

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ „КПІ”  
КАФЕДРА МІКРОЕЛЕКТРОНІКИ

„Моделювання технології та ІМС”

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів  
факультету електроніки всіх форм навчання

Рекомендовано на засіданні  
методичної ради НТУУ «КПІ»  
протокол № 10 від 16 червня 2009р.

Київ 2009

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ „КПІ”  
КАФЕДРА МІКРОЕЛЕКТРОНІКИ

„Моделювання технології та ІМС”

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт для студентів  
факультету електроніки всіх форм навчання

Рекомендовано на засіданні  
методичної ради НТУУ «КПІ»  
протокол № 10 від 16 червня 2009р.

Київ 2009

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу „ Моделювання технології та ІМС ”: Уклад.: О.В. Мачулянський, Д.Д. Татарчук.-К.: \_\_\_\_\_ , 2009.-

**Ошибка! Закладка не определена. с.**

Зміст посібника відповідає програмі базової вищої освіти з напрямку електроніка

Укладачі:

О.В. Мачулянський, к.т.н., доц.

Д.Д. Татарчук, к.т.н., доц.

Відповідальний

редактор О.В. Борисов, к.т.н., проф.

Рецензенти: А.Г. Білоус, д.х.н., проф.

В.Г. Вербицький, д.т.н., с.н.с.

Підп. до друку 00.00.08. Формат  $60 \times 84 \frac{1}{16}$ . Папір друк. №3. Друк офс.

Ум. друк. арк. 2.2. Наклад 200 пр.

Видавництво

03056, Київ, вул. Політехнічна, 16, тел.:241 86 00

## Зміст

Зміст.....	4
Вступ.....	5
Лабораторна робота №1 .....	6
Теоретичні відомості.....	6
Завдання.....	9
Додаткове завдання .....	10
Довідкові матеріали.....	10
Контрольні запитання .....	10
Лабораторна робота №2.....	11
Теоретичні відомості.....	11
Завдання.....	13
Довідкові матеріали.....	14
Контрольні запитання .....	14
Лабораторна робота № 3 .....	15
Теоретичні відомості.....	15
Завдання.....	19
Додаткове завдання.....	19
Довідкові матеріали: .....	19
Контрольні запитання .....	20
Лабораторна робота №4.....	21
Теоретичні відомості.....	21
Завдання.....	24
Довідкові дані .....	24
Контрольні запитання .....	25
Лабораторна робота №5.....	26
Теоретичні відомості.....	26
Завдання.....	29
Додаткове завдання .....	30
Довідкові дані .....	30
Контрольні запитання .....	30
Порядок оформлення і захисту робіт .....	31
Зміст звіту.....	31
Порядок захисту робіт.....	31
Список рекомендованої літератури.....	32

## Вступ

В зв'язку з швидким розвитком обчислювальної техніки широкого розповсюдження при проведенні наукових досліджень та інженерного проектування практично у всіх сферах людської діяльності набув обчислювальний експеримент. Це зумовлено тим, що використання обчислювального експерименту дозволяє значно зменшити витрати коштів і часу на розробку проекту та втілення його у виробництво.

Одним з важливих етапів обчислювального експерименту є етап побудови математичних моделей досліджуваного об'єкту та їх аналізу за допомогою засобів обчислювальної техніки. Цей процес є досить складним. Спочатку формулюються основні закони та взаємозв'язки, що описують даний об'єкт. На їх основі розробляється математична модель, що являє собою, як правило, запис цих законів у вигляді системи рівнянь (алгебраїчних, диференціальних, інтегральних і т.д.). Після цього проводиться аналіз і оптимізація моделі з метою досягнення розумного компромісу між точністю моделі та її складністю, що потребує від розробника не лише дуже високого рівня інтелектуальних здібностей, але і високого професіоналізму.

Це, в свою чергу, призводить до необхідності підготовки спеціалістів високої кваліфікації, які не лише ознайомлені з методами моделювання та базовими моделями в даній предметній області, але і мають практичні навички їх використання.

Даний посібник призначений для вироблення у студентів практичних навичок моделювання в області сучасних технологій електронного виробництва.

## Лабораторна робота №1

Тема: „Числове моделювання дифузії в умовах загонки домішки. ”

Мета роботи – вивчити теоретичні основи моделювання процесів дифузії та виробити навички їх практичного використання.

### **Теоретичні відомості**

Дифузія – один з основних технологічних процесів виготовлення напівпровідникових приладів. Саме за допомогою дифузії найчастіше формуються р-п-переходи та інші активні області напівпровідникових структур.

Як відомо процес дифузії математично можна описати за допомогою законів Фіка[1].

Перший закон Фіка вказує на градієнт концентрації як на джерело і причину виникнення дифузійного потоку:

$$I = -D \text{grad}(C), \quad (1.1)$$

де  $C$ - концентрація речовини, що дифундує,  $D$ - коефіцієнт дифузії,  $I$ - дифузійний потік. Знак мінус вказує на те, що дифузійний потік напрямлений протилежно до градієнта концентрації.

Другий закон Фіка характеризує швидкість зміни числа атомів домішки в одиничному об'ємі:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(I), \quad (1.2)$$

де  $t$ -час.

Якщо підставити значення потоку із рівняння (1.1) до (1.2), то отримаємо рівняння дифузії.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(D \operatorname{grad}(C)), (1.3)$$

В загальному випадку величини  $I$  та  $C$ , що входять до рівнянь (1.1-1.3) – є функціями трьох просторових координат, однак при моделюванні технологічних процесів в більшості випадків можна розглядати залежність лише від однієї координати.

