

# РАСЧЕТ ПРОФИЛЕЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ГАЛЛИЯ И СУРЬМЫ ПРИ ИХ СОВМЕСТНОЙ ДИФФУЗИИ В КРЕМНИИ

Х. М. Илиев<sup>1</sup>, В. С. Просолович<sup>2</sup>, С. Б. Исамов<sup>1</sup>,  
Б. О. Исаков<sup>1</sup>, Ю. Н. Янковский<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>) *Ташкентский государственный технический университет, Университетская 2, 100095, Ташкент, Узбекистан, e-mail: bobir6422isakov@gmail.com*

<sup>2</sup>) *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, Минск, Беларусь, e-mail: prosolovich@bsu.by*

В работе проведены расчеты профилей распределения примесей при диффузии атомов галлия и сурьмы в кремнии, дан сравнительный анализ совместной и последовательной диффузии данных атомов. Расчеты показали, что в процессе диффузии имеет место взаимодействие между собой двух легирующих компонентов, приводящее к изменению по сравнению с одиночной диффузией профилей распределения концентрации легирующих примесей в кремнии. Возможное влияние на коэффициенты диффузии примесей может оказывать также и изменение зарядового состояния вакансий при совместной диффузии двух примесей во время высокотемпературных обработок.

**Ключевые слова:** кремний; галлий; сурьма; концентрация примеси; диффузия; коэффициент диффузии.

## CALCULATING THE DISTRIBUTION PROFILES OF IMPURITY GALLIUM AND ANTIMONY ATOMS DURING THEIR CO-DIFFUSION IN SILICON

Kh. M. Iliiev<sup>1</sup>, V. S. Prosolovich<sup>2</sup>, S. B. Isamov<sup>1</sup>, B. O. Isakov<sup>1</sup>, Yu. N. Yankovsky<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>) *Tashkent State Technical University, Universitetskaya 2, 100095, Tashkent, Uzbekistan*

<sup>2</sup>) *Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030, Minsk, Belarus*  
*Corresponding author: V. S. Prosolovich (prosolovich@bsu.by)*

The distribution profiles of impurities in the diffusion of gallium and antimony atoms in silicon have been calculated and a comparative analysis of joint and sequential diffusion of these atoms has been performed. The calculations showed that in the process of diffusion the interaction of two dopant components takes place, resulting in a change in the concentration distribution profiles of dopant impurities in silicon as compared to single diffusion. Possible effect on the impurity diffusion coefficients can also be caused by the change in the charge state of vacancies during the joint diffusion of two impurities during high-temperature treatments.

**Key words:** silicon; gallium; antimony; impurity concentration; diffusion; diffusion coefficient.

## ВВЕДЕНИЕ

Использование в электронике полупроводниковых гетероэпитаксиальных структур позволяет создавать фотоприемники с расширенной спектральной областью чувств-

вительности и высоким быстродействием [1–3]. Формирование таких структур возможно посредством легирования при определенных термодинамических условиях кремния элементами III и V группы Периодической системы элементов. Процесс легирования кремния одиночными примесными атомами, например, бором или фосфором, достаточно подробно изучен, экспериментальные профили распределения примеси достаточно хорошо согласуются с теоретическими данными [4–6]. Процесс диффузии при наличии двух примесных атомов является существенно более сложным, его не представляется возможным рассчитать на основе существующих теоретических моделей вследствие вероятного взаимодействия между собой двух различных примесных атомов [7–8]. В данной работе были проведены расчеты распределения атомов галлия и сурьмы в решетке кремния после проведения диффузионного легирования, что является перспективным с точки зрения возможности формирования гетероэпитаксиальной структуры типа соединения  $A^{III}B^V$  – кремний.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Коэффициент диффузии примесных атомов можно определить с помощью следующего выражения [9]:

$$D_i = A \cdot e^{\left(\frac{B[\text{ев}]}{kT}\right)} \left[ \text{см}^2/\text{с} \right] \quad (1)$$

где  $A$  – частотный фактор, величина, равная коэффициенту диффузии при бесконечной температуре;  $B$  – энергия активации;  $D_i$  – коэффициент диффузии.

