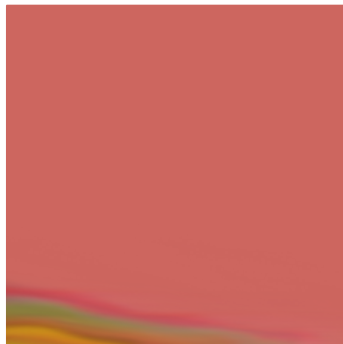
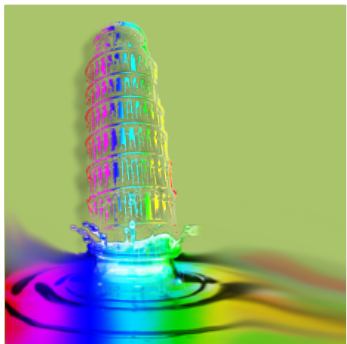
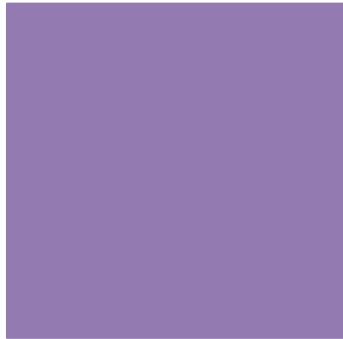


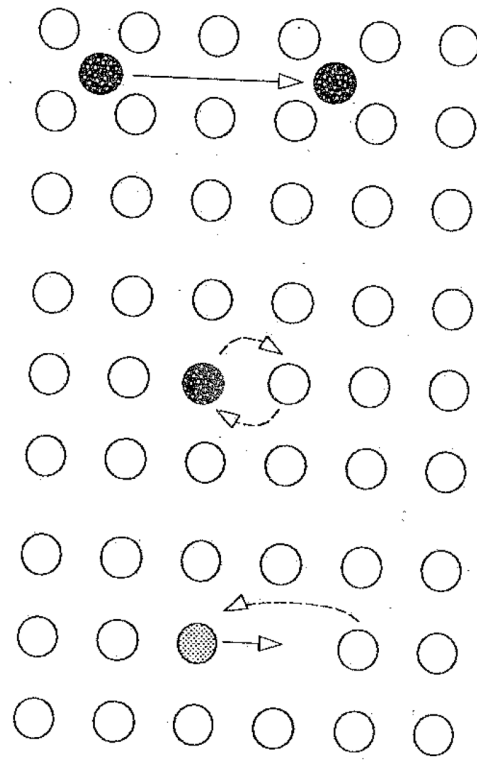
Diffusione termica

G. Vozzi



Meccanismi di diffusione termica

- **Diffusione interstiziale:** l'impurezza salta da un sito interstiziale ad un altro. Energia di attivazione bassa (0.5-1.5 eV)
- **Diffusione sostituzionale a scambio diretto:** l'impurezza migra nel reticolo scambiandosi con gli atomi del reticolo. Evento poco probabile con alta energia di attivazione
- **Diffusione sostituzionale tramite vacanze:** è un evento molto probabile con energia di attivazione tra 3 e 4 eV, che si ottiene in seguito alla formazione di vacanze
- **Diffusione sostituzionale tramite interstizi:** si ha lo scambio tra una impurezza sostituzionale ed un atomo di silicio interstiziale. E' un evento ad alta energia

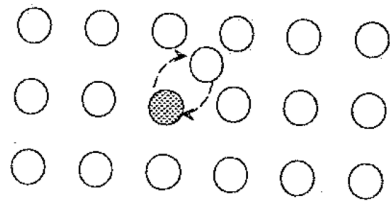


Interstiziale

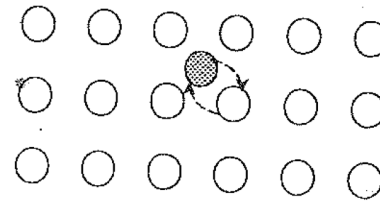
Sostituzionale
(scambio diretto)

