

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ &
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

**ΑΝΟΠΤΗΣΗ
ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΜΕ LASER
ΓΙΑ ΤΟ ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟ
ΡΗΧΩΝ ΕΠΑΦΩΝ p-n
ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ**

ΑΝΤΩΝΙΟΣ Π. ΦΛΩΡΑΚΗΣ

ΑΝΤΩΝΙΟΣ Π. ΦΛΩΡΑΚΗΣ

Πτυχιούχος Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ

Copyright © Αντώνιος Π. Φλωράκης, 2011

Με επιφύλαξη παντός νόμιμου δικαιώματος. All right reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ' ολοκλήρου ή τμήματος της για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

| |
|--|
| <p>Η έγκριση της παρούσας διδακτορικής διατριβής από την επταμελή εξεταστική επιτροπή και τη Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου δεν προϋποθέτει και την αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα σύμφωνα με τις διατάξεις του Ν.5343/1932, άρθρο 202, παράγραφος 2</p> |
|--|

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διδακτορική διατριβή, έχει ως στόχο, την επίδειξη δυο διαφορετικών στρατηγικών ανόπτησης πυριτίου με χρήση laser, για τον σχηματισμό ρηχών επαφών τύπου pn, και υλοποιήθηκε στα πλαίσια μιας ευρύτερης προσπάθειας για την κατασκευή πρότυπων διατάξεων CMOS, ικανών να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις που έχουν τεθεί από τον οδικό χάρη ITRS, για τους τεχνολογικούς κόμβους από τα 32 nm και πέρα. Αν και οι δυο αυτές στρατηγικές διαφέρουν τόσο στο μήκος κύματος της ακτινοβολίας, όσο και στη χρονική διάρκεια, εν τούτοις και οι δυο έχουν ένα κοινό χαρακτηριστικό, το οποίο επιβάλλεται από τις προαναφερθείσες απαιτήσεις. Και στις δυο, η ανόπτηση λαμβάνει χώρα σε καθεστώς μη τήξης, έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθούν τα φαινόμενα διάχυσης των προσμίξεων, και να διατηρηθεί η αρχική κατανομή των προσμίξεων. Με τον τρόπο αυτό, και σε συνδυασμό με καινοτόμες τεχνικές εμφύτευσης των προσμίξεων με χρήση πλάσματος (PLAsma Doping), είναι δυνατός ο περιορισμός του προφίλ νόθευσης σε πολύ μικρά βάθη, και τέτοια ώστε να είναι ικανά να διατηρήσουν τις συμμετρίες των εσωτερικών ηλεκτρικών πεδίων, καθώς οι πλευρικές διαστάσεις μειώνονται συνεχώς, με την έλευση κάθε καινούργιου τεχνολογικού κόμβου.

Όπως προαναφέρθηκε, χρησιμοποιήσαμε δυο διαφορετικά είδη laser, ένα KrF excimer ($\lambda=248$ nm, FWHM=20 ns), και ένα laser διοξειδίου του άνθρακα ($\lambda=10.6\mu\text{m}$ και διάρκεια παλμού της τάξης των μερικών milliseconds και χρήση προθέρμανσης στους 600-650C). Λόγω των διαφορετικών μηκών κύματος, αλλά και των χαρακτηριστικών χρόνων ανόπτησης, οι δυο προσεγγίσεις διαφέρουν ριζικά, ως προς το θερμικό αποτέλεσμα που επιφέρουν στον όγκο του υλικού, με το πρώτο να οδηγεί σε πιο επιφανειακή θέρμανση, ενώ το δεύτερο προσομοιάζει στο αποτέλεσμα την λειτουργία του flash annealing, το οποίο είναι το πλέον διαδεδομένο εργαλείο θερμικής επεξεργασίας των ημιαγωγικών τρανζίστορ αυτή τη στιγμή.

Με στόχο την μελέτη της επίδρασης του κάθε ενός από τα δυο laser, στα δοκίμια, της ακτινοβόλησης προηγήθηκε, αλλά και ακολούθησε εκτεταμένος ηλεκτρικός και μορφολογικός χαρακτηρισμός (που περιλαμβάνει μετρήσεις SIMS, TEM και AFM), οι οποίες κατέδειξαν τη δυνατότητα και των δυο τεχνικών να οδηγήσουν σε υψηλά ποσοστά ηλεκτρικής ενεργοποίησης των προσμίξεων με ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση της διάχυσης του Βορίου (μέγιστη παρατηρούμενη διάχυση=2.5 nm). Κάθε βήμα της πειραματικής προσπάθειας συνοδεύτηκε από την προσομοίωση των διαδικασιών που ένεχονται σε αυτό με την βοήθεια του εξειδικευμένου λογισμικού TCAD, Sentaurus Process της Synopsys. Έτσι στάθηκε δυνατή η πρόβλεψη της συμπεριφοράς της εμφύτευσης με πλάσμα, αλλά και της αλληλεπίδρασης κάθε ενός από τα δυο είδη laser με το πυρίτιο. Η μελέτη της αλληλεπίδρασης χωρίστηκε σε δυο μέρη: αυτό που αφορά την πρόβλεψη της εξέλιξης της θερμοκρασιακής κατανομής στον όγκο του υλικού, και σε αυτή της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Ανάλογα με την φύση του πρόβληματος χρησιμοποιήθηκε είτε η συνεχής (αριθμητική) προσέγγιση, είτε KMC αλγόριθμοι. Τα αποτελέσματα από την μοντελοποίηση κάθε βήματος, παρουσιάζουν σημαντικό βαθμό συμφωνίας με τα πειραματικά δεδομένα, καθιστώντας επιτυχημένη την προσπάθεια αυτή.

ABSTRACT

The main goal of this thesis, is the implementation of two emerging silicon annealing strategies for the formation of ultra shallow p-type junctions, able to fulfill the requirements for the upcoming CMOS generations, as they are imposed by the latest ITRS roadmaps. These annealing strategies are combined with state-of-art Plasma Doping implantation techniques. Careful junction engineering is necessary, in order to determine the optimum annealing conditions, so as to achieve high level of dopants electrical activation, while retaining or even eliminating the occurrence of diffusion phenomena, that could result in wide post - annealing dopant distributions.

Two different types of laser, have been used, an excimer Krf laser ($\lambda=248$ nm, FWHM=20 ns), and a sealed carbon dioxide laser in the millisecond regime ($\lambda=10.6$ μm). Even though, the different wavelengths and annealing durations, result in completely different annealing effect on the silicon bulk, both approaches have been proven successful, a fact that is testified by the extensive morphological and electrical characterization of every sample, performed prior and after the irradiations . Characterization includes SIMS, TEM, AFM and four point probe sheet resistance measurements via the Van der Pauw method.

Especially for the CO₂ laser part, the experimental work includes the design and fabrication of an integrated laser irradiation setup, able to preheat the samples at the range of 600-650°C and to conduct real time temperature measurements, using an IR pyrometer, a process that is complicated by the very nature of the laser – Si interaction phenomena.

Experimental work was supported by simulation of every step of the process, i.e. plasma implantation and laser annealing. The computational effort focused both on thermal and diffusion kinetics prediction, and resulted in significant agreement with experimental data regarding the interaction of Silicon and CO₂ / Excimer lasers, using a commercially available software tool. Due to the complex dependency of the absorption coefficient from Boron concentration profile, in the CO₂ case, the later should be taken into account in relevant calculations that require simultaneous solution of both thermal and dopant diffusion equations. Moreover, description of this transient process is getting more challenging as the majority of the parameters included in the heat equation, such as thermal conductivity and specific heat capacity are strongly coupled with temperature. By using surface temperature data obtained by pyrometry measurements, it was possible to calibrate and to verify the validity of the results.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η εκπόνηση ενός Διδακτορικού είναι μια διαδικασία η οποία δεν είναι ατομική υπόθεση, αλλά προϊόν συνεργασίας σε πολλά επίπεδα. Όλη η προσωπική προσπάθεια και ο μόχθος εκ μέρους του Υποψηφίου Διδάκτορα, δεν θα οδηγούσε πουθενά και δεν θα είχε κανένα αντίκρουσμα, αν δεν υπήρχε αυτή η διαδραστικότητα με πολλά διαφορετικά άτομα, όχι μόνο σε επιστημονικό και τεχνικό επίπεδο, αλλά και πάνω από αυτό, σε επίπεδο έμπνευσης και συμπαράστασης, ίσως και ανόχης. Και ίσως, πέραν από τον Τίτλο ή τις δημοσιεύσεις που προέκυψαν αυτό το διάστημα, αυτό που θα κρατήσω σίγουρα στο μέλλον είναι κάποιες συγκεκριμένες στιγμές που μοιράστηκα μαζί τους, εντός και εκτός του ΕΜΠ.

Ξεκινώντας ονομάστικά τις ευχαριστίες, δεν θα μπορούσα από το να μην ξεκινήσω από τον Επιβλέποντα μου, Καθηγητή ΕΜΠ, και Διευθυντή του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Δρ. Δημήτριο Τσουκαλά, καταρχάς για την καθοδήγηση και την βοήθεια που μου προσέφερε, όχι μόνο κατά την εκπόνηση του Διδακτορικού αλλά και κατά την διάρκεια της προπτυχιακής και διπλωματικής μου εργασίας. Επιπλέον όμως, θα ήθελα να σταθώ και στην στήριξη που μου προσέφερε, καθώς και την υπομονή που επέδειξε όταν τα πράγματα δεν πηγαίνουν καλά.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω τα παρακάτω άτομα, τα οποία συνδέθηκαν άμεσα με την εκπόνηση της παρούσας διατριβής:

Την Επιμ. Καθηγήτρια ΕΜΠ, Δρ. Ιωάννα Ζεργιώτη η οποία όχι μόνο προσέφερε τις εργαστηριακές της υποδομές για την διεξαγωγή ορισμένων ακτινοβολήσεων, αλλά και προσέφερε την εμπειρία της στο στήσιμο διατάξεων laser, με χρήσιμες υποδείξεις κατά την διάρκεια της κατασκευής της διάταξης CO₂ laser.

Τον Διδάκτορα ΕΜΠ και φίλο Emanuele Verrelli, καθώς στάθηκε ο ακρογωνιαίος λίθος στον οποίο στηρίχθηκε το μεγαλύτερο μέρος της πειραματικής εργασίας στα πλαίσια αυτού του διδακτορικού. Ο Emanuele προσέφερε απλόχερα τον χρόνο και την εμπειρία του σε πολλές πτυχές της προσπάθειας, και στάθηκε τρόπον τινά ως «πειραματικός μέντορας» μου.

Τον Καθηγητή Δρ. Κώστα Γρηγορόπουλο, Group leader στο Laser Thermal Lab, University of California, Berkeley με τον οποίο συνεργαστήκαμε στενά στο κομμάτι της ακτινοβολήσης με χρήση Excimer laser. Ο Δρ. Γρηγορόπουλος όχι μόνο μας τίμησε με την

συνεργασία του για την πραγματοποίηση των ακτινοβολήσεων, αλλά ταυτόχρονα στις σύντομες, αλλά ιδιαίτερα ουσιαστικές συναντήσεις που είχαμε, παρείχε πολύτιμη καθοδήγηση στο θεωρητικό κομμάτι της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με την ύλη. Παράλληλα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Dr. Nirun Misra (Υ.Δ. εκείνη την εποχή στο Laser Thermal Lab) για την πραγματοποίηση των ακτινοβολήσεων με χρήση Excimer laser.

Τον Αναπ. Καθηγητή ΕΜΠ, Δρ. Ιωάννη Ράπτη ο οποίος, στάθηκε ανεξάντλητη πηγή γνώσεων και πληροφοριών σε μια σειρά από ζητήματα, και ήταν πάντοτε πρόθυμος να βοηθήσει όποτε του το ζήτησα.

Την Αναστασία Ανδρεαδάκη, η οποία στο σύντομο πέρασμα της από το εργαστήριο συνέβαλε καθοριστικά στην πραγματοποίηση της κατασκευής της διάταξης ακτινοβολήσης, αλλά και με τίμησε με τη Φιλία της.

Τους (τότε) προπτυχιακούς και μεταπτυχιακούς φοιτητές (με χρονολογική σειρά) κ.κ. Γιάννη Ιωάννου, Νίκο Χατζηπαναγιώτη, Γιώργο Τζώρτζη και Θεόδωρο Λασπά, με τους οποίους συνεργάστηκα στενά κατά την εκπόνηση των διπλωματικών τους εργασιών. Καθώς οι εργασίες αυτές ήταν σε συνέργια με την δικιά μου προσπάθεια, έδωσαν ουσιαστική ώθηση στην πρόοδο της δικής μου δουλειάς. Θεωρώ δε, ότι πολλά από αυτά που γίνανε δεν θα είχαν γίνει πραγματικότητα χωρίς της δική τους συμβολή. Ακόμα σημαντικότερο θεωρώ όμως, ότι οι συνεργασίες αυτές, στάθηκαν αφορμή για την ανάπτυξη φιλιών, οι οποίες αποδείχτηκε ότι κρατάνε στο πέρασμα του χρόνου.

Τον συνάδερφο και φίλο Αθανάσιο Παπαδημητρίου, η συνδρομή του οποίου, ήταν πραγματικά καταλυτική όσον αφορά το κομμάτι της προσομοίωσης. Όχι μόνο μου υπέδειξε την ύπαρξη του Λογισμικού Sentauros Process (χάρης στο οποίο κατέστησαν δυνατές οι προσομοιώσεις) αλλά και αφιέρωσε ανιδιωτελώς ατελείωτες ώρες στην εκπαίδευση μου και στο στήσιμο των αρχικών αλγορίθμων. Ειλικρινά, θεωρώ εκείνη την συνάντηση μας εκείνη την Κυριακή του Ιούλη του 2008 στην Πρωτανεία ως σημείο καμπής στην πορεία του Διδακτορικού.

Τον Henk Katellarij, Process Architect στην Philips Research, ο οποίος με καθοδήγησε ουσιαστικά στην σχεδίαση και εγκατάσταση της ολοκληρωμένης διάταξης ακτινοβολήσης CO₂ laser. Η συμβολή του, δεν περιορίστηκε μόνο στα τυπικά καθήκοντα που είχε αναλάβει κατά την παραμονή του στην Ελλάδα, αλλά και συνεχίστηκε για μεγάλο χρονικό διάστημα. Η συνεισφορά του έγκειται επίσης και στην τεχνογνωσία που μου μετέφερε (στο κομμάτι των laser), η οποία στάθηκε καθοριστική για την συνέχεια.

Τον Ερευνητή του Fondazione Bruno Kessler (FBK), κ. Damiano Giubertoni, με τον οποίο πραγματοποιήσαμε μεγάλο αριθμό μετρήσεων SIMS, κατά την παραμονή μου στο Trento της Ιταλίας. Ο επαγγελματισμός και η τεχνογνωσία του, τον κατέστησαν ένα πολύτιμο συνεργάτη. Ταυτόχρονα θα ήθελα να σταθώ στους Dr. M. Bersani και G. Perroni για την συμβολή τους, στο να γίνει δυνατή η επίσκεψή μου για μια εβδομάδα στο FBK στα πλαίσια του προγράμματος ANNA.

Τον Ερευνητή του Ινστιτούτου Υλικών, Δρ. Κωνσταντίνο Γιαννακόπουλο για την πραγματοποίηση των μετρήσεων TEM, καθώς και την βοήθεια που μου παρείχε για την προετοιμασία των δειγμάτων.

Τον Dr. A. Hallimaui της ST Microelectronics για την παροχή των state of art δισκίων πυριτίου εμφυτευμένων με Βόριο μέσω πλάσματος.

Τον Διδάκτορα ΕΜΠ και φίλο μου, Tang Jun, ο οποίος κατά το διάστημα που εργάστηκε μαζί μας, ήταν πάντοτε πρόθυμος να βοηθήσει σε οτιδήποτε του είχε ζητηθεί.

Την Κα. Μαρία Σταματάκη για την πραγματοποίηση των μετρήσεων AFM, τον G. Bennassayag για την διεξαγωγή των προκαρτικών μετρήσεων SIMS, και τον Δρ. Π. Δημητράκη για τις πάντοτε επίκαιρες και χρήσιμες συμβουλές του για τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό.

Τον Υ.Δ. Χρήστο Μπουτόπουλο για την βοήθεια του στις περιφερειακές ακτινοβολήσεις με το Nd:YAG αλλά και τις χρήσιμες συζητήσεις που είχαμε κατά καιρούς σχετικά με τις ανοπτήσεις.

Τους κ.κ. Ραζακιά και Κωνσταντίνο οι οποίοι βοήθησαν σημαντικά μέσω των διαφόρων κατασκευών που έκαναν.

Θα ήθελα ειδικά να σταθώ στον B. Klinkeberg, ο οποίος με την εμπειρία του και το μεράκι που τον διακρίνει βοήθησε πολλές φορές σε θέματα που σχετίζονται με τα laser.

Όλα τα μέλη του εργαστηρίου (παλαιότερα και νέα) που συνυπήρξαμε και συνεργάστηκαμε όλο αυτό το διάστημα. Με την ελπίδα ότι δεν θα ξεχάσω κανένα, αναφέρω τον Υ.Δ. Ε. Σιοτάδη, τον Δρ. Πάνο Φωτόπουλο, τον Ι. Καλύρη, τη Δρα Σταυρούλα Κολιοπούλου, τον Γ. Πετράκη, τον Δ. Τσιαλούκη, τον Π. Τσουρούτα και τον Δ. Μουσαδάκο.

Τους συναδέρφους και φίλους Δρ. Πάρη Παρισιάδη και Αναστάσιο Αντωνάκο, με τους οποίους πέρασα ένα μεγάλο μέρος της εκπόνησης του διδακτορικού.

Περνώντας στο δεύτερο κομμάτι των ευχαριστιών θα ήθελα να σταθώ στους ανθρώπους που δεν συνδέθηκαν άμεσα με την εκπόνηση αυτή, καθέ αυτή, αλλά στάθηκαν εξίσου σημαντικοί αρωγοί της. Αναμφίβολα, ένα μεγάλο ευχαριστώ αλλά και ευγνωμοσύνη, πρέπει στους γονείς μου Τάκη και Στέλλα, οι οποίοι με στήριξαν αμέριστα και σε κάθε επίπεδο κατά την πραγματοποίηση αυτής της προσπάθειας. Σίγουρα ένα μεγάλο κομμάτι από αυτή την προσπάθεια αφιερώνεται σε αυτούς.

Ένα κομμάτι όμως, αφιερώνεται και στην Σύντροφο μου, Έφη για όλα όσο έκανε με τον δικό της τρόπο για μένα, τα τελευταία τρία χρόνια. Νομίζω πως δεν θα έγραφα καν, αυτές τις γραμμές, αν δεν ήταν αυτή.

Τέλος ένα ειδικό ευχαριστώ στον Θείο μου Dr. Χρήστο Καπετανάκο, ο οποίος αποτελεί πηγή έμπνευσης και πρότυπο για το πως πρέπει να είναι ένας Φυσικός, τόσο ως Επιστήμονας όσο και ως Άνθρωπος. Οι μεταξύ μας συζητήσεις είναι σαν το καλό κρασί: με το πέρασμα του χρόνου τείνουν να γίνονται πιο γοητευτικές και αλλά μεστές νοημάτων...

Πίνακας Περιεχομένων

| | |
|---|-----|
| Περίληψη | i |
| Abstract | ii |
| Ευχαριστίες | iii |
| Περιεχόμενα | vii |
| | |
| Πρόλογος | 1 |
| | |
| Κεφάλαιο 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ- ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ – ΒΑΣΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΠΡΟΚΛΗΣΕΙΣ ΤΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ MOSFET | 9 |
| 1.1 Εισαγωγή | 9 |
| 1.2 Το τρανζίστορ τύπου MOSFET | 11 |
| 1.3 Σμίκρυνση (Scaling) διατάξεων MOSFET | 12 |
| 1.4 Τεχνολογικές προκλήσεις σχετιζόμενες με την σμίκρυνση του MOSFET | 13 |
| 1.5 Κατασκευή ρηχών επαφών | 18 |
| 1.6 Εμφύτευση προσμίξεων – Ιστορική επισκόπηση | 19 |
| 1.7 Θερμική ανόπτηση – Ιστορική επισκόπηση | 22 |
| 1.8 Τεχνολογίες που εφαρμόζονται στα σύγχρονα MOSFET | 26 |
| 1.9 Το παρόν και το (προσεχές) μέλλον των ημιαγωγικών δομών | 28 |
| 1.10 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 29 |
| | |
| Κεφάλαιο 2 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ ΡΗΧΩΝ ΕΠΑΦΩΝ | 34 |
| 2.1 Εισαγωγικά | 34 |
| 2.2 Φασματοσκοπία Μάζας Δευτερογενών Ιόντων (SIMS) | 35 |
| 2.3 Μέτρηση της επιφανειακής αντίστασης | 39 |
| 2.4 Απεικόνιση με χρήση Ηλεκτρονιακής Μικροσκοπίας Διέλευσης (TEM) | 41 |
| 2.5 Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (AFM) | 42 |
| 2.6 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 43 |
| | |
| Κεφάλαιο 3 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ SYNOPSIS SENTAURUS PROCESS | 44 |
| 3.1 Εισαγωγή | 44 |
| 3.2 Το λογισμικό Synopsys Sentaurus Process | 45 |
| 3.3 Διάγραμμα Ροής και βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης | 46 |
| 3.4 Αριθμητική προσέγγιση | 48 |
| 3.4.1 Γενικά περί αριθμητικής προσέγγισης | 48 |
| 3.4.2 Εμφύτευση | 49 |
| 3.4.3 Μελέτη της ανόπτησης με laser | 50 |
| 3.5 Προσομοίωση με χρήση Kinetic Monte Carlo | 51 |
| 3.5.1 Γενικά περί της προσέγγισης KMC | 51 |
| 3.5.2 Εμφύτευση | 56 |
| 3.5.3 Μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης | 57 |
| 3.6 Υβριδική προσομοίωση | 58 |

| | |
|---|-----|
| 3.7 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 58 |
| Κεφάλαιο 4 ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ LASER ΜΕ ΤΗΝ ΥΛΗ | 60 |
| 4.1 Εισαγωγή | 60 |
| 4.2 Μηχανισμοί διέγερσης και μετατροπής σε θερμότητα | 60 |
| 4.3 Μακροσκοπική θεώρηση και Εξίσωση της Θερμότητας | 64 |
| 4.4 Περιγραφή του φαινομένου ακτινοβόλησης για κάθε τύπο laser | 68 |
| 4.4.1 Excimer KrF laser | 68 |
| 4.4.2 CO ₂ laser | 68 |
| 4.4.3 Αντιπαράβολή των σημαντικότερων χαρακτηριστικών του κάθε τύπου | 69 |
| 4.5 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 70 |
| Κεφάλαιο 5 ΚΙΝΗΤΙΚΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΩΝ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ ΣΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΣΩ ΤΟΥ SENTAURUS PROCESS | 71 |
| 5.1 Εισαγωγή | 71 |
| 5.2 Μακροσκοπική μελέτη της διάχυσης | 72 |
| 5.3 Μελέτη της διάχυσης σε μικροσκοπικό επίπεδο | 74 |
| 5.3.1 Είδη σημειακών ατελειών στους ημιαγωγούς | 74 |
| 5.3.2 Βασικές θεωρίες για την διάχυση σε μικροσκοπικό επίπεδο | 76 |
| 5.3.3 Εξάρτηση της διάχυσης από οπές και ενδοπλεγματικές ατέλειες | 77 |
| 5.3.4 Αλληλεπιδράσεις προσμίξεων-ατελειών | 78 |
| 5.3.5 Σύνοψη των αποτελεσμάτων για διάχυση σε καθεστώς χημικής ισορροπίας | 79 |
| 5.3.6 Προηγμένη μοντελοποίηση της διάχυσης – Πλήρως κινητική περιγραφή της αλληλεπίδρασης πρόσμικξης – ατέλειας με τη χρήση του Charged React Model | 80 |
| 5.4 Περιγραφή της διάχυσης με χρήση Kinetic Monte Carlo | 84 |
| 5.5 Απενεργοποίηση | 91 |
| 5.6 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 93 |
| Κεφάλαιο 6 ΕΜΦΥΤΕΥΣΗ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ PLASMA DOPING | 96 |
| 6.1 Προβλήματα που σχετίζονται με την συμβατική ιοντική εμφύτευση | 96 |
| 6.2 Εμφύτευση προσμίξεων με τη μέθοδο της PLASMA Doping (PLAD) | 97 |
| 6.3 Χαρακτηρισμός των δειγμάτων | 101 |
| 6.4 Προσομοίωση με της εμφύτευσης Βορίου με χρήση της μεθόδου PLAD | 104 |
| 6.5 Αποτελέσματα της προσομοίωσης εμφύτευσης με βάση την συνεχή προσέγγιση | 106 |
| 6.6 Αποτελέσματα της προσομοίωσης εμφύτευσης με βάση την μέθοδο Kinetic Monte Carlo | 108 |
| 6.7 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 114 |
| Κεφάλαιο 7 ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΜΕ ΧΡΗΣΗ CO₂ LASER ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΜΕΝΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ | 116 |
| 7.1 Ανόπτηση πυριτίου με χρήση CO ₂ laser | 116 |
| 7.2 Περιγραφή λειτουργίας των laser διοξειδίου του άνθρακα | 117 |
| 7.3 Περιγραφή της κατασκευής της διάταξης ακτινοβόλησης CO ₂ | 118 |

| | |
|--|-----|
| 7.4 Βαθμόνομηση της διάταξης ακτινοβόλησης CO ₂ | 131 |
| 7.5 Συνθήκες ακτινοβόλησης | 132 |
| 7.6 Χαρακτηρισμός των κατανομών συγκέντρωσης μέσω μετρήσεων SIMS | 135 |
| 7.7 Ηλεκτρικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων μέσω μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης | 139 |
| 7.8 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 143 |
| Κεφάλαιο 8 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ CO₂ LASER ΜΕ ΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ | 145 |
| 8.1 Εισαγωγή | 145 |
| 8.2 Το πρόβλημα της ανόπτησης πυριτίου με χρήση CO ₂ laser | 145 |
| 8.3 Διαδικασία επίλυσης των κυριότερων ζητημάτων που άπτονται της προσομοίωσης | 146 |
| 8.3.1 Γενικά | 146 |
| 8.3.2 Συντελεστής απορρόφησης α | 147 |
| 8.3.3 Μορφή παλμού του CO ₂ laser | 153 |
| 8.3.4 Λοιπές υπολογιστικές παράμετροι προσομοίωσης | 154 |
| 8.4 Αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις σε μια διάσταση | 157 |
| 8.5 Προσομοίωση ανόπτησης σε δυο διαστάσεις | 159 |
| 8.5.1 Γενικά | 159 |
| 8.5.2 Διαμόρφωση δυσδιάστατης προσομοίωσης | 160 |
| 8.5.3 Διαμόρφωση Γιαουσιανού χωρικά παλμού | 162 |
| 8.5.4 Διερεύνηση της επίδρασης υπολογιστικών παραγόντων στις δυο διαστάσεις | 164 |
| 8.5.5 Παρουσίαση αποτελεσμάτων σε δυο διαστάσεις | 166 |
| 8.5.6 Σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με πειραματικά δεδομένα | 174 |
| 8.6 Σύγκριση μονοδιάστατων και δισδιάστατων υπολογισμών | 175 |
| 8.7 Προσομοίωση της κινητικής της διαχυσης και της ενεργοποίησης των προσμιξεων βορίου κατά την ανόπτηση με CO ₂ laser - Εισαγωγή | 176 |
| 8.8 Προσομοίωση με χρήση της συνεχούς προσέγγισης | 177 |
| 8.8.1 Συνοπτική παρουσίαση της μεθοδολογίας | 177 |
| 8.8.2 Παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τους υπολογισμούς σε μια διάσταση | 178 |
| 8.8.3 Παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τους υπολογισμούς σε μια διάσταση | 184 |
| 8.9 Προσπάθεια προσομοίωσης με χρήση τεχνικών Kinetic Monte Carlo | 192 |
| 8.9.1 Εισαγωγή | 192 |
| 8.9.2 Σύνοψη των βασικότερων προσπαθειών | 194 |
| 8.9.3 Σύγκριση με αποτελέσματα από πειραματικές μετρήσεις και αναλυτικές προσομοιώσεις | 197 |
| 8.10 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 199 |
| Κεφάλαιο 9 ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΜΕ ΧΡΗΣΗ KrF EXCIMER LASER | 204 |
| 9.1 Ανόπτηση πυριτίου με χρήση KrF Excimer laser | 204 |
| 9.2 Βασικά χαρακτηριστικά και αρχές λειτουργίας | 205 |
| 9.3 Διάταξη ακτινοβόλησης | 206 |

| | |
|---|-----|
| 9.4 Κατάλογος συνθηκών ακτινοβολήσεων | 208 |
| 9.5 Χαρακτηρισμός των δειγμάτων - Εισαγωγή | 209 |
| 9.6 Προσδιορισμός της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων Βορίου μέσω SIMS | 209 |
| 9.7 Χαρακτηρισμός των ηλεκτρικών ιδιοτήτων μέσω μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης | 212 |
| 9.8 Μορφολογικός χαρακτηρισμός με Μικροσκοπία Ηλεκτρονικής Διέλευσης (TEM) | 214 |
| 9.9 Μορφολογικός χαρακτηρισμός με Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (AFM) | 215 |
| 9.10 Μελέτη των φαινομένων απενεργοποίησης των προσμίξεων | 217 |
| 9.11 Αντιπαραβολή με δείγματα τα οποία έχουν ακτινοβοληθεί σε καθεστώς τήξης | 218 |
| 9.12 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 219 |
| Κεφάλαιο 10 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ EXCIMER LASER ΜΕ ΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ | 221 |
| 10.1 Εισαγωγή | 221 |
| 10.2 Γενική περιγραφή της ανόπτησης με laser με τη χρήση του Sentaurus Process | 222 |
| 10.3 Περιγραφή της διαδικασίας προσομοίωσης της ακτινοβολήσης με Excimer KrF laser | 226 |
| 10.4 Αποτελέσματα της προσομοίωσης | 229 |
| 10.5 Προσομοίωση της κινητικής της διαχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων βορίου κατά την ανοπτηση με Excimer KrF Laser - Εισαγωγή | 235 |
| 10.6 Προσομοίωση με χρήση αναλυτικών - συνεχών μεθόδων | 236 |
| 10.7 Προσομοίωση με χρήση της προσέγγισης Kinetic Monte Carlo | 238 |
| 10.7.1 Επίδραση της ακτινοβολήσης με ένα παλμό | 238 |
| 10.7.2 Επίδραση της ακτινοβολήσης με ακολουθία παλμών | 241 |
| 10.8 Ανακεφαλαίωση – Βιβλιογραφικές αναφορές κεφαλαίου | 248 |
| ΕΠΙΛΟΓΟΣ | 251 |
| 1. Ανακεφαλαίωση και συμβολή στην έρευνα | 251 |
| 2. Προτάσεις για βελτιώσεις των υπαρχόντων τεχνικών | 257 |
| 3. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα | 258 |
| Σύντομο βιογραφικό σημείωμα και κατάλογος δημοσιεύσεων και παρουσιάσεων | 261 |

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Όταν στα τέλη της δεκαετίας του 40 οι ερευνητές των Bell Laboratories, κατασκεύασαν το πρώτο τρανζίστορ, σίγουρα δεν μπορούσαν να σκεφτούν τις κοσμογονικές αλλαγές που θα επέφερε το δημιούργημα τους στην καθημερινότητα μας, αλλά και στην εν γένει εξέλιξη του πολιτισμού μας. Πράγματι, οι τεχνολογίες που βασίζονται σε ολοκληρωμένα κυκλώματα, έχουν διεισδύσει σε κάθε τομέα της ανθρώπινης δραστηριότητας, είτε αυτή έχει να κάνει με την εργασία, την επικοινωνία, ή την διασκέδαση. Ένας από τους καθοριστικούς παράγοντες που συνέβαλαν στην εδραίωση της τεχνολογίας αυτής, ήταν η δυνατότητα της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής να προσφέρει ολοένα και πιο εξελιγμένους επεξεργαστές, οι οποίοι να είναι ικανοί να καλύψουν τις απαιτήσεις για αυξανόμενη υπολογιστική ισχύ. Τα τελευταία χρόνια μάλιστα, η πρόοδος της μικροηλεκτρονικής έχει φτάσει σε τέτοια επίπεδα, ώστε οι δυνατότητες των ολοκληρωμένων να υπερκαλύπτουν τις εκάστοτε απαιτήσεις, με αποτέλεσμα να δίνεται μια περεταίρω ώθηση για την επιτάχυνση του τεχνολογικού μας πολιτισμού.

Η ραγδαία εξέλιξη της μικροηλεκτρονικής δεν είναι ένα τυχαίο γεγονός, αλλά αποτελεί απόρροια της αδιάκοπης προσπάθειας ενός αιμαίου ανθρώπινου δυναμικού, το οποίο επί δεκαετίες δεν αρκείται στην συντήρηση, αλλά στοχεύει στην αδιάκοπη βελτίωση κάθε επιμέρους τεχνολογίας που σχετίζεται με την σχεδίαση και κατασκευή των επεξεργαστών. Κινητήριος δύναμη αλλά και οδηγός, αυτής της προσπάθειας αποτελούν οι οδικοί τεχνολογικοί χάρτες, οι οποίοι καταρτίζονται από κοινού από σημαίνοντα στελέχη της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής. Οι χάρτες αυτοί δίνουν τις κατευθύνσεις αλλά και τις απαιτήσεις που πρέπει να πληρούν οι μελλοντικές τεχνολογικές γενιές, έτσι ώστε να είναι σε θέση να ανταποκριθούν στις μελλοντικές ανάγκες. Η κυριότερη λογική που κρύβεται πίσω από τον σχεδιασμό είναι η κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, τα οποία να περιέχουν όσο το δυνατόν μεγαλύτερο αριθμό τρανζίστορ, με τις ελάχιστες δυνατές διαστάσεις, απαιτήσεις σε κατανάλωση και φυσικά, κόστος. Άμεση και λογική απόρροια αυτής της ανάγκης, αποτελεί η επιτακτική μείωση των πλευρικών διαστάσεων των τρανζίστορ, μια τάση που ακολουθείται από την αρχή της εξέλιξης των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, και η οποία θεωρείται ότι θα συνεχίσει για τουλάχιστον μια δεκαετία ακόμα.

Η διαρκής προσπάθεια για την μείωση των πλευρικών διαστάσεων, συνεπάγεται και αντίστοιχη σμίκρυνση κατά την κατακόρυφη διάσταση για λόγους διατήρησης της συμμετρίας των ηλεκτρικών πεδίων. Η ελαχιστοποίηση αυτή αποτέλεσε, και αποτελεί μια από τις σημαντικότερες ερευνητικές προκλήσεις κατά την κατασκευή των τρανζίστορ. Η βαθμιαία συρρίκνωση των μεγεθών οδήγησε σε διατάξεις με ενεργές περιοχές, το βάθος των οποίων δεν ξεπερνά τα 10 με 15 nm! Για το σκοπό αυτό αναπτύχθηκαν μια σειρά από τεχνολογίες εμφύτευσης και ανόπτησης των προσμίξεων, οι οποίες αποτελούν και τους φορείς αγωγιμότητας και επιτρέπουν την λειτουργία του τρανζίστορ ως διακόπτη. Ιδιαίτερα όσον αφορά την ανόπτηση, με την πάροδο του χρόνου υλοποιήθηκαν διάφορες προσεγγίσεις, οι οποίες ενσωματώθηκαν στην παραγωγική διαδικασία. Η φύση αυτών διέφερε, ανάλογα με τις κατασκευαστικές απαιτήσεις του αντίστοιχου τεχνολογικού

κόμβου, που αφορά τα επίπεδα διάχυσης και ενεργοποίησης των προσμίξεων αλλά και αποκατάστασης της καταστροφής που εισάγεται στον όγκο του πυριτίου, απόρροια της εμφύτευσης. Ανάμεσα στις διάφορες τεχνολογίες που αναπτύχθηκαν, μπορούμε κατά χρονολογική σειρά να ξεχωρίσουμε την συμβατική ανόπτηση σε φούρνους, την ταχεία ανόπτηση με λαμπτήρες (flash annealing), την ανόπτηση με laser σε καθεστώς τήξης και τελικά την επιταξιακή ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης με χρήση laser. Η ανάγκη για την υλοποίηση της τελευταίας κατέστη επιτακτική από την στιγμή που οι κατασκευαστικές απαιτήσεις προέβλεπαν την – πρακτικά – άνευ διάχυσης ενεργοποίηση των προσμίξεων. Πράγματι, οι προδιαγραφές που έχουν τεθεί για την επόμενη γενιά ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, αναγκαιούν τον περιορισμό της διάχυσης κατά την ανόπτηση, σε λιγότερο από 3 με 4 nm. Με άλλα λόγια, η διαδικασία ηλεκτρικής ενεργοποίησης των προσμίξεων πρέπει να οδηγήσει σε μια μετακίνηση του προφίλ κατανομής τους το πολύ κατά τέσσερα νανόμετρα, σε σχέση με το αρχικό. Για να καταστεί αυτό εφικτό είναι αναγκαίος ο πολύ προσεκτικός σχεδιασμός, έτσι ώστε να εισαχθεί το κατάλληλο ποσό θερμότητας και με τέτοιο τρόπο, ώστε να επιτευχθεί το βέλτιστο ισοζύγιο ανάμεσα στην ελαχιστοποίηση της διάχυσης και την μεγιστοποίηση των επιπέδων της ηλεκτρικής ενεργοποίησης των προσμίξεων.

Η παρούσα ερευνητική προσπάθεια εστιάζει ακριβώς σε αυτό το ζήτημα προτείνοντας δυο διαφορετικές στρατηγικές ανόπτησης με χρήση laser. Οι υλοποιήσεις αυτές παρουσιάζουν μια σειρά από διαφορετικά χαρακτηριστικά, λόγω των διαφορετικών χρόνων ανόπτησης (μια σε καθεστώς nanosecond με χρήση Excimer KrF laser, και μια σε καθεστώς millisecond με χρήση CO₂ laser). Και στις δυο αυτές περιπτώσεις όμως, οι επιλεγόμενες συνθήκες ακτινοβολίας είναι τέτοιες ώστε η θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στον όγκο του υλικού, να μην υπερβαίνουν την θερμοκρασία τήξης, καθώς στην αντίθετη περίπτωση, η εισαγωγή υγρής φάσης θα αύξανε δραματικά την διάχυση. Της επιλογής των δυο αυτών τύπων laser, προηγήθηκε εκτεταμένη βιβλιογραφική αναζήτηση, η οποία κατέδειξε την υπεροχή τους σε σχέση με άλλα είδη laser. Δεν είναι τυχαίο άλλωστε, ότι και τα δυο χρησιμοποιούνται ήδη στην βιομηχανία μικροηλεκτρονικής, για την ανόπτηση δισκίων πυριτίου. Τα τελείως διαφορετικά χαρακτηριστικά αλληλεπίδρασης των laser αυτών με το πυρίτιο, καθιστούν ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα την παράλληλη μελέτη της χρήσης τους για την ανόπτηση, τόσο πειραματικά, όσο και κυρίως μέσω της προσομοίωσης της όλης της διαδικασίας. Η τελευταία, προσέφερε την δυνατότητα για εμβάθυνση και κατανόηση των επιμέρους μηχανισμών της περίπλοκης αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το κρυσταλλικό πλέγμα και τις προσμίξεις που είχαν εισαχθεί σε αυτό.

Ο κυριότερος στόχος της προσπάθειας αυτής ήταν η πειραματική και θεωρητική επίδειξη της δυνατότητας κατασκευής ρηχών επαφών οι οποίες θα πληρούσαν τις απαιτήσεις που έχουν τεθεί από τις εικάστοτε χάρτες ITRS για τις επόμενες γενιές επεξεργασιών. Οι απαιτήσεις αυτές σχετίζονται κυρίως με την επίτευξη όσο το δυνατόν υψηλότερων επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης με ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση της διάχυσης, ει δυνατόν κάτω από τα 3 με 4 nm. Παράλληλα είναι αναγκαία η εξάλειψη της καταστροφής που έχει υποστεί το πλέγμα λόγω της διαδικασίας εμφύτευσης, ενώ είναι σημαντικό η σχηματισθείσα επαφή να διατηρεί τα ηλεκτρικά της χαρακτηριστικά κατά τα επόμενα στάδια επεξεργασίας που υφίσταται έως ότου ολοκληρωθεί η

διαδικασία κατασκευής του τρανζίστορ. Ζητούμενο αποτέλεσε η διερεύνηση των κατάλληλων συνθηκών ακτινοβόλησης, οι οποίες θα οδηγούσαν στα βέλτιστα αποτελέσματα. Η εργασία αυτή εντάχθηκε στα πλαίσια ενός ευρύτερου σχεδιασμού για την κατασκευή μικροεπεξεργαστών στα 32 και τα 22nm με την κωδική ονομασία “PullNANO”, υπό την αιγίδα και την χρηματοδότηση της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Το πρόγραμμα αυτό στόχευε στην ανάπτυξη τεχνικών αλλά και την απόκτηση τεχνογνωσίας, για όλα τα επιμέρους κατασκευαστικά στάδια τόσο για μικροεπεξεργαστές όσο και για στοιχεία SRAM, με έμφαση σε τεχνολογίες αιχμής που σχετίζονται με την ανόπτηση.

Η έρευνα στα πλαίσια της εκπόνησης της παρούσας διδακτορικής διατριβής μπορεί να διακριθεί σε διαφορετικούς θεματικούς άξονες, και ανάλογα με την σκοπιά που θα ειδωθεί. Μια πρώτη κατηγοριοποίηση θα μπορούσε να γίνει ανάλογα με το είδος του laser που χρησιμοποιήθηκε, δηλαδή KrF Excimer και CO₂. Και στις δυο περιπτώσεις, η διαδικασία ακτινοβόλησης και χαρακτηρισμού των δειγμάτων συνοδεύτηκε από εκτεταμένη προσομοίωση όλων των διεργασιών. Η προσομοίωση αυτή περιελάμβανε την μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας του εκάστοτε laser, όχι μόνο όσον αφορά τα αποτελέσματα που επέφερε στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής στον όγκο του υλικού αλλά και στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Η παραπάνω δομή ακολουθήθηκε και στην διάρθρωση της παρούσας διδακτορικής διατριβής, αποφασίστηκε δηλαδή η ομαδοποίηση των αποτελεσμάτων ανάλογα με το είδος του laser που χρησιμοποιήθηκε. Σε κάθε μέρος όμως, όμως γίνεται σαφής διάκριση ανάμεσα στην πειραματική διεργασία και την διαδικασία της προσομοίωσης, καθώς αυτές δίνονται σε ξεχωριστά κεφάλαια. Επίσης, καθώς οι υπολογιστικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση της επίδρασης της ακτινοβόλησης στην θερμοκρασιακή εξέλιξη και την κινητική της διάχυσης των φορέων είναι διαφορετικές, γίνεται ξεχωριστή μνεία, με στόχο την ευκρινέστερη παρουσίαση και την ευκολότερη κατανόηση. Σε κάθε περίπτωση, και όπου αυτό είναι εφικτό, προβαίνουμε σε συνεχείς συγκρίσεις και αντιπαραθέσεις των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την προσομοίωση με τα πειραματικά δεδομένα, για λόγους πληρότητας αλλά και επιβεβαίωσης των εκάστοτε διαδικασιών.

Πριν προχωρήσουμε στην παρουσίαση των επιμέρους κεφαλαίων, αναφέρουμε συνοπτικά, ότι τα πρώτα πέντε κεφάλαια, τα οποία και συνιστούν το πρώτο μέρος, προσφέρουν ολόκληρο το θεωρητικό υπόβαθρο, στο οποίο στηρίχθηκαν τόσο οι πειραματικές όσο και οι υπολογιστικές διαδικασίες στα πλαίσια της παρούσας διδακτορικής διατριβής. Η εκτεταμένη παρουσίαση αυτή κρίθηκε σκόπιμη λόγω των διαφορετικών συνιστωσών της ερευνητικής προσπάθειας, καθώς η τελευταία αγγίζει διάφορες θεματικές περιοχές (μικροηλεκτρονική, lasers και μηχανισμούς αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το πυρίτιο), ενώ ταυτόχρονα είναι απόρροια τόσο πειραματικής όσο και υπολογιστικής εργασίας. Το δεύτερο μέρος, το οποίο αποτελείται από ένα μόνο κεφάλαιο, πραγματεύεται την διαδικασία εισαγωγής προσμίξεων βορίων στο πλέγμα, με χρήση της καινοτόμου τεχνικής PLAD (Plasma Doping). Το τρίτο μέρος είναι αφιερωμένο στην παρουσίαση της ανόπτησης με χρήση CO₂, και αποτελείται από δυο κεφάλαια. Το κομμάτι αυτό πραγματεύεται το σημαντικότερο μέρος της παρούσας ερευνητικής προσπάθειας, καθώς απαιτήθηκε η κατασκευή μιας ολόκληρης διάταξης ακτινοβόλησης εκ του μηδενός. Επιπλέον, η ιδιαίτερα

περίπλοκη φύση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας σε αυτό το μήκος κύματος με το πυρίτιο, καθιστά την μοντελοποίηση της διαδικασίας θέρμανσης, πραγματική πρόκληση. Το τέταρτο μέρος περιγράφει την ανόπτηση πυριτίου με το άλλο είδος laser που χρησιμοποιήθηκε, αυτό του KrF Excimer laser. Στο πέμπτο και τελευταίο μέρος συνοψίζονται τα βασικότερα σημεία, αλλά και συμπεράσματα που προέκυψαν στα πλαίσια της εργασίας.

Πιο συγκεκριμένα, το πρώτο μέρος αποτελείται από τέσσερα κεφάλαια. Το πρώτο κεφάλαιο αποτελεί την εισαγωγή καθώς δίνονται ο σκοπός και οι κατευθυντήριες γραμμές που ακολουθήθηκαν. Αναφέρονται τα βασικά χαρακτηριστικά που πρέπει να πληρούν οι προς κατασκευή επαφές και τα βασικά προβλήματα που ανακύπτουν. Επιπλέον, γίνεται μια ιστορική επισκόπηση των βασικών τεχνικών που έχουν χρησιμοποιηθεί έως τώρα και οι οποίες προετοίμασαν την έλευση των υλοποιήσεων που εφαρμόστηκαν στην παρούσα εργασία. Καθώς ο ηλεκτρικός και μορφολογικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων αποτελεί αναπόσπαστο κομμάτι της διερεύνησης, στο δεύτερο κεφάλαιο περιγράφονται οι βασικότερες τεχνικές που χρησιμοποιήθηκαν. Τα αποτελέσματα από την χρήση αυτών των μεθόδων αυτών περιγράφονται στα κεφάλαια 6, 7 και 9, και επομένως για να αποφευχθεί άσκοπη επανάληψη της περιγραφής της πειραματικής διαδικασίας κρίθηκε σκόπιμο να δοθούν τα βασικά χαρακτηριστικά στην αρχή, και στη συνέχεια ο αναγνώστης να μπορεί να ανατρέχει από τα αντίστοιχα κεφάλαια. Το τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζει τα βασικά χαρακτηριστικά του λογισμικού που χρησιμοποιήθηκε για την μοντελοποίηση κάθε επιμέρους διαδικασίας. Πρόκειται για το Sentaurus Process της Synopsys, το οποίο αποτελεί το πλέον διαδεδομένο και αξιόπιστο υπολογιστικό εργαλείο, στον χώρο της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής, όσον αφορά την μοντελοποίηση των διεργασιών κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Επειδή έγινε χρήση τόσο συνεχών – αριθμητικών, όσο και Kinetic Monte Carlo τεχνικών, γίνεται ξεχωριστή μνεία σε κάθε μια ξεχωριστά. Επίσης γίνεται μια εκτεταμένη εισαγωγή στην κινητική και την διάχυση των προσμίξεων, ενώ παρουσιάζονται από μαθηματικής σκοπιάς τα βασικότερα χαρακτηριστικά των μοντέλων που χρησιμοποιούνται από το λογισμικό. Στο τέταρτο κεφάλαιο δίνονται οι βασικοί μηχανισμοί αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με το πυρίτιο. Επειδή οι μηχανισμοί αυτοί διαφοροποιούνται αισθητά ανάλογα με το μήκος κύματος του laser, παρουσιάζονται ξεχωριστά. Το κεφάλαιο αυτό παρέχει το θεωρητικό υπόβαθρο για την κατανόηση του σκεπτικού που ακολουθήθηκε κατά τους υπολογισμούς της επίδρασης της ανόπτησης με CO₂ και KrF Excimer όσον αφορά το θερμοκρασιακό κομμάτι, όπως αυτή περιγράφεται στα κεφάλαια 8 και 10 αντίστοιχα. Τέλος, στο 5ο κεφάλαιο, περιγράφεται ο φορμαλισμός της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων, τόσο σε μικροσκοπικό όσο και σε μακροσκοπικό επίπεδο.

Το δεύτερο μέρος πραγματεύεται την μέθοδο εμφύτευσης μέσω πλάσματος (PLAsma Doping, PLAD), μέσω της οποίας παρασκευάστηκαν τα δείγματα που χρησιμοποιήσαμε. Η τεχνική αυτή είναι ιδιαίτερα καινοτόμα, καθώς οδηγεί στον σχηματισμό πολύ ρηχών επαφών. Η εμφύτευση έγινε από την ST Microelectronics, αλλά ήταν αναγκαίος ο μορφολογικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων. Επιπλέον, προβήκαμε στην μοντελοποίηση της διαδικασίας

εμφύτευσης έτσι ώστε να είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε τα αποτελέσματα της, καθώς αυτά θα αποτελέσουν τα αρχικά δεδομένα στους μετέπειτα υπολογισμούς που σχετίζονται με την ανόπτηση.

Το τρίτο μέρος αναφέρεται στην προσπάθεια ανόπτησης πυριτίου με CO₂ laser, η οποία όπως προαναφέρθηκε αποτελεί και το σημαντικότερο κομμάτι της ερευνητικής μας προσπάθειας. Στο κεφάλαιο 7 παρουσιάζεται η διαδικασία ακτινοβόλησης πυριτίου με χρήση αυτού, η οποία αποτελεί μια από τις ελάχιστες που απαντώνται στην βιβλιογραφία. Η διάταξη αυτή προσφέρει την δυνατότητα ελεγχόμενης προθέρμανσης του πυριτίου στους 600 με 650°C, έτσι ώστε να είναι δυνατή τελικά η θέρμανση του με χρήση laser στους 1200 – 1350°C σε ελάχιστα ms. Αποδεικνύεται ότι η ακτινοβόληση σε αυτό το εύρος θερμοκρασίας και για αυτές τις διάρκειες ανόπτησης οδηγεί σε αποτελεσματική ενεργοποίηση των προσμίξεων και ανακρυστάλλωση με πολύ μικρή διάχυση. Ένα ακόμα σημαντικό χαρακτηριστικό της διάταξης είναι η δυνατότητα μέτρησης της επιφανειακής θερμοκρασίας που αναπτύσσεται στο δείγμα με τη βοήθεια πυρομετρίας υπερύθρου. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από τον μορφολογικό και ηλεκτρικό χαρακτηρισμό των δειγμάτων που υπέστησαν ακτινοβόληση με το CO₂ laser, για ένα μεγάλο εύρος συνθηκών έτσι ώστε να επιτευχθούν οι βέλτιστες σε όρους περιορισμού της διάχυσης και αύξησης των επιπέδων της ηλεκτρικής ενεργοποίησης. Πράγματι, οι τελευταίες οδήγησαν σε σημαντική βελτίωση των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών της επαφής, με πρακτικά αμελητέα διάχυση της τάξης των 2 με 2.5 nm, θέτοντας έτσι τα θεμέλια για την υιοθέτηση της μεθόδου αυτής και για τις επόμενες γενιές μικροεπεξεργασιών. Τα παραπάνω πειραματικά αποτελέσματα επιβεβαιώνονται από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης της κινητικής της διάχυσης, όπως αυτά δίνονται στο επόμενο κεφάλαιο. Σε μερικές μάλιστα περιπτώσεις, η συμφωνία πειράματος και υπολογισμών είναι εντυπωσιακή. Για λόγους πληρότητας, έλαβε χώρα διερεύνηση τόσο με χρήση συνεχών – αριθμητικών τεχνικών, όσο και με KMC, η οποία κατέδειξε την αδυναμία της δεύτερης να περιγράψει ακτινοβολήσεις με τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά, όπως και θα αναλυθεί στο αντίστοιχο κεφάλαιο.

Το όγδοο κεφάλαιο περιγράφει όλα τα βήματα που ακολουθήθηκαν μέχρι να καταστεί δυνατή η μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το πυρίτιο, διαδικασία ιδιαίτερα περίπλοκη λόγω της έντονης εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης τόσο από την θερμοκρασία όσο και από την κατανομή συγκέντρωσης φορέων. Η τελική μορφή της εξίσωσης θερμοότητας που προκύπτει περιπλέκεται ακόμα περισσότερο από το γεγονός ότι όλα τα μεγέθη που εμπλέκονται δεν είναι σταθερά, αλλά μεταβάλλονται. Παρά τις δυσκολίες αυτές, και με τη βοήθεια των εξελιγμένων αλγορίθμων του λογισμικού Sentaurus Process και των κατάλληλων υπολογιστικών τεχνασμάτων και προσεγγίσεων κατέστη δυνατή η επιτυχής προσομοίωση της διαδικασίας, γεγονός που καταδείχτηκε από τον σημαντικό βαθμό συμφωνίας ανάμεσα στα δεδομένα που προέκυψαν από την προσομοίωση και από τις μετρήσεις οπτικής πυρομετρίας. Η προσπάθεια αυτή αποκτά ιδιαίτερη σημασία αν ληφθεί υπόψη ότι ήταν η πρώτη φορά που διεξήχθη σε ακαδημαϊκό επίπεδο ακριβής μοντελοποίηση της διαδικασίας, λαμβάνοντας πλήρως την εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και κυρίως από την κατανομή της συγκέντρωσης των φορέων.

Αντίστοιχα, στο τέταρτο μέρος περιγράφεται η ανόπτηση με χρήση KrF Excimer laser, τόσο από πειραματικής όσο και από υπολογιστικής σκοπιάς, με τη διαφορά ότι στην περίπτωση αυτή δεν προβήκαμε σε κατασκευή νέας διάταξης ακτινοβόλησης, μιας και που αυτές έλαβαν χώρα στο Laser Thermal Lab, το οποίο υπάρχει στο University of California, Berkeley. Επίσης, σε αυτό το μήκος κύματος η αλληλεπίδραση της δέσμης με το πυρίτιο είναι σαφώς πιο απλή, με αποτέλεσμα η περιγραφή της να είναι πιο εύκολη και ακριβής σε σχέση με το CO₂ laser. Στο κεφάλαιο 9 περιγράφεται η λειτουργία των laser διηγευμένων διμερών, ενώ παρουσιάζονται τόσο οι συνθήκες ακτινοβόλησης, όσο και ο μορφολογικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων που περιλαμβάνει μετρήσεις SIMS, AFM, VDP, TEM καθώς και μια προκαταρκτική ανάλυση για την αντοχή των επαφών σε φαινόμενα απενεργοποίησης. Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζεται η διαδικασία προσομοίωσης τόσο της εξέλιξης της κατανομής της θερμοκρασίας, όσο και της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης, κυρίως με την χρήση KMC αλγορίθμων, οι οποίοι υπερέχουν στην περίπτωση αυτή. Και εδώ ο βαθμός συμφωνίας του πειράματος με την προσομοίωση είναι πολύ ικανοποιητικός.

Στο πέμπτο και τελευταίο μέρος, επαναλαμβάνονται τα βασικότερα στοιχεία της παρούσας εργασίας και παρουσιάζονται τα σημαντικότερα συμπεράσματα, μαζί με κάποιες υποδείξεις και προτάσεις που θα μπορούσαν να ληφθούν υπόψη σε μια ενδεχόμενη συνέχιση της προσπάθειας.

Πριν να αναφερθούμε στα πιο σημαντικά αποτελέσματα και συμπεράσματα που προέκυψαν κατά την επίσημη της παρούσας διδακτορικής διατριβής, θα ήταν σκόπιμο να κάνουμε μνεία στην κατασκευή αυτής καθεαυτής της διάταξης ακτινοβόλησης με χρήση laser CO₂, η οποία αποτέλεσε και τον πυρήνα της πειραματικής προσπάθειας. Η σημασία αυτής της διάταξης μπορεί να γίνει αντιληπτή από το γεγονός, ότι τουλάχιστον την περίοδο που κατασκευάστηκε δεν υπήρχε αντίστοιχη, σε ακαδημαϊκό επίπεδο. Παρά το σχετικά χαμηλό κόστος της, στάθηκε ικανή για την ανόπτηση δειγμάτων σε συνδυασμούς θερμοκρασίας και χρόνου, οι οποίες να οδηγούν στον σχηματισμό επαφών οι οποίες να πληρούν τα επιθυμητά χαρακτηριστικά (εφόσον η ακτινοβόληση διεξαχθεί σε καθεστώς μη τήξης). Παράλληλα προσφέρει τη δυνατότητα ελέγχου της διαδικασίας σε πραγματικό χρόνο λόγω της ενσωματωμένης διάταξης πυρομέτρησης υπερύθρου. Σε βιομηχανικό επίπεδο, παρέχεται μεν μια ολοκληρωμένη διάταξη ανόπτησης ολοκληρωμένων δισκίων με χρήση laser CO₂, αλλά με πολλαπλάσιο κόστος. Με τη βοήθεια της διάταξης που κατασκευάσαμε στάθηκε δυνατή η διεξαγωγή ενός μεγάλου αριθμού ακτινοβολήσεων σε διαφορετικούς συνδυασμούς θερμοκρασίας προανόπτησης, πυκνότητας ενέργειας και διάρκειας παλμού. Μέσω αυτής της πολυπαραμετρικής διερεύνησης, βρέθηκαν οι βέλτιστες συνθήκες για την επίδειξη της τεχνολογίας ως μια υποσχόμενη πρόταση για την ενεργοποίηση των προσμίξεων για την κατασκευή επαφών pn, οι οποίες θα ανταποκρίνονται στις απαιτήσεις για τις μελλοντικές γενιές ολοκληρωμένων κυκλωμάτων.

Πέρα από το laser διοξειδίου του άνθρακα όμως, και η ανόπτηση με χρήση KrF Excimer laser, αποδείχτηκε πως είναι ιδιαίτερα αποτελεσματική σε όρους ενεργοποίησης των προσμίξεων, αποικιάστασης της καταστροφής που εισήχθη στο κρυσταλλικό πλέγμα αλλά και επίτευξης πολύ μικρού βάθους επαφής. Τόσο ο μορφολογικός όσο και ο ηλεκτρικός χαρακτηρισμός των ακτινοβολημένων δειγμάτων κατέδειξε ότι η ανόπτηση σε καθεστώς nanosecond και εφόσον δεν προκληθεί τήξη, μπορεί να οδηγήσει πολύ υψηλά επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης με ταυτόχρονη ελαχιστοποίησης της διάχυσης των προσμίξεων.

Ένα από τα κυριότερα χαρακτηριστικά της παρούσας εργασίας συνίσταται στην ταυτόχρονη υποστήριξης της πειραματικής διαδικασίας από προσομοιώσεις όλων των φαινομένων που εμπλέκονται στην διαδικασία κατασκευής, από την εμφύτευση μέχρι και την ανόπτηση. Έτσι στάθηκε δυνατή η ακριβής αναπαράσταση των αποτελεσμάτων της ακτινοβολήσης, όσον αφορά την αλληλεπίδραση του laser με το υλικό, τόσο όσον αφορά την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής που εισάγεται, αλλά και την κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Και για τα δύο είδη laser που χρησιμοποιήθηκαν, ο βαθμός συμφωνίας πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων είναι ιδιαίτερα ικανοποιητικός.

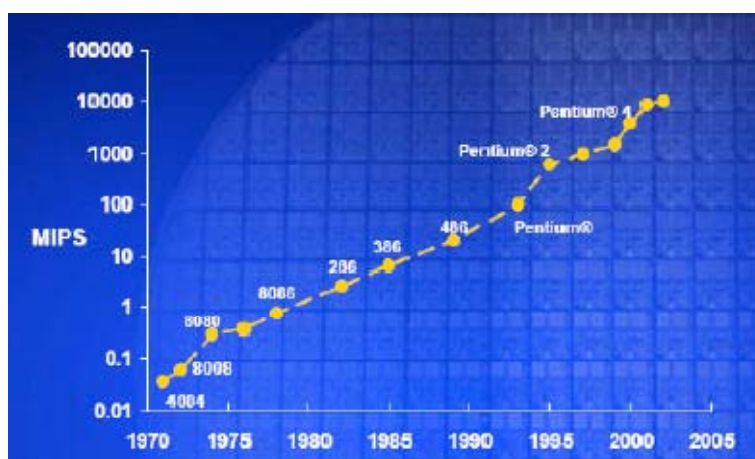
Όπως θα παρουσιαστεί αναλυτικά και στην συνέχεια, η προσπάθεια αυτή κατέδειξε την χρήση τόσο KrF όσο και CO₂ σε καθεστώς μη τήξης, ως αποτελεσματικές εναλλακτικές προτάσεις για την κατασκευή ρηχών επαφών, οι οποίες θα πληρούν τα χαρακτηριστικά που έχουν τεθεί για τις επερχόμενες γενιές ολοκληρωμένων κυκλωμάτων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ– ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ – ΒΑΣΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΠΡΟΚΛΗΣΕΙΣ ΤΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ MOSFET

1.1 Εισαγωγή

Δεν θα ήταν υπερβολή να ισχυριστεί κανείς ότι η αλματώδης ανάπτυξη στους περισσότερους τομείς της ανθρώπινης δραστηριότητας, οφείλεται εν πολλοίς στην ραγδαία αύξηση της διαθέσιμης υπολογιστικής ισχύος. Επιστήμες, οικονομία και βιομηχανική παραγωγή είναι ορισμένα μόνο από τα πεδία που έχουν επωφεληθεί τα μέγιστα από την δυνατότητα της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής, να προσφέρει κάθε περίπου δυο χρόνια και από μια νέα γενιά επεξεργαστών με σημαντικά βελτιωμένες ιδιότητες σε σχέση με την προκάτοχο της. Αν και η ανάπτυξη των επεξεργαστών τις τελευταίες δεκαετίες βρίσκεται από τα περισσότερα τεχνολογικά επιτεύγματα της ανθρωπότητας, το μεγαλύτερο ίσως τεχνολογικό θαύμα κρύβεται πίσω από αυτή καθαυτή την εξέλιξη. Πράγματι, από τα 50 τρανζίστορ που διέθετε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα τεχνολογίας αιχμής το 1965, πλέον έχουμε φτάσει στα δυο δισεκατομμύρια (όπως αυτά που διαθέτει ο επεξεργαστής με την κωδική ονομασία Tukwila από την Intel¹), τα οποία έχουν ολοκληρωθεί σε μια επιφάνεια λίγων τετραγωνικών εκατοστών. Αυτή η αύξηση στον αριθμό των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων έχει άμεσο αντίκτυπο στην δυνατότητα των σύγχρονων υπολογιστών να εκτελούν δεκάδες δισεκατομμύρια πράξεις ανά δευτερόλεπτο, όπως φαίνεται και στην εικόνα 1.1.



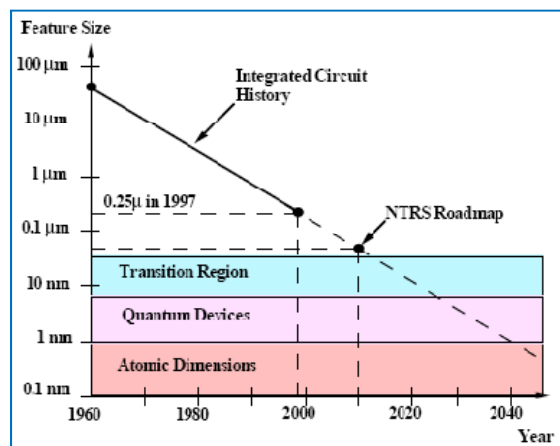
Εικόνα 1.1 Η αύξηση της απόδοσης των επεξεργαστών, όπως αυτή αντανακλάται στην λογαριθμική αύξηση των οδηγιών (σε εκατομμύρια) που μπορούν να εκτελεστούν ανά δευτερόλεπτο (MIPS), ως συνέπεια της σμίκρυνσης κλίμακας των χαρακτηριστικών διαστάσεων των CMOS².