Це пов'язано з тим, що технологічно дифузія здійснюється під маску лише вглиб пластини таким чином, щоб мінімізувати бічне „розповзання” домішка, а тому воно є настільки малим, що ним можна знехтувати.

Коефіцієнт дифузії  $D$  в загальному випадку є функцією температури та інших факторів і може бути обчислений за формулою[2]:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), (1.4)$$

де  $T$  – абсолютна температура системи,  $k = 1,381 \cdot 10^{-23}$  (Дж/К) – стала Больцмана,  $E_a$  – енергія активації,  $D_0$  – стала дифузії. Однак в силу того, що під час технологічного процесу підтримуються цілком певні постійні умови, коефіцієнт дифузії при розв'язуванні технологічних задач можна вважати величиною сталою.

Перепишемо рівняння дифузії з урахуванням вищевикладеного:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, (1.5)$$

Зазвичай процес дифузії проводять у два етапи - „загонка” та „розгонка” домішки. На першому етапі здійснюють початкове введення домішки у пластину. На другому етапі добиваються проникнення домішки вглиб напівпровідника (перерозподіл концентрацій).

При проведенні першого етапу можна вважати, що в початковий момент в тілі пластини відсутні домішки даного типу, а на межі розділу між зовнішнім середовищем і напівпровідником існує нескінченне джерело домішкових атомів з постійною концентрацією атомів домішки  $C_0$ , яка не змінюється протягом всього процесу дифузії. В цьому випадку рівняння (1.5) має аналітичний розв'язок[2]:

$$C = C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right), (1.6)$$

При проведенні другого етапу маємо задану кількість атомів домішки  $S$ , що в початковий момент розподілена певним чином і під дією дифузії перерозподіляється в тілі пластини. Кількість атомів домішки може бути визначена за формулою:

$$S = \int_0^{\infty} C(x, t_0) dx, (1.7)$$

На практиці при інтегруванні можна обмежитись тілом пластини. З урахуванням того факту, що величина  $S$  у тілі пластини залишається незмінною протягом всього процесу, а відбувається лише перерозподіл домішки, рівняння (1.5) має аналітичний розв'язок[2]:

$$C = \frac{S}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), (1.8)$$

Однак, на практиці не завжди можна отримати аналітичний розв'язок рівняння дифузії. В таких випадках вдаються до прямого розв'язування рівняння дифузії за допомогою числових методів. Для цього використовують такий прийом. Все тіло напівпровідника розбивається на  $n$ - точок.



У рівнянні (1.5) друга похідна по координаті замінюється кінцевою різницею другого порядку по схемі, що для одномірного випадку має вигляд[3]:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \begin{cases} \frac{-C_3 + 4C_2 - 5C_1 + 2C_0}{(\Delta x)^2}, k = 0 \\ \frac{C_{k-1} - 2C_k + C_{k+1}}{(\Delta x)^2}, 0 \leq k \leq n \\ \frac{-C_{n-3} + 4C_{n-2} - 5C_{n-1} + 2C_n}{(\Delta x)^2}, k = n \end{cases}, (1.9)$$

де  $k$  - номер точки.

В результаті рівняння (1.5) зводиться до системи  $n$  диференціальних рівнянь першого порядку, де кожне рівняння описує залежність концентрації домішки від часу в певній точці:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_0}{\partial t} = D \frac{-C_3 + 4C_2 - 5C_1 + 2C_0}{(\Delta x)^2}, k = 0 \\ \frac{\partial C_k}{\partial t} = D \frac{C_{k-1} - 2C_k + C_{k+1}}{(\Delta x)^2}, 0 \leq k \leq n \\ \frac{\partial C_n}{\partial t} = D \frac{-C_{n-3} + 4C_{n-2} - 5C_{n-1} + 2C_n}{(\Delta x)^2}, k = n \end{cases}, (1.10)$$

### **Завдання**

1. Отримати у викладача вхідні дані для розв'язку рівняння дифузії.
2. Написати програму числового розв'язку рівняння (1.5) для процесу „загонки” при заданих викладачем умовах.
3. Отримати графіки залежностей концентрації домішки у вузлових точках від часу.
4. Отримати графіки профілю розподілу домішка по пластині у задані викладачем моменти часу.

5. Порівняти результати отримані числовим методом з результатами обчислень за формулою (1.6). Пояснити результати порівняння.

### **Додаткове завдання**

Виконати п.п. 1-4 для процесу „розгонки”. Порівняти отримані результати з результатами, отриманими за формулою (1.7). Пояснити результати порівняння.

### **Довідкові матеріали**

Таблиця 1.1 Константи дифузії та енергії активації елементів В, Р, Sb при дифузії у власний кремній[4].

Параметр	Розмірність	Матеріал		
		В	Р	Sb
$D_0$	см <sup>2</sup> /с	0,76	3,85	0,214
$E_a$	еВ	3,46	3,66	3,65

### **Контрольні запитання**

1. Запишіть перший закон Фіка. Поясніть його фізичний зміст.
2. Запишіть другий закон Фіка. Поясніть його фізичний зміст.
3. Від яких факторів залежить швидкість процесу дифузії?
4. Виведіть рівняння дифузії, вважаючи коефіцієнт дифузії сталою величиною.
5. З яких двох етапів складається процес дифузії.
6. Назвіть умови, при яких рівняння дифузії має аналітичні розв’язки, та наведіть вирази для обчислення концентрації домішки в кожному випадку.
7. Яким чином можна звести розв’язок рівняння дифузії до розв’язку системи диференціальних рівнянь першого порядку.

