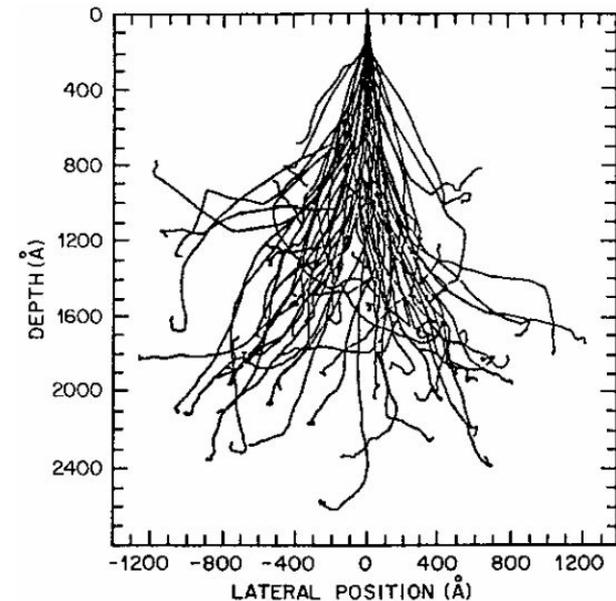
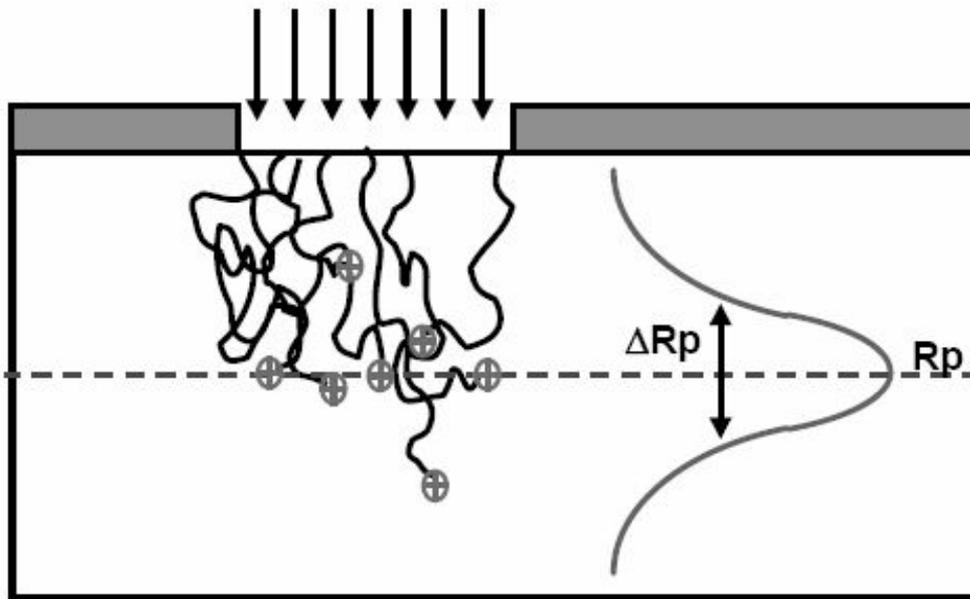


Математическое моделирование технологии изготовления ППП и элементов ИМС

Ионная имплантация

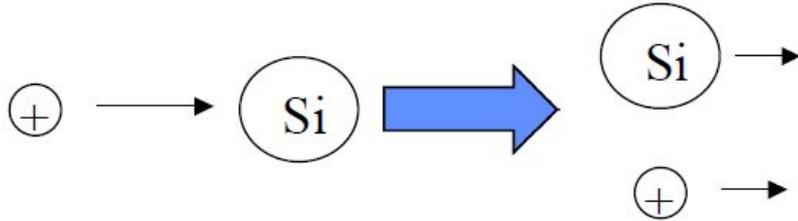
Ионной имплантацией называют процесс внедрения в мишень ионизированных атомов с энергией, достаточной для проникновения в ее приповерхностные области.

Процесс ионного легирования заключается в ионизации и ускорении до больших скоростей атомов примеси. Проникая в кристаллическую решетку, ионизированный атом примеси постепенно теряет кинетическую энергию за счёт взаимодействия с электронами и упругих столкновений с атомами полупроводника и примеси, т.е. в результате электронного и ядерного торможения.

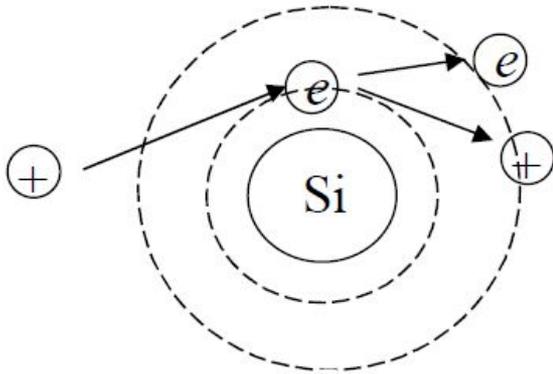


Ионная имплантация

Ядерное торможение обусловлено столкновением между двумя атомами.

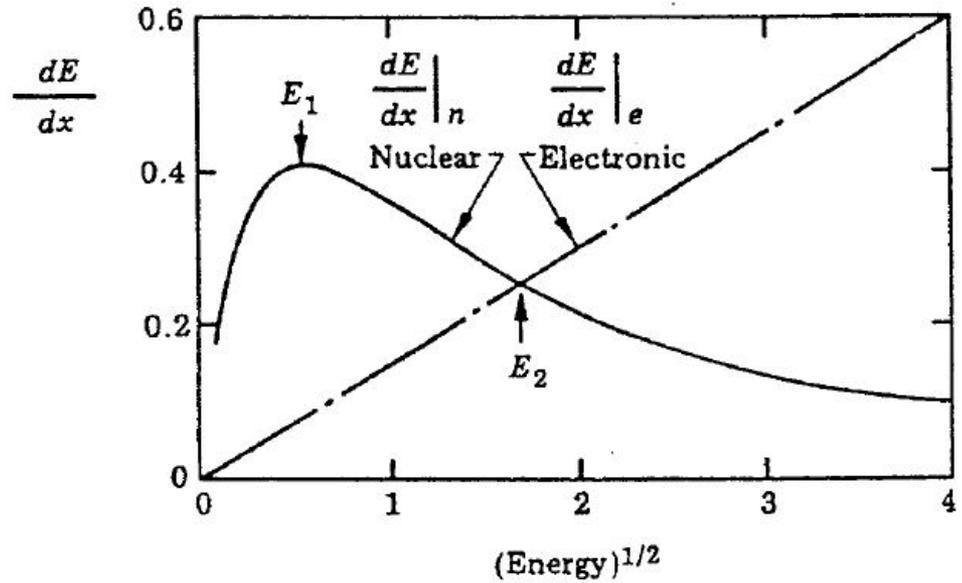


Электронное торможение обусловлено взаимодействием между падающим ионом и электронами мишени.



Тяжелые ионы/высокая энергия доминирует электронное торможение

Легкие ионы/низкая энергия доминирует ядерное торможение



Ядерная и электронная компоненты мощности торможения как функции скорости ионов

Теория Линдхарда-Шарфа-Шиотта (ЛШШ)

Ядерная тормозная способность рассматривается как результат последовательности независимых упругих двухчастичных столкновений.

Максимальная передаваемая энергия при лобовом столкновении – T_{\max} .

$$T_{\max} = 4M_1M_2E/(M_1+M_2)^2,$$

где E – энергия частицы, M_1 , M_2 – массы иона и атома мишени, соответственно.

Тормозная способность, т.е. потеря энергии в твердом теле с единичной плотностью атомов на отрезке $[x, x+dx]$, в этом процессе пропорциональна суммарной потере энергии в единичных столкновениях.

$$S_n(E) = - \left(\frac{1}{N} \right) \left(\frac{dE}{dx} \right)_n = \int_0^{T_{\max}} T_n d\sigma$$

где N – атомная плотность, T_n – энергия, передаваемая при столкновении с атомом,

$$T_n = T_{\max} \sin^2(\varphi/2),$$

φ – угол рассеяния в системе центра масс, σ – дифференциальное сечение столкновения.