Τα αίτια πίσω από αυτή την ραγδαία πρόοδο, πρέπει να αναζητηθούν αφενός μεν στην δεδομένη ανάγκη για μεγαλύτερη επεξεργαστική ισχύ, αλλά και κυρίως στην ώθηση που δίνει η ίδια

η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής για ολοένα και πιο εξελιγμένους επεξεργαστές, όπως αυτή εκφράζεται από τους οδικούς χάρτες ITRS³ (International Technology Roadmap for Semiconductors). Οι χάρτες αυτοί αποτελούν ένα εκτεταμένο σύνολο από χαρακτηριστικά που θα πρέπει να ικανοποιούνται από τις μελλοντικές γενιές ολοκληρωμένων κυκλωμάτων αλλά και μνημών, και στην ουσία αποτελούν την κινητήρια δύναμη (driving force) για την έρευνα και ανάπτυξη τους. Πρόδρομος αυτών των οδικών χαρτών είναι η εκτίμηση του Gordon Moore, πρωτοπόρου σε αυτό το πεδίο και μετέπειτα συνιδρυτή της Intel, το 1965, ότι ο αριθμός των τρανζίστορ σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα θα διπλασιάζεται κάθε ένα χρόνο⁴. Όταν το 1975 αναθεώρησε το διάστημα διπλασιασμού σε δυο χρόνια, πίστευε ότι η εκτίμηση αυτή θα είχε πρακτική ισχύ για τα επόμενα δέκα χρόνια. Τριάμισι δεκαετίες αργότερα, η πρόβλεψη αυτή δεν έχει χάσει την ισχύ της, με αποτέλεσμα να θεωρείται άτυπα ως νόμος, ο οποίος έμεινε ευρύτερα γνωστός ως νόμος του Moore. Έτσι, ακόμα και σήμερα, οι οδικοί χάρτες της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής (η οποία έχει ετήσιο κύκλο εργασιών περίπου τριακόσια δις δολάρια⁵) καταρτίζονται με γνώμονα την εκπλήρωση των προβλέψεων του νόμου του Moore.

Από το γεγονός ότι εκατοντάδες εκατομμύρια ή ακόμα και δισεκατομμύρια τρανζίστορ περιέχονται σε έναν, δυο ή τέσσερις πυρήνες (ανάλογα με την αρχιτεκτονική του επεξεργαστή) με συνολική επιφάνεια μικρότερη από δέκα τετραγωνικά εκατοστά προκύπτει εύλογα, ότι οι διαστάσεις των σύγχρονων τρανζίστορ είναι εξαιρετικά μικρές. Ενδεικτικά αναφέρουμε, ότι η επιφάνεια ενός στοιχειώδους δομικού κελιού – τρανζίστορ είναι 0.346 μm^2 για την τεχνολογία στα 45 nm, ενώ στους επερχόμενους επεξεργαστές στα 32 nm, η αντίστοιχη επιφάνεια θα είναι μόλις 0.171 μm^2 ! Η σμίκρυνση αυτή (scaling) στις πλευρικές διαστάσεις των τρανζίστορ, επιφέρει με την σειρά της μια σειρά από τεχνολογικές προκλήσεις που πρέπει να αντιμετωπιστούν σε όσο το δυνατόν μικρότερο χρονικό διάστημα για να μην ανακοπεί η προσδοκώμενη εξέλιξη. Ανάμεσα σε αυτές είναι η χρήση προηγμένων διηλεκτρικών στην πύλη (High-k δεύτερης γενιάς), η ελάττωση της ισχύος λειτουργίας, η βέλτιστη απαγωγή θερμότητας, η σμίκρυνση του ελάχιστου χαρακτηριστικού μεγέθους στην λιθογραφία και η ελάττωση του βάθους επαφής, η οποία και αποτέλεσε το κυριότερο ζητούμενο στα πλαίσια της παρούσας ερευνητικής προσπάθειας.

Για τα επόμενα λίγα χρόνια η προσπάθεια σμίκρυνσης των χαρακτηριστικών διαστάσεων της κυρίαρχης μορφής τρανζίστορ τύπου MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor), θα συνεχίσει να αποτελεί την κυριότερη απάντηση της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής στην απαίτηση για μεγαλύτερη επεξεργαστική ισχύ. Πολύ σύντομα όμως (στα μέσα της επόμενης δεκαετίας) προβλέπεται ότι το μήκος καναλιού της πύλης θα φτάσει στην οριακή τιμή των 10nm (εικόνα 1.2), οπότε η κβαντική φύση των φαινομένων θα οδηγήσει αναπόφευκτα στην υιοθέτηση ριζοσπαστικών τεχνολογικών λύσεων, όπως FINFET's, JFET's κ.α. Πρέπει φυσικά εδώ να τονιστεί ότι πέραν της στρατηγικής αύξησης της πυκνότητας των τρανζίστορ, η βιομηχανία στράφηκε και στην λύση των πολλαπλών πυρήνων έτσι ώστε να δώσει μια πρόσκαιρη απάντηση στο αίτημα για μεγαλύτερη επεξεργαστική ισχύ, χωρίς τις επιπλοκές που συνεπάγεται η πρώτη λύση. Σε κάθε περίπτωση, οι δυο στρατηγικές δεν είναι ανταγωνιστικές, αλλά συμπληρωματικές και ως εκ τούτου η χρήση της πολυπλεξίας (Multithreading) μπορεί μεν να καθυστερήσει πρόσκαιρα την αντικατάσταση της συμβατικής τεχνολογίας MOSFET, αλλά δεν μπορεί να την αποτρέψει.

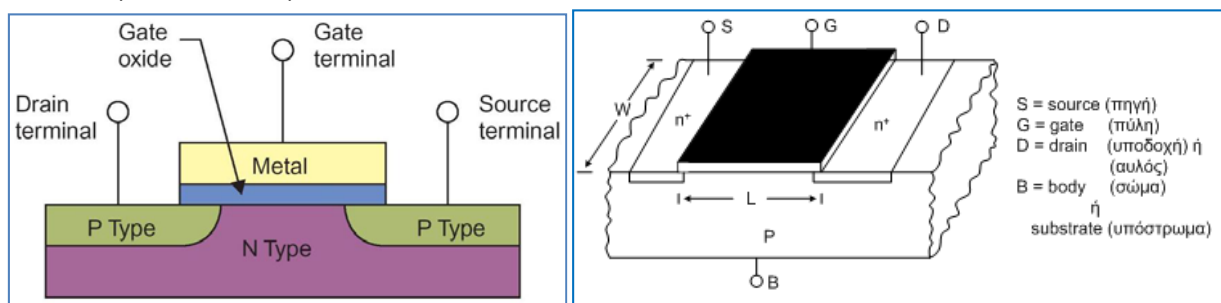


Εικόνα 1.2 Σχηματική αναπαράσταση της εξέλιξης του ελάχιστου χαρακτηριστικού μεγέθους για ένα τρανζίστορ. Η διακεκομμένη γραμμή αναφέρεται στις προβλέψεις του οδικού χάρτη ITRSⁱⁱⁱ. Παρατηρούμε ότι πλέον εισερχόμαστε στο μεταβατικό στάδιο, το οποίο είναι και το τελευταίο σύνορο ανάμεσα στα συμβατική τεχνολογία MOSFET και σε ριζοσπαστικές τεχνολογίες, όπως FINFET κ.α.

Πριν προχωρήσουμε στην παρουσίαση των κυριότερων προβλημάτων που σχετίζονται με την σμίκρυνση (scaling) των χαρακτηριστικών μεγεθών μιας διάταξης MOSFET, θα αναφερθούμε στα βασικά χαρακτηριστικά του.

1.2 Το τρανζίστορ τύπου MOSFET

Το πρώτο επίπεδο τρανζίστορ μετάλλου – οξειδίου – ημιαγωγού επίδρασης πεδίου (MOSFET) από πυρίτιο, κατασκευάστηκε το 1960 από τους E. Labate, D. Kahng και M. Atalla^{6 7} στα Bell Laboratories, τα οποία έμελε να διαδραματίσουν αποφασιστικό ρόλο στην διαμόρφωση της τεχνολογίας πυριτίου, τουλάχιστον κατά τα πρώτα βήματα της. Ανάλογα με τον εάν λειτουργούν ως διακόπτες με κίνηση ηλεκτρονίων ή οπών, τα MOSFET διακρίνονται σε NMOS και PMOS αντιστοίχως. Ένα τυπικό PMOS παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα 1.3.α, ενώ το αντίστοιχο NMOS στην εικόνα 1.3.β.



Εικόνα 1.3 Σχηματική αναπαράσταση τυπικής α) PMOS διάταξης και β) NMOS. Διακρίνονται η πηγή (S), η πύλη (G) ο απαγωγός (D) και το υπόστρωμα (n τύπου στην πρώτη περίπτωση και p τύπου στην δεύτερη).

Το τρανζίστορ NMOS αποτελείται από ένα υπόστρωμα Si τύπου p πάνω στο οποίο σχηματίζονται μέσω κατάλληλης εμφύτευσης ιόντων, δύο περιοχές τύπου n που λέγονται αντίστοιχα, πηγή (source) και απαγωγός ή καταβόθρα (drain). Η περιοχή ανάμεσα στην πηγή και στον απαγωγό υπόκειται στην επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου που εφαρμόζεται εξωτερικά μέσω

του υποστρώματος και του μεταλλικού υμενίου της πύλης. Παρόμοια, από άποψης αρχών λειτουργίας, είναι και η διάταξη PMOS η οποία μαζί με την αντίστοιχη NMOS αποτελούν τα δομικά μέρη των CMOS (Complementary-MOS) κυκλωμάτων. Όπως και στην προηγούμενη διάταξη, έτσι και εδώ διακρίνονται καθαρά η πύλη, η πηγή, ο απαγωγός καθώς και το οξειδίο πύλης (Gate Oxide). Η λειτουργία που επιτελεί αυτή η διάταξη είναι πολύ απλή: στην ουσία πρόκειται για ένα διακόπτη ρεύματος. Σε περίπτωση που δεν εφαρμόζεται τάση στην πύλη (κατάσταση 0), δεν επιτρέπεται η διέλευση οπών (και επομένως ρεύματος) από την πηγή στον απαγωγό. Αντίθετα, σε περίπτωση που εφαρμοστεί μια τάση μεγαλύτερη από το χαρακτηριστικό κατώφλι τάσης V_T τότε χάρις στο φαινόμενο πεδίο (ηλεκτρικό πεδίο κάθετο προς το υπόστρωμα), καθίσταται δυνατή η διέλευση οπών, μέσω ενός καναλιού (Channel), το οποίο σχηματίζεται ακριβώς κάτω από το διηλεκτρικό της πύλης (κατάσταση 1). Οι παράμετροι που καθορίζουν τα χαρακτηριστικά του καναλιού αυτού, δεν είναι άλλες από την επιβληθείσα τάση και από την πυκνότητα φορέων στην πηγή και στον απαγωγό. Η βασική διαφορά μεταξύ των διατάξεων PMOS και NMOS, είναι ότι στα PMOS η πηγή και ο απαγωγός είναι περιοχές εμφυτευμένες με μεγάλη δόση προσμίξεων p-τύπου, δηλαδή αποδέκτες (π.χ. Βόριο, B), ενώ το υπόστρωμα έχει νοθευτεί ελαφρώς με προσμίξεις n-τύπου, δηλαδή δότες (π.χ. Αρσενικό, As ή Φώσφορος, P), ενώ στα NMOS συμβαίνει ακριβώς το αντίθετο. Το μήκος καναλιού L , αποτελεί μια από τις σημαντικότερες χαρακτηριστικές παραμέτρους και είναι αυτό που χαρακτηρίζει την αντίστοιχη τεχνολογική γενιά του τρανζίστορ.

1.3 Σμίκρυνση (Scaling) διατάξεων MOSFET

Η μείωση των διαστάσεων του MOSFET ήταν πραγματικά δραματική κατά τις τρεις τελευταίες δεκαετίες. Ξεκινώντας από ένα ελάχιστο χαρακτηριστικό μήκος της τάξης των 10 μm το 1970, το μήκος της πύλης σταδιακά μειώθηκε στα 25 περίπου νανόμετρα το 2008, γεγονός που συνεπάγεται μείωση της τάξης του 13% το χρόνο. Η σμίκρυνση των MOSFET απαιτεί την μείωση μεγέθους, όχι μόνο όσον αφορά το μήκος και το πλάτος του καναλιού, αλλά και όλες τις άλλες χαρακτηριστικές διαστάσεις, περιλαμβανομένων του βάθους της πύλης και της καταβόθρας, του πάχους του οξειδίου και του εύρους της ζώνης απογύμνωσης. Ένας από τους βασικούς κανόνες στον σχεδιασμό των MOSFET επιβάλλει ένα ελάχιστο μέγεθος για το L_g ίσο με $\approx 5\lambda$, όπου λ είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος που δίνεται από τη σχέση⁸:

$$L_g = 0.1 \times (X_j T_{ox} T_{dep})^2 \quad (1.1)$$

όπου X_j είναι το βάθος επαφής των περιοχών της πύλης και το απαγωγού, T_{ox} είναι το πάχος του διηλεκτρικού της πύλης και T_{dep} είναι το εύρος του καναλιού απογύμνωσης. Σύμφωνα με τη σχέση αυτή, οι κάθετες διαστάσεις (X_j, T_{ox}, T_{dep}) πρέπει να μειωθούν αντιστοίχως με το L_g για την αποφυγή φαινομένων βραχυκύκλωσης στο κανάλι.

Η σμίκρυνση της ζώνης απογύμνωσης συνεπάγεται και αντίστοιχη μεταβολή της συγκέντρωσης υποστρώματος. Υπάρχουν δυο κυρίως τεχνικές σμίκρυνσης: αυτή του σταθερού πεδίου και αυτή της σταθερής τάσης. Η πρώτη, οδηγεί σε μεγαλύτερη μείωση της απαιτούμενης ισχύος ανά τρανζίστορ. Από την άλλη πλευρά όμως, προϋποθέτει ελάττωση της τάσης τροφοδοσίας καθώς μειώνονται τα ελάχιστα χαρακτηριστικά μεγέθη. Η προσέγγιση της σμίκρυνσης κρατώντας την τάση σταθερή, δεν παρουσιάζει αυτό το πρόβλημα και επομένως είναι προτιμητέα, καθώς η

τάση είναι συμβατή με τις υπόλοιπες διατάξεις στο chipset. Το βασικό μειονέκτημα της, έγκειται στο γεγονός ότι το ηλεκτρικό πεδίο αυξάνει καθώς ελαττώνεται το ελάχιστο χαρακτηριστικό μέγεθος, με αποτέλεσμα την εμφάνιση φαινομένων κορεσμού της ταχύτητας των φορέων, υποβάθμιση της ευκινησίας, αυξημένων ρευμάτων διαρροής και χαμηλότερης τάσης ηλεκτρικής κατάρρευσης. Στον πίνακα 1.1 παρουσιάζονται οι παράγοντες σμίκρυνσης (scaling factors) των σημαντικότερων μεγεθών του MOSFET, ανάλογα με την προσέγγιση σμίκρυνσης.

Πίνακας 1.1 Παράγοντες σμίκρυνσηςⁱⁱⁱ

| Παράμετρος | Σύμβολο | Σμίκρυνση σταθερού πεδίου | Σμίκρυνση σταθερής τάσης | Σμίκρυνση σταθερής τάσης με κορεσμό ταχύτητας |
|------------------------|--------------------|---------------------------|--------------------------|---|
| Μήκος πύλης | L | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ |
| Πλάτος πύλης | W | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ |
| Πεδίο | E | 1 | α | α |
| Πάχος οξειδίου | t_{oxide} | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ |
| Συγκέντρωση προσμίξεων | N_d | α^2 | α^2 | α^2 |
| Χωρητικότητα Πύλης | C_G | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ |
| Τάση | V | $1/\alpha$ | 1 | 1 |
| Ρεύμα | I | $1/\alpha$ | α | 1 |
| Ισχύς | P | $1/\alpha^2$ | α | 1 |
| Καθυστερήση ισχύος | $P \Delta t$ | $1/\alpha^3$ | $1/\alpha$ | $1/\alpha$ |

1.4 Τεχνολογικές προκλήσεις σχετιζόμενες με την σμίκρυνση του MOSFET

Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν οι σημαντικότερες προκλήσεις που αντιμετωπίζει η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής κατά την διαδικασία της σμίκρυνσης για την αύξηση της πυκνότητας των τρανζίστορ.

▪ Διαρροή υποκατωφλίου (subthreshold voltage)

Η μείωση των γεωμετρικών διαστάσεων συνεπάγεται και ελάττωση της τάσης που εφαρμόζεται στην πύλη, για λόγους αξιοπιστίας της διάταξης, και συνεπώς της τάσης κατωφλίου (threshold voltage)⁹. Το γεγονός αυτό δημιουργεί προβλήματα στην λειτουργία του τρανζίστορ ως διακόπτη, καθώς υπάρχει μεγαλύτερη ασάφεια στην μετάβαση από ON σε OFF (το εύρος μετάβασης από τη μια κατάσταση στην άλλη είναι πολύ μικρότερο). Έτσι η πιθανότητα εμφάνισης ρευμάτων διαρροής, όταν το κύκλωμα θεωρείται κλειστό είναι αρκετά σημαντική. Το ρεύμα αυτό ονομάζεται ρεύμα διαρροής υποκατωφλίου, και μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικές απώλειες ισχύος. Τέλος σημειώνεται ότι τα ρεύματα διαρροής σε διατάξεις παλαιότερων γενεών ήταν πολύ μικρά και θεωρούνταν αμελητέα.

▪ Εμφάνιση ρευμάτων διαρροής στις επαφές

Η σμίκρυνση των χαρακτηριστικών διαστάσεων επιβάλλει την χρησιμοποίηση προηγμένων τεχνικών εμφύτευσης και ανόπτησης για τον σχηματισμό τόσο των ρηχών επαφών, όσο και των

προεκτάσεων τους προς το κανάλι (halo extensions). Πέραν της δεδομένης απαίτησης για την μείωση του βάθους επαφής έτσι ώστε να διατηρηθούν οι συμμετρίες του ηλεκτρικού πεδίου, μια άλλη ιδιαίτερα σημαντική παράμετρος είναι η αντιμετώπιση του φαινομένου της μείωσης του φραγμού δυναμικού επαγόμενου από τον απαγωγό (Drain Induced Barrier Lowering, DIBL)¹⁰. Το τελευταίο σχετίζεται με τη ταπείνωση της προκαθορισμένης τάσης κατωφλίου όταν η τάση λαμβάνει υψηλές τιμές στον απαγωγό. Στην περίπτωση αυτή το MOSFET άγει ρεύμα ακόμα και για τάσεις μικρότερες από την τάση κατωφλίου με αποτέλεσμα να έχουμε την εμφάνιση παρασιτικών ρευμάτων διαρροής που προστίθενται σε αυτά που προαναφέραμε στην πρώτη παράγραφο. Για να μειωθεί η επίδραση του φαινομένου αυτού είναι απαραίτητο τα προφίλ συγκέντρωσης των προσμίξεων να είναι όσο το δυνατόν πιο απότομα (η κλίση της καμπύλης της συγκέντρωσης να είναι μεγάλη).

Φυσικά, στην περίπτωση που η τεχνική θερμικής ανόπτησης που θα εφαρμοστεί δεν οδηγήσει στην εξάλειψη της καταστροφής που εισήχθη στο πλέγμα κατά την διαδικασία της εμφύτευσης και στην ανακρυστάλλωση του, τότε οι εναπομείνουσες ατέλειες, θα προσφέρουν ανεπιθύμητα αγωγή μονοπάτια, με αποτέλεσμα την εμφάνιση ρευμάτων διαρροής. Επομένως η αποτελεσματικότητα της θερμικής ανόπτησης, όσον αφορά την θεραπεία της καταστροφής του κρυστάλλου, θα διαδραματίσει σημαντικό ρόλο στις μετέπειτα ηλεκτρικές ιδιότητες της διάταξης.

Τέλος τα υψηλά επίπεδα νόθευσης που εισάγονται για την βελτίωση των αγωγιμών χαρακτηριστικών της επαφής, οδηγούν ταυτόχρονα στην μείωση του εύρους της ζώνης απογύμνωσης (depletion layer), στις περιοχές κάτω από τις επαφές αλλά και το κανάλι. Η μείωση αυτή, συνεπάγεται την δημιουργία κέντρων επανασύνδεσης με αποτέλεσμα την εμφάνιση ρευμάτων διαρροής, ακόμα και αν το κρυσταλλικό πλέγμα δεν παρουσιάζει ατέλειες στις περιοχές αυτές.

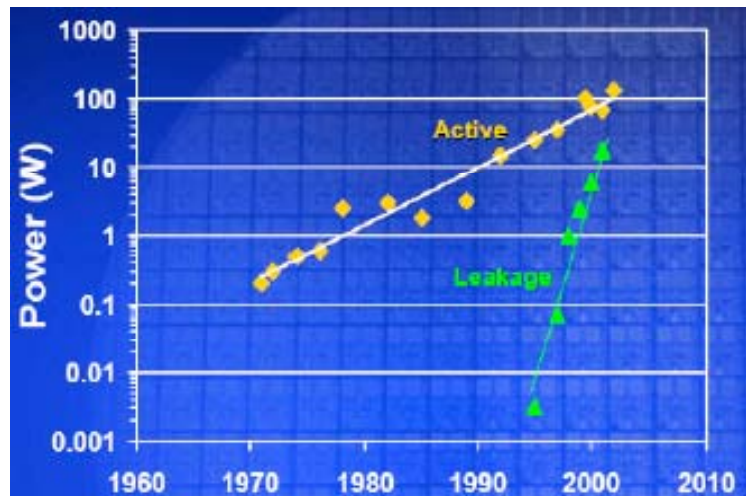
Από τα παραπάνω είναι φανερό, ότι απαιτείται ιδιαίτερα προσεκτικός σχεδιασμός για την επίτευξη του βέλτιστου ισοζυγίου ανάμεσα στις αντικρουόμενες κατασκευαστικές απαιτήσεις.

■ Φαινόμενα βραχυκύκλωσης μεταξύ πύλης και οξειδίου (gate – oxide leakage)

Το λεπτό υμένιο από διοξείδιο του πυριτίου που βρίσκεται ανάμεσα στην πύλη και στο κανάλι, δρα ως μονωτής εμποδίζοντας την ανεπιθύμητη μεταφορά φορτίου εφόσον η τάση έχει τιμή μικρότερη από την τάση κατωφλίου. Επομένως ιδανικά, το πάχος του υμενίου θα έπρεπε να είναι σχετικά μεγάλο. Από την άλλη πλευρά, εάν το πάχος είναι μεγάλο, τότε στην κατάσταση λειτουργίας “ON”, η αγωγιμότητα στο κανάλι θα είναι μειωμένη. Επομένως, βρισκόμαστε αντιμέτωποι με την πρόκληση το οξείδιο μας να έχει τέτοιες ιδιότητες ώστε να αποτρέπει φαινόμενα βραχυκύκλωσης ανάμεσα στην πύλη και το κανάλι όταν η διάταξη είναι σε κατάσταση “OFF” και να άγει όσο το δυνατόν περισσότερο όταν το MOS είναι στην κατάσταση “ON”. Μέχρι και πριν από λίγα χρόνια, η απαίτηση αυτή αποτελούσε ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα προς επίλυση για την κατασκευή διατάξεων CMOS, καθώς η μείωση των πλευρικών διαστάσεων συνεπαγόταν την ελάττωση του στρώματος SiO₂ στα 1.2nm, με αποτέλεσμα το οξείδιο να αδυνατεί να επιτελέσει την λειτουργία του ως μονωτής. Έτσι η τάση κατωφλίου της

πύλης δεν έχει προκαθορισμένη τιμή αλλά κυμαίνεται μέσα σε ένα εύρος τιμών, με αποτέλεσμα την αποσταθεροποίηση της λειτουργίας του τρανζίστορ. Επιπλέον, η ύπαρξη ρευμάτων διαρροής κατά την “OFF” κατάσταση συνεπάγεται αύξηση της καταναλισκόμενης ισχύος του επεξεργαστή. Το ζήτημα της αδυναμίας περαιτέρω μείωσης του πάχους του οξειδίου πύλης, αποτέλεσε σημαντική τροχοπέδη στην σμίκρυνση των υπόλοιπων κρίσιμων χαρακτηριστικών μεγεθών (όπως το μήκος καναλιού)¹¹ και ως εκ τούτου το μεγαλύτερο ερευνητικό ενδιαφέρον στράφηκε σε αυτό. Σημαντικές προκλήσεις, τόσο όσον αφορά στα υλικά αλλά και στη διαδικασία κατασκευής, οι οποίες ποικίλουν από το υλικό διεπιφάνειας, την σύνθεση αλλά και εναπόθεση των υμενίων υψηλής διηλεκτρικής σταθεράς και των μεταλλικών τμημάτων της πύλης, έπρεπε να ξεπεραστούν. Την λύση έδωσαν, οι ερευνητές της Intel¹² με την χρησιμοποίηση υλικών υψηλής διηλεκτρικής σταθεράς (high-k), όπως το HfO_2 , τα οποία εξασφαλίζουν υψηλή χωρητικότητα (η οποία συνδέεται άμεσα με το ρεύμα οδήγησης) με ταυτόχρονη μείωση του απαιτούμενου πάχους του οξειδίου.

Στην εικόνα 1.4 παρουσιάζεται η αντιστοιχία ανάμεσα στην ενεργό ισχύ, και αυτή που χάνεται λόγω ανεπιθύμητων διαρροών ρεύματος (από οποιαδήποτε από τις προαναφερθείσες αιτίες, όπως αυτές εξελίσσονται με το χρόνο). Το ποσοστό της απολεσθείσας ισχύος πλησιάζει το 50% της συνολικής ισχύος στους σύγχρονους επεξεργαστές.



Εικόνα 1.4 Εξέλιξη της σχέσης της ενεργούς και την καταναλισκόμενης λόγω διαρροών ισχύος στους μικροεπεξεργαστές ως συνέπεια της σμίκρυνσης των διαστάσεων. Το ποσοστό της απολεσθείσας ισχύος πλησιάζει το 50% της συνολικής ισχύος στους σύγχρονους επεξεργαστές.

▪ Μειωμένη ευκινησία φορέων

Τα αγώγιμα χαρακτηριστικά που συνδέονται με την ενίσχυση ρεύματος είναι ανάλογα με την συγκέντρωση των φορέων πλειονότητας και την ευκινησία τους. Η αύξηση των ηλεκτρικών πεδίων, απόρροια της μείωσης των διαστάσεων αλλά και οι υπερκορεσμένες συγκεντρώσεις προσμίξεων (πολλές φορές ακόμα και μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερες από το κατώφλι στερεάς διαλυτότητας της δεδομένης πρόσμιξης μέσα στο πυρίτιο), συνεπάγονται σημαντική μείωση της ευκινησίας των φορέων. Σημειώνεται πάντως, ότι, όπως θα αναλύσουμε και στη συνέχεια η

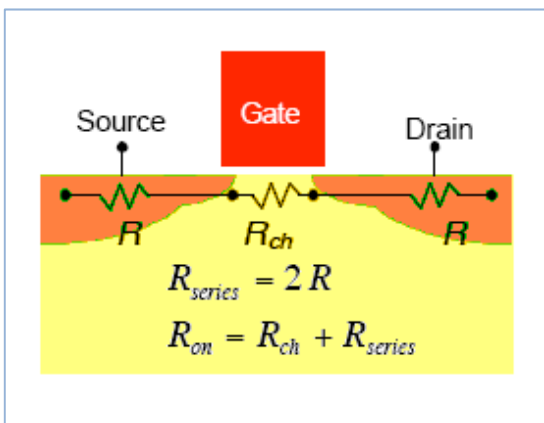
ανόπτηση με χρήση laser μπορεί να οδηγήσει σε συγκεντρώσεις ενεργών φορέων πλησίον ή ακόμα και παραπάνω από το προαναφερθέν κατώφλι στερεάς διαλυτότητας.

▪ **Κατανάλωση ισχύος και απαγωγή θερμότητας**

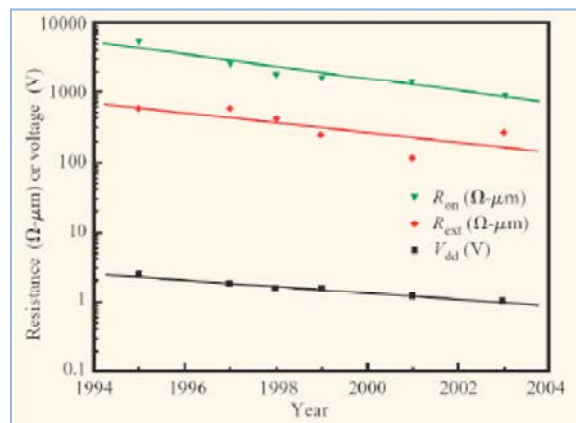
Η ενσωμάτωση τόσο μεγάλου πλήθους διακοπών ρεύματος σε τόσο μικρή επιφάνεια αποτελεί αναπόφευκτα την γενεσιουργό αιτία για την μεγάλη ηλεκτρική κατανάλωση των σύγχρονων επεξεργαστών^{13 14}, ενώ ταυτόχρονα θέτει σημαντικές προκλήσεις για την αποτελεσματική απαγωγή της θερμότητας. Η χρησιμοποίηση κατάλληλων υλικών για την απαγωγή της θερμότητας, η προσεκτικά σχεδιασμένη συσκευασία και χωροθέτηση (packaging) και η χρήση ψηκτρών σε συνδυασμό με την ελαχιστοποίηση της τάσης λειτουργίας έχουν κρατήσει προς το παρόν την κατανάλωση ισχύος, και συνεπακόλουθα την παραγωγή θερμότητας σε ελεγχόμενα επίπεδα. Παρόλα αυτά, εάν συνεχιστεί με το ρυθμό αυτό η αύξηση αριθμού των τρανζίστορ τότε σύντομα η καταναλισκόμενη ισχύς θα ξεπεράσει τα 1 kW.

▪ **Μείωση της αντίστασης στις περιοχές S/D.**

Μια ακόμα ιδιαίτερα σημαντική σχεδιαστική παράμετρος είναι η μείωση της αντίστασης λειτουργίας του MOS στην κατάσταση λειτουργίας ($R_{on} = V_{dd}/I_{on}$) η οποία είναι το άθροισμα των αντιστάσεων στο κανάλι R_{ch} και των αντιστάσεων που συναντά το ρεύμα κατά την διέλευση του από την πηγή στο κανάλι, αλλά και από το κανάλι στον απαγωγό (βλέπε εικόνα 1.5.α). Το άθροισμα των δύο αυτών αντιστάσεων καλείται R_{series} και επομένως ισχύει $R_{on} = R_{ch} + R_{series}$. Ιστορικά, η R_{series} βρισκόταν περίπου στο 10% της R_{on} , όπως φαίνεται και στην εικόνα 1.5.β. Καθώς οι επιδόσεις των διατάξεων βελτιώνονται σε κάθε τεχνολογικό κόμβο (κυρίως με την χρήση πυριτίου υπό τάση στο κανάλι), η επίτευξη αντίστοιχης μείωσης για τη R_{series} είναι ιδιαίτερα δύσκολη για τις γενιές από τα 100 nm και κάτω. Επίσης, σύμφωνα με τον οδικό χάρτη ITRSⁱⁱⁱ μετά το 2008 η R_{series} αντιπροσωπεύει το 20% της συνολικής αντίστασης, με αποτέλεσμα η μείωση της R_{series} να αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα ζητήματα που πρέπει να αντιμετωπιστούν.



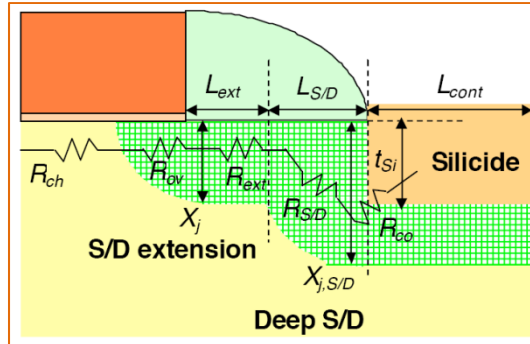
α.



β.

Εικόνα 1.5 α) Σχηματική αναπαράσταση της αντίστασης καναλιού (R_{ch}) και της παρασιτικής αντίστασης στην πύλη και τον απαγωγό (R_{series}). Η συνολική αντίσταση λειτουργίας του MOSFET, R_{on} είναι το άθροισμα των δυο παραπάνω αντιστάσεων, β) Ιστορική εξέλιξη της μείωσης των R_{series} και R_{on} για nMOSFET υψηλών επιδόσεων¹⁵.

Όπως φαίνεται και από την εικόνα 1.6, η R_{series} μπορεί να αναλυθεί σε τέσσερες επιμέρους συνιστώσες: α) αντίσταση extension-to-gate overlap (R_{ov}); β) αντίσταση S/D extension (R_{ext}), γ) αντίσταση deep S/D ($R_{S/D}$) και δ) αντίσταση επαφής στην διεπιφάνεια πυριτίου με την silicide (R_{co}).



Εικόνα 1.6 Σχηματική αναπαράσταση των συνιστωσών αντιστάσεων στην R_{sheet}

Η R_{ov} εξαρτάται ισχυρά από την νόθευση στην περιοχή υπέρθεσης και στην πλευρική κλίση του προφίλ της υπερτιθέμενης περιοχής. Αυτοί οι δυο παράγοντες επηρεάζουν περισσότερο την συγκέντρωση των φορέων και την διασπορά του ρεύματος. Για την μείωση της επίδρασης των φαινομένων βραχυκύκλωσης στο κανάλι και της αντίστασης διασποράς λόγω συσσώρευσης φορτίου (accumulation), απαιτούνται όσο το δυνατόν πιο απότομα πλευρικά προφίλ συγκέντρωσης. Γενικά λοιπόν ισχύει ότι:

$$R_{ov} = f(\text{Βαθμίδα προφίλ}, N_{ext}, R_{ch}), \quad (1.2)$$

όπου N_{ext} η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης στην περιοχή υπέρθεσης και R_{ch} η αντίσταση στο κανάλι. Γενικά, η σχεδίαση των ρηχών επαφών για την πύλη και τον απαγωγό για τις μελλοντικές διατάξεις CMOS απαιτεί όσο το δυνατόν μικρότερες τιμές για τα R_{ext} και τα R_{co} . Από την άλλη πλευρά η μείωση των διαστάσεων των S/D είναι απαραίτητη για την μείωση των φαινομένων βραχυκύκλωσης στο κανάλι, αλλά αυτή οδηγεί στην αύξηση της R_{ext} . Επομένως η αύξηση της συγκέντρωσης αλλά και της κλίσης του προφίλ των προσμίξεων είναι επιτακτικής σημασίας.

▪ Άλλες κατασκευαστικές προκλήσεις

Τέλος, μερικά ακόμα προβλήματα που συνδέονται με την σμίκρυνση των διαστάσεων των διατάξεων MOSFET, είναι η εμφάνιση χωρητικότητας μεταξύ των διασυνδέσεων (interconnect capacitance), η αυξανόμενη εξάρτηση του ρεύματος κόρου από την εφαρμοζόμενη τάση στον απαγωγό καθώς και οι διακυμάνσεις στις διαδικασίες κατασκευής. Καθώς οι διαστάσεις μειώνονται δραστηνά, η οποιαδήποτε (τυχαία φύσεως) απόκλιση από τις προκαθορισμένες τιμές για κάθε μέρος της διάταξης, μπορεί να οδηγήσει σε σημαντική υποβάθμιση των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών της διάταξης.

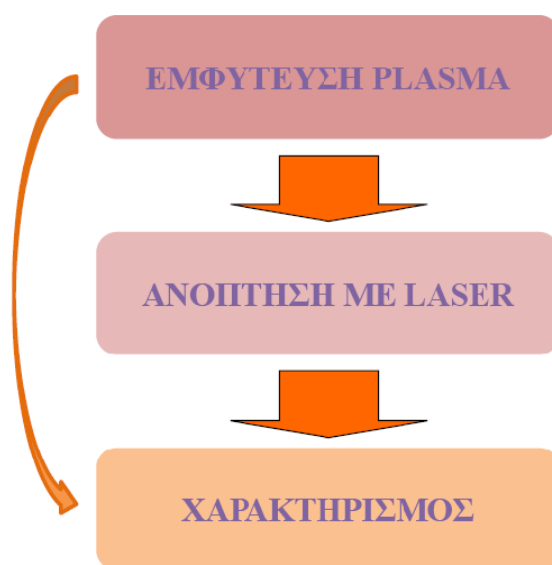
Από τα παραπάνω προκύπτει, ότι η αύξηση της συγκέντρωσης των ενεργών φορέων και της κλίσης του προφίλ, καθώς και η μείωση των ατελειών, συμβάλλουν αποφασιστικά στην ελάττωση των παρασιτικών αυτών φαινομένων. Η προσπάθεια ανόπτησης με laser, στοχεύει στην επίλυση ακριβώς, αυτών των ζητημάτων.

1.5 Κατασκευή ρηχών επαφών

Η κατασκευή μιας ολοκληρωμένης διάταξης CMOS είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη και συνίσταται από μια πλήρως προορισμένη σειρά ενδιάμεσων βημάτων. Η δημιουργία των ρηχών επαφών είναι ένα από τα πρώτα στάδια, είτε πρόκειται για p τύπου, είτε για n. Εάν παρομοιάζαμε την κατασκευή ενός CMOS με το χτίσιμο μιας πολυκατοικίας, τότε η δημιουργία των ρηχών επαφών θα αντιστοιχούσε στην θεμελίωση! Το πρώτο βήμα είναι η εισαγωγή των προσμίξεων στον όγκο του κρυστάλλου. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια, τις τελευταίες δεκαετίες έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι εμφύτευσης, αλλά στα πλαίσια της παρούσας ερευνητικής προσπάθειας χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος PLAsma Doping, με την εμφύτευση να διενεργείται στην ST Microelectronics, France από τον Dr. A. Hallimaoui. Τα δείγματα που προέκυψαν μελετήθηκαν με τη βοήθεια μεθόδων SIMS και TEM, για να αξιολογηθούν τα βασικά μορφολογικά χαρακτηριστικά τους (βάθος επαφής, δόση που πραγματικά εμφυτεύθηκε, πάχος αμορφοποιημένης περιοχής και τυχόν ύπαρξη εκτεταμένων ατελειών. Για την ενεργοποίηση των προσμίξεων και την αποκατάσταση της καταστροφής που έχει εισαχθεί στον όγκο του κρυστάλλου το επόμενο βήμα είναι η θερμική ανόπτηση. Μια αναδρομή στην βιβλιογραφία καταδεικνύει τις ποικίλες τεχνικές που έχουν εφαρμοστεί μέχρι στιγμής (συμβατική ανόπτηση, RTA, SPE, msec-flash, spike, laser (σε χρόνους από femtosecond έως και sec, με διάφορα μήκη κύματος, σε καθεστώς τήξης ή μη), κατά μονάς ή και σε συνδυασμό. Κοινός τόπος όλων των τεχνικών, και ιδιαίτερα των τελευταίων είναι η προσπάθεια να ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις των ελάχιστων οδικών χαρτών ITRS για τον δεδομένο τεχνολογικό κόμβο κατασκευής επεξεργαστών. Οι προδιαγραφές για την γενιά των 32 nm προβλέπουν ότι η σχετική μετατόπιση του προφίλ των προσμίξεων κατά την ανόπτηση δεν θα υπερβαίνει τα 3 nm^{xxviii}, ενώ η κλίση τους θα είναι πολύ απότομη (περίπου 2 nm/δεκάδα). Τέλος, η θερμική επεξεργασία πρέπει να οδηγεί στην επίτευξη πολύ υψηλών επιπέδων συγκεντρώσεων ηλεκτρικά ενεργοποιημένων φορέων (ή δυνατόν μεγαλύτερων από τα όρια στερεάς διαλυτότητας για την δεδομένη πρόσμιξη μέσα στο πυρίτιο), τα οποία θα είναι ανθεκτικά απέναντι σε φαινόμενα απενεργοποίησης που εμφανίζονται κατά τους θερμικούς κύκλους που εφαρμόζονται στα επόμενα στάδια κατασκευής του CMOS.

Πυρήνας της δικής μας ερευνητικής προσπάθειας είναι η διερεύνηση δυο διαφορετικών προσεγγίσεων όσον αφορά την χρονική διάρκεια της ανόπτησης laser. Η πρώτη προσέγγιση αφορά την ακτινοβολία σε καθεστώς nanosecond, με χρήση ενός Excimer KrF laser στα 248 nm, και η δεύτερη σε καθεστώς millisecond με τη βοήθεια ενός laser διοξειδίου του άνθρακα με μήκος κύματος στα 10.6 μm. Το διαφορετικό μήκος κύματος των δυο τύπων laser οδηγεί σε διαφορετικούς μηχανισμούς αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με την ύλη, και ως εκ τούτου σε διαφορετικές στρατηγικές για την ανόπτηση. Οι στόχοι όμως σε κάθε περίπτωση είναι κοινοί: επανακρυσταλλοποίηση των περιοχών που αμορφοποιήθηκαν κατά την εμφύτευση, οδήγηση των προσμίξεων σε πλεγματικές θέσεις (έτσι ώστε να καταστούν ηλεκτρικώς ενεργές), και όλα αυτά εισάγοντας την ελάχιστη δυνατή ποσότητα ενέργειας στον όγκο του υλικού ώστε να αποφευχθεί η διάχυση. Η διαδικασία ολοκληρώνεται με τον μορφολογικό και ηλεκτρικό χαρακτηρισμό της επαφής, με χρήση SIMS, TEM, AFM και μετρήσεων της επιφανειακής αντίστασης μέσω της τεχνικής VDP. Πέραν των τεχνικών αυτών που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία,

εφαρμόζεται μια πληθώρα τεχνικών για την αξιολόγηση της επαφής, όπως I-V χαρακτηρισμό (τόσο για τον προσδιορισμό του κατωφλίου τάσης, όσο και για την εύρεση των ρευμάτων διαρροής) και μετρήσεις Spreading Resistance Probe, SRP (για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης των ενεργοποιημένων προσμίξεων). Μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα τεχνική είναι η soft X-ray Photoelectron Spectroscopy (SXPS)¹⁶ η οποία στηρίζεται στην φασματοσκοπική ανάλυση των δυνάμεων σύζευξης ανάμεσα στα μόρια της πρόσμιξης με το πλέγμα. Ανάλογα με το εάν τα μόρια είναι δέσμια σε συσσωματώματα ή όχι, η ενέργεια σύζευξης είναι διαφορετική, όποτε η μέθοδος αυτή προσφέρει τη δυνατότητα υπολογισμού της συγκέντρωσης των ενεργών προσμίξεων κατά βάθος, με πολύ μεγάλη ακρίβεια τουλάχιστον για τα πρώτα 10 nm. Στην εικόνα 1.7, παρουσιάζονται με σχηματικό τρόπο, τα βασικότερα βήματα κατασκευής μίας ρηχής επαφής.



Εικόνα 1.7 Τα τρία βασικότερα στάδια κατασκευής και χαρακτηρισμού των επαφών που ακολουθήθηκαν στα πλαίσια της παρούσας ερευνητικής προσπάθειας. Της εμφύτευσης με πλάσμα BF_3 ακολουθεί ο χαρακτηρισμός με SIMS και TEM, για την αξιολόγηση της εμφύτευσης. Στη συνέχεια, τα δείγματα υφίστανται ακτινοβολία με KrF Excimer ή CO_2 laser. Το τελευταίο στάδιο είναι ο ηλεκτρικός και μορφολογικός χαρακτηρισμός μέσω SIMS, TEM, VDP και AFM.

1.6 Εμφύτευση προσμίξεων – Ιστορική επισκόπηση

Μία από τις πιο καθιερωμένες μεθόδους εμφύτευσης προσμίξεων τις προηγούμενες δεκαετίες, είναι η ιοντική εμφύτευση. Ένας τυπικός ιοντικός εμφυτευτήρας αποτελείται από μια πηγή ιόντων, έναν αναλυτή ιόντων, μια διάταξη επιτάχυνσης των ιόντων μέσω ισχυρού ηλεκτρικού πεδίου, διάφορα φίλτρα και ένα σύστημα στόχευσης (το οποίο προσομοιάζει τον τρόπο με τον οποίο η ηλεκτρονική δέσμη σαρώνει την οθόνη μιας τηλεόρασης CRT). Η μέθοδος αυτή είχε δύο πολύ σημαντικά πλεονεκτήματα και ένα εξίσου σημαντικό μειονέκτημα. Τα πλεονεκτήματα της ήταν ότι τα ιόντα που εισέρχονταν στο πυρίτιο είχαν την ίδια ενέργεια και το ότι η εμφυτευθείσα δόση μπορούσε να υπολογιστεί με μεγάλη ακρίβεια, ενώ γενικά παρουσίαζε ομοιόμορφη κατανομή.

Το μεγάλο της μειονέκτημα όμως ήταν ότι η ελάχιστη ενέργεια εμφύτευσης είχε ένα κάτω όριο περίπου στα 20 keV. Αυτό, σε συνδυασμό με το γεγονός ότι το βάθος της εμφύτευσης είναι άμεση συνάρτηση της ενέργειας εμφύτευσης, δημιουργούσε και ένα αντίστοιχο όριο στο ελάχιστο βάθος εμφύτευσης. Βέβαια αυτό δεν ήταν και τόσο μεγάλο πρόβλημα όσο τα επιδιωκόμενα χ ήταν πάνω από 100 nm. Η πρόοδος της τεχνολογίας όμως γέννησε την ανάγκη για ολοένα και πιο μικρά μεγέθη ολοκληρωμένων κυκλωμάτων Αναπόφευκτα λοιπόν, οι συμβατικές μέθοδοι εμφύτευσης είχαν πλέον ξεπεραστεί και έχρηζαν αντικατάστασης.

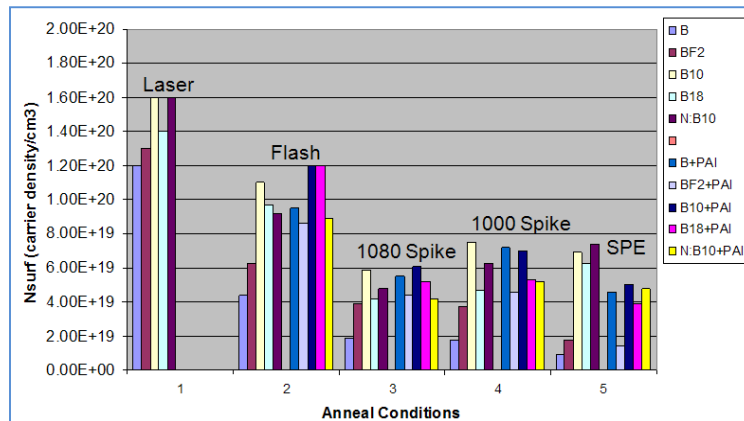
Το επόμενο βήμα στην εξέλιξη των εμφυτευτήρων ήταν οι ιοντικοί εμφυτευτήρες χαμηλής ενέργειας (Ultra Low Energy Ion Implanters, ULE I/I). Η ουσιαστική διαφορά τους από τους συμβατικούς ήταν ότι στο τελευταίο στάδιο, τα ιόντα επιβραδύνονταν από ένα ηλεκτροστατικό πεδίο έως ότου αποκτήσουν την επιθυμητή ενέργεια. Με τον τρόπο αυτό, μπορούσαν να επιτευχθούν ενέργειες εισόδου των ιόντων μέχρι και κάτω από 1 keV. Παρόλα αυτά όμως, η μέθοδος αυτή παρουσίαζε ένα σημαντικό πρόβλημα: την ενεργειακή επιμόλυνση της ιοντικής δέσμης. Αυτό με απλά λόγια σημαίνει ότι, κατά την διαδικασία της εμφύτευσης λόγω των συγκρούσεων στο διάστημα ανάμεσα στον αναλυτή-μαγνήτη και τους φακούς ηλεκτροστατικής επιβράδυνσης, δημιουργούνται ουδέτερα άτομα ή μόρια τα οποία λόγω έλλειψης ηλεκτρικού φορτίου δεν επιβραδύνονται και ως εκ τούτου εισέρχονται με μεγάλη ενέργεια μέσα στον όγκο του πυριτίου.

Όπως ήταν λογικό λοιπόν, αφότου και αυτού του τύπου οι μέθοδοι δεν απέδωσαν, το ζήτημα της εμφύτευσης επανεξετάστηκε ριζικά. Μία τεχνική που προέκυψε και η οποία χρησιμοποιείται για την δημιουργία των δειγμάτων στην παρούσα ερευνητική διαδικασία είναι η εμφύτευση με χρήση πλάσματος (Plasma Doping, PLAD)^{17 18 19}. Αναλυτική παρουσίαση της μεθόδου θα γίνει στο κεφάλαιο 6. Επιγραμματικά, μπορούμε να αναφέρουμε ότι βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι ότι επιτυγχάνεται ομοιόμορφη εμφύτευση με πολύ χαμηλή ενέργεια (έως και 0.2keV) χωρίς να εμφανίζονται τα προβλήματα της ενεργειακής επιμόλυνσης. Από την άλλη, βασικά της μειονεκτήματα είναι ότι οι ενέργειες εμφύτευσης των ιόντων παρουσιάζουν ένα εύρος (σε αντίθεση με την συμβατική ιοντική εμφύτευση που είναι μονοενεργειακή), όπως επίσης και η αδυναμία προσδιορισμού εκ των προτέρων της εμφυτευθείσας δόσης που εισήχθη πραγματικά μέσα στον κρύσταλλο.

Πέραν της μεθόδου PLAD τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί μια σειρά από νέες προσεγγίσεις που βασίζονται στην εμφύτευση με πλάσμα, όπως η Plasma Immersion Ion Implantation (PII)^{20 21 22}, η οποία είναι παρόμοια με την PLAD, και η εμφύτευση με πλάσμα B_2H_6/He χαμηλής πίεσης²³. Η τελευταία, εμφανίζεται και ως η πιο αποτελεσματική για ελαχιστοποίηση του βάθους εμφύτευσης²⁴.

Η μέθοδος GILD (Gas immersion laser doping)^{25 26 27} είναι μια ακόμα τεχνική που προτάθηκε για την ελαχιστοποίηση του βάθους επαφής. Η πρωτοτυπία της τεχνικής αυτής στηρίζεται στην χρήση laser, για την προσρόφηση μορίων BCl_3 στον όγκο του πυριτίου μέσω ενός κύκλου τήξης – επαναστερεοποίησης. Η σύγχρονη με την εμφύτευση, ακτινοβολήση οδηγεί στην ενεργοποίηση των προσμίξεων, ενώ και η επανακρυσταλλοποίηση εγγυάται την μειωμένη παρουσία ατελειών ή αμορφοποιημένων τμημάτων μετά το πέρας της διαδικασίας.

Μία ακόμα υποσχόμενη μέθοδος, είναι η μοριακή εμφύτευση ($B_{10}H_{14}$, $B_{18}H_{22}$ ή ακόμα και ενώσεις του Βορίου με αλογόνα, όπως BBr_2^+ , BCl_2^+ και BI_2^+), η οποία και οδηγεί στα μεγαλύτερα επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης για κάθε τεχνική θερμικής ανόπτησης, είτε έχει πραγματοποιηθεί προαμορφοποίηση είτε όχι, όπως διαφαίνεται και από το γράφημα της εικόνας 1.8, από τον Borland²⁸. Ένα από τα μεγάλα πλεονεκτήματα αυτών των μοριακών ειδών, είναι ότι δεν περιέχουν φθόριο (όπως τα BF_2 και BF_3) το οποίο αν και έχει σημαντικά πλεονεκτήματα (μικρότερο αρχικό βάθος επαφής^{29 30 31}, μείωση του φαινομένου TED που οδηγεί σε μεγάλη διάχυση του Βορίου^{32 33 34 35 36}), παρουσιάζει και σημαντικά μειονεκτήματα (εμφάνιση εντονότερης απενεργοποίησης³⁷, ενώ είναι αρκετά δραστική με αποτέλεσμα την υποβάθμιση των ιδιοτήτων του οξειδίου της πύλης³⁸). Σχετικά πάντως με το εάν η παρουσία φθορίου ενισχύει ή όχι την ενεργοποίηση των προσμίξεων, η βιβλιογραφία είναι διχασμένη, καθώς άλλες δημοσιεύσεις είναι υπέρ και μερικές κατά. Επιπλέον, η μοριακή εμφύτευση προσφέρει βελτιωμένο ρεύμα οδήγησης, ακριβή έλεγχο της εισερχόμενης δόσης, επαναληψιμότητα, και ομοιομορφία παρόμοια με την συμβατική ιοντική εμφύτευση^{39 40}. Πάντως, έρευνες έχουν δείξει⁴¹ πως τόσο το $B_{10}H_{14}$ όσο και το $B_{18}H_{22}$ παρουσιάζουν ελαφρώς μεγαλύτερο βάθος εμφύτευσης (σε ισοδύναμες ενέργειες) σε σχέση με αυτό του BF_2 .



Εικόνα 1.8 Επίπεδα συγκέντρωσης ενεργοποιημένων προσμίξεων ανάλογα με το είδος εμφύτευσης για διαφορετικές τεχνικές ανόπτησης [Borland^{xviii}]

Τέλος, αξίζει να αναφερθούν και οι τεχνικές προαμορφοποίησης του πυριτίου με μέσω εμφύτευσης ιόντων πυριτίου ή γερμανίου, προηγούνται της ιοντικής εμφύτευσης της πρόσμιξης. Στην περίπτωση που δεν έχει γίνει προαμορφοποίηση, το προσπίπτον ιόν είναι ιδιαίτερα πιθανό να βρει ένα ανοιχτό κανάλι στο κρυσταλλικό πλέγμα και να διεισδύσει αρκετά βαθιά, καθώς δεν συναντάει μεγάλη αντίσταση (φαινόμενο καναλισμού). Η διαδικασία αμορφοποίησης καταστρέφει την κρυσταλλική τάξη, μειώνοντας δραστικά την πιθανότητα διείσδυσης της πρόσμιξης σε μεγάλο βάθος. Το πρόβλημα αυτής της μεθόδου οφείλεται στην εμφάνιση έντονων φαινομένων απενεργοποίησης των προσμίξεων, στην περίπτωση ισχυρά νοθευμένων επαφών κατά την διάρκεια εφαρμογής θερμικών κύκλων μετά την ανόπτηση με χρήση laser (ιδιαίτερα στην περίπτωση που αυτή διεξήχθη σε καθεστώς μη τήξης). Τα φαινόμενα αυτά απενεργοποίησης θεωρείται ότι σχετίζονται με τον σχηματισμό ανενεργών συσσωματωμάτων Βορίου με ενδοπλεγματικές ατέλειες (Boron Interstitial Clusters, BIC's), ως αποτέλεσμα της απελευθέρωση ενδοπλεγματικών ατελειών

πυριτίου από τις ατέλειες εκτός προβεβλημένης εμβέλειας (end-of-range, EOR defects) κατά την διάρκεια της ανόπτησης⁴². Παρόλα αυτά, έχει δείχθει⁴³ ότι η συνεμφύτευση ατόμων άνθρακα μπορεί να μειώσει τα επίπεδα συγκέντρωσης των ειτεταμένων ατελειών. Μάλιστα, αυτή η μείωση είναι ανάλογη της δόσης άνθρακα που εμφυτεύεται, καθώς αυτά αποτελούν μια αποτελεσματική καταβόθρα για τις ενδοπλεγματικές ατέλειες. Η ευεργετική δράση της συνεμφύτευσης στην μείωση των προβλημάτων που δημιουργούνται με την διαδικασία της προαμορφοποίησης, έχει αποδειχθεί τόσο για την συμβατική RTA (Rapid Thermal Annealing)^{44 45}, όσο και για ανόπτηση με χρήση CO₂ laser⁴⁶. Μια πολύ πρόσφατη προσπάθεια⁴⁷, εστιάζει στην κατάλληλη εκμετάλλευση της κατανομής των πλεγματικών κενών (vacancy engineering), με στόχο την μείωση της διαχυτότητας, λόγω επανασυνδέσεων τους με ενδοπλεγματικά άτομα πυριτίου.

1.7 Θερμική ανόπτηση – Ιστορική επισκόπηση

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, οποιαδήποτε τεχνική εμφύτευσης και αν χρησιμοποιηθεί οδηγεί αναπόφευκτα και στην εισαγωγή καταστροφής στα πρώτα επίπεδα του κρυστάλλου, εξαιτίας της βίαιης φύσης της διαδικασίας εισαγωγής των προσμίξεων. Επιπλέον, τίποτα δεν μπορεί να προδικάσει ότι οι προσμίξεις θα καταλάβουν πλεγματικές θέσεις και επομένως θα συνεισφέρουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα της διάταξης. Λύση και στα δυο προβλήματα αποτελεί η θερμική ανόπτηση, και αυτό έγινε αντιληπτό από τα πρώτα κιόλας στάδια κατασκευής τρανζίστορ.

Η πρώτη απόπειρα ανόπτησης, υλοποιήθηκε με χρήση ειδικών φούρνων, και έμελλε να εδραιωθεί στην παραγωγή διατάξεων MOSFET για αριστέες δεκαετίες. Στην ουσία πρόκειται για διατάξεις με δυνατότητα να θερμάνουν δισκία πυριτίου στο θερμοκρασιακό εύρος των 800-1100°C. Ο χρόνος θέρμανσης καθώς και οι βαθμίδες ανόδου και καθόδου της θερμοκρασίας είναι παράμετροι οι οποίες μεταβλήθηκαν σημαντικά με την πάροδο του χρόνου και ανάλογα με τις κατασκευαστικές απαιτήσεις. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό όλων αυτών των διατάξεων είναι η βαθμίδα ανόδου της θερμοκρασίας μέχρι το επιθυμητό όριο. Μια τυπική βαθμίδα ανόδου της θερμοκρασίας για τους φούρνους πρώτης γενιάς ήταν της τάξης των 5-10°C/min, ενώ για τους πιο σύγχρονους, της τάξης των 100°C/min. Εδώ ακριβώς εντοπίζεται και το μεγάλο μειονέκτημα αυτών των μεθόδων όμως. Οι μεγάλοι χρόνοι θέρμανσης (από μερικές δεκάδες sec έως δεκάδες λεπτά) οδηγούν σε σημαντική διάχυση των προσμίξεων προς το βάθος του δισκίου, γεγονός τελείως ασύμβατο με την τεχνολογία ρηχών επαφών την οποία εμείς μελετάμε. Επιπλέον, η συμβατική θερμική ανόπτηση δεν είναι σε θέση να αποκαταστήσει όλη την καταστροφή που δημιουργήθηκε κατά την εμφύτευση. Αντιθέτως, οδηγεί στον σχηματισμό δευτερογενών ατελειών με επιβλαβείς συνέπειες στην λειτουργία της διάταξης.

Καθώς η διάχυση μιας πρόσμιξης είναι συνάρτηση του γινομένου του συντελεστή διάχυσης επί τον χρόνο ανόπτησης, η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής στην προσπάθεια της να ελαττώσει το τελικό βάθος της επαφής, στράφηκε από νωρίς σε λύσεις που θα μείωναν δραστικά τον χρόνο θέρμανσης. Η τεχνολογία που τελικά εδραιώθηκε στην παραγωγή ήταν η Ταχεία Θερμική Ανόπτηση, περισσότερο γνωστή ως RTA (Rapid Thermal Annealing). Μια τυπική διάταξη RTA συνίσταται σε μια συστοιχία λαμπτήρων πολύ υψηλής φωτεινότητας (κυρίως Xe), οι οποίοι λειτουργούν πρακτικά όπως το flash των φωτογραφικών μηχανών θερμαίνοντας ένα δισκίο πυριτίου

σε χρόνους πλησίον ή και μικρότερους από δευτερόλεπτο. Αν και οι διατάξεις αυτές συνέβαλλαν αποφασιστικά στην μείωση της διάχυσης, η λειτουργία τους χαρακτηρίζεται από σημαντικά μειονεκτήματα, μερικά εκ των οποίων είναι:

α) Αδυναμία πλήρους ελέγχου της θερμοκρασίας (παρά την χρήση οπτικής πυρομετρίας) καθώς και επίτευξης ομοιόμορφης θέρμανσης σε όλη την επιφάνεια του δισκίου.

β) Αν και η χρήση διατάξεων RTA οδήγησε σε σημαντική μείωση των φαινομένων διάχυσης σε σχέση με τις συμβατικές τεχνικές θέρμανσης, εντούτοις οι χρόνοι ανόπτησης πρέπει να ελαχιστοποιηθούν (στην περιοχή των μερικών millisecond) για να ανταποκριθούν στις πιεστικές απαιτήσεις όσον αφορά την διάχυση, που έχουν τεθεί για τις τελευταίες γενιές επεξεργαστών.

γ) Η λειτουργία RTA σχετίζεται με την εμφάνιση φαινομένων θερμικού σοκ, τα οποία μπορεί να οδηγήσουν στην εμφάνιση παραμορφώσεων ή ακόμα και μικρο-ρωγμών στον όγκο του δισκίου.

δ) Στην περίπτωση δισκίων στην επιφάνεια των οποίων έχουν ήδη σχηματισθεί δομές (patterns), μπορεί να παρουσιαστούν σημαντικά προβλήματα λόγω μεταβολών στην ανακλαστικότητα εξαιτίας των υπερκείμενων δομών, όπως θα αναφέρουμε και στη συνέχεια.

ε) Τέλος, εν αντιθέσει με τους συμβατικούς φούρνους οι οποίοι θερμαίνουν ταυτόχρονα εκατοντάδες δισκία, η RTA θερμαίνει μόνο ένα δισκίο κάθε φορά. Η αδυναμία της RTA για ταυτόχρονη θέρμανση πολλών δισκίων αποτελεί μεν μειονέκτημα, καθώς περιορίζει τον ρυθμό παραγωγής, αλλά από την άλλη πλευρά ελαχιστοποιεί την ενδεχόμενη οικονομική ζημιά που θα προέκυπτε από την καταστροφή μιας ολόκληρης σειράς δισκίων στην περίπτωση σφάλματος. Η σημασία του γεγονότος αυτού καθίσταται μεγαλύτερη αν αναλογιστούμε το τεράστιο κόστος των state-of-art δισκίων των 13 ιντσών.

Καθώς το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της διάχυσης γινόταν όλο και πιο πειστικό σε κάθε καινούργια γενιά μικροεπεξεργαστών, έγινε αντιληπτό ότι η έρευνα έπρεπε να στραφεί σε διατάξεις ικανές να οδηγήσουν σε πολύ μεγάλες βαθμίδες ανόδου και καθόδου της θερμοκρασίας. Αυτή η διαπίστωση συνέπεσε με την διάδοση συστημάτων laser, τα οποία ως γνωστόν, μπορούν να αποδώσουν μεγάλα ποσά ενέργειας σε χρόνους εξαιρετικά μικρότερους σε σχέση με οποιοδήποτε συμβατικό σύστημα θέρμανσης.

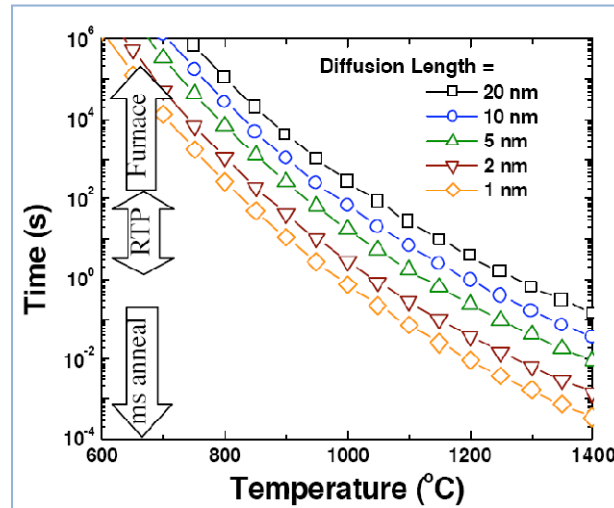
Έτσι λοιπόν, ήδη από τα μέσα του 1970^{48 49 50}, διάφοροι ερευνητές διερεύνησαν τη δυνατότητα χρήσης διατάξεων laser για να θερμάνουν πυρίτιο, με στόχο την αποκατάσταση της ζημιάς που είχε υποδεστεί το πλέγμα λόγω της διαδικασίας εμφύτευσης. Ακόμα νωρίτερα, στα τέλη της δεκαετίας του 1970, Σοβιετικοί επιστήμονες χρησιμοποίησαν διοδικά laser για την κρυστάλλωση δοκιμίων από άμορφο πυρίτιο⁵¹. Στις αρχές της επόμενης δεκαετίας, το έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον στράφηκε προς την κατανόηση και την μοντελοποίηση των θεμελειώδων μηχανισμών που κυβερνούν τις διαδικασίες ανόπτησης με laser⁵². Πράγματι, η ανόπτηση με laser παρέχει μια σειρά από πλεονεκτήματα, με κυριότερο την δυνατότητα επίτευξης υπερταχέων βαθμίδων θερμοκρασίας (μεγαλύτερη από 10^{10} °C/sec). Με τον τρόπο αυτό, ελαχιστοποιείται η εμφάνιση του φαινομένου TED και συνεπώς η διάχυση γιατί όπως εύκολα συμπεραίνει κανείς έχουμε αντίστοιχα πολύ μικρούς χρόνους θέρμανσης και ψύξης. Παρότι τα χαρακτηριστικά της ανόπτησης διέφεραν δραστηκά ανάλογα με τον τύπο του laser που δοκιμάστηκαν, όπως Excimer^{53 54} ^{55 56 57 58 59 60 61}, CO₂^{62 63 64 65 66 67 68 69}, Nd:YAG⁷⁰, κ.α. σε παλμική ή συνεχή λειτουργία, υπήρχε πάντοτε ένα κοινό στοιχείο: η ανόπτηση οδηγούσε σε τήξη των πρώτων στρωμάτων του πυρίτιου. Η

επαναστερεοποίηση από την διεπιφάνεια I-Si/c-Si προς την επιφάνεια του δισκίου οδηγούσε σε μια επανακρυσταλλοποίηση “στρώμα-στρώμα”. Συνεπώς, αποκαθίστανται μεν οι κατεστραμμένες περιοχές, αλλά αυτό όμως είχε ως αποτέλεσμα την διάχυση των προσμίξεων ακόμα και πέρα από διεπιφάνεια στερεού/τηγμένου πυριτίου, λόγω της πολύ μεγαλύτερης διαχυτότητας των προσμίξεων μέσα στο υγρό πυρίτιο. Επιπλέον, η ανόπτηση σε καθεστώς τήξης μπορεί να προκαλέσει παραμορφώσεις στις υπερκείμενες δομές που έχουν σχηματιστεί μέσω λιθογραφικών διεργασιών λόγω της τήξης της πύλης αλλά και του υποστρώματος πυριτίου που βρίσκεται κάτω από το οξείδιο απομόνωσης^{71 72}. Όλα τα παραπάνω λοιπόν γέννησαν την ανάγκη για εξέλιξη της ανόπτησης με χρήση laser από καθεστώς τήξης σε καθεστώς μη τήξης. Έτσι η βασική στρατηγική ανόπτησης αποβλέπει στην εισαγωγή του ελάχιστου δυνατού ποσού θερμότητας έτσι ώστε να επιτυγχάνονται όσο το δυνατόν μεγαλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης των προσμίξεων, ελαχιστοποιώντας ή ακόμα και μηδενίζοντας την διάχυση. Όπως και με την ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης, μια σειρά από διαφορετικά είδη laser διερευνήθηκαν, όπως Excimer^{73 74 75 76}, CO₂^{77 78 79}, ASLA⁸⁰, διοδικά⁸¹ αλλά και συνδυασμοί αυτών με spike ή flash annealing⁸². Αν λάβουμε υπόψη τις διαφορετικές τεχνικές εμφύτευσης που χρησιμοποιήθηκαν κάθε φορά, είναι πραγματικά δύσκολο να δοθεί μια συγκεντρωτική αναφορά για το ποιος συνδυασμός τεχνικών εμφύτευσης και ακτινοβολήσης είναι ο πιο αποδοτικός, καθώς κάθε προσέγγιση παρουσιάζει τα δικά της πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Η διαδικασία εξαγωγής συμπερασμάτων για το ποια είναι η βέλτιστη λύση μέσω της βιβλιογραφικής αναζήτησης καθίσταται ακόμα πιο δύσκολη από το γεγονός ότι στις περισσότερες αναφορές δεν δίνεται έμφαση στα μειονεκτήματα της εκάστοτε τεχνικής, ενώ οι εταιρίες του χώρου (οι οποίες και προφανώς διαθέτουν την τεχνολογική υπεροχή) είναι ιδιαίτερα φειδωλές σε ότι αφορά την πληροφορία που παρέχουν για λόγους βιομηχανικής κατασκοπίας. Παρόλα αυτά, θα επιχειρήσουμε να συνοψίσουμε μερικά από τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά των τεχνικών ανόπτησης.