## Лабораторна робота №2

Тема „Числове моделювання іонної імплантації.”

Мета роботи – вивчити теоретичні основи моделювання процесу іонної імплантації та навчитися застосовувати їх на практиці.

### **Теоретичні відомості**

Основною задачею при моделюванні процесу іонної імплантації є визначення розподілу домішки в мішені. В наш час найбільше розповсюдження отримала аналітична модель, в якій профіль концентрації домішки задано за допомогою функції розподілу. Основою для розробки таких моделей є методи експериментального визначення профілю концентрації домішки. Оскільки параметри розподілу підбираються так, щоб експериментальні результати співпадали з теоретичними, то така модель є точною у певному діапазоні параметрів процесу. Крім того така модель не потребує великих обчислювальних затрат.

Зазвичай в напівпровідниковій електроніці для моделювання процесу іонної імплантації використовується апроксимація функції розподілу спряженою напівгаусіаною[4,5]:

$$f(x) = \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\sigma^2}\right],$$
$$\sigma = \begin{cases} \sigma_1, & x \leq R_m, \\ \sigma_2, & x > R_m, \end{cases} \quad (2.1)$$

де  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $R_m$  - параметри розподілу.

В літературі наводяться експериментально визначені дані для таких характеристик розподілу: проекція пробігу на напрям іонного пучка  $R_p$ , стандартне відхилення  $\sigma_p$  та асиметрія  $\gamma_1$ . Знаючи ці дані можна визначити параметри розподілу із наступної системи рівнянь:

$$\begin{cases} R_p = R_m + 1,5958 \left( \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{2} \right) \\ \sigma_p^2 = \left( \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \right)^2 + 0,4536 \left( \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{2} \right)^2 \\ \sigma_p^3 \gamma_1 = 1,5958 \left( \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{2} \right) \left( \left( \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \right)^2 + 0,093 \left( \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{2} \right)^2 \right), \end{cases} \quad (2.2)$$

Для відомих параметрів розподілу профіль концентрації домішки можна розрахувати за формулою:

$$C = \frac{Q_f f(x)}{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx}, \quad (2.3)$$

Для розподілу виду (2.1) після обчислення інтегралу маємо:

$$C = \frac{Q_f f(x)}{\sqrt{2\pi} \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}} = \frac{Q_f f(x)}{1,253(\sigma_1 + \sigma_2)}, \quad (2.3)$$

де  $Q_f$  – доза імплантованої домішки,  $\text{см}^{-2}$ ;  $x$  – координата,  $\text{см}$ ;  $C$  – функція розподілу домішки,  $\text{см}^{-3}$ .

Якщо матеріал мав до початку іонної імплантації рівномірно розподілену домішку з концентрацією  $C_0$ , то для розподілу концентрації маємо:

$$C = \frac{Q_f f(x)}{1,253(\sigma_1 + \sigma_2)} \pm C_0, \quad (2.4)$$

де знак „+” – використовується для ізотипної домішки, знак „-” – у випадку неізотипної домішки.

Для випадку  $\gamma = 0$  вираз (2.4) спрощується оскільки в цьому випадку  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_m$ ,  $R_p = R_m$ . Тоді з урахуванням (2.1) можна записати:

$$C = \frac{Q_l \exp\left[-\frac{(x - R_m)^2}{2\sigma_m^2}\right]}{\sqrt{2\pi}\sigma_m} \pm C_0, \quad (2.5)$$

Доза імплантованої домішки визначається з виразу:

$$Q_l = \frac{I_i t}{A q n}, \quad (2.6)$$

де  $I_i$  – струм іонного пучка,  $A$  – площа іонного пучка,  $t$  – опромінення,  $q$  – заряд електрону,  $n$  – ступінь іонізації іонів.

### **Завдання**

1. Отримати у викладача вхідні дані для розрахунку розподілу імплантованої домішки.
2. Написати програму для розрахунку розподілу імплантованої домішки.
3. Побудувати графік просторового розподілу домішки.
4. За графіком визначити місцеположення р-п-переходу.

## Довідкові матеріали

Таблиця 2.1 Параметри функції розподілу для різних домішок [6]:

Іон	Параметр	Прискорююча енергія, кеВ				Одиниця виміру
		20	40	60	80	
В	$R_m$	734	1610	2438	3238	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	321	538	708	839	$10^{-4}$ МКМ
Р	$R_m$	260	490	732	980	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	94	164	231	295	$10^{-4}$ МКМ
Ga	$R_m$	163	280	392	502	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	40	67	91	115	$10^{-4}$ МКМ
As	$R_m$	159	271	377	481	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	37	62	84	105	$10^{-4}$ МКМ
In	$R_m$	141	231	312	390	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	25	40	53	66	$10^{-4}$ МКМ
Sb	$R_m$	140	229	308	384	$10^{-4}$ МКМ
	$\sigma_m$	24	38	51	63	$10^{-4}$ МКМ

### Контрольні запитання

1. Яка модель використовується в даній роботі.
2. Запишіть функцію розподілу для даної моделі.
3. Які параметри моделі. Як вони визначаються.
4. Запишіть вираз для розрахунку профілю концентрації домішки, який використовується в даній моделі.
5. В якому випадку цей вираз спрощується і чому.
6. Як визначити глибину виникнення р-п- переходу.
7. Запишіть вираз для обчислення дози імплантованої домішки.