Теория Линдхарда-Шарфа-Шиотта (ЛШШ)

Электронная тормозная способность в теории ЛШШ вычисляется в приближении свободного электронного газа. Эффективность торможения пропорциональна скорости ионов i , следовательно, корню квадратному из энергии.

$$S_e(E) = - (1/N)(dE/dx)_e = kE^{1/2}$$

Константа k зависит от атомных весов и атомных номеров налетающего иона и мишени.

Полная средняя длина пробега иона в мишени:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)}$$

где E_0 – начальная энергия иона, S_n и S_e – ядерная и электронная тормозная способность.

Диффузионная модель Бирсака

В теории Бирсака учитывается изменение направления движения иона после каждого столкновения.

При торможении ионы, в среднем, все больше и больше отклоняются от своего первоначального направления. Направление движения иона можно описывать полярным и азимутальным углами, отмечая их на единичной сфере.

Направление движения после каждого столкновения изменяется случайно, таким образом стохастическое движение на единичной сфере определяется диффузионным процессом, аналогичным броуновскому движению.

Функция распределения полярного угла ψ или его косинуса $\eta = \cos \psi$ в первый момент представляет собой дельта-функцию. При замедлении иона она уширяется, в конце траектории все направления движения являются равновесными.

Диффузионная модель Бирсака

Теория Бирсака позволяет вычислить длину проецируемого пробега, не рассчитывая явно функцию распределения для ψ или η . Достаточно вычислить среднее значение направляющего косинуса из диффузионного уравнения для функции распределения полярного угла ψ .

Средняя проекция пробега иона в диффузионной модели Бирсака.

$$R_p = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \bar{\eta} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)}$$

где η – среднее значение направляющего косинуса ионной траектории, изменяющейся при столкновениях с атомами мишени, E_0 – начальная энергия иона, S_n и S_e – ядерная и электронная тормозная способность;

$$\bar{\eta} = e^{-2\tau} \quad \tau = -\frac{M_2}{4M_1} \int_{E_0}^E \frac{S_n(E)}{S_n(E) + S_e(E)} \frac{dE}{E}$$

M_1, M_2 – массы иона и атома мишени, соответственно

Ионная имплантация

Общая длина траектории движения иона - длина пробега R

Расстояние, проходимое ионом до остановки в направлении, нормальном к поверхности мишени, - проецированная длина пробега R_p

Случайный разброс проецированной длины пробега - ΔR_p

Среднеквадратичное отклонение - ΔR_p^2

Доза имплантации (число имплантированных атомов на единицу площади см^{-2}) - ϕ

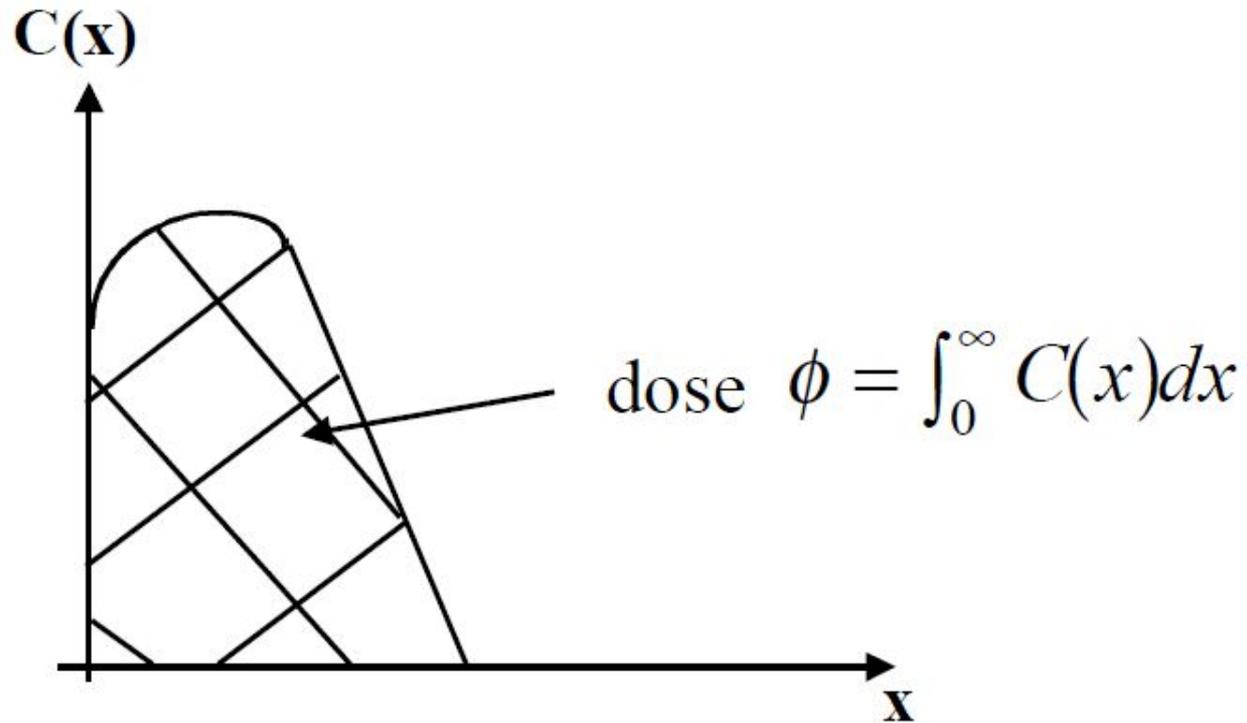
Распределение (профиль) внедренных ионов по глубине может быть оценено с помощью симметричной функции распределения Гаусса:

$$n(x) = n(R_p) \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right]$$

Максимальная концентрация $n(R_p)$

$$n(R_p) = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \approx \frac{0,4\phi}{\Delta R_p}$$

Ионная имплантация



Концентрация: $C = \text{атом/см}^3$

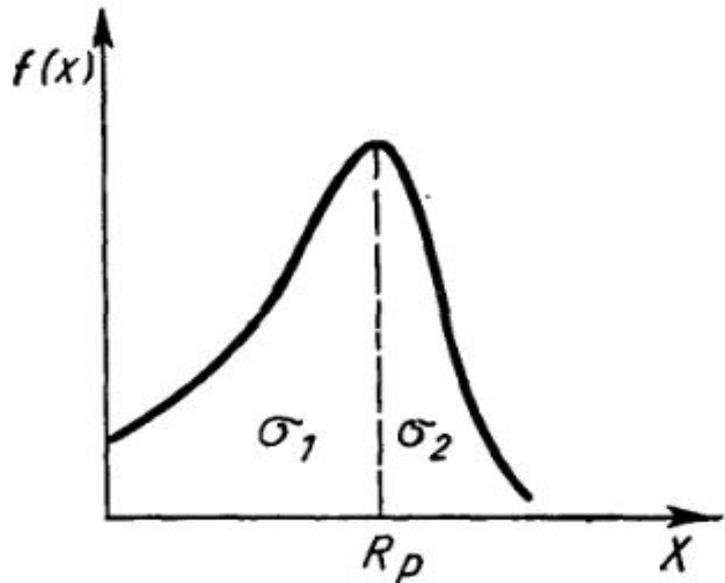
Доза: $Q = \text{атом/см}^2$

$$Q = \frac{\left(\frac{\text{Ток ионов}}{q} \right) (\text{Время имплантации})}{\text{площадь}}$$

Ионная имплантация

Недостатком описания с помощью функции Гаусса является отсутствие учета зависимости пробега внедренных ионов от различных факторов в многослойных мишенях, эффектов каналирования.

Усовершенствование модели возможно за счёт использования функции распределения ионов, имеющей вид сдвоенной полугауссианы - гауссианы с различными дисперсиями на левом и правом плечах распределения.



$$N(x) = \frac{Qf(x)}{\int_0^{\infty} f(x)dx}$$

$$f(x) = \begin{cases} \exp [-(x - R_p)^2 / (2\sigma_1)], & x \leq R_p, \\ \exp [-(x - R_p)^2 / (2\sigma_2)], & x > R_p, \end{cases}$$

Представленная модель с достаточной степенью точности описывает распределение атомов фосфора, сурьмы, мышьяка.

