TẠP CHÍ KHOA HỌC ĐẠI HỌC CỬU LONG
https://tapchikhdhcl.edu.vn
https://vjol.info.vn/index.php/dhcl
P-ISSN 3093-3196
E-ISSN 3093-3226

HỆ SỐ KHUẾCH TÁN HIỆU DỤNG CỦA BO VÀ ĐIỀN KẼ SILIC TRONG SILIC

EFFECTIVE DIFFUSION COEFFICIENTS OF BORON AND SILICON INTERSTITIALS IN SILICON

Vũ Bá Dũng[1*], Đỗ Bích Ngọc[2]
[1]*Trường Đại học Cửu Long*
[2] *Viện Nghiên cứu chiến lược chính sách công thương, Bộ Công thương*
[*]*Email: vubazung305@gmail.com*

DOI: https://doi.org/10.65934/mkusj.2026.03-e.1347
Ngày nhận bài: 26/02/2026 *Ngày phản biện: 20/03/2026* *Ngày duyệt bài: 28/09/2026*

TÓM TẮT

Sự khuếch tán tạp chất trong chất bán dẫn là một hiện tượng có ý nghĩa quan trọng cả về mặt công nghệ lẫn khoa học. Thứ nhất, quá trình khuếch tán tạp chất xảy ra trong hầu hết các công đoạn chế tạo linh kiện điện tử. Thứ hai, khuếch tán liên quan mật thiết đến các tính chất cơ bản của chất bán dẫn, thường bị chi phối bởi các khuyết tật điểm nội tại như nguyên điền kẽ (self-interstitial) và lỗ trống (vacancy). Do sự tương tác giữa tạp chất với mạng tinh thể, quá trình khuếch tán tạp chất trong silic thường tạo ra đồng thời các khuyết tật điểm, và các khuyết tật này cũng khuếch tán song song với tạp chất. Vì vậy, quá trình khuếch tán cũng như các hệ số khuếch tán của tạp chất và khuyết tật điểm trở nên rất phức tạp. Dựa trên lý thuyết nhiệt động học không thuận nghịch, bài báo trình bày và thảo luận hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo (B), nguyên tử điền kẽ (I) và lỗ trống (V) trong silic. Hệ số khuếch tán hiệu dụng của khuyết tật điểm có thể nhận giá trị âm, dẫn đến hiện tượng khuếch tán ngược của khuyết tật trong silic. Bài báo cũng nghiên cứu sự phụ thuộc của hệ số khuếch tán của bo và khuyết tật điểm vào hệ số khuếch tán đơn giản cũng như nồng độ của bo và các khuyết tật điểm.

Từ khóa: *Hệ số khuếch tán hiệu dụng, Tạp chất B, Điền kẽ silic, Lỗ trống, Sai hỏng điểm*

ABSTRACT

Dopant diffusion in semiconductors is an interesting phenomenon from both technological and scientific points of view. Firstly, dopant diffusion is taking place during most of the steps in electronic device fabrication. Secondly, diffusion is related to fundamental properties of the semiconductor, often controlled by intrinsic point defects (self-interstitials and vacancies). Due to the interaction between dopant with the crystal lattice, the dopant diffusion process in silicon often gives rise to point defects, which will diffuse simultaneously with the impurities. So, the diffusion process and diffusivities of dopant and point defects are very complex. Based on irreversible thermodynamic theory, the effective diffusivity of boron (B), interstitial (I) and vacancy (V) in silicon are presented and discussed. The effective diffusivity of point defects may be negative and diffusion of point defects in silicon could be backward diffusion. In this paper, the dependence of diffusivity of boron and point defects on simple diffusivity and concentration of boron and point defects are studied.