Значения постоянных  $A$  и  $B$  для различных примесных атомов в кремнии приведены в таблице [10]. Коэффициенты диффузии примесных атомов экспоненциально зависят от температуры, температурные зависимости коэффициентов диффузии элементов галлия и сурьмы (2) в монокристаллическом кремнии приведены на рис. 1.

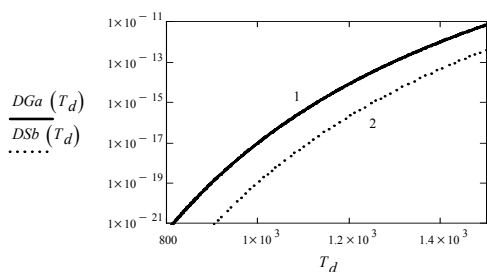


Рисунок 1. Температурные зависимости коэффициентов диффузии примесей галлия (1) и сурьмы (2) в монокристаллическом кремнии [9]

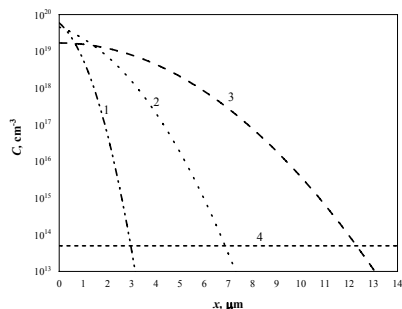


Рисунок 2. Рассчитанные профили распределения примесей при последовательной диффузии галлия и сурьмы в кремнии (профиль распределения Sb (1), профиль распределения Ga после первой стадии диффузии (2), профиль распределения Ga после второй стадии диффузии (3), концентрация исходной примеси (4))

**Значения постоянных в выражении (1): частотного фактора (A)  
и энергии активации диффузии (B) различных примесных атомов в кремнии**

	Al	As	B	Bi	Ga	In	N	P	Sb	Tl
A	0.317	8.85	3.79	1.08	3.81	3.13	$2 \cdot 10^5$	1.03	40.9	1.37
B	-3.023	-3.97	-3.645	-3.85	-3.552	-3.668	-3.24	-3.507	-4.158	-3.7

Концентрационное распределение атомов по глубине при диффузии из источника с постоянной поверхностной концентрацией примесных атомов определяется следующим выражением [6]:

$$C(x) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D(T) \cdot t}} \right) \quad (2)$$

где  $C(x)$  – концентрация примеси по глубине  $x$ ,  $C_0$  – поверхностная концентрация примеси (максимальная растворимость примеси в кремнии),  $x$  – глубина проникновения,  $D(T)$  – коэффициент диффузии при температуре  $T$ ,  $t$  – время диффузии.

Пусть после проведения диффузии первого элемента производится диффузия второго элемента. При этом первый элемент также диффундирует во время диффузии второго элемента. Если диффузия второй примеси происходит из источника с неограниченным содержанием примеси, а для первой примеси – из источника с ограниченным содержанием примеси, тогда профиль распределения для первого элемента определяется следующим выражением:

$$C'(x) = C'_0 \cdot \exp \left[ \frac{-x_0^2}{4(D(T_1) \cdot t_1 + D(T_2) \cdot t_2)} \right] \quad (3)$$

где  $C'(x)$  – концентрационное распределение первого элемента при диффузии из ограниченного источника,  $C'_0$  – концентрация первого элемента на поверхности полупроводника после первой стадии диффузии,  $x_0$  – глубина проникновения примесных атомов в полупроводник после второй стадии диффузии,  $D(T_1)$  – коэффициент диффузии примесных атомов при температуре  $T_1$ ,  $D(T_2)$  – коэффициент диффузии примесных атомов при температуре  $T_2$ ,  $t_1$  – время диффузии для первой стадии,  $t_2$  – время диффузии для второй стадии.

Галлий – элемент III группы Периодической системы элементов, сурьма – элемент V группы и  $x$  растворимость в кремнии при температуре  $T = 1200$  °C соответственно равна  $N_{\text{Ga}} \approx 4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $N_{\text{Sb}} \approx 6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , а коэффициенты диффузии соответственно равны  $D_{\text{Ga}} \approx 4 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2/\text{с}$  и  $D_{\text{Sb}} \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$ .