### Лабораторна робота № 3

Тема: ” Числове моделювання процесу термічного окиснення кремнію ”

Мета роботи – вивчити теоретичні основи моделювання процесу окиснення кремнію та виробити навички їх практичного застосування.

#### **Теоретичні відомості**

Основною задачею при моделюванні окиснення являється визначення залежності положення межі  $SiO_2$ , що росте, від часу.

Залежність товщини оксиду  $W$  від часу окиснення  $t$  при  $0,03 < W < 0,5$  мкм описується добре відомим лінійно-параболічним законом[4,5]:

$$\frac{W^2}{K_p} + \frac{W}{K_L} = t + t_0, (3.1)$$

де  $t_0$  – величина, що враховує відхилення залежності  $W(t)$  від цього закону при малих  $W$  і початкову величину  $W(0)$ ;  $K_p, K_L$  – відповідно параболічний та лінійний коефіцієнти окиснення. Ці коефіцієнти залежать від умов окиснення. При цьому слід враховувати наступне[4,5]:

1. У випадку окиснення в сухому  $O_2$  коефіцієнти  $K_p, K_L$  підпорядковуються закону Арреніуса  $K_{p,L} = K_{p,L}^0 \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right)$ , де  $E_a$  – енергія активації,  $k$  – константа Больцмана,  $T$  – абсолютна температура.
2. У випадку окиснення у в парах  $H_2O$  енергія активації залежить від температури. Це пов'язано з тим, що при  $T > (930...960) ^\circ C$  оксид  $SiO_2$  веде себе не лише, як пружний, але і як в'язкий матеріал. Це призводить до ослаблення механічної напруги в  $SiO_2$ , яка виникає в результаті швидкого перетворення  $Si$  у  $SiO_2$  в процесі вологого окиснення. В результаті полегшується процес дифузії окисника через шар  $SiO_2$  (тобто зменшує енергію активації для  $K_p$ ) і ускладнюється процес розриву хімічних зв'язків на межі  $Si - SiO_2$  (тобто

збільшує енергію активації для  $K_L$ ). Залежності  $K_p$  та  $K_L$  для кристалографічної орієнтації кремнію (111) визначаються нижченаведеними виразами:

- для сухого кисню:

$$K_p = 12,9 \exp\left(\frac{-1,23}{kT}\right), (3.2)$$

$$K_L = 1,04 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-2,0}{kT}\right), (3.3)$$

- для окиснення в парах води:

$$K_p = 280 \exp\left(\frac{-1,17}{kT}\right), T \leq 950^\circ\text{C}, (3.4)$$

$$K_p = 7 \exp\left(\frac{-0,78}{kT}\right), T > 950^\circ\text{C}, (3.5)$$

$$K_L = 3,45 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{-1,6}{kT}\right), T \leq 900^\circ\text{C}, (3.6)$$

$$K_L = 2,95 \cdot 10^6 \exp\left(\frac{-2,05}{kT}\right), T > 900^\circ\text{C}, (3.7)$$

де  $K_p$  - параболічний коефіцієнт,  $\text{мкм}^2/\text{хв}$ ,  $K_L$  - лінійний коефіцієнт,  $\text{мкм}/\text{хв}$

3. Коефіцієнт  $K_p$ , який визначається в основному коефіцієнтом дифузії окисника в  $\text{SiO}_2$ , слабо залежить від орієнтації кремнієвої підкладки. Коефіцієнт  $K_L$ , який визначається швидкістю реакції на межі  $\text{Si}-\text{SiO}_2$ , навпаки, сильно залежить від орієнтації підкладки із-за залежності щільності атомів  $\text{Si}$  від орієнтації кристалографічних площин. При окисненні кремнію з орієнтацією (100) має місце зменшення  $K_L$  у 1,68 рази у порівнні з орієнтацією (111). Більш точні дослідження показали, що в початковий період окиснення в сухому  $\text{O}_2$ , при  $W < 25$  нм, швидкості окиснення для різних кристалографічних напрямків співвідносяться наступним чином:



$\dot{W}(110) > \dot{W}(111) > \dot{W}(311) > \dot{W}(511) > \dot{W}(100)$ . При  $W > 25$  нм і  $T < 1100$  °C перша нерівність змінює знак, тобто  $\dot{W}(111) > \dot{W}(110)$ . Таким чином співвідношення (3.3) виконується лише для  $W > 25$  нм.

4. Коефіцієнти  $K_p$  і  $K_L$  прямо пропорційні парціальному тиску окисника  $P$ . Винятком являється коефіцієнт  $K_L$  при окисненні у сухому кисні, для якого  $K_L \propto P^{0,75}$ . Окиснення в парах води, отриманих піролізом  $O_2$  та  $H_2$ , відповідає окисненню при  $P_{H_2O} = 0,85$  атм. При окисненні у суміші  $O_2$  та  $H_2O$  можна вважати, що два процеси відбуваються незалежно. Тоді швидкість сумарного процесу дорівнює сумі швидкостей окремих процесів, що для лінійно-параболічного закону (3.1) відповідає виразу:

$$\frac{W^2}{K_p^*} + \frac{W}{K_L^*} - A \ln(1 + BW) = t, \quad (3.8)$$

де:

$$K_p^* = K_{pO_2} + K_{pH_2O};$$

$$K_L^* = K_p^{*2} \left( \frac{K_{pO_2}^2}{K_{LO_2}} + \frac{K_{pH_2O}^2}{K_{LH_2O}} \right)^{-1};$$

$$A = \frac{K_{pO_2} K_{pH_2O} \left( \frac{K_{pH_2O}}{K_{LH_2O}} - \frac{K_{pO_2}}{K_{LO_2}} \right)^2}{2K_p^{*3}};$$

$$B = \frac{\frac{1}{K_{pO_2}} + \frac{1}{K_{pH_2O}}}{\frac{1}{K_{LO_2}} + \frac{1}{K_{LH_2O}}};$$

