

О. М. ФРОЛОВ

кандидат технічних наук, доцент,
доцент кафедри автоматизації та електроустаткування
Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова
ORCID: 0000-0003-2186-9488

С. Р. СЕЛІВЕРСТОВА

кандидат технічних наук, доцент,
доцент кафедри експлуатації суднового електрообладнання і засобів автоматизації
Херсонська державна морська академія
ORCID: 0000-0003-1015-1593

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ РОЗРАХУНКУ КОЕФІЦІЄНТА ДИФУЗІЇ БОРУ В КРЕМНІЙ

У статті розроблено та обґрунтовано математичну модель розрахунку коефіцієнта дифузії бору в кремній з урахуванням впливу основних технологічних параметрів процесу формування $p-n$ -переходів. Актуальність дослідження зумовлена зростанням вимог до точності відтворення параметрів напівпровідникових структур у виробництві сучасних електронних приладів та інтегральних мікросхем. Традиційні підходи до визначення коефіцієнта дифузії базуються переважно на температурній залежності та не враховують вплив дози введеної домішки, що призводить до похибок при прогнозуванні глибини залягання $p-n$ -переходу та профілю концентрації.

У роботі проаналізовано існуючі літературні дані щодо значень коефіцієнта пропорційності та енергії активації дифузії бору, встановлено їх варіативність та залежність від умов технологічного процесу. Розрахунки виконано для кремнієвих пластин n -типу провідності з різним питомим опором у діапазоні температур розгону 1050–1150 °С, при дозах легування 4–100 мкКл/см² і тривалості термічної обробки 75–225 хв. На основі аналітичних перетворень рівнянь дифузії та визначення концентрацій через питомий опір отримано числові значення коефіцієнтів дифузії для різних режимів.

Встановлено, що коефіцієнт пропорційності D_0 залежить від дози домішки та зростає за степеневим законом із показником 0,331, тоді як енергія активації E також збільшується зі зростанням дози за показником 0,0091 і практично не залежить від температури та тривалості процесу в досліджуваному інтервалі. Узагальнення отриманих результатів дозволило сформулювати аналітичний вираз для коефіцієнта дифузії бору, який одночасно враховує температурний фактор і дозу введеної домішки.

Запропонована математична модель забезпечує підвищення точності інженерних розрахунків параметрів дифузійних шарів та може бути використана для оптимізації технологічних режимів виготовлення напівпровідникових структур із заданими електрофізичними характеристиками. Отримані результати мають практичне значення для проектування та вдосконалення технологій виробництва мікроелектронних приладів.

Ключові слова: дифузія бору; кремній; коефіцієнт дифузії; енергія активації; $p-n$ -перехід.

A. N. FROLOV

Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor,
Assistant Professor at the Department of Automation and Electrical Equipment
National University of Shipbuilding named after Admiral Makarov
ORCID: 0000-0003-2186-9488

S. R. SELIVERSTOVA

Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor,
Assistant Professor at the Department of Operation of Ship Electrical Equipment and Automation Systems
Kherson State Maritime Academy
ORCID: 0000-0003-1015-1593

MATHEMATICAL MODEL FOR CALCULATING BORON DIFFUSION COEFFICIENT IN SILICON

The article presents the development and substantiation of a mathematical model for calculating the boron diffusion coefficient in silicon, taking into account the influence of the main technological parameters involved in $p-n$ junction formation. The relevance of the study is determined by the increasing requirements for accuracy in reproducing the



parameters of semiconductor structures in the production of modern electronic devices and integrated circuits. Traditional approaches to determining the diffusion coefficient are mainly based on temperature dependence and do not consider the effect of the implanted dopant dose, which leads to errors in predicting the junction depth and concentration profile.

The paper analyzes existing literature data concerning the proportionality factor and activation energy of boron diffusion, identifying their variability and dependence on technological process conditions. Calculations were performed for n-type silicon wafers with different resistivity values in the drive-in temperature range of 1050–1150 °C, implantation doses of 4–100 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$, and thermal treatment durations of 75–225 minutes. Based on analytical transformations of diffusion equations and the determination of concentrations through resistivity values, numerical values of diffusion coefficients were obtained for various process regimes.