Sostituzionale
(tramite vacanze)

Sostituzionale (tramite interstizi)



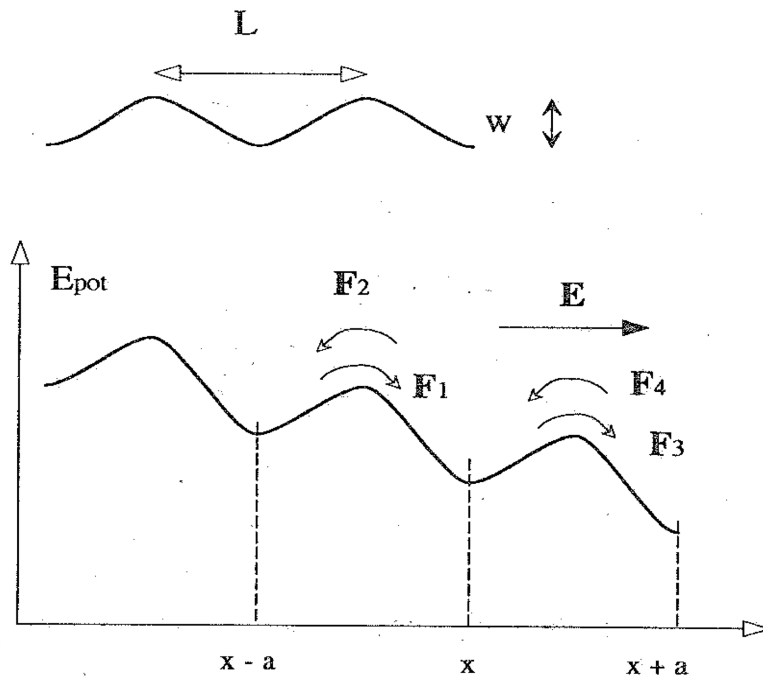
fase 1



fase 2

Calcolo dei flussi

Qualunque sia il meccanismo di diffusione le impurezze superano un profilo energetico che rispetta la periodicità del reticolo cristallino



L è la costante reticolare (qualche °A) e w la ampiezza della barriera energetica.

Supponiamo di avere un flusso di impurezze cariche positive che quindi si muovono sotto l'azione del campo elettrico E . Per la legge di Fick posso scrivere:

$$\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2} \right) \right] \cdot v$$

$$F_1 = aC(x) \cdot e$$

$$\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2} \right) \right] \cdot v$$

$$F_2 = aC(x-a) \cdot e$$

$$\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2} \right) \right] \cdot v$$

$$F_3 = aC(x) \cdot e$$

$$\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2} \right) \right] \cdot v$$

$$F_4 = aC(x+a) \cdot e$$

Calcolo dei flussi

$$F_1 = aC(x) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2}\right)\right]} \cdot v$$

$$F_2 = aC(x - a) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2}\right)\right]} \cdot v$$

$$F_3 = aC(x) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2}\right)\right]} \cdot v$$

$$F_4 = aC(x + a) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2}\right)\right]} \cdot v$$

- $aC(x)$ = densità di impurezze nel sito x
- Il termine esponenziale mi da la probabilità di superare al barriera energetica
- v è la frequenza di tentativi di salto

Approssimiamo

$$C(x + a) \cong C(x) \pm a \frac{\partial C}{\partial x}$$

Il flusso in x è dato da

$$F = \frac{1}{2} \left[(F_1 - F_2) + (F_3 - F_4) \right]$$

Calcolo dei flussi

$$F_1 = aC(x) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2}\right)\right] \cdot v}$$

$$F = \frac{1}{2} \left[(F_1 - F_2) + (F_3 - F_4) \right]$$

$$F_2 = aC(x - a) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w - \frac{aE}{2}\right)\right] \cdot v}$$

$$F_3 = aC(x) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2}\right)\right] \cdot v}$$

$$F_4 = aC(x + a) \cdot e^{\left[-\frac{q}{KT} \cdot \left(w + \frac{aE}{2}\right)\right] \cdot v}$$

