

О. О. НАГАЙЧЕНКО**ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОПРИЛАДІВ****НАУКОВИЙ КЕРІВНИК О. С. МЕЛЬНИК**

У статті розглянуто фізико-математичну модель двостадійної дифузії донорних і акцепторних домішок у кремнієвих напівпровідниках для створення двох $p-n$ – переходів у нанорозмірних структурах. Враховано температурну залежність коефіцієнтів та енергії активації дифузії, тривалості дифузійних циклів, концентрацію домішок у вхідному кремнії, поверхневі концентрації та граничну розчинність легуючих речовин. Проведено чисельне моделювання одновимірної розподілу концентрацій із визначенням точок інверсії типу провідності. Розраховано глибини залягання емітерного та колекторного переходів, а також ширину бази з урахуванням повторного перерозподілу домішок. Моделювання проведено в середовищі MathCAD. Побудовано профілі легування після кожної стадії термічної обробки. Оцінено вплив технологічних параметрів на формування електричного поля в базовій області. Показано залежність глибини $p-n$ – переходів від часу та температури окремих стадій дифузії. Проведено серію розрахунків для різних геометричних масштабів: 100 нм, 50 нм, 20 нм. Визначено зміни ширини бази залежно від режимів загону й розгону. Побудовано криві розподілу концентрацій для кожного випадку. Оцінено коефіцієнт підсилення за струмом у схемі з загальним емітером. Наведено числові дані для типових технологічних параметрів. Запропонована модель може бути використана для прогнозування параметрів транзистора до етапу фізичної реалізації, а також для підбору оптимальних умов формування базової області в мікро- і нанoeлектронних структурах.

Ключові слова: біполярний нанотранзистор, дифузія домішок, $p-n$ – перехід, розподіл концентрації домішок, ширини бази, MathCAD, коефіцієнт підсилення струму, глибина залягання емітерного та колекторного переходів.

О. О. НАГАЙЧЕНКО**PHYSICO-MATHEMATICAL MODELING OF SEMICONDUCTOR NANODEVICES****SCIENTIFIC SUPERVISOR O. S. MELNYK**

The article presents a physico-mathematical model of two-stage diffusion of donor and acceptor impurities in silicon semiconductors for the formation of two $p-n$ – junctions in nanoscale structures. The model takes into account the temperature dependence of diffusion coefficients and activation energy, duration of diffusion cycles, impurity concentration in the initial silicon, surface concentrations, and the solubility limit of dopants. One-dimensional concentration profiles were simulated numerically, with identification of conductivity type inversion points. The depths of the emitter and collector junctions and the base width were calculated, considering secondary redistribution of dopants. The simulation was carried out using the MathCAD environment. Doping profiles were constructed for each stage of thermal treatment. The influence of technological parameters on the formation of the electric field in the base region was evaluated. The dependence of the junction positions on the time and temperature of individual diffusion stages was demonstrated. A series of simulations was conducted for various geometric scales: 100 nm, 50 nm and 20 nm. The change in base width under different pre-deposition and drive-in regimes was determined. Concentration distribution curves were plotted for each case. The current gain in a common-emitter configuration was evaluated. Numerical data were presented for typical technological parameters. The proposed model can be used to predict transistor parameters prior to fabrication and to justify the choice of optimal conditions for base region formation in micro- and nanoelectronic structures.

Key words: bipolar nanotransistor, impurity diffusion, $p-n$ – junction, impurity concentration distribution, base width, MathCAD, current gain, emitter and collector junction depth.

Вступ. Сучасні стимули розвитку *мікроелектроніки* вимагають зменшення розмірів *напівпровідникових приладів*, зокрема *біполярних транзисторів*, що дозволяє підвищити їхню швидкість, зменшити енергоспоживання та збільшити функціональну щільність інтегральних схем. Зі зменшенням геометричних розмірів активних елементів критично зростає вплив технологічних факторів на їхні електричні характеристики. Одним із ключових аспектів проектування є точне моделювання процесів дифузійного легування, які визначають положення $p-n$ – переходів та ширину базової області. Формування заданого профілю домішки в умовах нанометрових масштабів потребує використання *математичних моделей* для оптимізації технологічних режимів.