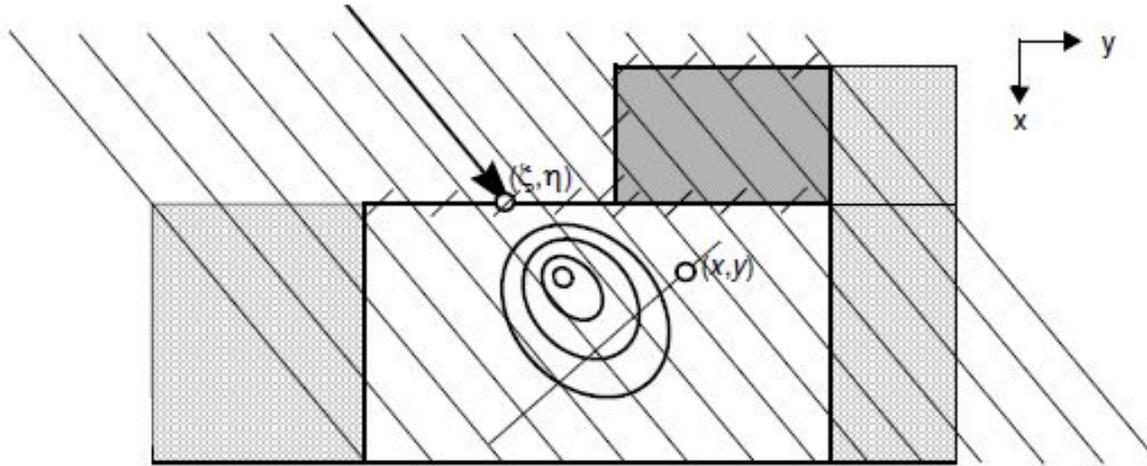
Ионная имплантация

Во время имплантации ионы внедряются в подложку через открытые участки внешней поверхности и рассеиваются внутри подложки в трех измерениях. Проекция ионного пучка в двумерной плоскости моделирования зависит от углов поворота и наклона подложки и может приводить к **несимметричным профилям распределения примеси в окрестностях краев маски**.

Предположим, что ионный пучок, падающий в точку внешней границы с координатами (ξ, η) создает в подложке функцию распределения $\Phi(x, y, \xi, \eta)$. Тогда в любой точке (x, y) внутри подложки концентрация примеси будет вычисляться как суперпозиция функций распределения, исходящих от всех точек падения ионного пучка, т.е. от всех точек внешней границы структуры:

$$N(x, y) = \int_{S_{out}} \Phi(x, y, \xi(s), \eta(s)) ds$$

Ионная имплантация



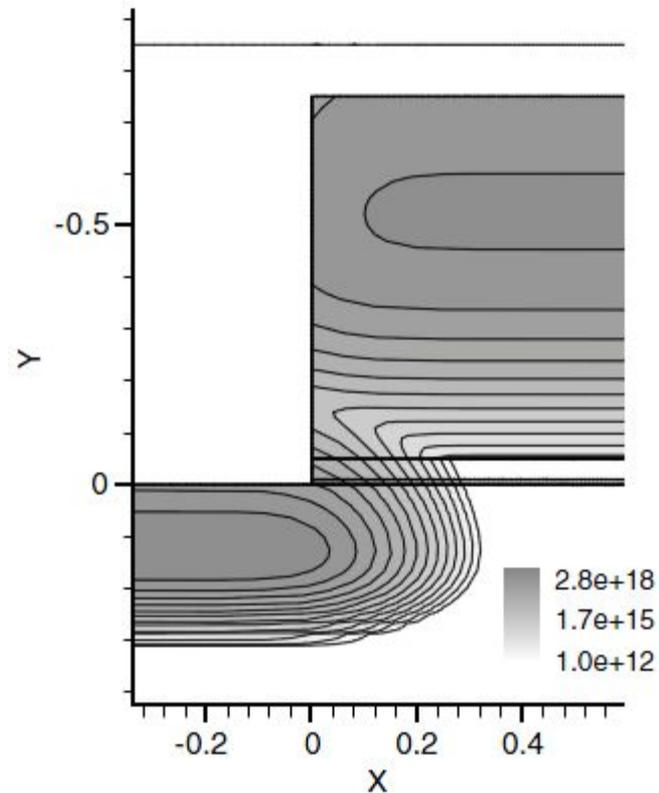
Для того чтобы сравнивать концентрацию имплантированных ионов с экспериментальными одномерными ВИМС – профилями, двумерный профиль представляется как произведение двух ортогональных функций: основной функции $f_p(x)$ и латеральной функции $f_l(y)$:

$$F(x, y, \xi, \eta) = f_p(x - \xi(s)) \cdot f_l(y - \eta(s))$$

Ионная имплантация

Латеральное (боковое) распределение также может описываться с помощью функции распределения Гаусса:

$$f_l(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_l(x)} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_l^2(x)}\right)$$



Ионная имплантация

Для описания распределения бора хорошо подходит распределение Пирсона.

Распределение Пирсона учитывает четыре параметра: R_p , ΔR_p , несимметричность γ и затухание β :

$$\frac{dh(x)}{dx} = \frac{(x'-a)h(x')}{b_2x'^2 + b_1x' + b_0} \quad x' = x - R_p.$$

h – нормированная функция распределения, удовлетворяющая условию: $\int_{-\infty}^{\infty} h(x)dx = 1$

$$\begin{aligned} a &= -\gamma_1\mu_2(\beta + 3)/A \\ b_0 &= -\mu_2^2(4\beta - 3\gamma_1^2)/A \\ b_1 &= a \\ b_2 &= -(2\beta - 3\gamma_1^2 - 6)/A \\ A &= 10\beta - 12\gamma_1^2 - 18 \end{aligned}$$

Ионная имплантация

Средний проецируемый пробег, он же 1-ый момент функции распределения

$$\mu_1 = R_p = \int_{-\infty}^{\infty} xh(x)dx$$

Разброс проецируемого пробега:

$$\mu_2 = \Delta R_p = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 h(x)dx$$

Несимметричность:

$$\gamma_1 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^3 h(x)dx / \Delta R_p^3$$

Затухание (эксцесс), характеризует плавность вблизи вершины

$$\beta = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^4 h(x)dx / \Delta R_p^4$$

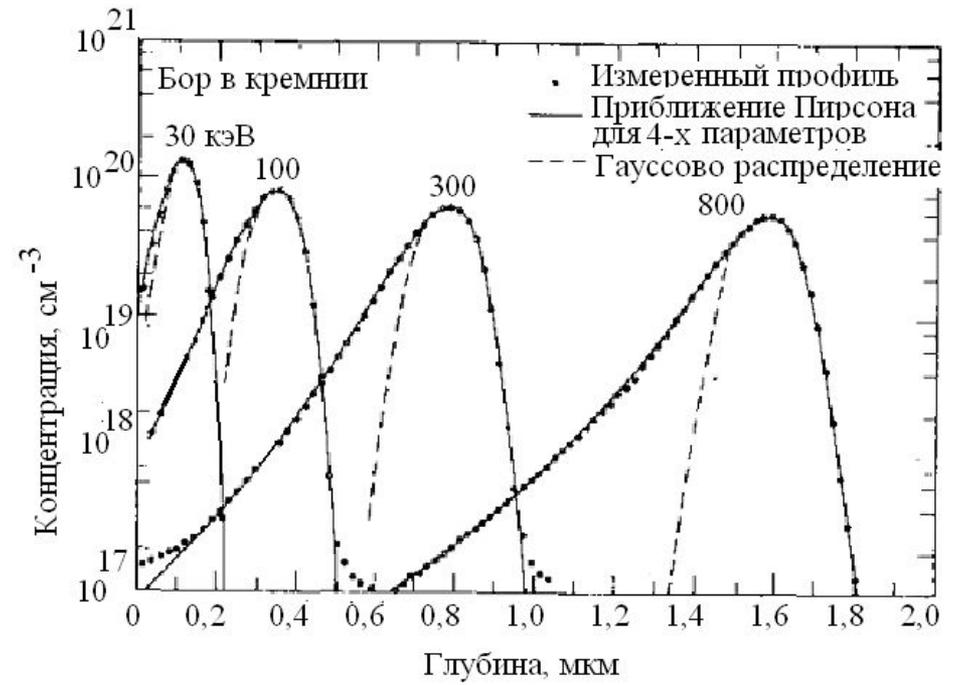
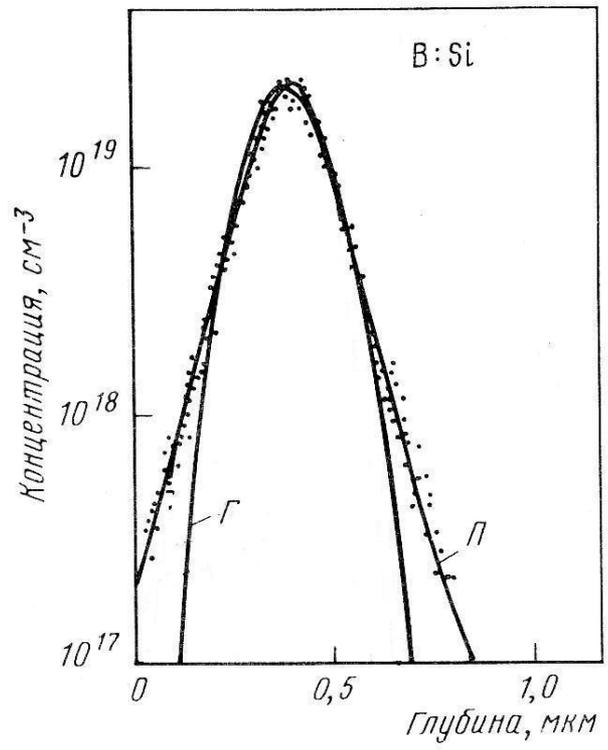
i-ый момент функции распределения

