



# ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

## Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

---

### ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΤΑΧΕΙΑΣ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΚΑΙ ΓΕΡΜΑΝΙΟΥ ΣΕ ΚΑΘΕΣΤΩΣ ΜΗ ΤΗΞΗΣ

---

Διδακτορική διατριβή

**Σπύρος Σταθόπουλος**

Διπλωματούχος Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και  
Φυσικών Επιστημών ΕΜΠ

Επιβλέπων

Δημήτρης Τσουκαλάς

Καθηγητής ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης







# ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

## Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

---

### ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΤΑΧΕΙΑΣ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΚΑΙ ΓΕΡΜΑΝΙΟΥ ΣΕ ΚΑΘΕΣΤΩΣ ΜΗ ΤΗΞΗΣ

---

Διδακτορική διατριβή

**Σπύρος Σταθόπουλος**

Διπλωματούχος Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και  
Φυσικών Επιστημών ΕΜΠ

**Τριμελής συμβουλευτική επιτροπή**

Τσουκαλάς Δημήτρης, Καθηγητής ΕΜΠ (επιβλέπων)

Ζεργιώτη Ιωάννα, Αναπ. Καθηγήτρια ΕΜΠ

Τσάμης Χρήστος, Ερευνητής Α, ΕΚΕΦΕ «Δ»

**Επταμελής εξεταστική επιτροπή**

Τσουκαλάς Δημήτρης, Καθηγητής ΕΜΠ (επιβλέπων)

Ζεργιώτη Ιωάννα, Αναπ. Καθηγήτρια ΕΜΠ

Τσάμης Χρήστος, Ερευνητής Α, ΕΚΕΦΕ «Δ»

Σεραφετινίδης Αλέξανδρος, Καθηγητής ΕΜΠ

Ράπτης Ιωάννης, Αναπ. Καθηγητής ΕΜΠ

Normand Pascal, Ερευνητής Α, ΕΚΕΦΕ «Δ»

Τσέτσερης Λεωνίδα, Αναπ. Καθηγητής ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2015



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Πειραματική μελέτη και προσομοίωση της ταχείας ανόπτησης πυριτίου και  
γερμανίου σε καθεστώς μη τήξης

Διδακτορική διατριβή

του

Σπύρου Σταθόπουλου

Διπλωματούχου Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών ΕΜΠ

Copyright© 2015 Σπύρος Σταθόπουλος — Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Το παρόν κείμενο παρέχεται υπό τους όρους της άδειας χρήσης “Creative Commons by Attribution Share-Alike”. Επιτρέπεται η αντιγραφή, ελεύθερη αναδιανομή και τροποποίηση του παρόντος έργου εφόσον διατηρείται εμφανώς αναφορά στον αρχικό δημιουργό και τα παράγωγα έργα αναδιανέμονται υπό την ίδια άδεια.

<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο — ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος “Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση” του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) – Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: *Ηράκλειτος ΙΙ. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου.*



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ  
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ  
2007-2013  
πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΙΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σε αυτή τη διδακτορική διατριβή θα δούμε τη χρήση της τεχνικής της ανόπτωσης με laser διοξειδίου του άνθρακα ( $\text{CO}_2$ ) το οποίο λειτουργεί σε μήκος κύματος 10.6  $\mu\text{m}$  για τη θερμική κατεργασία γερμανίου και πυριτίου σε χρονικό εύρος millisecond και καθεστώς μη τήξης. Η ανόπτωση είναι κρίσιμο βήμα στη διαδικασία κατασκευής μικροηλεκτρονικών διατάξεων και καθώς οι διαστάσεις αυτών μικραίνουν είναι εξαιρετικά μεγάλης σημασίας ο ακριβής έλεγχος της διάχυσης των προσμίξεων ούτως ώστε να είναι εφικτός ο σχηματισμός εξαιρετικά ρηχών επαφών με τον μέγιστο βαθμό ενεργοποίησης και την ελάχιστη δυνατή διάχυση. Παράλληλα η θέρμανση του υλικού σε υψηλές θερμοκρασίες είναι σημαντική για την επανακρυστάλλωση της φθοράς που υπεισέρχεται μετά την εμφύτευση. Σε αυτή την εργασία εργαζόμαστε προς αυτή την κατεύθυνση και παρουσιάζουμε τη χρήση του laser  $\text{CO}_2$  για να πετύχουμε την κατασκευή εξαιρετικά ρηχών επαφών  $p^+/n$  στο πυρίτιο και όσο το δυνατόν πιο ρηχών επαφών  $n^+/p$  στο γερμάνιο.

Όσον αφορά το πυρίτιο, η επίτευξη χαμηλής διάχυσης και απότομων προφίλ προσμίξεων παίζει εξαιρετικά μεγάλο ρόλο για τον έλεγχο των ρευμάτων διαρροής τόσο στην πηγή/απαγωγό του τρανζίστορ MOSFET όσο και στις επεκτάσεις αυτών κάτω από τα διαχωριστικά οξειδία που ήδη από τον κόμβο των 90 nm είναι απαραίτητες για τον περιορισμό του short channel effect. Θα αξιοποιήσουμε το laser  $\text{CO}_2$  καθώς και την τεχνική της εμφύτευσης εμφύτευσης πλάσματος  $\text{BF}_3^+$  (Plasma Immersion Ion Implantation, PIII) για τον σχηματισμό επαφών  $n^+/p$  με βάση το βόριο με εξαιρετικά μικρή διάχυση κάτι το οποίο θα μας οδηγήσει σε βάθη επαφής μέχρι 15 nm, μεγάλα επίπεδα ενεργοποίησης και πλήρη επανακρυστάλλωση των αμορφοποιημένων περιοχών. Η μελέτη της ανόπτωσης στο πυρίτιο συνοδεύεται από υλοποίηση ενός μοντέλου προσομοίωσης μέσω του industry standard TCAD εργαλείου Sentaurus Process™ της εταιρείας Synopsys® για την πρόβλεψη τόσο της θερμοκρασιακής κατανομής όσο και της κινητικής του βορίου και του επιπέδου ενεργοποίησης του με πολύ καλά αποτελέσματα.

Στην περίπτωση του γερμανίου μελετήθηκε η βιωσιμότητα της ίδιας μεθόδου για τον σχηματισμό ηλεκτρικά ενεργών επαφών  $n^+/p$  με βάση τον φώσφορο. Ο έλεγχος της διάχυσης του φωσφόρου είναι ένα πολύ σημαντικό ζήτημα για τη σμίκρυνση των

μικροηλεκτρονικών διατάξεων που βασίζονται στο γερμάνιο. Χρησιμοποιώντας τη διάταξη ανόπτησης με το laser CO<sub>2</sub> έγινε εφικτή η κατασκευή των επαφών με εξαιρετικά μικρή διάχυση. Επίσης εξερευνάται η χρήση του αζώτου ως παράγοντα συννόθευσης για τον περαιτέρω έλεγχο της διάχυσης του φωσφόρου. Τα πειράματά μας όντως έδειξαν ιδιαίτερα έντονο κατευνασμό της διάχυσης με κόστος το χαμηλότερο επίπεδο ενεργοποίησης γεγονός που έγινε ξεκάθαρο μέσω ηλεκτρικού χαρακτηρισμού και μετρήσεων SIMS. Παράλληλα, αυτό επιβεβαιώθηκε και μέσω θεωρητικών υπολογισμών density functional theory (DFT) οι οποίοι κατέδειξαν ότι ο φώσφορος σχηματίζει ενεργειακά σταθερά αλλά ηλεκτρικά αδρανή σύμπλοκα με το άζωτο.



## ABSTRACT

In this dissertation we present the application of laser annealing of silicon and germanium using a carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) laser at  $10.6 \mu\text{m}$  in millisecond range and sub-melt regime. Thermal annealing is a crucial step in the fabrication process of micro- and nanoelectronic devices. As their critical dimension decreases the control of dopant diffusion is of paramount importance in order to be able to create extremely shallow junctions with the least possible profile movement. In addition high temperature treatment of the semiconductor is important for the crystal reconstruction of the implantation induced damage. In this work we are moving toward that end by using a high power  $\text{CO}_2$  laser for the fabrication of ultra shallow  $\text{p}^+/\text{n}$  junctions in silicon and  $\text{n}^+/\text{p}$  junctions in germanium.

As far as silicon is concerned the achievement of low impurity diffusion as well as abrupt dopant profiles plays an extremely important role in controlling leakage currents in both MOSFET source/drain and the source/drain extension below the spacer oxides that are present since the introduction of the 90 nm technology node to address short channel effects. We utilize our  $\text{CO}_2$  laser setup and  $\text{BF}_3^+$  Plasma Immersion Ion Implantation (PIII) for the fabrication of  $\text{p}^+/\text{n}$  junctions based on boron impurities that exhibit junction depth up to 15 nm, high activation percentage and full recrystallization of the amorphized regions. This experimental process is supported through the use of an industry standard TCAD tool, Synopsys® Sentaurus Process™, to predict both the temperature distribution as well as the boron kinetics. Both are in excellent agreement with our experimental observations.

In the case of germanium we examined the viability of the same annealing process for realizing electrically active  $\text{n}^+/\text{p}$  dopants with created with phosphorus ion implantation. Controlling the fast diffusion of phosphorus is a critical issue for the scaling of germanium based microelectronic devices. Using our setup it was made possible to fabricate junctions with very small profile movement and high activation levels. We also explore the presence of nitrogen co-doping and we conclude that it can further reduce dopant movement at the expense of lower activation level. This observation is confirmed by both electrical and SIMS measurements. Additionally we employ density functional theory (DFT) calculation to further examine this phe-

nomenon. DFT calculations indicate that nitrogen-phosphorus co-doping creates stable but electrically inert N-P complexes that, indeed, are consistent with the observed deactivation and diffusion suppression of phosphorus.

## ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η διαδικασία εκπόνησης ενός διδακτορικού δεν είναι ούτε εύκολη και αρκετές φορές, μπορώ να πω, ούτε ιδιαίτερα ευχάριστη εμπειρία. Υπάρχουν πολλές στιγμές απογοήτευσης ιδιαίτερα όταν κάποιος επενδύει κόπο και βλέπει τα πειράματά του να μην αποδίδουν αποτελέσματα. Η κατάσταση είναι ακόμα πιο πολύπλοκη αν αναλογιστούμε το γενικότερο πλαίσιο στο οποίο πραγματοποιείται η έρευνα στα ελληνικά πανεπιστήμια με τα γνωστά προβλήματα υποχρηματοδότησης, ελλιπούς οργάνωσης, γραφειοκρατίας, κλπ., τα οποία αν και υπήρχαν ανέκαθεν τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει ακόμα εντονότερα αντικατοπτρίζοντας τα παγιωμένα, πλέον, οικονομικά και κοινωνικά προβλήματα της χώρας. Σίγουρα, δεν είναι ένα περιβάλλον ενθαρρυντικό για την εκπαίδευση και ανάδειξη νέων επιστημόνων. Ωστόσο παρά τις αντιξοότητες η παρούσα διατριβή έφτασε στο τέλος της και, αναπόφευκτα, κάποιοι άνθρωποι συνδέθηκαν με αυτή τη δουλειά. Αυτή η μικρή εισαγωγή αφιερώνεται, συνεπώς, σε εκείνους.

Δεν θα μπορούσα να μην ξεκινήσω από τον επιβλέποντά μου καθηγητή Δημήτρη Τσουκαλά με τον οποίον είχα τη χαρά να συνεργαστώ συνεχόμενα τα τελευταία χρόνια από τότε που ήμουν ακόμα προπτυχιακός φοιτητής της σχολής. Εκτός από τη δημιουργία ενός ασφαλούς και εύρυθμου ερευνητικού περιβάλλοντος οι συμβουλές του και η εμπειρία σε θέματα που σχετίζονται με το αντικείμενο της διατριβής ήταν καθοριστικής σημασίας για την εξέλιξη αυτής της δουλειάς. Οι ευχαριστίες μου επίσης επεκτείνονται και στα υπόλοιπα δύο μέλη της συμβουλευτικής επιτροπής μου και συγκεκριμένα την αναπληρώτρια καθηγήτρια ΕΜΠ Ιωάννα Ζεργιώτη και τον ερευνητή του ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” Δρ. Χρήστο Τσάμη. Δεν πρέπει επίσης να παραλείψω να αναγνωρίσω τη βοήθεια του καθηγητή ΕΜΠ Αλέξανδρου Σεραφετινίδη σε ορισμένα θέματα που είχαμε με την ομοιομορφία της δέσμης του laser στην αρχή αυτού του διδακτορικού. Επίσης, δεν μπορώ να μην αναφερθώ στον αναπληρωτή καθηγητή ΕΜΠ Ιωάννη Ράπτη με τον οποίον συνεργαστήκαμε πολύ συχνά σε διάφορα θέματα σχετικά ή μη με αυτή τη δουλειά και ο οποίος ήταν πάντα πρόθυμος να βοηθήσει. Οφείλω να αναγνωρίσω ακόμα, τη βοήθεια του αναπληρωτή καθηγητή ΕΜΠ Λεωνίδα Τσέτσερη. Η συνεισφορά και η εμπειρία του με τους υπολογισμούς DFT που χρησιμοποιήθηκαν για τη μελέτη της συμπεριφοράς της συννόθευσης αζώτου και φωσφόρου στο γερμάνιο ήταν εξέχουσας σημασίας.

Επίσης, πρέπει να ευχαριστήσω θερμά τον Δρ. Gérard Bennasayag του ερευνητικού κέντρου CEMES/CNRS στην Τουλούζη για την πραγματοποίηση των μετρήσεων SIMS στα δείγματα του πυριτίου καθώς και τους Δρ. Nilay Pradhan και Δρ. Benjamin Colombeau ερευνητές της Applied Materials για τις μετρήσεις SIMS στα δείγματα γερμανίου. Ευχαριστώ ακόμα τους Yohann Spiegel και Δρ. Frank Torregrosa της εταιρείας Ion Beam Services για τις εμφυτεύσεις πλάσματος  $\text{BF}_3$  καθώς και τον Δρ. Κώστα Γιαννακόπουλο του ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” για τις εικόνες TEM.

Πρέπει επίσης να αναφερθώ στη συμβολή του Δρ. Αντώνη Φλωράκη συνέχεια της δουλειάς του οποίου αποτελεί αυτή η διατριβή. Χωρίς τη βοήθεια και τις υποδείξεις του στην αρχή αυτής της προσπάθειας είναι σίγουρο ότι θα είχα να αντιμετωπίσω πολύ περισσότερες δυσκολίες από όσες τώρα.

Φυσικά δεν γίνεται να μην ευχαριστήσω τους συναδέλφους και συνεργάτες με τους οποίους μοιραστήκαμε ευχάριστες αλλά και δύσκολες στιγμές. Θα ξεκινήσω πρώτα με τα μέλη της ερευνητικής ομάδας του εργαστηρίου με τα οποία συνεργαστήκαμε άψογα όλα αυτά τα χρόνια και θέλω να πιστεύω ότι διατηρούμε μια πολύ καλή φιλική σχέση πέρα από την αλληλεπίδραση μεταξύ συναδέλφων. Συγκεκριμένα (με τυχαία σειρά) τους Δρ. Βαγγέλη Σκοτάδη, Ειρήνη Μιχελακάκη, Μαριάνθη Παναγοπούλου, Παναγιώτη Μπούσουλα, Λεωνίδα Μαδιανό και Λάμπρο Πατσιούρα. Πραγματικά δε νομίζω ότι θα μπορούσα να έχω καλύτερους συναδέλφους τόσο από πλευρά ικανοτήτων όσο και προσωπικότητας. Το ίδιο ισχύει και για τρέχοντα και προηγούμενα μέλη της ερευνητικής ομάδας της κ. Ζεργιώτη με τα οποία είχα καθημερινή αλληλεπίδραση και συγκεκριμένα τους Δρ. Μαριαννέζα Χατζηπέτρου, Μαρίνα Μακρύγιαννη, Γιάννη Καλπύρη, Σίμο Παπάζογλου και Δρ. Φιλήμονα Ζαχαράτο. Ιδιαίτερη μνεία επίσης στον Δημήτρη Τσιαλούκη οι διαχειριστικές ικανότητες του οποίου ήταν σημαντικότες για τη βιωσιμότητα του εργαστηρίου μας.

Κλείνοντας, νομίζω είναι αυτονόητο ότι οφείλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου Παναγιώτη και Αγγελική για την αδιαμαρτύρητη υποστήριξη τους όλα αυτά τα χρόνια από τότε που ήμουν ακόμα μαθητής μέχρι σήμερα. Ένα μεγάλο ευχαριστώ επίσης στην πρώην συμφοιτήτρια και καλή μου φίλη Αρχοντία Δημητρίου για το εξονυχιστικό proofreading του κειμένου.

Η παρούσα έρευνα έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο — ΕΚΤ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος “Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση” του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) – Ερευνητικό Χρηματοδοτούμενο Έργο: *Ηράκλειτος II. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου*.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Περιεχόμενα **xiii**

Πρόλογος **1**

<b>1</b>	<b>Εισαγωγή: Ιστορική αναδρομή και γενικές αρχές</b>	<b>5</b>
1.1	Σύντομη ιστορία της τεχνολογίας ημιαγωγών	5
1.2	Το MOSFET και η σμίκρυνσή του	9
1.3	Νέες προσεγγίσεις στην κατασκευή των σύγχρονων τρανζίστορ	16
1.4	Ιοντική εμφύτευση και ρηχές επαφές	20
1.5	Θερμική ανόπτηση	29
1.6	Ανακεφαλαίωση	32
1.7	Αναφορές	34
<b>2</b>	<b>Αλληλεπίδραση της ακτινοβολίας laser με την ύλη</b>	<b>41</b>
2.1	Εισαγωγή	41
2.2	Απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας	42
2.3	Θερμική επίδραση της ακτινοβολίας laser	49
2.4	Διαφορές στα άκρα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος	55
2.5	Αναφορές	56
<b>3</b>	<b>Διάχυση προσμίξεων στους ημιαγωγούς</b>	<b>59</b>
3.1	Μακροσκοπική θεώρηση της διάχυσης	60
3.2	Ατομιστική προσέγγιση της διάχυσης	63
3.3	TCAD προσομοίωση — Το μοντέλο Charged-React	71
3.4	Διάχυση του βορίου στο πυρίτιο	75
3.5	Διάχυση του φωσφόρου στο γερμάνιο	77
3.6	Αναφορές	80
<b>4</b>	<b>Προσομοίωση με το Sentaurus Process</b>	<b>85</b>
4.1	Εισαγωγή	85
4.2	Επίλυση εξισώσεων με το SProcess	87

4.3	Η διαδικασία της προσομοίωσης	92
4.4	Προσομοίωση της εμφύτευσης	96
4.5	Προσομοίωση της θερμικής αλληλεπίδρασης	106
4.6	Μελέτη της διάχυσης με το SProcess	116
4.7	Ανακεφαλαίωση	121
4.8	Αναφορές	121
<b>5</b>	<b>Κατασκευή ρηχών επαφών στο πυρίτιο</b>	<b>125</b>
5.1	Εισαγωγή	125
5.2	Αρχή λειτουργίας του laser διοξειδίου του άνθρακα	126
5.3	Η διάταξη ανόπτησης με laser CO <sub>2</sub>	128
5.4	Βαθμονόμηση της διάταξης	130
5.5	Η πειραματική διαδικασία — Τεχνικές χαρακτηρισμού	133
5.6	Αποτελέσματα	140
5.7	Ανακεφαλαίωση	146
5.8	Αναφορές	147
<b>6</b>	<b>Κατασκευή επαφών n<sup>+</sup>/p στο γερμάνιο</b>	<b>151</b>
6.1	Εισαγωγή	151
6.2	Κατασκευαστικές προκλήσεις	152
6.3	Πειραματική διαδικασία	157
6.4	Αποτελέσματα	160
6.5	Ποσοστό ενεργοποίησης και ενεργειακή συζήτηση	167
6.6	Ανακεφαλαίωση	170
6.7	Αναφορές	171
	<b>Ανακεφαλαίωση και προοπτικές</b>	<b>175</b>

# ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Αντικείμενο της παρούσας διατριβής είναι η μελέτη της αξιοποίησης της τεχνικής της ταχείας ανόπτησης για το σχηματισμό ρηχών επαφών τόσο στο πυρίτιο όσο και στο γερμάνιο σε καθεστώς μη τήξης. Οι ακτινοβολήσεις πραγματοποιούνται με ένα laser CO<sub>2</sub> στα 10.6 μm με χρονική διαμόρφωση millisecond. Μελετάται η χρήση της τεχνικής σε συνδυασμό με εμφυτεύσεις πλάσματος BF<sub>3</sub> στο πυρίτιο για τον σχηματισμό επαφών p<sup>+</sup>/n και ιοντικές εμφυτεύσεις φωσφόρου για τον σχηματισμό n<sup>+</sup>/p επαφών στο γερμάνιο με στόχο την ελάχιστη δυνατή διάχυση των προσμίξεων ενώ η πειραματική διαδικασία συνοδεύεται από προσομοίωση TCAD με industry standard πακέτα προσομοίωσης. Η δομή της διδακτορικής διατριβής είναι η ακόλουθη:

Στο πρώτο κεφάλαιο της διδακτορικής διατριβής γίνεται μια σύντομη ιστορική αναδρομή της ανάπτυξης της τεχνολογίας ημιαγωγικών διατάξεων καθώς και στη διατύπωση των κανόνων σμίκρυνσης των τρανζίστορ. Επίσης, γίνεται μια εκτενής αναφορά στον βασικό δομικό λίθο των σύγχρονων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, το MOSFET, καθώς και τα προβλήματα που δημιουργούνται από τη συνεχιζόμενη σμίκρυνση των διαστάσεων του. Αυτά περιλαμβάνουν ενδεικτικά διαρροές οξειδίου πύλης, διαρροές υποκατωφλίου, μείωση αντίστασης εξόδου, μείωση διαγωγιμότητας καθώς και ρεύματα διαρροής στις επαφές. Η εμφάνιση αυτών των προβλημάτων απαιτεί μια ριζική αναθεώρηση του τρόπου κατασκευής των διατάξεων η οποία περιλαμβάνει τόσο νέες γεωμετρίες όσο και εναλλακτικά υλικά. Επίσης γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση δύο βασικών διεργασιών που σχετίζονται με το αντικείμενο της διδακτορικής διατριβής, την ιοντική εμφύτευση και τη θερμική ανόπτηση, καθώς και η συμβολή τους όσον αφορά τον σχηματισμό ρηχών επαφών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια θεωρητική παρουσίαση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με την ύλη. Αναλύονται οι τρόποι απορρόφησης της ακτινοβολίας laser από τους ημιαγωγούς και η εξάρτηση που έχει ο συντελεστής απορρόφησης από τη θερμοκρασία και το επίπεδο της εξωγενούς νόθευσης. Εστιάζουμε κυρίως στους έμμεσους μηχανισμούς απορρόφησης καθώς τα 117 meV των φωτονίων του laser CO<sub>2</sub> που χρησιμοποιήθηκε δεν είναι αρκετά για να πραγματοποιηθούν διαζωνικές μεταβάσεις μέσω άμεσης απορρόφησης. Αντ' αυτού η απορρόφηση γίνεται κατά κύριο λόγο μέσω των ελεύθερων φορέων και της αλληλεπίδρασής τους με το κρυσταλλικό πλέγμα.

Παράλληλα, γίνεται μια μελέτη για την εξαγωγή των βασικών παραμέτρων που εκφράζουν τη σχέση του συντελεστή απορρόφησης πυριτίου και γερμανίου στο μήκος κύματος των 10.6  $\mu\text{m}$  καθώς, σε αντίθεση με τις άμεσες μεταβάσεις, η απορρόφηση στο βαθύ υπέρυθρο εξαρτάται έντονα από τη νόθευση του ημιαγωγού. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την παρουσίαση της θερμικής επίδρασης της ακτινοβολίας laser στον κρύσταλλο και της εξαγωγής των βασικών παραμέτρων θερμικής αγωγιμότητας, θερμοχωρητικότητας και θερμικής διαχυτότητας.

Αντικείμενο του τρίτου κεφαλαίου είναι η μελέτη της διάχυσης προσμίξεων στους ημιαγωγούς. Η παρουσίαση του φαινομένου γίνεται πρώτα από μακροσκοπική άποψη με τη διατύπωση της εξίσωσης συνέχειας και την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου των προσμίξεων στον συντελεστή διάχυσης. Στη συνέχεια εστιάζουμε στον τρόπο σχηματισμού ατελειών στο κρυσταλλικό πλέγμα των ημιαγωγών και στους τρεις βασικούς μηχανισμούς διάχυσής τους στο υλικό. Η αλληλεπίδραση των προσμίξεων με τις κρυσταλλικές ατέλειες είναι τελικά ο λόγος για τη διάχυση των πρώτων στον κρύσταλλο. Με βάση την μικροσκοπική αλληλεπίδραση των ατελειών με τις προσμίξεις παρουσιάζουμε το μοντέλο ChargedReact που αποτελεί το βασικό εργαλείο στην προσπάθεια προσομοίωσης της διάχυσης.

Στο τέταρτο κεφάλαιο εστιάζουμε στη διαδικασία προσομοίωσης της διάχυσης μέσα από τη χρήση εργαλείων TCAD. Το πρόγραμμα TCAD προσομοίωσης που χρησιμοποιείται είναι το Sentaurus Process (SProcess) της εταιρείας Synopsys που αποτελεί ένα από τα industry standard εργαλεία για τη μοντελοποίηση όλης της γκάμας των διεργασιών που εφαρμόζονται στη μικροηλεκτρονική. Παράλληλα υλοποίηση των σχετικών ρουτινών προσομοίωσης που άπτονται της ιοντικής εμφύτευσης, απορρόφησης της ακτινοβολίας laser και διάχυσης και ενεργοποίησης των προσμίξεων. Γίνεται παρουσίαση και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων.

Στο επόμενο κεφάλαιο, προσανατολιζόμαστε στην πειραματική διαδικασία που ακολουθήσαμε για τον σχηματισμό ρηχών επαφών στο πυρίτιο μέσω εμφύτευσης πλάσματος  $\text{BF}_3$  και θερμικής ανόπτησης με το laser  $\text{CO}_2$  σε καθεστώς μη τήξης με παλμούς χρονικού εύρους millisecond. Γίνεται παρουσίαση της πειραματικής διαδικασίας που ακολουθήθηκε ενώ παράλληλα παρουσιάζονται αποτελέσματα δομικού και ηλεκτρικού χαρακτηρισμού τα οποία υποδεικνύουν τη δυνατότητα κατασκευής επαφών p+/n με απότομο προφίλ και εξαιρετικά μικρό βάθος επαφής. Ο δομικός χαρακτηρισμός περιλαμβάνει μετρήσεις SIMS και XTEM ενώ ο ηλεκτρικός χαρακτηρισμός των διατάξεων γίνεται μέσω της τεχνικής τεσσάρων επαφών van der Pauw. Με την πειραματική δια-



δικασία που ακολουθήθηκε έγινε δυνατός ο σχηματισμός επαφών με βάθος επαφής μόλις 15 nm, εξαιρετικά μικρή διάχυση, μικρότερη από 10 nm, και ηλεκτρικά χαρακτηριστικά εξίσου καλά ή καλύτερα με άλλες state of the art τεχνικές ταχείας ανόπτησης. Παράλληλα κάνουμε σύγκριση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης και αξιολογούμε τη χρήση του SProcess για τη μοντελοποίηση της διαδικασίας. Η χρήση TCAD προσομοίωσης μας επιτρέπει, επίσης, να κάνουμε μια ασφαλή εκτίμηση του επίπεδου ενεργοποίησης του βορίου στο πυρίτιο.

Στο έκτο και τελευταίο κεφάλαιο, εφαρμόζουμε την τεχνική που ακολουθήθηκε στο πυρίτιο για τη μελέτη του σχηματισμού επαφών  $n^+ / p$  στο γερμάνιο μέσω εμφύτευσης φωσφόρου και millisecond laser annealing. Γίνεται αξιολόγηση της χρήσης του laser για τον έλεγχο της, κατά τα άλλα πολύ έντονης, διάχυσης του φωσφόρου στο γερμάνιο. Παρά το γεγονός ότι η διαδικασία της ανόπτησης με laser φαίνεται να έχει θετικά αποτελέσματα στην αντιμετώπιση της διάχυσης, διατηρώντας παράλληλα καλά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά, η διάχυση και πάλι είναι ιδιαίτερα έντονη αν αναλογιστούμε ότι σκοπός είναι ο σχηματισμός όσο πιο ρηχών επαφών είναι εφικτό. Για την αντιμετώπιση της διάχυσης χρησιμοποιούμε συννόθευση με άζωτο η οποία έχει παρουσιαστεί από τη βιβλιογραφία ως ελκυστικός τρόπος για την αντιμετώπιση της διάχυσης του φωσφόρου. Παρά το γεγονός ότι όντως παρατηρείται ανάσχεση της διάχυσης στην περίπτωση της παράλληλης νόθευσης, αυτή συνοδεύεται με αισθητή απενεργοποίηση του φωσφόρου η οποία μέσω υπολογισμών DFT αποδίδεται τελικά στον σχηματισμό σταθερών δεσμών μεταξύ των ατόμων φωσφόρου-αζώτου.

Τέλος, η διατριβή ολοκληρώνεται με μια σύντομη ανασκόπηση των προβλημάτων που επιλύθηκαν ενώ γίνεται μια αξιολόγηση στην επιστημονική συμβολή της παρούσας εργασίας. Μελετήθηκε εντατικά η επίδραση της ακτινοβολίας laser  $CO_2$  στον σχηματισμό ρηχών επαφών μόλις 15 nm με ελάχιστη διάχυση στο πυρίτιο ενώ παράλληλα έγινε μια μελέτη στο θέμα της ανόπτησης του γερμανίου μέσω laser με στόχο τον έλεγχο της διάχυσης του φωσφόρου πράγμα που αποτελεί ακόμα ερευνητική πρόκληση. Μελλοντική έρευνα στην ίδια κατεύθυνση θα πρέπει να περιλαμβάνει μελέτη της επίδρασης της ακτινοβολίας laser για την πλήρη ενεργοποίηση νανοδομών στο πυρίτιο ενώ στην περίπτωση του γερμανίου η χρήση ρηχών εμφυτεύσεων τύπου πλάσματος ή Ultra Low Energy implantations (ULE) θα μας επιτρέψει τον σχηματισμό επαφών της τάξης των 20 με 30 nm.



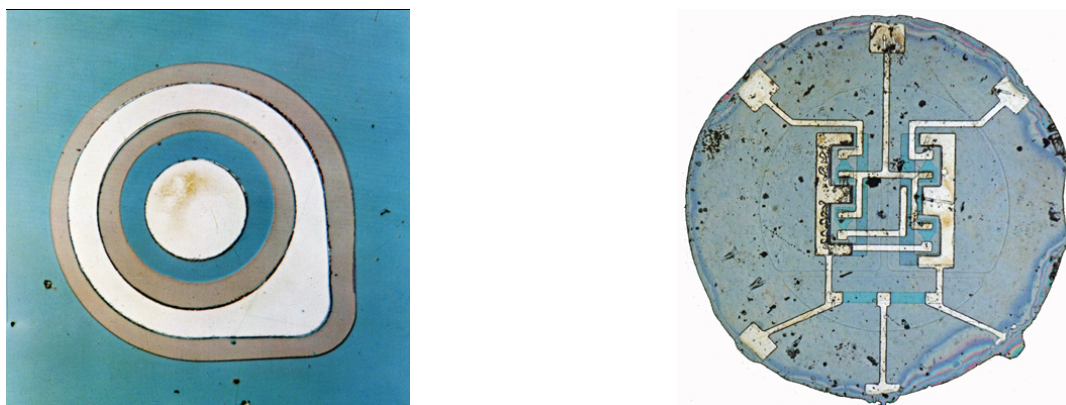
# ΕΙΣΑΓΩΓΗ: ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ ΚΑΙ ΓΕΝΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ

# 1

## § 1.1 ΣΥΝΤΟΜΗ ΙΣΤΟΡΙΑ ΤΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΗΜΙΑΓΩΓΩΝ

Χωρίς αμφιβολία ο κλάδος της μικροηλεκτρονικής είναι ο πιο ταχέα αναπτυσσόμενος διεπιστημονικός τομέας των τελευταίων 4–5 δεκαετιών. Μέσα σε λιγότερο από 70 χρόνια από την ανακάλυψη του τρανζίστορ από τους J. Bardeen, W. Shockley και W. Brattain στα εργαστήρια Bell το 1948 οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές μεταμορφώθηκαν από πολύπλοκα, θορυβώδη μηχανήματα με δύσκολη συντήρηση σε μέγεθος δωματίου σε εξαιρετικά εκλεπτυσμένες συσκευές που χωρούν στην παλάμη μας με υπερπολλαπλάσια επεξεργαστική ισχύ. Και δεν είναι μόνο οι υπολογιστές και οι μικροεπεξεργαστές οι οποίοι είδαν τεράστια ανάπτυξη. Μαζί με τα τεχνολογικά άλματα της βιομηχανίας ημιαγωγών πολλά ήταν τα οφέλη τα οποία αποκομίστηκαν προς όφελος άλλων βιομηχανιών, όπως η αεροναυτιλία, η αυτοκίνηση, η ιατρική τεχνολογία, κλπ. Χωρίς υπερβολή, μπορούμε να πούμε ότι η ανάπτυξη της τεχνολογίας ημιαγωγών πραγματικά έκανε τη ζωή των ανθρώπων λίγο καλύτερη, κάτι το οποίο θα έλεγε κανείς ότι είναι και ένας από τους θεμελιώδεις στόχους της επιστήμης γενικότερα. Το πρώτο εμπορικό προϊόν βασισμένο σε τρανζίστορ εμφανίστηκε στην αγορά λίγα χρόνια μετά, το 1952, και ήταν ένα ακουστικό βαρυκοΐας κατασκευασμένο από την εταιρεία Sonotone. Το Sonotone 1010 χρησιμοποιούσε τρία τρανζίστορ σε συνδυασμού με λυχνίες κενού για την ενίσχυση του σήματος. Λίγο αργότερα, μόλις το 1954, εμφανίστηκε και το πρώτο προϊόν που ταυτίστηκε με την εννοία του τρανζίστορ όσο κανένα άλλο, το ραδιόφωνο, με τη μορφή του Regency TR-1, κατασκευασμένο από την Texas Instruments. Αν και η τεχνολογία του ραδιοφώνου υπήρχε ήδη εδώ και αρκετά χρόνια, τα μόλις τέσσερα τρανζίστορ του συγκεκριμένου μοντέλου που παρουσιάστηκε επέτρεψαν στη συσκευή να είναι η μικρότερη που κατασκευάστηκε ποτέ, καθώς είχε το μέγεθος περίπου μίας παλάμης [1]. Ήδη δηλαδή από την απαρχή της τεχνολογίας ημιαγωγών φάνηκε η διάθεση για την κατασκευή μικρότερων πιο αποδοτικών συσκευών, τάση η οποία υπάρχει και συνεχίζεται ακόμα και στις μέρες μας.

Μέσα στα επόμενα δέκα περίπου χρόνια άρχισαν να τοποθετούνται οι βασικοί δομικοί λίθοι των διεργασιών και τεχνολογιών που απαρτίζουν την κατασκευή ημιαγωγικών διατάξεων και ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Ενδεικτικά κάποιες από αυτές εί-

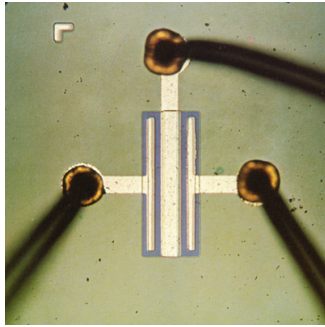


**Σχήμα 1.1:** Τα πρώτα κυκλώματα που κατασκευάστηκαν με την διεργασία επίπεδης ολοκλήρωσης από την Fairchild Semiconductors: ένα τρανζίστορ BJT (αριστερά) και ένα ολοκληρωμένο flip-flop (δεξιά).

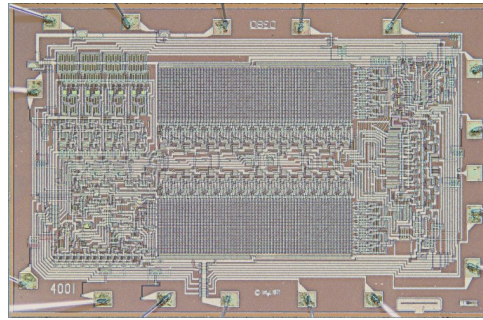
ναι οι εξής: το 1955 εξερευνάται η χρήση του πυριτίου σαν υλικό για την κατασκευή ημιαγωγικών διατάξεων με την κατασκευή της πρώτης n-p-n διατάξης [2]. το 1956 αναπτύσσεται η πρώτη διεργασία ανάπτυξης οξειδίου του πυριτίου για προστασία και αδρανοποίηση των διατάξεων στο πυρίτιο [3]. το 1957 εφαρμόζονται οι πρώτες διεργασίες φωτολιθογραφίας [4]. το 1958 η Fairchild Semiconductors κατασκευάζει το πρώτο μαζικά παραγόμενο τρανζίστορ πυριτίου (το 2N697), το οποίο σχεδιάστηκε από τους G. Moore και J. Hoerni [5] ενώ το 1959 κατασκευάζεται το πρώτο ολοκληρωμένο κύκλωμα από τον J.S. Kilby [6] (βρ. Νόμπελ 2000).

Σημαντικό σημείο καμπής στην εξέλιξη της τεχνολογίας ημιαγωγών ήταν η ανακάλυψη της διεργασίας επίπεδης ολοκλήρωσης (planar integration process) από τον J. Hoerni το 1959 [7]. Η επίπεδη ολοκλήρωση επέτρεψε στις διατάξεις να κατασκευάζονται όλες στη μία πλευρά του ημιαγωγού και είχαν πολύ καλύτερα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά λόγω καλύτερης προστασίας των διόδων p-n που απαρτίζουν το τρανζίστορ. Η επίπεδη ολοκλήρωση οδήγησε στα πρώτα επίπεδα τρανζίστορ BJT (Fairchild Semiconductors, 2N1613) και ολοκληρωμένα επίπεδα κυκλώματα (Fairchild Semiconductors, type-F flip flop), βλ. και σχήμα 1.1.

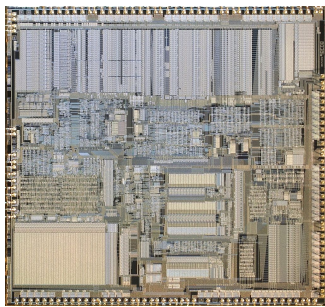
Η επίπεδη ολοκλήρωση ήταν επίσης καταλυτικής σημασίας για την επόμενη ανακάλυψη ορόσημο στην ιστορία των ημιαγωγών, η οποία δεν ήταν άλλη από την ανακάλυψη του MOSFET, η γενικότερη θεωρία του οποίου είχε αναπτυχθεί ήδη από τον J.E. Lilienfeld [8] το 1925, έγινε όμως πραγματικότητα το 1960 από τους D. Kahng και M.M. Atalla [9] που το υλοποίησαν σε μορφή MIS (Metal-Insulator-Semiconductor) για πρώτη φορά. Παρά το γεγονός ότι το MOSFET στις βασικές του αρχές



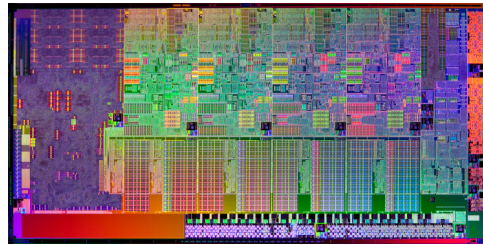
(α) Fairchild F100, 1 τρανζίστορ, 1964



(β) Intel 4001, 2500 τρανζίστορ, 1971



(γ) Intel 80386, 250000 τρανζίστορ, 1986



(δ) Intel Sandy Bridge, 504 εκ. τρανζίστορ, 2011

**Σχήμα 1.2:** Τέσσερα ενδεικτικά ολοκληρωμένα κυκλώματα, χαρακτηριστικά της συνεχόμενα πυκνότερης στοίβαξης των τρανζίστορ. Ο Sandy Bridge έχει 2000 φορές περισσότερα τρανζίστορ, σε μόλις 30% μεγαλύτερη επιφάνεια σε σχέση με τον 80386!

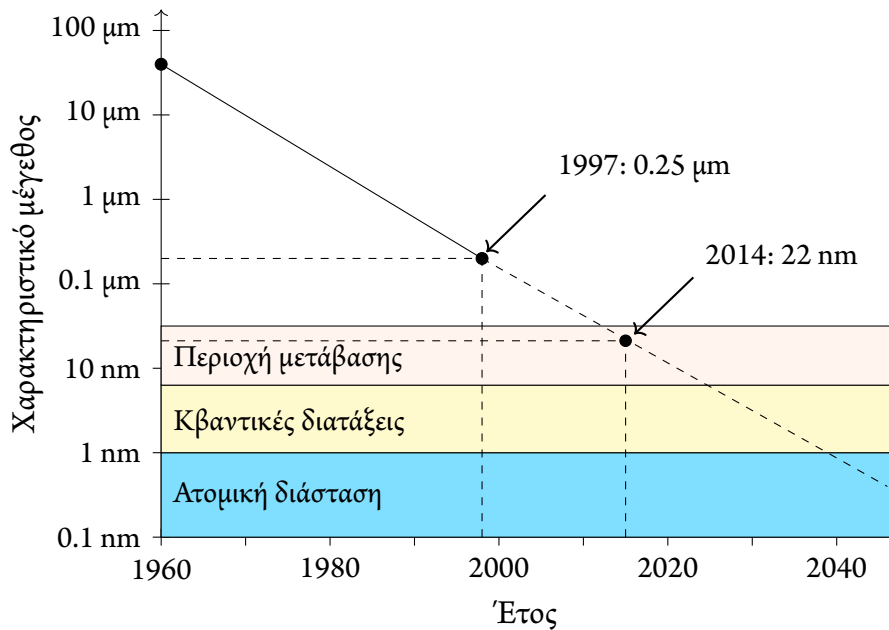
έχει παρόμοια ενισχυτική δράση με τα BJT που κατασκευάζονταν μέχρι τότε, κατείχε ένα πολύ μεγάλο πλεονέκτημα· ήταν δυνατόν να ολοκληρωθεί σε μεγάλες επιφάνειες ενώ όσο μικρότερο ήταν το μέγεθός του τόσο περισσότερα τρανζίστορ ήταν δυνατόν να “στριμωχτούν” στον σχετικά μικρό χώρο του ολοκληρωμένου κυκλώματος. Σε συνδυασμό με την τεχνολογία CMOS που ανακαλύφθηκε τον επόμενο χρόνο από τους F.M. Wanlass και C.T. Sah [10] τα πρώτα ολοκληρωμένα κυκλώματα βασισμένα στην τεχνολογία CMOS δεν άργησαν να φανούν. Το 1964, εμφανίστηκε το πρώτο εμπορικό ολοκληρωμένο κύκλωμα βασισμένο σε αυτή την τεχνολογία από την General Microelectronics με τη μορφή ενός 20-bit shift register.

Μέσα σε κάτι παραπάνω από μια δεκαετία ο αριθμός των τρανζίστορ που μπορούσαν να κατασκευαστούν σε ένα μικρό κομμάτι ημιαγωγού εκατονταπλασιάστηκε. Ήδη από τα μέσα τις δεκαετίας του 1960 ήταν εμφανής η κατεύθυνση που θα ακολουθούσε η βιομηχανία ημιαγωγών για πιο μικρά, πιο γρήγορα, πιο οικονομικά και πιο πυκνά ολοκληρωμένα κυκλώματα. Το 1965 ο G. Moore, διευθυντής του τμήματος έρευνας και

ανάπτυξης της Fairchild Semiconductors έκανε την περίφημη πρόβλεψη (την οποία όλα τα κείμενα που σχετίζονται με τους ημιαγωγούς έχουν καταχραστεί πολλάκις έκτοτε) ότι ο αριθμός των τρανζίστορ στα ολοκληρωμένα κυκλώματα θα διπλασιάζεται κάθε δύο χρόνια η οποία τελικά έμεινε στην ιστορία ως ο *Νόμος του Moore* [11].

Εκ πρώτης όψης θα μπορούσε κανείς να πει ότι ο νόμος του Moore έπεσε πολύ κοντά στις αρχικές προβλέψεις του, στην πραγματικότητα, όμως, αποτελεί μια αυτοεκπληρούμενη προφητεία, αφού τελικά χρησιμοποιήθηκε σαν μιας μορφής “οδικός χάρτης” για την σμίκρυνση και εξέλιξη των διατάξεων στα ολοκληρωμένα κυκλώματα. Τελικά θα επισημοποιηθεί γύρω στο 1990 με τη μορφή του *Εθνικού Τεχνολογικού Χάρτη για τους Ημιαγωγούς* (National Technology Roadmap for Semiconductors, NTRS) ο οποίος μετέπειτα εξελίχθηκε στον *Διεθνή Τεχνολογικό Χάρτη για τους Ημιαγωγούς* (International Technology Roadmap for Semiconductors, ITRS) [12]. Οι χάρτες αυτοί αποτελούν, πρακτικά, ένα σύνολο χαρακτηριστικών που πρέπει να ικανοποιούνται από τις επόμενες γενιές (κόμβοι ή *nodes*) ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Κύριο χαρακτηριστικό είναι η σμίκρυνση της επιφάνειας κάθε τρανζίστορ, η οποία ενδεικτικά για τον κόμβο των 35 nm είναι μικρότερη από  $0.2 \mu\text{m}^2$ . Πέραν τούτου, περιλαμβάνεται η χρήση προηγμένων διηλεκτρικών (*high-κ*), χάλκινων ενδοσυνδεσμολογιών, η ελάττωση της ισχύος λειτουργίας, η ελάττωση του βάθους επαφής, το πλήθος των επιπέδων λιθογραφίας και επιμεταλλώσεων, κλπ.

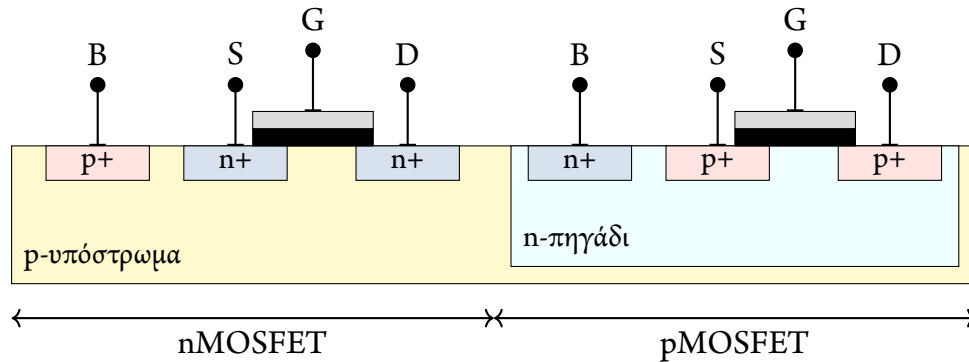
Μια απλοποιημένη έκφραση του ITRS για το χαρακτηριστικό μέγεθος των διατάξεων μπορεί να φανεί στο σχήμα 1.3. Σε αυτό το σχήμα μπορεί κανείς να παρατηρήσει την “ευλάβεια” με την οποία ακολουθείται ο ITRS όσον αφορά τη σμίκρυνση των διαστάσεων. Αυτό που δεν μπορεί να φανεί από ένα διάγραμμα είναι οι δυσκολίες και τα προβλήματα που έπρεπε να αντιμετωπιστούν καθώς οι διαστάσεις μικραίνουν. Πλήθος μελετών έχουν πραγματοποιηθεί σχετικά με το πόσο μπορεί να συνεχιστεί η σμίκρυνση των χαρακτηριστικών μεγεθών των δομών MOS. Είναι εμφανές ωστόσο, ακόμα και με μια πρώτη ματιά, ότι καθώς πλησιάζουμε σε χαρακτηριστικά μεγέθη κάτω από 50 nm και μέχρι περίπου τα 10 nm, στη λεγόμενη *περιοχή μετάβασης* του σχήματος 1.3, και με κατεύθυνση κβαντικές διαστάσεις σχεδιαστικά χαρακτηριστικά των τρανζίστορ πρέπει να αλλάξουν δραματικά. Χαρακτηριστικό παράδειγμα που προκύπτει από αυτή την παρατήρηση είναι το οξείδιο πύλης το οποίο για την περιοχή μετάβασης του χάρτη θα πρέπει να κυμαίνεται στα πλαίσια του περίπου 1 nm κάτι το οποίο ουσιαστικά αναιρεί την ιδιότητα που έχει ως διηλεκτρικό. Αυτό αναπόφευκτα δημιουργεί νέες σχεδιαστικές προκλήσεις στην ανάπτυξη των MOSFET νέας γενιάς.



**Σχήμα 1.3:** Εξέλιξη των χαρακτηριστικών μεγεθών στα ολοκληρωμένα κυκλώματα (προσαρμοσμένο από Plummer κ.ά. [13])

## § 1.2 ΤΟ MOSFET ΚΑΙ Η ΣΜΙΚΡΥΝΣΗ ΤΟΥ

Δύο βασικές διαφοροποιήσεις του MOSFET είναι αυτές που χρησιμοποιούνται και οι οποίες σχηματίζουν τον βασικό δομικό λίθο των λογικών κυκλωμάτων, το CMOS (Complementary MOS). Το pMOSFET και το nMOSFET. Τα MOSFET κατασκευάζονται σε ένα πυριτικό υπόστρωμα στο οποίο εμφυτεύονται προσμίξεις αντίθετου φορέα αγωγιμότητας για τον σχηματισμό της πηγής (source) και του απαγωγού (drain). Ανάμεσα στη πηγή και στον απαγωγό αναπτύσσεται ή εναποτίθεται ένα λεπτό στρώμα διηλεκτρικού (control oxide) πάνω από το οποίο δημιουργείται η μεταλλουργική επαφή της πηγής. Εφαρμόζοντας τάση στην πύλη μπορεί να δημιουργηθεί ηλεκτρικό κύκλωμα ανάμεσα στη πηγή και τον απαγωγό. Έτσι ελέγχοντας την τάση στην πύλη το MOSFET μπορεί να γυρνάει από κατάσταση αγωγής σε κατάσταση μη αγωγής καθιστώντας ουσιαστικά τη διάταξη σε έναν πολύ μικρό διακόπτη ρεύματος. Στην περίπτωση του nMOSFET, αυτό κατασκευάζεται σε ένα υπόστρωμα τύπου p, δηλαδή εμφυτευμένο με ένα χαμηλό ποσοστό προσμίξεων τύπου p, συνήθως βόριο, γάλλιο ή πιο σπάνια ίνδιο, δηλαδή της ομάδας III του περιοδικού πίνακα. Στην πύλη και τον απαγωγό εμφυτεύεται ένας μεγάλος αριθμός προσμίξεων (4 ή 5 τάξεις μεγέθους υψηλότερο από το υπόστρωμα) της ομάδας V του περιοδικού πίνακα, συνήθως φώσφορο, αρσενικό ή

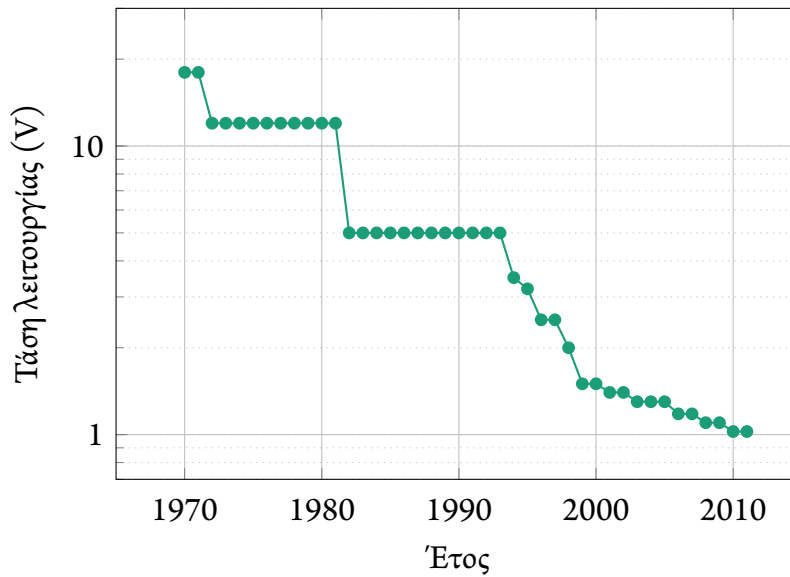


**Σχήμα 1.4:** Σχηματική αναπαράσταση ενός CMOS που αποτελείται από δύο διαφορετικά MOSFET (p και n).

πιο σπάνια αντιμόνιο. Για την περίπτωση του pMOSFET όλα αντιστρέφονται. Επειδή συνήθως τόσο τα nMOS όσο και pMOS κατασκευάζονται στο ίδιο υπόστρωμα, τύπου p, η κατασκευή του pMOSFET γίνεται μέσα ένα πηγάδι τύπου n το οποίο εμφυτεύεται στο υπόστρωμα τύπου p. Έτσι, έχουμε πλέον τη δομή του σχήματος 1.4. Εκατοντάδες εκατομμύρια ή ακόμα και δισεκατομμύρια τέτοιες δομές ολοκληρώνονται στο κύκλωμα ενός σύγχρονου επεξεργαστή. Το κύριο μέγεθος που χαρακτηρίζει την “κούρσα” για τη σμίκρυνση των τρανζίστορ είναι το μέγεθος καναλιού,  $L$ , δηλαδή χονδρικά η απόσταση ανάμεσα στις έντονα εμφυτευμένες περιοχές n (στο nMOSFET) ή p (στο pMOSFET) που σχηματίζουν τη πηγή και τον απαγωγό.

Η πρώτη προσπάθεια διατύπωσης κάποιων κανόνων σμίκρυνσης για τα τρανζίστορ πραγματοποιήθηκε για πρώτη φορά από τους Dennard κ.ά. [14] το 1974. Βασική προϋπόθεση για την διατύπωση του Dennard είναι ότι η πυκνότητα ισχύος παραμένει σταθερή (προσέγγιση σταθερής πυκνότητας ισχύος, full scaling), αυτό συνεπάγεται συνεχή σμίκρυνση τόσο των ρευμάτων όσο και των τάσεων λειτουργίας κατά τον ίδιο σταθερό παράγοντα σμίκρυνσης της διάταξης. Επειδή όμως αυτό δεν ήταν εφικτό, γιατί οι τάσεις δεν μπορούν αφενός να μικραίνουν αυθαίρετα συνεχώς και αφετέρου σε έναν επεξεργαστή ή ολοκληρωμένο κύκλωμα πρέπει να υπάρχει συμβατότητα τάσεων ανάμεσα στα τρανζίστορ και τα συνοδευτικά κυκλώματα, για αρκετά χρόνια η βιομηχανία ημιαγωγών πορεύθηκε με την στρατηγική σταθερής τάσης. Στη δεκαετία του 1990 η τάση λειτουργίας ήταν 5 V, μετά τον κόμβο των 500 nm έπεσε στα 3.3 V αρχικά και 2.5 V στη συνέχεια. Το πρόβλημα με αυτή την προσέγγιση σταθερής τάσης, όπως αποκαλείται, είναι ότι εμφανίζονται φαινόμενα κορεσμού της ταχύτητας των φορέων κάτι το οποίο οδηγεί τόσο σε υποβάθμιση της ευκινησίας των φορέων όσο και σε εμφάνιση





**Σχήμα 1.5:** Ιστορική εξέλιξη της τάσης λειτουργίας των μικροεπεξεργαστών.

ρευμάτων διαρροής. Συνεπώς η στρατηγική η οποία ακολουθείται σήμερα αποκαλείται *γενικευμένη σμίκρυνση* (general scaling). Σύμφωνα με αυτή την προσέγγιση πέραν από τον παράγοντα σμίκρυνσης των διαστάσεων,  $\chi$ , του τρανζίστορ εισάγεται και ένα δεύτερος παράγοντας σμίκρυνσης της τάσης,  $\mu$ . Έτσι οι διαστάσεις της διάταξης μειώνονται κατά  $1/\chi$  ενώ οι τάσεις λειτουργίας κατά  $1/\mu$ . Στο γράφημα 1.5 μπορούμε να δούμε την εξέλιξη της τάσης λειτουργίας των μικροεπεξεργαστών. Μπορούμε να παρατηρήσουμε την σταδιακή μετάβαση από το fixed voltage scaling στο general scaling στα τέλη της δεκαετίας του 1990. Επίσης στον πίνακα 1.1 παρουσιάζονται συνοπτικά οι παράγοντες σμίκρυνσης σε σχέση με τις τρεις στρατηγικές που αναφέρθηκαν. Για λόγους πληρότητας, θα παραθέσουμε μερικές από τις προκλήσεις που εισάγει η συνεχόμενη σμίκρυνση των διαστάσεων παρακάτω.

**Διαρροές οξειδίου πύλης (gate oxide leakage).** Από τις απαρχές της τεχνολογίας πυριτίου, στα μέσα της δεκαετίας του 1960, τα τρανζίστορ κατασκευάζονταν με την ανάπτυξη ενός λεπτού θερμικού διοξειδίου του πυριτίου για την κατασκευή της πύλης. Αυτό ήταν, άλλωστε, και το μεγάλο κατασκευαστικό πλεονέκτημα του πυριτίου έναντι, πχ., του γερμανίου το οποίο άλλωστε έχει καλύτερα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά. Το θερμικό οξείδιο του πυριτίου είναι εξαιρετικά σταθερό, τόσο μηχανικά όσο και ηλεκτρικά και μπορεί να αναπτυχθεί εύκολα σε έναν φούρνο οξείδωσης με πολύ καλό έλεγχο του πάχους. Το οξείδιο της πύλης πρέπει να είναι αρκετά λεπτό ώστε να επιτρέπει τον σχη-

Χαρακτηριστικό	Πλήρης	Γενικευμένη	Σταθερής ταχύτητας
Διαστάσεις ( $W, L_g, t_{ox}$ )	$1/x$	$1/x$	$1/x$
Τάση ( $V_T, V_{DD}$ )	$1/x$	$1/u$	1
Πυκνότητα προσμίξεων ( $N_a$ )	$x$	$x^2/u$	$x^2$
Χωρητικότητα οξειδίου ( $C_{ox}$ )	$x$	$x$	$x$
Χωρητικότητα πύλης ( $C_g$ )	$1/x$	$1/x$	$1/x$
Ρεύμα ( $I_S$ )	$1/x$	$1/u$	1
Πυκνότητα ρεύματος ( $J_S$ )	$x$	$x^2/u$	$x^2$
Αντίσταση πύλης ( $R_g$ )	1	1	1
Καθυστέρηση ρεύματος	$1/x$	$1/x$	$1/x$
Ισχύς ( $P$ )	$1/x^2$	$1/u^2$	1
Πυκνότητα ισχύος ( $P/A$ )	1	$x^2/u^2$	1

**Πίνακας 1.1:** Παράγοντες σμίκρυνσης χαρακτηριστικών μεγεθών σύμφωνα με τις τρεις στρατηγικές που αναφέρθηκαν.

ματισμό της ζώνης απογύμνωσης με την ελάχιστη δυνατή τάση στο κανάλι αλλά και παράλληλα αρκετά παχύ ώστε να είναι κατάλληλο για την ηλεκτρική απομόνωση της πύλης από το κανάλι. Επιβάλλεται, λοιπόν, το οξείδιο να είναι ηλεκτρικά μονωτικό στην κατάσταση “0” του τρανζίστορ αλλά να χρειάζεται παράλληλα λίγη τάση για να γυρίσει στην κατάσταση “1”.

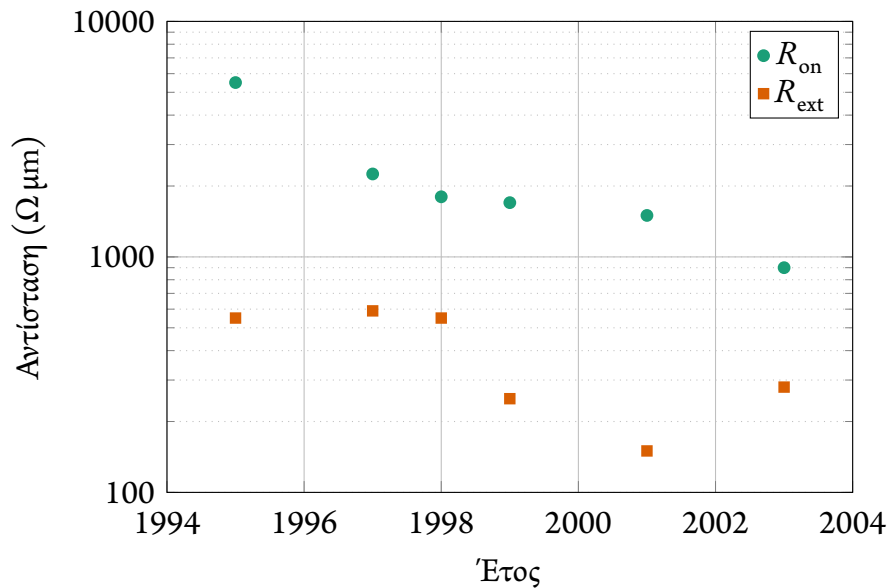
Για να συνεχιστεί η σμίκρυνση των τρανζίστορ πρέπει παράλληλα να μικραίνει και τα πάχος του οξειδίου πύλης. Ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 1990 ήταν εμφανές ότι το πάχος του οξειδίου δεν γίνεται να μικραίνει επ’ άπειρον. Για τον τεχνολογικό κόμβο των 45 nm το προβλεπόμενο πάχος του οξειδίου θα έπρεπε να είναι περίπου της τάξης του 1 nm, πρακτικά 5 στιβάδες ατόμων  $\text{SiO}_2$ , δηλαδή σε ένα επίπεδο που τα μονωτικά χαρακτηριστικά του οξειδίου αρχίζουν να καταρρέουν. Η λύση σε αυτό το πρόβλημα ήταν η εισαγωγή διηλεκτρικών με μεγαλύτερη διηλεκτρική σταθερά [15, 16]. Ωστόσο η μετάβαση από το  $\text{SiO}_2$  στο  $\text{HfO}_2$  ως διηλεκτρικό πύλης δεν είναι τόσο απλή καθώς δημιουργούνται ένα σύνολο άλλων προβλημάτων, το σημαντικότερο εκ των οποίων ήταν οι αυξημένες ενεργειακές απαιτήσεις των νέων τρανζίστορ τόσο για να μεταβούν από τη μία κατάσταση στην άλλη (μεγαλύτερη διηλεκτρική σταθερά) όσο και για την κίνηση των ηλεκτρονίων μέσα στο κανάλι, καθώς οι επιφανειακές παγίδες στη διεπιφάνεια διηλεκτρικού και υποστρώματος προκαλούσαν έντονη σκέδαση των ηλεκτρονίων καθώς κινούνταν στο κανάλι. Η λύση σε αυτά τα προβλήματα ήταν η εισαγωγή μετάλλων ως υλικό πύλης, αντί για πολυκρυσταλλικό πυρίτιο που χρησιμοποιούταν μέχρι τότε, και η χρήση ατομικής επιταξίας (atomic layer deposition, ALD).

Τα μέταλλα έχουν καλύτερη αγωγιμότητα από το πολυκρυσταλλικό πυρίτιο, ενώ η ατομική επιταξία είναι κατάλληλη για την κατασκευή εξαιρετικά ομαλών και λεπτών στρωμάτων διηλεκτρικών σε σχέση με τις παραδοσιακές τεχνικές εναπόθεσης διηλεκτρικών, όπως το sputtering. Έτσι οι σκεδάσεις στις διεπιφάνειες μειώνονται δραματικά. Σε κάθε περίπτωση, μπορούμε να πούμε ότι η μετάβαση στον κόμβο των 45 nm στον οποίον εφαρμόστηκαν για πρώτη φορά αυτές οι καινοτομίες ήταν από τις πιο παραγωγικές από πλευράς εισαγωγής νέων τεχνολογιών από τη δεκαετία του 1990.

Επίσης πρέπει να αναφέρουμε ότι η εισαγωγή high-κ διηλεκτρικών στην πύλη ανοίγει ουσιαστικά τον δρόμο και στην αξιοποίηση νέων υλικών ως βάση κατασκευής των MOSFET. Αναλογικά, το πυρίτιο έχει ξεκάθαρα χειρότερες διηλεκτρικές ιδιότητες τόσο σε σχέση με άλλους ημιαγωγούς της ίδιας ομάδας, όπως το γερμάνιο, όσο και με σύνθετους ημιαγωγούς όπως οι GaAs, GaAlAs, GaInAs κλπ. Η κυριαρχία του πυριτίου όλα αυτά τα χρόνια βασίστηκε κατά κύριο λόγο στις πολύ καλές ιδιότητες του οξειδίου του. Απαξ και σταδιακά η ανάγκη για ανάπτυξη θερμικού οξειδίου απομακρύνεται η εισαγωγή νέων ημιαγωγών φαίνεται πλέον ελκυστική εναλλακτική. Ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 2000 έχουν εμφανιστεί πολλές ερευνητικές δουλειές με θέμα τον σχηματισμό τρανζίστορ με high-κ διηλεκτρικά στην πύλη όπως  $\text{HfO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ή  $\text{ZrO}_2$ , τόσο σε γερμάνιο [17–21], όσο και σε GaAs [22–26], ενώ πλέον τόσο η Intel όσο και η AMD χρησιμοποιούν high-κ διηλεκτρικά ήδη από τον κόμβο των 45 nm.

**Διαρροές υποκατωφλίου (subthreshold leakage).** Αναφέραμε ήδη ότι η σμίκρυνση των τρανζίστορ, ανεξάρτητα με το ποια στρατηγική ακολουθείται, έχει ως αποτέλεσμα την μείωση της απαιτούμενης τάσης που χρειάζεται για την μετάβαση από τη μία κατάσταση στην άλλη. Αποτέλεσμα της συνεχόμενης μείωσης της τάσης κατωφλίου (threshold voltage), όπως αποκαλείται, προκαλεί προβλήματα στη λειτουργία του τρανζίστορ ως διακόπτη διότι υπάρχει μεγαλύτερη ασάφεια ανάμεσα στα δύο επίπεδα τάσεων που διαχωρίζουν τις καταστάσεις “0” και “1”. Συνεπώς έχουμε την εμφάνιση ρευμάτων διαρροής στην κατάσταση “0” η οποία πλέον έχει σημαντική επίδραση στην λειτουργία του τρανζίστορ. Αυτή η διαρροή ρεύματος στην κατάσταση “0” καλείται *διαρροή υποκατωφλίου* και μαζί με τις διαρροές λόγω οξειδίου πύλης που μόλις αναφέρθηκαν αποτελούν περίπου το 50% της συνολικής κατανάλωσης ισχύος ενός επεξεργαστή (βλέπε και [27]).

**Μείωση αντίστασης εξόδου.** Ένα ακόμα πρόβλημα που προκύπτει από τη σμίκρυνση του καναλιού των MOSFET είναι ότι τα ηλεκτρόδια πηγής και απαγωγού πλησιάζουν



**Σχήμα 1.6:** Εξέλιξη των χαρακτηριστικών αντιστάσεων εξόδου των MOSFET (από Agnello [28]).

τόσο πολύ κοντά ώστε το πλάτος των περιοχών απογύμνωσης που σχηματίζονται στις νοθευμένες περιοχές πηγής και απαγωγού να είναι συγκρίσιμες με το πλάτος του καναλιού. Είναι μια μορφή φαινομένου στενού καναλιού (short channel effect). Η συνολική αντίσταση,  $R_{on}$ , μιας διάταξης MOSFET μπορεί χονδρικά να αναλυθεί στην αντίσταση του καναλιού,  $R_{ch}$ , και την εξωγενή αντίσταση ανάμεσα στο κανάλι και την πηγή/απαγωγό,  $R_{ext}$ . Καθώς μειώνεται η αντίσταση του καναλιού λόγω μείωσης των διαστάσεων του αντίστοιχη μείωση πρέπει να συμβαίνει και στην εξωγενή αντίσταση ούτως ώστε η διάταξη να συνεχίζει να συμπεριφέρεται με τον αναμενόμενο τρόπο. Για να επιτευχθεί αυτός ο στόχος επιβάλλεται τόσο η πιο έντονη νόθευση των περιοχών που χαρακτηρίζουν την πηγή και τον απαγωγό αλλά και παράλληλα ο σχηματισμός απότομων προφίλ νόθευσης ούτως ώστε να μην υπάρχει υπερ-επικάλυψη του καναλιού από τις περιοχές απογύμνωσης πηγής και απαγωγού. Στο γράφημα 1.6 μπορούμε να δούμε την εξέλιξη των δύο χαρακτηριστικών αντιστάσεων την τελευταία δεκαετία.

**Μείωση διαγωγιμότητας.** Η αύξηση του ηλεκτρικού πεδίου που αναπτύσσεται στο τρανζίστορ λόγω σμίκρυνσης της διάστασής του έχει ως αποτέλεσμα την μείωση της ευκινησίας των φορέων μέσα στο κανάλι. Αυτό το φαινόμενο γίνεται ακόμα πιο έντονο αν αναλογιστούμε τη σχετικά μικρή ευκινησία ηλεκτρονίων και οπών στο πυρίτιο καθώς και τις εξαιρετικά μεγάλες συγκεντρώσεις εξωγενών προσμίξεων που πλέον απαιτού-

νται για τον σχηματισμό των επαφών στα σύγχρονα τρανζίστορ οδηγώντας έτσι σε μια συνεχόμενη μείωση της συνολικής διαγωγιμότητας της διάταξης.

**Ρεύματα διαρροής στις επαφές.** Η πολυπλοκότητα στον σχεδιασμό των τρανζίστορ έχει εισάγει νέες δυσκολίες στην κατασκευή των επαφών. Δεν αρκεί πλέον μια ιοντική εμφύτευση και ανόπτηση σε φούρνο για την κατασκευή των επαφών που απαρτίζουν το MOSFET. Ήδη εδώ και αρκετά χρόνια η εμφύτευση των επαφών στις περιοχές πηγής και απαγωγού δεν είναι ομοιόμορφη παρά συνοδεύεται και από δευτερογενείς εμφυτεύσεις χαμηλότερης πυκνότητας προσμίξεων μέσα στο κανάλι (halo doping). Σκοπός του halo doping είναι η αντιμετώπιση του φαινομένου drain-induced barrier lowering (DIBL), που είναι μια συνέπεια του short channel effect λόγω διάτρησης του καναλιού από τις πλευρικές εμφυτεύσεις. Το πρόβλημα που προκύπτει με αυτές τις εμφυτεύσεις είναι ότι απαιτείται πολύ προσεκτικός έλεγχος της τοποθέτησής τους κάτω από το κανάλι του τρανζίστορ και μάλιστα με πολύ απότομα προφίλ, διαφορετικά οδηγούμαστε στην εμφάνιση του reverse short channel effect [29]. Ειδικά όσο οι επαφές γίνονται όλο και πιο ρηχές εμφανίζεται η ανάγκη για πιο ακριβείς μεθόδους εμφύτευσης και ενεργοποίησης με την ελάχιστη δυνατή διάχυση. Όπως θα δούμε και στα επόμενα κεφάλαια, σκοπός αυτής της εργασίας είναι ο σχηματισμός ρηχών επαφών σε πυριτίου και γερμάνιο με χρήση προηγμένων τεχνολογιών ανόπτησης, οπότε θα εμβαθύνουμε περισσότερο στη συνέχεια.

**Αυξημένη κατανάλωση ενέργειας.** Είναι προφανές ότι η πυκνότερη στοίβαξη όλο και περισσότερων διατάξεων σε μια σχετικά μικρή περιοχή και μάλιστα με την αύξηση των χρονισμών στους σύγχρονους επεξεργαστές θα έχει ως αποτέλεσμα τόσο την ανάγκη για μεγαλύτερη κατανάλωση ενέργειας όσο και την αύξηση της παραγόμενης θερμότητας από τα ολοκληρωμένα κυκλώματα [30, 31]. Η αυξημένη θερμοκρασία μπορεί να έχει καταστροφικές συνέπειες για τις επιδόσεις ενός ολοκληρωμένου κυκλώματος λόγω των καθυστερήσεων που προκύπτουν στις μεταλλικές ενδοδιασυνδέσεις (η αντίσταση των μετάλλων αυξάνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας). Αν και η εισαγωγή νέων υλικών στην κατασκευή των MOSFET έχει επιβραδύνει τον ρυθμό αύξησης της ισχύος συνεχίζει να παραμένει ένα δύσκολο πρόβλημα το οποίο όμως αντιμετωπίζεται από πιο έξυπνες στρατηγικές διαχείρισης της λειτουργίας των επεξεργαστών (ρυθμιζόμενη συχνότητα, πολλαπλές καταστάσεις ενεργειακής κατανάλωσης, sleep states, κλπ.). Εξάλλου, ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 2000 η “κούρσα” για πιο γρήγορους χρονισμούς έχει πλέον σταματήσει και αντί αυτού οι προσπάθειες επικεντρώνο-

νται στην επίτευξη περισσότερων οδηγιών (instructions) ανά κύκλο ρολογιού, αντί για αύξηση της ταχύτητας με την οποία επεξεργάζονται σειριακά από τον επεξεργαστή. Υπό άλλες συνθήκες η απαγόμενη ισχύς που θα αναπτυσσόταν θα ξεπέρναγε το 1 kW. Επίσης σε αυτό έχει συνδράμει σημαντικά και η ανάπτυξη νέων επεξεργαστικών μοντέλων, όπως οι πολλαπλοί συνεργιστικοί πυρήνες στους επεξεργαστές (multi-core processing) όπως και ο διαμοιρασμός των εργασιών σε περισσότερα από ένα υπολογιστικά υποσυστήματα, όπως οι κάρτες γραφικών για παράδειγμα.

### § 1.3 ΝΕΕΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΙΣ ΣΤΗΝ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΤΩΝ ΣΥΓΧΡΟΝΩΝ ΤΡΑΝΖΙΣΤΟΡ

Είδαμε ήδη από την προηγούμενη ενότητα ότι η συνεχής εξέλιξη των τρανζίστορ εισάγει ένα σύνολο διαφορετικών προβλημάτων στην ήδη πολύπλοκη κατασκευή τους. Σε αυτή την ενότητα θα δούμε ένα σύνολο από προσεγγίσεις που είτε εφαρμόζονται ήδη στη βιομηχανία είτε είναι υποψήφια για το μέλλον των τρανζίστορ. Αναφέραμε πιο πριν (σελίδα 12) ότι η εισαγωγή των high-κ διηλεκτρικών σαν οξείδιο πύλης έλυσε το πρόβλημα του υπέρλεπτου διοξειδίου του πυριτίου. Θα αναφερθούμε στις υπόλοιπες προσεγγίσεις και θεωρίες για το μέλλον των τρανζίστορ αμέσως παρακάτω.

#### 1.3.1 Εναλλακτικές γεωμετρίες

Σκοπός όλων των εναλλακτικών γεωμετριών είναι η όσο το δυνατόν μεγαλύτερη εκμετάλλευση του καναλιού χωρίς την παρασιτική παρουσία του υποστρώματος του ημιαγωγού το οποίο έχει ως αποτέλεσμα την εμφάνιση παρασιτικών ρευμάτων. Ουσιαστικά στόχος είναι η *πλήρης απογύμνωση* (full depletion) του καναλιού.

**Τρανζίστορ Ultra-Thin Body SOI.** Η πρώτη, χρονολογικά, γεωμετρία που μελετήθηκε ήταν αυτή των τρανζίστορ υπέρλεπτου σώματος, τα οποία κατασκευάζονται σε ένα υπόστρωμα πυριτίου σε μονωτή (silicon on insulator, SOI). Το SOI έχει ένα θαμμένο στρώμα διοξειδίου του πυριτίου το οποίο απομονώνει τις διατάξεις στην επιφάνεια από το υπόστρωμα. Η αρχή λειτουργίας του δεν είναι δραματικά διαφορετική από το κλασικό MOSFET ωστόσο σε αυτή την περίπτωση το θαμμένο οξείδιο αποτρέπει την εμφάνιση ρευμάτων διαρροής οπότε και οι διατάξεις μπορούν να γίνουν πλέον εξαιρετικά λεπτές με πάχος καναλιού μόλις 1 nm [32, 33]. Παράλληλα αντιμετωπίζεται το πρόβλημα της χαμηλής ευκινησίας των οπών το οποίο ανέκαθεν ήταν ένα προβλημα-

τικό σημείο στην ανάπτυξη των MOSFET στο πυρίτιο σε σχέση με τους υπόλοιπους ημιαγωγούς [34].

**Τρανζίστορ πολλαπλών πυλών (multi-gate transistors).** Η ανάπτυξη των τρανζίστορ πολλαπλών πυλών προέκυψε ως ένας τρόπος αντιμετώπισης του φαινομένου στενού καναλιού στο οποίο αναφερθήκαμε και πιο πριν. Σε αυτές τις γεωμετρίες η πύλη του τρανζίστορ “τυλίγεται” γύρω από ένα πολύ λεπτό φιλμ ημιαγωγού που αποτελεί το κανάλι. Και πάλι η διεργασία γίνεται σε υποστρώματα SOI. Έτσι μπορεί να σχηματιστεί ένα λεπτό “πτερύγιο” (fin) πλάτους λίγων νανομέτρων πάνω από το οποίο εναποτίθεται το διηλεκτρικό και μέταλλο πύλης. Ουσιαστικά, δηλαδή, η πύλη εναποτίθεται γύρω από το κανάλι, αντί για πάνω από αυτό. Αυτή η διάταξη ονομάζεται FinFET [35] και είναι η πιο συνηθισμένη διάταξη τρανζίστορ πολλαπλών πυλών. Μια παραλλαγή αυτής της αρχιτεκτονικής, η οποία ονομάζεται trigate, αναπτύχθηκε από την Intel [36, 37] για τον τεχνολογικό κόμβο των 22 nm. Η τεχνολογία FinFET φαίνεται ότι θα εξακολουθήσει να αποτελεί την κύρια παραγωγική ναυαρχίδα της Intel μέχρι τα τέλη της δεκαετίας του 2010, πιθανότατα μέχρι και μετά τον κόμβο των 14 nm.

**Μονοδιάστατα τρανζίστορ.** Μια τελευταία εναλλακτική γεωμετρία, η οποία όμως απαιτεί πλήρη αναδιάταξη του τρόπου κατασκευής των τρανζίστορ, είναι τα μονοδιάστατα τρανζίστορ. Σε αυτά ένα εξαιρετικά μικρό σε διάμετρο νήμα πυριτίου “τυλίγεται” πλήρως σε διηλεκτρικό και το μέταλλο πύλης. Αν και ακόμα δεν έχει πλήρως διερευνηθεί η δυνατότητά εισαγωγής τους στην μαζική παραγωγή οι βελτιώσεις που υποσχονται τόσο στη κινητικότητα των φορέων όσο και την διαγωγιμότητα του καναλιού είναι εντυπωσιακές [38].

### 1.3.2 Εναλλακτικά υλικά

Πέρα από τη λύση των εναλλακτικών γεωμετριών του MOSFET μία άλλη, ίσως πιο προφανής, επιλογή είναι η διερεύνηση διαφορετικών υλικών για το σώμα του τρανζίστορ. Το πυρίτιο, σε σχέση με τους υπόλοιπους ημιαγωγούς έχει την χειρότερη δυνατή ευκινησία όπως φαίνεται και στις ενδεικτικές τιμές του πίνακα 1.2, εντούτοις, όπως ήδη αναφέραμε, επικράτησε των υπολοίπων λόγω της καλής ποιότητας του οξειδίου του. Εφόσον σταδιακά το οξείδιο πύλης αντικαταστάθηκε δεν υπάρχει κάποιος ουσιαστικός παράγοντας που να εμποδίζει την αξιοποίηση νέων υλικών για το βασικό υλικό κατασκευής του “σώματος” του τρανζίστορ.

Υλικό	Ευκινησία ηλεκτρονίων [cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	Ευκινησία οπών [cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	Ενεργειακό διάκενο [eV]
Πυρίτιο	1400	400	1.12
Γερμάνιο	3640	1900	0.67
GaAs	8500	400	1.42

**Πίνακας 1.2:** Ενδεικτικές ευκινησίες φορέων αγωγιμότητας και ενεργειακά διάκενα σε τρεις διαφορετικούς ενδογενείς ημιαγωγούς σε θερμοκρασία δωματίου [39, 40].

**Ημιαγωγοί III-V.** Η μαζικότερη ανάπτυξη συστημάτων μοριακής επιταξίας όπως η επιταξία μοριακής δέσμης (molecular beam epitaxy, MBE) και η εναπόθεση ατομικών στοιβάδων (atomic layer deposition, ALD) άνοιξαν τον δρόμο στην εισαγωγή σύνθετων III-V ημιαγωγών όπως GaAs, InGaAs, InSb και συνδυασμοί αυτών σε στοιβάδες. Παράλληλα με τη χρήση high-κ διηλεκτρικών στις πύλες των τρανζίστορ ήδη από τα τέλη της δεκαετίας του 2000 έχουμε την εμφάνιση σε πειραματικό επίπεδο των πρώτων MOSFET βασισμένα σε GaAs/InGaAs τα οποία έχουν να επιδείξουν εξαιρετικά επίπεδα ευκινησίας στο κανάλι [41–44] ενώ πρόσφατα παρουσιάστηκαν τρανζίστορ γεωμετρίας FinFET βασισμένα σε κβαντικά πηγάδια InGaAs/InP με πλάτος καναλιού μικρότερο από 50 nm [45].