It has been established that the proportionality factor D_0 depends on the dopant dose and increases according to a power law with an exponent of 0.331, while the activation energy E also increases with increasing dose according to an exponent of 0.0091 and is practically independent of temperature and process duration within the studied range. Generalization of the obtained results made it possible to formulate an analytical expression for the boron diffusion coefficient that simultaneously accounts for both temperature and implantation dose.

The proposed mathematical model improves the accuracy of engineering calculations of diffusion layer parameters and can be applied to optimize technological regimes for manufacturing semiconductor structures with specified electrophysical characteristics. The obtained results are of practical importance for the design and improvement of microelectronic device fabrication technologies.

Key words: boron diffusion; silicon; diffusion coefficient; activation energy; p–n junction.

Постановка проблеми

В технології виготовлення напівпровідникових виробів використовують дифузійні області n-типу провідності та р-типу провідності. Розвиток техніки постійно потребує розробки нових виробів електроніки з малим розкидом параметрів та характеристик. Це потребує більш точних параметрів дифузійних областей [1-4]. Практично, у переважній більшості виробів електроніки, застосовуються дифузійні області р-типу провідності. Області р-типу провідності формуються шляхом дифузії бора.

При розрахунках дифузійних областей необхідно знання коефіцієнтів дифузії даного домішки. Коефіцієнт дифузії домішки при термічних операціях визначається формулою [5]:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1)$$

де: – D_0 – коефіцієнт пропорційності;

- E – енергія активації;
- k – постійна Больцмана;
- T – температура термічної операції (в градусах Кельвіна).

Для практичної реалізації технологічного процесу та врахування впливу ряду факторів на створення області р-n переходу виразу (1) не достатньо.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Дослідження, в основі яких було закладено залежність коефіцієнта дифузії бору від температури для домішки бора показали наступні результати [6-8]:

- $D_0=10 \text{ см}^2/\text{с}$; $E=3,6\text{eV}$ згідно [6];
- $E=3,5\text{-}4,3\text{eV}$ згідно [7];
- $D_0=5\text{-}10,5\text{см}^2/\text{с}$; $E=3,5\text{-}3,7\text{eV}$ згідно [8].

Пізніші дослідження показали, що коефіцієнт дифузії бору залежить не тільки від температури, а й від інших факторів: від поверхневої концентрації та середовища, в якому відбувається дифузія, від концентрації домішки та орієнтації вихідної пластини.

Графічні залежності коефіцієнта дифузії бору від впливу деяких технологічних факторів наведені в [5], але математичну модель розрахунку коефіцієнта дифузії бору, яка враховувала б ці залежності, не було наведено.

На першому етапі дифузійні області створювалися шляхом термодифузії в одну стадію (загонка домішки), або в дві стадії (загонка домішки та перерозподіл домішки). Пізніше, замість дифузійної загонки, вносили домішку за допомогою іонного легування. Доза домішки, що вводилась при дифузійній загонці, могла різнитись в залежності від тривалості технологічного процесу в часі. Ця доза залежала не тільки від температури, а й від атмосферного тиску, точності дотримання часових інтервалів оператором дифузійних процесів та від інших факторів. Технологія іонного легування дозволяє дуже точно вводити необхідну кількість домішки.

Проведені дослідження параметрів дифузійних шарів, отриманих при іонному введенні з подальшою розгонкою [9], показали залежність коефіцієнта дифузії бору від температури розгонки та від дози домішки. Але вираз для розрахунку коефіцієнтів дифузії, наведений в [9], не відображає цю залежність безпосередньо.

Формулювання мети дослідження

Метою роботи є створення математичної моделі, яка враховує залежність коефіцієнта дифузії бору від основних параметрів процесу дифузії.