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i f(x)dx$$

Ионная имплантация

Распределение Пирсона :

$$N(x) = Dk \cdot \left[b_2 (x - R_p)^2 + b_1 (x - R_p) + b_0 \right] \times \exp \left[\frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right]$$



Ионная имплантация

Каналирование

Вследствие кристаллической природы полупроводников ионы могут проникнуть в них значительно глубже, если имплантация производится вдоль главной кристаллической оси или плоскости.

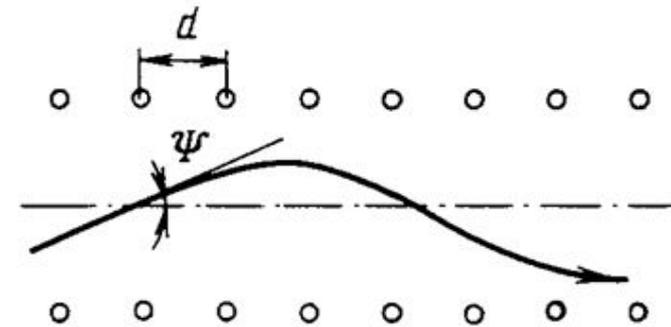
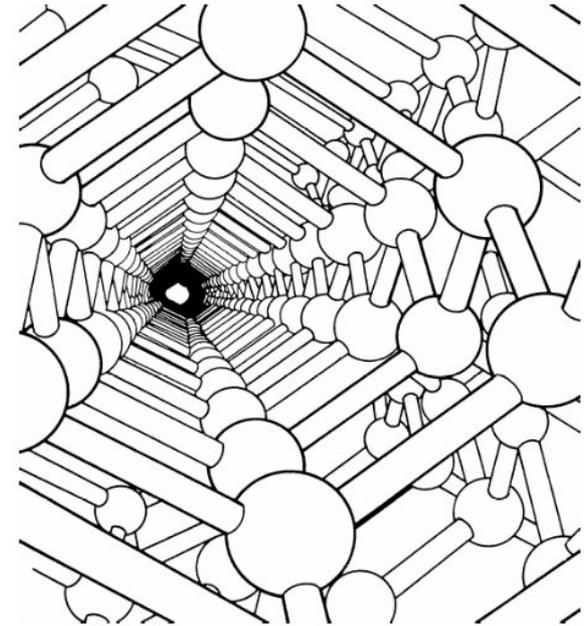
В этом случае ионы редко сближаются с атомами настолько близко, чтобы были существенными ядерные потери при столкновениях.

Вместо комбинации ядерного и электронного торможений имеет место торможение только электронное. Вследствие этого пробег пропорционален скорости иона, т.е. корню квадратному из энергии.

Критический угол каналирования – максимальный угол захвата ионов в канал при имплантации в кристаллическую подложку.

$$\Psi_{\text{крит}} = \left(\frac{a}{\sqrt{2}d} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi E \epsilon_0 d}} \right)^{1/2}$$

a – параметр экранирования порядка радиуса Бора, d – расстояние между атомами вдоль канала, Z_1, Z_2 – атомный номер иона и атома мишени, E – энергия иона.

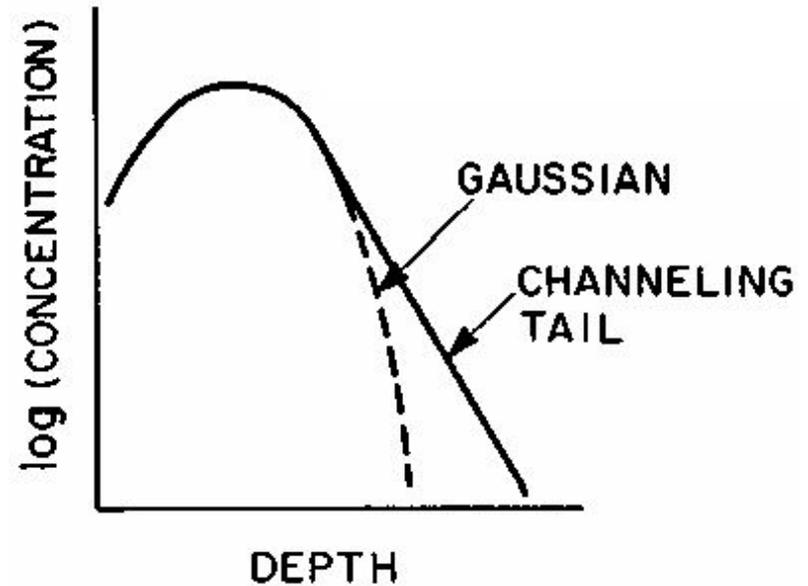


Ионная имплантация

$$N(x) = (\Phi - \Phi_{chan}) n_a(x) + \Phi_{chan} n_c(x)$$

$$n_c(x) = \begin{cases} h_{mc}(x) & \text{for } x \leq x_T \\ \kappa [h_{mc}(x) + h_{Tc}(x)] & \text{for } x > x_T \end{cases}$$

$$h_{Tc}(x) = h_{mc}(x_p) \exp \left[-(\ln \eta) \left(\frac{x - x_p}{L} \right)^a \right]$$



Ионная имплантация

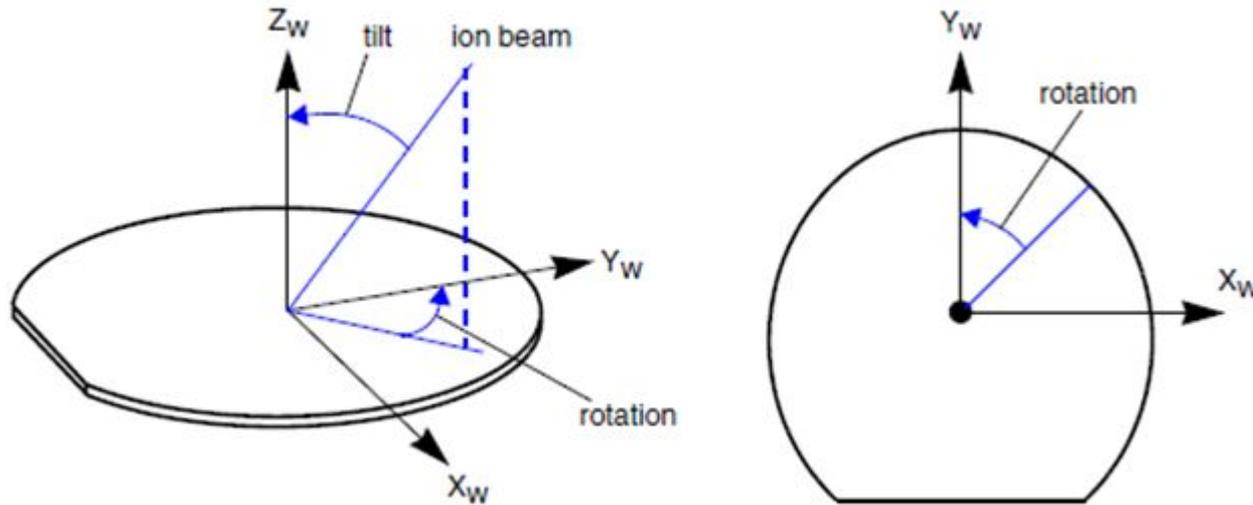
Системы координат при моделировании ионной имплантации

Первая система координат – это система, привязанная к реальной установке ионной имплантации. В этой системе координат ионный пучок всегда направлен вдоль оси $-Z$.