**Γερμάνιο.** Αν και οι σύνθετοι ημιαγωγοί III-V έχουν εξαιρετικά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά και οι διατάξεις που κατασκευάζονται δείχνουν ενθαρρυντικές για το μέλλον των τρανζίστορ, έχουν ένα σημαντικό μειονέκτημα: η διαδικασία κατασκευής τους και ανάπτυξής του σε υποστρώματα είναι δύσκολη και εξαιρετικά ακριβή ενώ παράλληλα η εισαγωγή τους στη γραμμή παραγωγής είναι πιο δύσκολη εξαιτίας της ασυμβατότητάς τους με την τρέχουσα τεχνολογία πυριτίου. Μια πιο συντηρητική προσέγγιση στην εξερεύνηση νέων υλικών είναι το *γερμάνιο*, το οποίο άλλωστε είναι και το υλικό από το οποίο κατασκευάζονταν τα πολύ πρώτα τρανζίστορ λόγω της καλύτερης ευκινησίας τόσο των ηλεκτρονίων όσο και των οπών. Καθώς η συνεχής σμίκρυνση των διατάξεων πυριτίου πλησιάζει στο τέλος της υπάρχει ένα ανανεωμένο ενδιαφέρον από την επιστημονική κοινότητα για το γερμάνιο. Ένα σημαντικό πλεονέκτημα της τεχνολογίας γερμανίου είναι ότι σχεδόν όλες οι διεργασίες που αφορούν το πυρίτιο μεταφέρονται πρακτικά αυτούσιες στο γερμάνιο, οπότε το κόστος ανανέωσης του εξοπλισμού είναι σημαντικά μικρότερο. Επίσης, το γερμάνιο έχει χαμηλότερο σημείο τήξης, στους 938.25°C έναντι 1414°C του πυριτίου. Αυτό σημαίνει ότι όλες οι διεργασίες (ανόπτηση, κλπ.) έχουν σημαντικά μικρότερες θερμοκρασιακές απαιτήσεις από ότι στο πυρίτιο. Ωστόσο,



το γερμάνιο έχει και μια σειρά από μειονεκτήματα κύριο εκ των οποίων είναι η γρήγορη διάχυση των προσμίξεων τύπου n σε αυτό [46, 47] κάτι το οποίο απαιτεί προσεκτικό έλεγχο της διαδικασίας ενεργοποίησης των προσμίξεων. Παράλληλα η μηχανική του αντοχή είναι αρκετά μικρότερη σε σχέση με το πυρίτιο. Παρόλα αυτά αρκετές ερευνητικές δουλειές έχουν γίνει για την κατασκευή διατάξεων στο γερμάνιο με εξαιρετική απόδοση ευκινησίας [48] και ηλεκτρικών χαρακτηριστικών σε συνδυασμό με high-κ διηλεκτρικά [49–51].

**Πυρίτιο υπό τάση — Κράματα πυριτίου.** Αν και δεν είναι καινούριο υλικό, το πυρίτιο έχει αυξημένη ευκινησία φορέων όταν βρίσκεται υπό μηχανική τάση. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα την εισαγωγή του ήδη από τον τεχνολογικό κόμβο των 90 nm βελτιώνοντας σημαντικά την ευκινησία των φορέων εντός του καναλιού. Η ενσωμάτωσή του στην τεχνολογία πυριτίου γίνεται με τους δύο κύριους βασικούς τρόπους. Ο πρώτος προϋποθέτει την ανάπτυξη ενός στρώματος γερμανίου/πυριτίου (silicon germanium, SiGe) επί του πυριτίου. Το SiGe είναι ένα κράμα πυριτίου και γερμανίου το οποίο έχει διαφορετική σταθερά πλέγματος από το πυρίτιο. Αυτό επιτρέπει την εισαγωγή τάσεων στα επιπλέον στρώματα πυριτίου ουσιαστικά “τεντώνοντας” το πλέγμα του ημιαγωγού [52] και με αυτό τον τρόπο εισάγονται μηχανικές τάσεις στο κανάλι. Ο δεύτερος τρόπος, ο οποίος και τελικά χρησιμοποιήθηκε από την Intel για τον κόμβο των 90 nm ονομάζεται uniaxially strained silicon και περιορίζει την εισαγόμενη τάση μόνο κατά μήκος του καναλιού. Στην προσέγγιση της Intel για την εισαγωγή συμπιεστικών τάσεων το κράμα SiGe αναπτύσσεται επιταξιακά πλευρικά του τρανζίστορ σε εσοχές που έχουν προσχηματιστεί οπότε και δρα συμπιεστικά ως προς το κανάλι. Για την εισαγωγή εφελκυστικών τάσεων αυτές πραγματοποιούνται με την επιπλέον εναπόθεση ενός σχετικά παχιού φιλμ  $\text{Si}_3\text{N}_4$  [53]. Αντίστοιχα αποτελέσματα μπορούν να επιτευχθούν και με τη χρήση κραμάτων πυριτίου/άνθρακα (silicon carbon, SiC) [54]. Αξίζει, επίσης, να αναφέρουμε ότι το ίδιο το SiGe σαν υλικό κατασκευής του ίδιου του τρανζίστορ φαίνεται αρκετά υποσχόμενο με την IBM, σε συνεργασία με τη Global Foundries, τη Samsung και το State University of New York να παρουσιάζουν το 2015 τα πρώτα δοκιμαστικά τρανζίστορ με μήκος καναλιού μόλις 7 nm κατασκευασμένα εξ ολοκλήρου από SiGe σε συνδυασμό με λιθογραφία εξαιρετικά βαθέος υπεριώδους [55]. Τέλος, όπως και στην περίπτωση του γερμανίου, το SiGe έχει πολύ καλή συμβατότητα με την υπάρχουσα υποδομή πυριτίου το οποίο είναι ένα σημαντικό πλεονέκτημα σε σχέση με τους ημιαγωγούς III-V.

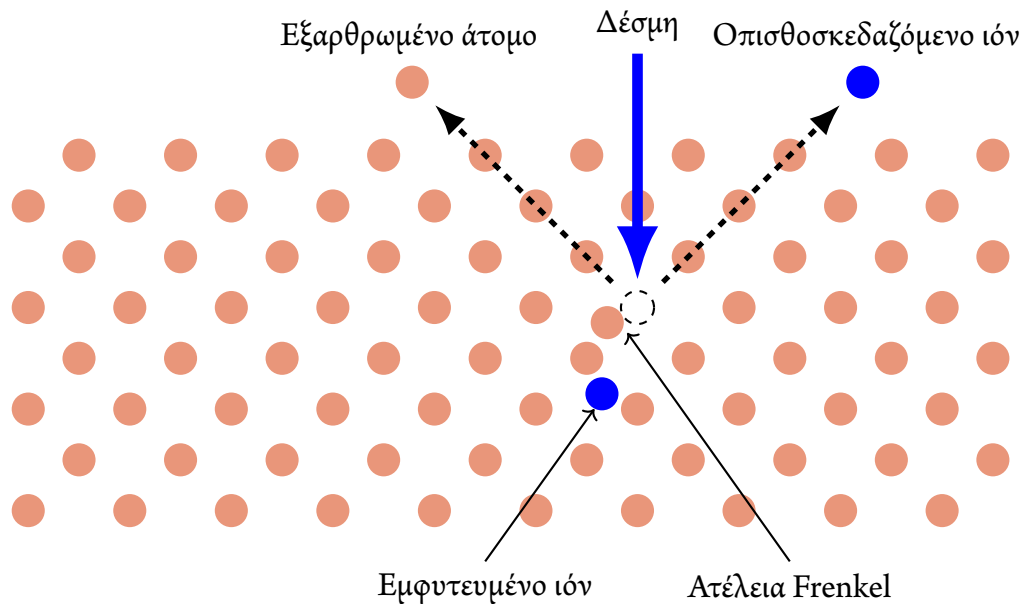
## § 1.4 ΙΟΝΤΙΚΗ ΕΜΦΥΤΕΥΣΗ ΚΑΙ ΡΗΧΕΣ ΕΠΑΦΕΣ

### 1.4.1 Γενικά περί ιοντικής εμφύτευσης

Καθώς το βασικό κομμάτι της ερευνητικής δουλειάς της παρούσας εργασίας αφορά την εμφύτευση και ενεργοποίηση προσμίξεων τόσο σε πυρίτιο όσο και σε γερμάνιο κρίνεται σκόπιμο να κάνουμε μια πιο εκτενή αναφορά στις μεθόδους ιοντικής εμφύτευσης και μια σύντομη διερεύνηση της προσπάθειας για την κατασκευή όλο και ρηχότερων επαφών κατά κύριο λόγο στο πυρίτιο και μετά και στο γερμάνιο.

Γνωρίζουμε ότι η σημαντικότερη ιδιότητα των ημιαγωγών είναι η “ικανότητα” που εμφανίζουν να αλλάζουν την αγωγιμότητά τους ανάλογα με το επίπεδο προσμίξεων οι οποίες εισάγονται στον κρύσταλλο. Ανάλογα, λοιπόν, με τον τύπο της πρόσμιξης που επιλέγεται, τύπου p ή τύπου n, η ηλεκτρική συμπεριφορά του ημιαγωγού μεταβάλλεται. Οι πρώτες προσπάθειες για συστηματικό doping των ημιαγωγών έγιναν στο πλαίσιο ανάπτυξης επαφών στα πρώτα τρανζίστορ. Αυτή η διαδικασία doping αφορούσε την εναπόθεση και μετέπειτα θέρμανση ενός μετάλλου (συνήθως ίνδιο) στον ημιαγωγό (συνήθως γερμάνιο). Με τη θέρμανση της διάταξης το ίνδιο διαχεόταν στο σώμα του ημιαγωγού δημιουργώντας ταυτόχρονα και την μεταλλουργική επαφή. Αυτή η πρώιμη μορφή εμφύτευσης ονομάστηκε alloy junction technology αλλά ήταν εμφανές ότι η δυνατότητα ελέγχου της εμφύτευσης ήταν εξαιρετικά κακή και γρήγορα εγκαταλείφθηκε. Η διαδικασία βελτιώθηκε λίγα χρόνια μετά με την double diffused mesa technology σύμφωνα με την οποία ο ημιαγωγός εκτίθεται σε ένα περιβάλλον αερίου που αποτελείται από άτομα της πρόσμιξης. Με τη θέρμανση του συστήματος σε έναν φούρνο οι προσμίξεις του αερίου μπορούσαν πλέον να διαχυθούν στο σώμα του ημιαγωγού. Σε συνδυασμό με την επίπεδη τεχνολογία που ανακαλύφθηκε εκείνη την περίοδο από τον J. Hoerni στην Fairchild Semiconductors επέτρεψε στον σχηματισμό πολλών τρανζίστορ στον ίδιον ημιαγωγό με πολλαπλά στάδια λιθογραφίας και ανάπτυξης οξειδίων. Με αυτή τη διαδικασία πορεύθηκε η κατασκευή διατάξεων μέχρι και τη δεκαετία του 1970, οπότε εμφανίστηκε η ανάγκη για καλύτερο έλεγχο του βάθους του προφίλ προσμίξεων.

Παρά το γεγονός ότι η ιοντική εμφύτευση καθυστέρησε, σχετικά, να εισαχθεί στην κατασκευή μικροηλεκτρονικών διατάξεων, η πρώτη παρουσίαση της μεθόδου για αυτή τη χρήση είχε ήδη γίνει από το 1956 από τον W. Shockley στα εργαστήρια Bell. Στη σχετική πατέντα [56] ο Shockley παρουσιάζει τη χρήση μιας δέσμης επιταχυνόμενων ιόντων της ομάδας III ή V του περιοδικού πίνακα της οποίας η ενέργεια επιτρέπει



**Σχήμα 1.7:** Οι βασικές αλληλεπιδράσεις μιας δέσμης ιόντων με ένα στερεό.

την εισαγωγή των ιόντων μέχρι ενός πολύ καλά ελεγχόμενου βάθους. Η μετέπειτα θέρμανση της διάταξης μπορεί να επαναφέρει τις κρυσταλλικές ιδιότητες του ημιαγωγού και να ενεργοποιήσει ηλεκτρικά τις προσμίξεις. Μάλιστα, ο Schockley παρουσίασε την κατασκευή ενός διπολικού τρανζίστορ ακολουθώντας αυτή τη διαδικασία. Από κει και πέρα η διεργασία της εμφύτευσης βελτιώθηκε συστηματικά χάρη στις συνεισφορές των J.F. Gibbons [57, 58], R.W. Bower [59–61], S. Wagner [62], R.H. Dennard [14] και άλλων, ώσπου καθιερώθηκε ως ο βασικός μηχανισμός εισαγωγής προσμίξεων στους ημιαγωγούς με τον οποίο πορευτήκε η βιομηχανία ημιαγωγών τουλάχιστον μέχρι τα μέσα της δεκαετίας του 2000.

Όταν, λοιπόν, επιταχυνόμενα ιόντα εισέρχονται σε ένα υλικό (βλ. και εικόνα 1.7) αυτά θα χάσουν σταδιακά ενέργεια λόγω σκεδάσεων με το στόχο. Υπάρχουν δύο κύριοι τρόποι απώλειας ενέργειας, ο ηλεκτρονικός και ο πυρηνικός [63]. Στον πρώτο η απώλεια ενέργειας του ιόντος γίνεται μέσω σκεδάσεων του με τα ηλεκτρόνια του στόχου. Αυτή η απώλεια ενέργειας μεταφέρεται μέσω του νέφους ηλεκτρονίων κάτι το οποίο οδηγεί, τελικά, σε θερμικές ταλαντώσεις του πλέγματος. Ο ηλεκτρονικός τρόπος απώλειας ενέργειας είναι χαρακτηριστικός της διαδικασίας όταν η ταχύτητα του ιόντος είναι αρκετά μεγάλη, οπότε και το ιόν κινείται στο υλικό σε σχεδόν ευθεία τροχιά. Όταν το ιόν χάσει αρκετή ενέργεια υπεισέρχεται στη διαδικασία ο πυρηνικός τρόπος απώλειας ενέργειας. Στον πυρηνικό τρόπο η απώλεια ενέργειας οφείλεται στις σκεδάσεις του ιόντος

με άτομα του στόχου. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την μετακίνηση των ατόμων του στόχου εκτός των συγκεκριμένων πλεγματικών σημείων οπότε και εισάγεται πλέον στο υλικό μια ατέλεια. Οι ατέλειες που μπορεί να εισάγει αυτή η διαδικασία στο πλέγμα είναι πολλές και διαφορετικές και μπορεί να κυμαίνονται από σημειακές ατέλειες τύπου Frenkel ή εξαρθρώσεις μέχρι πλήρη αμορφοποίηση του υλικού. Όταν όλη η ενέργεια του ιόντος χαθεί, είτε με τον έναν τρόπο είτε με τον άλλον, τότε αυτό θα σταματήσει να κινείται και είναι πλέον εμφυτευμένο στον στόχο.

Ένα χαρακτηριστικό μέγεθος που μας βοηθάει στην εκτίμηση της ολικής εμβέλειας ενός ιόντος σε ένα υλικό είναι η ανασχετική ισχύς (stopping power),  $S(E)$ , η οποία ουσιαστικά είναι ο ρυθμός απώλειας ενέργειας του ιόντος κατά βάθος.

$$S(E) = -\frac{dE}{dx} \quad (1.1)$$

οπότε πλέον η ολική εμβέλεια,  $R_p$ , του σωματιδίου θα είναι

$$R_p = \int_0^{E_k} \frac{1}{S_n(E) + S_e(E)} dE \quad (1.2)$$

όπου  $E_k$  η αρχική ενέργεια επιτάχυνσης του ιόντος. Οι παράμετροι  $S_n(E)$  και  $S_e(E)$  αποτελούν την ανασχετική ισχύς από τον πυρηνικό και ηλεκτρονικό τρόπο αντίστοιχα και έχουν εκτιμηθεί από τον Gibbons [57] για τον πυρηνικό τρόπο

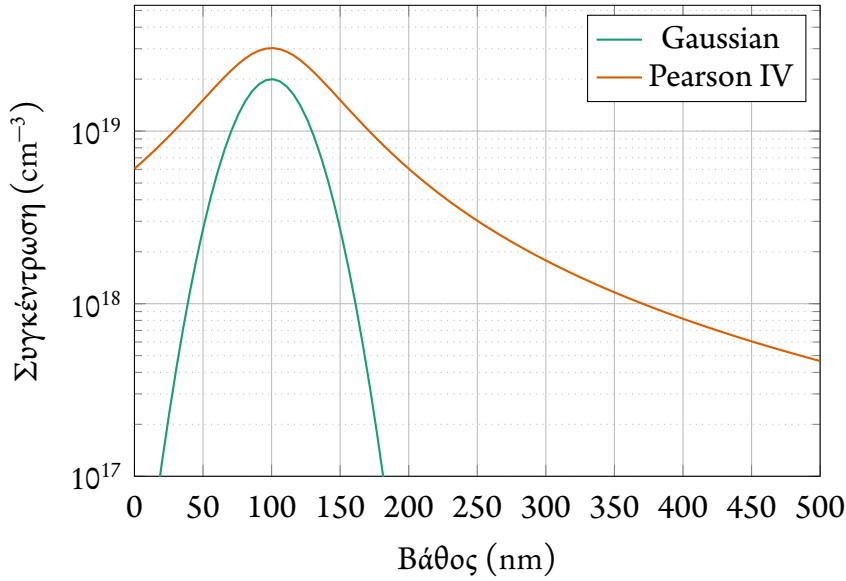
$$S_n(E) = 2.8 \times 10^{-15} \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}} \frac{m_1}{m_1 + m_2} \text{ eV cm}^2 \quad (1.3)$$

όπου  $m_1, Z_1, m_2, Z_2$  οι μάζες και ατομικοί αριθμοί εμφυτευόμενου ιόντος και στόχου αντίστοιχα, ενώ για τον ηλεκτρονικό:

$$S_e(E) \simeq k \sqrt{E_k} \quad (1.4)$$

όπου  $k$  μια ημι-εμπειρική παράμετρος που εξαρτάται από το εμφυτευόμενο ιόν.

Αυτή η διαδικασία προφανώς έχει κάποιες μορφής στατιστικό χαρακτήρα, καθώς τα ιόντα μπορεί να σταματήσουν πιο πριν ή πιο μετά από την προβλεπόμενη εμβέλεια. Αυτή η κατανομή των ιόντων εξαρτάται αρκετά και από την τρέχουσα απόσταση η οποία έχει ήδη διανυθεί από το ιόν καθώς όσο πιο πολύ κινείται στο σώμα του ημιαγωγού τόσο πιο πολλά γεγονότα πέδησης (πχ. σκεδάσεις) μπορούν να πραγματοποιηθούν. Τελικά θα έχουμε μια κατανομή ιόντων με την μεγάλη πλειοψηφία αυτών να βρίσκονται εντός ενός εμβελειακού εύρους,  $\Delta R_p$ . Ειδικά σε ενέργειες κάτω από 100 keV



**Σχήμα 1.8:** Σύγκριση των γκαουσιανών και Pearson IV προσεγγίσεων για την ιοντική εμφύτευση.

και δόσεις μεγαλύτερες από  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  αυτή η διαδικασία έχει έντονα στατιστικό χαρακτήρα, η κατανομή τους, όμως μπορεί να περιγραφεί από μια γκαουσιανή κατανομή η οποία έχει τη μορφή:

$$C(x) = C_p \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) \quad (1.5)$$

Τα ιόντα κατανέμονται με γκαουσιανό τρόπο γύρω από μια κορυφή συγκέντρωσης,  $C_p$ . Με αυτό τον τρόπο μπορεί να εκτιμηθεί η ολική δόση της εμφύτευσης,  $Q$

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} C(x) dx = \sqrt{2\pi} \Delta R_p C_p \quad (1.6)$$

Παρόλα αυτά η γκαουσιανή κατανομή δεν είναι αρκετή για να αναπαραστήσει σωστά την “ουρά” της κατανομής των προσμίξεων. Μια πιο σωστή προσέγγιση της εμφύτευσης είναι μέσω της κατανομής Pearson IV [64].

$$C(x) = C_p \left[ 1 + \left( \frac{x - R_p}{2\Delta R_p} \right)^2 \right]^{-m} \exp \left[ -n \tan^{-1} \left( \frac{x - R_p}{2\Delta R_p} \right) \right] \quad (1.7)$$

Η κατανομή Pearson IV έχει πολύ καλύτερη αναπαράσταση της συγκέντρωσης προσμίξεων μακριά από το βάθος μέγιστης συγκέντρωσης, όπως μπορεί να φανεί και στην εικόνα 1.8. Με κατάλληλο fitting των παραμέτρων  $n$  και  $m$  μπορεί να επιτευχθεί πολύ

καλή συμφωνία πειράματος και μοντελοποίησης, τουλάχιστον για το εύρος υψηλών ενεργειών από 30 μέχρι 100 keV περίπου. Περαιτέρω βελτιώσεις αυτής της προσέγγισης μπορούν να γίνουν χρησιμοποιώντας διπλές κατανομές Pearson [65].

### 1.4.2 Ατέλειες κατά την εμφύτευση

Είπαμε ότι ένα αποτέλεσμα της ιοντικής εμφύτευσης είναι η εισαγωγή ατελειών στο κρυσταλλικό πλέγμα του ημιαγωγού. Οι ατέλειες είναι ο λόγος για τον οποίον όλες οι κατανομές προσμίξεων αποκλίνουν από τις γκαουσιανές στην περιοχή μέγιστης συγκέντρωσης. Για την αντιμετώπιση των ατελειών που εισάγονται με την εμφύτευση απαιτείται μια θερμική κατεργασία του ημιαγωγού που ονομάζεται *ανόπτηση* (annealing). Η θέρμανση σε υψηλή θερμοκρασία μπορεί να διαλύσει την πλειοψηφία των ατελειών προσφέροντάς τους ενέργεια ενώ παράλληλα μετακινεί τις εμφυτευμένες προσμίξεις σε ενδοπλεγματικές θέσεις που είναι ηλεκτρικά ενεργές. Ακολουθεί μια σύντομη ανασκόπηση των πλεγματικών ατελειών που εισάγονται κατά την εμφύτευση σε πυρίτιο και γερμάνιο.

**Channeling.** Αν και το channeling δεν είναι ακριβώς ατέλεια είναι ένα φαινόμενο το οποίο πρέπει να αντιμετωπιστεί κατά την ιοντική εμφύτευση. Στην ουσία πρόκειται για την μη αναμενόμενη επέκταση της διαδρομής ενός ιόντος ανάμεσα στα πλεγματικά επίπεδα χωρίς να συναντήσει κάποιο πλεγματικό άτομο. Αυτό επιτρέπει στο ιόν να κινηθεί πολύ βαθύτερα του αναμενόμενου. Συνήθως αντιμετωπίζεται με μια ελαφριά κλίση του wafer της τάξης των 7–10° ώστε το πλεγματικό σύστημα να “φαίνεται άμορφο” στο ιόν. Στην πραγματικότητα αυτό δεν ισχύει, φυσικά, αλλά μειώνει σημαντικά τις παρενέργειες της “κανονικότητας” του πλέγματος του ημιαγωγού.

**Πλεγματικές ατέλειες Frenkel και σύμπλοκά τους.** Αναφέραμε ήδη ότι η εισαγωγή ενός ιόντος στο κρυσταλλικό πλέγμα αφήνει μια ατέλεια στον κρύσταλλο. Η ατέλεια Frenkel, όπως αποκαλείται, αποτελείται ουσιαστικά από ένα ενδοπλεγματικό άτομο (interstitial) το οποίο μετακινήθηκε από τη θέση του κατά την εισαγωγή του ιόντος και ένα ενδοπλεγματικό κενό (vacancy) το οποίο άφησε πίσω του το άτομο που μετακινήθηκε. Οι δύο αυτές ατέλειες αποτελούν ένα ζεύγος Frenkel. Και οι δύο ατέλειες υπάρχουν στο πλέγμα και ακολουθούν μια κατανομή της μορφής

$$N_d = N \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (1.8)$$

#### 1.4. Ιοντική εμφύτευση και ρηχές επαφές

όπου  $N_d$  η συγκέντρωση των ατελειών,  $N$  ο αριθμός των πλεγματικών σημείων και  $E_a$  η ενέργεια ενεργοποίησης για τον σχηματισμό της ατέλειας που συνήθως είναι της τάξης των μερικών eV. Στο πυρίτιο αυτή η ενέργεια είναι 2 και 4.4 eV για interstitials και vacancies αντίστοιχα [66]. Και οι δύο ατέλειες μπορούν να υπάρχουν μεμονωμένες ή ακόμα και να σχηματίζουν σύμπλοκα (clusters) σε υψηλότερες ενέργειες εμφύτευσης. Σε πολύ υψηλές ενέργειες μπορεί να οδηγηθούμε και σε τοπικούς αμορφοποιημένους θύλακες στην περιοχή των συμπλόκων (amorphous pockets).

**Εκτεταμένες ατέλειες.** Όταν έχουμε ένα μεγάλο σύνολο από πλεγματικές ατέλειες πλέον μιλάμε για εκτεταμένες ατέλειες. Η πυκνότητα των ατελειών είναι τόσο μεγάλη ώστε εμφανίζονται ως διακριτά χαρακτηριστικά στο κρυσταλλικό πλέγμα του ημιαγωγού. Στις εκτεταμένες ατέλειες περιλαμβάνονται:

- ▶ *Βρόγχοι εξάρμωσης (dislocation loops)*: Προκαλούνται από υπερσυγκέντρωση πλεγματικών κενών ή ενδοπλεγματικών ατόμων επί ενός κρυσταλλικού επιπέδου. Η υπερσυγκέντρωση αυτή έχει ως αποτέλεσμα την μηχανική παραμόρφωση του πλέγματος γύρω από τις ατέλειες.
- ▶ *Σφάλματα στοίβαξης (stacking faults)*: Αφορούν την λανθασμένη αλληλουχία ατόμων ανάμεσα στα κρυσταλλικά επίπεδα.
- ▶ *Σφάλματα {311}*: Προκαλούνται από την συσσωμάτωση ενδοπλεγματικών ατόμων σε μορφή ράβδου. Τα σφάλματα {311} είναι χαρακτηριστικά των ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή αδάμαντα και εμφανίζονται τόσο στο πυρίτιο όσο και στο γερμάνιο με τη μορφή μιας ράβδου η οποία επεκτείνεται γραμμικά κατά μήκος του κρυσταλλικού επιπέδου <110> [67]. Ο σχηματισμός των {311} περνάει από τρία στάδια. Πρώτα έχουμε τον σχηματισμό των υπο-μικροσκοπικών συμπλόκων ενδοπλεγματικών ατόμων (sub-microscopic interstitial clusters, SMIC). Καθώς το σύμπλοκο μεγαλώνει η ατέλεια επεκτείνεται κατά μήκος του επιπέδου <110> και στο τέλος μετά από θέρμανση του ημιαγωγού διαλύονται στα ενδοπλεγματικά άτομα από τα οποία δημιουργήθηκαν [68–70].

Η παρουσία των {311} και των βρόγχων εξάρμωσης παίζει επίσης μεγάλο ρόλο στην εμφάνιση του φαινομένου της *Ταχείας Μεταβατικής Διάχυσης* (Transient Enhanced Diffusion, TED) που είναι ένα φαινόμενο που εμφανίζεται σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες ανόπτησης και κατά το οποίο ενισχύεται εξαιρετικά έντονα η διάχυση των προσιμίξεων στον ημιαγωγό κάτι το οποίο δεν είναι γενικά επιθυμητό ειδικά όσο το βάθος

των εμφυτευμένων επαφών μικραίνει. Αυτό απαιτεί την έντονη μεταφορά θερμότητας σε σύντομο χρονικό διάστημα και είναι ο λόγος για την ανάπτυξη νέων συστημάτων ανόπτησης που μπορούν να μεταφέρουν μεγάλο θερμικό budget σε μικρό χρονικό διάστημα. Ανάμεσά τους είναι και η ανόπτηση με laser που είναι αντικείμενο αυτής της διατριβής και θα δούμε και πιο αναλυτικά στα επόμενα κεφάλαια.

**End of Range defects.** Κατά την εμφύτευση ένα ποσοστό του ημιαγωγού αμορφοποιείται. Στα όρια της άμορφης περιοχής με την κρυσταλλική έχουμε την εμφάνιση ορισμένων ατελειών που συνήθως είναι σύμπλοκα σφαλμάτων  $\{311\}$  με βρόγχους εξάρμωσης και καλούνται *End of Range (EOR) defects*. Αυτού του τύπου οι ατέλειες είναι εξαιρετικά σταθερές καθώς περνούν από μία διαδικασία *ωρίμανσης* κατά τη θέρμανση. Καθώς ο ημιαγωγός θερμαίνεται οι βρόγχοι που αποτελούν τα EOR τείνουν να μεγαλώνουν αφού η προσφορά ενέργειας συνεισφέρει στην συσσωμάτωση μικρότερων βρόγχων σε μεγαλύτερους [71]. Η αντιμετώπισή τους είναι εξαιρετικά δύσκολη και απαιτεί θέρμανση πάνω από τους 1000°C στην περίπτωση του πυριτίου. Η παρουσία τους είναι ιδιαίτερα καταστροφική στα όρια των επαφών καθώς μπορούν να οδηγήσουν στην εμφάνιση εξαιρετικά μεγάλων ρευμάτων διαρροής. Αν και έχει παρατηρηθεί ότι το φαινόμενο εμφανίζεται ακόμα και απουσία  $\{311\}$ , τουλάχιστον στο πυρίτιο [72], η ύπαρξή τους επιταχύνει τη διαδικασία.

### 1.4.3 Εμφυτεύσεις πλάσματος, χαμηλής ενέργειας και ρηχές επαφές

Καθώς τα τρανζίστορ συνέχιζαν να μικραίνουν τη δεκαετία του 2000 εμφανίστηκε η ανάγκη για την εμφύτευση προσμίξεων σε όλο και μικρότερο βάθος ούτως ώστε να κατασκευαστούν η πηγή και ο απαγωγός του τρανζίστορ και κυρίως οι επεκτάσεις τους μέσα στο κανάλι (source/drain extensions) που έγιναν απαραίτητες για την αντιμετώπιση του short channel effect. Αυτές οι εμφυτεύσεις απαιτούν ένα μεγάλο ποσοστό προσμίξεων σε πολύ μικρό βάθος, αποτελούν δηλαδή *ρηχές επαφές* και είναι πλέον ο κατεξοχήν τρόπος με τον οποίο κατασκευάζονται τα σύγχρονα τρανζίστορ πυριτίου. Οι επαφές αυτές πρέπει να είναι όχι μόνο πολύ ρηχές αλλά και ταυτόχρονα πολύ απότομες.

**Ultra Low Energy Implantation.** Η πρώτη προσπάθεια για τον καλύτερο έλεγχο του βάθους της εμφύτευσης έγινε με τους εμφυτευτές χαμηλής ενέργειας (Ultra Low Energy, ULE). Οι ULE εμφυτευτές επιβραδύνουν τα ιόντα μέσα σε ένα ηλεκτροστατικό πεδίο προτού αυτά εισαχθούν στον στόχο. Με αυτή τη διαδικασία μπορούν να



επιτευχθούν ενέργειες εμφύτευσης μικρότερες από 1 keV. Υπάρχουν, όμως, δύο προβλήματα που προκύπτουν από τη χρήση εμφυτευτών αυτής της μορφής. Πρώτον, λόγω της ύπαρξης ελεύθερων μορίων ή ατόμων ανάμεσα στον ενεργειακό αναλυτή και τους φακούς επιβράδυνσης υπεισέρχεται μια αβεβαιότητα ως προς την ενέργεια της δέσμης με αποτέλεσμα ένα ποσοστό της δέσμης να μην επιβραδύνεται ικανοποιητικά θέτοντας αρκετούς περιορισμούς στο τελικό βάθος εμφύτευσης που μπορεί να επιτευχθεί. Δεύτερον, η πυκνότητα ρεύματος της δέσμης είναι αρκετά χαμηλή, σύμφωνα με τον νόμο Child-Langmuir.

$$J = \frac{4\epsilon_0}{9} \sqrt{\frac{2q}{m_i}} \frac{V_e^{3/2}}{x^2} \quad (1.9)$$

όπου  $q$  το στοιχειώδες φορτίο,  $m_i$  η μάζα του εμφυτευόμενου ιόντος,  $V_e$  το δυναμικό επιτάχυνσης και  $x$  η απόσταση στην οποία εφαρμόζεται το δυναμικό. Λόγω της ύπαρξης φορτίων χώρου η σωστή μεταφορά της δέσμης από την πηγή στον στόχο γίνεται δύσκολη με αποτέλεσμα τόσο την υποβάθμιση της έντασης όσο και της ομοιομορφίας της δέσμης [73].

**Εμφύτευση πλάσματος.** Επόμενη εξέλιξη των εμφυτευτών χαμηλής ενέργειας είναι η εισαγωγή της διαδικασίας εμφύτευσης πλάσματος (plasma doping, PLAD). Με τις διάφορες παραλλαγές της μεθόδου μπορούν να επιτευχθούν ενέργειες εμφύτευσης ακόμα και κάτω από 200 eV. Σε αυτή την οικογένεια ιοντικών εμφυτεύσεων η διαδικασία της εισαγωγής προσμίξεων γίνεται με την παραγωγή πλάσματος το οποίο βασίζεται στην πρόσμιξη στην οποία πρόκειται να εμφυτευθεί. Στην περίπτωση, για παράδειγμα, του βορίου το σύνηθες πλάσμα βασίζεται σε ιόντα  $\text{BF}_3^+$  ενώ του φωσφόρου σε ιόντα  $\text{PH}_3^+$ . Τα δείγματα φορτίζονται με έναν παλμό δυναμικού από 100 ως 5000 V, ανάλογα με το βάθος που επιζητείται, στην άνοδο του θαλάμου πλάσματος, ενώ τα ιόντα επιταχύνονται κατά μήκος της καθόδου. Η ενέργεια η οποία τελικά θα αποκτήσουν κατά την εισαγωγή τους στον ημιαγωγό είναι ανάλογη του δυναμικού του παλμού που εφαρμόστηκε στην άνοδο [74]. Οι παλμοί δυναμικού ουσιαστικά ενεργοποιούν το πλάσμα σταδιακά μέχρι να επιτευχθεί η επιθυμητή δόση, ενώ όταν ο παλμός παύεται τα ελεύθερα ηλεκτρόνια αποφορτίζουν το θετικό φορτίο που συσσωρεύτηκε κατά τη διάρκεια εφαρμογής του. Η διάρκεια των παλμών είναι της τάξης των μερικών δεκάδων μs σε πολύ υψηλή συχνότητα για την αποφυγή παρασιτικών φαινομένων [75]. Στην περίπτωση που η “άντληση” του πλάσματος δεν είναι παλμική μιλάμε για πλέον Plasma Immersion Ion Implantation [76, 77]. Οι διαφορές τους είναι μικρές αν και η χρήση

παλμικού πλάσματος φαίνεται να προστατεύει την επιφάνεια από παρασιτική χάραξη καλύτερα από την PIII [78].

Σε κάθε περίπτωση η μεγάλη πυκνότητα ρεύματος που μπορεί να αποδώσει ένας εμφυτευτής πλάσματος σε συνδυασμό με τις πολύ χαμηλές ενέργειες εμφύτευσης ανοίγουν το δρόμο για το σχηματισμό *υπερ-ρηχών επαφών*. Η ρηχή εμφύτευση χαμηλής ενέργειας είναι ο ένας κρίσιμος παράγοντας για τον σχηματισμό υπερ-ρηχών επαφών στους ημιαγωγούς μαζί με την ελεγχόμενη ταχεία ανόπτηση ώστε να αποφευχθεί η διάχυση των προσμίξεων.

Ειδικά στην περίπτωση του βορίου, με το οποίο εμφυτεύτηκαν και τα δείγματα πυριτίου της παρούσας εργασίας, προς την κατεύθυνση ελαχιστοποίησης της διάχυσης συνεισφέρει η παρουσία του φθορίου στο πλάσμα της εμφύτευσης. Οι εμφυτεύσεις πλάσματος με βασική πρόσμιξη το βόριο συνήθως αποτελούνται από ένα μείγμα ιόντων  $\text{BF}_3^+$ ,  $\text{BF}_2^+$ ,  $\text{BF}^+$  και  $\text{B}^+$  σε συνήθη αναλογία 70:10:10:10. Η διαδικασία αυτή οδηγεί σε μειωμένη διάχυση του βορίου τόσο μετά την εμφύτευση όσο και μετά την ανόπτηση [79]. Ο συνδυασμός εμφύτευσης πλάσματος αυτής της μορφής και ταχείας ανόπτησης μπορεί να οδηγήσει όπως θα δούμε σε σχηματισμό επαφών στο πυρίτιο κάτω από 20 nm.

Παρόλα αυτά η εμφύτευση πλάσματος δεν είναι χωρίς μειονεκτήματα. Κύριο πρόβλημα που εμφανίζει η τεχνική είναι η σημαντική απόκλιση ονομαστικής και πραγματικής δόσης που τελικά καταλήγει στον ημιαγωγό, κάτι το οποίο απαιτεί συνεχείς βαθμονομήσεις τόσο σε επίπεδο κατασκευής όσο και προσομοίωσης. Παράλληλα λόγω της φύσης της διαδικασίας τα ιόντα που εμφυτεύονται δεν είναι αυστηρά μονοενεργειακά, όπως στην περίπτωση της κλασικής ιοντικής εμφύτευσης, αλλά εμφανίζουν μια διασπορά στο ενεργειακό τους φάσμα. Επίσης η παρουσία του φθορίου, στην περίπτωση του πλάσματος  $\text{BF}_x^+$ , παρά το γεγονός ότι περιορίζει τόσο τη διάχυση του βορίου οδηγώντας σε ρηχότερες επαφές όσο και την εμφάνιση του TED [80], φαίνεται ότι επηρεάζει αρνητικά το ποσοστό ενεργοποίησης των προσμίξεων [81], πιθανότατα λόγω της δημιουργίας συμπλόκων βορίου-φθορίου, ενώ εμφανίζονται και προβλήματα στην αξιοπιστία των οξειδίων πύλης μετά την εμφύτευση.

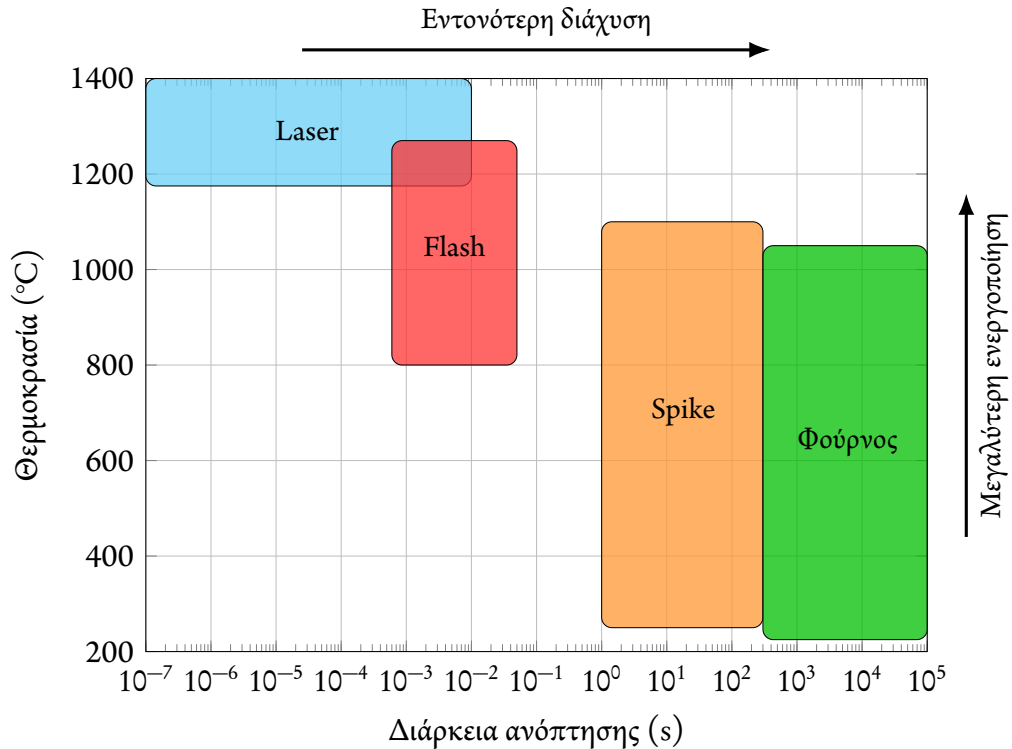
**Μοριακή εμφύτευση.** Κλείνοντας αυτή την παράγραφο, πρέπει να αναφερθούμε και σε μία καινούρια μέθοδο εμφύτευσης η οποία βασίζεται στην επιταξία μοριακών στρωμάτων και ονομάζεται *Molecular Monolayer Doping* (MLD) και εμφανίζει ιδιαίτερο ερευνητικό ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια. Παρουσιάστηκε για πρώτη φορά από ερευνητές του πανεπιστημίου Berkeley [82] και αφορά στον σχηματισμό πολύ λεπτών ατο-

## 1.5. Θερμική ανόπτηση

μικρών στρωμάτων (πάχους 1–1.5 nm) τα οποία προσδένονται με χημικό τρόπο επάνω στην επιφάνεια του ημιαγωγού. Μετά τον σχηματισμό του μοριακού στρώματος ένα διηλεκτρικό εναποτίθεται στην επιφάνεια και κατόπιν ακολουθεί ένας κύκλος ανόπτησης. Κατά την ανόπτηση οι προσμίξεις του μοριακού στρώματος διαχέονται στον ημιαγωγό και παραμένουν σε εξαιρετικά μικρό βάθος επιτρέποντας με αυτό τον τρόπο τον σχηματισμό πολύ ρηχών εμφυτεύσεων, οι οποίες μάλιστα έχουν το πλεονέκτημα της ισοτροπικότητας, δηλαδή με αυτή την διαδικασία είναι εφικτό το ντοπάρισμα τρισδιάστατων γεωμετριών κάτι το οποίο είναι εξαιρετικά σημαντικό για την ομοιομορφία της εμφύτευσης στα τρανζίστορ τύπου FinFET [83]. Με αυτή την τεχνική μπορεί να επιτευχθεί ο σχηματισμός εμφυτεύσεων βορίου με βάθος επαφής μικρότερο και από 8 nm με συμβατικές μεθόδους spike annealing με ποσοστό ενεργοποίησης που ξεπερνά το 70% [84] χωρίς τη χρήση φθορίου. Επίσης, επειδή η διαδικασία δεν είναι ενεργητική οι ατέλειες που εισάγονται στο πλέγμα είναι εξαιρετικά λιγότερες, κάτι το οποίο αντιμετωπίζει ένα σύνολο προβλημάτων που προέρχονται από την εκτεταμένη κατανομή ατελειών, όπως το TED στο οποίο έχουμε αναφερθεί εκτεταμένα. Αν και η πρωτότυπη εργασία αφορά την μελέτη του βορίου στο πυρίτιο, εκτεταμένες έρευνες έχουν γίνει με τη χρήση άλλων προσμίξεων (πχ. αρσενικό [85]) ή ακόμα και άλλων υποστρωμάτων, όπως ημιαγωγοί III-V [86]. Σε γενικές γραμμές μπορούμε να πούμε ότι πρόκειται για μια εξαιρετικά υποσχόμενη τεχνική που δεν πάσχει από τις ενδημικές παθογένειες της ενεργειακής εμφύτευσης με ιόντα.

### § 1.5 ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΝΟΠΤΗΣΗ

Εφόσον είδαμε μια επισκόπηση της εμφύτευσης προσμίξεων, θα κάνουμε τώρα το ίδιο και για τη δεύτερη σημαντική διεργασία που μας ενδιαφέρει για αυτή τη διατριβή, η οποία δεν είναι άλλη από τη θερμική ανόπτηση thermal annealing. Η ανόπτηση είναι μια εξαιρετικά κρίσιμη διαδικασία στην κατασκευή των τρανζίστορ. Αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο ότι η διαδικασία της ιοντικής εμφύτευσης, είτε αυτή αναφέρεται σε κλασικούς εμφυτευτές, είτε σε πλάσματος, εισάγει αναπόφευκτα ατέλειες στον κρύσταλλο του ημιαγωγού οι οποίες μπορεί να κυμαίνονται από σημειακές ως εκτεταμένες. Αρκετές φορές, ανάλογα με τις συνθήκες εμφύτευσης, μπορεί να οδηγηθούμε και σε αμορφοποίηση του κρυστάλλου. Πέραν τούτου, λόγω της στατιστικής φύσης της διαδικασίας της εμφύτευσης, οι προσμίξεις δεν θα καταλήξουν απαραίτητα σε ενδοπλεγματικές θέσεις που μπορούν να συνεισφέρουν ηλεκτρικά στον κρυστάλλου. Ως εκ τούτου επιβάλλεται η προσφορά ενέργειας, στον κρύσταλλο ούτως ώστε να επανακρυ-



**Σχήμα 1.9:** Θερμοκρασιακά και χρονικά εύρη των διαφορών τεχνικών ανόπτησης που χρησιμοποιούνται (προσαρμοσμένο από Kalra [87]).

σταλλοποιηθούν οι περιοχές του κρυστάλλου στις οποίες εμφανίστηκαν ατέλειες και να μετακινηθούν οι εμφυτευμένες προσμίξεις σε θέσεις χαμηλής ενέργειας και να είναι ηλεκτρικά ενεργές. Η προσφορά ενέργειας για την πραγματοποίηση αυτών των διαδικασιών γίνεται με θερμικό τρόπο και αποτελεί αναπόσπαστο κομμάτι της κατασκευαστικής αλυσίδας των ημιαγωγικών διατάξεων. Στο γράφημα 1.9 μπορούμε να δούμε τα χρονικά και θερμοκρασιακά εύρη των διάφορων τεχνικών ανόπτησης στις οποίες θα αναφερθούμε.

Από την αρχή της ιστορίας της τεχνολογίας των ημιαγωγών η διαδικασία της ανόπτησης γινόταν με τη χρήση φούρνων στις οποίες τα wafers στοιβάζονταν και θερμαίνονταν μαζί με βαθμίδες θερμοκρασίας από 10 με 100°C/min. Ο χρόνος αυτής της διαδικασίας κυμαινόταν από μερικά δευτερόλεπτα (spike annealing) μέχρι δεκάδες λεπτά. Σε κάθε περίπτωση αποτέλεσμα αυτής της συμβατικής ανόπτησης είναι η έντονη διάχυση των προσμίξεων σε πολύ μεγάλο βάθος, κάτι το οποίο είναι μη επιθυμητό πλέον στην εποχή που οι εμφυτεύσεις πρέπει να είναι όχι μόνο ρηχές αλλά και με απότομα προφίλ.

Εφόσον ο συντελεστής διαχυτότητας,  $D$ , μιας πρόσμιξης στο υλικό δεν μπορεί να αλλάξει, ο μόνος ελεγχόμενος παράγοντας που μπορεί να επηρεάσει το μήκος διάχυσης,  $\tau \simeq \sqrt{Dt}$  μιας πρόσμιξης είναι ο χρόνος,  $t$ , της διαδικασίας. Συνεπώς ήταν φυσική εξέλιξη η προσπάθεια για όλο και μικρότερους χρόνους ανόπτησης με όλο και μεγαλύτερο θερμικό budget. Φτάνουμε αναπόφευκτα πλέον στην ανάπτυξη της ταχείας ανόπτησης (Rapid Thermal Annealing, RTA). Η σημαντικότερη διαφορά της ταχείας ανόπτησης σε σχέση με τις συμβατικές ανοπτήσεις φούρνου, είναι ότι το δείγμα ή wafer δεν είναι ποτέ σε θερμική ισορροπία με το περιβάλλον του. Η ιδέα της ταχείας ανόπτησης δεν είναι καινούρια, καθώς περιγράφηκε σε τεχνική πρώτη φορά το 1957 από ερευνητές του CalTech οι οποίοι παρουσίασαν ένα σύστημα το οποίο μπορούσε να θερμάνει άμορφο πυρίτιο στους 1000°C με ρυθμό θέρμανσης 1000°C/s. Το 1961 ο F.J. White παρουσίασε ένα σύστημα με λάμπες βολφραμίου μεγάλης ισχύος το οποίο μπορούσε να θερμάνει δείγματα σε θερμοκρασίες πάνω από 1000°C σε μερικά δευτερόλεπτα. Καμία από τις δύο περιπτώσεις, ωστόσο, δεν αναφερόταν στην τεχνολογία ημιαγωγών καθώς η εφαρμογή τους ήταν σε θερμομηχανικά πειράματα [88].

Οι τυπικές διατάξεις RTA αποτελούνται κατά κύριο λόγο από ένα σύνολο λαμπτήρων, συνήθως ξένου, μεγάλης ισχύος και φωτεινότητας οι οποίοι ενεργοποιούνται για χρονική διάρκεια από εκατοντάδες ms μέχρι μερικά δευτερόλεπτα [89]. Αυτή η διεργασία RTA αποκαλείται flash annealing και οι διατάξεις αυτής της μορφής είναι από τις πιο συνηθισμένες για ταχεία ανόπτηση ημιαγωγών. Τουλάχιστον στο πυρίτιο θερμοκρασίες της τάξης των 1200°C μπορούν να επιτευχθούν στο χρονικό εύρος των 0.1–2 δευτερολέπτων.

Περαιτέρω εξέλιξη του flash annealing είναι η ανόπτηση με laser που είναι και αντικείμενο αυτής της διατριβής. Ήδη από τη δεκαετία του 1960 ερευνητές τόσο από τις ΗΠΑ όσο και από την Σοβιετική Ένωση είχαν παρουσιάσει εργασίες με χρήση laser για την γρήγορη θέρμανση ημιαγωγών [90, 91], ενώ το 1975 οι Pilipovich κ.ά. [92] παρουσίασαν τη χρήση ενός ruby laser για τον σχηματισμό επαφών p-n σε GaAs με ιοντική εμφύτευση ψευδαργύρου. Ήταν η πρώτη επίδειξη της χρήσης laser για ενεργοποίηση προσμίξεων σε ημιαγωγούς.

Το μεγάλο πλεονέκτημα της ανόπτησης με laser είναι η δυνατότητα για επίτευξη εξαιρετικά μεγάλων βαθμίδων θερμοκρασίας της τάξης των  $1 \times 10^9$ °C/s κάτι το οποίο μπορεί να περιορίσει μεταβατικά φαινόμενα, όπως το TED, που είναι ιδιαίτερα έντονα στην περίπτωση του πυριτίου. Σήμερα πλέον υπάρχει μια μεγάλη βιβλιογραφία που αφορά τη χρήση laser στην ανόπτηση πυριτίου με μεγάλη ποικιλία από laser όπως ex-

cimer, Nd:YAG, CO<sub>2</sub>, διοδικά, κ.ά. τόσο σε καθεστώς τήξης [93–97] όσο και μη [81, 98–100]. Αντίστοιχες εργασίες έχουν γίνει και στο γερμάνιο [101–105]. Η ποιότητα της επανακρυσταλλοποίησης του ημιαγωγού σε καθεστώς τήξης φαίνεται καλύτερης ποιότητας, ωστόσο ο έλεγχος της διάχυσης των προσμίξεων είναι καλύτερος στην περίπτωση της ανόπτησης μη τήξης (οι προσμίξεις διαχέονται εξαιρετικά πιο γρήγορα στον τηγμένο ημιαγωγό). Επίσης η ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης δεν επηρεάζει ήδη υπάρχουσες δομές στον ημιαγωγό οι οποίες διαφορετικά θα καταστρέφονταν.

Σε γενικές γραμμές μπορούμε να πούμε ότι η ανόπτηση με laser διαφαίνεται ως μια πολλά υποσχόμενη τεχνική για το μέλλον των μικροηλεκτρονικών διατάξεων. Δεν είναι, ωστόσο, χωρίς μειονεκτήματα, τα οποία τα μοιράζεται με τις υπόλοιπες τεχνικές RTA με κυριότερο εκ των οποίων να είναι μεγάλη η δυσκολία παρακολούθησης της θερμοκρασίας. Στην περίπτωση διατάξεων με χρονικό εύρος  $1 \times 10^{-3}$  με μερικά δευτερόλεπτα η διαδικασία μπορεί να παρακολουθηθεί με οπτική πυρομετρία, ωστόσο σε χρονικά καθεστώτα κάτω από μs η καταγραφή της θερμοκρασίας είναι εξαιρετικά δυσκολότερη ειδικά αν αναλογιστούμε την γενικότερη μη ομοιομορφία της θερμοκρασίας καθώς το δείγμα δεν βρίσκεται σε θερμική ισορροπία με το περιβάλλον του. Επίσης τίθεται θέμα παραγωγικότητας, καθώς, σε αντίθεση με τους φούρνους, δεν είναι εφικτή η ανόπτηση περισσότερων του ενός δείγματος τη φορά με αποτέλεσμα να γίνεται δύσκολη η παραλληλοποίηση της διαδικασίας σε καθεστώς μαζικής παραγωγής.

## § 1.6 ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Στις παραγράφους που προηγήθηκαν είδαμε μια ιστορική ανασκόπηση της τεχνολογίας ημιαγωγών και τη συνεχιζόμενη προσπάθεια να εξωθήσουμε στα άκρα τα όρια σμίκρυνσης των μικροηλεκτρονικών διατάξεων. Παράλληλα κάναμε μια εισαγωγή σε δύο βασικές front-end τεχνολογίες, την εμφύτευση και την ανόπτηση που θα μας απασχολήσουν γενικότερα στη συνέχεια.

Σίγουρα η υπάρχουσα τεχνολογία πυριτίου θα συνεχίσει τουλάχιστον και μέχρι την τρίτη δεκαετία του 21<sup>ου</sup> αιώνα, σίγουρα όμως πλησιάζουμε, αργά ή γρήγορα, στο τέλος της συνεχόμενης σμίκρυνσης των διατάξεων πυριτίου ή και της χρήσης του πυριτίου σαν το κύριο υλικό των τρανζίστορ. Ήδη, όπως είπαμε, τα state of the art τρανζίστορ που χρησιμοποιούνται στους επεξεργαστές των κόμβων μετά τα 45 nm έχουν απομακρυνθεί από την κλασική αρχιτεκτονική με την οποία πορεύτηκαν για πάνω από 30 χρόνια ενώ ένα σύνολο διαφορετικών υλικών και τεχνικών έχει ενσωματωθεί στη γραμμή παραγωγής. Είναι, δηλαδή, ξεκάθαρο ότι τόσο το ερευνητικό όσο και το τεχνολογικό

κόστος για κάθε επόμενο κόμβο σμίκρυνσης είναι εξαιρετικά μεγαλύτερο από ότι ήταν τη δεκαετία του 1980 και του 1990 καθώς απαιτούνται πολύ περισσότερες καινοτομίες για την μετάβαση από τον έναν κόμβο στον άλλο. Αυτός είναι άλλωστε και ο λόγος ότι οι εταιρείες οι οποίες ανταγωνίζονται στον κλάδο των μικροεπεξεργαστών είναι πλέον εξαιρετικά λίγες. Η μετάβαση στα τρανζίστορ πραγματικά νέας γενιάς, πιθανότατα χωρίς το πυρίτιο, θα γίνει σύντομα αλλά το γεγονός ότι η αγορά των μικροεπεξεργαστών είναι ουσιαστικά ένα ολιγοπώλιο η υπάρχουσα κατάσταση μπορεί να παραμείνει λόγω “κεκτημένης ταχύτητας” για κάποια χρόνια παραπάνω. Ήδη η Intel, για παράδειγμα, καθυστέρησε έναν χρόνο την παραγωγή μικροεπεξεργαστών του κόμβου των 14 nm για πρώτη φορά την τελευταία εικοσαετία.

Σε κάθε περίπτωση για να αντιμετωπιστούν τα προβλήματα που άπτονται της σμίκρυνσης των διατάξεων πυριτίου πρέπει να μελετάται συνεχώς η χρήση νέων τεχνικών, όπως η ανόπτηση με laser με την οποία θα ασχοληθούμε, για να επιτευχθεί ο σχηματισμός εξαιρετικά ρηχών επαφών στο πυρίτιο με το μεγαλύτερο δυνατό ποσοστό ενεργοποίησης των εμφυτευμένων προσμίξεων.

Επίσης είναι δεδομένη η μετάβαση σε νέα υλικά κατασκευής, καθώς είναι σαφές πλέον ότι το πυρίτιο φτάνει σε όρια τα οποία είναι κβαντικά περιορισμένα. Η φυσική, δηλαδή, δεν μας επιτρέπει την περαιτέρω σμίκρυνση των διατάξεων που βασίζονται σε αυτό. Προς αυτή την κατεύθυνση το γερμάνιο και οι ημιαγωγοί III-V είναι οι πιο λογικές προτάσεις. Ειδικότερα η επεξεργασία του γερμανίου είναι πολύ συμβατή με την τεχνολογία πυριτίου αν και η αυξημένη ευκινησία των III-V φαντάζει ως ελκυστική.

Τέλος, αναντικατάστατη δεν είναι ούτε και η αρχιτεκτονική CMOS στην οποία βασίζονται όλα τα υπολογιστικά μοντέλα που γνωρίζουμε, με στάθμες “0” και “1”. Εξαιρετικά έντονη είναι η ερευνητική δραστηριότητα στον κλάδο των κβαντικών υπολογιστών, οι οποίοι θεμελιώνουν ένα ριζικά διαφορετικό μοντέλο “σκέψης” υπολογισμών. Αυτό βέβαια προϋποθέτει τον ριζικό επανασχεδιασμό όλων των επιπέδων που απαρτίζουν την επιστήμη υπολογιστών, από τον φυσικό σχεδιασμό των διατάξεων, μέχρι τη θεωρητική θεμελίωση και τις γλώσσες προγραμματισμού κάτι το οποίο καθιστά την υλοποίηση ενός τέτοιου συστήματος εξαιρετικά δύσκολη, τουλάχιστον ακόμα.

Κλείνοντας, μπορούμε να πούμε ότι κανείς δεν ξέρει ακριβώς ποια θα είναι η επόμενη κίνηση στον κλάδο της μικροηλεκτρονικής είτε βραχυπρόθεσμα είτε μακροπρόθεσμα, αφού τελικά αυτοί που καθορίζουν τον ρου της τεχνολογικής εξέλιξης είναι και αυτοί που έχουν τα τεχνολογικά μέσα να κάνουν έρευνα και ανάπτυξη σε μαζική κλίμακα και δεν είναι άλλοι από τις μεγάλες βιομηχανίες του χώρου.

## § 1.7 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] E. Braun και S. MacDonald. *Revolution in miniature: The history and impact of semiconductor electronics*. Cambridge University Press, 1982.
- [2] M. Tanenbaum κ.ά. “Silicon n-p-n Grown Junction Transistors”. *J. Appl. Phys.* 26.6 (1955), 686–692. DOI: [10.1063/1.1722071](https://doi.org/10.1063/1.1722071).
- [3] C.J. Frosch και L. Derick. “Surface protection and selective masking during diffusion in silicon”. *Journal of The Electrochemical Society* 104.9 (1957), 547–552. DOI: [10.1149/1.2428650](https://doi.org/10.1149/1.2428650).
- [4] J.W. Lathrop. “Photolithographic fabrication techniques for transistors which are an integral part of a printed circuit”. *Electron Devices, IRE Transactions on S.2* (Απρ. 1958), 117. DOI: [10.1109/T-ED.1958.14395](https://doi.org/10.1109/T-ED.1958.14395).
- [5] G.E. Moore και R.N. Noyce. “Method for fabricating transistors”. Διπλ. ευρεσ. US 3,108,359 (ΗΠΑ). Οκτ. 1963.
- [6] J.S. Kilby. “Semiconductor solid circuits”. *American Rocket Society 14th Annual Meeting*. Νοέ. 1959.
- [7] J.A. Hoerni. “Method of manufacturing semiconductor devices”. Διπλ. ευρεσ. US 3,025,589 (ΗΠΑ). Μαρ. 1962.
- [8] J.E. Lilienfeld. “Method and apparatus for controlling electric currents”. Διπλ. ευρεσ. US 1,745,175 (ΗΠΑ). Ιαν. 1930.
- [9] D. Kahng και M.M. Atalla. “Silicon-silicon dioxide field induced surface devices”. *IRE Solid-State Device Research Conference*. 1960.
- [10] F.M. Wanlass και C.T. Sah. “Nanowatt Logic Using Field-Effect Metal-Oxide Semiconductor Triodes”. *International Solid State Circuits Conference Digest of Technical Papers*. Φεβ. 1963, 32–33.
- [11] G. Moore. “Cramming more components onto Integrated Circuits”. *Electronics Magazine* 38.8 (Απρ. 1965).
- [12] Semiconductor Industry Association. *International Technology Roadmap for Semiconductors*. Sematech, 2013. URL: <http://www.itrs.net>.
- [13] J.D. Plummer, M.D. Deal και P.B. Griffin. *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling*. Prentice Hall electronics and VLSI series. Prentice Hall, 2000. ISBN: 978-0-13-085037-9.
- [14] R.H. Dennard κ.ά. “Design of ion-implanted MOSFETs with very small physical dimensions”. *IEEE J. Solid-State Circuits* 9.5 (Οκτ. 1974), 256–268. DOI: [10.1109/jssc.1974.1050511](https://doi.org/10.1109/jssc.1974.1050511).
- [15] R. Chau κ.ά. “High-κ/metal-gate stack and its MOSFET characteristics”. *IEEE Electron Device Lett.* 25.6 (Ιούν. 2004), 408–410. DOI: [10.1109/led.2004.828570](https://doi.org/10.1109/led.2004.828570).
- [16] M.T. Bohr κ.ά. “The high-k solution”. *IEEE Spectrum* (Οκτ. 2007), 29–35.
- [17] C. Rossel κ.ά. “Ge p-channel MOSFETS with La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> gate dielectrics”. *ESSDERC 2008 - 38th European Solid-State Device Research Conference*. IEEE, 2008. DOI: [10.1109/essderc.2008.4681703](https://doi.org/10.1109/essderc.2008.4681703).
- [18] S. Van Elshocht κ.ά. “Deposition of HfO<sub>2</sub> on germanium and the impact of surface pretreatments”. *Appl. Phys. Lett.* 85.17 (2004), 3824. DOI: [10.1063/1.1810642](https://doi.org/10.1063/1.1810642).
- [19] M. Meuris κ.ά. “The future of high-κ on pure germanium and its importance for Ge CMOS”. *Materials Science in Semiconductor Processing* 8.1-3 (Φεβ. 2005), 203–207. DOI: [10.1016/j.mssp.2004.09.124](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2004.09.124).



- [20] J. W. Seo κ.ά. “HfO<sub>2</sub> high-κ dielectrics grown on (100) Ge with ultrathin passivation layers: Structure and interfacial stability”. *Appl. Phys. Lett.* 87.22, 221906 (2005). DOI: [10.1063/1.2137897](https://doi.org/10.1063/1.2137897).
- [21] H. Kim κ.ά. “Interfacial characteristics of HfO<sub>2</sub> grown on nitrated Ge (100) substrates by atomic-layer deposition”. *Appl. Phys. Lett.* 85.14 (2004), 2902. DOI: [10.1063/1.1797564](https://doi.org/10.1063/1.1797564).
- [22] M.M. Frank κ.ά. “HfO<sub>2</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> gate dielectrics on GaAs grown by atomic layer deposition”. *Appl. Phys. Lett.* 86.15, 152904 (2005). DOI: [10.1063/1.1899745](https://doi.org/10.1063/1.1899745).
- [23] I. Ok κ.ά. “Self-Aligned n- and p-channel GaAs MOSFETs on Undoped and p-type Substrates Using HfO<sub>2</sub> and Silicon Interface Passivation Layer”. *2006 International Electron Devices Meeting*. IEEE, 2006. DOI: [10.1109/iedm.2006.346742](https://doi.org/10.1109/iedm.2006.346742).
- [24] S. Koveshnikov κ.ά. “Metal-oxide-semiconductor capacitors on GaAs with high-κ gate oxide and amorphous silicon interface passivation layer”. *Appl. Phys. Lett.* 88.2, 022106 (2006). DOI: [10.1063/1.2164327](https://doi.org/10.1063/1.2164327).
- [25] H.-S. Kim κ.ά. “Metal gate-HfO<sub>2</sub> metal-oxide-semiconductor capacitors on n-GaAs substrate with silicon/germanium interfacial passivation layers”. *Appl. Phys. Lett.* 89.22, 222903 (2006). DOI: [10.1063/1.2396912](https://doi.org/10.1063/1.2396912).
- [26] D.C. Suh κ.ά. “Improved thermal stability of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/HfO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> high-κ gate dielectric stack on GaAs”. *Appl. Phys. Lett.* 96.14, 142112 (2010). DOI: [10.1063/1.3377915](https://doi.org/10.1063/1.3377915).
- [27] S.G. Narendra και A.P Chandrakasan. *Leakage in nanometer CMOS technologies*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [28] P.D. Aignello. “Process requirements for continued scaling of CMOS; the need and prospects for atomic-level manipulation”. *IBM Journal of Research and Development* 46.2.3 (Mar. 2002), 317–338. DOI: [10.1147/rd.462.0317](https://doi.org/10.1147/rd.462.0317).
- [29] T. Kunikiyo κ.ά. “Reverse short-channel effect due to lateral diffusion of point-defect induced by source/drain ion implantation”. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 13.4 (Apr. 1994), 507–514. DOI: [10.1109/43.275360](https://doi.org/10.1109/43.275360).
- [30] H. Iwai. “CMOS downsizing toward sub-10 nm”. *Solid-State Electronics* 48.4 (Apr. 2004), 497–503. DOI: [10.1016/j.sse.2003.09.034](https://doi.org/10.1016/j.sse.2003.09.034).
- [31] D.J. Frank κ.ά. “Device scaling limits of Si MOSFETs and their application dependencies”. *Proceedings of the IEEE* 89.3 (Mar. 2001), 259–288. DOI: [10.1109/5.915374](https://doi.org/10.1109/5.915374).
- [32] K. Uchida κ.ά. “Experimental study on carrier transport mechanism in ultrathin-body SOI n and p-MOSFETs with SOI thickness less than 5 nm”. *International Electron Devices Meeting Digest*. IEEE, 2002. DOI: [10.1109/iedm.2002.1175776](https://doi.org/10.1109/iedm.2002.1175776).
- [33] G. Tsutsui κ.ά. “Impact of SOI Thickness Fluctuation on Threshold Voltage Variation in Ultra-Thin Body SOI MOSFETs”. *IEEE Transactions On Nanotechnology* 4.3 (Mar. 2005), 369–373. DOI: [10.1109/tnano.2005.846913](https://doi.org/10.1109/tnano.2005.846913).
- [34] Z. Ren κ.ά. “Examination of hole mobility in ultra-thin body SOI MOSFETs”. *International Electron Devices Meeting Digest*. IEEE, 2002. DOI: [10.1109/iedm.2002.1175777](https://doi.org/10.1109/iedm.2002.1175777).
- [35] C. Hu κ.ά. “FinFET-a self-aligned double-gate MOSFET scalable to 20 nm”. *IEEE Trans. Electron Devices* 47.12 (2000), 2320–2325. DOI: [10.1109/16.887014](https://doi.org/10.1109/16.887014).
- [36] B.S. Doyle κ.ά. “High performance fully-depleted tri-gate CMOS transistors”. *IEEE Electron Device Lett.* 24.4 (Apr. 2003), 263–265. DOI: [10.1109/led.2003.810888](https://doi.org/10.1109/led.2003.810888).
- [37] J. Kavalieros κ.ά. “Tri-Gate Transistor Architecture with High-κ Gate Dielectrics, Metal Gates and Strain Engineering”. *2006 Symposium on VLSI Technology, 2006. Digest of Technical Papers*. IEEE, 2006. DOI: [10.1109/vlsit.2006.1705211](https://doi.org/10.1109/vlsit.2006.1705211).

- [38] Y. Cui κ.ά. “High Performance Silicon Nanowire Field Effect Transistors”. *Nano Letters* 3.2 (Φεβ. 2003), 149–152. DOI: [10.1021/nl0258751](https://doi.org/10.1021/nl0258751).
- [39] H.A. Charles. *Handbook of materials and processes for electronics*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1970.
- [40] A. R. Peaker κ.ά. “Germanium... The Semiconductor of Tomorrow?” *AIP Conference Proceedings* 866.1 (2006), 3–8. DOI: [10.1063/1.2401448](https://doi.org/10.1063/1.2401448).
- [41] P.D. Ye κ.ά. “GaAs metal-oxide-semiconductor field-effect transistor with nanometer-thin dielectric grown by atomic layer deposition”. *Appl. Phys. Lett.* 83.1 (2003), 180. DOI: [10.1063/1.1590743](https://doi.org/10.1063/1.1590743).
- [42] X. Li κ.ά. “GaAs MOSFET Using InAlP Native Oxide as Gate Dielectric”. *IEEE Electron Device Lett.* 25.12 (Δεκ. 2004), 772–774. DOI: [10.1109/led.2004.838555](https://doi.org/10.1109/led.2004.838555).
- [43] M. Passlack κ.ά. “High Mobility III-V MOSFETs For RF and Digital Applications”. *2007 IEEE International Electron Devices Meeting*. IEEE, 2007. DOI: [10.1109/iedm.2007.4419016](https://doi.org/10.1109/iedm.2007.4419016).
- [44] R.J.W.Hill κ.ά. “Enhancement-Mode GaAs MOSFETs With an  $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  Channel, a Mobility of over  $5000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , and Transconductance of over  $475 \mu\text{S } \mu\text{m}^{-1}$ ”. *IEEE Electron Device Lett.* 28.12 (Δεκ. 2007), 1080–1082. DOI: [10.1109/led.2007.910009](https://doi.org/10.1109/led.2007.910009).
- [45] N. Waldron κ.ά. “An InGaAs/InP quantum well FinFET using the replacement fin process integrated in an RMG flow on 300mm Si substrates”. *2014 Symposium on VLSI Technology (VLSI-Technology): Digest of Technical Papers*. IEEE, Ιούν. 2014. DOI: [10.1109/vlsit.2014.6894349](https://doi.org/10.1109/vlsit.2014.6894349).
- [46] I. Riihimäki κ.ά. “Vacancy-impurity complexes and diffusion of Ga and Sn in intrinsic and p-doped germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 91.9 (Αύγ. 2007), 091922. DOI: [10.1063/1.2778540](https://doi.org/10.1063/1.2778540).
- [47] S. Brotzmann και H. Bracht. “Intrinsic and extrinsic diffusion of phosphorus, arsenic, and antimony in germanium”. *J. Appl. Phys.* 103.3, 033508 (Φεβ. 2008). DOI: [10.1063/1.2837103](https://doi.org/10.1063/1.2837103).
- [48] M. Myronov κ.ά. “Temperature dependence of transport properties of high mobility holes in Ge quantum wells”. *J. Appl. Phys.* 97.8, 083701 (2005). DOI: [10.1063/1.1862315](https://doi.org/10.1063/1.1862315).
- [49] H. Shang κ.ά. “Electrical characterization of germanium p-channel MOSFETs”. *IEEE Electron Device Lett.* 24.4 (Απρ. 2003), 242–244. DOI: [10.1109/led.2003.810879](https://doi.org/10.1109/led.2003.810879).
- [50] C.O. Chui, F. Ito και K.C. Saraswat. “Scalability and Electrical Properties of Germanium Oxynitride MOS Dielectrics”. *IEEE Electron Device Lett.* 25.9 (Σεπτ. 2004), 613–615. DOI: [10.1109/led.2004.833830](https://doi.org/10.1109/led.2004.833830).
- [51] A. Nayfeh κ.ά. “Fabrication of high-quality p-MOSFET in Ge grown heteroepitaxially on Si”. *IEEE Electron Device Lett.* 26.5 (Μάι. 2005), 311–313. DOI: [10.1109/led.2005.846578](https://doi.org/10.1109/led.2005.846578).
- [52] T. Tezuka κ.ά. “A Novel Fabrication Technique of Ultrathin and Relaxed SiGe Buffer Layers with High Ge Fraction for Sub-100 nm Strained Silicon-on-Insulator MOSFETs”. *Jpn. J. Appl. Phys.* 40.Part 1, No. 4B (Απρ. 2001), 2866–2874. DOI: [10.1143/jjap.40.2866](https://doi.org/10.1143/jjap.40.2866).
- [53] S.E. Thompson κ.ά. “A 90-nm Logic Technology Featuring Strained-Silicon”. *IEEE Trans. Electron Devices* 51.11 (Νοέ. 2004), 1790–1797. DOI: [10.1109/ted.2004.836648](https://doi.org/10.1109/ted.2004.836648).
- [54] K.-W. Ang κ.ά. “Performance Enhancement in Uniaxial Strained Silicon-on-Insulator n-MOSFETs Featuring Silicon/Carbon Source/Drain Regions”. *IEEE Trans. Electron Devices* 54.11 (Νοέ. 2007), 2910–2917. DOI: [10.1109/ted.2007.906941](https://doi.org/10.1109/ted.2007.906941).
- [55] IBM Media Relations. *IBM Research Alliance Produces Industry’s First 7 nm Node Test Chips*. 9 Ιούλ. 2015. URL: <https://www-03.ibm.com/press/us/en/pressrelease/47301.wss> (επίσκεψη 15/08/2015).

- [56] W. Schockley. “Forming semiconductive devices by ionic bombardment”. Διπλ. ευρεσ. US 2,787,564 (ΗΠΑ). Απρ. 1957.
- [57] J.F. Gibbons. “Ion implantation in semiconductors — Part I: Range distribution theory and experiments”. *Proceedings of the IEEE* 56.3 (1968), 295–319. DOI: [10.1109/proc.1968.6273](https://doi.org/10.1109/proc.1968.6273).
- [58] J.F. Gibbons. “Ion implantation in semiconductors — Part II: Damage production and annealing”. *Proceedings of the IEEE* 60.9 (1972), 1062–1096. DOI: [10.1109/proc.1972.8854](https://doi.org/10.1109/proc.1972.8854).
- [59] R.W. Bower και R.G. Dill. “Insulated gate field effect transistors fabricated using the gate as source-drain mask”. *1966 International Electron Devices Meeting*. IEEE, 1966. DOI: [10.1109/iedm.1966.187724](https://doi.org/10.1109/iedm.1966.187724).
- [60] R.W. Bower. “Field-effect device with insulated gate”. Διπλ. ευρεσ. US 3,472,712 (ΗΠΑ). Οκτ. 1969.
- [61] R.W. Bower. “Insulated-gate field-effect device having source and drain regions formed in part by ion implantation and method of making same”. Διπλ. ευρεσ. US 3,615,934 (ΗΠΑ). Οκτ. 1971.
- [62] S. Wagner. “Diffusion of Boron from Shallow Ion Implants in Silicon”. *Journal of The Electrochemical Society* 119.11 (1972), 1570. DOI: [10.1149/1.2404044](https://doi.org/10.1149/1.2404044).
- [63] J.P. Biersack και J.F. Ziegler. *The stopping and range of ions in matter*. Springer, 1985. ISBN: 978-3-642-68779-2.
- [64] D.G. Ashworth, R. Oven και B. Munding. “Representation of ion implantation profiles by Pearson frequency distribution curves”. *Journal of Physics D: Applied Physics* 23.7 (Ιούλ. 1990), 870–876. DOI: [10.1088/0022-3727/23/7/018](https://doi.org/10.1088/0022-3727/23/7/018).
- [65] C. Park, K.M. Klein και A.F. Tasch. “Efficient modeling parameter extraction for dual pearson approach to simulation of implanted impurity profiles in silicon”. *Solid-State Electronics* 33.6 (Ιούν. 1990), 645–650. DOI: [10.1016/0038-1101\(90\)90176-f](https://doi.org/10.1016/0038-1101(90)90176-f).
- [66] J.F. Ziegler. *Ion Implantation Science and Technology*. 6η έκδοση. Ion Implantation Technology Co., 1996.
- [67] G.Z. Pan, K.N. Tu και S. Prussin. “Microstructural evolution of {113} rodlike defects and {111} dislocation loops in silicon-implanted silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 71.5 (1997), 659. DOI: [10.1063/1.119821](https://doi.org/10.1063/1.119821).
- [68] D.J. Eaglesham κ.ά. “Implantation and transient B diffusion in Si: The source of the interstitials”. *Appl. Phys. Lett.* 65.18 (1994), 2305. DOI: [10.1063/1.112725](https://doi.org/10.1063/1.112725).
- [69] J.L. Benton κ.ά. “Evolution from point to extended defects in ion implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 82.1 (1997), 120. DOI: [10.1063/1.365583](https://doi.org/10.1063/1.365583).
- [70] S. Coffa, S. Libertino και C. Spinella. “Transition from small interstitial clusters to extended {311} defects in ion-implanted Si”. *Appl. Phys. Lett.* 76.3 (2000), 321. DOI: [10.1063/1.125733](https://doi.org/10.1063/1.125733).
- [71] G.Z. Pan, K.N. Tu και A. Prussin. “Size-distribution and annealing behavior of end-of-range dislocation loops in silicon-implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 81.1 (1997), 78. DOI: [10.1063/1.364099](https://doi.org/10.1063/1.364099).
- [72] L.H. Zhang κ.ά. “Transient enhanced diffusion without {311} defects in low energy B<sup>+</sup>-implanted silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 67.14 (1995), 2025. DOI: [10.1063/1.114775](https://doi.org/10.1063/1.114775).
- [73] D. Lenoble και A. Grouillet. “The fabrication of advanced transistors with plasma doping”. *Surface and Coatings Technology* 156.1-3 (Ιούλ. 2002), 262–266. DOI: [10.1016/s0257-8972\(02\)00105-6](https://doi.org/10.1016/s0257-8972(02)00105-6).

- [74] R.B. Liebert κ.ά. “Plasma doping system for 200 and 300 mm wafers”. *2000 International Conference on Ion Implantation Technology Proceedings*. IEEE, 2000. DOI: [10.1109/iit.2000.924190](https://doi.org/10.1109/iit.2000.924190).
- [75] A. Agarwal και M.J. Kushner. “Time evolution of ion energy distributions for plasma doping”. *IEEE Trans. Plasma Sci.* 33.2 (Απρ. 2005), 252–253. DOI: [10.1109/tps.2005.845887](https://doi.org/10.1109/tps.2005.845887).
- [76] P.K. Chu. “Semiconductor applications of plasma immersion ion implantation”. *Plasma Phys. Control. Fusion* 45.5 (Μαρ. 2003), 555–570. DOI: [10.1088/0741-3335/45/5/304](https://doi.org/10.1088/0741-3335/45/5/304).
- [77] F. Torregrosa κ.ά. “Ultra shallow P<sup>+</sup>/N junctions using plasma immersion ion implantation and laser annealing for sub 0.1 μm CMOS devices”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 237.1-2 (Αύγ. 2005), 18–24. DOI: [10.1016/j.nimb.2005.04.108](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.04.108).
- [78] S.R. Walther κ.ά. “Formation of extremely shallow junctions for sub-90 nm devices”. *Surface and Coatings Technology* 186.1-2 (Αύγ. 2004), 68–72. DOI: [10.1016/j.surfcoat.2004.04.014](https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.04.014).
- [79] S.B. Felch κ.ά. “Plasma doping for the fabrication of ultra-shallow junctions”. *Surface and Coatings Technology* 156.1-3 (Ιούλ. 2002), 229–236. DOI: [10.1016/s0257-8972\(02\)00097-x](https://doi.org/10.1016/s0257-8972(02)00097-x).
- [80] H.A.W. El Mubarek κ.ά. “Effect of fluorine implantation dose on boron thermal diffusion in silicon”. *J. Appl. Phys.* 96.8 (2004), 4114. DOI: [10.1063/1.1790063](https://doi.org/10.1063/1.1790063).
- [81] D. Lee κ.ά. “Ultrashallow p<sup>+</sup>/n Junction Prepared by Low Energy BF<sub>3</sub> Plasma Doping and KrF Excimer Laser Annealing”. *Electrochemical and Solid-State Letters* 9.1 (2006), G19. DOI: [10.1149/1.2138448](https://doi.org/10.1149/1.2138448).
- [82] J.C. Ho κ.ά. “Controlled nanoscale doping of semiconductors via molecular monolayers”. *Nature Materials* 7.1 (Νοέ. 2007), 62–67. DOI: [10.1038/nmat2058](https://doi.org/10.1038/nmat2058).
- [83] Y.-J. Lee κ.ά. “A novel junctionless FinFET structure with sub-5nm shell doping profile by molecular monolayer doping and microwave annealing”. *2014 IEEE International Electron Devices Meeting*. Institute of Electrical & Electronics Engineers (IEEE), Δεκ. 2014. DOI: [10.1109/iedm.2014.7047158](https://doi.org/10.1109/iedm.2014.7047158).
- [84] J.C. Ho κ.ά. “Wafer-Scale, Sub-5 nm Junction Formation by Monolayer Doping and Conventional Spike Annealing”. *Nano Letters* 9.2 (Φεβ. 2009), 725–730. DOI: [10.1021/nl8032526](https://doi.org/10.1021/nl8032526).
- [85] J. O’Connell κ.ά. “Organo-arsenic Molecular Layers on Silicon for High-Density Doping”. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 7.28 (Ιούλ. 2015), 15514–15521. DOI: [10.1021/acsami.5b03768](https://doi.org/10.1021/acsami.5b03768).
- [86] W.-Y. Loh κ.ά. “300 mm wafer level sulfur monolayer doping for III-V materials”. *2015 26th Annual SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference (ASMC)*. IEEE, Μάι. 2015. DOI: [10.1109/asmc.2015.7164438](https://doi.org/10.1109/asmc.2015.7164438).
- [87] P. Kalra. “Advanced Source/Drain Technologies for Nanoscale CMOS”. Διδακτορική διατρ. Berkeley, CA, USA: University of California, Berkeley, 2008.
- [88] A. Wachter. “A radiation model of a rapid thermal processing system”. Μεταπτυχ/κή διπλ. εργασ. Simon Fraser University, Dept. of Mathematics, 1997.
- [89] T. Gebel κ.ά. “Flash lamp annealing with millisecond pulses for ultra-shallow boron profiles in silicon”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 186.1-4 (Ιαν. 2002), 287–291. DOI: [10.1016/s0168-583x\(01\)00900-4](https://doi.org/10.1016/s0168-583x(01)00900-4).