Il flusso in x è dato da

$$\begin{aligned} F &= 2vaC(x)e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \operatorname{senh}\left(\frac{qaE}{2KT}\right) - a^2v \frac{\partial C}{\partial x} e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \operatorname{cosh}\left(\frac{qaE}{2KT}\right) \\ &\approx \frac{va^2Eq}{KT} C(x)e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} - a^2v \frac{\partial C}{\partial x} e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \\ &= -D + \mu EC(x) \end{aligned}$$

Calcolo dei flussi

$$\begin{aligned} F &= 2vaC(x)e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \sinh\left(\frac{qaE}{2KT}\right) - a^2v \frac{\partial C}{\partial x} e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \cosh\left(\frac{qaE}{2KT}\right) \\ &\approx \frac{va^2Eq}{KT} C(x)e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} - a^2v \frac{\partial C}{\partial x} e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} \\ &= -D \frac{\partial C}{\partial x} + \mu EC(x) \leftarrow \text{Termine di trascinamento} \end{aligned}$$

Dove abbiamo la definizione microscopica della diffusività

$$D = a^2 v e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)}$$

Mentre la mobilità data dalla legge di Einstein è:

$$\mu = \frac{va^2q}{KT} e^{\left(-\frac{qw}{KT}\right)} = \frac{D}{q}$$

Calcolo dei flussi

Le ipotesi fatte sono:

- Il flusso in x è la media dei flussi adiacenti
- La probabilità di saltare la barriera è proporzionale all'esponenziale negativo dell'ampiezza della barriera

Se le cariche sono negative cambia il segno del termine di trascinamento

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} \pm \mu EC(x)$$

Se il campo elettrico non c'è abbiamo la legge di Fick pura

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

Equazione di continuità

La variazione nel tempo nel volume $A dx$ della densità di atomi di impurezze è pari alla differenza tra flusso entrante e flusso uscente:

$$A dx \frac{\partial C}{\partial t} = A(F(x) - F(x + dx))$$

Approssimo:

$$F(x + dx) \approx F(x) + dx \frac{\partial F}{\partial x}$$

Quindi:

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

Equazione di continuità che in forma generale è:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla F$$

Seconda legge di Fick

Combiniamo la prima legge di Fick con l'equazione di continuità

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

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Fasi del drogaggio

- **Pre-deposizione** in cui le impurezze sono introdotte nello strato superficiale del semiconduttore
- **Drive-in** il cui le impurezze sono fatte diffondere nel semiconduttore

Sorgenti del drogaggio

- **Sorgente solida:** l'impurezza viene introdotta nel gas, facendo fluire azoto su di un solido mantenuto in condizioni di evaporazione, sono di solito usati come ossidi di impurezza (anidride fosforica P_2O_5 , anidride borica B_2O_3 , Triossido di arsenico As_2O_3 , Ossido di antimonio Sb_2O_3)
- **Sorgente Liquida:** il gas inerte viene fatto gorgogliare attraverso un'ampolla tenuta termostata; in genere si usa ossicloruro di fosforo $POCl_3$ e tribromuro di boro BBr_3
- **Sorgente gassosa:** si usa il gas direttamente come diborano B_2H_6 , fosfina PH_3 e arsina AsH_3

Si cerca tenere la concentrazione del drogante sempre pari a quella massima di solubilità nel semiconduttore

Modellistica della Pre-deposizione

Parto dalla seconda legge di Fick e so che

$$C(0,t)=C_s$$

$$C(\infty,t)=0$$

$$C(x,0)=0$$

Risolvendo tale equazione ho:

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

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-a^2} da$$

Modellistica della Pre-deposizione

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

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-a^2} da$$

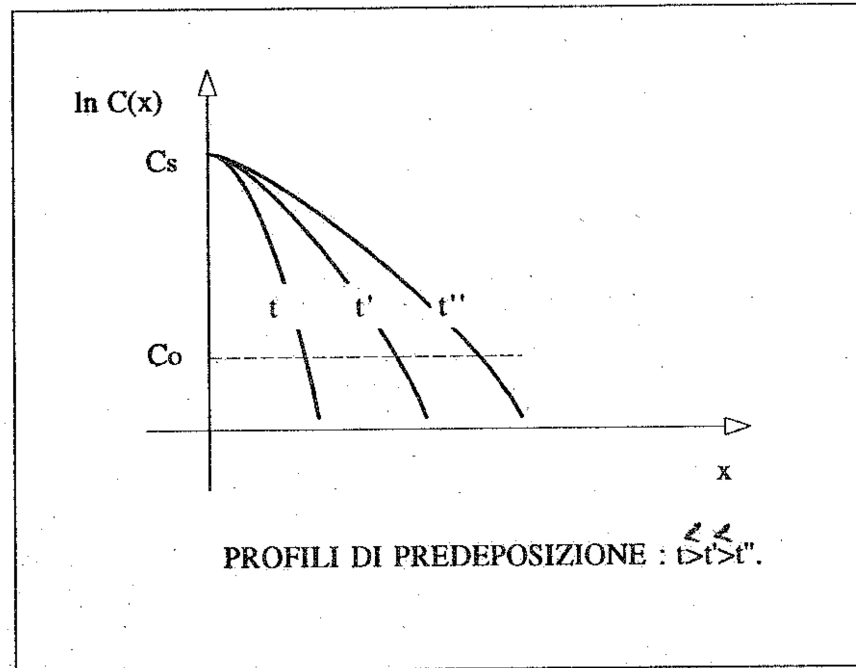
Per calcolare la quantità di drogante introdotta (Q)

$$Q = \int_0^\infty C(x,t) dx = C_s \int_0^\infty \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) dx = C_s \frac{2\sqrt{Dt}}{\sqrt{\pi}}$$

$$2\sqrt{Dt}$$

Lunghezza di diffusione in genere varia tra 0,1 e 0,2 micrometri

Profili di Pre-deposizione



Modellistica del Drive-in

Il drive-in è eseguito in atmosfera ossidante ed in assenza della sorgente drogante.

L'ossido che si forma limita la fuga di drogante.

In prima istanza si trascura l'ipotesi di effetti di redistribuzione tra semiconduttore e drogante.

Ipotesi di lavoro:

$$C(x, 0) = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt_0}}\right)$$

$$C(\infty, t) = 0$$

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$$

t_0 è il tempo di pre-deposizione

La terza condizione esprime la condizione di flusso nullo per effetto dell'ossido

Modellistica del Drive-in

Si suppone che la lunghezza di diffusione della fase di drive-in è di gran lunga maggiore di quella di pre-deposizione

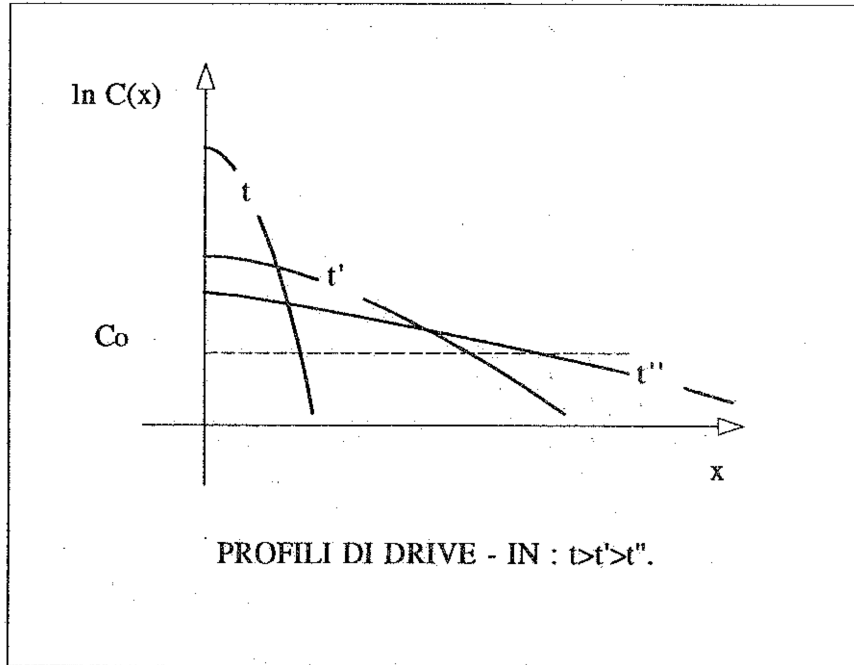
$$\left[\sqrt{Dt} \right]_{DI} \gg \left[\sqrt{Dt} \right]_{Pre\ ed}$$