Викладення основного матеріалу дослідження

Для встановлення залежності коефіцієнта дифузії бору від ряду технологічних факторів приймалися наступні параметри:

- дози домішки: 4 мкКл/см², 12 мкКл/см², 40 мкКл/см², 100 мкКл/см²;
- температури розгону домішки: 1050°C, 1100°C, 1150°C;
- кремнієві пластини n-типу провідності з питомим опором: $\rho=1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $\rho=4,5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$;
- час процесу розгону: 75 хв., 150 хв., 225 хв.

Для визначення показників коефіцієнта дифузії бору в кремнії використовувалася формула [5]:

$$N(x) = N_{so} \cdot \exp\left(-\frac{x_j^2}{4Dt}\right) \tag{2}$$

де: – $N(x)$ – концентрація вихідної домішки кремнію n-типу;

– N_{so} – поверхнева концентрація;

– D – коефіцієнт дифузії;

– t – час процесу розгонки, с.

Для розрахунку коефіцієнта дифузії бору використано формулу (2).

Перетворення цієї формули для пластин з різною концентрацією дає вираз для розрахунку:

$$D = \frac{x_{j2}^2 - x_{j1}^2}{4t \cdot \ln\left(\frac{N(x_1)}{N(x_2)}\right)} \tag{3}$$

Величини концентрацій визначалися через питомий опір за виразом (4) [10]:

$$N = \sqrt[3]{\left\{ \frac{2,7 \cdot 10^{12}}{U_{\text{проб.пл.}} - \frac{10,5}{(U_{\text{проб.пл.}})^{0,72}}} \right\}} \tag{4}$$

де: для p^+ -n переходів:

$$U_{\text{проб.пл.}} = 86 \cdot \rho_n^{0,64} \tag{5}$$

Розрахункові концентрації для відповідних значень питомих опорів:

для $\rho=0,8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$: $N(x_1)=6,95 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$;

для $\rho=3,5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$: $N(x_2)=1,67 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Рішення рівняння (3) дозволяє отримати дані щодо коефіцієнтів дифузії бору в кремнії, які наведені в таблиці 1.

Таблиця 1

Розрахункові коефіцієнти дифузії бора (D_B , см²/с)

Режими дифузії		Доза домішки, мкКл/см ²			
$T_p, ^\circ\text{C}$	t , хв.	$Q=4$	$Q=12$	$Q=40$	$Q=100$
1050	75	$6,008 \cdot 10^{-14}$	$6,643 \cdot 10^{-14}$	$7,510 \cdot 10^{-14}$	$8,135 \cdot 10^{-14}$
	150	$6,006 \cdot 10^{-14}$	$6,665 \cdot 10^{-14}$	$7,523 \cdot 10^{-14}$	$8,118 \cdot 10^{-14}$
	225	$5,990 \cdot 10^{-14}$	$6,694 \cdot 10^{-14}$	$7,473 \cdot 10^{-14}$	$8,157 \cdot 10^{-14}$
	Середнє	$6,001 \cdot 10^{-14}$	$6,673 \cdot 10^{-14}$	$7,502 \cdot 10^{-14}$	$8,137 \cdot 10^{-14}$
1100	75	$1,532 \cdot 10^{-13}$	$1,721 \cdot 10^{-13}$	$1,948 \cdot 10^{-13}$	$2,144 \cdot 10^{-13}$
	150	$1,533 \cdot 10^{-13}$	$1,717 \cdot 10^{-13}$	$1,952 \cdot 10^{-13}$	$2,139 \cdot 10^{-13}$
	225	$1,529 \cdot 10^{-13}$	$1,724 \cdot 10^{-13}$	$1,948 \cdot 10^{-13}$	$2,138 \cdot 10^{-13}$
	Середнє	$1,531 \cdot 10^{-13}$	$1,721 \cdot 10^{-13}$	$1,949 \cdot 10^{-13}$	$2,140 \cdot 10^{-13}$
1150	75	$3,657 \cdot 10^{-13}$	$4,151 \cdot 10^{-13}$	$4,736 \cdot 10^{-13}$	$5,225 \cdot 10^{-13}$
	150	$3,654 \cdot 10^{-13}$	$4,134 \cdot 10^{-13}$	$4,719 \cdot 10^{-13}$	$5,227 \cdot 10^{-13}$
	225	$3,652 \cdot 10^{-13}$	$4,133 \cdot 10^{-13}$	$4,723 \cdot 10^{-13}$	$5,231 \cdot 10^{-13}$
	Середнє	$3,654 \cdot 10^{-13}$	$4,139 \cdot 10^{-13}$	$4,726 \cdot 10^{-13}$	$5,228 \cdot 10^{-13}$