Вторая система координат – это система, привязанная к подложке. В этой системе всегда ось X направлена вдоль базового среза пластины, ось Z – перпендикулярно поверхности подложки. Ось Y образует с заданными осями X и Z правую тройку.

Третья система координат – это система, построенная непосредственно для проведения вычислений и моделирования либо двумерного сечения в двумерных задачах, либо трехмерного кристалла в трехмерных задачах

Ионная имплантация



Угол **Tilt** может быть определен как угол между осями Z в первой и второй системах координат, т.е. между осями Z имплантера и подложки. Угол **Rotation** определяется как угол между проекцией оси Z имплантера на плоскость подложки и осью Y подложки. Положительным считается направление против часовой стрелки. Стандартное положение подложки $Tilt=7^\circ$, $Rotation=-90^\circ$.

Ионная имплантация

Распределение Гаусса с обобщенным экспоненциальным «хвостом»

$$N(x) = \begin{cases} D \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{n_0}{\sigma_P} \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right], & \text{при } x \leq R_P + \sigma_P \\ D \cdot n_0 k \cdot \left(\frac{1}{\sigma_P \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - R_P)^2}{2\sigma_P^2}\right] + \frac{1}{\sigma_P \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{x - R_P}{l_{\text{exp}}}\right)^\alpha\right] \right), & \text{при } x > R_P + \sigma_P; \end{cases}$$

D – доза имплантированной примеси, 1/ см-3,

k – коэффициент, обеспечивающий непрерывность в точке $x = R_p + \sigma_p$

n_0 – обратное значение нормы функции распределения,

α , l_{exp} – параметры распределения в «хвостовой» части.

Ионная имплантация

Распределение Пирсона-IV с линейно-экспоненциальным хвостом

$$N(x) = \begin{cases} N_P(x), & 0 \leq x \leq x_{\max} \\ N_T(x), & x_{\max} \leq x \leq x_a \\ N_l(x), & x_a \leq x \leq \infty \end{cases}$$

$N_P(x)$ - распределение Пирсона-IV

$N_T(x)$ - функция распределения в переходной области

$N_l(x)$ - функция распределения в «хвостовой» части

x_{\max} - координата максимума функции распределения Пирсона

$$N_{\max} = N_P(x_{\max})$$

x_a - координата точки, в которой концентрация примеси равна половине максимального значения

$$N_a = N_P(x_a) = \frac{1}{2} N_{\max}$$

Функция распределения в «хвостовой» части

$$N_l(x) = N_P(x) + \left(\frac{x - x_{\max}}{l_{\exp}} \right) \cdot N_P(x_{\max}) \exp\left(- \frac{x - x_{\max}}{l_{\exp}} \right)$$

Ионная имплантация

Распределение Пирсона -IV с линейно- экспоненциальным хвостом в переходной области

$$N_T(x) = N_P(x_{\max}) \cdot \exp\left(A(x - x_{\max})^2 + B(x - x_{\max})^3\right)$$

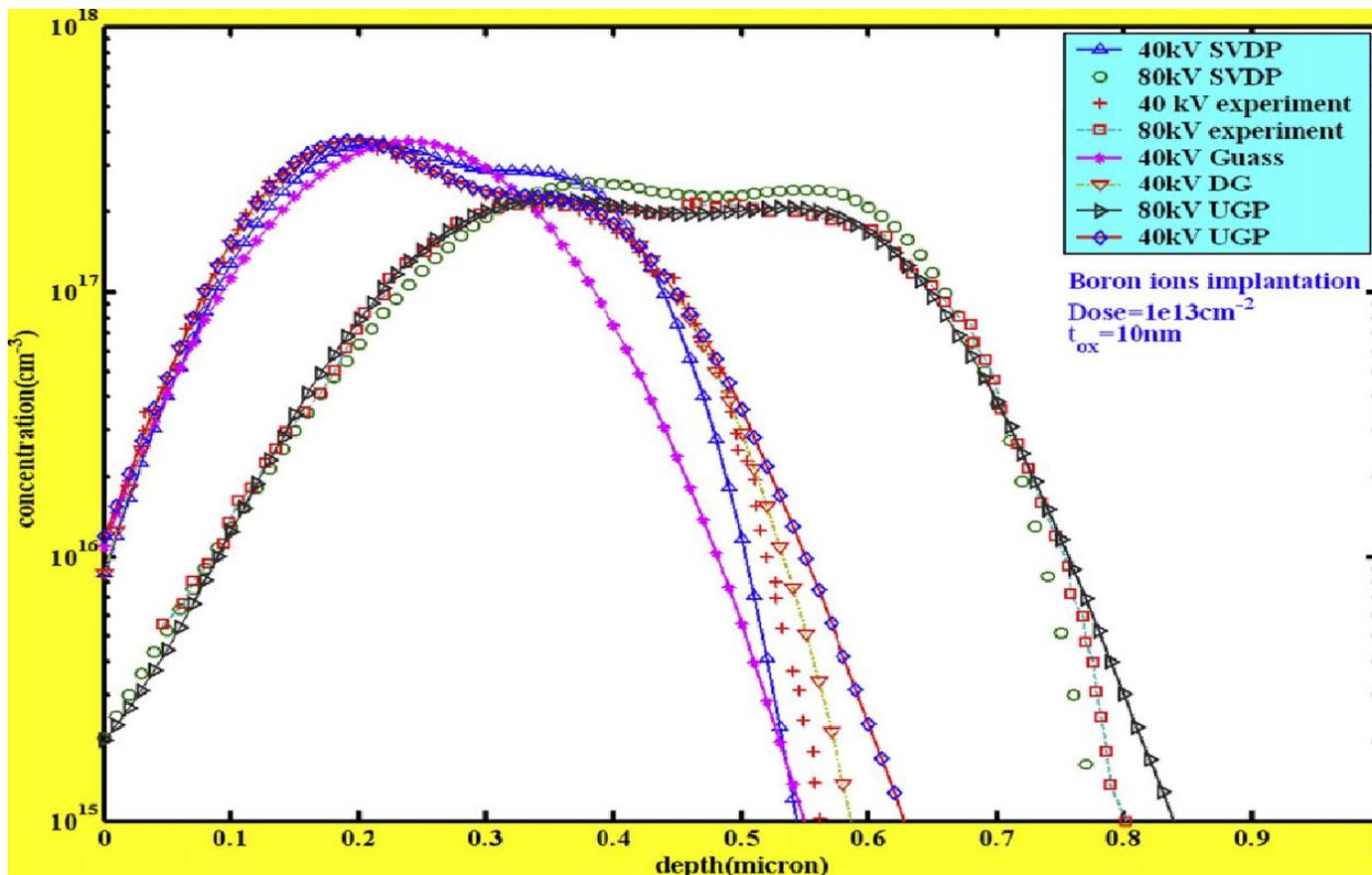
A и B определяются из условий непрерывности функции и производной в точке $x = x_a$:

$$N_l(x_a) = N_T(x_a) \qquad \frac{d}{dx} N_l(x) = \frac{d}{dx} N_T(x) = N'_a$$

$$A = \frac{3 \ln(N_a / N_{\max})}{(x_{\max} - x_a)^2} + \frac{N'_a}{N_a (x_{\max} - x_a)}$$

$$B = \frac{2 \ln(N_a / N_{\max})}{(x_{\max} - x_a)^3} + \frac{N'_a}{N_a (x_{\max} - x_a)^2}$$

Ионная имплантация



Результат применения усовершенствованных моделей учитывающих сильную асимметрию и эффекты каналирования

Ионная имплантация

В современных системах моделирования наиболее точно распределение примеси при ионной имплантации рассчитывается с использованием метода Монте – Карло.

