числе пространственных переменных больше двух. Кроме этого, МПН условно устойчив в задачах со смешанными производными уже в двумерном случае.

На первом полушаге

$$\frac{u_{i,j}^{k+1/2} - u_{i,j}^k}{\tau/2} = \frac{u_{i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{\Delta y^2}.$$

Получим следующие прогоночные коэффициенты:

$$b_{1j} = 0; d_{1j} = 0; a_{1j} = 1; r_{1j} = 0$$

$$b_{nj} = 0; d_{nj} = 0; a_{nj} = 1; r_{nj} = 0$$

На втором полушаге по времени уравнение в разностной форме выглядит следующим образом:

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k/2}}{\tau/2} = \frac{u_{i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + 2u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + 2u_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta x^2}.$$

Получим:

$$b_{ij} = 1; d_{ij} = 1; a_{ij} = -\left(2 + \frac{\Delta y^2}{\tau/2}\right); r_{ij} = -\frac{\Delta y^2}{\Delta x^2} \left(u_{i+1,j}^{k+1/2} - \left(2 - \frac{\Delta x^2}{\tau/2}\right) u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2} \right).$$

Трёхмерное изображение диффузионного распределения имеет вид:

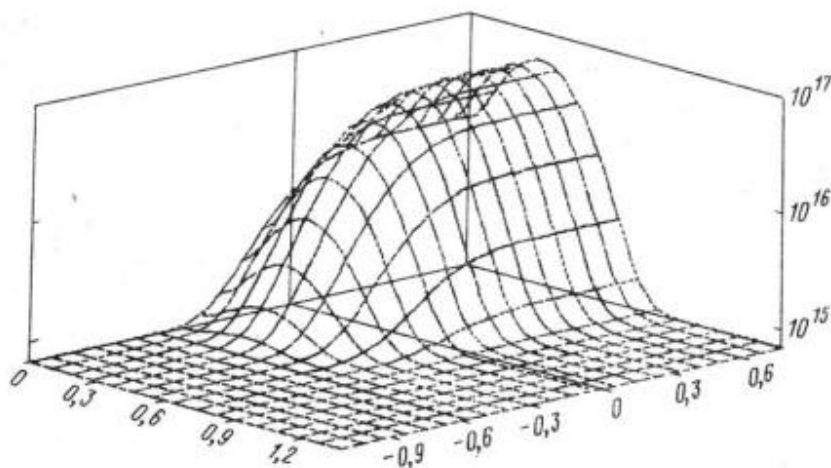


Рисунок 2 – Решение двумерного уравнения диффузии

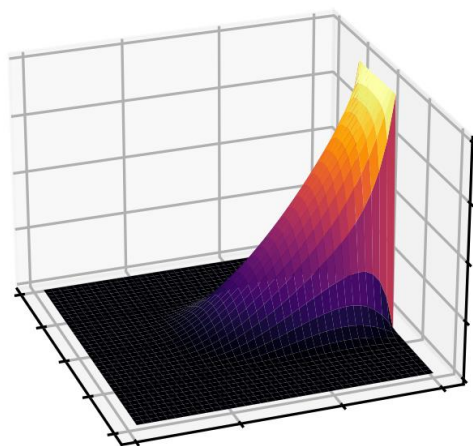
2. Расчетная часть

Программа составлена на основе вводных данных:

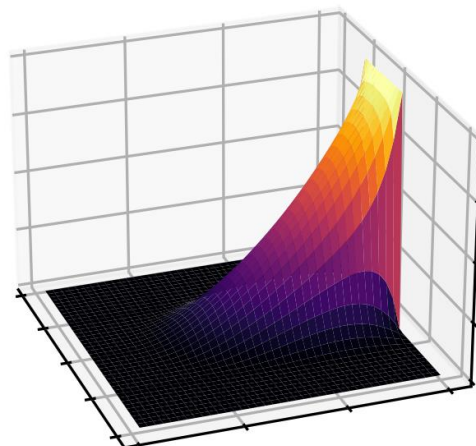
8	Бронников О.А.	Si <111> <i>n</i> - типа, $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	В	Диффузия	$T=1150^{\circ}\text{C}$ $t = 15 \text{ мин}$	$T=1050^{\circ}\text{C}$ $t = 25 \text{ мин}$
---	-------------------	-------------------------------------------------------------------	---	----------	--------------------------------------------------	--------------------------------------------------

2.1 Результаты расчетов

С помощью моделирования распределения бора в кремнии были получены трёхмерные профили (рисунок 3) диффузии, а также были определены размеры области, в которой образуется рп-переход(рисунок 4).



а)



б)

Рисунок 3 –Профили диффузии бора в кремний (а- загонка, б - разгонка)

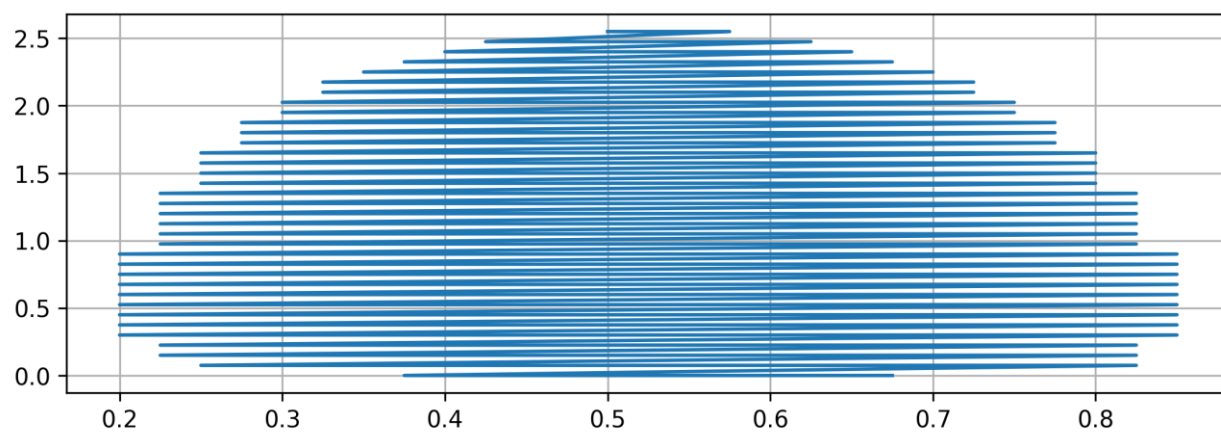


Рисунок 4 – Плоскость, в которой образуется рп-переход