- [90] M. Birnbaum. “Semiconductor Surface Damage Produced by Ruby Lasers”. *J. Appl. Phys.* 36.11 (1965), 3688. DOI: [10.1063/1.1703071](https://doi.org/10.1063/1.1703071).
- [91] L.M. Blinov, V.S. Vavilov και G.N. Galkin. “Charge carrier concentration in semiconductors illuminated by a powerful laser pulse”. *Sov. Phys. Sol. State* 9 (1967), 854–859.
- [92] V.A. Pilipovich κ.ά. “Formation of p-n junctions in gallium arsenide by laser irradiation”. *J. Appl. Spectrosc.* 22.3 (Μαρ. 1975), 324–328. DOI: [10.1007/bf00610077](https://doi.org/10.1007/bf00610077).
- [93] G. Foti κ.ά. “Amorphous-polycrystal transition induced by laser pulse in self-ion implanted silicon”. *Applied Physics* 14.2 (Οκτ. 1977), 189–191. DOI: [10.1007/bf00883088](https://doi.org/10.1007/bf00883088).
- [94] X. Zhang, J.R. Ho και C.P. Grigoropoulos. “Ultra-shallow p+-junction formation in silicon by excimer laser doping: a heat and mass transfer perspective”. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 39.18 (Δεκ. 1996), 3835–3844. DOI: [10.1016/0017-9310\(96\)00043-9](https://doi.org/10.1016/0017-9310(96)00043-9).
- [95] E.V. Monakhov κ.ά. “Excimer laser annealing of B and BF<sub>2</sub> implanted Si”. *Materials Science and Engineering: B* 124-125 (Δεκ. 2005), 232–234. DOI: [10.1016/j.mseb.2005.08.059](https://doi.org/10.1016/j.mseb.2005.08.059).
- [96] R.B. James κ.ά. “CO<sub>2</sub> laser processing of diffusion induced lattice imperfections in silicon: Experiment and theory”. *J. Appl. Phys.* 62.7 (1987), 2981. DOI: [10.1063/1.339384](https://doi.org/10.1063/1.339384).
- [97] P. Baeri και E. Rimini. “Laser annealing of silicon”. *Materials Chemistry and Physics* 46.2-3 (Νοέ. 1996), 169–177. DOI: [10.1016/s0254-0584\(97\)80010-7](https://doi.org/10.1016/s0254-0584(97)80010-7).
- [98] S. Earles κ.ά. “Nonmelt Laser Annealing of 1 keV Boron Implanted Silicon”. *MRS Proc.* 669 (Ιαν. 2001). DOI: [10.1557/proc-669-j4.1](https://doi.org/10.1557/proc-669-j4.1).
- [99] A. Florakis κ.ά. “Non-melt laser annealing of Plasma Implanted Boron for ultra shallow junctions in Silicon”. *Materials Science and Engineering: B* 154-155 (Δεκ. 2008), 39–42. DOI: [10.1016/j.mseb.2008.09.035](https://doi.org/10.1016/j.mseb.2008.09.035).
- [100] A. Colin κ.ά. “Simulation of the sub-melt laser anneal process in 45 nm CMOS technology. Application to the thermal pattern effects”. *Materials Science and Engineering: B* 154-155 (Δεκ. 2008), 31–34. DOI: [10.1016/j.mseb.2008.09.009](https://doi.org/10.1016/j.mseb.2008.09.009).
- [101] P. Baeri κ.ά. “A melting model for pulsing-laser annealing of implanted semiconductors”. *J. Appl. Phys.* 50.2 (1979), 788. DOI: [10.1063/1.326046](https://doi.org/10.1063/1.326046).
- [102] P. Tsouroutas κ.ά. “Laser annealing for n+/p junction formation in germanium”. *Materials Science in Semiconductor Processing* 9.4-5 (Αύγ. 2006), 644–649. DOI: [10.1016/j.mssp.2006.08.013](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.08.013).
- [103] G. Hellings κ.ά. “Ultra Shallow Arsenic Junctions in Germanium Formed by Millisecond Laser Annealing”. *Electrochemical and Solid-State Letters* 14.1 (2011), H39. DOI: [10.1149/1.3512990](https://doi.org/10.1149/1.3512990).
- [104] Q. Zhang κ.ά. “Drive-Current Enhancement in Ge n-Channel MOSFET Using Laser Annealing for Source/Drain Activation”. *IEEE Electron Device Lett.* 27.9 (Σεπτ. 2006), 728–730. DOI: [10.1109/led.2006.880655](https://doi.org/10.1109/led.2006.880655).
- [105] E. Bruno κ.ά. “High-level incorporation of antimony in germanium by laser annealing”. *J. Appl. Phys.* 108.12, 124902 (2010). DOI: [10.1063/1.3520671](https://doi.org/10.1063/1.3520671).



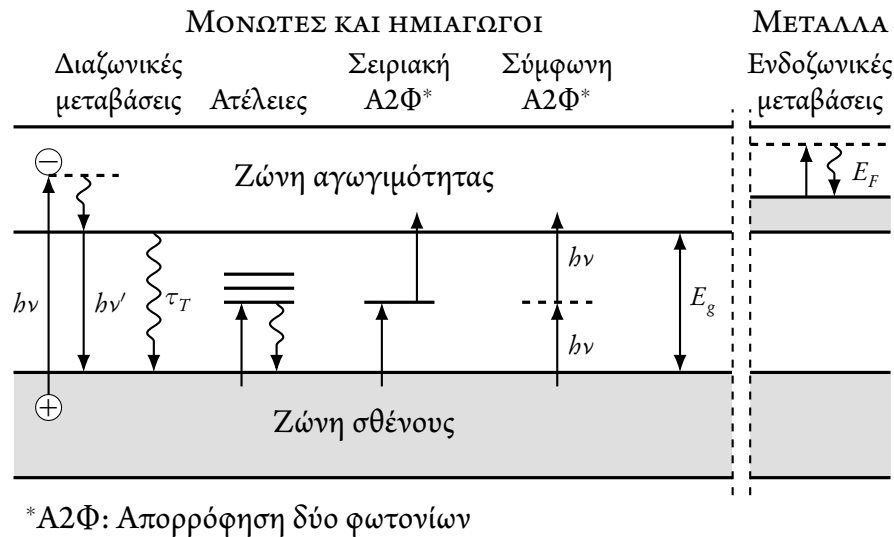
# ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ LASER ΜΕ ΤΗΝ ΎΛΗ

# 2

## § 2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι εφαρμογές των laser στην τεχνολογία μέσα στα περίπου 60 χρόνια από την πρώτη πρακτική κατασκευή τους είναι πολλαπλές. Διατάξεις laser έχουν εδραιωθεί ως βασικά εργαλεία σε πάρα πολλά πεδία της σύγχρονης τεχνολογίας τα οποία εκμεταλλεύονται το σύνολο των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών που έχει μια δέσμη laser. Η εξαιρετικά υψηλή πυκνότητα ενέργειας και η κατευθυνσιμότητα της δέσμης laser επιτρέπει τη χρήση της για εξαιρετικά εντοπισμένη θερμική κατεργασία υλικών με χωρική ανάλυση της τάξης των nm. Παράλληλα, ανάλογα με το είδος του laser που επιλέγεται μπορούμε να έχουμε διάρκειες παλμών οι οποίες κυμαίνονται από το επίπεδο των femtosecond ( $1 \times 10^{-15}$  s) μέχρι και τη συνεχή λειτουργία (CW) με ριζικά διαφορετικές επιπτώσεις στον τρόπο που η κάθε μία από αυτές τις δέσμες αλληλεπιδρά με την ύλη, θερμικά ή μη. Σημαντικό χαρακτηριστικό, επίσης, είναι η αυστηρή *μονοχρωματικότητα* της δέσμης η οποία μας δίνει την δυνατότητα να έχουμε καλό έλεγχο του βάθους της θερμικής αλληλεπίδρασης με το υλικό καθώς και τον βαθμό απορρόφησης της ακτινοβολίας από αυτό απλά επιλέγοντας μήκος κύματος. Και φυσικά υπάρχουν οφέλη μηχανικής φύσεως, για παράδειγμα δεν χρειάζεται κάποια μηχανική υποστήριξη για τη χρήση δεσμών laser ενώ η απουσία άλλων μηχανικών μερών από τη διάταξη αποτρέπει τη μόλυνση των δειγμάτων προς επεξεργασία κάτι το οποίο είναι κρίσιμο ειδικά σε κλάδους όπως η μικροηλεκτρονική.

Οι δύο βασικές κατηγορίες κατεργασιών με laser διαχωρίζονται σε *φυσικές* και *χημικές*. Στις φυσικές κατεργασίες η επίδραση του laser είναι κατά βάση θερμική και τα φαινόμενα που απορρέουν από αυτή την επίδραση είναι αποτέλεσμα παροχής θερμότητας (πχ. τήξη, αποδόμηση, διάχυση, κλπ.). Στις χημικές κατεργασίες μιλάμε πλέον για αλλαγή της χημικής σύστασης όλου ή μέρους του υλικού. Αρκετές περιπτώσεις μπορεί, φυσικά, να έχουν και τα δύο αποτελέσματα, σε κάθε περίπτωση, πάντως οι διαδικασίες μπορούν να έχουν εξαιρετικά εντοπισμένο εύρος, τόσο χωρικά όσο και χρονικά. Στο τρέχον κεφάλαιο θα κάνουμε μια μικρή επισκόπηση των βασικών στοιχείων που αφορούν την αλληλεπίδραση δεσμών laser με την ύλη, κυρίως ως προς τα θερμικά φαινόμενα, ενώ θα εστιάσουμε περισσότερο στην περίπτωση των ημιαγωγών που μας αφορούν.



**Σχήμα 2.1:** Χαρακτηριστικές ηλεκτρονικές αλληλεπιδράσεις φωτονίων με την ύλη (Bäuerle [1]). Συνεχείς γραμμές υποδεικνύουν απορρόφηση ή εκπομπή φωτονίων,  $h\nu$ , ενώ κυματιστές γραμμές υποδεικνύουν μη ακτινοβολητικές μεταβάσεις.

## § 2.2 ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ

Το φως αλληλεπιδρά με την ύλη με στοιχειώδεις διεγέρσεις οι οποίες περιλαμβάνουν ηλεκτρονικές διεγέρσεις, όπως ενδοζωνικές και διαζωνικές μεταβάσεις, εξιτόνια, πλασμόνια, κλπ., καθώς και διεγέρσεις φωνονίων, πολαριτονίων κλπ. Δέσμες laser υψηλής πυκνότητας ισχύος έχουν ως αποτέλεσμα τη δημιουργία εξαιρετικά μεγάλου αριθμού ηλεκτρονικών διεγέρσεων, είτε λόγω θερμικών φαινομένων είτε μη θερμικών. Ο αριθμός αυτής της πυκνότητας μεταβάσεων μπορεί να ξεπεράσει τις  $10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Ο συνδυασμός πολλών στοιχειωδών διεγέρσεων μπορεί να οδηγήσει παράλληλα στην εμφάνιση νέων φαινομένων, όπως για παράδειγμα η θερμική διαφυγή στα μέταλλα και τους ημιαγωγούς. Με περαιτέρω αύξηση της πυκνότητας ισχύος έχουμε πλέον την εμφάνιση μη γραμμικών οπτικών φαινομένων ενώ ακόμα μεγαλύτερη αύξηση οδηγεί στον σχηματισμό πλάσματος του υλικού.

Ανάλογα με την ενέργεια των φωτονίων που προσπίπτουν στο υλικό η απορρόφηση και η ανακατανομή της ενέργειας μπορεί να γίνει κατά κύριο λόγο με τους εξής τρόπους [1]: (α') συγκρούσεις μεταξύ φορέων· (β') διέγερση πλασμονίων· (γ') επανασύνδεση ηλεκτρονίου-οπής (φαινόμενο Auger)· (δ') δημιουργία ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής λόγω ιονισμού και (ε') εκπομπή φωτονίου (αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου με ένα φωνόνιο). Στο σχήμα 2.1 συνοψίζονται μερικές από τις βασικές ηλεκτρονικές διεγέρ-



σεις που προκαλούνται από την επίδραση της ακτινοβολίας laser με ένα στερεό υλικό. Διαζωνικές μεταβάσεις από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας μπορούν να συμβούν αν η ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου,  $h\nu$ , είναι μεγαλύτερη από το ενεργειακό διάκενο,  $E_g$ . Σε αυτή τη διαδικασία δημιουργούνται ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών. Οι διαζωνικές μεταβάσεις είναι συνήθως στο κοντινό υπέρυθρο ή ορατό φάσμα για τους ημιαγωγούς και στο υπεριώδες για τα μονωτικά υλικά. Η παρουσία ατελειών στο υλικό δημιουργεί ηλεκτρικές καταστάσεις μέσα στο ενεργειακό διάκενο κάτι το οποίο μπορεί να οδηγήσει στην εμφάνιση μεταβάσεων στη ζώνη αγωγιμότητας με ενέργειες  $h\nu < E_g$ , κυρίως σε δέσμες υψηλής ισχύος μέσω απορροφήσεων δύο φωτονίων είτε με σειριακό τρόπο είτε με σύμφωνο. Ενδοζωνικές μεταβάσεις εμφανίζονται κατά κύριο λόγο στα μέταλλα, επειδή η στάθμη Fermi,  $E_F$ , στα μέταλλα βρίσκεται μέσα στη ζώνη αγωγιμότητας.

Στην περίπτωση των μετάλλων η απορρόφηση της ακτινοβολίας γίνεται από τα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας μέσα σε ένα πάχος περίπου μέχρι 10 nm. Ο χρόνος ανάμεσα σε δύο διαδοχικές συγκρούσεις ηλεκτρονίων της ζώνης αγωγιμότητας στα μέταλλα,  $\tau_e$ , είναι της τάξης των  $10^{-14}$  με  $10^{-12}$  s. Η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων και φωνονίων,  $\tau_{ep}$ , απαιτεί περισσότερο χρόνο συνήθως από  $10^{-12}$  με  $10^{-10}$  s. Πέραν των φωνονίων δεν υπάρχει κάποια άλλη αλληλεπίδραση των διεγερμένων ηλεκτρονίων με το πλέγμα. Μιας και η απορρόφηση στα μέταλλα είναι κυρίως επιφανειακή υπόθεση οι οπτικές ιδιότητες των μετάλλων αλλάζουν δραματικά όταν αλλάζουν τα χαρακτηριστικά της επιφάνειας, τα οποία μπορεί να είναι διαφορετικά από το συμπαγές υλικό. Τέτοιες ακραίες περιπτώσεις είναι ιδιαίτερα εμφανείς σε πολύ λεπτά μεταλλικά φιλμ ή φιλμ μεταλλικών νανοσωματιδίων [2].

Στους ημιαγωγούς οι διαζωνικές μεταβάσεις απαιτούν σημαντικά περισσότερο χρόνο από  $10^{-12}$  μέχρι και  $10^{-6}$  s, ειδικά στην περίπτωση μεταβάσεων που οφείλονται σε ατέλειες. Ανάλογα με το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας η διαζωνική μετάβαση μπορεί να γίνει είτε απευθείας αν η προσφερόμενη ενέργεια είναι μεγαλύτερη από το ενεργειακό χάσμα, είτε μέσω απορρόφησης των ελεύθερων φορέων αγωγιμότητας. Στην πρώτη περίπτωση εντάσσονται περιπτώσεις ακτινοβολήσης με laser το μήκος κύματος των οποίων βρίσκεται στα όρια οπτικού και υπεριώδους ή χαμηλότερα (πχ. excimer). Στη δεύτερη περίπτωση, η οποία μας ενδιαφέρει περισσότερο σε αυτή την εργασία, ανήκουν ακτινοβολήσεις με laser κοντινού (Nd:YAG) ή βαθέος υπέρυθρου όπως το laser CO<sub>2</sub> που χρησιμοποιήθηκε σε αυτή τη διατριβή. Δεν θα αναλύσουμε την περίπτωση των άμεσων απορροφήσεων καθώς έχουν αναλυθεί σε προηγούμενη διδακτορική διατριβή [3]. Αντ' αυτού θα εστιάσουμε στο πως συνεισφέρουν οι ελεύθεροι

ιονισμένοι φορείς στη διαδικασία οπτικής απορρόφησης στα υπέρυθρα μήκη κύματος.

Στα πλαίσια, λοιπόν, αυτής της θεώρησης ο συντελεστής απορρόφησης για μια θερμοκρασία,  $T$ , μπορεί να θεωρηθεί γενικά ότι είναι [4]:

$$\alpha(T) = \alpha_0 + N_{eb}(T)\sigma(T) \quad (2.1)$$

όπου  $\alpha_0$  ο συντελεστής απορρόφησης του πλέγματος,  $N_{eb}(T)$  η πυκνότητα ζευγών ηλεκτρονίων-οπών και  $\sigma$  η ενεργός διατομή απορρόφησης από ένα τέτοιο ζεύγος. Ο συντελεστής απορρόφησης του πλέγματος είναι ένας σταθερός αριθμός για δεδομένη θερμοκρασία και για την περίπτωση του πυριτίου είναι περίπου  $2 \text{ cm}^{-1}$  [5] ενώ για την περίπτωση του γερμανίου κυμαίνεται από  $10^{-4}$  έως  $10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  ανάλογα με τη θερμοκρασία [6]. Σε κάθε περίπτωση ο συντελεστής απορρόφησης του πλέγματος συνεισφέρει σημαντικά λιγότερο από την απορρόφηση των φορέων, ειδικά στην περίπτωση έντονα νοθευμένων ημιαγωγών και στις υψηλές θερμοκρασίες που μελετάμε στην περίπτωση της ανόπτησης. Η ενεργός διατομή,  $\sigma(T)$ , μπορεί να οριστεί με βάση το μοντέλο Drude ως

$$\sigma(T) = \frac{q^2}{\epsilon_0 n c \omega^2} \left( \frac{1}{m_e^* \tau_e(T)} + \frac{1}{m_b^* \tau_b(T)} \right) \quad (2.2)$$

όπου  $q$  το στοιχειώδες φορτίο,  $\epsilon_0$  η διηλεκτρική σταθερά του κενού,  $n$  ο συντελεστής διάθλασης του υλικού,  $c$  η ταχύτητα του φωτός και  $\omega$  η κυκλική συχνότητα,  $2\pi\nu$ . Τα  $m_{e,b}^*$  αφορούν τις ενεργές μάζες ηλεκτρονίων και οπών ενώ  $\tau_{e,b}$  είναι οι χρόνοι σύγκρουσης για ηλεκτρόνια και οπές [7].

Τόσο οι χρόνοι σύγκρουσης,  $\tau_{e,b}$ , όσο και η πυκνότητα φορέων,  $N_{eb}$ , εξαρτώνται από τη θερμοκρασία. Για την πυκνότητα ζευγών ηλεκτρονίων και οπών, η γενική έκφραση δίνεται από τη σχέση

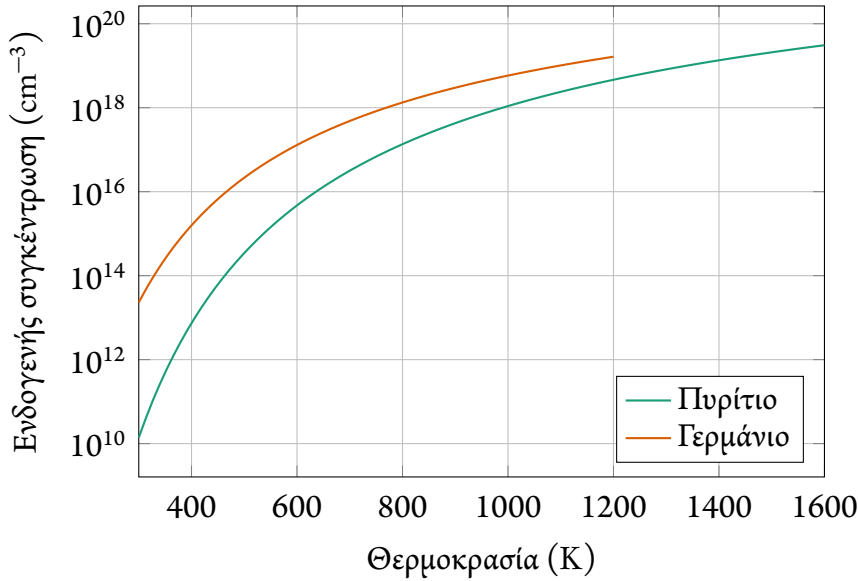
$$N_{eb}(T) = 2(m_e^* m_b^*)^{3/4} \left( \frac{kT}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (2.3)$$

Στην περίπτωση των ημιαγωγών με προσμίξεις ο όρος  $N_{eb}$  μπορεί να αναλυθεί σε δύο επιμέρους όρους που είναι η συγκέντρωση εμφυτευμένων φορέων,  $N$  και η ενδογενής πυκνότητα φορέων η οποία είναι εξαρτώμενη από τη θερμοκρασία [8]

$$N_{eb}(T) = N + n_i(T) \quad (2.4)$$

Για το πυρίτιο μια εκτίμηση της ενδογενούς πυκνότητας φορέων δίνεται από την έκφραση [8, 9]

$$n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} T^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \text{ cm}^{-3} \quad (2.5)$$



**Σχήμα 2.2:** Σύγκριση της εξάρτησης της ενδογενούς συγκέντρωσης φορέων από τη θερμοκρασία για πυρίτιο και γερμάνιο με βάση τις σχέσεις (2.5) και (2.6).

όπου  $T$  η θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin. Για την περίπτωση του γερμανίου μπορούμε επίσης από Meyer κ.ά. [9] να βρούμε την αντίστοιχη έκφραση σε:

$$n_i(T) = 1.76 \times 10^{16} T^{3/2} \exp\left(-\frac{4560}{T}\right) \text{ cm}^{-3} \quad (2.6)$$

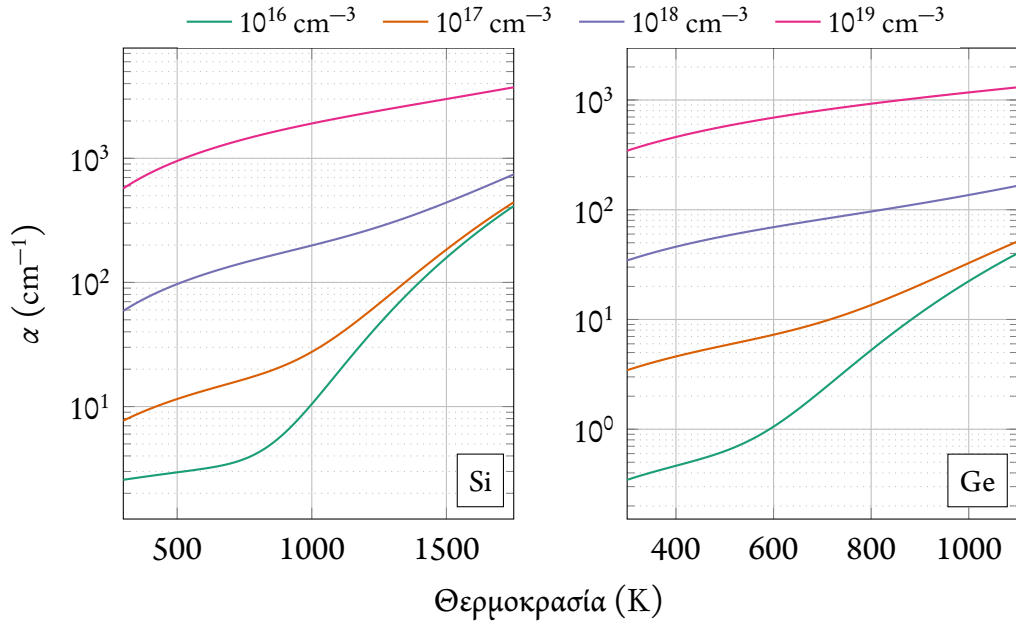
Μια γραφική αναπαράσταση της εξάρτησης της συγκέντρωσης ελεύθερων φορέων για τους δύο ημιαγωγούς μπορεί να φανεί στο γράφημα 2.2. Για θερμοκρασία δωματίου οι εξισώσεις δίνουν τις χαρακτηριστικές τιμές της ενδογενούς συγκέντρωσης, δηλαδή  $\sim 9 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$  και  $\sim 2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  για πυρίτιο και γερμάνιο αντίστοιχα.

Όσον αφορά την ενεργό διατομή απορρόφησης των ελεύθερων φορέων αυτή μπορεί να εκτιμηθεί αρχικά από την έκφραση για έναν δεδομένο κυματαριθμό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας,  $\tilde{\nu}$ , ως [5]:

$$\sigma(\tilde{\nu}, T) = C(\tilde{\nu}) T^{3/2} \quad (2.7)$$

Ο συντελεστής  $C(\tilde{\nu})$  μπορεί να βρεθεί από θεωρητικούς υπολογισμούς. Έτσι, για το μήκος κύματος των  $10.6 \mu\text{m}$  ( $\tilde{\nu} = 943.4 \text{ cm}^{-1}$ ) που αφορά το laser  $\text{CO}_2$  έχουμε για την περίπτωση του πυριτίου [8, 10]

$$\sigma_{\text{Si}}(943.4 \text{ cm}^{-1}, T) = 1.9 \times 10^{-19} T^{3/2} \text{ cm}^2 \quad (2.8)$$



**Σχήμα 2.3:** Συντελεστής απορρόφησης νοθευμένων ημιαγωγών στα 10.6  $\mu\text{m}$  σε σχέση με τη θερμοκρασία για διάφορα επίπεδα νόθευσης σύμφωνα με τις εξ. (2.10) και (2.11).

ενώ για την περίπτωση του γερμανίου [11]

$$\sigma_{\text{Ge}}(943.4\text{cm}^{-1}, T) = 1.15 \times 10^{-19} T^{3/2} \text{ cm}^2 \quad (2.9)$$

Έτσι με βάση τις σχέσεις (2.1), (2.5) και (2.8) μπορούμε να εξάγουμε μία σχέση για τον συντελεστή απορρόφησης του πυριτίου για το μήκος κύματος των 10.6  $\mu\text{m}$  σε

$$\alpha_{\text{Si}}(T) = 2 + [1.9 \times 10^{-19} T^{3/2}] \times \left[ N + 3.87 \times 10^{16} T^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \right] \quad (2.10)$$

ενώ αντίστοιχα για το γερμάνιο από τις σχέσεις (2.1), (2.6) και (2.9)

$$\alpha_{\text{Ge}}(T) = 1 \times 10^{-3} + [1.15 \times 10^{-19} T^{3/2}] \times \left[ N + 1.76 \times 10^{16} T^{3/2} \exp\left(-\frac{4560}{T}\right) \right] \quad (2.11)$$

όπου  $T$  η θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin και  $N$  η εξωγενής συγκέντρωση προσμίξεων σε  $\text{cm}^{-3}$ . Στο γράφημα 2.3 μπορούμε να δούμε μια γραφική αναπαράσταση των εξισώσεων (2.10) και (2.11) μέχρι τη θερμοκρασία τήξης του εκάστοτε ημιαγωγού. Μπορούμε να δούμε την εμφανή υπερεκθετική εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από τη θερμοκρασία καθώς και την έντονη επίδραση των εξωγενών προσμίξεων. Σε πολύ χαμηλή νόθευση η απορρόφηση του πλέγματος επικρατεί και στις δύο περιπτώσεις ενώ η απότομη άνοδος του συντελεστή απορρόφησης από τους περίπου 700 K στο

πυρίτιο και από τους περίπου 600 K στο γερμάνιο οφείλεται στην έντονη παραγωγή ζευγών ηλεκτρονίων οπών (εξισώσεις (2.5) και (2.6)). Στην περίπτωση που η εξωγενής νόθευση ξεπερνάει κατά πολύ τα ενδογενή ζεύγη ηλεκτρονίων οπών είναι αυτή που καθορίζει κατά κύριο λόγο την απορρόφηση του υλικού. Ο ρυθμός αύξησης του συντελεστή απορρόφησης σε τέτοια υψηλά επίπεδα doping είναι πιο μικρός, αν και η απόλυτη τιμή του ίδιου του συντελεστή είναι σημαντικά υψηλότερη. Αυτό παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στην απορρόφηση της ακτινοβολίας laser σε περιπτώσεις που η νόθευση είναι αρκετά έντονη και απότομη στα πρώτα λίγα nm του ημιαγωγού όπως είναι η περίπτωση των εμφυτεύσεων χαμηλής ενέργειας και πλάσματος.

Όπως είπαμε στην περίπτωση υψηλής νόθευσης, γενικά πάνω από  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , οι συγκρούσεις μεταξύ των φορέων επικρατούν από αυτές με το κρυσταλλικό πλέγμα. Οι φορείς σε αυτή την περίπτωση συμπεριφέρονται συλλογικά με την μορφή πλάσματος και η απορρόφηση της ακτινοβολίας εξωθεί τα ηλεκτρόνια ψηλά στη ζώνη αγωγιμότητας και τις οπές βαθιά στη ζώνη σθένους. Ενώ σε χαμηλές νοθεύσεις οι φορείς έρχονται σε θερμική ισορροπία με το πλέγμα ο καθένας ξεχωριστά στην περίπτωση των υψηλών νοθεύσεων έχουμε τον σχηματισμό μιας κατανομής θερμοκρασίας των φορέων πριν αυτοί φτάσουν σε θερμική εξισορρόπηση με το πλέγμα. Η ανταλλαγή ενέργειες ανάμεσα σε ηλεκτρόνια και οπές γίνεται μέσω επανασυνδέσεων καθώς και μέσω του φαινομένου Auger. Οι χαρακτηριστικοί χρόνοι αυτών των διαδικασιών είναι αρκετά μεγάλοι και αποτελούν τον κύριο μηχανισμό μέσω του οποίου η θερμοκρασία των φορέων τελικά αυξάνεται [12–14].

Το πλάσμα των φορέων συμπεριφέρεται γενικά σαν ένα ανεξάρτητο σύστημα στον κρύσταλλο το οποίο απορροφάει ενέργεια από την ακτινοβολία και ανταλλάσσει ενέργεια με το πλέγμα. Το ίδιο το πλάσμα αποκτά ενέργεια μέσω διαζωνικών μεταβάσεων καθώς και από την απορρόφηση των ελεύθερων φορέων που αναλύσαμε παραπάνω. Στην περίπτωση διαδικασιών Auger επιπλέον ενέργεια  $E_g$  προστίθεται στην ενέργεια του πλάσματος κάθε φορά που γίνεται επανασύνδεση. Από την άλλη το πλάσμα χάνει ενέργεια λόγω απώλειας της περίσσειας ενέργειας,  $E_c$ , των φορέων που το αποτελούν καθώς και από απορρόφηση φωνονίων η οποία οδηγεί σε θέρμανση του πλέγματος και αποτελεί τον κύριο μηχανισμό θέρμανσης του κρυστάλλου λόγω απορρόφησης. Η περίσσεια ενέργειας ακολουθεί την εξής έκφραση [15]:

$$N_{eb} \frac{\partial \langle E_c \rangle}{\partial t} = I \left[ \alpha_0 \left( 1 - \frac{1}{h\nu} \right) + \sigma N_{eb} \right] + \frac{E_g}{\tau_r} (N_{eb} - \bar{N}_{eb}(T)) + \nabla (\langle E_c \rangle D_a \nabla N) - \left( \langle E_c \rangle - \frac{3kT}{2} \right) \frac{N}{\tau_E} \quad (2.12)$$

Ο πρώτος όρος αφορά την ενέργεια που λαμβάνει το πλέγμα μέσω ενδοζωνικών μεταβάσεων και απορρόφηση ελεύθερων φορέων ενώ ο δεύτερος είναι η ενέργεια που αποδεσμεύεται μέσω επανασυνδέσεων τύπου Auger. Οι δύο τελευταίοι όροι αναφέρονται στην ενέργεια που χάνεται από τους φορείς και μεταφέρεται στο πλέγμα αντίστοιχα. Ο όρος  $3kT/2$  είναι η περίσσεια ενέργειας σε κατάσταση ισορροπίας και  $\tau_E$  είναι ο ενεργός χρόνος χαλάρωσης για τις συγκρούσεις πλέγματος και φορέων. Η παράμετρος  $D_a$  είναι ο αμφιπολικός συντελεστής διάχυσης και είναι χαρακτηριστικός της έλξης μεταξύ ηλεκτρονίων και οπών,  $\alpha_0$  είναι ο συντελεστής απορρόφησης για διαζωνική μετάβαση και τέλος,  $\tau_r$  είναι ο χρόνος ζωής για επανασύνδεση. Παράλληλα, η χρονική εξέλιξη των ζευγών ηλεκτρονίων οπών ακολουθεί τη σχέση [16]

$$\frac{\partial N_{eh}}{\partial t} = \alpha_0 \frac{I}{h\nu} + \nabla(D_a \nabla N_{eh}) - \frac{1}{\tau_r} [N_{eh} - \bar{N}_{eh}(T)] \quad (2.13)$$

Για την ακτινοβολία με μια δέσμη ισχύος,  $I$ , οι εξισώσεις (2.12) και (2.13) καθορίζουν τη χρονική εξέλιξη της ενέργειας του πλάσματος των φορέων.

Σημειώνουμε ότι η παραπάνω θεώρηση ισχύει με την προϋπόθεση ότι η πυκνότητα των φορέων είναι μικρή σε σχέση με την συνολική πυκνότητα καταστάσεων. Σε διαφορετική περίπτωση το πλάσμα εκφυλίζεται κάτι το οποίο περιορίζει τόσο την ανταλλαγή ενέργειας μέσω των φορέων λόγω έλλειψης μη κατειλημμένων ενεργειακών καταστάσεων όσο και τον ρυθμό επανασύνδεσης μέσω φαινομένου Auger. Επίσης, πέρα από τα θερμικά φαινόμενα το πλάσμα των φορέων μπορεί να αποθηκεύσει ενέργεια και με τη μορφή πλασματικών ταλαντώσεων. Στην περίπτωση του νοθευμένου πυριτίου με  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  το ποσοστό της ενέργειας που αντιστοιχεί σε τέτοιες πλασματικές ταλαντώσεις φτάνει και το 10% [13, 14].

Τα πλασμόνια μπορεί να θεωρηθούν ως ψευδο-σωματίδια που χάνουν ενέργεια καθώς συγκρούονται και αυτά με το πλέγμα. Η αλληλεπίδραση είναι ισχυρότερη όταν η ενέργειά τους είναι συγκρίσιμη με τις σχετικές ενέργειες των φωνονίων, συνήθως σε μικρές πυκνότητες προσμίξεων. Σε μεγαλύτερες, όπου το πλάσμα είναι πυκνότερο, τα πλασμόνια είναι ανεξάρτητα από το πλέγμα εκτός αν η ενέργεια των πλασμονίων ξεπεράσει το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού. Σε αυτή την περίπτωση τα πλασμόνια διασπώνται σε ζεύγη ηλεκτρονίων και οπών [17].

Κλείνοντας αυτή την παράγραφο, πρέπει να αναφέρουμε ότι σε εξαιρετικά βραχείες ακτινοβολήσεις το πλάσμα έχει σημαντική επίδραση και στις μηχανικές ιδιότητες του πλέγματος. Η αφαίρεση ηλεκτρονίων από τη ζώνη σθένους έχει την τάση να μειώνει τις συχνότητες των φωνονίων κάτι το οποίο οδηγεί σε έναν αυξημένο αριθμό διεγερμέ-

### 2.3. Θερμική επίδραση της ακτινοβολίας laser

νων φωνονίων σε μια δεδομένη θερμοκρασία. Η εξαιρετικά μεγάλη πυκνότητα διεγερμένων φορέων και φωνονίων μπορεί να οδηγήσει το υλικό σε μια ρευστή κατάσταση πολύ χαμηλότερα από το σημείο τήξης του υλικού. Σε χρονική κλίμακα nanosecond είναι εφικτή, για παράδειγμα, η επανακρυσταλλοποίηση πυριτίου σε θερμοκρασίες κάτω από το σημείο τήξης [18].

#### § 2.3 ΘΕΡΜΙΚΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ LASER

Παρά το γεγονός ότι οι επιδράσεις της ακτινοβολίας laser σε ένα υλικό είναι πολύπλοκες ανάλογα με τη διάρκεια και την ισχύ του παλμού που χρησιμοποιείται σε αυτή τουλάχιστον την εργασία ο βασικός ρόλος του laser είναι η θέρμανση του υλικού. Σε αυτή την περίπτωση τόσο οι χρόνοι όσο και η ισχύ του laser είναι σχετικά ήπιοι. Εφόσον αναλύσαμε στην προηγούμενη παράγραφο πως η ακτινοβολία laser απορροφάται από τους ημιαγωγούς, θα δούμε τώρα μια μακροσκοπική θεώρηση της κατανομής και διάχυσης της θερμότητας στο υλικό.

Θεωρούμε αρχικά μια δέσμη ακτίνας  $w$  ενός laser που βρίσκεται στον θεμελιώδη ρυθμό λειτουργίας  $TEM_{00}$ . Σε αυτή την περίπτωση η ακτινική κατανομή της έντασης,  $I$ , στο κυματομέτωπο θα είναι γκαουσιανή με τη μορφή

$$I(r) = I_0 \exp\left(-\frac{r^2}{w^2}\right) \quad (2.14)$$

όπου  $I_0$  η ένταση της ακτινοβολίας για  $r = 0$ . Η συνολική ισχύς,  $P$ , της ακτινοβολίας θα είναι

$$P = 2\pi \int_0^\infty r I(r) dr = \pi w^2 I_0 \quad (2.15)$$

Για ένα ομοιόμορφο υλικό μπορούμε να ορίσουμε τη *συνάρτηση εξασθένισης* (attenuation function),  $f(z)$  ως

$$f(z) = \alpha(T(z)) \left[ 1 - \exp\left(-\int_0^z \alpha(z') dz'\right) \right] \quad (2.16)$$

όπου  $\alpha(T(z))$  ο συντελεστής απορρόφησης στην τρέχουσα θερμοκρασία και βάθος υλικού. Το ολοκλήρωμα στο εκθετικό καλείται και *οπτικό πάχος* του υλικού. Στο απλό ενδεχόμενο όπου ο συντελεστής απορρόφησης δεν εξαρτάται από τη θερμοκρασία η συνάρτηση εξασθένισης μπορεί να απλοποιηθεί σε:

$$f(z) = \alpha \exp(-\alpha z) \quad (2.17)$$

ενώ όταν μιλάμε για lasers τα οποία έχουν χαρακτηριστικούς χρόνους παλμών της τάξης των ns ή μικρότερους και παράλληλα η απορρόφηση στο υλικό γίνεται κατά κύριο λόγο στην επιφάνεια (όπως στην περίπτωση των μετάλλων) η εξασθένιση μπορεί να εκφυλιστεί σε:

$$f(z) = \delta(z) \quad (2.18)$$

κάτι το οποίο σημαίνει ότι η επίδραση της ακτινοβολίας έχει εξαιρετικά επιφανειακό χαρακτήρα. Η σχέση (2.17) είναι κατάλληλη για περιπτώσεις θέρμανσης ημιαγωγών με laser βαθέος υπεριώδους (όπως τα excimer) όπου η διαδικασία είναι έντονα αδιαβατική και επιφανειακή, όχι όμως στην περίπτωση του βαθέος υπερύθρου (όπως το CO<sub>2</sub>) όπου το θερμικό μήκος διάχυσης είναι εξαιρετικά μεγαλύτερο και ο συντελεστής απορρόφησης εξαρτάται έντονα από τη θερμοκρασία, και κατ' επέκταση το βάθος. Τότε υποχρεωτικά πρέπει να χρησιμοποιηθεί η αναλυτική σχέση (2.16). Ανεξάρτητα με τη μορφή, τελικά, που έχει η συνάρτηση εξασθένισης στην εκάστοτε περίπτωση, μπορούμε να γράψουμε για την πυκνότητα ισχύος,  $J$ , που τελικά παραλαμβάνεται από το υλικό, αν  $R$  η ανακλαστικότητα του υλικού (0.30 για το πυρίτιο και 0.38 για το γερμάνιο στα 10.6  $\mu\text{m}$  [1]).

$$J(z) = I(1 - R)f(z) \quad (2.19)$$

Τέλος άλλη μία παράμετρος που μας ενδιαφέρει είναι η ροή θερμότητας. Αφού η ενέργεια απορροφηθεί ως θερμότητα δεν παύει να είναι έντονα εντοπισμένη και τείνει να διαχέεται. Η ροή θερμότητας σε αυτή την περίπτωση σε ένα σημείο  $z_0$  του υλικού θα είναι

$$\Phi(z_0) = -K(T) \left. \frac{dT}{dz} \right|_{z=z_0} \quad (2.20)$$

όπου  $K(T)$  η θερμική αγωγιμότητα του υλικού.

Ας θεωρήσουμε ότι θερμαίνουμε μια λεπτή ομοιόμορφη πλάκα υλικού η οποία εκτείνεται σε βάθος από  $z$  μέχρι  $z + \Delta z$ . Το ενεργειακό ισοζύγιο σε αυτή την πλάκα θα είναι

$$\Delta t [\Phi(z) - \Phi(z + \Delta z)] = \Delta T \rho c_p \Delta z \quad (2.21)$$

όπου  $\Delta T$  η στοιχειώδης αλλαγή στη θερμοκρασία η οποία είναι αποτέλεσμα της θερμικής ροής στα όρια του χωρίου. Για  $\Delta z \rightarrow 0$  θα έχουμε

$$\Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Delta z = \Delta T \rho c_p \Delta z \quad (2.22)$$

Μέσω της (2.20) οδηγούμαστε στη σχέση

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.23)$$



που είναι η εξίσωση θερμότητας σε μία διάσταση για ένα υλικό θερμικής αγωγιμότητας  $K$ , ειδικής θερμοχωρητικότητας  $c_p$  και πυκνότητας  $\rho$ . Οι τρεις αυτοί συντελεστές καθορίζουν μονοσήμαντα το υλικό όσον αφορά τη θερμική του συμπεριφορά και, εφόσον αυτό είναι ομοιόμορφο, είναι σταθεροί σε δεδομένη θερμοκρασία. Και οι τρεις συνδέονται μεταξύ τους μέσω της *θερμικής διαχυτότητας* η οποία ορίζεται ως

$$D(T) \equiv \frac{K(T)}{\rho c_p(T)} \quad (2.24)$$

Για την περίπτωση των υλικών που μελετάμε μπορούμε να βρούμε τις σχετικές παραμέτρους στη βιβλιογραφία. Όσον αφορά τις πυκνότητες έχουμε ότι [1]

$$\rho_{\text{Si}} = 2.33 \text{ g cm}^{-3} \quad (2.25)$$

$$\rho_{\text{Ge}} = 5.32 \text{ g cm}^{-3} \quad (2.26)$$

Για τις θερμικές αγωγιμότητες μπορούμε να βρούμε για το πυρίτιο [19, 20]

$$K_{\text{Si}}(T) = 0.235 + 4.45 \exp\left(-\frac{T}{247}\right) \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (2.27)$$

ενώ για το γερμάνιο έχουμε [21, 22]

$$K_{\text{Ge}}(T) = 0.144 + 1.34 \exp\left(-\frac{T}{323}\right) \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (2.28)$$

Τέλος έχουμε για τη θερμοχωρητικότητα του πυριτίου [20] και του γερμανίου [23, 24]

$$c_{p-\text{Si}} = 0.81 + 1.3 \times 10^{-4}T - 1.26 \times 10^4 T^{-2} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (2.29)$$

$$c_{p-\text{Ge}} = 0.36 - 11T^{-1} - 107T^{-2} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (2.30)$$

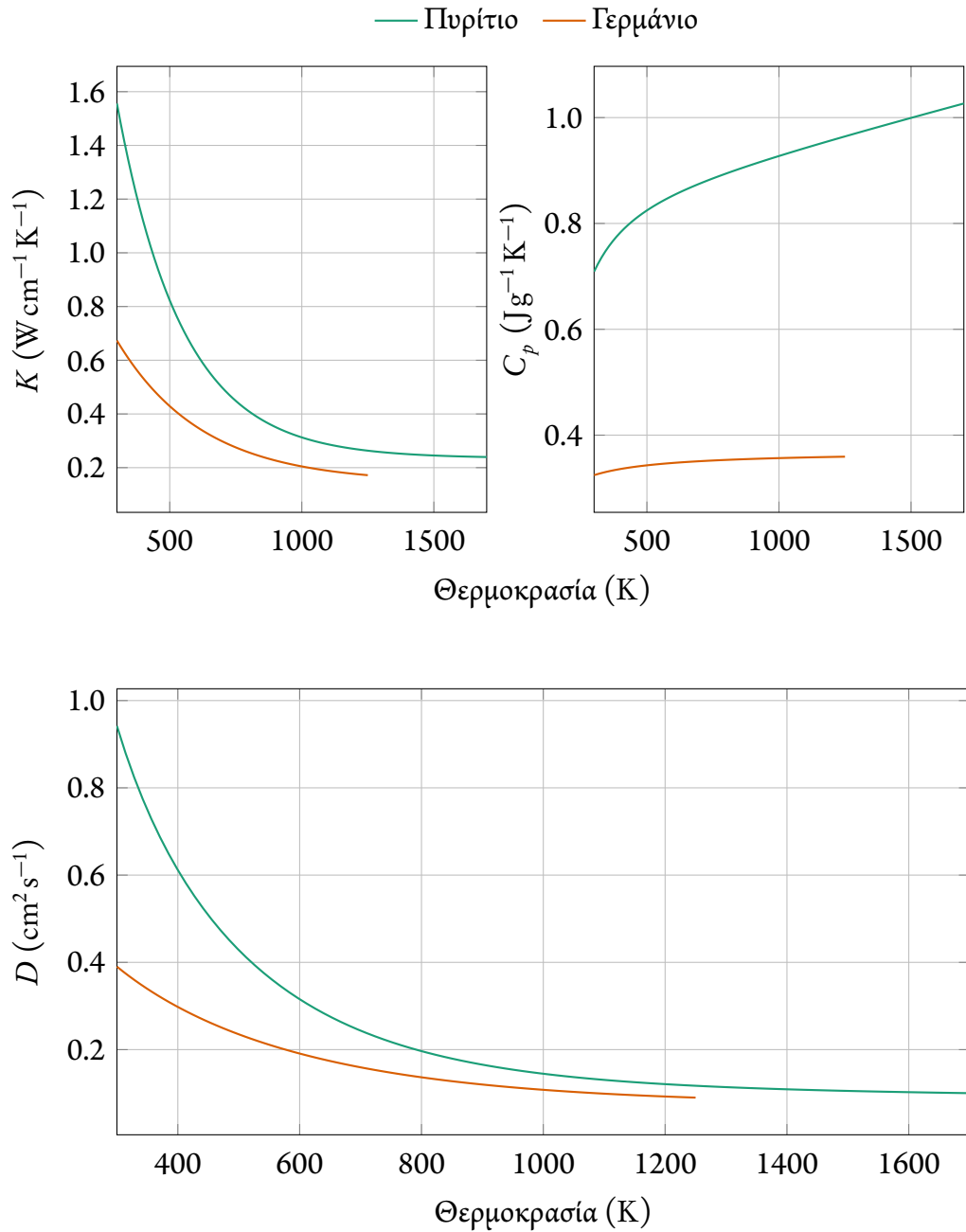
Μια γραφική απεικόνιση της θερμικής αγωγιμότητας, της θερμοχωρητικότητας και του συντελεστή θερμικής διάχυσης για πυρίτιο και γερμάνιο μπορεί να φανεί στο γράφημα 2.4 της σελίδας 52.

Με βάση όλα τα παραπάνω μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση θερμικής διάχυσης στην γνώριμη μορφή της για μία διάσταση

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.31)$$

Στην περίπτωση που έχουμε παραγωγή θερμότητας λόγω απορρόφησης πρέπει να προστεθεί και ο όρος πηγής (source term)  $Q(z, t)$ .

$$Q(z, t) = (1 - R)I_0(z, t)f(z)q(t) \quad (2.32)$$



**Σχήμα 2.4:** Η εξάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά), της θερμοχωρητικότητας (δεξιά) και του συντελεστή θερμικής διάχυσης (κάτω) για πυρίτιο και γερμάνιο μέχρι τη θερμοκρασία τήξης.

όπου  $q(t)$  μια συνάρτηση που εκφράζει τη χρονική διαμόρφωση της δέσμης. Τελικά μπορούμε να γράψουμε

$$\rho c_p(T) \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} - K(T) \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} = (1 - R) I_0(z, t) f(z) q(t) \quad (2.33)$$

Στη γενική περίπτωση όπου όλοι οι συντελεστές εξαρτώνται από τη θερμοκρασία η εξίσωση (2.33) μπορεί να επιλυθεί μόνο αριθμητικά. Για παραμέτρους ανεξάρτητες της θερμοκρασίας με τη μέθοδο των συναρτήσεων Green μπορούν να βρεθούν λύσεις της εξίσωσης για την περίπτωση ενός ημι-άπειρου στερεού, όπου το πάχος,  $L$ , είναι πολύ μικρότερο των άλλων δύο διαστάσεων. Αρχικά για την περίπτωση μιας πηγής γκαουσιανού σχήματος με FWHM ίσο με  $w$  σε βάθος  $z$  από την επιφάνεια του υλικού και σε απόσταση  $r$  από το κέντρο της γκαουσιανής δέσμης

$$T(r, z, t) = \frac{P_a}{2K\pi^{3/2}} \int_0^\delta \exp\left(-\frac{r^2}{\beta^2 + w^2}\right) Y_1 \frac{d\beta}{\beta^2 + w^2} \quad (2.34)$$

ενώ αν η δέσμη είναι εκτατή χωρικά ως προς το βάθος του υλικού, δηλαδή το θερμικό μήκος διάχυσης  $\delta = \sqrt{D\tau_l}$ , όπου  $\tau_l$  ο χρόνος ακτινοβόλησης είναι συγκρίσιμο με το πάχος του υλικού

$$T(r, z, t) = \frac{\alpha P_a}{4\pi K} \int_0^\delta \exp\left(-\frac{r^2}{\beta^2 + w^2} + \frac{\alpha^2 \beta^2}{4}\right) Y_2 \frac{\beta d\beta}{\beta^2 + w^2} \quad (2.35)$$

Οι όροι που χρησιμοποιούνται στις εξισώσεις (2.34) και (2.35) είναι οι εξής

$$\begin{aligned} P_a(t) &= (1 - R) \iint I(x', y', t) dx' dy' \\ \beta &= 2\sqrt{D|t - t'|} \\ Y_1 &= 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{2nL - z}{\beta}\right)^2 \\ Y_2 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[\alpha(2nL - z)] \\ &\quad \times \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+1)L - z}{\beta} + \frac{\alpha\beta}{2}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{2nL - z}{\beta}\right) + \frac{\alpha\beta}{2} \right] \end{aligned}$$

Ο πλήρης φορμαλισμός γύρω από τις εξισώσεις (2.34) και (2.35) μπορεί να βρεθεί στις εκτεταμένες δημοσιεύσεις του M. Lax [25, 26] καθώς και στην σχετική βιβλιογραφία [1, 4]. Ωστόσο στην περίπτωση που μελετάμε οι οπτικοί και θερμικοί συντελεστές εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και δεν θα αναλωθούμε περισσότερο στην επίλυση της

εξίσωσης θερμικής διάχυσης. Θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο, ωστόσο, πως θα αξιοποιήσουμε τις παρατηρήσεις που κάναμε για τις θερμικές και οπτικές ιδιότητες πυριτίου και γερμανίου ούτως ώστε να μοντελοποιήσουμε τη θέρμανση από laser στο πλαίσιο της γενικότερης προσομοίωσης της ανόπτησης με διαδικασίες TCAD.

Όλη η παραπάνω διατύπωση ισχύει εφόσον το υλικό βρίσκεται κάτω από το κατώφλι τήξης δηλαδή τους 1687 K για το πυρίτιο και 1211 K για το γερμάνιο. Σε διαφορετική περίπτωση στην μοντελοποίηση της διάχυσης της θερμότητας πρέπει να ληφθεί υπόψιν και η *ενθαλπία μετασχηματισμού φάσης*, που είναι ουσιαστικά η διαφορά της ενθαλπίας,  $H_{s \rightarrow l}$ , που προκύπτει λόγω της μετάβασης από την υγρή,  $H_l$ , στη στερεή φάση,  $H_s$ .

$$H_{s \rightarrow l} = H_l - H_s \quad (2.36)$$

Όταν το ισοζύγιο της ενθαλπίας είναι θετικό βρισκόμαστε στη διαδικασία της τήξης, διαφορετικά έχουμε επαναστερεοποίηση του υλικού. Σε κάθε περίπτωση η λανθάνουσα θερμότητα,  $L$ , της διαδικασίας πρέπει να είναι θετική

$$H_{s \rightarrow l} = -H_{l \rightarrow s} = L > 0 \quad (2.37)$$

Για την εξίσωση θερμότητας απουσία εξωτερικής πηγής θερμότητας στο σημείο,  $z = s$ , της διεπιφάνειας στερεού και τήγματος μπορεί να γραφεί για στερεοποίηση (με το θετικό πρόσημο) και τήξη (με το αρνητικό) [27]

$$-K_l \left. \frac{\partial T_l}{\partial z} \right|_{z=s} + K_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial z} \right|_{z=s} = \pm \rho_s H_{s \rightarrow l} \frac{ds}{dt} \quad (2.38)$$

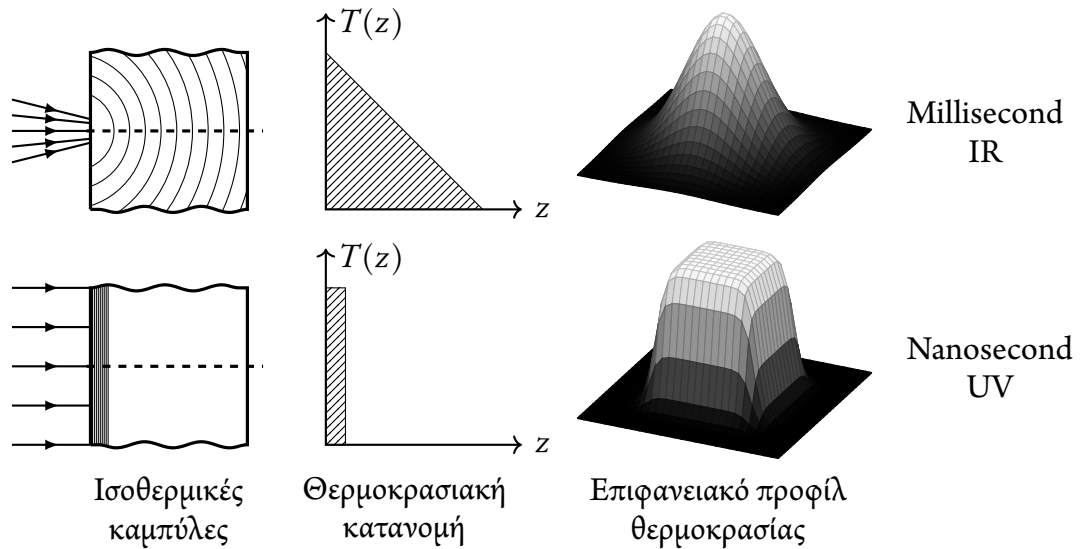
Είναι εμφανές ότι η αναλυτική επίλυση του προβλήματος της διάχυσης σε ένα υλικό που είναι μερικώς τηγμένο ανάγεται στην εύρεση του ρυθμού με τον οποίον η διεπιφάνεια υγρού/στερεού,  $s$ , μετακινείται ( $ds/dt$ ). Από κει και πέρα η συμπεριφορά των δύο φάσεων τόσο όσο προς τις οπτικές τους ιδιότητες όσο και ως προς τις θερμικές είναι σημαντικά διαφορετική ενώ παράλληλα μένουν πεπλεγμένα. Το σύστημα υγρού/στερεού απορροφά την ακτινοβολία σαν ένα στερεό υλικό με ένα λεπτό υμένιο υγρού υλικού που είναι το τήγμα. Επομένως τίθενται και θέματα συμβολής ανάμεσα στα δύο στρώματα όσον αφορά την οπτική απορρόφηση. Αντίστοιχη είναι η κατάσταση και για την περίπτωση της θερμικής διάχυσης. Στη βιβλιογραφία υπάρχει εκτεταμένη μελέτη της συγκεκριμένης διαδικασίας ειδικά στην περίπτωση ανόπτησης ημιαγωγών υπό καθεστώς τήξης [28–31], ωστόσο εμείς δεν θα επεκταθούμε περισσότερο καθώς στην παρούσα διατριβή θα εστιάσουμε σε περιπτώσεις όπου δεν ξεπερνάμε το κατώφλι τήξης.

## § 2.4 ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΣΤΑ ΑΚΡΑ ΤΟΥ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΦΑΣΜΑΤΟΣ

Κλείνοντας αυτό το κεφάλαιο θα κάνουμε μια σύνοψη του τρόπου με τον οποίο αλληλεπιδρά με την ύλη ένα laser στα άκρα του υπερύθρου όπως το CO<sub>2</sub> που χρησιμοποιήθηκε και θα το αντιπαραβάλουμε με ένα laser στα όρια του υπεριώδους [3].

Στην περίπτωση του βαθέος υπεριώδους, όπως για παράδειγμα στην περιοχή λειτουργιών των laser KrF (248 nm, 5.0 eV), ArF (193 nm, 6.4 eV) ή XeCl (308 nm, 4.0 eV), τα οποία χρησιμοποιούνται εκτεταμένα στη θερμική κατεργασία ημιαγωγών, η ενέργεια των φωτονίων είναι αρκετά μεγάλη ώστε να καλύψει το ενεργειακό φάσμα του ημιαγωγού. Σαν αποτέλεσμα η απορρόφηση γίνεται απευθείας μέσω διαζωνικών μεταβάσεων και δημιουργίας ζευγών ηλεκτρονίων οπών. Επίσης τόσο το πυρίτιο όσο και το γερμάνιο έχουν εξαιρετικά μεγάλους συντελεστές απορρόφησης στο υπεριώδες. Ενδεικτικά στα 250 nm οι συντελεστές απορρόφησης είναι  $1.67 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  και  $1.43 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  για πυρίτιο και γερμάνιο αντίστοιχα [1]. Ως αποτέλεσμα η απορρόφηση της ακτινοβολίας μετατρέπεται εξαιρετικά γρήγορα σε θερμότητα στα πρώτα λίγα nm του υλικού. Λόγω της μεγάλης απορρόφησης η διάρκεια των παλμών είναι της τάξης των 10 με 100 ns. Σε αυτό το χρονικό διάστημα το μήκος θερμικής διάχυσης είναι μικρότερο από 1 μm, οπότε και η κατανομή της θερμοκρασίας θα φθίνει εκθετικά από την επιφάνεια. Λόγω της μικρής θερμικής διάχυσης το πρόβλημα της κατανομής της θερμοκρασίας ανάγεται στην ανακατανομή της θερμοκρασίας που απέκτησε η επιφάνεια κατά την ακτινοβολή στο υπόλοιπο υλικό. Ως εκ τούτου η αντιμετώπιση είναι πρακτικά μονοδιάστατη και η διαδικασία απλουστεύεται.

Στην περίπτωση της υπέρυθρης ακτινοβολήσης, τα μόλις 117 meV ενέργειας της δέσμης των 10.6 μm δεν είναι αρκετά για να προκαλέσουν άμεσες διαζωνικές μεταβάσεις και όλη η απορρόφηση γίνεται μέσω των ελεύθερων φορέων με τη διαδικασία που περιγράφηκε στην παράγραφο 2.2. Η σύγκρουση των φορέων με το πλέγμα είναι αυτό που οδηγεί ουσιαστικά στη θέρμανση του υλικού. Η μεγαλύτερη δυσκολία στην περιγραφή της απορρόφησης και θερμικής διάχυσης σε αυτή την περίπτωση έγκειται κατά κύριο λόγο στην εκτεταμένη θερμική επίδραση που έχει τελικά η δέσμη. Σε αντίθεση με μια δέσμη διάρκειας ns στην περίπτωση του υπερύθρου η μικρή απορρόφηση απαιτεί μεγαλύτερης διάρκειας παλμούς της τάξης των  $10^{-3}$  με  $10^{-2}$  s. Κατ' επέκταση το μήκος θερμικής διάχυσης μπορεί να φτάσει στην περίπτωση του πυριτίου ακόμα και τα 800 μm πρακτικά σε όλο το βάθος ενός τυπικού wafer διαμέτρου 4 ιντσών. Επομένως η απλή προσέγγιση ότι η θερμοκρασία κατανέμεται σύμφωνα με την εξίσωση θερμικής διάχυσης από την επιφάνεια στον όγκο του υλικού παύει να ισχύει. Οποιαδήποτε



**Σχήμα 2.5:** Σύγκριση δύο διαφορετικών καθεστώτων ακτινοβολίας ως προς τις θερμοκρασιακές κατανομές. Τα γραφήματα της δεύτερης στήλης υποδεικνύουν την κατανομή της θερμοκρασίας κατά μήκος της εστιγμένης γραμμής.

προσπάθεια μοντελοποίησης της διαδικασίας πρέπει να λάβει υπόψιν τόσο την εκτατή μορφή της θερμοκρασιακής κατανομής όσο και την έντονη εξάρτηση της απορρόφησης από τη θερμοκρασία. Στο σχήμα 2.5 μπορούμε να δούμε μια σύνοψη των θερμικών αλληλεπιδράσεων στα δύο διαφορετικά καθεστώτα ακτινοβολίας που περιγράψαμε.

## § 2.5 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] D.W. Bäuerle. *Laser processing and chemistry*. 4η έκδοση. Springer Science & Business Media, 2013. ISBN: 978-3-642-17612-8.
- [2] C.F. Bohren και D.R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley-Blackwell, Απρ. 1998. ISBN: 978-0-47-129340-8.
- [3] Α. Φλωράκης. “Ανόπτηση πυριτίου με χρήση laser για τον σχηματισμό ρηχών επαφών”. Διδακτορική διατριβή. Αθήνα, Ελλάδα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούν. 2011. URL: <http://dspace.lib.ntua.gr/handle/123456789/4599>.
- [4] M.V. Allmen και A. Blatter. *Laser-beam interactions with materials*. Springer-Verlag New York Inc., New York, NY, 1987. ISBN: 978-3-642-57813-7.
- [5] R.A. Smith. *Semiconductors*. 2η έκδοση. Cambridge University Press, 1978. ISBN: 978-0-521-29314-3.
- [6] S.J. Fray κ.ά. “Lattice bands in germanium”. *Proc. Phys. Soc.* 85.1 (Ιαν. 1965), 153–158. DOI: [10.1088/0370-1328/85/1/321](https://doi.org/10.1088/0370-1328/85/1/321).

- [7] H.Y. Fan. "Effects of Free Carriers on the Optical Properties". Στο: *Optical Properties of III-V Compounds*. Επιμέλεια υπό R.K. Willardson και A.C. Beer. Τόμ. 3. Semiconductors and Semimetals. Academic Press, New York, 1967. Κεφ. 9.
- [8] M. Blomberg κ.ά. "Substrate heating effects in CO<sub>2</sub> laser annealing of ion-implanted silicon". *J. Appl. Phys.* 54.5 (Μάι. 1983), 2327–2328. DOI: [10.1063/1.332343](https://doi.org/10.1063/1.332343).
- [9] J. R. Meyer, M. R. Kruer και F. J. Bartoli. "Optical heating in semiconductors: Laser damage in Ge, Si, InSb, and GaAs". *J. Appl. Phys.* 51.10 (1980), 5513. DOI: [10.1063/1.327469](https://doi.org/10.1063/1.327469).
- [10] W. Spitzer και H.Y. Fan. "Infrared Absorption in n-type Silicon". *Phys. Rev.* 108.2 (Οκτ. 1957), 268–271. DOI: [10.1103/physrev.108.268](https://doi.org/10.1103/physrev.108.268).
- [11] H.Y. Fan, W. Spitzer και R.J. Collins. "Infrared Absorption in n-type Germanium". *Phys. Rev.* 101.2 (Ιαν. 1956), 566–572. DOI: [10.1103/physrev.101.566](https://doi.org/10.1103/physrev.101.566).
- [12] R.G. Ulbrich. "Low density photoexcitation phenomena in semiconductors: Aspects of theory and experiment". *Solid-State Electronics* 21.1 (Ιαν. 1978), 51–59. DOI: [10.1016/0038-1101\(78\)90114-4](https://doi.org/10.1016/0038-1101(78)90114-4).
- [13] E.J. Yoffa. "Role of carrier diffusion in lattice heating during pulsed laser annealing". *Appl. Phys. Lett.* 36.1 (1980), 37. DOI: [10.1063/1.91306](https://doi.org/10.1063/1.91306).
- [14] E.J. Yoffa. "Dynamics of dense laser-induced plasmas". *Phys. Rev. B* 21.6 (Μαρ. 1980), 2415–2425. DOI: [10.1103/physrevb.21.2415](https://doi.org/10.1103/physrevb.21.2415).
- [15] A. Lietoila. "Computer modeling of the temperature rise and carrier concentration induced in silicon by nanosecond laser pulses". *J. Appl. Phys.* 53.4 (1982), 3207. DOI: [10.1063/1.331020](https://doi.org/10.1063/1.331020).
- [16] W.B. Gauster. "Laser-Induced Infrared Absorption in Silicon". *J. Appl. Phys.* 41.9 (1970), 3850. DOI: [10.1063/1.1659517](https://doi.org/10.1063/1.1659517).
- [17] Mark Rasolt και H. Kurz. "Lifetime of an Electron-Hole Plasma of Silicon in the Picosecond Range". *Phys. Rev. Lett.* 54.7 (Φεβ. 1985), 722–724. DOI: [10.1103/physrevlett.54.722](https://doi.org/10.1103/physrevlett.54.722).
- [18] J.A. van Vechten, R. Tsu και F.W. Saris. "Nonthermal pulsed laser annealing of Si; plasma annealing". *Physics Letters A* 74.6 (Δεκ. 1979), 422–426. DOI: [10.1016/0375-9601\(79\)90242-1](https://doi.org/10.1016/0375-9601(79)90242-1).
- [19] S. de Unamuno και E. Fogarassy. "A thermal description of the melting of c- and a-silicon under pulsed excimer lasers". *Applied Surface Science* 36.1-4 (Ιαν. 1989), 1–11. DOI: [10.1016/0169-4332\(89\)90894-5](https://doi.org/10.1016/0169-4332(89)90894-5).
- [20] V. Gonda, J. Slabbekoorn και L.K. Nanver. "Silicon Laser Annealing by a Two-Pulse Laser System with Variable Pulse Offsets". *15th International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors*. IEEE, Οκτ. 2007. DOI: [10.1109/rtp.2007.4383851](https://doi.org/10.1109/rtp.2007.4383851).
- [21] C.J. Glassbrenner και G.A. Slack. "Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3 K to the Melting Point". *Phys. Rev.* 134.4A (Μάι. 1964), A1058–A1069. DOI: [10.1103/physrev.134.a1058](https://doi.org/10.1103/physrev.134.a1058).
- [22] Y.S. Touloukian και E.H. Buyco. Στο: *Specific heat: nonmetallic solids*. Επιμέλεια υπό Y.S. Touloukian. Τόμ. 5. Thermophysical Properties of Matter. IFI/Plenum, New York, 1975.
- [23] P. Sommelet και R.L. Orr. "High-Temperature Thermal Properties of Germanium." *Journal of Chemical & Engineering Data* 11.1 (Ιαν. 1966), 64–65. DOI: [10.1021/je60028a018](https://doi.org/10.1021/je60028a018).
- [24] A.S. Okhotin, A.S. Pushkarskii και V.V. Gorbachev. *Thermophysical Properties of Semiconductors*. "Atom" Publishing House, Moscow, 1972.
- [25] M. Lax. "Temperature rise induced by a laser beam". *J. Appl. Phys.* 48.9 (1977), 3919. DOI: [10.1063/1.324265](https://doi.org/10.1063/1.324265).

- [26] M. Lax. “Temperature rise induced by a laser beam II. The nonlinear case”. *Appl. Phys. Lett.* 33.8 (1978), 786. DOI: [10.1063/1.90505](https://doi.org/10.1063/1.90505).
- [27] J. Taler και P. Duda. *Solving Direct and Inverse Heat Conduction Problems*. Springer Science & Business Media, 2006. ISBN: 978-3-540-33470-5.
- [28] W. Szyszko. “Melting and diffusion under nanosecond laser pulse”. *Applied Surface Science* 90.3 (Noέ. 1995), 325–331. DOI: [10.1016/0169-4332\(95\)00076-3](https://doi.org/10.1016/0169-4332(95)00076-3).
- [29] S. Whelan κ.ά. “Dopant redistribution and electrical activation in silicon following ultra-low energy boron implantation and excimer laser annealing”. *Phys. Rev. B* 67.7 (Φεβ. 2003). DOI: [10.1103/physrevb.67.075201](https://doi.org/10.1103/physrevb.67.075201).
- [30] A. La Magna. “A phase-field approach to the simulation of the excimer laser annealing process in Si”. *J. Appl. Phys.* 95.9 (2004), 4806. DOI: [10.1063/1.1690861](https://doi.org/10.1063/1.1690861).
- [31] R. Milazzo κ.ά. “N-type doping of Ge by As implantation and excimer laser annealing”. *J. Appl. Phys.* 115.5, 053501 (Φεβ. 2014). DOI: [10.1063/1.4863779](https://doi.org/10.1063/1.4863779).



Ένα από τα κύρια χαρακτηριστικά των ημιαγωγών που τους έχουν καταστήσει ως τα βασικά υλικά της μικροηλεκτρονικής είναι η δυνατότητα του ελέγχου της ηλεκτρικής συμπεριφοράς τους μέσω της εισαγωγής εξωγενών προσμίξεων είτε τύπου p της ομάδας III του περιοδικού πίνακα (βόριο, γάλλιο, ίνδιο) είτε τύπου n της ομάδας V (φώσφορος, αρσενικό, αντιμόνιο). Ανάλογα με τη πυκνότητα των εισαγόμενων προσμίξεων μπορεί να ελεγχθεί η πυκνότητα των ενδοχασματικών καταστάσεων και κατ' επέκταση η αντίσταση της επαφής που δημιουργείται. Ωστόσο οι εισαγόμενες προσμίξεις κατανέμονται τυχαία στον κρύσταλλο και σε πολλές περιπτώσεις καταλήγουν σε θέσεις οι οποίες δεν μπορούν να συνεισφέρουν ηλεκτρικά στον κρύσταλλο. Έτσι, επιβάλλεται η παροχή ενέργειας στον κρύσταλλο ώστε οι προσμίξεις να μετακινηθούν σε θέσεις που μπορούν να συνεισφέρουν ηλεκτρικά. Παρ' όλα αυτά η θέρμανση του κρυστάλλου οδηγεί αναπόφευκτα και σε κίνηση των προσμίξεων στο βάθος του ημιαγωγού μια διαδικασία την οποία αποκαλούμε *διάχυση προσμίξεων* όπου οι προσμίξεις ανακατανέμονται και κινούνται προς μια κατάσταση ισορροπίας.

Η διάχυση ανέκαθεν ήταν ο βασικός μηχανισμός με τον οποίον σχηματίζονταν επαφές στους ημιαγωγούς είτε σε ένα βήμα νόθευσης και διάχυσης είτε σε δύο διακριτά βήματα εμφύτευσης και διάχυσης. Οι συνήθεις μηχανισμοί συνοψίζονται σε (α') διάχυση από χημική πηγή σε μορφή ατμών· (β') διάχυση από νοθευμένο στρώμα οξειδίου· (γ') διάχυση από ιοντικά εμφυτευμένες προσμίξεις. Από αυτούς ο τρίτος τρόπος είναι ο πλέον συνηθισμένος για τον σχηματισμό τόσο του καναλιού των τρανζίστορ όσο και τη δημιουργία των βαθιά εμφυτευμένων περιοχών του απαγωγού και της πηγής σε ένα τρανζίστορ τύπου MOSFET. Σε συνδυασμό με τεχνικές ταχείας ανόπτησης μπορεί να επιτευχθεί εξαιρετικά καλός έλεγχος της κατανομής των εμφυτευμένων προσμίξεων.

Προφανώς, στις μέρες μας, η μοντελοποίηση της διαδικασίας είναι κρίσιμης σημασίας στην κατασκευαστική διαδικασία ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, ειδικά μάλιστα όταν στην περίπτωση δημιουργίας ρηχών επαφών απόκλιση μερικών νανομέτρων μπορεί να αποδειχθεί καταστροφική για την κατασκευαστική διαδικασία. Ήδη από τη δεκαετία του 1970 υπήρξαν προσπάθειες για την πρόβλεψη της κινητικής των προσμίξεων αρχικά σε μακροσκοπικό επίπεδο. Σήμερα έχουν αναπτυχθεί εξαιρετικά εξειδικευμένα υπολογιστικά πακέτα για τη μελέτη και μοντελοποίηση αυτής της διαδικασίας τα οποία αποτελούν ίσως τα πιο χρήσιμα εργαλεία στον σχεδιασμό κάθε επόμενου τεχνολογικού κόμβου. Ένα τέτοιο industry standard εργαλείο είναι το TCAD Sentaurus™ Process

της εταιρείας Synopsys® με το οποίο έγιναν και οι προσομοιώσεις της παρούσας εργασίας και στο οποίο θα αναφερθούμε εκτεταμένα στη συνέχεια.

### § 3.1 ΜΑΚΡΟΣΚΟΠΙΚΗ ΘΕΩΡΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Η πρώτη προσπάθεια μοντελοποίησης της διαδικασίας της διάχυσης ήταν σε μακροσκοπικό επίπεδο, δηλαδή αγνοώντας τις επιμέρους ατομιστικές διαδικασίες. Στη μακροσκοπική θεώρηση λαμβάνεται υπόψιν η γενικότερη συλλογική κίνηση του προφίλ κατανομής προσμίξεων επιλύοντας την εξίσωση διάχυσης παρά η κίνηση κάθε ατόμου ξεχωριστά όπως θα γινόταν σε μικροσκοπικό επίπεδο. Ο φορμαλισμός των σχετικών νόμων διάχυσης σωματιδίων ανήκει στον A.E. Fick. Παρά το γεγονός ότι διατυπώθηκε το 1855 ακόμα και σήμερα είναι αρκετά επαρκής για να προβλέψει την μετακίνηση προφίλ προσμίξεων χαμηλής νόθευσης σε απλές διαδικασίες. Η κύρια ποσότητα που καθορίζει τη διάχυση κατά Fick είναι η ροή σωματιδίων,  $F$ , για την οποία σε μία διάσταση ο πρώτος νόμος του Fick θεωρεί ότι ισχύει [1]

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.1)$$

όπου  $D$  ο συντελεστής διάχυσης ( $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ) και  $\partial C / \partial x$  η βαθμίδα συγκέντρωσης. Σύμφωνα με το νόμο του Fick η πηγή της ανακατανομής των προσμίξεων είναι η ανομοιομορφία στην τρέχουσα συγκέντρωσή τους. Η ροή, δηλαδή, των σωματιδίων κατά βάθος στον ημιαγωγό είναι ανάλογη της πηγής της ροής. Σε ένα πλέγμα με δομή αδάμαντα όπως στους ημιαγωγούς ο συντελεστής διάχυσης είναι ανεξάρτητος της κατεύθυνσης κατά την οποία κινούνται οι προσμίξεις στο πλέγμα. Ο συντελεστής διάχυσης είναι μια ποσότητα που εξαρτάται από την θερμοκρασία και ακολουθεί μια εξίσωση τύπου Arrhenius

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (3.2)$$

όπου  $D_0$  ο συντελεστής διάχυσης για  $T \rightarrow \infty$  και  $E_a$  η ενέργεια ενεργοποίησης της πρόσμιξης υπό μελέτη στον ημιαγωγό. Η παρουσία του αρνητικού πρόσημου στο εκθετικό υποδηλώνει ότι η πρόσμιξη διαχέεται προς την κατεύθυνση που η συγκέντρωση είναι μικρότερη κάτι το οποίο φαίνεται, άλλωστε, και στον πρώτο νόμο του Fick. Για την περίπτωση του πυριτίου τυπικές τιμές του συντελεστή  $D_0$  είναι 3.5 με 4.5 eV.

Στην εξίσωση (3.1) δεν υπεισέρχεται ο χρόνος καθώς αφορά τη ροή σωματιδίων σε μία δεδομένη χρονική στιγμή της διαδικασίας. Μια πιο πρακτική μορφή της παραπάνω έκφρασης που περιλαμβάνει και τον χρόνο είναι ο δεύτερος νόμος του Fick ή εξίσωση

### 3.1. Μακροσκοπική θεώρηση της διάχυσης

συνέχειας όπως είναι πιο γνωστός

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{\Delta F}{\Delta x} = \frac{F_i - F_o}{\Delta x} \quad (3.3)$$

όπου  $F_i$  και  $F_o$  η ροή σωματιδίων που εισέρχεται και εξέρχεται σε και από έναν όγκο  $\Delta x$  του υλικού. Για την περίπτωση που  $\Delta x \rightarrow 0$  και  $\Delta t \rightarrow 0$  έχουμε τον δεύτερο νόμο της διάχυσης του Fick

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3.4)$$

ή σε τρεις διαστάσεις

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot F = \nabla(D\nabla C) \quad (3.5)$$

Η σχέση (3.5) μας λέει, ουσιαστικά ότι η βαθμίδα της ροής σωματιδίων σε έναν δεδομένο όγκο ισούται με τον ρυθμό με τον οποίον η συγκέντρωση των προσμίξεων σε αυτό τον όγκο εξαντλείται. Η ροή του υλικού προς τα μέσα είναι κατ' επέκταση ανάλογη κατά  $D$  της βαθμίδας της συγκέντρωσης. Βέβαια ο συντελεστής διάχυσης εξαρτάται από τη θερμοκρασία και όταν η κατανομή της θερμοκρασίας είναι ανομοιόμορφη στο υλικό, όπως στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με laser, θα έχουμε και ανομοιομορφία του συντελεστή διάχυσης και κατά βάθος.

#### 3.1.1 Η επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου των προσμίξεων

Ο νόμος του Fick προσεγγίζει πολύ καλά μακροσκοπικά τη διάχυση στην περίπτωση που η εξωγενής συγκέντρωση προσμίξεων είναι μικρότερη της ενδογενούς. Διαφορετικά η διάχυση επηρεάζεται έντονα από ηλεκτρικά πεδία που δημιουργούνται από τα άτομα της πρόσμιξης. Πηγή του ηλεκτρικού πεδίου είναι τα ίδια τα διαχεόμενα σωματίδια, των οποίων οι φορείς έχουν μεγαλύτερη ευκινησία σε σχέση με τα άτομα της πρόσμιξης. Σε αυτή την περίπτωση πρέπει να λάβουμε υπόψιν άλλη μία ροή,  $F = Cv$ , όπου  $v$  η ταχύτητα των σωματιδίων της πρόσμιξης οπότε και οι δύο νόμοι του Fick τροποποιούνται σε [2]

$$F_{\text{ολ}} = -D \frac{\partial C}{\partial x} + Cv \quad (3.6)$$

και

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial (vC)}{\partial x} \quad (3.7)$$

Για την ταχύτητα των φορέων μπορούμε να γράψουμε

$$v = \mu \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (3.8)$$

όπου  $\mu$  η ευκινησία των φορέων και  $\psi$  το ενδογενές δυναμικό που αναπτύσσεται, αν  $n_i$  η ενδογενής συγκέντρωση φορέων

$$\psi = -\frac{kT}{q} \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad (3.9)$$

Παράλληλα για την ευκινησία έχουμε από τη σχέση Nerst-Einstein

$$\mu = \frac{qD}{kT} \quad (3.10)$$

Στην περίπτωση πλήρους ιονισμού των, έστω, αποδεκτών θα ισχύει για την συγκέντρωσή τους,  $C_a$ , ότι  $C_a + p = n$ . Σε συνδυασμό με τη σχέση Einstein,  $pn = n_i^2$  καταλήγουμε στη σχέση

$$\frac{n}{n_i} = \frac{C_a}{2n_i} + \left[ \left( \frac{C_a}{2n_i} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (3.11)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις (3.9) και (3.11) στην (3.7) μπορούμε να εξάγουμε το νόμο της διάχυσης παρουσία ηλεκτρικού πεδίου προερχόμενου από τις προσμίξεις

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_e \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3.12)$$

ορίζοντας τον ενεργό συντελεστή διάχυσης,  $D_e$

$$D_e \equiv \eta D \text{ όπου } \eta = 1 + \frac{C}{\sqrt{C^2 + 4n_i^2}} \quad (3.13)$$

Με την εισαγωγή του φαινομενολογικού παράγοντα  $D_e$  μπορούμε να επαναφέρουμε το νόμο του Fick στη γνώριμη μορφή του. Ο παράγοντας  $\eta$  καλείται *παράγοντας ηλεκτρικού πεδίου* και υποδηλώνει ακριβώς την επίδραση που έχει το ηλεκτρικό πεδίο στη διάχυση αυξάνοντας τον συντελεστή με τον οποίο τελικά οι προσμίξεις διαχέονται. Οι τιμές του κυμαίνονται από 1, οπότε μιλάμε ουσιαστικά για ενδογενή διάχυση, έως 2 όταν κινούμαστε σε πολύ υψηλά επίπεδα νόθευσης.

### 3.1.2 Η επίδραση της πυκνότητας προσμίξεων

Πολλά χαρακτηριστικά προφίλ προσμίξεων τόσο σε πυρίτιο όσο και σε γερμάνιο έχουν μια χαρακτηριστική μορφή παραλληλόγραμμου κάτι το οποίο υποδεικνύει ότι η διάχυση είναι πιο γρήγορη στις περιοχές που η πρόσμιξη είναι πιο έντονη, κάτι το οποίο

### 3.2. Ατομιστική προσέγγιση της διάχυσης

έρχεται σε αντίθεση με το νόμο του Fick στον οποίο η διάχυση εξαρτάται μόνο από τη βαθμίδα της συγκέντρωσης και όχι από την ίδια την τιμή. Μια περαιτέρω διόρθωση στον συντελεστή διάχυσης μπορεί να γίνει για αυτή την περίπτωση θεωρώντας μια εξάρτηση του συντελεστή από τον όρο  $(n/n_i)$  [3]

$$D_{ef} = D_o + D^- \left( \frac{n}{n_i} \right) + D^{2-} \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \quad \text{για προσμίξεις τύπου n} \quad (3.14)$$

$$D_{ef} = D_o + D^+ \left( \frac{p}{n_i} \right) + D^{2+} \left( \frac{p}{n_i} \right)^2 \quad \text{για προσμίξεις τύπου p} \quad (3.15)$$

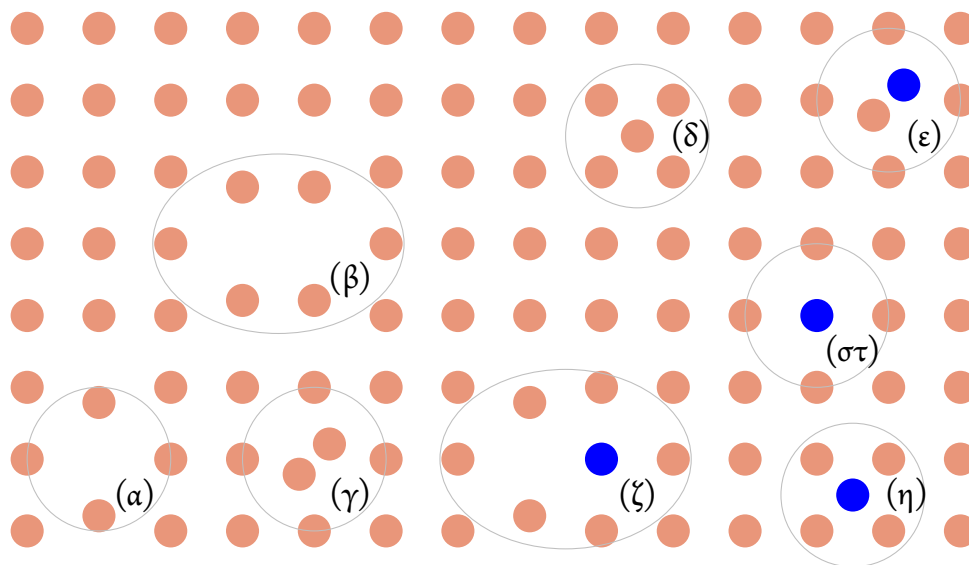
$$(3.16)$$

όπου  $D_o$ ,  $D^\pm$ ,  $D^{2\pm}$  επιμέρους συντελεστές διάχυσης που αφορούν τις αλληλεπιδράσεις με ουδέτερες, μονά και διπλά φορτισμένες ατέλειες σε ατομικό επίπεδο. Κάθε ένας από τους συντελεστές ακολουθεί μια εξάρτηση τύπου Arrhenius, όπως η εξίσωση (3.2). Βλέπουμε, λοιπόν, ότι σταδιακά πρέπει να αρχίσουμε να λαμβάνουμε υπόψιν φαινόμενα τα οποία συμβαίνουν σε ατομιστικό επίπεδο ούτως ώστε να προσεγγίσουμε καλύτερα τη κίνηση των προσμίξεων, ακόμα και μακροσκοπικά.

### § 3.2 ΑΤΟΜΙΣΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Το τέλειο κρυσταλλικό πλέγμα των ημιαγωγών διαταράσσεται καθώς η θερμοκρασία αποκλίνει από το απόλυτο μηδέν από την εισαγωγή πλεγματικών ατελειών οι οποίες διαταράσσουν την κανονικότητα της κρυσταλλικής δομής. Οι ατέλειες στις οποίες συμμετέχουν μόνο άτομα του ίδιο του κρυστάλλου καλούνται ενδογενείς (intrinsic) ενώ ατέλειες που προέρχονται από την εισαγωγή κάποιου στοιχείου ξένου ως προς τον κρύσταλλο, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση των εμφυτεύσεων, καλούνται εξωγενείς (extrinsic). Όσον αφορά την κατανομή των ατελειών αυτές μπορεί να επηρεάζουν μόνο τα γειτονικά άτομα του πλέγματος, οπότε μιλάμε για σημειακές ατέλειες (point defects) ή μπορεί να ομαδοποιούνται σε μεγαλύτερα σύμπλοκα και να σχηματίζουν εκτεταμένες ατέλειες (extended defects), αν και πολλές φορές ο διαχωρισμός ανάμεσα στους δύο είναι ασαφής.

Σε ένα δεύτερο επίπεδο ατέλειες μπορεί να σχηματιστούν κατά μήκος μιας γραμμής (line defects) και οι οποίες διαχωρίζονται σε δύο κατηγορίες ανάλογα με την κατεύθυνση στην οποία εμφανίζονται, κατά μήκος των πλεγματικών επιπέδων (edge dislocation) ή κατά μήκος ενός κύριου κρυσταλλογραφικού άξονα οπότε υπάρχει και μια περιστροφή των ατόμων γύρω από αυτό τον άξονα (screw dislocation). Και οι δύο



**Σχήμα 3.1:** Τυπικές πλεγματικές ατέλειες (α') πλεγματικό κενό (vacancy): (β') διπλό πλεγματικό κενό (divacancy): (γ') ενδοπλεγματοειδές άτομο (interstitialcy): (δ') ενδοπλεγματική ατέλεια (self-interstitial): (ε') ζεύγος (pair) πρόσμιξης και ενδοπλεγματικής ατέλειας: (στ') πρόσμιξη σε πλεγματική θέση (substitutional impurity): (ζ') ζεύγος πρόσμιξης πλεγματικού κενού και (η') πρόσμιξη σε ενδοπλεγματική θέση (interstitial impurity) [4]

μορφές μπορούν να εμφανιστούν είτε σε κλειστούς βρόγχους είτε κοντά στην επιφάνεια. Επίσης, μια τυπική κατηγορία εκτεταμένων ατελειών είναι τα σφάλματα στοίβαξης (stacking faults) τα οποία προκαλούνται από τη λανθασμένη ευθυγράμμιση δύο ή περισσότερων συνεχόμενων πλεγματικών επιπέδων. Όταν προκαλούνται από έλλειψη επιπέδων καλούνται ενδογενή ενώ σε διαφορετική περίπτωση εξωγενή. Μεγάλες συγκεντρώσεις τέτοιων ατελειών καλούνται *ατέλειες όγκου* (volume defects) οι οποίες ουσιαστικά αποτελούν μια ξεχωριστή φάση στον κρύσταλλο.

Μια σχηματική αναπαράσταση των βασικότερων σημειακών ατελειών μπορεί να φανεί στο σχήμα 3.1. Η πρώτη μορφή ενδογενών είναι τα *πλεγματικά κενά* (vacancies) που είναι ουσιαστικά η έλλειψη ενός ατόμου του κατά τα άλλα συμμετρικού κρυστάλλου. Για ενεργειακούς λόγους, ωστόσο, η ύπαρξη ενός πλεγματικού κενού έχει ως αποτέλεσμα την χαλάρωση των ατόμων που το περιβάλλουν. Τα πλεγματικά κενά μπορεί να είναι μεμονωμένα, ή σε ζεύγη ή ακόμα και σε σύμπλοκα (clusters) πλεγματικών κενών. Η έτερη μορφή ενδογενών ατελειών είναι η ύπαρξη επιπλέον ατόμων στο πλέγμα. Η πιο συνηθισμένη έκφραση αυτού του τύπου ατελειών είναι η *ενδοπλεγματική ατέλεια* (self-interstitial), όπου ένα άτομο του υλικού καταλαμβάνει μια ενδοπλεγματική θέση (τετραεδρική ή εξαεδρική). Την ενδοπλεγματική θέση μπορεί να την μοιράζονται δύο

### 3.2. Ατομιστική προσέγγιση της διάχυσης

άτομα ενδοπλεγματοειδή ατέλεια (interstitialcy ή split interstitial). Μαζί με τα εκτεταμένα πλεγματικά κενά είναι η βασική αιτία φαινομένων τύπου TED που αναφέρθηκαν στο πρώτο κεφάλαιο.

Όσον αφορά τις προσμίξεις, η πιο συνηθισμένη θέση η οποία καταλαμβάνουν είναι οι ενδοπλεγματικές (interstitial impurity) ενώ σχηματίζουν και σύμπλοκα τόσο με άτομα του κρυστάλλου δημιουργώντας ζεύγη προσμίξεων και ενδοπλεγματικών ατόμων (impurity self-interstitial pair) όσο και με τα ενδοπλεγματικά κενά (impurity vacancy pair). Φυσικά είναι δυνατόν να αντικαταστήσουν ένα άτομο του κρυστάλλου (substitutional impurity). Ο ρόλος των προσμίξεων αντικατάστασης είναι συνήθως περιορισμένος καθώς δεν συμμετέχουν στη διαδικασία της διάχυσης παραμένοντας ακίνητα λόγω ευνοϊκής ενεργειακής κατάστασης.

#### 3.2.1 Δημιουργία σημειακών ατελειών

Υπάρχουν δύο μηχανισμοί με τους οποίους σχηματίζονται οι ατέλειες στους ημιαγωγούς: ο μηχανισμός Frenkel και ο μηχανισμός Schottky [5]. Η πρώτη περίπτωση αφορά τον σχηματισμό ατελειών στον όγκο του κρυστάλλου όπου πλεγματικά κενά και ενδοπλεγματικά άτομα παράγονται σε ζεύγη, στην ουσία, δηλαδή, κάθε άτομο του υλικού που μετακινείται αφήνοντας πίσω του ένα πλεγματικό κενό στο τέλος της κίνησής του μετατρέπεται σε ενδοπλεγματικό άτομο. Η δεύτερη περίπτωση αφορά τον σχηματισμό ατελειών κοντά στην επιφάνεια. Ένα άτομο που μετακινείται από τη σωστή του θέση στον κρύσταλλο μπορεί να καταλάβει μια θέση στην επιφάνεια του κρυστάλλου αφήνοντας στην ουσία ένα κενό χωρίς τη δημιουργία ενδοπλεγματικού ατόμου. Η παραγωγή, δηλαδή, των ατελειών γίνεται ανεξάρτητα και όχι σε ζεύγη όπως στην περίπτωση του μηχανισμού Frenkel.

Για την περίπτωση του μηχανισμού Schottky σε μια δεδομένη θερμοκρασία η συγκέντρωση των σημειακών ατελειών βρίσκεται σε μια κατάσταση ισορροπίας [6]

$$C_X^* = \theta C_L \exp\left(\frac{\Delta S_X^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_X^f}{kT}\right) \quad (3.17)$$

όπου το X ισούται είτε με V είτε με I για πλεγματικά κενά και ενδοπλεγματικά άτομα αντίστοιχα. Το  $\theta$  είναι οι εσωτερικοί βαθμοί ελευθερίας σε μία πλεγματική θέση,  $C_L$  το σύνολο των διαθέσιμων πλεγματικών θέσεων και  $\Delta S_X^f$ ,  $\Delta H_X^f$  η εντροπία και ενθαλπία σχηματισμού της ατέλειας αντίστοιχα. Για τα πλεγματικά κενά οι τιμές της ενθαλπίας σχηματισμού κυμαίνονται από 2.5 ως 6 eV για το πυρίτιο και από 1.9 ως 3.5 eV για

την περίπτωση του γερμανίου [7-9]. Στην περίπτωση του μηχανισμού Frenkel η κατάσταση είναι διαφορετική με τις δύο συγκεντρώσεις να είναι ίσες αφού είπαμε ότι και οι δύο ατέλειες εμφανίζονται κατά ζεύγη. Έτσι έχουμε:

$$C_V^* = C_I^* = \theta C_L \exp\left(\frac{\Delta S_V^f + \Delta S_I^f}{2k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_V^f + \Delta H_I^f}{2kT}\right) \quad (3.18)$$

Στην περίπτωση ενός άπειρα μεγάλου κρυστάλλου η διαδικασία Frenkel επικρατεί, ενώ στην περίπτωση πεπερασμένου μεγέθους υπερτερεί η Schottky. Και στις δύο, ωστόσο, το γινόμενο των δύο συγκεντρώσεων είναι σταθερό

$$C_V^* C_I^* = \theta^2 C_L^2 \exp\left(\frac{\Delta S_V^f + \Delta S_I^f}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_V^f + \Delta H_I^f}{kT}\right) \quad (3.19)$$

Αυτό που δεν λαμβάνουν υπόψιν οι παραπάνω εξισώσεις είναι το φορτίο των ατελειών. Στην πραγματικότητα οι ατέλειες εκτός από ουδέτερες μπορεί να είναι μονά ή διπλά φορτισμένες, τόσο αρνητικά όσο και θετικά [10]. Οι συγκεντρώσεις ισορροπίας των φορτισμένων ενδογενών ατελειών θα εξαρτώνται από τη θέση της στάθμης Fermi,  $E_F$ , η οποία θα επηρεάζεται κατ' επέκταση από τη συγκέντρωση των προσμίξεων. Συνεπώς αν  $C_{X^0}^*$  οι συγκεντρώσεις των ουδέτερων σημειακών ατελειών θα ισχύει

$$C_{X^-}^* = C_{X^0}^* \exp\left(-\frac{E_{X^-} - E_F}{kT}\right) \quad (3.20\alpha')$$

$$C_{X^{2-}}^* = C_{X^0}^* \exp\left(-\frac{E_{X^{2-}} + E_{X^{2-}} - 2E_F}{kT}\right) \quad (3.20\beta')$$

$$C_{X^+}^* = C_{X^0}^* \exp\left(-\frac{E_F - E_{X^+}}{kT}\right) \quad (3.20\gamma')$$

$$C_{X^{2+}}^* = C_{X^0}^* \exp\left(-\frac{2E_F - E_{X^+} - E_{X^{2+}}}{kT}\right) \quad (3.20\delta')$$

Η επίδραση της στάθμης Fermi γίνεται αισθητή σε μεγάλες συγκεντρώσεις οπότε και η συγκέντρωση των σημειακών ατελειών συνδέεται με την ενδογενή πυκνότητα ατελειών,  $[C_X^*]_i$ , του ημιαγωγού μέσω των σχέσεων

$$\frac{C_{X^-}^*}{[C_{X^-}^*]_i} = \frac{n}{n_i} \quad \frac{C_{X^{2-}}^*}{[C_{X^{2-}}^*]_i} = \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \quad (3.21\alpha')$$

$$\frac{C_{X^+}^*}{[C_{X^+}^*]_i} = \frac{p}{n_i} \quad \frac{C_{X^{2+}}^*}{[C_{X^{2+}}^*]_i} = \left(\frac{p}{n_i}\right)^2 \quad (3.21\beta')$$



### 3.2. Ατομιστική προσέγγιση της διάχυσης

Οι εξισώσεις (3.20) και (3.21) ισχύουν με την προϋπόθεση ότι οι σημειακές ατέλειες βρίσκονται μακριά από τα άτομα των προσμίξεων οπότε και μπορούν να θεωρηθούν ασυσχέτιστες. Σε κάθε περίπτωση η συνολική συγκέντρωση φορέων οι οποίες προσδένονται γύρω από πλεγματικά κενά ή ενδοπλεγματικά άτομα είναι μικρή σε σχέση με τη συνολική ποσότητα των φορέων στον κρύσταλλο κάτι το οποίο δεν έχει τελικά επίδραση στη στάθμη Fermi του κρυστάλλου.

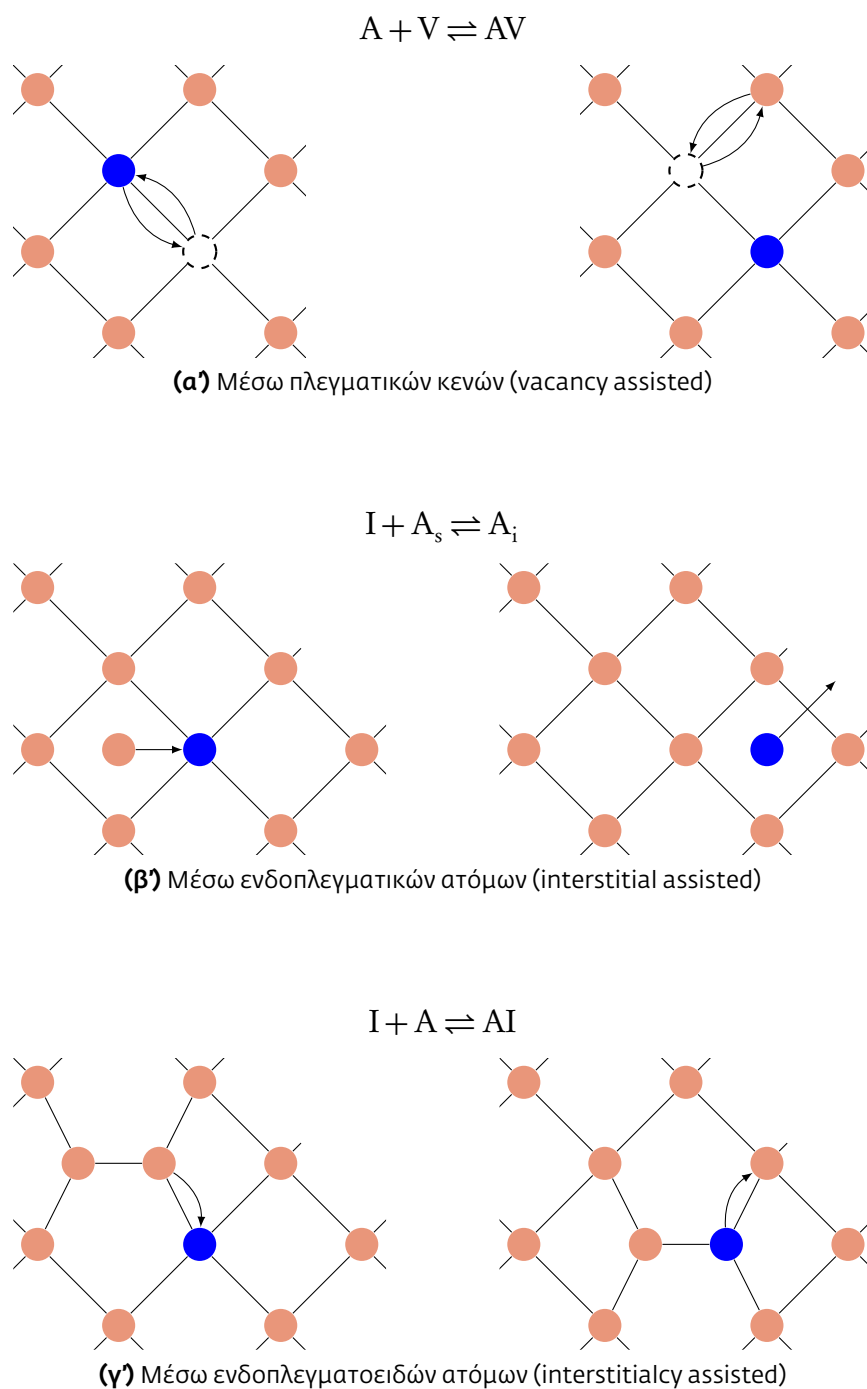
#### 3.2.2 Μηχανισμοί διάχυσης προσμίξεων

Ο καθοριστικός παράγοντας που καθοδηγεί τη διάχυση των προσμίξεων στους ημιαγωγούς είναι η αλληλεπίδρασή τους με τις πλεγματικές ατέλειες [11]. Μπορούμε να δούμε στο σχήμα 3.2 μια σύνοψη των τριών βασικών μηχανισμών διάχυσης προσμίξεων μέσω σημειακών ατελειών.

Στην πρώτη περίπτωση (σχήμα 3.2α') το άτομο της πρόσμιξης αλληλεπιδρά με τα πλεγματικά κενά (vacancy assisted diffusion). Το άτομο της πρόσμιξης ανταλλάσσει θέση με ένα γειτονικό πλεγματικό κενό. Εάν η ενέργεια σύνδεσης ανάμεσα στην πρόσμιξη και το πλεγματικό κενό είναι αρκετά μεγάλη μπορούν να συνεχίσουν να διαχέονται με τον ίδιο τρόπο ως ζεύγος. Το πλεγματικό κενό ανταλλάσσει θέση με ένα πλησιέστερο άτομο του κρυστάλλου (το οποίο είναι ο τρίτος πλησιέστερος γείτονας από την αρχική θέση της πρόσμιξης) οπότε και θα καταλήξει τελικά σε θέση δίπλα από την πρόσμιξη αλλά κινούμενο από άλλη κατεύθυνση. Επαναλαμβανόμενη αυτή η διαδικασία οδηγεί τη διάχυση του ζεύγους πρόσμιξης και πλεγματικού κενού στον ημιαγωγό.

Στη δεύτερη περίπτωση (σχήμα 3.2β') η αλληλεπίδραση γίνεται με τα ενδοπλεγματικά άτομα. Εδώ μια πρόσμιξη η οποία έχει βρεθεί σε θέση αντικατάστασης εξωθείται από τη θέση της από ένα ενδοπλεγματικό άτομο και κατόπιν μπορεί να κινηθεί στα κανάλια του κρυσταλλικού πλέγματος μέχρι τελικά να αλληλεπιδράσει με κάποια άλλη ατέλεια και να ανταλλάξουν θέσεις. Αυτός ο μηχανισμός διάχυσης αποκαλείται και "kick-out" diffusion.

Στην τελευταία περίπτωση (σχήμα 3.2γ') η διάχυση γίνεται μέσω ενδοπλεγματοειδών ατόμων. Όταν ένα ενδοπλεγματοειδές άτομο πλησιάσει αρκετά κοντά σε ένα άτομο πρόσμιξης που βρίσκεται σε θέση αντικατάστασης τότε ανταλλάσσουν θέσεις οπότε και η πρόσμιξη τοποθετείται σε ενδοπλεγματοειδή θέση. Από κει και πέρα πρόσμιξη και ατέλεια μπορούν να κινηθούν μαζί από την πλεγματική θέση την οποία μοιράζονται. Πρακτικά δεν υπάρχει ξεκάθαρος διαχωρισμός ανάμεσα σε αυτό τον μηχανισμό διάχυσης και τον προηγούμενο, οπότε και οι δύο αντιμετωπίζονται από τη βιβλιογραφία ως ένας



**Σχήμα 3.2:** Μηχανισμοί διάχυσης προσμίξεων μέσω σημειακών ατελειών. Δεν υπάρχει ουσιαστική διάκριση ανάμεσα στον δεύτερο και τον τρίτο οι οποίοι αντιμετωπίζονται ως ένας μηχανισμός από τη βιβλιογραφία.

### 3.2. Ατομιστική προσέγγιση της διάχυσης

μηχανισμός διάχυσης μέσω ενδοπλεγματικών ατόμων (intertitial assisted diffusion).

Αν Α ένα άτομο της πρόσμιξης τότε αυτό δύναται να αλληλεπιδράσει με τις πλεγματικές ατέλειες Χ (όπου Χ=I για ενδοπλεγματικά άτομα και Χ=V για τα πλεγματικά κενά) σύμφωνα με την απλή αντίδραση της μορφής



Δηλαδή στιγμιαία μια ενδοπλεγματική ατέλεια ή πλεγματικό κενό καταναλώνεται ούτως ώστε να δημιουργηθεί ένα κινούμενο στοιχείο. Από κει και πέρα σε κάθε χρονική στιγμή υπάρχει ένα ποσοστό ατόμων πρόσμιξης που αλληλεπιδρά με ενδοπλεγματικά άτομα, ένα άλλο ποσοστό με πλεγματικά κενά και ένα ποσοστό που παραμένει αδρανές. Με βάση αυτή τη θεώρηση μπορούμε να εισάγουμε έναν ενεργό συντελεστή διάχυσης,  $D_e$ , της όλης διαδικασίας της μορφής

$$D_e = D_{AI} \left( \frac{C_{AI}}{C_A} \right) + D_{AV} \left( \frac{C_{AV}}{C_A} \right) \quad (3.23)$$

όπου  $C_{AI}$ ,  $C_{AV}$  και  $C_A$  οι επιμέρους συγκεντρώσεις συμπλόκων προσμίξεων-ενδοπλεγματικών ατόμων, προσμίξεων-πλεγματικών κενών και προσμίξεων αντίστοιχα. Παράλληλα  $D_{AI}$  και  $D_{AV}$  είναι οι επιμέρους συντελεστές διάχυσης των συμπλόκων των προσμίξεων με ενδοπλεγματικά άτομα και πλεγματικά κενά αντίστοιχα.

### 3.2.3 Διάχυση σε καθεστώς ισορροπίας

Στην απλή περίπτωση όπου οι προσμίξεις είναι λιγότερες από το ενδογενές επίπεδο προσμίξεων (ενδογενείς συνθήκες διάχυσης) μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η ροή της διάχυσης μιας πρόσμιξης μπορεί να γραφεί ως

$$F_A = - \left( D_{AV} \frac{\partial C_{AV}}{\partial x} + D_{AI} \frac{\partial C_{AI}}{\partial x} \right) \quad (3.24)$$

τα συμπλέγματα AX κατά τη διάρκεια της διάχυσης διαλύονται και δημιουργούνται. Η συγκέντρωση των επιμέρους συγκεντρώσεων ως προς τη συγκέντρωση των συμπλόκων θα ακολουθεί μια σταθερά αναλογίας σε μια δεδομένη θερμοκρασία, δηλαδή

$$\frac{C_A C_X}{C_{AX}} = K(T) \Rightarrow \frac{\partial C_{AX}}{\partial x} = \frac{C_{AX}}{C_A} \frac{\partial C_A}{\partial x} + \frac{C_{AX}}{C_X} \frac{\partial C_X}{\partial x}$$

οπότε για τη ροή των προσμίξεων μπορούμε να γράψουμε

$$F_A = - \frac{\partial C_A}{\partial x} \left( D_{AV} \frac{\partial C_{AV}}{\partial x} + D_{AI} \frac{\partial C_{AI}}{\partial x} \right) \quad (3.25)$$

και τελικά να καταλήξουμε στο νόμο της διάχυσης για την ενδογενή διάχυση

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \underbrace{(D_{AV}^* + D_{AI}^*)}_{=D_A^*} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \quad (3.26)$$

με

$$D_{AX}^* = D_{AX} \frac{C_{AX}}{C_A} \quad (3.27)$$

Στην περίπτωση όπου το εξωγενές επίπεδο πρόσμιξης είναι αρκετά υψηλότερο του ενδογενούς η μιλάμε πλέον για συνθήκες εξωγενούς διάχυσης [4]. Σε αυτή την περίπτωση πρέπει να ληφθεί υπόψιν η κίνηση κάθε ατόμου της πρόσμιξης με κάθε επίπεδο φόρτισης της εκάστοτε ατέλειας. Έχουμε δηλαδή τη διάχυση συμπλόκων  $A^+X^0$ ,  $A^+X^-$  και  $A^+X^{2-}$  (ή  $A^-X^0$ ,  $A^-X^+$  και  $A^-X^{2+}$  σε περίπτωση αντίθετου τύπου πρόσμιξης) για αφόρτιστες, μονά και διπλά φορτισμένες ατέλειες αντίστοιχα. Σε αυτή την περίπτωση και θεωρώντας επιπλέον ότι βρισκόμαστε σε κατάσταση πλήρους ιονισμού (οπότε και  $C_A^+ = C_A$ ) μπορεί να αποδειχθεί [12] ότι η εξίσωση διάχυσης τροποποιείται σε

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{Ae}^* \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) \quad (3.28)$$

όπου  $D_{Ae}^*$  ο ενεργός συντελεστής διάχυσης της διαδικασίας

$$D_{Ae}^* = \eta \left[ D_{A^+X^0}^i + D_{A^+X^-}^i \left( \frac{n}{n_i} \right) + D_{A^+X^{2-}}^i \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \right] \quad (3.29)$$

με

$$\eta = 1 + \frac{C_A}{2n_i} \left[ 1 + \left( \frac{C_A}{2n_i} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (3.30)$$

και

$$D_{A^+X^0}^i = D_{A^+X^0} \frac{C_{A^+X^0}}{C_A} \quad (3.31\alpha')$$

$$D_{A^+X^-}^i = D_{A^+X^-} \frac{C_{A^+X^-}}{C_A} \quad (3.31\beta')$$

$$D_{A^+X^{2-}}^i = D_{A^+X^{2-}} \frac{C_{A^+X^{2-}}}{C_A} \quad (3.31\gamma')$$

Ουσιαστικά η εξίσωση (3.28) μας λέει ότι κάθε ζεύγος φορτισμένης ατέλειας με μία πρόσμιξη συμμετέχει στη διάχυση με έναν ανηγμένο συντελεστή διάχυσης  $D^i$  ο οποίος

εκφράζει το κλάσμα της συμμετοχής του εκάστοτε συμπλόκου στη συνολική διαδικασία με έναν επιπλέον παράγοντα διόρθωσης  $\eta$ . Με βάση αυτό τον φορμαλισμό η εξίσωση διάχυσης διατηρεί τη γνώριμη μορφή της, “αποκρύπτοντας” την πολύπλοκη φυσική σχηματισμού και διάλυσης συμπλόκων AX μέσω των ανηγμένων συντελεστών διάχυσης.

### § 3.3 TCAD ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ — ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ CHARGED-REACT

Η εξίσωση (3.28) αποτελεί τη βάση της πλειοψηφίας των σύγχρονων μοντέλων TCAD προσομοίωσης για τη διεργασία της διάχυσης. Ένα τέτοιο TCAD εργαλείο είναι το Sentaurus™ Process (SProcess) το οποίο και χρησιμοποιήθηκε για την εκτέλεση αυτής της εργασίας. Στα πλαίσια του υπολογισμού της ανακατανομής των προσμίξεων κατά τη διαδικασία της διάχυσης υπάρχει ένα σύνολο παραμέτρων που πρέπει να ληφθεί υπόψιν από έναν state-of-the-art προσομοιωτή, ενδεικτικά

- ▶ Ενεργοποίηση και απενεργοποίηση προσμίξεων
- ▶ Αλληλεπίδραση προσμίξεων με τις κρυσταλλικές ατέλειες
- ▶ Χημικές αντιδράσεις στις διεπιφάνειες ανάμεσα στα υλικά
- ▶ Ροή προσμίξεων και υλικών
- ▶ Μετακίνηση διεπιφανειών
- ▶ Εσωτερικά ηλεκτρικά πεδία

Σε κάθε περίπτωση κύριο αντικείμενο της προσομοίωσης είναι ο υπολογισμός της ροής (flux) των προσμίξεων σε κάθε χρονικό βήμα της διαδικασίας. Ένας από τους πιο προηγμένους τέτοιους αλγόριθμους που αξιοποιείται από το SProcess είναι ο αλγόριθμος ChargedReact ή five-stream model [13] το οποίο διατυπώθηκε για πρώτη φορά για την περιγραφή της διάχυσης του φωσφόρου στο πυρίτιο [14], εντούτοις ο φορμαλισμός είναι αρκετά γενικός ώστε να επεκταθεί και για την γενικότερη περιγραφή της διάχυσης. Ο αλγόριθμος περιλαμβάνει την επίλυση τριών διαφορετικών εξισώσεων ανά πρόσμιξη αντικατάστασης, δύο διαφορετικών εξισώσεων για την κίνηση ζευγών πρόσμιξης-ατέλειας και δύο εξισώσεων για τη διάχυση των ατελειών. Στη γενικότερη περίπτωση για τη ροή σωματιδίων μιας ατέλειας A φορτίου  $c$  θα έχουμε ότι

$$\mathbf{F}_{A^c} = -D_{A^c} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-c} \nabla \left[ C_A \left( \frac{n}{n_i} \right)^c \right] \quad (3.32)$$

ενώ για την εξίσωση συνέχειας θα έχουμε

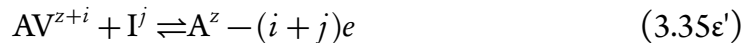
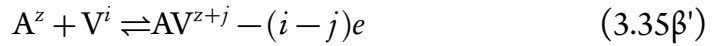
$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\nabla F_{A^c} + R_{A^c}^t - R_{A^c}^c \quad (3.33)$$

οι όροι  $R$  είναι οι όροι επανασύνδεσης και δημιουργίας προσμίξεων. Ο πρώτος όρος αφορά τη συνεισφορά από το μοντέλο μεταφοράς προσμίξεων και ο δεύτερος από άλλες συνεισφορές όπως αλληλεπιδράσεις μεταξύ συμπλόκων. Αντιδράσεις οι οποίες μετατρέπουν προσμίξεις σε κάποιο άλλο είδος (AI, AV, κλπ) έχουν θετική συνεισφορά στον όρο  $R_{A^c}^c$ . Σε ισορροπία επίσης θα ισχύει ότι για μία πρόσμιξη φορτίου  $A$  φορτίου  $c$  πάνω από το επίπεδο αναφοράς  $r$  (συνήθως 0)

$$C_A^{c+r} = k_{A^c} C_{A^r} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-(c+r)} \quad (3.34)$$

όπου  $k$  μια έκφραση τύπου Arrhenius που είναι χαρακτηριστική της εκάστοτε πρόσμιξης.

Οι αντιδράσεις που λαμβάνονται υπόψιν από το ChargedReact είναι οι εξής (τα  $i$ ,  $j$  υποδηλώνουν στάθμες φορτίου)



και οι οποίες περιλαμβάνουν αλληλεπιδράσεις τόσο ανάμεσα στα άτομα της πρόσμιξης με τις ατέλειες όσο και τις αλληλεπιδράσεις των συμπλόκων με τις ατέλειες. Παράλληλα προβλέπεται και η αντίδραση δημιουργίας φορτισμένων προσμίξεων από ήδη σχηματισμένα σύμπλοκα. Σε κάθε περίπτωση η αντίδραση έχει ως αποτέλεσμα αλλαγές στις στάθμες φορτίου με την παραγωγή ή σύλληψη ηλεκτρονίων. Οι πέντε διαφορικές εξισώσεις του five-stream model που μοντελοποιούν αυτές τις διαδικασίες είναι οι

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -R_{AI} - R_{AV} + R_{AI,V} + R_{AV,I} - R_A^c \quad (3.36\alpha')$$

$$\frac{\partial C_{AI}}{\partial t} = -\nabla F_{AI} + R_{AI} - R_{AI,V} - R_{AI}^c \quad (3.36\beta')$$

$$\frac{\partial C_{AV}}{\partial t} = -\nabla F_{AV} + R_{AV} - R_{AV,I} - R_{AV}^c \quad (3.36\gamma')$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = -\nabla F_I - R_{IV} - R_{AV,I} - R_{AI} - R_I^c \quad (3.36\delta')$$

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = -\nabla F_V - R_{IV} - R_{AI,V} - R_{AV} - R_V^c \quad (3.36\epsilon')$$

όπου  $C_A$  η συγκέντρωση των προσμίξεων αντικατάστασης και  $C_X$  η συγκέντρωση των μη δεσμευμένων ατελειών. Για τη συγκέντρωση των δεσμευμένων ατελειών  $C_{A^{z+c}}$  μια σχέση ανάλογη της (3.34) μπορεί να θεωρηθεί

$$C_{AX^{z+c}} = k_{AX^c} C_{AX^z} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-c} \quad (3.37)$$

με την εξάρτηση τύπου Arrhenius για τον συντελεστή  $k$

$$k_{AX^c} = k_{AX^c}^0 \exp\left(\frac{-k_{AX^c}^E}{kT}\right) \quad (3.38)$$

Με βάση τα παραπάνω η ροή των συμπλόκων AX μπορεί να υπολογιστεί αξιοποιώντας την εξίσωση (3.32):

$$F_{AX} = -\sum_c D_{AX^c} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-(c+z)} \nabla \left[ \frac{C_{AX}}{C_{X^0}^* \sum_q k_{AX^q} k_{X^q} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-q}} \left( \frac{n}{n_i} \right)^z \right] \quad (3.39)$$

Ο συντελεστής  $D_{AX}$  εκφράζεται και αυτός μέσω μιας σχέσης Arrhenius

$$D_{AX^c} = D_{AX^c}^0 \exp\left(-\frac{D_{AX^c}^E}{kT}\right) \quad (3.40)$$

ενώ το  $C_{X^0}^*$  είναι η συγκέντρωση ισορροπίας των ουδέτερων ατελειών. Αντίστοιχα για τη ροή των ατελειών μπορεί να γραφεί

$$F_X = -\frac{\sum_c k_{X^c} D_{X^c} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-c} C_{X^c}}{\sum_q k_{X^q} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-q}} \nabla \left( \frac{C_X}{C_X^*} \right) \quad (3.41)$$

ο συντελεστής διαχυτότητας ακολουθεί μια αντίστοιχη σχέση με την περίπτωση των συμπλόκων (3.40).

Τέλος για όλους τους συνδυασμούς ρυθμών δημιουργίας,  $R$  μπορούμε να γράψουμε

$$A^a + B^b \rightleftharpoons AB^c + (c - a - b)e \quad (3.42)$$

Αθροίζοντας σε όλες τις στάθμες φορτίου μπορούμε να ορίσουμε για τους ρυθμούς αντίδρασης

$$R_{AX} \equiv -K_{AX}^f \left( C_A C_X - \frac{C_{AX}}{K_{AX}^r} \right) \quad (3.43\alpha')$$

$$R_{AI,V} \equiv K_{AI,V} (C_{AI} C_V - K_{AX}^r C_I^* C_V^* C_A) \quad (3.43\beta')$$

$$R_{AV,I} \equiv K_{AV,I}^f (C_{AV} C_I - K_{AX}^r C_I^* C_V^* C_A) \quad (3.43\gamma')$$

$$R_{IV} \equiv K_{IV} (C_I C_V - C_I^* C_V^*) \quad (3.43\delta')$$

Οι συντελεστές  $K$  αφορούν τους ρυθμούς αντίδρασης για κάθε έναν από τους μηχανισμούς διάχυσης. Ο  $K_{AX}^f$  είναι ο ρυθμός του kick-out μηχανισμού για σύμπλοκα προσμίξεων με ατέλειες ενώ οι  $K_{AI,V}^f$  και  $K_{AV,I}^f$  αφορούν τους ρυθμούς του kick-out μηχανισμού για την αλληλεπίδραση ήδη υπάρχοντων συμπλόκων με κάποια ατέλεια. Αντίστοιχα και για τον ρυθμό  $R_{IV}$  που αφορά τον ρυθμό αντίδρασης της αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο ατελειών απουσία ατέλειας. Ο εκθέτης  $*$  υποδηλώνει συγκεντρώσεις σε κατάσταση ισορροπίας, ενώ οι υπόλοιπες συγκεντρώσεις θεωρούνται εκτός ισορροπίας.

Το ChargedReact λαμβάνει υπόψιν όλα τα επίπεδα φορτίου τόσο των προσμίξεων όσο και των ατελειών. Όταν τα επίπεδα φόρτισης δεν είναι σημαντικά για την περιγραφή της διαδικασίας υπάρχει η απλούστερη παραλλαγή του ίδιου μοντέλου που λέγεται React. Σε αυτή την περίπτωση οι σχέσεις αλληλεπίδρασης είναι οι



με το αντίστοιχο σετ διαφορικών εξισώσεων

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -R_{AI} - R_{AV} - R_A^c \quad (3.45\alpha')$$

$$\frac{\partial C_{AX}}{\partial t} = -\nabla F_{AX} + R_{AX} - R_{AX}^c \quad (3.45\beta')$$

$$\frac{\partial C_X}{\partial t} = -\nabla J_X - R_{IV} - R_{AX} - R_X^c \quad (3.45\gamma')$$

ενώ αντίστοιχος είναι ο φορμαλισμός που ακολουθείται όπως στην περίπτωση του ChargedReact.

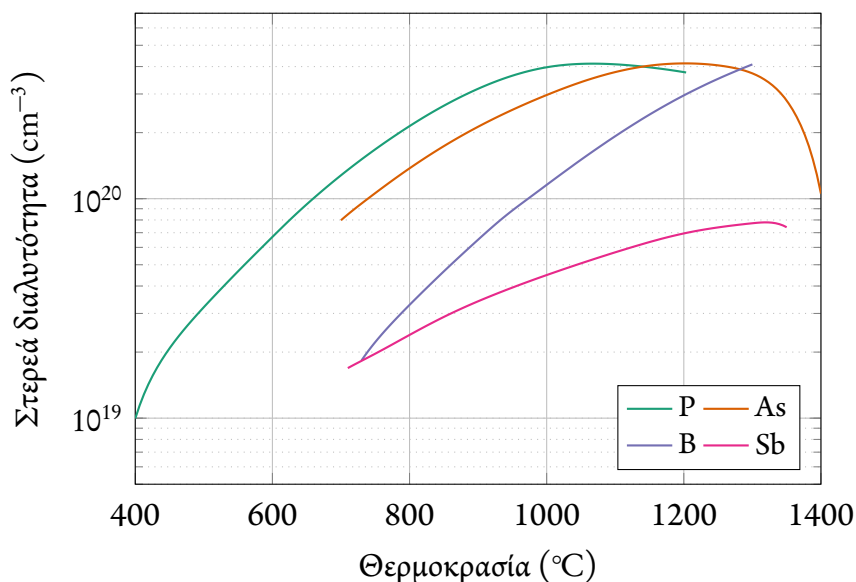
Πέρα από τα μοντέλα της οικογένειας React υπάρχει και η οικογένεια μοντέλων Pair όπου η αλληλεπίδραση των ζευγών πρόσμιξης και ατέλειας είναι σε τοπική ισορροπία με τη συγκέντρωση της πρόσμιξης και τη συγκέντρωση της ατέλειας. Όταν τόσο οι



προσμίξεις όσο και οι ατέλειες είναι φορτισμένες μιλάμε για το ChargedPair. Επιπλέον το μοντέλο ChargedFermi δεν λαμβάνει υπόψιν τις σημειακές ατέλειες οι οποίες θεωρούνται ότι βρίσκονται σε ισορροπία (δηλαδή οι συγκεντρώσεις τους δεν μεταβάλλονται). Τέλος το μοντέλο Constant θεωρεί μόνο μία εξίσωση διάχυσης αγνοώντας την παρουσία φορτίων και πεδίων. Παρ' ότι θα περίμενε κανείς ότι τα δύο τελευταία μοντέλα είναι εξαιρετικά απλουστευτικά στην πραγματικότητα είναι πολύ χρήσιμα εργαλεία για την αρχική προτυποποίηση της διαδικασίας της διάχυσης σε συνδυασμούς ημιαγωγών και προσμίξεων για τα οποία οι παράμετροι των React μοντέλων δεν έχουν εκτιμηθεί με ακρίβεια ούτως ώστε να είναι σωστά βαθμονομημένα και αυτοσυνεπή.

### § 3.4 ΔΙΑΧΥΣΗ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ ΣΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ

Από τις βασικότερες προσμίξεις που χρησιμοποιούνται στο πυρίτιο το βόριο είναι από αυτές που έχουν την μεγαλύτερη τεχνολογική σημασία καθώς παρουσιάζει την υψηλότερη στερεά διαλυτότητα στο πυρίτιο σε σχέση με τις υπόλοιπες προσμίξεις της στήλης III του περιοδικού πίνακα. Η στερεά διαλυτότητα είναι ο καθοριστικός παράγοντας που ρυθμίζει τελικά το ποσοστό της ενεργοποίησης της εκάστοτε εμφύτευσης (βλ. και γράφημα 3.3). Η ενέργεια ιονισμού του βορίου σε μια θέση αντικατάστασης στο πλέγμα του πυριτίου κυμαίνεται από 45 μέχρι 47 meV [19, 20] ενώ λόγω του μικρού



**Σχήμα 3.3:** Εξάρτηση της στερεάς διαλυτότητας βασικών προσμίξεων στο πυρίτιο από τη θερμοκρασία [15–18].

μεγέθους του βορίου σε σχέση με το πυρίτιο η παρουσία του σε θέση αντικατάστασης προκαλεί σύμπτυξη της μοναδιαίας κυψελίδας του πυριτίου περίπου κατά 32% [21]. Πέρα από τις θέσεις αντικατάστασης η παρουσία του βορίου τόσο σε ενδοπλεγματικές θέσεις όσο και σε ενδοπλεγματοειδείς σχηματισμούς με δύο άτομα έχει επιβεβαιωθεί από πολλές εργασίες (ενδεικτικά [22–25]). Ειδικά για την περίπτωση των ενδοπλεγματοειδών σχηματισμών η κατεύθυνση σχηματισμού αυτών των συμπλόκων είναι επί της  $\langle 100 \rangle$  διεύθυνσης [26] με απόσταση 1.6 Å ανάμεσα στο βόριο και το πλησιέστερο άτομο πυριτίου [27]. Παράλληλα το βόριο σχηματίζει δεσμούς με τα ενδοπλεγματικά άτομα πυριτίου κάτι το οποίο είναι και ο κυριότερος μηχανισμός διάχυσης του βορίου στο πυρίτιο [28] με ενέργεια σύνδεσης από 1.4 έως 1.7 eV [29, 30] και με την πιο ενεργητικά επωφελή διάταξη να είναι η ύπαρξη ενός ενδοπλεγματικού ατόμου σε τετραεδρική θέση δίπλα σε μια πρόσμιξη αντικατάστασης κατά μήκος της κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης  $\langle 110 \rangle$  [31]. Αντίστοιχη είναι η κατάσταση για τα ζεύγη του βορίου με τα μονά φορτισμένα πλεγματικά κενά με ενέργειες σύνδεσης που κυμαίνονται από 0.8 eV για ενδογενείς συνθήκες [32] μέχρι 1.36 eV για εξωγενείς [33].

Όσον αφορά τον συντελεστή διάχυσης του βορίου στο πυρίτιο θα πρέπει να διαχωρίσουμε τις περιπτώσεις ενδογενούς και εξωγενούς διάχυσης. Στην ενδογενή περίπτωση υπάρχει πλήθος εργασιών (ενδεικτικά [34–38]) από τις οποίες μπορεί να εξαχθεί μια σχέση τύπου Arrhenius για τον συντελεστή διάχυσης του βορίου τουλάχιστον για θερμοκρασίες άνω των 1000 °C [4]

$$D_i = 3.79 \exp\left(-\frac{3.645}{kT}\right) \text{cm}^2 \text{s}^{-1} \quad (3.46)$$

Στην εξωγενή διάχυση έχουμε τη συνεισφορά των φορτισμένων ατελειών. Μια αντίστοιχη σχέση [4] μπορεί να εξαχθεί μέσω σχετικών δημοσιεύσεων [39–41]

$$\begin{aligned} D_e = & 0.123 \exp\left(-\frac{3.566}{kT}\right) \\ & + \frac{p}{n_i} 4.21 \exp\left(-\frac{3.671}{kT}\right) \\ & + \left(\frac{p}{n_i}\right)^2 39.8 \exp\left(-\frac{4.373}{kT}\right) \text{cm}^2 \text{s}^{-1} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Επίσης για την κίνηση των ενδοπλεγματικών ατόμων βορίου μπορεί να εξαχθεί μια αντίστοιχη σχέση [4, 42, 43]

$$D_{Bi} = 2.3 \times 10^{-5} \exp\left(-\frac{0.53}{kT}\right) \text{cm}^2 \text{s}^{-1} \quad (3.48)$$

Πέρα από τους βασικούς σχηματισμούς του βορίου στο πλέγμα του πυριτίου πιθανή είναι και η εμφάνιση πιο εκτεταμένων σχηματισμών του με τις πλεγματικές ατέλειες οι οποίοι έχουν διάφορα επίπεδα σταθερότητας και κινητικότητας, όπως η σύνδεση ενός ενδοπλεγματικού βορίου με ένα ή περισσότερα ενδοπλεγματικά άτομα ( $B_i I_n$ ), ζεύγη ατόμων αντικατάστασης βορίου ( $B_{2s}$ , μετασταθές), ζεύγη ενδοπλεγματικών ατόμων βορίου με άτομα βορίου σε θέσεις αντικατάστασης ( $B_i B_s$ ) ή σχηματισμός πολλών βορίων αντικατάστασης με ενδοπλεγματικά άτομα πυριτίου ( $B_s I B_s$ ), ζεύγη δύο ενδοπλεγματικών βορίων με ενδοπλεγματικό άτομο πυριτίου ( $B_{2i} I$ , μετασταθές) ή εκτεταμένα clusters βορίου με ενδοπλεγματικά άτομα πυριτίου, τα οποία είναι γνωστά και ως Boron Interstitial Clusters (BICs). Ο τελευταίος σχηματισμός παίζει μεγάλο ρόλο στην μοντελοποίηση της διάχυσης του βορίου στο πυρίτιο, ειδικά στην περίπτωση εξαιρετικά έντονων νοθεύσεων, καθώς η περιορισμένη κινητικότητά τους περιορίζει και το ποσοστό του βορίου το οποίο μπορεί να συνεισφέρει τελικά ηλεκτρικά στις επαφές που σχηματίζονται.

### § 3.5 ΔΙΑΧΥΣΗ ΤΟΥ ΦΩΣΦΟΡΟΥ ΣΤΟ ΓΕΡΜΑΝΙΟ

Σε αντίθεση με την περίπτωση του πυριτίου η εξέλιξη των ατελειών στο γερμάνιο ειδικά μετά από ιοντική εμφύτευση δεν είναι πολύ καλά μελετημένη αν και φαίνεται ότι η πλειοψηφία πλεγματικών κενών και ενδοπλεγματικών ατόμων γερμανίου είναι αρκετά κινητική σε θερμοκρασία δωματίου. Όποιες από αυτές δεν επανασυνδέονται σχηματίζουν σύμπλοκα με τις προσμίξεις. Από κει και πέρα η ενέργεια σχηματισμού πλεγματικών κενών στο γερμάνιο είναι πολύ χαμηλότερη (1.9 eV [44]) του σχηματισμού ενδοπλεγματικών ατόμων (3.55 eV [45, 46]), γι αυτό άλλωστε και η αυτοδιάχυση του γερμανίου είναι κατά κύριο λόγο καθοδηγούμενη από τα πλεγματικά κενά. Λόγω του εύκολου σχηματισμού τους τα πλεγματικά κενά, έναντι των ενδοπλεγματικών ατόμων, θα παίζουν τελικά και τον κυριότερο ρόλο για τη διάχυση προσμίξεων τύπου [47]. Συγκεκριμένα στην περίπτωση προσμίξεων τύπου p η διάχυση καθοδηγείται μέσω των ουδέτερων πλεγματικών κενών ενώ στις προσμίξεις τύπου n από τα διπλά αρνητικά φορτισμένα πλεγματικά κενά [48–50], τα οποία άλλωστε έχουν και τη χαμηλότερη ενέργεια σχηματισμού από όλες τις φορτισμένες στάθμες των πλεγματικών κενών [51]. Αντίθετα, τα μονά φορτισμένα πλεγματικά κενά είναι μετασταθή [52] και δεν συμμετέχουν τελικά στη διάχυση. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με τα πλεγματικά κενά στο πυρίτιο των οποίων η σημαντικά μεγάλη ενέργεια σχηματισμού τους στα 4.36 eV [53] τα καθιστά λιγότερο σημαντικά στον μηχανισμό της διάχυσης σε σχέση με το γερμάνιο.

Έτσι με βάση τις παραπάνω παρατηρήσεις η βασική αντίδραση που καθοδηγεί τη διάχυση των προσμίξεων τύπου n είναι [54]

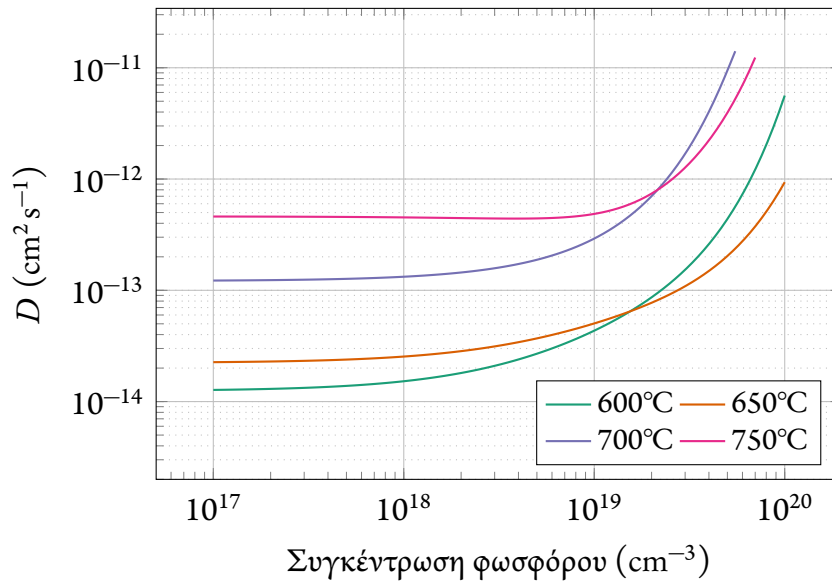


Τα σύμπλοκα  $(AV)^-$  είναι κινητικά και μέσω αυτών πραγματοποιείται τελικά η διάχυση των ατόμων της πρόσμιξης. Η διάλυση αυτών των συμπλόκων οδηγεί στην ακινητοποίηση των ατόμων της πρόσμιξης σε θέσεις αντικατάστασης μέσω της αντίθετης αντίδρασης.

Κατ' αντιστοιχία με το πυρίτιο μία από τις σημαντικότερες προσμίξεις τύπου n στην περίπτωση του γερμανίου αυτή τη φορά είναι ο φώσφορος ο οποίος έχει το υψηλότερο επίπεδο στερεάς διαλυτότητας από τις υπόλοιπες προσμίξεις ίδιου τύπου και εντοπίζεται στο επίπεδο των  $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  στους περίπου 700 με 750 °C [55]. Μόνο το γάλλιο έχει υψηλότερο επίπεδο διαλυτότητας ( $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) στις ίδιες θερμοκρασίες αλλά είναι τύπου p [56, 57] αν και σε κάθε περίπτωση όμως τα επίπεδα αυτά είναι χαμηλότερα από τα αντίστοιχα του πυριτίου για τις ίδιες προσμίξεις. Επίσης οι προσμίξεις τύπου n παρουσιάζουν συντελεστές διάχυσης σε καθεστώς ισορροπίας πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερους από τους αντίστοιχους των προσμίξεων τύπου p [54, 58] κάτι το οποίο καθιστά δύσκολο τον έλεγχο του προφίλ κατά τη διάρκεια θερμικών επεξεργασιών. Για χαμηλές συγκεντρώσεις μια έκφραση του συντελεστή διάχυσης του φωσφόρου μπορεί να βρεθεί από την βιβλιογραφία [59, 60]

$$D_p = (0.09 \pm 0.03) \exp\left(-\frac{2.10 \pm 0.02}{kT}\right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \quad (3.50)$$

Ωστόσο σε συγκεντρώσεις φωσφόρου άνω του  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  είναι εμφανής μια ισχυρή εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης από τη συγκέντρωση του φωσφόρου (σχήμα 3.4), παρατήρηση η οποία είναι γνωστή και από παλαιότερες εργασίες [61], ενώ αντίστοιχη τάση εμφανίζει και το αρσενικό [47]. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ανώμαλη διάχυση του φωσφόρου ειδικά στις πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Βέβαια, σε υψηλά επίπεδα προσμίξεων δεν πρέπει να παραβλέψουμε την παρουσία εκτεταμένης καταστροφής του πλέγματος λόγω της εμφύτευσης κάτι το οποίο μπορεί να οδηγήσει στην εμφάνιση φαινομένων τύπου TED στο γερμάνιο όπως έχει παρατηρηθεί από τους Chui κ.ά. [62] θεωρήσει η οποία ενισχύεται αν αναλογιστούμε ότι η έκταση της καταστροφής λόγω της εμφύτευσης επεκτείνεται λόγω του μεγαλύτερου μεγέθους των ατόμων της ομάδας V. Στην περίπτωση του αντιμονίου, ειδικά, η καταστροφή είναι τόσο μεγάλη που δεν αναστρέφεται ούτε μετά από ανόπτηση.



**Σχήμα 3.4:** Εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης του φωσφόρου από το επίπεδο εξωγενούς συγκέντρωσης [61].

Η ανάγκη για μεγαλύτερες δόσεις πρόσμιξης στο γερμάνιο έχει επιπλέον επίδραση και στο ποσοστό των προσμίξεων που μπορούν τελικά να ενεργοποιηθούν. Σε συγκεντρώσεις προσμίξεων κοντά στο επίπεδο των  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  η χημική κατανομή των προσμίξεων διαφέρει σημαντικά από αυτή των ηλεκτρικά ενεργών [49] κάτι το οποίο υποδηλώνει την ύπαρξη συμπλόκων των ουδέτερων προσμίξεων με πλεγματικές ατέλειες τα οποία σχηματίζονται μέσω μιας αντίδρασης της μορφής



ή της μορφής



ωστόσο η δεύτερη αντίδραση δεν είναι πολύ πιθανή στην περίπτωση προσμίξεων τύπου n, όπως ο φώσφορος, καθώς τόσο τα ζεύγη AV όσο και τα πλεγματικά κενά είναι αρνητικά φορτισμένα οπότε η αλληλεπίδραση Coulomb ανάμεσά τους δυσκολεύει τη “γειτνιάσή” τους για να σχηματιστεί το σύμπλοκο  $AV_2$ . Ο σχηματισμός των ουδέτερων συμπλόκων  $A_2V^0$  εξηγεί, όμως, το χαμηλό ποσοστό ενεργοποίησης το οποίο μπορεί να μειωθεί περαιτέρω με καθώς περισσότερα άτομα πρόσμιξης συμμετέχουν στον σχηματισμό πιο εκτεταμένων  $A_mV_n$  συμπλόκων. Μια κατεύθυνση για την αντιμετώπιση αυτού του φαινομένου είναι με χρήση μεθόδων ταχείας ανόπτησης σε υψηλή θερμοκρασία, όπως για παράδειγμα flash annealing [63] ή laser annealing [64]. Σε κάθε περίπτωση

η γρήγορη διάχυση των n-type προσμίξεων σε συνδυασμό με την τάση απενεργοποίησης που εμφανίζουν καθιστά αρκετά δύσκολο τον έλεγχο του σχηματισμού επαφών n+/p στο γερμάνιο ειδικά με συμβατικές μεθόδους ανόπτησης.

### § 3.6 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] J. Crank. *The mathematics of diffusion*. 2η έκδοση. Oxford university press, 1979. ISBN: 978-0-19-853411-2.
- [2] S.M. Hu. “Diffusion in Silicon and Germanium”. Στο: *Atomic Diffusion in Semiconductors*. Επιμέλεια υπό D. Shaw. Plenum, 1973. ISBN: 978-1-4615-8638-8.
- [3] P.M. Fahey, P.B. Griffin και J.D. Plummer. “Point defects and dopant diffusion in silicon”. *Reviews of Modern Physics* 61.2 (Απρ. 1989), 289–384. DOI: [10.1103/revmodphys.61.289](https://doi.org/10.1103/revmodphys.61.289).
- [4] P. Pichler. *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*. Springer Vienna, 2004. ISBN: 978-3-7091-0597-9.
- [5] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. 8η έκδοση. Wiley, Νοέ. 2004. ISBN: 978-0-471-41526-8.
- [6] S. Hu. “Nonequilibrium point defects and diffusion in silicon”. *Materials Science and Engineering: R: Reports* 13.3-4 (Οκτ. 1994), 105–192. DOI: [10.1016/0927-796X\(94\)90009-4](https://doi.org/10.1016/0927-796X(94)90009-4).
- [7] W. Frank. “Diffusion in Crystalline Silicon and Germanium – the State-of-the-Art in Brief”. Στο: *Crucial Issues in Semiconductor Materials and Processing Technologies*. Επιμέλεια υπό S. Coffa κ.ά. NATO ASI Series E: Applied Sciences. Springer Science & Business Media Dordrecht, 1992. ISBN: 978-94-010-5203-0.
- [8] A. Janotti κ.ά. “Electronic and structural properties of vacancy and self-interstitial defects in germanium”. *Physica B: Condensed Matter* 273-274 (Δεκ. 1999), 575–578. DOI: [10.1016/S0921-4526\(99\)00576-1](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(99)00576-1).
- [9] V.P. Markevich κ.ά. “Vacancy–group-V-impurity atom pairs in Ge crystals doped with P, As, Sb, and Bi”. *Phys. Rev. B* 70.23 (Δεκ. 2004). DOI: [10.1103/physrevb.70.235213](https://doi.org/10.1103/physrevb.70.235213).
- [10] G.D. Watkins, J.R. Troxell και A.P. Chatterjee. “Vacancies and interstitials in silicon”. Στο: *International conference on defects and radiation effects in semiconductors*. Τόμ. 46. Institute of Physics Conference Series. The Institute of Physics, 1979, 16–30. ISBN: 978-0-854-98137-3.
- [11] P.A. Stolk κ.ά. “Physical mechanisms of transient enhanced dopant diffusion in ion-implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 81.9 (1997), 6031. DOI: [10.1063/1.364452](https://doi.org/10.1063/1.364452).
- [12] Ν.Κ. Ιωάννου. “Διάχυση και ενεργοποίηση προσμίξεων τύπου p σε πυρίτιο υπό μηχανική τάση και γερμάνιο”. Διδακτορική διατριβή. Πάτρα, Ελλάδα: Πανεπιστήμιο Πατρών, 2009.
- [13] *Sentaurus™ Process User Guide*. Εκδ. K-2015.06. Synopsys® Inc. Ιούν. 2015. 1086 σσ.
- [14] S.T. Dunham. “A Quantitative Model for the Coupled Diffusion of Phosphorus and Point Defects in Silicon”. *Journal of The Electrochemical Society* 139.9 (1992), 2628. DOI: [10.1149/1.2221276](https://doi.org/10.1149/1.2221276).
- [15] V.E. Boisenko και S.G. Yudin. “Steady-state solubility of substitutional impurities in silicon”. *Physica Status Solidi (a)* 101.1 (Μάι. 1987), 123–127. DOI: [10.1002/pssa.2211010113](https://doi.org/10.1002/pssa.2211010113).

- [16] A. Lietoila, J. F. Gibbons και T. W. Sigmon. “The solid solubility and thermal behavior of metastable concentrations of As in Si”. *Appl. Phys. Lett.* 36.9 (1980), 765. DOI: [10.1063/1.91650](https://doi.org/10.1063/1.91650).
- [17] J. Goetzlich, P.H. Tsien και H. Ryssel. “Relaxation Behavior of Metastable As and P Concentrations in Si After Pulsed and CW Laser Annealing”. *MRS Proc.* 23 (Ιαν. 1983). DOI: [10.1557/proc-23-235](https://doi.org/10.1557/proc-23-235).
- [18] J. Murota κ.ά. “Arsenic Diffusion in Silicon from Doped Polycrystalline Silicon”. *Jpn. J. Appl. Phys.* 17.2 (Φεβ. 1978), 457–458. DOI: [10.1143/jjap.17.457](https://doi.org/10.1143/jjap.17.457).
- [19] G.A. Samara και C.E. Barnes. “Pressure dependence of impurity levels in semiconductors: The deep gold acceptor level and shallow donor and acceptor levels in silicon”. *Phys. Rev. B* 35.14 (Μάι. 1987), 7575–7584. DOI: [10.1103/physrevb.35.7575](https://doi.org/10.1103/physrevb.35.7575).
- [20] A. Onton, P. Fisher και A.K. Ramdas. “Spectroscopic Investigation of Group-III Acceptor States in Silicon”. *Phys. Rev.* 163.3 (Νοέ. 1967), 686–703. DOI: [10.1103/physrev.163.686](https://doi.org/10.1103/physrev.163.686).
- [21] J. Zhu κ.ά. “Ab initio pseudopotential calculations of B diffusion and pairing in Si”. *Phys. Rev. B* 54.7 (Αύγ. 1996), 4741–4747. DOI: [10.1103/physrevb.54.4741](https://doi.org/10.1103/physrevb.54.4741).
- [22] R.C. Newman και R.S. Smith. “Local mode absorption from boron pairs in silicon”. *Physics Letters A* 24.12 (Ιούν. 1967), 671–672. DOI: [10.1016/0375-9601\(67\)91019-5](https://doi.org/10.1016/0375-9601(67)91019-5).
- [23] R.C. Newman και D.H.J. Totterdell. “Electron irradiation damage in silicon containing high concentrations of boron-lithium pairs”. *J. Phys. C: Solid State Phys.* 7.18 (Σεπτ. 1974), 3418–3426. DOI: [10.1088/0022-3719/7/18/025](https://doi.org/10.1088/0022-3719/7/18/025).
- [24] K. Laithwaite, R.C. Newman και D.H. Totterdell. “Interstitial defects involving boron in irradiated silicon”. *J. Phys. C: Solid State Phys.* 8.2 (Ιαν. 1975), 236–242. DOI: [10.1088/0022-3719/8/2/016](https://doi.org/10.1088/0022-3719/8/2/016).
- [25] J. Yamauchi, N. Aoki και I. Mizushima. “Vibrational properties of two boron atoms in silicon”. *Phys. Rev. B* 63.7 (Ιαν. 2001). DOI: [10.1103/physrevb.63.073202](https://doi.org/10.1103/physrevb.63.073202).
- [26] J.R. Troxell και G.D. Watkins. “Interstitial boron in silicon: A negative-U system”. *Phys. Rev. B* 22.2 (Ιούλ. 1980), 921–931. DOI: [10.1103/physrevb.22.921](https://doi.org/10.1103/physrevb.22.921).
- [27] M.L. Swanson. “Lattice location of solute atoms by channeling”. *Vacuum* 39.2-4 (Ιαν. 1989), 87–90. DOI: [10.1016/0042-207X\(89\)90167-X](https://doi.org/10.1016/0042-207X(89)90167-X).
- [28] E. Tarnow. “Theory of the B Interstitial Related Defect in Si”. *Europhysics Letters (EPL)* 16.5 (Οκτ. 1991), 449–454. DOI: [10.1209/0295-5075/16/5/007](https://doi.org/10.1209/0295-5075/16/5/007).
- [29] I. Bork και H. Matsumoto. “On the Determination of Boron Diffusivities and Boron Interstitial Pair Binding Energies in Silicon”. *1996 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD '96)*. Tokyo: Japan Society of Applied Physics, 1996, 91–92.
- [30] M. Hane και H. Matsumoto. “A model for boron short time annealing after ion implantation”. *IEEE Trans. Electron Devices* 40.7 (Ιούλ. 1993), 1215–1222. DOI: [10.1109/16.216424](https://doi.org/10.1109/16.216424).
- [31] W. Windl κ.ά. “First-Principles Study of Boron Diffusion in Silicon”. *Phys. Rev. Lett.* 83.21 (Νοέ. 1999), 4345–4348. DOI: [10.1103/physrevlett.83.4345](https://doi.org/10.1103/physrevlett.83.4345).
- [32] H. Park και M.E. Law. “Point defect based modeling of low dose silicon implant damage and oxidation effects on phosphorus and boron diffusion in silicon”. *J. Appl. Phys.* 72.8 (1992), 3431. DOI: [10.1063/1.351416](https://doi.org/10.1063/1.351416).
- [33] D. Mathiot και J. C. Pfister. “Dopant diffusion in silicon: A consistent view involving nonequilibrium defects”. *J. Appl. Phys.* 55.10 (1984), 3518. DOI: [10.1063/1.332941](https://doi.org/10.1063/1.332941).
- [34] Masahiro Okamura. “Boron Diffusion into Silicon Using Elemental Boron”. *Jpn. J. Appl. Phys.* 8.12 (Δεκ. 1969), 1440–1448. DOI: [10.1143/jjap.8.1440](https://doi.org/10.1143/jjap.8.1440).

- [35] A. Ural, P.B. Griffin και J.D. Plummer. “Fractional contributions of microscopic diffusion mechanisms for common dopants and self-diffusion in silicon”. *J. Appl. Phys.* 85.9 (1999), 6440. DOI: [10.1063/1.370285](https://doi.org/10.1063/1.370285).
- [36] Y.M. Haddara κ.ά. “Accurate measurements of the intrinsic diffusivities of boron and phosphorus in silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 77.13 (2000), 1976. DOI: [10.1063/1.1313248](https://doi.org/10.1063/1.1313248).
- [37] H.-J. Gossmann κ.ά. “Determination of Si self-interstitial diffusivities from the oxidation-enhanced diffusion in B doping-superlattices: The influence of the marker layers”. *J. Appl. Phys.* 77.5 (1995), 1948. DOI: [10.1063/1.358828](https://doi.org/10.1063/1.358828).
- [38] U. Södervall, M. Friesel και A. Lodding. “Atomic transport of trivalent impurities in silicon: diffusion, isotope effects, activation volumes”. *Faraday Trans.* 86.8 (1990), 1293. DOI: [10.1039/ft9908601293](https://doi.org/10.1039/ft9908601293).
- [39] M. Miyake. “Oxidation-enhanced diffusion of ion-implanted boron in silicon in extrinsic conditions”. *J. Appl. Phys.* 57.6 (1985), 1861. DOI: [10.1063/1.334416](https://doi.org/10.1063/1.334416).
- [40] A.F.W. Willoughby κ.ά. “Diffusion of boron in heavily doped n- and p-type silicon”. *J. Appl. Phys.* 59.7 (1986), 2392. DOI: [10.1063/1.336340](https://doi.org/10.1063/1.336340).
- [41] D. Tsoukalas και P. Chenevier. “Boron diffusion in silicon by a vacancy mechanism”. *phys. stat. sol. (a)* 92.2 (Δεκ. 1985), 495–501. DOI: [10.1002/pssa.2210920219](https://doi.org/10.1002/pssa.2210920219).
- [42] A.K. Tipping και R.C. Newman. “An infrared study of the production, diffusion and complexing of interstitial boron in electron-irradiated silicon”. *Semiconductor Science and Technology* 2.7 (Ιούλ. 1987), 389–398. DOI: [10.1088/0268-1242/2/7/001](https://doi.org/10.1088/0268-1242/2/7/001).
- [43] B. Ittermann κ.ά. “Mobility of interstitial B in Si analyzed by a stochastic reorientation model”. *Physica B: Condensed Matter* 308-310 (Δεκ. 2001), 236–239. DOI: [10.1016/s0921-4526\(01\)00680-9](https://doi.org/10.1016/s0921-4526(01)00680-9).
- [44] A. Fazzio κ.ά. “Microscopic picture of the single vacancy in germanium”. *Phys. Rev. B* 61.4 (Ιαν. 2000), R2401–R2404. DOI: [10.1103/physrevb.61.r2401](https://doi.org/10.1103/physrevb.61.r2401).
- [45] A.J.R. da Silva κ.ά. “Self-interstitial defect in germanium”. *Phys. Rev. B* 62.15 (Οκτ. 2000), 9903–9906. DOI: [10.1103/physrevb.62.9903](https://doi.org/10.1103/physrevb.62.9903).
- [46] M.D. Moreira, R.H. Miwa και P. Venezuela. “Electronic and structural properties of germanium self-interstitials”. *Phys. Rev. B* 70.11 (Σεπτ. 2004). DOI: [10.1103/physrevb.70.115215](https://doi.org/10.1103/physrevb.70.115215).
- [47] E. Vainonen-Ahlgren κ.ά. “Identification of vacancy charge states in diffusion of arsenic in germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 77.5 (2000), 690. DOI: [10.1063/1.127087](https://doi.org/10.1063/1.127087).
- [48] M. Naganawa κ.ά. “Charge states of vacancies in germanium investigated by simultaneous observation of germanium self-diffusion and arsenic diffusion”. *Appl. Phys. Lett.* 93.19, 191905 (2008). DOI: [10.1063/1.3025892](https://doi.org/10.1063/1.3025892).
- [49] S. Brotzmann κ.ά. “Diffusion and defect reactions between donors, C, and vacancies in Ge. I. Experimental results”. *Phys. Rev. B* 77.23 (Ιούν. 2008). DOI: [10.1103/physrevb.77.235207](https://doi.org/10.1103/physrevb.77.235207).
- [50] T. Südkamp κ.ά. “Doping dependence of self-diffusion in germanium and the charge states of vacancies”. *Appl. Phys. Lett.* 102.24, 242103 (Ιούν. 2013). DOI: [10.1063/1.4811442](https://doi.org/10.1063/1.4811442).
- [51] H. Tahini κ.ά. “Diffusion of E centers in germanium predicted using GGA+U approach”. *Appl. Phys. Lett.* 99.7, 072112 (2011). DOI: [10.1063/1.3625939](https://doi.org/10.1063/1.3625939).
- [52] J. Coutinho κ.ά. “Donor-vacancy complexes in Ge: Cluster and supercell calculations”. *Phys. Rev. B* 73.23 (Ιούν. 2006). DOI: [10.1103/physrevb.73.235213](https://doi.org/10.1103/physrevb.73.235213).



- [53] M.I.J. Probert και M.C. Payne. “Improving the convergence of defect calculations in supercells: An ab initio study of the neutral silicon vacancy”. *Phys. Rev. B* 67.7 (Φεβ. 2003). DOI: [10.1103/physrevb.67.075204](https://doi.org/10.1103/physrevb.67.075204).
- [54] S. Brotzmann και H. Bracht. “Intrinsic and extrinsic diffusion of phosphorus, arsenic, and antimony in germanium”. *J. Appl. Phys.* 103.3, 033508 (Φεβ. 2008). DOI: [10.1063/1.2837103](https://doi.org/10.1063/1.2837103).
- [55] E. Simoen κ.ά. “Ion-implantation issues in the formation of shallow junctions in germanium”. *Materials Science in Semiconductor Processing* 9.4-5 (Αύγ. 2006), 634–639. DOI: [10.1016/j.mssp.2006.08.067](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.08.067).
- [56] C.D. Thurmond, F.A. Trumbore και M. Kowalchik. “Germanium Solidus Curves”. *The Journal of Chemical Physics* 25.4 (1956), 799. DOI: [10.1063/1.1743083](https://doi.org/10.1063/1.1743083).
- [57] F.A. Trumbore. “Solid Solubilities of Impurity Elements in Germanium and Silicon”. *Bell System Technical Journal* 39.1 (Ιαν. 1960), 205–233. DOI: [10.1002/j.1538-7305.1960.tb03928.x](https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1960.tb03928.x).
- [58] A. Chroneos και H. Bracht. “Diffusion of n-type dopants in germanium”. *Appl. Phys. Rev.* 1.1, 011301 (Ιαν. 2014). DOI: [10.1063/1.4838215](https://doi.org/10.1063/1.4838215).
- [59] U. Södervall και M. Friesel. “Diffusion of Silicon and Phosphorus into Germanium as Studied by Secondary Ion Mass Spectrometry”. *Defect and Diffusion Forum* 143–147 (1997), 1053–1058. DOI: [10.4028/www.scientific.net/ddf.143-147.1053](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ddf.143-147.1053).
- [60] C. Claeys και E. Simoen, επιμελητές. *Germanium-based technologies: from materials to devices*. Elsevier, 2007. ISBN: 978-0-08-044953-1.
- [61] S. Matsumoto. “Concentration Dependence of a Diffusion Coefficient at Phosphorus Diffusion in Germanium”. *Journal of The Electrochemical Society* 125.8 (1978), 1307. DOI: [10.1149/1.2131668](https://doi.org/10.1149/1.2131668).
- [62] C.O. Chui κ.ά. “Activation and diffusion studies of ion-implanted p and n dopants in germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 83.16 (2003), 3275. DOI: [10.1063/1.1618382](https://doi.org/10.1063/1.1618382).
- [63] C. Wündisch κ.ά. “Millisecond flash lamp annealing of shallow implanted layers in Ge”. *Appl. Phys. Lett.* 95.25, 252107 (2009). DOI: [10.1063/1.3276770](https://doi.org/10.1063/1.3276770).
- [64] G. Hellings κ.ά. “Ultra Shallow Arsenic Junctions in Germanium Formed by Millisecond Laser Annealing”. *Electrochemical and Solid-State Letters* 14.1 (2011), H39. DOI: [10.1149/1.3512990](https://doi.org/10.1149/1.3512990).



## § 4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Αναμφισβήτητα ο κλάδος της μικροηλεκτρονικής έχει αναπτυχθεί αλματωδώς τα τελευταία 20 χρόνια και ένα πολύ σημαντικό μερίδιο αυτής της επιτυχίας αναλογεί στην ανάπτυξη όλο και πιο εκλεπτυσμένων εργαλείων TCAD (Technology Computer Aided Design tools). Τα προγράμματα TCAD καλύπτουν όλο το φάσμα της κατασκευής μιας μικροηλεκτρονικής διάταξης από τον σχεδιασμό των μασκών λιθογραφίας, την προσομοίωση των βασικών διεργασιών εμπρόσθιας όψης (front end processes), οπίσθιας όψης (back end processes), τη μοντελοποίηση και αξιολόγηση των διατάξεων σε ηλεκτρικό επίπεδο (device simulation) όσο και τη μοντελοποίηση ολόκληρων κυκλωμάτων (προσομοιωτές τύπου SPICE). Η ευρεία αποδοχή των συστημάτων προσομοίωσης άλλαξε ριζικά το τοπίο του σχεδιασμού ολοκληρωμένων κυκλωμάτων καθιστώντας τη διαδικασία πιο προβλέψιμη και πιο επαναλήψιμη. Σε συνδυασμό με state-of-the-art τεχνολογία κατασκευής η απόδοση (yield) της βιομηχανίας ημιαγωγών ξεπερνάει πλέον το 90%. Αν και, προφανώς, ο κύριος στόχος των πιο εξελιγμένων εργαλείων TCAD είναι η βιομηχανία κατασκευής διατάξεων MOS δεν παύουν να είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο και στον χώρο της έρευνας. Εταιρείες που δραστηριοποιούνται στον χώρο της βιομηχανικής αγοράς TCAD είναι μεταξύ άλλων η Silvaco, Cadence, Synopsys, Crosslight και Cogenda

Ένα τέτοιο industry standard υπολογιστικό πακέτο TCAD είναι το Sentaurus της εταιρείας Synopsys το οποίο χρησιμοποιήθηκε και σε αυτή την εργασία. Αποτελεί μετεξέλιξη του λογισμικού TAURUS της ίδιας εταιρείας που και αυτό με τη σειρά του βασίζεται στον αλγόριθμο FLOOPS (Florida's Object Oriented Process Simulator) που αναπτύχθηκε από το πανεπιστήμιο της Florida στις αρχές της δεκαετίας του 1990 [1]. Το Sentaurus καλύπτει όλο το φάσμα των διαδικασιών που σχετίζονται με την κατασκευή μιας διάταξης CMOS από την εμφύτευση, τη λιθογραφία, τη διάχυση προσμίξεων (Sentaurus Process), την ηλεκτρική μοντελοποίηση διατάξεων (Sentaurus Device) μέχρι και την τελική συσκευασία (packaging) του ολοκληρωμένου κυκλώματος. Καθώς η έρευνα που αφορά αυτή την εργασία αφορά τη διάχυση και ενεργοποίηση προσμίξεων υπό καθεστώς ακτινοβολήσης laser εστίασαμε κυρίως στη χρήση του Sentaurus Process (SProcess για συντομία) στις δυνατότητες του οποίου περιλαμβάνονται μεταξύ άλλων:

- ▶ Προσομοίωση θερμικής απορρόφησης σε τρεις διαστάσεις ή δύο στην περίπτωση θέρμανσης με laser.
- ▶ Προσομοίωση διάχυσης η διαστατικότητα της οποίας εξαρτάται από τη παραπάνω θερμική απορρόφηση. Η προσομοίωση μπορεί να γίνει είτε με αριθμητική επίλυση των σχετικών διαφορικών εξισώσεων είτε με μεθόδους Monte Carlo.
- ▶ Προσομοίωση εμφύτευσης είτε με αναλυτικό τρόπο (τύπου Pearson IV) είτε μέσω μεθόδων Monte Carlo (Sentaurus MC ή Crystal-TRIM).
- ▶ Προσομοίωση οξείδωσης.
- ▶ Προσομοίωση επιταξιακής εναπόθεσης.
- ▶ Προσομοίωση ανάπτυξης μηχανικών τάσεων σε κάθε βήμα της διαδικασίας.
- ▶ Real time visualization σε κάθε βήμα της προσομοίωσης.

Η λειτουργία του SProcess είναι πλήρως προγραμματιζόμενη μέσω της γλώσσας Allegator που αποτελεί ένα υπερσύνολο της πολύ γνωστής γλώσσας προγραμματισμού Tcl (Tool Command Language). Η συντριπτική πλειοψηφία των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται από το SProcess σε κάθε βήμα της προσομοίωσης είναι παραμετροποιήσιμοι ενώ παρέχεται και η δυνατότητα εισαγωγής νέων διαφορικών εξισώσεων διάχυσης (προσμίξεων, ατελειών ή συμπλόκων), θερμότητας ή οξείδωσης προς επίλυση ανάλογα με τις ανάγκες του κάθε προβλήματος.

Πέρα από τους επιλυτές με τους οποίους είναι εξοπλισμένο, το SProcess διαθέτει και ένα σύνολο προηγμένων βιβλιοθηκών βαθμονόμησης των υπολογιστικών μοντέλων που χρησιμοποιούνται και λέγεται Sentaurus Advanced Calibration. Υπό ιδανικές συνθήκες η βελτιστοποίηση της προσομοίωσης μπορεί να γίνει τροφοδοτώντας το SProcess με πειραματικά υπολογισμένες παραμέτρους για κάθε πειραματική διαδικασία ξεχωριστά. Στην πραγματικότητα αυτό απαιτεί έναν εξαντλητικό αριθμό πειραμάτων που δεν είναι πάντα εφικτός. Αυτές οι βιβλιοθήκες ουσιαστικά αποτελούν προκαταρτισμένες λίστες με παραμέτρους και συνδυασμούς μοντέλων διάχυσης με τους οποίους τροφοδοτούνται οι επιλυτές του SProcess και βασίζονται σε πειραματικό feedback της Synopsys. Με κάθε νέα έκδοση του Sentaurus οι πίνακες του Advanced Calibration ανανεώνονται. Την περίοδο συγγραφής αυτής της διατριβής η τρέχουσα έκδοση είναι η “K-2015.06”. Σε οποιοδήποτε σημείο της παρούσας εργασίας γίνεται χρήση αυτών των βιβλιοθηκών θα αναφέρεται μαζί με την έκδοση που χρησιμοποιήθηκε. Αντίστοιχες βαθμονομήσεις μέσω βιβλιοθηκών Advanced Calibration παρέχονται και για

τις προσομοιώσεις με μεθόδους Monte Carlo όσο και για το τμήμα του προγράμματος που αφορά την ηλεκτρική προσομοίωση ολοκληρωμένων διατάξεων με το Sentaurus Device.

## § 4.2 ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΜΕ ΤΟ SPROCESS

### 4.2.1 Αναλυτική προσέγγιση

Η επίλυση ενός συνόλου πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων στο SProcess γίνεται με μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Το υπολογιστικό χωρίο χωρίζεται σε ένα εικονικό τριγωνικό πλέγμα σε όλες τις διαστάσεις προσομοίωσης με μια μέθοδο που λέγεται *τριγωνοποίηση Delaunay* (Delaunay triangulation) [2, 3]. Η μορφολογία αλλά και η πυκνότητα του πλέγματος παίζουν σημαντικό ρόλο στην ακρίβεια και αυτοσυνέπεια των αποτελεσμάτων. Καθώς η επίλυση του συστήματος των πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων γίνεται σε κάθε κόμβο του πλέγματος είναι προφανές ότι ένα αραιό πλέγμα δεν μπορεί να αποτυπώσει σωστά διεργασίες που έχουν κινήσεις μικρότερες από την απόσταση δύο κόμβων. Από την άλλα ένα εξαιρετικά πυκνό πλέγμα έχει τεράστιο υπολογιστικό κόστος καθώς οι κόμβοι για τους οποίους πρέπει να επιλυθούν οι σχετικές εξισώσεις υπερπολλαπλασιάζεται. Χρειάζεται, λοιπόν, μια ισορροπία ανάμεσα στην ακρίβεια που επιδιώκουμε και τον υπολογιστικό χρόνο που μπορούμε να διαθέσουμε. Η πυκνότητα του πλέγματος δεν είναι απαραίτητο να είναι σταθερή καθώς δεν έχει νόημα να επιδιώκουμε πολύ μεγάλη ακρίβεια σε περιοχές μακριά από την επιφάνεια του wafer όπου λαμβάνουν χώρα οι πιο πολλές διεργασίες. Συνεπώς το SProcess μας δίνει τη δυνατότητα να χρησιμοποιούμε μεταβλητή πύκνωση σε διάφορα σημεία του χωρίου ολοκλήρωσης αραιώνοντας ή πυκνώνοντας εκεί που κρίνουμε απαραίτητο. Σε όλες τις περιπτώσεις το πλέγμα επιλέχθηκε να έχει πυκνότητα 0.2 nm στα πρώτα 30 nm του υποστρώματος, 0.5 nm για τα υπόλοιπα 70 nm, 1.0 nm μέχρι το πρώτο 1 μm και μετά προοδευτικά 10 μm μέχρι το τέλος του wafer στα 500 μm. Μεγαλύτερες διαφοροποιήσεις στην πύκνωση του πλέγματος δεν είχαν κάποια ουσιαστική επίπτωση στα αποτελέσματα οπότε δεν διερευνήθηκε περισσότερο.