Keywords: *Effective diffusivity, Boron impurity Silicon self-interstitial, Vacancy, Point defects.*

MỞ ĐẦU

Hệ số khuếch tán là đại lượng đặc trưng cho khả năng xảy ra quá trình khuếch tán và đóng vai trò là động lực của sự khuếch tán. Đối với các hệ khuếch tán đơn giản như trong chất lỏng và chất khí, hệ số khuếch tán thường được xem là một hằng số vật lý, phụ thuộc vào kích thước phân tử, các tính chất của chất khuếch tán cũng như nhiệt độ và áp suất. Tuy nhiên, trong chất rắn, đặc biệt là trong chất bán dẫn, hệ số khuếch tán có bản chất phức tạp hơn nhiều. Phần lớn các quá trình khuếch tán trong chất bán dẫn là sự khuếch tán đồng thời của tạp chất và các khuyết tật điểm [1–6]. Do tồn tại sự tương tác giữa tạp chất và khuyết tật điểm, hệ số khuếch tán trở nên phức tạp. Tuy vậy, dựa trên lý thuyết nhiệt động học không thuận nghịch, có thể thiết lập hệ phương trình khuếch tán đồng thời và từ đó xác định các hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo và các khuyết tật điểm.

1. Cơ chế khuếch tán trong chất bán dẫn

Để hiểu rõ bản chất vật lý của quá trình khuếch tán, cần xem xét các cơ chế vi mô chi phối chuyển động của nguyên tử. Trong chất bán

dẫn tồn tại một số cơ chế khuếch tán chủ yếu như: cơ chế điền kẽ, cơ chế lỗ trống, cơ chế hỗn hợp, cơ chế "đẩy ra" (kick-out) và cơ chế phân ly. Cơ chế đơn giản nhất là cơ chế điền kẽ, trong đó nguyên tử khuếch tán nhảy từ một vị trí điền kẽ sang vị trí xen kẽ khác trong khoảng trống giữa các nguyên tử mạng. Cơ chế phổ biến và được nghiên cứu rộng rãi nhất là cơ chế lỗ trống, có thể được mô tả thông qua phản ứng [6]:

$$A_S + V \rightarrow AV \quad (1)$$

Trong đó A_S là nguyên tử nằm ở vị trí thay thế trong mạng tinh thể, V là khuyết tật lỗ trống và AV là cặp nguyên tử – lỗ trống. Lỗ trống là một vị trí mạng tinh thể bị bỏ trống. Trong cơ chế lỗ trống, các nguyên tử khuếch tán trong mạng bằng cách trao đổi vị trí với các lỗ trống. Trong cơ chế xen kẽ, hay còn gọi là cơ chế khuếch tán được trung gian bởi nguyên tử xen kẽ quá trình khuếch tán diễn ra thông qua phản ứng [6]:

$$A_S + I \rightarrow A_I \quad (2)$$

Trong đó A_I là nguyên tử nằm ở vị trí điền kẽ trong mạng tinh thể còn I là nguyên tử điền kẽ tự thân. Vị trí thay thế tương ứng với vị trí mạng tinh thể thông thường, trong khi nguyên tử điền kẽ tự thân là nguyên tử dư chiếm các vị trí nằm giữa những nút mạng trong tinh thể. Trong cơ chế điền kẽ, các nguyên tử hòa tan ở vị trí thay thế khuếch tán bằng cách tương tác với các nguyên tử điền kẽ tự thân, thông qua quá trình "đẩy" lẫn nhau từ vị trí thay thế sang vị trí điền kẽ khác. Khi một nguyên tử có khả năng tồn tại cả ở vị trí thay thế và vị trí điền kẽ, quá trình khuếch tán có thể diễn ra theo cơ chế "đẩy ra" (kick-out) hoặc cơ chế phân ly theo phản ứng [6, 7]:

$$A_S \rightarrow A_I + V \quad (3)$$

Nói cách khác, một nguyên tử ở vị trí thay thế có thể phân ly thành một nguyên tử ở vị trí điền kẽ và một lỗ trống và phản ứng ngược xảy ra khi nguyên tử điền kẽ tái hợp với lỗ trống để trở về trạng thái A_S. Tương tự như cơ chế kick-out, nguyên tử ở trạng thái điền kẽ (A_I) có thể khuếch tán trên những khoảng cách dài theo cơ chế điền kẽ trực tiếp trước khi tái hợp với một lỗ trống để trở thành nguyên tử ở vị trí thay thế. Đặc trưng chung của hai cơ chế này là hệ số khuếch tán hiệu dụng lớn, do khuếch tán trực tiếp theo cơ chế điền kẽ diễn ra rất nhanh so với khuếch tán được trung gian bởi khuyết tật điểm. Tùy thuộc vào điều kiện khuếch tán, cơ chế kick-out có thể là nguyên nhân tạo nên những dạng phân bố nồng độ "bất thường" quan sát được trong một số thực nghiệm khuếch tán. Những dạng phân bố này có thể được sử dụng như một dấu hiệu nhận biết cho cơ chế kick-out. Đây là trường hợp đặc biệt, bởi vì trong hầu hết các tình huống, không thể suy ra trực tiếp cơ chế khuếch tán vi mô mà dựa trên hình dạng của các đường cong phân bố nồng độ thực nghiệm [8, 9].

2. Khuếch tán thông qua khuyết tật điểm trong chất bán dẫn

Để một nguyên tử có thể khuếch tán, nó phải thực hiện một bước nhảy sang một vị trí mạng khác. Bước nhảy này đòi hỏi phải vượt qua một rào cản năng lượng nhất định, rào cản này giữ cho các nguyên tử nằm ổn định tại những vị trí ưu tiên trong mạng tinh thể. Giả thiết rằng năng lượng cần thiết để vượt qua rào cản này có nguồn gốc từ chuyển động nhiệt, tức là xác suất xảy ra bước nhảy khuếch tán phụ thuộc vào nhiệt độ. Khi đó, quá trình khuếch tán thông qua cơ chế (a) có thể được mô tả theo biểu thức [9]:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{H^m}{kT}\right) \quad (4)$$

với D_0 được xác định bởi:

$$D_0 = g a_0^2 \nu_0 \exp\left(\frac{S^m}{k}\right) \quad (5)$$

Trong đó g_α là hệ số hình học, phản ánh ảnh hưởng của hình học mạng tinh thể; a_0 là khoảng cách bước nhảy; ν_0 là tần số thử; H^m, S^m và k lần lượt là enthanpi, entropy di chuyển nguyên tử khuếch tán và hằng số Boltzmann. Phần lớn các cơ chế khuếch tán là gián tiếp, đòi hỏi sự tham gia của các nguyên tử điền kẽ hoặc lỗ trống như những "phương tiện" vận chuyển khuếch tán. Điều này có nghĩa là nguyên tử điền kẽ hoặc lỗ trống trước hết phải di chuyển đến vùng lân cận của nguyên tử khuếch tán thì bước nhảy khuếch tán mới có thể xảy ra. Sau khi bước nhảy khuếch tán đã diễn ra, xác suất để bước nhảy bị triệt tiêu bởi một bước nhảy ngược thường lớn hơn xác suất để xảy ra một bước nhảy tiếp theo, do khuyết tật vẫn còn ở gần nguyên tử đang khuếch tán. Hiện tượng này được gọi là tương quan và cần được tính đến cùng với nồng độ khuyết tật. Khi kết hợp ba yếu tố: hệ số hình học, nồng độ khuyết tật và hiệu ứng tương quan, ta thu được biểu thức cho hệ số khuếch tán của nguyên tử

đánh dấu thông qua cơ chế điền–thay thế hoặc cơ chế lỗ trống như sau [9]:

$$D_0 = fga_0^2 v_0 \exp(\frac{S^F+S^m}{k}) \quad (6)$$

với D_0 được xác định bởi:

$$D = D_0 \exp(-\frac{H^F+H^m}{kT}) \quad (7)$$

Ở đây S^F, S^m là entropi hình và entropi di chuyển điền kẽ, và H^F, H^m là enthanpi hình và enthanpi di chuyển điền kẽ. Các phương trình (6) và (7) cho thấy hệ số khuếch tán của tạp chất trong chất bán dẫn phụ thuộc vào cơ chế khuếch tán. Tuy nhiên, trên thực tế, hệ số khuếch tán của phần lớn các tạp chất trong chất bán dẫn, đặc biệt là trong silic, còn phụ thuộc vào nhiều đặc trưng khác của hệ khuếch tán, chẳng hạn như nồng độ tạp chất và mức độ tương tác giữa tạp chất với các khuyết tật điểm.

3. Hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo và điền kẽ trong silic

Quá trình khuếch tán tạp chất bo trong silic là quá trình khuếch tán đồng thời. Do sự tương tác giữa các nguyên tử bo và mạng tinh thể silic, các khuyết tật điểm được tạo ra. Các nguyên tử điền kẽ và lỗ trống này khuếch tán đồng thời với bo trong silic. Chính các tương tác này cũng làm cho hệ số khuếch tán của bo và các khuyết tật điểm trong silic trở nên phức tạp. Việc xác định hệ số khuếch tán trong trường hợp này là rất khó khăn. Tuy nhiên, có thể thiết lập các biểu thức cho hệ số khuếch tán của bo và các khuyết tật điểm thông qua hệ phương trình khuếch Onsager [10]. Các hệ số khuếch tán thu được trong trường hợp này được gọi là hệ số khuếch tán hiệu dụng. Áp dụng lý thuyết nhiệt động học không thuận nghịch cho hệ khuếch tán đa thành phần, các biểu thức tổng quát cho mật độ dòng khuếch tán của bo (J_B), nguyên tử điền kẽ (J_I) và lỗ trống (J_V) có thể được viết dưới dạng sau [10–12]:

$$J_B = L_{BB}X_B + L_{B1}X_1 + L_{BV}X_V \quad (8)$$

$$J_I = L_{IB}X_B + L_{II}X_1 + L_{IV}X_V \quad (9)$$

$$J_V = -(J_B + J_I) \quad (10)$$

Trong đó, J_B, J_I và J_V lần lượt là mật độ dòng khuếch tán của bo (B), nguyên tử điền kẽ (I) và lỗ trống (V). Các đại lượng X_B, X_I và X_V là các lực dẫn động tương ứng. Các hệ số L_{BB}, L_{II} và L_{VV} là các hệ số hiện tượng. Các hệ số L_{BI}, L_{BV}, L_{IB}, L_{IV}, L_{VB} và L_{VI} là các hệ số chéo, đặc trưng cho sự liên kết và tương tác giữa các thành phần khuếch tán khác nhau [6,7]. Hệ phương trình khuếch tán đồng thời của bo, nguyên tử điền kẽ và lỗ trống có thể được viết dưới dạng sau [10–12]:

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{eB}\frac{\partial^2 C_B}{\partial X^2} - u_B\frac{\partial C_B}{\partial X} \quad (11)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = D_{eI}\frac{\partial^2 C_I}{\partial X^2} - u_I\frac{\partial C_I}{\partial X} - \sigma_I C_I \quad (12)$$

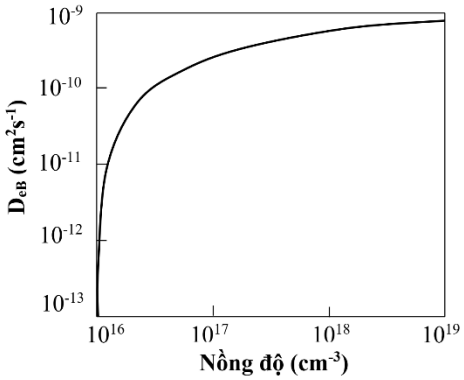
$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = -(\frac{\partial C_B}{\partial t} + \frac{\partial C_1}{\partial x}) \quad (13)$$

Trong đó D_{eB} và D_{eI} lần lượt là hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo và nguyên tử điền kẽ trong silic. Các đại lượng u_B và u_I là vận tốc đối lưu hiệu dụng của bo và nguyên tử điền kẽ trong silic. C_B, C_I và C_V lần lượt là nồng độ của bo, nguyên tử điền kẽ và lỗ trống. Đại lượng σ_I là hệ số sinh–hủy của nguyên tử điền kẽ trong silic. Các hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo và nguyên tử điền kẽ trong hệ phương trình khuếch tán đồng thời của bo, nguyên tử điền kẽ và lỗ trống trong silic được xác định bởi các biểu thức sau:

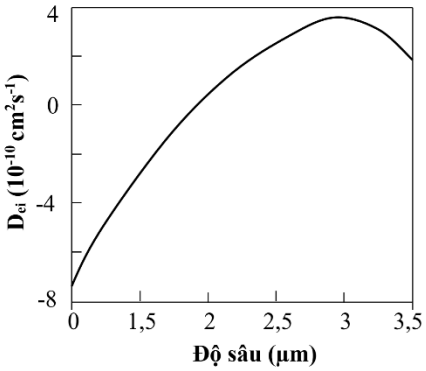
$$D_{eB} = \frac{1}{2}(2D_B + D_V + \frac{D_B C_B - D_I C_I}{C_V}) \quad (14)$$

$$D_{eI} = \frac{1}{2}(2D_I + D_V + \frac{D_I C_I - D_B C_B}{C_V}) \quad (15)$$

Trong đó D_B, D_I và D_V lần lượt là các hệ số khuếch tán đơn giản (simple diffusivity) của bo (B), nguyên tử điền kẽ (I) và lỗ trống (V) trong silic; đây là các hệ số khuếch tán của B, I và V khi có thể bỏ qua sự tương tác giữa chúng. Hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo D_{eB} trong silic không chỉ phụ thuộc vào hệ số khuếch tán đơn giản và nồng độ của bo, mà còn phụ thuộc vào hệ số khuếch tán đơn giản và nồng độ của nguyên tử điền kẽ và lỗ trống. Tương tự, hệ số khuếch tán hiệu dụng của nguyên tử điền kẽ D_{eI} trong silic không chỉ phụ thuộc vào hệ số khuếch tán đơn giản và nồng độ của nguyên tử điền kẽ, mà còn phụ thuộc vào hệ số khuếch tán đơn giản và nồng độ của bo và lỗ trống. Hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo D_{eB} và của nguyên tử điền kẽ D_{eI} được khảo sát trong bài toán khuếch tán đồng thời của bo và các khuyết tật điểm trong silic cho trường hợp một chiều, với các giá trị: $D_B = 3{,}54.10^{-14}$ (cm^2s^{-1}); $D_I = 3{,}57.10^{-11}$ (cm^2s^{-1}) và $D_V = 4{,}21.10^{-10}$ (cm^2s^{-1}). Các điều kiện biên và điều kiện ban đầu được cho như sau: $C_B(0, t) = 10^{19}$ (cm^{-3}); $C_B(\infty, t) = 0$; $C_I(0, t) = 1{,}12.10^{12}$ (cm^{-3}); $C_V(0, t) = 1{,}04.10^{15}$ (cm^{-3}) and $C_B(0, 0) = 10^{19}$ (cm^{-3}); $C_B(x>0, 0) = 0$; $C_I(x, 0) = 1{,}1.10^{12}$ (cm^{-3}); $C_V(x, 0) = 1{,}04.10^{15}$ (cm^{-3}). Thời gian khuếch tán là 10 phút ở nhiệt độ T = 1300 ºC.



Hình 1. Đồ thị sự phụ thuộc hệ số khuếc tán hiệu dụng của B theo nồng độ trong silic



Hình 2. Đồ thị sự phụ thuộc hệ số khuếc tán hiệu dụng của xen kẽ theo độ sâu trong silic

Các kết quả thu được được trình bày dưới dạng đồ thị. Trong hình 1 là đồ thị biểu diễn hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo, cho thấy rằng hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo phụ thuộc mạnh vào nồng độ bo. Hình 2 là đồ thị biểu diễn hệ số khuếch tán hiệu dụng của nguyên tử điền kẽ, cho thấy rằng hệ số khuếch tán hiệu dụng của nguyên tử điền kẽ phụ thuộc vào độ sâu x. Đồ thị hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo trong hình 1 cho thấy khi nồng độ bo tăng thì tốc độ khuếch tán của bo cũng tăng theo. Tuy nhiên, hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo luôn mang giá trị dương, do đó quá trình khuếch tán của bo trong silic luôn là khuếch tán thuận (tức là thông lượng khuếch tán có hướng từ vùng có nồng độ cao sang vùng có nồng độ thấp). Ngược lại, đồ thị trong hình 2 cho thấy hệ số khuếch tán của nguyên tử điền kẽ có tính chất rất phức tạp. Đặc biệt, trong vùng độ sâu từ 0 đến 1,5 µm, hệ số khuếch tán hiệu dụng của nguyên tử điền kẽ nhận giá trị âm, vì vậy quá trình khuếch tán của nguyên tử điền kẽ là khuếch tán ngược (tức là thông lượng khuếch tán có hướng từ vùng có nồng độ thấp sang vùng có nồng độ cao). Có thể là do khi khuếch tán các nguyên tử B và I bị nung nóng và bị ion hoa rất mạnh làm cho B mang điện dương còn các phân tử I mang điện tíc dương. Chúng hút nhau làm B thì khuếch tán tăng cường còn I khuếch tán nhược trở lại.