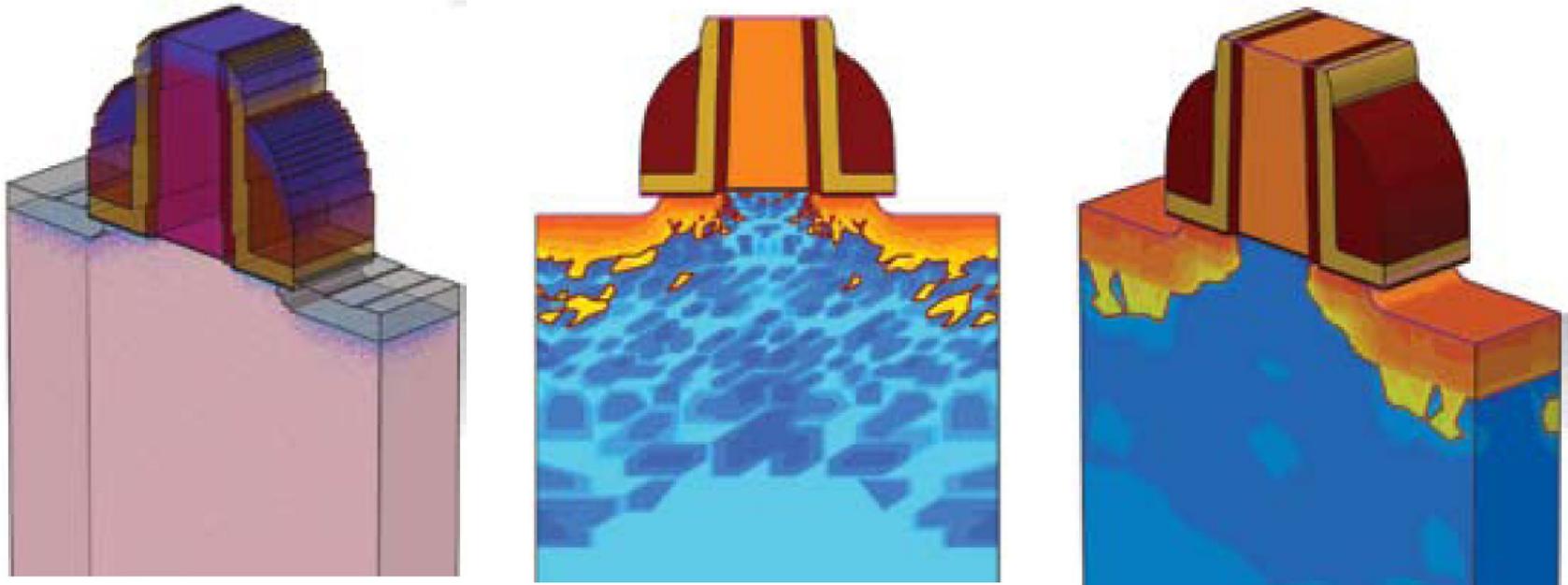
С помощью метода Монте – Карло моделируются физические события, происходящие при торможении отдельных частиц. Результатом моделирования торможения достаточно большого числа частиц является случайное распределение их траекторий. Для получения достоверных результатов требуется рассчитать, как правило, от 10 до 30 тысяч отдельных траекторий.

Основная проблема метода Монте – Карло - большая вычислительная трудоемкость

Важно оптимизировать время, затрачиваемое на вычисление каждой отдельной траектории. Это достигается, в основном, двумя способами:

- выбором эффективных оценок для средней длины свободного пробега между столкновениями с учетом энергии частицы;
- применением эффективных алгоритмов и аппроксимаций при вычислении угла рассеяния.

Ионная имплантация моделирование методом Монте-Карло



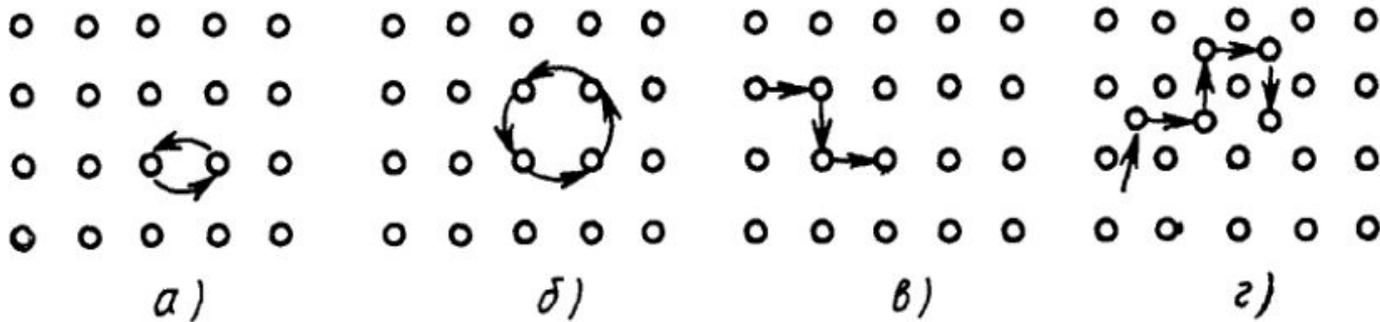
Ионная имплантация

Вопросы современного моделирования процессов ионной имплантации:

- имплантация при малых энергиях имплантации, высоких дозах;
- распределение дефектов при ионной имплантации;
- совместная имплантация примеси;
- имплантация в сложные полупроводниковые соединения, новых примесей.

Диффузия

Диффузией называется перенос атомов вещества, обусловленный их хаотическим тепловым движением, в направлении уменьшения концентрации. Диффузия атомов в кристаллической решетке осуществляется отдельными скачками из одного положения равновесия в другое



а) обмен местами соседних атомов
б) кольцевой обмен;

в) перемещение по вакансиям
г) перемещение по междоузлиям

В примесной диффузии основную роль играют механизмы по вакансиям и междоузлиям. Механизмы могут различаться от типа примеси, от температуры обработки и т.д.

Диффузия

Первый закон Фика:

$$j = -D \nabla N$$

j - плотность потока атомов; D - коэффициент диффузии; оператор дифференцирования; N - концентрация атомов

Второй закон Фика:

$$\frac{dN}{dt} = D \frac{d^2 N}{dx^2}$$

Диффузия обычно проводится в два этапа: загонка и разгонка.

Двум этапам диффузионного процесса соответствует два решения уравнения Фика при различных граничных условиях:

- первый этап - диффузия с постоянной поверхностной концентрацией или диффузия из бесконечного источника;
- второй этап - диффузия из ограниченного источника.

Диффузия из бесконечного источника

Цель этапа - внедрение в полупроводник точно контролируемого количества примеси.

Начальное условие для решения второго закона Фика:

$$N(x, t)|_{t=0} x > 0 = 0$$

Граничное условие:

$$N(x, t)|_{t \geq 0} x = 0 = N_0$$

Решение уравнения Фика:

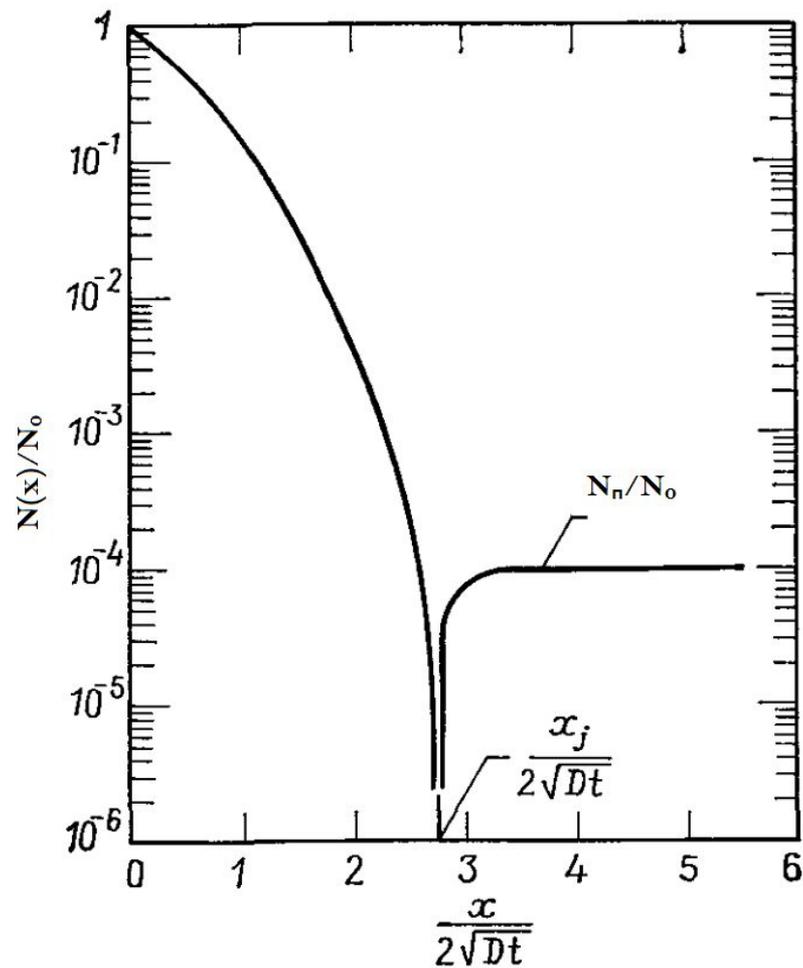
$$N(x, t) = N_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