Коефіцієнт пропорційності D_o не залежить від температури та часу, але може залежати від дози домішки. У цьому випадку використовуються дані, які було отримано за коефіцієнтами дифузії для однієї дози, але для різних температур процесу розгонки домішки:

$$D_o = \exp\left(\frac{T_1 \cdot \ln D_1 - T_2 \cdot \ln D_2}{T_2 - T_1}\right) \quad (6)$$

Дані розрахунку D_o наведено у таблиці 2

Таблиця 2

T, °C (T ₂ /T ₁)	Величина D_o при дозі, мкКл/см ²			
	4	12	40	100
1150/1050	0,00865	0,01208	0,0178	0,0235
1150/1100	0,00876	0,01267	0,0183	0,0255
1100/1050	0,00886	0,01301	0,0188	0,0276
Середнє D_o	0,00876	0,01267	0,0183	0,02553

Отримані дані показують, що значення D_o залежать від дози домішки та практично не залежать від температури процесу, що дозволяє використовувати середнє арифметичне значення. Розглянемо статичну залежність D_o від дози відповідно до виразу:

$$D_o = A \cdot Q^\alpha \quad (7)$$

де: – A – деякий постійний коефіцієнт;

– α – показник ступеня.

Вирішуючи рівняння (7) відносно двох різних доз отримуємо рівняння:

$$\alpha = \frac{\ln D_{o1} - \ln D_{o2}}{\ln Q_1 - \ln Q_2} \quad (8)$$

Результати розв'язання рівняння (8) наведено у таблиці 3.

Таблиця 3

D_{o1}/D_{o2}	4/12	4/40	4/100	12/40	12/100	40/100
α	0,3359	0,3199	0,3323	0,3054	0,3304	0,3633

Отримані значення величини α досить близькі, що дозволяє для подальших розрахунків середнє значення коефіцієнта α . За всіма шістьма розрахунковими даними отримано середнє значення ступеня, яке дорівнює $\alpha=0,331$. Постійна A визначається на основі даних, наведених у табл. 2 при використанні формули (7):

$$A = \frac{D_o}{Q^{0,331}} \quad (9)$$

Отримані розрахункові дані наведено у таблиці 4.

Таблиця 4

Q , мкКл/см ²	4	12	40	100
A	$5,53 \cdot 10^{-3}$	$5,57 \cdot 10^{-3}$	$5,25 \cdot 10^{-3}$	$5,56 \cdot 10^{-3}$

Отримані значення величини A показують, що дані дуже близькі. Тому для подальших розрахунків може бути застосована середня величина $A=5,48 \cdot 10^{-3}$. З врахуванням отриманих даних по величинам A та α , визначено величину коефіцієнта пропорційності D_o . Дані розрахунку за виразом (9) наведено у таблиці 5.

Таблиця 5

Q , мкКл/см ²	4	12	40	100
D_o	0,00867	0,01247	0,01858	0,02516

Для розрахунку енергії активації домішки (E) використовується перетворення виразу (1):

$$E = kT \cdot \ln\left(\frac{D_o}{D}\right) = kT \cdot \ln\left(\frac{5,48 \cdot 10^{-3} \cdot Q^{0,331}}{D}\right) \quad (10)$$

Дані розрахунку енергії E наведено у таблиці 6.