KẾT LUẬN

Áp dụng lý thuyết nhiệt động học không thuận nghịch cho phép xây dựng một khung lý thuyết tổng quát để mô tả khuếch tán đồng thời của bo, điền kẽ và lỗ trống trong silic và hệ số khuếch tán hiệu dụng của tạp chất bo và sai hỏng điểm xen kẽ.

Hệ số khuếch tán hiệu dụng của bo luôn dương và tăng theo nồng độ bo, phù hợp với bản chất khuếch tán thuận trong silic. Điều này khẳng định vai trò chi phối của nồng độ tạp chất đối với tốc độ khuếch tán và phân bố bo trong các quá trình công nghệ chế tạo linh kiện.

Hệ số khuếch tán hiệu dụng của nguyên tử điền kẽ có thể nhận cả giá trị dương và âm, phản ánh bản chất phi tuyến và phụ thuộc mạnh vào tương tác trong quá trình khuếch tán. Sự tồn tại của hệ số khuếch tán âm chỉ ra rằng trong một số vùng, gradient nồng độ không còn là yếu tố quyết định duy nhất đối với hướng của thông lượng khuếch tán.

Hiện tượng khuếch tán ngược của nguyên tử điền kẽ cho thấy cần mở rộng các mô hình khuếch tán cổ điển dựa trên định luật Fick để bao hàm ảnh hưởng của tương tác giữa các thành phần và các hiệu ứng nhiệt động học không thuận nghịch. Đây là cơ sở quan trọng cho việc xây dựng các mô hình khuếch tán tiên tiến hơn trong chất bán dẫn.

Các kết quả của bài báo góp phần làm rõ vai trò của khuyết tật điểm trong việc điều khiển khuếch tán tạp chất và có ý nghĩa thực tiễn trong tối ưu hóa các quy trình công nghệ như cấy ion, ủ nhiệt và chế tạo cấu trúc nano trong silic.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

S. M. Hu, *Atomic Diffusion in Semiconductors*, Plenum Press, London, 1973, p.217.

D. Shaw, *Atomic Diffusion in semiconductor*, Plenum Press, NY, 1995.

R. Fair. *Impurity diffusion in silicon, Diffusion and defect Data*, Vol.37. 1984.

G. D. C, Kuiken, *Thermodynamics of Irreversible Processes*, Wiley, London,1994.

P, Garbaczewski, *Acta. Phys. Pol.* E39, 2008, pp. 1087-1101.

N.D, Thai, *Solid State Electronics*, Pergamum Press, 1970, pp. 165-172.

N.A, Stolwijk, B. Schuster, J. Hölzl, H. Mehrer and W. Frank, *Physica B*, Vol. 116, 1983, p. 335.

S.R, Jones, Diffusion in Silicon, *IC Knowledge LC*, 2008, USA, p. 7.

P, Laitinen, I. Riihimaki, J. Raisanen, *Physical Review B*, Vol. 68, 2003, p. 155209.

V. B. Dung and D. K. An, *Defect and Diffusion Forum*, Vol. 194, 2001, p. 647- 652.

V. B.Dung, D. K. An, P. A. Tuan and N. V. Truong, *Defect and Diffusion Forum*, Vol. 258, 2007, pp. 32-38.

Vu Ba Dung, Dinh Van Thien, Ta Thi Dung and Hoang Dinh Chieu, *Proc. Natl.Conf. Theor. Phys. 35*, 2010, pp. 73-79.