Η RTA δεν είναι σε θέση να ανταποκριθεί στις απαιτήσεις για την ελαχιστοποίηση της διάχυσης, ενώ επιτυγχάνει χαμηλά επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης λόγω των χαμηλών ορίων στερεάς διαλυτότητας. Απαιτούνται υψηλότερες θερμοκρασίες ανόπτησης σε σχέση με αυτές που επιτυγχάνουν οι σύγχρονες διατάξεις RTA, αλλά η μεγάλη διάρκεια ανόπτησης θα προκαλούσε πολύ βαθιά προφίλ. Η εικόνα 1.9 δείχνει ότι για τον περιορισμό της διάχυσης στα 2 nm, απαιτείται ανόπτηση σε χρόνους millisecond για θερμοκρασίες πάνω από τα 1250°C.

Η χρήση spike προσφέρει υψηλούς ρυθμούς ανόδου της θερμοκρασίας, ικανές μεν να καλύψουν τις απαιτήσεις για τον τεχνολογικό κόμβο των 45 nm, αλλά όχι για τις επόμενες γενιές, ιδιαίτερα λόγω της εμφάνισης του φαινομένου TED. Οι τεχνικές flash και laser διαφαίνονται ως οι πιο πιθανοί αντικαταστάτες των συμβατικών τεχνικών RTA και Spike, καθώς είναι οι μοναδικές που μπορούν να προσφέρουν σημαντική ενεργοποίηση των προσμίξεων με ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση της διάχυσης. Η μέθοδος flash στηρίζεται στην χρήση μιας συστοιχίας λαμπτήρων τύπου flash οι οποίοι πυροδοτούνται μέσω παλμών υψηλής τάσης, έτσι ώστε να επιτευχθούν χρόνοι ανόπτησης στην τάξη των ms^{83 84}. Η ανόπτηση με χρήση laser σε καθεστώς nanosecond, είναι μια μετασταθής διαδικασία κατά την οποία οι προσμίξεις μπορούν να βρεθούν σε πλεγματικές θέσεις σε συγκεντρώσεις σημαντικά υψηλότερες από το όριο στερεάς διαλυτότητας⁸⁵. Παρόλα αυτά υπάρχει σκεπτικισμός σχετικά με το γεγονός ότι αυτές οι διαδικασίες παρασκευής αυτές δεν είναι ώριμες

τεχνολογικά. Σε κάθε περίπτωση όμως είναι ικανές να θερμάνουν το υπόστρωμα πυριτίου σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Η εικόνα 1.9 παρουσιάζει τις διαφοροποιήσεις στις θερμοκρασίες και τους χρόνους ανόπτησης ανάμεσα στις συμβατικές (φούρνοι, RTA και spike) και τις προηγμένες τεχνικές (flash και laser). Με την χρήση των τελευταίων είναι εφικτή η θέρμανση σε υψηλές θερμοκρασίες ($T > 1200^{\circ}\text{C}$) για την επίτευξη υψηλών επιπέδων ενεργοποίησης, διατηρώντας παράλληλα τους χρόνους ανόπτησης σε πολύ μικρές τιμές για τον περιορισμό της διάχυσης. Μια ακόμα βασική διαφοροποίηση έγκειται στο γεγονός ότι οι προηγμένες τεχνικές θερμαίνουν μόνο την επιφάνεια του δισκίου, εν αντιθέσει με τις συμβατικές που οδηγούν σε θέρμανση ολόκληρου του όγκου.

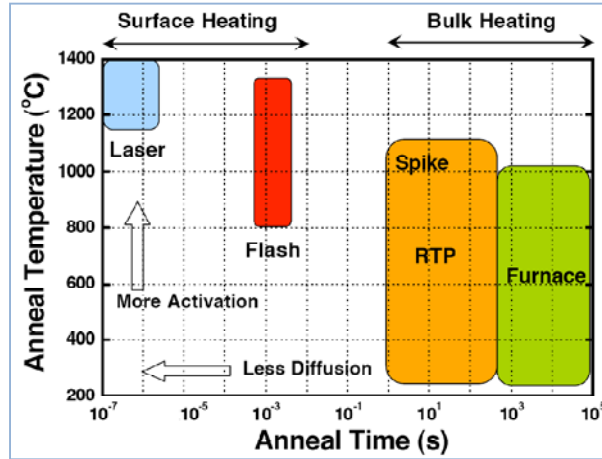


Εικόνα 1.9 Κριτήρια του ποσού θερμότητας που εισάγεται για διαφορετικά μήκη διάχυσης του Βορίου $(Dt)^{1/2}$. Ανοπτήσεις υψηλής θερμοκρασίας σε καθεστώς millisecond μπορούν να προσφέρουν υψηλά επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης με ελάχιστη μετακίνηση του προφίλ συγκέντρωσης [Pankaj Kalra, PhD Thesis].

Τέλος, η επιταξιακή ανάπτυξη σε στερεά φάση (Solid State Epitaxial Regrowth, SPER) αποτελεί έναν ακόμα πιθανό υποψήφιο για την κατασκευή ρηχών επαφών. Τα κυριότερα πλεονεκτήματα της μεθόδου είναι η επίτευξη επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης πάνω από το όριο σε ισορροπία, ο ακριβής έλεγχος του βάθους επαφής και η χαμηλή θερμοκρασία ανόπτησης (περίπου 650°C)⁸⁶. Το μεγαλύτερο μειονέκτημα της είναι η σχετικά μεγάλη τιμή πυκνότητα ατελειών που παραμένουν μετά την ανόπτηση, η οποία οδηγεί σε μεγάλες διαρροές στην επαφή.

Τέλος, ακόμα και τώρα, η έρευνα για την ανόπτηση τύπου spike ή flash δεν έχει σταματήσει, αλλά πλέον έχει στραφεί σε χρόνους της τάξης του ms για να ανταποκριθεί στις απαιτήσεις για την ελαχιστοποίηση της διάχυσης^{87 88}.

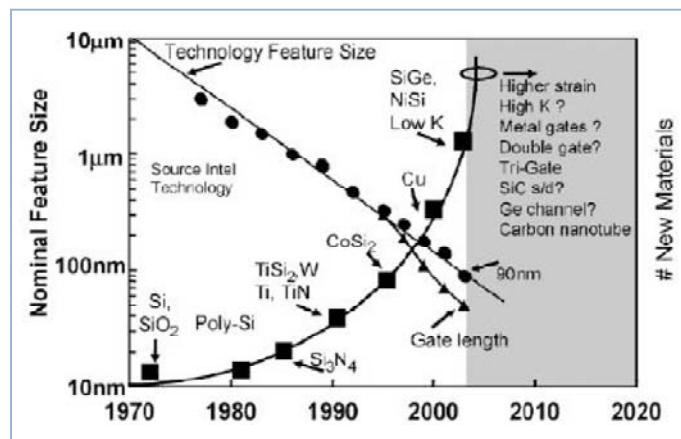
Στην εικόνα 1.10 παρουσιάζεται ένα συγκεντρωτικό διάγραμμα της θερμοκρασίας και χρόνου θέρμανσης, ανάλογα με την αντίστοιχη τεχνολογία ανόπτησης που χρησιμοποιείται. Τα βέλη υποδεικνύουν την κατεύθυνση κατά την οποία ενισχύονται τα επίπεδα ηλεκτρικής αγωγιμότητας και της ελαχιστοποίησης της διάχυσης.



Εικόνα 1.10 Τιμές θερμοκρασίας και χρόνου θέρμανσης για διάφορες συμβατικές και προηγμένες μεθόδους ανόπτησης [Pankaj Kalra, PhD Thesis].

1.8 Τεχνολογίες που εφαρμόζονται στα σύγχρονα MOSFET

Καθώς η σμίκρυνση του μήκους της πύλης συνεχίζει να διαδραματίζει κυρίαρχο ρόλο στην απαιτήσις για τις νεότερες τεχνολογικές γενιές τρανζίστορ, αναμένεται πως οι παρούσες τεχνολογίες high-k/metal δεν θα είναι σε θέση από μόνες τους να προσφέρουν επαρκή έλεγχο απέναντι σε φαινόμενα βραχυκύκλωσης (short channel effect) από τον κόμβο των 45 nm και μετά. Έτσι λοιπόν η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής θα πρέπει αναπόφευκτα να στραφεί σε ριζοσπαστικές λύσεις, οι οποίες δεν θα στηρίζονται μόνο στην κλιμακούμενη μείωση των ελάχιστων χαρακτηριστικών μεγεθών. Πριν όμως προχωρήσουμε στην παρουσίαση τους, αξίζει να γίνει μια σύντομη αναφορά σε δυο τεχνολογίες οι οποίες βρίσκονται ήδη σε παραγωγή προεκτείνοντας για μερικά ακόμα έτη τον χρόνο ζωής των στρατηγικών κατασκευής που βασίζονται στην μείωση των χαρακτηριστικών διαστάσεων. Η εικόνα 1.11 παρουσιάζει τα βασικότερα υλικά που εισήχθησαν από την Intel μαζί με τα αντίστοιχα χαρακτηριστικά μεγέθη για κάθε γενιά.

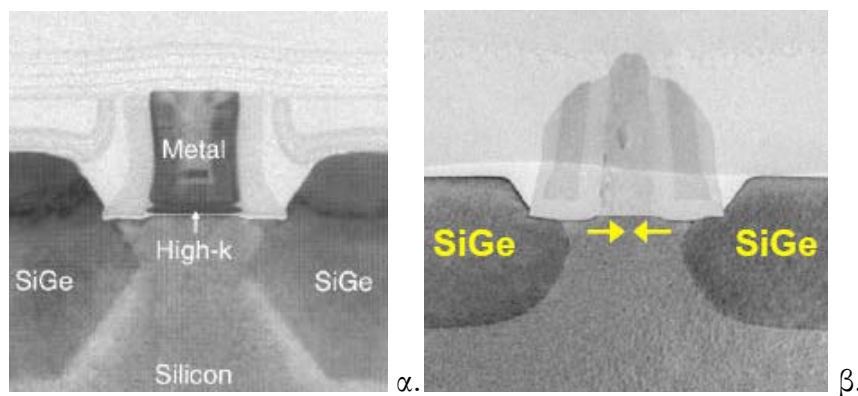


Εικόνα 1.11 Χαρακτηριστικό μέγεθος και νέα υλικά που εισήχθησαν από την Intel με την χρονιά παραγωγής⁸⁹

- **Χρήση υλικών υψηλής διηλεκτρικής σταθεράς στην πύλη**

Όπως προαναφέρθηκε, το σημαντικότερο πρόβλημα που αντιμετωπίστηκε στην διαδικασία κατασκευής των δυο προηγούμενων γενεών επεξεργαστών (στα 90 και 65 nm) ήταν τα φαινόμενα

βραχυκύκλωσης από την πύλη στο κανάλι λόγω της μείωσης του πάχους του οξειδίου. Η αντικατάσταση του SiO_2 από υλικά με υψηλότερη διηλεκτρική σταθερά θα μπορούσε να δώσει την λύση στα περισσότερα από τα προαναφερθέντα προβλήματα^{90 91}. Διάφορα υλικά έχουν προταθεί, ξεκινώντας από αυτά που είχαν χρησιμοποιηθεί ήδη σε διατάξεις μνήμων, όπως τα Ti_2O_5 ⁹², SrTiO_3 ⁹³ και Al_2O_3 ⁹⁴ τα οποία παρουσιάζουν τιμές διηλεκτρικής σταθεράς από 10 έως 80. Με εξαίρεση όμως τα δυο τελευταία, τα οξείδια αυτά δεν είναι θερμοδυναμικά σταθερά, όταν έρχονται σε απευθείας επαφή με το πυρίτιο, και επομένως είναι ακατάλληλα για να αντικαταστήσουν το SiO_2 . Μετά από αρκετές προσπάθειες το ερευνητικό ενδιαφέρον εστιάστηκε στα μεταλλικά οξείδια της IV-B ομάδας και κυρίως στο οξείδιο του Χαφνίου (HfO_2)^{95 96 97 98 99 100}, κάτι που έλυσε σε μεγάλο βαθμό τα προαναφερθέντα προβλήματα, αφού η πολύ μεγάλη τιμή διηλεκτρικής σταθεράς του (25 σε σχέση με τα 3.4 του SiO_2), επιτρέπει την επίστρωση υμενίων με σημαντικά μεγαλύτερο πάχος (εξασφαλίζοντας την λειτουργία του ως μονωτή στην κατάσταση “OFF”) που ταυτόχρονα όμως άγουν αποτελεσματικά το ρεύμα όταν το MOSFET βρίσκεται στην κατάσταση “ON”. Λόγω του αυξημένου πάχους τα ρεύματα διαρροής μπορούν να μειωθούν ακόμα και κατά δυο τάξεις μεγέθους σε σχέση με τα συμβατικά οξείδια. Μερικά ακόμα από τα πλεονεκτήματα του HfO_2 είναι το μεγάλο του ενεργειακό χάσμα (περίπου 5.5eV), τα μεγάλα band offsets με το πυρίτιο, η σταθερότητα που επιδεικνύει στις υψηλές θερμοκρασίες και η ευκολία στην κατεργασία του. Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά οδήγησαν στην υιοθέτηση του HfO_2 στην διαδικασία παραγωγής μικροεπεξεργαστών από τον τεχνολογικό κόμβο των 45 nm και μετά (εικόνα 1.12.β).



Εικόνα 1.12 α) Διάταξη High-K/μετάλλου που χρησιμοποιείται σε τρανζίστορ στα 45nm από την Intel¹⁰¹
β) Μικρογραφία TEM ενός pMOSFET στα 90nm της Intel¹⁰², στο οποίο επιταξιακό υμένιο από SiGe έχει ενσωματωθεί στην διάταξη της πηγής απαγωγού για να εισάγει συμπιεστική τάση στο κανάλι.

▪ Πυρίτιο υπό τάση

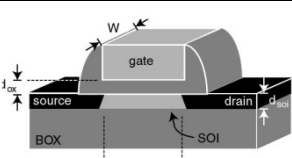
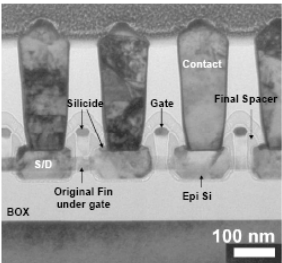
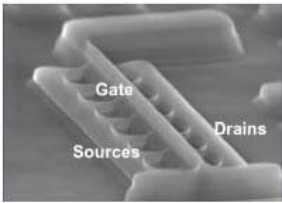
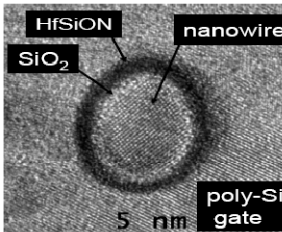
Πριν όμως προχωρήσουμε στην παρουσίαση τους, αξίζει να γίνει μια σύντομη αναφορά σε μια τεχνολογία η οποία βρίσκεται ήδη σε παραγωγή (ήδη από τον τεχνολογικό κόμβο των 90nm τόσο από την INTEL όσο και από την AMD), αυτή του πυριτίου υπό τάση^{103 104 105}. Η ιδέα αντικατάστασης του απλού πυριτίου από πυρίτιο υπό τάση (strained silicon) πηγάζει από το γεγονός, ότι το τελευταίο παρουσιάζει υψηλότερες τιμές ευκινησίας αλλά και ταχύτητες κορεσμού ακόμα και σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Η αύξηση των σχετικών αποστάσεων μεταξύ των ατόμων του κρυσταλλικού πλέγματος καθίσταται δυνατή μέσω εναπόθεσης ενός στρώματος

πυριτίου επί ενός υποστρώματος SiGe. Σύμφωνα με την IBM, η τεχνολογία πυριτίου υπό τάση επιτυγχάνει αύξηση των επιδόσεων έως και 35%.

1.9 Το παρόν και το (προσεχές) μέλλον των ημιαγωγικών δομών

Αν και αυτές οι τεχνολογίες κατάφεραν να βελτιώσουν σημαντικά την λειτουργία των επίπεδων MOS διατάξεων, θεωρείται βέβαιο ότι δεν μπορούν να αποτρέψουν τα τεράστια προβλήματα με τα οποία θα βρεθεί αντιμέτωπη η επίπεδη τεχνολογία κατά την ενσωμάτωση της στις μελλοντικές γενιές επεξεργαστών. Ως εκ τούτου, εδώ και αρκετά χρόνια η έρευνα έχει στραφεί σε πρωτοποριακές διατάξεις με δομές που θα διαφέρουν ριζικά με ότι χρησιμοποιείται έως και σήμερα. Μέσα από το πλήθος των λύσεων που έχουν προταθεί, ξεχωρίζουν οι ultra-thin-body SOI, FinFET, Trigate και Silicon Nanowire διατάξεις¹⁰⁶. Στον πίνακα 1.II παρουσιάζονται τα βασικά χαρακτηριστικά της κάθε προσέγγισης μαζί με μια σχηματική αναπαράσταση.

Πίνακας 1.II Προτάσεις για μελλοντικά transistor

| | Σχηματική αναπαράσταση | Βασικά Χαρακτηριστικά |
|----------|---|---|
| UTB SOI |  | Επίπεδα τρανζίστορ, όμοια με τα συμβατικά MOSFET αλλά κάτω από τις επαφές υπάρχει ένα στρώμα μονωτή (SiO ₂), το οποίο εμποδίζει εμφάνιση ρευμάτων διαρροής, ειδικά στην κατάσταση OFF ¹⁰⁷ . Εξέλιξη της SOI αποτελεί η Ultra-thin-body SOI στην οποία ο πάχος του καναλιού δεν ξεπερνά το 1nm ^{108 109} . |
| FinFET |  | Τρισδιάστατες (non planar) δομές που ενσωματώνουν δυο πύλες που περιβάλλουν ένα fin ^{110 111 112 113} . Βελτίωση των ηλεκτροστατικών χαρακτηριστικών μέσω μιας δεύτερης πύλης, η οποία κάνει screen το πεδίο του απαγωγού. Οι δυο πύλες προσφέρουν καλύτερο έλεγχο του short channel φαινομένου, μείωση του DIBL, ενώ ειδικά τα pFET εμφανίζουν σημαντική ενίσχυση της ευκινησίας των οπών. Οι διαστάσεις του fin, καθορίζουν το ενεργό μήκος καναλιού της διάταξης. Ιδιαίτερα σημαντικό ήταν το ζήτημα της ευθυγράμμισης των πυλών με τις εμφυτευθείσες περιοχές ¹¹⁴ , που λύθηκε μέσω αυτό - ευθυγράμμισης ^{115 116} . Μέχρι στιγμής διατάξεις FinFET με μήκος πύλης 18nm και πάχος οξειδίου πύλης 2.5nm έχουν επιδειχτεί πειραματικά ¹¹⁷ |
| Trigate |  | Τα FET's τριπλής πύλης ή trigate ¹¹⁸ είναι παραλλαγή των FinFET's με την διαφορά ότι το ρεύμα κυκλοφορεί επίσης και στο πάνω μέρος του Fin, με αποτέλεσμα την μείωση της παρασιτικής χωρητικότητας ανάμεσα στην πύλη και στον απαγωγό. Σύμφωνα με την INTEL ^{119 120} , τα τρανζίστορ αυτά παρουσιάζουν μικρότερες διαρροές αλλά και κατανάλωση σε σχέση με τα συμβατικά MOSFET. |
| Nanowire |  | Τα FET τύπου νανοσωλήνα πυριτίου ^{121 122} οι οποίοι περιβάλλονται από μια αγωγίμη πύλη παρέχουν τον απόλυτο έλεγχο επί της λειτουργίας του καναλιού. Η ομοαξονική γεωμετρία ανοίγει νέους ορίζοντες για λιγότερο επιθετική σμίκρυνση του διηλεκτρικού πύλης λόγω της λογαριθμικής εξάρτησης της χωρητικότητας πύλης από το πάχος του διηλεκτρικού. Η σημαντικότερη πρόκληση που πρέπει να αντιμετωπιστεί είναι η μείωση των διακυμάνσεων στην κατασκευή τους. |

Πέραν των παραπάνω προσεγγίσεων αξίζει να αναφερθούμε και στην προσπάθεια που γίνεται για την αντικατάσταση του πυριτίου (το οποίο συνεχίζει να αποτελεί το κυρίαρχο υλικό σε όλες τις προαναφερθείσες προσεγγίσεις) με το γερμάνιο. Η αλήθεια είναι ότι αυτή η ιδέα μόνο καινούργια δεν είναι: τα πρώτα τρανζίστορ ημιαγωγού που κατασκευάστηκαν από τους Shockley, Bardeen και Brattain στα Bell Laboratories το 1948, ήταν βασισμένα σε γερμάνιο και όχι πυρίτιο. Οι λόγοι για τους οποίους η έρευνα ξεκίνησε από το γερμάνιο και όχι από το υλικό που τελικά κυριάρχησε, το πυρίτιο, μπορούν να αναζητηθούν στην μεγαλύτερη ευκινησία του πρώτου έναντι του δεύτερου (δυο φορές για τα ηλεκτρόνια και τέσσερες για τις οπές) και στο μικρότερο ενεργειακό χάσμα (0.67 eV έναντι 1.12 eV σε θερμοκρασία δωματίου. Παρά τα καλύτερα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά του, το γερμάνιο σύντομα τέθηκε στο περιθώριο λόγω των κακών ιδιοτήτων που έχει το ενδημικό οξείδιο (native oxide, κακές ηλεκτρικές και μονωτικές ιδιότητες και μικρή μηχανική αντοχή). Αντιθέτως, το ενδημικό οξείδιο του πυριτίου έχει εξαιρετικές ιδιότητες, οι οποίες του επέτρεψαν να καθιερωθεί ως το ημιαγωγικό υλικό των διατάξεων MOSFET. Πάντως τα τελευταία χρόνια, και καθώς τα προβλήματα που υπήρχαν με το SiO₂ έθεταν υπό αμφισβήτηση το μέλλον του πυριτίου, το ερευνητικό ενδιαφέρον στράφηκε ξανά στο γερμάνιο και ιδιαίτερα στην ανάπτυξη διεργασιών κατασκευής high-k διηλεκτρικών πύλης, με ενθαρρυντικά αποτελέσματα^{123 124 125 126}.

Σε κάθε περίπτωση, κανείς δεν μπορεί να προδικάσει με ασφάλεια ποιο θα είναι το μέλλον (με ορίζοντα δεκαετίας), καθώς αυτοί που θα καθορίσουν σε τελική ανάλυση το τι θα συμβεί, είναι αποκλειστικά οι μεγάλοι παίκτες της βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής (INTEL, AMD, IBM, SOITEC, Freescale, Motorola κ.α.), οι οποίοι φυσικά κρατούν την εξέλιξη των βασικότερων τεχνολογιών τους, ως επτασφράγιστο μυστικό.

1.10 Ανακεφαλαίωση

Η σμίκρυνση κλίμακας αποτελεί την κινητήρια δύναμη πίσω από τα τεχνολογικά επιτεύγματα της βιομηχανίας ημιαγωγών κατά τις τελευταίες δεκαετίες. Για να καταστεί εφικτή η ελαχιστοποίηση των φαινομένων βραχυκύκλωσης στο κανάλι, είναι αναγκαία η αναλογική μείωση του πάχους του οξειδίου της πύλης καθώς και του βάθους επαφής της πηγής και του απαγωγού. Επιπλέον, καθώς οι διαστάσεις των MOSFET's μειώνονται δραματικά, η αντίσταση επαφής ανάμεσα στο silicide και στην πηγή και τον απαγωγό περιορίζει τα όρια της απόδοσης του τρανζίστορ. Για να αντιμετωπιστούν τα προβλήματα αυτά απαιτείται η δημιουργία υπερ-ρηχών επαφών η οποίες να εμφανίζουν υψηλά ποσοστά ενεργοποίησης. Για να γίνει εφικτή η κατασκευή επαφών που να πληρούν τα χαρακτηριστικά αυτά είναι απαραίτητη η συνδυασμένη χρήση τεχνολογιών αιχμής, τόσο όσον αφορά την εμφύτευση των προσμίξεων, όσο και στην ανόπτηση. Η διατριβή αυτή πραγματεύεται την χρήση δυο διαφορετικών προσεγγίσεων για την ανόπτηση με laser για την επίτευξη υψηλών επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης και θεραπείας του κρυστάλλου με ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση της διάχυσης, σε δείγματα που έχουν υποστεί εμφύτευση με την τεχνική PLAD.

Βιβλιογραφικές αναφορές 1^{ου} κεφαλαίου

“Silicon VLSI Technology”, J.D. Plummer et al, εκδόσεις Prentice Hall 2000.

“Advanced Source/Drain Technologies for Nanoscale CMOS”, Pankaj Kalra, PhD dissertation University of California, Berkeley 2008.

¹ White Paper: Introduction to Intel’s 32nm Process Technology

² G. E. Moore, *IEEE ISSCC Tech. Digest*, pp. 20-23, 2003.

³ International Technology Roadmap for Semiconductors: www.itrs.net

⁴ G.E. Moore, *Electronics*, p. 114-117 (1965)

⁵ *IEEE Spectrum*, Vol. 45, no 5 (INT), May 2008, p. 40

⁶ U.S. Patent 3,102,230 (filed in 1960, issued in 1963)

⁷ D. Kahng and M. M. Atalla: Proc. IRE-AIEE Solid State Device Res. Conf. Pittsburgh, PA (1960)

⁸ Z. H. Liu, C. Hu, J. H. Huang et al., *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 40, pp. 86-95, 1993.

⁹ Siva G. Narendra and Anantha Chandrakasan (Editors) (2006). “*Leakage in Nanometer CMOS Technologie*”s. Springer Publications. p. 307.

¹⁰ Yannis Tsividis (1999). “*Operational Modeling of the MOS Transistor*” (Second Edition ed.). New York: McGraw-Hill. p. 268

¹¹ T. C. Chien, *ESSDERC 2009 - Proceedings of the 39th European Solid-State Device Research Conference*, pp. 1-5

¹² M.bohr, P. Chau, T. Ghani, K. Mistrym, *IEEE Spectrum OCT* (2007)

¹³ H. Iwai, *Solid-State Electron*, **48** 497 (2003)

¹⁴ D. Frank, R. Dennard, E. Nowak et al., *Proc. IEEE* **89** 259 (2001)

¹⁵ P. D. Agnello, *IBM J. Res. Dev*, vol. 46, no. 2/3, pp. 317-338, 2002.

¹⁶ K. Tsutsui, M. Watanabe, Y. Nakagawa et al, *ESSDERC 2008 - Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference*, art. no. 4681719, pp. 142-145

¹⁷ D. Lenoble, A. Grouillet, *Surf. And Coat. Technol.* **156** (2002) 262-266

¹⁸ A. Agarwal and M. J. Kushner *IEEE Trans. Plasma Sci*, vol. **33**, no 2, April 2005

¹⁹ S.R. Walther, S. Mehta, U. Jeong et al., *Surf. & Coat. Tech.* **186** (2004) 68– 72

²⁰ P. K. Chu, *Plasma Phys. Control. Fusion* **45** (2003) 555–570

²¹ N. W. Cheung, *Mater. Chem. Phys.* **46** 132 (1996)

²² N. W. Cheung, *Surf. Coat. Technol.* **156** 24 (2002)

²³ B. Mizuno, I. Nakayama, N Aoi et al., *Appl. Phys. Lett.* **53**, 2059 (1988)

²⁴ B. Mizuno and Y. Sasaki, *Proc. of 15th IEEE Int. Conf. on Adv. RTP of Sem.*, Catania 2007 p.1

²⁵ G.Kerrien, T.Sarnet, D.Debarre et al., *Thin Solid Films* 453 – 454 (2004) 106–109

²⁶ G.Kerrien, J. Boulmer, D.Debarre, et al., *Appl. Surf. Sci.* **186** (2002) 45.

²⁷ P.G. Carey, T.W. Sigmon, *Appl. Surf. Sci.*, Volume 43, Issues 1-4, (1989), 325-332

²⁸ J. O. Borland, *Proc. of 15th IEEE Int. Conf. on Adv. RTP of Sem.*, Catania 2007, p.181

²⁹ R. G. Wilson, *J. Appl. Phys.*, **54**, 6879 (1983).

³⁰ D. F. Downey, J. W. Chow, E. Ishida et al., *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1263(1998).

³¹ Y. J. Park and J. J. Kim, *J. Appl. Phys.*, **85**, 803 (1999).

- ³² K. Ohyu, T. Itoga, and N. Natasuaki, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, **29**, 457 (1990).
- ³³ 15. D. Fan, J. M. Parks, and R. J. Jaccodine, *Appl. Phys. Lett.*, **5**, 1212 (1991)
- ³⁴ L. Y. Kransnobaev, N. M. Omelyanovskaya, and V. V. Makarov, *J. Appl. Phys.*, **74**, 6020 (1993).
- ³⁵ H. A. W. El Mubarek, J. M. Bonar, G. D. Dilliway et al., *J. Appl. Phys.*, **96**, 4114 (2004).
- ³⁶ L. S. Robertson, P. N. Warnes, M. E. Law et al., *Proc. of the Int. I Conf. on Ion Impl. Tech.*, p. 171 (2000).
- ³⁷ D. Lee, S. Baek, S. Heo, *Electrochem. Solid-State Lett.*, **9** 1 G19-G21 (2006).
- ³⁸ R.P. Webb, S.H. Winston, R.M. Gwilliam et al., *Nucl. Instr. Meth. B* 202 (2003) 143–148
- ³⁹ W. Krull, B. Haslam, T. Horsky et al., *Int. Conf. Ion Implantation Technology Proc.*, pp. 182-185, 2006.
- ⁴⁰ L. M. Rubin, M. S. Ameen, M. A. Harris et al., *Int. Workshop Junction Technology*, pp. 113-118, 2007.
- ⁴¹ A. Mineji, J. Borland, S. Shishiguchi et al., *the 7th Int. Workshop on Junc. Tech. (IWJT 2007)*, 2007 in Kyoto, Japan, p.73.
- ⁴² R. A. Camillo-Castillo, M. E. Law et al, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 232104 (2006).
- ⁴³ M. Craig, A. Sultan, and S. Banerjee, *Proc. of 11th Int. Conf. on Ion Impl. Tech.*, 1996, p. 665
- ⁴⁴ A. Cacciato, J. G. E. Klappe, N. E. B. Cowern et al., *J. Appl. Phys.* **79**, 2314 (1996).
- ⁴⁵ P. A. Stolk, D. J. Eagleshom, H.-J. Grossmann et al., *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1370 (1995).
- ⁴⁶ C. H. Poon, A. See, Y. Tan, *J. Appl. Phys.* **103**, 084906 (2008).
- ⁴⁷ Claverie, A., Cristiano, F., Gavelle, et al., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, volume 1070. MRS (2008).
- ⁴⁸ G.A. Kachurin, N.B. Pridachin and L.S. Jmimov, *Fig. Tekh. Poluprov.*, **9** (1975) 1429.
- ⁴⁹ I.B. Khaibullin, E.I. Shtyrkov, M.M. Zaripov et al., *Laser Annealing of implanted Layers*, VINITI N (1974) 2061-74.
- ⁵⁰ Pilipovic, V. A. (1975). *Zhurnal Prikladnoi Spektroskopii*, **22**:431.
- ⁵¹ Kutolin, S. A. and Kompanec, V. (1969). Number 869. *Novosibirsk*.
- ⁵² Poate, J. M. and Mayer, J. W. (1982). *Laser Annealing of Semiconductors*. Academic Press, N.Y.
- ⁵³ I.B. Khaibullin, V.V. Titov, E.I. Shtyrkov, in: J. Gyulai, T. Lohner, E. Pastor (Eds.), *Proc. Int. Conf. Ion Implantation*, Budapest, pp. 212, 1973.
- ⁵⁴ G. Foti, E. Rimini, E. Vitali, M. Bertolotti, *Appl. Phys. Lett.* **14** (1977) 189.
- ⁵⁵ X. Zhang, J.R. Ho, C.P. Grigoropoulos, *Int. J. Heat. Mass Transfer* **39** (1996) 91.
- ⁵⁶ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* **124–125** (2005) 228–231
- ⁵⁷ J. Venturini, M. Hernandez, G. Kerrien et al., *Thin Solid Films* **453–454** (2004) 145–149
- ⁵⁸ V. Privitera, A. La Magna, G. Fortunato et al., *Mat. Sci. Eng. B* **114–115** (2004) 92–99
- ⁵⁹ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* **114–115** (2004) 114–117
- ⁶⁰ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* **124–125** (2005) 232–234
- ⁶¹ F. Torregrosa, C. Laviron, F. Milesi et al., *Nucl. Instr. Meth. B* **237** (2005) 18–24
- ⁶² G.K. Celler, R. Borutta, W.L. Brown et al., *Laser-solid interactions and laser proceedings 1978*, edited by S.D. Ferris et al. (AIP, New York, 1979), p. 381
- ⁶³ M. Takai, P.H. Tsien, S.C. Tsu et al., *Appl. Phys.* **22**, 129 (1980)
- ⁶⁴ R.B. James, G.D. Jeist, R.T. Young et al., *J. Appl. Phys.* **62** (7) 1987 p. 2981
- ⁶⁵ M. Blomberg, K. Naukarinen, T. Tuomi et al. *J. Appl. Phys.* **54** (1983) 2327
- ⁶⁶ A. Bhattacharyya, B.G Streetman, *Sol. State Com.*, **36** (1980) 671-675
- ⁶⁷ A. Bhattacharyya B.G. Streetman, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **14** (1981) L67-72.
- ⁶⁸ J. Narayan, R.B. James, O.W. Holland et al. *J. Vac. Sci. Technol. A* **3**(4) (1985) 1836
- ⁶⁹ P.H. Tsien, J. Gotzlich, H. Ryssel et al., *J. Appl. Phys.* Vol. **53** (1) (1982) 663
- ⁷⁰ P. Baeri, E. Rimini, *Materials Chemistry and Physics* **46** (1996) 169-177

- ⁷¹ C.G. Jin, Y. Sasaki, K. Okashita et al., *Nucl. Instr. Meth. B* 237 (2005) 58–61
- ⁷² A. Shima, H. Ashihara, A. Hiraiwa et al., *IEEE Trans. Electron Devices* **52**, 1165 (2005).
- ⁷³ Susan Earles, Mark Law, Kevin Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 669 2001
- ⁷⁴ S. Earles, M. Law, K. Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp.* Vol. 610 (2000)
- ⁷⁵ K.K. Ong et al., *Appl. Phys. Lett.* 89, 082101 (2006).
- ⁷⁶ D. Lee, S. Baek, S. Heo et al., *Elect. Sol. State Lett.* 9 (1) G19-G21 (2006).
- ⁷⁷ S.B. Felch, D.F. Downey et al., *Proceedings of the ICIT* (2000) 167
- ⁷⁸ T. Ito et al., *Ext. Abs. of 5th Intel Workshop on Junction Technol.* (Osaka 2005) 59
- ⁷⁹ K. Adashi et al., *Symp. VLSI Tech. Dig.*, (2005) 142
- ⁸⁰ K. Yamazaki, T. Kudo, K. Seike et al., *Dig. Tech. Pap.* (2002) 149.
- ⁸¹ A. Colin, P. Morin, F. Cacho et al., *Mater. Sci. Eng., B* 154–155 (2008) 31–34
- ⁸² W. Lerch, S. Paul, J. Niess et al., *Mater. Sci. Eng., B* **124–125**, 24 (2005).
- ⁸³ T. Ito, T. Iinuma, A. Murakoshi et al., *Ext. Abs. SSDM*, pp. 182–183, 2001
- ⁸⁴ T. Gebel, M. Voelskow, W. Skorupa et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* vol. 186, no. 1-4, pp. 287-291, 2002.
- ⁸⁵ B. J. Cho, D. Poon, L. S. Tan et al, *Int. Workshop Junction Technology*, pp. 22-26, 2004.
- ⁸⁶ R. Lindsay, K. Henson, W. Vandervorst et al., *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 22, no. 1, pp. 306-311, 2004.
- ⁸⁷ C. T. M. Kwok, R. D. Braatz, S. Paul et al., *J. Appl. Phys.* **105**, 063514 (2009)
- ⁸⁸ S. Baek, S. Heo, H. Choi et al., *J. Vac. Sci. Technol. B* **23**, 257 (2005).
- ⁸⁹ S. E. Thompson, R. S. Chau, T. Ghani et al., *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 18, no. 1, pp. 26-36, Feb 2005.
- ⁹⁰ G. D. Wilk, R. M. Wallace, J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **89**, 5243 (2001); doi:10.1063/1.1361065
- ⁹¹ http://www.itrs.net/Links/2006Update/FinalToPost/04_PIDS2006Update.pdf
- ⁹² X. Huang, W.-C. Lee, C. Kuo, et al., *Tech. Dig. Int. Electron Devices Meet.* **1999**, p. 67.
- ⁹³ R. A. McKee, F. J. Walker, and M. F. Chisholm, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3014 (1998).
- ⁹⁴ T. M. Klein, D. Niu, W. S. Epling et al., *Appl. Phys. Lett.* **75**, 4001 (1999).
- ⁹⁵ M. Balog, M. Schieber, S. Patai et al., *J. Cryst. Growth* **17**, 298 (1972)
- ⁹⁶ M. Balog, M. Schieber, M. Michman, and S. Patai, *Thin Solid Films* **41**, 247 (1977);
- ⁹⁷ R. C. Smith, N. Hoilien, C. J. Taylor et al., *J. Electrochem. Soc.* **147**, 3472 (2000).
- ⁹⁸ B. H. Lee, L. Kang, W. J. Qi et al., *Tech. Dig. Int. Elect. Devices Meet.* **1999**, p. 133; **2000**, p. 39.
- ⁹⁹ B. H. Lee, L. Kang, R. Nieh, et al., *Appl. Phys. Lett.* 123 **76**, 1926 (2000).
- ¹⁰⁰ L. Kang, B. H. Lee, W.-J. Qi et al., *IEEE Electron Device Lett.* **21**, 181 (2000).
- ¹⁰¹ K. Mistry, L. Pipes, M. Prince et al., *IEEE IEDM Tech. Digest*, pp. 247–250, 2007.
- ¹⁰² T. Ghani, M. Armstrong, C. Auth et al., *IEEE IEDM Tech. Digest*, pp. 978–980, 2003.
- ¹⁰³ T. Ghani et al., *IEDM 2003, Technical Digest.*, p. 11.6.1-3, (2003).
- ¹⁰⁴ K. Mistry et al., *Digest of Technical Papers, 2004 Symposium on VLSI technology*, pages 50-51 (2004)
- ¹⁰⁵ S. E. Thompson et al., *IEEE Transactions on Electron Devices*, 51 (11): 1790-1797 (2004)
- ¹⁰⁶ Haensch, W., Nowak, E.J., Dennard, R.H. et al., *IBM Journal of Research and Development* 50 (4-5), pp. 339-361 (2006)
- ¹⁰⁷ B. Doris, M. Jeong, T. Karnansky et al., *IEDM'02, Digest*, pp. 267-270, Dec. 2003
- ¹⁰⁸ K. Uchida, J. Koga, and S. Takagi: *IEDM Tech. Dig.*, 2003, p. 805
- ¹⁰⁹ Gen Tsutsui and Toshiro Hiramoto *Jpn. J. Appl. Phys.* **46** (2007) pp. 5686-5690

- ¹¹⁰ X. Huang, W. C. Lee, C. Kuo et al., *International Electron Devices Meeting Technical Digest*, p. 67. December 5–8, 1999.
- ¹¹¹ R. S. Shenoy and K. C. Saraswat, *IEEE Transactions in Nanotechnology*, 2 (4): 265-270 (2003)
- ¹¹² R. S. Shenoy and K. C. Saraswat, *Proceedings of IEEE Inter.SOI Conference*, 2004, pp. 190-191 (2004)
- ¹¹³ Y. K. Choi, N. Lindert, P. Xuan et al., *IEDM 2001*, pp. 421-424
- ¹¹⁴ H.-S. Wong, *IBM J. Res. & Dev.*, vol. 46, no. 2/3, pp. 537-570, 2002.
- ¹¹⁵ Y. Taur, *IBM J. Res. & Dev.*, vol. 46, no. 2/3, pp. 213-222, 2002.
- ¹¹⁶ N. Lindert, L. Chang, Y.-K. Choi et al., *IEEE Electron Device Letters*, vol. 22, no. 10, pp. 487-489, 2001.
- ¹¹⁷ X. Huang, W.-C. Lee, C. Kuo et al., *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, no. 5, pp. 880-886, 2001.
- ¹¹⁸ B. S. Doyle, S. Datta, M. Doczy et al., *IEEE Electron Device Lett.*, 24 (4): 263-265 (2003)
- ¹¹⁹ R. Chau, B. Doyle, J. Kavalieros et al., *Extended Abstracts of the International Conference on Solid-State Devices and Materials (SSDM)*, Nagoya, Japan, 2002, pp. 68-69.
- ¹²⁰ J. Kavalieros, B. Doyle, S. Datta et al., *VLSI Technology Digest of Technical Papers*, June 2006, pp. 62-63.
- ¹²¹ Y. Cui, Z. Zhong, D. Wang et al., *Nano Letters*, **2003**, 3 (2), pp 149–152
- ¹²² Y. Cui, X. Duan, J. Hu et al., *J. Phys. Chem. B*, **2000**, 104 (22), pp 5213–5216
- ¹²³ Saraswat, K., Chui, C.O., Krishnamohan, T. et al., *Mater. Sci. Eng., B* 135 (3), pp. 242-249 (2006)
- ¹²⁴ Chui, C.O., Saraswat, K.C., 2005 *IEEE Conference on Electron Devices and Solid-State Circuits, EDSSC*, art. no. 1635216, pp. 101-106 (2005)
- ¹²⁵ Saraswat, K.C., Nayfeh, A., Chui, C.O. *Meeting Abstracts MA 2005-02*, pp. 957 (2005)
- ¹²⁶ Chui, C.O., Ramanathan, S., Triplett, B.B. et al., *IEEE Electron Device Lett.* 23 (8), pp. 473-475 (2002)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ ΡΗΧΩΝ ΕΠΑΦΩΝ

2.1 Εισαγωγικά περί χαρακτηρισμού

Αναπόσπαστο κομμάτι της διαδικασίας κατασκευής των ρηχών επαφών αποτελεί αναμφίβολα ο χαρακτηρισμός τους, ο οποίος είναι απαραίτητος όχι μόνο για να διαπιστωθεί αν επετεύχθησαν οι κατασκευαστικές απαιτήσεις, αλλά και δρα ως οδηγός για την βελτιστοποίηση της διαδικασίας αυτής καθεαυτής. Από την στιγμή που η περιοχή ενδιαφέροντος εκτείνεται σε ένα βάθος μόλις λίγων δεκάδων νανομέτρων, είναι προφανές ότι απαιτούνται ιδιαίτερα εξειδικευμένες αλλά και απαιτητικές τεχνικές χαρακτηρισμού, μερικές εκ των οποίων βρίσκονται στην αιχμή της τεχνολογίας. Όπως αναφέρθηκε και στο πρώτο κεφάλαιο, τα σημαντικότερα μεγέθη υπό εξέταση είναι η συγκέντρωση του προφίλ προσμίξεων, η επιφανειακή αντίσταση, η πυκνότητα και η μορφολογία των ατελειών, η επιφανειακή τραχύτητα και τα επίπεδα κρυσταλλικότητας. Στον πίνακα 2.1 συνοψίζονται όλα τα υπό μελέτη μεγέθη, η τεχνική που χρησιμοποιήθηκε αντίστοιχα, καθώς και κάποια βασικά χαρακτηριστικά.

Πίνακας 2.1 Βασικά μεγέθη χαρακτηρισμού

| Μετρούμενο μέγεθος | Τεχνική χαρακτηρισμού | Βασικά χαρακτηριστικά |
|--|---|--|
| Κατανομή της συγκέντρωσης προσμίξεων κατά βάθος, C(x) ή N(x) | SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy, Φασματοσκοπία Μάζας Δευτερογενών Ιόντων) | Προσδιορισμός της χημικής συγκέντρωσης των προσμίξεων (Βόριο), τόσο πριν όσο και μετά την ανόπτηση. Δείχνει την διάχυση. Ιδιαίτερα απαιτητική και δύσκολη για τα πολύ μικρά βάθη επαφών υπό εξέταση. |
| Επιφανειακή αντίσταση ρ_s ή ρ_{sheet} | Τεσσάρων ακίδων Van der Pauw | Μελέτη της ηλεκτρικής αγωγιμότητας της επαφής. Στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με CO ₂ , πραγματοποιείται χαρτογράφηση ολόκληρης της ανοπτημένης περιοχής (και ως καταδεικτής για τις μετρήσεις SIMS) |
| Παρουσία ατελειών και προσδιορισμός της κρυσταλλικότητας | TEM (Transient Electron Microscopy, Ηλεκτρονιακή Μικροσκοπία Διέλευσης) | Επιτρέπει την λήψη εικόνων - τομών κατά τον εγκάρσιο άξονα σε νανομετρική κλίμακα. Προσδιορισμός των ατελειών, αλλά και του βαθμού ανακρυστάλλωσης που επετεύχθη κατά την ανόπτηση. Απαιτείται επίπονη προετοιμασία των δειγμάτων. |
| Μέση επιφανειακή τραχύτητα (RMS roughness) | AFM (Atomic Force Microscopy, Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης) | Μελέτη της επίδρασης της ακτινοβόλησης στην μορφολογία της επιφάνειας. Επιπλέον παρέχει μια έμμεση πληροφορία για το εάν η ακτινοβόληση έγινε υπό καθορισμένη τήξης ή όχι. |

Πριν προχωρήσουμε σε μια διεξοδικότερη παρουσίαση των παραπάνω μεθόδων χαρακτηρισμού, πρέπει να τονιστεί ότι αν και είναι οι πιο σημαντικές, δεν είναι και οι μόνες που χρησιμοποιούνται. Καταρχάς, η μέθοδος SIMS μπορεί να προσδιορίσει την συνολική συγκέντρωση των προσμίξεων χωρίς να είναι σε θέση να κάνει διάκριση ανάμεσα σε αυτές που συνεισφέρουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα και αυτές που δεν συνεισφέρουν. Ο υπολογισμός της κατανομής της συγκέντρωσης των ενεργοποιημένων προσμίξεων είναι εξαιρετικά δύσκολος, καθώς η συμβατική τεχνική που χρησιμοποιείται μέχρι τώρα, η SRP¹ (Spreading Resistance Probe), αδυνατεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα όσο τα προφίλ συγκέντρωσης πλησιάζουν όλο και περισσότερο προς την επιφάνεια. Το ίδιο ακριβώς συμβαίνει και με την συμβατική διαφορική μέτρηση Hall (Differential Hall Effect, DHE). Μια ενδιαφέρουσα προσέγγιση, που επιτρέπει την διάκριση των ατόμων βορίου που είναι σε συσσωματώματα (και επομένως δεν συμμετέχουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα), από αυτά που δεν είναι, είναι η χρήση φασματοσκοπίας SXPES (X-ray Photoelectron Spectroscopy)². Η τεχνική αυτή μέσω της μέτρησης της ενέργειας σύζευξης των ατόμων βορίου, μπορεί να αποδώσει με μεγάλη ακρίβεια την κατανομή των ενεργών προσμίξεων, τουλάχιστον για τα πρώτα δέκα νανόμετρα από την επιφάνεια. Δυστυχώς, απαιτείται η χρήση διάταξης σύγχροτρου (με ενέργεια 8 GeV) για την παραγωγή της κατάλληλης δέσμης ακτίνων X, για την διέγερση του δείγματος, γεγονός το οποίο δεν επέτρεψε την διεξαγωγή μετρήσεων στην διάταξη XPS του ερευνητικού ιδρύματος FBK (που βρίσκεται στο Τρέντο της Ιταλίας), με το οποίο συνεργαζόμαστε. Η αδυναμία αυτή άμεσου προσδιορισμού του ενεργού προφίλ, καλύπτεται εν μέρει, έμμεσα, με χρήση κατάλληλων θεωρητικών υπολογισμών που λαμβάνουν υπόψη τους, μετρήσεις SIMS σε αντιπαράβολη με τις αντίστοιχες μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης.

Άλλες τεχνικές για τον προσδιορισμό της επιφανειακής αντίστασης, είναι οι Four-Point Probe (FPP), Variable Probe Spacing (VPS), Contactless Junction Photo Voltage (JPV), Micro Four-Point Probe (M4PP), Model Based Infra-red spectroscopic Reflectometry (MBIR), μια παρουσίαση αλλά και συγκριτική μελέτη (με έμφαση στην μέτρηση δειγμάτων που έχουν ανοιχθεί με laser σε καθεστώς μη τήξης) των οποίων δίνεται από τους Clarysse et al.³ Σε κάθε περίπτωση, η προσπάθεια για ακριβέστερες μετρήσεις της επιφανειακής αντίστασης και της κατανομής των ενεργοποιημένων προσμίξεων, δεν είναι μια στατική διαδικασία αλλά εξελίσσεται όσο ελαττώνονται οι διαστάσεις των CMOS.

2.2 Φασματοσκοπία Μάζας Δευτερογενών Ιόντων (SIMS)

Η φασματοσκοπία μάζας δευτερογενών ιόντων είναι μια περίπλοκη τεχνική, ιδιαίτερα στην περίπτωση που απαιτείται προσδιορισμός της συγκέντρωσης στα πρώτα νανόμετρα του υλικού. Η ιστορία των μετρήσεων SIMS⁴ ξεκινά τη δεκαετία του 50, με τη χρήση διατάξεων για εξαγωγή ιόντων και την επιτάχυνση τους προς κάποια υλικά-στόχους. Η πρώτη διάταξη SIMS κατασκευάστηκε στα πλαίσια ενός συμβολαίου με τη NASA στις αρχές του 60, με στόχο την ανάλυση πετρωμάτων που είχαν ληφθεί από την επιφάνεια της σελήνης. Καθώς η αποτελεσματικότητα του οργάνου ξεπέρασε τις προσδοκίες, ακολούθησε μια σειρά παραγγελιών τέτοιων διατάξεων οι οποίες πλέον μπήκαν και σε εμπορική χρήση.

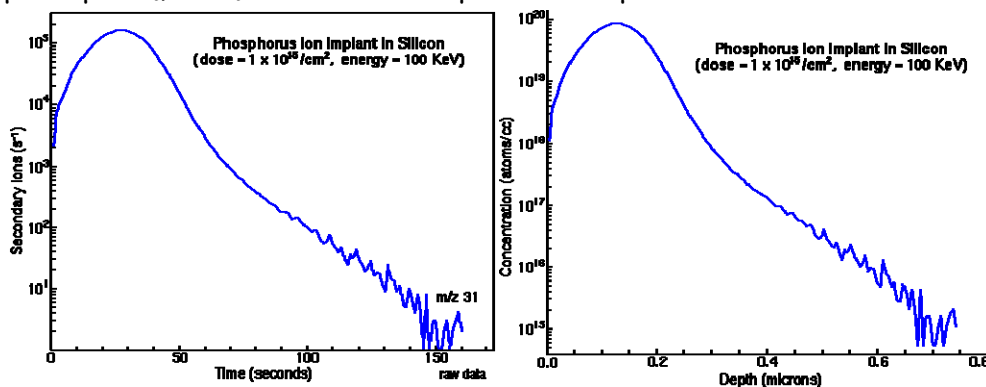
Στις μέρες μας, η τεχνική SIMS χρησιμοποιείται ευρέως για την εντοπισμό στοιχείων εντός στερεών υλικών, και ιδιαίτερα εντός ημιαγωγών και λεπτών υμενίων. Επιγραμματικά, η μέθοδος

αυτή στηρίζεται στον βομβαρδισμό του προς εξέταση υλικού-στόχου με ιόντα, τα οποία καθώς προσκρούουν στο υλικό εκτοπίζουν μόρια τόσο του υποστρώματος όσο και των προσμίξεων που υπάρχουν μέσα σε αυτό. Τα εκτοπισμένα ιόντα κινούνται προς μια συστοιχία ανιχνευτικών διατάξεων. Η χρήση των διατάξεων αυτών, οι οποίες περιλαμβάνουν και φασματογράφο μάζας, επιτρέπει τον προσδιορισμό της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων αυτών καθώς προχωράμε από την επιφάνεια προς το βάθος του υποστρώματος.

Η αλληλεπίδραση της πρωτογενούς δέσμης ιόντων με το υλικό-στόχο προκαλεί μια δέσμη που αποτελείται από δευτερογενή μονοατομικά και πολυατομικά σωματίδια από τον στόχο, ιόντα της πρωτογενούς δέσμης τα οποία ανακλάστηκαν από την επιφάνεια καθώς και ηλεκτρόνια και φωτόνια. Τα δευτερογενή σωματίδια μπορεί να είναι είτε θετικά, είτε αρνητικά φορτισμένα, ή και ουδέτερα και με κινητική ενέργεια σε ένα εύρος από σχεδόν μηδέν ως μερικές εκατοντάδες eV.

Η πρωτογενής δέσμη μπορεί να συνίσταται από στοιχεία όπως Cs^+ , O_2^+ , O , Ar^+ και Ga^+ με ενέργειες μεταξύ 0.3 έως και 30 keV. Αυτά εμφυτεύονται και αναμειγνύονται με τα άτομα του στόχου σε ένα βάθος που ποικίλει από 1 έως 10 nm. Ο ρυθμός της ιοντοβολής (sputter rate), ο οποίος διαδραματίζει πρωτεύοντα ρόλο στην επακόλουθη κανονικοποίηση μεταβάλλεται μεταξύ 0.1 και 5 nm ανά δευτερόλεπτο. Ο ρυθμός αυτός εξαρτάται από την ένταση της πρωτογενούς δέσμης, το υλικό του στόχου καθώς και τον κρυσταλλικό προσανατολισμό.

Οι ανιχνευτικές διατάξεις δεν μετράνε την κατανομή της συγκέντρωσης κατά βάθος, αλλά την κατανομή των ανιχνευόμενων ιόντων στην εξέλιξη του χρόνου. Στην εικόνα 2.1α παρουσιάζεται ένα τέτοιο διάγραμμα. Ως εκ τούτου για να προκύψει το επιθυμητό αποτέλεσμα πρέπει να γίνουν κατάλληλοι μετασχηματισμοί, οι οποίοι λαμβάνουν υπόψη διάφορες παραμέτρους, ενώ ταυτόχρονα γίνονται και αναγωγές με βάση μετρήσεις σε πρότυπα δείγματα. Επίσης, είναι αναγκαίος ο προσδιορισμός του βάθους του κρατήρα που δημιουργήθηκε εξαιτίας της ιοντοβολής και για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται κατάλληλη διάταξη, το προφίλερόμετρο. Μετά το πέρας της διαδικασίας κανονικοποίησης και βαθμονόμησης προκύπτει τελικά το διάγραμμα συγκέντρωσης προσμίξεων με το βάθος, όπως αυτό δίνεται στην εικόνα 2.1β.



Εικόνα 2.1 Μετατροπή από την πρωτογενή μέτρηση στην τελική καμπύλη συγκέντρωσης α) προσπίπτοντα δευτερογενή ιόντα στον ανιχνευτή συναρτήσει του χρόνου β) τελική μορφή που παριστάνει την συγκέντρωση των ιόντων Βορίου με το βάθος, μετά τους μετασχηματισμούς και την κανονικοποίηση⁵.

Το κατά πόσο η βάση του κρατήρα είναι επίπεδη ή όχι, έχει σημαντική επίδραση στην αξιοπιστία της μέτρησης. Έχουν αναπτυχθεί διάφορες τεχνικές για να ληφθούν ιόντα από τις κατάλληλες περιοχές έτσι ώστε να μετρηθεί αξιόπιστα το βάθος του κρατήρα.

Στη συνέχεια, θα αναλύσουμε τα βασικά μέρη από τα οποία συνίσταται μια σύγχρονη διάταξη SIMS. Ξεκινάμε από την πηγή πρωτογενών ιόντων, η οποία μπορεί να είναι είτε ένα duoplasmatron, είτε μια πηγή ιονισμού επιφανείας είτε και τα δυο. Το πρώτο μπορεί να λειτουργήσει σχεδόν με οποιοδήποτε αέριο, αλλά το οξυγόνο είναι το πιο κοινό. Η δεύτερη πηγή χρησιμοποιείται κυρίως για την παραγωγή ιόντων καισίου.

Τα πρωτογενή ιόντα εξάγονται από τις πηγές και μεταβιβάζονται στο προς εξέταση δείγμα μέσω μιας συστοιχίας φακών οι οποίοι εστιάζουν κατάλληλα την δέσμη. Η συστοιχία αυτή συνήθως περιλαμβάνει ένα φίλτρο μάζας το οποίο επιτρέπει την διέλευση μόνο των ιόντων εκείνων που πληρούν μια συγκεκριμένη αναλογία μάζας-φορτίου. Το φίλτρο αυτό εξαλείφει τις ανεπιθύμητες προσμίξεις μέσα στην δέσμη. Οι ηλεκτροστατικοί φακοί και τα διαφράγματα ελέγχουν την ένταση και το πλάτος της πρωτογενούς δέσμης. Οι ηλεκτροστατικοί εκτροπείς διαμορφώνουν την δέσμη κατάλληλα έτσι ώστε να επιτευχθεί όσο το δυνατόν πιο ομοιόμορφη κατανομή πάνω στο δείγμα, έτσι ώστε να δημιουργηθεί ένας επίπεδος κρατήρας. Όσο πιο κάθετα είναι τα τοιχώματα, τόσο πιο καλή είναι η διακριτική ικανότητα της μεθόδου.

Τα ιόντα που παράγονται από την πρόσκρουση, εξάγονται από την επιφάνεια του δείγματος. Εάν τα συστατικά του φασματογράφου μάζας είναι γειωμένα, τότε το υλικό – στόχος, πρέπει να είναι σε υψηλό δυναμικό, που είναι και αυτό που προκαλεί τελικά την επιτάχυνση. Τα δευτερογενή ιόντα επιταχύνονται προς το γειωμένο πλαίσιο ενός ηλεκτροστατικού φακού. Ο πρώτος φακός ονομάζεται «φακός εξαγωγής». Ο δεύτερος φακός, που ονομάζεται φακός μεταφοράς, εστιάζει την ιοντική δέσμη στην είσοδο του φασματογράφου μάζας. Στην ουσία, αυτό το σύστημα δυο φακών συμπεριφέρεται σαν ένα ιοντικό μικροσκόπιο. Τα δευτερογενή ιόντα μπορούν να προβληθούν σε ένα ανιχνευτή εικόνας έτσι ώστε να απεικονισθεί η επιφάνεια του δείγματος. Διαφορετικοί φακοί μεταφοράς μπορούν να χρησιμοποιηθούν έτσι ώστε να επιτευχθούν διαφορετικές τιμές μεγέθυνσης.

Στη συνέχεια, θα αναφερθούμε στις ανιχνευτικές διατάξεις που εμπεριέχονται σε μια μονάδα SIMS. Οι ηλεκτροστατικοί αναλυτές ενέργειας, καμπυλώνουν εντονότερα τα ιόντα χαμηλής ενέργειας σε σχέση με τα ιόντα υψηλής ενέργειας. Η διαδικασία ιοντοβολής οδηγεί στην εξαγωγή ειδών που παρουσιάζουν ένα ευρύ ενεργειακό φάσμα. Ένα ειδικό πέτασμα χρησιμοποιείται για την ανάσχεση των ιόντων πολύ υψηλής ενέργειας. Κατάλληλες τροποποιήσεις της τάσης πραγματοποιούνται για την ενίσχυση των μονοατομικών ιόντων σε σχέση με τα πολυατομικά. Στη συνέχεια τα ιόντα διέρχονται μέσα από ένα φασματογράφο μάζας ο οποίος επιτρέπει την διέλευση μόνο εκείνων που έχουν συγκεκριμένη μάζα. Η συνδυασμένη χρήση μαγνητικών και ηλεκτροστατικών διατάξεων προσφέρει διπλή εστίαση.

Οι περισσότερες σύγχρονες διατάξεις SIMS περιέχουν έως και τέσσερις ανιχνευτές. Αυτοί περιλαμβάνουν ένα πολλαπλασιαστή ηλεκτρονίων, ένα κλωβό Faraday και δυο ανιχνευτές εικόνας. Οι πολλαπλασιαστές ηλεκτρονίων οι οποίοι και καταμετρούν τα ιόντα, είναι τα πλέον ευαίσθητα όργανα, και ως εκ τούτου πρέπει να θωρακίζονται από ισχυρές δέσμες. Στην περίπτωση αυτή την καταμέτρηση των ιόντων, την αναλαμβάνει ο κλωβός Faraday.

Ένας πολλαπλασιαστής ηλεκτρονίων αποτελείται από μια σειρά ηλεκτροδίων που ονομάζονται δύνοδοι, και είναι συνδεδεμένοι μέσω αντιστάσεων. Ο κλωβός Faraday, από την άλλη είναι ένα ηλεκτρόδιο με το οποίο μετράται το ηλεκτρικό ρεύμα που παράγεται από την πρόσκρουση των ιόντων πάνω στον κλωβό. Τέλος, οι ανιχνευτές εικόνας ιόντων είναι επίπεδα δισκία,

τα οποία συνίστανται από μια μεγάλη συστοιχία (έως και 2000) μικρών πολλαπλασιαστών ηλεκτρονίων. Στις εικόνες 2.2 α και β, παρουσιάζεται η διάταξη SIMS που χρησιμοποιήθηκε κατά τις μετρήσεις στο ινστιτούτο FBK, στο Τρέντο της Ιταλίας.



Εικόνα 2.2 Η διάταξη SIMS που χρησιμοποιήθηκε στις μετρήσεις στο ινστιτούτο FBK, τύπου Cameca Wf/Sc-ULTRA

Καθώς τα βάθη επαφής μειώνονται συν τω χρόνω, η διενέργεια μετρήσεων πολύ κοντά στην επιφάνεια αποκτά ολοένα και μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Σε αυτά τα βάθη, η επίτευξη σταθερού ρυθμού ιοντοβολής κοντά στην επιφάνεια δεν είναι πάντα εύκολη, οπότε και τα αποτελέσματα των μετρήσεων δεν είναι και τόσο αξιόπιστα. Επιπλέον, αν χρησιμοποιείται οξυγόνο για την πρωτογενή δέσμη, ο αρχικός ρυθμός ιοντοβολής πιθανόν να είναι υψηλότερος, όταν τα στρώματα που υποβάλλονται στην ιοντοβολή, οξειδώνονται μερικώς λόγω της επακόλουθης ενσωμάτωσης των ατόμων οξυγόνου. Η μείωση της ενέργειας της πρωτογενούς δέσμης στο εύρος 0.5-1.5 keV, οδηγεί σε ελάττωση του ρυθμού ιοντοβολής και επομένως αμβλύνει την επίδραση των παραπάνω παραγόντων. Η βελτιστοποίηση της γωνίας πρόσπτωσης μπορεί να οδηγήσει σε ακόμα καλύτερα αποτελέσματα. Τέλος, η παρουσία αερίου οξυγόνου υπό χαμηλή πίεση οδηγεί σε μερικό κορεσμό της επιφάνειας (full oxidizing), και επομένως διατηρεί σταθερό τον ρυθμό της ιοντοβολής για την επίτευξη ακριβέστερων μετρήσεων κοντά στην επιφάνεια.