Постановка задачі. Метою дослідження є *чисельне моделювання процесу двостадійної дифузії акцепторних і донорних домішок* у кремнієвому напівпровіднику для формування *емітерного та колекторного $p-n$ – переходів* у біполярному нанотранзисторі. Завданням дослідження є побудова одновимірної моделі розподілу концентрацій акцепторних і донорних домішок з урахуванням температурної залежності *коефіцієнтів дифузії*, граничної розчинності, часу та послідовності термічної обробки. Необхідно визначити глибину залягання $p-n$ – переходів, ширину бази та оцінити вплив технологічних режимів загону і розгону на формування легуваних областей. Також передбачається розрахунок *коефіцієнта підсилення* за струмом у схемі з загальним емітером для типових геометричних масштабів наноструктур.

Математична модель. У формуванні структури біполярного транзистора необхідно створити два $p-n$ – переходи. Схема дискретного вертикального біполярного транзистора, сформованого за стандартною планарною технологією, показана на рис. 1. Такий транзистор можна сформувати, наприклад, якщо в кремній ввести спочатку акцепторну домішку, а потім донорну.

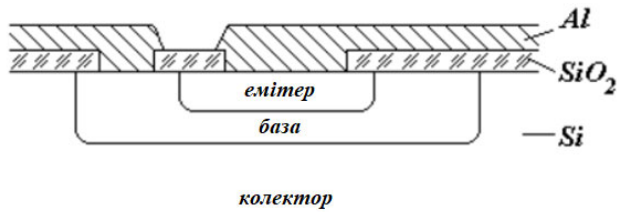


Рис. 1 – Схема біполярного транзистора, сформованого за стандартною планарною технологією.

Перший метод, хоча й відрізняється простотою, не допускає роздільного регулювання концентрації домішок або температури. Тому зазвичай віддають перевагу другому методу, що допускає роздільне регулювання концентрації та температури. Спочатку в напівпровідник вводять домішку (донор), що повільно дифундує, інакше буде важко керувати розподілом домішки (акцептора), що швидко дифундує.

Для кращого контролю процесу потрібно, щоб обидва домішкових елементи були присутні в напівпровіднику тільки під час другої дифузії. У тому випадку, коли можна задавати концентрації незалежно від температури, проведення обох дифузійних циклів за умови різних температур забезпечує більшу гнучкість процесу. Навіть коли коефіцієнти дифузії донора й акцептора однакові, можна управляти процесом шляхом різної тривалості першого і другого циклу.

Базову дифузію зазвичай здійснюють у дві стадії: перша – стадія загону, друга – стадія розгону. Стадію загону проводять протягом короткого часу, у цьому випадку кількість домішки суворо регламентується.

Розподіли концентрації домішок (1), (3), (5), (6) та температурна залежність коефіцієнта дифузії (7) описані згідно з моделлю Grove A. S., Leistiko O., Sah C. T. [1].

Розподіл концентрації домішки описується *erfc* – функцією:

$$C_1(x) = C_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_1 \cdot t_1}}. \quad (1)$$

Поверхнева концентрація домішки Q (2) розрахована за моделлю Fair R. B. [2]:

$$Q = C_0 \cdot \sqrt{\pi \cdot D_1 \cdot t_1}, \quad (2)$$

де Q – поверхнева концентрація введеної домішки; C_0 – поверхнева концентрація домішки в процесі загону; D_1 – коефіцієнт дифузії домішки під час загону; t_1 – коефіцієнт дифузії домішки в процесі загону, і водночас підпорядковується експоненціальним розподілам.

Другу стадію проводять більш тривалий час, а розподіл домішки:

$$C_2(x) = \frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D_2 \cdot t_2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot D_2 \cdot t_2}\right), \quad (3)$$

де D_2 – коефіцієнт дифузії домішки в процесі розгону; t_2 – час розгону домішки.

Глибина залягання $p-n$ – переходу (4) визначена за методом експоненційного розподілення домішки, наведеним у [3]:

$$X_i = 2\sqrt{D_2 \cdot t_2} \cdot \sqrt{\ln\left(\frac{Q}{C_s} \sqrt{\pi \cdot D_2 \cdot t_2}\right)}, \quad (4)$$

де C_s – концентрація домішки у вихідному напівпровіднику.

Дифузію емітерної області проводять в одну стадію, зазвичай із джерела з постійною поверхневою концентрацією, тому розподіл домішки описується *erfc* – функцією:

$$C_3(x) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_3 \cdot t_3}}, \quad (5)$$

де D_3 – коефіцієнт дифузії емітерної домішки; t_3 – час дифузії емітерної домішки.