Таблиця 6

T, °C	Доза, мкКл/см ²			
	4	12	40	100
1050	2,92355	2,95296	2,98495	3,01025
1100	2,92345	2,95260	2,98502	3,00984
1150	2,92347	2,95284	2,98533	3,01014
<i>Середнє</i>	2,92349	2,95282	2,98510	3,01008

Дані таблиці 6 показують, що значення енергії активації домішки при дифузії збільшується при збільшенні дози і не залежить від температури або часу режиму дифузії домішки.

Припустимо, що залежність енергії активації домішки бору буде залежати від дози домішки. Тоді використовується формула:

$$E = B \cdot Q^\beta \quad (11)$$

де: – B – деяка постійна;

– β – показник ступеня.

Вирішуючи рівняння (11) для поєднання двох різних доз отримуємо вираз:

$$\beta = \frac{\ln\left(\frac{E_1}{E_2}\right)}{\ln\left(\frac{Q_1}{Q_2}\right)} \quad (12)$$

Результати розв'язання рівняння (12) наведено у таблиці 7.

Таблиця 7

D_1/D_2	Відношення доз домішки					
	4/12	4/40	4/100	12/40	12/100	40/100
β	0,00908	0,00906	0,00907	0,00903	0,00906	0,00910

Отримані значення не показують пряму залежність коефіцієнта від дози домішки або відношення доз. Ці умови дозволяють для подальших розрахунків застосувати середнє значення коефіцієнта β . За всіма шістьма розрахунковими даними отримано середнє значення ступеня, яке дорівнює $\beta = 0,00907 \approx 0,0091$.

Постійна A визначається на основі даних, наведених у табл. 7 при використанні формули (11):

$$B = \frac{E}{Q^{0,0091}} \quad (13)$$

Отримані розрахункові дані наведено у таблиці 8.

Таблиця 8

Q , мкКл/см ²	4	12	40	100
B	2,8868	2,8868	2,8866	2,8865

Отримані значення величини B показують, що для подальших розрахунків може бути застосована середня величина $B = 2,8867$.

В результаті виявлених залежностей та визначення необхідних даних отримано наступний вираз для розрахунку коефіцієнтів дифузії бору в кремній:

$$D = D_o \cdot \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) = 5,48 \cdot 10^{-3} \cdot Q^{0,331} \cdot \exp\left(\frac{-2,8867 \cdot Q^{0,0091}}{kT}\right) \quad (14)$$

Даний вираз є математичною моделлю коефіцієнта дифузії бору в кремній, так як у ній визначена залежність коефіцієнта дифузії бору від основних параметрів технологічного режиму процесу дифузії, – від впроваджені дози та від температури процесу.

Висновки

1. Запропоновано нову математичну модель коефіцієнта дифузії бору в кремній, яка враховує залежність коефіцієнта дифузії бору від дози введеної домішки, та від температури дифузії.
2. У моделі показано, що енергія активації E домішки бору при дифузії збільшується зі збільшенням дози за ступенем 0,00953.
3. У моделі показано, що коефіцієнт пропорційності D_0 також збільшується при збільшенні дози за ступенем 0,339.