Поскольку глубины проникновения примесных атомов в кремнии могут зависеть от того, какая примесь вводится раньше, были рассмотрены два варианта диффузии для примесей галлия и сурьмы, а также вариант совместной диффузии двух различных примесных атомов одновременно.

Время диффузии для каждой из примесей составляло 1 час, температура диффузии –  $T = 1200$  °C. Глубиной проникновения примеси во всех расчетах принималась точка пересечения диффузионного профиля данной примеси с профилем исходной примеси в монокристалле.

Таким образом были рассмотрены три случая:

а) Первой проводится диффузия галлия, а затем сурьмы:  $1 - \text{Ga} \rightarrow \text{Si}$ ,  $2 - \text{Sb} \rightarrow \text{Si}(\text{Ga})$ ;

б) Первой проводится диффузия сурьмы, а затем галлия:  $1 - \text{Sb} \rightarrow \text{Si}$ ,  $2 - \text{Ga} \rightarrow \text{Si}(\text{Sb})$ ;

в) Диффузия галлия и сурьмы проводится одновременно:  $1 - \text{Sb, Ga} \rightarrow \text{Si}$ .

Рассмотрим подробнее каждый из возможных вариантов проведения диффузии:

а) глубина проникновения галлия на первой стадии диффузии в кремний определяется из выражения (2):  $x_{\text{Ga}} \approx 6.865$  мкм. На второй стадии диффузии примесные атомы сурьмы проникнут на  $x_{\text{Sb}} \approx 3$  мкм, при этом атомы галлия, введенные на первой стадии, продолжают диффундировать в кремний, глубина проникновения галлия определяется выражением (3),  $x'_{\text{Ga}} \approx 12.3$  мкм (рис. 2).

б) диффузия атомов сурьмы осуществляется в две стадии (первая стадия – диффузия непосредственно атомов сурьмы, вторая стадия – диффузия атомов сурьмы при проведении диффузии галлия), глубины проникновения атомов сурьмы соответственно будут равны:  $x_{\text{Sb}} \approx 3$  мкм и  $x'_{\text{Sb}} \approx 3.802$  мкм. Глубина проникновения атомов галлия равна  $x_{\text{Ga}} \approx 6.865$  мкм (рис. 3).

в) совместная диффузия атомов галлия и сурьмы в кремнии. В этом случае глубины проникновения атомов галлия и сурьмы в кремний в течение 1 часа соответственно будут равны:  $x_{\text{Ga}} \approx 6.865$  мкм и  $x_{\text{Sb}} \approx 3$  мкм (рис. 4).

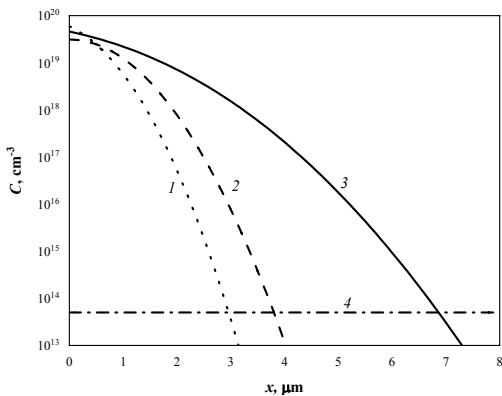


Рисунок 3. Рассчитанные профили распределения примесей при последовательной диффузии галлия и сурьмы в кремнии (профиль распределения Sb после первой стадии диффузии (1), профили распределения Sb после второй стадии диффузии (2), профиль распределения Ga (3), концентрация исходной примеси (4))