Στα πλαίσια της παρούσας διδακτορικής διατριβής διενεργήθηκαν μετρήσεις σε τρία διαφορετικά εργαστήρια (Evans Analytical Group (EAG), CEMES/CNRS Toulouse, FBK). Κάθε εργαστήριο χρησιμοποίησε διαφορετικές συνθήκες μέτρησης, γεγονός το οποίο οδήγησε και σε κάποιες διαφοροποιήσεις των μετρούμενων προφίλ ακόμα και για δείγματα τα οποία δεν έχουν υποστεί ανόπτηση (και ως εκ τούτου θα έπρεπε να ταυτίζονταν). Στον πίνακα 2.Π συνοψίζονται οι κυριότερες συνθήκες μέτρησης ανά εργαστήριο (όσες ήταν διαθέσιμες).

Όσον αφορά τις μετρήσεις που διεξαγάγαμε στο FBK, το όργανο που χρησιμοποιήθηκε είναι τύπου Cameca Wf/Sc-ULTRA. Η πρωτογενής ιοντική δέσμη O_2^+ είναι στα 500 eV (με γωνία πρόσπτωσης 68°). Τα δευτερογενή ιόντα $^{11}B^+$ και $^{28}Si^+$ συλλέγονται από κυκλική περιοχή διαμέτρου 66 μm η οποία βρίσκεται στο κέντρο της τετραγωνικής περιοχής με διαστάσεις 350x350 μm^2 . Η ανάλυση διεξήχθη υπό συνθήκες πλήρους οξείδωσης (full oxidizing condition), εισάγοντας ελεγχόμενη ποσότητα οξυγόνου (πίεση 5×10^{-6} mbar) στον θάλαμο ανάλυσης. Το δείγμα ήταν

τοποθετημένο επί περιστρεφόμενης πλατφόρμας έτσι ώστε τα τοιχώματα του κρατήρα να είναι ομοιόμορφα και να μην επηρεαστεί ο βαθμός απόδοσης ιοντοβολής (sputtering and ion yield)^{6 7}. Αυτό γίνεται για τον περιορισμό της εναπόθεσης υλικού στα τοιχώματα του κρατήρα, κάτι το οποίο θα μπορούσε να επιφέρει σημαντικά σφάλματα κατά την διαδικασία βαθμονόμησης μέσω της μέτρησης του κρατήρα.

Πίνακας 2.Π Χαρακτηριστικά διαφορετικών SIMS

| | EAG | CEMES/CNRS | FBK |
|--|-----------------------------|-----------------------------|-------------------------------|
| Τύπος οργάνου | - | Cameca IMS 4fE6 | Cameca Wf/Sc Ultra |
| Πρωτογενής δέσμη | O ₂ ⁺ | O ₂ ⁺ | O ₂ ⁺ |
| Ενέργεια πρωτογενούς δέσμης (keV) | 1.0 | 1.08 | 0.5 |
| Σχήμα & μέγεθος κρατήρα (μm) | - | R=150 μm | 350×350 μm ² |
| Παρουσία οξυγόνου | Όχι | Όχι | Ναι (5×10 ⁻⁶ mbar) |
| Γωνία πρόσπτωσης πρωτογενούς δέσμης | 60° | 68° | 68° |

Ο χρόνος της ιοντοβολής μετατράπηκε σε ισοδύναμο βάθος χρησιμοποιώντας το ρυθμό ιοντοβολής (sputtering rate, SR) που προσδιορίστηκε από μετρήσεις σε πρότυπα δείγματα, στα οποία είχαν εμφυτευθεί αλληπάλληλες κορυφές βορίου. Ελήφθη πρόνοια για την διόρθωση των σφαλμάτων που εισάγει η παρουσία του επιφανειακού στρώματος SiO₂, μέσω κατάλληλων κανονικοποιήσεων με τη βοήθεια του παράγοντα SR. Η ένταση του σήματος του ¹¹B⁺ μετατράπηκε σε συγκέντρωση, κατόπιν κανονικοποίησης του σήματος ²⁸Si⁺ και εφαρμογής του παράγοντα ευαισθησίας ο οποίος προσδιορίζεται από ένα δείγμα Si, που έχει υποστεί ομοιόμορφη εμφύτευση βορίου σύμφωνα με τα πρότυπα που έχουν τεθεί από τον NIST.

2.3 Μέτρηση της επιφανειακής αντίστασης

Οι συνήθεις μέθοδοι μετρήσεως επιφανειακής αντίστασης βασίζονται στις γνωστές τεχνικές των τεσσάρων ακίδων (Four Point Probe). Παρόλα αυτά, στην περίπτωση μας, το πολύ μικρό βάθος κατανομής των προσμίξεων μας απαγορεύει την χρήση των συμβατικών αυτών μεθόδων και οδηγεί στην υιοθέτηση της μεθόδου Van der Pauw. Σε σύγκριση με τις συμβατικές μεθόδους, η μέθοδος Van der Pauw^{8 9} παρουσιάζει δυο βασικά πλεονεκτήματα, ιδιαίτερα όταν αναφερόμαστε σε μετρήσεις ρηχών επαφών. Αυτά τα δυο πλεονεκτήματα είναι: α) οι τέσσερις ακίδες του Van der Pauw δε χρειάζεται να διαπεράσουν την επιφάνεια του υλικού για να πραγματοποιηθεί η μέτρηση, και β) οι τέσσερις ακίδες δε χρειάζεται να τοποθετηθούν με απόλυτα συμμετρικό τρόπο καθώς προβλέπεται αυτοδιόρθωση κατά την επεξεργασία των μετρήσεων.

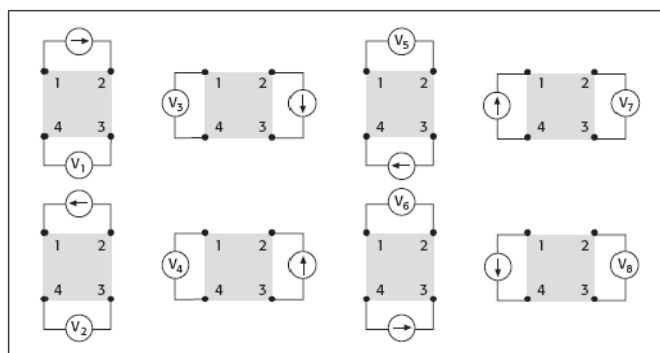
Μια τυπική διάταξη Van der Pauw¹⁰ φαίνεται στη παρακάτω εικόνα 2.3. Οι τέσσερις ακίδες του probe ακουμπάνε στην επιφάνεια του προς μέτρηση δοκιμίου σε διάταξη σταυρού, έτσι ώστε να διέρχεται ρεύμα από τις δυο ακίδες και από τις άλλες δυο να μετράται η τάση. Της μέτρησης

προηγείται σχηματισμός αγώγιμων επαφών μέσω εναπόθεσης αλουμινίου με χρήση λιθογραφικών τεχνικών, είτε μασκών που προέκυψαν με ακτινοβόληση laser Nd:YAG.



Εικόνα 2.3 Η διάταξη που χρησιμοποιήθηκε για την μέτρηση της επιφανειακής αντίστασης. Διακρίνονται οι τέσσερες ακίδες, η βάση στήριξης του δείγματος και το μικροσκόπιο που χρησιμοποιείται για την τοποθέτηση των ακίδων.

Μέσω μιας πηγής συνεχούς ρεύματος (τύπου Keithley) το δείγμα διαρρέεται με ρεύμα για τρεις ή τέσσερες τιμές έντασης του (10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} και 10^{-5} A) και μετράμε την τάση με ένα κατάλληλο βολτόμετρο (τύπου Keithley). Αυτή η διαδικασία γίνεται για συνολικά 8 διαφορετικές συνδεσμολογίες για κάθε τιμή ρεύματος οι οποίες φαίνονται στη παρακάτω Εικόνα 2.4.



Εικόνα 2.4 Οι οκτώ δυνατές συνδεσμολογίες μετρήσεων που απαιτούνται για τη μέθοδο Van der Pauw.

Συνεπώς, για κάθε μια τιμή έντασης προκύπτουν οχτώ τιμές τάσης $V_1 - V_8$.

Με βάση αυτές τις μετρήσεις προκύπτουν δυο τιμές επιφανειακής αντίστασης ρ_A και ρ_B , από τις οποίες μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε την ολική επιφανειακή αντίσταση, γνωρίζοντας ότι αυτή προκύπτει από το ημίθροισμα των :

$$\rho = \frac{\rho_A + \rho_B}{2} \quad (2.1)$$

Οι δυο αντιστάσεις δίνονται από τις σχέσεις :

$$\rho_A = \frac{\pi}{\ln 2} f_A \frac{V_1 - V_2 + V_3 - V_4}{4I} \quad (2.2)$$

$$\rho_B = \frac{\pi}{\ln 2} f_A \frac{V_5 - V_6 + V_7 - V_8}{4I}, \quad (2.3)$$

με I , συμβολίζουμε το ρεύμα που διαρρέει το δείγμα, ενώ f_A και f_B είναι οι γεωμετρικοί παράγοντες βασισμένοι στην γεωμετρία του δείγματος. Σχετίζονται δε με τους δυο λόγους αντίστασης Q_A και Q_B , οι οποίοι δίνονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

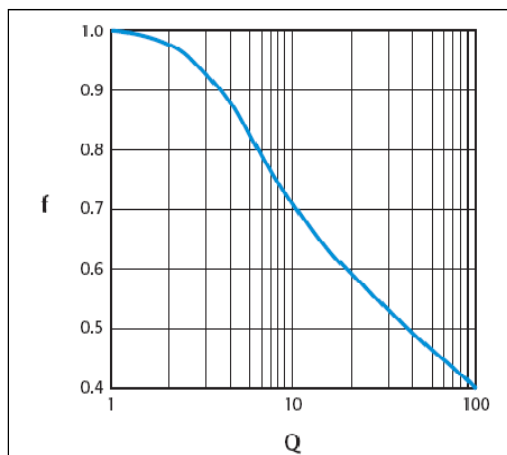
$$Q_A = \frac{V_1 - V_2}{V_3 - V_4} \quad (2.4)$$

$$Q_B = \frac{V_5 - V_6}{V_7 - V_8} \quad (2.5)$$

Σε περίπτωση πλήρως συμμετρικά τοποθετημένων ακίδων ισχύει $f_A = f_B = 1$. Στην γενικότερη περίπτωση οι παράγοντες f και Q συσχετίζονται μέσω της αυτοσυνεπούς εξίσωσης:

$$\frac{Q-1}{Q+1} = \frac{f}{0.693} \arccos \left[\frac{\exp(0.693/f)}{2} \right] \quad (2.6)$$

Η εξίσωση αυτή επιλύεται είτε μέσω ενός κατάλληλου υπολογιστικού πακέτου (όπως στην περίπτωση μας το Mathematica), είτε γραφικά με την βοήθεια του διαγράμματος που απεικονίζεται στην παρακάτω εικόνα 2.5.



Εικόνα 2.5 Εξάρτηση παράγοντα f από τον παράγοντα Q .

Όσον αφορά τα δείγματα που ανοπτήθηκαν με χρήση Excimer laser, η χρησιμοποίηση ομογενοποιητή οδήγησε σε ομοιόμορφη (top-hat) κατανομή της πυκνότητας ενέργειας, γεγονός το οποίο επιβεβαιώθηκε και από μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης σε όλη την επιφάνεια της ανοπτημένης περιοχής. Επομένως στην περίπτωση αυτή, αρκεί η διεξαγωγή μιας μέτρησης ανά δείγμα. Αντίθετα, καθώς η χωρική κατανομή της ενέργειας στο laser CO₂ είναι Γκαουσιανή (TEM₀₀), απαιτείται χαρτογράφηση της κατανομής της επιφανειακής αντίστασης, μέσω μετρήσεων σε πολλά σημεία εντός της ανοπτημένης περιοχής

2.4 Απεικόνιση με χρήση Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας Διέλευσης (TEM)

Η Ηλεκτρονική μικροσκοπία διέλευσης (TEM) παρέχει την δυνατότητα απεικόνισης των πρώτων στρωμάτων κατά βάθος του δοκιμίου, γεγονός που επιτρέπει αφενός μεν την παρατήρηση τυχόν ατελειών στον όγκο του υλικού, και αφετέρου την μελέτη της επίδρασης της ακτινοβόλησης όσον αφορά την ανακρυστάλλωση των κατεστραμμένων από την εμφύτευση περιοχών. Από φυσικής απόψεως, τα μικροσκοπία διέλευσης είναι παρόμοια με τα οπτικά μικροσκοπία, καθώς και τα δυο

περιέχουν μια σειρά από φακούς για να μεγεθύνουν μια περιοχή του δείγματος. Η μεγάλη δύναμη του TEM έγκειται στην εξαιρετικά υψηλή διακριτική ικανότητα, που φτάνει έως και τα 0.15 nm. Αυτό προκύπτει από την σχέση:

$$s = 0.61 \frac{\lambda}{NA} \quad (2.7)$$

Σε ένα οπτικό μικροσκόπιο το αριθμητικό άνοιγμα NA είναι περίπου ίσο με 1 και το $\lambda=500$ nm δίνοντας $s \approx 300$ nm. Σε ένα τυπικό TEM έχουμε αντίστοιχα $NA=0,01$, λόγω των μεγαλύτερων ατελειών των ηλεκτρονικών φακών, αλλά και πολύ μικρότερα μήκη κύματος ($\lambda_e=0.004$ nm) με αποτέλεσμα το s να είναι ίσο με 0.25 nm δίνοντας μεγεθύνεις πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερες από ένα οπτικό μικροσκόπιο. Φυσικά οι παραπάνω υπολογισμοί είναι αρκετά απλοποιημένοι αλλά δίνουν ένα μέτρο της ικανότητας του μικροσκοπίου. Από την άλλη πλευρά, ένα σημαντικό μειονέκτημα του TEM είναι η αδυναμία του να διεισδύσει σε μεγάλο βάθος, κάτι το οποίο αντιμετωπίζεται με εγκάρσιες τομές του δείγματος με αποτέλεσμα να έχουμε μια καθαρή εικόνα του εσωτερικού του δείγματος. Αυτό προϋποθέτει κατάλληλη προετοιμασία του δείγματος, η οποία είναι επίπονη και μπορεί να γίνει μόνο από εξειδικευμένο προσωπικό. Το δείγμα πρέπει να είναι επαρκώς λεπτό (από μερικές δεκάδες έως μερικές εκατοντάδες νανόμετρα), έτσι ώστε να είναι διαπερατό από τα ηλεκτρόνια. Τα ηλεκτρόνια και τα εμπροσθοσκοιδαζόμενα ηλεκτρόνια, σχηματίζουν ένα πρότυπο περίθλασης στο πίσω μέρος του επιπέδου εστίασης, και μια μεγεθυμένη εικόνα. Για την προετοιμασία των δειγμάτων χρησιμοποιούνται διάφορες τεχνικές όπως:

- λέπτυνση με δέσμη ηλεκτρονίων
- χρήση μικροτομών υψηλής λεπτότητας
- χημική λέπτυνση
- σχισμός σε παράλληλα κρυσταλλικά επίπεδα
- βομβαρδισμός με δέσμες ιόντων (Focused Ion Beam, FIB)

Η πλευρική διάσταση του δείγματος είναι μερικά μικρόμετρα. Το δείγμα εισάγεται στο θάλαμο του μικροσκοπίου μέσω ειδικής θυρίδας που εξασφαλίζει την διατήρηση του κενού και τοποθετείται σε διάταξη που παρέχει τη δυνατότητα μικρομετρικών μετατοπίσεων. Με χρήση επιπρόσθετων φακών, μπορούμε να απεικονίσουμε είτε την εικόνα, είτε το επίπεδο περίθλασης πάνω σε μια φθορίζουσα ή κανονική οθόνη ή να την φωτογραφίσουμε. Η ικανότητα σχηματισμού του προτύπου περίθλασης μας δίνει πληροφορίες για την δομή του δείγματος. Έγινε δυνατή η λήψη εικόνων με μεγέθυνση έως και 800k×, οι οποίες κατέστησαν δυνατή την μελέτη της διαδικασίας κρυσταλλοποίησης λόγω της ανόπτησης. Οι μετρήσεις TEM διεξήχθησαν στο Ινστιτούτο Υλικών του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. “Δημόκριτος” από τον Δρ. Κωνσταντίνο Γιαννακόπουλο.

2.5 Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (AFM)

Πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις AFM σε επιλεγμένα δείγματα, με στόχο την μελέτη της επίδρασης της ακτινοβόλησης στην μορφολογία της επιφάνειας του δείγματος, καθώς έχει παρατηρηθεί ότι αυξανόμενης της πυκνότητας ενέργειας, η ανόπτηση οδηγεί σε αλλοιώσεις στα

επιφανειακά στρώματα. Αν μάλιστα η ακτινοβόληση οδηγήσει σε τήξη, τότε η αλλοίωση αυτή είναι πολύ έντονη. Έτσι παρακολουθώντας την μέση επιφανειακή τραχύτητα (RMS roughness) και συγκρίνοντας με τις τιμές που έχουν παρατηρηθεί για δείγματα που έχουν υποστεί τήξη, έχουμε ακόμα μια έμμεση επιβεβαίωση για το αν μια δεδομένη συνθήκη οδήγησε σε τήξη ή όχι.

Η αρχή λειτουργίας Μικροσκοπίας Ατομικής Δύναμης (AFM) στηρίζεται στην μέτρηση των δυνάμεων μεταξύ μιας ακίδας και του δείγματος. Αυτές οι δυνάμεις εξαρτώνται από την φύση του δείγματος, την απόσταση ανάμεσα στην ακίδα και το δείγμα, την γεωμετρία της ακίδας και από μια πιθανή επιμόλυνση της επιφάνειας του δείγματος. Είναι δυνατή η μέτρηση AFM τόσο σε αγώγιμα υλικά όσο και σε μη αγώγιμα, ενώ η ακίδα είτε μπορεί να έρχεται σε επαφή με το δείγμα είτε όχι.

2.6 Ανακεφαλαίωση

Ο συνδυασμός των παραπάνω τεχνικών, μπορεί να μας δώσει άμεση ή έμμεση πληροφορία για το εάν επετεύχθησαν ή όχι οι βασικότερες κατασκευαστικές απαιτήσεις. Στην πλειοψηφία τους, οι μέθοδοι αυτές είναι απαιτητικές και απαιτούν την χρήση περίπλοκου και ακριβού εξοπλισμού, ιδιαίτερα όσο μειώνεται το βάθος επαφής. Σε επόμενα κεφάλαια, θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα των μετρήσεων, είτε αυτά αφορούν δείγματα που δεν έχουν υποστεί θερμική επεξεργασία, είτε φυσικά δείγματα που έχουν ανοπτηθεί με KrF Excimer ή με CO₂.

Βιβλιογραφία 2^ο κεφαλαίου

“Silicon VLSI Technology”, J.D. Plummer et al, εκδόσεις Prentice Hall 2000

“Low Level Measurements” 5th edition, εκδόσεις KEITHLEY

“Semiconductor Material and Device Characterization” D. K. Schroder εκδόσεις Wiley-Interscience 1998

¹ T. Clarysse, D. Vanhaeren, I. Hoflijk et al., *Mater. Sci. Eng.*, R 47 (2004) 123–206

² K. Tsutsui, M. Watanabe, Y. Nakagawa et al., “New Analysis of Heavily Doped Boron and Arsenic in Shallow Junctions by X-ray Photoelectron Spectroscopy”

³ T. Clarysse, J. Bogdanowicz, J. Goossens et al., *Mater. Sci. Eng.*, B 154–155 (2008) 24–30

⁴ “Secondary Ion Mass Spectrometry: Basic Concepts, Instrumental Aspects, Applications, and Trends”, by A. Benninghoven, F. G. Rüdenauer, and H. W. Werner, Wiley, New York, 1987.

⁵ http://www.cea.com/training/tutorials/sims_theory_tutorial/profil.php

⁶ M. Bersani et al., *Appl. Surf. Sci.* 252 (2006) 7315.

⁷ W. Vandervorst et al., *Appl. Surf. Sci.* 203–204 (2003) 371.

⁸ L.J. Van der Pauw, *Phil. Res. Rep.* **13** 1-9, Feb. 1958.

⁹ L.J. Van der Pauw, *Phil. Tech. Rev.* **20**, 220-224. Aug. 1958

¹⁰ Mary Anne Tupta, “Instrumentation and Techniques for Measuring High Resistivity and Hall Voltage of Semiconducting Materials” Keithley Instruments, Inc.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΤΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ SYNOPSIS SENTAURUS PROCESS

3.1 Εισαγωγή

Η κατασκευή των επαφών *p-n* περιλαμβάνει μια σειρά βημάτων στα οποία εμπλέκονται φαινόμενα με μεγάλη πολυπλοκότητα. Γενικά θα μπορούσαμε να διακρίνουμε τρεις κύριες θεματικές περιοχές οι οποίες χρήζουν μελέτης με προσομοίωση. Αυτές είναι, η εμφύτευση με πλάσμα, η αλληλεπίδραση της δέσμης του laser με το υλικό (που αφορά στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής που εισάγεται στο υλικό), και την επίδραση αυτής, στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Οι τρεις αυτές διαδικασίες είναι άρρηκτα συνδεδεμένες μεταξύ τους, καθώς η μελέτη της διάχυσης προϋποθέτει την γνώση της εξέλιξης των θερμοκρασιακών προφίλ αλλά και της κατανομής των προσμίξεων, όπως αυτή προέκυψε από την διαδικασία της εμφύτευσης. Επίσης, στην περίπτωση της ανόπτησης με CO₂ laser, η εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την κατανομή της συγκέντρωσης των προσμίξεων καθιστά και πάλι αναγκαία την προσομοίωση της εμφύτευσης εκ των προτέρων.

Ιδιαίτερα το κομμάτι της ανόπτησης απαιτεί τον ακριβή προσδιορισμό των κατάλληλων συνθηκών, έτσι ώστε να επιτευχθούν τα βέλτιστα αποτελέσματα, τόσο όσον αφορά την ηλεκτρική ενεργοποίηση όσο και την ελαχιστοποίηση της διάχυσης. Η αναζήτηση των κατάλληλων συνθηκών απαιτεί την διεξαγωγή ενός μεγάλου αριθμού ακτινοβολήσεων. Θα ήταν σκόπιμο λοιπόν να προσδιορίσουμε εκ των προτέρων την επίδραση της ακτινοβολήσης στην κινητική των προσμίξεων. Για να γίνει εφικτό αυτό όμως, προαπαιτείται ο υπολογισμός της κατανομής θερμοκρασίας τόσο κατά βάθος όσο και κατά πλάτος της υπό ακτινοβολήση περιοχής. Με άλλα λόγια, πρέπει να είμαστε σε θέση να επιλύσουμε την εξίσωση της θερμότητας σε κάθε κόμβο του πλέγματος, και στη συνέχεια τις εξισώσεις διάχυσης. Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνουμε δυναμική ανανέωση της θερμοκρασίας και όλων των παραμέτρων που σχετίζονται με την κινητική των προσμίξεων αλλά και των ατελειών σε κάθε επανάληψη.

Η περίπλοκη εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και από την συγκέντρωση των ελεύθερων φορέων επιβάλλει την αυτοσυνεπή επίλυση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων σε κάθε κόμβο, είτε αναλυτικά είτε αριθμητικά. Η επίλυση καθίσταται ακόμα πιο δύσκολη από το γεγονός ότι σχεδόν όλοι οι όροι που υπεισέρχονται στην εξίσωση θερμότητας εξαρτώνται από την θερμοκρασία. Όλα αυτά καθιστούν αναγκαία την χρησιμοποίηση ενός εξειδικευμένου υπολογιστικού πακέτου, το οποίο να είναι σε θέση να επιλύει ταυτόχρονα όλες τις εξισώσεις θερμότητας και διάχυσης για τα σημαντικότερα μεγέθη που επηρεάζουν την κινητική των προσμίξεων. Επιπλέον πρέπει να ενσωματώνει τους βέλτιστους αλγορίθμους για την επίτευξη όσο δυνατόν ταχύτερης σύγκλισης με το ελάχιστο δυνατόν υπολογιστικό κόστος. Στο χώρο της μικροηλεκτρονικής, το (σπάντα) εργαλείο επιλογής είναι το Sentaurus Process από την εταιρία Synopsis.

3.2 Το λογισμικό Synopsys Sentaurus Process

Το Sentaurus αποτελεί την μετεξέλιξη του λογισμικού Taurus της ίδιας εταιρίας, που και αυτό με την σειρά του βασίζεται στον αλγόριθμο FLOOPS (Florida's Object Oriented Process Simulator) που αναπτύχθηκε στο πανεπιστήμιο της Florida. Το λογισμικό αυτό δύναται να προσομοιώσει όλες τις διαδικασίες που εμπεριέχονται για την κατασκευή μιας διάταξης CMOS, από την εμφύτευση μέχρι και την τελική συσκευασία του ολοκληρωμένου (packaging). Είναι χαρακτηριστικό, ότι προσαρμοσμένες στον τελικό χρήστη (custom) εκδοχές του πακέτου αυτού χρησιμοποιούνται ευρέως από σχεδόν όλες τις εταιρίες που στον χώρο της μικροηλεκτρονικής. Ενδεικτικά αναφέρουμε τις ST Microelectronics, Mattson, Applied Materials και IBM.

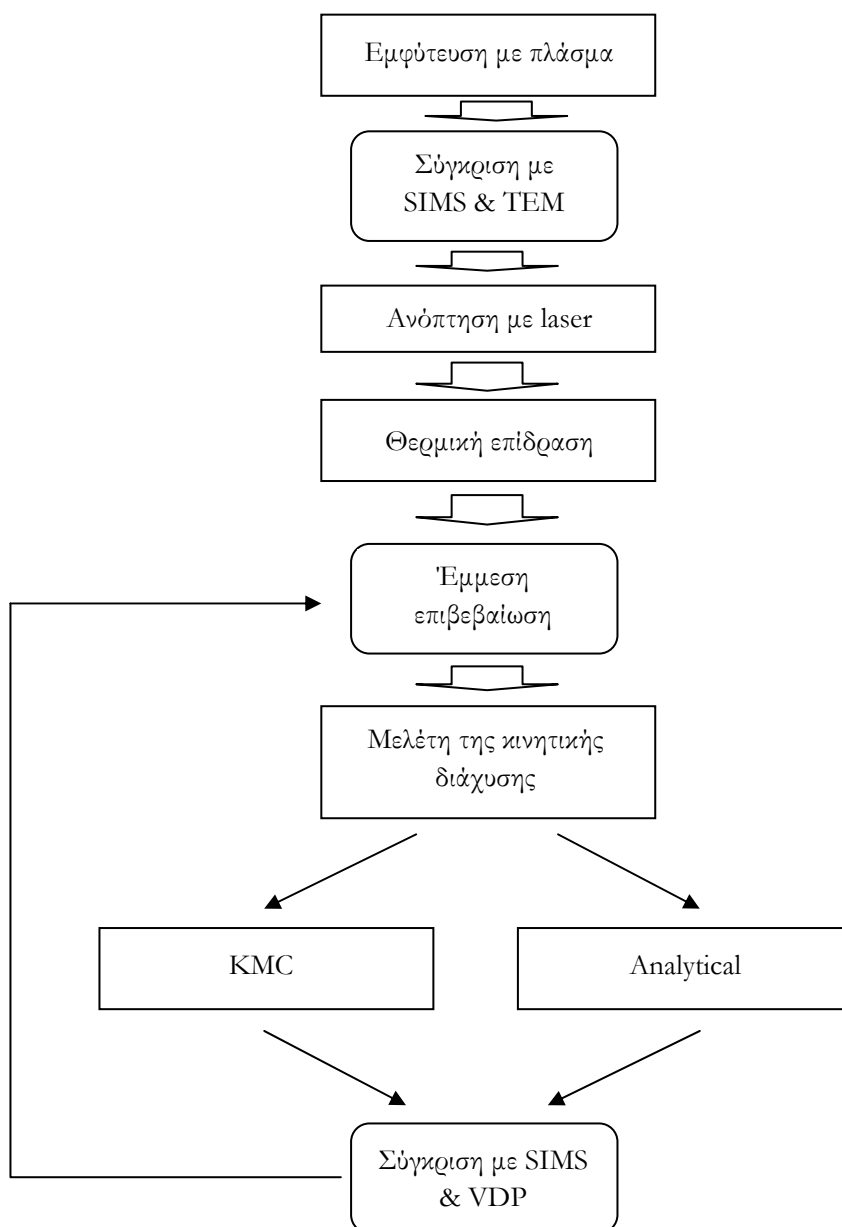
Το Sentaurus Process δέχεται ως είσοδο μια ακολουθία εντολών, η οποία δίνεται υπό μορφή ενός script αρχείου με επέκταση .cmd. Η παραγωγική ροή προσομοιώνεται θέτοντας μια ακολουθία εντολών οι οποίες αντιστοιχούν σε κάθε βήμα της παραγωγής ξεχωριστά. Μια σειρά εντολών επιτρέπει την επιλογή διαφορετικών φυσικών αλλά και υπολογιστικών μοντέλων, την μεταβολή παραμέτρων, υιοθέτηση διαφορετικών στρατηγικών κατασκευής υπολογιστικών πλεγμάτων, κ.α. Επιπλέον, το λογισμικό επιτρέπει την ανάπτυξη νέων μοντέλων ή εξισώσεων που καθορίζονται από τον χρήστη μέσω μιας ειδικής προγραμματιστικής γλώσσας (Alagator). Το Sentaurus Process είναι γραμμένο σε μια προέκταση της γλώσσας Tool command language (Tcl), και επομένως μπορούν να αξιοποιηθούν όλες οι εντολές και οι λειτουργίες της Tcl (βρόχοι επανάληψης, δομές ελέγχου, δημιουργία και αξιολόγηση μεταβλητών, κ.α.). Ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα του λογισμικού είναι η δυνατότητα χρήσης τόσο αριθμητικών, όσο και Kinetic Monte Carlo (KMC) αλγορίθμων, τόσο ξεχωριστά είτε και σε συνδυασμό (hybrid). Το τελευταίο αυτό χαρακτηριστικό, επιτρέπει την δημιουργία αλγορίθμων, στους οποίους να επιλέγεται κατά βούληση η χρήση αναλυτικών ή KMC στρατηγικών, για κάθε βήμα ξεχωριστά, ανάλογα με το ποια στρατηγική είναι η βέλτιστη για την προσομοίωση του συγκεκριμένου βήματος. Παραδείγματος χάριν, είναι δυνατόν να γίνει εμφύτευση με χρήση KMC και στη συνέχεια τα δεδομένα αυτά να χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωση της ανόπτησης με αριθμητικούς αλγορίθμους. Με την σειρά τους, τα αποτελέσματα όσον αφορά στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την μελέτη της διάχυσης των προσμίξεων πάλι μέσω KMC. Πρέπει φυσικά να τονιστεί πως η μετατροπή των δεδομένων κατά την μετάβαση από KMC σε αριθμητικά μοντέλα και αντιστρόφως (deatomization και atomization αντίστοιχα) εισάγει αναπόφευκτα μια αλλοίωση, η έκταση της οποίας έχει ελαχιστοποιηθεί μέσω προσεκτικού σχεδιασμού των αλγορίθμων από την Synopsys.

Υπάρχει μια σειρά από διαφορετικούς τρόπους αλληλεπίδρασης του λογισμικού με τον χρήστη, είτε δυναμικά είτε στατικά. Ιδιαίτερα όσον αφορά την οπτικοποίηση και την παρουσίαση των δεδομένων που δίνει ως έξοδο, η Synopsys παρέχει μια OEM (Original Equipment Manufacturer) διανομή του λογισμικού Tecplot από την Tecplot, Inc. Επιπλέον, εμπεριέχεται ένα πρόγραμμα που επιτρέπει την επικοινωνία του Sentaurus Process με το Tecplot καθώς και την δυνατότητα εκκίνησης (launching) του ενός μέσω του άλλου. Το πιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό είναι η δυνατότητα δυναμικής παρουσίασης των δεδομένων μέσω του Tecplot που παρέχει το Sentaurus Process κατά την εκτέλεση κάθε υπολογιστικού βήματος, έτσι ώστε να παρακολουθείται η εξέλιξη των παραμέτρων κατά την διάρκεια του φαινομένου. Παραδείγματος χάριν, είμαστε σε

θέση να παρακολουθούμε την εξέλιξη των ισόθερων γραμμών μέσα στον όγκο του υλικού, όπως αυτές σχηματίζονται μετά από κάθε υπολογιστικό βήμα. Επιπλέον καθιστά αποτελεσματικότερο τον έλεγχο της όλης διαδικασίας, αφού είναι ευκολότερο να παρατηρηθούν τυχόν προβλήματα ή δυσλειτουργίες. Αν ληφθεί υπόψη, ότι οι περισσότερες προσομοιώσεις που θα παρουσιαστούν στη συνέχεια διαρκούν από 8 έως και 48 ώρες, γίνεται εύκολα αντιληπτή η σημασία αυτής της δυνατότητας, με αντίστοιχο βέβαια κόστος όσον αφορά στην κατανάλωση μνήμης και την πιθανότητα να ακυρωθεί κάποια στιγμή η προσομοίωση λόγω έλλειψης μνήμης (όπως και συνέβη σε πολλές περιπτώσεις).

3.3 Διάγραμμα Ροής και βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης

Στην εικόνα 3.1 δίνεται το σχηματικό διάγραμμα ροής που ακολουθήσαμε κατά την προσομοίωση όλων των διαδικασιών: εμφύτευση, θερμικό αποτέλεσμα της ανόπτησης και επίδραση στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων Βορίου μέσα στο πυρίτιο.



Εικόνα 3.1 Διάγραμμα ροής της διαδικασίας προσομοίωσης που ακολουθήθηκε.

Συνοπτικά αναφέρουμε πως το πρώτο βήμα ήταν φυσικά η προσομοίωση της διαδικασίας εμφύτευσης με χρήση πλάσματος, ακολουθώντας την προσέγγιση των Walther et al. Τα υπολογισθέντα προφίλ συγκρίθηκαν απευθείας με τα πειραματικά προφίλ, όπως αυτά είχαν εξαχθεί από μετρήσεις SIMS. Χρησιμοποιήθηκε η αναλυτική προσέγγιση και μάλιστα παρατηρήθηκε ότι η χρήση BF_2 αντί για Βόριο, έδινε πολύ ικανοποιητικές προβλέψεις καθώς και την έκταση της αμορφοποίησης που εισάγεται μέσα στον όγκο του υλικού κατά την εμφύτευση.

Το κυρίως μέρος της προσομοίωσης αφορούσε την επίδραση της ανόπτησης των δυο διαφορετικών ειδών laser (Excimer και CO_2), στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής κατά πλάτος και κατά βάθος του δισκίου πυριτίου. Για μια σειρά από λόγους οι οποίοι θα αναλυθούν σε επόμενο κεφάλαιο, ξεκινήσαμε από την ανάλυση του φαινομένου σε μια διάσταση και στην συνέχεια μεταπηδήσαμε στις δυο διαστάσεις. Όσον αφορά στο Excimer, η μονοδιάστατη και η διδιάστατη επίλυση οδήγησαν σε σχεδόν ταυτόσημα αποτελέσματα, γεγονός που επέτρεψε την μονοδιάστατη αντιμετώπιση του προβλήματος. Καθώς είμαστε υποχρεωμένοι να μελετήσουμε την επίδραση μεγάλου αριθμού παλμών, η δυνατότητα αυτή είναι καθοριστική, αφού σε αντίθετη περίπτωση η προσομοίωση θα ήταν υπερβολικά χρονοβόρα. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η προσομοίωση για 100 παλμούς διήρκησε κοντά στις 24 ώρες για την μονοδιάστατη περίπτωση, γεγονός που συνεπάγεται ότι οι αντίστοιχοι υπολογισμοί σε δυο διαστάσεις θα κρατούσαν πάνω από 10 ημέρες! Σε κάθε περίπτωση ακολουθήσαμε αναλυτικές τεχνικές επίλυσης της εξίσωσης της θερμότητας, καθώς τα μοντέλα KMC δεν μπορούν να εφαρμοσθούν εδώ. Τα αποτελέσματα αξιολογήθηκαν είτε έμμεσα, είτε άμεσα και στη συνέχεια χρησιμοποιήθηκαν ως είσοδος για την μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης του Βορίου.

Τέλος, προβήκαμε στην μελέτη της επίδρασης της ακτινοβόλησης στην κινητική και στην διάχυση των προσμίξεων του Βορίου. Στην περίπτωση του Excimer KrF laser ήταν δυνατή η χρήση τόσο αριθμητικών, όσο και KMC αλγορίθμων. Αντίθετα, για μια σειρά από λόγους που θα αναλυθούν στο κεφάλαιο 8, η προσέγγιση μέσω KMC της επίδρασης του CO_2 laser στην διάχυση είναι ιδιαίτερα προβληματική. Τα αποτελέσματα όσον αφορά στην μεταβολή του προφίλ συγκέντρωσης όσο και στην επιφανειακή αντίσταση συγκρίνονται άμεσα με τις μετρήσεις SIMS και επιφανειακής αντίστασης μέσω της τεχνικής VDP. Ο βαθμός ταύτισης των αποτελεσμάτων παρέχει μια ακόμα σημαντική ένδειξη για την ορθότητα των υπολογισμών στα προηγούμενα βήματα (εμφύτευση και θερμική επίδραση).

Σε κάθε περίπτωση, απαιτήθηκε ένας μεγάλος αριθμός δοκιμών για την επίτευξη των βέλτιστων αποτελεσμάτων. Πέραν της συμφωνίας με τα πειραματικά δεδομένα, ζητούμενα ήταν επίσης, η επίτευξη σύγκλισης και η ελάττωση των απαιτούμενων υπολογιστικών πόρων. Συνολικά, η όλη διαδικασία προσομοίωσης έγκειται στην εξεύρεση της βέλτιστης ισορροπίας ανάμεσα στον μέγιστο βαθμό ακρίβειας και στην ελαχιστοποίηση των απαιτούμενων υπολογισμών. Οι παράμετροι που επηρεάζουν τις υπολογιστικές απαιτήσεις διαφέρουν ανάλογα με την χρήση αριθμητικών ή KMC προσεγγίσεων και θα αναλυθούν στα επιμέρους κεφάλαια.

Ο υπολογιστής που χρησιμοποιήθηκε κατά κύριο λόγο ήταν ένας Dell Optiplex 330, διπλού πυρήνα με χρονισμό στα 2.13GHz και 2GB RAM. Επίσης σε ορισμένες περιπτώσεις που ήταν ιδιαίτερα απαιτητικές υπολογιστικά (κυρίως για δοκιμές σε πλέγματα με μεγάλη πυκνότητα), χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής με τέσσαρες πυρήνες και μνήμη 12GB. Όλοι οι χρόνοι

διάρκειας υπολογισμών που αναφέρονται στο κείμενο αφορούν τον πρώτο υπολογιστή, εκτός και αν σημειώνονται ξεχωριστά

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε ξεχωριστά στις δυο διαφορετικές στρατηγικές που ακολουθήσαμε, την αριθμητική και την KMC, κάνοντας μια επιμέρους διάκριση στο πως αυτές εφαρμόζονται (όπου αυτό είναι εφικτό) σε κάθε βήμα της παραγωγικής διαδικασίας.

3.4 Αριθμητική προσέγγιση

3.4.1 Γενικά περί αριθμητικής προσέγγισης

Σε γενικές γραμμές, η αριθμητική επίλυση τέτοιων προβλημάτων συνίσταται στην δημιουργία ενός «εικονικού» πλέγματος, το οποίο μπορεί να είναι μονοδιάστατο, διδιάστατο ή και τρισδιάστατο, και στην επίλυση μιας σειράς εξισώσεων σε κάθε σημείο που έχει οριστεί. Το πλέγμα αυτό συνιστά το υπολογιστικό πεδίο ή χώρο και οι διαστάσεις και η μορφολογία του πρέπει να είναι τέτοιες ώστε να απεικονίζουν με την μέγιστη δυνατή ακρίβεια το υπό επίλυση πρόβλημα. Η μορφολογία καθώς και η πυκνωση του (το πόσο απέχουν οι πλεγματικές γραμμές μεταξύ τους) είναι ένα από τα πιο σημαντικά στοιχεία της διαδικασίας προσομοίωσης, καθώς οποιαδήποτε αβλεψία σε αυτό το στάδιο θα έχει πολύ σημαντική επίδραση στη συνέχεια. Πράγματι, ένα «αραιό» πλέγμα πιθανόν να μην είναι σε θέση να απεικονίσει το πραγματικό πρόβλημα ή να οδηγήσει σε ασυνέχειες ή αδυναμία σύγκλισης. Από την άλλη πλευρά η υπερβολική πυκνωση του πλέγματος θα αυξήσει σημαντικά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Η εύρεση των βέλτιστων χαρακτηριστικών του πλέγματος αποτελεί μια από τις πιο απαιτητικές εργασίες και απαιτεί μεγάλο αριθμό δοκιμών για την επίτευξη του επιθυμητού αποτελέσματος. Συνήθως η μεταβλητή πυκνωση, ή η υιοθέτηση αυτόματων στρατηγικών προσαρμογής πλέγματος καθώς και η χρήση κατάλληλων συμμετριών (όπου αυτές υπάρχουν) είναι τα σημαντικότερα εργαλεία που χρησιμοποιούνται. Τα σημεία τομής των πλεγματικών γραμμών, ονομάζονται κόμβοι και σε κάθε ένα από αυτά επιλύεται αριθμητικά ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων, ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων όχι μόνο σε κάθε ένα από τα σημεία αυτά, αλλά και στα γειτονικά τους στο πλέγμα. Ανάλογα με τον επιλύτη και τις υπολογιστικές παραμέτρους που έχουν χρησιμοποιηθεί, σε κάθε χρονικό βήμα, ο αλγόριθμος επαναλαμβάνει αριθμητικές επιλύσεις των ενάστοτε εξισώσεων έως ότου επιτευχτεί ο επιθυμητός βαθμός σύγκλισης. Μετά το πέρας κάθε υπολογιστικού χρονικού βήματος η τιμή όλων των υπολογιστικών παραμέτρων ανανεώνεται δυναμικά σε όλη την έκταση του υπολογιστικού χωρίου. Όπως είναι κατανοητό, όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των υπολογιστικών σημείων, το πλήθος των προς επίλυση εξισώσεων αυξάνει δραστικά, με ανάλογο κόστος στον υπολογιστικό χρόνο.

Γενικά, το Sentaurus Process, κατά την διάρκεια της προσομοίωσης των βημάτων της διάχυσης, επιλύει τρεις διαφορετικές μερικές διαφορικές εξισώσεις:

- Εξισώσεις Διάχυσης
- Εξισώσεις Θερμότητας
- Εξισώσεις Τάσεων

Οι εξισώσεις που σχετίζονται με την οξείδωση, τις προσμίξεις και τις σημειακές ατέλειες επιλύονται σε κάθε σημείο του πλέγματος χρησιμοποιώντας το Bank - Rose TRBDF¹ σχήμα διακριτοποίησης του χρόνου, μια μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων για την χωρική ολοκλήρωση και την μέθοδο

Newton για την επίλυση των μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων. Διάφοροι άμεσοι (direct), αλλά και επαναληπτικοί (iterative) επιλύτες (solvers) έχουν ενσωματωθεί στο Sentaurus Process για την επίλυση του μεγάλου αριθμού συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων σε κάθε επανάληψη Newton. Για τα μονοδιάστατα και τα διδιάστατα προβλήματα ο προκαθορισμένος επιλύτης είναι ο PARDISO (PARallel DIrect linear Solver)^{2,3}, ενώ για τα τρισδιάστατα ο ILS (Iterative Linear Solver)⁴, αλλά φυσικά παρέχεται η δυνατότητα επιλογής του καθενός από αυτούς. Γενικά όμως, ο ILS θεωρείται πιο αποδοτικός υπολογιστικά όσο αυξάνει ο αριθμός των κόμβων. Στην περίπτωση χρήσης direct επιλύτη, μια τροποποιημένη μέθοδος Newton χρησιμοποιείται εκ προοιμίου. Για την αποφυγή επανα-υπολογισμών και παραγοντοποίησης ενός νέου πίνακα γίνεται χρήση του τελευταίου παραγοντοποιημένου πίνακα, εφόσον ο ρυθμός σύγκλισης παραμένει υψηλός. Όσον αφορά τους επαναληπτικούς επιλύτες, χρησιμοποιείται ένα πλήρες σχήμα Newton⁵.

3.4.2 Εμφύτευση

Καθώς το Sentaurus Process δεν παρέχει την δυνατότητα απευθείας προσομοίωσης της εμφύτευσης με πλάσμα, θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο των Walther et al.⁶, (βλέπε κεφ. 6), η οποία σε τελική ανάλυση καθιστά ισοδύναμη την διαδικασία αυτή με μια ακολουθία κλασικών εμφυτεύσεων, κατόπιν κατάλληλης κανονικοποίησης της ενέργειας και της δόσης. Επομένως θα δώσουμε μια συνοπτική μορφή της μοντελοποίησης της αναλυτικής εμφύτευσης, με την επισήμανση ότι φαινομενολογικά, η υπέρθεση των αποτελεσμάτων της ακολουθίας αυτής εμφυτεύσεων οδηγεί σε ένα προφίλ συγκέντρωσης παρόμοιο με αυτό που προκύπτει από την PLAD.

Ο υπολογισμός της κατανομής των εμφυτευθέντων ιόντων γίνεται με βάση είτε απλών μοντέλων Gaussian και Pearson είτε με πιο προηγμένων συναρτήσεων dual Pearson⁷. Η καταστροφή που εισάγεται στο πλέγμα υπολογίζεται με βάση το μοντέλο Hobler⁸. Η αναλυτική εμφύτευση προσομοιώνει την χωρική κατανομή των εμφυτευμένων ιόντων με βάση προκαθορισμένες συναρτήσεις κατανομών, οι οποίες περιγράφονται μέσω ορμών. Οι κατανομές ορμών εξαρτώνται από τα ιοντικά είδη, την ενέργεια εμφύτευσης, την δόση, την γωνία εισόδου κ.α. Οι κατανομές σημειακής απόκρισης παράγονται με τη μέθοδο των ροπών και οι ροπές που καθορίζουν τη χαρακτηριστική και πλευρική κατανομή, προέρχονται από πίνακες εμφύτευσης με προϋπολογισμένα δεδομένα. Ενδεικτικά τέτοιοι πίνακες είναι οι Dios⁹, Advanced calibration¹⁰, Taurus¹¹ και Tasch¹². Αναλόγως ισχύει και για τις τρισδιάστατες προσομοιώσεις. Οι συναρτήσεις κατανομής που μπορεί να επιλεγούν από το χρήστη είναι του τύπου Gaussian, Pearson, DualPearson κλπ.

Ο υπολογισμός της προκληθείσας καταστροφής στο κρυσταλλικό πλέγμα λόγω της εμφύτευσης στο αναλυτικό μοντέλο γίνεται μέσω του μοντέλου του Hobler, όπου ο συντελεστής N_{vac} καθορίζει τον αριθμό των ατελειών Frenkel που παράγονται ανά εμφυτευθέν ιόν. Ανάλογα με τον τύπο των ιόντων (βαρέα ή ελαφρά) χρησιμοποιούνται διαφορετικοί τύποι για τον υπολογισμό της καταστροφής, πάντα σε συνάρτηση με τις προαναφερθείσες συναρτήσεις κατανομών.

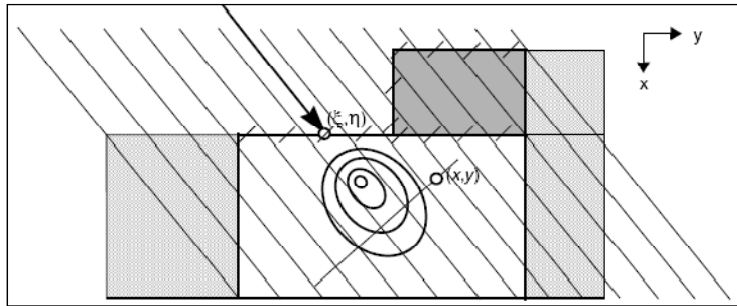
Για τις ανάγκες μιας δισδιάστατης προσομοίωσης που βασίζεται σε αναλυτικές εξισώσεις, υποθέτουμε πως μια δέσμη ιόντων που προσκρούει σε ένα σημείο (ξ, η) περιγράφεται από μια συνάρτηση κατανομής $F(x, y, \xi, \eta)$. Ο υπολογισμός της συγκέντρωσης των εμφυτευθέντων στοιχείων

σε κάθε σημείο της προσομοίωσης (x,y) , προκύπτει ως η υπέρθεση όλων των συναρτήσεων κατανομής από όλα τα πιθανά σημεία πρόσκρουσης και υπολογίζεται με τον τύπο:

$$C(x, y) = N_d \int_{\Gamma_{gas}} F(x, y, \xi(s), \eta(s)) ds \quad (3.1)$$

όπου N_d είναι η ολική δόση ανά εκτεθείσα περιοχή και $C(x,y)$ είναι το προφίλ της νόθευσης. Οι διδιάστατες συναρτήσεις κατανομής θεωρείται πάντα πως είναι γινόμενο δύο μονοδιάστατων κατανομών, που είναι ορθογώνιες μεταξύ τους, μια χαρακτηριστική συνάρτηση κατανομής $f_p(x)$ και μια πλευρική αντίστοιχα $f_l(x)$:

$$F(x, y, \xi(s), \eta(s)) = f_p(x - \xi(s)) f_l(y - \eta(s)) \quad (3.2)$$



Εικόνα 3.2 Κατανομή σημειακής απόκρισης για ένα σωματίδιο που προσκρούει στο σημείο (ξ,η) στην επιφάνεια. Τα διαστήματα χρησιμοποιούνται για την πλευρική ολοκλήρωση στο σημείο (x,y) [Sentaurus Process User Guide]

3.4.3 Μελέτη της ανόπτησης με laser

Από την έκδοση 2007.03 και μετά, το Sentaurus Process προσφέρει την δυνατότητα προσομοίωσης της ακτινοβόλησης πυριτίου με χρήση laser. Το μοντέλο αυτό δύναται να προσομοιώσει μη ομογενή θέρμανση, όπως αυτή εισάγεται στο πυρίτιο από διατάξεις laser ή flash, με στόχο την αύξηση των επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης¹³. Η μελέτη αυτή μπορεί να γίνει αυστηρά με χρήση αναλυτικών μεθόδων. Όπως προαναφέρθηκε το Sentaurus λύνει τρία σετ από διαφορικές εξισώσεις. Σε κάθε χρονικό βήμα λύνει πρώτα την εξίσωση της θερμοτότητας για να ανανεώσει δυναμικά την θερμοκρασία σε κάθε κόμβο και στη συνέχεια με βάση αυτή, επιλύει τις εξισώσεις διάχυσης και στρες. Η μορφή της εξίσωσης θερμοτότητας που θα χρησιμοποιηθεί για κάθε τύπο laser, περιγράφεται αναλυτικά στο κεφάλαιο 4 που πραγματεύεται την αλληλεπίδραση της ακτινοβολίας με την ύλη. Η λύση της εξίσωσης είναι μια εσωτερική μεταβλητή που ονομάζεται HeatTempK. Το μοντέλο ενεργοποιείται δηλώνοντας την λογική (Boolean) παράμετρο laser μαζί με την εντολή diffusion και την αρχική θερμοκρασία:

```
| diffuse temperature=500 time=1<ms> laser
```

Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό της αναλυτικής προσέγγισης είναι η δυνατότητα επιλογής μεταξύ διαφορετικών μοντέλων μεταφοράς κάθε φορά, με στόχο τη βελτιστοποίηση της προσομοίωσης για τα εκάστοτε δεδομένα. Αυτό μπορεί να εκφράζεται μέσω της χρήσης απλούστερων μοντέλων για συγκεκριμένες διεργασίες, με στόχο το κέρδος σε υπολογιστικό χρόνο, αν βέβαια κριθεί πως η φυσική της προσομοιωμένης διαδικασίας είναι τέτοια που η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων να παραμένει ανεπηρέαστη. Βέβαια, αν για το δοθέν πρόβλημα συνολικά ή για ένα

συγκεκριμένο φαινόμενο του προβλήματος, απαιτείται λεπτομερέστερη περιγραφή, π.χ. μεταβατικά φαινόμενα διάχυσης, τότε δύναται να επιλεχθούν πιο ακριβή μοντέλα με το αντίστοιχο κόστος στον απαιτούμενο χρόνο. Ειδικά για τις εξισώσεις διάχυσης, οι οποίες όπως είναι γνωστό έχουν συγκεκριμένη κάθε φορά μορφή ανάλογα με το μοντέλο διάχυσης που θα επιλεχτεί να χρησιμοποιηθεί, πρέπει να αναφέρουμε ότι το Sentaurus προσφέρει αρκετά μεγάλη ποικιλία μοντέλων διάχυσης όπως Charge React, React, Pair Diffusion κ.α. Στη συγκεκριμένη προσπάθεια χρησιμοποιείται το Charge React, το οποίο είναι το πιο γενικό μοντέλο διάχυσης στο Sentaurus (five stream model). Περιλαμβάνει μία ακίνητη σε θέση αντικατάστασης πρόσμιξη και μέχρι δυο κινητά φορτισμένα ζεύγη πρόσμιξης-ατέλειας. Επίσης μπορεί να συμπεριλάβει κινητές σημειακές ατέλειες. Όπως αναφέρεται και στο εγχειρίδιο χρήσης του λογισμικού, για εξαιρετικά υψηλούς ρυθμούς ανόδου της θερμοκρασίας ή για custom αρχικές συνθήκες, τα μοντέλα Charge React, React, φαίνεται να είναι οι καλύτερες επιλογές, παρά τις μεγαλύτερες απαιτήσεις σε όρους υπολογιστικής ισχύος. Επομένως στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με laser, η επιλογή αυτού το μοντέλου αποτελεί μονόδρομο. Στο κεφάλαιο 5 περιγράφονται αναλυτικά, όλες οι εξισώσεις που εμπεριέχονται στο μοντέλο αυτό.

3.5 Προσομοίωση με χρήση Kinetic Monte Carlo

3.5.1 Γενικά περί της προσέγγισης KMC

Πέραν των αναλυτικών – αριθμητικών μεθόδων, μια άλλη τάξη αρκετά διαδεδομένων αλγορίθμων που βασίζονται στη χρήση τυχαίων ή ψευδο-τυχαίων αριθμών και πιθανοτήτων είναι οι μέθοδοι Monte Carlo. Η ονομασία τους προκύπτει σε αναλογία με το Monte Carlo του Monaco, τη Μέκκα των τυχερών παιγνίων, καθώς η βασική ιδέα πίσω από τις μεθόδους αυτές βασίζεται στις έννοιες της τυχειότητας και της επαναληψιμότητας. Το σύνολο των μεθόδων αυτών χρησιμοποιείται κυρίως για την επίλυση αιτιοκρατικών προβλημάτων τα οποία μπορεί να εμφανίζουν μεγάλο βαθμό πολυπλοκότητας, μη-γραμμικότητας ή να έχουν διάφορες παραμέτρους άγνωστες έτσι ώστε να μην ενδείκνυται μια συμβατική μέθοδος αιτιοκρατικής επίλυσης. Τυπικά προβλήματα που λύνονται με χρήση αυτών των μεθόδων, είναι προβλήματα μεταβατικής φύσεως, όπου τα φαινόμενα περιγράφονται με πολύπλοκα συστήματα μη – γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με μεγάλο αριθμό συζευγμένων παραμέτρων ή σε προβλήματα όπου υπάρχει αβεβαιότητα στα δεδομένα εισόδου και στις οριακές συνθήκες. Με τον όρο Monte Carlo, δεν εννοούμε φυσικά μια συγκεκριμένη μέθοδο, αλλά ένα γενικότερο τρόπο προσέγγισης των προβλημάτων τα βασικά σημεία του οποίου συνοψίζονται στα εξής:

1. Ορισμός ενός πεδίου πιθανών δεδομένων αρχικοποίησης ενός προβλήματος
2. Παραγωγή δεδομένων με βάση την τυχειότητα στην επιλογή αριθμών
3. Διεξαγωγή αιτιοκρατικού υπολογισμού χρησιμοποιώντας τα τυχαία δεδομένα αρχικοποίησης
4. Συγκέντρωση των επιμέρους υπολογισμών στη συνολική λύση του προβλήματος.

Δύο βασικές εγγενείς ιδιότητες της μεθόδου που πρέπει να αναφερθούν εδώ, είναι αφ' ενός η εξάρτηση του υπολογισμού από τη ποιότητα της παραγωγής πραγματικά τυχαίων αριθμών, και αφ' ετέρου η αργή σύγκλιση προς ολοένα και καλύτερες προσεγγίσεις καθώς αυξάνουμε την ποσότητα των δεδομένων προς δειγματοληψία.

Στο λογισμικό Sentaurus Process, η μέθοδος Monte Carlo υλοποιείται υπό την ονομασία KMC (Kinetic Monte Carlo)¹⁴ για την προσομοίωση διαδικασιών όπως η διάχυση ή η εμφύτευση. Στην ουσία στηρίζεται σε μια παλαιότερη υλοποίηση το DADOS^{15 16 17}. Το πρόγραμμα μας προσφέρει δύο διαφορετικές παραλλαγές της μεθόδου :

- Atomistic KMC : Εφαρμόζει τον αλγόριθμο επίλυσης Monte Carlo για να προσομοιώσει την εξέλιξη ενός φαινομένου από την αρχή μέχρι το τέλος του.
- Non-Atomistic KMC : Επιτρέπει τη χρήση του αλγορίθμου Monte Carlo σαν κομμάτι μιας γενικότερης προσομοίωσης. Η υπορουτίνα KMC ανταλλάζει δεδομένα με τον αναλυτικό λύτη. Με αυτό τον τρόπο επιτρέπει στο χρήστη να εκμεταλλεύεται τις ιδιότητες του συνεχούς - αναλυτικού λύτη για υπολογισμούς κοντά στην ισορροπία και να αφήνει την KMC να κάνει τους υπολογισμούς εκτός ισορροπίας. Η παραλλαγή αυτή είναι ο θεμέλιος λίθος της υβριδικής προσέγγισης που θα παρουσιαστεί στην συνέχεια.

Βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου KMC είναι ότι λαμβάνει υπ' όψιν μόνο ατέλειες και προσμίξεις, αγνοώντας το υπόλοιπο κρυσταλλικό πλέγμα του πυριτίου, μειώνοντας έτσι δραστηκά τις απαιτήσεις σε μνήμη και σε υπολογιστική ισχύ, σε σχέση με τις συνεχείς – αριθμητικές τεχνικές, επιτρέποντας έτσι την προσομοίωση και των πλέον σύγχρονων διατάξεων. Το γιατί συμβαίνει αυτό μπορεί να γίνει εύκολα κατανοητό αν σκεφτεί κανείς ότι οι χαρακτηριστικοί χρόνοι για τις ταλαντώσεις του πλέγματος είναι της τάξης των 10^{-13} δευτερολέπτων ενώ οι αντίστοιχοι χρόνοι για πλέον ταχύτερα διαχεόμενα σωματίδια είναι της τάξης των 10^{-9} δευτερολέπτων. Συνεπώς, αγνοώντας την πληροφορία για το κρυσταλλικό πλέγμα, η μέθοδος KMC επιτυγχάνει δραστηκή μείωση του υπολογιστικού χρόνου. Κατά την πραγματοποίηση της διάχυσης, τα κινούμενα σωματίδια μπορεί να παγιδευτούν από εκτεταμένες ατέλειες, οι οποίες με τη σειρά τους εκπέμπουν μεμονωμένα σωματίδια, αλλά με συχνότητες αρκετές τάξεις μεγέθους μικρότερες από τις αντίστοιχες για άλματα μεμονωμένων σημειακών ατελειών.

Κατά την εκτέλεση της KMC για την προσομοίωση της διάχυσης, τα δεδομένα εισόδου είναι οι παράμετροι για τις ενέργειες μετάβασης, σύζευξης, εκπομπής κ.λ.π. Η μέθοδος υπολογίζει τις συχνότητες πραγματοποίησης αυτών των διεργασιών. Στην αρχή της υπολογιστικής διαδικασίας τα χρονικά βήματα είναι μικρά, όσο όμως η προσομοίωση εξελίσσεται και οι ταχέως κινούμενες ατέλειες εξαφανίζονται, το μέσο χρονικό βήμα αλλάζει, και προσαρμόζεται στις νέες συνθήκες. Επί παραδείγματι, στην αρχή της διαδικασίας της διάχυσης και αλληλεπίδρασης των ατελειών, η ταχύτερη διαδικασία είναι αυτή της μετάβασης μιας σημειακής ατέλειας με χαρακτηριστική περίοδο της τάξης των 10^{-9} δευτερολέπτων καθορίζοντας έτσι το χρονικό βήμα του υπολογισμού σε αυτό το επίπεδο. Όταν σταματήσουν να υπάρχουν κινούμενες ατέλειες το χρονικό βήμα αυξάνεται αυτόματα στα 10^{-3} δευτερόλεπτα, που είναι οι χαρακτηριστικοί χρόνοι για την εκπομπή ατελειών από την επιφάνεια ή από μια εκτεταμένη ατέλεια.

Όλοι οι υπολογισμοί του KMC γίνονται σε τρισδιάστατο υπολογιστικό πεδίο, το μέγεθος του οποίου πρέπει προφανώς να είναι όσο το δυνατόν μικρότερο για τον περιορισμό του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου, χωρίς ταυτόχρονα να επηρεάζει αρνητικά την αξιοπιστία της λύσης (αδυναμία αναπαράστασης ολοκληρωμένων ειτεταμένων ατελειών, στατιστικός θόρυβος κλπ). Αναλόγως με τις συνθήκες του εκάστοτε προβλήματος πρέπει να επιλέγεται και το βέλτιστο υπολογιστικό πεδίο μέσω διαδοχικών δοκιμών που θα διερευνούν την ανεξαρτησία λύσης από το υπολογιστικό πλέγμα. Επί παραδείγματι, για μονοδιάστατη προσομοίωση (που δύναται να συγκριθεί με δεδομένα SIMS) η KMC θα χρησιμοποιήσει όσο το δυνατόν μικρότερες πλευρικές διαστάσεις για τη μείωση του υπολογιστικού χρόνου. Παρ' όλα αυτά, πλευρικές διαστάσεις μικρότερες των 20 nm ίσως να είναι πολύ μικρές για να περιλαμβάνουν τις ειτεταμένες ατέλειες που μπορεί να σχηματιστούν. Το εμβαδόν των πλευρικών διαστάσεων πολλαπλασιαζόμενο με την εμφυτευθείσα δόση εκφράζει τον αριθμό των ιόντων που εμφυτεύθηκαν και θα πάρουν μέρος στον KMC υπολογισμό. Σε περίπτωση που έχουμε υψηλά επίπεδα συγκέντρωσης προσμίξεων, είναι δυνατό να έχουμε επαρκή ποσότητα σωματιδίων σε ένα σχετικά μικρό υπολογιστικό πεδίο. Για παράδειγμα, μια εμφυτευθείσα δόση της τάξης των 10^{15} cm^{-2} θα δημιουργήσει 4000 ιόντα για μια επιφάνεια δισκίου $20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$. Ένας τέτοιος αριθμός ιόντων είναι αρκούντως για να επιτύχουμε χαμηλό στατιστικό θόρυβο, ενώ περαιτέρω αύξηση της επιφάνειας του δισκίου θα προκαλούσε απλά και μόνο αύξηση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Είναι προφανές, λοιπόν, πως για να επιτύχουμε καλή στατιστική για χαμηλότερες δόσεις πρέπει να αυξήσουμε την επιφάνεια του δισκίου αναλόγως (μια δόση της τάξης των 10^{12} cm^{-2} θα δημιουργούσε μόνο τέσσερα ιόντα στις προαναφερθείσες διαστάσεις). Οι αναμενόμενες τιμές αύξησης του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου είναι σε αναλογία με την αντίστοιχη αύξηση στις πλευρικές διαστάσεις του υπολογιστικού χωρίου.