Глибина залягання емітерного $p-n$ – переходу визначається точкою інверсії типу провідності. Для розрахунку глибини залягання $p-n$ – переходу необхідно розв'язати кінетичне рівняння:

$$C_3(x) + C_s = C_2(x). \quad (6)$$

Точний розрахунок глибини залягання $p-n$ – переходу в аналітичному вигляді дуже складний, тому рівняння (6) розв'язується чисельним способом.

Температурна залежність коефіцієнта дифузії має вигляд:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (7)$$

де D_0 – постійна, чисельно рівна коефіцієнту дифузії за умови нескінченно високої температури, $\text{см}^2/\text{с}$; E – енергія активації дифузії, еВ ; $k = 8,625 \cdot 10^{-5} \text{ еВ/К}$ – *постійна Больцмана*.

Коефіцієнт дифузії As при 1200 С	$\text{DoAs} := 24 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$		
Коефіцієнт дифузії В при 1200 С	$\text{DoB} := 5.1 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}$		
Енергія активації дифузії для As	$\text{EaAs} := 4.08 \text{ еВ}$		
Енергія активації дифузії для В	$\text{EaB} := 3.7 \text{ еВ}$		
Поверхнева концентрація As	$\text{No}_1 := 3 \cdot 10^{19} \frac{1}{\text{см}^{-3}}$		
Поверхнева концентрація В	$\text{No}_3 := 10^{21} \frac{1}{\text{см}^{-3}}$		
Концентрація домішки у вихідному Si	$\text{Nc} := 10^{17} \frac{1}{\text{см}^{-3}}$	Загонка миш'яку	$T_1 := 273 + 1000 \text{ К}$
Максимальна розчинність As у Si	$\text{MA}_s := 2 \cdot 10^{21} \frac{1}{\text{см}^{-3}}$	Розгін миш'яку	$t_1 := 60 \cdot 15 \text{ с}$
Максимальна розчинність В у Si	$\text{MB} := 4 \cdot 10^{20} \frac{1}{\text{см}^{-3}}$		$T_2 := 273 + 1100 \text{ К}$
Постійна Больцмана	$k := 8.625 \cdot 10^{-5} \frac{\text{еВ}}{\text{К}}$	Дифузія бору	$t_2 := 60 \cdot 60 \text{ с}$
			$T_3 := 273 + 1100 \text{ К}$
			$t_3 := 60 \cdot 5 \text{ с}$

Рис. 2 – Константи, які ми задаємо в середовищі MathCad.

транзистора; p_B – рівноважна щільність неосновних носіїв на основі.

Значимо, що $\gamma < 1$ і $\alpha_T < 1$, а величини, що доповнюють їх до 1, пропорційні електронному струму, що з базового контакту. У біполярному транзисторі з шириною бази, меншою $0.1L_B$, $\alpha_T > 0.995$, коефіцієнт підсилення по струму майже повністю визначається ефективністю емітера. За умови, що $\alpha_T \sim 1$,

$$h_{FE} = \frac{\gamma}{1-\gamma} = \frac{p_B D_B I_E}{L_E D_E L_B} \text{cth}\left(\frac{W}{L_B}\right). \quad (10)$$

Моделювання в середовищі MathCad. Задаємо константи та формули в MathCad для моделювання процесу дифузії нанорозмірного транзистора (рис. 2, 3).

$$D(T) := \text{DoB} \cdot \exp\left(-\frac{\text{EaB}}{k \cdot T}\right)$$

$$N1(x) := \begin{cases} \left[\text{No}_1 \cdot \left(1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D(T_1) \cdot t_1}}\right) \right) \right] & \text{if } \text{No}_1 < \text{MB} \\ \left[\text{MB} \cdot \left(1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D(T_1) \cdot t_1}}\right) \right) \right] & \text{otherwise} \end{cases}$$

a

$$Q := \text{Nc} \cdot \sqrt{\pi \cdot D(T_2) \cdot (t_2 + t_3)}$$

$$N2(x) := \frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot D(T_2) \cdot (t_2 + t_3)}} \cdot \exp\left[-\frac{x^2}{4 \cdot [D(T_2) \cdot (t_2 + t_3)]}\right]$$

$$D(T_2) = 1.375 \times 10^{-13}$$

б

$$DAs(T) := \text{DoAs} \cdot \exp\left(-\frac{\text{EaAs}}{k \cdot T}\right)$$

$$D3 := DAs(T_3) \quad D3 = 2.614 \times 10^{-14}$$

$$N3(x) := \begin{cases} \left[\text{No}_3 \cdot \left(1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{DAs(T_3) \cdot t_3}}\right) \right) \right] & \text{if } \text{No}_3 < \text{MA}_s \\ \left[\text{MA}_s \cdot \left(1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{DAs(T_3) \cdot t_3}}\right) \right) \right] & \text{otherwise} \end{cases}$$