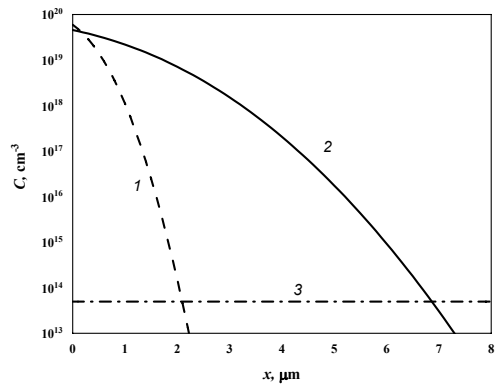


Рисунок 4. Рассчитанные профили распределения примесей при совместной диффузии сурьмы (1) и галлия (2) в кремнии, концентрация исходной примеси (3)

Из представленных результатов видно, что при совместной диффузии атомов сурьмы и атомов галлия как глубины их проникновения в монокристаллический кремний, так и профили их распределения отличаются от соответствующих характеристик при проведении одиночной диффузии. В процессе диффузии, вероятно, происходит взаимодействие атомов диффундирующих элементов между собой, приводящих к изменению профилей распределения концентрации легирующих примесей и

глубин их проникновения в материал. Не исключено, что, учитывая вакансионный механизм диффузии данных примесей в кремнии [6], во время высокотемпературных диффузионных процессов изменяется зарядовое состояние вакансий, приводящее к изменению коэффициентов диффузии одного или обоих мигрирующих компонентов. Для получения требуемых профилей распределения каждой из примесей при создании гетероваризонной структуры необходимо варьировать как время, так и температуру диффузии.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом проведенные расчеты показали, что при создании методом диффузии гетероваризонных структур соединений  $A^{III}B^V$  в монокристаллическом кремнии необходимо учитывать технологические особенности диффузионных процессов. Характеристики профилей распределения вводимых примесей галлия и сурьмы и глубины проникновения примесей в кремний существенно зависят как от последовательности их диффузии в монокристаллы. Данные характеристики при совместной диффузии примесей отличаются от случая отдельно диффузии. Вероятно, в этом случае имеет место взаимодействие между собой диффундирующих примесей.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Photoelectric converters with graded-gap layers based on ZnSe / Yu.N., Bobrenko [et. al] // Semiconductors.– 2013. – V. 47. N.10. – P. 1372–1375.
2. A graded-gap photoelectric detector for ionizing radiation / L.Dapkus [et. al] // Semiconductors. –2005. –V.39. N. 2. – P. 265–268.
3. Silicon with Clusters of Impurity Atoms as a Novel Material for Optoelectronics and Photovoltaic Energetics / M.K. Bakhadyrhanov [et. al] // Journal of Materials Science and Chemical Engineering. – 2018, –V.6. –P. 180–190.
4. Александров, О.В. Моделирование концентрационной зависимости диффузии бора в кремнии/ О.В.Александров // Физика и техника полупроводников. – 2004. –Т. 38. Вып. 3. –С. 270–273.
5. Гадияк, Г.В. Диффузия бора и фосфора в кремнии при высокотемпературной ионной имплантации / Г.В. Гадияк // Физика и техника полупроводников. –1997. –Т.31. Вып.4. – С. 385–389.
6. Ободников, В.И. Влияние исходного уровня легирования бором на его распределение, возникающее при термообработке в облученном ионами бора кремнии / В.И. Ободников, Е.Г. Тишковский // Физика и техника полупроводников. –1998. –Т.32. № 4. – С.417–420.
7. Formation of Complexes of Phosphorus and Boron Impurity Atoms in Silicon/ M.K. Bakhadyrkhanov [et. al] //Inorganic Materialsthis link is disabled. –2022, –V.58. N1. –P.3–9.
8. Влияние наличия достаточно высокой концентрации фосфора на концентрационное распределение галлия в кремнии/М.К. Бахадирханов, [и др.]//Физика и техника полупроводников. –2022. –Т.56. вып. 2. –С.
9. Болтакс Б. И. Диффузия в полупроводниках/ Б.И. Болтакс – М.: ФИЗМАТГИЗ, 1961. – 462 с.
10. Mostafa, A. Binary Phase Diagrams and Thermodynamic Properties of Silicon and Essential Doping Elements (Al, As, B, Bi, Ga, In, N, P, Sb and Tl) / A. Mostafa, M. Medraj // Materials. – 2017. – V.10. N 676. – 49 p.