Η μέθοδος KMC χρησιμοποιεί ένα υπολογιστικό ψευδο-πλέγμα για να :

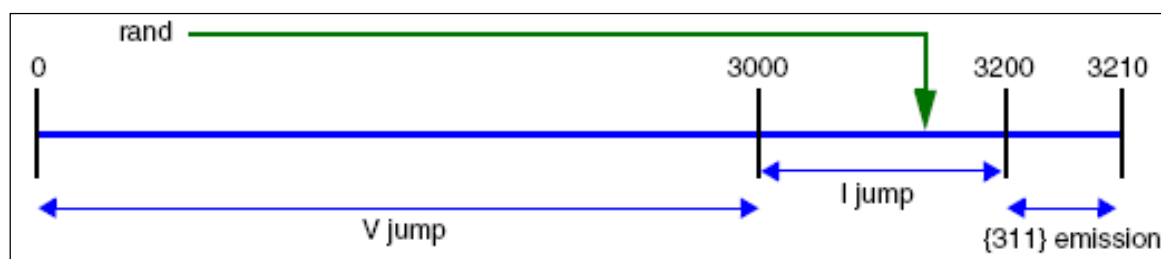
- αποθηκεύσει τη γεωμετρία και να αναθέσει τα ανά περιοχή υλικά της δομής που θα προσομοιωθεί
- επιταχύνει την εύρεση πιθανών αλληλεπιδρώντων στοιχείων με την εκάστοτε ατέλεια που ενυπάρχει στην προσομοίωση
- υπολογίσει τις ηλεκτρονικές ιδιότητες
- ορίσει τον ελάχιστο όγκο αμορφοποίησης του υποστρώματος (ίσο με ένα υπολογιστικό κελί)
- ορίσει τη βάση με την οποία θα υπολογίσει τις συγκεντρώσεις των στοιχείων κατά την εξαγωγή των αποτελεσμάτων

Το πλέγμα για την KMC υλοποίηση στο Sentaurus Process είναι γινόμενο μητρώων, ένα μητρώο για κάθε διάσταση. Το ελάχιστο δυνατό μέγεθος για κάθε υπολογιστικό κελί ορίζεται στα $0.8 \times 0.8 \times 0.8 \text{ nm}^3$. Το μέγεθος των 0.8 nm δεν είναι τυχαίο, αλλά αναφέρεται στο διπλάσιο του χαρακτηριστικού μήκους μετάβασης των σωματιδίων.

Η μορφή και το μέγεθος του πλέγματος καθορίζεται αυτόματα από το πρόγραμμα με βάση το δοθέν υπολογιστικό πεδίο. Μολαταύτα, ο χρήστης μπορεί, με συγκεκριμένες εντολές, να παρέμβει σε αυτήν την αυτοματοποιημένη διαδικασία και να προσδώσει στο πλέγμα την εκάστοτε επιθυμητή μορφή. Επίσης, υπάρχει και η δυνατότητα δυναμικής προσαρμογής του πλέγματος στις

συνθήκες επίλυσης κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης. Η εύρεση του βέλτιστου πλέγματος για μια συγκεκριμένη προσομοίωση είναι μια διαδικασία πολλές φορές χρονοβόρα και επίπονη, αφού πρέπει κανείς να εκτελέσει πολλές δοκιμές μέχρι να καταλήξει στο επιθυμητό αποτέλεσμα. Ιδιαίτερα σε προσομοιώσεις που απαιτούν μεγάλο υπολογιστικό χρόνο η επαλήθευση της ανεξαρτησίας της λύσεως από την πυκνότητα και τη μορφή του πλέγματος με στατικές αλλαγές στα κελιά θα αποτελούσε μείζον πρόβλημα αν δεν υπήρχε η δυνατότητα της δυναμικής προσαρμογής του πλέγματος με βάση τα δεδομένα των επιμέρους λύσεων. Στο συγκεκριμένο λογισμικό, η αναπροσαρμογή του πλέγματος γίνεται με βάση τις τιμές των πεδίων στα διάφορα σημεία της προσομοίωσης. Ανά τακτά διαστήματα, το μέγεθος των οποίων καθορίζεται από τον χρήστη, το πρόγραμμα ελέγχει τις τιμές επιλεγμένων πεδίων μέσα στο υπολογιστικό πεδίο και αν αυτές ξεπερνούν κάποια προκαθορισμένα από το χρήστη όρια, τότε γίνεται η αντίστοιχη αναπροσαρμογή στις πλευρές των κελιών. Με αυτόν τον τρόπο ελέγχεται η ακρίβεια της λύσης, αφού αν εντοπιστούν απότομες αλλαγές στις τιμές ενός μεγέθους σε μια γειτονιά κελιών, τότε αυτόματα πυκνώνει το πλέγμα εκεί για να γίνει πιο λεπτομερής ανάλυση των οποιονδήποτε φαινομένων.

Επιγραμματικά, η λειτουργία της KMC στηρίζεται στην δυνατότητα των προς εξέταση σωματιδίων να εκτελούν κινήσεις με προκαθορισμένο μήκος εντός του υπολογιστικού χωρίου, με συχνότητα η οποία εξαρτάται από τις αντίστοιχες ενέργειες και προεκθετικούς παράγοντες που έχουν ανατεθεί εκ των προτέρων για την δεδομένη κίνηση του σωματιδίου αυτού, ή αλληλεπίδραση του με άλλα σωματίδια ή σχηματισμούς. Το βασικό στοιχείο της μεθόδου KMC είναι ένας αλγόριθμος ο οποίος διαδοχικά επιλέγει τα πιθανά, τυχαία γεγονότα (μετανάστευση μιας σημειακής ατέλειας, εκπομπή από εκτεταμένη ατέλεια κ.λ.π.) ανάλογα με τις αντίστοιχες συχνότητες, σύμφωνα με τον αλγόριθμο των Bortz-Kalos-Liebowitz (BKL)¹⁸. Στη συνέχεια, με την βοήθεια του σχήματος 3, θα επιχειρήσουμε να επεξηγήσουμε τη διαδικασία επιλογής για μια διάταξη που αποτελείται από τρεις οπές V, δύο ενδοπλεγματικές ατέλειες I και μια ατέλεια τύπου {311}.



Εικόνα 3.3 Τα γεγονότα επιλέγονται σύμφωνα με τις αναλογίες τους, οι οποίες με τη σειρά τους καθορίζονται από την ελάχιστη ατομιστική διάταξη.

Αν υποθέσουμε πως οι συχνότητες μετάβασης για μια οπή και μια ενδοπλεγματική ατέλεια είναι 1000 sec^{-1} και 100 sec^{-1} αντίστοιχα, και πως η συχνότητα εκπομπής από μια ατέλεια {311} είναι 10 sec^{-1} , τότε για να προσομοιώσουμε ένα πραγματικό δευτερόλεπτο, πρέπει να προσομοιώσουμε 3210 γεγονότα. Συνεπώς, η προσομοίωση ενός γεγονότος αντιστοιχεί σε προσομοίωση $1/3210$ δευτερολέπτων. Αυτό υπονοεί πως το χρονικό βήμα της προσομοίωσης δεν είναι σταθερό, αλλά βασίζεται στην ελάχιστη συγκεκριμένη ατομιστική διάταξη. Επιπροσθέτως, πρέπει να επιλεγεί μια οπή με πιθανότητα $3000/3210$ και ενδοπλεγματικές ατέλειες {311} με πιθανότητες αντιστοίχως $200/3210$ και $10/3210$. Ένα τυχαίος αριθμός μεταξύ του 1 και του 3210

παράγεται και καθορίζει την εξέλιξη της διαδικασίας. Επί παραδείγματι, αν ο τυχαίος αριθμός ήταν ο 3147, τότε το επιλεγμένο γεγονός θα ήταν μια μετανάστευση ενδοπλεγματοειδούς ατέλειας I.

Μετά από αρκετά γεγονότα μετανάστευσης, όταν μια ενδοπλεγματοειδής ατέλεια θα φτάσει και θα αλληλεπιδράσει με μια οπή, η προσομοίωση θα δημιουργήσει ένα ζεύγος IV, το οποίο καλείται αμορφοποιημένος θύλακας. Το υπολογιστικό πεδίο τώρα έχει λοιπόν 2 V, 1 I, 1 IV και 1 {311}. Ας υποθέσουμε πως το IV έχει συχνότητα επανασύνδεσης 500 sec^{-1} . Ο νέος τυχαίος αριθμός θα πρέπει, επομένως, να βρίσκεται μεταξύ του 1 και του $200+100+500+10=2610$. Συνεπάγεται έτσι, ότι το χρονικό βήμα πλέον είναι $1/2610$ δευτερόλεπτα. Εάν η τυχαία επιλογή καταλήξει στην επανασύνδεση του αμορφοποιημένου θύλακα αυτός θα εξαφανιστεί και το επόμενο βήμα θα περιέχει μόνο 2 V, 1 I και 1 {311} με σύμφωνο χρονικό βήμα $1/2110$ δευτερόλεπτα.

Εδώ πρέπει να τονίσουμε ότι το χρονικό βήμα εξαρτάται από τον αριθμό των σωματιδίων και από τις συχνότητες των γεγονότων (events) που συνδέονται με τα σωματίδια και τις ατέλειες, οι οποίες με την σειρά τους εξαρτώνται από τους εξής τρεις παράγοντες:

- Είδος του γεγονότος
- Τύπος του Arrhenius plot που σχετίζεται με το γεγονός αυτό
- Θερμοκρασία

Δύο ακόμα σημαντικές παράμετροι της χρήσης αλγορίθμων KMC είναι η γεννήτρια τυχαίων αριθμών και ο υπολογιστικός χρόνος. Η πρώτη προσφέρει μια ακόμα δυνατότητα ελέγχου για την απουσία στατιστικών αποκλίσεων στη λύση. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί μέσω της αλλαγής του “σπόρου” (seed), της γεννήτριας των ψεύδο-τυχαίων αριθμών. Σε περίπτωση που η λύση εξαρτάται από την επιλογή του “σπόρου”, τότε πρέπει να γίνει επανέλεγχος στις διάφορες παραμέτρους της διαδικασίας γιατί τα αποτελέσματα δεν είναι σωστά.

Ο υπολογιστικός χρόνος και η απαιτούμενη μνήμη για να διεκπεραιωθεί μια προσομοίωση KMC είναι ευθέως ανάλογα του αριθμού των σωματιδίων που ενυπάρχουν στη διάταξη που λύνουμε. Τυπικά, για ένα συνηθισμένο επεξεργαστή με χρονισμό στα 2GHz η μέθοδος KMC θα πραγματοποιήσει ένα εκατομμύριο γεγονότα (μεταβάσεις σωματιδίων) σε ένα δευτερόλεπτο, ενώ για πιο εξελιγμένους επεξεργαστές της αυτής ταχύτητας ο αριθμός μπορεί να προσεγγίσει και τα δύο εκατομμύρια.

Σε κατάσταση ισορροπίας και χωρίς δημιουργία καταστροφής λόγω της διαδικασίας εμφύτευσης, οι συγκεντρώσεις των κινούμενων στοιχείων είναι μικρές και τα γεγονότα που δύνανται να συμβούν σπάνια. Επομένως, η προσομοίωση απαιτεί μικρότερο υπολογιστικό χρόνο για να περατωθεί. Σε συνθήκες όμως που κυριαρχούν μεταβατικά φαινόμενα διάχυσης μετά από το βήμα της εμφύτευσης, χρειάζεται αρκετός χρόνος για τον υπολογισμό. Ανάλογα με τις συνθήκες εμφύτευσης, ένα τυπικό εμφυτευόμενο ιόν θα παράγει μέχρι 10^3 ενδοπλεγματοειδείς ατέλειες και οπές. Κάθε ενδοπλεγματοειδής ατέλεια ή οπή πραγματοποιεί κατά μέσο όρο 10^5 μεταβάσεις μέχρι να επανασυνδεθεί στην επιφάνεια. Πρακτικά, αυτό σημαίνει πως χρειάζεται περίπου ένα δευτερόλεπτο υπολογιστικού χρόνου για κάθε εμφυτευόμενο ιόν. Οι διαδικασίες συσσωμάτωσης και εκπομπής καταναλώνουν περισσότερο χρόνο από ότι οι αντίστοιχες των απλών μεταβάσεων. Αν επιπλέον των απλών μεταβάσεων έχουμε και μεταβολές στις ηλεκτρονιακές συγκεντρώσεις ή τη θερμοκρασία, αυτό συνεπάγεται αύξηση του απαιτούμενου χρόνου καθώς πρέπει να ανανεώνονται κάθε φορά οι θερμοκρασιακές εξαρτήσεις και το επίπεδο Fermi. Οι παραπάνω τιμές προφανώς είναι ενδεικτικές

και διαφέρουν ανάλογα με τον ελάχιστο υπολογιστή, το λειτουργικό του σύστημα και άλλους παράγοντες.

3.5.2 Εμφύτευση

Το μοντέλο εμφύτευσης του Sentaurus KMC έχει σχεδιαστεί ώστε να είναι γενικά ακριβές για τις περισσότερες δυνατές συνθήκες εμφύτευσης. Έχει βαθμονομηθεί για ενέργειες από μερικές εκατοντάδες eV μέχρι και 10 MeV και για διάφορες συνθήκες, όπως τυχαία κατεύθυνση εμφύτευσης, διεύθυνση καναλισμού κλπ.

Κατά τη διάρκεια της εμφύτευσης, ψευδοσωματίδια που αναπαριστούν μέρος της ολικής δόσης εκκινούν από την επιφάνεια, η οποία κατασκευάζεται πάνω από το στόχο παράλληλα στην επιφάνεια του δισκίου. Τα ψευδοσωματίδια αυτά είναι στατιστικά μεγέθη και το καθένα μπορεί να αναπαριστά αρκετά πραγματικά σωματίδια ή κλάσμα ενός πραγματικού σωματιδίου. Για διδιάστατες και τρισδιάστατες γεωμετρίες η επιφάνεια εκκίνησης χωρίζεται σε τμήματα ίσου μεγέθους για τα οποία η αντίστοιχη δόση υπολογίζεται.

Το πρόγραμμα δύναται να προσομοιώσει και μοριακά ιόντα ή συσσωματώματα ατομικών στοιχείων, όπως π.χ. το BF_2 . Η υπόθεση που γίνεται είναι πως το εμφυτευόμενο μόριο διασπάται απευθείας στα συστατικά του τη στιγμή που έρχεται σε επαφή με την επιφάνεια του δισκίου. Στη συνέχεια, τα εν λόγω συστατικά κινούνται ως ξεχωριστά σωματίδια, αλληλεπιδρώντας μόνο εμμέσως μέσω της φθοράς που προκαλούν στο πλέγμα.

Οι θέσεις των ατόμων του στόχου υπολογίζονται με βάση τον τύπο του κρυσταλλικού πλέγματος. Η κρυσταλλική δομή αποτελείται από μια ατομική βάση (ένα μεμονωμένο άτομο ή μια ομάδα ατόμων) η οποία προσαρμόζεται στα ελάχιστα σημεία του πλέγματος. Οι θερμικές ταλαντώσεις των ατόμων στόχου παίζουν σημαντικό ρόλο στη συμπεριφορά της κίνησης ενός ιόντος σε ένα μονοκρυσταλλικό υλικό. Συγκεκριμένα, στην KMC εμφύτευση μόνο στιγμιαίες θερμικές μετατοπίσεις των ατόμων στόχου από τις ιδανικές τους θέσεις στο πλέγμα λαμβάνονται υπόψη. Οι μετατοπίσεις αυτές θεωρείται πως υπακούουν σε μια τρισδιάστατη γκαουσιανή κατανομή με ενεργό (RMS) τιμή που προκύπτει από το μοντέλο Debye¹⁹.

Καθώς τα ιόντα ταξιδεύουν μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα του στόχου, συγκρούονται με τα άτομα του στόχου εκτοπίζοντας αρκετά από αυτά από τις θέσεις που καταλάμβαναν αρχικά στο πλέγμα. Ο εκτοπισμός αυτός λαμβάνει χώρα στην περίπτωση όπου η μεταφερόμενη από το ιόν στο άτομο του στόχου ενέργεια υπερβαίνει ένα συγκεκριμένο κατώφλι. Το εκτοπισμένο άτομο πραγματοποιεί μεταβάσεις μέσα στο πλέγμα έως ότου κάποια στιγμή φτάνει σε ηρεμία οπότε και πλέον θεωρείται ενδοπλεγματική ατέλεια.

Το Sentaurus KMC δύναται να υπολογίσει τη συσσώρευση της φθοράς από τα εισερχόμενα ιόντα με βάση δύο μοντέλα. Στο πρώτο μοντέλο, αφού υπολογιστεί η εναποτιθέμενη ενέργεια E_D από το προσπίπτον ιόν στο άτομο στόχου για μια σκέδαση, τότε με βάση το μοντέλο Kinchin-Pease²⁰ μπορούμε να βρούμε τον αριθμό των ατελειών που θα προκύψουν στη συνέχεια από το σκεδαζόμενο άτομο στόχου. Το πλήθος των ατελειών δίνεται από την σχέση $n(x) = \kappa(E_D/2D_{thr})$, όπου $\kappa=0.8$ και $D_{thr}=15$ eV η ενέργεια αποκόλλησης του ατόμου στόχου από το πλεγματικό σημείο. Στο δεύτερο μοντέλο, το πρόγραμμα ακολουθεί την πορεία όλων των δευτερευόντως σκεδαζομένων ατόμων του στόχου. Τα άτομα πυριτίου που εκτοπίζονται από την πλεγματική τους

θέση μπορούν, με τη σειρά τους, να εκτοπίσουν άλλα άτομα, δημιουργώντας έτσι μια αλυσίδα σκεδάσεων με προφανές αποτέλεσμα τη συσσώρευση φθοράς στο κρυσταλλικό πλέγμα. Οι τροχιές των ατόμων αυτών υπολογίζονται με την ίδια ακρίβεια όπως και οι αντίστοιχες των ιόντων. Κάθε φορά που ένα άτομο εκτοπίζεται από την πλεγματοκή του θέση δημιουργείται μια οπή στην προσομοίωση. Αντίστοιχα, όταν το εκτοπιζόμενο άτομο ηρεμήσει ευρισκόμενο σε ενδοπλεγματοκή θέση, τότε δημιουργείται μια ενδοπλεγματοκή ατέλεια. Κατά την εξέλιξη των παραπάνω διεργασιών κάποιες ατέλειες δε θα επιβιώσουν και θα επανασυνδεθούν (επανασύνδεση I-V) αφαιρώντας, έτσι, μια ενδοπλεγματοκή ατέλεια και μια οπή από τον υπόλοιπο υπολογισμό.

Το φαινόμενο του καναλισμού λαμβάνεται υπόψη στη μεθοδολογία KMC αφού στον υπολογισμό εμπεριέχεται και η πληροφορία για την κρυσταλλική δομή. Καθώς όμως συσσωρεύεται η φθορά τα φαινόμενα καναλισμού μειώνονται, λόγω της προφανούς αλλοίωσης της δομής. Μάλιστα, όταν τα επίπεδα καταστροφής σε μια περιοχή φτάσουν σε μια κρίσιμη τιμή, τότε το πρόγραμμα αλλάζει το χαρακτηρισμό της περιοχής από κρυσταλλική σε αμορφοποιημένη. Εάν η τοπική συγκέντρωση ατελειών ξεπεράσει το κατώφλι αμορφοποίησης, τότε η περιοχή τοπικά χαρακτηρίζεται αμορφοποιημένη αλλάζοντας έτσι τα δεδομένα υπολογισμού. Για την μετάβαση από την κρυσταλλική στην άμορφη περιοχή το λογισμικό απαιτεί την συνολική συγκέντρωση της ζημιάς να είναι ίσο με το ένα τέταρτο της συγκέντρωσης του πυριτίου (1.15×10^{22} άτομα/cm³).

3.5.3 Μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης

Η προσέγγιση της μοντελοποίησης της διάχυσης των προσμίξεων με βάση αναλυτικές (continuum) τεχνικές στηρίζεται στην επίλυση συστημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες περιγράφουν την μεταφορά των προσμίξεων και την διατήρηση της δόσης. Η προσέγγιση αυτή αποδείχτηκε ιδιαίτερα χρήσιμη στον σχεδιασμό ημιαγωγικών διατάξεων κατά το παρελθόν, όμως πιθανόν να φανεί ανεπαρκής να περιγράψει με ακρίβεια όλα τα φαινόμενα κατά την κατασκευή των επόμενων γενεών ολοκληρωμένων κυκλωμάτων.

Η ελαχιστοποίηση των ποσοτήτων θερμότητας που εισάγονται στον όγκο του υλικού κατά τις διαδικασίες θερμικής ανόπτησης, οδηγεί σε δραστηκή μείωση της διάχυσης και ως εκ τούτου καθιστά λιγότερο επιτακτική την ανάγκη για ακριβή μοντελοποίηση της διάχυσης. Από την άλλη πλευρά, τα φαινόμενα που σχετίζονται με την ενεργοποίηση των προσμίξεων (που περιλαμβάνουν τον σχηματισμό μιας ποικιλίας ζευγών προσμίξεων-ατελειών καθώς και εκτεταμένων ατελειών) συχνά δεν φτάνουν σε θερμοδυναμική ισορροπία, με αποτέλεσμα να απαιτείται η μελέτη τους περισσότερο σε μεταβατικό καθεστώς, παρά σε ισορροπία. Σε συνεχή μοντέλα διάχυσης αυτό απαιτεί την χρήση μιας εξίσωσης για κάθε πιθανή διάταξη (configuration) πρόσμικης – ατέλειας, η οποία με την σειρά της οδηγεί σε μεγάλη αύξηση των προς επίλυση εξισώσεων.

Λόγω της συνεχούς σμίκρυνσης των διαστάσεων των διατάξεων, η τάση κατωφλίου ενός τρανζίστορ έχει φτάσει σε σημείο να εξαρτάται από ένα πολύ μικρό αριθμό (μερικές δεκάδες ή λίγες εκατοντάδες) προσμίξεων. Είναι ιδιαίτερα πιθανόν πολύ σύντομα να ξεπεραστεί το όριο όπου οι μικρές διακριτές συγκεντρώσεις που παίζουν κυρίαρχο ρόλο στην διαμόρφωση των χαρακτηριστικών λειτουργίας του τρανζίστορ να μην μπορούν πια να περιγραφούν με ακρίβεια με την χρήση συνεχών προσεγγίσεων.

Όπως προαναφέραμε κατά την υλοποίηση της μεθόδου KMC το λογισμικό λαμβάνει υπόψη μια σειρά από σωματίδια, είτε κατά μονάς είτε σε συνδυασμούς. Στο κεφάλαιο 5 που πραγματεύεται την κινητική της διάχυσης θα αναφερθούμε στον τρόπο με τον οποίο μοντελοποιούνται τα σημαντικότερα από αυτά τα σωματίδια.

3.6 Υβριδική προσομοίωση

Η Synopsys σε σχετικές της δημοσιεύσεις²¹ – παραδείγματα περιπτώσεων, προτείνει και μια τρίτη προσέγγιση για την προσομοίωση της κατασκευής ολοκληρωμένων διατάξεων. Συγκεκριμένα υιοθετεί μια υβριδική προσέγγιση η οποία συνδυάζει συνεχείς και KMC τεχνικές, χωρίζοντας στην ουσία την μελέτη της διαδικασίας παρασκευής σε δυο ξεχωριστά τμήματα. Στην αρχή χρησιμοποιούνται συνεχείς τεχνικές για την μοντελοποίηση των πρώτων βημάτων μέχρι και το στάδιο της επανοξείδωσης της πύλης (τα οποία περιλαμβάνουν εκτός των άλλων τα στάδια εμφύτευσης και ανόπτησης των καναλιών). Στη συνέχεια εφαρμόζονται τεχνικές KMC για τα υπόλοιπα βήματα, τα οποία είναι και τα πιο κρίσιμα (όπως ο σχηματισμός των LDD και των HALO περιοχών, καθώς και η ανόπτηση σε καθεστώς millisecond). Το μεγάλο πλεονέκτημα αυτής της στρατηγικής είναι η μείωση του υπολογιστικού χρόνου, και για την υλοποίηση της εφαρμόζονται διάφορες στρατηγικές για την μετατροπή των συνεχών ποσοτήτων σε ατομικιστικές και το αντίστροφο (atomization και deatomization αντίστοιχα).

3.7 Ανακεφαλαίωση

Συμπερασματικά, το Sentaurus Process της Synopsys, προσφέρει την δυνατότητα μοντελοποίησης και προσομοίωσης των σημαντικότερων διαδικασιών που εμπλέκονται στην κατασκευή μιας διάταξης CMOS, από την εμφύτευση έως και το τελικό packaging. Με εξαίρεση την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με την ύλη η οποία μπορεί να αντιμετωπιστεί μόνο με συνεχείς τεχνικές, για όλα τα υπόλοιπα βήματα μπορούμε να καταφύγουμε τόσο σε αναλυτικές μεθόδους όσο και σε αυτές που χρησιμοποιούν KMC αλγορίθμους ή ακόμα και σε υβριδικές που συνδυάζουν τις δυο παραπάνω υλοποιήσεις.

Βιβλιογραφικές Αναφορές 3^{ου} κεφαλαίου

Synopsys Sentaurus Process User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Carlo User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Advanced Calibration User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Solvers User Guide ver. 2008.09

¹ R. E. Bank, W. M. Coughran, W. Fichtner et al., *IEEE Transactions on Computer-Aided Design, CAD-4*, 436–451, 1985.

² O. Schenk, *Scalable Parallel Sparse LU Factorization Methods on Shared Memory Multiprocessors*, *Series in microelectronics*, vol. 89, Konstanz, Germany: Hartung- Gorre, 2000.

- ³ O. Schenk, M. Hagemann, and S. Röllin, in *International Conference on Simulations of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, Boston, MA, USA, pp. 103–108, September 2003.
- ⁴ L. Dagum and R. Menon, *IEEE Computational Science & Engineering*, vol. 5, no. 1, pp. 46–55, 1998.
- ⁵ D. R. Fokkema, G. L. Sleijpen, and H. A. van der Vorst, „*SIAM Journal of Scientific Computing*, vol. 19, no. 2, pp. 657–674, 1998.
- ⁶ S. Walther, L. Godet, T. Buyuklimanli et al., *J. Vac Sci. Technol. B* 24 (1) (2006) 489.
- ⁷ H. Rysset et al., *J. Appl. Phys.*, 24, 39 (1981).
- ⁸ G. Hobler and S. Selberherr, *IEEE Trans. Comput. Aided Des.*, vol. 7, no. 2, pp. 174–180, 1988.
- ⁹ J. F. Gibbons, W. S. Johnson, and S. W. Mylroie, *Projected Range Statistics: Semiconductors and Related Materials*, Pennsylvania: Dowden, Hutchinson & Ross, 2nd ed., 1975.
- ¹⁰ C. Zechner et al., “New Implantation Tables for B, BF₂, P, As, In and Sb,” in *14th International Conference on Ion Implantation Technology (IIT)*, Taos, NM, USA, pp. 567–570, September 2002.
- ¹¹ S. Tian, V. Moroz, and N. Strecker, in *MRS Symposium Proceedings, Silicon Front-End Junction Formation—Physics and Technology*, vol. 810, San Francisco, CA, USA, pp. 287–292, April 2004.
- ¹² S. J. Morris et al., *IEEE Trans. Semicond. Manuf.*, vol. 8, no. 4, pp. 408–413, 1995.
- ¹³ R. B. Fair and P. N. Pappas, *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 122, no. 9, pp. 1241–1244, 1975.
- ¹⁴ S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 15, no. 1, 1-89 (1943)
- ¹⁵ I. Martin-Bragado, *Simulación atomística de procesos para Microelectrónica*, Ph.D. thesis, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain, 2004.
- ¹⁶ M. Jaraiz et al., in *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, Athens, Greece, pp. 10–17, September 2001.
- ¹⁷ N. Strecker, V. Moroz, and M. Jaraiz, in *Technical Proceedings of the International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems (Nanotech 2002)*, vol. 1, San Juan, Puerto Rico, USA, pp. 462–465, April 2002.
- ¹⁸ A. B. Bortz and M. H. Kalos and J. L. Lebowitz, *Journal of Computational Physics* 17 (1975) 10
- ¹⁹ P. Debye *Annalen der Physik (Leipzig)* 39(4), p. 789 (1912)
- ²⁰ G.H. Kinchin and R.S. Pease, *Rep. Prog. Phys.*, vol. 18, pp. 1-51, 1955.
- ²¹ Sentaurus Technology Template: 45-nm Reference Flow and CMOS Processing

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ LASER ΜΕ ΤΗΝ ΎΛΗ

4.1 Εισαγωγή

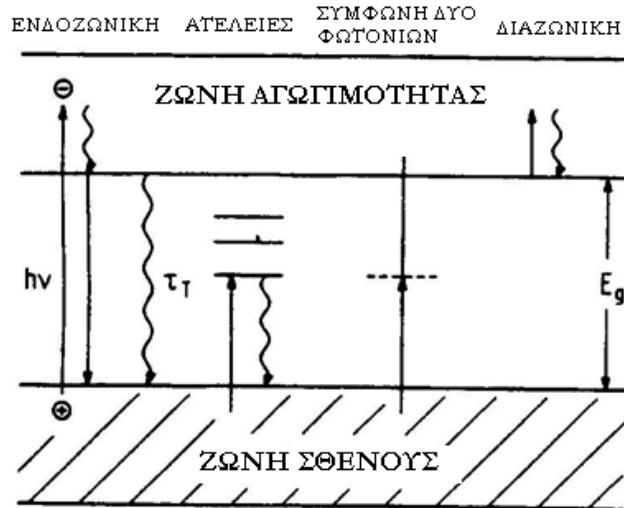
Τις τελευταίες δεκαετίες, έχει εδραιωθεί η χρήση των laser τόσο για επιστημονικές, ιατρικές, αμυντικές όσο και για βιομηχανικές εφαρμογές. Το γεγονός αυτό πηγάζει από τις μοναδικές ιδιότητες της ακτινοβολίας laser. Η υψηλή χωρική συμφωνία που επιτυγχάνεται, επιτρέπει εξαιρετική εστίαση και κατευθυντική ακτινοβολή υπό υψηλότερες τιμές πυκνότητας ενέργειας. Τα παραπάνω χαρακτηριστικά, σε συνδυασμό με την μονοχρωματικότητα των πηγών laser, επιτρέπει την χρησιμοποίησή τους σε ένα εύρος διαφορετικών εφαρμογών, ανάμεσα στις οποίες μπορούμε να ξεχωρίσουμε την κοπή μετάλλων, την εγχάραξη (etching), σχηματισμό πλάσματος (plasma formation), την χημική εναπόθεση μέσω ατμών (laser CVD), πλήθος ιατροβιολογικών και αμυντικών εφαρμογών αλλά την και ταχεία θερμική ανόπτηση ημιαγωγών. Η ανάγκη για την βελτιστοποίηση των διαδικασιών αυτών επιβάλλει την ενδελεχή μελέτη της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας του laser με το υλικό - στόχο, καθώς και σε ορισμένες περιπτώσεις, με το μέσο διάδοσης. Τα φαινόμενα αυτά είναι συνήθως περίπλοκα και εξαρτώνται από μια σειρά παραμέτρων, όπως το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, την διάρκεια παλμού, το υλικό πρόσπτωσης, το μέσο διάδοσης και την πυκνότητα ενέργειας. Στην προκειμένη περίπτωση θα μελετήσουμε την αλληλεπίδραση δυο διαφορετικών τύπων laser (Excimer KrF και CO₂) με το κρυσταλλικό πυρίτιο, περιγράφοντας πρώτα τις βασικές οπτικές και θερμικές διαδικασίες που σχετίζονται με αυτή και στη συνέχεια θα εξετάσουμε τα φαινόμενα μακροσκοπικά, με βάση την εξίσωση διάδοσης της θερμότητας. Οι επιμέρους διαφοροποιήσεις όσον αφορά τους μηχανισμούς διέγερσης αλλά και τους χαρακτηριστικούς χρόνους των δυο τύπων laser, επιβάλλουν την ξεχωριστή περιγραφή τους σε ορισμένα σημεία.

4.2 Μηχανισμοί διέγερσης και μετατροπής σε θερμότητα

Οι πρωταρχικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ της ακτινοβολίας και της ύλης είναι πάντοτε μη θερμικής φύσεως. Στις διεργασίες με χρήση laser, οι σχετιζόμενες διεγέρσεις μπορούν να κατηγοριοποιηθούν, ανάλογα με το εάν αφορούν το υπό επεξεργασία υπόστρωμα, το μέσο διάδοσης ή ακόμα και ένα πιθανό μέσο απορρόφησης της ακτινοβολίας.

Στα στερεά, το φως μπορεί να αλληλεπιδράσει μέσω πρωτογενών διεγέρσεων οι οποίες είναι οπτικά ενεργές. Ανάμεσα σε αυτές περιλαμβάνονται διάφοροι τύποι ηλεκτρονικών διεγέρσεων (ενδοζωνικές και διαζωνικές μεταβάσεις, πλασμόνια, εξιτόνια, κ.α.) καθώς και διεγέρσεις φωτονίων, πολαριτονίων, μαγνιτονίων και άλλων. Επιπρόσθετα, δύνανται να υπάρχουν χωρικά εντοπισμένες ή μη εντοπισμένες ηλεκτρονιακές ή ταλαντωτικές καταστάσεις οι οποίες να σχετίζονται με ατέλειες, προσμίξεις ή και την ίδια την επιφάνεια του στερεού. Μερικές από αυτές τις μεταβάσεις αναπαριστώνται στο σχήμα 4.1, με την E_g να εκφράζει την διαφορά ανάμεσα στις ζώνες σθένους και

αγωγιμότητας. Καταρχάς, μπορούμε να διακρίνουμε τις διαζωνικές μεταβάσεις, οι οποίες πραγματοποιούνται για $h\nu \geq E_g$ (1.12 eV στην περίπτωση του κρυσταλλικού πυριτίου στους 300K). Ο επόμενος τύπος διέγερσης, σχετίζεται με απορρόφηση φωτονίων από ατέλειες, όπως π.χ. προσμίξεις. Άλλες μεταβάσεις περιλαμβάνουν πολυφωτονικές ή ενδοζωνικές διεγέρσεις. Σε όλα τα συστήματα, διαφορετικές πρωτογενείς διεγέρσεις συζευγνύονται μέσω αναρμονικών, ή υψηλής τάξης, διπολικών αλληλεπιδράσεων.



Εικόνα 4.1 Σχηματική αναπαράσταση των διαφορετικών τύπων ηλεκτρονικών διεγέρσεων σε ένα στερεό. Μόνο η υψηλότερη Ζώνη Σθένους (VB) και η χαμηλότερη Ζώνη Αγωγιμότητας (CB) εμφανίζονται. Οι ευθείες γραμμές παριστάνουν απορρόφηση ή εκπομπή φωτονίων με διαφορετικές ενέργειες. Οι καμπυλωμένες γραμμές παριστάνουν μη ακτινοβολητικές διαδικασίες. Διαζωνικές μεταβάσεις $VB \rightarrow CB$, λαμβάνουν χώρα, εφόσον $h\nu \geq E_g$. Κατά τη διάρκεια αυτής της διαδικασίας γεννάται ζεύγος ηλεκτρονίου οπής. Η παρουσία ατελειών, προσμίξεων και επιφανειακών καταστάσεων, συχνά επιτρέπει μεταβάσεις εντός του ενεργειακού χάσματος $h\nu \leq E_g$. Σε ακτινοβολήσεις με μεγάλη πυκνότητα ενέργειας φαινόμενα διαδοχικών πολυφωτονικών διεγέρσεων μέσω καταστάσεων ατελειών ή σύμφωνων πολυφωτονικών διεγέρσεων γίνονται σημαντικά. Τέλος ενδοζωνικές, μεταβάσεις είναι τυπικές για διεγέρσεις με laser CO_2 σε μέταλλα ή σε ημιαγωγούς σε υψηλές θερμοκρασίες [Bauerle].

Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι υψηλές πυκνότητες ενέργειας οδηγούν στην δημιουργία μεγάλων πυκνοτήτων διεγερμένων ειδών είτε θερμικά, είτε μη θερμικά. Οι συγκεντρώσεις αυτών των σωματιδίων (μόρια, άτομα, ηλεκτρόνια κ.α.) μπορούν να υπερβούν ακόμα και τα 10^{22} είδη/cm³. Η σύζευξη των πρωτογενών διεγέρσεων μεταξύ τους αλλά και με την έντονη ακτινοβολία laser, οφείλεται για την εμφάνιση μιας σειράς νέων φαινομένων. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι οι μεταβολές στην ενεργό διατομή απορρόφησης, η θερμική διαφυγή στα μέταλλα και στους ημιαγωγούς, η θερμική αυτοεστίαση σε διαφανή μέσα, καθώς και η εμφάνιση μεγάλων πυκνοτήτων ελεύθερων φορέων σε ημιαγωγούς λόγω διαζωνικών διεγέρσεων και ιονισμών λόγω συγκρούσεων. Στην περίπτωση ακτινοβόλησης με ακόμα υψηλότερη πυκνότητα ενέργειας μη γραμμικά φαινόμενα, όπως αυτοεστίαση καθώς και πολυφωτονικές διεργασίες, διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο. Τέλος, κάτω από εξαιρετικά έντονες συνθήκες ακτινοβόλησης μπορεί να παρατηρηθούν σχηματισμός πλάσματος και detonation waves.

Μετά την απορρόφηση ενέργειας από τους φορείς, η ενέργεια ανακατανέμονται στο υλικό με μια από τις επόμενες διαδικασίες: συγκρούσεις μεταξύ των φορέων, δημιουργία πλασμονίων,

επανασύνδεση ηλεκτρονίου - οπής μέσω της διαδικασίας Auger, δημιουργία ζεύγους ηλεκτρονίου - οπής λόγω ιονισμού και εκπομπή φωτονίου. Συγκεκριμένα, όταν η συγκέντρωση των φορέων είναι μεγάλη, οι συγκρούσεις μεταξύ τους είναι πολύ συχνές, με αποτέλεσμα η διαδικασία δημιουργίας πλασμονίων να επικρατεί της εκπομπής φωτονίων. Επειδή ο χρόνος εφησυχασμού για τις συγκρούσεις των φορέων είναι πολύ μικρός, τελικά αποκαθίσταται ισορροπία στην θερμοκή κατανομή των φορέων προτού κάποιο ουσιαστικό ποσό ενέργειας δοθεί στο πλέγμα. Τόσο η διαδικασία Auger, όσο ο ιονισμός δεν μεταφέρει ενέργεια από τους φορείς στο πλέγμα. Κατά την διαδικασία Auger, έχουμε την καταστροφή ενός ζεύγους ηλεκτρονίου οπής με ταυτόχρονη μεταφορά ενέργειας σε ένα ηλεκτρόνιο της Ζώνης Αγωγιμότητας. Αντίθετα κατά τον ιονισμό, ένα ηλεκτρόνιο δημιουργεί ένα ζεύγος ηλεκτρονίου οπής. Η διαδικασία Auger είναι πιο συχνή, αφού χρειάζεται ενέργεια ίση με E_g , ενώ ο ιονισμός απαιτεί ενέργεια $3E_g$. Επίσης η εκπομπή φωτονίων (αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - φωνονίου) προκαλεί μεταφορά ενέργειας στο πλέγμα με αποτέλεσμα την αύξηση της θερμοκρασίας.

Ο χρόνος διάρκειας της μετατροπής της ενέργειας διέγερσης σε θερμότητα (thermalization) εξαρτάται από το είδος του υλικού και τις παραμέτρους του laser. Όσον αφορά τα μέταλλα, τα φωτόνια απορροφώνται σχεδόν αποκλειστικά από τα ηλεκτρόνια της Ζώνης Αγωγιμότητας. Η διάρκεια των συγκρούσεων ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου τ_{e-e} είναι της τάξης των 10^{-14} με 10^{-12} s. Οι αντίστοιχοι χαρακτηριστικοί χρόνοι (relaxation time) για τις σκεδάσεις ηλεκτρονίων φωτονίων τ_{e-ph} , είναι αισθητά μεγαλύτεροι λόγω της μεγάλης διαφοράς των μαζών των ηλεκτρονίων και των ιόντων. Ανάλογα με την ισχύ της σύζευξης ηλεκτρονίου - φωνονίου, για τον χρόνο αυτό, μπορεί να ισχύει $10^{-12} \text{ s} \leq \tau_{e-ph} \leq 10^{-10} \text{ s}$. Παρόμοιοι χαρακτηριστικοί χρόνοι μπορούν να βρεθούν για τα ημι-δέσμια (quasi-free) ηλεκτρόνια της Ζώνης Αγωγιμότητας για τους ημιαγωγούς, όπως το πυρίτιο.

Σε μη μεταλλικά υλικά, οι διαζωνικές μεταβάσεις μπορεί να διαρκέσουν πολύ περισσότερο, ποικίλλοντας από 10^{-12} έως 10^{-6} s. Οι διεγέρσεις από τοπικά εντοπισμένες ηλεκτρονικές καταστάσεις που σχετίζονται με την παρουσία ατελειών, προσμίξεων ή και την επιφάνεια έχουν ακόμα μεγαλύτερους χρόνους ζωής. Τα δε φωνόνια στα μη μεταλλικά υλικά μπορούν να διεγερθούν απευθείας μέσω υπέρυθρης ακτινοβολίας. Σε κάθε περίπτωση, πρέπει να δοθεί έμφαση στο γεγονός ότι σε ακτινοβολήσεις πολύ υψηλής έντασης, οι μηχανισμοί διέγερσης και μεταφοράς ενέργειας μπορεί να διαφοροποιηθούν αισθητά σε σχέση με ότι συμβαίνει για χαμηλότερης έντασης ακτινοβολήσεις.

Το επόμενο και τελευταίο στάδιο των μη θερμικών διαδικασιών συνίσταται στην ανακατανομή των φωνονίων σε ολόκληρη Ζώνη Brillouin σύμφωνα με την κατανομή Bose-Einstein. Σε αυτό το στάδιο καθορίζεται η θερμοκρασία από τα χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας. Όλη αυτή η διαδικασία έχει ολοκληρωθεί πριν την παρέλευση ενός νανοδευτερολέπτου.

Από την στιγμή που ένα ηλεκτρόνιο διεγερθεί σε μια υψηλότερη ενεργειακή στάθμη, υπάρχουν δυο διαφορετικοί τρόποι αποδιέγερσης σε μια πιο χαμηλή. Η πρώτη είναι μέσω σκεδάσεων ηλεκτρονίων - φωνονίων (απορρόφηση πλέγματος), με αποτέλεσμα την μεταφορά ενέργειας σε ολόκληρη την ζώνη Brillouin και την τοπική θέρμανση του πλέγματος. Η άλλη πιθανότητα σχετίζεται με την διέγερση ηλεκτρονίων που βρίσκονται εντός της ζώνης αγωγιμότητας σε μια υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση. Η αποκαλούμενη και απορρόφηση μέσω ελεύθερων φορέων, είναι πιο πιθανόν να συμβεί όταν η ζώνη αγωγιμότητας περιέχει μεγάλο πληθυσμό

ελεύθερων φορέων, όπως στην περίπτωση που έχουμε υψηλές θερμοκρασίες ή / και επίπεδα νόθευσης.

Οι διαφορετικές ενέργειες φωτονίων των Excimer KrF (5 eV) και του CO₂ (117 meV), οι οποίες βρίσκονται εκατέρωθεν της τιμής του ενεργειακού χάσματος του πυριτίου ($E_g^{300K}=1.12$ eV), οδηγούν και σε διαφορετικούς μηχανισμούς αλληλεπίδρασης με αυτό. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται, στην περίπτωση των φωτονίων με μεγάλο μήκος κύματος, την σημαντική εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και τα επίπεδα νόθευσης σε κάθε περίπτωση, κάτι το οποίο δεν συμβαίνει για τα φωτόνια με μήκος κύματος στην υπεριώδη περιοχή. Η διαφοροποίηση αυτή θα οδηγήσει σε διαφορετικές στρατηγικές ακτινοβολήσης, όπως θα δούμε και στη συνέχεια.

Πιο συγκεκριμένα, στην περίπτωση του KrF Excimer ($\lambda=248$ nm) η πολύ μεγάλη ενέργεια των φωτονίων, εξασφαλίζει την απορρόφηση της οπτικής ενέργειας, μέσω διαζωνικών μεταβάσεων. Το γεγονός αυτό έχει άμεσο αντίκτυπο και στον συντελεστή απορρόφησης του πυριτίου a , ο οποίος παρουσιάζει ανεπαίσθητη εξάρτηση τόσο από την θερμοκρασία, όσο και τα επίπεδα νόθευσης. Επιπλέον, εξαιτίας της μεγάλης πιθανότητας της μετάβασης λόγω μεγάλης ενέργειας, ο συντελεστής απορρόφησης έχει πολύ μεγάλη τιμή (1.67×10^6 cm⁻¹), με συνέπεια το οπτικό μήκος απορρόφησης να είναι πάρα πολύ μικρό (5.5 nm).

Αντιθέτως, η πολύ μικρή ενέργεια των φωτονίων του CO₂ laser, δεν επιτρέπει την απευθείας μετάβαση φορέων από την ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας. Στην περίπτωση αυτή, η απορρόφηση καθίσταται δυνατή κυρίως μέσω φωτοδιέγερσης ελεύθερων φορέων¹, γεγονός που θα διαδραματίσει καταλυτικό ρόλο στην μορφή του συντελεστή απορρόφησης του πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος. Στην συνέχεια, θα συζητήσουμε την προέλευση της εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση των φορέων.

Συγκεντρωτικά, ο ολικός συντελεστής απορρόφησης για ένα ημιαγωγικό υλικό μπορεί να περιγραφεί από την σχέση:

$$a = a_f + a_c = a_f + \sigma_a N_c \quad (4.1)$$

όπου a_f είναι ο συντελεστής απορρόφησης τόσο λόγω πλέγματος όσο και λόγω διαζωνικής μετάβασης, ανάλογα με το μήκος κύματος της ακτινοβολίας που χρησιμοποιείται. Ο συντελεστής a_f παρουσιάζει πολύ ασθενή εξάρτηση από την θερμοκρασία, με εξαίρεση φωτόνια, των οποίων η ενέργεια είναι κοντά στην E_g . Ο συντελεστής a_c περιγράφει την απορρόφηση λόγω ελεύθερων φορέων, η οποία εξαρτάται από την συγκέντρωση των ζευγών ηλεκτρονίου-οπής, N_c καθώς και από τις ενεργές διατομές τους, σ_a . Στους ημιαγωγούς, όπου τόσο τα ηλεκτρόνια όσο και οι οπές είναι ευκίνητα και επομένως συμβάλλουν στην ηλεκτρική αγωγιμότητα, η ενεργή διατομή σ_a , μπορεί να γραφεί στην μορφή:

$$\sigma_a = \frac{e^2}{\epsilon_0 n \omega^2} \left(\frac{1}{m_e^* \tau_e} + \frac{1}{m_h^* \tau_h} \right) \quad (4.2)$$

όπου e είναι το ηλεκτρικό φορτίο, ϵ_0 είναι η διηλεκτρική σταθερά του κενού, n είναι το πραγματικό μέρος του συντελεστή διάθλασης, c η ταχύτητα του φωτός και $\omega = 2\pi\nu$. Οι ποσότητες m_e^* και m_h^* , είναι οι ενεργές μάζες και τ_e και τ_h οι χαρακτηριστικοί χρόνοι συγκρούσεων για τα ηλεκτρόνια και τις οπές αντίστοιχα. Η εξίσωση αυτή δείχνει ότι η ενεργός διατομή απορρόφησης μεταβάλλεται αντιστρόφως ανάλογα με την ενέργεια των φωτονίων. Χαρακτηριστικά, για το πυρίτιο η ενεργός

διατομή απορρόφησης για Nd:YAG laser (1.06μm) είναι $5 \times 10^{-18} \text{cm}^2$ στους 300K ², ενώ η αντίστοιχη τιμή για το CO₂ είναι 10^{-16}cm^2 ³.

Η θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης πηγάζει κατά κύριο λόγο από την θερμοκρασιακή εξάρτηση της συγκέντρωσης των ζευγών, οπών-ηλεκτρονίων, $N_c(T) = N_e(T) = N_b(T)$. Σε κατάσταση θερμοικής ισορροπίας, η συγκέντρωση των φορέων σε ένα ενδογενή (μη νοθευμένο) κρυσταλλικό ημιαγωγό δίνεται από την σχέση ⁴:

$$\bar{N}_c(T) = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_b^*)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_g(T)}{2k_B T}\right) \quad (4.3)$$

με την ενέργεια χάσματος, E_g να μειώνεται γενικά με την θερμοκρασία. Αντίστοιχη σχέση προκύπτει και από τους Blomberg et al.⁵, για νοθευμένο κρυσταλλικό πυρίτιο, με τον συντελεστή να δίνεται προσεγγιστικά από την σχέση:

$$a(N, T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2} [N + n_i(T)] \quad (4.4)$$

όπου $n_i(T)$ είναι η εξαρτημένη από την θερμοκρασία ενδογενής συγκέντρωση φορέων η οποία μπορεί να εκφραστεί ως

$$n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \quad (4.5)$$

με την τιμή της ποσότητας a_0 να είναι περίπου 2 cm^{-1} . Από τις σχέσεις αυτές, γίνεται προφανές ότι ο συντελεστής a αυξάνεται με την θερμοκρασία κατά υπερειθετικό τρόπο. Το γεγονός αυτό μπορεί να οδηγήσει στο φαινόμενο της θερμοικής διαφυγής (thermal runaway): καθώς το υλικό θερμαίνεται λόγω της απορρόφησης μέσω των αρχικά υπαρχόντων ελεύθερων φορέων, ατελειών πλέγματος και προσμίξεων, το $N_c(T)$ αυξάνεται. Η αύξηση αυτή στο N_c με τη σειρά της, οδηγεί σε αύξηση του συντελεστή a και συνεπακόλουθα σε άνοδο του ρυθμού θέρμανσης κ.τ.λ. Σε επόμενη παράγραφο, θα συζητηθεί διεξοδικά η επίδραση της εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία, στην εξέλιξη του φαινομένου της αλληλεπίδρασης του laser με το υλικό, ειδικά όσον αφορά τις ακτινοβολήσεις μικρής διάρκειας παλμού (ns).

4.3 Μακροσκοπική θεώρηση και Εξίσωση της Θερμότητας

Οι θερμοκρασιακές κατανομές που εισάγονται λόγω της απορρόφησης της ακτινοβολίας laser μέσα στον όγκο του υλικού, μπορούν να υπολογισθούν μακροσκοπικά με βάση την εξίσωση θερμότητας. Στην πιο γενική περίπτωση, η θερμοκρασία $T \equiv T(\mathbf{x}, t) = T(x_a, t)$ είναι συνάρτηση τόσο των χωρικών συντεταγμένων x_a , όσο και του χρόνου t . Με καθορισμένες τις παραμέτρους του laser, η θερμοκρασιακή κατανομή εξαρτάται από την οπτική απορρόφηση εντός της ζώνης ακτινοβολήσης, την μεταφορά θερμότητας από την ζώνη αυτή προς τα έξω, τις ενθαλπίες μετασχηματισμού φάσης (κρυσταλλοποίηση, εξάτμιση, χημικών αντιδράσεων) εάν και εφόσον αυτές υπάρχουν, κ.α. Στην περίπτωση απουσίας φαινομένων μεταφοράς θερμότητας λόγω ακτινοβολητικών διαδικασιών ή συναγωγής (το οποίο συμβαίνει στα φαινόμενα που μελετάμε), η εξίσωση θερμότητας μπορεί να γραφεί σε ένα σύστημα συντεταγμένων, καθορισμένο με βάση την δέσμη του laser, ως εξής:

$$\rho(T)c_p(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, T)}{\partial t} - \nabla[\kappa(T) \nabla T(\mathbf{x}, T)] + \rho(T)c_p(T) v_s \nabla T(\mathbf{x}, T) = Q(\mathbf{x}, t) \quad (4.6)$$

όπου $T(\mathbf{x}, t)$ είναι η κατανομή της θερμοκρασίας, $\rho(T)$ η πυκνότητα μάζας, $c_p(T)$ η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, v_s είναι η ταχύτητα του υποστρώματος σε σχέση με την πηγή θερμότητας, $\kappa(T)$ είναι η θερμική αγωγιμότητα και Q είναι μια ποσότητα που περιγράφει την ισχύ της πηγής σε μονάδες W/cm^3 .

Για μονοδιάστατα προβλήματα στα οποία το υπόστρωμα παραμένει ακίνητο σε σχέση με την δέσμη, η εξίσωση μπορεί να αναχθεί στην εξής μορφή:

$$\rho(T)c_p(T)\frac{\partial T(x, T)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa(T)\frac{\partial T(x, T)}{\partial x}\right) = Q(x, t) \quad (4.7)$$

όπου όρος της πηγής δίνεται από την σχέση:

$$Q(x_a, t) = I_0(x, y, t)(1 - R)f(z) = I_a(x, y)f(z)q(t) \quad (4.8)$$

όπου $I_a = I_0(1 - R(T))$ είναι η μέγιστη ένταση του laser που δεν ανακλάται από την επιφάνεια του δείγματος, I_0 είναι η ένταση εξόδου του laser, η $I_a(x, y)$ περιγράφει την χωρική κατανομή της δέσμης στο επίπεδο xy , η $f(z)$ αναπαριστά την εξασθένηση της ισχύος του laser κατά την διάδοση στον άξονα z και $q(t)$ είναι η χρονική εξάρτηση του παλμού. Η ποσότητα $R = R(T, \lambda)$ υποδηλώνει την κανονικοποιημένη ανακλαστικότητα στην υπό εξέταση περιοχή και εξαρτάται από την θερμοκρασία του υλικού, την επιφανειακή τραχύτητα και μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Επίσης, εξαρτάται από την γωνία πρόσπτωσης, την πόλωση της δέσμης και το πάχος του δοκιμίου. Η τελευταία επίδραση μπορεί να αγνοηθεί, εφόσον το μήκος οπτικής απορρόφησης είναι πολύ μικρότερο από το πάχος του δοκιμίου, ισχύει δηλαδή $l_a \ll l_s$. Στην αντίθετη περίπτωση, τα φαινόμενα συμβολής λόγω πολλαπλών ανακλάσεων της δέσμης μπορεί να γίνουν σημαντικά.

Αναφερθήκαμε προηγουμένως στην συνάρτηση $f(z)$, η οποία περιγράφει την εξασθένηση της ισχύος του laser κατά την διάδοση στο κατακόρυφο z επίπεδο. Στην γενική περίπτωση η έκφραση αυτή, μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$f(z) = a(T(z)) \exp\left[-\int_0^z a(T(z')) dz'\right] \quad (4.9)$$

όπου $a(T)$ είναι ο θερμοκρασιακά εξαρτώμενος συντελεστής απορρόφησης του υλικού. Εξαιτίας αυτής της θερμοκρασιακής εξάρτησης, οι οπτικές ιδιότητες του υλικού καθίστανται μη ομογενείς. Τυχόν εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την πυκνότητα των ελεύθερων φορέων (όπως συμβαίνει κατά την αλληλεπίδραση του CO_2 laser με το πυρίτιο), περιπλέκει περαιτέρω την επίλυση της εξίσωσης θερμότητας. Όσον αφορά τα Excimer laser, η απορρόφηση μπορεί να θεωρηθεί ως σταθερή, όποτε η $f(z)$ δίνεται από την σχέση:

$$f(z) = a \exp(-az) \quad (4.10)$$

Το μήκος που απαιτείται για την εξασθένηση της ακτινοβολίας στο $1/e$ της τιμής, l_a είναι πολύ μικρότερο από θερμικό μήκος διάχυσης $l_{thermal}$ στην περίπτωση επιφανειακής απορρόφησης. Το θερμικό μήκος διάχυσης είναι μια σημαντική παράμετρος η οποία εκφράζει το βάθος διάδοσης της θερμότητας λόγω θερμικής διάχυσης, και δίνεται στην γενική περίπτωση από την σχέση:

$$l_T \approx \zeta(D\tau)^{1/2} \quad (4.11)$$

Στις περισσότερες περιπτώσεις μεταβατικής θέρμανσης που χαρακτηρίζονται από την διάρκεια του παλμού, επιλέγεται $\zeta = 2$. Η παράμετρος D που ονομάζεται θερμική διαχυτότητα (thermal diffusivity), σχετίζεται με την θερμική αγωγιμότητα κ , την πυκνότητα ρ και την ειδική θερμοχωρητικότητα c_p και για μια ομογενή και ισοτροπικά υλικά δίνεται από την σχέση:

$$D = \kappa / \rho c_p \quad (4.12)$$

Στον πίνακα 4.1 δίνονται οι εκφράσεις για διάφορες παραμέτρους που εμπεριέχονται στην εξίσωση της θερμότητας. Γίνεται διάκριση ανάμεσα στις ιδιότητες του υλικού, οι οποίες είναι ανεξάρτητες από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας και τις οπτικές ιδιότητες, οι οποίες συσχετίζονται με την αλληλεπίδραση της ακτινοβολίας με το υλικό, και είναι προφανώς διαφορετικές για κάθε τύπο laser. Παρακάτω αναφέρονται οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν κατά τις προσομοιώσεις.

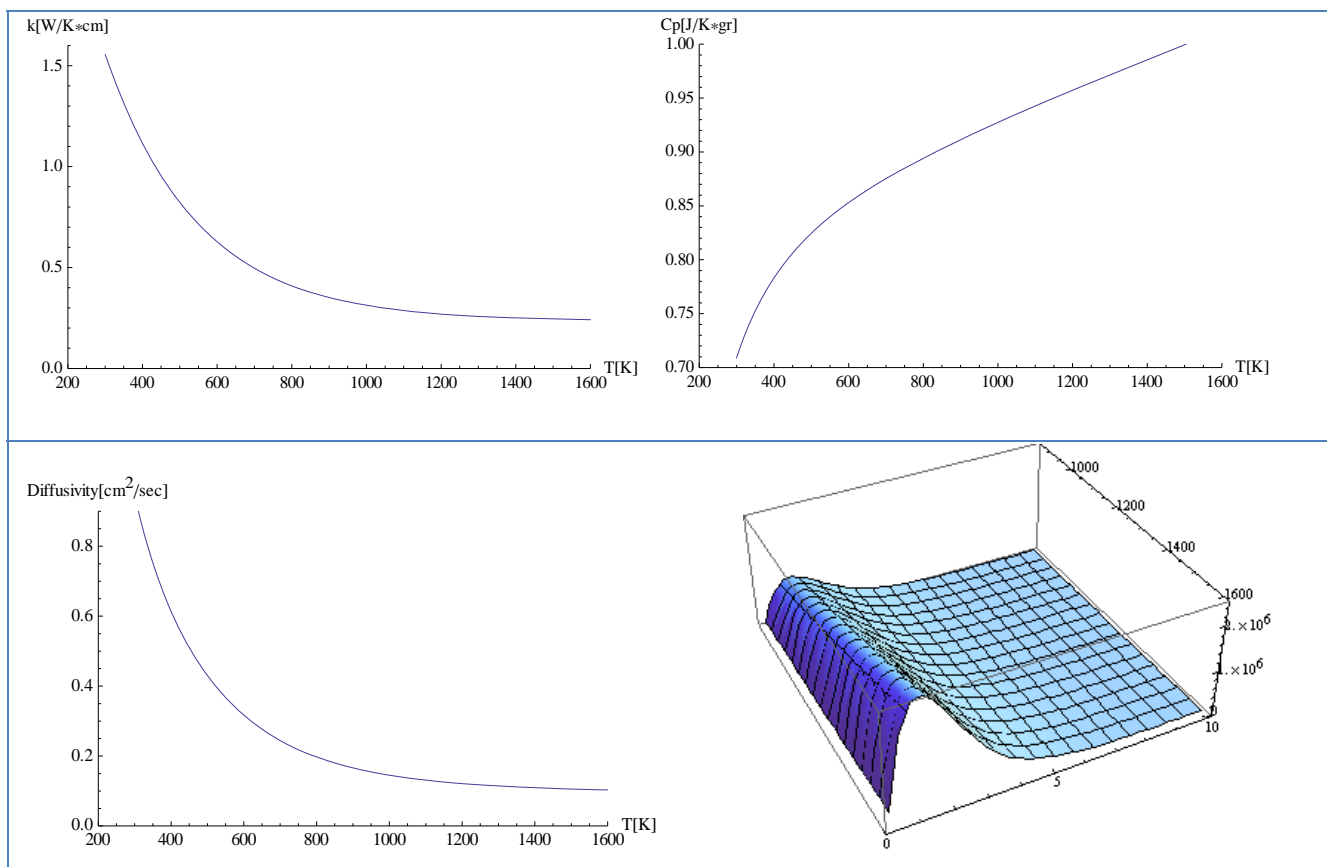
Πίνακας 4.1 Παράμετροι για τους δυο τύπους laser

| Ιδιότητα | KrF Excimer (λ=248nm) | CO ₂ (λ=10.6μm) |
|--|--|--|
| ρ (g/cm ³) ⁶ | | 2.32 |
| $c_p(T)$ (J/g K) ⁷ | 0.81+1.3×10 ⁻⁴ T-1.26×10 ⁻⁴ T ² | |
| $\kappa(T)$ (W/cm K) ^{vii} | 0.235+4.45exp(-T/247) | |
| $R(T)$ (90°) ^{vi} | 0.66+1.8×10 ⁻⁵ T | 0.30 |
| $\alpha(T)$ (cm ⁻¹) ^v | 1.65-1.7×10 ⁶ | $a(N, T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2} [N + n_i(T)]$ $n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right)$ |

Στην εικόνα 4.2 παριστάνεται η εξάρτηση της ειδικής θερμοχωρητικότητας, της θερμικής αγωγιμότητας και της θερμικής διαχυτότητας με την θερμοκρασία. Επίσης δίνουμε μια ενδεικτική δυσδιάστατη απεικόνιση της εξάρτησης του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και την απόσταση από την επιφάνεια (σε nm), για την περίπτωση ακτινοβολήσης με CO₂ σε ένα από τα δείγματα που χρησιμοποιήσαμε και όπως αυτή υπολογίστηκε με τρόπο που θα αναλυθεί στο κεφάλαιο 8.

Η διαστατικότητα (dimensionality) της θερμικής ροής χαρακτηρίζεται από το σχετικό μέγεθος του l_T και από άλλες χαρακτηριστικές ποσότητες, όπως η διάμετρος της δέσμης w , το μήκος οπτικής απορρόφησης l_a , το πάχος του υποστρώματος l_s , κ.α. Αν παραδείγματος χάριν, ισχύει $l_T \gg (w, l_a)$, είμαστε υποχρεωμένοι να εξετάσουμε το πρόβλημα της διάδοσης της θερμότητας σε τρεις διαστάσεις. Αντιθέτως, όταν ισχύει $l_a \leq l_T$ και $l_T \ll w$, η πλευρική διάδοση της θερμότητας μπορεί να αγνοηθεί και να ληφθεί η θερμοκρασιακή κατανομή κατά τον κατακόρυφο άξονα με βάση την μονοδιάστατη εξίσωση θερμότητας. Μια τέτοια περίπτωση, όπως θα δούμε και αναλυτικά στο κεφάλαιο 10, είναι η ακτινοβολήση με χρήση KrF Excimer, όπου συνδυάζει πολύ μικρή διάρκεια παλμού (FWHM=2×10⁻⁸ sec) και μεγάλο συντελεστή απορρόφησης ($a=1.67 \times 10^6$ cm⁻¹). Το γεγονός αυτό μας επιτρέπει να αγνοήσουμε τελείως την πλευρική διάδοση θερμότητας και να προχωρήσουμε σε μονοδιάστατη επίλυση του προβλήματος, εξοικονομώντας έτσι πολύτιμο υπολογιστικό χρόνο. Επιπλέον, μπορούμε να μην λάβουμε υπόψη την ένταση της δέσμης που διεισδύει μέσα στον όγκο του υλικού. Έτσι ο όρος της θερμικής πηγής Q , εκλείπει παντού εκτός από την επιφάνεια πρόσπτωσης της δέσμης. Τονίζεται ότι οι παραπάνω προσεγγίσεις μπορούν να

γίνουν μόνο στην περίπτωση του Excimer laser και όχι στο CO₂, κάτι το οποίο όπως θα δούμε και στη συνέχεια θα δυσχεράνει σημαντικά τους υπολογισμούς μας.



Εικόνα 4.2 Εξάρτηση από την θερμοκρασία (σε βαθμούς Kelvin) των σημαντικότερων παραμέτρων που υπεισέρχονται έμμεσα ή άμεσα, στην εξίσωση της θερμότητας: α) συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας, β) Ειδική θερμότητα, γ) Θερμική διαχυτότητα και δ) Εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης για ακτινοβολία με laser CO₂ σε δείγμα ισχυρά νοθευμένο με Βόριο, από την θερμοκρασία και το βάθος κατά τον κατακόρυφο άξονα. Η καμπύλη αυτή προέκυψε από την σχέση του Blomberg, λαμβάνοντας υπόψη την κατανομή συγκέντρωσης Βορίου σε αυτό το δείγμα, όπως αυτή προσδιορίστηκε από μετρήσεις SIMS.

Πρέπει εδώ να σημειωθεί, ότι ο παραπάνω φορμαλισμός είναι έγκυρος, εφόσον η θερμοκρασιακή κατανομή μέσα στον όγκο του πυριτίου, δεν ξεπερνάει το κατώφλι τήξης. Στην περίπτωση αυτή, πρέπει να ληφθεί υπόψη και η ενθαλπία μετασχηματισμού φάσης⁸. Η επίδραση της ενθαλπίας, υπεισέρχεται στην εξίσωση της θερμότητας μέσω κατάλληλης τροποποίησης της έκφρασης της ειδικής θερμοχωρητικότητας (βηματική συνάρτηση). Μια, ακόμα πιο έγκυρη από φυσικής σκοπιάς, είναι η τεχνική Phase field, η οποία είναι σε θέση να περιγράψει την κινητική της κινούμενης διεπιφάνειας υγρού – κρυσταλλικού, πυριτίου, προς τον όγκο του υλικού⁹. Σε κάθε περίπτωση όμως, ο σχεδιασμός όλων των ακτινοβολήσεων που διεξήχθησαν στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, απαιτούσε (με γνώμονα τις απαιτήσεις για ελαχιστοποίηση της διάχυσης) την πραγματοποίηση της ανόπτησης σε καθεστώς μη τήξης, οπότε δεν χρειάστηκε να καταφύγουμε στην πιο περίπλοκη αυτή, μοντελοποίηση.