в

Рис. 3 – Задаємо в середовищі MathCad формули для розрахунку стадій дифузії: *a* – розрахунок концентрації домішкових атомів, уведених під час загону; *б* – друга стадія (розгону); *в* – третя стадія – стадія дифузії.

Після моделювання в середовищі MathCad отримано розподіли концентрації домішок по глибині пластини для різних стадій дифузії та глибини залягання емітерного та колекторного переходу для нанорозмірних транзисторів 100, 50, 20 нм (рис. 4 – 6).

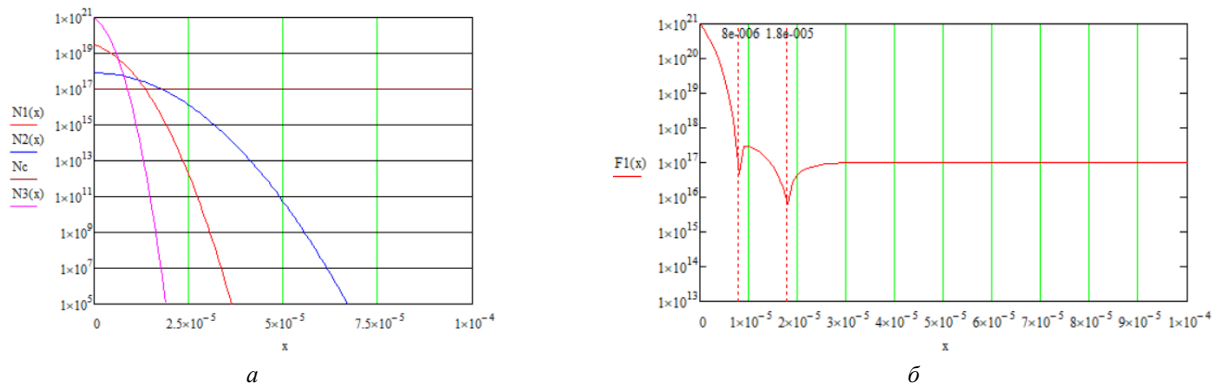


Рис. 4 – Результати моделювання в середовищі MathCad для 100 нм нанотранзистора коли $t_2 = 175$ с та $t_2 = 100$ с :

a – розподіл концентрації домішок по глибині пластини для різних стадій дифузії;
 b – глибина залягання емітерного та колекторного переходу.