Il profilo di drogante iniziale è impulsivo

$$C(x, 0) = Q\delta(x)$$

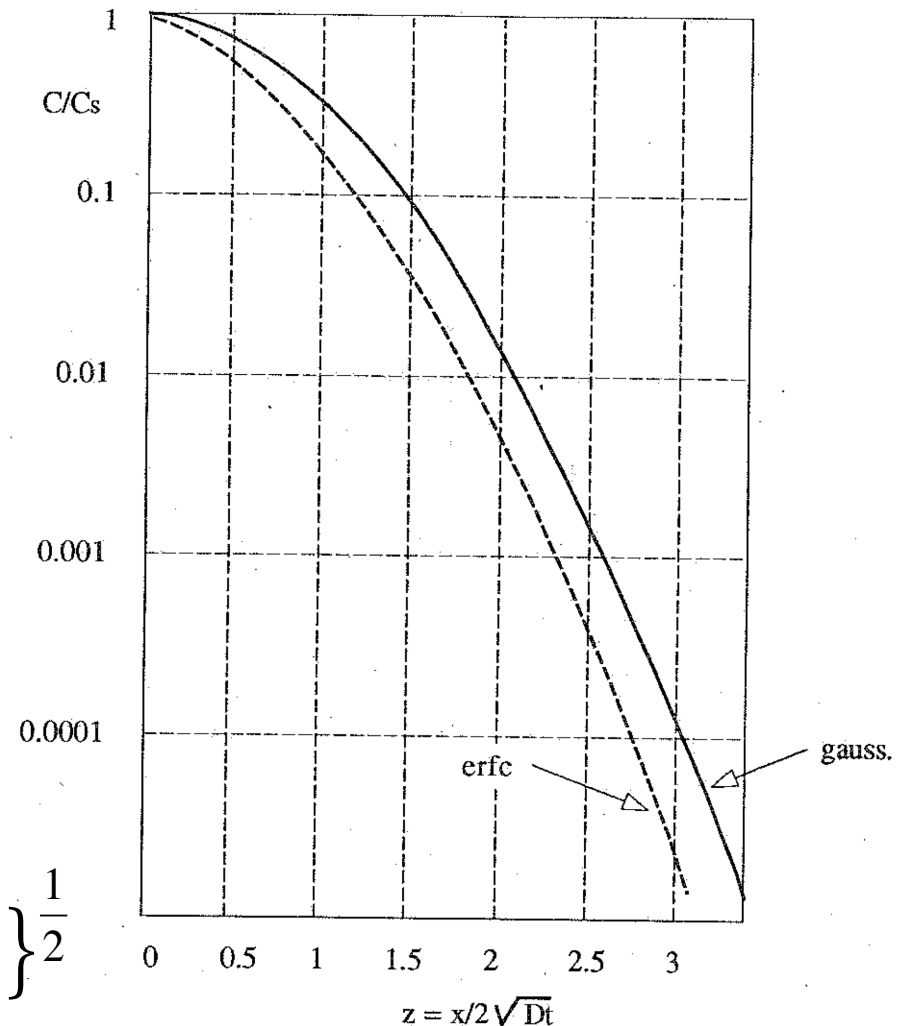
$$C(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)} \quad \text{Il profilo è di tipo gaussiano}$$