Σε κάθε κόμβο του υπολογιστικού χωρίου το SProcess λύνει τα εξής διαφορετικά συστήματα διαφορικών εξισώσεων: (α') εξίσωση διάχυσης θερμότητας· (β') εξίσωση απορρόφησης ακτινοβολίας στην περίπτωση θέρμανσης με laser· (γ') εξισώσεις διάχυσης ατελειών και προσμίξεων· (δ') εξίσωση ανακατανομής μηχανικών τάσεων και (ε') υπολογισμός κρυσταλλικής καταστροφής λόγω εμφύτευσης. Για την διακριτικοποίηση

ηση του χρόνου στις εξισώσεις που σχετίζονται με προσμίξεις και σημειακές ατέλειες χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Bank-Rose TRBDF [4], ενώ η χωρική ολοκλήρωση γίνεται μέσω πεπερασμένων στοιχείων. Η αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων γίνεται μέσω της μεθόδου Newton. Από κει και πέρα το SProcess ενσωματώνει τόσο άμεσους όσο και επαναληπτικούς επιλυτές λόγω του μεγάλου αριθμού διαφορικών εξισώσεων που πρέπει να επιλύονται σε κάθε κόμβο σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης. Για προσομοιώσεις μίας και δύο διαστάσεων ο προεπιλεγμένος επιλυτής είναι ο PARDISO (Parallel Direct Linear Solver) [5] ενώ για τρεις διαστάσεις χρησιμοποιείται ένας επιλυτής ILS (Iterative Linear Solver) ο οποίος έχει πολύ καλό scalability σε συστήματα με περισσότερους από έναν πυρήνες ή επεξεργαστές. Αν και, προφανώς, δεν θα υπάρχει διαφορά στα αποτελέσματα, υπάρχει σημαντική βελτίωση στον υπολογιστικό χρόνο που απαιτείται έναντι του επιλυτή PARDISO.

Όσον αφορά τις εμφυτεύσεις το SProcess αξιοποιεί τα μοντέλα Pearson IV και Double Pearson IV για τον υπολογισμό της κατανομής των προσμίξεων ενώ η καταστροφή που προκαλείται από τη διαδικασία βασίζεται στο μοντέλο που έχει προταθεί από τους Hobler και Selberherr [6]. Το μοντέλο αυτό ορίζει έναν συντελεστή που καθορίζει τον αριθμό των ατελειών που εισάγονται στο πλέγμα από κάθε ιόν που εμφυτεύεται. Η χωρική κατανομή των ιόντων υπολογίζεται με βάση προκαθορισμένες συναρτήσεις κατανομών που εξαρτώνται από τις ορμές των ιόντων του στοιχείου που εμφυτεύεται και οι οποίες με τη σειρά τους εξαρτώνται από το ιοντικό είδος, την ενέργεια εμφύτευσης και τη δόση εμφύτευσης. Τουλάχιστον για την περίπτωση του καλά μελετημένου πυριτίου αξιοποιούνται προϋπολογισμένοι πίνακες με δεδομένα όπως οι Dios [7], Advanced Calibration [8], Taurus [9] και Tasch [10]. Οι πίνακες αυτοί περιλαμβάνουν και την έκταση της καταστροφής που προκαλείται ανά ιόν πρόσμιξης. Για άλλα υλικά που είναι λιγότερο μελετημένα όπως το γερμάνιο οι πίνακες των ορμών δεν είναι εκτενώς υπολογισμένοι οπότε αναμένεται απόκλιση από τα πειραματικά αποτελέσματα. Σε αυτή την περίπτωση οι αλγόριθμοι Monte Carlo έχουν πιο αξιόπιστα αποτελέσματα για την προσομοίωση της κατανομής των εμφυτευμένων ιόντων (βλ. και επόμενη παράγραφο) με μειονέκτημα τον περιορισμό στην χωρική έκταση της κατανομής που μπορεί να εξαγάγει ο αλγόριθμος (μέχρι 10 μm σε κάθε διάσταση) όσο και την σημαντική αύξηση του υπολογιστικού χρόνου για όμοια χωρία προσομοίωσης.

Τέλος για την διάχυση και ενεργοποίηση των προσμίξεων όπως και το damage evolution μπορούν να αξιοποιηθούν τα μοντέλα της οικογένειας React ή Pair για τα οποία έγινε εκτενής συζήτηση στο προηγούμενο κεφάλαιο.

### 4.2.2 Προσέγγιση Kinetic Monte Carlo

Πέρα από την αναλυτική προσέγγιση των διεργασιών μια άλλη οικογένεια επιλυτών έχει αναπτυχθεί οι οποίοι βασίζονται σε μεθόδους τυχαίων αριθμών Monte Carlo μεθοδολογία η οποία ούτως ή άλλως χρησιμοποιείται εκτεταμένα στη μελέτη μεταβατικών ή μη γραμμικών φαινομένων. Το Sentaurus υλοποιεί τέτοιες μεθόδους με τη γενική ονομασία Kinetic Monte Carlo (KMC) των οποίων οι βασικές αρχές βασίζονται στον φορμαλισμό των τυχαίων περιπάτων [11] και αποτελεί μετεξέλιξη του προγράμματος DADOS (Diffusion of Atomistic Defects Object-oriented Simulator) [12]. Το Sentaurus μπορεί να χρησιμοποιήσει μέθοδο KMC είτε για την περιγραφή ολόκληρης της διεργασίας από την αρχή μέχρι το τέλος της (atomistic KMC) είτε κατά στάδια σε συνέργεια με τον αναλυτικό επιλυτή (non-atomistic KMC).

Σε αντίθεση με τους αναλυτικούς επιλυτές οι μέθοδοι KMC δεν λαμβάνουν υπόψιν την κρυσταλλική δομή του ημιαγωγού, αντ' αυτού μοντελοποιούν μόνο την κίνηση των προσμίξεων και των ατελειών δεδομένου ότι οι χαρακτηριστικοί χρόνοι κίνησης αυτών είναι πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτεροι από τις ταλαντώσεις του πλέγματος. Οι προσμίξεις κατά τη διάχυσή τους μπορεί να αλληλεπιδρούν με τις πλεγματικές ατέλειες παράγοντας με τη σειρά τους νέα σωματίδια. Για κάθε "γενιά" παραγόμενων σωματιδίων οι πιθανότητες αλληλεπίδρασης μειώνονται ώσπου τελικά το σωματίδιο σταματάει να κινείται και θεωρείται ενεργοποιημένο. Το χρονικό βήμα του υπολογισμού τροποποιείται ανάλογα με το ρυθμό διάλυσης των ατελειών και το μέγεθος του χαρακτηριστικού χρόνου της εκάστοτε διαδικασίας. Έτσι η προσομοίωση ξεκινά με βήμα της τάξης των  $10^{-9}$  s που είναι στην ίδια τάξη μεγέθους με τους χαρακτηριστικούς χρόνους κίνησης ατελειών και προσμίξεων και φτάνει μέχρι τα  $10^{-3}$  s που είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος διάχυσης και εκπομπής εκτεταμένων ατελειών.

Οι υπολογισμοί γίνονται σε ένα ψευδο-πλέγμα το οποίο κατασκευάζεται από τον ορισμό του πλέγματος όπως και στην αναλυτική προσέγγιση. Σε περίπτωση συνεργιστικής προσομοίωσης με αναλυτικές μεθόδους και KMC τα δεδομένα μεταφέρονται από το ένα πλέγμα στο άλλο με μια διαδικασία που καλείται atomization. Ο έλεγχος των διαστάσεων του πλέγματος είναι πολύ σημαντικός για την ισορροπία ανάμεσα στον χρόνο προσομοίωσης και την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων. Η επιλογή του μεγέθους του πλέγματος δεν είναι πάντα προφανής και εξαρτάται τελικά από την ποσότητα των προσμίξεων που έχουν εισαχθεί στο πλέγμα. Σε εμφυτεύσεις υψηλής δόσης μπορεί να υπάρχει ικανός αριθμός σωματιδίων για την προσομοίωση σε λίγες δεκάδες νανόμετρα υπολογιστικού χωρίου. Σε κάθε περίπτωση στο ψευδο-πλέγμα ο KMC αλγόριθ-

μος υπολογίζει την πιθανότητα αλληλεπίδρασης μεταξύ των συμμετεχόντων στοιχείων (ατέλειες και προσμίξεις) καθώς και την έκταση της αμορφοποίησης που εισάγεται από την εμφύτευση. Το ελάχιστο μέγεθος του κάθε κελιού του πλέγματος είναι  $0.8 \text{ nm}^3$  που είναι διπλάσιο του χαρακτηριστικού μήκους μετάβασης του εκάστοτε σωματιδίου.

Στην μέθοδο KMC ο αλγόριθμος επιλέγει πιθανά τυχαία γεγονότα, τα οποία μπορεί να περιλαμβάνουν την μετακίνηση μιας ατέλειας, τη μετακίνηση μιας πρόσμιξης, την εκπομπή εκτεταμένης ατέλειας, κλπ. ανάλογα με τις αντίστοιχες συχνότητες εμφάνισης του κάθε φαινομένου. Η διαδικασία επιλογής βασίζεται στον αλγόριθμο Bortz-Kalos-Liebowitz [13]. Η χρονική διακριτοποίηση του κάθε πραγματικού δευτερόλεπτου καθορίζεται από τον αριθμό των σωματιδίων και τη συχνότητα μετάβασής τους. Αν, για παράδειγμα, θεωρήσουμε τρεις διαφορετικές ατέλειες με συχνότητες μετάβασης 1000, 100 και  $10 \text{ s}^{-1}$  τότε η διακριτοποίηση του ενός δευτερόλεπτου θα γίνει σε 3210 τμήματα. Η επιλογή ενός τυχαίου αριθμού ανάμεσα στο 0 και 3209 καθορίζει ποια από τις τρεις ατέλειες τελικά θα αλληλεπιδράσει. Τα διαστήματα διακριτοποίησης σε κάθε δευτερόλεπτο της διαδικασίας μεταβάλλονται, προφανώς, όταν έχουμε τη δημιουργία ή διάλυση νέων ατελειών. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με μια καινούρια επιλογή αριθμού για τη νέα διακριτοποίηση που δημιουργήθηκε.

Ένα από τα κατεξοχήν πεδία εφαρμογής της μεθόδου KMC είναι για την μοντελοποίηση της ιοντικής εμφύτευσης. Αν και οι αναλυτικοί μέθοδοι εμφύτευσης είναι πιο γρήγοροι υπολογιστικά και μπορούν να εφαρμοστούν σε μεγαλύτερα υπολογιστικά χωρία η μέθοδος KMC είναι πιο αξιόπιστη σε περιπτώσεις που οι παράμετροι καταστροφής και εύρους των στοιχείων προς εμφύτευση ή του υποστρώματος δεν είναι πειραματικά υπολογισμένοι.

Στο SProcess η εμφύτευση KMC πραγματοποιείται θεωρώντας τα είδη προς εμφύτευση ως ψευδο-σωματιδίων. Το “ψεύδο-” αναφέρεται στο γεγονός ότι δεν είναι απαραίτητο οι προσμίξεις να παρέχονται σε ατομική μορφή καθώς μπορεί να αναπαριστούν μοριακά σύμπλοκα με την υπόθεση όμως ότι αυτά διαλύονται στα συστατικά τους όταν εισέρχονται στο υλικό. Τα ατομικά είδη, στη συνέχεια, αλληλεπιδρούν με το υλικό είτε αντιδρώντας με πλεγματικές ατέλειες ή προκαλώντας καταστροφή και αμορφοποίηση. Ο αριθμός των ατελειών που εισάγονται από ένα σκεδαζόμενο άτομο υπολογίζεται με βάση το μοντέλο Kinchin-Pease [14].

$$n(x) = x \frac{E_D}{2E_t} \quad (4.1)$$

όπου  $x$  μια ημι-εμπειρική παράμετρος,  $E_D$  η ενέργεια εναπόθεσης (δηλαδή στην ουσία



της εμφύτευσης) του σωματιδίου της πρόσμιξης και  $E_t$  μια ενέργεια κατωφλίου. Στο πυρίτιο οι προεπιλεγμένες τιμές που χρησιμοποιούνται είναι  $x = 0.8$  και  $E_t = 15$  keV. Παράλληλα υπάρχει και η δυνατότητα για full cascade simulation όπου ο προσομοιωτής καταγράφει όλες τις δευτερεύουσες συγκρούσεις των σωματιδίων του υποστρώματος που εξάγονται από άτομα της πρόσμιξης. Το άτομο του υποστρώματος εξαρθρώνεται από τη θέση του όταν απορροφά ενέργεια μεγαλύτερη από  $E_t$ . Τα ελεύθερα άτομα του υποστρώματος μπορούν με τη σειρά τους να εξαρθρώσουν άλλα άτομα του υποστρώματος, αφήνοντας πίσω τους πλεγματοειδή κενά. Όταν τα εξαρθρωμένα άτομα του υποστρώματος σταματήσουν να κινούνται σχηματίζουν ενδοπλεγματοειδή ατέλεια. Τέλος, λαμβάνεται υπόψιν το φαινόμενο του καναλισμού (channeling) αν και λόγω της συσσωρευόμενης καταστροφής τέτοια φαινόμενα μειώνονται λόγω τοπικής αμορφοποίησης του υποστρώματος. Αν η καταστροφή είναι πολύ εκτεταμένη, πάνω από ένα κατώφλι αμορφοποίησης, το υλικό θεωρείται άμορφο και η προσέγγιση είναι διαφορετική, αλλά αυτό είναι κάτι που δεν θα μας απασχολήσει σε αυτή τη δουλειά.

Μέσω KMC μπορεί να γίνει προσομοίωση και της διαδικασίας της διάχυσης και ενεργοποίησης των προσμιξέων. Σε αυτή την προσέγγιση κάθε μία από τις τοπικές ή εκτεταμένες ατέλειες (I, V, AI, AV, {311}, βρόγχοι εξάρμωσης, κλπ.) μπορεί να θεωρηθεί ως ένα σωματίδιο. Τα σύμπλοκα σωματιδίων με τις ατέλειες σχηματίζονται και διαλύονται με βάση τις συχνότητες μετάβασης όπως περιγράφηκαν παραπάνω. Σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης αυτά τα σύμπλοκα μπορεί είτε να διαχυθούν είτε να διασπαστούν. Στη δεύτερη περίπτωση τα συνιστάμενα άτομα των συμπλόκων μπορούν να πραγματοποιήσουν νέα σύμπλοκα ή να ακινητοποιηθούν. Αν η ακινητοποίηση της πρόσμιξης είναι σε θέση αντικατάστασης τότε η πρόσμιξη θεωρείται ηλεκτρικά ενεργή ενώ παράλληλα αντίστοιχη θεώρηση ισχύει και για τις φορτισμένες ατέλειες.

Τέλος, η καταστροφή του υποστρώματος στην KMC προσέγγιση μοντελοποιείται με βάση του αμορφοποιημένους θύλακες (amorphous pockets) οι οποίοι, ουσιαστικά, είναι συσσωματώματα σημειακών ατελειών που εισήχθησαν κατά την εμφύτευση και αποτελούνται από ζεύγη ενδοπλεγματοειδών ατόμων και πλεγματοειδών κενών (IV) ή μεμονωμένων ενδοπλεγματοειδών ατόμων (I) και πλεγματοειδών κενών (V). Στους θύλακες που αποτελούνται από IV γίνεται επανασύνδεση των δύο με τη θέρμανση. Στην περίπτωση μεμονωμένων I ή V θυλάκων αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί στη διάλυσή τους μέσω εκπομπής σημειακών ατελειών ή ενδοπλεγματοειδών κενών. Το μέγεθος των ατελειών αυξάνεται με την ενσωμάτωση νέων ατελειών μέχρι ενός ορίου μετά το οποίο μετατρέπονται σε εκτεταμένες ατέλειες τύπου {311}. Η ακτίνα πρόσληψης μιας ατέ-

λειας από έναν θύλακα ορίζεται ως το άθροισμα των συστατικών του. Η κύρια αλληλεπίδραση των προσμίξεων με τους θύλακες αμορφοποίησης είναι η



Στην πρώτη περίπτωση σημειακή ατέλεια που είναι κομμάτι του θύλακα αποκολλάται και φτάνει σε θέση αντικατάστασης ενώ στη δεύτερη γίνεται πρόσληψη της ατέλειας από την πρόσμιξη σχηματίζοντας με αυτόν τον τρόπο συσσωματώματα προσμίξεων.

### § 4.3 Η ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΤΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

Το SProcess είναι κομμάτι μιας πολύ εκτεταμένης σουίτας λογισμικού της οποίας τα συνιστάμενα προγράμματα είναι φτιαγμένα για να συνεργάζονται μεταξύ τους σε μια συνεχιζόμενη αλυσίδα προσομοίωσης. Για παράδειγμα μπορεί κανείς να ξεκινήσει την προσομοίωση της εμφύτευσης, εναπόθεσης, ανόπτησης και διάχυσης με το SProcess και να “τροφοδοτήσει” το αποτέλεσμα αυτής της προσομοίωσης στο Sentaurus Device (sdevice) για μελέτη των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών, παρακολουθώντας παράλληλα την εξέλιξη της διαδικασίας με real time visualization μέσω του προγράμματος svisual. Στην πραγματικότητα ακόμα και αυτά τα τρία στοιχειώδη προγράμματα, sprocess, sdevice, svisual αποτελούν frontends για ένα άλλο σύνολο υποπρογραμμάτων που χρησιμοποιούνται για τον κατακερματισμό του πλέγματος, για την διαδικασία του atomizing και deatomizing για την μετατροπή συνεχών πλεγμάτων σε πλέγματα KMC, για διάχυση KMC κλπ. Όταν απαιτείται η χρήση όλων αυτών των προγραμμάτων για μία διαδικασία TCAD η “ενορχήστρωση” της διαδικασίας μπορεί να γίνει μέσω ενός κεντρικού προγράμματος διαχείρισης, του Sentaurus Workbench (swb). Στην περίπτωση την δική μας, ωστόσο, καθώς προσανατολιζόμαστε κυρίως στην χρήση του SProcess και μόνο θα καταστρώσουμε το input που χρειάζεται ο προσομοιωτής γράφοντας απευθείας scripts στη γλώσσα Tcl με τα οποία θα τρέξουμε το SProcess. Ένα απλό τέτοιο πρόγραμμα για μια διαδικασία οξείδωσης, για παράδειγμα, είναι το εξής

---

```

1 line x location= 0.0      spacing= 1.0<nm> tag=SiTop
2 line x location= 50.0<nm> spacing= 1.0<nm>
3 line x location=500.0<nm> spacing=10.0<nm>
4 line x location= 2.0<um> spacing=20.0<nm>
5 line x location= 15.0<um> spacing= 1.0<um>
6 line x location=500.0<um> spacing=10.0<um> tag=SiBottom

```

```

7
8 line y location= 0.0      spacing= 0.1<um> tag=SiLeft
9 line y location= 10.0<um> spacing= 0.1<um> tag=SiRight
10
11 region substrate xlo=SiTop xhi=SiBottom \
12   ylo=SiLeft yhi=SiRight Silicon
13
14 init concentration=1e15 field=phosphorus wafer.orient=100
15
16 implant Boron energy=10 dose=1e15 tilt=7<degree>
17
18 gas_flow name=021 pressure=1<atm> flow02=0.7<l/min>
19
20 diffuse temp=900<C> time=30<min> gas.flow=021
21
22 struct tdr=OxideGrowth
23
24 SetPlxList { 02 }
25 WritePlx oxidant.dat x=5.0<um>

```

Μπορούμε να τρέξουμε την παραπάνω ρουτίνα προσομοίωσης καλώντας την μέσω του sprocess στο shell της διανομής Linux στην οποία τρέχει το software

```
> sprocess oxidation.tcl
```

Η ρουτίνα περιέχει όλη την πληροφορία που χρειάζεται το πρόγραμμα για να προσομοιώσει τη διαδικασία της οξείδωσης στην πιο απλή μορφή του. Στις γραμμές 1 έως 9 ορίζεται το πλέγμα της προσομοίωσης. Στις γραμμές 1–4 ορίζεται η κατακόρυφη διεύθυνση. Συγκεκριμένα για τα πρώτα 50 nm ορίζουμε ένα πλέγμα με σταθερή πύκνωση 1 nm, ενώ για να μπορούμε να αναφερθούμε στο άνω μέρος του πλέγματος στο υπόλοιπο πρόγραμμα σημαίνουμε την πρώτη γραμμή με την ετικέτα (tag) SiTop. Από τα 50 έως τα 500 nm ορίζουμε μια μεταβλητή πύκνωση που ξεκινάει από το 1 nm με το οποίο τέλειωσε ο προηγούμενος ορισμός και καταλήγει τελικά σε πύκνωση 10 nm. Το SProcess θα αραιώσει το πλέγμα ομοιόμορφα σε αυτή την περιοχή. Στη συνέχεια αραιώνουμε ακόμα περισσότερο το πλέγμα μέχρι το τελικό πάχος του δείγματος που είναι τα 500 nm (τυπικό πάχος ενός δισκίου 4 ιντσών). Η περισσότερη πληροφορία

που μας ενδιαφέρει, άλλωστε, είναι στα πρώτα 1 με 2  $\mu\text{m}$ . Επίσης στο τέλος βάζουμε ένα tag αντίστοιχο με το πρώτο, το SiBottom, ώστε να μπορέσουμε να ανακαλέσουμε αυτή τη θέση στη συνέχεια. Στις γραμμές 8 και 9 γίνεται η ίδια διαδικασία και για την άλλη διάσταση, διατηρώντας ένα πλέγμα σταθερής πύκνωσης 100 nm.

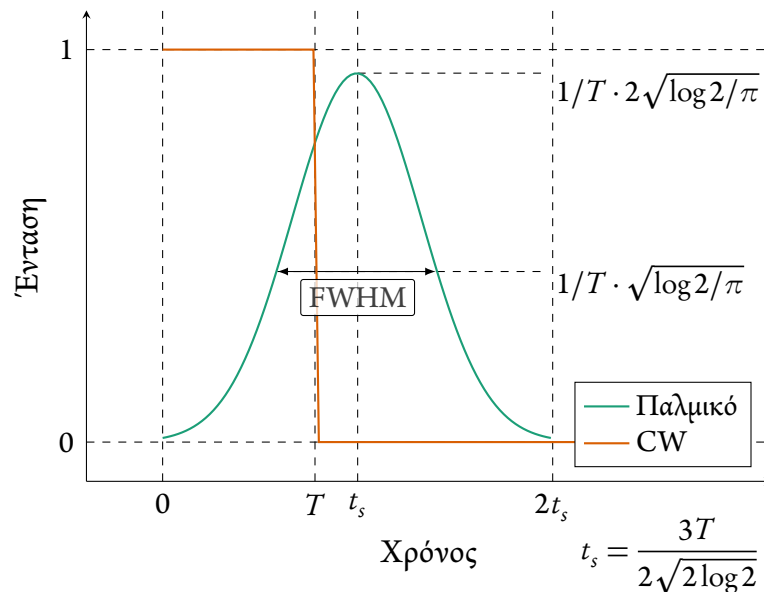
Στις γραμμές 11 και 12 γίνεται ορισμός του υποστρώματος μέσω των τεσσάρων tags που ορίστηκαν παραπάνω και ορίζεται το υλικό του υποστρώματος ως πυρίτιο. Στη γραμμή 14 αρχικοποιείται το υπόστρωμα με ένα σταθερό background προσμίξεων και η ύπαρξη του φωσφόρου ορίζει την background νόθευση ως τύπου n. Παράλληλα ορίζεται και ο προσανατολισμός του wafer. Στη γραμμή 16 γίνεται μια εμφύτευση με βόριο ενέργειας 10 keV και δόσης  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Αν θέλαμε να χρησιμοποιήσουμε άλλες μονάδες θα μπορούσαμε να το κάνουμε εσωκλείοντάς τες μέσα σε  $\langle \rangle$  αμέσως μετά τον αριθμό, πχ.  $200 \langle \text{eV} \rangle$ . Η γραμμή 18 ορίζει τη ροή και την πίεση του οξυγόνου συνθήκες οι οποίες αποθηκεύονται με το όνομα 021 ενώ στη γραμμή 20 γίνεται η διαδικασία της διάχυσης, ορίζοντας τη θερμοκρασία και τον χρόνο. Αν υπάρχει το επιπλέον όρισμα gas.flow τότε η διάχυση γίνεται σε συνθήκες που έχουν οριστεί μέσω του gas.flow, διαφορετικά πραγματοποιείται μόνο η διεργασία της ανόπτησης. Στη γραμμή 22 αποθηκεύεται ολόκληρη η δομή του ημιαγωγού που χρησιμοποιήθηκε. Η πιο συνηθισμένη μορφή αρχείου που χρησιμοποιεί όλη η σουίτα του Sentaurus είναι το TDR το οποίο είναι ουσιαστικά μια υλοποίηση του file format HDF5 (Hierarchical Data Format version 5) που χρησιμοποιείται κατά κόρον από επιστημονικά προγράμματα για την αποδοτική αποθήκευση μεγάλης ποσότητας δεδομένων σε μία ιεραρχική μορφή με απλό τρόπο αναπαράστασης. Τα αρχεία tdr που εξάγει το SProcess μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν αρχεία εισόδου από τα υπόλοιπα προγράμματα του Sentaurus και περιέχουν ολόκληρη την πληροφορία για την αναπαραγωγή της τρέχουσας κατάστασης της προσομοίωσης. Παράλληλα με τη χρήση του WritePlx μπορούμε να εξάγουμε ένα προφίλ των επιλεγμένων στοιχείων ή μεταβλητών που ορίζονται με το SetPlxList κατά μήκος μιας cutline που ορίζεται με τη μεταβλητή στο όρισμα του WritePlx. Η cutline μπορεί να γίνει σε οποιαδήποτε από τις τρεις διαστάσεις του χωρίου προσομοίωσης με χρήση των x=, y=, z= ή συνδυασμού αυτών.

Το παράδειγμα που περιγράφηκε πιο πάνω φαίνεται αρκετά απλό αν αναλογιστεί κανείς την πολυπλοκότητα των φαινομένων που περιγράφει. Παρ' όλα αυτά, σε ένα ρεαλιστικό σενάριο προσομοίωσης υπάρχουν πολλοί ακόμα παράμετροι που πρέπει να ληφθούν υπόψιν. Στη δική μας περίπτωση έχουμε να αντιμετωπίσουμε ένα σύνολο από προβλήματα που άπτονται τόσο της εμφύτευσης με πλάσμα όσο και της περιγραφής της ακτινοβολήσης. Αρχικά, στο θέμα της εμφύτευσης, στην περίπτωση του πυριτίου η εμ-

φύτευση πλάσματος που χρησιμοποιήθηκε δεν μπορεί να προσομοιωθεί άμεσα από το SProcess καθώς οι τρέχουσες εκδόσεις έχουν περιορισμένη υποστήριξη για εμφύτευση πλάσματος,  $\text{BF}$  και  $\text{BF}_2$  αντί του  $\text{BF}_3$  που χρησιμοποιήθηκε για τα δείγματα πυριτίου. Για να προσαρμόσουμε την εμφύτευση στα πειραματικά αποτελέσματα θα κατακερματίσουμε την εμφύτευση PIII που χρησιμοποιήθηκε σε επιμέρους βήματα εμφύτευσης πλάσματος  $\text{BF}_2$  ούτως ώστε να έχουμε την καλύτερη δυνατή αναπαράσταση του προφίλ βορίου που λαμβάνουμε από τα SIMS. Στην περίπτωση του γερμανίου, η εμφύτευση δεν μπορεί να περιγραφεί με αναλυτικό τρόπο καθώς οι damage tables για τον φώσφορο στο γερμάνιο δεν είναι υπολογισμένοι. Ως εκ τούτου για να έχουμε την καλύτερη δυνατή αναπαράσταση του προφίλ φωσφόρου θα καταφύγουμε στη χρήση της εμφύτευσης KMC.

Όσον αφορά την ανόπτηση τα πράγματα περιπλέκονται ακόμα περισσότερο. Παρά το γεγονός ότι το SProcess έχει υποστήριξη για ανόπτηση με μεθόδους laser αυτή προσανατολίζεται κατά κύριο λόγο σε παλμικά laser καθεστώτος nanosecond με σταθερό συντελεστή απορρόφησης. Αυτή η υπόθεση μπορεί να περιγράψει πολύ καλά τη θέρμανση με ένα laser υπεριώδους όπως τα excimer ωστόσο ο τρόπος λειτουργίας αυτών των laser είναι ριζικά διαφορετικός από την περίπτωση του  $\text{CO}_2$  laser που έχουμε στη διάθεσή μας, τόσο σε επίπεδο οπτικής απορρόφησης όσο και σε επίπεδο χρονικής και χωρικής διαμόρφωσης της δέσμης. Συγκεκριμένα η απορρόφηση στην περίπτωση του βαθέος υπερύθρου εξαρτάται πολύ έντονα εκτός από τη θερμοκρασία και από το επίπεδο των προσμίξεων. Οι ελεύθεροι φορείς είναι αυτοί που κατά κύριο λόγο καθοδηγούν τη διαδικασία της απορρόφησης καθώς η ενέργεια των φωτονίων είναι πολύ μικρή για να προκαλέσει άμεσες μεταβάσεις. Ως εκ τούτου η έκφραση του συντελεστή απορρόφησης που χρησιμοποιεί το SProcess πρέπει να τροποποιηθεί ούτως ώστε να αντικατοπτρίζει την πραγματικότητα.

Για την χωρική διαμόρφωση του παλμού laser στην προεπιλεγμένη περίπτωση το SProcess θεωρεί ότι η χωρική/χρονική κατανομή του παλμού είναι σταθερή (top-hat) όσον αφορά την ισχύ και γκαουσιανή όσον αφορά τη χρονική εξέλιξη. Αυτό ισχύει γενικά για τα παλμικά laser των οποίων η δέσμη περνάει μέσα από ομογενοποιητή, όχι όμως για την περίπτωση του  $\text{CO}_2$  που μελετάμε. Σε αυτή την περίπτωση το προφίλ ακτινοβολίας είναι γκαουσιανό αλλά δεν υπάρχει εξάρτηση από το χρόνο. Στο γράφημα 4.1 μπορούμε να δούμε ότι στο παλμικό laser η μέγιστη επιτεύξιμη ισχύς εξαρτάται από τη διάρκεια του παλμού,  $T$ , και η διάρκεια λειτουργίας του laser είναι περίπου 3 φορές η ονομαστική διάρκεια του παλμού. Εν αντιθέσει το laser σταθερής ισχύος αποδίδει 100% της ισχύος στην αρχή της ακτινοβολήσης και 0 στο τέλος του παλμού. Η



**Σχήμα 4.1:** Σύγκριση της χρονικής εξέλιξης ενός παλμού από laser συνεχούς ισχύος και ένα παλμικό για ίδια ονομαστική μέγιστη ισχύ (κανονικοποιημένη στη μονάδα) και διάρκεια παλμού,  $T$ .

σημαντική διαφορά στην χρονική εξάρτηση της έντασης ακτινοβολήσης (heat intensity profile) πρέπει να εκφραστεί στο πρόγραμμα ούτως ώστε να αντικατοπτρίζει την πραγματικότητα. Αντίστοιχη τροποποίηση πρέπει να γίνει και στην χωρική εξάρτηση της έντασης ώστε να αποδίδει σωστά το γκαουσιανό σχήμα της, όπως αναφερθήκαμε και στο τέλος του δεύτερου κεφαλαίου.

## § 4.4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΕΜΦΥΤΕΥΣΗΣ

### 4.4.1 Εμφύτευση πλάσματος βορίου στο πυρίτιο

Πρώτο βήμα στη διαδικασία της μοντελοποίησης που ακολουθήθηκε είναι η ορθή απεικόνιση της διαδικασίας της εμφύτευσης που χρησιμοποιήθηκε. Στην περίπτωση του πυριτίου τα δείγματα είχαν εμφυτευθεί με τη μέθοδο Plasma Immersion Ion Implantation η οποία είναι μία συνήθης μέθοδος εμφύτευσης πλάσματος που χρησιμοποιείται για τον σχηματισμό ρηχών επαφών στο πυρίτιο. Μια παρουσίαση της μεθόδου εμφύτευσης με πλάσμα έγινε στην παράγραφο 1.4.3. Προτού γίνει επιλογή των συνθηκών εμφύτευσης για τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν έγινε μια προκαταρκτική μελέτη μέσω του SProcess και της μεθόδου που περιγράφεται από τους Walther κ.ά. [15]. Σε αυτή την εργασία οι Walther κ.ά. επιχείρησαν να αναλύσουν εμφύτευση πλάσματος

Ενέργεια [eV]	Δόση [%]	Ενέργεια [eV]	Δόση [ $\times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ]
450	2.6	540	0.26
350	1.95	420	0.20
250	1.87	300	0.19
150	10.1	180	1.01
100	40.66	120	4.07
80	19.29	96	1.93
50	16.62	60	1.67
20	6.83	24	0.68

(α) Ανάλυση εμφύτευσης πλάσματος  $\text{BF}_3$  σε ιοντικές εμφυτεύσεις βορίου κατά Walther κ.ά.

(β) Αναγωγή σε 600 eV και δόση  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .

**Πίνακας 4.1:** Ανάλυση της εμφύτευσης  $\text{BF}_3$  που χρησιμοποιήθηκε από τους Walther κ.ά. [15] και αναγωγή στην περίπτωση της εμφύτευσης που χρησιμοποιήθηκε στα δικά μας πειράματα.

$\text{BF}_3$  σε συνήθεις ιοντικές εμφυτεύσεις γνωστής δόσης. Με τη χρήση ενός φασματογράφου μάζας ανέλυσαν τα ιόντα που εισήχθησαν στο πυρίτιο με την ιοντική εμφύτευση ανάλογα με το είδος και την ενέργειά τους για μια δεδομένη ονομαστική δόση και ενέργεια εμφύτευσης. Με αυτό τον τρόπο μπορεί να κατακερματιστεί η συνολική δόση της εμφύτευσης σε επιμέρους κανονικές ιοντικές εμφυτεύσεις διαφορετικής ενέργειας. Για την περίπτωση των 500 eV που χρησιμοποίησαν ανέλυσαν την εμφύτευση σε οκτώ ιοντικές εμφυτεύσεις κάθε μία από τις οποίες είχε το ποσοστό της συνολικής ονομαστικής δόσης όπως περιγράφεται στον πίνακα 4.1. Με βάση αυτή την ανακατανομή των δόσεων επέτυχαν πολύ καλή συμφωνία ανάμεσα στις δύο κατανομές βορίου.

Χρησιμοποιώντας, λοιπόν, την προσέγγιση των Walther κ.ά. πραγματοποιήσαμε προκαταρκτικές προσομοιώσεις με χρήση του SProcess ούτως ώστε να έχουμε μια εκτίμηση του βάθους μέγιστης συγκέντρωσης καθώς και του βάθους επαφής. Ο στόχος μας ήταν η εμφύτευση ενέργειας 600 eV και δόσης  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Έτσι κάνοντας αναγωγή στις τιμές που χρησιμοποίησαν οι Walther κ.ά. μπορούμε να εξάγουμε τις τιμές που αντιστοιχούν στην δική μας περίπτωση (πίνακας 4.1β'). Η σύγκριση έγινε ανάμεσα στη μέθοδο KMC και την συνεχή προσέγγιση, χρησιμοποιώντας είτε βόριο ως στοιχείο εμφύτευσης (BoIon) ή  $\text{BF}_2$  το οποίο είναι πιο κοντά και στην πραγματικότητα ( $\text{BF}_2$ ) καθώς έχει παραπλήσιο ατομικό βάρος άρα και θα έχει πιο προβλέψιμη εμβέλεια καθώς το βόριο, μετά τη διάσπαση του  $\text{BF}_3$ , κινείται στον ημιαγωγό. Παράλληλα έγινε

και μια επισκόπηση της χρήσης της βιβλιοθήκης Advanced Calibration. Η ρουτίνα προσομοίωσης μπορεί να τροποποιηθεί κατάλληλα ανάλογα με την περίπτωση που μελετάμε και είναι η εξής

---

```

1  set doKMC 1
2  AdvancedCalibration Off
3  set ndose 1.0e15
4  set doseconv 0.55
5  set ener 0.600
6  set species "Boron"
7  set partcl 1000
8
9  line x location=0 spacing=0.5<nm> tag=SiTop
10 line x location=50<nm> spacing=0.5<nm>
11 if { $doKMC == 0 } {
12   line x location=500<nm> spacing=0.75<nm>
13   line x location=2.0<um> spacing=1<nm>
14   line x location=10<um> spacing=20<nm>
15   line x location=100<um> spacing=2<um>
16   line x location=500<um> spacing=10<um> tag=SiBottom
17 } else {
18   line x location=75<nm> spacing=0.75<nm>
19   line x location=100<nm> spacing=1<nm>
20   line x location=500<nm> spacing=5<nm>
21   line x location=1000<nm> spacing=10<nm>
22   line x location=1.25<um> spacing=25<nm> tag=SiBottom
23 }
24 line y location=0 spacing=0.5<um> tag=Left
25 line y location=5<um> spacing=0.5<um> tag=Right
26
27 region substrate xlo=SiTop xhi=SiBottom ylo=Left yhi=Right Silicon
28 init concentration=1e15 field=Phosphorus wafer.orient=100
29
30 # calculate real dose

```



```

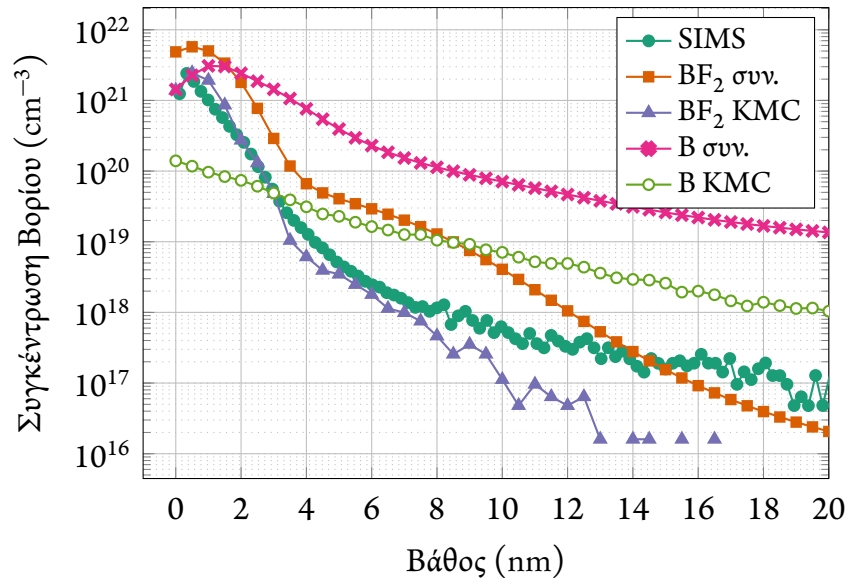
31 set rdose [expr $doseconv*$ndose]
32
33 # normalisation factor based on 500eV implantation by Walther
34 set norm [expr $ener/0.500]
35
36 # Energies per Walther et. al
37 set energies [list 0.4500 0.1500 0.1000 0.0200 \
38                 0.3500 0.0500 0.2500 0.0800]
39 set doses [list 0.0260 0.1010 0.4066 0.0683 \
40              0.0195 0.1662 0.0187 0.1929]
41
42 if { $doKMC == 1 } { SetAtomistic }
43
44 for { set i 0 } { $i < [llength $energies] } { incr i } {
45     set curen [lindex $energies $i]
46     set curdose [lindex $doses $i]
47     if { $doKMC == 1 } {
48         implant $species energy=[expr $norm*$curen]<keV> \
49             dose=[expr $rdose*$curdose]<cm-2> tilt=0<degree> \
50             particles=$partcl
51     } else {
52         implant $species energy=[expr $norm*$curen]<keV> \
53             dose=[expr $rdose*$curdose]<cm-2> tilt=0<degree> \
54             particles=$partcl
55     }
56 }
57
58 if { $doKMC == 1 } { UnsetAtomistic }
59 SetPlxList { Boron }
60 if { $doKMC == 1 } {
61     WritePlx "${species}_${ndose}_${ener}_KMC"
62 } else {
63     WritePlx "${species}_${ndose}_${ener}"
64 }

```

---

Τροποποιώντας τις μεταβλητές που έχουν οριστεί στις πρώτες 7 γραμμές του κώδικα μπορούμε να ρυθμίσουμε τη χρήση ή όχι KMC, τη χρησιμοποίηση ή όχι Advanced Calibration κλπ. Οι μεταβλητές \$ndose και \$ener καθορίζουν τις συνθήκες της εμφύτευσης, ενώ η μεταβλητή \$partc1 είναι ο αριθμός των σωματιδίων που χρησιμοποιούνται στην εμφύτευση KMC. Η επιλογή του στοιχείου της εμφύτευσης γίνεται αλλάζοντας τη μεταβλητή \$species μεταξύ "Boron" και "BF2". Η μεταβλητή \$doseconν είναι ο παράγοντας διόρθωσης της ονομαστικής δόσης. Σε επικοινωνία με την εταιρεία Ion Beam Services που πραγματοποίησε τελικά τις εμφυτεύσεις ενημερωθήκαμε ότι η πραγματική δόση η οποία τελικά εμφυτεύεται είναι περίπου το 55% της ονομαστικής, οπότε είναι μία παράμετρος που πρέπει να ληφθεί υπόψιν. Από κει και πέρα ο αλγόριθμος τροποποιεί το πλέγμα στην περίπτωση συνεχούς ή KMC προσέγγισης και πραγματοποιεί τις εμφυτεύσεις εξάγοντας μια σχέση αναλογίας ανάμεσα στις τιμές του πίνακα 4.1α' και της τρέχουσας δόσης και ενέργειας. Στο τέλος αποθηκεύει την κατανομή του βορίου που μας ενδιαφέρει. Δεν έγινε κάποια συγκεκριμένη μελέτη ως προς την πυκνότητα του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε καθώς από την ανάλυση των αποτελεσμάτων δεν παρατηρήθηκε κάποια αλλαγή στις μηχανικές τάσεις που αναπτύσσονται σε καμία περίπτωση εμφύτευσης, οπότε δεν αναμένουμε κάποια επίδραση της πυκνότητας του πλέγματος στα αποτελέσματα. Προφανώς, βέβαια, το πλέγμα πρέπει να είναι αρκετά πυκνό στα πρώτα 20 nm του χωρίου προσομοίωσης ούτως ώστε να μην έχουμε απώλεια πληροφορίας. Κάτω από το 0.5 nm, το οποίο και τελικά χρησιμοποιήθηκε, δεν υπήρχε καμία διαφοροποίηση.

Στο γράφημα 4.2 μπορούμε να δούμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με τις 4 διαφορετικές στρατηγικές σε σύγκριση με τα αποτελέσματα μετρήσεων SIMS που έγιναν αργότερα για τα δείγματα πυριτίου. Εστιάζουμε στα πρώτα 20 nm μετά τα οποία ούτως ή άλλως η συγκέντρωση του βορίου είναι ήδη μικρότερη  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  ώστε να έχει κάποιο ενδιαφέρον. Δεν έχουμε συμπεριλάβει στο γράφημα αποτελέσματα με τη χρήση Advanced Calibration καθώς οι διαφορές τους ήταν εξαιρετικά μικρές. Ταυτόσημα ήταν τα αποτελέσματα ανάμεσα και σε διαφορετικές εκδόσεις του Advanced Calibration (δοκιμάστηκαν οι 2008.09, 2010.12 και 2014.09). Με βάση αυτά τα αποτελέσματα μπορούμε να δούμε ότι η ταύτιση της ανάλυσης σε συνδυασμό με τη χρήση  $\text{BF}_2$  και KMC μας έδωσε αξιόπιστα αποτελέσματα τόσο για τη μέγιστη τιμή του προφίλ βορίου όσο και για τη θέση την οποία εμφανίζεται. Παράλληλα η απόκλιση του βάθους επαφής (στα  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) είναι μικρότερη από 1 nm (7.0 έναντι 7.5 nm που ήταν το αποτέλεσμα του SIMS). Και η συνεχής προσέγγιση έδωσε φυσιολογικές τιμές για την μέγιστη συγκέντρωση και το βάθος που εμφανίζεται αν και σε αυτή την περίπτωση υπάρχει μια καθολική μετακίνηση του προφίλ προς τα μέσα ενώ παράλληλα

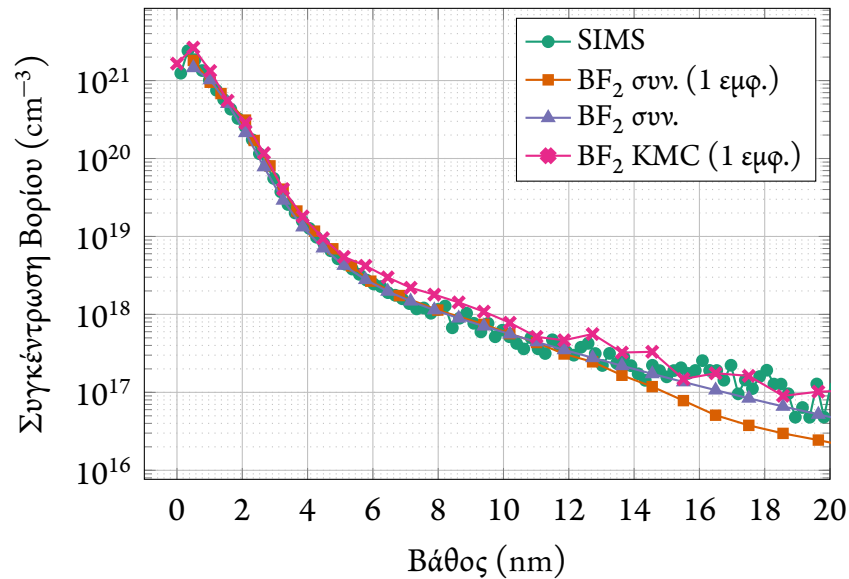


**Σχήμα 4.2:** Σύγκριση των διάφορων προσεγγίσεων κατά Walther κ.ά. [15] για την εκτίμηση του προφίλ βορίου.

είναι εξαιρετικά έντονο το “γόνατο” στα περίπου 4 nm κάτι το οποίο δεν εμφανίζεται στις μετρήσεις SIMS. Οι προσομοιώσεις που έγιναν με χρήση βορίου ως στοιχείο εμφύτευσης αποτυγχάνουν πλήρως στην απόδοση του προφίλ εμφανίζοντας έντονο channeling κάτι το οποίο συνηθίζεται στο βόριο όμως όχι στο BF<sub>2</sub>/BF<sub>3</sub>. Ως εκ τούτου δεν μπορεί να θεωρηθεί ως αξιόπιστη προσέγγιση τόσο στη συνεχή της μορφή όσο και στην KMC.

Αν και η προσέγγιση που παρουσιάσαμε, όπως τελικά αποδείχθηκε, ήταν εξαιρετικά χρήσιμο εργαλείο για την αρχική εκτίμηση του προφίλ του βορίου ώστε να μας βοηθήσει στην εκλογή δόσεων και ενεργειών εμφύτευσης, υπάρχει μια σημαντική απόκλιση στην “ουρά” της κατανομής σε σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα ακόμα και στο καλύτερο σενάριο προσομοίωσης κάτι το οποίο είναι φυσιολογικό αν αναλογιστούμε τις σημαντικές διαφορές που έχει η διεργασία της ιοντικής εμφύτευσης σε σύγκριση με την εμφύτευση πλάσματος. Παρά το γεγονός ότι δοκιμάστηκαν αρκετές μέθοδοι προσαρμογής της καμπύλης προσομοίωσης ως προς την πειραματική, όπως για παράδειγμα ο ορισμός ενός σταδιακού παράγοντα επανακλιμάκωσης για τις δόσεις σε καμία περίπτωση δεν καταφέραμε να ταυτίσουμε την “ουρά” της καμπύλης που προσομοιώθηκε με την πειραματική.

Η λύση σε αυτό το πρόβλημα ήρθε με τις νεότερες εκδόσεις του SProcess στο οποίο περιλαμβάνονταν πλέον εξειδικευμένοι αλγόριθμοι για plasma doping που προσομοιώνουν πολύ καλύτερα της συνθήκες που επικρατούν στους σύγχρονους εμφυτευτές πλά-



**Σχήμα 4.3:** Προσέγγιση της εμφύτευσης πλάσματος  $\text{BF}_3$  με χρήση των αλγορίθμων για plasma doping στις εκδόσεις 2012.06 ή νεότερες.

σματος. Ακόμα βέβαια δεν υπάρχει υποστήριξη για πλάσμα που περιέχει ιόντα  $\text{BF}_3$  με το  $\text{BF}_2$  να παραμένει το βαρύτερο σύμπλοκο του βορίου που είναι διαθέσιμο για εμφύτευση, ωστόσο όπως θα δούμε η ποιότητα των αποτελεσμάτων βελτιώνεται αν κατακερματίσουμε την εμφύτευση σε λίγες εμφυτεύσεις πλάσματος  $\text{BF}_2$ . Για να χρησιμοποιήσουμε την προσομοίωση πλάσματος αρκεί να εισάγουμε το όρισμα `plasma.source` στη θέση του `$species` στην εντολή `implant` της ρουτίνας προσομοίωσης (στις γραμμές 48 και 52 του προγράμματος). Το όρισμα ακολουθείται από την αναλογία των στοιχείων του πλάσματος. Εμείς χρησιμοποιήσαμε την απλούστερη περίπτωση που το πλάσμα αποτελούταν μόνο από  $\text{BF}_2$  (`{BF2=1}`). Δοκιμές σε διάφορες αναλογίες έγιναν και με τα άλλα είδη του βορίου που είναι διαθέσιμα (`BF` και `Boron`) αλλά δεν παρατηρήθηκαν ουσιαστικές διαφορές. Όλα τα είδη του βορίου παρουσιάζουν μια μικρή απόκλιση από τις μετρήσεις SIMS στην ουρά της “προσομοίωσης” κάτι το οποίο οφείλεται στη διαφοροποίηση που έχουν με το  $\text{BF}_3$  αλλά η κατάσταση είναι πολύ καλύτερη σε σχέση με την προηγούμενη απόπειρα. Για να αντιμετωπιστεί, ωστόσο, αυτή η μικρή διαφορά μειώθηκε η πραγματική δόση της βασικής εμφύτευσης ( $600 \text{ eV}$  και  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ) κατά 0.5% και αντικαταστάθηκε από τρεις ίσης δόσης ( $0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) εμφυτεύσεις ενέργειας 6, 9 και 11 keV. Με αυτή τη μικρή διαφοροποίηση στις εμφυτεύσεις είχαμε εξαιρετικά πιστή αναπαραγωγή όλης της καμπύλης SIMS όπως μπορεί να φανεί και στο γράφημα 4.3. Από την άλλη η εμφύτευση KMC αποδίδει πιο σωστά την “ουρά”

της καμπύλης αλλά έχει μια υπερεκτίμηση στο βάθος επαφής. Όπως και να χει ο KMC αλγόριθμος δεν μελετήθηκε περισσότερο καθώς τα αποτελέσματα της συνεχούς προσέγγισης είχαν πολύ καλή πιστότητα στα μετρήσεις SIMS και εξαιρετικό μικρότερο υπολογιστικό χρόνο έναντι του KMC οπότε και προτιμήθηκαν. Καθώς όλα τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν στα πειράματα του πυριτίου ήταν εμφυτευμένα με τις ίδιες ακριβώς συνθήκες εμφύτευσης η κατακερματισμένη εμφύτευση plasma ήταν αυτή που τελικά χρησιμοποιήθηκε για όλες τις προσομοιώσεις που ακολούθησαν.

#### 4.4.2 Ιοντική εμφύτευση φωσφόρου στο γερμάνιο

Η δεύτερη σειρά προσομοιώσεων με θέμα την εμφύτευση αφορά την ιοντική εμφύτευση φωσφόρου στο γερμάνιο. Τα δείγματα που χρησιμοποιήσαμε είχαν εμφυτευθεί είτε με φώσφορο ( $P^+$ ) είτε με φώσφορο και μοριακό άζωτο ( $N_2^+$ ) σε ίσες δόσεις και ενέργειες,  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  και 30 keV. Καθώς το άζωτο εμφυτεύθηκε δεύτερο η κατανομή του προφίλ του φωσφόρου δεν θα εξαρτάται από τη δεύτερη εμφύτευση οπότε προσανατολιζόμαστε στην προσομοίωση της εμφύτευσης του φωσφόρου μόνο. Τα πράγματα είναι πιο ξεκάθαρα σε αυτή την περίπτωση καθώς η συνήθης ιοντική εμφύτευση είναι γενικά πιο καλά υποστηριζόμενη από το πρόγραμμα. Το πρόβλημα εντοπίζεται κυρίως στον τρόπο αντιμετώπισης της διεργασίας. Καθώς οι πίνακες φθοράς για το γερμάνιο δεν έχουν εκτιμηθεί με τόσο μεγάλη ακρίβεια όσο στο πυρίτιο, αναμένουμε σημαντική απόκλιση στους αναλυτικούς αλγορίθμους. Στην περίπτωση εμφύτευσης KMC το SProcess υποστηρίζει δύο διαφορετικούς αλγορίθμους, τον CrystalTRIM και τον sentaurus.mc. Ο πρώτος είναι μια μετεξέλιξη [16] του καλά μελετημένου αλγορίθμου TRIM (Transport of Ions in Matter) που χρησιμοποιείται για την εμπέλεια των ιόντων σε στερεά υλικά [17] ενώ ο δεύτερος είναι μια νεότερη εκδοχή του αλγορίθμου Taurus Monte Carlo [18] για συστήματα με πολλαπλούς επεξεργαστές ή επεξεργαστές με πολλαπλούς πυρήνες.

Συγκρίναμε τρεις διαφορετικές στρατηγικές προσομοίωσης. Η πρώτη βασίζεται στον αναλυτικό αλγόριθμο Pearson, ενώ οι άλλες δύο βασίζονται στους δύο διαφορετικούς αλγορίθμους KMC, sentaurus.mc και CrystalTRIM. Το πρόγραμμα που κατασκευάστηκε είναι το εξής

---

1 **set** doKMC 1

2 **AdvancedCalibration** 2014.09

3 **set** ndose 1.0e15

```

4  set ener 30
5  set species "Phosphorus"
6  set algorithm "sentaurus.mc"
7
8  line x location=0 spacing=0.5<nm> tag=GeTop
9  line x location=50<nm> spacing=0.5<nm>
10 if { $doKMC == 0 } {
11   line x location=500<nm> spacing=0.75<nm>
12   line x location=2.0<um> spacing=1<nm>
13   line x location=10<um> spacing=20<nm>
14   line x location=100<um> spacing=2<um>
15   line x location=500<um> spacing=10<um> tag=GeBottom
16 } else {
17   line x location=75<nm> spacing=0.75<nm>
18   line x location=100<nm> spacing=1<nm>
19   line x location=500<nm> spacing=5<nm>
20   line x location=1000<nm> spacing=10<nm>
21   line x location=1.25<um> spacing=25<nm> tag=GeBottom
22 }
23 line y location=0 spacing=0.5<um> tag=Left
24 line y location=5<um> spacing=0.5<um> tag=Right
25
26 region substrate xlo=GeTop xhi=GeBottom \
27   ylo=Left yhi=Right Germanium
28 init concentration=1e15 field=Gallium wafer.orient=100
29
30 if { $doKMC == 1 } { SetAtomistic }
31
32 if { $doKMC == 1 } {
33   implant $species energy=$ener<keV> dose=$ndose<cm-2> \
34     $algorithm particles=10000
35 } else {
36   implant $species energy=$ener<keV> dose=$ndose<cm-2>
37 }
38

```

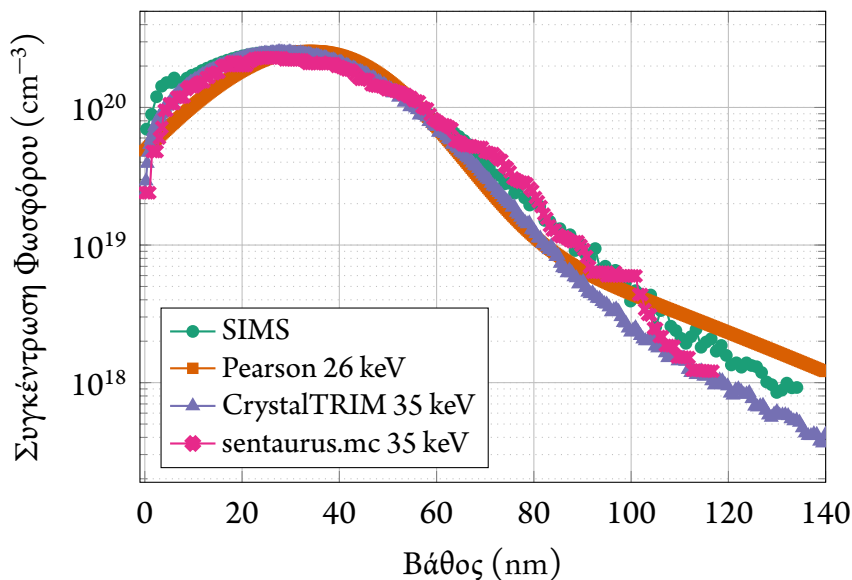
```

39 if ξ $doKMC == 1 } ξ UnsetAtomistic }
40
41 SetPlxList ξ Phosphorus }
42 if ξ $doKMC == 1 } ξ
43     WritePlx "${species}_${ndose}_${ener}_${algorithm}_KMC"
44 } else ξ
45     WritePlx "${species}_${ndose}_${ener}"
46 }

```

Η ρουτίνα είναι ουσιαστικά όμοια με την περίπτωση του πυριτίου που μελετήθηκε παραπάνω χωρίς τον βρόγχο επανάληψης για τις πολλαπλές εμφυτεύσεις. Η μεταβλητή `$algorithm` καθορίζει την επιλογή αλγορίθμου στην περίπτωση που χρησιμοποιούμε την προσέγγιση KMC, το υπόστρωμα είναι πλέον Germanium και η νόθευση γάλλιο, δηλαδή τύπου p, αυτή τη φορά (Gallium). Και πάλι οι μεταβλητές `$ndose` και `$ener` καθορίζουν τα χαρακτηριστικά της εμφύτευσης. Τέλος ως το πεδίο που θα εξαχθεί για επεξεργασία επιλέγεται ο φώσφορος (Phosphorus).

Αυτό που έγινε αντιληπτό από αυτή την προσπάθεια (βλ. και σχήμα 4.4) είναι η μεγάλη ασυμφωνία που έχουν όλοι οι αλγόριθμοι ως προς την ενέργεια εμφύτευσης. Παρά το γεγονός ότι και οι τρεις αποδίδουν το μέγιστο επίπεδο προσμίξεων στο σωστό



**Σχήμα 4.4:** Προσέγγιση της ιοντικής εμφύτευσης φωσφόρου στο γερμάνιο με τρεις διαφορετικούς αλγόριθμους μέσω του SProcess.

νούμερο σε σχέση με τις μετρήσεις SIMS,  $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , οι ενέργειες οι οποίες χρειάζονται για να προσεγγίσουν την πειραματική καμπύλη είναι 35 keV για τους KMC και μόλις 26 keV για τον αναλυτικό αλγόριθμο έναντι των 30 keV που ήταν η ονομαστική τιμή. Με βάση το γεγονός ότι τα 30 keV είναι το κάτω όριο του εμφυτευτή που χρησιμοποιήθηκε υπάρχει πιθανότητα η τελική ονομαστική ενέργεια των ιόντων που κατέληξαν στο γερμάνιο να ήταν όντως μεγαλύτερης ενέργειας. Αυτή η παρατήρηση και σε συνδυασμό με την πολύ καλύτερη προσαρμογή των αλγορίθμων KMC έναντι του αναλυτικού στην πειραματική καμπύλη (η απόκλιση στο βάθος επαφής είναι 5–8 nm) μας οδηγούν στο να θεωρήσουμε ως πιο αξιόπιστα τα αποτελέσματα των αλγορίθμων KMC. Τα αποτελέσματα του αλγορίθμου sentaurus.mc είναι αυτά που τελικά χρησιμοποιήθηκαν καθώς απέδωσαν αρκετά καλά την πειραματική καμπύλη σε πολύ συντομότερο χρόνο έναντι του CrystalTRIM.

#### § 4.5 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ

Εφόσον έχουμε επαρκή ταύτιση των προσομοιώσεων με τις μετρήσεις SIMS για την as-implanted κατανομή των προσμίξεων και στα δύο υλικά μπορούμε, πλέον, να μελετήσουμε τη θερμική επίδραση της δέσμης laser στον ημιαγωγό. Από την έκδοση 2008.09 και μετά το SProcess υποστηρίζει μοντέλα διάχυσης της θερμότητας μέσω ακτινοβολήσης με laser. Η εξίσωση θερμότητας που επιλύει το SProcess είναι η

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla T) + G \quad (4.3)$$

όπου  $\rho$ ,  $c_p$  και  $K$  η πυκνότητα, ειδική θερμοχωρητικότητα και θερμική αγωγιμότητα αντίστοιχα. Το  $G$  είναι ο όρος πηγής και υπολογίζεται με βάση τη σχέση

$$G = I \alpha \exp\left(-\int_0^d \alpha d\mathbf{l}\right) = I f(\mathbf{l}) \quad (4.4)$$

όπου  $\alpha$  ο συντελεστής απορρόφησης και  $d$  το πάχος του δείγματος. Πρακτικά οι δύο παραπάνω εξισώσεις αποτελούν τρισδιάστατη έκφραση της γενικής εξίσωσης θερμότητας που είδαμε στο δεύτερο κεφάλαιο (εξίσωση 2.23). Σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης το SProcess υπολογίζει τον όρος της πηγής (Heat Generation Term) και εξάγει την κατανομή της θερμοκρασίας κατά βάθος. Αυτό το θερμικό προφίλ χρησιμοποιείται σε κάθε κόμβο του πλέγματος για την επίλυση των εξισώσεων διάχυσης των προσμίξεων. Το μοντέλο απορρόφησης laser ενεργοποιείται στο SProcess με χρήση της boolean μεταβλητής laser στα ορίσματα της εντολής diffuse. Επί παραδείγματι



`diffuse temperature=200<ms> time=1<ms> laser`

Σε προσομοίωση μιας τυπικής διεργασίας διάχυσης το όρισμα της θερμοκρασίας θα αφορούσε τη θερμοκρασία στην οποία πραγματοποιείται η ανόπτηση. Στην περίπτωση της ανόπτησης με laser η θερμοκρασία εκφράζει την *αρχική θερμοκρασία του δείγματος*. Επίσης ο χρόνος αφορά τη *συνολική διάρκεια της προσομοίωσης* και όχι τη διάρκεια του παλμού, η οποία καθορίζεται από άλλη μεταβλητή. Αυτό μας επιτρέπει να δούμε τη χρονική εξέλιξη της διαδικασίας ακόμα και μετά την παύση του παλμού laser καθώς το δείγμα επιστρέφει στην αρχική του θερμοκρασία. Σε περίπτωση υψηλών θερμοκρασιών αυτό είναι σημαντικό καθώς φαινόμενα διάχυσης μπορεί να συνεχίζουν και καθώς το δείγμα κρύνει.

Οι προκλήσεις που έχουμε να αντιμετωπίσουμε σε αυτή την προσομοίωση κινούνται σε δύο κατευθύνσεις. Η πρώτη αφορά την ορθή περιγραφή της χωροχρονικής διαμόρφωσης της δέσμης. Τα προεπιλεγμένα μοντέλα του SProcess για τη θέρμανση με laser θεωρούν την ακόλουθη μορφή κατανομής έντασης

$$I(r, t) = (1 - R) \frac{I_0}{\sqrt{2\pi}t_s} \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2t_s^2}\right) \quad (4.5)$$

με

$$t_s \equiv \frac{T}{2\sqrt{2\log 2}} \quad (4.6)$$

όπου  $t_0$  η χρονική στιγμή έναρξης του παλμού,  $R$  η ανακλαστικότητα,  $I_0$  η προσπίπτουσα πυκνότητα ισχύος και  $T$  η χρονική διάρκεια του παλμού. Αυτό που παρατηρούμε από τις δύο αυτές εξισώσεις είναι η έλλειψη εξάρτησης της κατανομής της έντασης από την ακτινική απόσταση από το κέντρο της δέσμης,  $r$ , καθώς και η γκαουσιανή χρονική διαμόρφωση του παλμού. Αυτή η προσέγγιση ισχύει κατά κύριο λόγο μόνο σε παλμικά laser και όχι σε laser συνεχούς ισχύος όπως το CO<sub>2</sub> που χρησιμοποιούμε. Σε αυτή την περίπτωση η χωροχρονική κατανομή έντασης δίνεται από την εξίσωση

$$I(r, t) = (1 - R)I_0 \exp\left[-\frac{(r - r_0)^2}{2w_0^2}\right] \quad (4.7)$$

Παρατηρώντας την εξίσωση (4.7) μπορούμε να δούμε ότι αυτή τη φορά η διαμόρφωση της έντασης εξαρτάται από την ακτινική απόσταση από το κέντρο  $r_0$  της δέσμης αλλά σε αντίθεση με την (4.5) δεν εξαρτάται από τον χρόνο, είναι, δηλαδή, ακριβώς η συμπεριφορά που περιμένουμε. Αυτή η μορφή της κατανομής έντασης μπορεί να κωδικοποιηθεί στο SProcess με τον εξής κώδικα

---

```

1  set PI 3.1415926535
2  # integration region width in microns
3  set width 100.0
4  # beam radius in cm
5  set beam 0.055
6  # in W
7  set power 67
8  # reflection coefficient
9  set refl 0.3
10 # calculate beam waist
11 set waist [expr $beam/sqrt(2)]
12 # calculate power density
13 set pdensity [expr $power*(1-$refl)/($PI*($beam/sqrt(2))**2)]
14
15 # make intensity profile
16 sel z="y" name=xdim store
17 sel z="($beam*/sqrt(2))" name=waist store
18 sel z="-(1e-8*(xdim-($width/2))^2)/(2*$waist^2)" name=sqx
19 sel z="exp(sqx)" name=expo
20
21 # enable custom intensity profile
22 pdbSetBoolean Heat UseIntensityProfile 1
23 # set the intensity profile expression
24 pdbSetString Heat IntensityProfile "$pdensity*expo"

```

---

Στις γραμμές 2–9 ορίζονται τα χαρακτηριστικά της δέσμης καθώς και η ανακλαστικότητα του πυριτίου. Από κει και πέρα υπολογίζεται το beam waist σύμφωνα με τη σχέση

$$w_0 = \frac{r}{\sqrt{2}} \quad (4.8)$$

όπου  $r$  η ακτίνα της δέσμης. Επίσης υπολογίζεται η πυκνότητα ισχύος που αντιστοιχεί σε αυτά τα χαρακτηριστικά για προσπίπτουσα ισχύ  $P$  σύμφωνα με την εξίσωση

$$I = \frac{P}{\pi w_0^2} \quad (4.9)$$

Στις γραμμές 16–19 ορίζεται η μορφή της γκαουσιανής καμπύλης η οποία θεωρούμε ότι έχει ως κέντρο το κέντρο του χωρίου στο οποίο γίνεται η προσομοίωση. Εφόσον

αυτό ορίστηκε να έχει πλάτος 100 μm το κέντρο της γκαουσιανής κατανομής ορίζεται στα 50 μm (δηλαδή  $\text{width}/2$ ). Η έκφραση της κατανομής αποθηκεύεται σε μια εσωτερική μεταβλητή του SProcess την οποία καλούμε `expro`. Στις γραμμή 22 θέτουμε μια boolean μεταβλητή η οποία υποδεικνύει στο πρόγραμμα τη χρήση παραμετροποιημένης κατανομής έντασης και στη γραμμή 24 ορίζεται η έκφρασή της η οποία ουσιαστικά είναι η πυκνότητα ισχύος που υπολογίστηκε διαμορφωμένη από το εκθετικό μέρος της εξίσωσης (4.7) που ορίστηκε στις γραμμές 16–19. Πουθενά δεν γίνεται αναφορά στο χρόνο κάτι το οποίο πρακτικά σημαίνει ότι η δέσμη απενεργοποιείται αμέσως μόλις παρέλθει η χρονική διάρκεια του παλμού, η οποία ορίζεται με την εξής εντολή

```
pdbSet Heat HeatingTime 10
```

Οι μονάδες που χρησιμοποιούνται για το HeatingTime είναι ms. Με την παραπάνω εντολή ορίζουμε τη χρονική διάρκεια που η δέσμη είναι ενεργή σε 10 ms.

Επόμενο βήμα στην προσομοίωση της απορρόφησης και διάχυσης της ακτινοβολίας είναι ο ορισμός των οπτικών και θερμικών συντελεστών του υλικού. Σε αυτό θα μας βοηθήσει η ανάλυση που έγινε στο δεύτερο κεφάλαιο προς αυτή την κατεύθυνση και θα αξιοποιήσουμε τις σχέσεις που εξάγαμε για πυκνότητα (2.25 για πυρίτιο και 2.26 για γερμάνιο), συντελεστή απορρόφησης (2.10 για πυρίτιο, 2.11 για γερμάνιο), ειδική θερμοχωρητικότητα (2.29 για πυρίτιο, 2.30 για γερμάνιο) και θερμική αγωγιμότητα (2.27 για πυρίτιο, 2.28 για γερμάνιο). Οι παράμετροι αυτοί μπορούν να εισαχθούν στο SProcess μέσω των εντολών

```
pdbSetDouble Silicon MassDensity ...
pdbSetString Silicon Absorptivity "...
pdbSetString Silicon SpecificHeatCapacity "...
pdbSetString Silicon ThermalConductivity "...
```

Προφανώς στην περίπτωση του γερμανίου το όρισμα Silicon γίνεται Germanium. Η μετατροπή των εξισώσεων στα ορίσματα των παραπάνω εντολών είναι προφανής και παραλείπεται για συντομία. Σημειώνουμε μόνο πως στο SProcess η θερμοκρασία αναπαριστάται από τη μεταβλητή Temperature ενώ οι συγκεντρώσεις βορίου και φωσφόρου από τις Boron και Phosphorus αντίστοιχα.

Ένα τελευταίο σημαντικό σημείο που χρήζει προσοχής είναι η διαστασιολόγηση του προβλήματος. Καθώς η θερμοκρασία η οποία τελικά αναπτύσσεται στην επιφάνεια του υλικού εξαρτάται, τελικά, από τη θέση στην οποία βρισκόμαστε είναι προφανώς λογικό ότι η κατανομή κατά βάθος σε κάθε σημείο της επιφάνειας του υλικού θα είναι διαφορετική. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι το πως τελικά η θερμοκρασία στην οποία

βρίσκεται ένας κόμβος μιας τομής του υλικού επηρεάζεται από τη θερμοκρασία των γειτονικών του κόμβων τόσο κατακόρυφα όσο και οριζόντια. Αυτό σημαίνει ότι εν γένει το πρόβλημα το οποίο μελετάμε δεν μπορεί να αναχθεί στη μελέτη της απορρόφησης σε μία διάσταση. Το πρόβλημα, δηλαδή, επιβάλλεται να έχει *δισδιάστατη* προσέγγιση. Καθώς το SProcess προσανατολίζεται κυρίως σε ομογενοποιημένες δέσμες laser η κατανομή της θερμοκρασίας κατά βάθος είναι η ίδια σε κάθε σημείο του δείγματος κάτι το οποίο απλοποιεί την προσέγγιση κάνοντας το πρόβλημα της απορρόφησης μονοδιάστατο. Στην περίπτωση του CO<sub>2</sub> laser όμως πρέπει να ορίσουμε ρητά ότι το πρόβλημα πρέπει να λυθεί σε μεγαλύτερη διάσταση. Αυτό μπορεί να γίνει μέσω της εντολής `grid` ως εξής

```
grid FullD
```

Η παραπάνω εντολή θα θέσει την προσομοίωση στην μέγιστη διάσταση η οποία επιτρέπεται από το τρέχον πρόβλημα. Στην περίπτωση ανόπτησης με laser η μέγιστη επιτρεπτή διάσταση είναι 2. Η τρίτη γίνεται με *extrapolation* από τις δύο διαστάσεις. Προσομοιώσεις έγιναν και στη μονοδιάστατη προσέγγιση ωστόσο είχαν μεγάλες αποκλίσεις με τις πειραματικές μετρήσεις οπότε και απορρίφθηκαν.

Από κει και πέρα αρκεί να προσθέσουμε στην ρουτίνα που φτιάξαμε για την εμφύτευση τον κώδικα τον οποίον αναπτύξαμε σε αυτή την παράγραφο και να καλέσουμε την εντολή `diffuse` για να τρέξουμε την προσομοίωση της διάχυσης

```
diffuse temp=650.0 time=30<ms> write.temp.file=CO2_timetemp.dat \
  movie={ [evolution $time 50.0] } laser
```

Η παραπάνω εντολή θα τρέξει προσομοίωση για 30 ms ενώ θεωρεί ότι η θερμοκρασία ισορροπίας του δείγματος είναι οι 650°C. Παράλληλα μέσω του `write.temp.file` το SProcess θα αποθηκεύσει τη θερμοκρασία στην επιφάνεια του δείγματος σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης. Εκτός από αυτή τη δυνατότητα χρησιμοποιήσαμε και το όρισμα `movie` το οποίο μας επιτρέπει να ορίσουμε μία custom Tcl procedure σε κάθε χρονικό βήμα (του οποίου ο χρόνος αποθηκεύεται στη μεταβλητή `$time`). Αυτό είναι πολύ χρήσιμο καθώς μας επιτρέπει να κρατάμε στιγμιότυπα διάφορων μεταβλητών καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση. Στην πιο απλή μορφή μπορούμε να κρατήσουμε την εξέλιξη της θερμοκρασίας, αλλά αντίστοιχη δυνατότητα έχουμε και για τις υπόλοιπες μεταβλητές που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα. Μια μορφή της Tcl procedure που χρησιμοποιήθηκε είναι η παρακάτω με την οποία αποθηκεύουμε τις θερμοκρασιακές κατανομές σε κάθε βήμα της προσομοίωσης στο σημείο που του ορίζουμε, εδώ στη μέση του

χωρίου προσομοίωσης στα 50  $\mu\text{m}$ . Η procedure θα εξάγει τα δεδομένα από το SProcess στο σημείο που του καθορίστηκε και θα αποθηκεύσει τα δεδομένα σε ένα ξεχωριστό αρχείο για κάθε χρονικό βήμα.

---

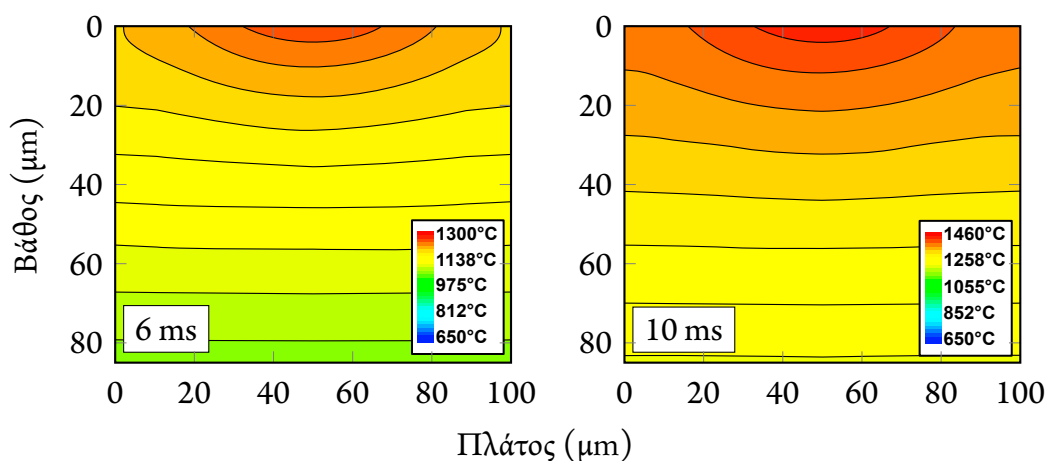
```

1  proc evolution { t yslice } {
2      select z= Temperature
3      set FID [ open "transient/Temperature_{t}.dat" w ]
4      foreach { coord value } [lindex [slice y=$yslice] 0] {
5          puts $FID "${coord}\t${value}"
6      }
7      close $FID
8  }

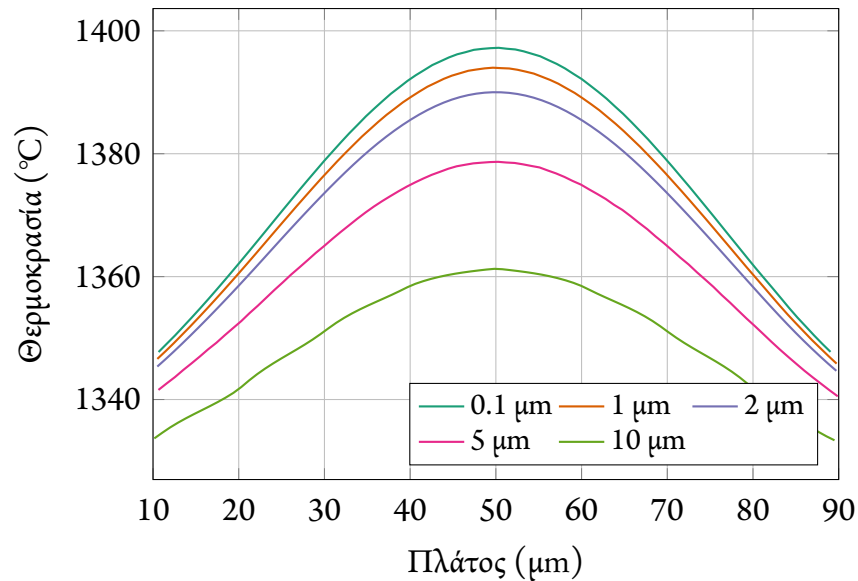
```

---

Με βάση όλα τα παραπάνω μπορούμε να τρέξουμε τις προσομοιώσεις για το laser  $\text{CO}_2$ . Από διερευνητικά πειράματα που έγιναν είδαμε ότι το κατώφλι τήξης εντοπίζεται περίπου στα 67 W για ακτινοβολία 10 ms και spot size 1.1 mm. Αυτοί είναι και οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν τελικά για την θερμική προσομοίωση η οποία αφορούσε ακτινοβολία 6, 8 και 10 ms. Στα διαγράμματα 4.5 μπορούμε να δούμε τις ισοθερμικές κατανομές που προέκυψαν από την προσομοίωση. Οι μέγιστες θερμοκρασίες που εντοπίζονται είναι περίπου 1300 °C για τα 6 ms και περίπου 1400 °C για τα 10 ms και τα δύο κάτω από το κατώφλι τήξης του πυριτίου. Ακόμα, είναι εμφανής η ξεκάθαρα



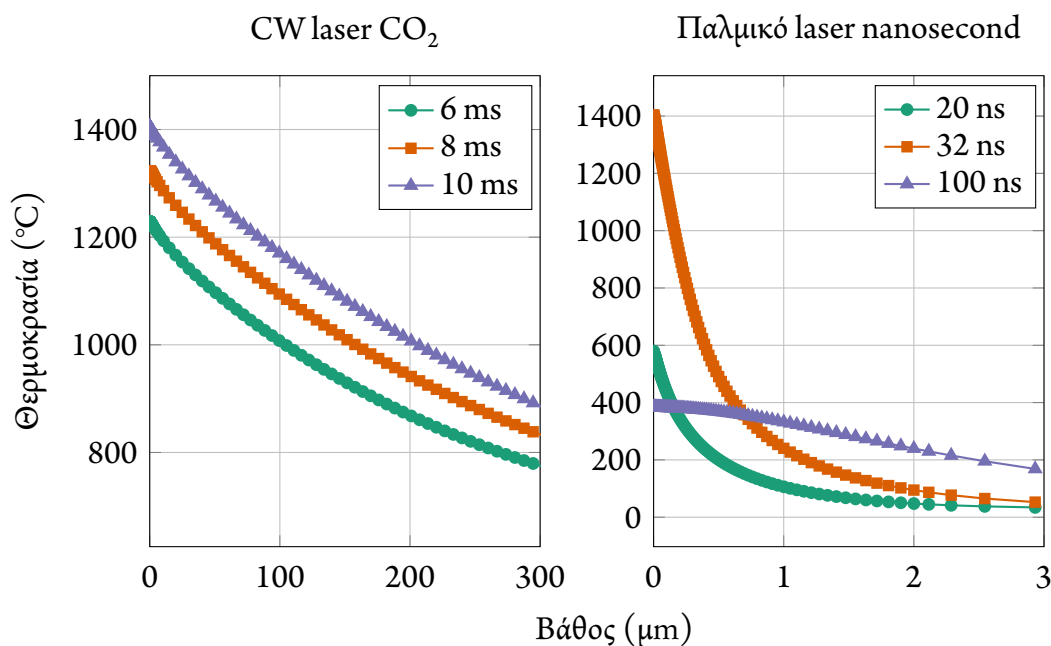
**Σχήμα 4.5:** Ισοθερμικές καμπύλες θερμοκρασιακής κατανομής για ακτινοβολία με παλμό 9870  $\text{W}/\text{cm}^2$  διάρκειας 8 και 10 ms στο πυρίτιο.



**Σχήμα 4.6:** Θερμοκρασιακή κατανομή κατά πλάτος όλου του υπολογιστικού χωρίου σε διαφορετικά βάθη για την ακτινοβολήση των 10 ms.