4.4 Περιγραφή του φαινομένου ακτινοβόλησης για κάθε τύπο laser

4.4.1 Excimer KrF laser

Στην περίπτωση του KrF Excimer, η ακτινοβόληση δημιουργεί απευθείας ζεύγη ηλεκτρονίου – οπής. Επειδή ο συντελεστής κβαντικής απόδοσης για την διαζωνική απορρόφηση είναι κοντά στην μονάδα, είναι δυνατή η γένεση πολύ μεγάλων πυκνοτήτων φορέων. Για $N_c > 10^{18} / \text{cm}^3$, οι μηχανισμοί επανασύνδεσης των φορέων κυριαρχούνται από την διαδικασία Auger. Ο χρόνος μετάδοσης της ενέργειας στο πλέγμα είναι της τάξης των μερικών picoseconds.

Η πολύ μεγάλη τιμή του συντελεστή απορρόφησης εγγυάται ότι η φωτεινή ενέργεια θα μετατραπεί σε θερμότητα μέσα στα πρώτα 5.9 nm. Το ποσό αυτό θερμότητας δεν θα διεισδύσει σε μεγάλο βάθος, αφού το μέσο μήκος θερμικής διάχυσης είναι γύρω στα 900 nm. Επομένως η κατανομή ενέργειας με το βάθος του υλικού θα είναι φθίνουσα εκθετική, λόγω της μορφής της έκφρασης της εξασθένισης της δέσμης μέσα στον όγκο του υλικού (νόμος Beer Lambert), ενώ παρόμοια μορφή (αλλά φυσικά πιο διευρυμένη) θα έχει και η κατανομή της θερμοκρασίας σε κάθε χρονική στιγμή. Η πολύ μικρή διάρκεια παλμού (20 ns) οδηγεί σε μια σχετικά αδιαβατική θέρμανση του υλικού. Το άθροισμα $l_a + l_T$ (ίσο με 906 nm) είναι πολύ μικρότερο από το w (που είναι γενικά της τάξεως των 5 mm) οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε την ακτινοβόληση επιφανειακή και να την αναπαράστησουμε με μια πηγή θερμότητας που δρα στην επιφάνεια. Για το κρυσταλλικό πυρίτιο αυτή η προσέγγιση ικανοποιείται για laser με μήκος κύματος μικρότερο από 0.5 μm και διάρκεια παλμού κάτω από 10^{-7} sec. Η χρήση ομογενοποιητή εισάγει ένα ομοιόμορφο προφίλ πυκνότητας ενέργειας επί της ακτινοβολούμενης περιοχής. Η παρατήρηση αυτή σε συνδυασμό με το πολύ μικρό μήκος πλευρικής θερμικής διάχυσης σε σχέση με το πλάτος του τετραγωνικού σποτ του laser (0.9 μm σε σχέση με 5.0 mm) οδηγεί στην εισαγωγή παράλληλων ισόθερων καμπυλών μέσα στον όγκο του υλικού, επιτρέποντας την μονοδιάστατη αντιμετώπιση του προβλήματος.

Επιπλέον, η σταθερή τιμή του συντελεστή απλοποιεί σημαντικά την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης διάχυσης της θερμότητας. Φυσικά ακόμα και με το a σταθερό, η εξάρτηση όλων σχεδόν των παραμέτρων που εμπεριέχονται στην εξίσωση από την θερμοκρασία, δεν επιτρέπει την αναλυτική επίλυση της. Τέλος, η υψηλή τιμή του συντελεστή απορρόφησης ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου επιτρέπει την διενέργεια ακτινοβολήσεων σε θερμοκρασία δωματίου και χωρίς την χρήση υμενίων που να απορροφούν την ακτινοβολία (absorbing layers).

4.4.2 CO₂ laser

Αντίθετα με ότι ισχύει για τα Excimer laser, το φαινόμενο της ακτινοβόλησης με laser διοξειδίου του άνθρακα είναι ιδιαίτερα περίπλοκο και μεταβατικό. Εξαιτίας της μικρής ενέργειας των φωτονίων δεν είναι δυνατές διαζωνικές μεταβάσεις, παρά μόνο φωτοδιεγέρσεις ελεύθερων φορέων (θερμικά ενεργοποιημένων) εντός της ζώνης αγωγιμότητας. Οι φορείς αυτοί μεταφέρουν την ενέργεια τους στο πλέγμα πάρα πολύ γρήγορα, μέσω σκεδάσεων ηλεκτρονίου – φωνονίου, σε χρόνους της τάξης των 10^{-12} με 10^{-13} sec. Ως αποτέλεσμα, το πλέγμα θερμαίνεται τοπικά και ο συντελεστής απορρόφησης αυξάνεται εκθετικά. Ταυτόχρονα, το οπτικό μήκος απορρόφησης $l_a = a^{-1}$ ελαττώνεται, ωθώντας την απορρόφηση να λάβει χώρα σε μικρότερο όγκο. Ο ρυθμός θέρμανσης

ενισχύεται περαιτέρω από την μείωση στα $\kappa(T)$ και $D(T)$. Αυτή η δυναμική ανάδραση αυξάνει τον συνολικό ρυθμό θέρμανσης πολύ γρήγορα, ιδιαίτερα για την περίπτωση της ακτινοβόλησης σε καθεστώς nanosecond, όπου η όλη διαδικασία είναι σαφώς πιο αδιαβατική. Στην δική μας περίπτωση, όπου η διάρκεια παλμού είναι πολύ μεγαλύτερη (millisecond), η επίδραση των φαινομένων αυτών αμβλύνεται, αφού ο ρυθμός μετάδοσης θερμότητας είναι πολύ μικρότερος, οπότε η θερμότητα διαχέεται προς το βάθος του υλικού.

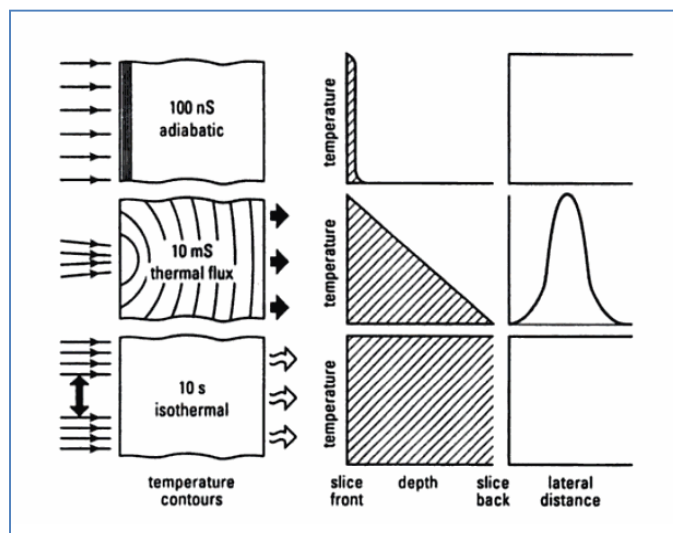
4.4.3 Αντιπαράβολή των σημαντικότερων χαρακτηριστικών του κάθε τύπου

Τα βασικά χαρακτηριστικά της ακτινοβόλησης για κάθε τύπο laser, συνοψίζονται στον πίνακα 4.Π.

Πίνακας 4.Π Σύγκριση χαρακτηριστικών ακτινοβόλησης ανά τύπο laser

| | KrF Excimer | CO ₂ |
|------------------------------------|-------------------|--|
| Συντελεστής απορρόφησης | Σταθερός | Εξάρτηση από T και συγκέντρωση φορέων N(x,T) |
| Χωρική κατανομή παλμού f(x,y) | Σταθερή (top-hut) | Γιαουσιανή |
| Χρονική κατανομή παλμού q(t) | Γιαουσιανή | Σταθερή (top-hut) |
| Μονοδιάστατη αντιμετώπιση | Ναι | Όχι |
| Επιφανειακή ακτινοβόληση | Ναι | Όχι |
| Προθέρμανση δείγματος | Όχι | Ναι (600-650°C) |
| Μέσο οπτικό μήκος απορρόφησης (μm) | 0.0055 | Εξαρτάται από N και T |
| Μήκος θερμικής διάχυσης (μm) | 0.90 | Μερικές εκατοντάδες (ανάλογα με την διάρκεια του παλμού) |

Η εικόνα 4.3 αναπαριστά την διαφορετική επίδραση που έχει η ακτινοβόληση σε διαφορετικά χρονικά καθεστώτα, τόσο σε κατά βάθος του δοκιμίου όσο και πλευρικά. Αντιπαράβουμε τις ακτινοβολήσεις στα δυο χρονικά καθεστώτα που χρησιμοποιήθηκαν πειραματικά, μαζί με τα αποτελέσματα της συμβατικής ανόπτησης (διάρκειας 10 sec). Στην περίπτωση της ανόπτησης σε nanosecond, η θερμοκρασία κατανέμεται πολύ κοντά στην επιφάνεια σχηματίζοντας παράλληλες ισόθερμες. Αντίθετα, η ακτινοβόληση σε ms οδηγεί σε μια ομαλότερη βαθμίδα θερμοκρασίας, ενώ οι ισόθερμες παρουσιάζουν γιαουσιανή μορφή. Τέλος, η συμβατική ανόπτηση οδηγεί σε ομοιόμορφη θέρμανση κατά μήκος και πλάτος του δοκιμίου, καθώς το μήκος θερμικής διάχυσης είναι της τάξης των 2 cm και επομένως αισθητά μεγαλύτερο από το πάχος του δισκίου.



Εικόνα 4.3 Αποτελέσματα ακτινοβολήσεως σε τρία διαφορετικά χρονικά καθεστώτα. Από πάνω προς τα κάτω: α) nanosecond (αδιαβατική), β) millisecond (γκαουσιανή) και γ) second (ισόθερμη). Η ανόπτηση διάρκειας nanosecond οδηγεί στην πιο επιφανειακή θερμοκρασιακή κατανομή.

4.5 Ανακεφαλαίωση

Οι διαφορετικοί μηχανισμοί αλληλεπίδρασης των δυο μηκών κύματος με το πυρίτιο, οδηγούν σε ριζικά διαφορετικά φαινόμενα απορρόφησης. Στην περίπτωση του KrF Excimer laser, μια σειρά από παράγοντες διευκολύνουν την μελέτη του φαινομένου. Αντίθετα, η αλληλεπίδραση του CO₂ laser είναι μια μεταβατική και πολύπλοκη διαδικασία, η μοντελοποίηση της οποίας είναι ιδιαίτερα δύσκολη και απαιτητική.

Βιβλιογραφικές αναφορές 4ου κεφαλαίου

D. Bauerle “Laser Processing and Chemistry” εκδ. Springer 2000

¹ J. Narayan, R.B. James, O.W. Holland et al., *J. Vac. Sci. Technol. A* 3(4) (1985) 1836

² K.G. Svantesson et al., *Phys. Scr.* **18** (1978) 405

³ A. Bhattacharyya, B.G Streetman, *Sol. State Com.*, **36** (1980) 671-675

⁴ J. Ziman, *Principles of the theory of solids* (Cambridge University Press, London 1972)

⁵ M. Blomberg, K. Naukarinen, T. Tuomi et al., *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 2327

⁶ W. Szyszko, *Appl. Surf. Sci.* 90 (1995) 325-331

⁷ V. Gonda, J. Slabbekoorn and L.K. Nanver, *15th IEEE 2007 RTP proceedings* p. 257-261.

⁸ Taler, J. and Duda, P. (2006). “Solving direct and inverse heat conduction problems”. Springer.

⁹ A. La Magna, P. Alippi, V. Privitera et al., *J. Appl. Phys.*, 95:4806–4814 (2004).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΚΙΝΗΤΙΚΗ ΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΩΝ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ ΣΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ

5.1 Εισαγωγή

Η χρήση οποιασδήποτε τεχνικής για την εισαγωγή προσμίξεων μέσα στον όγκο του πυριτίου, οδηγεί αναπόφευκτα στην καταστροφή των κρυσταλλικών επιπέδων που βρίσκονται κοντά στην επιφάνεια του δισκίου. Επιπλέον, μετά την εμφύτευση, μόνο ένα μικρό ποσοστό των προσμίξεων καταλαμβάνει πλεγματικές θέσεις και επομένως συνεισφέρει στην ηλεκτρική αγωγιμότητα της διάταξης. Από τα πρώτα βήματα της κατασκευής τρανζίστορ, η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής στράφηκε στην λύση της θερμικής ανόπτωσης για την επίλυση των παραπάνω προβλημάτων. Στις παλαιότερες γενιές ολοκληρωμένων κυκλωμάτων μάλιστα, η ανόπτωση εξυπηρετούσε και ένα επιπλέον σκοπό, αυτόν της οδήγησης των προσμίξεων μέσα στον όγκο του υλικού, με στόχο την τροποποίηση των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών της διάταξης. Αν και πλέον, η έρευνα έχει στραφεί στην αντίπερα όχθη, αυτή της ελαχιστοποίησης της διάχυσης, η αντιμετώπιση των σχετιζόμενων με την εμφύτευση προβλημάτων παραμένει επίκαιρη. Με τον όρο διάχυση περιγράφουμε φαινόμενα κατά τα οποία η κίνηση των ατόμων οδηγεί σε μια επαναδιανομή των συγκεντρώσεων, κατευθυνόμενη προς μια κατάσταση ισορροπίας. Η ελαχιστοποίηση των διαστάσεων, σε συνδυασμό με τις αυξανόμενες απαιτήσεις όσον αφορά την ηλεκτρική αγωγιμότητα απαιτούν την υιοθέτηση ιδιαίτερα προηγμένων στρατηγικών ανόπτωσης, οι οποίες με την σειρά τους προϋποθέτουν την εις βάθος κατανόηση των μηχανισμών που σχετίζονται με την κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Η ανάγκη για την μοντελοποίηση των διαδικασιών αυτών διαφάνηκε από πολύ νωρίς, και αποτελεί πεδίο εκτεταμένης ερευνητικής δραστηριότητας τόσο από ακαδημαϊκούς και ερευνητικούς φορείς όσο και από την βιομηχανία μικροηλεκτρονικής. Παρά τον μεγάλο όγκο των θεωριών που προτάθηκαν για την κατανόηση των φαινομένων αυτών, στην ουσία αυτές στηρίζονται σε δυο διαφορετικές προσεγγίσεις.

Ιστορικά, οι πρώτες απόπειρες για την περιγραφή της διάχυσης δεν λάμβαναν υπόψη την ατομιστική φύση των στερεών. Φαινομενολογικές εξισώσεις χρησιμοποιήθηκαν για τον συσχετισμό των ροών των ατόμων με τις βαθμίδες συγκέντρωσης τους. Οι εξισώσεις αυτές έγιναν ευρύτερα γνωστές ως νόμοι του Fick, οι οποίοι λαμβάνουν υπόψη μόνο τις κατανομές και τις ροές των προσμίξεων, αγνοώντας τις υπόλοιπες ατέλειες. Οι απλοϊκές εκφράσεις των νόμων αυτών δεν ήταν σε θέση να συμπεριλάβουν την επίδραση σημαντικών παραμέτρων με αποτέλεσμα την σταδιακή τους τροποποίηση. Πιο εξελιγμένες μορφές των εξισώσεων αυτών χρησιμοποιούνται ακόμα και σήμερα από μερικά λογισμικά προσομοίωσης, αλλά καθώς τα κρίσιμα κατασκευαστικά μεγέθη είναι πλέον σε νανομετρική κλίμακα, η μακροσκοπική θεώρηση του φαινομένου αρχίζει και εγκαταλείπεται προς χάρη της υιοθέτησης ατομιστικών μοντέλων για την περιγραφή του συστήματος. Η μελέτη των φαινομένων στην μικροσκοπική κλίμακα, αν και περίπλοκη, οδήγησε στην εις βάθος κατανόηση των μηχανισμών διάχυσης, αυξάνοντας κατακόρυφα την αξιοπιστία της διαδικασίας μοντελοποίησης.

Εδώ, πέραν των προσμίξεων, στους υπολογισμούς περιλαμβάνονται όλες οι ατέλειες του κρυσταλλικού πλέγματος (ενδοπλεγματικές I, και κενά V) καθώς και όλοι οι πιθανοί σχηματισμοί τους. Με τον τρόπο, αυτό έγινε για πρώτη φορά δυνατή η ενσωμάτωση στους υπολογισμούς των πραγματικών αιτιών που οδηγούν στην διάχυση και την ενεργοποίηση των προσμίξεων. Μπορούμε να διακρίνουμε δυο βασικές προσεγγίσεις, που χρησιμοποιούνται κατά κόρον για την μελέτη της κινητικής της διάχυσης σε μικροσκοπικό επίπεδο, αυτή του συνεχούς μέσου και αυτή που στηρίζεται σε υλοποιήσεις Kinetic Monte Carlo. Η πρώτη βασίζεται στην επίλυση συστημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων. Αυξάνοντας τον αριθμό των ειδών που περιλαμβάνονται στους υπολογισμούς, η μοντελοποίηση καθίσταται πιο ρεαλιστική, με αντίστοιχο βέβαια υπολογιστικό κόστος. Η δεύτερη είναι τυχαιοκρατικής φύσεως και στηρίζεται στο γεγονός ότι οι περισσότερες θερμικές ταλαντώσεις δεν οδηγούν σε κινήσεις ατόμων. Η χρήση αλγορίθμων Monte Carlo^{1 2 3} ήρθε στο προσκήνιο για τη μελέτη της διάχυσης, καθώς οι αλγόριθμοι αυτοί λαμβάνουν υπόψη μόνο τις διεργασίες που οδηγούν τελικά σε ατομικά άλματα – μετακινήσεις (jumps). Μια από αυτές, επιλέγεται τυχαιοκρατικά κάθε φορά μέσω μιας διαδικασίας που αντανάκλα τις διαφορετικές πιθανότητες μετάβασης, μεταξύ των πιθανών θέσεων. Επιπλέον, στους υπολογισμούς αγνοούνται και τα άτομα που καταλαμβάνουν πλεγματικές θέσεις, με αποτέλεσμα να λαμβάνονται τελικά υπόψη μόνο οι ατέλειες (π.χ. ενδογενείς και εξωγενείς σημειακές ατέλειες και τα συσσωματώματα αυτών).

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε ξεχωριστά στην μακροσκοπική και στη μικροσκοπική θεώρηση της διάχυσης, ξεκινώντας από την πρώτη, η οποία άλλωστε προηγήθηκε χρονικά. Όσον αφορά την μελέτη σε μικροσκοπικό επίπεδο θα παρουσιάσουμε τόσο την συνεχή όσο και την KMC προσέγγιση.

5.2 Μακροσκοπική μελέτη της διάχυσης

Η διάχυση σε μακροσκοπικό επίπεδο, μπορεί να περιγραφεί με βάση δύο χαρακτηριστικές εξισώσεις που είναι γνωστές ως νόμοι του Fick. Σχεδόν όλα τα μακροσκοπικά μοντέλα διάχυσης που έχουν επινοηθεί, βασίζονται σε παραλλαγές αυτών των δύο εξισώσεων.

Ο πρώτος νόμος του Fick είναι μια εξίσωση που συνδέει τη ροή των ατόμων (flux), με την διάχυση και την συγκέντρωση, ή πιο σωστά με την χωρική παράγωγο της συγκέντρωσης των προσμίξεων. Η μαθηματική διατύπωση του είναι η εξής :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.1)$$

όπου F η ροή των προσμίξεων, D ο συντελεστής διάχυσης και $\partial C/\partial x$ η χωρική παράγωγος της συγκέντρωσης. Σύμφωνα με τη σχέση αυτή, οι περιοχές με ανομοιομορφίες στην κατανομή της συγκέντρωσης προσμίξεων αποτελούν τη γενεσιουργό αιτία διάχυσης των μορίων αυτών των προσμίξεων σε άλλες περιοχές και μάλιστα σε μεγέθη ανάλογα της τοπικής διαφοράς στη συγκέντρωση. Η σταθερά αναλογίας D , που ονομάζεται συντελεστής διάχυσης ή αλλιώς διαχυτότητα, είναι χαρακτηριστική του υλικού στο οποίο γίνεται η διάχυση και συνήθως εξαρτάται από μεγέθη όπως η θερμοκρασία, η πίεση, ατέλειες του κρυσταλλικού πλέγματος κ.λ.π. Γενικά δεν εξαρτάται από τη θέση μέσα στο υλικό (ισότροπος), υπάρχουν όμως και περιπτώσεις υλικών με ανιστροπικούς συντελεστές μοριακής διάχυσης. Η κλασική περιγραφή του συντελεστή D γίνεται μέσω της εξίσωσης του Arrhenius :

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k \cdot T}\right), \quad (5.2)$$

όπου D_0 είναι ο συντελεστής διάχυσης σε άπειρη θερμοκρασία και E_A η ενέργεια ενεργοποίησης. Τέλος, η παρουσία του αρνητικού συμβόλου στην εξίσωση είναι απαραίτητη, καθώς υποδεικνύει ότι η διάχυση συμβαίνει προς την κατεύθυνση όπου η συγκέντρωση προσμίξεων μειώνεται. Όσον αφορά στην ενδογενή διαχυτότητα του Βορίου μέσα στο πυρίτιο, η οποία θα μας απασχολήσει, τα D_0 και E_A λαμβάνουν τις τιμές $1.0 \text{ cm}^2/\text{sec}$ και 3.5 eV αντίστοιχα.

Διαβάζοντας τα όσα γράφτηκαν μέχρι τώρα κάποιος μπορεί να κάνει την πολύ εύστοχη παρατήρηση ότι πουθενά δεν έχει εισαχθεί η μεταβλητή του χρόνου. Το πρόβλημα αυτό έρχεται να λύσει ο δεύτερος νόμος του Fick ο οποίος συσχετίζει τη συγκέντρωση με μεταβλητές τόσο χωρικές, όσο και χρονικές. Η εξίσωση που τον περιγράφει, εξάγεται ουσιαστικά από την εφαρμογή του νόμου διατήρησης της μάζας σε ένα θεωρούμενο όγκο αναφοράς, ο οποίος υποδεικνύει ότι η μεταβολή στη συγκέντρωση με την εξέλιξη του χρόνου μέσα στον εν λόγω όγκο, ισούται με τη μεταβολή ροή από και προς αυτόν. Μαθηματικά διατυπωμένα τα παραπάνω γράφονται ως εξής :

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{F_{in} - F_{out}}{\Delta x} = -\frac{\Delta F}{\Delta x}, \quad (5.3)$$

οπότε παίρνοντας το όριο Δt και $\Delta x \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (5.4)$$

Αντικαθιστώντας τον πρώτο νόμο στην παραπάνω σχέση προκύπτει η έκφραση :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (5.5)$$

η οποία είναι ουσιαστικά η μαθηματική διατύπωση του δεύτερου νόμου του Fick και ισχύει και για την περίπτωση όπου ο συντελεστής D εξαρτάται και από τη θέση.

Αν και οι νόμοι του Fick χρησιμοποιήθηκαν στο παρελθόν με μεγάλη επιτυχία, καθώς οι διαστάσεις των διατάξεων μειώνονται συνεχώς, είμαστε υποχρεωμένοι να συμπεριλάβουμε την επίδραση μιας σειράς παραγόντων. Ένας από αυτούς είναι η δημιουργία ηλεκτρικού πεδίου από τα άτομα της πρόσμιξης, όταν η συγκέντρωση αυτών ξεπερνά την ενδογενή συγκέντρωση φορέων του πυριτίου (φαινόμενο που οφείλεται στη μεγαλύτερη διαχυτότητα που έχουν τα ηλεκτρόνια σε σχέση με τα άτομα της πρόσμιξης). Αποδεικνύεται, ότι στην περίπτωση που η συγκέντρωση των προσμίξεων είναι κατά πολύ μεγαλύτερη της ενδογενούς συγκέντρωσης, τότε το δημιουργούμενο ηλεκτρικό πεδίο μπορεί ακόμα και να διπλασιάσει την ροή των προσμίξεων προς την κατεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου. Η δημιουργία του πεδίου αυτού πηγάζει από το γεγονός ότι η ευκινησία των οπών ή των ηλεκτρονίων είναι πολύ μεγαλύτερη από τα ιόντα – φορείς τους, με αποτέλεσμα να προπορεύονται, οδηγώντας στην εμφάνιση ηλεκτροστατικού πεδίου. Ένα δεύτερο αρκετά σημαντικό φαινόμενο είναι η εξάρτηση της διαχυτότητας από τη συγκέντρωση (περιοχές με υψηλότερη συγκέντρωση εμφανίζουν μεγαλύτερη διάχυση, εξομαλύνοντας έτσι την παράγωγο συγκέντρωσης).

Κατά την μοντελοποίηση της κινητικής της διάχυσης, οι δυο παραπάνω παράγοντες λαμβάνονται υπόψη, μέσω κατάλληλων διορθώσεων που εισάγονται στις εξισώσεις του Fick. Πρέπει εδώ να τονιστεί, ότι παρά το γεγονός ότι οι βελτιώσεις αυτές οδήγησαν σε ρεαλιστικότερη

μοντελοποίηση, εν τούτοις η ελάττωση των κρίσιμων κατασκευαστικών μεγεθών σε νανομετρική κλίμακα καθιστά προβληματική αυτή την αντιμετώπιση.

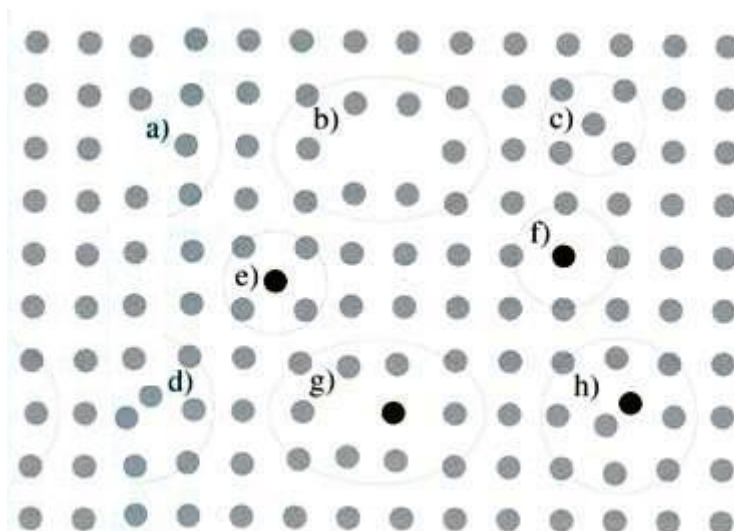
5.3 Μελέτη της διάχυσης σε μικροσκοπικό επίπεδο

Όπως προαναφέρθηκε, η μελέτη της κινητικής της διάχυσης σε μικροσκοπικό επίπεδο μπορεί να γίνει είτε μέσω επίλυσης διαφορικών εξισώσεων που να περιγράφουν την κίνηση των επιμέρους ειδών που συμμετέχουν στις σχετιζόμενες με την διάχυση διαδικασίες, είτε μέσω αλγορίθμων Kinetic Monte Carlo. Πριν προχωρήσουμε στην ανάλυση της κάθε προσέγγισης θα αναφερθούμε στα βασικά είδη που εμπεριέχονται στους υπολογισμούς και στην επίδραση τους στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης.

5.3.1 Είδη σημειακών ατελειών στους ημιαγωγούς

Από το θεώρημα του Nerst, είναι γνωστό ότι ένα κρυσταλλικό πλέγμα δύναται να έχει τέλεια δομή μόνο στην θερμοκρασία του απόλυτου μηδενός. Σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, οι κρύσταλλοι παρουσιάζουν αναγκαστικά μια σειρά από ατέλειες ή ανωμαλίες, οι οποίες διαταράσσουν την περιοδική πλεγματική δομή. Οι ατέλειες που συνίστανται μόνο από άτομα που είναι γηγενή στο πλέγμα (π.χ. ιόντα Na ή Cl σε κρυστάλλους NaCl), ονομάζονται ενδογενείς (intrinsic). Η διαδικασία αναδιανομής τέτοιων ατελειών καλείται αυτοδιάχυση (self-diffusion). Η μεγάλη σπουδαιότητα αυτών των ατελειών έγκειται στο γεγονός ότι διαδραματίζουν πρωτεύοντα ρόλο σε όλες σχεδόν τις θεωρίες που σχετίζονται με την διάχυση των προσμίξεων μέσα στον όγκο του πυριτίου. Στην περίπτωση που εμπλέκονται και άλλα άτομα όπως προσμίξεις, τότε οι ατέλειες αυτές χαρακτηρίζονται ως εξωγενείς (extrinsic).

Στην πιο απλή μορφή, οι ατέλειες επηρεάζουν μόνο τα πλησιέστερα γειτονικά άτομα του κρυσταλλικού πλέγματος, και καλούνται σημειακές ατέλειες (point defects). Οι ατέλειες μεγαλύτερων διαστάσεων ομαδοποιούνται με τον χαρακτηρισμό ως «εκτεταμένες» (extended defects). Παρόλα αυτά, δεν υπάρχει πάντα μια σαφής διαχωριστική γραμμή ανάμεσα στις δυο αυτές περιπτώσεις, ανάλογα από την σκοπιά που τις εξετάζει κανείς. Στην συνέχεια, θα παρουσιάσουμε τους βασικότερους τύπους εκτεταμένων ατελειών ανάλογα με την διαστατικότητα τους. Η πρώτη κατηγορία αναφέρεται σε ατέλειες που εισάγουν μια τοπική αταξία κατά μήκος μιας πλεγματικής γραμμής, και οι οποίες ονομάζονται γραμμικές ατέλειες. Αυτές μπορεί να απαντηθούν υπό μορφή κλειστού βρόγχου ή στην επιφάνεια. Για οποιαδήποτε κρυσταλλογραφική γραμμή, μπορούν να ληφθούν παράλληλα πλεγματικά επίπεδα. Συγκρίνοντας τις ατομικές διευθετήσεις, γίνεται προφανές ότι οι σχηματισμοί επαναλαμβάνονται με περιοδικό τρόπο, καθορίζοντας την διάταξη στοιβάξης του κρυστάλλου. Τυχόν απουσία ή περίσσεια πλεγματικών επιπέδων συνήθως οδηγεί σε διατάραξη της πλεγματικής τάξης. Στην περίπτωση αυτή, οι ατέλειες αυτές ονομάζονται σφάλματα επιστοιβάξης (stacking faults) και είναι τυπικά παραδείγματα διδιάστατων ατελειών. Τα απόντα πλεγματικά επίπεδα καλούνται «ενδογενή» σε αντιδιαστολή με τα πλεονάζοντα τα οποία ονομάζονται «εξωγενή». Ατέλειες ακόμα μεγαλύτερης διαστατικότητας είναι ατέλειες όγκου, οι οποίες αποτελούνται από μη γηγενή άτομα. Τυπικά παραδείγματα είναι τα σφαιρικού σχήματος συσσωματώματα οξυγόνου και τα οκταεδρικής μορφής κενά.



Εικόνα 5.1 Σχηματική αναπαράσταση των σημειακών ατελειών στο πυρίτιο: a) πλεγματικά κενά, b) διπλό πλεγματικό κενό, c) ενδοπλεγματική ατέλεια, d) ενδοπλεγματικότητα, e) πρόσμιξη σε ενδοπλεγματική θέση, f) πρόσμιξη σε πλεγματική θέση, g) ζεύγος πρόσμιξης – πλεγματικού κενού και h) ζεύγος πρόσμιξης – ενδοπλεγματικής ατέλειας.

Μια σχηματική αναπαράσταση των σημαντικότερων σημειακών ατελειών δίνεται στην εικόνα 5.1. Η απλούστερη μορφή είναι τα πλεγματικά κενά (a) (Vacancies, V) τα οποία είναι απολεσθέντα άτομα σε ένα κανονικό τετραεδρικής διάταξης δίκτυο. Γενικά, μια τέτοια ατομική διευθέτηση δεν είναι ενεργειακά προτιμητέα, οπότε τελικά θα υπάρξει μια χαλάρωση στα άτομα που περιβάλλουν το πλεγματικό κενό. Η επόμενη κατηγορία ενδογενών σημειακών ατελειών περιλαμβάνει πλεονάζοντα άτομα πυριτίου. Διατάξεις με ένα μόνο έξτρα άτομο χαρακτηρίζονται ως ενδοπλεγματικές ατέλειες (self – interstitials, I). Στην απλούστερη μορφή, αυτές συνίστανται στην παρουσία ενός επιπλέον ατόμου σε μια καλά ορισμένη θέση (π.χ τετραεδρική ή εξαγωνική θέση) σε ένα κατά τα άλλα τέλειο κρυσταλλικό πλέγμα (c). Πέραν αυτής της μορφής, μια διάταξη όπου δυο άτομα πυριτίου μοιράζονται την ίδια πλεγματική θέση έχει προταθεί. Η διάταξη αυτή ονομάζεται ενδοπλεγματικότητα (interstitialcy). Τέτοιες ενδοπλεγματικές ατέλειες μπορούν να σχηματίσουν μεγαλύτερα συσσωματώματα ατελειών, η κινητική των οποίων διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση μεταβατικών φαινομένων τα οποία ενισχύουν δραστικά την διάχυση (φαινόμενο Ταχείας Μεταβατικής Διάχυσης, Transient Enhanced Diffusion, TED). Οι ενδοπλεγματικές ατέλειες σε οποιαδήποτε μορφή και αν βρίσκονται μέσα στον κρύσταλλο, εμπεριέχουν μόνο γηγενή άτομα με αποτέλεσμα όλες συνολικά να ομαδοποιούνται υπό τον γενικότερο όρο «ενδογενείς σημειακές ατέλειες».

Εξαιτίας της ιδιαίτερα ανοιχτής δομής του πυριτίου, πολλές προσμίξεις καταλαμβάνουν ενδοπλεγματικές θέσεις στο πλέγμα (e). Ανάμεσα σε αυτές είναι άτομα Οξυγόνου και πολλά αλκάλια και βαρέα μέταλλα, όμως οι πιο σημαντικές είναι άτομα που ανήκουν στις ομάδες III και V του περιοδικού πίνακα. Άτομα της ομάδας V, τα οποία αποκαλούνται δότες (donors) έχουν ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο από τα τέσσερα που απαιτούνται για την συνεισφορά στον σχηματισμό ομοιοπολικών δεσμών με τα γειτονικά άτομα πυριτίου. Τα ηλεκτρόνια αυτά συμπεριφέρονται κατά κάποιο τρόπο ως ελεύθερα ηλεκτρόνια, συνεισφέροντας στην ηλεκτρική αγωγιμότητα του υλικού. Αντιστοίχως, τα άτομα από την ομάδα III, τα οποία ονομάζονται αποδέκτες (acceptors) έχουν ένα

λιγότερο ηλεκτρόνιο από αυτά που απαιτούνται για τον σχηματισμό των ομοιοπολικών δεσμών. Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να θεωρήσουμε πως τα άτομα αυτά εισάγουν στο πλέγμα μια οπή που συμπεριφέρεται ως ένα θετικά φορτισμένο σωματίδιο το οποίο μπορεί να κινείται ελεύθερα στον όγκο του πλέγματος. Οι δυο αυτοί τύποι των φορέων φορτίου καθορίζουν τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά της διάταξης, και η ακριβής πρόβλεψη της χωρικής κατανομής των δοτών και των αποδεκτών, είναι ιδιαίτερα σημαντική. Καθώς τα άτομα των προσμίξεων που είναι σε θέσεις αντικατάστασης θεωρούνται ως ακίνητα στην πλειοψηφία των θεωριών διάχυσης, πρέπει να ληφθεί υπόψη η αλληλεπίδραση τους με τις ενδογενείς ατέλειες. Μια τέτοια αλληλεπίδραση μπορεί να οδηγήσει στον σχηματισμό ζευγών είτε πρόσμιξης – πλεγματικού κενού (g) είτε πρόσμιξης – ενδοπλεγματικής ατέλειας (h).

Με τις ενδοπλεγματικές προσμίξεις και τα ζεύγη πρόσμιξης – ενδοπλεγματικής ατέλειας, εισάγονται δυο πολύ παρόμοιες μορφές της εξωγενούς ενδοπλεγματικής ατέλειας. Η σημαντικότερη διαφορά ανάμεσα σε αυτές τις δυο μορφές, δεν είναι η ατομική διεύθυνση στην ενεργειακά πιο προτιμητέα θέση, αλλά το ζήτημα, κατά πόσο το άτομο πυριτίου και η πρόσμιξη εκτελούν μια συσχετισμένη μεταξύ τους κίνηση. Όταν αυτό συμβαίνει, το άτομο πυριτίου είναι το tracer άτομο και η συσχετιζόμενη διάχυση μπορεί να επιταχύνει την διαδικασία αυτοδιάχυσης. Όταν αυτό δεν ισχύει, όπως ακριβώς συμβαίνει στην περίπτωση των ενδοπλεγματικών ατελειών, δεν αναμένεται άμεση επίδραση στην αυτοδιάχυση. Γενικότερα, η συσχετιζόμενη και μη διάχυση των προσμίξεων και των αντίστοιχων συνοδών ατόμων πυριτίου, μπορούν να συμβούν ταυτόχρονα, υποκειμένα στην πιθανότητα για τον αντίστοιχο μηχανισμό. Σε κάθε περίπτωση όμως, καθώς η επίδραση στις διαδικασίες αυτοδιάχυσης είναι μικρής σημασίας και οι δυο μορφές μπορούν να αντιμετωπιστούν με τον ίδιο τρόπο.

5.3.2 Βασικές θεωρίες για την διάχυση σε μικροσκοπικό επίπεδο

Η ύπαρξη σημειακών ατελειών (οπές και ενδοπλεγματικές ατέλειες) συνδέεται άρρηκτα με τη φυσική της διάχυσης των προσμίξεων. Η κατανόηση της συμπεριφοράς των σημειακών ατελειών δύναται, λοιπόν, να μας παρέχει μια εξήγηση για τους μηχανισμούς που υπόκεινται της διάχυσης των ατόμων των προσμίξεων, ξεκαθαρίζοντας έτσι την εικόνα που έχουμε για πολλά φαινόμενα που παλαιότερα φάνταζαν να έχουν ανώμαλη εξέλιξη.

Ένας προφανής μηχανισμός διάχυσης προκύπτει, αν θεωρήσουμε ένα άτομο πρόσμιξης να γειτνιάζει με μια οπή. Το άτομο δύναται να μεταβεί στη κενή γειτονική του θέση, σηματοδοτώντας έτσι ένα βήμα μικρο-διάχυσης. Αυτός ο μηχανισμός αναγνωρίστηκε πρώτος, χάρη στην προϋπάρχουσα θεωρία διάχυσης στα μέταλλα. Αρχικά είχε μεγάλη επιτυχία, αφού προσέφερε εξήγηση σε παρατηρήσεις πάνω στη διάχυση προσμίξεων υψηλής συγκέντρωσης μέσω της χρήσης ενός απλού συνόλου συγκεντρώσεων οπών που εξαρτώνται μόνο από το επίπεδο Fermi.

Ένας άλλος μηχανισμός προκύπτει, αν σκεφτούμε πως μια ενδοπλεγματική ατέλεια μπορεί να εξωθήσει ένα άτομο πρόσμιξης από τη θέση αντικατάστασης στην οποία βρίσκεται, δίνοντας του έτσι τη δυνατότητα να διαχυθεί ταχέως στα ελεύθερα κανάλια του κρυσταλλικού πλέγματος (kick-out mechanism). Μετά από λίγη ώρα το άτομο της πρόσμιξης θα επανασυνδεθεί σε μια θέση αντικατάστασης, εξωθώντας αντίστοιχα ένα άτομο πυριτίου να μετατραπεί σε ενδοπλεγματική ατέλεια ή συμπληρώνοντας μια οπή. Αυτή η διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί αρκετές φορές κατά

τη διάρκεια της διάχυσης. Στην ουσία, κάθε μετάβαση του ατόμου της διαχεόμενης πρόσμιξης είναι μια τυχαία διαδρομή μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, στην οποία παρεμβάλλονται μεγάλες περιόδους παραμονής του ατόμου σε στάσιμη κατάσταση σε θέσεις αντικατάστασης.

Ένας όχι και τόσο προφανής μηχανισμός διάχυσης προκύπτει, αν φανταστούμε ότι μια πρόσμιξη και μια ενδοπλεγματική ατέλεια διαχέονται μαζί σαν ζεύγος. Μια τέτοια μετάβαση είναι δυνατή κατά μήκος των δεσμών, και όχι διαμέσου των ανοικτών καναλιών του κρυσταλλικού πλέγματος. Ένα άτομο πρόσμιξης και ένα άτομο πυριτίου δύνανται να μοιράζονται μια πλεγματική θέση καθώς μετακινούνται κατά μήκος των δεσμών, πραγματοποιώντας έτσι μια ενεργή μετάβαση σαν ζεύγος μέσα στον κρύσταλλο. Μετά το πέρας της ελάχιστης κίνησης που πραγματοποιούν τα δύο συζευγμένα σωματίδια, χωρίζονται, και το άτομο της πρόσμιξης εγκαθίσταται σε μια πλεγματική θέση αντικατάστασης, αφήνοντας το άτομο πυριτίου ως ενδοπλεγματική ατέλεια. Ο μηχανισμός αυτός αποκαλείται “interstitialcy” για να διαχωρίζεται από τον προαναφερθέντα «kick-out» μηχανισμό. Μαθηματικά, οι δύο διαδικασίες είναι ταυτόσημες και ακόμα και στη βιβλιογραφία πολλές φορές αναφέρονται ως μια και μοναδική διαδικασία.

Η άποψη πως οι οπές και οι ενδοπλεγματικές ατέλειες συνεισφέρουν στη διάχυση προσμίξεων στο πυρίτιο έχει πλέον ουσιαστικά καθιερωθεί, αφού επιβεβαιώνεται από πειραματικές και θεωρητικές προβλέψεις. Μόλις πρόσφατα έγινε δυνατή η διεξαγωγή θεωρητικών υπολογισμών βασισμένων σε κβαντομηχανικά μοντέλα της φυσικής στερεάς κατάστασης. Τα πειράματα τα οποία καταδεικνύουν με δραματικό τρόπο την ύπαρξη διττού μηχανισμού διάχυσης, βασίζονται στην παρατήρηση πως για συγκεκριμένες ταυτόσημες συνθήκες, π.χ. οξείδωση της επιφάνειας του πυριτίου, μια συγκεκριμένη πρόσμιξη μπορεί να παρουσιάζει αύξηση της διαχυτότητάς της, ενώ μια άλλη να έχει μείωση. Κατά την οξείδωση επιφάνειας πυριτίου σχηματίζονται δομές από συσσωματωμένες ενδοπλεγματικές ατέλειες (stacking faults) μέσα στο πυρίτιο. Η δημιουργία της δομής SiO₂ απαιτεί διόγκωση κατά 30% σε σχέση με το απλό πυρίτιο και ακριβώς για να ανακουφιστεί η επαγόμενη μηχανική τάση, έχουμε έγχυση ενδοπλεγματικών ατελειών στη διεπιφάνεια. Αυτές οι ενδοπλεγματικές ατέλειες συσσωματώνονται σε επίπεδα ανάμεσα στα κανονικά κρυσταλλικά επίπεδα του πυριτίου προκαλώντας έτσι την επιθυμητή διόγκωση. Ακριβώς αυτός ο μηχανισμός, δηλαδή η αύξηση της συγκέντρωσης των ενδοπλεγματικών ατελειών, βρέθηκε ότι συνδέεται άρρηκτα και με τους μηχανισμούς διάχυσης, αφού για τις ίδιες συνθήκες διαφορετικές προσμίξεις παρουσιάζουν διαφορετική, ποιοτικά, συμπεριφορά. Είναι προφανές πως αυτό σημαίνει πως η διάχυση πραγματοποιείται με τουλάχιστον δύο μηχανισμούς και μάλιστα πως κάθε πρόσμιξη έχει διαφορετικό βαθμό εξάρτησης από τον κάθε μηχανισμό.

5.3.3 Εξάρτηση της διάχυσης από οπές και ενδοπλεγματικές ατέλειες

Οι προαναφερθείσες παρατηρήσεις μπορούν να μοντελοποιηθούν με το σιεπτικό πως οι προσμίξεις πραγματοποιούν διάχυση κατά ένα μέρος f_I μέσω ενδοπλεγματικών ατελειών και κατά το υπόλοιπο $f_V = 1 - f_I$ μέσω οπών. Σε κατάσταση διαταραγμένων συνθηκών, όπου οι συγκεντρώσεις των ενδοπλεγματικών ατελειών (C_I) και των οπών (C_V) διαφέρουν από τις αντίστοιχες τιμές σε ισορροπία, η διαχυτότητα μιας πρόσμιξης μπορεί να γραφεί ως:

$$D_A^{eff} = D_A^* \left(f_I \frac{C_I}{C_I^*} + f_V \frac{C_V}{C_V^*} \right), \quad (5.6)$$

όπου D_A^{eff} είναι η ενεργός διαχυτότητα μιας πρόσμειξης υπολογισμένη σε διαταραγμένες συνθήκες πληθυσμού σημειακών ατελειών και D_A^* είναι η κανονική διαχυτότητα σε συνθήκες ισορροπίας. Εξ' ορισμού ισχύει πως $f_I + f_V = 1$.

Είναι ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε πως οι δύο μηχανισμοί διάχυσης έχουν παρόμοιες ενέργειες ενεργοποίησης. Σε περίπτωση που ίσχυε το αντίθετο, μια γραφική παράσταση της διαχυτότητας προς το $1/T$ θα έδειχνε ξεχωριστές περιοχές με διαφορετική κλίση. Κάτι τέτοιο, που θα ήταν χαρακτηριστικό στην περίπτωση του Αρσενικού, το οποίο έχει σχεδόν ίσους συντελεστές διάχυσης για I και V, δεν παρατηρείται. Γενικά, η εξέταση της συμπεριφοράς της διάχυσης κάτω από διαφορετικές συνθήκες, όπου οι ατέλειες τελούν υπό καθεστώς διαταραχής, μπορεί να μας δώσει μια εκτίμηση για την προδιάθεση της ελάχιστε πρόσμειξης να διαχυθεί μέσω οπών ή ενδοπλεγματικών ατελειών.

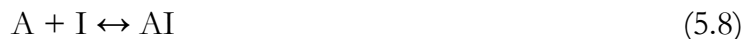
5.3.4 Αλληλεπιδράσεις προσμίξεων-ατελειών

Ένας πιο ενδεδειγμένος μαθηματικός τύπος εκφράζει την ενεργό διαχυτότητα ως:

$$D_A^{eff} = d_{AI} \left[\frac{C_{AI}}{C_A} \right] + d_{AV} \left[\frac{C_{AV}}{C_A} \right], \quad (5.7)$$

όπου το d_{AI} ή d_{AV} εκφράζουν τη διαχυτότητα του πραγματικά κινούμενου στοιχείου που πραγματοποιεί τις μεταβάσεις και C_{AI}/C_A , C_{AV}/C_A είναι το ποσοστό της ελάχιστε πρόσμειξης στη συγκεκριμένη αυτή κατάσταση που επιτρέπει τις μεταβάσεις.

Αυτή είναι μια πιο αυστηρή διατύπωση για τη διαδικασία της διάχυσης, αφού χωρίζει το ολικό αποτέλεσμα και το εκφράζει μέσω των διαχυτοτήτων των ελάχιστε κινούμενων στοιχείων και των μικροσκοπικών συγκεντρώσεων αυτών. Το άτομο πρόσμειξης από μόνο του θεωρείται ακίνητο. Επομένως, τα κινούμενα αυτά στοιχεία που αναφέρουμε δεν είναι τίποτα άλλο παρά στοιχεία που προέρχονται από την αλληλεπίδραση μεμονωμένων ατόμων πρόσμειξης με σημειακές ατέλειες, σύμφωνα και με τα προαναφερθέντα. Ένα άτομο πρόσμειξης A δύναται να αλληλεπιδράσει με μια ενδοπλεγματική ατέλεια I (είτε V) σχηματίζοντας σε ατομική κλίμακα το κινούμενο στοιχείο AI (AV).



Αυτό ισοδυναμεί με τους δύο προαναφερθέντες μηχανισμούς διάχυσης σε μικροσκοπικό επίπεδο “kick-out” και “Interstitialcy”. Σαν προτυποποίηση, οι δύο μηχανισμοί είναι ισοδύναμοι. Η συνολική εικόνα και στις δύο περιπτώσεις είναι πως μια ενδοπλεγματική ατέλεια καταναλώνεται προσωρινά για να δημιουργηθεί ένα κινούμενο στοιχείο, το οποίο στη συνέχεια θα ταξιδέψει μέσα στην κρυσταλλική δομή. Το κινούμενο αυτό στοιχείο κάποια στιγμή θα ηρεμήσει, αφήνοντας ένα άτομο πρόσμειξης σε θέση αντικατάστασης και εγγέοντας στο σύστημα εκ νέου μια ενδοπλεγματική ατέλεια.

Παρ' ότι ο παραπάνω μηχανισμός διάχυσης φαντάζει απλοϊκός, εμπεριέχει έναν εντυπωσιακό όγκο φυσικής. Επί παραδείγματι, γίνεται προφανές ότι σε συνθήκες υπεριορεσμού των

ενδοπλεγματοειδών ατελειών θα έχουμε μεγαλύτερη διάχυση των προσμίξεων που ευνοούνται από αυτό, π.χ. Βόριο (αντιστρόφως έλλειψη ενδοπλεγματοειδών ατελειών θα οδηγεί σε μείωση της διάχυσης του Βορίου). Ακόμα και σε φυσιολογικές συνθήκες, όπου θεωρούμε τη διάχυση μιας πρόσμιξης από την επιφάνεια, η ατομική περιγραφή υποστηρίζει πως το εσωτερικό του δείγματος θα περιέχει σύντομα πολλά ΑΙ, οδηγώντας έτσι την παραπάνω εξίσωση προς τα αριστερά. Το άμεσο αποτέλεσμα είναι να απελευθερωθούν πολλές ενδοπλεγματοειδείς ατέλειες στο εσωτερικό όταν τα κινούμενα άτομα πρόσμιξης ηρεμήσουν σε μια θέση αντικατάστασης. Τοιοιούτοτρόπως, οι ενδοπλεγματοειδείς ατέλειες ωθούνται από την επιφάνεια στην οποία βρίσκονταν αρχικά προς το εσωτερικό. Εάν, τώρα, υπάρχει μια πηγή στην επιφάνεια που κρατάει τα επίπεδα συγκέντρωσης των ατελειών σε τιμές πλησίον της ισορροπίας, τότε θα παρατηρηθεί πλεονασμός των ενδοπλεγματοειδών πιο βαθιά στο δείγμα. Αυτός ο πλεονασμός με τη σειρά του θα αυξήσει τη διάχυση των προσμίξεων, προκαλώντας έτσι ταχύτερη διάχυση της απόληξης ενός προφίλ νόθευσης.

Μια πιο ενδελεχής εξέταση της φυσικής αυτού του φαινομένου αποκαλύπτει πως το βάθος στο οποίο εκδηλώνεται ο υπεριορεσμός των ενδοπλεγματοειδών εξαρτάται από το λόγο της ροής των προσμίξεων ($d_{AI}C_{AI}$) προς τη ροή των ενδοπλεγματοειδών (dIC_I^*). Επομένως, ταχέως διαχεόμενες προσμίξεις με υψηλή διαλυτότητα, όπως ο Φώσφορος, παρουσιάζουν το εν λόγω φαινόμενο με μεγαλύτερη ένταση από ότι προσμίξεις χαμηλής διαχυτότητας και διαλυτότητας, όπως το Αρσενικό. Ακόμα, λόγω της διαφοράς στις ενέργειες ενεργοποίησης μεταξύ της ενδογενούς διάχυσης (4.8eV) και της διάχυσης μιας πρόσμιξης (3-4eV), παρατηρείται μια αύξηση του μεγέθους του υπεριορεσμού ενδοπλεγματοειδών στις χαμηλές θερμοκρασίες.

5.3.5 Σύνοψη των αποτελεσμάτων για διάχυση σε καθεστώς χημικής ισορροπίας

Οι διεργασίες ανόπτησης που χρησιμοποιούνταν μέχρι και σχετικά πρόσφατα, ήταν τέτοιες ώστε γενικά η αντίδραση που περιγράφει την αλληλεπίδραση μιας πρόσμιξης, έστω Α με μια πλεγματοειδή ατέλεια Ι, $A + I \leftrightarrow AI$ να διεξάγεται σε συνθήκες χημικής ισορροπίας. Το γεγονός αυτό, απλοποιούσε αρκετά τους υπολογισμούς για την πρόβλεψη της κινητικής της διάχυσης. Αν και όπως θα αναλύσουμε στην συνέχεια, μια τέτοια θεώρηση δεν ευσταθεί για τις διαδικασίες ανόπτησης που χρησιμοποιούμε πλέον, θα παρουσιάσουμε για λόγους πληρότητας την έκφραση της ενεργής διαχυτότητας D_A^{eff} , η οποία λαμβάνει υπόψη τους σημαντικότερους παράγοντες που επηρεάζουν την διαχυτότητα. Αποδεικνύεται ότι η ολική διαχυτότητα των κινούμενων ζευγών του Βορίου δίνεται από τρεις όρους: το συντελεστή ενδογενούς, σε κατάσταση ισορροπίας, διάχυσης που ισχύει για χαμηλά επίπεδα νόθευσης, το βαθμό στον οποίο αυτός αυξάνεται σε συνθήκες υψηλής νόθευσης λόγω του επιπέδου Fermi και το βαθμό υπεριορεσμού των ενδοπλεγματοειδών ατελειών.

$$D_{BI}^{eff} = D_{BI}^* \left(\frac{1 + \beta \frac{p}{n_i}}{1 + \beta} \right) \frac{C_{I^0}}{C_{I^0}^*} C_{B^-} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(C_{B^-} \frac{C_{I^0}}{C_{I^0}^*} \frac{p}{n_i} \right) \quad (5.9)$$

Το β εκφράζει την αύξηση της διαχυτότητας του Βορίου λόγω του επιπέδου Fermi και εξαρτάται από τη διαχυτότητα των ζευγών, τη συγκέντρωση αυτών και το ενεργειακό επίπεδο των φορτισμένων σημειακών ατελειών στο ενεργειακό χάσμα. Μεγάλο μέρος της φυσικής του μικροσκοπικού επιπέδου συνοψίζεται στον ορισμό του β . Περιέχει πληροφορία για τις διαχυτότητες των διάφορων φορτισμένων ζευγών, τις συγκεντρώσεις των φορτισμένων ενδογενών ατελειών που σχηματίζουν τα

ζεύγη και τις σχετικές συγκεντρώσεις των ζευγών στην κάθε φορτισμένη κατάσταση. Το αξιοπρόσεκτο σε αυτήν την εξίσωση είναι ότι ενώ προέρχεται από μια θεώρηση σε μικροσκοπικό επίπεδο, τελικά εμπεριέχει μόνο όρους που είναι μετρήσιμοι σε μακροσκοπικό επίπεδο.

5.3.6 Προηγμένη μοντελοποίηση της διάχυσης – Πλήρως κινητική περιγραφή της αλληλεπίδρασης πρόσμιξης – ατέλειας με τη χρήση του Charged React Model

Ακόμα και τα πιο προηγμένα από τα μοντέλα που περιγράφηκαν προηγουμένως, δεν είναι πλέον ικανά για την μοντελοποίηση των φαινομένων της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων στις υπέρ-ρηχές επαφές των τελευταίων γενεών CMOS. Η αδυναμία αυτή πηγάζει από το γεγονός ότι θεωρήσαμε ότι η αντίδραση $A + I \leftrightarrow AI$ είναι σε ισορροπία, κάτι το οποίο δεν ισχύει στην περίπτωση των ανοπτήσεων σε πολύ μικρούς χρόνους. Για την αποτελεσματική αντιμετώπιση του προβλήματος αυτού απαιτείται μια πιο γενική περιγραφή των διεργασιών της διάχυσης, εις τρόπον ώστε οι ρυθμοί των αντιδράσεων να μην είναι σε ισορροπία, αλλά να περιγράφονται ατομιστικά από τους ευθείς και αντίστροφους ρυθμούς αντίδρασης, έτσι ώστε η πλήρης κινητική έκφραση του ρυθμού της αντίδρασης να δίνεται από την:

$$R = k_f C_A C_I - k_r C_{AI} \quad (5.10)$$

όπου τα k_f και k_r είναι ο ευθύς και ο αντίστροφος ρυθμός αντίδρασης. Με τον τρόπο αυτό, η διάχυση των προσμίξεων μπορεί να περιγραφεί από μια σειρά αντιδράσεων-εξισώσεων διάχυσης. Το λογισμικό προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε, το Sentaurus Process, περιλαμβάνει ένα πολύ προηγμένο μοντέλο διάχυσης σε καθεστώς μη ισορροπίας, το Charged React. Πρόκειται για το πιο γενικό μοντέλο κινητικής περιγραφής της διάχυσης στο Sentaurus (five stream model). Περιλαμβάνει μία ακίνητη σε θέση αντικατάστασης πρόσμιξη και μέχρι δυο κινητά φορτισμένα ζεύγη πρόσμιξης-ατέλειας. Επίσης μπορεί να συμπεριλάβει κινητές σημειακές ατέλειες. Όπως αναφέρεται και στο εγχειρίδιο χρήσης του λογισμικού, για εξαιρετικά υψηλούς ρυθμούς ανόδου της θερμοκρασίας ή για custom αρχικές συνθήκες, τα μοντέλα Charge React, React, φαίνεται να είναι οι καλύτερες επιλογές, παρά τις μεγαλύτερες απαιτήσεις σε όρους υπολογιστικής ισχύος. Επομένως στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με laser, η επιλογή αυτού το μοντέλου αποτελεί μονόδρομο. Τα παραπάνω μπορούν να μοντελοποιηθούν με βάση τις παρακάτω αμφίδρομες αντιδράσεις:



με το A να εκφράζει την πρόσμιξη (π.χ. Βόριο), το I μια ενδοπλεγματική ατέλεια και το V ένα πλεγματικό κενό. Οι διαφορικές εξισώσεις που επιλύονται σε αυτό το μοντέλο είναι :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -R_{AI} - R_{AV} + R_{AI,V} + R_{AI,I} - R_A^{clus} \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial C_{AI}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{AI} + R_{AI} - R_{AI,V} - R_{AI}^{clus} \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial C_{AV}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{AV} + R_{AV} - R_{AV,I} - R_{AV}^{clus} \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = -\nabla \cdot J_I - R_{IV} - R_{AI} - R_{AV,I} - R_I^{clus} \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = -\nabla \cdot J_V - R_{IV} - R_{AV} - R_{AI,V} - R_V^{clus} \quad (5.20)$$

με C_A να είναι η συγκέντρωση των προσμίξεων σε θέσεις αντικατάστασης και C_X η συγκέντρωση των ελεύθερων ατελειών τύπου X που δεν βρίσκονται σε συσσωματώματα ή ζεύγη. Οι ρυθμοί αντίδρασης κάθε είδους θα καθοριστούν στη συνέχεια αυτής της παραγράφου.

Στη συνέχεια υπολογίζεται η ροή του ευκίνητου ζεύγους ατέλειας. Με βάση την εξίσωση:

$$J_{A^c} = -d_{A^c} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-c} \nabla \left(A^c \left(\frac{n}{n_i} \right)^c \right), \quad (5.21)$$

για τα φορτισμένα ζευγάρια, η ροή εκφράζεται με βάση τους όρους της ολικής συγκέντρωσης των ζευγών. Γενικά αναμένεται ότι η αντίδραση δημιουργίας ζευγών πρόσμιξης – ατέλειας βρίσκεται σε ισορροπία και ορίζεται ένα σετ σταθερών για αυτή την αντίδραση:

$$C_{AX^{\zeta+c}} = k_{AX^c} C_{AX^c} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-(\zeta+c)}, \quad (5.22)$$

με X να είναι I ή V, ζ το φορτίο της πρόσμιξης A και k_{AX^c} η σταθερά αντίδρασης του ζεύγους AX που δύναται να υπολογιστεί με βάση το τύπο:

$$k_{AX^c} = k_{AX^c}^0 \exp \left(\frac{-k_{AX^c}^E}{k_B T} \right) \quad (5.23)$$

Έχοντας όλα αυτά στη διάθεσή μας υπολογίζουμε τη ροή των ζευγών από την σχέση:

$$J_{AX} = -\sum J_{AX^c} = \sum_c D_{AX^c} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-c-\zeta} \nabla \left(\frac{C_{AX}}{C_{X^0}^+ \sum_q k_{AX^q} k_{X^q} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-q}} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{\zeta} \right) \quad (5.24)$$

με C_{AX} να είναι η ολική συγκέντρωση ζευγών και D_{AX^c} η ενεργός διαχυτότητα του ζεύγους πρόσμιξης – σημειακής ατέλειας σε κατάσταση φόρτισης c η οποία συσχετίζεται με τη διαχυτότητα d_{AX^c} μέσω της:

$$D_{AX^c} = C_{X^0}^+ k_{AX^c} k_{X^c} d_{AX^c} = D_{AX^c}^0 \exp \left(\frac{-D_{AX^c}^E}{k_B T} \right), \quad (5.25)$$

με τον όρο $C_{X^0}^+$ να συμβολίζει την κατάσταση ισορροπίας των ουδέτερων ατελειών και να συσχετίζεται με την ολική εσωτερική συγκέντρωση της ατέλειας X μέσω της εξίσωσης:

$$C_{X^0}^+ = \frac{C_{X(\text{intrinsic})}^+}{\sum_c k_{X^c}} \quad (5.26)$$

Οι ποσότητες $C_{V(\text{intrinsic})}^+$ και $C_{X(\text{intrinsic})}^+$ οι οποίες εξ ορισμού ακολουθούν το νόμο του *Arrhenius* ορίζονται από εμάς με κατάλληλες εντολές. Παρόμοια με τα ζεύγη, ορίζονται και οι ροές των ατελειών:

$$J_X = -\sum J_{X^c} = \frac{\sum_c k_{X^c} D_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c} C_X^+}{\sum_q k_{X^q} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-q}} \nabla \left(\frac{C_X}{C_X^+} \right), \quad (5.27)$$

με C_X να είναι η ολική συγκέντρωση των ατελειών (δηλαδή το άθροισμα των τοπικών ατελειών) και D_{X^c} η διαχυτότητα της ατέλειας X σε κατάσταση φόρτισης c που δίνεται από τον τύπο:

$$D_{X^c} = d_{X^c} = D_{X^c}^0 \exp\left(\frac{-D_{X^c}^E}{k_B T}\right) \quad (5.28)$$

Έτσι λοιπόν οι ρυθμοί αντίδρασης μπορούν να υπολογιστούν, και η γενική φόρμουλα για κάθε συνδυασμό κατάστασης φόρτισης δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις:



$$R_{A^a, B^b, c} = k_{A^a, B^b, c}^f \left(C_{A^a} C_{B^b} - k_{A^a, B^b, c}^r C_{AB^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{(c-a-b)} \right) \quad (5.30)$$

Αθροίζοντας λοιπόν για όλες τις πιθανές καταστάσεις φόρτισης έχουμε:

$$R_{AX} \equiv -R_{AX}^f \left(C_A C_X - \frac{C_{AX}}{\bar{K}_{AX}^r} \right) \quad (5.31)$$

$$R_{AI, V} \equiv \bar{K}_{AI, V}^f (C_{AI} C_V - \bar{K}_{AX}^r C_I^+ C_V^+ C_A) \quad (5.32)$$

$$R_{AV, I} \equiv \bar{K}_{AV, I}^f (C_{AV} C_I - \bar{K}_{AX}^r C_I^+ C_V^+ C_A) \quad (5.33)$$

Με :

$$\bar{K}_{AX}^f \equiv \frac{\sum_i K_{f_X KO_i} k_{X^i} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-i}}{\sum_c k_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}} \quad (5.34)$$

$$\bar{K}_{AX}^r \equiv \frac{\sum_i K_{AX^i} k_{X^i} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-i}}{\sum_c k_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}} \quad (5.35)$$

$$\bar{K}_{AI,V}^f \equiv \frac{\sum_i \sum_j K_{f_{AI^i,V^j} FT^k_{AI^i k_{V^j}}} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-(i+j)}}{\sum_c k_{AI^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c} \sum_{\xi} k_{V^{\xi}} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-\xi}} \quad (5.36)$$

\bar{K}_{AX}^f είναι ο ρυθμός αντίδρασης δίχως τον μηχανισμό kick-out και X η ενδοπλεγματική ατέλεια ή κενό. Τα $\bar{K}_{AV,I}^f$ και $\bar{K}_{AI,V}^f$ είναι οι ρυθμοί αντίδρασης για το μηχανισμό Frank–Turnbull⁴, τους οποίους δύναται να ορίσουμε εμείς, ενώ το \bar{K}_{AX}^r συμβολίζει τη σταθερά ισορροπίας.