Profili di Drive-in



Se si effettuano n drive-in consecutivi, la concentrazione finale avrà sempre profilo gaussiano, ma la lunghezza di diffusione sarà data dal valore quadratico medio delle Singole lunghezze

$$L_{eq} = \left\{ \sum_{i=1}^n L_i^2 \right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ \sum_{i=1}^n 4D_i t_i \right\}^{\frac{1}{2}}$$



Distribuzione del drogante nell'ossido e nel semiconduttore

I modelli per ora sviluppati si basano sul presupposto che siamo in un'atmosfera ossidante e che l'ossido sia impermeabile al drogante.

In realtà dobbiamo tener conto del coefficiente di segregazione tra silicio e ossido

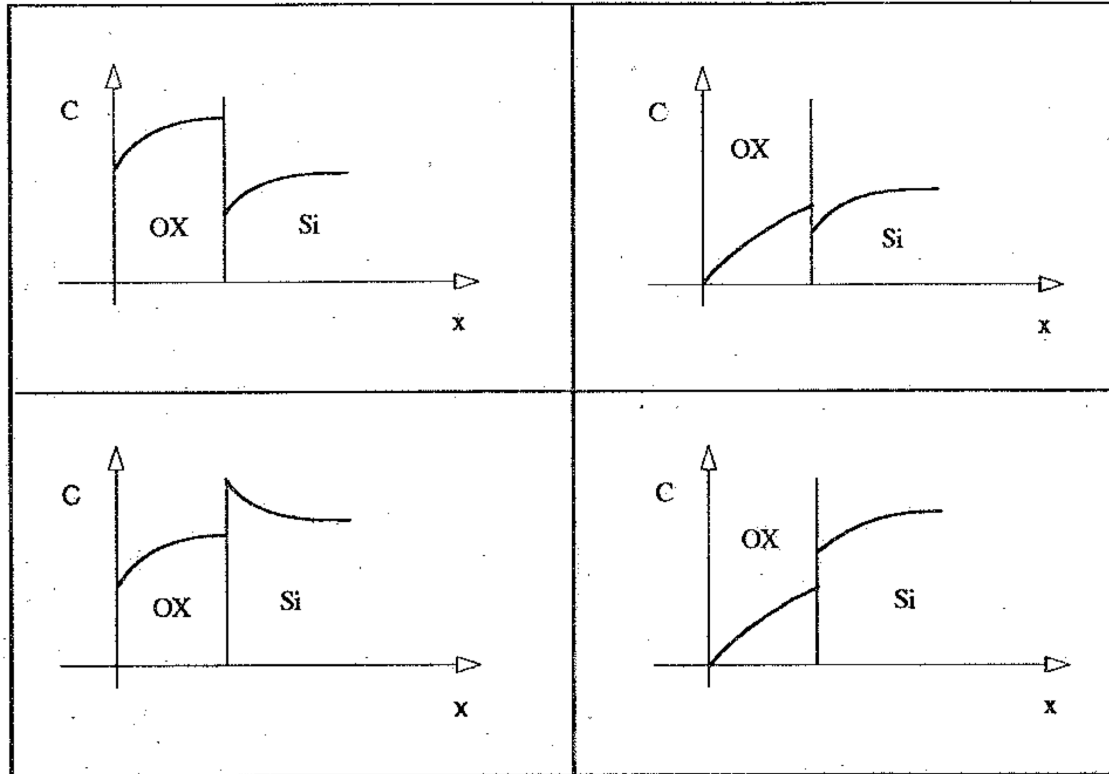
$$k = \frac{C_{Si}}{C_{SiO_2}}$$

$K > 1$ se si usano impurezze di tipo n

$K < 1$ se si usano impurezze di tipo p

Per avere un'idea più reale dei profili che si creano bisogna quindi tener conto della segregazione e della diffusione

Distribuzione del drogante nell'ossido e nel semiconduttore



bassa D_{ox}

alta D_{ox}