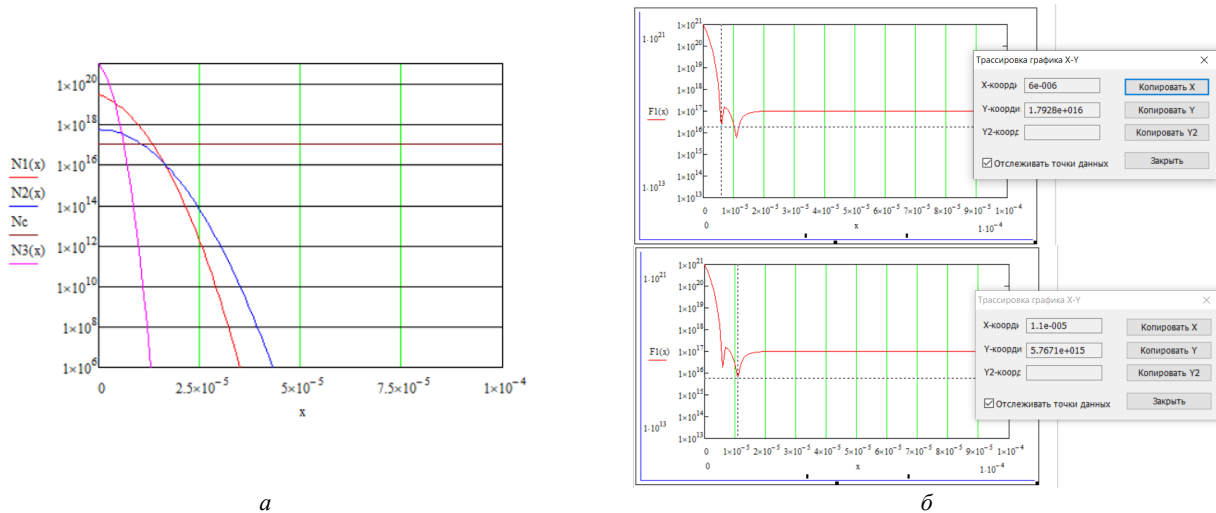


Рис. 5 – Результати моделювання в середовищі MathCad для 50 нм нанотранзистора коли $t_2 = 75$ с та $t_3 = 50$ с :

a – розподіл концентрації домішок по глибині пластини для різних стадій дифузії;
 b – глибина залягання емітерного та колекторного переходу.

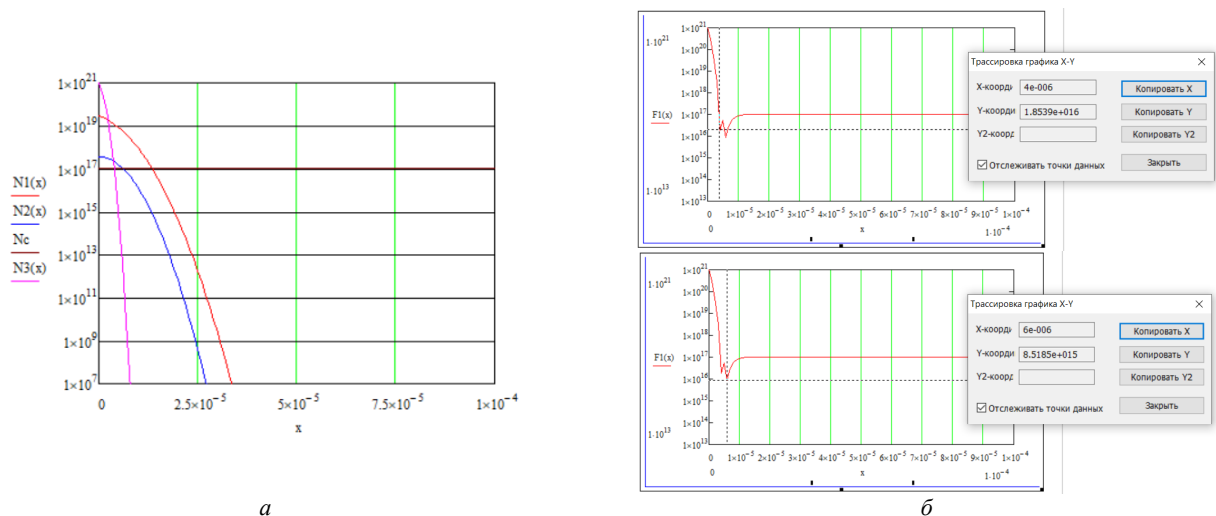


Рис. 6 – Результати моделювання в середовищі MathCad для 20 нм нанотранзистора коли $t_2 = 35$ с та $t_3 = 20$ с :

a – розподіл концентрації домішок по глибині пластини для різних стадій дифузії;
 b – глибина залягання емітерного та колекторного переходу.

За допомогою формули (10) [4] розраховано статичний коефіцієнт підсилення струму у схемі із загальним емітером h_{FE} , коли початкові константи дорівнюють:

$$p_B = 1e^{13} \frac{1}{\text{см}^3}; \quad L_B = 1e^4 \text{ см}; \quad L_E = 2e^{-4} \text{ см}; \quad D_E = 24 \frac{\text{см}^2}{\text{с}}; \quad D_B = 5.1 \frac{\text{см}^2}{\text{с}};$$

$$I_E = 1 \text{ мА}; \quad W = 1 \text{ нм} - 1 \text{ мкм}, \text{ то}$$

$$h_{FE} = \frac{p_B D_B I_E}{L_E D_E L_B} \text{cth} \left(\frac{W}{L_B} \right).$$

Отже,

$$h_{FE} \text{ для } W = 10 \text{ нм}: 1.06e+21;$$

$$h_{FE} \text{ для } W = 20 \text{ нм}: 5.31e+20;$$

$$h_{FE} \text{ для } W = 50 \text{ нм}: 2.13e+20;$$

$$h_{FE} \text{ для } W = 100 \text{ нм}: 1.06e+20.$$

Графік залежності коефіцієнта підсилення транзистора від дози домішки, імплантованої в базу, наведено на рис. 7.