$\operatorname{erfc} y$ - дополняющая к функции ошибки $\operatorname{erf} y$:

$$\operatorname{erfc} y = 1 - \operatorname{erf} y = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-z^2} dz$$

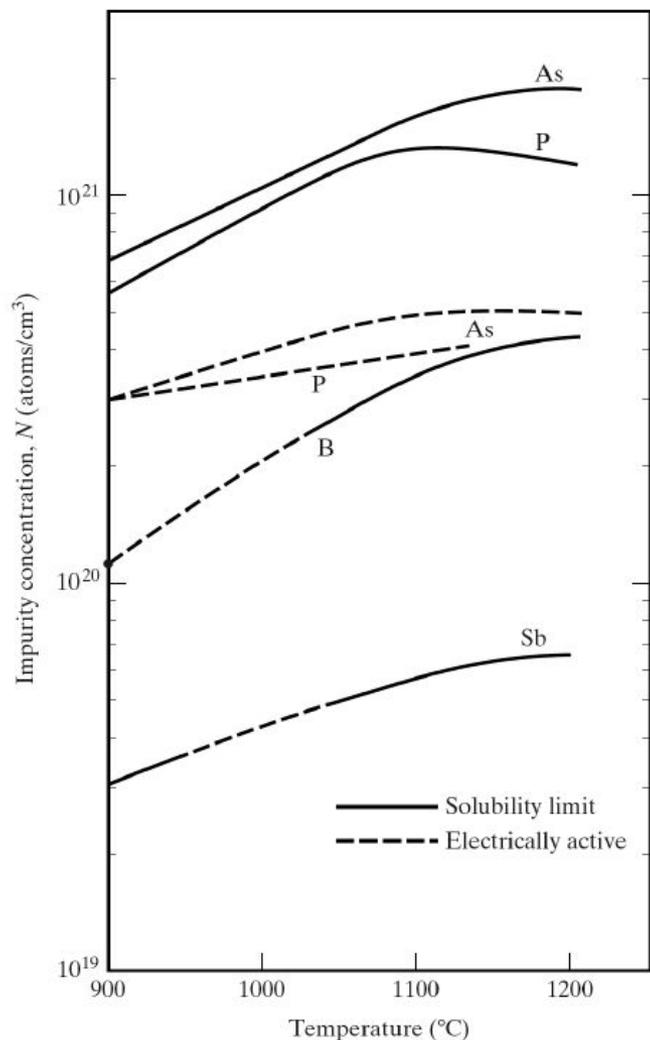
В результате за время t в твердое тело поступит количество примеси:

$$Q = \int_0^{\infty} N(x, t) dx = 2N_0 \sqrt{Dt} / \pi$$

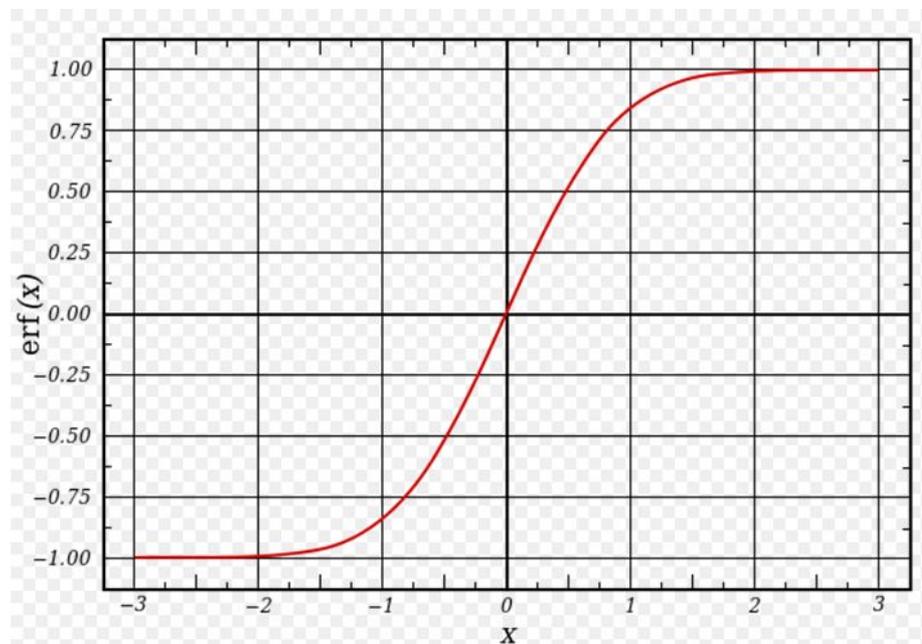


Диффузия из бесконечного источника

Предел растворимости примеси в кремнии (сплошная линия)



Функция ошибки erf(x)



Диффузия из ограниченного источника

Цель этапа - получение заданного распределения примеси

Граничное условие

(поток примеси через поверхность $x=0$ в любое время отсутствует)

$$\left. \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$$

Вся примесь сосредоточена в тонком приповерхностном слое толщиной h , распределение примеси $Q=N_0h$.

Начальные условия:

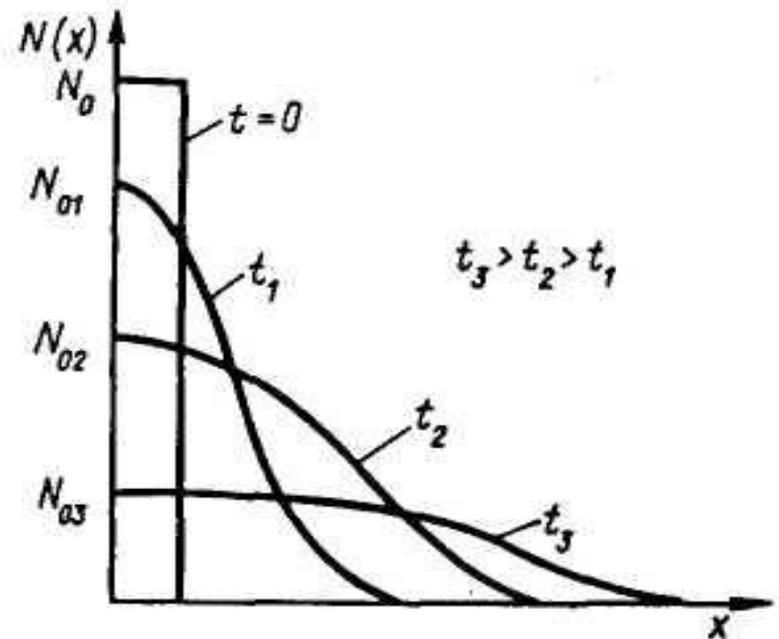
$$N(x, t)|_{t=0} = \begin{cases} N_0, & 0 \leq x \leq h \\ 0, & x > h \end{cases}$$

Решение уравнения Фика:

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \exp \left[- \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)^2 \right]$$

Поверхностная концентрация примеси в момент времени t

$$N_s(t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} < N_0$$



Диффузия

В диапазоне используемых температур коэффициент диффузии обычно описывается уравнением Аррениуса:

$$D(T) = D_0 \exp(-E_A/kT)$$

E_A - энергия активации;

k - постоянная Больцмана;

T - температура.

Данная модель предполагает взаимодействие примеси при диффузии только с одним каким-либо видом дефектов, находящимся в состоянии равновесия.