Однак при малому тиску водяної пари швидкість окиснення значно більша, ніж розрахована за даними співвідношеннями. Це пов'язано з тим, що молекули води являються прискорювачами процесів реакції та дифузії

молекул кисню. Для врахування цього ефекту необхідно  $K_{pO_2}, K_{LO_2}$  помножити на коефіцієнт  $(1 + P_{H_2O}/P^*)$  при  $P_{H_2O} \leq P^* = 1,66 \cdot 10^{-3}$  атм. При подальшому зростанні тиску водяної пари коефіцієнти залишаються незмінними.

5. Додавання пари  $HCl$  до сухого кисню також впливає на коефіцієнти  $K_p$  і  $K_L$ . Тому треба вводити поправку згідно виразу:

$$K = K_0 \exp(a), \quad (3.9)$$

де  $K_0$  – значення коефіцієнта при нульовій концентрації  $HCl$ ,  $a$  – поправка, що береться із табл. 3.1 (див. довідкові матеріали).

6. При товщині окислу ( $W > 0,5$  мкм) закон росту плівки оксиду змінюється і може бути описаний співвідношенням:

$$\dot{W} = \frac{K_L \cosh(W/L)}{\cosh(W/L) + (2LK_L/K_p) \sinh(W/L)}, \quad (3.10)$$

де  $L = 4,17 \cdot 10^{-6} T^2 - 11,52 \cdot 10^{-3} T + 8,86$  (мкм) для окиснення в  $H_2O$  і  $L = 5,45 \cdot 10^{-4} \exp(0,853/kT)$  (мкм) для окиснення в  $O_2$  в діапазоні  $T = 1173 \dots 1473$  К.

Однією з важливих характеристик при окисненні кремнію є величина нерухомого заряду  $Q_f$ , яку можна визначити із співвідношення [4,5]:

$$\frac{d(Q_f)}{dt} = K_g \dot{W} - K_r (C_i Q_f - C_i^* Q_f^*), \quad (3.11)$$

де  $C_i = K_i \dot{W} + C_i^*$  – концентрація міжвузлових атомів кремнію;  $C_i^*, Q_f^*$  – значення  $C_i, Q_f$  у стані рівноваги;  $K_g, K_r, K_i$  – коефіцієнти моделі, що залежать

від температури згідно закону Арреніуса (див таблицю 3.2 довідкових матеріалів).

### **Завдання**

1. Отримати у викладача вхідні дані для розрахунку товщини плівки оксиду кремнію.
2. Написати програму для розрахунку залежності товщини плівки оксиду кремнію від часу окиснення.
3. Побудувати графічну залежність товщини плівки оксиду кремнію від часу окиснення.

### **Додаткове завдання.**

1. Написати програму для розрахунку залежності величини нерухомого заряду від часу окиснення.
2. Побудувати графічну залежність величини нерухомого заряду від часу окиснення.

### **Довідкові матеріали:**

Таблиця 3.1 Параметр  $a$  для розрахунку збільшення коефіцієнтів окиснення  $K_p$ ,  $K_L$  при додаванні  $HCl$  до  $O_2$  [4]:

T, °C	a для $K_p$			a для $K_L$			
	Концентрація $HCl$ , %						
	0	1	10	0	1	3	10
900	0	0,067	0,67	0	0,58	0,58	0,58
1000	0	0,5	1	0	0,18	0,35	0,35
1100	0	0,275	0,71	0	0,45	0,8	0,8

Таблиця 3.2 [4]

Параметр	$K_g$ , хв/см <sup>3</sup>	$K_r$ , см <sup>3</sup> /хв	$C_l^*$ , см <sup>-3</sup>	$Q_f^*$ , см <sup>-2</sup>		$K_l$ , хв/см <sup>4</sup>
				(111)	(100)	
$K_0$	$1,06 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{22}$	$5,24 \cdot 10^9$	$5,22 \cdot 10^7$	$2,65 \cdot 10^{15}$
$E_a$ , еВ	-1,67	0,0	2,36	-0,36	-0,69	-1,38

### Контрольні запитання

1. Запишіть вираз для обчислення залежності товщини оксиду від часу для випадку тонкої плівки оксиду.
2. При яких величинах товщини оксидної плівки цей вираз залишається вірним.
3. Поясніть вплив наявності в окиснику парів води на процес окиснення.
4. Поясніть залежність швидкості окиснення від кристалографічної орієнтації пластини.
5. Поясніть залежність швидкості окиснення від парціального тиску окисника.
6. Які особливості окиснення кремнію при окисненні в суміші  $O_2$  та  $H_2O$ .
7. Запишіть вираз для обчислення залежності товщини оксиду від часу окиснення для випадку товстої плівки оксиду.
8. Наведіть вираз для визначення нерухомого заряду.
9. Як впливає на швидкість окиснення додавання до окисника парів  $HCl$ .

## Лабораторна робота №4

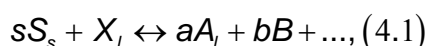
Тема:” Числове моделювання процесу рідинного травління напівпровідникових структур. ”

Мета роботи – вивчити теоретичні основи моделювання процесу рідинного травління та виробити навички їх практичного застосування.