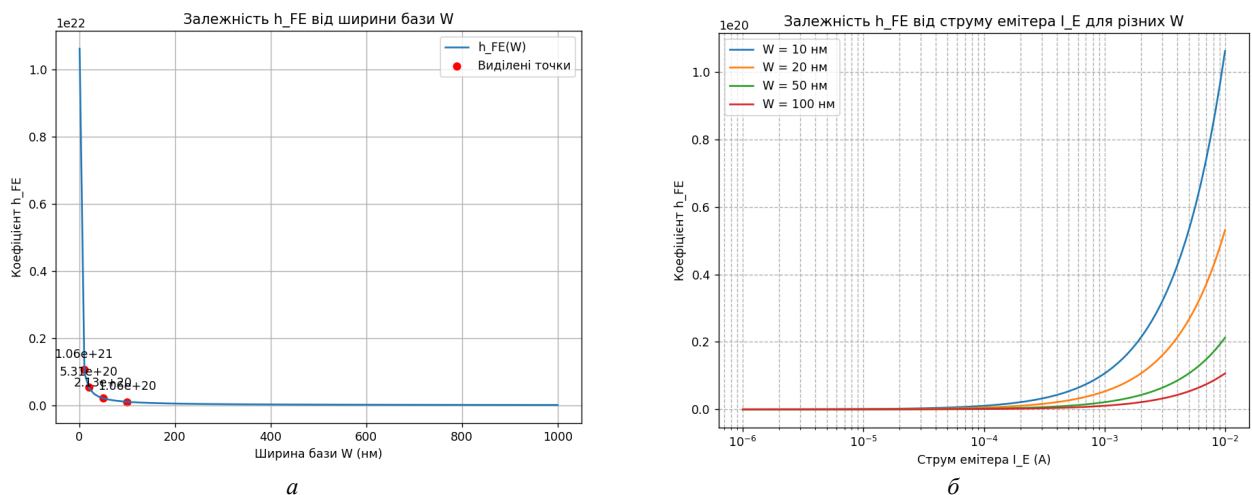


Рис. 7 – Залежність коефіцієнта підсилення транзистора від ширини бази:

a – залежність коефіцієнта підсилення транзистора від ширини бази $W = 1 \text{ нм} - 1 \text{ мкм}$;

б – залежність коефіцієнта підсилення транзистора від ширини бази $W = 100, 50, 20, 10 \text{ нм}$.

Перспективи подальших досліджень. Отримані результати фізико-математичного моделювання двостадійного процесу дифузії домішок у нанорозмірних структурах біполярних транзисторів відкривають низку перспективних напрямів для подальших наукових досліджень.

По-перше, доцільним є розширення моделі з урахуванням двовимірних і тривимірних ефектів дифузії, що набувають особливої ваги в умовах подальшого зменшення розмірів транзисторів. У таких масштабах неоднорідності розподілу домішок по площині та глибині суттєво впливають на електричні характеристики приладів, а тому врахування просторової анізотропії дифузії дозволить отримати більш точні прогнози.

По-друге, перспективним напрямом є врахування ефектів рекомбінації, генерації та електростатичного екранування в моделі. Це дозволить описати динаміку носіїв заряду під час технологічних стадій і в робочому режимі транзистора, що є важливим для подальшого переходу від топологічного до повнофункціонального електрофізичного моделювання.

По-третє, доцільно здійснити інтеграцію отриманих результатів у комплексні САПР-системи (CAD), зокрема шляхом розробки програмних модулів для передбачення параметрів $p-n$ – переходів на етапі проектування мікросхем. Це забезпечить практичне застосування моделі в умовах промислової мікро- та наноелектроніки.

Окрему увагу заслуговує розширення дослідження шляхом врахування напружених шарів, сегрегації та кластеризації домішок, що особливо актуально при високотемпературній обробці. Залучення даних із літератури щодо граничної розчинності та стабільності домішкових профілів дозволить модифікувати модель під складні фізико-хімічні умови.

Також перспективним є дослідження впливу іонної імплантації як альтернативного або комбінованого методу введення домішок. Порівняльний аналіз ефективності дифузії та імплантації в межах єдиної моделі надасть змогу обґрунтовано вибирати оптимальні технологічні підходи до формування базової області транзистора.