γκαουσιανή μορφή της θερμοκρασιακής κατανομής, αποτέλεσμα της ανομοιομορφίας της δέσμης του laser CO<sub>2</sub>. Είναι επίσης εμφανές το μεγάλο θερμικό μήκος απορρόφησης της ακτινοβολίας το οποίο εκτείνεται πέρα από τα 80 μm και στις δύο περιπτώσεις. Παράλληλα, στο γράφημα 4.6 μπορούμε να δούμε την κατανομή της θερμοκρασίας κατά πλάτος του υπολογιστικού χωρίου η οποία αντικατοπτρίζει την γκαουσιανή κατανομή της ισχύος.

Η παρατήρηση σχετικά με την έκταση της θερμικής επίδρασης γίνεται πιο εμφανής μέσω του γραφήματος 4.7 που απεικονίζει την κατανομή της θερμοκρασίας κατά βάθος στο σημείο μέγιστης θερμοκρασίας (δηλαδή στο κέντρο του υπολογιστικού χωρίου) ακριβώς στη λήξη της διάρκειας του παλμού. Μπορούμε να δούμε την ομοιόμορφη βαθμίδα θερμοκρασίας η οποία είναι σύμφωνη με τις παρατηρήσεις που κάναμε στο δεύτερο κεφάλαιο (βλ. και εικόνα 2.5). Η θερμοκρασία αναπτύσσεται ομαλά πρακτικά σε όλο το βάθος του υλικού. Για σύγκριση κάναμε ένα σύνολο από προσομοιώσεις σε καθυστάτως nanosecond στο μήκος κύματος του laser KrF σύμφωνα με τη διαδικασία που αναπτύχθηκε και στη διδακτορική διατριβή του Α. Φλωράκη [19]. Οι συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν ήταν πυκνότητα ενέργειας 580 mJ cm<sup>-2</sup> και διάρκεια παλμού 20 ns. Εκτός από την ανομοιόμορφη ανάπτυξη της θερμοκρασίας λόγω της γκαουσιανής χρονικής συμπεριφοράς του laser (η μέγιστη θερμοκρασία επιτυγχάνεται στα 32 ns, δηλαδή 12 ns μετά τη λήξη του παλμού) μπορούμε να παρατηρήσουμε την ταχύτερη επα-

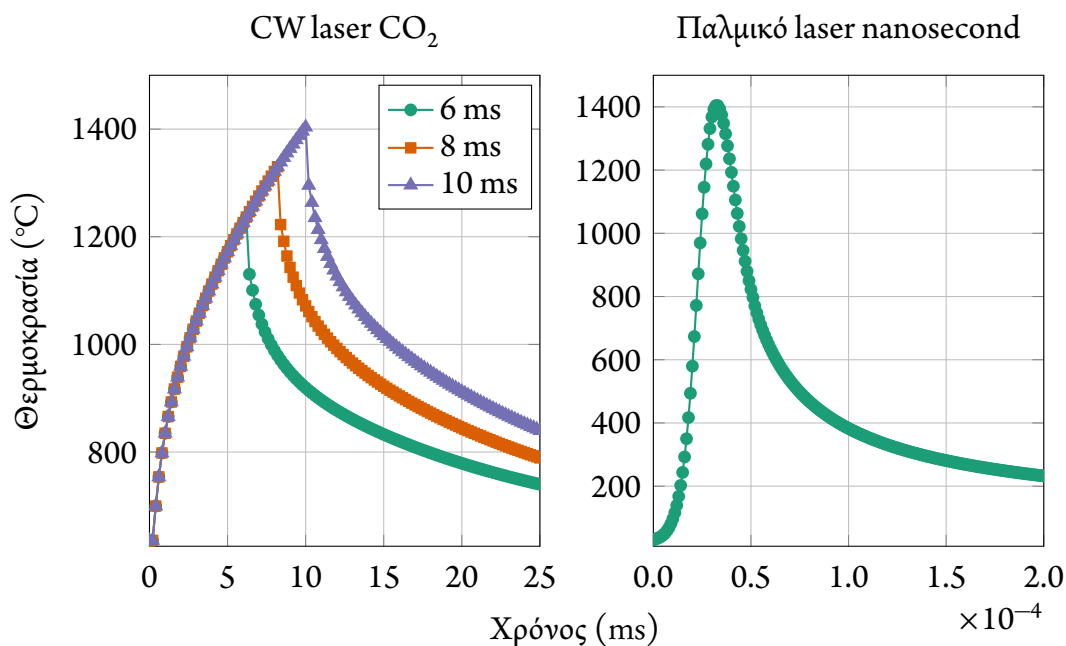


**Σχήμα 4.7:** Θερμοκρασιακή κατανομή κατά βάθος στο κέντρο του χωρίου προσομοίωσης (αριστερά) και σύγκριση με την περίπτωση ακτινοβολήσης σε καθεστώς nanosecond στο UV από ένα παλμικό laser διάρκειας παλμού 20 ns (δεξιά).

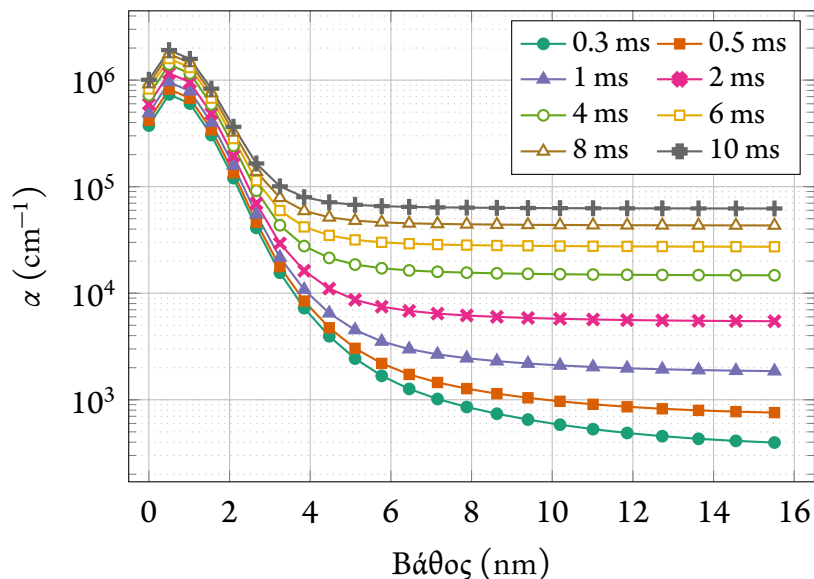
ναφορά του δείγματος στην αρχική του θερμοκρασία. Με λίγα λόγια στην περίπτωση του laser CO<sub>2</sub> η θερμική επίδραση είναι πολύ εκτεταμένη σε αντίθεση με ένα παλμικό laser σε καθεστώς nanosecond όπου η όλη διαδικασία είναι πολύ πιο αδιαβατική και σε συνδυασμό με την ταχύτητα απορρόφησης των ημιαγωγών στο υπεριώδες πολύ πιο εντοπισμένη. Η θερμική επίδραση περιορίζεται στα πρώτα 3 μm σε αντίθεση με την δική μας περίπτωση όπου η θερμική επίδραση εκτείνεται σε όλο το υλικό.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει, επίσης, η χρονική εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας. Στο γράφημα 4.8 μπορούμε να δούμε την χρονική εξέλιξη της θερμοκρασίας στην επιφάνεια, στο κέντρο του υπολογιστικού χωρίου. Η μορφή που έχει η καμπύλη στην περίπτωση του laser CO<sub>2</sub> είναι τυπική για την περίπτωση ακτινοβολήσης με παλμούς σταθερής ισχύος και τετραγωνικής χρονικής διαμόρφωσης όπως μπορούμε να δούμε και στην εργασία των Doubenskaia κ.ά. [20]. Εκτός από την προφανή διαφορά στη χρονική κλίμακα η εξέλιξη της θερμοκρασίας είναι επίσης ριζικά διαφορετική ως προς το σχήμα της σε σχέση με την περίπτωση των nanosecond παλμικών laser.

Ακόμα στο γράφημα 4.9 μπορούμε να δούμε τη χρονική εξέλιξη του συντελεστή απορρόφησης κατά βάθος. Τα δεδομένα εξήχθησαν με χρήση της Tcl procedure που περιγράφηκε πιο πριν. Το όνομα του πεδίου το οποίο εξήχθη είναι το Absorptivity.

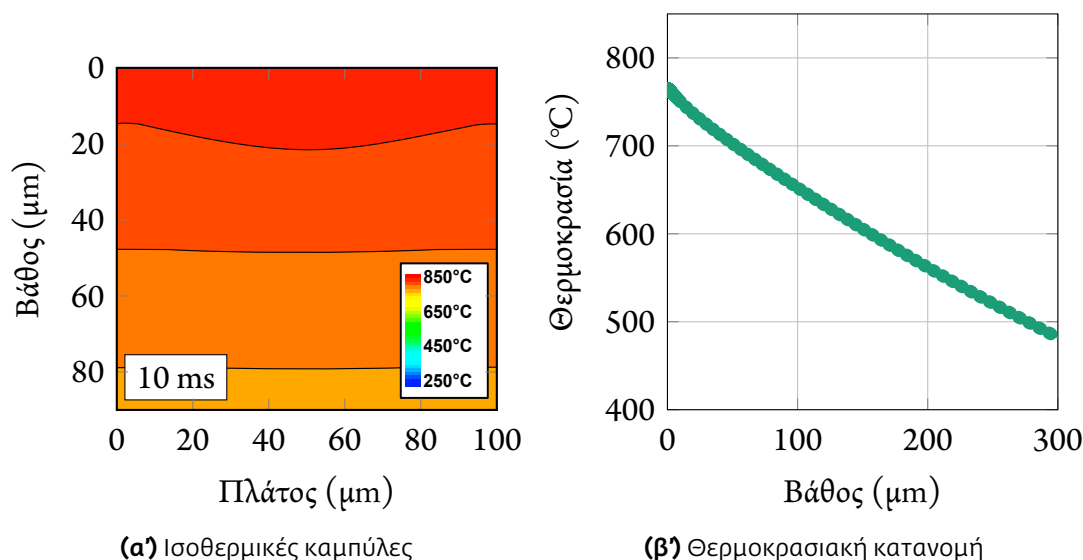


**Σχήμα 4.8:** Χρονική εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας που αναπτύσσεται στο κέντρο του χωρίου προσομοίωσης (αριστερά) και σύγκριση με την ακτινοβολή σε καθεστώς nanosecond στο UV από ένα παλμικό laser διάρκειας παλμού 20 ns (δεξιά).



**Σχήμα 4.9:** Εξέλιξη του συντελεστή απορρόφησης για τα πρώτα νανόμετρα του πυριτίου όπως προκύπτει από το SProcess.





**Σχήμα 4.10:** Αποτελέσματα θερμικής προσομοίωσης για ακτινοβολήση γερμανίου με δέσμη Laser CO<sub>2</sub> πυκνότητας ισχύος 5500 W/cm<sup>2</sup> και διάρκειας 10 ms.

Είναι εμφανές ότι η πολύ υψηλή νόθευση στα πρώτα νανόμετρα του υλικού οδηγεί σε εξαιρετικά μεγάλη αύξηση του συντελεστή απορρόφησης. Ουσιαστικά το μεγαλύτερο ποσοστό της ακτινοβολίας απορροφάται από τις περιοχές πολύ υψηλής νόθευσης και ως αποτέλεσμα η μορφή της κατανομής του συντελεστή ακολουθεί κατά κάποιον τρόπο την κατανομή των προσμίξεων βορίου. Καθώς ο χρόνος περνάει και η θερμοκρασία στο δείγμα ανεβαίνει ο συντελεστής απορρόφησης σε μεγαλύτερα βάθη αρχίζει να αυξάνεται. Από θερμοκρασία ισορροπίας μέχρι και τα 10 ms ο συντελεστής απορρόφησης έχει αυξηθεί τελικά δύο τάξεις μεγέθους.

Η κατάσταση είναι αντίστοιχη και για τη θερμική προσομοίωση του γερμανίου. Και σε αυτή την περίπτωση έγιναν προκαταρκτικές ακτινοβολήσεις ούτως ώστε να βρούμε ένα σύνολο συνθηκών οι οποίες δε λιώνουν το γερμάνιο. Βρήκαμε, λοιπόν, ότι ακτινοβολήση στα 52–55 W δεν προκαλεί τήξη στο γερμάνιο. Επίσης η θερμοκρασία προθέρμανσης του γερμανίου περιορίζεται στους 270°C. Μεγαλύτερες θερμοκρασίες είναι ακατάλληλες γιατί αφενός οδηγούν σε γρήγορη τήξη του γερμανίου και αφετέρου αρχίζουν να κινούνται σε επίπεδα τα οποία μπορεί να θεωρηθούν κρίσιμα για την ενεργοποίηση της διαδικασίας της διάχυσης κάτι το οποίο δεν θέλουμε σε καμία περίπτωση να συμβεί στη διαδικασία της προθέρμανσης. Από κει και πέρα τα αποτελέσματα δεν έχουν κάποια ουσιαστική διαφοροποίηση ως προς αυτά του πυριτίου αν και, όπως μπορεί να φανεί και στο σχήμα 4.10, οι μέγιστες θερμοκρασίες είναι προφανώς μικρότερες, κάτω από το σημείο τήξης του γερμανίου που ήταν και ο στόχος μας. Η μορφή της

κατανομής των ισοθερμικών καμπυλών της θερμοκρασίας (4.10α') καθώς και της χωρικής εξέλιξης στο υλικό (4.10β') είναι ακριβώς αντίστοιχη κάτι το οποίο είναι λογικό εφόσον τα δύο υλικά απορροφούν πρακτικά με τον ίδιο τρόπο.

## § 4.6 ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΜΕ ΤΟ SPROCESS

Η κύρια λειτουργία του SProcess περιστρέφεται γύρω από την πρόβλεψη της κινητικής των προσμίξεων στο πυρίτιο. Στη συνεχή προσέγγιση το πρόγραμμα ουσιαστικά επιλύει ταυτόχρονα ένα σύστημα χρονοεξαρτώμενων διαφορικών εξισώσεων οι οποίες καθορίζονται από το εκάστοτε μοντέλο που χρησιμοποιείται. Οι εξισώσεις αυτές είναι πεπλεγμένες με τις αντίστοιχες εξισώσεις διάχυσης της θερμότητας. Η μελέτη της διάχυσης γίνεται είτε με αναλυτικούς αλγόριθμους είτε με προσέγγιση ΚΜC. Η εντολή `diffuse` αποτελεί το κύριο εργαλείο του SProcess και μέσω αυτής μπορεί να προσομοιωθεί ένα ευρύ σύνολο φαινομένων όπως:

- ▶ Ανόπτηση, ανακατανομή, ενεργοποίηση και απενεργοποίηση προσμίξεων
- ▶ Ανάπτυξη υλικών, όπως οξείδωση ή επιταξία
- ▶ Τάσεις που αναπτύσσονται στο υλικό όσο και στις διεπιφάνειες μεταξύ υλικών

Πολλά διαφορετικά μοντέλα διάχυσης προσμίξεων είναι διαθέσιμα στο SProcess η επιλογή των οποίων μπορεί να γίνει μέσω της εντολής

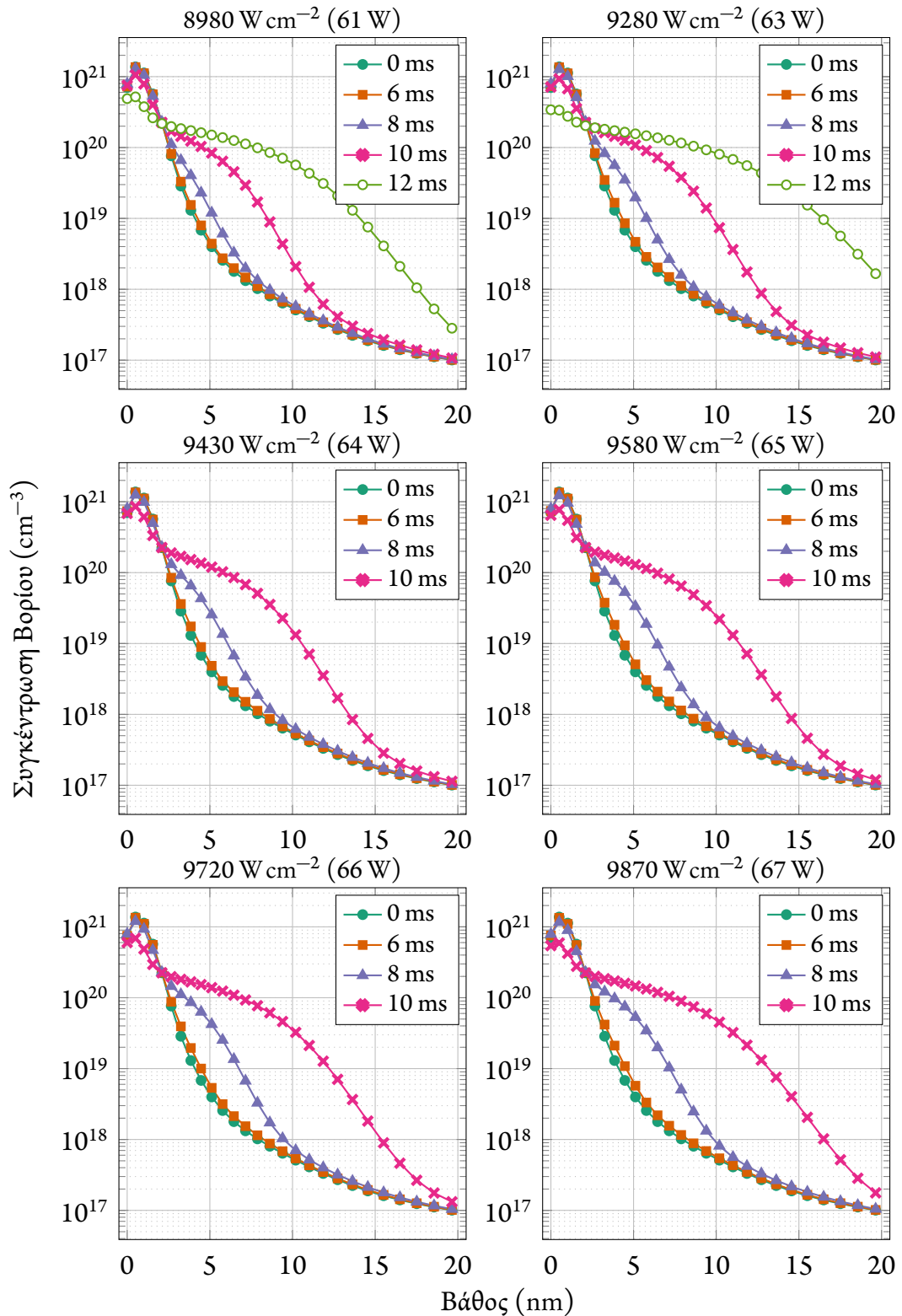
```
pdbSet Silicon Dopant DiffModel <model>
```

Στη θέση του `<model>` μπορεί να είναι ένα εκ των `ChargedReact`, `React`, `Constant`, `Fermi`, `ChargedFermi` ή `ChargedPair`. Σε όλες τις προσομοιώσεις που έγιναν αξιοποιήθηκε το `ChargedReact` το οποίο αποτελεί το γενικότερο μοντέλο περιγραφής της διάχυσης στο SProcess και περιλαμβάνει μία ακίνητη πρόσμιξη σε θέση αντικατάστασης και μέχρι δύο κινητά φορτισμένα ζεύγη πρόσμιξης-ατέλειας. Παράλληλα, συμπεριλαμβάνονται κινητές σημειακές ατέλειες καθώς και ένα σύνολο μεταβατικών φαινομένων που περιγράφονται από τη βιβλιογραφία [21–26]. Όπως προτείνεται και από την ίδια τη Synopsys το `ChargedReact` είναι καταλληλότερο για διεργασίες ανόπτησης με εξαιρετικά απότομη βαθμίδα θερμοκρασίας όπως η ανόπτηση με laser. Αναλυτική παρουσίαση του μοντέλου μπορεί να βρεθεί στο προηγούμενο κεφάλαιο. Επίσης για τον σχηματισμό συσσωματωμάτων ενδοπλεγματοικών ατελειών αξιοποιείται το μοντέλο `1Moment` μέσω του οποίου περιγράφεται η χρονική εξέλιξη των συσσωματωμάτων [27].

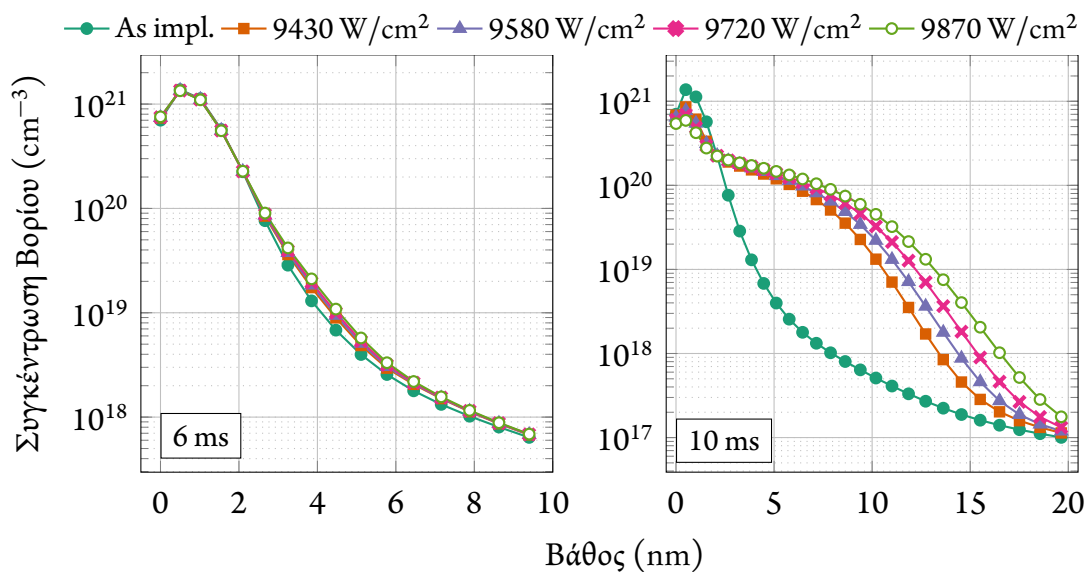
Παράλληλα, αξιοποιήσαμε τις βιβλιοθήκες Advanced Calibration στις οποίες έγινε μια αναφορά στην αρχή του κεφαλαίου. Όσον αφορά τη διάχυση οι βιβλιοθήκες χωρίζονται σε τέσσερις ενότητες τα μοντέλα των οποίων εκτελούνται σειριακά από το SProcess. Η πρώτη αφορά την επιλογή μοντέλων μεταφοράς, ενεργοποίησης και συσσωμάτωσης. Η δεύτερη περιέχει ένα σύνολο από σταθερές παραμέτρους που υπεισέρχονται στην προσομοίωση και προέρχονται κατά κύριο λόγο από τη βιβλιογραφία. Στην τρίτη περιέχονται παράμετροι αρχικοποίησης μοντέλων με βάση ερευνητικό feedback που έχει η Synopsys (πχ. μετρήσεις SIMS). Τέλος, στην τέταρτη ενότητα περιλαμβάνονται μοντέλα που άπτονται πιο εξεζητημένων θεμάτων της προσομοίωσης. Στην δική μας περίπτωση θα αξιοποιήσουμε τα μοντέλα Full και ChargedCluster για τον σχηματισμό συσσωματωμάτων βορίου με ενδοπλεγματικές ατέλειες. Αν και, όπως παρατηρήσαμε και από προκαταρκτικές προσομοιώσεις, η χρήση των βιβλιοθηκών Advanced Calibration δεν έχει κάποια επίδραση στα θερμοκρασιακά προφίλ έχει αρκετή διαφορά στην κινητικότητα του προφίλ των προσμίξεων οπότε και τελικά προτιμήθηκαν. Θα δούμε, άλλωστε, στο επόμενο κεφάλαιο πόσο καλά προσεγγίζουν τα πειραματικά αποτελέσματα.

Έτσι, με βάση τα παραπάνω πραγματοποιήσαμε ένα σύνολο προσομοιώσεων για διάφορες πυκνότητες ισχύος. Αυτές αντιστοιχούσαν σε ισχύες άνω των 60 W καθώς μικρότερες είχαν ως αποτέλεσμα πολύ μικρές θερμοκρασίες κάτω από τους 900°C ώστε να έχουν κάποια χρησιμότητα. Για να εξοικονομήσουμε χρόνο στις προσομοιώσεις αξιοποιήσαμε την ιδιότητα της (χρονικής) τετραγωνικότητας του παλμού του CW laser. Αυτό σημαίνει ότι η θερμοκρασιακή κατανομή στο υλικό και κατ' επέκταση η διάχυση που προέρχεται από αυτή θα είναι ίδια είτε στο τέλος ενός παλμού 10 ms είτε στη μέση της ακτινοβολήσης με έναν παλμό 20 ms, κάτι το οποίο είναι εμφανές άλλωστε και από το γράφημα 4.8 της σελίδας 114 που προηγήθηκε. Αυτό μας επιτρέπει να τρέξουμε μία προσομοίωση με έναν πολύ μεγάλης διάρκειας παλμό (πχ. 50 ms) και να κρατάμε στιγμιότυπα της κατανομής του βορίου μέσω της Tcl procedure που γράψαμε και της μεταβλητής `Bo10n` η οποία αποθηκεύει την κατανομή του βορίου κατά βάθος στο σημείο που επιλέγεται. Εδώ το σημείο που επιλέχθηκε ήταν το κέντρο του υπολογιστικού χωρίου όπου η ισχύς ήταν μέγιστη.

Αποτέλεσμα αυτών των προσομοιώσεων είναι τα γραφήματα 4.11 της σελίδας 118. Αυτά περιλαμβάνουν τα προφίλ της κατανομής του βορίου για τρία ή τέσσερα διαφορετικά στιγμιότυπα. Στις ισχύες άνω των 63 W το στιγμιότυπο των 12 ms παραλείπεται καθώς αφορά θερμοκρασίες οι οποίες ξεπερνούν το κατώφλι τήξης του πυριτίου και δεν μπορούν να θεωρηθούν αντιπροσωπευτικά. Στις καμπύλες του σχήματος οι μέγισ-



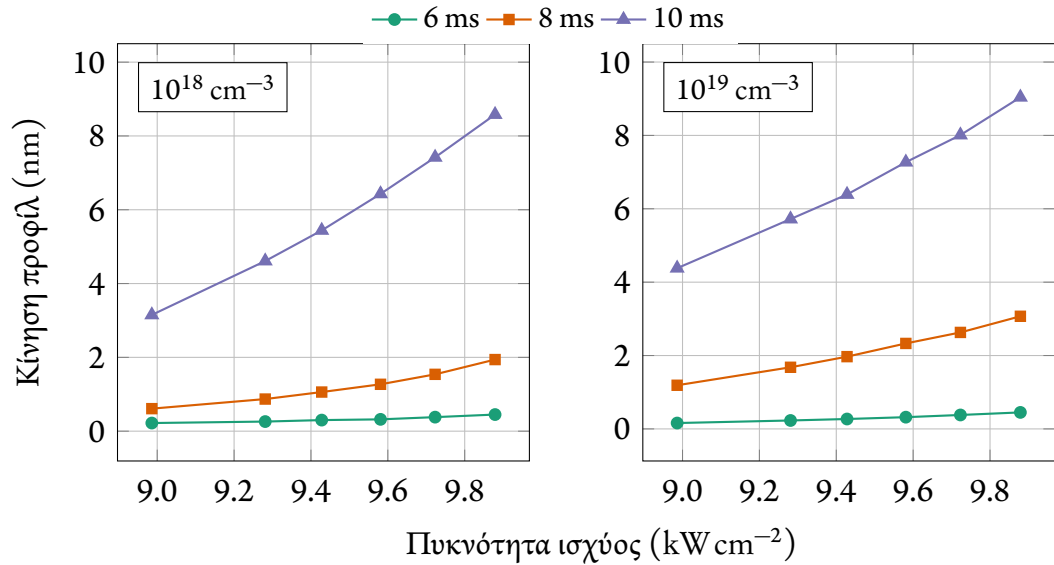
**Σχήμα 4.11:** Διάχυση προσμίξεων βορίου σε σχέση με την as-implanted (0 ms) κατανομή για έξι διαφορετικές πυκνότητες ισχύος όπως εξήχθησαν από το SProcess.



**Σχήμα 4.12:** Σύγκριση των προφίλ βορίου για 4 διαφορετικές πυκνότητες ισχύος στα 6 και 10 ms.

στες θερμοκρασίες που αναπτύσσονται κυμαίνονται από περίπου 1250 ως 1400 °C. Σε όλες τις περιπτώσεις είναι εμφανής η σταδιακή μετακίνηση του προφίλ του βορίου με αύξηση της διάρκειας του παλμού κάτι το οποίο είναι λογικό καθώς η θερμοκρασία που αναπτύσσεται αυξάνεται. Το ίδιο ισχύει και για την αύξηση της πυκνότητας ισχύος του παλμού. Η σταδιακή μετακίνηση του προφίλ σε σχέση με την προσπίπτουσα πυκνότητα ισχύος μπορεί να φανεί στο διάγραμμα 4.12. Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση των 6 ms η μετακίνηση του βορίου είναι εξαιρετικά μικρή δίνοντας βάθη επαφής πολύ κοντά στα 7 nm της as-implanted κατανομής. Αντίθετα στα 10 ms έχουμε μια σταδιακή μετατόπιση του προφίλ προς τα μέσα καθώς η ισχύς αυξάνεται. Είναι εμφανές ότι η χρονική διάρκεια ανάμεσα στα 6 και 12 ms είναι το κρίσιμο κατώφλι πέρα από το οποίο “ενεργοποιείται” εμφανώς ο μηχανισμός της διάχυσης για αυτό το εύρος ισχύων. Προφανώς, αντίστοιχα αποτελέσματα μπορούν να επιτευχθούν με χαμηλότερη ισχύ και μεγαλύτερους παλμούς αλλά στόχος μας είναι η μέγιστη δυνατή μεταφορά θερμότητας με βραχείς παλμούς ούτως ώστε να περιορίσουμε τα μεταβατικά φαινόμενα.

Ένα χαρακτηριστικό που είναι κοινό σε όλες τις κατανομές βορίου είναι η ύπαρξη ενός σχετικά ακλόνητου τμήματος περίπου στα  $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Αυτό υποδεικνύει την ύπαρξη εκτεταμένων ατελειών βορίου-ενδοπλεγματικών ατόμων τα οποία ονομάζονται Boron Interstitial Clusters (BIC) [23]. Η μορφή της κατανομής είναι παρόμοια με ανάλογες προσομοιώσεις που βρίσκουμε στη βιβλιογραφία [28].



**Σχήμα 4.13:** Σύγκριση της μετακίνησης του προφίλ προσμίξεων βορίου σε σχέση με την προσπίπτουσα ισχύ σε δύο διαφορετικά επίπεδα νόθευσης. Το as-implanted βάθος επαφής στα  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  είναι 7 nm ενώ στα  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  είναι 3.9 nm.

Στο γράφημα 4.13 παρουσιάζεται η μετακίνηση του προφίλ σε δύο διαφορετικά επίπεδα νόθευσης. Εφόσον το as-implanted προφίλ έχει βάθος επαφής στα  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  μπορούμε να εξάγουμε ότι το βάθος επαφής στο ανοπτημένο πυρίτιο ανάλογα με την προσπίπτουσα ισχύ κυμαίνεται από περίπου 7.7 έως 7.9 nm στην περίπτωση των 6 ms, από 8.2 έως 10.1 nm στην περίπτωση των 8 ms και από 10 έως 18 nm στην περίπτωση των 10 ms. Είναι ξεκάθαρο από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ο βαθμός του ελέγχου που παρέχεται μέσω της ανόπτησης με laser ακόμα και σε μικρές μετακινήσεις του προφίλ κατανομής του βορίου είναι εξαιρετικά υψηλός.

Κλείνοντας, πρέπει να αναφέρουμε ότι αντίστοιχες προσομοιώσεις που έγιναν στο γερμάνιο δεν απέδωσαν τα αναμενόμενα αποτελέσματα καθώς σε όλες τις περιπτώσεις μέχρι και τους 900 °C δεν παρουσιάστηκε καμία μετακίνηση του προφίλ φωσφόρου με κανένα συνδυασμό μοντέλων. Προφανώς το SProcess δεν είναι κατάλληλα calibrated για την προσομοίωση της διάχυσης σε γερμάνιο σε καθεστώς laser annealing. Για να βελτιωθεί αυτή η κατάσταση πρέπει πιθανότατα να επέμβουμε στις εξισώσεις που χρησιμοποιεί το SProcess για την έκφραση του συντελεστή διάχυσης αλλά αυτό απαιτεί μια εκτεταμένη μελέτη που δεν κατέστη δυνατή μέσα στα χρονικά πλαίσια της παρούσας εργασίας. Σε κάθε περίπτωση το θέμα της προσομοίωσης της διάχυσης στο γερμάνιο χρήζει εκτενέστερης μελέτης.

## § 4.7 ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Στο κεφάλαιο που ολοκληρώθηκε είδαμε αναλυτικά τη χρήση του Sentaurus Process για την προσομοίωση όλων των διεργασιών που απαιτούνται για την κατασκευή ρηχών επαφών στο πυρίτιο καθώς και μια ολοκληρωμένη θερμική μελέτη για το γερμάνιο. Αναπαράγαμε με εξαιρετική πιστότητα τις εμφυτεύσεις οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν στα δείγματά μας, ενώ παράλληλα αντιμετωπίσαμε τους περιορισμούς του SProcess ούτως ώστε να περιγράψουμε την ακτινοβόληση των υλικών με το Laser CO<sub>2</sub> τόσο σε επίπεδο απορρόφησης μέσω κατάλληλα τροποποιημένων σχέσεων όσο και σε επίπεδο θερμικής διάχυσης. Στην περίπτωση του πυριτίου, επιπλέον, μελετήσαμε τη διάχυση των προσμίξεων βορίου με βάση τα θερμικά προφίλ τα οποία προσομοιώθηκαν. Θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο πως μπορούμε να αξιοποιήσουμε τα αποτελέσματα που βγάλαμε για τον σχεδιασμό της πειραματικής διαδικασίας που τελικά ακολουθήθηκε. Παράλληλα σε συνδυασμό με τα πειραματικά αποτελέσματα θα κάνουμε μια αξιολόγηση του επιπέδου ενεργοποίησης του βορίου και τα συνεπαγόμενα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά των επαφών.

## § 4.8 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] M.E. Law και S. Cea. “Three-Dimensional Simulation of Thermal Processes”. Στο: *3-Dimensional Process Simulation*. Επιμέλεια υπό J. Lorenz. Springer Science & Business Media, 1995, 77–94. ISBN: 978-3-7091-7430-2.
- [2] B.N. Delaunay. “Sur la sphère vide”. Γαλλικά. *Bull. Acad. Sci. URSS* 7.6 (1934), 793–800.
- [3] M. de Berg κ.ά. “Delaunay Triangulations”. Στο: *Computational Geometry: Algorithms and Applications*. Springer Science & Business Media, 2008, 191–218. ISBN: 978-3-540-77973-5.
- [4] R.E. Bank κ.ά. “Transient Simulation of Silicon Devices and Circuits”. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 4.4 (Οκτ. 1985), 436–451. DOI: [10.1109/tcad.1985.1270142](https://doi.org/10.1109/tcad.1985.1270142).
- [5] O. Schenk, M. Hagemann και S. Rollin. “Recent advances in sparse linear solver technology for semiconductor device simulation matrices”. *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices SISPAD 2003*. Boston, MA, USA: IEEE, 2003. DOI: [10.1109/sispad.2003.1233648](https://doi.org/10.1109/sispad.2003.1233648).
- [6] G. Hobler και S. Selberherr. “Two-dimensional modeling of ion implantation induced point defects”. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 7.2 (1988), 174–180. DOI: [10.1109/43.3147](https://doi.org/10.1109/43.3147).
- [7] J.F. Gibbons, W.S. Johnson και S.W. Mylroie. *Projected range statistics. Semiconductors and related materials*. 2η έκδοση. Dowden, Hutchinson και Ross, Inc., Stroudsburg, PA, 1975. ISBN: 978-0-4702-9739-1.

- [8] C. Zechner κ.ά. “New implantation tables for B, BF<sub>2</sub>, P, As, In and Sb”. *SCS 2003 International Symposium on Signals Circuits and Systems Proceedings*. IEEE, 2002. DOI: [10.1109/iit.2002.1258068](https://doi.org/10.1109/iit.2002.1258068).
- [9] S. Tian, V. Moroz και N. Strecker. “Accurate Monte Carlo simulation of ion implantation into arbitrary 1D/2D/3D structures for silicon technology”. *MRS Proc.* 810 (Ιαν. 2004), 287–294. DOI: [10.1557/proc-810-c6.5](https://doi.org/10.1557/proc-810-c6.5).
- [10] S.J. Morris κ.ά. “An accurate and efficient model for boron implants through thin oxide layers into single-crystal silicon”. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing* 8.4 (1995), 408–413. DOI: [10.1109/66.475182](https://doi.org/10.1109/66.475182).
- [11] S. Chandrasekhar. “Stochastic Problems in Physics and Astronomy”. *Rev. Mod. Phys.* 15 (1 Ιαν. 1943), 1–89. DOI: [10.1103/RevModPhys.15.1](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.15.1).
- [12] M. Jaraiz κ.ά. “Atomistic Front-End Process Modelling: A Powerful Tool for Deep-Submicron Device Fabrication”. Στο: *Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2001*. Επιμέλεια υπό D. Tsoukalas και Ch. Tsamis. Springer Science & Business Media, 2001, 10–17. ISBN: 978-3-7091-7278-0. DOI: [10.1007/978-3-7091-6244-6\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-6244-6_2).
- [13] A.B. Bortz, M.H. Kalos και J.L. Lebowitz. “A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems”. *Journal of Computational Physics* 17.1 (Ιαν. 1975), 10–18. DOI: [10.1016/0021-9991\(75\)90060-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(75)90060-1).
- [14] G.H. Kinchin και R.S. Pease. “The Displacement of Atoms in Solids by Radiation”. *Rep. Prog. Phys.* 18.1 (Ιαν. 1955), 1–51. DOI: [10.1088/0034-4885/18/1/301](https://doi.org/10.1088/0034-4885/18/1/301).
- [15] S. Walther κ.ά. “Plasma implanted ultra shallow junction boron depth profiles: Effect of plasma chemistry and sheath conditions”. *J. Vac. Sci. Technol. B* 24.1 (2006), 489. DOI: [10.1116/1.2137336](https://doi.org/10.1116/1.2137336).
- [16] M. Posselt. “CrystalTRIM and its application to investigations on channeling effects during ion implantation”. *Radiation Effects and Defects in Solids* 1 (Ιούλ. 1994), 87–119. DOI: [10.1080/10420159408219774](https://doi.org/10.1080/10420159408219774).
- [17] J.P. Biersack. “Basic physical aspects of high energy implantation”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 35.3-4 (Δεκ. 1988), 205–214. DOI: [10.1016/0168-583x\(88\)90272-8](https://doi.org/10.1016/0168-583x(88)90272-8).
- [18] S. Tian. “Predictive Monte Carlo ion implantation simulator from sub-keV to above 10 MeV”. *J. Appl. Phys.* 93.10 (2003), 5893. DOI: [10.1063/1.1565690](https://doi.org/10.1063/1.1565690).
- [19] Α. Φλωράκης. “Ανόπτηση πυριτίου με χρήση laser για τον σχηματισμό ρηχών επαφών”. Διδακτορική διατριβή. Αθήνα, Ελλάδα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούν. 2011. URL: <http://dspace.lib.ntua.gr/handle/123456789/4599>.
- [20] M. Doubenskaia, Ph. Bertrand και I. Smurov. “Pyrometry in laser surface treatment”. *Surface and Coatings Technology* 201.5 (Οκτ. 2006), 1955–1961. DOI: [10.1016/j.surfcoat.2006.04.060](https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2006.04.060).
- [21] M.-J. Caturla κ.ά. “Monte Carlo simulation of Boron diffusion during low energy implantation and high temperature annealing”. *MRS Proc.* 469 (Ιαν. 1997). DOI: [10.1557/proc-469-335](https://doi.org/10.1557/proc-469-335).
- [22] P. Pichler. “Current Understanding and Modeling of Boron-Interstitial Clusters”. *MRS Proc.* 717 (Ιαν. 2002). DOI: [10.1557/proc-717-c3.1](https://doi.org/10.1557/proc-717-c3.1).
- [23] F. Cristiano κ.ά. “Clusters formation in ultralow-energy high-dose boron-implanted silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 83.26 (2003), 5407. DOI: [10.1063/1.1637440](https://doi.org/10.1063/1.1637440).
- [24] I. Avci. “Modeling extended defect ( $\{311\}$  and dislocation) nucleation and evolution in silicon”. *J. Appl. Phys.* 95.5 (2004), 2452. DOI: [10.1063/1.1645644](https://doi.org/10.1063/1.1645644).



- [25] C.J. Ortiz κ.ά. “Modeling of extrinsic extended defect evolution in ion-implanted silicon upon thermal annealing”. *Materials Science and Engineering: B* 114-115 (Δεκ. 2004), 184–192. DOI: [10.1016/j.mseb.2004.07.054](https://doi.org/10.1016/j.mseb.2004.07.054).
- [26] E. Lampin κ.ά. “Prediction of boron transient enhanced diffusion through the atom-by-atom modeling of extended defects”. *J. Appl. Phys.* 94.12 (2003), 7520. DOI: [10.1063/1.1627461](https://doi.org/10.1063/1.1627461).
- [27] C.S. Rafferty κ.ά. “Simulation of cluster evaporation and transient enhanced diffusion in silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 68.17 (1996), 2395. DOI: [10.1063/1.116145](https://doi.org/10.1063/1.116145).
- [28] M. Aboy κ.ά. “Kinetics of large B clusters in crystalline and preamorphized silicon”. *J. Appl. Phys.* 110.7, 073524 (2011). DOI: [10.1063/1.3639280](https://doi.org/10.1063/1.3639280).



## § 5.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Έχουμε ήδη αναφέρει ότι η ανάγκη για όλο και μικρότερες διατάξεις καθώς και η εισαγωγή νέων γεωμετριών, όπως τα FinFET στην τεχνολογία πυριτίου επιβάλλει τη χρήση πιο σύγχρονων τεχνικών ανόπτησης για τον ακριβή έλεγχο της τοποθέτησης του προφίλ της νόθευσης ειδικά στον σχηματισμό της πηγής και του απαγωγού στα σύγχρονα τρανζίστορ MOSFET ούτως ώστε να πληρούνται οι απαιτήσεις του Διεθνούς Χάρτη Τεχνολογίας Ημιαγωγών (ITRS) [1]. Προς αυτή την κατεύθυνση είναι ολοένα και πιο συνηθισμένη η χρήση τεχνικών ταχείας ανόπτησης όπως spike, flash ή laser που είναι και αντικείμενο αυτής της εργασίας. Η παρούσα εργασία χρησιμοποιεί ένα laser CO<sub>2</sub> στα 10.6 μm αλλά υπάρχει ένα εκτενές σύνολο από δημοσιεύσεις που αναφέρονται τόσο στη χρήση solid state [2–5] ή πιο πρόσφατα excimer laser [6–9] για την ανόπτηση του πυριτίου. Η χρήση laser CO<sub>2</sub>, πέρα από το γεγονός ότι είναι εξαιρετικά συνηθισμένη εγκατάσταση σε βιομηχανικό επίπεδο, προσφέρει ένα σύνολο από πλεονεκτήματα όπως, για παράδειγμα, ο περιορισμός του pattern dependency [10, 11], που είναι σημαντικό πρόβλημα σε πολλαπλά στοιβαγμένες δομές από διατάξεις. Παράλληλα η εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης τόσο από τη θερμοκρασία όσο και από τη νόθευση μας επιτρέπει την κατά βούληση τροποποίηση του θερμικού μήκους απορρόφησης. Επίσης περιορίζονται τα φαινόμενα θερμικού σοκ λόγω της απότομης αύξησης της θερμοκρασίας από περιβάλλοντος σε περίπου 1200°C που είναι συνηθισμένες συνθήκες μιας ανόπτησης flash ή spike.

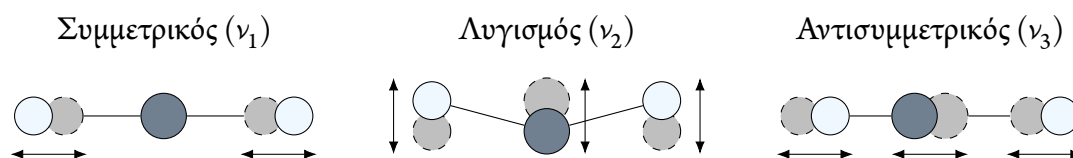
Στο κεφάλαιο που προηγήθηκε είδαμε έναν τρόπο για την TCAD μοντελοποίηση της διαδικασίας κατασκευής ρηχών επαφών στο πυρίτιο μέσω της ανόπτησης με laser CO<sub>2</sub>. Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφερθούμε αρχικά στην πειραματική διάταξη που χρησιμοποιήθηκε καθώς και στην αρχή λειτουργίας του laser CO<sub>2</sub>. Στη συνέχεια θα δούμε πως μπορούμε να αξιοποιήσουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη μοντελοποίηση για τον σχεδιασμό και εκτέλεση πειραμάτων κατασκευής ρηχών επαφών p<sup>+</sup>/n στο πυρίτιο ενώ θα γίνει μία σύγκριση ανάμεσα στα αποτελέσματα της προσομοίωσης και τα πειραματικά αποτελέσματα μέσω μετρήσεων SIMS. Επίσης θα πραγματοποιηθεί ένα σύνολο μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης για τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό των επαφών και με τη βοήθεια του SProcess θα κάνουμε μια συζήτηση γύρω από τον βαθμό ενεργοποίησης των προσμίξεων βορίου στο πυρίτιο.

## § 5.2 ΑΡΧΗ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ LASER ΔΙΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ

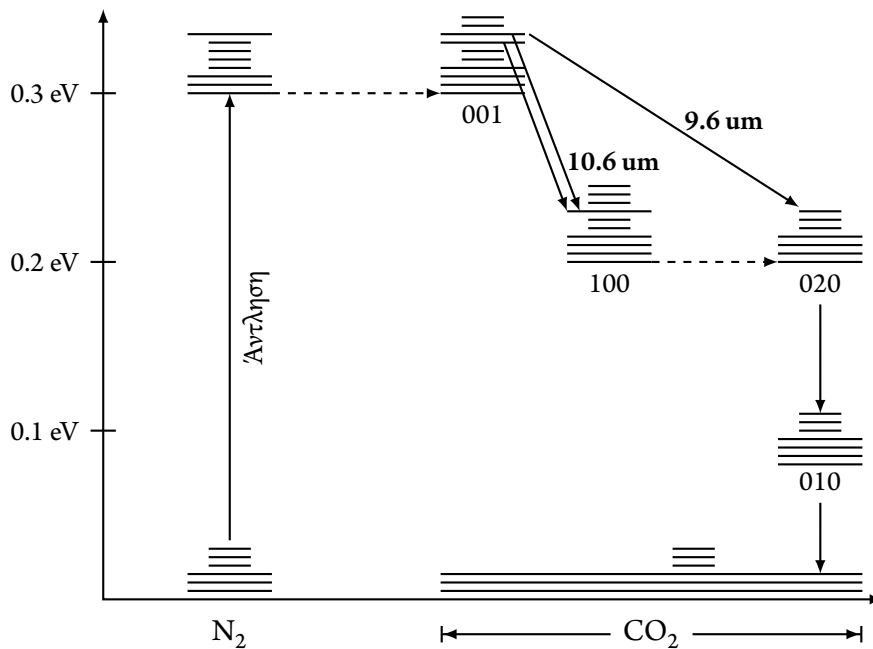
Το laser CO<sub>2</sub> είναι ένα laser συνεχούς κύματος (continuous wave, CW) και ανήκει στην ευρύτερη κατηγορία των μοριακών laser στην οποία περιλαμβάνονται επίσης laser μοριακού αζώτου N<sub>2</sub>, laser διεγερμένων διμερών excimer, κλπ. αν και σε κάθε περίπτωση το CO<sub>2</sub> είναι ο πιο χαρακτηριστικός εκπρόσωπος αυτής της κατηγορίας. Η σχετικά απλή λειτουργία του σε συνδυασμό με το εξαιρετικά μεγάλο εύρος ισχύων που μπορεί να επιτευχθεί, από μερικά milliwatt έως και εκατοντάδες kilowatt, το έχουν καταστήσει ως ένα βασικό εργαλείο τόσο σε επιστημονική και βιομηχανική κλίμακα όσο και σε ιατρικές εφαρμογές. Επίσης τα laser CO<sub>2</sub> έχουν από τις υψηλότερες αποδόσεις άντλησης που μπορεί να φτάσουν ακόμα και το 20%, πράγμα που ενισχύει τον παραπάνω ισχυρισμό.

Πιο ειδικά το CO<sub>2</sub> laser είναι ένα δονητικό-περιστροφικό laser του οποίου το ενεργό μέσο είναι ένα αέριο αποτελούμενο από μείγμα αερίων διοξειδίου του άνθρακα (CO<sub>2</sub>), αζώτου (N<sub>2</sub>) και ηλίου (He). Η βασική αρχή λειτουργίας του CO<sub>2</sub> διατυπώθηκε από τον Patel [12] τη δεκαετία του 1960. Όταν εφαρμοστεί τάση στο μείγμα διοξειδίου του άνθρακα και αζώτου, το οποίο βρίσκεται σε χαμηλή πίεση, μπορεί να δημιουργηθεί κάτω από τις κατάλληλες συνθήκες αντιστροφή πληθυσμών στα διεγερμένα επίπεδα ταλάντωσης του αερίου. Μέσω ενός οπτικού αντηχείου μπορούμε να έχουμε, τελικά, εκπομπή ακτινοβολίας σε ένα από τα δύο κύρια μήκη κύματος του laser CO<sub>2</sub>, δηλαδή τα 9.6 μm και 10.6 μm.

Οι τρεις βασικοί τρόποι ταλάντωσης του μορίου CO<sub>2</sub> είναι ο συμμετρικός, ο λυγισμός και ο αντισυμμετρικός [13], όπως μπορεί να φανεί στην εικόνα 5.1, και αποτελούν τους κύριους βαθμούς ελευθερίας. Οι κυματαριθμοί των αδιατάρακτων αυτών τρόπων ταλάντωσης αντιστοιχούν σε 1351.2 cm<sup>-1</sup>, 672.2 cm<sup>-1</sup> και 2396.4 cm<sup>-1</sup> [14]. Κάθε τρόπος ταλάντωσης αντιστοιχεί σε έναν κβαντικό αριθμό  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  και  $\nu_3$  και συνεπώς οι βασικές ενεργειακές καταστάσεις του μορίου θα περιγράφονται από συνδυασμό των τριών αυτών αριθμών. Βέβαια εκτός από αυτούς τους εγκάρσιους ρυθμούς ταλάντωσης



**Σχήμα 5.1:** Οι τρεις κανονικοί μη-περιστροφικοί τρόποι ταλάντωσης του μορίου του διοξειδίου του άνθρακα.



**Σχήμα 5.2:** Απλοποιημένο ενεργειακό διάγραμμα του laser CO<sub>2</sub>. Οι εστιγμένες γραμμές υποδηλώνουν μεταβάσεις λόγω μοριακών συγκρούσεων [15].

το μόριο μπορεί παράλληλα να περιστρέφεται κάτι το οποίο οδηγεί στη δημιουργία επιπλέον ταλαντωτικών επιπέδων περιστροφής τα οποία βρίσκονται εξαιρετικά κοντά το ένα στο άλλο κάτι το οποίο μας οδηγεί τελικά στο πιο πολύπλοκο ενεργειακό διάγραμμα του σχήματος 5.2.

Από το ίδιο διάγραμμα μπορούμε, επίσης, να δούμε ότι ουσιαστικά η διαδικασία της ακτινοβολίας ξεκινάει από τη μετάβαση μορίων αζώτου από τη βασική τους κατάσταση σε μία διεγερμένη. Λόγω της αργής αποδιέγερσης των μορίων του αζώτου και της εξαιρετικά μικρής ενεργειακής διαφορά μεταξύ της διεγερμένης στάθμης του αζώτου και μιας περιστροφικής υποστάθμης της στάθμης 001 του CO<sub>2</sub> ( $18 \text{ cm}^{-1}$  ή μόλις  $2.2 \text{ meV}$ ) πολλά από αυτά μεταφέρουν την ενέργεια που απέκτησαν μέσω μοριακών συγκρούσεων στα μόρια του CO<sub>2</sub>. Η ενέργεια, δηλαδή, που απέκτησε το άζωτο καταλήγει τελικά στο CO<sub>2</sub> και εφόσον το επίπεδο 001 είναι το υψηλότερο ενεργειακά ακολουθεί μια αλληλουχία αποδιεγέρσεων προς χαμηλότερα επίπεδα. Κάποιες από αυτές έχουν ως αποτέλεσμα ακτινοβολία laser. Επειδή οι χρόνοι μετάπτωσης για τις μεταβάσεις από τα επίπεδα 100 και 020 στο 010 είναι τουλάχιστον μια τάξη μεγέθους ταχύτεροι από τη μετάβαση από το επίπεδο 010 στη βασική στάθμη δημιουργούνται συνθήκες αντιστροφής πληθυσμών ανάμεσα στα επίπεδα 001–100 και 001–020 από τα οποία τελικά παράγεται η ακτινοβολία μήκους κύματος 10.6 και 9.6 μm που είναι τα

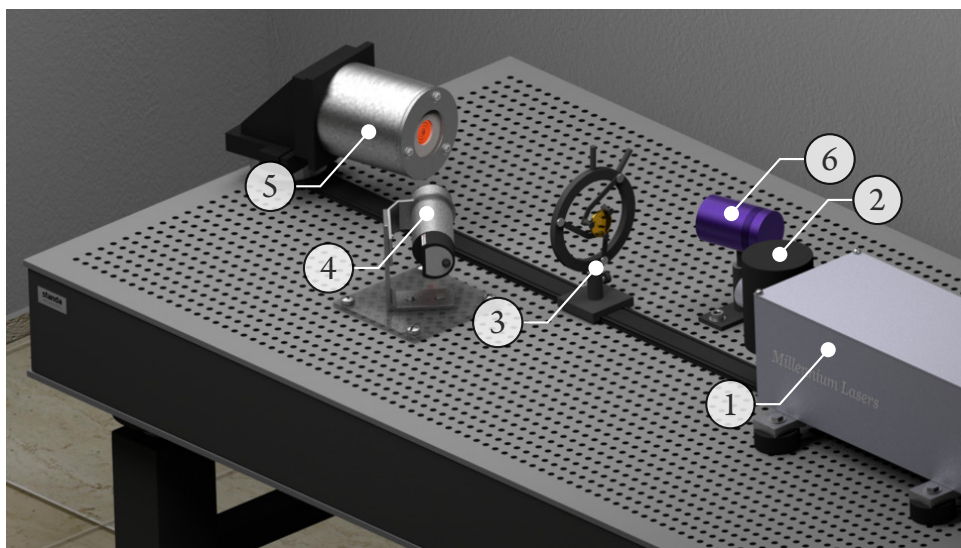
Χαρακτηριστικό	Τιμή
Εύρος ισχύος λειτουργίας	5–70 W
Αστάθεια ισχύος	<5%
Διάμετρος δέσμης	6.0 mm
Ελάχιστη εστιασμένη δέσμη	1.0 mm
TTL On/Off	5 V
Ρύθμιση ισχύος	Αναλογική διαμόρφωση 0–5 V
Ψύξη	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> :H <sub>2</sub> O 8:2

**Πίνακας 5.1:** Χαρακτηριστικά του laser Millennium ML70 που χρησιμοποιήθηκε στο εργαστήριο.

χαρακτηριστικά μήκη κύματος του laser CO<sub>2</sub> [16]. Τέλος, πρέπει να σημειώσουμε, ότι για να επιταχυνθεί η μετάβαση στη βασική στάθμη, ούτως ώστε να ξεκινήσει ένας νέος κύκλος αντιστροφής πληθυσμών, απαιτείται η παρουσία ενός τρίτου αερίου, του ηλίου. Τα διεγερμένα μόρια CO<sub>2</sub> συγκρούονται με τα αδρανή άτομα του ηλίου και επιστρέφουν τελικά στη βασική τους κατάσταση. Βλέπουμε, τελικά, ότι αυτό που αποκαλούμε laser CO<sub>2</sub> είναι ουσιαστικά ένα καλά ισορροπημένο μείγμα αερίων CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> και He.

### § 5.3 Η ΔΙΑΤΑΞΗ ΑΝΟΠΤΗΣΗΣ ΜΕ LASER CO<sub>2</sub>

Εφόσον αναφερθήκαμε στην αρχή λειτουργίας του laser CO<sub>2</sub> μπορούμε να περάσουμε στην περιγραφή της πειραματικής διάταξης η οποία χρησιμοποιήθηκε για όλα τα πειράματα που αναφέρονται τόσο σε αυτό όσο και στο επόμενο κεφάλαιο και μια άποψη της οποίας φαίνεται στο σχήμα 5.3. Η διάταξη έχει στηθεί γύρω από ένα υδρόψυκτο laser CO<sub>2</sub> ML70 της Millennium Lasers κλειστού τύπου (sealed laser) ονομαστικής ισχύος 70 W του οποίου τα χαρακτηριστικά συνοψίζονται στον πίνακα 5.1. Η επιλογή της έντασης εξόδου του laser γίνεται μέσω ενός τροφοδοτικού τάσης/ρεύματος Thurlby Thandar Instruments (TTi) QL355 το οποίο έχει ακρίβεια 1 mV στο εύρος των 0–35 V λειτουργίας του με ρεύμα αποκοπής (compliance) στα 100 mA. Το τροφοδοτικό τάσης με τη σειρά του διαμορφώνει την έξοδο του τροφοδοτικού του laser ούτως ώστε να έχουμε την επιθυμητή ισχύ αντιστοιχώντας τάσεις με μετρούμενες ισχύες. Για τη χρονική διαμόρφωση της δέσμης χρησιμοποιήθηκε τόσο μια προγραμματιζόμενη γεννήτρια τάσης Keithley 230 όσο και μια παλμογεννήτρια Hewlett Packard 8116A για πιο καλή ακρίβεια στην παραγωγή των τετραγωνικών παλμών καθώς κάτω από τα 10 ms η γεννήτρια Keithley 230 τείνει να παράγει πιο τραπεζοειδείς παλμούς με αποτέλεσμα η ενέργεια που τελικά χρησιμοποιούμε να είναι μικρότερη της επιθυμητής.



**Σχήμα 5.3:** Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης που χρησιμοποιήθηκε. Διακρίνονται το laser (1), ο beam injector (2), ο φακός ZnSe (3), το πυρόμετρο (4), η θερμαινόμενη βάση (5) και η καταβόθρα ανακλώμενων ακτίνων (6).

Η ψύξη του laser γίνεται μέσω ενός κυκλοφορητή MTA TAE Evo M10 με ένα ψυκτικό μείγμα που αποτελείται από αιθυλική γλυκόλη ( $C_2H_6O_2$ ) και απιονισμένο νερό σε αναλογία 8:2 και ροή  $1.5 \text{ L min}^{-1}$ . Η θερμοκρασία του ψυκτικού υγρού διατηρείται μεταξύ  $14.5$  και  $15.5^\circ\text{C}$  όπως προτείνεται από τον κατασκευαστή αν και παρατηρήθηκε ότι σε αυτό το εύρος θερμοκρασιών μπορεί να έχουμε απόκλιση της ισχύος εξόδου μέχρι και  $0.6 \text{ W}$  αναλόγως και της θερμοκρασίας περιβάλλοντος. Δεδομένης της ευαισθησίας των πειραμάτων προσπαθήσαμε σε κάθε περίπτωση να κάνουμε τις ακτινοβολήσεις στην ίδια θερμοκρασία ψυκτικού, συνήθως  $14.9\text{--}15^\circ\text{C}$ , για να μην έχουμε λανθασμένη εκτίμηση της ισχύος που τελικά αποδίδουμε στο δείγμα. Αυτό περιορίζει το χρονικό διάστημα το οποίο προσφέρεται για ακτινοβολήση χωρίς αλλοίωση της θερμοκρασίας του ψυκτικού σε περίπου 15 λεπτά ανά κύκλο λειτουργίας του κυκλοφορητή.

Η εστίαση της δέσμης γίνεται μέσω ενός φακού ZnSe εστιακής απόστασης  $254 \text{ mm}$  και ανακλαστικότητας μικρότερη από  $0.5\%$  η βάση του οποίου μπορεί να ολισθαίνει πάνω σε μία βαθμονομημένη ράγα ούτως ώστε να επιτρέπεται η ρύθμιση της εστίασης. Ο φακός βρίσκεται υπό μικρή γωνία περίπου  $5$  μοιρών για να αποτρέπει τις ανακλώμενες ακτίνες από το να επιστρέψουν στο laser.

Για την καλύτερη ευθυγράμμιση της αόρατης δέσμης του laser αξιοποιείται ένας beam injector της Ulo Optics. Ο injector προβάλλει ομοαξονικά με τη δέσμη του laser μια κόκκινη δέσμη από διοδικό laser. Ευθυγραμμίζοντας τις δύο δέσμες μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση για το σημείο στο οποίο θα προσπέσει η δέσμη του CO<sub>2</sub> laser.

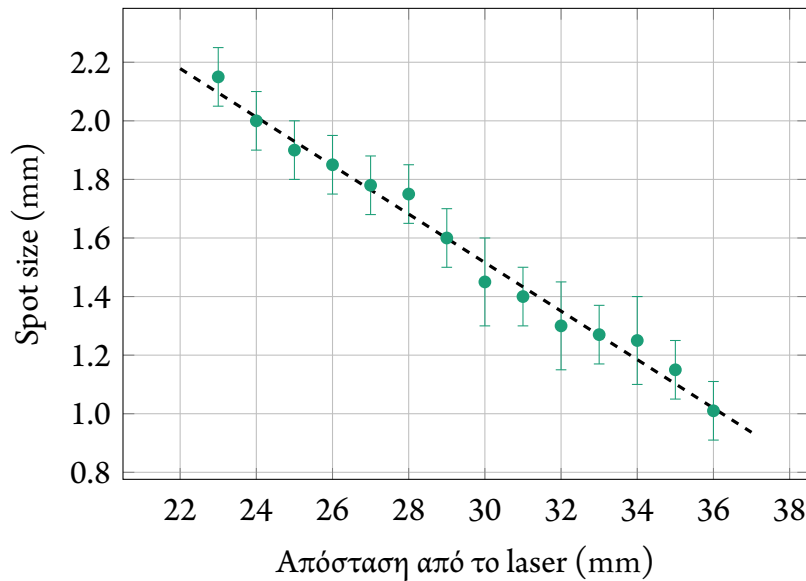
Ένα σημαντικό στοιχείο της διάταξης είναι η θερμαντική βάση. Σε αυτήν έχει προσαρμοστεί ένα θερμαντικό στοιχείο σπειροειδούς σχήματος και πάνω από αυτό μπορεί να προσαρμόζεται με χρήση των κλιπ το δείγμα. Το θερμαντικό στοιχείο, ηλεκτρικής αντίστασης  $2 \Omega$ , έχει τη δυνατότητα να ζεσταίνει τα δείγματα πυριτίου (και γερμανίου αργότερα) σε θερμοκρασίες μέχρι και  $850^{\circ}\text{C}$  σε χρονικό διάστημα μικρότερο από 2 λεπτά με καλή ομοιομορφία. Η γρήγορη θέρμανση και η σύντομη διαδικασία φόρτωσης/εκφόρτωσης του δείγματος επιτρέπει την ακτινοβολήση αρκετών δειγμάτων στο χρήσιμο διάστημα λειτουργίας. Όλη η θερμαινόμενη βάση είναι τοποθετημένη επάνω σε μια ρυθμιζόμενη βάση με μικρομετρικό βερνιέρο για την κατάλληλη ευθυγράμμιση του δείγματος με το laser ενώ μπορεί να ολισθαίνει όπως ακριβώς και ο φακός.

Το γεγονός ότι η ακτινοβολήση γίνεται σε χρονικό καθεστώς millisecond μας επιτρέπει να έχουμε real time παρακολούθηση της θερμοκρασίας που αναπτύσσεται στο δείγμα. Αυτό είναι άλλωστε και ένα πρόβλημα το οποίο αντιμετωπίζουν οι διατάξεις ανόπτησης που βασίζονται σε laser με διάρκεια παλμών κάτω από microsecond καθώς είναι εξαιρετικά δύσκολη αν όχι αδύνατη η απευθείας μέτρηση της θερμοκρασίας στο εξαιρετικά σύντομο χρονικό διάστημα της διαδικασίας. Στην δική μας περίπτωση η παρακολούθηση της θερμοκρασίας γίνεται με τη χρήση ενός υπέρυθρου πυρομέτρου Marathon MM της εταιρείας Raytek με χρόνο ολοκλήρωσης 1 ms. Το πυρόμετρο τοποθετείται στο ίδιο ύψος με τη θερμαινόμενη βάση σε απόσταση 19 cm και υπό γωνία 15 μοιρών. Στην απόσταση των 19 cm το χωρίο ολοκλήρωσης της θερμοκρασίας έχει διάμετρο 0.6 mm. Ευθυγραμμίζοντας το laser με το πυρόμετρο είτε μέσω του ενσωματωμένου viewfinder είτε μέσω της ενσωματωμένης δέσμης laser είναι δυνατή η μέτρηση της θερμοκρασίας στο κέντρο της περιοχής μέγιστης έντασης.

#### § 5.4 ΒΑΘΜΟΝΟΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ

Προτού προχωρήσουμε στα πειράματα αυτά καθ' αυτά έγινε ένα σύνολο διερευνητικών εργασιών ούτως ώστε να γίνει μια βαθμονόμηση της διάταξης. Η πρώτη από αυτές αφορά στην εξεύρεση μιας σχέσης ανάμεσα στο spot size και την απόσταση του φακού ZnSe από την έξοδο του laser. Αυτό πραγματοποιήθηκε κάνοντας ακτινοβολήσεις στην ελάχιστη δυνατή ισχύ, δηλαδή στα 5 W επάνω σε φωτογραφικό χαρτί. Κατόπιν μετρήσαμε τη διάμετρο του αποτυπώματος μέσω μικροσκοπίου. Αν και η μέθοδος είναι αρκετά προσεγγιστική μας έδωσε μια καλή αίσθηση για το μέγεθος στο οποίο πρέπει να βρίσκεται ο φακός για τα διάφορα πειράματα που ακολούθησαν. Στο γράφημα 5.4 φαίνεται το αποτέλεσμα της βαθμονόμησης. Στα περισσότερα πειράματα τελικά κρα-



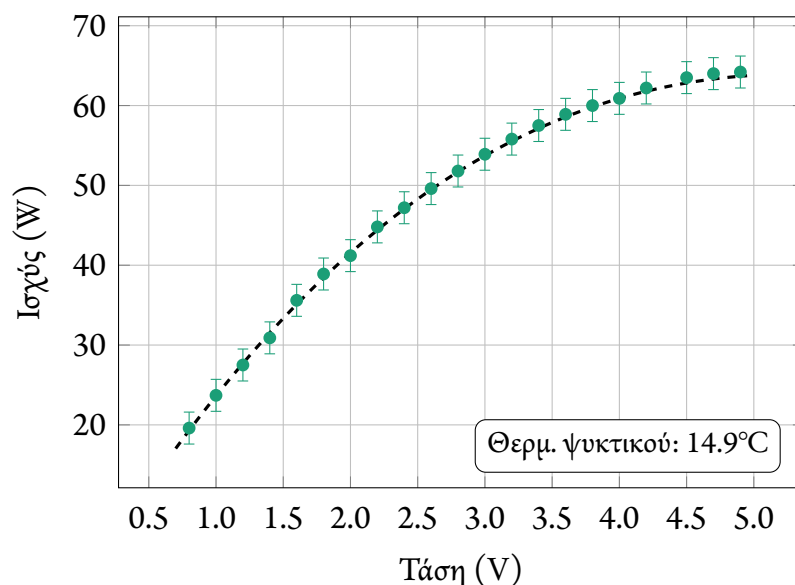


**Σχήμα 5.4:** Εξάρτηση του spot size από την απόσταση από την έξοδο του laser.

τήσαμε spot size μεταξύ 1.0 και 1.2 mm κάτι το οποίο υποδηλώνει απόσταση 34 έως 36 mm από την έξοδο του laser. Μεγέθη spot μεγαλύτερα από 1.25 mm έχουν ως αποτέλεσμα πολύ μικρές πυκνότητες ισχύος ούτως ώστε να θερμάνουν σε σύντομο χρονικό διάστημα το δείγμα.

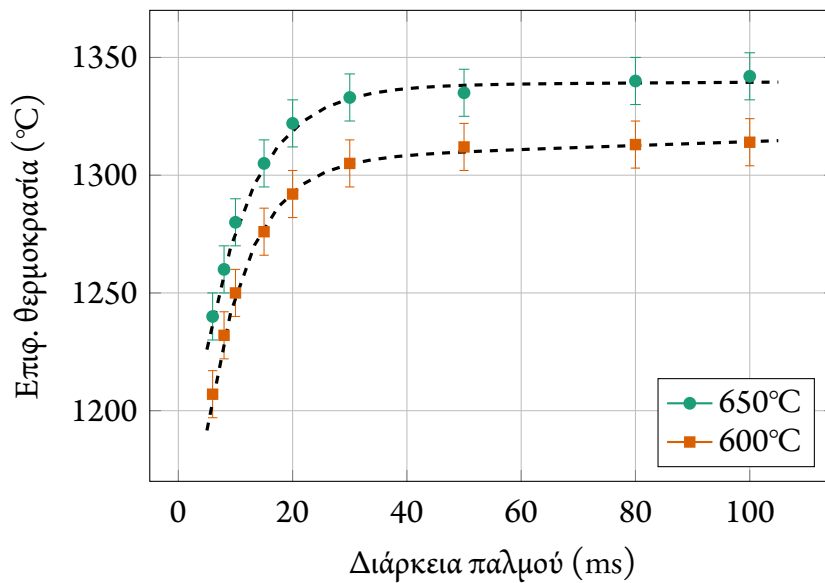
Επόμενο βήμα είναι η βαθμονόμηση της ισχύος του laser σε σχέση με την τάση που επιλέγεται από το τροφοδοτικό. Με χρήση ενός ισχυόμετρου Ophir σαρώσαμε όλο το εύρος τάσεων από 0.8 έως 4.9 V. Για να επιτρέψουμε στο ισχυόμετρο να λάβει μία πλήρη μέτρηση περιμέναμε 2 δευτερόλεπτα πριν την καταγραφή της τιμής. Αποτέλεσμα αυτών των μετρήσεων είναι το γράφημα 5.5. Όπως φαίνεται και από το διάγραμμα μετά τα περίπου 4 V η έξοδος του laser παρουσιάζει κορεσμό με την μέγιστη επιτεύξιμη ισχύ να φτάνει τα περίπου 65 W. Αν και πιο χαμηλό από το ονομαστικό μέγιστο η τιμή αυτή μπορεί να θεωρηθεί επαρκής για το εύρος θερμοκρασιών που θέλουμε να πετύχουμε. Να αναφέρουμε, ότι αυτές οι τιμές είναι μετά από επαναευθυγράμμιση του οπτικού αντηχείου του laser καθώς κατά την πρώτη προσπάθεια λειτουργίας του οι καταγεγραμμένες ισχύες ήταν 7 W μικρότερες. Η ευθυγράμμιση οδήγησε σε αισθητή βελτίωση της παραγόμενης ισχύος. Σημειώνουμε επίσης ότι όλες οι μετρήσεις έγιναν στην ίδια θερμοκρασία ψυκτικού (14.9°C).

Άπαξ και τα χαρακτηριστικά της δέσμης είχαν βαθμονομηθεί τελευταία προεργασία που έπρεπε να γίνει ήταν η μελέτη των επιτεύξιμων θερμοκρασιών με τον συνδυασμό προθέρμανσης επί της θερμαντικής βάσης και της ακτινοβολήσης. Όπως έχουμε



**Σχήμα 5.5:** Αντιστοίχιση επιλεγμένης τάσης στο τροφοδοτικό με την ισχύ εξόδου του laser όπως προέκυψε από τα πειράματα βαθμονόμησης της διάταξης.

ήδη πει η προθέρμανση παίζει εξαιρετικά σημαντικό ρόλο στην απορρόφηση της ακτινοβολίας και τελικά στις θερμοκρασίες που μπορούν να σημειωθούν. Παράλληλα η προθέρμανση του δείγματος επιτρέπει την επίτευξη τελικής θερμοκρασίας σε πολύ συντομότερο διάστημα (10 ή λιγότερα millisecond) κάτι το οποίο είναι κρίσιμο για τον περιορισμό της διάχυσης. Επίσης μειώνονται οι απαιτήσεις σε πυκνότητα ισχύος [17] γεγονός το οποίο οδηγεί σε πιο ήπια άνοδο της θερμοκρασίας στο δείγμα και κατά συνέπεια περιορίζει το επαγόμενο θερμικό σοκ. Σε αντίθετη περίπτωση για ακτινοβολία χωρίς προθέρμανση μπορεί να χρειαστούν ακόμα και 90 δευτερόλεπτα για επίτευξη θερμοκρασιών της τάξης των 1000°C [18] κάτι το οποίο προφανώς οδηγεί σε εκτεταμένη διάχυση των προσμίξεων. Προθέρμανση της τάξης των 600–650°C φαίνεται να είναι οι ιδανικότερες [19–22] για την επίτευξη θερμοκρασιών κοντά στο σημείο τήξης του πυριτίου. Με βάση τα παραπάνω πραγματοποιήσαμε μια σειρά από ακτινοβολήσεις με διάφορες διάρκειες παλμών τόσο στους 600 όσο και στους 650 °C για δέσμη ισχύος 62 W με spot size 1.2 mm, δηλαδή ελαφρώς αφεστιασμένη. Το αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας μπορεί να φανεί στο γράφημα 5.6. Είναι εμφανής η επίδραση της προθέρμανσης στις τελικές θερμοκρασίες που μπορούν να επιτευχθούν, κάτι το οποίο άλλωστε ήταν αναμενόμενο. Μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η μέγιστη θερμοκρασία φτάνει σε κορεσμό περίπου στα 40 ms και είναι αρκετά κοντά στη θερμοκρασία τήξης του πυριτίου ειδικά στην περίπτωση της προθέρμανσης των 650°C. Βέβαια σε



**Σχήμα 5.6:** Θερμοκρασία που αναπτύχθηκε στην επιφάνεια του πυριτίου για ακτινοβόληση ισχύος 62 W με spot size 1.2 mm για διάφορους χρόνους ανόπτησης.

πολύ σύντομους παλμούς η μέγιστη θερμοκρασία είναι μέχρι και 100°C χαμηλότερη. Αυτό υποδεικνύει ότι πρέπει να χρησιμοποιηθεί πιο εστιασμένη δέσμη ούτως ώστε να γίνει κάποιο compensation στη διαφορά των θερμοκρασιών κάτι το οποίο και τελικά έγινε για τα πειράματα που διεξήχθησαν όπως θα συζητήσουμε και αμέσως μετά. Σε κάθε περίπτωση αυτή η βαθμονόμηση ήταν αρκετή για να επιβεβαιώσουμε τη δυνατότητα επίτευξης των απαιτούμενων θερμοκρασιών ειδικά στην περίπτωση των 650°C που είναι και η θερμοκρασία προανόπτησης η οποία τελικά επιλέχθηκε.

## § 5.5 Η ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ — ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ

Εφόσον όλες οι παραπάνω διερευνητικές εργασίες ολοκληρώθηκαν είμαστε πλέον έτοιμοι να προχωρήσουμε στη διεξαγωγή των πειραμάτων κατασκευής και χαρακτηρισμού ρηχών επαφών στο πυρίτιο. Η πειραματική διαδικασία που ακολουθήθηκε έχει ως εξής.

### 5.5.1 Εμφύτευση και ακτινοβόληση

Πρώτο βήμα των πειραμάτων είναι η επιλογή των συνθηκών για την εμφύτευση πλάσματος ΡΙΙΙ που έγινε. Η επιλογή των δόσεων και ενεργειών έγινε με τη βοήθεια του SProcess ούτως ώστε να έχουμε μια εκτίμηση του εμφυτευμένου προφίλ προσμί-

ξεων όπως είδαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο. Τελικά οι συνθήκες εμφύτευσης που χρησιμοποιήθηκαν είναι δόση  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  και ενέργεια 600 eV για όλα τα δείγματα που μελετήθηκαν. Οι εμφυτεύσεις έγιναν με χρήση του εμφυτευτή πλάσματος PULSION HP [23] της εταιρείας Ion Beam Services με την οποία συνεργαστήκαμε για τη διεξαγωγή αυτών των πειραμάτων. Ο εμφυτευτής PULSION χρησιμοποιεί επαγωγικά συζευγμένο πλάσμα (inductively coupled plasma, ICP) βασιζόμενο είτε σε συνεχή είτε σε παλμική διέγερση αν και η δεύτερη προτιμάται για την αποφυγή σχηματισμού συσσωματωμάτων προσμίξεων στον θάλαμο καθώς και για την αποφυγή συσσώρευσης φορτίου στο δείγμα. Το δεύτερο είναι εξαιρετικά σημαντικό για την αποφυγή καταστροφής σε δείγματα που έχουν επίστρωση ρητίνης. Επίσης η διαφορά πίεσης ανάμεσα στην πηγή του πλάσματος και τον θάλαμο εναπόθεσης φτάνει μέχρι και τις δύο τάξεις μεγέθους ανάλογα με την εφαρμογή η οποία επιλέγεται. Σε κάθε περίπτωση το δείγμα βρίσκεται σε αρνητικό δυναμικό στο ένα ηλεκτρόδιο του θαλάμου εκκένωσης οπότε τα ιόντα του πλάσματος ωθούνται προς αυτό και τελικά εμφυτεύονται. Υπάρχει δυνατότητα για εμφύτευση μιας μεγάλης γκάμας προσμίξεων όπως  $\text{AsH}_3$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{B}_2\text{H}_6$ ,  $\text{PH}_3$ , κλπ. και η διαδικασία είναι κατάλληλη τόσο για bulk πυρίτιο όσο και για SOI [24]. Στα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτά τα πειράματα έγινε εμφύτευση με ένα μείγμα ιόντων  $\text{BF}_3^+$ ,  $\text{BF}_2^+$ ,  $\text{BF}^+$  και  $\text{B}^+$ .

Για την επιδιόρθωση της επαγόμενης φθοράς που προκαλείται από την εμφύτευση καθώς και για την ενεργοποίηση των εμφυτευμένων προσμίξεων προχωρήσαμε, στη συνέχεια, στην ακτινοβολήση των δειγμάτων με τη διάταξη Laser  $\text{CO}_2$  που περιγράψαμε πιο πριν. Αρχικά έγινε ένα σύνολο διερευνητικών ακτινοβολήσεων για τη βαθμονόμηση του συστήματος και τη σύγκριση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης χρησιμοποιώντας παλμούς ισχύος 64 W με spot size 1.8 mm και διάρκεια παλμών 20 ως 80 ms. Οι τελικές ακτινοβολήσεις, ωστόσο, έγιναν με χρήση ίδιας ισχύος, 64 W, αλλά μικρότερου spot size, 1.1 mm, και διάρκειας ακτινοβολήσης (από 6 μέχρι 10 ms). Αυτές οι συνθήκες αντιστοιχούν σε πυκνότητα ισχύος περίπου  $9400 \text{ W cm}^{-2}$  και με βάση τους χρόνους ακτινοβολήσης η πυκνότητα ενέργειας κυμάνθηκε από 56 έως  $94 \text{ J cm}^{-2}$ . Η παραπάνω διαφοροποίηση έγκειται στο γεγονός ότι το χρονικό εύρος από 6 ως 10 ms είναι πολύ κοντά στην ελάχιστη συχνότητα λήψης μετρήσεων του πυρομέτρου οπότε για να έχουμε καλύτερη ακρίβεια στις μετρούμενες θερμοκρασίες αυξήσαμε τους χρόνους ακτινοβολήσης μειώνοντας την πυκνότητα ισχύος. Άπαξ και βαθμονομήθηκαν οι θερμοκρασίες που μετρήσαμε με τις προσομοιούμενες χρησιμοποιήθηκαν οι τελικές συνθήκες ακτινοβολήσης οι οποίες αναφέρθηκαν για το σύνολο των πειραμάτων που αναφέρονται μέχρι τέλος αυτού του κεφαλαίου.

Σε όλα τα πειράματα τα δείγματα τοποθετούνται κάθετα στη θερμαντική βάση της διάταξης καθώς, όπως αναφέραμε, η προθέρμανση είναι απαραίτητη για την επίτευξη υψηλού ρυθμού οπτικής απορρόφησης στην αρχή του φαινομένου της ανόπτησης στο πυρίτιο το οποίο υπό άλλες συνθήκες είναι διάφανο στο μήκος κύματος των 10.6 μm. Η θερμοκρασία προθέρμανσης είναι 650°C και ο χρόνος ο οποίος χρειάζεται για να επιτευχθεί αυτή η θερμοκρασία είναι περίπου 1 λεπτό. Ανάλογα με τον χρόνο ακτινοβολήσης οι θερμοκρασίες οι οποίες τελικά αναπτύσσονται στο πυρίτιο κυμαίνονται από 1250 έως 1400°C.