### **Теоретичні відомості**

У виробництві напівпровідникових елементів рідинне травління використовується при обробці поверхні напівпровідника, а також при підготовці пластин до процесу фотолітографії.

В загальному випадку процес травління може бути описаний у вигляді зворотної хімічної реакції[2]:



де  $S$  - напівпровідниковий матеріал, що травиться (у твердому вигляді );

$s$  - кількість молів матеріалу, що травиться згідно рівняння реакції;

$X$  - травник (у вигляді рідини);

$A, B$  - продукти реакції (рідини);

$a, b$  - кількість молей продуктів реакції у рівнянні реакції.

Рівняння реакції зведено до одного моля рідинного травника.

Процес травління складається з кількох етапів:

- транспортування травника до поверхні напівпровідника;
- хімічної реакції;
- видалення результатів реакції від поверхні напівпровідника.

Швидкість доставки травника, швидкість реакції та швидкість видалення продуктів реакції повинні бути узгоджені з рівнянням реакції та забезпечувати необхідну стехіометрію процесу травління. Виходячи з цього можна побудувати рівняння, що описує швидкість процесу травління. Для цього розглянемо етапи процесу травління.

Транспортування травника та видалення продуктів реакції – це дифузійні процеси, в результаті яких створюються відповідні дифузійні потоки травника та продуктів реакції[2]:

$$\begin{aligned} J_X^d &= \beta_X (C_{X0} - C_X) \\ J_i^d &= \beta_i (C_i - C_{i0}), i = A, B, \end{aligned} \quad (4.2)$$

де  $\beta_i = D_i/\delta_i$  – коефіцієнт масопереносу  $i$ -го компонента у рідкому стані,  $D_i$  – коефіцієнт дифузії  $i$ -го компонента,  $\delta_i$  – товщина дифузійного шару  $i$ -го компонента (визначається експериментально),  $C_i$  – концентрація  $i$ -го компонента,  $C_{i0}$  – початкова концентрація  $i$ -го компонента.

В стаціонарному режимі дифузійний потік повинен дорівнювати хімічному потоку для кожного компонента відповідно. З урахуванням цього можна записати:

$$J_i \equiv J_i^c \equiv J_i^d, i = X, A, B, \quad (4.3)$$

де  $J_i^c$  – хімічний потік  $i$ -го компонента.

Умова забезпечення необхідної стехіометрії процесу визначає співвідношення між відповідними потоками:

$$J_X^c = \frac{J_A^c}{a} = \frac{J_B^c}{b} = \dots = \frac{J_S^c}{s}. \quad (4.4)$$

У відповідності до основного постулату хімічної кінетики можна записати:

$$J_X^c = k_r C_X, \quad (4.5)$$

де  $k_r$  – константа швидкості травління.

Підставимо (4.5) до (4.3), врахуємо (4.2) і виразимо концентрацію травника  $X$  на поверхні напівпровідника  $S$ :

$$C_x = \frac{\beta_x}{\beta_x + k_r} C_{x0}. \quad (4.6)$$

Тоді на основі (4.4,4.5,4.6) можна записати для потоку травління твердої напівпровідникової речовини  $S$ :

$$J_S^c = s \frac{\beta_x k_r}{\beta_x + k_r} C_{x0} = k_{eff} C_{x0}, \quad (4.7)$$

де

$$\frac{1}{k_{eff}} = \frac{1}{sk_r} + \frac{1}{s\beta_x}, \quad (4.8)$$

Геометричну швидкість травління  $\left(\frac{dx}{dt}\right)$  можна визначити з виразу[2]:

$$J_S^c = N_s \left(\frac{dx}{dt}\right) = \left(\frac{\rho_s N_A}{M_s}\right) \left(\frac{dx}{dt}\right), \quad (4.9)$$

де  $N_s$  – число молекул в одиниці об'єму твердого напівпровідника  $S$ ,  $\rho_s$  густина твердого напівпровідника,  $M_s$  – молярна маса твердого напівпровідника,  $N_A$  – число Авогадро.

Остаточно із (4.7,4.8, 4.9) маємо рівняння для геометричної швидкості травління твердого напівпровідника  $S$ :

$$k_{eff} C_{x0} = \left(\frac{\rho_s N_A}{M_s}\right) \left(\frac{dx}{dt}\right). \quad (4.10)$$

## Завдання

1. Отримати у викладача вхідні дані для виконання роботи.
2. Написати програму для розрахунку  $x(t)$ , вважаючи за додатній напрямок – напрямок вглиб пластини, а за 0 осі  $Ox$  – початкове положення межі розділу травник-напівпровідник.
3. Побудувати графічну залежність  $x(t)$ .

## Довідкові дані

$$\rho_{Si} = 2,33 \text{ (Г/см}^3\text{)};$$

$$M_{Si} = 28,086 \text{ (Г/моль)};$$

$$\rho_{Ge} = 5,32 \text{ (Г/см}^3\text{)};$$

$$M_{Ge} = 72,59 \text{ (Г/моль)};$$

Таблиця 4.1 Значення параметрів травління для процесів полірування  $Si$  та  $Ge$  при різних концентраціях травника  $C_0$  і температурі  $T = 293K$ .