Η αντίδραση επανασύνδεσης I – V γράφεται ως :

$$R_{IV} = \mathfrak{R}_{IV}(C_I C_V - C_I^+ C_V^+) \quad (5.37)$$

όπου :

$$\mathfrak{R}_{IV} = \frac{C_{I(int\ rinsic)}^+ C_{V(int\ rinsic)}^+}{C_I^+ C_V^+ \sum_{\xi} k_{I^{\xi}} \sum_{\zeta} k_{V^{\zeta}}} \sum_i \sum_j K_{I^i V^j} k_{I^i} k_{V^j} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-(i+j)} \quad (5.38)$$

Το σύμβολο “+” πάνω από τις συγκεντρώσεις υπονοεί τις συγκεντρώσεις σε κατάσταση ισορροπίας. Τα i, j, k αναφέρονται σε διαφορετικές καταστάσεις φόρτισης των ατελειών. Ο όρος $K_{I^i V^j}$ αναφέρεται στο ρυθμό επανασύνδεσης όγκου ενδοπλεγματικών ατελειών και κενών σε καταστάσεις φόρτισης i και j.

Η συγκέντρωση ισορροπίας μη συζευγμένης σημειακής ατέλειας μπορεί να υπολογιστεί ως:

$$C_X^+ = C_{X(int\ rinsic)}^+ \frac{\sum_c k_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}}{\sum_c k_{X^c}^s}, \quad (5.39)$$

με τον όρο $k_{X^c}^s$ να συμβολίζει τον προσαρμοζόμενο συντελεστή φόρτισης για την ατέλεια X. Το σύνολο λοιπόν των παραπάνω εξισώσεων περιγράφει το μοντέλο Charge React που χρησιμοποιήθηκε για κάθε αναλυτικό υπολογισμό της κινητικής της διάχυσης.

Τέλος, πρέπει να τονιστεί ότι τα σχήματα αυτά είναι προβληματικά στην περιγραφή περιπτώσεων που η συγκέντρωση των προσμίξεων υπερβαίνει τα $2 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$, εφόσον αναφερόμαστε σε Γερμάνιο, Αρσενικό και Αντιμόνιο. Πράγματι, για αυτές τις συγκεντρώσεις σημειώνεται δραστική αύξηση της διαχυτότητας, η οποία ερμηνεύεται από την Percolation θεωρία σύμφωνα με τους Mathiot και Pfister^{5,6}. Σύμφωνα με αυτή, η εγγύτητα των προσμίξεων ελαττώνει τις ενέργειες σχηματισμού και μετανάστευσης (migration) των πλεγματικών κενών που βρίσκονται στην περιοχή κοντά τους, με αποτέλεσμα την ενίσχυση της διαχυτότητας εντός των συσσωματωμάτων. Σημειώνεται πάντως ότι για το Βόριο, η diffusion-react προσέγγιση δεν αντιμετωπίζει παρόμοια προβλήματα.

5.4 Περιγραφή της διάχυσης με χρήση Kinetic Monte Carlo

Η εναλλακτική κεντρική προσέγγιση για την περιγραφή της διάχυσης είναι η μελέτη της ακριβούς κινητικής των στοιχείων σε ατομική κλίμακα. Στα στερεά, σε θερμοκρασίες πάνω από το απόλυτο μηδέν, τα άτομα βρίσκονται σε συνεχή κίνηση γύρω από ενεργειακά προτιμητέες θέσεις. Χρονικά σταθμισμένες, οι περισσότερες από αυτές τις ταλαντώσεις δεν οδηγούν σε μετατόπιση. Για να φτάσουμε σε κάποιο γενικότερο συμπέρασμα, μόνο οι κινήσεις που οδηγούν σε μετατόπιση πρέπει να ληφθούν υπόψη. Στην ουσία πρόκειται για «άλματα» των ατόμων μεταξύ ενεργειακά προτιμητέων θέσεων. Τα άλματα του κάθε ατόμου σχετίζονται άμεσα με τις αντίστοιχες μετακινήσεις των γειτονικών ατόμων. Επιπλέον η διεύθυνση κατά την οποία πραγματοποιείται κάθε άλμα είναι ανεξάρτητη από τα προηγούμενα βήματα, με αποτέλεσμα τα άτομα τελικά να εκτελούν μια τυχαία διαδρομή (random walk) ή αλλιώς κίνηση Brown. Μια εξαιρετική περιγραφή των φαινομένων αυτών έχει δοθεί από τον Chandrasekhar⁷. Παρά το γεγονός ότι μόνο τα άτομα αναφέρονται ως διαχεόμενα σωματίδια, οι εξαγόμενες σχέσεις ισχύουν και για τις υπόλοιπες σημειακές ατέλειες, όπως τα πλεγματικά κενά.

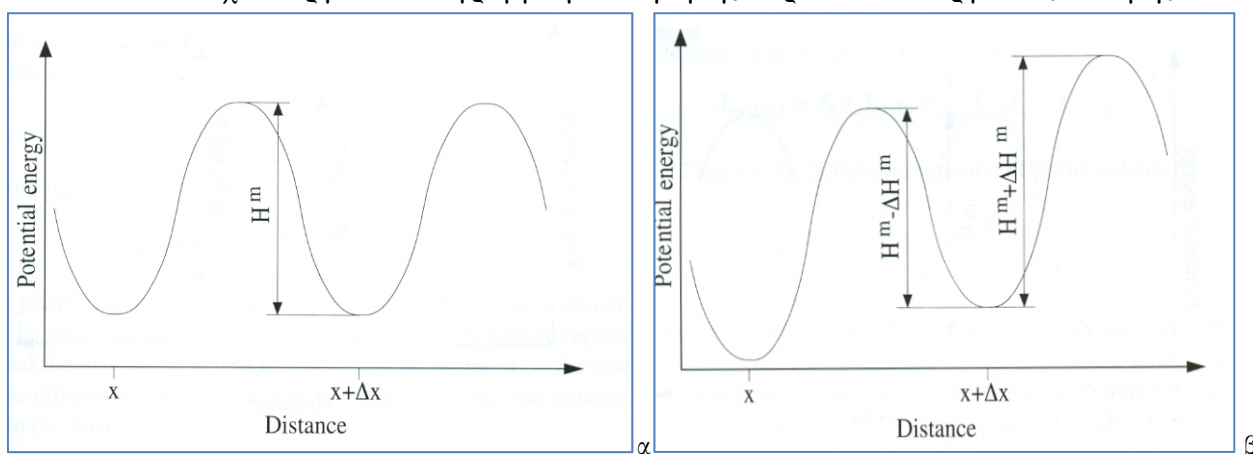
Όταν ο αριθμός των διαχεόμενων ατόμων είναι αρκετά μεγάλος, μπορούμε να αναθέσουμε τις κυριότερες ιδιότητες τους, σε ένα αντιπροσωπευτικό άτομο. Τα πιο ενδιαφέροντα ζητήματα προς επίλυση τότε, είναι ποια είναι η πιο πιθανή απόσταση του ατόμων μετά την διενέργεια N βημάτων και πόσο μεγάλη είναι η πιθανότητα να βρεθεί εντός του διαστήματος μεταξύ (x,y,z) και $(x+\delta x, y+\delta y, z+\delta z)$. Χρησιμοποιώντας μια σειρά στατιστικών εργαλείων με βάση την κατανομή Bernoulli καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι το άτομο μετά από N τυχαία βήματα θα απέχει από την αρχική του θέση μια μέση απόσταση $\langle D_N^2 \rangle$ ίση με το γινόμενο $N \cdot L^2$, όπου L είναι το μήκος του βήματος. Ο κυριότερος τρόπος για να εξάγουμε τους νόμους του Fick από τις τυχαιοκρατικές ατομικές μετακινήσεις είναι να εξετάσουμε την ανταλλαγή των ατόμων μεταξύ γειτονικών (επιπέδων) ενεργειακά προτιμητέων θέσεων στο πλέγμα του κρυστάλλου. Ακολουθώντας μια σειρά διαφορετικών συλλογισμών στη βιβλιογραφία^{8 9 10} είναι γενικά αποδεκτό ότι η συχνότητα Γ με την οποία εκτελούνται τα τυχαία βήματα, δίνεται από την σχέση:

$$\Gamma = \Gamma_0 \cdot \exp\left(\frac{S^m}{k}\right) \cdot \exp\left(-\frac{H^m}{k \cdot T}\right) \quad (5.40)$$

Η σχέση αυτή ισχύει για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από την θερμοκρασία Debye και για μετακίνηση χωρίς να υπάρχει καθοδηγούσα δύναμη. Η Γ_0 είναι μια σταθμισμένη συχνότητα, η οποία καλείται συχνότητα attempt, ενώ τα S^m και H^m είναι αντίστοιχα οι εντροπία και η ενθαλπία μετακίνησης (migration) ή διάχυσης. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η τιμή της συχνότητας αυτής στην περίπτωση υψηλών θερμοκρασιών είναι $1.36 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ¹¹. Στην εικόνα 5.2.α δίνεται ένα σχηματικό διάγραμμα ενεργειακό διάγραμμα στην περίπτωση αυτή. Μια σύγκριση ανάμεσα στην σταθερά της διάχυσης, την συχνότητα άλματος και την σχέση του Arrhenius δείχνει ότι η ενθαλπία μετακίνησης H^m αντιστοιχεί στην ενέργεια σχηματισμού E_s , εφόσον όλοι οι παράμετροι θεωρηθούν ανεξάρτητοι από την θερμοκρασία.

Στην περίπτωση που στην σημειακή ατέλεια επενεργούν εξωτερικές δυνάμεις, τότε η κατάσταση διαφοροποιείται ελαφρώς. Ακολουθώντας τον ορισμό του Manning¹², ως επενεργούσα εξωτερική δύναμη, θεωρούμε κάθε επιρροή στο άτομο, η οποία καθιστά την συχνότητα

μεταπήδησης εξαρτώμενη από την διεύθυνση του άλματος. Τέτοιες επιδράσεις μπορεί να είναι η παρουσία ηλεκτρικών πεδίων, βαρυτικές δυνάμεις, βαθμίδες τάσης, κ.α. Στο διάγραμμα 5.2.β δίνεται το αντίστοιχο ενεργειακό διάγραμμα μεταπήδησης παρουσία επενεργούσας δύναμης.



Εικόνα 1 Σχηματική αναπαράσταση ενεργειακού φράγματος α) χωρίς και β) με, ύπαρξη οδηγούσας δύναμης (driving force).

Γενικά η μέθοδος Kinetic Monte Carlo, στηρίζεται στην δημιουργία ενός υπολογιστικού χωρίου στο οποίο δεν λαμβάνονται υπόψη τα άτομα του πλέγματος και οι ταλαντώσεις τους γύρω από τις θέσεις ισορροπίας, αλλά μόνο κάθε λογής ατέλειες. Σε κάθε είδος ατέλειας αναθέτεται ένας τύπος σωματιδίου, του οποίου η συμπεριφορά της κινητικής του εξαρτάται από την συχνότητα πραγματοποίησης μιας δεδομένης μεταπήδησης από μια ενεργειακά προτιμητέα θέση σε μια άλλη. Η συχνότητα αυτή εξαρτάται τόσο από τα χαρακτηριστικά του σωματιδίου, όσο και από αυτή καθαυτή τη μεταπήδηση, μέσω κατάλληλων ενεργειών και προεκθετικών παραγόντων, οι τιμές των οποίων έχουν ανατεθεί εκ των προτέρων. Στη συνέχεια, θα παρουσιαστούν αναλυτικά τα κυριότερα είδη των σωματιδίων που λαμβάνονται υπόψη κατά τους υπολογισμούς που διενεργεί το Sentaurus Process.

Σωματίδια, ατέλειες και οπές

Τύποι Σωματιδίων

Για κάθε σωματίδιο χρησιμοποιούνται τρεις χωρικές συντεταγμένες (x, y, z) και δύο ετικέτες που καθορίζουν τον τύπο αυτού και τις αλληλεπιδράσεις που δύναται να πραγματοποιήσει. Μερικές από τις ετικέτες που χρησιμοποιούνται είναι: “Τύπος σωματιδίου”, που καθορίζει ποιο στοιχείο είναι, το φορτίο και το ρόλο αυτού στην προσομοίωση ή “Τύπος ατέλειας”, που καθορίζει ποιες αντιδράσεις συσσωμάτωσης δύναται να πραγματοποιήσει το ελάχιστο σωματίδιο. Σε κάθε σωματίδιο που εμφανίζεται στη προσομοίωση, η μέθοδος αντιστοιχίζει και μια ξεχωριστή οντότητα. Π.χ. μια ενδοπλεγματική ατέλεια με φορτίο $-1, 0, 1$ αντιστοιχεί σε τρία διαφορετικά σωματίδια για το πρόγραμμα, τα IM, I και IP (αντίστοιχα VM, V και VP για μια οπή), με τα γράμματα M και P να συμβολίζουν μια μονάδα αρνητικού και θετικού φορτίου αντίστοιχα. Επίσης, όταν μια πρόσμιξη συσσωματώνεται π.χ. με μια οπή, τότε αυτό πάλι αποτελεί ξεχωριστό σωματίδιο για την προσομοίωση. Επί παραδείγματι, ένα συσσωμάτωμα ενός ατόμου Βορίου με μια οπή και φορτίο

+1, απεικονίζεται ως BVP. Τα σωματίδια που δύναται να προσομοιώσει η μέθοδος φαίνονται παρακάτω συγκεντρωτικά:

I, V, B, As, C, F, In, P, Sb, IM, IP, VMM, VM, VP, VPP, Asi, AsiP, AsV, AsVP, AsVM, Bi, BiP, BiM, Ci, FV, FI, Ini, IniM, InV, InVM, Pi, PiP, PV, PVM, PVP, Sbi, SbiP, SbV, SbVP, SbVM

Στο κάθε ένα σωματίδιο φυσικά αντιστοιχεί και μια σειρά παραμέτρων, μερικές εκ των οποίων είναι: οι παράμετροι διάχυσης του (συντελεστές και ενέργειες ενεργοποίησης), η απορρόφηση και εκπομπή του από την επιφάνεια του δισκίου, ο μέγιστος αριθμός σωματιδίων που μπορεί να βρίσκονται παγιδευμένα στην επιφάνεια, οι ενέργειες σύζευξης του με άλλα σωματίδια, τα ηλεκτρονικά επίπεδα κ.λ.π.

Τύποι ατελειών

Το Sentaurus_KMC δύναται να προσομοιώσει τους παρακάτω τύπους ατελειών:

| Τύπος ατέλειας | Περιγραφή |
|--|--|
| Αμορφοποιημένη περιοχή (Amorphous) | Αμορφοποιημένη περιοχή μέσα στο πυρίτιο. Μόνο I και V σωματίδια επιτρέπονται. |
| Αμορφοποιημένος θύλακας (AmorphousPocket) | Συσσωμάτωμα Is και Vs. Μόνο I και V σωματίδια επιτρέπονται. |
| Συσσωμάτωμα ατελειών (ImpurityCluster) | Συσσωμάτωμα προσμίξεων είτε καθαρά, είτε με ομάδες Is και Vs. |
| Διεπιφάνεια (Interface) | Προσμίξεις παγιδευμένες σε διεπιφάνεια |
| Βρόχος εξάρμωσης (Loop) | Εκτεταμένες ατέλειες ενδοπλεγματικών ατελειών (I). Μόνο I επιτρέπονται. |
| Σημειακή ατέλεια (PointDefect) | Μεμονωμένα σωματίδια ή συζευγμένα σωματίδια (σωματίδια που δεν ανήκουν σε κάποιο συσσωμάτωμα ή εκτεταμένη ατέλεια) |
| 311 (ThreeOneOne) | Εκτεταμένες ατέλειες συσσωματωμένων I με τη μορφή ράβδου |
| Κενό (Void) | Συσσωμάτωμα οπών |

Ενδοπλεγματικές ατέλειες και οπές

Οι ενδοπλεγματικές ατέλειες και οι οπές μπορούν να κινηθούν, πραγματοποιώντας βήματα διάχυσης, κατά έναν άξονα j του τρισδιάστατου χώρου. Η συχνότητα με την οποία πραγματοποιούν το εκάστοτε βήμα δίνεται από τον τύπο:

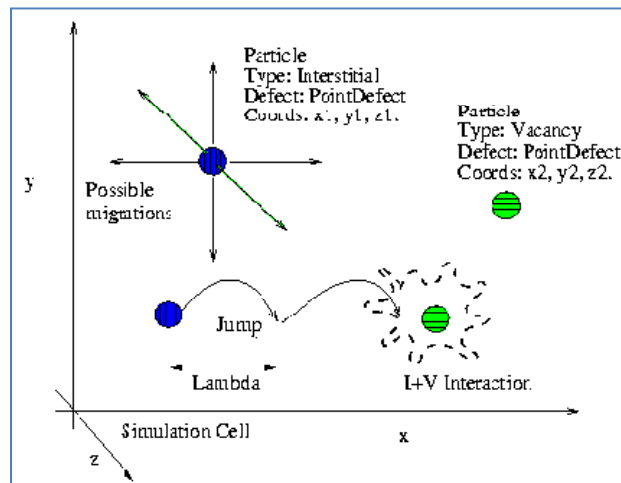
$$v_m^j = \frac{v_{0,m}}{3} \exp \left[-\frac{E_m + \sigma'_j \Delta V_{par} + \sum_{i \neq j} (\sigma'_i \Delta V_{ori}) + \Delta E_m(Ge)}{k_B T} \right], \quad (5.41)$$

όπου $v_{0,m}$ ο συντελεστής και E_m η ενέργεια ενεργοποίησης για την πραγματοποίηση ενός βήματος διάχυσης, σ'_j οι ορθές τάσεις (οι τάσεις για τις οποίες ο πίνακας των τάσεων είναι διαγώνιος), ΔV_{par}

ο όγκος ενεργοποίησης για διάχυση παράλληλη σε μια μηχανική τάση, ΔV_{ort} ο αντίστοιχος όγκος για εγκάρσια διάχυση και $\Delta E_m(Ge)$ η διόρθωση λόγω παρουσίας Γερμανίου. Φυσικά με τη χρήση κατάλληλων εντολών, μπορούμε να παρέμβουμε στις τιμές των και να αλλάξουμε τις τιμές των παραμέτρων κατά προτίμηση ανάλογα με τη προσομοίωση που απαιτείται κάθε φορά.

Εφόσον υπολογίσει την συχνότητα κάθε συμβάντος, η μέθοδος KMC υπολογίζει το κάθε βήμα διάχυσης μετατοπίζοντας τις συντεταγμένες του κάθε σωματιδίου κατά μια δεδομένη απόσταση λ , ίση με την απόσταση από το δεύτερο γειτονικό σωματίδιο του κρυσταλλικού πλέγματος (0.384 nm). Όταν η μετακίνηση τελειώσει, το πρόγραμμα με βάση το νέο επίπεδο Fermi, ανανεώνει την κατάσταση φόρτισης του σωματιδίου. Σε περίπτωση όπου η ατέλεια που μετακινείται συναντήσει ένα άλλο σωματίδιο, άλλη ατέλεια ή κάποια διεπιφάνεια τότε υπολογίζεται η μεταξύ τους αλληλεπίδραση. Γενικά ορίζονται τρεις κύριες αλληλεπιδράσεις:

i) Αλληλεπίδραση με άλλο στοιχείο, π.χ. μια ενδοπλεγματική ατέλεια συναντά ένα άτομο βορίου και σχηματίζεται ένα συσσωμάτωμα BI, ii) Αλληλεπιδράσεις αντίθετου φορτίου (αλληλεπιδράσεις μεταξύ αμοιβαία απωθητικών σωματιδίων δεν επιτρέπονται), iii) Αλληλεπιδράσεις με ατέλειες τύπου {311}, iv) βρόχους εξάρμωσης και v) αλληλεπιδράσεις απλής σύζευξης με όμοιου τύπου ατέλειες, γιατί οι ενέργειες σύζευξης είναι μεγαλύτερες του 0. Σε περίπτωση που η αντίδραση για το σχηματισμό συσσωμάτωματος ατελειών δεν είναι προτιμητέα ενεργειακά τότε το νεοσχηματισθέν συσσωμάτωμα, είτε διαλύεται στα εξ'ων συνετέθη, είτε απορρίπτεται πριν την πραγματοποίηση της αντίδρασης. Για να πραγματοποιήσει το πρόγραμμα κάποια από τις παραπάνω αλληλεπιδράσεις μεταξύ των κινούμενων σωματιδίων, πρέπει το εν λόγω σωματίδιο να υπεισέλθει στην ακτίνα σύλληψης του εταίρου σωματιδίου. Αυτή η ακτίνα ισούται με λ για μεμονωμένα σωματίδια, ενώ για εκτεταμένες ατέλειες είναι το άθροισμα των ακτινών όλων των συστατικών τους.



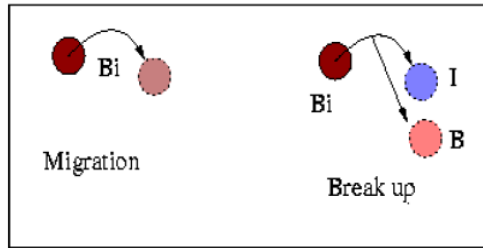
Εικόνα 5.3 Σχηματική αναπαράσταση της αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατελειών και γειτονικών σωματιδίων με βήμα λ σε οποιαδήποτε εκ των τριών ορθογώνιων κατευθύνσεων των αξόνων.

Προσμίξεις

Άτομα προσμίξεων δύναται να έχουμε σε θέσεις αντικατάστασης ή να βρίσκονται σε σύζευξη με μια ενδοπλεγματική θέση ή οπή. Σε θέση αντικατάστασης θεωρούνται ηλεκτρικά ενεργά και πρακτικά ακίνητα. Προσμίξεις τύπου αποδέκτη και δότη (ομάδες III και IV του περιοδικού πίνακα αντίστοιχα) μπορούν να κινούνται μέσα στο πυρίτιο μόνο σε περίπτωση που έχουν συζευχθεί με μια

ενδοπλεγματική ατέλεια ή μια οπή^{13 14 15 16 17}. Άλλου τύπου προσμίξεις, όπως το Φθόριο, μπορούν να κινούνται χωρίς τη βοήθεια αυτών.

Όπως και με τις ατέλειες, έτσι και εδώ, οι προσμίξεις μοντελοποιούνται με βάση τον τύπο σωματιδίου και ατέλειας που τους έχει προσδοθεί. Ο τύπος ατέλειας μιας πρόσμιξης είναι πάντα PointDefect. Όσον αφορά τις προσμίξεις που βρίσκονται σε συζευγμένη κατάσταση, αυτές πραγματοποιούν δύο λειτουργίες: διάχυση (βήμα διάχυσης) και διάσπαση (διάσπαση του ζεύγους πρόσμιξης-ατέλειας). Τα παραπάνω συμβάντα απεικονίζονται στην εικόνα 5.4:



Εικόνα 5.4 Τα ζεύγη προσμίξεων δύνανται είτε να πραγματοποιήσουν ένα βήμα διάχυσης, είτε να διασπαστούν.

Όσον αφορά τη διάχυση, αν και ο ορισμός του φαινομένου παραμένει ίδιος, πρέπει να οριστεί εκ νέου η διαχυτότητα με βάση τη μικροσκοπική φύση του φαινομένου. Από τα προηγούμενα είναι πλέον γνωστό ότι ένα άτομο π.χ. Βορίου μπορεί να διαχυθεί μόνο μέσω σύζευξης του με μια ενδοπλεγματική ατέλεια, με την οποία θα κινηθεί μαζί μέχρι να σπάσει η σύζευξη. Αυτό σημαίνει ότι η μακροσκοπική διάχυση εξαρτάται από τη διαχυτότητα του BI αλλά και από τη συχνότητα διάσπασης της σύζευξης. Ο τύπος της ενεργού διαχυτότητας συνεπώς ορίζεται ως:

$$D^{eff}(B) = D_0^{eff}(B) \exp\left(-\frac{E_{diff}(B)}{k_B T}\right), \quad (5.42)$$

όπου το $D_0^{eff}(B)$ εξαρτάται από τους συντελεστές διάχυσης των BI και I και το συντελεστή διάσπασης του BI. Το $E_{diff}(B)$ εξαρτάται από τη μικροσκοπική ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης του BI ($E_m(B_i)$), την ενέργεια σχηματισμού ενός I ($E_f(I)$), και την ενέργεια σύζευξης του BI ($E_b(B_i)$):

$$E_{diff}(B) = E_m(B_i) + E_f(I) - E_b(B_i) \quad (5.43)$$

Η ολική διαχυτότητα του Βορίου λοιπόν δίνεται ως το άθροισμα των επιμέρους διαχυτοτήτων όλων των παραλλαγών όσον αφορά στη φόρτιση:

$$D(B) = D(B_i^-) \frac{[B_i^-]}{[B^-]} + D(B_i^0) \frac{[B_i^0]}{[B^-]} + D(B_i^+) \frac{[B_i^+]}{[B^-]} \quad (5.44)$$

Συσσώρευση φθοράς και αμορφοποιημένοι θύλακες

Η συσσώρευση φθοράς μοντελοποιείται στη μέθοδο KMC μέσω αμορφοποιημένων θυλάκων (Amorphous Pockets). Οι αμορφοποιημένοι θύλακες είναι συσσωματώματα σημειακών ατελειών που έχουν παραχθεί κατά την ιοντική εμφύτευση. Περιέχουν ζεύγη IV ή Is ή Vs, όμως όχι δυο ή περισσότερα είδη ζευγών ταυτόχρονα. Στην περίπτωση θυλάκων IV, με την αύξηση της θερμοκρασίας η γενικότερη τάση που υπάρχει είναι η επανασύνδεση των ζευγών. Αντίθετα, στους Is

και Vs τυχόν αύξηση θερμοκρασίας οδηγεί στην διάλυση των θυλάκων και εκπομπή ατελειών ή οπών στο σύστημα. Γενικά, οι θύλακες αυξάνουν το μέγεθος τους προσλαμβάνοντας τις νεοεισερχόμενες ατέλειες. Στην περίπτωση θυλάκων που περιέχουν μόνο I ή μόνο V αυτό γίνεται μέχρι ενός κατώφλιου, το οποίο όταν ο θύλακας ξεπεράσει, μετασχηματίζεται σε εκτεταμένη ατέλεια {311} για τα Is και κενό (Void) για τα Vs. Ο ελάχιστος θύλακας δύναται να προσλάβει γειτονικές σημειακές ατέλειες, αν αυτές πλησιάσουν σε απόσταση μικρότερη από την ακτίνα σύλληψης αυτού. Η ακτίνα αυτή ορίζεται ίση με το άθροισμα των ακτινών σύλληψης των συστατικών του. Αν ο θύλακας αποτελείται από ζεύγη I και V τότε δύναται να προσλάβει ατέλειες οποιασδήποτε φορτισμένης κατάστασης. Αν αποτελείται μόνο από I ή μόνο από V, τότε δέχεται μόνο ηλεκτρικά ουδέτερα σωματίδια. Το σχήμα που θα αποκτήσει ο θύλακας είναι γενικά ακανόνιστο, καθώς τα σωματίδια που προσλαμβάνει απλά μένουν στη θέση προσκόλλησής τους.

Η χρησιμότητα των θυλάκων είναι πολύ μεγάλη κατά τη διαδικασία ενεργοποίησης των προσμίξεων. Στη περίπτωση που ο θύλακας αλληλεπιδράσει με προσμίξεις, δεν έχουμε ενσωμάτωση ατόμων πρόσμιξης στο θύλακα. Αντίθετα, δύναται να συμβούν δύο γεγονότα: είτε κάποια σημειακή ατέλεια που ήταν συζευγμένη με τη πρόσμιξη θα αποκολληθεί, οπότε θα βρεθεί σε θέση αντικατάστασης ($B_1 + I_2 V_3 = B + I_3 V_3$), είτε η πρόσμιξη θα πάρει σημειακές ατέλειες από το θύλακα γενόμενη έτσι συσσωμάτωμα προσμίξεων ($B_1 + I_2 V_3 = BI_2 + IV_3$).

Όλες οι παραπάνω διαδικασίες εμπεριέχονται τον κώδικα της μεθόδου KMC και φυσικά παρέχεται η δυνατότητα στο χρήστη να προβεί σε κατάλληλες τροποποιήσεις των παραμέτρων.

Εκτεταμένες ατέλειες

Αναφερθήκαμε σε αυτές προηγουμένως, στην περίπτωση όπου το μέγεθος του αμορφοποιημένου θύλακα ξεπεράσει ένα προκαθορισμένο κατώφλι, οπότε και ο θύλακας μετατρέπεται σε εκτεταμένη ατέλεια τύπου {311} ή κενό (Void). Στην περίπτωση τώρα που και οι εκτεταμένες ατέλειες υπερβούν το αντίστοιχο κατώφλι μεγέθους, μετατρέπονται σε βρόχους εξάρμωσης.

Αν οι θύλακες που περιέχουν μόνο I, ξεπεράσουν το κατώφλι μεγέθους και μετατραπούν σε εκτεταμένη ατέλεια, οι σχηματιζόμενες ατέλειες είναι τύπου {311}. Ο ρόλος αυτών είναι πολύ σημαντικός στην εξέλιξη του φαινομένου της ταχείας μεταβατικής διάχυσης (TED)¹⁸, οπότε η ακριβής προσομοίωσή τους είναι καθοριστικής σημασίας όσον αφορά τη συνολική πρόβλεψη της διάχυσης και συνεπώς στην ορθότητα του τελικού αποτελέσματος. Η ονομασία τους προκύπτει από το γεγονός ότι το σχήμα τους ομοιάζει με αυτό ορθογώνιας λωρίδας που κείται στο επίπεδο {311} κατά μήκος της <110> διεύθυνσης. Η αναλογία μήκους (L) πλάτους (W) για μια {311} δίνεται ως $W=(CL)^{1/2}$ και το πρόγραμμα φροντίζει να τη διατηρεί έτσι προσθέτοντας σε ανάλογες θέσεις τα νεοεισερχόμενα σωματίδια.

Από το σχήμα αυτού του τύπου των ατελειών και μόνο, μπορεί κανείς να προβλέψει ότι αυτού του τύπου τα συσσωμάτωμα δύναται να μεγαλώνουν ή να μικραίνουν μόνο στις άκρες τους, εφόσον αυτές είναι διαθέσιμες. Έτσι όταν ένα ουδέτερο I έλθει σε επαφή με μια ατέλεια {311}, θα προσλαμβάνεται και θα προστίθεται σε μια από τις δύο άκρες αυτής, ή στη διαθέσιμη άκρη σε περίπτωση που η άλλη είναι δεσμευμένη.

Τέλος, στη περίπτωση που το μέγεθος της εκτεταμένης ατελειας {311} συνεχίσει να αυξάνεται και ξεπεράσει ένα συγκεκριμένο κατώφλι, τότε αυτή μετατρέπεται τελικά σε βρόχο

εξάρμωσης. Το κατώφλι μετάβασης (ο απαιτούμενος αριθμός ενδοπλεγματικών ατελειών) δίνεται από μια σχέση τύπου *Arrhenius* και προφανώς πρέπει η ενέργεια σχηματισμού βρόχου να είναι μικρότερη από την αντίστοιχη για περαιτέρω αύξηση της {311}.

Βρόχοι εξάρμωσης

Υπάρχουν δύο είδη βρόχων εξάρμωσης, οι πρισματικοί (FDL) και οι τέλειοι (PDL). Γενικά είναι ατέλειες που κείτονται πάνω στα επίπεδα {111}. Οι μεν FDL, που μας ενδιαφέρουν εδώ καθώς σε αντίθεση με τους PDL εμπεριέχονται στην προσομοίωση, είναι σύνολα ατελειών που συσσωματώνονται σε κυκλική διάταξη και περιβάλλονται από μια γραμμή εξάρμωσης. Η διαδικασία που επιτελεί ο βρόχος αυτός είναι να προσλαμβάνει οποιαδήποτε ηλεκτρικά ουδέτερη ενδοπλεγματική ατέλεια τον πλησιάζει, και στη συνέχεια να εκπέμπει με τη σειρά του τις ενδοπλεγματικές ατέλειες πίσω στο σύστημα με συχνότητα που εξαρτάται από το ελάχιστο μέγεθός του.

Συσσωματώματα οπών και προσμίξεων

Τα συσσωματώματα οπών είναι σφαιροειδείς κενοί χώροι. Η παρατήρησή τους είναι δυνατόν να γίνει κυρίως μέσω μετρήσεων TEM (Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διέλευσης). Γενικά ο σχηματισμός τους γίνεται από αμορφοποιημένους θύλακες που περιέχουν μόνο οπές, όταν αυτοί περάσουν το απαιτούμενο κατώφλι μεγέθους, μια διαδικασία που συζητήθηκε και προηγουμένως, με τη διαφορά ότι αυτά τα συσσωματώματα δεν μένουν άμορφα αλλά επαναπροσδιορίζουν το σχήμα τους, παίρνοντας σφαιροειδή μορφή. Ένα συσσωμάτωμα n οπών πρέπει να καταλαμβάνει όγκο ίσο με τον αντίστοιχο που καταλαμβάνει ίσος αριθμός πλεγματικών θέσεων του πυριτίου. Οι αντιδράσεις που μπορεί να εκτελέσει περιλαμβάνουν την πρόσληψη μιας ηλεκτρικά ουδέτερης οπής, την επανασύνδεση μιας οπής και μιας ενδοπλεγματικής ατέλειας καθώς και το σπάσιμο ενός ζεύγους μιας πρόσμιξης, μέσω πρόσληψης ή επανασύνδεσης του V ή I του εν λόγω ζεύγους αντίστοιχα.

Τα συσσωματώματα προσμίξεων είναι ακανόνιστες συσσωρεύσεις προσμίξεων (A) με ή χωρίς ενδοπλεγματικές ατέλειες και οπές (X) οι οποίες συμβολίζονται ως A_nX_m για n άτομα προσμίξεων και m ενδοπλεγματικές ατέλειες ή οπές. Η μέθοδος KMC τα χρησιμοποιεί για να μοντελοποιήσει το φαινόμενο της απενεργοποίησης προσμίξεων, που λαμβάνει χώρα όταν έχουμε υψηλές συγκεντρώσεις προσμίξεων κατά το οποίο δε παρατηρείται εμφανής διάχυση. Ο όρος ενδοπλεγματικές ατέλειες δεν αφορά μόνο άτομα πυριτίου, αλλά και άτομα οποιουδήποτε άλλου υλικού που βρίσκονται σε ενδοπλεγματικές θέσεις. Το KMC θεωρεί όλες τις δυνατές παραλλαγές των A_nX_m ως όμοιες με την ίδια ενέργεια σχηματισμού. Τα άτομα A πάντα θεωρούνται πως βρίσκονται σε θέση αντικατάστασης, αλλά είναι αδρανοποιημένα.

Ενεργειακά επίπεδα σωματιδίων

Όπως είδαμε και προηγουμένως, στη μέθοδο KMC που χρησιμοποιείται, κάθε παραλλαγή ενός σωματιδίου όσον αφορά στο φορτίο του, αναπαριστάται ως διαφορετικό σωματίδιο για τις ανάγκες της προσομοίωσης. Επίσης, τόσο οι σημειακές ατέλειες (I και V) όσο και τα άτομα προσμίξεων δύνανται να εμφανίζονται σε διάφορες φορτισμένες καταστάσεις στο πυρίτιο εν αντιθέσει με τις πάντα ηλεκτρικά ουδέτερες εκτεταμένες ατέλειες αλλά και τα συσσωματώματα

προσμίξεων. Συνεπώς, για τη κάθε περίπτωση σημειακής ατέλειας ή ζεύγους ατέλειας-πρόσμιξης θα έχουμε ορισμό ξεχωριστού σωματιδίου αλλά και ορισμό ξεχωριστών παραμέτρων, καθώς η κάθε παραλλαγή θα έχει τη δική της χαρακτηριστική ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης, ενέργεια σχηματισμού, ενέργεια ενεργοποίησης αντιδράσεων σύζευξης κ.λ.π.

Τυπικό παράδειγμα αυτών που αναφέρεται στο εγχειρίδια του Sentaurus είναι η αντίδραση:



Η ενέργεια που απαιτείται για να φύγει ένα ηλεκτρόνιο από το I^0 και να προκύψει το $I^+ + e^-$ είναι $e(+,0)$ και μετράται από την ενέργεια της ζώνης σθένους. Από την άλλη πλευρά, η ενέργεια που απαιτείται για σχηματισμό ενός θετικά φορτισμένου I είναι:

$$E_f(I^+) = E_f(I^0) + e_F - e(+,0), \quad (5.46)$$

όπου e_F είναι η ενέργεια Fermi. Ο λόγος της συγκέντρωσης των φορτισμένων ενδοπλεγματιών ατελειών προς την αντίστοιχη συγκέντρωση των ηλεκτρικά ουδέτερων είναι:

$$\frac{[I^0]}{[I^+]} = \exp\left(\frac{e_F - e(+,0)}{k_B T}\right) \quad (5.47)$$

$$\frac{[I^-]}{[I^0]} = \exp\left(\frac{e_F - e(0,-)}{k_B T}\right) \quad (5.48)$$

Οι υπολογισμοί για να βρεθεί το φορτίο γίνονται με βάση τη μέση συγκέντρωση των προσμίξεων σε θέση αντικατάστασης που βρίσκονται στη γειτονιά του εν λόγω κελιού για το οποίο γίνεται ο υπολογισμός. Σε κάθε υπολογιστικό βήμα έχουμε ανανέωση της κατανομής του φορτίου οπότε και αλλαγή των επιπέδων Fermi, καθώς οι ηλεκτρονιακές συγκεντρώσεις σε κάθε κελί αλλάζουν οπότε αλλάζουν και τις στάθμες των επιπέδων Fermi.

Οι κύριες φυσικές-θεωρητικές παραδοχές βάση των οποίων η μέθοδος KMC διενεργεί τους υπολογισμούς είναι οι εξής: η ενέργεια αναφοράς ισούται με την ενέργεια της ζώνης σθένους και οι αντιδράσεις φορτίου είναι κατά πολύ ταχύτερες των αντίστοιχων δομικών αντιδράσεων. Η ενέργεια σχηματισμού των ηλεκτρικά ουδέτερων στοιχείων δεν εξαρτάται από το επίπεδο Fermi, η εξάρτηση των ηλεκτρονιακών επιπέδων με τη θερμοκρασία είναι ανάλογη της αντίστοιχης εξάρτησης του ενεργειακού χάσματος, τα άτομα πρόσμιξης που βρίσκονται σε θέση αντικατάστασης είναι πάντα ιονισμένα, πχ το βόριο θα είναι πάντα B^- .

Κλείνοντας πρέπει να αναφερθεί ένα ακόμα σημαντικό χαρακτηριστικό της μεθόδου KMC. Όπως είδαμε προηγουμένως, λόγω της φύσης των υπολογισμών, υπάρχουν τοπικές διακυμάνσεις σημαντικού μεγέθους στη συγκέντρωση φορτίων μεταξύ ακόμα και γειτονικών κόμβων. Το γεγονός αυτό εισάγει στους υπολογισμούς ένα ηλεκτρικό πεδίο που δε μπορεί να αμεληθεί και το οποίο παίζει σημαντικό ρόλο στη διαδικασία της διάχυσης. Η μέθοδος μοντελοποιεί και αυτό το φαινόμενο προσφέροντας ακόμα περισσότερη ακρίβεια στον υπολογισμό.

5.5 Απενεργοποίηση

Τα κυριότερα πλεονεκτήματα της ανόπτησης με χρήση laser, πηγάζουν από το γεγονός ότι η διαδικασία θέρμανσης πραγματοποιείται σε καθεστώς μη θερμοδυναμικής ισορροπίας. Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνονται αφενός μεν ενεργές συγκεντρώσεις μεγαλύτερες από το κατώφλι στερεάς

διαλυτότητας, και αφετέρου η εξάλειψη φαινομένων που σχετίζονται με την διάχυση, όπως το TED. Δυστυχώς όμως, η μεταβατική φύση της ανόπτησης αυτής αποτελεί την γενεσιουργό αιτία και του μεγαλύτερου μειονεκτήματος της μεθόδου, αυτό της απενεργοποίησης (deactivation) των προσμίξεων. Όπως είναι γνωστό, η θερμική ανόπτηση για την κατασκευή ρηχών επαφών ακολουθεί μια εκτεταμένη σειρά διεργασιών για την κατασκευή της διάταξης CMOS, πολλές εκ των οποίων περιλαμβάνουν και θερμική επεξεργασία σε ένα εύρος θερμοκρασιών. Διάφορες έρευνες^{19 20} έχουν καταδείξει ότι οι κύκλοι αυτοί θερμικής επεξεργασίας (post annealing) προκαλούν την απενεργοποίηση των προσμίξεων, ανεξαρτήτως τύπου (P, B, Sb και As).

Οι μη ενεργές προσμίξεις μπορούν να βρεθούν υπό τη μορφή είτε μικρών συσσωματωμάτων είτε εκτεταμένων συσσωματωμάτων που μπορούν να θεωρηθούν και ως τοπικής φύσης αλλαγές φάσης (precipitates), την ακριβή φύση των οποίων είναι συχνά δύσκολο να διακρίνουμε. Τα συσσωματώματα τυπικά αποτελούνται από ένα μικρό αριθμό προσμίξεων και σημειακών ατελειών (είτε I είτε V). Λόγω του μικρού τους μεγέθους και της μικρής διαταραχής που επιφέρουν στο κρυσταλλικό πλεγμα, είναι γενικά δύσκολος ο εντοπισμός τους μέσω TEM ή φασματοσκοπίας RBS. Τα precipitates από τη μεριά τους είναι μια δευτερογενής φάση του συστήματος πρόσμιξης – πυριτίου. Παρουσιάζουν την δική τους κρυσταλλική δομή και συνήθως είναι πιο μακροσκοπικές δομές με αποτέλεσμα να είναι ευκολότερη η ανίχνευση τους μέσω TEM. Ο σχηματισμός τους απαιτεί την διάχυση μεγάλου πλήθους προσμίξεων σε μια τοποθεσία. Η δομή των μη ενεργών δομών προσμίξεων εξαρτάται ισχυρά από τον πληθυσμό των σημειακών ατελειών μέσα στον όγκο του κρυστάλλου και από τις συνθήκες ανόπτησης. Υπάρχει ένας σχετικά περιορισμένος όγκος εργασιών που αφορούν τη μελέτη των μη ενεργών δομών που σχηματίζονται κατά την διαδικασία αποενεργοποίησης των προσμίξεων σε δείγματα που έχουν υποστεί ανόπτηση με laser. Οι δομές αυτές μπορεί να διαφέρουν σε σχέση με αυτές που βρίσκονται σε δείγματα που έχουν προκύψει από συμβατική ιοντική εμφύτευση και ταχεία θερμική ανόπτηση, εξαιτίας των μεγάλων διαφορών στους πληθυσμούς των σημειακών ατελειών. Στην περίπτωση του Βορίου, σχηματίζονται συσσωματώματα Βορίου και ενδοπλεγματικών ατελειών (Boron Interstitial Clusters, BIC's)^{21 22 23 24}. Το φαινόμενο αυτό καθώς και το TED^{25 26 27} σχετίζεται με τη δημιουργία περίσσειας I (κυρίως κατά την ιοντική εμφύτευση και σε μικρότερο βαθμό στην εμφύτευση με χρήση πλάσματος), και επομένως αναμένεται η επίδραση του να είναι σημαντικά μικρότερη σε δείγματα που έχουν υποστεί ανόπτηση με laser σε καθεστώς τήξης. Στην περίπτωση αυτή ο κύκλος τήξης/επανακρυστάλλωσης πρακτικά εξαλείφει τις ατέλειες. Μάλιστα λαμβανόταν ειδική πρόνοια το βάθος της τηγμένης περιοχής να ήταν τέτοιο ώστε να περιλαμβάνει την ζώνη που περιέχει τις end-of-range (EOR) ατέλειες. Οι ατέλειες αυτές, μπορούν να λειτουργήσουν ως πηγές I κατά την διάρκεια της μετέπειτα θερμικής επεξεργασίας, ενισχύοντας τόσο τα φαινόμενα απενεργοποίησης όσο και την ταχεία μεταβατική διάχυση, υποβαθμίζοντας καθοριστικά τις ιδιότητες της επαφής pn. Στην περίπτωση όμως επανακρυστάλλωσης σε στερεά φάση, ο πληθυσμός των I θα είναι σίγουρα μικρότερος σε σχέση με αυτόν δειγμάτων που έχουν υποστεί RTA, αλλά και μεγαλύτερος από αυτόν δειγμάτων που έχουν υποστεί τήξη. Ο βαθμός στον οποίο θα εξαλειφθούν οι ατέλειες τέτοιου τύπου, θα καθορίσει την συμπεριφορά αποενεργοποίησης κατά τα επόμενα θερμικά βήματα. Τόσο οι Itoh²⁸ όσο και οι Landi^{29 30}, μελέτησαν την κινητική του βορίου στην περίπτωση απουσίας σημειακών ατελειών αναφέροντας ότι φαινόμενα απενεργοποίησης Βορίου σε δείγματα που ανοπτήθηκαν σε καθεστώς τήξης με laser, παρατηρήθηκαν μόνο σε θερμοκρασίες πάνω από 800°C (οι οποίες και προφανώς

είναι ιδιαίτερα υψηλές). Απέδωσαν δε το φαινόμενο στον σχηματισμό precipitates. Οι Landi et al. μοντελοποίησε την χρονική εξάρτηση της απενεργοποίησης από την ανάπτυξη των precipitates, θεωρώντας την συγκέντρωση των τελευταίων σταθερή. Οι Itoh et al. υπολόγισαν την ενέργεια απενεργοποίησης ίση με 3.2 eV, τιμή που είναι κοντά στην ενέργεια ενεργοποίησης της διαδικασίας διάχυσης του Βορίου μέσα στο πυρίτιο, που είναι 3.5 eV. Εξαιτίας της εγγύτητας αυτής των τιμών, υπέθεσαν ότι η διάχυση των ατόμων Βορίου προς τα precipitates μπορούσε να αποτελεί τον ρυθμιστή της διαδικασίας αποενεργοποίησης. Με άλλα λόγια στην περίπτωση που έχουν τα δείγματα έχουν προκύψει από συνδυασμό συμβατικής ιοντικής εμφύτευσης βορίου και ανόπτηση με χρήση laser σε καθεστώς τήξης, αυτά παρουσιάζουν πολύ μεγάλη ανοχή σε φαινόμενα αποενεργοποίησης. Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι αυτό ισχύει μόνο για το Βόριο, καθώς οι υπόλοιπες προσμίξεις καθίστανται μη ενεργές σε πολύ μικρότερες θερμοκρασίες³¹ (με εξαίρεση το Sb αλλά σε χαμηλή συγκέντρωση). Τι συμβαίνει όμως στην περίπτωση της εμφύτευσης με πλάσμα BF₃ και ανόπτησης με laser σε θερμοκρασίες κάτω από το κατώφλι τήξης; Η παρουσία του Φθορίου επηρεάζει τις διεργασίες;

Είναι γενικά γνωστό ότι το φθόριο ελαττώνει σημαντικά την διάχυση με αποτέλεσμα το προφίλ συγκέντρωσης Βορίου να είναι σημαντικά ρηχότερο στην περίπτωση που της εμφύτευσης με πλάσμα BF₃ ή BF₂ σε σχέση με την εμφύτευση μόνο με Βόριο^{32 33 34}. Πολλές από τις εργασίες αυτές έχουν καταδείξει ότι η παρουσία του φθορίου μειώνει την επίδραση του φαινομένου TED και αυξάνει τα επίπεδα ενεργοποίησης^{35 36 37 38 39 40}. Οι D.Lee et al.⁴¹ ανόπτησαν δείγματα εμφυτευμένα με πλάσμα BF₃ με ένα παλμό laser KrF σε καθεστώς μη τήξης και μελέτησαν την εμφάνιση φαινομένων αποενεργοποίησης σε διαφορετικές θερμοκρασίες (400-800°C) . Ανέφεραν σημαντική μείωση των ενεργών συγκέντρωσης (έως και 89%), την οποία απέδωσαν στον σχηματισμό συσσωματωμάτων Βορίου ή Φθορίου. Πάντως, η έντονη εμφάνιση αποενεργοποίησης στην περίπτωση τους μπορεί να οφείλεται και στο γεγονός ότι η ακτινοβόληση έγινε με ένα μόνο παλμό (ενώ γενικά ακτινοβόληση με μεγαλύτερο αριθμό παλμών οδηγεί σε βελτιωμένες ηλεκτρικές ιδιότητες).

5.6 Ανακεφαλαίωση

Η μοντελοποίηση της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων κατά την ανόπτηση του πυριτίου με χρήση laser είναι μια ιδιαίτερα περίπλοκη διαδικασία, η οποία απαιτεί να ληφθούν υπόψη όχι μόνο αυτές καθεαυτές οι προσμίξεις, αλλά και ένας μεγάλος αριθμός ατελειών και συσσωματώσεων. Για την μελέτη αυτή μπορούμε να ακολουθήσουμε είτε συνεχείς είτε KMC προσεγγίσεις, με τη βοήθεια του λογισμικού Sentaurus Process, το οποίο είναι σε θέση να προσομοιώσει τα μεταβατικής φύσεως φαινόμενα που εμπεριέχονται κατά την ανόπτηση με laser.

Βιβλιογραφικές αναφορές 5^{ου} κεφαλαίου

Synopsys Sentaurus Process User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Carlo User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Advanced Calibration User Guide ver. 2008.09

“Silicon VLSI Technology”, J.D. Plummer et al, εκδόσεις Prentice Hall 2000

“Intrinsic point defects, impurities and their diffusion in Silicon”, P. Pichler, εκδόσεις Springer WienNewYork 2004

-
- ¹ M. M. Bunea and S.T. Dunham, in: Semiconductor Process and device performance modeling, edited by S.T. Dunham and J. S. Nelson, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 490, 3-8 (1998)
 - ² M. Jaraiz, P. Castrillo, R. Pinacho et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 610, B11.1.1-B11.1.7
 - ³ M. Hane, T. Ikezawa, K. Takeuchi et al., *Technical Digest of the 2001 IEDM*, Piscataway 843-846 (2001).
 - ⁴ F. C. Frank and D. Tumbull, *Phys. Rev.* 104, 617 (1956).
 - ⁵ D. Mathiot and J.S. Pfister, *J. Appl. Phys.* vol. 66 no 2, 970-972 (1989)
 - ⁶ D. Stauffer, *Phys. Rep.* , vol. 54 1-74 (1979)
 - ⁷ S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 15, no. 1, 1-89 (1943)
 - ⁸ C. Zener, *J. Appl. Phys.*, vol. 22, no 4, 372-375 (1951)
 - ⁹ S. A. Rice, *Phys. Rev.* vol. 112, no 3, 804-811 (1958)
 - ¹⁰ C. P. Flynn, *Phys. Rev.* vol. 171, no. 3, 682-698 (1968)
 - ¹¹ M. Kagaya, T. Soma and M.R. Brozel, in Properties of crystalline Silicon, edited by R. Hull, no. 20, London, 151-152” (1999)
 - ¹² J. R. Manning, Princeton: Van Nostrand (1968)
 - ¹³ R. A. Casali, H. Rücker, and M. Methfessel, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, no. 7, pp. 913–915, 2001.
 - ¹⁴ N. Cowern and C. Rafferty, *MRS Bulletin*, vol. 25, no. 6, pp. 39–44, 2000.
 - ¹⁵ N. E. B. Cowern et al., *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, no. 19, pp. 2434–2437, 1990.
 - ¹⁶ P. M. Fahey, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 61, no. 2, pp. 289–388, 1989.
 - ¹⁷ P. A. Stolk et al., *J. Appl. Phys.*, vol. 81, no. 9, pp. 6031–6050, 1997.
 - ¹⁸ D. J. Eaglesham et al., *Appl. Phys. Lett.*, vol. 65, no. 18, pp. 2305–2307, 1994.
 - ¹⁹ P. M. Rousseau, Ph.D. thesis, Stanford University, 1996; P. M. Rousseau, P. B. Griffin, W. T. Fang, and J. D. Plummer, *J. Appl. Phys.* **84**, 3593 (1998).
 - ²⁰ Y. Takamura, S. H. Jain, P. B. Griffin et al., *J. Appl. Phys.* **92**, 230 (2002).
 - ²¹ T. J. Lenosky, B. Sadigh, S. K. Theiss et al., *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1834 (2000).
 - ²² L. Pelaz, G. H. Gilmer, H.-J. Gossmann et al., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3657 (1999).
 - ²³ E. Schroer, V. Privitera, F. Priolo et al., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3996 (1999).
 - ²⁴ W. Luo and P. Clancy, *J. Appl. Phys.* **89**, 1596 (2001).
 - ²⁵ M. D. Giles, *J. Electrochem. Soc.* **138**, 1160 (1991).
 - ²⁶ D. J. Eaglesham, P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, et al., *Appl. Phys. Lett.* **65**, 2305 (1994).
 - ²⁷ P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, et al., *J. Appl. Phys.* **81**, 6031 (1997).
 - ²⁸ K. Itoh, Y. Sasaki, T. Mitsushi, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, Part 2 **21**, L245 (1982).
 - ²⁹ E. Landi, S. Guimaraes, and S. Solmi, *Appl. Phys. A: Solids Surf.* **44**, 135 (1987).
 - ³⁰ S. Solmi, E. Landi, and F. Baruffaldi, *J. Appl. Phys.* **68**, 3250 (1990).
 - ³¹ Takamura, Griffin, and Plummer, *J. Appl. Phys.*, Vol. 92, No. 1, 235 (2002)
 - ³² R. G. Wilson, *J. Appl. Phys.*, **54**, 6879 (1983).
 - ³³ D. F. Downey, J. W. Chow, E. Ishida et al., *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1263 (1998).
 - ³⁴ Y. J. Park and J. J. Kim, *J. Appl. Phys.*, **85**, 803 (1999).
 - ³⁵ K. Ohyu, T. Itoga, and N. Natasuaki, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Part 1, **29**, 457 (1990).

- ³⁶ D. Fan, J. M. Parks, and R. J. Jaccodine, *Appl. Phys. Lett.*, **5**, 1212 (1991).
- ³⁷ L. Y. Kransnobaev, N. M. Omelyanovskaya, and V. V. Makarov, *J. Appl. Phys.*, **74**, 6020 (1993).
- ³⁸ H. A. W. El Mubarek, J. M. Bonar, et al., *J. Appl. Phys.*, **96**, 4114 (2004).
- ³⁹ K. Ohyu, T. Itoga, and N. Natsuaki, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, **29**, 457 (1990).
- ⁴⁰ L. S. Robertson, P. N. Warnes, M. E. Law et al., in *Proc. of the Int. Conference on Ion Implantation Technology*, p. 171 (2000).
- ⁴¹ D. Lee, S. Baek, S. Heo et al., *Elect. Sol. State Lett.* **9** (1) G19-G21 (2006).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΕΜΦΥΤΕΥΣΗ ΠΡΟΣΜΙΞΕΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ PLASMA DOPING

6.1 Προβλήματα που σχετίζονται με την συμβατική ιοντική εμφύτευση

Για περισσότερες από τρεις δεκαετίες η ιοντική εμφύτευση αποτέλεσε πρακτικά την μοναδική μέθοδο εισαγωγής προσμίξεων για τον σχηματισμό ρηχών επαφών (τύπου p ή n), καθώς μέσω της συστηματικής μείωσης της ενέργειας εμφύτευσης, ήταν ικανή να ανταποκριθεί στις απαιτήσεις που τίθεντο από τους οδικούς χάρτες ITRS, για τον εικάστοτε τεχνολογικό κόμβο. Καθώς όμως μπαίνουμε στην νανοκλίμακα, αυτή η προσέγγιση φαίνεται να μην είναι πλέον αποδοτική, ιδιαίτερα για τα PMOS. Είναι γνωστό, ότι το Βόριο είναι η μοναδική πρόσμιξη p τύπου που χρησιμοποιείται για αυτή την εφαρμογή, καθώς παρουσιάζει αρκετά μεγάλο όριο στερεάς διαλυτότητας μέσα στο Πυρίτιο, για να ανταποκριθεί στα επίπεδα νόθευσης που απαιτούνται. Δυστυχώς το Βόριο παρουσιάζει δυο μεγάλα μειονεκτήματα:

- 1) Το ιόν του Βορίου είναι πολύ ελαφρύ. Για το σκοπό αυτό απαιτούνται εμφυτευτήρες με δέσμη πολύ χαμηλής ενέργειας (Ultra-low energy implantation, ULE/I) για την εισαγωγή ιόντων μέσα στα πρώτα δέκα με είκοσι νανόμετρα του όγκου του δισκίου.
- 2) Τα εμφυτευμένα άτομα Βορίου εμφανίζουν υπό προϋποθέσεις μεταβατικά φαινόμενα ενισχυόμενης διάχυσης (Transient Enhanced Diffusion, TED) κατά την διάρκεια των επακόλουθων θερμικών κύκλων που υφίστανται, τα οποία οδηγούν σε περεταίρω αύξηση του βάθους επαφής x_i .

Έτσι λοιπόν, η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής στράφηκε από νωρίς στην ανάπτυξη συστημάτων ULE/I, τα οποία για ένα διάστημα αποτέλεσαν το μεταβατικό στάδιο από την συμβατική εμφύτευση και μέχρι την έλευση καινοτόμων λύσεων. Παρόλα αυτά, αυτή η τεχνολογία παρουσιάζει μια σειρά προβλημάτων, τα οποία καθιστούν επιτακτική την αντικατάστασή της. Καταρχάς, στην μέθοδο ULE, η πυκνότητα ρεύματος της δέσμης j είναι πολύ χαμηλή εξαιτίας του νόμου Child-Langmuir¹:

$$j = \frac{4\epsilon_0}{9} \left(\frac{2e}{M_i} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{V_{extract}^{\frac{3}{2}}}{x^2} \quad (6.1)$$

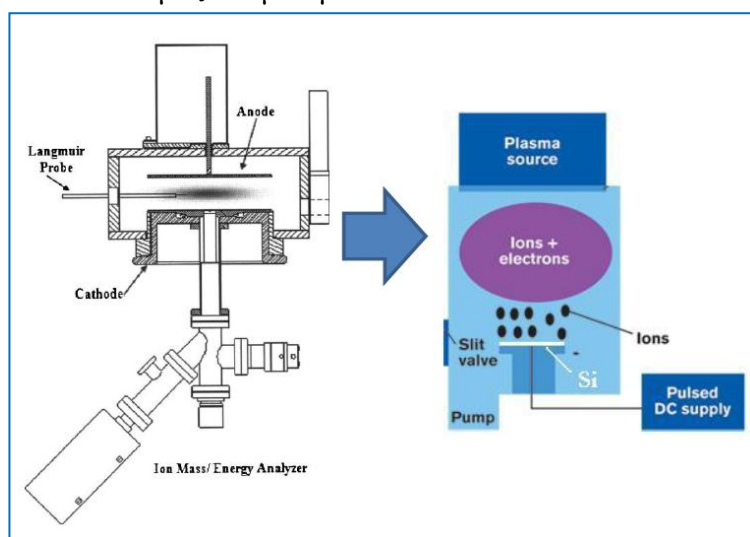
όπου e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου, M_i η μάζα του ιόντος και $V_{extract}$ είναι το δυναμικό εξαγωγής και x η απόσταση πάνω στην οποία εφαρμόζεται στο δυναμικό. Επιπλέον, εξαιτίας φαινομένων που οφείλονται σε φορτία χώρου, ο έλεγχος της μεταφοράς της δέσμης από την πηγή των ιόντων προς τον στόχο γίνεται όλο και πιο δύσκολος. Τα δύο αυτά φαινόμενα, τα οποία είναι σύμφυτα με την ιοντική εμφύτευση, οδηγούν σε σημαντική υποβάθμιση της έντασης^{2 3 4} αλλά και της ομοιομορφίας της εμφύτευσης, ιδιαίτερα όταν η ενέργεια της δέσμης μειώνεται κάτω από 1 keV. Οι όποιες προσπάθειες για την αντιμετώπιση αυτών των φαινομένων σχετίζονται με την ενσωμάτωση στην διάταξη, ηλεκτροστατικών πεδίων τα οποία να επιβραδύνουν τα ιόντα από την αρχική ενέργεια των 2 keV, σε μια τιμή μικρότερη από 1 keV. Δυστυχώς όμως, αυτή η λύση παρουσιάζει ένα σημαντικό μειονέκτημα: την ενεργειακή επιμόλυνση της δέσμης. Αυτή προκαλείται

λόγω των ουδέτερων ατόμων ή μορίων που δημιουργούνται ανάμεσα στον αναλυτή – μαγνήτη και τους ηλεκτροστατικούς φακούς επιβράδυνσης. Η κίνηση των σωματιδίων αυτών δεν επηρεάζεται από τους φακούς, με αποτέλεσμα να εισάγονται μέσα στον κρύσταλλο με την μεγάλη ενέργεια που είχαν κατά την εξαγωγή τους από την πηγή παραγωγής τους. Η επίδραση αυτού του φαινομένου αυξάνει όσο περισσότερο μειώνεται η προσδοκώμενη ενέργεια εισόδου στον κρύσταλλο και τελικά, η ενεργειακή επιμόλυνση οδηγεί σε σημαντικούς περιορισμούς όσον αφορά την τιμή για το ελάχιστο βάθος που επιτυγχάνεται, ανεξάρτητα από την τελική τιμή της ενέργειας όταν χρησιμοποιούνται τεχνικές επιβράδυνσης (decel mode)¹. Επιπλέον, η χρήση δισκίων τα οποία είναι καλυμμένα με ρητίνες, θα οξύνει ακόμα περισσότερο το πρόβλημα της επιμόλυνσης καθώς οι ρητίνες έχουν την τάση να διαχέονται προς τα έξω καθώς αυξάνεται η πίεση στον θάλαμο εναπόθεσης.

6.2 Εμφύτευση προσμίξεων με τη μέθοδο της PLAsma Doping (PLAD)

Ανάμεσα στις διάφορες τεχνικές εμφύτευσης που εμφανίζονται ως πιθανοί αντικαταστάτες της μεθόδου ULE/I και οι οποίες αναλύθηκαν στο πρώτο κεφάλαιο, η μέθοδος της εμφύτευσης μέσω πλάσματος (PLAsma Doping, PLAD) αποτελεί μια από τις πιο υποσχόμενες προτάσεις.

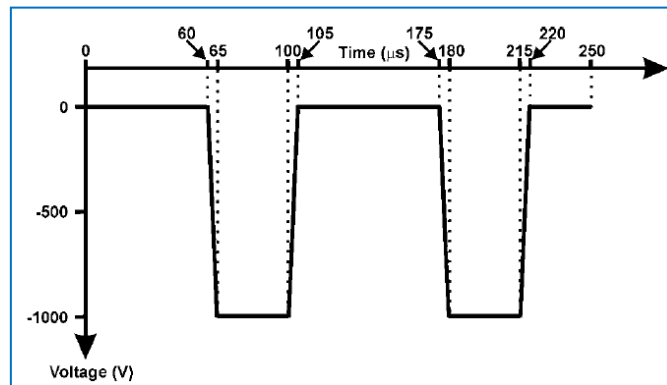
Η μέθοδος αυτή στηρίζεται στην δημιουργία πλάσματος, (κυρίως, με βάση αέριο BF_3), σε έναν όγκο παραπλεύρως του δισκίου πυριτίου. Το δίσκιο Si είναι τοποθετημένο επί της καθόδου και φορτίζεται με έναν παλμό αρνητικού δυναμικού (το οποίο μπορεί να ποικίλει από τα 100 V έως και τα 5 kV). Τα ιόντα επιταχύνονται κατά μήκος της καθόδου με αποτέλεσμα να εμφυτεύονται μέσα στο δίσκιο με ενέργειες που αντανακλούν το δυναμικό του παλμού, το φορτίο του ιόντος και τη μοριακή δομή τους, εφόσον η πίεση κοντά στο κέλυφος (sheath) της καθόδου είναι αρκετά χαμηλή. Σε αυτή τη μέθοδο το πλάσμα “πυροδοτείται” από κάθε παλμό που εφαρμόζεται στο δίσκιο και παύει να είναι διάπυρο όταν ο παλμός σταματήσει⁵.



Εικόνα 6.1 Αριστερά: σχηματικό διάγραμμα διάταξης PLAD, με τα παρελκόμενα του χαρακτηρισμού της διεργασίας, Δεξιά: λεπτομέρεια της περιοχής που γίνεται η εμφύτευση με πλάσμα [Godet 2006]

Στο τέλος κάθε παλμού υπάρχουν διαθέσιμα ηλεκτρόνια τα οποία αναλαμβάνουν να «εξουδετερώσουν» το φορτίο που συσσωρεύεται κατά την διάρκεια της διαδικασίας αυτής. Το πλάτος του παλμού περιορίζεται από την ανάγκη διατήρησης την τάσης φόρτισης κάτω από το

κατώφλι καταστροφής. Μια ακόμα σημαντική παράμετρος είναι η πίεση του αερίου. Η παράμετρος αυτή επηρεάζει τις συγκρούσεις μεταξύ των ιόντων και των ουδέτερων ειδών γεγονός που μπορεί να μεταβάλλει την ενέργεια των ιόντων⁶. Επιπλέον, η ανάγκη για την μείωση της έκθεσης του δοκιμίου στο πλάσμα (έτσι ώστε να ελαττωθούν τυχόν παρασιτικά φαινόμενα όπως χάραξη της επιφάνειας του πυριτίου) απαιτεί πολύ υψηλές συχνότητες και σύντομους χρόνους εμφύτευσης (και επομένως υψηλό ρεύμα στην κάθοδο). Ένας τυπικός χρόνος για την διάρκεια ενός παλμού είναι από 5 έως και 50 μsec ^{7 8}.