### 5.5.2 Ηλεκτρικός χαρακτηρισμός

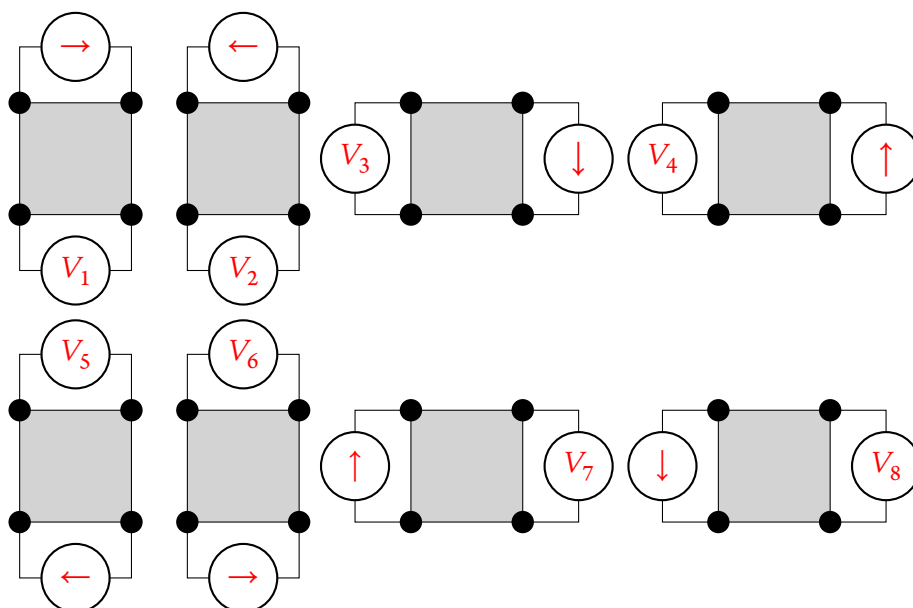
Ο κύριος παράγοντας αξιολόγησης των σχηματιζόμενων επαφών μετά την ακτινοβολήση είναι μέσω ηλεκτρικού χαρακτηρισμού. Το κύριο μέγεθος που μας ενδιαφέρει να μετρήσουμε είναι η *επιφανειακή αντίσταση* ή *sheet resistance*. Η επιφανειακή αντίσταση είναι ένα χαρακτηριστικό μέγεθος αντίστασης κατάλληλο για δείγματα τα οποία είτε είναι λεπτά φιλμ είτε έχουν μια πολύ λεπτή ομοιόμορφη σύσταση. Είναι πολύ συνηθισμένη μέτρηση για την αξιολόγηση των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών λεπτών φιλμ ή νοθευμένων ημιαγωγών όπως στην περίπτωση μας το πυρίτιο (και πιο μετά το γερμάνιο). Καθώς στους ημιαγωγούς η αγωγιμότητα εξαρτάται πολύ έντονα από το βάθος, λόγω της ανομοιόμορφης κατανομής των προσμίξεων είναι πιο βολικό να αξιοποιούμε την επιφανειακή αντίσταση η οποία ουσιαστικά είναι αντίσταση ανηγμένη ανά μονάδα βάθους [25]. Αν  $w$  το πλάτος του δείγματος και  $t$  το πάχος του (οπότε η διατομή είναι  $A = wt$ ) η αντίσταση σε ένα κομμάτι υλικού μήκους  $l$  θα είναι:

$$R = \frac{\rho}{t} \frac{l}{w} \quad (5.1)$$

όπου  $\rho$  η ειδική αντίσταση του υλικού. Η επιφανειακή αντίσταση ορίζεται

$$R_s \equiv \frac{\rho}{t} \quad (5.2)$$

Με γνώση της επιφανειακής αντίστασης μπορούμε να βρούμε την αντίσταση ενός υλικού ανεξαρτήτου πάχους απλά πολλαπλασιάζοντας την επιφανειακή αντίσταση με τα επιφανειακά γεωμετρικά του χαρακτηριστικά. Αν και η επιφανειακή αντίσταση έχει πρακτικά μονάδες αντίστασης, για να υπάρχει διαχωρισμός από την συνήθη αντίσταση του υλικού η μονάδα η οποία χρησιμοποιείται κατά σύμβαση είναι *ohm ανά τετράγωνο* ( $\Omega/\square$ ). Η επιφανειακή αντίσταση μπορεί να μετρηθεί απευθείας με χρήση ηλεκτρικού χαρακτηρισμού τεσσάρων ακίδων. Συγκεκριμένα χρησιμοποιήσαμε την μέθοδο τεσσάρων ακίδων Van der Pauw [26, 27] η οποία είναι μια απλή μέθοδος στην οποία δεν



**Σχήμα 5.7:** Οι οκτώ συνδεσμολογίες της μέτρησης van der Pauw που απαιτείται για την εξαγωγή της επιφανειακής αντίστασης [28].

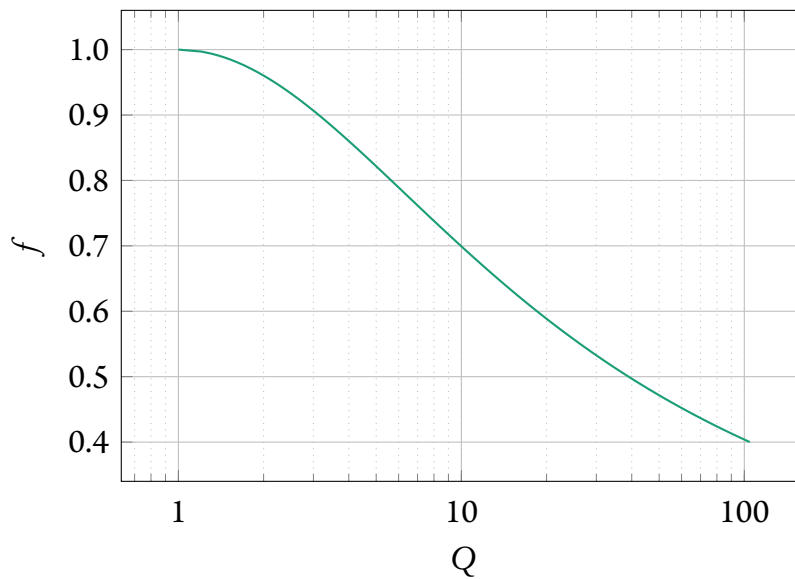
χρειάζεται διάτρηση του υλικού (όπως στις μετρήσεις spreading resistance) ενώ μπορούμε να μετράμε σε σχετικά ακανόνιστες γεωμετρίες μέσω ενός τρόπου αυτοδιόρθωσης που διαθέτει η μέθοδος.

Για τη διεξαγωγή μετρήσεων van der Pauw χρειαζόμαστε μια πηγή ρεύματος και ένα νανοβολτόμετρο καθένα εκ των οποίων συνδέεται με δύο ακίδες του prober ηλεκτρικών μετρήσεων του εργαστηρίου. Η DC πηγή ρεύματος που χρησιμοποιήθηκε ήταν μία Keithley 6220 ενώ το βολτόμετρο ήταν το Agilent 34420A. Μέσω της πηγής ρεύματος σαρώνουμε ένα εύρος ρευμάτων (και για τις δύο πολικότητες) τα οποία διαρρέουν δύο σημεία του υλικού ενώ μετράμε την τάση που αναπτύσσεται σε άλλα δύο. Οι ακροδέκτες εναλλάσσονται κυκλικά μέχρι να καλυφθούν όλοι οι συνδυασμοί που φαίνονται στο σχήμα 5.7. Για την αυτοματοποίηση αυτής της διαδικασίας γράφτηκε ένα πρόγραμμα για τη συλλογή μετρήσεων ρεύματος-τάσης.

Για κάθε επιλεγμένο ρεύμα,  $I$ , μπορούν να εξαχθούν δύο ειδικές αντιστάσεις σύμφωνα με τους τύπους

$$\rho_A = \frac{\pi}{\ln 2} f_A \frac{V_1 - V_2 + V_3 - V_4}{4I} \quad (5.3\alpha')$$

$$\rho_B = \frac{\pi}{\ln 2} f_B \frac{V_5 - V_6 + V_7 - V_8}{4I} \quad (5.3\beta')$$



**Σχήμα 5.8:** Η εξάρτηση των δύο παραμέτρων που υπεισέρχονται στην εξίσωση 5.5.

με την επιφανειακή αντίσταση να είναι η μέση τιμή των δύο αυτών αντιστάσεων

$$R_s = \frac{\rho_A + \rho_B}{2} \quad (5.4)$$

Οι παράγοντες  $f_A$  και  $f_B$  είναι οι παράγοντες διόρθωσης της γεωμετρίας. Σε ένα τέλεια συμμετρικό δείγμα ισούνται με τη μονάδα, αλλά επειδή αυτό δεν είναι πάντα εφικτό η μέθοδος Van der Pauw μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε αυτή τη διόρθωση στις επιμέρους ειδικές αντιστάσεις. Κάθε ένας από τους δύο παράγοντες πρέπει να πληροί τη σχέση

$$\frac{Q-1}{Q+1} = \frac{f}{\ln 2} \cosh^{-1} \left[ \frac{1}{2} \exp \left( \frac{\ln 2}{f} \right) \right] \quad (5.5)$$

ενώ κάθε ένας παράγοντας  $Q$  υπολογίζεται με βάση τις σχέσεις

$$Q_A = \frac{V_1 - V_2}{V_3 - V_4} \quad (5.6\alpha')$$

$$Q_B = \frac{V_5 - V_6}{V_7 - V_8} \quad (5.6\beta')$$

Η εξίσωση (5.5) επιλύεται αριθμητικά (πχ. με τη μέθοδο Newton-Raphson) με οποιοδήποτε υπολογιστικό πρόγραμμα. Στην περίπτωση μας αξιοποιήσαμε το πακέτο SciPy για τη γλώσσα προγραμματισμού python. Μια γραφική απεικόνιση για την εξάρτηση των δύο παραμέτρων φαίνονται και στο γράφημα της εικόνας 5.8.

Παρότι οι μετρήσεις μπορούν να γίνουν απευθείας επάνω στο πυρίτιο τα αποτελέσματα έχουν καλύτερη ακρίβεια αν υπάρχουν μεταλλικές επαφές στην επιφάνεια καθώς με αυτό τον τρόπο μειώνεται η αντίσταση επαφής (contact resistance) των ακίδων βολφραμίου με τις οποίες είναι εξοπλισμένος ο probe του εργαστηρίου. Για αυτό το λόγο σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε μια απλή μάσκα οπτικής λιθογραφίας η οποία αποτελείται από τετράγωνα μεγέθους 75  $\mu\text{m}$  με edge-to-edge απόσταση επίσης 75  $\mu\text{m}$ . Με χρήση e-gun evaporation εναποτέθηκαν 35 nm χρυσού με 5 nm τιτανίου για καλύτερη πρόσφυση στον ημιαγωγό. Η δομή σχηματίστηκε με την τεχνική lift-off αφού τα δείγματα αφέθηκαν περίπου 1 ώρα σε θερμή ακετόνη θερμοκρασίας 45°C. Τα υπολείμματα ρητίνης αφαιρέθηκαν με sonication σε λουτρό υπερήχων για μερικά δευτερόλεπτα. Οι επαφές που κατασκευάστηκαν καλύπτουν πλήρως την ανοπτημένη περιοχή η οποία μαρκάρεται από ένα βαθύ αυλάκι που σχηματίστηκε με τη χρήση diamond stylus. Πέρα από οπτική καθοδήγηση το αυλάκι αυτό χρησιμεύει επίσης στην καλύτερη ηλεκτρική απομόνωση της ανοπτημένης περιοχής από τον υπόλοιπο ημιαγωγό.

Τα ρεύματα τα οποία σαρώθηκαν για την εξαγωγή της επιφανειακής αντίστασης κυμαίνονται από 10 nA μέχρι 1 mA. Το εύρος ρευμάτων κάτω από  $\mu\text{A}$ , όμως, εμφάνισε αρκετά υψηλό θόρυβο και ως αποτέλεσμα τα πιο πολλά αποτελέσματα που βγήκαν σε αυτό το εύρος να μην είναι αξιοποιήσιμα. Αντίστοιχα ρεύματα πάνω από 500  $\mu\text{A}$  δέχονται την παρασιτική επίδραση του υποστρώματος και ήταν και αυτά μη αξιοποιήσιμα. Ωστόσο τα ρεύματα ανάμεσα σε αυτές τις δύο ακραίες τιμές μας έδωσαν λογικές και επαναλήψιμες μετρήσεις και είναι το εύρος ρευμάτων στο οποίο τελικά πραγματοποιήθηκαν όλες οι μετρήσεις. Πρέπει να σημειώσουμε ότι λόγω της μη ομοιόμορφης κατανομής ισχύος και κατ' επέκταση θερμοκρασίας της γκαουσιανής δέσμης του laser CO<sub>2</sub> είναι λογικό να υποθέσουμε ότι η διάχυση των προσμίξεων δεν θα είναι ομοιόμορφη σε όλη την έκταση της επιφάνειας που ακτινοβολήθηκε. Ως εκ τούτου επιβάλλεται να κάνουμε ένα εκτενές σύνολο μετρήσεων με χρήση των επαφών που κατασκευάστηκαν ώστε να εντοπίσουμε την περιοχή ελάχιστης αντίστασης η οποία θα έλαβε τελικά και το μεγαλύτερο ποσοστό θερμότητας. Η περιοχή ελάχιστης αντίστασης είναι και αυτή που χρησιμοποιήθηκε για τις μετρήσεις SIMS.

### 5.5.3 Μετρήσεις SIMS

Για την εξαγωγή της κατανομής του βορίου πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις Secondary Ion Mass Spectroscopy (SIMS) από τον Δρ. G. Bennisayag στο ινστιτούτο Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES) του Γαλλικού



Εθνικού Κέντρου Ερευνών (Centre National de la Recherche Scientifique, CNRS). Η μέθοδος SIMS είναι μια καταστροφική μέθοδος στοιχειομετρικής ανάλυσης που χρησιμοποιείται εκτεταμένα στην τεχνολογία ημιαγωγών. Η αρχή της μεθόδου βασίζεται στον βομβαρδισμό του προς ανάλυση στόχου με ιόντα όπως  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{Ar}^+$  ή  $\text{Ga}^+$  (πρωτογενής δέσμη) τα οποία καθώς προσκρούουν σε αυτόν εκτοπίζουν (sputter) άτομα του κρυστάλλου μέσα στα οποία περιλαμβάνονται και οι προσμίξεις. Η ενέργεια της πρωτογενούς δέσμης κυμαίνεται από 0.3 έως 30 keV αν και για την περίπτωση ρηχών μετρήσεων η ενέργεια δεν ξεπερνάει τα 2 keV. Τα άτομα που εξάγονται λόγω χαμηλής πίεσης κινούνται προς την ανιχνευτική διάταξη (δευτερογενής δέσμη) της οποίας κύριο κομμάτι είναι ο φασματογράφος μάζας (mass spectrometer). Μέσω του φασματογράφου έχουμε τελικά την ανάλυση της εκτοπισμένης δέσμης ατόμων στα άτομα που τον απαρτίζουν [29].

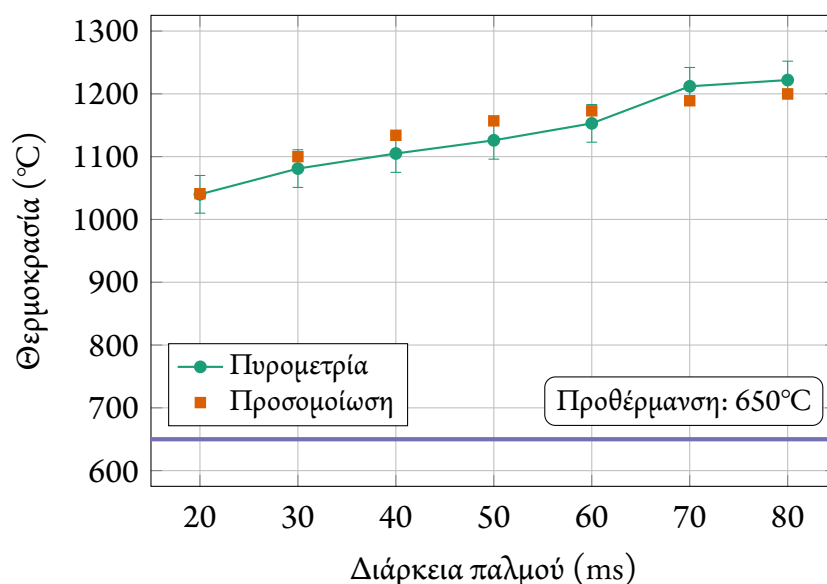
Τα ιόντα της πρωτογενούς δέσμης οδηγούνται στο δείγμα μέσω μιας συστοιχίας ηλεκτρομαγνητικών φακών, κατά αντιστοιχία με τη συστοιχία φακών που χρησιμοποιείται σε διατάξεις εστιασμένης ιοντικής δέσμης (Focused Ion Beam, FIB). Στην έξοδο της δέσμης υπάρχει ένα φίλτρο το οποίο επιτρέπει τη διέλευση μόνο των ιόντων που πληρούν μια συγκεκριμένη αναλογία μάζας προς φορτίου ούτως ώστε να μην έχουμε την παρουσία ανεπιθύμητων προσμίξεων στο υλικό προς ανάλυση. Από κει και πέρα η δέσμη εστιάζεται ξανά με ένα σύστημα ηλεκτροστατικών φακών. Η καλή εστίαση της δέσμης είναι απαραίτητη για την καθετότητα των τοιχωμάτων του κρατήρα που διανοίγεται στο δείγμα και κατ' επέκταση για τη διακριτική ικανότητα της μέτρησης. Τα ιόντα της δευτερογενούς δέσμης εξάγονται από το δείγμα μέσω ενός ηλεκτροδίου που βρίσκεται πολωμένο σε υψηλό δυναμικό (extractor) και στη συνέχεια με ένα ακόμα σύστημα ηλεκτροστατικών φακών οδηγείται στον φασματογράφο για ανάλυση. Η διαδικασία είναι ουσιαστικά αντίστοιχη με την αρχή λειτουργίας των ηλεκτρονικών μικροσκοπίων σάρωσης αλλά για φορτισμένα ιόντα αντί για ηλεκτρόνια.

Αφού η δευτερογενής δέσμη αναλυθεί σε μονοενεργειακή ανάλογα με το υλικό που θέλουμε να ανιχνεύσουμε ακολουθεί η καταμέτρηση των ιόντων. Αυτή γίνεται μέσω ενός πολλαπλασιαστή ηλεκτρονίων και ενός Faraday cup. Παράλληλα παρέχονται ανιχνευτές και για την οπτική απεικόνιση της επιφάνειας για προσανατολισμό επί του δείγματος. Το Faraday cup είναι μια εξαιρετικά απλή αλλά ταυτόχρονα πολύ ευαίσθητη διάταξη που χρησιμοποιείται για την καταμέτρηση φορτισμένων σωματιδίων είτε αυτά είναι ηλεκτρόνια είτε βαριά φορτισμένα ιόντα [30]. Η καταμέτρηση γίνεται πρακτικά μέσω του ρεύματος που μεταφέρει η δέσμη στη διάταξη.

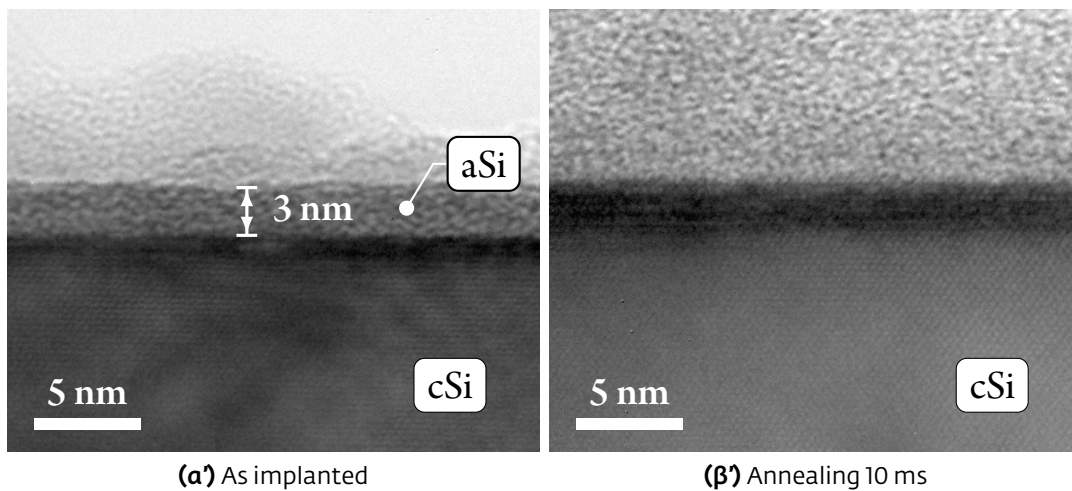
Στα πλαίσια αυτής της εργασίας χρησιμοποιήθηκε η διάταξη SIMS IMS 4fE6 της εταιρείας Cameca. Η πρωτογενής δέσμη αποτελείται από ιόντα μοριακού οξυγόνου με ενέργεια 1.5 keV η οποία προσπίπτει υπό γωνία  $68^\circ$  στο δείγμα. Το ρεύμα της πρωτογενούς δέσμης είναι 20.5 nA. Το δείγμα βρίσκεται τοποθετημένο επί περιστρεφόμενης βάσης για την ομοιομορφία των τοιχωμάτων του σχηματιζόμενου κρατήρα διαμέτρου 150  $\mu\text{m}$  και είναι πολωμένο στα 600 V.

## § 5.6 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Η μελέτη των αποτελεσμάτων συνίσταται στην αντιπαράθεση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τη προσομοίωση με αυτά που πήραμε από τα πειράματα που αναφέρθηκαν πιο πάνω. Αρχικά μας ενδιαφέρει να δούμε κατά πόσο η θερμική προσομοίωση που περιγράφηκε εκτενώς στο προηγούμενο κεφάλαιο αντικατοπτρίζει την πραγματικότητα, καθώς η θερμοκρασία είναι ο κύριος παράγοντας ο οποίος τελικά καθορίζει τη διάχυση των προσμίξεων. Γι αυτό, όπως αναφέραμε ήδη, κάναμε ακτινοβολήσεις με μεγαλύτερο spot size και διάρκεια παλμών ούτως ώστε να συγκρίνουμε την πυρομετρία με την προσομοίωση και το αποτέλεσμα αυτής της εργασίας φαίνεται στο γράφημα 5.9. Όπως είναι εμφανές έχουμε εξαιρετική πιστότητα αποτελεσμάτων ανάμεσα



**Σχήμα 5.9:** Μέγιστες καταγεγραμμένες τιμές θερμοκρασίας στην επιφάνεια και σύγκριση με την προσομοίωση. Το spot size της δέσμης είναι 1.8 mm και η θερμοκρασία προθέρμανσης 650°C.

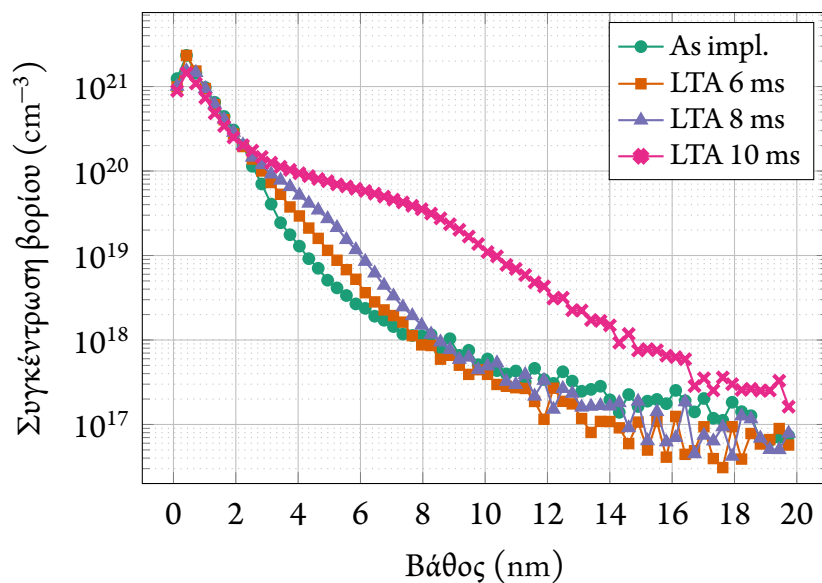


**Σχήμα 5.10:** Μικρογραφίες TEM πριν και μετά την ακτινοβόληση με το CO<sub>2</sub> laser διάρκειας 10 ms στα 9430 W/cm<sup>2</sup> (64 W).

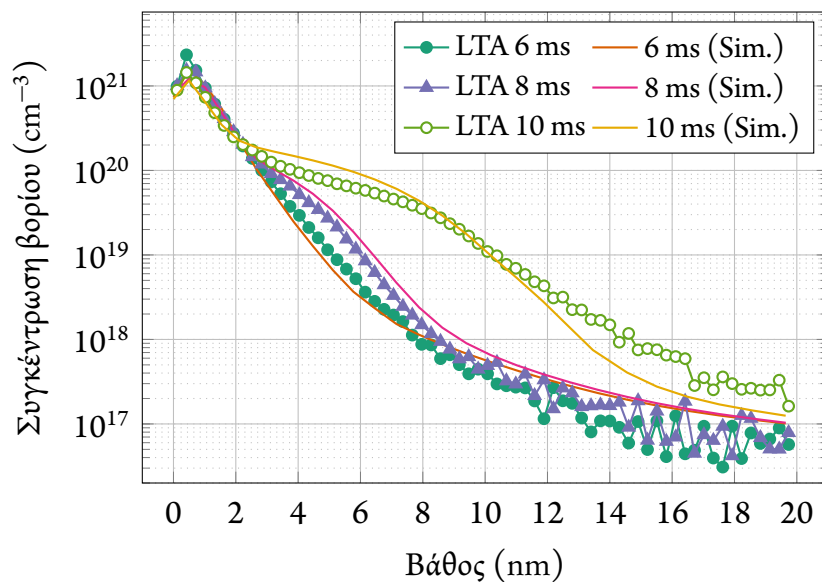
στις δύο διεργασίες κάτι το οποίο μας επιβεβαιώνει την ορθή ανάπτυξη της ρουτίνας προσομοίωσης που αναπτύχθηκε. Έχοντας βεβαιωθεί για αυτό γνωρίζουμε πλέον ότι τα αποτελέσματα προσομοίωσης και πειραμάτων μπορούν να είναι άμεσα συγκρίσιμα.

Θα δούμε πρώτα την επίδραση που έχει η δέσμη στα δομικά χαρακτηριστικά του υλικού. Στη μικρογραφία TEM της εικόνας 5.10α' μπορούμε να δούμε το επίπεδο αμορφοποίησης που εισάγεται από την εμφύτευση πλάσματος. Το βάθος αμορφοποίησης εντοπίζεται στα περίπου 2.5–3 nm και δείχνει το εξαιρετικά μικρό επίπεδο φθοράς που προκαλεί αυτή η μέθοδος εμφύτευσης η οποία είναι συγκρίσιμη με αντίστοιχες μεθόδους εμφύτευσης βορίου ενέργειας μικρότερης του 1 keV. Το εύρος αμορφοποίησης έρχεται σε εξαιρετικά καλή συμφωνία με την προσομοίωση του SProcess από το οποίο εκτιμήθηκε το βάθος των θυλάκων αμορφοποίησης στα περίπου 2.7 nm. Μετά την ακτινοβόληση με πυκνότητα ισχύος 9430 W cm<sup>-2</sup> (64 W) διάρκειας 10 ms έχουμε την κατάσταση που φαίνεται στην εικόνα 5.10β'. Όπως είναι εμφανές η προηγουμένως άμορφη περιοχή έχει επανακρυσταλλωθεί κάτι το οποίο υποδεικνύει ότι η δέσμη του CO<sub>2</sub> laser επιδιορθώνει ικανοποιητικά τη φθορά η οποία εισήχθη με την εμφύτευση. Παρ' όλα αυτά η παρουσία των πιο σκουρόχρωμων περιοχών στην εικόνα 5.10β' δείχνει πιθανότατα την εισαγωγή κάποιων παραμενόντων τάσεων στον κρύσταλλο του πυριτίου.

Είμαστε σε θέση, πλέον, να προχωρήσουμε στα αποτελέσματα της κατανομής του βορίου για τις συνθήκες ανόπτησης που χρησιμοποιήθηκαν. Στο γράφημα 5.11 μπο-



**Σχήμα 5.11:** Κατανομές βορίου όπως προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS για τρεις διαφορετικούς χρόνους ανόπτησης σε σύγκριση με την as implanted κατανομή.



**Σχήμα 5.12:** Σύγκριση των πειραματικών αποτελεσμάτων για τους τρεις διαφορετικούς χρόνους ανόπτησης με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της προσομοίωσης (συνεχείς γραμμές).

Χρόνος [ms]	$x_j$ (E) [nm]	$x_j$ (S) [nm]	Θερμοκρασία (E) [°C]	Θερμοκρασία (S) [°C]
6	7.5	7.3	1250±30	1215
8	8.2	8.9	1320±30	1340
10	12.9	14.2	1390±30	1400

**Πίνακας 5.2:** Σύνοψη των κυριότερων πειραματικών αποτελεσμάτων (E) και σύγκριση με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που προέκυψαν από το SProcess (S).

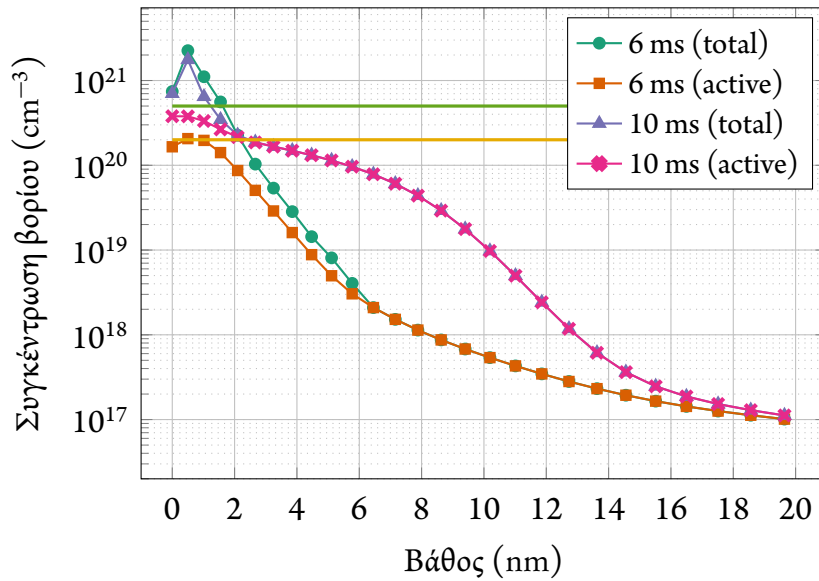
ρούμε να δούμε τις κατανομές του βορίου όπως αυτές προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS. Είναι εμφανές ότι με την αύξηση της διάρκειας παλμού έχουμε όλο και μεγαλύτερη μετακίνηση του προφίλ των προσμίξεων ως αποτέλεσμα της μέγιστης θερμοκρασίας που τελικά αναπτύσσεται. Με βάση τα διαγράμματα φαίνεται ότι τα βάθη επαφής ( $x_j$ ) τα οποία επιτυγχάνονται στα  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  με την ανόπτηση είναι 7.5 nm για τα 6 ms, δηλαδή πρακτικά δεν υπάρχει ουσιαστική διάχυση, 8.2 nm για την περίπτωση των 8 ms και 14.2 nm για την ανόπτηση των 10 ms. Φαίνεται ότι η χρονική διάρκεια μεταξύ 6 και 8 ms είναι αυτή η οποία εκκινεί πρακτικά τη διαδικασία της διάχυσης. Μέσω του πειράματος, λοιπόν, σαρώνουμε όλες εκείνες τις κρίσιμες θερμοκρασίες με τις οποίες μεταβαίνουμε από μία διαδικασία χωρίς διάχυση σε μία με αισθητή μετατόπιση του προφίλ. Οι θερμοκρασίες οι οποίες μετρήθηκαν από το πυρόμετρο για αυτούς τους χρόνους είναι  $1250 \pm 30 \text{ }^\circ\text{C}$  για τα 6 ms,  $1320 \pm 30 \text{ }^\circ\text{C}$  για τα 8 ms και  $1390 \pm 30 \text{ }^\circ\text{C}$  για τα 10 ms σε πολύ καλή συμφωνία με τη θερμοκρασιακή προσομοίωση που έγινε στο προηγούμενο κεφάλαιο (βλ. και γράφημα 4.8). Στο γράφημα 5.12 μπορεί να δει κανείς σύγκριση των πειραματικών καμπύλων SIMS με τις κατανομές βορίου που προέκυψαν από την προσομοίωση. Στην περίπτωση της ακτινοβόλησης των 6 και 8 ms έχουμε πολύ καλή συμφωνία των δύο κατανομών ενώ στην περίπτωση των 10 ms υπάρχει μια υποεκτίμηση περίπου 1.5 με 2 nm του SProcess όσον αφορά το βάθος επαφής ωστόσο η μορφή της καμπύλης αποδίδεται πολύ καλά. Σε γενικές γραμμές μπορούμε να πούμε ότι υπάρχει καλή ταύτιση πειραμάτων και προσομοίωσης κάτι το οποίο υποδεικνύει ότι η μεθοδολογία που ακολουθήσαμε όσον αφορά την μοντελοποίηση του φαινομένου είναι σωστή. Σύνοψη των πειραματικών αποτελεσμάτων μπορεί να φανεί και στον πίνακα 5.2. Πρέπει να σημειώσουμε ότι έγινε επίσης ένας έλεγχος για το ενδεχόμενο εμφάνισης παρασιτικής διάχυσης λόγω της προθέρμανσης στους  $650 \text{ }^\circ\text{C}$  για περίπου 1 με 2 λεπτά αλλά δεν φάνηκε να υπάρχει κάποια ανεπιθύμητη διάχυση στην κατανομή του βορίου ανάμεσα στα προθερμασμένα δείγματα και σε αυτά που δεν είχαν υποστεί κάποια προθέρμανση. Ως εκ τούτου δεν θεωρούμε ότι υπάρχει περίπτωση

να επηρεάζεται η τελική κατανομή του βορίου από τις συνθήκες προανόπτησης που ακολουθήθηκαν.

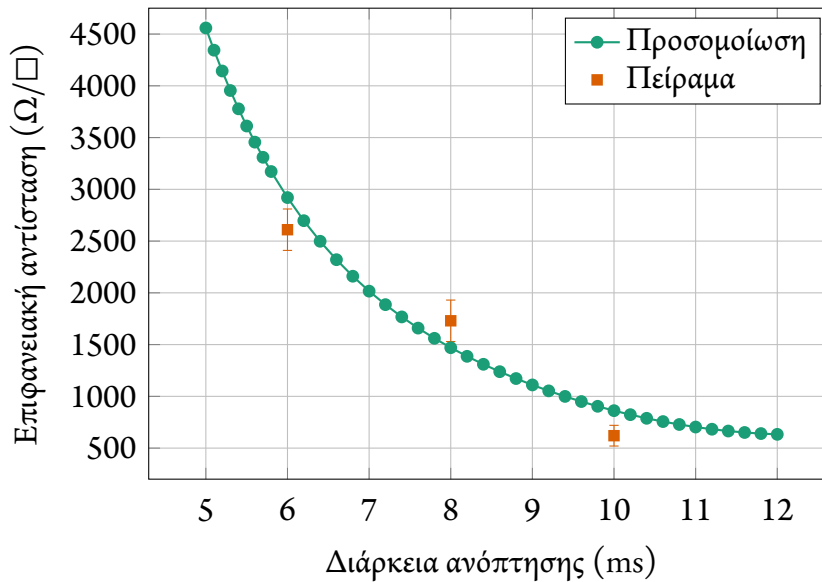
Ένα χαρακτηριστικό που είναι κοινό σε όλες τις καμπύλες που εξήχθησαν και ιδιαίτερα στην περίπτωση των 10 ms είναι ένα ακλόνητο τμήμα βορίου σε συγκεντρώσεις άνω των  $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  συγκέντρωση η οποία είναι πολύ κοντά στο όριο στερεάς διαλυτότητας του βορίου στο πυρίτιο [31]. Η παρουσία αυτού του χαρακτηριστικού αποδίδεται στον σχηματισμό εκτεταμένων ατελειών βορίου με ενδοπλεγματικά άτομα του πυριτίου, οι οποίες καλούνται Boron Interstitial Clusters (BICs). Η παρουσία των BICs αναλύεται στη δημοσίευση των Cristiano κ.ά. [32] οι οποίοι παρατήρησαν τον σχηματισμό μικρών ατελειών μέσω μικροσκοπίας TEM στα όρια της περιοχής αμορφοποίησης μετά από εμφυτεύσεις χαμηλής ενέργειας. Οι Cristiano κ.ά. παρατήρησαν επίσης ότι παρά το γεγονός ότι υπάρχει μια τάση προς διάλυση των ατελειών σε υψηλές θερμοκρασίες οι οποίες μικραίνουν την έκτασή τους σε επίπεδα μικρότερα από τη διακριτική ικανότητα του TEM, το ακλόνητο προφίλ δεν φαίνεται να διαλύεται πλήρως διατηρώντας ουσιαστικά τη διαλυτότητα του βορίου στα αναμενόμενα επίπεδα, κάτι το οποίο φαίνεται τόσο από τις μετρήσεις SIMS όσο και από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Όσον αφορά τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό πραγματοποιήθηκε ένα σύνολο μετρήσεων στις επαφές που κατασκευάστηκαν επί των δειγμάτων. Φάνηκε ξεκάθαρα η τάση της επιφανειακής αντίστασης να μειώνεται καθώς αυξάνεται η διάρκεια της ακτινοβόλησης. Στον παλμό των 6 ms η ελάχιστη μετρούμενη αντίσταση ήταν  $2610 \pm 200 \Omega/\square$ , στην περίπτωση των 8 ms μετρήθηκε σε  $1730 \pm 70 \Omega/\square$  ενώ, τελικά, στην περίπτωση των 10 ms φτάσαμε στα  $620 \pm 50 \Omega/\square$ . Η μείωση της επιφανειακής αντίστασης υποδηλώνει ότι σταδιακά φτάνουμε σε όλο και μεγαλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης τα οποία εξαρτώνται από το επίπεδο της στερεάς διαλυτότητας του βορίου στη θερμοκρασία η οποία αναπτύσσεται. Το SProcess πέρα από τη χημική κατανομή του βορίου μας επιτρέπει να εξάγουμε και την κατανομή του ενεργού βορίου. Η σύγκριση των δύο κατανομών μπορεί να φανεί στο διάγραμμα 5.13 στο οποίο είναι εμφανές ότι η κατανομή του ενεργού βορίου προσεγγίζει εξαιρετικά κοντά το όριο στερεάς διαλυτότητας για τις αντίστοιχες θερμοκρασίες. Αυτό είναι μια ένδειξη ότι και στις δύο περιπτώσεις ανόπτησης βρισκόμαστε πολύ κοντά στο όριο μέγιστης ενεργοποίησης.

Για να δούμε, ωστόσο, κατά πόσο οι κατανομές ενεργού βορίου του SProcess αντικατοπτρίζουν την πραγματικότητα πρέπει να εξάγουμε μέσω αυτών την υπολογιζόμενη επιφανειακή αντίσταση. Για να το κάνουμε αυτό θα αξιοποιήσουμε το εξής μο-



**Σχήμα 5.13:** Σύγκριση των κατανομών χημικού (total) και ενεργού (active) βορίου όπως εξάγονται από το SProcess. Οι παράλληλες γραμμές υποδηλώνουν τις αντίστοιχες στερεές διαλυτότητες του βορίου [31] στους 1250°C και 1400°C που είναι οι θερμοκρασίες που αντιστοιχούν σε αυτές τις συνθήκες απόπτωσης.



**Σχήμα 5.14:** Εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης όπως υπολογίζεται από το SProcess σε σύγκριση με τις πειραματικές τιμές για τις τρεις συνθήκες ακτινοβόλησης.

ντέλο ευκινησίας για προσμίξεις τύπου p στο πυρίτιο [33, 34].

$$\mu(x) = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{N(x)}{C}\right)^r} \quad (5.7)$$

όπου  $N$  η ολική συγκέντρωση βορίου και  $\mu_{\min}$ ,  $\mu_{\max}$ ,  $C$ ,  $r$  ημι-εμπειρικοί παράμετροι που εξαρτώνται από το υλικό. Για το βόριο οι συντελεστές είναι  $\mu_{\min} = 44.9 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $\mu_{\max} = 470.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $C = 2.23 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , και  $r = 0.719$ . Αντίστοιχες τιμές έχουν υπολογιστεί και για τις υπόλοιπες βασικές προσμίξεις του πυριτίου. Άπαξ και υπολογιστεί η ευκινησία του βορίου σε σχέση με το βάθος μπορεί να υπολογιστεί και η επιφανειακή αντίσταση ολοκληρώνοντας την ενεργή κατανομή προσμίξεων με την ευκινησία κατά βάθος μέχρι το βάθος επαφής. Αν  $N_A$  η ενεργή κατανομή βορίου,  $q$  το στοιχειώδες φορτίο και  $x_j$  το βάθος επαφής τότε η επιφανειακή αντίσταση του υλικού δίνεται από τη σχέση

$$\frac{1}{R_s} = q \int_0^{x_j} N_A(x) \mu(N(x)) dx \quad (5.8)$$

Με βάση το παραπάνω ολοκλήρωμα μπορούμε να εξάγουμε την εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης καθώς αυξάνεται ο χρόνος ακτινοβολήσης. Το αποτέλεσμα αυτής της ανάλυσης φαίνεται στο γράφημα 5.14. Είναι εμφανής η καλή ταύτιση πειράματος και προσομοίωσης κάτι το οποίο υποδεικνύει ότι τα επίπεδα ενεργοποίησης του σχήματος 5.13 αντικατοπτρίζουν την πραγματικότητα. Σε γενικές γραμμές τόσο οι επιφανειακές αντιστάσεις όσο και τα επίπεδα ενεργοποίησης είναι παραπλήσια με τη βιβλιογραφία [35–37] για ανόπτηση με laser ειδικά στην περίπτωση των 10 ms.

## § 5.7 ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Στο κεφάλαιο που προηγήθηκε είδαμε τη χρήση του laser CO<sub>2</sub> σε συνδυασμό με εμφύτευση πλάσματος για την κατασκευή ρηχών επαφών στο πυρίτιο. Έγινε μια πλήρης περιγραφή της διάταξης και όλων των επιμέρους στοιχείων που την απαρτίζουν καθώς και διαδικασίες βαθμονόμησης της διάταξης ούτως ώστε να είναι λειτουργική για το θερμοκρασιακό εύρος που θέλαμε να πετύχουμε. Παράλληλα έγινε μια αναφορά στις βασικότερες τεχνικές χαρακτηρισμού των επαφών που κατασκευάστηκαν.

Είδαμε ότι η δέση του laser μπορεί να θερμάνει το πυρίτιο σε αρκετά υψηλές θερμοκρασίες κοντά αλλά πιο χαμηλά από τη θερμοκρασία τήξης του επιδιορθώνοντας τη φθορά που εισήχθη κατά την εμφύτευση ενώ παράλληλα οδηγεί σε μεγάλο βαθμό ενεργοποίησης χωρίς εκτεταμένη διάχυση. Στην πιο ακραία περίπτωση των 10 ms το βά-



θος επαφής δεν ξεπέρασε τα 15 nm τιμή που αντιστοιχεί σε μετακίνηση του προφίλ βορίου μόλις 8 nm σε σχέση με την as implanted κατανομή σε πολύ καλή ταύτιση με τις εκτιμήσεις του SProcess. Παράλληλα, σε συνδυασμό με το μοντέλο προσομοίωσης που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε ότι ο βαθμός ενεργοποίησης που εξάγεται από το SProcess είναι πολύ κοντά στο μέγιστο βαθμό στερεάς διαλυτότητας του βορίου υποδηλώνοντας μεγάλο ποσοστό ενεργοποίησης κάτι το οποίο επιβεβαιώνεται και από τις χαμηλές επιφανειακές αντιστάσεις που μετρήθηκαν.

Ανάμεσα στα πειράματα και την πλήρη TCAD μοντελοποίηση μέσω του SProcess έγινε μία πλήρης περιγραφή της διαδικασίας της ανόπτησης μέσω της οποίας φάνηκε η βιωσιμότητα της μεθόδου ανόπτησης σε καθεστώς millisecond για τον σχηματισμό εξαιρετικά ρηχών και πλήρως ενεργοποιημένων επαφών  $p^+/n$  στο πυρίτιο με πολύ καλά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά.

## § 5.8 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Semiconductor Industry Association. *International Technology Roadmap for Semiconductors*. Sematech, 2013. URL: <http://www.itrs.net>.
- [2] A. Gat κ.ά. "Physical and electrical properties of laser-annealed ion-implanted silicon". *Appl. Phys. Lett.* 32.5 (1978), 276. DOI: [10.1063/1.90046](https://doi.org/10.1063/1.90046).
- [3] A. Gat και J.F. Gibbons. "A laser-scanning apparatus for annealing of ion-implantation damage in semiconductors". *Appl. Phys. Lett.* 32.3 (1978), 142. DOI: [10.1063/1.89960](https://doi.org/10.1063/1.89960).
- [4] J. Krynicki κ.ά. "Laser annealing of arsenic implanted silicon". *Physics Letters A* 61.3 (Μάι. 1977), 181–182. DOI: [10.1016/0375-9601\(77\)90286-9](https://doi.org/10.1016/0375-9601(77)90286-9).
- [5] B. Mizuno και Y. Sasaki. "Aiming for the Best Matching Between Ultra-Shallow Doping and Milli-To Femto-Second Activation". *15th International Conference on Advanced Thermal Processing of Semiconductors*. IEEE, Οκτ. 2007. DOI: [10.1109/rtp.2007.4383811](https://doi.org/10.1109/rtp.2007.4383811).
- [6] V. Privitera κ.ά. "Two-dimensional delineation of ultrashallow junctions obtained by ion implantation and excimer laser annealing". *Appl. Phys. Lett.* 77.4 (2000), 552. DOI: [10.1063/1.127041](https://doi.org/10.1063/1.127041).
- [7] S. Whelan κ.ά. "Dopant redistribution and electrical activation in silicon following ultra-low energy boron implantation and excimer laser annealing". *Phys. Rev. B* 67.7 (Φεβ. 2003). DOI: [10.1103/physrevb.67.075201](https://doi.org/10.1103/physrevb.67.075201).
- [8] K.K. Ong κ.ά. "Dopant activation in subamorphized silicon upon laser annealing". *Appl. Phys. Lett.* 89.8, 082101 (2006). DOI: [10.1063/1.2335950](https://doi.org/10.1063/1.2335950).
- [9] N. Misra κ.ά. "Excimer laser annealing of silicon nanowires". *Appl. Phys. Lett.* 90.11, 111111 (2007). DOI: [10.1063/1.2713774](https://doi.org/10.1063/1.2713774).
- [10] K. Adachi κ.ά. "Issues and optimization of millisecond anneal process for 45 nm node and beyond". *Digest of Technical Papers. 2005 Symposium on VLSI Technology*. IEEE, 2005. DOI: [10.1109/.2005.1469245](https://doi.org/10.1109/.2005.1469245).

- [11] L.M. Feng, Y. Wang και D.A. Markle. “Minimizing Pattern Dependency in Millisecond Annealing”. *International Workshop on Junction Technology IWJT '06*. Shanghai: IEEE, 2006. DOI: [10.1109/iwjt.2006.220853](https://doi.org/10.1109/iwjt.2006.220853).
- [12] C.K.N. Patel. “Interpretation of CO<sub>2</sub> Optical Maser Experiments”. *Phys. Rev. Lett.* 12.21 (Μάι. 1964), 588–590. DOI: [10.1103/physrevlett.12.588](https://doi.org/10.1103/physrevlett.12.588).
- [13] W.J. Witteman. *The CO<sub>2</sub> Laser*. Springer Berlin Heidelberg, 1987. ISBN: 978-3-540-47744-0. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-47744-0>.
- [14] D.M. Dennison. “The Infrared Spectra of Polyatomic Molecules. Part II”. *Rev. Mod. Phys.* 12.3 (Ιούλ. 1940), 175–214. DOI: [10.1103/revmodphys.12.175](https://doi.org/10.1103/revmodphys.12.175).
- [15] J. Wilson και J.F.B. Hawkes. *Optoelectronics: an introduction*. 3η έκδοση. Prentice Hall Europe, 1998. ISBN: 978-0-121-03961-2.
- [16] O. Svelto. *Αρχές των lasers*. Μετάφραση υπό Α.Α. Σεραφετινίδης και Γ.Α. Κουρούκλης. 2η έκδοση. Τίτλος πρωτότυπου: “Principia dei laser”. Συμμετρία, 1986.
- [17] K. Naukarinen. “CO<sub>2</sub> laser annealing of silicon”. *J. Appl. Phys.* 53.8 (1982), 5634. DOI: [10.1063/1.331446](https://doi.org/10.1063/1.331446).
- [18] P. H. Tsien. “CO<sub>2</sub> laser annealing characteristics of high-dose boron- and arsenic-implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 53.1 (1982), 663. DOI: [10.1063/1.329974](https://doi.org/10.1063/1.329974).
- [19] G. K. Celler. “CW infrared laser annealing of ion-implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 50.11 (1979), 7264. DOI: [10.1063/1.325808](https://doi.org/10.1063/1.325808).
- [20] M. Blomberg κ.ά. “Substrate heating effects in CO<sub>2</sub> laser annealing of ion-implanted silicon”. *J. Appl. Phys.* 54.5 (Μάι. 1983), 2327–2328. DOI: [10.1063/1.332343](https://doi.org/10.1063/1.332343).
- [21] A. Florakis κ.ά. “Non-melting annealing of silicon by CO<sub>2</sub> laser”. *Thin Solid Films* 518.9 (Φεβ. 2010), 2551–2554. DOI: [10.1016/j.tsf.2009.09.140](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2009.09.140).
- [22] Α. Φλωράκης. “Ανόπτηση πυριτίου με χρήση laser για τον σχηματισμό ρηχών επαφών”. Διδακτορική διατριβή. Αθήνα, Ελλάδα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούν. 2011. URL: <http://dspace.lib.ntua.gr/handle/123456789/4599>.
- [23] S.B. Felch κ.ά. “PULSION® HP: Tunable, High Productivity Plasma Doping”. AIP Publishing, 2011. DOI: [10.1063/1.3548413](https://doi.org/10.1063/1.3548413).
- [24] J. Duchaine κ.ά. “Integration of a plasma doping PULSION® process into a fully depleted SOI transistor flow chart”. *11th International Workshop on Junction Technology (IWJT)*. IEEE, Ιούν. 2011. DOI: [10.1109/iwjt.2011.5970001](https://doi.org/10.1109/iwjt.2011.5970001).
- [25] SM Sze και K Ng Kwok. *Physics of semiconductor devices 3rd Edition*. 2007.
- [26] L.J. van der Pauw. “A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape”. *Philips Res. Rep.* 13 (1958), 1–9.
- [27] L.J. van der Pauw. “A method of measuring the resistivity and Hall coefficient on lamellae of arbitrary shape”. *Philips Tec. Rev.* 20.8 (1958), 220–224.
- [28] J. Yeager και M.A. Hrusch-Tupta. *Low Level Measurements Handbook*. 5η έκδοση. Keithley Instruments, 2004.
- [29] A. Benninghoven, F.G. Rudenauer και H.W. Werner. *Secondary Ion Mass Spectrometry: Basic Concepts, Instrumental Aspects, Applications and Trends*. Wiley New York, 1987. ISBN: 978-047101-056-2.
- [30] K.L. Brown. “Faraday-Cup Monitors for High-Energy Electron Beams”. *Rev. Sci. Instrum.* 27.9 (1956), 696. DOI: [10.1063/1.1715674](https://doi.org/10.1063/1.1715674).
- [31] P. Pichler. *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*. Springer Vienna, 2004. ISBN: 978-3-7091-0597-9.

- [32] F. Cristiano κ.ά. “Clusters formation in ultralow-energy high-dose boron-implanted silicon”. *Appl. Phys. Lett.* 83.26 (2003), 5407. DOI: [10.1063/1.1637440](https://doi.org/10.1063/1.1637440).
- [33] D.A. Antoniadis. “Boron in Near-Intrinsic <100> and <111> Silicon under Inert and Oxidizing Ambients — Diffusion and Segregation”. *J. Electrochem. Soc.* 125.5 (1978), 813. DOI: [10.1149/1.2131554](https://doi.org/10.1149/1.2131554).
- [34] G. Masetti, M. Severi και S. Solmi. “Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon”. *IEEE Trans. Electron Devices* 30.7 (Ιούλ. 1983), 764–769. DOI: [10.1109/t-ed.1983.21207](https://doi.org/10.1109/t-ed.1983.21207).
- [35] J.A. Sharp κ.ά. “Deactivation of ultrashallow boron implants in preamorphized silicon after nonmelt laser annealing with multiple scans”. *Appl. Phys. Lett.* 89.19, 192105 (2006). DOI: [10.1063/1.2385215](https://doi.org/10.1063/1.2385215).
- [36] A. Florakis κ.ά. “Formation of silicon ultra shallow junction by non-melt excimer laser treatment”. *Solid-State Electronics* 54.9 (Σεπτ. 2010), 903–908. DOI: [10.1016/j.sse.2010.04.025](https://doi.org/10.1016/j.sse.2010.04.025).
- [37] S.R. Aid κ.ά. “Comparison of boron diffusion in silicon during shallow p+/n junction formation by non-melt excimer and green laser annealing”. *Phys. Status Solidi A* 208.12 (Αύγ. 2011), 2772–2777. DOI: [10.1002/pssa.201127198](https://doi.org/10.1002/pssa.201127198).



## § 6.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε τη διαδικασία σχηματισμού πολύ ρηχών επαφών βορίου  $p^+ / n$  στο πυρίτιο με τη χρήση της μεθόδου ανόπτησης με laser  $CO_2$ . Αντικείμενο αυτού του κεφαλαίου, είναι η προσπάθεια για την κατασκευή ρηχών επαφών  $n^+ / p$  με βάση το φώσφορο στο γερμάνιο αυτή τη φορά με χρήση της ίδιας τεχνικής. Αν και στα πλαίσια αυτής της εργασίας δεν υπήρξε περιθώριο για τη μελέτη της εμφύτευσης με χρήση plasma doping όπως στο πυρίτιο, θα δούμε κατά πόσο είναι δυνατόν να γίνει έλεγχος της εκτεταμένης διάχυσης του φωσφόρου μέσω ανόπτησης με laser καθώς και με τη χρήση συνεμφύτευσης με άζωτο. Παράλληλα θα μελετήσουμε την επίδραση που έχει αυτή η διαδικασία στα επιτεύξιμα ποσοστά ενεργοποίησης του εμφυτευμένου φωσφόρου.

Παρά το γεγονός ότι οι πρώτες βασικές ανακαλύψεις που έγιναν γύρω από την τεχνολογία ημιαγωγικών διατάξεων χρησιμοποιούσαν το γερμάνιο ως βασικό υλικό για την κατασκευή τους (το πρώτο τρανζίστορ, άλλωστε, ήταν φτιαγμένο από γερμάνιο [1]) από τα μέσα της δεκαετίας του 1960 η χρήση του επισκιάστηκε από το πυρίτιο. Αν και από τους βασικότερους ημιαγωγούς το πυρίτιο είναι μάλλον το πιο “φτωχό” υλικό από πλευράς ηλεκτρικών ιδιοτήτων καθώς έχει πολύ χαμηλότερη ευκινησία φορέων και οπών, τόσο σε σχέση με το γερμάνιο (2.5 φορές για τα ηλεκτρόνια και 4 φορές για τις οπές) όσο και με πολλούς σύνθετους ημιαγωγούς III-V, το πολύ καλό μονωτικό οξείδιο που μπορούσε να αναπτυχθεί στην επιφάνεια του με πολύ απλό τρόπο το κατέστησε ως το κύριο υλικό με το οποίο πορεύτηκε η επίπεδη τεχνολογία ολοκλήρωσης για πάνω από 30 χρόνια. Ενδεικτικά το 2004 η ετήσια κατανάλωση πυριτίου ανερχόταν στο εξωπραγματικό ποσό των 8 τρισεκατομμυρίων δολαρίων. Οι χρήσεις του γερμανίου παραμένουν περιορισμένες σε πιο εξειδικευμένες αγορές όπως, για παράδειγμα, η χρήση του ως υποστρώματα επιταξίας σε φωτοβολταϊκά III-V ή σε ανιχνευτές ραδιο-νέργειας (ακτίνες  $\beta$ ,  $\gamma$ ).

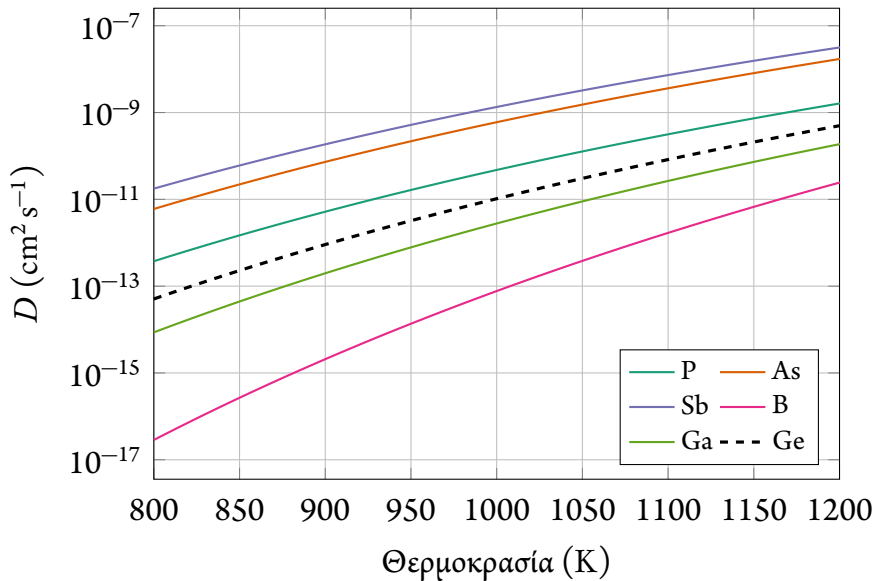
Ωστόσο, όπως συζητήσαμε και στο πρώτο κεφάλαιο, η συνεχιζόμενη σμίκρυνση των κατασκευαστικών κόμβων της τεχνολογίας πυριτίου έχει οδηγήσει σε πολλές καινοτόμες αλλαγές στην κατασκευή των τρανζίστορ με πιο σημαντική την αφαίρεση του διοξειδίου του πυριτίου ως υλικό του διηλεκτρικού πύλης και την αντικατάστασή του

από πιο σύγχρονα, high-κ διηλεκτρικά όπως  $HfO_2$ ,  $ZrO_2$ , κλπ., για την αποφυγή φαινομένων σήραγγας ανάμεσα στην πύλη και το υπόστρωμα. Η απώλεια του κυριότερου κατασκευαστικού πλεονεκτήματος του πυριτίου έχει αρχίσει και προκαλεί νέο ερευνητικό ενδιαφέρον για υποστρώματα μεγάλης ευκινησίας όπως το γερμάνιο και οι σύνθετοι ημιαγωγοί III-V ( $GaAs$ ,  $GaAlAs$ ,  $InGaAs$ ). Η περίπτωση του γερμανίου φαντάζει αρκετά ελκυστική γιατί οι διεργασίες κατεργασίας του είναι εξαιρετικά συμβατές με τον υπάρχων υλικοτεχνικό εξοπλισμό της βιομηχανίας πυριτίου. Παράλληλα αυτή ακριβώς η αστάθεια του οξειδίου του γερμανίου ( $GeO_2$ ) που οδήγησε στην παράκαμψή του έναντι του πυριτίου προσφέρει πλέον ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα στη χρήση διηλεκτρικών φιλμ στην επιφάνειά του. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι λόγω αυτής της αστάθειας το native οξείδιο που αναπτύσσεται ανάμεσα στη διεπιφάνεια του υλικού και ενός εναποτιθέμενου φιλμ είναι εξαιρετικά λεπτότερο από ότι στην περίπτωση του πυριτίου [2, 3].

## § 6.2 ΚΑΤΑΣΚΕΥΑΣΤΙΚΕΣ ΠΡΟΚΛΗΣΕΙΣ

Παρόλα αυτά το γερμάνιο δεν είναι και αυτό χωρίς τα προβλήματά του. Το μικρό ενεργειακό του χάσμα (περίπου 0.67 eV) και η υψηλή ενδογενής συγκέντρωση φορέων ( $10^{13} \text{ cm}^{-3}$  σε θερμοκρασία δωματίου) οδηγούν στην εμφάνιση ενός χαρακτηριστικού ζητήματος που είναι το σχετικό υψηλό ρεύμα διαρροής που εμφανίζεται στις επαφές  $p-n$  και το οποίο προφανώς επηρεάζει τις στάθμες “0” και “1” ενός τρανζίστορ MOSFET που βασίζεται στο γερμάνιο. Ένα ακόμα σημαντικό πρόβλημα που εμφανίζεται στην κατασκευή ρηχών  $n^+/p$  επαφών είναι η εξαιρετικά έντονη διάχυση όλων των βασικών προσμίξεων τύπου  $n$  στο γερμάνιο [4], μία διαδικασία που καθοδηγείται κατά κύριο λόγο από τα διπλά αρνητικά φορτισμένα πλεγματικά διάκενα,  $V^{2-}$  [5]. Αυτό έρχεται σε μεγάλη αντίθεση με τις προσμίξεις τύπου  $p$  των οποίων ο συντελεστής διάχυσης είναι τάξεις μεγέθους μικρότερος. Στην πιο ακραία περίπτωση, το βόριο έχει σχεδόν 5 τάξεις μεγέθους μικρότερο συντελεστή διάχυσης από τον φώσφορο (βλ. και σχήμα 6.1).

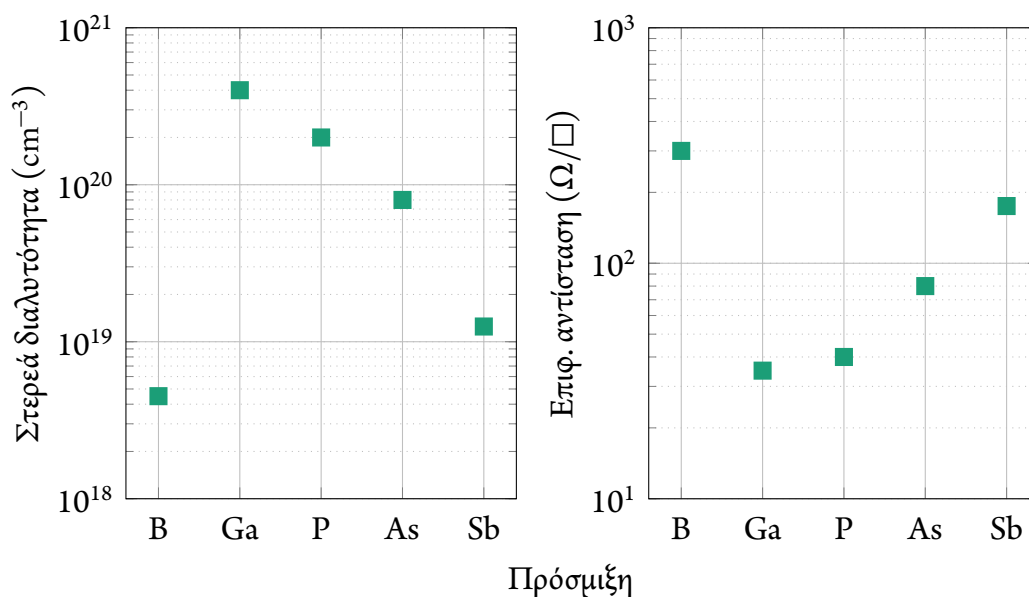
Οι μέγιστες στερεές διαλυτότητες των προσμίξεων  $n$  στο γερμάνιο είναι μικρότερες από εκείνες στο πυρίτιο, αν και στην περίπτωση των προσμίξεων τύπου  $p$  έχει φανεί ότι μπορεί να ξεπεραστεί το επίπεδο διαλυτότητας στην ενεργοποίησή τους με τεχνικές προαμορφοποίησης [6, 7] κάτι το οποίο συνδέεται με τον χαμηλό συντελεστή διάχυσής τους. Στην περίπτωση του βορίου ειδικά εμφανίζεται ένα φαινόμενο αυτοανόπτησης σύμφωνα με το οποίο η πρόσμιξη ενεργοποιείται κατά την εμφύτευση. Στις προσμίξεις τύπου  $n$  δεν φαίνεται να συμβαίνει κάτι τέτοιο καθώς τα σχετικά μεγάλα



**Σχήμα 6.1:** Εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης βασικών προσμίξεων στο γερμάνιο από τη θερμοκρασία και σε σύγκριση με τον συντελεστή αυτοδιάχυσης του γερμανίου (μαύρη εστιγμένη γραμμή) [4, 5].

άτομα της ομάδας IV του περιοδικού πίνακα οδηγούν σε πιο εκτεταμένη καταστροφή του ημιαγωγού κάτι το οποίο κάνει τη χρήση ανόπτησης απαραίτητη. Η αμορφοποιημένη ζώνη μάλιστα εμφανίζει χαρακτηριστικά αντίθετης αγωγιμότητας [8]. Ειδικά στην περίπτωση του αντιμονίου η καταστροφή είναι τόσο έντονη που δεν επιδιορθώνεται ούτε μετά από ανόπτηση κάτι το οποίο κάνει απαγορευτική τη χρήση του για την κατασκευή ρηχών επαφών. Παρόμοιας έκτασης αμορφοποίηση φαίνεται ότι προκαλεί και το αρσενικό [9].

Αυτό αφήνει τον φώσφορο ως την καλύτερη υποψήφια πρόσμιξη για τον σχηματισμό επαφών  $n^+/p$  στο γερμάνιο ο οποίος ούτως ή άλλως εμφανίζει την υψηλότερη στερεά διαλυτότητα από τις προσμίξεις  $n$  οπότε δυνητικά μπορεί να επιτευχθεί και η χαμηλότερη επιφανειακή αντίσταση όπως είναι εμφανές και από το σχήμα 6.2. Υπάρχουν ωστόσο ένα σύνολο από προβλήματα που πρέπει να ληφθούν υπόψιν. Πρώτο είναι, όπως ήδη αναφέραμε, ο υψηλός συντελεστής διάχυσης. Ειδικά σε συγκεντρώσεις άνω του  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  υπάρχει μια έντονη εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης από το επίπεδο νόθευσης [13] φαινόμενο το οποίο εμφανίζεται και στο αρσενικό [14]. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ανώμαλη διάχυση του φωσφόρου σε υψηλές θερμοκρασίες το οποίο σε συνδυασμό με την αμορφοποίηση που εισάγεται οδηγεί σε φαινόμενα ταχείας μεταβατικής διάχυσης. Παράλληλα ο φώσφορος εμφανίζει τάση απενεργοποίησης σε

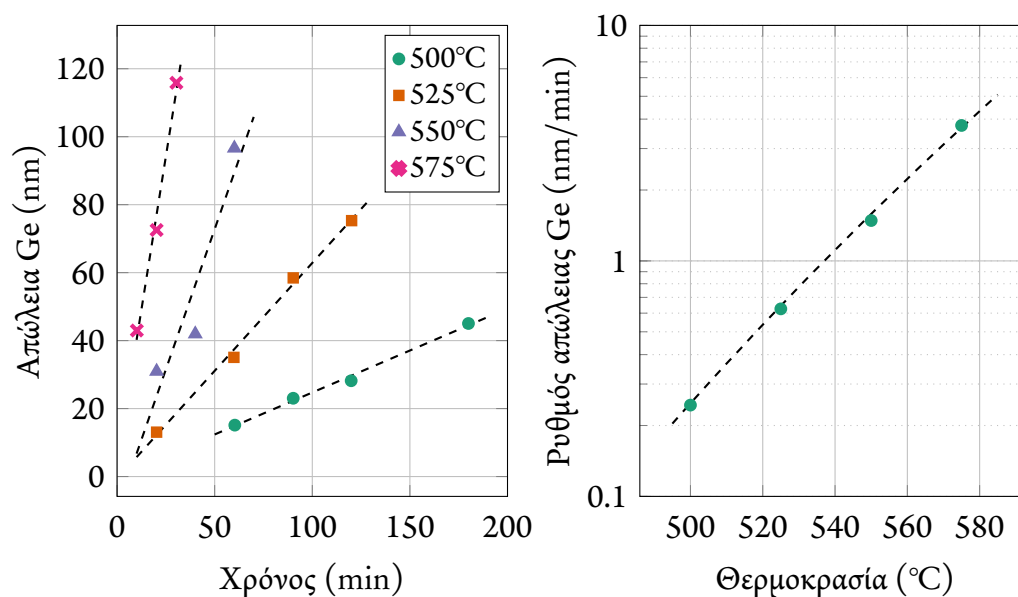


**Σχήμα 6.2:** Μέγιστες στερεές διαλυτότητες σε συνθήκες ισορροπίας (αριστερά) και θεωρητικές ελάχιστες επιφανειακές αντιστάσεις (δεξιά) στα 100 nm για τις βασικές προσμίξεις του γερμανίου [10–12].

επίπεδα νόθευσης άνω του  $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  καθώς δεσμεύεται από ουδέτερα πλεγματοειδή κενά [15]. Αποτέλεσμα αυτών των φαινομένων είναι ο δύσκολος έλεγχος του τελικού προφίλ του φωσφόρου κάτι το οποίο είναι πολύ σημαντικό για τον σχηματισμό ρηχών επαφών. Όπως και στο πυρίτιο η επίτευξη μεγάλων θερμοκρασιών σε σύντομο χρονικό διάστημα φαίνεται ευεργετική για την αντιμετώπιση αυτού του φαινομένου [16, 17].

Πέρα από θέματα που αφορούν τη διάχυση και ενεργοποίηση του φωσφόρου ένα άλλο σημαντικό ζήτημα που εμφανίζεται στις συνήθεις μορφές ανόπτησης είναι η απώλεια υποστρώματος γερμανίου κατά τη διάρκεια της διαδικασίας κάτι το οποίο οδηγεί σε μεγάλη απώλεια της εμφυτευμένης δόσης πρόσμιξης λόγω εξω-διάχυσης (out-diffusion) που μπορεί να φτάσει και το 75% [18]. Το φαινόμενο δεν συνδέεται με την εξάχνωση του υλικού καθώς απαιτεί πολύ μεγαλύτερες θερμοκρασίες για να εμφανιστεί στους 1430°C με ενέργεια ενεργοποίησης περίπου 3.46 eV [19, 20]. Συνεπώς είναι απαραίτητη η χρήση κάποιου διηλεκτρικού αδρανολογίου (capping layer) συνήθως  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  ή  $\text{Al}_2\text{O}_3$  για να αποτραπεί αυτό το φαινόμενο [18, 21] ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες ανόπτησης. Το  $\text{Si}_3\text{N}_4$  φαίνεται επίσης να αποτρέπει πιο αποτελεσματικά την εξω-διάχυση του φωσφόρου στο διηλεκτρικό αν κάτι το οποίο φαίνεται από μια απότομη κορυφή της κατανομής φωσφόρου στη διεπιφάνεια Ge/ $\text{Si}_3\text{N}_4$  κάτι το οποίο οφείλεται στην ισχυρή αλληλεπίδραση του αζώτου με τα πλεγματοειδή κενά του γερμα-





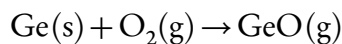
**Σχήμα 6.3:** Απώλεια υποστρώματος γερμανίου σε διάφορες θερμοκρασίες και χρόνους ανόπτησης (αριστερά) και εξάρτηση του ρυθμού απώλειας υποστρώματος από τη θερμοκρασία (δεξιά) κατά Ιοαννου κ.ά. [23].

νίου [22]. Οι Ιοαννου κ.ά. [23] έκαναν μια εκτενή μελέτη του ρυθμού αποδόμησης του υποστρώματος και απέδωσαν την εμφάνιση αυτού του φαινομένου σε μία θερμοκίνη ενεργοποιούμενη διαδικασία τύπου Arrhenius με ενέργεια ενεργοποίησης 2.03 eV η οποία είναι εμφανώς μικρότερη από την αντίστοιχη ενέργεια για εξάχνωση (sublimation) και ακολουθεί μια σχέση της μορφής

$$R = 4.75 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{2.03 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ nm min}^{-1} \quad (6.1)$$

Παρά το γεγονός ότι η μέγιστη θερμοκρασία που χρησιμοποίησαν ήταν 575°C, σχεδόν 400°C κάτω από το σημείο τήξης του γερμανίου (940°C) παρατήρησαν εξαιρετικά γρήγορη αποδόμηση του υποστρώματος η οποία έφτασε ακόμα και τα 120 nm για ανόπτηση μισής ώρας χωρίς τη χρήση κάποιας μορφής στρώματος αδρανοποίησης (βλ. και γράφημα 6.3). Αντίθετα με τη χρήση SiO<sub>2</sub> και Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> δεν παρατηρήθηκε κάποια μετρήσιμη απώλεια υποστρώματος. Αν και ο λόγος που προκαλείται αυτό το φαινόμενο δεν είναι ακόμα ξεκάθαρος, σε μια πρόσφατη δημοσίευσή τους οι Kaiser κ.ά. [24] μετά από πειράματα ανόπτησης γερμανίου σε περιβάλλον ατμοσφαιρικού αέρα, αργού ή αζώτου καταλήγουν στο συμπέρασμα ότι η απώλεια του υποστρώματος γίνεται κυρίως εξαιτίας του μονοξειδίου του γερμανίου που σχηματίζεται λόγω αλληλεπίδρασης

του γερμανίου με το οξυγόνο του περιβάλλοντος της ανόπτησης μέσω της αντίδρασης



Το GeO έχει πολύ μεγαλύτερη τάση ατμών τόσο από το ίδιο το γερμάνιο όσο και από το GeO<sub>2</sub> [25] κάτι το οποίο οδηγεί στη γρήγορη εξάχνωσή του σε θερμοκρασίες άνω των 450°C μειώνοντας παράλληλα το γερμάνιο της επιφάνειας. Η παρουσία του οξυγόνου επιβεβαιώνεται και από τα πειράματα ανόπτησης σε σφραγισμένους θαλάμους υπό κενό [15] στα οποία δεν παρατηρείται απώλεια υποστρώματος. Αντίστοιχες παρατηρήσεις έχουν γίνει και σε διεργασίες flash annealing [26].

Σε κάθε περίπτωση είτε λόγω γρήγορης διάχυσης του φωσφόρου είτε λόγω της εμφανούς απώλειας υλικού σε διεργασίες ανόπτησης φούρνου ή rapid thermal annealing η θερμική επεξεργασία του γερμανίου για τον σχηματισμό επαφών είναι μια αρκετά απαιτητική διαδικασία. Για να διαχειριστούμε αυτά τα πρόβλημα σε αυτή την εργασία προτείνουμε δύο τρόπους αντιμετώπισης. Ο πρώτος είναι η χρήση ανόπτησης με laser σε καθεστώς millisecond όπως κάναμε και για τη περίπτωση των επαφών p<sup>+</sup>/n στο πυρίτιο. Το μεγάλο θερμικό budget της ανόπτησης με laser σε σύντομο χρονικό διάστημα 10 ή λιγότερων millisecond είναι ικανό να περιορίσει μεταβατικά φαινόμενα όπως είναι η γρήγορη διάχυση του φωσφόρου και η εξάχνωση των ενδογενών στρωμάτων GeO που σχηματίζονται κάτι το οποίο αρχίζει να αντικατοπτρίζεται σταδιακά και στη βιβλιογραφία [17, 27, 28].

Πέρα από τη χρήση laser annealing θα μελετήσουμε τη χρήση συννόθευσης (codoping) με άζωτο για την ανάσχεση της διάχυσης του φωσφόρου. Η τεχνική της συννόθευσης με κάποια άλλη αδρανέστερη πρόσμιξη δεν είναι γενικά καινούρια καθώς υπάρχουν αρκετές εργασίες με τη χρήση άνθρακα (ενδεικτικά [29, 30]) ή φθορίου (ενδεικτικά [31, 32]) για να επιτευχθεί ο έλεγχος της διάχυσης του φωσφόρου. Η περίπτωση του αζώτου έχει διερευνηθεί λιγότερο. Η ευεργετική επίδραση του αζώτου στη διάχυση του φωσφόρου παρουσιάστηκε αρχικά από τους Simoen κ.ά. [10] οι οποίοι πραγματοποίησαν εμφυτεύσεις φωσφόρου ενέργειας 65 keV και δόσης  $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  σε συνδυασμό με συννόθεση με ατομικό άζωτο ενέργειας 45 keV και δόσης  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$  τόσο σε συμπαγές γερμάνιο όσο και σε προαμορφοποιημένο με ιόντα γερμανίου ενέργειας 120 keV και δόσης  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Στα δείγματα που είχαν συνεμφυτεύσεις με άζωτο παρατήρησαν μείωση του βάρους επαφής από τα 170 nm που είχαν στα δείγματα μόνο με φωσφόρο στα περίπου 110 nm στην περίπτωση συννόθευσης με άζωτο και προαμορφοποίησης της επιφάνειας. Πιο πρόσφατα οι Thomidis κ.ά. [33] πραγματοποίησαν συννόθεση με μοριακό άζωτο χαμηλής ενέργειας 11 keV και δόσης  $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  σε δείγ-

ματα στα οποία είχε εμφυτευτεί φώσφορος ενέργειας 10 keV και δόσης  $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . Σε συνδυασμό με στρώμα αδρανοποίησης 40 nm  $\text{Al}_2\text{O}_3$  και rapid thermal annealing διάρκειας ενός λεπτού παρατήρησαν εξαιρετικά μικρή διάχυση του φωσφόρου παρουσία αζώτου κάτι το οποίο αφενός επέτρεψε την κατασκευή επαφών βάθους 40 nm αλλά παράλληλα περιόρισε την απώλεια δόσης του φωσφόρου μέχρι και 65%, κάτι το οποίο είναι πολύ ενθαρρυντικό για τον περιορισμό της διάχυσης του φωσφόρου. Στην παρούσα εργασία θα δούμε πως μπορούμε να συνδυάσουμε τη συννόθευση με άζωτο με την ανόπτηση με laser για τον περιορισμό της διάχυσης ενώ θα κάνουμε, παράλληλα, μία συζήτηση για το επίπεδο ενεργοποίησης που επιτυγχάνεται με τις δύο μεθόδους και ποιο process είναι τελικά καλύτερο από αυτή τη σκοπιά. Επίσης θα παρουσιάσουμε μια ανάλυση σε ενεργειακό επίπεδο για την αλληλεπίδραση του αζώτου με τον φώσφορο και τις ατέλειες του γερμανίου με σκοπό να εξηγήσουμε την επίδραση του πρώτου στη διάχυση και στο ποσοστό ενεργοποίησης. Και για τα δύο τελευταία σημεία υπάρχει γενικά έλλειμμα βιβλιογραφίας το οποίο θα προσπαθήσουμε να καλύψουμε.

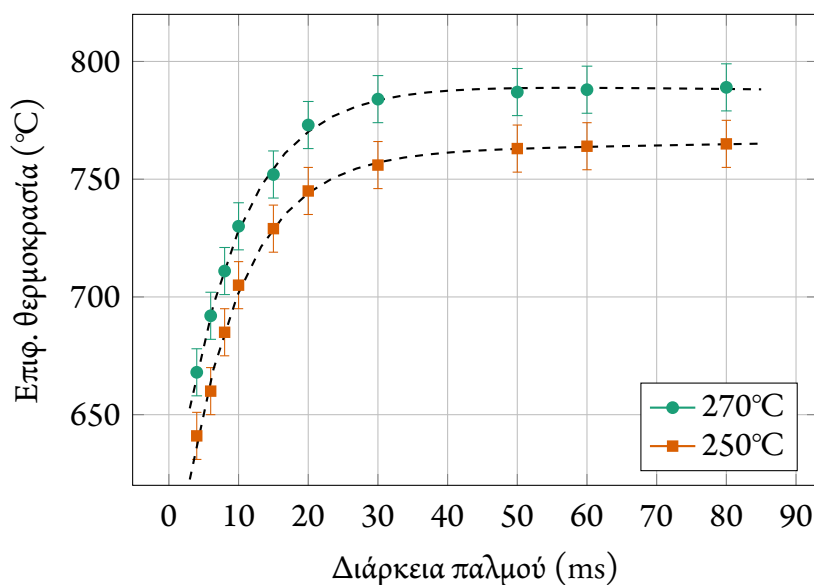
### § 6.3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

Για τις ανάγκες αυτής της διερεύνησης πραγματοποιήθηκαν πειράματα ανόπτησης σε δισκία γερμανίου ηλεκτρονικής ποιότητας (electronic grade) κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης (100) που προμηθευτήκαμε από την εταιρεία Umicore. Το υπόστρωμα είναι τύπου p νοθευμένο με γάλλιο ειδικής αντίστασης 2–5  $\Omega \text{ cm}$  κάτι το οποίο αντιστοιχεί συγκέντρωση προσμίξεων περίπου  $\sim 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Εν συνεχεία εναποτέθηκε στο wafer ένα στρώμα διοξειδίου του πυριτίου ( $\text{SiO}_2$ ) πάχους 32–35 nm του οποίου η ανάπτυξη έγινε με την τεχνική του RF sputtering στους 250°C. Η θερμοκρασία είναι απαραίτητη καθώς σε θερμοκρασία δωματίου το οξείδιο που αναπτύσσεται είναι ψαθυρό και απομακρύνεται μηχανικά. Στο φιλμ  $\text{SiO}_2$  έγινε οπτική λιθογραφία ενός παραθύρου διαστάσεων  $600 \times 600 \mu\text{m}^2$  το οποίο εγχαράχτηκε σε υδατικό διάλυμα υδροφθορίου (HF) 5% (συγκεκριμένα ένα μέρος HF περιεκτικότητας 50% προς 10 μέρη απιονισμένο νερό) για 40 δευτερόλεπτα. Στο τέλος της διαδικασίας το φιλμ εντός του τετραγώνου που λιθογραφήθηκε απομακρύνεται εντελώς αφήνοντας ένα άνοιγμα της ίδιας διάστασης στο  $\text{SiO}_2$  μέσω του οποίου είναι εκτεθειμένο το υπόστρωμα του γερμανίου. Αυτή η διαδικασία γίνεται για τον περιορισμό της εμφύτευσης των ιόντων που χρησιμοποιήθηκαν εντός του τετραγώνου που σχηματίστηκε ούτως ώστε να υπάρχει ένα πολύ απότομο προφίλ κατανομής προσμίξεων σε σχέση με τα πλευρικά τοιχώματα (τα οποία καλύπτονται από το οξείδιο) της περιοχής που μελετάμε. Αυτός ο περιορισμός

κρίθηκε απαραίτητος επειδή κατά τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό, όπως αποδείχθηκε εκ των υστέρων, υπήρχε μεγάλη παρασιτική επίδραση των πλευρικών τοιχωμάτων του υποστρώματος με αποτέλεσμα όλα τα αποτελέσματα του ηλεκτρικού χαρακτηρισμού να δίνουν περίπου τις ίδιες τιμές αντίστασης με αυτές του υποστρώματος. Η κατάσταση βελτιώθηκε εμφανώς με την εισαγωγή του παραπάνω process.