Элемент	D_0 (см ² /с)	E_A (эВ)
B	10,5	3,69
Al	8,0	3,47
Ga	3,6	3,51
In	16,5	3,90
P	10,5	3,69
As	0,32	3,56
Sb	5,60	3,95

Диффузия

Если собственный или примесный атом при диффузии взаимодействует с точечными дефектами (вакансии и междоузлия), то его коэффициент диффузии пропорционален концентрации и коэффициенту диффузии этих дефектов.

Точечные дефекты могут находиться в нейтральном V^X , однократно ионизованном состоянии V^- , V^+ , двукратно ионизованном состоянии $V^{=}$.

$$D = D^+ \frac{n_{ie}}{n} + D^X + D^- \frac{n}{n_{ie}} + D^{=} \left(\frac{n}{n_{ie}} \right)^2 + D_I [I]$$

Диффузия

Для акцепторной примеси, например бора, диффузия происходит через нейтральные и положительно заряженные вакансии.

Для донорной примеси – через нейтральные и отрицательно заряженные вакансии.

Пример:

Диффузия, ускоренная окислением

В общем случае ускорение диффузии можно интерпретировать как дополнительную концентрацию междоузлий

$$D_I[I](x, y) = D_o |v_T(x_T, y_T)|^{voxn} \exp - \frac{\sqrt{(x - x_T)^2 + (y - y_T)^2}}{leny}$$

voxn и leny – экспериментальные параметры

Диффузия, замедленная окислением

$$D(x, y) = \frac{D_{inert}(x, y)}{\left(1 + D_o |v_T(x_T, y_T)|^{voxn}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\sqrt{(x - x_T)^2 + (y - y_T)^2}}{leny}\right)}$$

Диффузия

Дальнейшее усовершенствование моделей диффузии сводится к учету взаимодействия между точечными дефектами и примесями, учет влияния пар точечный дефект – примесь.

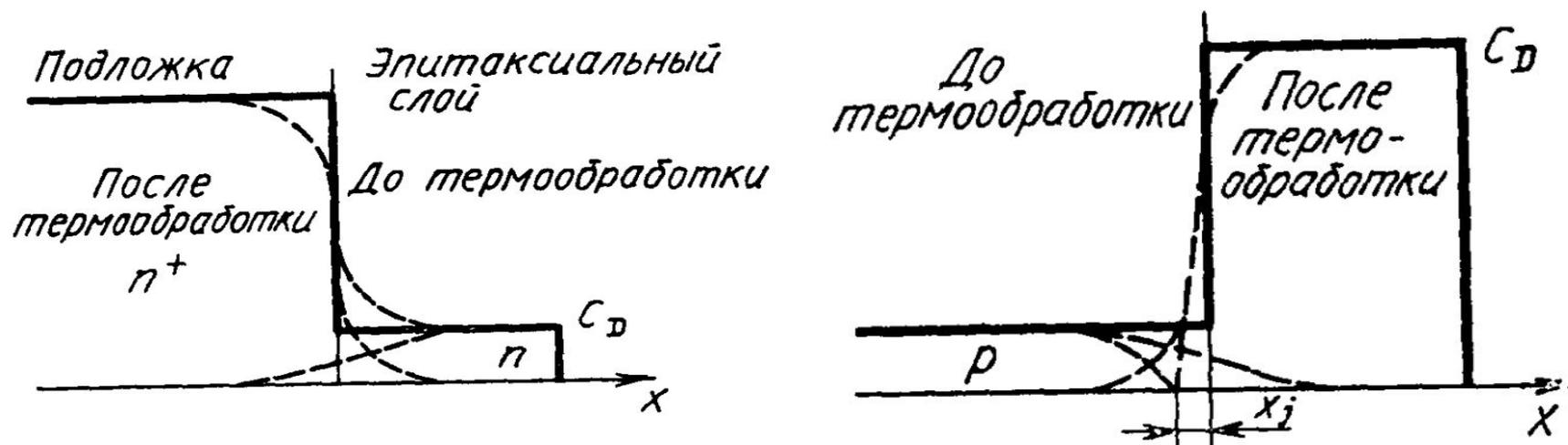
Вопросы современного моделирования процессов диффузии:

- моделирование с учетом точечных дефектов, в том числе с распределением, полученным из результатов моделирования ионной имплантации;
- моделирование при различных режимах температурной обработки, различные внешние условия (атмосфера, примеси в реакторе и т.д.);
- моделирование распределение примеси в сложных полупроводниковых соединениях;
- процессы диффузии атомов при формировании омических контактов и контактов Шоттки.

Эпитаксия

Эпитаксия — это закономерное нарастание одного кристаллического материала на другой, т.е. ориентированный рост одного кристалла на поверхности другого (подложки).

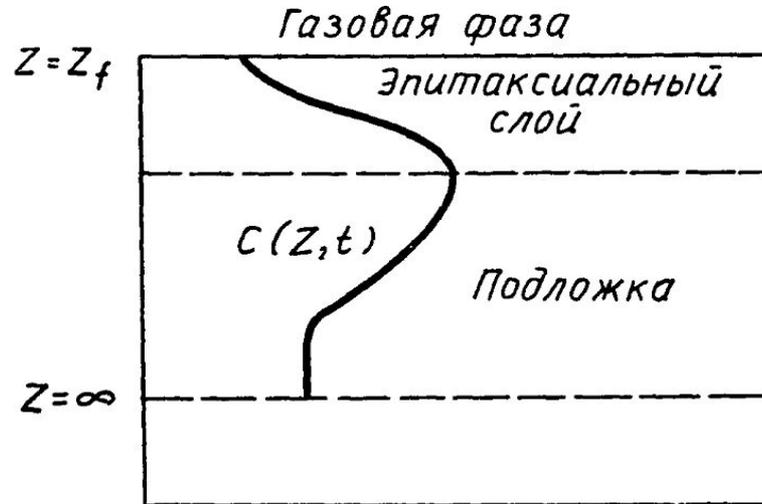
Формирование эпитаксиальных слоев с равномерным легированием может оказаться чрезвычайно затруднительным из-за неравномерности распределения легирующего вещества на начальной границе эпитаксиальный слой подложка.



Эффекты, влияющие на распределении примеси при эпитаксиальном росте

Эпитаксия

Модель роста слоев кремния из смеси силана с водородом и легирование эпитаксиальных слоев. Источник примеси – арсин.



Для расчёта термического распределения в объеме структуры в процессе эпитаксиального роста используется одномерное уравнение диффузии, решаемое для области $\infty > Z > Z_f$

$$\frac{\partial C(Z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} \left(D \frac{\partial C}{\partial Z} \right)$$

Граничные и начальные условия

$$C(Z, 0) = f_1(Z), \quad D \frac{\partial C}{\partial Z} \Big|_{z \rightarrow \infty} = 0, \quad D \frac{\partial C}{\partial Z} \Big|_{z \rightarrow z_f} = f_2(t)$$

Эпитаксия

Последовательность процессов при эпитаксиальном росте:

1. принудительный массоперенос арсина от входа в камеру к области эпитаксиального наращивания;
2. массоперенос молекул арсина из основного газового потока через граничный слой к поверхности, где происходит эпитаксиальное наращивание;
3. диссоциацию молекул арсина посредством газофазных химических реакций на мышьяксодержащие частицы;
4. адсорбцию мышьяксодержащих частиц на поверхности;
5. химическую диссоциацию арсина в адсорбированном слое;
6. диффузию на поверхности и встраивание адсорбированных атомов As в наращиваемый эпитаксиальный слой;
7. зарастание встроенных в решетку атомов As за счёт последующего подхода атомов Si в процессе наращивания;
8. десорбцию водорода с поверхности.

$$D \frac{\partial C}{\partial Z} \Big|_{z=z_f} = \dot{f}_2(t) = -k_{mf} \left[p_{D0} - \frac{C(Z_f)}{k_p} \right] + gC(Z_f) + k_A \frac{\partial C(Z_f)}{\partial t}$$

k_{mf} - кинетический коэффициент, связанный с механизмом, определяющим процесс захвата решеткой легирующей примеси;

p_{D0} - парциальное давление на входе;

$C(Z_f)$ - концентрация легирующей примеси на границе раздела фаз;

k_p - коэффициент сегрегации, связывающий концентрацию легирующей примеси в газовой фазе;

k_A - коэффициент, связывающий концентрацию легирующей примеси в эпитаксиальном слое с концентрацией атомов этой примеси в адсорбированном слое