$C_0$ , (моль/л)	Полірування $Si$ $Si + 2HCl \leftrightarrow SiCl_2 + H_2$		Полірування $Ge$ $Ge + 2H_2O_2 \leftrightarrow H_2GeO_3 + H_2O$	
	$k_r$ , (мкм/хв)	$\beta_x$ , (мкм/хв)	$k_r$ , (мкм/хв)	$\beta_x$ , (мкм/хв)
1	20	30	15	12
2	22	30	17	13
3	25	31	18	14
4	28	32	19	16
5	30	34	21	17



### **Контрольні запитання**

1. З якою метою використовується рідинне травління в напівпровідниковій технології.
2. З яких етапів складається процес травління.
3. Виведіть рівняння для обчислення швидкості рідинного травління.

## Лабораторна робота №5

Тема:” Числове моделювання різкого ступінчастого р-n-переходу у стані термодинамічної рівноваги. ”

Мета роботи – ознайомитись з теоретичними основи та методами моделювання напівпровідникових структур.

### **Теоретичні відомості**

Різкий ступінчастий р-n-перехід не являється типовою структурою для сучасних напівпровідникових приладів. Однак така структура дозволяє побудувати просту модель, на основі якої можна здійснити аналіз найбільш важливих характеристик р-n-переходу.

У випадку різкого ступінчастого р-n-переходу робиться припущення , що концентрація акцепторів  $N_a$  в р- області і концентрація донорів  $N_d$  в n- області постійні та значно більші за власну концентрацію носіїв у даному напівпровідниковому матеріалі.

Будемо розглядати р-n- перехід у стані термодинамічної рівноваги, тобто при відсутності зовнішніх впливів, таких, як зовнішня напруга і т.д.

Припущення про термодинамічну рівновагу означає, що[7]:

- сумарні струми електронів та дірок в кожній точці напівпровідника дорівнюють 0 ( $I_n = I_p = 0$ ).

- квазірівень Фермі  $E_{Fn} = E_{Fp} = E_F$  є постійним для всього напівпровідника; квазіпотенціали  $\psi_n = \psi_p = \psi_F = const$ . При цьому енергетичні зони вигнуті та цілком заповнені. У всіх точках напівпровідника виконується співвідношення:  $np = n_i^2$ , де  $n, p$  відповідно концентрації електронів та дірок,  $n_i$ - концентрація носіїв у власному напівпровіднику.

Крім того, береться до уваги гіпотеза збіднення, яка полягає в тому, що весь напівпровідник можна розділити на область р-n-переходу та на дві нейтральні області. При цьому в області р-n-переходу нехтують носіями заряду (рис. 5.1).

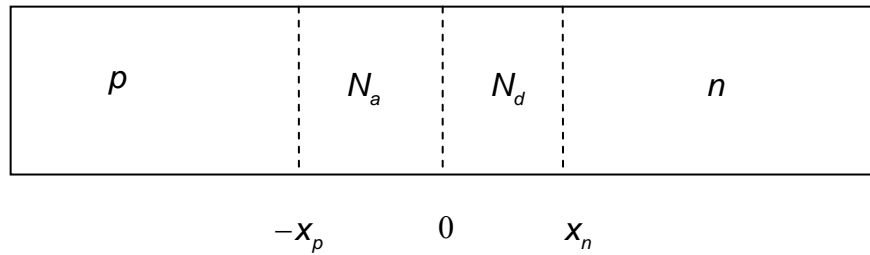


Рисунок 5.1 Одновимірна модель різкого p-n-переходу

У рівноважному стані густини струмів електронів і дірок дорівнюють нулю ( $J_n = J_p = 0$ ). Це твердження стосується і дифузійного, і дрейфового струмів. Виходячи з цього можна записати[7]:

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx} = 0, (5.1)$$

де  $q$ - елементарний заряд,  $\mu_n$ - рухливість електронів,  $E$ - напруженість електричного поля,  $D_n$ - коефіцієнт дифузії електронів,  $x$ -координата.

Тоді:

$$E = -\frac{D_n}{n\mu_n} \frac{dn}{dx}. (5.2)$$

З (5.2), використовуючи співвідношення Ейнштейна ( $D_n = \frac{kT}{q} \mu_n$ ) і рівність  $E = -d(\psi(x))/dx$  знаходимо:

$$\frac{d(\psi(x))}{dx} = \frac{U_T}{n} \frac{dn}{dx}, (5.3)$$

де  $\psi$ -електричний потенціал,  $k$ -постійна Больцмана,  $T$ -абсолютна температура, а  $U_T = kT/q$ -температурний потенціал.

Інтегруючи рівняння по  $x$  в межах від  $-x_p$  до  $x_n$ , маємо:

$$U_0 = \psi(x_n) - \psi(-x_p) = U_T \ln \left( \frac{n(x_n)}{n(-x_p)} \right), \quad (5.4)$$

Оскільки всі домішки вважаються іонізованими, то  $n(x_n) = N_d$  і  $n(-x_p) = n_i^2 / p(-x_p)$ ,  $p(-x_p) = N_a$ , звідки маємо:

$$U_0 = U_T \ln \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right), \quad (5.5)$$

Такий же вираз можна отримати з рівності  $J_p = 0$ .

Оскільки умови термодинамічної рівноваги виконано, то незадіяним залишається лише рівняння Пуасона. З урахуванням припущення про те, що всі домішки іонізовані та концентрація домішків значно більша за власну концентрацію носіїв маємо вираз[7]:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{d^2\psi(x)}{(dx)^2} = \frac{q}{\epsilon\epsilon_0} [p(x) - n(x) - N_d(x) + N_a(x)] \approx -\frac{q}{\epsilon\epsilon_0} [N_d(x) - N_a(x)], \quad (5.6)$$

де  $\epsilon$  - відносна діелектрична проникність матеріалу,  $\epsilon_0 = 8,849 \cdot 10^{-12}$  (Ф/м) - діелектрична стала.