Για να βεβαιωθούμε ότι η δέσμη των ιόντων που εμφυτεύτηκαν δεν θα περάσει το φιλμ SiO<sub>2</sub> η ρητίνη της λιθογραφίας δεν αφαιρέθηκε σε αυτή τη φάση. Αντ' αυτού τα δείγματα οδηγήθηκαν για εμφύτευση που έγινε από το Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας του ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”. Στο μισό wafer γερμανίου έγινε εμφύτευση 30 keV με ρεύμα δέσμης μικρότερο από 100  $\mu\text{A}$  και δόση  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  ενώ στο άλλο μισό έγινε εκτός από εμφύτευση φωσφόρου μία επιπλέον εμφύτευση μοριακού άζωτου (N<sub>2</sub><sup>+</sup>) με τις ίδιες συνθήκες εμφύτευσης. Ο λόγος που επελέγη το μοριακό άζωτο έναντι του ατομικού ήταν επειδή το ατομικό βάρος του ( $2 \times 7 = 14$ ) είναι περίπου το ίδιο με αυτό του φωσφόρου (15). Ως εκ τούτου αρχικά είχαμε τη δυνατότητα να έχουμε μια καλή εκτίμηση της εμβέλειας που θα έχει το άζωτο στο γερμάνιο και η οποία εκτιμάται ότι θα ήταν παραπλήσια με αυτή του φωσφόρου. Επίσης μας δίνει τη δυνατότητα να έχουμε μια πιο άμεση σύγκριση τόσο με τη δουλειά των Thomidis κ.ά. που χρησιμοποιούσαν παρόμοια στρατηγική εμφύτευσης (αν και σε χαμηλότερη ενέργεια) όσο και με προηγούμενα πειράματα που είχαν γίνει στο εργαστήριο μας με θέμα την ενεργοποίηση του φωσφόρου στο γερμάνιο (ίδιες συνθήκες εμφύτευσης). Σίγουρα, βέβαια, η δέσμη των 30 keV δεν μπορεί να θεωρηθεί ως χαμηλής ενέργειας με βάση τα σημερινά standards. Ωστόσο ήταν η ελάχιστη επιτεύξιμη ενέργεια που μπορούμε να πετύχουμε με τον εμφυτευτή του ινστιτούτου και τη χρονική περίοδο κατά την οποία έγιναν αυτά τα πειράματα δεν ήταν εφικτή η πραγματοποίηση εμφυτεύσεων πλάσματος. Μπορεί να μας δώσει, παρόλα αυτά όπως θα δούμε, μια καλή εκτίμηση της κινητικής του φωσφόρου στα χρονικά πλαίσια της ανόπτησης που χρησιμοποιήθηκε. Αφού αφαιρέθηκε η εναπομένουσα ρητίνη της λιθογραφίας τα δύο μισά του wafer κόπηκαν σε δείγματα διαστάσεων 0.8×0.8 cm<sup>2</sup> ούτως ώστε να οδηγηθούν σε ακτινοβόληση.

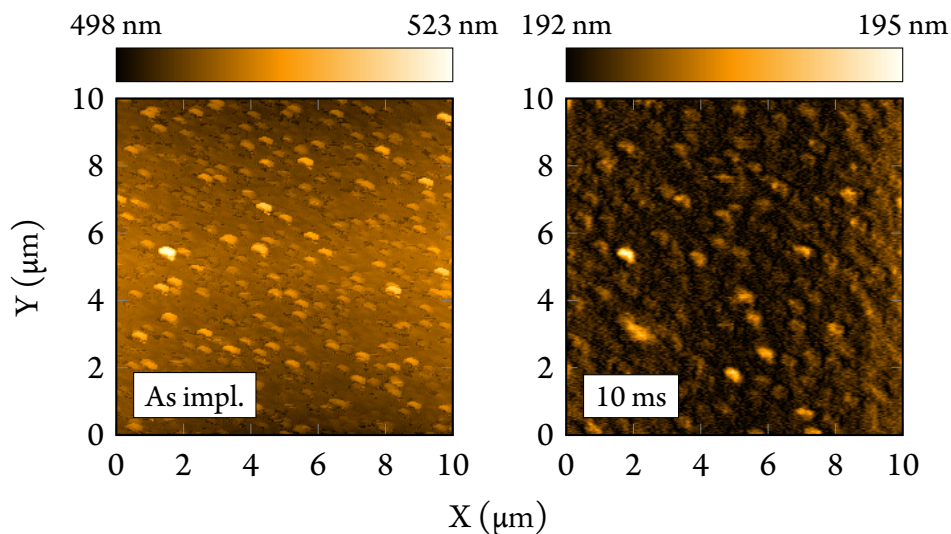
Καθώς η θερμοκρασία τήξης του γερμανίου είναι πολύ μικρότερη του πυριτίου στους 938 °C οι συνθήκες προθέρμανσης που χρησιμοποιήθηκαν στο πυρίτιο δεν είναι εφικτό να χρησιμοποιηθούν και εδώ. Ως εκ τούτου πραγματοποιήσαμε μερικές δοκιμές ακτινοβόλησης σε χαμηλότερες θερμοκρασίες προθέρμανσης. Οι ακτινοβολήσεις έγιναν με spot size 1.3 mm και ισχύ 50 W και οι θερμοκρασίες προανόπτησης που διερευνήθηκαν κυμαίνονταν από 200 έως 300 °C. Θερμοκρασίες κάτω των 240 °C οδήγησαν σε μέγιστες καταγεγραμμένες θερμοκρασίες στην επιφάνεια κάτω από 650 °C κάτι το οποίο



**Σχήμα 6.4:** Θερμοκρασία που αναπτύχθηκε στην επιφάνεια του γερμανίου για ακτινοβολήση ισχύος 50 W με spot size 1.3 mm για διάφορους χρόνους ανόπτησης και δύο διαφορετικές συνθήκες προθέρμανσης.

δεν έχει κάποια χρησιμότητα για τις χρονικές διάρκειες που θέλουμε να μελετήσουμε. Οι πιο τεχνολογικά ενδιαφέρουσες θερμοκρασίες γύρω από τους 800°C επιτεύχθηκαν με προθέρμανση μεταξύ 250 και 300°C καθώς σε αυτό το εύρος θερμοκρασιών ο συντελεστής απορρόφησης του γερμανίου αυξάνεται πάνω από 10 φορές [34, 35]. Στο γράφημα 6.4 μπορούμε να δούμε χαρακτηριστικές θερμοκρασίες που καταγράφηκαν στην επιφάνεια των δειγμάτων που ακτινοβολήθηκαν για δύο διαφορετικές θερμοκρασίες προθέρμανσης. Η θερμοκρασία η οποία χρησιμοποιήθηκε στις τελικές ακτινοβολήσεις ήταν οι 270°C.

Η ισχύς η οποία χρησιμοποιήθηκε στις τελικές ακτινοβολήσεις ήταν 54–55 W ενώ το spot του laser ήταν 1.2 mm το οποίο είναι 0.1 mm μεγαλύτερο από το αντίστοιχο spot size που χρησιμοποιήθηκε στο πυρίτιο. Αυτό έγινε για να υπάρχει μια λιγότερο απότομη κατανομή θερμοκρασίας καθώς όταν χρησιμοποιήθηκε spot size 1.1 mm άρχισε να εμφανίζεται στην επιφάνεια παραμόρφωση με τη μορφή κρυσταλλικής ολίσθησης (slippage). Γι αυτό το λόγο αποφασίστηκε η μικρή αύξηση του spot ούτως ώστε να αποφευχθεί αυτό το πρόβλημα. Όντως στα 1.2 mm η κατάσταση ήταν εμφανώς βελτιωμένη. Σε κάθε περίπτωση το εκτεθειμένο παράθυρο γερμανίου που έχει σχηματιστεί καλύπτεται πλήρως από τη δέσμη. Οι χρόνοι ακτινοβολήσης που χρησιμοποιήθηκαν κυμαίνονταν από 8 μέχρι 12 ms και για τις δύο κατηγορίες δειγμάτων. Για σύγκριση,



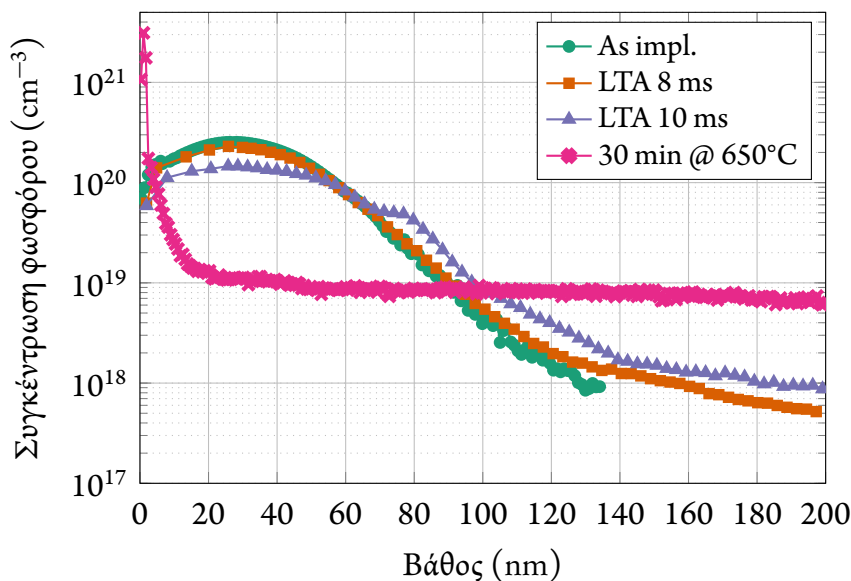
**Σχήμα 6.5:** Τοπογραφίες AFM ενός δείγματος γερμανίου πριν (αριστερά) και μετά (δεξιά) την ακτινοβολή διάρκειας 10 ms.

εκτός από τα δείγματα που ανοπτήθηκαν με laser χρησιμοποιήθηκαν και δύο επιπλέον δείγματα, ένα με εμφύτευση φωσφόρου και ένα εμφυτευμένο με φώσφορο και άζωτο, στα οποία έγινε συμβατική ανόπτηση σε φούρνο στους 650°C για 30 λεπτά. Για την αποφυγή απώλειας υποστρώματος έγινε μια επιπλέον εναπόθεση ενός φιλμ SiO<sub>2</sub> πάχους 30 nm μέσω RF sputtering το οποίο αφαιρέθηκε μετά τη διαδικασία με εμβάπτιση σε διάλυμα HF.

Για τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό των δειγμάτων ακολουθήθηκε η ίδια διαδικασία με το πυρίτιο. Επί της επιφάνειας του εκτεθειμένου γερμανίου στο φιλμ του SiO<sub>2</sub> έγινε μέσω lift-off ο σχηματισμός επαφών χρυσού πάχους 35 nm με 5 nm τιτάνιο για ενδιάμεσο στρώμα πρόσφυσης. Οι επαφές έχουν διάσταση 75 μm και οι άκρες τους απέχουν επίσης 75 μm. Μια επαφή με τα ίδια χαρακτηριστικά κατασκευάστηκε, επίσης, σε όλη την πίσω επιφάνεια του δείγματος (back contact) για να εξεταστεί η συμπεριφορά των δειγμάτων ως δίοδοι. Όπως και στα δείγματα του πυριτίου οι μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης λειτουργούν ως οδηγός για την εύρεση του σημείου ελάχιστης αντίστασης (άρα και μέγιστης διάχυσης) όπου θα γίνουν οι μετρήσεις SIMS.

## § 6.4 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Τα δείγματα που ακτινοβολήθηκαν μελετήθηκαν αρχικά ως προς την τραχύτητα της επιφάνειάς τους. Στο σχήμα 6.5 μπορούμε να δούμε την αποκατάσταση της επι-

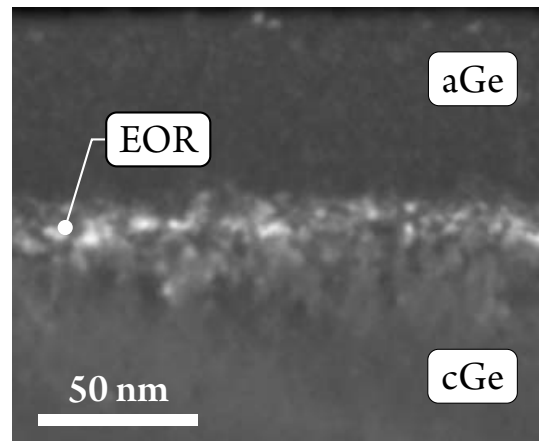


**Σχήμα 6.6:** Μετρήσεις SIMS για τα δείγματα γερμανίου στα οποία είχε εμφυτευθεί μόνο φώσφορος για δύο χρόνους ανόπτησης με laser και σύγκριση με την περίπτωση της ανόπτησης σε φούρνο.

φανειακής ομοιομορφίας του γερμανίου μετά από ακτινοβόληση διάρκειας 10 ms σε σχέση με την as-implanted κατάσταση. Είναι εμφανής η μείωση της τραχύτητας από περίπου 20 nm σε λιγότερο από 5, κάτι το οποίο αποδεικνύει τη διάλυση των ατελειών που προκλήθηκαν από την εμφύτευση κοντά στην επιφάνεια. Βέβαια, αυτό ίσως υποδεικνύει ένα χαμηλότερο κατώφλι τήξης των έντονα αμορφοποιημένων περιοχών κοντά στην επιφάνεια, αλλά για να είμαστε σίγουροι χρειάζεται πιο εκτεταμένη μελέτη με μικροσκοπία διέλευσης. Επίσης πρέπει να επισημάνουμε ότι μετρώντας το βήμα ανάμεσα στο φιλμ SiO<sub>2</sub> και την ακάλυπτη περιοχή στην οποία είναι εκτεθειμένο το γερμάνιο δεν παρατηρήθηκε καμία διαφορά στο βάθος κάτι που δείχνει ότι δεν υπάρχει απώλεια υποστρώματος παρά την υψηλή θερμοκρασία που αναπτύσσεται και την απουσία στρώματος αδρανοποίησης. Σημειώνουμε ότι οι θερμοκρασίες που μετρήθηκαν από το πυρόμετρο ήταν περίπου 740°C και 815°C στην ανόπτηση με 8 και 10 ms αντίστοιχα.

Προχωρώντας στον χαρακτηρισμό SIMS, στο γράφημα 6.6 μπορούμε να δούμε την κατανομή προσμίξεων φωσφόρου για τα δείγματα στα οποία είχε εμφυτευτεί μόνο φώσφορος. Είναι εμφανής η βελτίωση της διάχυσης του φωσφόρου στα δείγματα τα οποία ακτινοβολήθηκαν με laser έναντι της ανόπτησης που έγινε στον φούρνο. Στην πρώτη περίπτωση η διάχυση και στις δύο συνθήκες ανόπτησης έχει διατηρηθεί σε ανεκτά πλαίσια οδηγώντας σε βάθη επαφής (στα  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) 162 και 190 nm για τα

**Σχήμα 6.7**  
Μικρογραφία TEM της φθοράς που εισάγεται κατά την εμφύτευση φωσφόρου σύμφωνα με τους Tsuroutas κ.ά. [36] οι οποίοι χρησιμοποίησαν τις ίδιες συνθήκες εμφύτευσης φωσφόρου.



8 και 10 ms αντίστοιχα. Αντίθετα στην ανόπτηση που έγινε στο φούρνο η διάχυση είναι πολύ εντονότερη οδηγώντας πρακτικά σε μία κυβοειδή (box-like) κατανομή των προσμιξεων του φωσφόρου. Μπορούμε, επίσης, να κάνουμε ακόμα τρεις παρατηρήσεις. Η πρώτη αφορά στην εμφάνιση ενός pile-up στην κατανομή στην περίπτωση της ανόπτησης στο φούρνο. Αυτή η κορυφή κοντά στην επιφάνεια οφείλεται στη συγκέντρωση φωσφόρου ο οποίος τείνει να κάνει out-diffusion στη διεπιφάνεια του γερμανίου με το φιλμ SiO<sub>2</sub> το οποίο το καλύπτει. Μπορούμε επίσης να διακρίνουμε ένα χαρακτηριστικό “γόνατο” στην περιοχή των 75–80 nm στην περίπτωση της ανόπτησης των 10 ms. Η παρουσία αυτής της ιδιομορφίας οφείλεται στην ύπαρξη ατελειών εκεί που ήταν το όριο της περιοχής που αμορφοποιήθηκε από την εμφύτευση με την κρυσταλλική περιοχή του γερμανίου. Αυτό μπορούμε να το δούμε στις εικόνες TEM που παρουσιάζουν στη δημοσίευσή τους οι Tsuroutas κ.ά. [36] (βλ. και εικόνα 6.7) οι οποίοι χρησιμοποίησαν ίδιες συνθήκες καθώς και τον ίδιο ιοντικό εμφυτευτή για τις εμφυτεύσεις φωσφόρου που πραγματοποίησαν στα δικά τους πειράματα. Τέλος, το γεγονός ότι η κατανομή του φωσφόρου ακολουθεί πιστά την as-implanted κατανομή ενισχύει περαιτέρω τον ισχυρισμό μας ότι δεν υπάρχει απώλεια υποστρώματος.

Ένα ακόμα σημείο στο οποίο πρέπει να σταθούμε είναι ο βαθμός της απώλειας δόσης που εμφανίζεται κατά αυτή τη διαδικασία. Για να υπολογίσουμε τη δόση ολοκληρώνουμε την καμπύλη της κατανομή μέχρι το βάθος επαφής

$$D_p = \int_0^{x_j} N_p(x) dx \quad (6.2)$$

Για την περίπτωση της ανόπτησης με laser η απώλεια δόσης είναι σχετικά μικρή στα 9% για τα 8 ms, αλλά πιο έντονη για την περίπτωση των 10 ms στην οποία υπολογίζεται σε 25%. Και οι δύο περιπτώσεις είναι ξεκάθαρα καλύτερες, ωστόσο, από την ανόπτηση



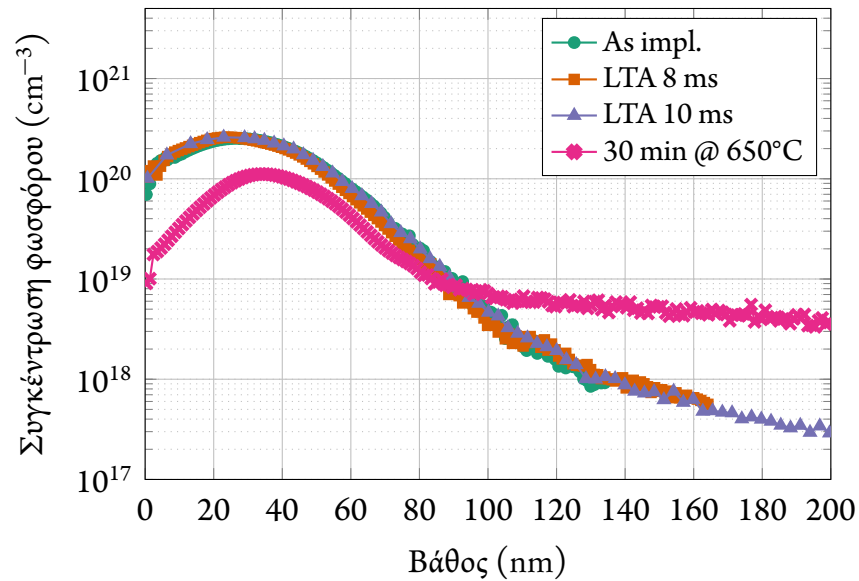
Νόθευση	Χρόνος	Θερμοκρασία [°C]	Βάθος επαφής [nm]	Απώλεια δόσης [%]
P	8 ms	740±25	162	9
P	10 ms	815±25	190	25
P	30 min	650 (φούρνος)	≥200	59
P+N <sub>2</sub>	8 ms	743±25	135	<5
P+N <sub>2</sub>	10 ms	816±25	139	<5
P+N <sub>2</sub>	30 min	650 (φούρνος)	>200	50

**Πίνακας 6.1:** Σύνοψη των κυριότερων πειραματικών αποτελεσμάτων για τα βάθη επαφών φωσφόρου στο γερμάνιο. Το as implanted βάθος επαφής είναι 131 nm.

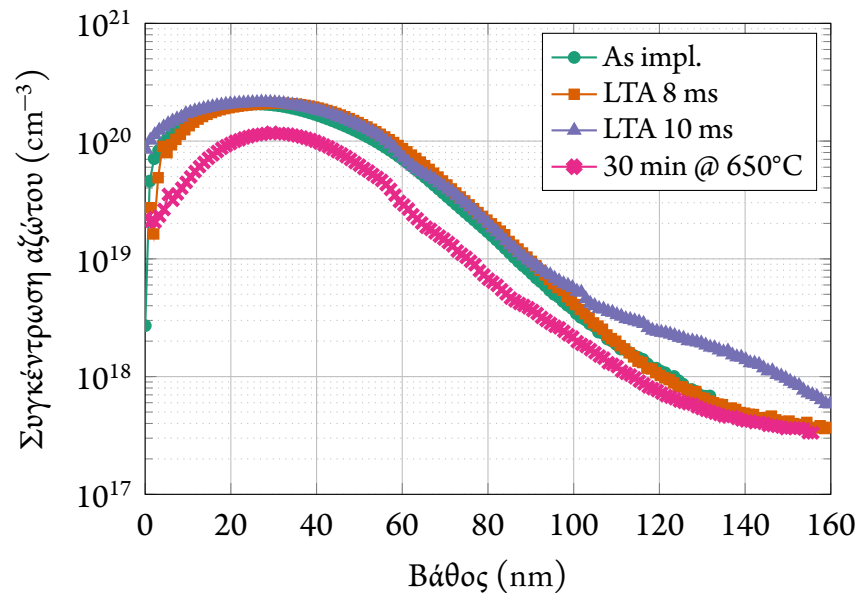
στο φούρνο όπου η απώλεια δόσης είναι εξαιρετικά έντονη και υπολογίζεται στα 59%. Είναι εμφανές ότι η διατήρηση της δόσης είναι πολύ καλύτερη στην περίπτωση της ανόπτησης με laser αν και στην περίπτωση του φούρνου η κατάσταση μπορεί να βελτιωθεί πιθανότατα χρησιμοποιώντας ένα καλύτερο διηλεκτρικό όπως Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> ή Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> για να περιοριστεί η εξω-διάχυση της πρόσμιξης εντός του στρώματος αδρανοποίησης.

Σε γενικές γραμμές μπορούμε να πούμε ότι η ανόπτηση με laser έχει αρκετά καλά αποτελέσματα στον περιορισμό της διάχυσης. Για να δούμε αν η κατάσταση μπορεί να βελτιωθεί περαιτέρω, όσον αφορά τη διάχυση, θα δούμε τη συννόθευση με άζωτο. Τα αποτελέσματα των μετρήσεων SIMS για τον φώσφορο και το άζωτο μπορούν να βρεθούν στα γραφήματα 6.8 και 6.9 (σελίδα 164) αντίστοιχα. Η συννόθευση με άζωτο βελτιώνει θεαματικά την ανόπτηση στο φούρνο αν και πάλι οδηγεί σε βάθη επαφής πάνω από 200 nm. Η ανάσχεση της διάχυσης του φωσφόρου είναι ακόμα πιο έντονη στην ανόπτηση με laser κάτι το οποίο οδηγεί τελικά σε βάθη επαφής 135 και 139 nm για τα 8 και 10 ms αντίστοιχα κάτι το οποίο αντιστοιχεί σε μετακίνηση του προφίλ προσμίξεων κάτω από 10 nm. Παράλληλα ολοκληρώνοντας τις καμπύλες μπορούμε να δούμε ότι υπάρχει ελάχιστη απώλεια δόσης, μικρότερη από 5%, και στις δύο περιπτώσεις. Αυτό έρχεται σε έντονη αντίθεση με την περίπτωση του φούρνου όπου η απώλεια είναι περίπου 50%.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει, επίσης, και η συμπεριφορά του αζώτου στο καθεστώς της ανόπτησης που πραγματοποιήθηκε. Στην περίπτωση της ανόπτησης με laser η διάχυση του αζώτου είναι εξαιρετικά ασθενής και μόνο στην περίπτωση των 10 ms αρχίζει να εμφανίζεται κάποια μετακίνηση στο προφίλ της κατανομής του (σχήμα 6.9). Η πλειοψηφία της δόσης του αζώτου διατηρείται με τη μέγιστη απώλεια να καταγράφεται στην περίπτωση των 10 ms όπου είναι 7%. Η γενικότερη σταθερότητα του προφίλ



**Σχήμα 6.8:** Μετρήσεις SIMS **φωσφόρου** για τα δείγματα γερμανίου στα οποία είχε εμφυτευθεί φώσφορος και άζωτο για δύο χρόνους ανόπτησης με laser και σύγκριση με την περίπτωση της ανόπτησης σε φούρνο.



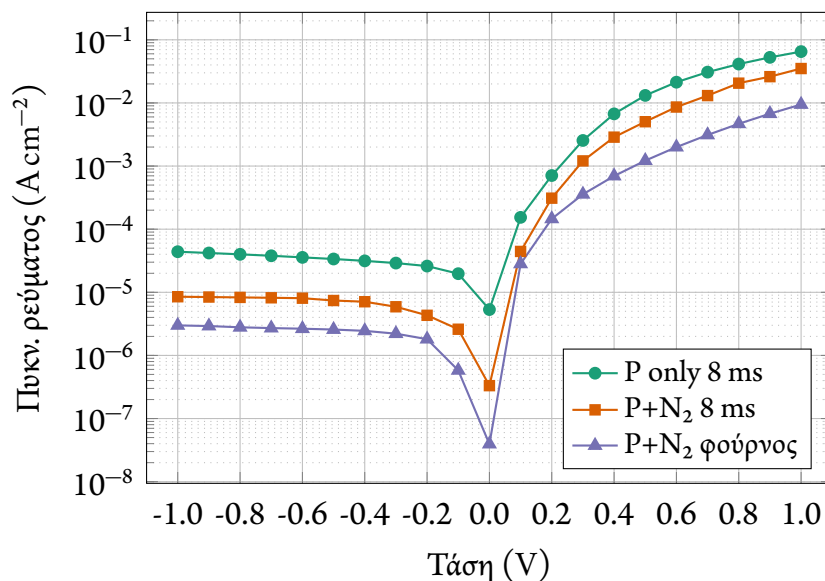
**Σχήμα 6.9:** Κατανομή συγκέντρωσης **αζώτου** για τα δείγματα με συννόθευση.

Νόθευση	Χρόνος	Θερμοκρασία [°C]	Επιφ. αντίσταση [Ω/□]
P	8 ms	740±25	68±6
P	10 ms	815±25	58±6
P	30 min	650 (φούρνος)	62±3
P+N <sub>2</sub>	8 ms	743±25	153±10
P+N <sub>2</sub>	10 ms	816±25	131±10
P+N <sub>2</sub>	30 min	650 (φούρνος)	138±10

**Πίνακας 6.2:** Αποτελέσματα μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης για τα δείγματα που μελετήθηκαν.

σε συνδυασμό με τη χαμηλή απώλεια δόσης υποδεικνύει ότι στο καθεστώς ms το άζωτο είναι πρακτικά ακλόνητο. Κάτι αντίστοιχο παρατήρησαν και οι Thomidis κ.ά. σε δείγματα που είχαν ανοπτηθεί με rapid thermal annealing. Στη περίπτωση του φούρνου αρχίζει να διαφαίνεται μιας μορφής ανώμαλη διάχυση του αζώτου προς τα έξω κάτι το οποίο έχουν παρατηρήσει επίσης και οι Skarlatos κ.ά. [37] σε αντίστοιχα πειράματα εμφύτευσης αζώτου με ενέργειες 3 και 10 keV και ίδιες δόσεις. Οι καταγεγραμμένες απώλειες δόσης είναι επίσης συγκρίσιμες.

Όσον αφορά τις μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης, έγιναν πολλές μετρήσεις σε διάφορους συνδυασμούς επαφών από αυτές που κατασκευάστηκαν, διατηρώντας όμως μια τετραγωνική συμμετρία σε κάθε μέτρηση. Οι ελάχιστες καταγεγραμμένες αντιστάσεις για κάθε συνθήκη ανόπτησης συνοψίζονται στον πίνακα 6.2. Από ό,τι μπορούμε να δούμε είναι ξεκάθαρο ότι οι επιφανειακές αντιστάσεις αυξάνονται καθώς μεγαλώνει η διάρκεια της ανόπτησης κάτι το οποίο αποδίδεται στη σταδιακά μεγαλύτερη διάχυση των προσμίξεων. Επίσης παρατηρούμε ότι οι διαφορές ανάμεσα στις αντιστάσεις μεταξύ των ανοπτήσεων φούρνου και laser είναι πολύ μικρές κάτι το οποίο μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι βρισκόμαστε κοντά στο μέγιστο επίπεδο ενεργοποίησης και στις δύο στρατηγικές νόθευσης. Στην περίπτωση των δειγμάτων μόνο με φώσφορο κυμαίνονται από 58 μέχρι 68 Ω/□ τιμές οι οποίες είναι τυπικές για αυτό το επίπεδο νόθευσης [38] και πολύ κοντά στο θεωρητικό μέγιστο επίπεδο επιφανειακής αντίστασης όπως είδαμε και στην αρχή του κεφαλαίου. Στην περίπτωση της συννόθευσης με άζωτο οι επιφανειακές αντιστάσεις είναι υψηλότερες και κυμαίνονται από 131 έως 153 Ω/□. Και εδώ μπορεί να γίνει η ίδια παρατήρηση για το μέγιστο επίπεδο ενεργοποίησης καθώς παρόμοιες είναι η τιμή της επιφανειακής αντίστασης του δείγματος που ανοπτήθηκε στον φούρνο.



**Σχήμα 6.10:** Χαρακτηριστικές τάσης-ρεύματος για διόδους που κατασκευάστηκαν με τις δύο διαφορετικές στρατηγικές εμφύτευσης.

Μετρήσεις έγιναν επίσης για την αξιολόγηση των διατάξεων ως διόδοι χρησιμοποιώντας την οπίσθια επαφή. Στο σχήμα 6.10 συνοψίζονται χαρακτηριστικές τάσης-ρεύματος για δύο διόδους με διαφορετικές στρατηγικές νόθευσης καθώς και μία διόδος με συννόθευση που κατασκευάστηκε για σύγκριση. Η πυκνότητα ρεύματος στην ορθή πόλωση είναι ικανοποιητική ενώ οι διόδοι που ανοπτήθηκαν με laser εμφανίζουν αισθητά καλύτερα ρεύματα σε αυτή την περίπτωση σε σύγκριση με τη βιβλιογραφία για αντίστοιχα πειράματα με laser annealing [28]. Αντίθετα η κατάσταση είναι πιο περίπλοκη για την ανάστροφη πόλωση στην οποία οι διατάξεις που ανοπτήθηκαν με laser εμφανίζουν μεγαλύτερο ρεύμα διαρροής σε σχέση με το δείγμα που ανοπτήθηκε στο φούρνο. Κατά πάσα πιθανότητα αυτό αποδίδεται στην ύπαρξη deep level ατελειών στη ζώνη απογύμνωσης οι οποίες δεν διαλύονται πλήρως με τη διαδικασία που ακολουθήθηκε με αποτέλεσμα να λειτουργούν ως κέντρα εκπομπής φορέων κάτι το οποίο οδηγεί στο αυξημένο ρεύμα διαρροής. Η παρουσία του αζώτου φαίνεται να αδρανοποιεί μερικώς αυτά τα κέντρα αν και όχι αρκετά ούτως ώστε να φέρει το ρεύμα διαρροής στα επίπεδα της ανόπτησης στο φούρνο. Οι Shayesteh κ.ά. [27] στη δημοσίευσή τους πραγματοποίησαν ανόπτηση με χρήση excimer laser annealing σε δείγματα στα οποία είχε εμφυτευθεί φώσφορος ίδιας δόσης στα 15 keV και παρατήρησαν και εκείνοι αυξημένο ρεύμα διαρροής σε σχέση με δείγματα που ανοπτήθηκαν με rapid thermal annealing στους 500°C. Είναι ξεκάθαρο ότι είναι ένα σημείο που χρήζει βελτιστοποίησης.

## § 6.5 ΠΟΣΟΣΤΟ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΗ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Αν και από τις μετρήσεις SIMS του γραφήματος 6.8 φαίνεται ξεκάθαρα η ευεργετική επίδραση του αζώτου στον έλεγχο της διάχυσης του φωσφόρου η υψηλή μετρούμενη επιφανειακή αντίσταση σε σχέση με τα δείγματα που δεν έχουν συννόθευση με αζώτο εγείρει κάποια ερωτηματικά σε σχέση με το ποσοστό ενεργοποίησης των προσμίξεων του φωσφόρου. Μια εκτίμηση για το επίπεδο ενεργοποίησης του φωσφόρου μπορεί να γίνει υπολογίζοντας την επιφανειακή αντίσταση από την κατανομή SIMS. Για να το κάνουμε αυτό θα αξιοποιήσουμε το ημι-εμπειρικό μοντέλο ευκινησίας για τον φώσφορο στο γερμάνιο το οποίο έχει προταθεί αρχικά από τον Hilsun [39] ενώ λίγο πιο μετά ένα αντίστοιχο μοντέλο προτάθηκε και από τους Fistul κ.ά. [40]

$$\mu(x) = \frac{4200}{1 + \sqrt{N(x) \times 1 \times 10^{-17}}} \quad (6.3)$$

$N(x)$  είναι η συγκέντρωση φωσφόρου (σε  $\text{cm}^{-3}$ ) και  $x$  το βάθος (σε cm) εντός του ημιαγωγού. Στην απλούστερη περίπτωση μια ικανοποιητική προσέγγιση της κατανομής ενεργού φωσφόρου είναι να θεωρήσουμε ότι όλες οι προσμίξεις είναι ενεργές μέχρι μία μέγιστη τιμή συγκέντρωσης,  $N_m$ , πάνω από την οποία ο φώσφορος θεωρείται ηλεκτρικά ανενεργός [41]. Έτσι μέσω της σχέσης για την επιφανειακή αντίσταση

$$\frac{1}{R_s} = q \int_0^{x_j} \mu(x)N(x)dx \quad (6.4)$$

μπορούμε να εκτιμήσουμε την τιμή του  $N_m$  για την οποία η υπολογιζόμενη επιφανειακή αντίσταση προσεγγίζει τις τιμές που έχουμε μετρήσει. Για την περίπτωση των 10 ms μπορούμε να υπολογίσουμε ότι  $N_m = 5.85 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  το οποίο βρίσκεται εξαιρετικά κοντά στο όριο στερεάς διαλυτότητας του φωσφόρου στο γερμάνιο (το οποίο είναι περίπου  $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  [42]) και υποδεικνύει ότι έχουμε υψηλό βαθμό ενεργοποίησης. Αντίθετα στην περίπτωση της συννόθευσης υπολογίζουμε ότι  $N_m = 2.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  κάτι το οποίο είναι μόλις το 40% της προηγούμενης τιμής. Είναι, δηλαδή, εμφανές ότι παρά τον περιορισμό της διάχυσης το επίπεδο ενεργοποίησης του φωσφόρου είναι χαμηλότερο όταν έχουμε παρουσία προσμίξεων αζώτου. Είναι λογικό να υποθέσουμε ότι ο φώσφορος απενεργοποιείται μέσω σχηματισμών που δημιουργούνται με το αζώτο.

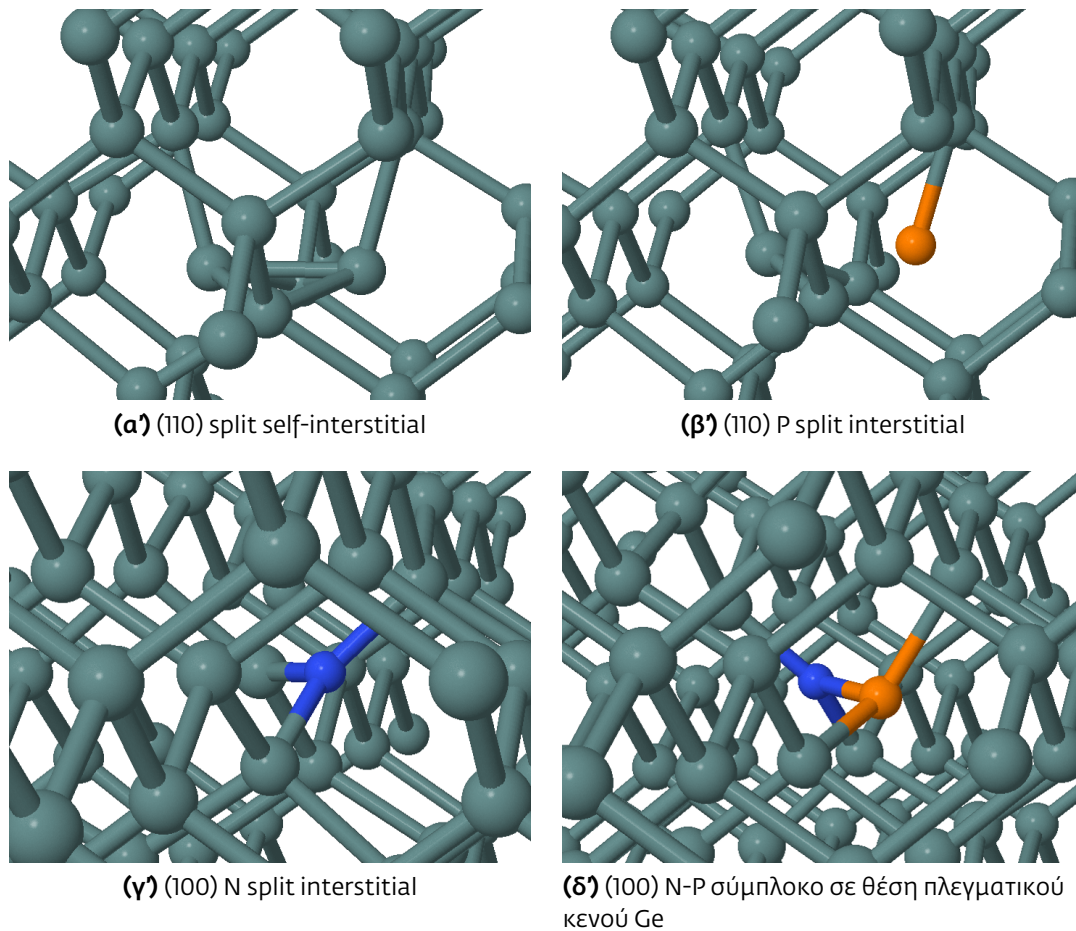
Για να έχουμε μια καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών αλληλεπίδρασης φωσφόρου και αζώτου τόσο με το γερμάνιο όσο και μεταξύ τους στραφήκαμε στη χρήση υπολογισμών DFT (density functional theory) οι οποίοι έγιναν με τη χρήση του πακέτου

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [43] και projector-augmented ψευδοδυναμικά (PAW) [44]. Η υπερκυψελίδα του γερμανίου περιελάμβανε 216 άτομα ενώ η ενέργεια αποκοπής ορίστηκε στα 350 eV [45–47]. Αρκετές εργασίες [5, 48, 49] έχουν ασχοληθεί με τη μελέτη της επίδρασης των πλεγματικών κενών στη διάχυση του φωσφόρου. Προς αυτή την κατεύθυνση μπορεί να πει κανείς ότι ο περιορισμός της διάχυσης παρουσία αζώτου οφείλεται στην αλληλεπίδραση του αζώτου με τα πλεγματικά κενά [22] ωστόσο υπάρχει ακόμα ένα έλλειμμα βιβλιογραφίας για το κατά πόσο είναι εφικτοί αυτοί οι σχηματισμοί του αζώτου ή κατά πόσο διατηρούνται στις υψηλές θερμοκρασίες της ανόπτησης. Στη δική μας περίπτωση θα εστιάσουμε στον έτερο μηχανισμό αλληλεπίδρασης με απευθείας δέσμευση ατόμων φωσφόρου από το άζωτο.

Για την αξιολόγηση της σταθερότητας των διάφορων σχηματισμών αζώτου και φωσφόρου μελετήθηκαν τα χαρακτηριστικά μεμονωμένων σημειακών ατελειών στην κυψελίδα του γερμανίου. Οι βασικότερες γεωμετρίες που μελετήθηκαν ήταν οι (110) και (100) ενδοπλεγματικές θέσεις, οι τετραεδρικές θέσεις και οι ενδοπλεγματικές θέσεις στο κέντρο της εξαγωνικής συμμετρίας της κυψελίδας. Από τις ενδοπλεγματικές ατέλειες του γερμανίου ο πιο ενεργειακά σταθερός σχηματισμός είναι ο (110)-split interstitial, όπως φαίνεται στο σχήμα 6.11α' κάτι το οποίο συμφωνεί με προηγούμενες δημοσιεύσεις που αφορούν ενεργειακές μελέτες για τις ενδοπλεγματικές ατέλειες του γερμανίου [50, 51].

Στην περίπτωση που έχουμε την παρουσία ενός ατόμου φωσφόρου στο υλικό ο πιο ενεργειακά συμφέρων σχηματισμός είναι η ενδοπλεγματική θέση στην (110) διεύθυνση (split configuration), όπως φαίνεται στην εικόνα 6.11β' με την απόσταση ανάμεσα στα δύο άτομα φωσφόρου και γερμανίου να υπολογίζεται στα 2.42 Å. Όταν έχουμε άζωτο, αντί για φώσφορο, στην κυψελίδα οι πιο ενεργειακά συμφέροντες σχηματισμοί είναι οι ενδοπλεγματικές θέσεις στις διευθύνσεις (110) και (100) αν και η δεύτερη (σχήμα 6.11γ') είναι οριακά πιο σταθερή κατά 0.16 eV.

Ακόμα για να αντικατασταθεί ένα άτομο γερμανίου από ένα ενδοπλεγματικό άτομο αζώτου και να καταστεί ως πρόσμιξη αντικατάστασης απαιτείται σημαντικά υψηλή ενέργεια που υπολογίζεται στα 1.81 eV. Αντίθετα η ίδια διαδικασία για ένα άτομο φωσφόρου απαιτεί μόλις 0.22 eV. Συνεπώς ο φώσφορος έχει ξεκάθαρα μεγαλύτερη τάση να αντικαθιστά άτομα γερμανίου και να λειτουργεί τελικά σαν πρόσμιξη αντικατάστασης. Επίσης, πολύ ενεργειακά συμφέρων είναι ο σχηματισμός όπου ένα ενδοπλεγματικό άτομο αζώτου ή φωσφόρου καταλαμβάνει το κέντρο ενός υπάρχοντος πλεγματικού κενού με ενεργειακά οφέλη 2.27 και 3.85 eV αντίστοιχα.



**Σχήμα 6.11:** Κυριότεροι σχηματισμοί πλεγματού ατελειών και προσμίξεων αζώτου/φωσφόρου στο γερμάνιο.

Όταν έχουμε την παρουσία και των δύο στοιχείων στο γερμάνιο έχουμε τον σχηματισμό εξαιρετικά σταθερών συμπλόκων ατόμων φωσφόρου και αζώτου. Η γεωμετρία χαμηλότερης ενέργειας που σχηματίζεται σε ένα πλεγματού κενό γερμανίου είναι στη διεύθυνση (100) και μπορεί να φανεί στο σχήμα 6.11δ'. Με αφετηρία ένα άτομο αζώτου σε θέση αντικατάστασης και ένα άτομο φωσφόρου σε μια απομακρυσμένη θέση ο σχηματισμός ενός συμπλόκου N-P αποδεσμεύει ένα σημαντικό ποσό ενέργειας, 2.69 eV. Σημαντικό είναι, επίσης το ενεργειακό όφελος όταν το σύμπλοκο N-P σχηματίζεται με τη δέσμευση ενός αζώτου από ένα άτομο φωσφόρου σε θέση αντικατάστασης (1.11 eV). Τα σημαντικά οφέλη δείχνουν ότι το σύμπλοκο αζώτου-φωσφόρου μπορεί να σχηματιστεί ανεξάρτητα από την αρχική γεωμετρία. Επίσης, ο σχηματισμός έχει μεγαλύτερο ενεργειακό όφελος κατά 0.88 eV όταν τα δύο άτομα αλληλεπιδρούν

για το σχηματισμό της γεωμετρίας του σχήματος 6.11δ' με την ταυτόχρονη εξαγωγή ενός ενδοπλεγματού γερμανίου. Παράλληλα δεν παρατηρείται κάποια διαφορά στην κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων ανάμεσα σε μία κυψελίδα χωρίς ατέλειες και σε μία κυψελίδα με την ύπαρξη συμπλόκου N-P κάτι το οποίο υποδεικνύει ότι δεν έχουμε νέες καταστάσεις στο ενεργειακό χάσμα του υλικού, επομένως το σύμπλοκο είναι ηλεκτρικά ανενεργό.

Με βάση τα παραπάνω μπορούμε να πούμε ότι η συννόθευση ατόμων αζώτου μαζί με φώσφορο στο γερμάνιο οδηγεί στον σχηματισμό σταθερών συμπλόκων φωσφόρου και αζώτου τα οποία είναι ηλεκτρικά ανενεργά. Αυτό σημαίνει ότι αφενός περιορίζεται η διάχυση του φωσφόρου λόγω της σταθερότητας των συμπλόκων ενώ εξηγείται παράλληλα και η μείωση στο ποσοστό ενεργοποίησης το οποίο παρατηρήθηκε, όπως είδαμε, και από τα πειράματα.

## § 6.6 ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Στο κεφάλαιο που ολοκληρώθηκε είδαμε τη χρήση της διάταξης ακτινοβολήσης με laser CO<sub>2</sub> για την ανόπτηση δειγμάτων γερμανίου με σκοπό τον σχηματισμό επαφών n<sup>+</sup>/p. Από τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν είναι ξεκάθαρο ότι η ανόπτηση με laser αντιμετωπίζει κατάλληλα το πρόβλημα της εξαιρετικά έντονης διάχυσης του φωσφόρου, σε σχέση με μία συμβατική ανόπτηση στον φούρνο, ενώ προσφέρει παράλληλα πολύ υψηλό επίπεδο ενεργοποίησης του εμφυτευμένου φωσφόρου. Παράλληλα μελετήθηκε η χρήση της συννόθευσης με άζωτο για τον περαιτέρω περιορισμό της διάχυσης του φωσφόρου κάτι το οποίο όντως επιβεβαιώσαμε από τα πειράματα. Αυτός ο περιορισμός, όμως, έρχεται με κόστος την αισθητή απενεργοποίηση του φωσφόρου η οποία εκφράζεται μέσω της σημαντικά υψηλότερης μετρούμενης επιφανειακής αντίστασης. Μέσω υπολογισμών DFT αποδώσαμε αυτή την απενεργοποίηση στον σχηματισμό πολύ σταθερών συμπλόκων μεταξύ αζώτου και φωσφόρου τα οποία είναι ακλόνητα αλλά παράλληλα ηλεκτρικά ανενεργά.

Με βάση αυτά τα συμπεράσματα μπορούμε να πούμε ότι η συννόθευση δεν είναι η καλύτερη δυνατή στρατηγική ανάσχεσης της διάχυσης παρά τα αρχικά ενδιαφέροντα αποτελέσματα. Στην τρέχουσα φάση είναι άγνωστο αν τα σταθερά σύμπλοκα N-P μπορούν να διαλυθούν σε υψηλότερες θερμοκρασίες, αλλά αυτό φαίνεται αρκετά δύσκολο με βάση τη μεγάλη ενέργεια που απαιτείται. Αντίστοιχα φαινόμενα έχουν παρατηρηθεί και στη συννόθευση με άνθρακα και φθόριο. Κατά τη γνώμη μας η προσπάθεια για περιορισμό της διάχυσης πρέπει να γίνει μέσω πιο ισχυρών αλλά πιο σύντομων παλ-



μών laser καθώς φαίνεται από τα πειράματα ότι το μεγάλο θερμικό budget λειτουργεί ευεργετικά προς αυτή την κατεύθυνση. Αυτό βέβαια, δεν αποκλείει τη μελέτη άλλων στοιχείων προς συννόθευση με σκοπό τον περιορισμό της διάχυσης.

## § 6.7 ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] J. Bardeen και W.H. Brattain. “Physical Principles Involved in Transistor Action”. *Phys. Rev.* 75.8 (Απρ. 1949), 1208–1225. DOI: [10.1103/physrev.75.1208](https://doi.org/10.1103/physrev.75.1208).
- [2] K. Kita, K. Kyuno και A. Toriumi. “Growth mechanism difference of sputtered HfO<sub>2</sub> on Ge and on Si”. *Appl. Phys. Lett.* 85.1 (2004), 52. DOI: [10.1063/1.1767607](https://doi.org/10.1063/1.1767607).
- [3] C. Claeys και E. Simoen, επιμελητές. *Germanium-based technologies: from materials to devices*. Elsevier, 2007. ISBN: 978-0-08-044953-1.
- [4] A. ChronEOS και H. Bracht. “Diffusion of n-type dopants in germanium”. *Appl. Phys. Rev.* 1.1, 011301 (Ιαν. 2014). DOI: [10.1063/1.4838215](https://doi.org/10.1063/1.4838215).
- [5] S. Brotzmann και H. Bracht. “Intrinsic and extrinsic diffusion of phosphorus, arsenic, and antimony in germanium”. *J. Appl. Phys.* 103.3, 033508 (Φεβ. 2008). DOI: [10.1063/1.2837103](https://doi.org/10.1063/1.2837103).
- [6] C.O. Chui κ.ά. “Activation and diffusion studies of ion-implanted p and n dopants in germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 83.16 (2003), 3275. DOI: [10.1063/1.1618382](https://doi.org/10.1063/1.1618382).
- [7] A. Satta κ.ά. “Diffusion, activation, and recrystallization of boron implanted in preamorphized and crystalline germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 87.17, 172109 (2005). DOI: [10.1063/1.2117631](https://doi.org/10.1063/1.2117631).
- [8] K. Benourhazi και J.P. Ponpon. “Implantation of phosphorous and arsenic ions in germanium”. *Nucl. Instrum. Meth. B* 71.4 (Σεπτ. 1992), 406–411. DOI: [10.1016/0168-583X\(92\)95358-X](https://doi.org/10.1016/0168-583X(92)95358-X).
- [9] T. Janssens κ.ά. “Heavy ion implantation in Ge: Dramatic radiation induced morphology in Ge”. *J. Vac. Sci. Technol. B* 24.1 (2006), 510. DOI: [10.1116/1.2151904](https://doi.org/10.1116/1.2151904).
- [10] E. Simoen κ.ά. “Ion-implantation issues in the formation of shallow junctions in germanium”. *Materials Science in Semiconductor Processing* 9.4-5 (Αύγ. 2006), 634–639. DOI: [10.1016/j.mssp.2006.08.067](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.08.067).
- [11] C.D. Thurmond, F.A. Trumbore και M. Kowalchik. “Germanium Solidus Curves”. *The Journal of Chemical Physics* 25.4 (1956), 799. DOI: [10.1063/1.1743083](https://doi.org/10.1063/1.1743083).
- [12] A. Satta κ.ά. “Shallow Junction Ion Implantation in Ge and Associated Defect Control”. *J. Electrochem. Soc.* 153.3 (2006), G229. DOI: [10.1149/1.2162469](https://doi.org/10.1149/1.2162469).
- [13] S. Matsumoto. “Concentration Dependence of a Diffusion Coefficient at Phosphorus Diffusion in Germanium”. *Journal of The Electrochemical Society* 125.8 (1978), 1307. DOI: [10.1149/1.2131668](https://doi.org/10.1149/1.2131668).
- [14] E. Vainonen-Ahlgren κ.ά. “Identification of vacancy charge states in diffusion of arsenic in germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 77.5 (2000), 690. DOI: [10.1063/1.127087](https://doi.org/10.1063/1.127087).
- [15] S. Brotzmann κ.ά. “Diffusion and defect reactions between donors, C, and vacancies in Ge. I. Experimental results”. *Phys. Rev. B* 77.23 (Ιούν. 2008). DOI: [10.1103/physrevb.77.23207](https://doi.org/10.1103/physrevb.77.23207).
- [16] C. Wündisch κ.ά. “Millisecond flash lamp annealing of shallow implanted layers in Ge”. *Appl. Phys. Lett.* 95.25, 252107 (2009). DOI: [10.1063/1.3276770](https://doi.org/10.1063/1.3276770).

- [17] G. Hellings κ.ά. “Ultra Shallow Arsenic Junctions in Germanium Formed by Millisecond Laser Annealing”. *Electrochemical and Solid-State Letters* 14.1 (2011), H39. DOI: [10.1149/1.3512990](https://doi.org/10.1149/1.3512990).
- [18] A. Chroneos κ.ά. “Implantation and diffusion of phosphorous in germanium”. *Mat. Sci. Semicon. Proc.* 9.4-5 (Αύγ. 2006), 640–643. DOI: [10.1016/j.mssp.2006.10.001](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.10.001).
- [19] B. Smets. “Atom formation and dissipation in electrothermal atomization”. *Spectrochim. Acta Part B* 35.1 (Ιαν. 1980), 33–42. DOI: [10.1016/0584-8547\(80\)80100-5](https://doi.org/10.1016/0584-8547(80)80100-5).
- [20] B.V. L'vov, P.A. Bayunov και G.N. Ryabchuk. “A macrokinetic theory of sample vaporization in electrothermal atomic absorption spectrometry”. *Spectrochim. Acta Part B* 36.5 (Ιαν. 1981), 397–425. DOI: [10.1016/0584-8547\(81\)80042-0](https://doi.org/10.1016/0584-8547(81)80042-0).
- [21] J. Oh και J.C. Campbell. “Thermal desorption of Ge native oxides and the loss of Ge from the surface”. *J. Electron. Mater.* 33.4 (Απρ. 2004), 364–367. DOI: [10.1007/s11664-004-0144-4](https://doi.org/10.1007/s11664-004-0144-4).
- [22] A. Chroneos. “Effect of germanium substrate loss and nitrogen on dopant diffusion in germanium”. *J. Appl. Phys.* 105.5, 056101 (2009). DOI: [10.1063/1.3086664](https://doi.org/10.1063/1.3086664).
- [23] N. Ioannou κ.ά. “Germanium substrate loss during low temperature annealing and its influence on ion-implanted phosphorous dose loss”. *Appl. Phys. Lett.* 93.10, 101910 (2008). DOI: [10.1063/1.2981522](https://doi.org/10.1063/1.2981522).
- [24] R.J. Kaiser κ.ά. “Germanium substrate loss during thermal processing”. *Microelectron. Eng.* 88.4 (Απρ. 2011), 499–502. DOI: [10.1016/j.mee.2010.08.031](https://doi.org/10.1016/j.mee.2010.08.031).
- [25] W. Bues και H.V. Wartenberg. “Das System Ge/Geo/GeO<sub>2</sub>”. *Γερμανικά. Z. Anorg. Allg. Chem.* 266.6 (Νοέ. 1951), 281–288. DOI: [10.1002/zaac.19512660602](https://doi.org/10.1002/zaac.19512660602).
- [26] A. Satta κ.ά. “Formation of germanium shallow junction by flash annealing”. *Nucl. Instrum. Meth. B* 257.1-2 (Απρ. 2007), 157–160. DOI: [10.1016/j.nimb.2006.12.191](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2006.12.191).
- [27] M. Shayesteh κ.ά. “Optimized Laser Thermal Annealing on Germanium for High Dopant Activation and Low Leakage Current”. *IEEE Trans. Electron Devices* 61.12 (Δεκ. 2014), 4047–4055. DOI: [10.1109/ted.2014.2364957](https://doi.org/10.1109/ted.2014.2364957).
- [28] C. Wang κ.ά. “Phosphorus diffusion in germanium following implantation and excimer laser annealing”. *Appl. Surf. Sci.* 300 (Μάρ. 2014), 208–212. DOI: [10.1016/j.apsusc.2014.02.041](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.02.041).
- [29] G. Luo κ.ά. “Suppressing phosphorus diffusion in germanium by carbon incorporation”. *Electron. Lett.* 41.24 (2005), 1354. DOI: [10.1049/el:20052999](https://doi.org/10.1049/el:20052999).
- [30] B.J. Pawlak κ.ά. “Suppression of phosphorus diffusion by carbon co-implantation”. *Appl. Phys. Lett.* 89.6, 062102 (2006). DOI: [10.1063/1.2234315](https://doi.org/10.1063/1.2234315).
- [31] A. Chroneos, R. W. Grimes και H. Bracht. “Fluorine codoping in germanium to suppress donor diffusion and deactivation”. *J. Appl. Phys.* 106.6, 063707 (2009). DOI: [10.1063/1.3224900](https://doi.org/10.1063/1.3224900).
- [32] H.A.W. El Mubarek. “Reduction of phosphorus diffusion in germanium by fluorine implantation”. *J. Appl. Phys.* 114.22, 223512 (2013). DOI: [10.1063/1.4847555](https://doi.org/10.1063/1.4847555).
- [33] C. Thomidis κ.ά. “Strong Diffusion Suppression of Low Energy-Implanted Phosphorous in Germanium by N<sub>2</sub> Co-Implantation”. *Electrochem. Solid St.* 4.6 (Ιαν. 2015), P47–P50. DOI: [10.1149/2.0061506ssl](https://doi.org/10.1149/2.0061506ssl).
- [34] J.E. Peters κ.ά. “Far-infrared absorption of Czochralski germanium and silicon”. *Inorganic Optical Materials*. Επιμέλεια υπό A.J. Marker III. Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng., Σεπτ. 1998. DOI: [10.1117/12.323764](https://doi.org/10.1117/12.323764).

- [35] K.A. Osmer, C.J. Pruszynski και J. Richter. “High Temperature IR Absorption Of Low Resistivity Germanium”. *Window and Dome Technologies and Materials*. Επιμέλεια υπό P. Klocek. Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng., Σεπτ. 1989. DOI: [10.1117/12.960767](https://doi.org/10.1117/12.960767).
- [36] P. Tsouroutas κ.ά. “Modeling and experiments on diffusion and activation of phosphorus in germanium”. *J. Appl. Phys.* 105.9, 094910 (2009). DOI: [10.1063/1.3117485](https://doi.org/10.1063/1.3117485).
- [37] D. Skarlatos κ.ά. “Nitrogen Implantation and Diffusion in Crystalline Germanium: Implantation Energy, Temperature and Ge Surface Protection Dependence”. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* 1.6 (Ιαν. 2012), P315–P319. DOI: [10.1149/2.003301jss](https://doi.org/10.1149/2.003301jss).
- [38] P. Tsouroutas, D. Tsoukalas και H. Bracht. “Experiments and simulation on diffusion and activation of codoped with arsenic and phosphorous germanium”. *J. Appl. Phys.* 108.2, 024903 (2010). DOI: [10.1063/1.3456998](https://doi.org/10.1063/1.3456998).
- [39] C. Hilsum. “Simple empirical relationship between mobility and carrier concentration”. *Electron. Lett.* 10.13 (1974), 259. DOI: [10.1049/e1:19740205](https://doi.org/10.1049/e1:19740205).
- [40] V.I. Fistul κ.ά. “Solubility and electrical activation of phosphorus in germanium”. *Inorgan. Mater.* 11 (1975), 593–542.
- [41] S. Koffel. “Implantation, diffusion et activation des dopants dans le germanium”. Γαλλικά. Διδακτορική διατρ. Grenoble, France: Institut Polytechnique de Grenoble, Νοέ. 2008.
- [42] N.S. Bennett και N.E.B. Cowern. “Doping characterization for germanium-based microelectronics and photovoltaics using the differential Hall technique”. *Appl. Phys. Lett.* 100.17, 172106 (2012). DOI: [10.1063/1.4705293](https://doi.org/10.1063/1.4705293).
- [43] G. Kresse και D. Joubert. “From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method”. *Phys. Rev. B* 59.3 (Ιαν. 1999), 1758–1775. DOI: [10.1103/physrevb.59.1758](https://doi.org/10.1103/physrevb.59.1758).
- [44] P.E. Blöchl. “Projector augmented-wave method”. *Phys. Rev. B* 50.24 (1994), 17953–17979. DOI: [10.1103/physrevb.50.17953](https://doi.org/10.1103/physrevb.50.17953).
- [45] L. Tsetseris, S. Wang και S.T. Pantelides. “Thermal donor formation processes in silicon and the catalytic role of hydrogen”. *Appl. Phys. Lett.* 88.5 (2006), 051916. DOI: [10.1063/1.2168680](https://doi.org/10.1063/1.2168680).
- [46] L. Tsetseris κ.ά. “Hydrogen effects in MOS devices”. *Microelectronic Engineering* 84.9-10 (Σεπτ. 2007), 2344–2349. DOI: [10.1016/j.mee.2007.04.076](https://doi.org/10.1016/j.mee.2007.04.076).
- [47] L. Tsetseris και S.T. Pantelides. “Morphology and defect properties of the Ge-GeO<sub>2</sub> interface”. *Appl. Phys. Lett.* 95.26 (2009), 262107. DOI: [10.1063/1.3280385](https://doi.org/10.1063/1.3280385).
- [48] A. Chroneos κ.ά. “Vacancy-mediated dopant diffusion activation enthalpies for germanium”. *Appl. Phys. Lett.* 92.17, 172103 (2008). DOI: [10.1063/1.2918842](https://doi.org/10.1063/1.2918842).
- [49] J. Coutinho κ.ά. “Donor-vacancy complexes in Ge: Cluster and supercell calculations”. *Phys. Rev. B* 73.23 (Ιούν. 2006). DOI: [10.1103/physrevb.73.235213](https://doi.org/10.1103/physrevb.73.235213).
- [50] A.J.R. da Silva κ.ά. “Self-interstitial defect in germanium”. *Phys. Rev. B* 62.15 (Οκτ. 2000), 9903–9906. DOI: [10.1103/physrevb.62.9903](https://doi.org/10.1103/physrevb.62.9903).
- [51] M.D. Moreira, R.H. Miwa και P. Venezuela. “Electronic and structural properties of germanium self-interstitials”. *Phys. Rev. B* 70.11 (Σεπτ. 2004). DOI: [10.1103/physrevb.70.115215](https://doi.org/10.1103/physrevb.70.115215).



# ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ ΚΑΙ ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στα κεφάλαια που προηγήθηκαν είδαμε αναλυτικά όλες τις πτυχές της ανάπτυξης και κατασκευής ηλεκτρικά ενεργών επαφών σε πυρίτιο και γερμάνιο με χρήση της τεχνικής υπερ-ταχείας ανόπτησης βασισμένη στη διάταξη ακτινοβολήσης με ένα laser CO<sub>2</sub> σε μήκος κύματος 10.6 μm σε θερμοκρασίες κάτω από την τήξη των ημιαγωγών.

Όσον αφορά το πυρίτιο πραγματοποιήσαμε την κατασκευή ρηχών επαφών p<sup>+</sup>/n με συνδυασμό ανόπτησης με laser και εμφύτευσης πλάσματος (Plasma Immersion Ion Implantation, PIII) με βάση ιόντα BF<sub>3</sub><sup>+</sup> στα 600 keV και δόση 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>. Με χρήση ακτινοβολήσης με laser πυκνότητας ισχύος περίπου 9 kW cm<sup>-2</sup> και διάρκεια 6 με 10 ms επιτεύχθηκαν ρηχές επαφές με βάθος επαφής μέχρι μόλις 15 nm και διάφορα επίπεδα ενεργοποίησης ανάλογα με την ενέργεια που τελικά αποδώθηκε στο υλικό τα οποία βρίσκονται εξαιρετικά κοντά στο όριο στερεάς διαλυτότητας του βορίου σε κάθε μία από τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες. Αυτό υποδεικνύει τον υψηλό βαθμό ενεργοποίησης που μπορεί να επιτευχθεί πετυχαίνοντας παράλληλα επιφανειακές αντιστάσεις μέχρι και 600 Ω/□ πολύ κοντά στο state of the art για εμφυτεύσεις τέτοιου επιπέδου. Επίσης μέσω μετρήσεων ΧΤΕΜ παρατηρήθηκε πλήρης επανακρυστάλλωση του υλικού υποδεικνύοντας την καταλληλότητα της μεθόδου για τη θεραπεία της φθοράς που εισέρχεται κατά την εμφύτευση χωρίς να χρειαστεί η τήξη του υλικού ούτως ώστε να επανασυσταθεί κρυσταλλικά μέσω επιταξιακής ανάπτυξης (solid phase epitaxial regrowth) που είναι η συνήθης διαδικασία επανακρυστάλλωσης σε συνθήκες τήξης με κόστος, όμως, τη μεγαλύτερη διάχυση. Η επίτευξη επανακρυστάλλωσης χωρίς τήξη και συνεπώς μικρότερη διάχυση είναι άλλωστε και το μεγάλο πλεονέκτημα διατάξεων laser για τη διεργασία της ανόπτησης το οποίο εκμεταλλευόμαστε και εδώ με πολύ καλά αποτελέσματα. Με βάση τα αποτελέσματα μπορούμε να πούμε ότι η ανόπτηση με laser CO<sub>2</sub> έχει εξαιρετικά αποτελέσματα στον σχηματισμό επαφών με ελάχιστη διάχυση κάτι το οποίο απαιτεί απαίτηση για τη νέα γενιά νανοηλεκτρονικών διατάξεων χαρακτηριστικού μεγέθους μικρότερο από 20 nm στα οποία η φθορά που εισάγεται λόγω της ρηχής και έντονης νόθευσης οδηγεί σε μεταβατικά φαινόμενα διάχυσης τύπου TED.

Η διεργασία της ανόπτησης στο πυρίτιο συνοδεύεται από πλήρη TCAD μοντελοποίηση για όλα τα στάδια της διαδικασίας, από την ιοντική εμφύτευση μέχρι την ηλεκτρική ενεργοποίηση. Η σουίτα λογισμικού Sentaurus Process™ της εταιρείας Synopsys® είναι ένα industry standard εργαλείο το οποίο όμως δεν είναι προσαρμοσμένο για χρήση σε ανόπτηση με laser διοξειδίου του άνθρακα. Με κατάλληλες τροποποιήσεις που έγιναν μετά από εκτενή βιβλιογραφική έρευνα καταφέραμε να υλοποιήσουμε μια ρουτίνα προσομοίωσης η οποία λαμβάνει υπόψιν τόσο τα χωρικά και χρονικά χαρακτηριστικά της δέσμης όσο και την εξαιρετικά έντονη εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης πυριτίου και γερμανίου από το επίπεδο νόθευσης. Φυσικά η μη ομογενής μορφή της δέσμης του laser CO<sub>2</sub> επιβάλλει την επίλυση σε δύο διαστάσεις αντί για μία, κάτι το οποίο μπορεί να γίνει με ένα παλμικό laser στο UV όπου ο συντελεστής απορρόφησης είναι ανεξάρτητος της νόθευσης και η θερμική επίδραση πολύ πιο περιορισμένη. Κάνοντας αυτές τις τροποποιήσεις επιτεύχθηκε εξαιρετικά καλή ταύτιση ανάμεσα στο πείραμα και στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Η χρήση της προσομοίωσης μας έδωσε και μια καλή αίσθηση για το επίπεδο ενεργοποίησης αφού οι υπολογιζόμενες επιφανειακές αντιστάσεις που εξάγονται από την καμπύλη ενεργών προσμίξεων βορίου είχαν πολύ καλή ταύτιση με τις επιφανειακές αντιστάσεις που μετρήθηκαν στα δείγματα.

Στην περίπτωση του γερμανίου μελετήθηκε η χρήση της ίδιας διάταξης για τον σχηματισμό επαφών n<sup>+</sup>/p χρησιμοποιώντας ιοντική εμφύτευση φωσφόρου στα 30 keV με δόση 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>. Από όσο γνωρίζουμε δεν υπάρχουν μελέτες για την ανόπτηση γερμανίου σε μήκη κύματος που βρίσκονται στο υπέρυθρο. Γενικά η ανόπτηση με laser έχει μελετηθεί λίγο στο γερμάνιο, αν και εμφανίζονται σταδιακά εργασίες οι οποίες όμως προσανατολίζονται κυρίως στη χρήση παλμικών laser στο υπεριώδες. Λόγω του χαμηλότερου σημείου τήξης του γερμανίου η πυκνότητα ισχύος περιορίστηκε στα περίπου 5 kW cm<sup>-2</sup> ενώ για την αποφυγή κρυσταλλικής ολίσθησης έγινε μια μικρή αφεστίαση της δέσμης. Με βάση τις μετρήσεις SIMS και τα ηλεκτρικά αποτελέσματα που είχαμε καταφέραμε να επιδείξουμε την κατασκευή επαφών με βάθη επαφής γύρω στα 150 nm με τη μετακίνηση του προφίλ του φωσφόρου να περιορίζεται σε μόλις 20 nm στην πιο ακραία περίπτωση. Αυτό το αποτέλεσμα είναι πολύ ενθαρρυντικό αν αναλογιστεί κανείς την εξαιρετικά έντονη τάση διάχυσης των προσμίξεων τύπου n στο γερμάνιο. Επίσης, οι επιφανειακές αντιστάσεις φτάνουν σε επίπεδα της τάξης των 55 με 65 Ω/□ πολύ κοντά στις μέγιστες θεωρητικές τιμές καθώς και σε αντίστοιχες τιμές στη βιβλιογραφία για αυτό το επίπεδο νόθευσης. Επίσης σε όλες τις περιπτώσεις ακτινοβολήσης δεν υπήρχε καμία απώλεια υποστρώματος που είναι ένα πολύ συνηθισμένο φαινόμενο στην ανόπτηση του γερμανίου σε φούρνο ή spike/flash annealing κάτι το οποίο καθι-

στά αναγκαία την αδρανοποίηση της επιφάνειας με κάποιο διηλεκτρικό capping layer. Μέσω της ακτινοβολήσης αποφεύχθηκε αυτό το βήμα, απλοποιώντας τη διαδικασία.

Ακόμα διερευνήθηκε η περίπτωση της συννόθευσης με άζωτο, μια πρόσμιξη η οποία φαίνεται από αρκετές έρευνες στη βιβλιογραφία ότι περιορίζει τη διάχυση του φωσφόρου. Πραγματοποιήθηκαν, λοιπόν, πειράματα με συννόθευση μοριακού αζώτου με ίδιες συνθήκες εμφύτευσης όπως ο φώσφορος. Σύμφωνα με τα αποτελέσματά μας από τις μετρήσεις SIMS όντως η παρουσία του αζώτου περιορίζει θεαματικά τη διάχυση του φωσφόρου η μετακίνηση του προφίλ του οποίου περιορίζεται σε λιγότερο από 10 nm σε σχέση με την as implanted κατανομή. Ωστόσο, η εμφάνιση σχεδόν διπλάσια επιφανειακής αντίστασης σε σχέση με την εμφύτευση μόνο φωσφόρου υποδεικνύει ότι υπάρχει κάποιο έλλειμμα ενεργοποίησης. Χρησιμοποιώντας μια απλή προσέγγιση για την ενεργή κατανομή των προσμίξεων και ένα μοντέλο ευκινησίας για το γερμάνιο εκτιμήσαμε το ποσοστό ενεργοποίησης του φωσφόρου σε μόλις 40% της αντίστοιχης τιμής για τα δείγματα χωρίς συννόθευση. Για να έχουμε μια ξεκάθαρη εικόνα ως προς τον μηχανισμό ο οποίος οδηγεί τελικά στην απενεργοποίηση του φωσφόρου όταν συννοθεύεται με άζωτο καταφύγαμε σε υπολογισμούς density functional theory (DFT). Μέσω αυτών καταλήξαμε ότι ο φώσφορος και το άζωτο σχηματίζουν εξαιρετικά σταθερά σύμπλοκα σε θέση ενδοπλεγματού κενού του γερμανίου τα οποία είναι ηλεκτρικά ανενεργά. Θεωρούμε ότι η μεγάλη σταθερότητα του συμπλόκου N-P είναι ο λόγος ο οποίος οδηγεί, τελικά, τόσο στην ανάσχεση της διάχυσης, όσο και στην απενεργοποίηση του φωσφόρου. Με βάση αυτό το αποτέλεσμα μπορούμε να πούμε ότι είναι μάλλον προτιμότερος ο προσεκτικότερος έλεγχος της ανόπτησης παρά η συννόθευση ως μέσο ελέγχου της διάχυσης, εφόσον τα αποτελέσματα τα οποία είχαμε είναι ενθαρρυντικά προς αυτή την κατεύθυνση και με υψηλότερο επίπεδο ενεργοποίησης.

## ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ & ΘΕΜΑΤΑ ΠΟΥ ΧΡΗΣΟΥΝ ΕΚΤΕΝΕΣΤΕΡΗΣ ΜΕΛΕΤΗΣ

Παρά το γεγονός ότι οι δύο βασικοί άξονες οι οποίοι ακολουθήθηκαν σε αυτή τη διατριβή, δηλαδή η ανόπτηση σε πυρίτιο και γερμάνιο, έδωσαν ικανοποιητικά αποτελέσματα υπάρχουν θέματα τα οποία χρειάζονται εκτενέστερη μελέτη και στα δύο υλικά.

Ξεκινώντας από το πυρίτιο ένα πολύ σημαντικό σημείο που χρειάζεται έρευνα είναι η εφαρμογή της ανόπτησης με laser για τη θερμική επεξεργασία δομών που έχουν ήδη σχηματιστεί στο πυρίτιο, το οποίο άλλωστε είναι και ένα μεγάλο πλεονέκτημα του laser CO<sub>2</sub>. Λόγω του μεγάλου μήκους θερμικής επίδρασης είναι κατάλληλο για την ανόπτηση υλικών με κάποιο pattern στην επιφάνεια, ενώ σε συνδυασμό με πόλωση

μειώνονται σημαντικά τα φαινόμενα συμβολής στην επιφάνεια, που είναι πάντα ένα ζήτημα με τις διατάξεις ανόπτησης που βασίζονται σε laser.

Επίσης, ένα άλλο σημείο που είναι πολύ ενδιαφέρον, αν και δεν συνδέεται άμεσα με source/drain engineering που είναι η κύρια κατεύθυνση αυτής της δουλειάς, είναι η χρήση της διάταξης για ανόπτηση δειγμάτων Silicon on Insulator (SOI) με σκοπό την κατασκευή διατάξεων που βασίζονται σε nanowires τα οποία είναι fully depleted. Το μεγάλο θερμικό budget της δέσμης είναι κατάλληλο για την ανόπτηση τέτοιων δομών. Να τονίσουμε ότι, στα πλαίσια, του διδακτορικού έγινε μια προσπάθεια για την κατασκευή nanowires σε υποστρώματα SOI. Σε αυτό παρατηρήθηκε η εξαιρετικά εντονότερη θέρμανση του δείγματος λόγω της παρουσίας του θαμμένου οξειδίου (Buried Oxide, BOX). Με κατάλληλη ρύθμιση των παραμέτρων του laser κατέστη εφικτή η θέρμανση του υλικού σε υψηλές θερμοκρασίες κάτω από το σημείο τήξης ωστόσο τα nanowires που κατασκευάστηκαν μετά από dry etching του ανοπτημένου υλικού και είχαν πλάτος 48 nm και μήκος 3 μm υπέφεραν από την ύπαρξη παραμένου φορτίου πιθανότατα λόγω ατμοσφαιρικών συνθηκών. Παρατηρήθηκε ότι με θέρμανση σε χαμηλή θερμοκρασία τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά βελτιώνονται, αλλά σύντομα πάλι εμφανίζεται το ίδιο φαινόμενο. Σε αυτή την περίπτωση είναι απαραίτητη η αδρανοποίηση της επιφάνειας με ένα συμπαγές διηλεκτρικό κάτι το οποίο δεν κατέστη δυνατόν ούτε με RF sputtering ούτε με low temperature oxide (LTO). Πιθανότατα η ανάπτυξη στρωμάτων αδρανοποίησης μέσω ατομικής εναπόθεσης (atomic layer deposition, ALD) να βελτιώσει αυτή την κατάσταση.

Αναφερόμενοι στις ατομικές εναποθέσεις μια ιδέα για περαιτέρω ερευνητική δουλειά είναι η χρήση ατομικών στρωμάτων από διηλεκτρικά που βασίζονται σε κάποια πρόσμιξη κατάλληλη για τη νόθευση του ημιαγωγού. Από κει και πέρα με ακτινοβολία σε υψηλή θερμοκρασία μπορεί πιθανόν να επιτευχθεί διάχυση της πρόσμιξης από το οξείδιο προς τον ημιαγωγό με ταυτόχρονη ενεργοποίηση. Το πολύ μεγάλο δυνητικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου δεν βρίσκεται τόσο στην ενεργοποίηση αλλά στην εξαιρετικά καλή και ομοιόμορφη κάλυψη (conformal) τρισδιάστατων δομών τύπου FinFET επί του πυριτίου η ομοιόμορφη νόθευση των οποίων για τον σχηματισμό πηγής και απαγωγού επί ενός υπάρχοντος nanowire είναι μια κατασκευαστική πρόκληση κυρίως τα τελευταία χρόνια όπου τέτοιες γεωμετρίες γίνονται όλο και πιο συνηθισμένες. Αυτός είναι και ο λόγος άλλωστε που οι μοριακές εμφυτεύσεις είναι ένα πεδίο εντατικής έρευνας αυτή την περίοδο. Ο συνδυασμός με κάποια ατομική επιταξία, τύπου ALD, μπορεί να προσφέρει μια εναλλακτική προς αυτή την κατεύθυνση και μάλιστα με χρήση διεργασιών που είναι πολύ συμβατές με την τεχνολογία CMOS.



Όσον αφορά το γερμάνιο, υπάρχει ακόμα μεγαλύτερο περιθώριο για έρευνα κυρίως γιατί το θέμα της ανόπτησης laser σε αυτό είναι σχετικά καινούριο. Η πρώτη ξεκάθαρη κατεύθυνση που πρέπει να ακολουθηθεί είναι ο συνδυασμός της ανόπτησης με laser με πολύ ρηχές εμφυτεύσεις πλάσματος καθώς η εμφύτευση που χρησιμοποιήθηκε δεν είναι αρκετά χαμηλής ενέργειας. Προκαταρκτική εργασία προς αυτή την κατεύθυνση έχει ήδη γίνει με τη χρήση δειγμάτων γερμανίου στα οποία έχει εμφυτευτεί φώσφορος με τη μέθοδο ΡΙΙΙ χρησιμοποιώντας πλάσμα βασισμένα σε ιόντα  $\text{PH}_3^+$  καθώς και σε συνδυασμό  $\text{PH}_3^+$  και μοριακού αζώτου. Πιστεύουμε ότι ο συνδυασμός αυτής της εμφύτευσης με την ανόπτηση laser μπορεί να σχηματίσει επαφές ακόμα και κάτω από 20 nm. Υπάρχει ακόμα ένα κενό για τον δομικό χαρακτηριστικό των εμφυτευμένων δειγμάτων καθώς δεν κατέστη δυνατή η πραγματοποίηση μετρήσεων ΧΤΕΜ στο χρονικό πλαίσιο αυτής της εργασίας. Και αυτό, όμως, είναι μια εργασία που βρίσκεται σε εξέλιξη.

Επίσης υπάρχει ακόμα περιθώριο για τη μοντελοποίηση του διάχυσης μέσω του Sentaurus Process. Σε αυτή την εργασία η διαδικασία σταμάτησε μέχρι την αναπαραγωγή των προφίλ εμφύτευσης. Η εφαρμογή του ίδιου αλγόριθμου με το πυρίτιο για την αναπαραγωγή της διάχυσης στο γερμάνιο δεν ήταν επιτυχής καθώς σε καμία περίπτωση, ακόμα και σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες, δεν εμφανιζόταν διάχυση του φωσφόρου στα αποτελέσματα της προσομοίωσης κάτι το οποίο, προφανώς, δεν αντικατοπτρίζει την πραγματικότητα. Αποδίδουμε αυτό το πρόβλημα στην ελλιπή περιγραφή του συντελεστή διάχυσης του φωσφόρου, μια διαδικασία η οποία δεν είναι καλά βαθμονομημένη για το γερμάνιο στο SProcess ούτως ή άλλως. Θεωρούμε ότι με κατάλληλο calibration των συντελεστών μπορούμε να πετύχουμε καλύτερη απεικόνιση της διάχυσης. Παρά το γεγονός ότι και αυτή η εργασία έχει ξεκινήσει δεν έχουμε ακόμα ικανοποιητικά αποτελέσματα.

Φυσικά, έχει αρκετό ενδιαφέρον και η χρήση μιας αντίθετης πρόσμιξης, τύπου p, όπως για παράδειγμα το βόριο ή το γάλλιο. Οι πρόσμιξεις τύπου p, και κυρίως το βόριο, διαχέονται πολύ πιο αργά στο γερμάνιο ενώ παράλληλα, ειδικά στην περίπτωση του βορίου ακόμα και σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες είναι πολύ μικρή η μετατόπιση του προφίλ της κατανομής. Παράλληλα το βόριο πάσχει από χαμηλά επίπεδα μέγιστης στερεάς διαλυτότητας στο γερμάνιο. Θα έχει ενδιαφέρον να δούμε αν μπορούμε να ξεπεράσουμε αυτό το κατώφλι διαλυτότητας με ισχυρούς σύντομους παλμούς laser. Το γάλλιο, από την άλλη, έχει πιο μεγάλα επίπεδα ενεργοποίησης και διαλυτότητας αλλά πάσχει από πιο εκτεταμένη φθορά του υποστρώματος. Είναι ένα ερώτημα αν μπορούμε να επανακρυσταλλώσουμε το κομμάτι του υλικού που αμορφοποιείται με την ελάχιστη δυνατή διάχυση και σε αυτή την περίπτωση.





Δεν πρέπει να παραλείψουμε να εξάρουμε τη συμβολή του λογισμικού ανοιχτού κώδικα στην παραγωγή αυτής της διατριβής. Για την τυπογραφική σύνθεση του κειμένου χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα στοιχειοθεσίας  $\text{\TeX}$  ενώ για τη δημιουργία γραφημάτων και επεξεργασία αποτελεσμάτων αξιοποιήθηκαν, μεταξύ άλλων, το πρόγραμμα `gnuplot` και η γλώσσα προγραμματισμού `python`.

Αθήνα, Οκτώβριος 2015

Τελευταία ενημέρωση: 2015-10-26 15:20:19

Τρέχουσα αναθεώρηση: 1.17

DBB1D23B9F5937FFF14595F2932D5AFF594A7899