Крім того, подальші дослідження можуть бути спрямовані на вивчення деградаційних механізмів та надій-

ності нанопристроїв, зумовлених зміною профілю легування під впливом часу, температури та робочого навантаження. Це особливо актуально для застосування біполярних нанотранзисторів у відповідальних сферах, таких як авіоніка, космічна техніка та біомедичні пристрої.

З урахуванням вищевикладеного, подальший розвиток фізико-математичного моделювання біполярних наноприладів сприятиме створенню більш точних, надійних та ефективних напівпровідникових структур, орієнтованих на вимоги сучасної та перспективної наноелектроніки.

Висновки. Таким чином, у роботі успішно було проведено фізико-топологічне моделювання процесу формування біполярного транзистора з використанням дифузійних методів. Основні результати, отримані в ході роботи, можна підсумувати наступним чином:

1. Аналіз технології формування транзисторних структур.

Було розглянуто основні методи створення $p-n$ – переходу у кремнієвій підкладці за допомогою дифузійних процесів. Досліджено особливості послідовного введення домішок та їх вплив на характеристики транзистора.

2. Моделювання дифузійного процесу.

Використовуючи програмне середовище MathCad, проведено чисельне моделювання процесу дифузії домішок у напівпровідникову пластину. Досліджено залежність концентрацій донорних і акцепторних домішок від глибини залягання та вплив температурного режиму на кінцевий розподіл домішок.

3. Розрахунок параметрів біполярного транзистора.

Виконано розрахунки ширини базової області, глибини залягання колекторного та емітерного $p-n$ – переходу, що дозволило оцінити електрофізичні параметри отриманої структури. Визначено вплив часу та температури дифузії на глибину проникнення домішок.

4. Визначення оптимальних технологічних параметрів.

Було проведено серію експериментів, змінюючи час та температуру дифузії, що дозволило отримати оптимальні параметри для формування необхідної транзисторної структури. Результати показали, що контрольований вибір технологічних параметрів дає змогу досягти необхідних характеристик транзистора.

Список літератури

1. Grove A. S., Leistik O., Sah C. T. Redistribution of Acceptor and Donor Impurities during Thermal Oxidation of Silicon // *Journal of Applied Physics*. – 1964. – Vol. 35. – no. 9. – P. 2695 – 2701. DOI: 10.1063/1.1713810.
2. Fair R. B. Concentration Profiles of Diffused Dopants in Silicon. "Impurity Doping Processes in Silicon". – Amsterdam: North-Holland Publishing, 1981. – P. 315 – 442.
3. Plummer J. D., Deal M. D., Griffin P. B. *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling*. – Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. – 856 p.
4. Sze S. M., Ng Kwok K. *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd ed. – Hoboken : John Wiley & Sons, 2007. – 832 p.

References (transliterated)

1. Grove A. S., Leistik O., Sah C. T. Redistribution of Acceptor and Donor Impurities during Thermal Oxidation of Silicon // *Journal of Applied Physics*. 1964, Vol. 35, no. 9, pp. 2695–2701. DOI: 10.1063/1.1713810.
2. Fair R. B. Concentration Profiles of Diffused Dopants in Silicon. "Impurity Doping Processes in Silicon". – Amsterdam: North-Holland Publishing, 1981. – P. 315 – 442.
3. Plummer J. D., Deal M. D., Griffin P. B. *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling*. Upper Saddle River, Prentice Hall, 2000. 856 p.
4. Sze S. M., Ng Kwok K. *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd ed. Hoboken, John Wiley & Sons, 2007. 832 p.

Надійшло (received) 10.05.2025

Відомості про авторів / Information about authors

Нагайченко Олександр Олегович – студент 5 курсу, кафедри Електроніки, робототехніки і технологій моніторингу та інтернету речей (ЕРMIT), факультету Аеронавігації, електроніки та телекомунікацій (ФА-ЕТ), Державний університет «Київський авіаційний інститут», м. Київ; тел.: (093) 974-16-34; ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-0197-0572>; e-mail: t3t3t3@ukr.net.

Nahaichenko Oleksandr Olegovich – 5th-year student, Department of Electronics, Robotics, and Monitoring and Internet of Things Technologies (ERMIT), Faculty of Aeronautics, Electronics, and Telecommunications (FAET), State University "Kyiv Aviation Institute", Kyiv; tel.: (093) 974-16-34; ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-0197-0572>; e-mail: t3t3t3@ukr.net.