Список використаної літератури

1. Wolf F. A., Martinez-Limia A., Pichler P. A comprehensive model for diffusion of boron in silicon in presence of fluorine. *Solid-State Electronics*, 2013, v. 87. P.4-10.
2. Ignacio Dopico, Pedro Castrillo, Ignacio Martin-Bragado. Modeling of boron diffusion in silicon-germanium alloys using. *Kinetic Monte-Carlo*. 2024, v.93. P.61-65.
3. F. Alexander Wolf, Alberto Martinez-Limia, Daniela Grote, Daniel Stichtenoth, Peter Pichler. Diffusion and Segregation Model for the Annealing of Silicon Solar Cell Implanted With Phosphorus. *IEEE Journal of Photovoltaics*. 2015, V.5, Issue 1. P.129-136.
4. Kang M. G., Lee J.-H., Boo H., Tark S. J., Hwang H. C., Hwang W. J., Kang H. O., Kim D. Effect of annealing on ion implanted Si for interdigitated back contact solar cell. *Current Applied Physics*. 2012, Vol. 12, Issue 6. P.1615-1618.
5. С.М. Павлов, О.В. Войцеховська. Технологія мікроелектронних засобів: Навчальний посібник./С.М. Павлов, О.В. Войцеховська. Вінниця: ВНТУ, 2017. 169с.
6. Sze S.M., Kwok K.N. *Physics of Semiconductor Devices*: 3rd ed. Published by John Wiley and Sons Ltd, 2006. 832 p. <https://www.wiley.com/en-us/Physics+of+Semiconductor+Devices%2C+3rd+Edition-p-9780470068328>
7. Gray P. R., Hurst P. J., Lewis S. H., Meyer R. G. *Analysis and design of analog integrated circuits*. 5th ed. Hoboken, NJ : John Wiley & Sons, 2009. 881 p.
8. Готра З.Ю. Технологія електронної техніки: навч. посіб. у 2 т. Т.1. Львів: Львівська політехніка, 2010. 888с.
9. Ніколайчук Г. П. Фізичні основи напівпровідникових приладів [Електронний ресурс] : навч. посіб. Нац. техн. ун-т "Харків. політехн. ін-т". Харків, 2023. 112 с. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/64176>
10. Міхаліченко П.Є., Фролов О.М., Надточій А.В., Надточій В.А, Філіпчук О.М., Субботкіна О.П. Оперативний розрахунок елементів мікросхем та напівпровідникових приладів./ за ред. д.т.н. Міхаліченко П.Є. Миколаїв: Іліон, 2024. 182с. – <https://eir.nuos.edu.ua/collections/3e0c175f-3afd-4bbf-9ded-6116f6ddf332>.

References

1. Wolf, F. A., Martinez-Limia, A., & Pichler, P. (2013). *A comprehensive model for diffusion of boron in silicon in presence of fluorine*. *Solid-State Electronics*, 87, 4–10.
2. Dopico, I., Castrillo, P., & Martin-Bragado, I. (2024). *Modeling of boron diffusion in silicon-germanium alloys using kinetic Monte-Carlo*. *Solid-State Electronics*, 93, 61–65.
3. Wolf, F. A., Martinez-Limia, A., Grote, D., Stichtenoth, D., & Pichler, P. (2015). *Diffusion and segregation model for the annealing of silicon solar cell implanted with phosphorus*. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 5(1), 129–136.
4. Kang, M. G., Lee, J.-H., Boo, H., Tark, S. J., Hwang, H. C., Hwang, W. J., Kang, H. O., & Kim, D. (2012). *Effect of annealing on ion implanted Si for interdigitated back contact solar cell*. *Current Applied Physics*, 12(6), 1615–1618.
5. Pavlov S. M., & Voytsehovska O. V. (2017). *Tekhnolohiya mikroelektronih zasobiv* [Microelectronics technology]. VNTU.
6. Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). *Physics of semiconductor devices* (3rd ed.). John Wiley & Sons.
7. Gray, P. R., Hurst, P. J., Lewis, S. H., & Meyer, R. G. (2009). *Analysis and design of analog integrated circuits* (5th ed.). John Wiley & Sons.
8. Ghotra Z.Ju. (2010) *Tekhnologhija elektronnoji tekhniky: navch. posib. in 2 t. T.1. Ljviv: Ljvivsjska politekhnika*.
9. Nikolajchuk Gh. P. (2023). *Fizychni osnovy napivprovodnykovykh pryladiv* [Elektronnyj resurs] : navch. posib. Nac. tekhn. un-t "Kharkiv. politekhn. in-t". Kharkiv. <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/64176>
10. Mykhalichenko P.Ie., Frolov O.V., Nadtochy A.V. (2024) *Optymizatsiia tekhnolohii vyhotovlennia epitaksialno-planarnoho varykapa* [Operational calculation of microcircuit elements and semiconductor devices]. Mykolaiv: Ilion.

Дата першого надходження статті до видання: 20.02.2026

Дата прийняття статті до друку після рецензування: 27.03.2026

Дата публікації (оприлюднення) статті: 07.05.2026