На відрізку  $-x_p < x < 0$  із розв'язку рівняння (5.6) маємо:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{qN_a}{\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{x^2}{2} + xx_p \right) + C_1 \\ E &= -\frac{qN_a}{\epsilon\epsilon_0} (x + x_p), \end{aligned} \quad (5.7)$$

На відрізку  $0 \leq x \leq x_n$  із розв'язку рівняння (5.6) маємо:

$$\psi(x) = -\frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( \frac{x^2}{2} + xx_n \right) + C_2$$

$$E = -\frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0} (x_n - x), \quad (5.8)$$

Величина  $E$  максимальна при  $x = 0$ . Виходячи з (5.7, 5.8):

$$E_m = -\frac{qN_a}{\varepsilon\varepsilon_0} x_p = -\frac{qN_d}{\varepsilon\varepsilon_0} x_n, \quad (5.9)$$

Звідки

$$N_a x_p = N_d x_n, \quad (5.10)$$

що є умовою електричної нейтральності переходу.

У відповідності до рис. (5.1) товщина збідненого слою р-п-переходу:

$$W = x_p + x_n, \quad (5.11)$$

Оскільки при  $x = 0$  потенціал  $\psi$  повинен бути неперервним, то  $C_1 = C_2 = C$ . Використовуючи це на основі (5.4, 5.7, 5.8, 5.10, 5.11) маємо[7]:

$$W = \sqrt{\left[ \frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{q} \left( \frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) U_0 \right]}, \quad (5.12)$$

### Завдання

1. Отримати у викладача вхідні дані для виконання роботи.
2. Розрахувати розподіл напруженості електричного поля у р-п-переході. Розрахувати  $U_0$  та  $E_m$ .

- Зобразити графічно розподіл напруженості електричного поля у р-n-переході.
- Визначити ширину р-n-переходу.

### **Додаткове завдання**

- Розрахувати розподіл потенціалу у р-n-переході.
- Зобразити графічно розподіл потенціалу у р-n-переході.

### **Довідкові дані**

Параметр	Ge	Si	GaAs
Відносна діелектрична проникність	16	12	13
Концентрація $n_i$ , $\text{см}^{-3}$ при $T = 300\text{K}$	$2,5 \cdot 10^{13}$	$1,5 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^6$
Рухливість електронів $\mu_n$ , $\text{см} \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ при $T = 300\text{K}$	3800	1300	8500
Рухливість дірок $\mu_p$ , $\text{см} \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ при $T = 300\text{K}$	1800	500	450
Коефіцієнт дифузії електронів $D_n$ , $\text{см}^2/\text{с}$	99	34	-
Коефіцієнт дифузії дірок $D_p$ , $\text{см}^2/\text{с}$	47	13	-

### **Контрольні запитання**

- Які припущення використовуються в моделі різкого ступінчастого р-n-переходу.
- Запишіть вирази для густин струмів у стані рівноваги.
- Запишіть рівняння для напруженості електричного поля р-n-переходу у стані рівноваги.
- Запишіть співвідношення Ейнштейна.
- Запишіть рівняння Пуассона.

## **Порядок оформлення і захисту робіт**

### ***Зміст звіту***

- 1) Номер роботи.
- 2) Варіант.
- 3) Завдання по роботі згідно варіанту.
- 4) Теоретичні відомості, необхідні для виконання роботи.
- 5) Лістинг програми та результати обчислень згідно завдання.

### ***Порядок захисту робіт***

Захист робіт відбувається після виконання всіх робіт та отримання у викладача допуску до захисту. Захист проводиться на основі опитування по матеріалу даного посібника згідно переліку контрольних запитань, наведеного у посібнику.

### Список рекомендованої літератури.

1. Пирс К., Адамс А., Кац Л., Цай Дж., Сейдел Т., Макгиллис Д. Технология СБИС: В 2-х кн. Кн.1 Пер. с англ./ под ред. С. Зи. – М.: Мир, 1986. – 404 с.
2. Барыбин А.А., Сидоров В.Г. Физико-технологические основы электроники. – СПб.: Издательство «Лань», 2001. – 272 с. – ISBN 5-8114-0369-0.
3. Прокопенко Ю.В., Татарчук Д.Д., Казміренко В.А. Обчислювальна математика: Навч. посіб. – К.: ІВЦ „Видавництво ”Політехніка” ”, 2003.– 120 с.
4. Бубенников А.Н., Садовников А.Д. Физико-технологическое проектирование биполярных элементов кремниевых БИС. – М.: Радио и связь, 1991. – 288 с.– ISBN 5-256-00739-4.
5. Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем: Учеб. Пособие для спец. ” Физика и технология материалов и компонентов электронной техники”.– М.: Высш. школа, 1989 – 320 с. – ISBN 5-06-000123-7.
6. Автоматизация проектирования технологических процессов изготовления БИС: Учеб. пособие /А.И.Петренко, Ю.С.Синекоп, Э.Бонат, М.Б. Погребинский, В.Н. Щеткин. – К.: УМК ВО, 1988. – 188 с.
7. Росадо Л. Физическая электроника и микроэлектроника. Под ред. В.А. Терехова. – М.: Высш. Шк., 1991. – 351 с.– ISBN 5-06-000820-7.