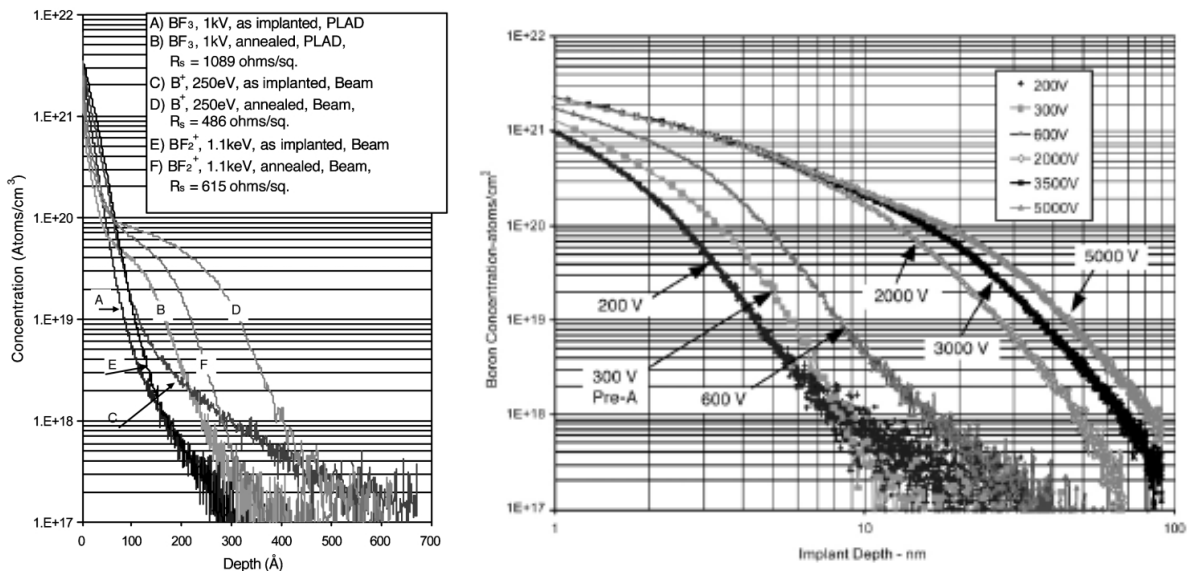
Εικόνα 6.2 Quasi-dc παλμοί που χρησιμοποιούνται για την δημιουργία πλάσματος [Agarwal 2004].

Στην περίπτωση του πλάσματος BF_3 , ιόντα BF_3^+ , BF_2^+ , BF^+ και B^+ εισάγονται ταυτόχρονα στον όγκο του κρυστάλλου σε αναλογία 70:10:10:10. Μελέτες⁹ έχουν καταδείξει ότι η τεχνική αυτή δεν προκαλεί σημαντικά φαινόμενα εγχάραξης ή αύξησης της τραχύτητας στην επιφάνεια του δισκίου πυριτίου ή του photoresist, ενώ επιπλέον τα επίπεδα ενεργειακής επιμόλυνσης είναι ιδιαίτερα χαμηλά. Ένα ακόμα ζήτημα είναι η συνεμφύτευση Φθορίου μαζί με το Βόριο. Σε ορισμένες περιπτώσεις, η ύπαρξη φθορίου μέσα στον όγκο του πυριτίου μπορεί να έχει αρνητικές συνέπειες στις επιδόσεις του τρανζίστορ¹⁰ καθώς και στην αξιοπιστία του οξειδίου της πύλης¹¹. Η εικόνα 6.3.α. παρουσιάζει τα προφίλ συγκέντρωσης F και B, όπως αυτά προέκυψαν από μετρήσεις SIMS ενός δείγματος πυριτίου που έχει υποστεί εμφύτευση με πλάσμα με ονομαστική ενέργεια 600 eV. Στην περίπτωση αυτή ο λόγος F/B είναι 0.8, ενώ μπορεί να ρυθμιστεί ανάμεσα στα 0.8 και 2 ανάλογα με τις παραμέτρους της διαδικασίας (πίεση, τάση, συχνότητα κ.α.). Σε μια διαδικασία σχηματισμού υπερ-ρηχών επαφών, αυτός ο λόγος είναι περίπου στο 1, τιμή που είναι περίπου στο μισό από την ποσότητα F που εισάγεται στην περίπτωση της ιοντικής εμφύτευσης BF_2^+ . Επιπλέον, το Φθόριο που μετά την εμφύτευση είναι κοντά στην επιφάνεια του πυριτίου έχει την τάση να μετακινείται έντονα κατά το επόμενο στάδιο της θερμικής ανόπτησης, με αποτέλεσμα μετά από αυτή, η εναπομένουσα δόση Φθορίου να είναι ελάχιστη.

Τα πλεονεκτήματα της τεχνικής αυτής μπορούν να συνοψιστούν ως εξής¹²:

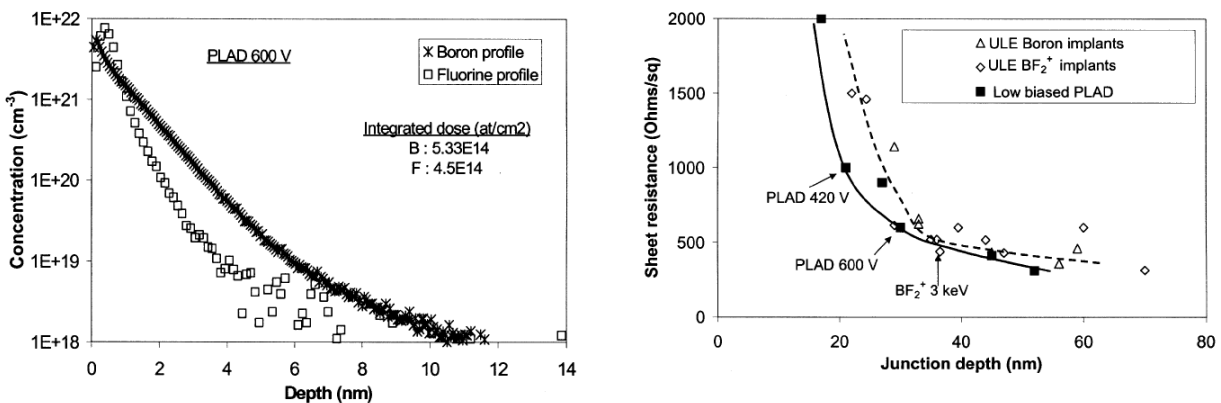
- Χαμηλή ενέργεια (έως και 100 eV) που μπορεί να οδηγήσει σε βάθη εμφύτευσης μικρότερα των 10nm. Το προφίλ κατανομής είναι πολύ ρηχότερο σε σχέση με αυτό που προκύπτει από εμφύτευση με ULE/I είτε Βορίου είτε BF_2 . Επίσης η επίδραση της ανόπτησης οδηγεί σε μικρότερη σχετική μετατόπιση του προφίλ, όπως φαίνεται και από τα διαγράμματα SIMS της εικόνας 6.3 από τους S.B. Felch et al.¹³
- Μεγάλη αποδοτικότητα: μεγάλη ροή ιόντων εξαιτίας της απουσίας φαινομένων μεταφοράς της δέσμης (βλέπε νόμο *Child-Langmuir*) και επιλογής μάζας (*mass selection*). Επιπλέον έχουμε ταυτόχρονη εμφύτευση σε όλη την επιφάνεια του δισκίου.

- Εύκολη ρύθμιση της ενέργειας εμφύτευσης: είναι δυνατή η εμφύτευση με πολλαπλές ενέργειες.
- Βελτιωμένο ρεύμα οδήγησης των προσμίξεων και ελάττωση των μόνιμων ατελειών μετά την ανόπτηση (τόσο με laser όσο και με RTA), πιθανότατα λόγω της χαμηλής ενέργειας εμφύτευσης.
- Ελαχιστοποίηση του παραμένοντος φορτίου.
- Μειωμένο κόστος και συμβατότητα των επιμέρους διατάξεων.



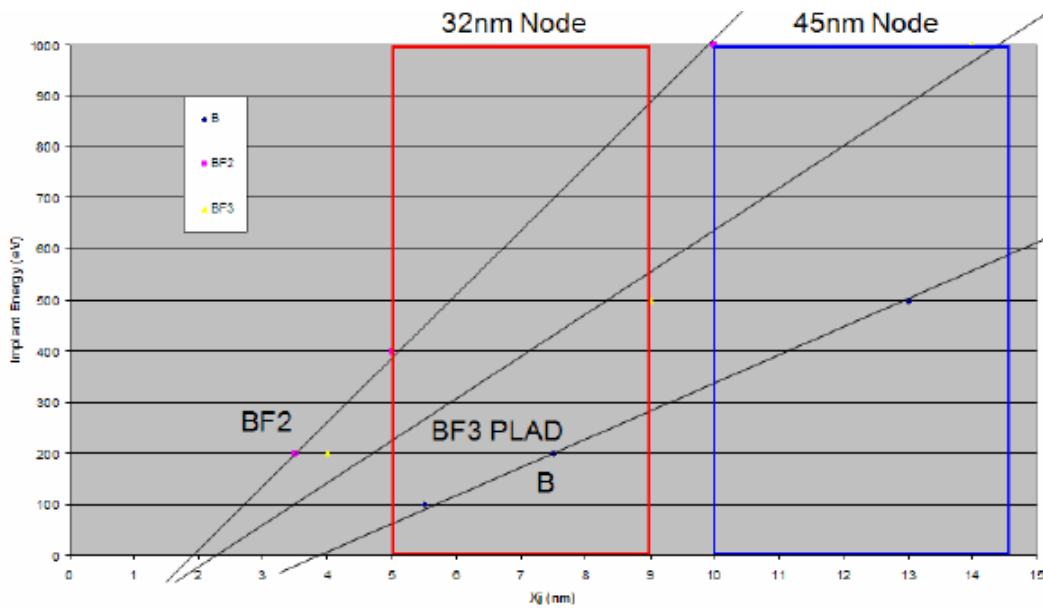
Εικόνα 6.3 α) Συγκριτικό διάγραμμα των προφίλ συγκέντρωσης για 1kV PLAD, 250 eV B⁺ και 1.1 keV BF₂⁺ (τόσο όπως προέκυψαν μετά την εμφύτευση όσο και με μετά από ανόπτηση spike στους 1050⁰C). Παρατηρούμε ότι η PLAD οδηγεί όχι μόνο στο ρηχότερο προφίλ εμφύτευσης αλλά και στην μικρότερη σχετική μετατόπιση μετά την ανόπτηση. Το μόνο μειονέκτημα της PLAD σε σχέση με τις συμβατικές μεθόδους εμφύτευσης, έγκειται στην μικρότερη μέγιστη τιμή συγκέντρωσης που επιτυγχάνεται. β) Προφίλ συγκέντρωσης από SIMS για εμφύτευση Βορίου δόσης 1E15cm⁻² μέσω της PLAD για διαφορετικές τιμές της τάσης του παλμού [πηγή Felch et al.]

Το διάγραμμα 6.4.β απεικονίζει την αναμφισβήτητη υπεροχή της τεχνικής PLAD σε σχέση με την ULE/I (είτε στην περίπτωση εμφύτευσης Βορίου ή μορίου BF₂), τόσο από άποψη του βάθους επαφής όσο και της επιφανειακής αντίστασης που επιτυγχάνονται.



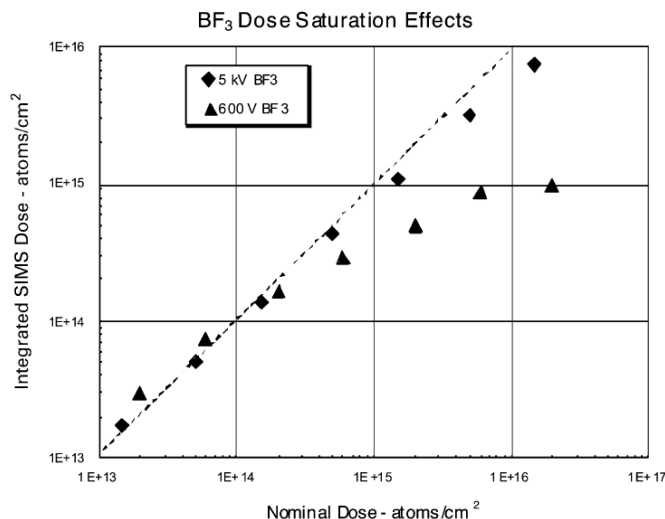
Εικόνα 6.4 α) Προφίλ συγκεντρώσεων F και B από μετρήσεις SIMS για ένα δείγμα που έχει υποστεί εμφύτευση με πλάσμα στα 600eV, β) Επιφανειακή αντίσταση με το βάθος επαφής, p⁺/n επαφών που κατασκευάζονται είτε με την ULE/I, είτε με την PLAD [Lenoble]

Η εικόνα 6.5¹⁴ παρουσιάζει τις ενέργειες εμφύτευσης για την επίτευξη δεδομένου βάθους επαφής, για τρεις διαφορετικούς τύπους εμφύτευσης (Βόριο ή BF₂ μέσω ULE/I και BF₃ μέσω PLAD). Σημειώνεται ότι το βάθος επαφής στην συγκεκριμένη εικόνα λαμβάνεται για συγκέντρωση στα 5E18 cm⁻³ και όχι στα 1E18 cm⁻³. Παρατηρούμε ότι για την κάλυψη των απαιτήσεων του τεχνολογικού κόμβου των 32 nm, η ονομαστική ενέργεια εμφύτευσης της μεθόδου PLAD πρέπει να βρίσκεται στο εύρος 200 με 550 eV.



Εικόνα 6.5 Ενέργειες εμφύτευσης για την επίτευξη δεδομένου βάθους επαφής, για τρεις διαφορετικούς τύπους εμφύτευσης (Βόριο ή BF₂ μέσω ULE/I και BF₃ μέσω PLAD). Σημειώνεται ότι το βάθος επαφής στην συγκεκριμένη εικόνα λαμβάνεται για συγκέντρωση στα 5E18 cm⁻³ [Borland]

Παρά τα αδιαμφισβήτητα πλεονεκτήματα της μεθόδου, υπάρχουν μια σειρά από προβλήματα τα οποία εμποδίζουν μέχρι στιγμής την εισαγωγή της σε ευρεία παραγωγή. Τα πιο σημαντικά έχουν να κάνουν με την αδυναμία προσδιορισμού εκ των προτέρων της πραγματικής δόσης που εμφυτεύεται μέσα στον όγκο του υλικού, καθώς η τελευταία είναι σημαντικά μικρότερη από την ονομαστική δόση. Η απόκλιση ανάμεσα στην ονομαστική και την εμφυτευθείσα δόση αυξάνεται όσο αυξάνει η ονομαστική δόση, όπως φαίνεται καθαρά και στο διάγραμμα 6.6. Έτσι λοιπόν είναι αναγκαία η βαθμονόμηση της μεθόδου με τη βοήθεια μετρήσεων SIMS, έτσι ώστε να γίνει γνωστή η αντιστοιχία ανάμεσα στην ονομαστική και την πραγματικά εμφυτευθείσα δόση. Επίσης, σε αντίθεση με την μονοενεργειακή ιοντική εμφύτευση, η εμφύτευση με πλάσμα εισάγει μια μεγάλη ποικιλία ειδών μέσα στον όγκο του πυριτίου, τα οποία παρουσιάζουν ένα ευρύ ενεργειακό φάσμα. Για το λόγο αυτό, η πρόβλεψη της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων που εμφυτεύτηκαν δεν είναι δυνατή χρησιμοποιώντας την προκαθορισμένη μεθοδολογία προσομοίωσης. Ένα ακόμα ζήτημα είναι η συνεμφύτευση Φθορίου, του οποίου η δράση έχει τόσο θετικές (μικρότερο αρχικό βάθος επαφής^{15 16 17}, μείωση του φαινομένου TED που οδηγεί σε μεγάλη διάχυση του Βορίου^{18 19 20 21 22}), όσο και αρνητικές συνέπειες (εμφάνιση εντονότερης απενεργοποίησης²³, ενώ είναι αρκετά δραστική με αποτέλεσμα την υποβάθμιση των ιδιοτήτων του οξειδίου της πύλης²⁴) στην λειτουργία του τρανζίστορ.



Εικόνα 6.6 Ονομαστική δόση για εμφύτευση με χρήση BF_3 PLAD με την πραγματικά εμφυτευθείσα (όπως αυτή προκύπτει από ολοκλήρωση του προφίλ συγκέντρωσης από το SIMS) για δυο διαφορετικές τιμές της τάσης του παλμού (5 kV και 600 V). Η απόκλιση ανάμεσα στην ονομαστική και την πραγματική δόση αυξάνει όσο μεγαλώνουν οι ονομαστική δόση και η τάση του παλμού.

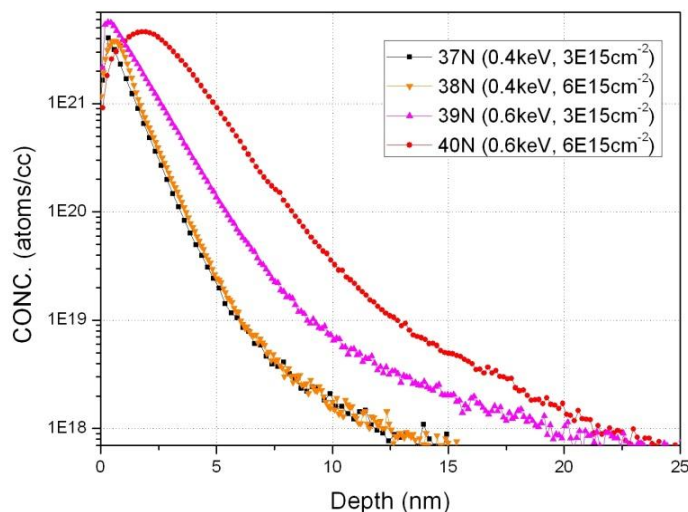
6.3 Χαρακτηρισμός των δειγμάτων

Τα δείγματα που είχαμε στην διάθεση μας κατασκευάστηκαν στην ST Microelectronics, France από τον Δρ. Hallimaoui. Οι ονομαστικές ενέργειες ήταν 400 και 600eV, ενώ οι ηλεκτρικοί παλμοί που πυροδοτούσαν το πλάσμα είχαν διάρκεια 50μs και συχνότητα 2.5 kHz (12.5% κύκλος εργασίας). Η πίεση του αερίου BF_3 ποίκιλε από τα 70 έως τα 250mTorr. Στον πίνακα 6.I συνοψίζονται οι τιμές ονομαστικής ενέργειας και δόσης για τις τέσσερες διαφορετικές συνθήκες εμφύτευσης μαζί με την αντίστοιχη κωδική ονομασία του δείγματος, την οποία και θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια. Επιπλέον δίνονται οι τιμές βάθους συγκέντρωσης (για συγκέντρωση $1\text{E}18\text{cm}^{-3}$) καθώς και η πραγματική δόση που εμφυτεύτηκε όπως αυτή προκύπτει από ολοκλήρωση της κατανομής συγκέντρωσης).

Πίνακας 6.I Κυριότερα χαρακτηριστικά ανά δείγμα

| Ονομασία δείγματος | Q_{nominal} (cm^{-2}) | Ενέργεια εμφύτευσης (keV) | Q_{actual} (cm^{-2}) | Βάθος επαφής (nm) |
|--------------------|---|---------------------------|--|-------------------|
| 37N | 3E15 | 0.4 | 5.26E14 | 12 |
| 38N | 6E15 | 0.4 | 5.41E14 | 13 |
| 39N | 3E15 | 0.6 | 8.56E14 | 18 |
| 40N | 6E15 | 0.6 | 1.65E15 | 22 |

Το πρώτο βήμα ήταν η διενέργεια μετρήσεων SIMS, έτσι ώστε να υπολογιστούν η πραγματική δόση που εμφυτεύτηκε και το προφίλ της συγκέντρωσης των προσμίξεων. Οι πρώτες μετρήσεις έγιναν στο CEMES/CNRS της Τουλούζης από τον Δρ. G. Bennassayag, χρησιμοποιώντας μια κάμερα IMS Cameca και δέσμη O_2 στα 1.1keV. Με στόχο την διασταύρωση των αποτελεσμάτων στάλθηκαν και άλλα δυο δείγματα στο Evans Analytical Group των Η.Π.Α., τα οποία χρησιμοποίησαν παρόμοιο εξοπλισμό. Στην εικόνα 6.7 παρουσιάζονται οι κατανομές συγκέντρωσης για κάθε μια από τις συνθήκες εμφύτευσης.

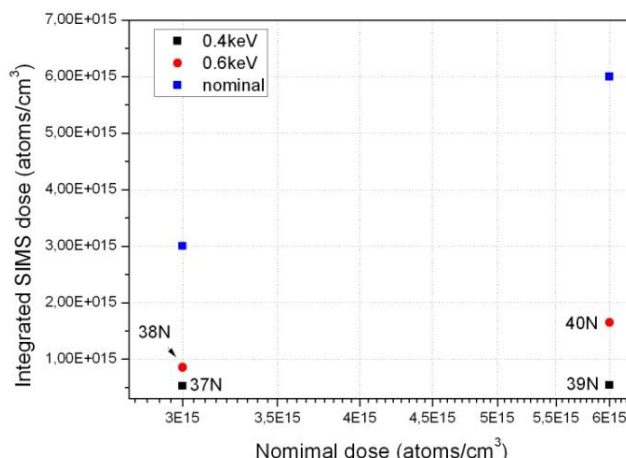


Εικόνα 6.7 Κατανομές συγκέντρωσης Βορίου για τις τέσσερες διαφορετικές συνθήκες εμφύτευσης (as implanted) όπως προέκυψαν από μετρήσεις SIMS. Αυξανόμενη της ενέργειας εμφύτευσης αυξάνεται και το βάθος της επαφής (το οποίο υπολογίζεται στην συγκέντρωση $1\text{E}18\text{ cm}^{-3}$).

Από το συγκεντρωτικό διάγραμμα της εικόνας 6.7 παρατηρείται καταρχάς ότι αυξανόμενη της ονομαστικής ενέργειας εμφύτευσης, οι προσμίξεις κατανέμονται σε μεγαλύτερο βάθος. Ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι τα δείγματα 40N παρουσιάζουν αισθητά βαθύτερο προφίλ σε σχέση με τα δείγματα 39N παρά το ότι η ενέργεια τους είναι ίδια (0.6 keV). Αντιθέτως τα δείγματα 37N και 38N που εμφυτεύθηκαν με την ίδια ενέργεια (0.4 keV) παρουσιάζουν πανομοιότυπο βάθος επαφής.

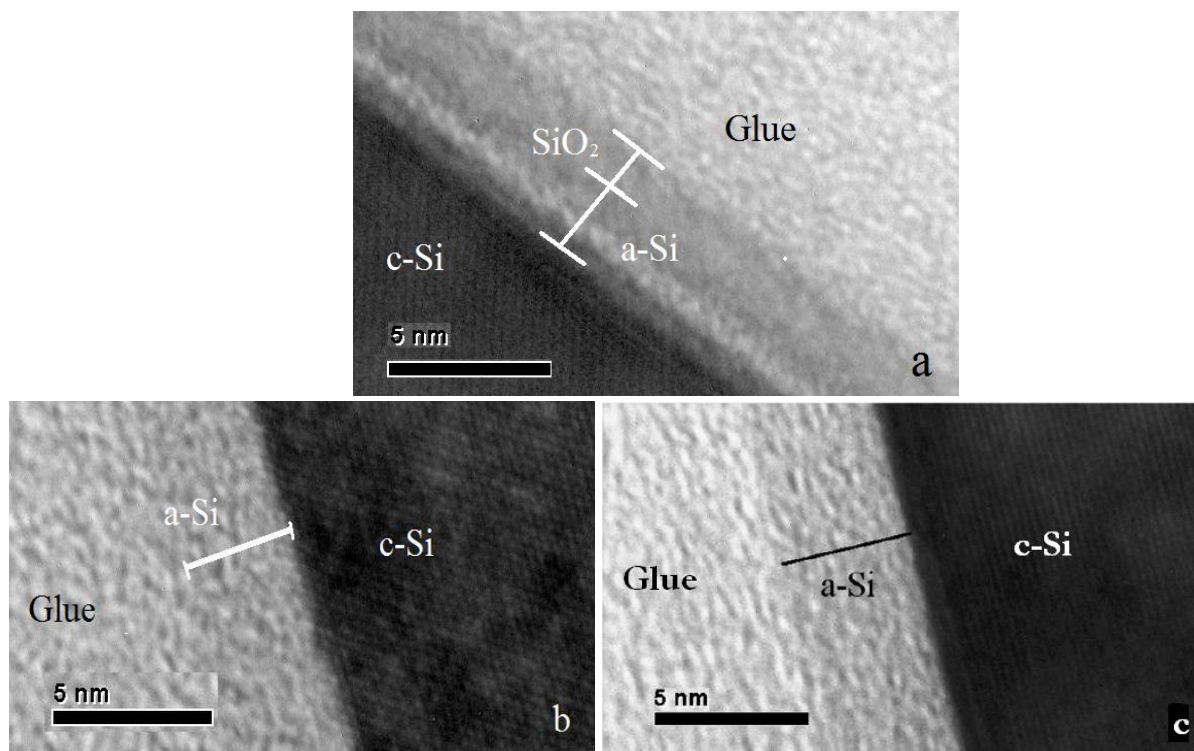
Η ολοκλήρωση των προφίλ συγκέντρωσης κατέδειξε την μεγάλη απόκλιση ανάμεσα στην ονομαστική και την πραγματική δόση που εμφυτεύτηκαν, και οι οποίες παρουσιάζονται στον διάγραμμα της εικόνας 6.8. Η δόση που πραγματικά εμφυτεύεται μέσα στον όγκο του κρυστάλλου προκύπτει από ολοκλήρωση του προφίλ συγκέντρωσης από τη μέτρηση SIMS. Παρατηρούμε ότι σε συμφωνία με την βιβλιογραφία^v η απόκλιση αυτή αυξάνει, όσο μειώνεται η ονομαστική ενέργεια και αυξάνεται η δόση.

Τέλος, η ολοκλήρωση της κατανομής προσμίξεων για τα δείγματα 37N και 38N κατέδειξε ότι η πραγματικά εμφυτευθείσα δόση είναι περίπου ίδια και στις δυο περιπτώσεις, παρά το γεγονός ότι το δεύτερο έχει διπλάσια ονομαστική δόση σε σχέση με το πρώτο. Η μικρή ποσότητα δόσης που εμφυτεύτηκε πραγματικά στα δείγματα 38N οδηγεί και σε φτωχά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά μετά την ανόπτηση, όπως θα δειχτεί και στο κεφάλαιο 9, και πιθανότατα πρέπει να αποδοθεί σε αστοχία της διαδικασίας εμφύτευσης στο συγκεκριμένο δείγμα. Σημειώνεται ότι ο λόγος της πραγματικής προς την ονομαστική δόση δεν ξεπερνά το 10%, ενώ ο λόγος αυτός έχει τιμές 17%, 28.5% και 27.5% για τα δείγματα 37N, 39N και 40N αντίστοιχα.



Εικόνα 6.8 Ονομαστική δόση για εμφύτευση με χρήση BF_3 PLAD (μπλε τετράγωνα) με την πραγματικά εμφυτευθείσα (όπως αυτή προκύπτει από ολοκλήρωση του προφίλ συγκέντρωσης από το SIMS) για δυο διαφορετικές τιμές της τάσης του παλμού (μαύρο 400 και κόκκινο 600V). Η απόκλιση ανάμεσα στην ονομαστική και την πραγματική δόση αυξάνει όσο μεγαλώνει η ονομαστική δόση και όσο μειώνεται η τάση του παλμού.

Περνάμε κατόπιν στον δομικό χαρακτηρισμό των δειγμάτων ο οποίος πραγματοποιήθηκε μέσω HRTEM. Οι εικόνες που λαμβάνονται μέσω του HRTEM, είναι ιδιαίτερα διαφωτιστικές για την επίδραση που είχε η εμφύτευση στον όγκο του πυριτίου, καθώς μας δίνει μια εικόνα για το βάθος της αμορφοποιημένης περιοχής που προκαλείται από την πρόσπτωση των ιόντων στο κρυσταλλικό πλέγμα. Επιπλέον, μας δίνει πληροφορία για την ύπαρξη ατελειών ή άλλου είδους παραμορφώσεων μέσα στον όγκο του πυριτίου. Οι εικόνες αυτές έχουν προκύψει από τομή του δείγματος και επομένως μας δίνουν πληροφορία για την εγκάρσια μορφολογία του δείγματος σε αντίθεση με την μικροσκοπία ατομικής δύναμης, η οποία μας δίνει την επιφανειακή μορφολογία του δείγματος. Παρουσιάζουμε εικόνες TEM από τα δείγματα 37N, 39N και 40N σε μεγέθυνση 800k \times , όπως αυτές ελήφθησαν από τον Δρ. Κώστα Γιαννακόπουλο, του ΙΕΠ, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Αφού η κρυσταλλογραφική διεύθυνση του δισκίου είναι η (001), το πρότυπο περίθλασης (diffraction pattern) του TEM θα δώσει το (110) πεδίο, εφόσον το δοκίμιο δεν είναι υπό κλίση. Το πιο ανοιχτόχρωμο τμήμα είναι η ειδική κόλλα που χρησιμοποιείται, ενώ οι σκουρόχρωμες περιοχές αποτελούν το κρυσταλλικό πυρίτιο. Οι ευθείες που φαίνονται είναι τα διάφορα κρυσταλλικά επίπεδα. Η λωρίδα που βρίσκεται ανάμεσα στις προαναφερθείσες περιοχές αντιπροσωπεύει την αμορφοποιημένη ζώνη. Η εικόνα 6.9a παρουσιάζει μια μικρογραφία του δείγματος 37N με το εύρος της έχει υπολογιστεί στα 3.5 nm, εκ των οποίων 1.5 nm είναι το οξείδιο (όπως έχει φανεί από τις μετρήσεις SIMS), και επομένως η πραγματική περιοχή που έχει υποστεί αμορφοποίηση λόγω της εμφύτευσης εκτείνεται στα 2 nm. Η εικόνα 6.9b απεικονίζει το δείγμα 39N με τα πάχη να είναι 1nm και 3nm για το οξείδιο και το a-Si αντίστοιχα. Τα αντίστοιχα μεγέθη για το δείγμα 40N που φαίνεται στην εικόνα 6.9c, είναι 4.5 nm, 1.5 nm και 3.0 nm. Παρατηρούμε ότι όπως αναμενόταν, η μεγαλύτερη ενέργεια εμφύτευσης συνεπάγεται και μεγαλύτερο εύρος της ζώνης αμορφοποίησης. Επίσης, δεν παρατηρούνται άλλες ατέλειες σε βάθος μεγαλύτερο από αυτό της διεπιφάνειας άμορφου / κρυσταλλικού πυριτίου, χωρίς αυτό όμως να αποκλείει την ύπαρξη μεμονωμένων ατελειών με μέγεθος μικρότερο από την διακριτική ικανότητα του HRTEM.



Εικόνα 6.9 Μικρογραφίες από HRTEM από δείγματα που προέκυψαν από τρεις διαφορετικές συνθήκες εμφύτευσης a) 37N (400eV, $3E15cm^{-2}$), b) 39N (600eV, $3E15cm^{-2}$), c) 37N (600eV, $6E15cm^{-2}$). Διακρίνονται τρεις διαφορετικές περιοχές: με το πιο σκούρο χρώμα το κρυσταλλικό πυρίτιο, με γκρι το άμορφο πυρίτιο και με ανοιχτό γκρι, η ειδική κόλλα που χρησιμοποιείται για την στήριξη του δείγματος στην βάση του TEM.

6.4 Προσομοίωση με της εμφύτευσης Βορίου με χρήση της μεθόδου PLAD

Όπως προαναφέρθηκε, ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα της εμφύτευσης με πλάσμα αποτελεί η αδυναμία προσδιορισμού αφενός μεν της δόσης και αφετέρου του προφίλ της συγκέντρωσης. Οι μετρήσεις SIMS έδειξαν ότι μόνο ένα μικρό ποσοστό της ονομαστικής δόσης εισέρχεται στον όγκο του κρυστάλλου. Μέχρι στιγμής δεν υπάρχει κάποιο υπολογιστικό πακέτο που να προσομοιώνει διαδικασίες εμφύτευσης με πλάσμα και ως εκ τούτου πρέπει να βρούμε έναν έμμεσο τρόπο για να προβλέψουμε την εξέλιξη της εμφύτευσης. Οι Walther et al.²⁵, κατέδειξαν την δυνατότητα έμμεσης πρόβλεψης του προφίλ συγκέντρωσης εφόσον είναι γνωστή η δόση. Καθώς η εμφύτευση δεν είναι ούτε μονοατομική αλλά ούτε και μονοενεργειακή, χρησιμοποίησαν ένα φασματογράφο μάζας με την βοήθεια του οποίου μπόρεσαν να κατηγοριοποιήσουν τα ιόντα που εισέρχονται στο πυρίτιο ανάλογα με το είδος και την ενέργεια τους, για δεδομένη ονομαστική δόση και ενέργεια εμφύτευσης. Η βασική ιδέα είναι η αντιστοίχησή τους σε διακριτά ενεργειακά κανάλια Βορίου. Δημιουργείται δηλαδή, μια διακριτή κατανομή δόσεων ιόντων Βορίου που κάθε μια έχει την δική της ενέργεια εμφύτευσης. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να προσομοιώσουμε την εμφύτευση με πλάσμα με μια σειρά διαδοχικών εμφυτεύσεων Βορίου υπό διαφορετική ενέργεια. Απαραίτητη προϋπόθεση είναι η υπέρθεση να είναι παρόμοια με το πραγματικό προφίλ συγκέντρωσης, όπως αυτό εξάγεται από μετρήσεις SIMS.

Οι Walther et al, προέβησαν σε εμφύτευση με πλάσμα με ονομαστική ενέργεια 0.5 keV. Τα κανονικοποιημένα ποσοστά δόσης και τα αντίστοιχα κανάλια ενέργειας δίνονται από τον πίνακα 6.Π.

Πίνακας 6.Π (500 eV)

| Ενέργεια (eV) | Ποσοστό δόσης % |
|------------------|--------------------|
| 450 | 2.6 |
| 350 | 1.95 |
| 250 | 1.87 |
| 150 | 10.1 |
| 100 | 40.66 |
| 80 | 19.29 |
| 50 | 16.62 |
| 20 | 6.83 |

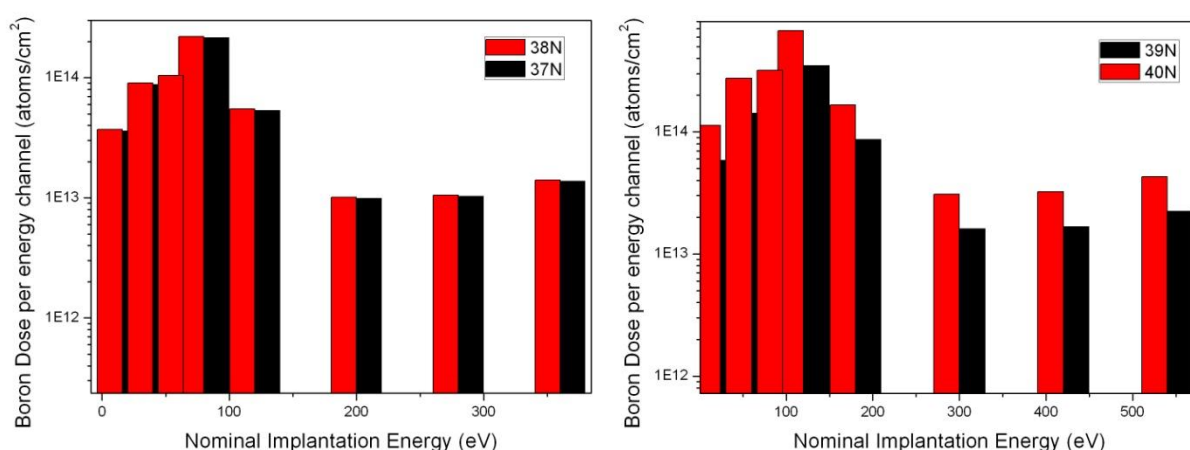
Με βάση τις ονομαστικές ενέργειες εμφύτευσης (0.4 και 0.6 keV) και τις τιμές πραγματικής δόσης, όπως αυτές προσδιορίστηκαν μέσω SIMS, προβήκαμε στον υπολογισμό των αντίστοιχων ενεργειών και δόσεων για όλα τα δείγματα, κάνοντας τις κατάλληλες αναγωγές με βάση τα 500 eV. Τα αποτελέσματα, με βάση τα οποία σχηματίζουμε και την ακολουθία των βημάτων εμφύτευσης δίνονται στους πίνακες 6.ΠΙ α έως και δ.

Πίνακας 6.ΠΙ

| α. 37N (400eV) | | β. 38N (400eV) | |
|------------------|----------------------------------|------------------|----------------------------------|
| Ενέργεια (eV) | Δόση (1E14 cm ⁻²) | Ενέργεια (eV) | Δόση (1E14 cm ⁻²) |
| 360 | 0.137 | 360 | 0.147 |
| 280 | 0.103 | 280 | 0.105 |
| 200 | 0.098 | 200 | 0.101 |
| 120 | 0.531 | 120 | 0.546 |
| 80 | 2.138 | 80 | 2.197 |
| 64 | 1.014 | 64 | 1.043 |
| 40 | 0.874 | 40 | 0.899 |
| 16 | 0.359 | 16 | 0.370 |

| γ. 39N (600 eV) | | δ. 40N (600 eV) | |
|------------------|----------------------------------|------------------|----------------------------------|
| Ενέργεια (eV) | Δόση (1E14 cm ⁻²) | Ενέργεια (eV) | Δόση (1E14 cm ⁻²) |
| 540 | 0.223 | 540 | 0.429 |
| 420 | 0.167 | 420 | 0.321 |
| 300 | 0.160 | 300 | 0.309 |
| 180 | 0.864 | 180 | 1.666 |
| 120 | 3.498 | 120 | 6.709 |
| 96 | 1.651 | 96 | 3.183 |
| 60 | 1.390 | 60 | 2.742 |
| 24 | 0.584 | 24 | 1.270 |

Στα διαγράμματα α και β της εικόνας 6.10 παρουσιάζονται οι κατανομές δόσης ανά κανάλι ενέργειας για κάθε συνθήκη. Έχει γίνει διαχωρισμός ανάλογα με την ονομαστική ενέργεια κάθε συνθήκης, οπότε στο α παρουσιάζονται οι κατανομές των δειγμάτων με ονομαστική ενέργεια 400 eV, ενώ στο β για 600 eV. Από τα διαγράμματα αυτά προκύπτει ότι για τα δείγματα με την ονομαστική ενέργεια εμφύτευσης 400 eV, το συντριπτικό ποσοστό των προσμίξεων κατανέμεται μέχρι τα 120eV, ενώ για τα δείγματα με ενέργεια 600 eV, η κατανομή γίνεται κυρίως μέχρι τα 180 eV. Οι κατανομές αυτές χρησιμοποιήθηκαν για τον σχηματισμό των ακολουθιών εμφύτευσης που εφαρμόσαμε κατά την προσομοίωση της διαδικασίας, είτε αυτή έγινε με χρήση αναλυτικών, είτε KMC μεθόδων.



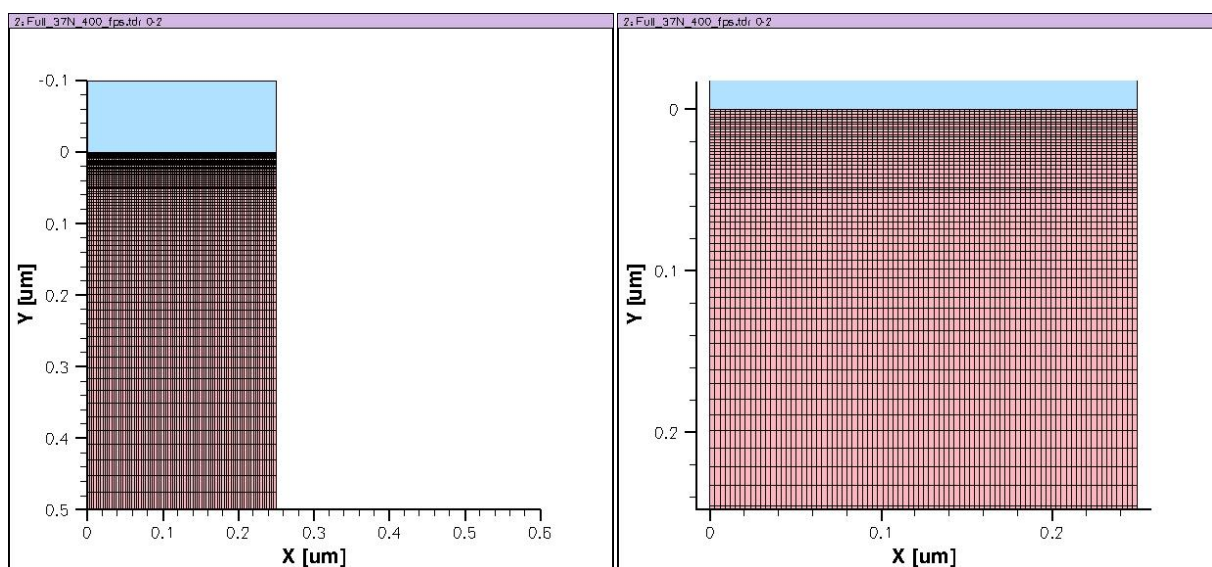
Εικόνα 6.10 Κατανομές δόσης ανά κανάλι ενέργειας για κάθε μια από τις συνθήκες εμφύτευσης, όπως αυτές προέκυψαν από την αναγωγή των δεδομένων φασματοσκοπίας μάζας από τους Walther et al., για τις δικές μας τιμές ενέργειας και δόσης που πραγματικά εμφυτεύτηκαν. Οι κατανομές ομαδοποιήθηκαν ανάλογα με την ονομαστική τους ενέργεια (α, 400 eV και β, 600 eV).

Για την μελέτη της εμφύτευσης ακολουθήσαμε τόσο συνεχείς όσο και Monte Carlo προσεγγίσεις, με βάση πάντοτε την μεθοδολογία των Walther et al., εκτελώντας μια ακολουθία οκτώ εμφυτεύσεων με δόσεις και ενέργειες που αντανακλούν τα δεδομένα του πίνακα 6.III για κάθε ένα από τα τέσσερα δείγματα. Θα ξεκινήσουμε πρώτα από την περιγραφή των υπολογισμών με χρήση συνεχών μεθόδων και στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα από την ανάλυση με KMC, η οποία όπως και θα δούμε, έδωσε τα πιο αξιόπιστα αποτελέσματα.

6.5 Αποτελέσματα της προσομοίωσης εμφύτευσης με βάση την συνεχή προσέγγιση

Ξεκινήσαμε την προσπάθεια μας να προσομοιώσουμε τις διαδικασίες εμφύτευσης χρησιμοποιώντας αναλυτικά μοντέλα. Επικεντρωθήκαμε στην μελέτη της επίδρασης δυο βασικών παραγόντων: της στρατηγικής κατασκευής πλέγματος και των πινάκων εμφύτευσης από τους οποίους αντλεί δεδομένα το λογισμικό για να δημιουργήσει τις τροχιές των ιόντων μέσα στο πλέγμα. Βασικό μας δεδομένο για την εξακρίβωση της ορθότητας των υπολογισμών μας αποτελούν οι μετρήσεις SIMS των δυο δειγμάτων που προαναφέραμε. Ακολουθήσαμε δυο διαφορετικές στρατηγικές για την δημιουργία του πλέγματος του πυριτίου, μια με την χρήση της MGOALS και μια χωρίς. Η στρατηγική MGOALS επιτρέπει τη δυναμική ανασύνθεση του πλέγματος έτσι ώστε να μπορεί να ανταποκριθεί σε διαδικασίες εισάγουν μηχανική τάση (stress) εντός του κρυστάλλου με αποτέλεσμα την παραμόρφωση ή την εισαγωγή επιπλέον πλεγματικών γραμμών στις διεπιφάνειες. Τέτοιες

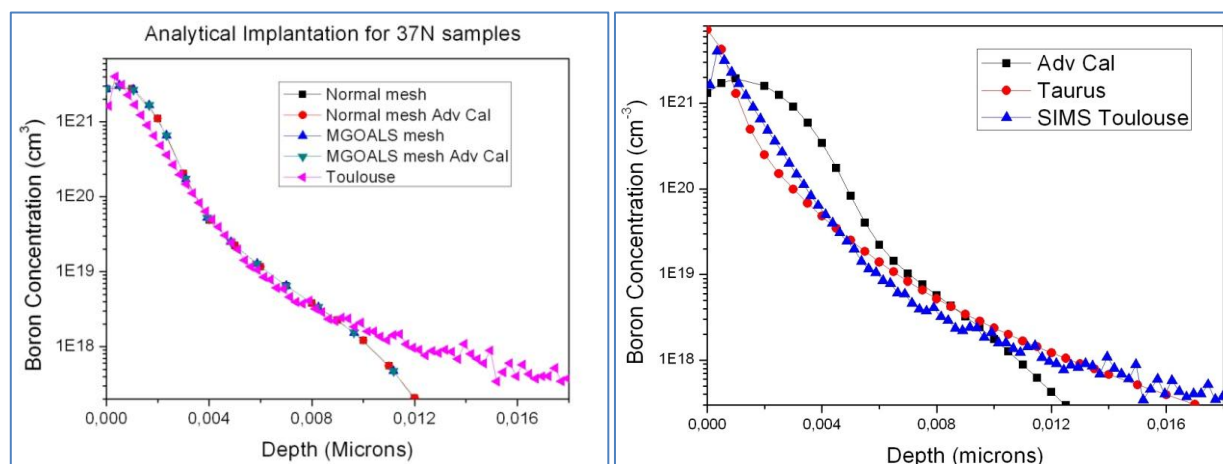
διαδικασίες είναι η οξείδωση και η εναπόθεση υμενίων. Αν και στην παρούσα εργασία δεν θα λάβουμε υπόψιν τέτοιες διαδικασίες, η μελέτη αυτή θα χρησιμέψει σε επόμενα στάδια της προσομοίωσης. Η δεύτερη στρατηγική σχετίζεται με την διαδικασία κατασκευής ενός απλού πλέγματος με μεταβλητή πυκνωση προς το βάθος του δισκίου, το οποίο δεν επιτρέπει την δυναμική ανασύνθεση των πλεγματικών γραμμών. Στις εικόνες 6.11 δίνονται μια γενική και μια μεγεθυμένη εικόνα του μέρους του πλέγματος που βρίσκεται κοντά στην επιφάνεια του δισκιδίου.



Εικόνα 6.11 Σχηματική απεικόνιση του ανώτερου τμήματος του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε σε όλους τους αναλυτικούς αλγορίθμους σε αυτή την εργασία. Συνολικά το βάθος του πλέγματος ήταν 700 μm , από τα οποία απεικονίζονται τα πρώτα α) 0.5 μm και β) τα πρώτα 0.2 μm .

Και για τις δυο διαφορετικές προσεγγίσεις μελετήθηκε η επίδραση της χρήσης των βιβλιοθηκών Advanced Calibration. Το τελευταίο είναι ένα αρχείο το οποίο περιέχει μια σειρά παραμέτρων που έχουν προκύψει μετά από εκτεταμένη βαθμονόμηση μέσω πειραμάτων και προσομοίωσης. Κατά την Synopsys, αποτελεί την πιο σύγχρονη και ενημερωμένη βιβλιοθήκη παραμέτρων και η οποία ανανεώνεται σε κάθε καινούργια έκδοση του λογισμικού. Στο διάγραμμα 6.12 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με τους τέσσερις δυνατούς συνδυασμούς για το δείγμα με την κωδική ονομασία 37N καθώς την πραγματική κατανομή των προσμίξεων μετά την εμφύτευση όπως αυτή προσδιορίστηκε πειραματικά από μετρήσεις SIMS.

Παρατηρούμε καταρχάς ότι όλες οι διαφορετικές στρατηγικές οδηγούν σε πανομοιότυπα αποτελέσματα, γεγονός αναμενόμενο για δυο λόγους: α) από τη στιγμή που δεν έχουμε εφαρμογή τάσης στον κρύσταλλο τα δύο πλέγματα έχουν παρόμοιες ιδιότητες, β) οι παράμετροι του αρχείου Advanced Calibration παρουσιάζουν σχετικά μεγαλύτερες διαφορές σε σχέση με τους προκαθορισμένους για διαδικασίες που αφορούν διάχυση. Τυχόν διαφορές θα μπορούσαν να υπάρχουν μόνο όσον αφορά την εισαγωγή καταστροφής εντός του πλέγματος. Εκ του αποτελέσματος όμως φαίνεται ότι οι όποιες διαφορές αν υπάρχουν είναι αμελητέες. Όσον αφορά στην σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα, παρατηρούμε καλή συμφωνία από την επιφάνεια μέχρι τα 8 πρώτα νανόμετρα. Δυστυχώς όμως παρατηρείται μεγάλη απόκλιση στην ουρά της κατανομής. Ακριβώς το ίδιο φαινόμενο παρατήρησαν και οι Walther et al.



Εικόνα 6.12 α) Σύγκριση προφίλ εμφύτευσης για διαφορετικές στρατηγικές πλέγματος με χρήση αναλυτικής προσέγγισης για το δείγμα 37N μαζί με τη πειραματικά προσδιορισθείσα από SIMS κατανομή β) Προσομοίωση αναλυτικής εμφύτευσης για το δείγμα 37N με χρήση διαφορετικών πινάκων εμφύτευσης.

Στη συνέχεια μελετήσαμε την επίδραση της επιλογής διαφορετικών πινάκων δεδομένων για την εμφύτευση. Το Sentaurus Process παρέχει τη δυνατότητα επιλογής ανάμεσα σε πέντε πίνακες εμφύτευσης (implantation tables):

- Default (πίνακες που εξήχθησαν μέσω προσομοιώσεων με Monte Carlo χρησιμοποιώντας Crystal-TRIM).
- DIOS.
- Tasch (University of Texas).
- Taurus (Πίνακες από Taurus Process)
- ADVCAL

Τα DIOS και Tasch αποδείχτηκε ότι απείχαν πάρα πολύ από τις πειραματικές τιμές, γεγονός το οποίο αποδίδεται στο ότι είναι σχεδιασμένα για να περιγράφουν την εμφύτευση ιόντων με μεγαλύτερη ενέργεια από αυτές που χρησιμοποιούμε εμείς και έτσι δεν τα παρουσιάσαμε στο διάγραμμα 6.12β. Από την εικόνα αυτή προκύπτει ότι οι προκαθορισμένοι πίνακες δεδομένων προσεγγίζουν με μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα το φαινόμενο. Επίσης και τα δεδομένα από Taurus δείχνουν ότι προσομοιώνει καλύτερα την ουρά, αλλά στερείται κάπως ακρίβειας στα πρώτα νανόμετρα. Αντίθετα, το προφίλ που προκύπτει από τους πίνακες του ADVCAL, απέχει αρκετά από την πειραματικό.

Παρόμοια εικόνα προκύπτει και με τα δεδομένα εμφύτευσης και των υπολοίπων δειγμάτων. Αν και τα αποτελέσματα είναι ικανοποιητικά (ειδικά αν ληφθεί υπόψιν και το γεγονός ότι καταφύγαμε σε μια έμμεση μέθοδο υπολογισμού του προφίλ εμφύτευσης), αποφασίστηκε να διερευνήσουμε και τη μέθοδο KMC για να συγκρίνουμε τις δυο προσεγγίσεις.

6.6 Αποτελέσματα της προσομοίωσης εμφύτευσης με βάση την μέθοδο Kinetic Monte Carlo

Η μέθοδος Kinetic Monte Carlo είναι ιδιαίτερα υποσχόμενη για την πρόβλεψη φαινομένων τα οποία λαμβάνουν χώρα σε πολύ μικρά βάθη από την επιφάνεια του υλικού, γεγονός το οποίο απεικονίζεται και στον διαρκώς αυξανόμενο αριθμών δημοσιεύσεων στις οποίες γίνεται χρήση της

KMC. Για το σκοπό αυτό, το κέντρο βάρους της μελέτης μας όσον αφορά τις διαδικασίες εμφύτευσης είναι μετατοπισμένο στις διακριτές μεθόδους. Στην περίπτωση μας η πραγματοποίηση ολοκληρωμένης παραμετροποίησης της μεθόδου επιβάλλει τη διενέργεια ενός μεγάλου αριθμού δοκιμών έτσι ώστε να βρούμε τις βέλτιστες συνθήκες. Μερικές από τις παραμέτρους που διερευνήθηκαν ήταν:

- α) Χρήση ή όχι αλγορίθμων Advanced Calibration (και αν ναι, ποιά έκδοση),
- β) Μέγεθος πλέγματος (το οποίο μπορεί να έχει αποφασιστική σημασία στην προσομοίωση με KMC)
- γ) Αριθμός ψευδοσωματιδίων (Particles) ανά μονάδα όγκου που θα ληφθούν υπόψιν κατά την αρχικοποίηση των υπολογισμών (προκαθορισμένη τιμή 1000).
- δ) Cascades: όταν η flag cascades είναι ενεργοποιημένη, τότε το Sentaurus MC παρακολουθεί όλες τις τροχιές που προκύπτουν από δευτερογενείς συγκρούσεις.
- ε) random seed number: αν μεταβάλλουμε τον αριθμό αυτό, μπορούμε να διερευνήσουμε τις στατιστικές διακυμάνσεις της μεθόδου. Ο random seed number μπορεί να λάβει οποιαδήποτε τιμή από 0 έως και 31328. Σε περίπτωση που η χρήση διαφορετικών seed number οδηγεί σε διαφορετικά αποτελέσματα, τότε προφανώς η αξιοπιστία της προσομοίωσης δεν είναι ικανοποιητική.
- στ) Ακολουθία εμφύτευσης: όπως προαναφέρθηκε, η μεθοδολογία που ακολουθούμε επιτάσσει τη διενέργεια πολλών εμφυτεύσεων (διαφορετικής ενέργειας). Ανάλογα με το αν γίνουν πρώτα οι εμφυτεύσεις μεγάλης ή μικρής ενέργειας έχουμε και διαφορετικό προφίλ που προκύπτει ως υπέρθεση των επιμέρους εμφυτεύσεων. Αυτό μπορεί να εξηγηθεί από το γεγονός ότι αν εισέλθουν πρώτα τα ιόντα με υψηλή ενέργεια θα ανοίξουν κανάλια τα οποία θα διευκολύνουν την διείσδυση των ιόντων χαμηλότερης ενέργειας πιο βαθιά στον όγκο του υλικού.
- ζ) Hopping mode: η επιλογή μεγαλύτερου μήκους λ (doublelong) ανάμεσα στα γεγονότα οδηγεί σε μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου.
- η) Χρόνος εμφύτευσης: ο χρόνος στον οποίο το πρόγραμμα θεωρεί ότι πραγματοποιήθηκε η εμφύτευση μπορεί να οδηγήσει στην εισαγωγή μεγαλύτερων ποσοστών αμορφοποίησης μέσα στον όγκο του υλικού. Αυτή η παράμετρος έχει πραγματικό νόημα στην προσομοίωση της συμβατικής ιοντικής εμφύτευσης, αλλά από την άλλη θέλαμε να διασφαλίσουμε ότι δεν έχει επίδραση στην δική μας περίπτωση
- θ) Εμφύτευση με χρήση BF₂: δυστυχώς το Sentaurus Process δεν περιλαμβάνει το BF₃ ανάμεσα στα είδη με τα οποία μπορεί να εκτελέσει προσομοίωση της εμφύτευσης και επομένως έπρεπε να στραφούμε στο πλησιέστερο από άποψη ιδιοτήτων είδος, το BF₂. Η μεθοδολογία που ακολουθήσαμε δεν λάμβανε υπόψη τα ιόντα Φθορίου τα οποία αναπόφευκτα εισάγονται στο πυρίτιο. Το λογισμικό από την άλλη, αν και δεν περιλαμβάνει την δυνατότητα εμφύτευσης με BF₃, επιτρέπει την εμφύτευση μορίων BF₂. Καθώς το Βόριο έχει ατομικό βάρος 11 και το Φθόριο 19, το μοριακό βάρος του μορίου BF₂ είναι 49 και επομένως περίπου 4.4 φορές μεγαλύτερο από το βάρος του B. Αν χρησιμοποιήσουμε τις ενέργειες εμφύτευσης του πίνακα 6.ΠΙ τότε το βάθος επαφής είναι περίπου 4-5nm και επομένως πολύ μικρότερο από τα 16nm του 39N. Είναι φανερό πως η ενέργεια αυτή κατανέμεται σε όλο το μόριο. Επομένως για να έχουμε την πραγματική συνολική ενέργεια εμφύτευσης του μορίου πρέπει να πολλαπλασιάσουμε τις τιμές του πίνακα με ένα παράγοντα 4.4. Αν και αυτή η προσέγγιση στερείται θεωρητικής τεκμηρίωσης, φαίνεται ότι δεν

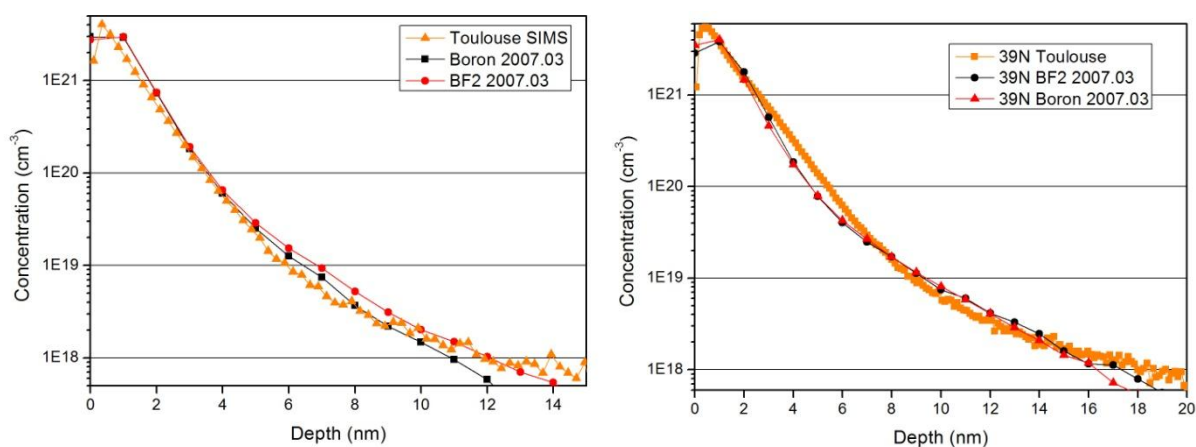
απέχει και πολύ από την πραγματικότητα, όπως φαίνεται και εκ του αποτελέσματος. Στον πίνακα 6.IV αναφέρουμε συνοπτικά όλες τις διαφορετικές παραμέτρους που διερευνήσαμε. Όπως αποδείχτηκε, οι πιο σημαντικές ήταν η χρήση ή μη μοντέλων Advanced Calibration, καθώς και το εάν χρησιμοποιήθηκε Βόριο ή BF_2 . Το μοντέλο Sentaurus MC implant φάνηκε να είναι πιο αποτελεσματικό στην περιγραφή της διαδικασίας εμφύτευσης, ιδιαίτερα στο τμήμα της ουράς κατανομής. Η διερεύνηση όσον αφορά την εξάρτηση από τις διαστάσεις του πλέγματος έδειξε ανεξαρτησία, τουλάχιστον για τα μεγέθη που χρησιμοποιήθηκαν στην συγκεκριμένη περίπτωση. Διερευνήσαμε δυο διαφορετικές οικογένειες μεγεθών, μια που η x (κατά βάθος διάσταση) ήταν μικρή και μια που ήταν μεγάλη. Η πρώτη αποσκοπεί στην μελέτη της στατιστικής εξάρτησης της μεθόδου από τις πλευρικές διαστάσεις, υπό τη λογική ότι μεγαλύτερες πλευρικές διαστάσεις συνεπάγονται μεγαλύτερο αριθμό σωματιδίων μέσα στο υπολογιστικό χωρίο και επομένως καλύτερο στατιστικό δείγμα. Η μελέτη αυτή έγινε με γνώμονα την ελαχιστοποίηση του χρόνου που θα απαιτείτο για την διεξαγωγή της προσομοίωσης της εμφύτευσης, καθώς λόγω του μικρού βάθους εμφύτευσης, το βάθος του υπολογιστικού χωρίου δεν έχει ιδιαίτερη επίδραση. Αντίθετα, η δεύτερη «οικογένεια» έγινε με γνώμονα να χρησιμοποιηθεί ως είσοδος σε προσομοιώσεις της κινητικής των προσμίξεων κατά την διάρκεια της ανόπτησης. Στην περίπτωση αυτή, μια πολύ μικρή τιμή της κατακόρυφης διάστασης του υπολογιστικού χωρίου θα οδηγήσει αναπόφευκτα σε φαινόμενα θερμικού περιορισμού (thermal confinement), τα οποία θα δώσουν λανθασμένα αποτελέσματα όσον αφορά στην διάχυση (και ειδικά στην περίπτωση της ανόπτησης με CO_2 laser, όπου τα μήκη απορρόφησης έχουν μεγάλες τιμές). Περισσότερα για αυτό το πρόβλημα θα αναφερθούν στο κεφάλαιο 8 που πραγματεύεται την μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων κατά την ανόπτηση με CO_2 laser.

Πίνακας 6.IV Παράμετροι που διερευνήθηκαν στην KMC

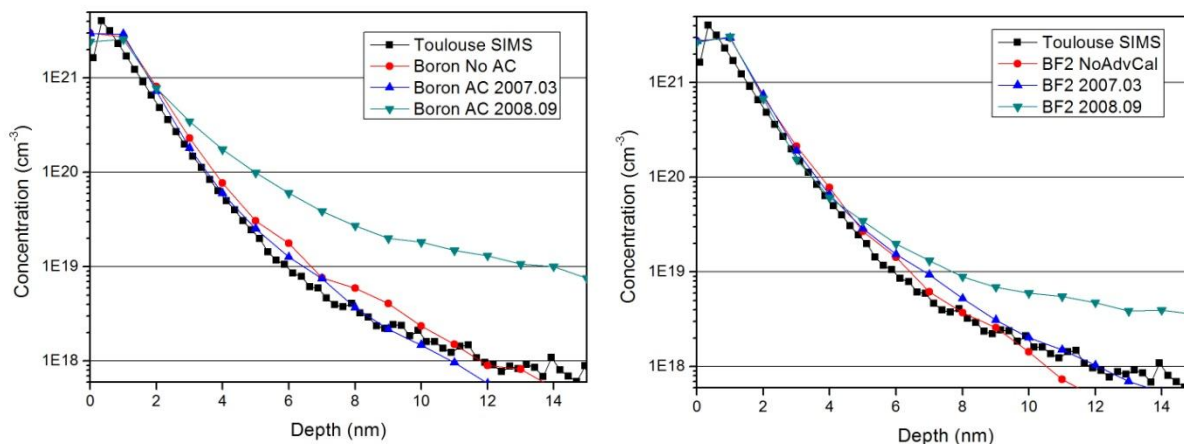
| Παράμετροι | Διαφορετικές τιμές παραμέτρου | | | |
|-----------------------|--|--|--|---------|
| Μοντέλο KMC | Sentaurus MC Implant | | Crystal TRIM | |
| Boron- BF_2 | Boron | | BF_2 | |
| Calibrations | None | 2007.03 | 2007.12 | 2008.09 |
| Μοντέλα αμορφοποίησης | NAI | | OXI | |
| Grid (Μικρό βάθος) | Small $0.3 \times 0.1 \times 0.1 \mu\text{m}$ | Medium $0.5 \times 0.2 \times 0.2 \mu\text{m}$ | Big $0.6 \times 0.5 \times 0.3 \mu\text{m}$ | |
| Grid (Μεγάλο βάθος) | Small $1.0 \times 1.0 \times 0.1 \mu\text{m}$ | Medium $3.0 \times 1.0 \times 0.1 \mu\text{m}$ | Big $10.0 \times 1.0 \times 0.2 \mu\text{m}$ | |
| Implantation sequence | Δοκιμή 8 διαφορετικών ακολουθιών είτε από τη μικρότερη στη μεγαλύτερη ενέργεια, είτε το ανάποδο, είτε τυχαία | | | |
| Implantation duration | 1s | | 10s | |
| Particles | 1000 | 3000 | 10000 | |
| Seed | 21 | 800 | 15000 | |
| Cascades | On | | Off | |

Συνοψίζοντας, καταρχάς προσομοιώθηκε εμφύτευση τόσο με Βόριο, όσο και με BF_2 (με την κατάλληλη φυσικά αναγωγή στην ενέργεια εμφύτευσης. Το τελικό αποτέλεσμα και για τις δύο περιπτώσεις παρουσιάζει αρκετά καλή ομοιότητα. Ακολούθως, έγινε ανάλυση με βάση τα calibrations που παρέχονται από το πρόγραμμα. Τα προφίλ νόθευσης που προκύψαν για το κάθε μοντέλο είναι ουσιαστικά όμοια, με εξαίρεση αυτά του 2008.09 που αποκλίνουν αρκετά των επιθυμητών. Δοκιμάστηκαν, ακόμη, τα δύο μοντέλα προσομοίωσης της KMC εμφύτευσης, το Sentaurus MC Implant και το CTRIM, με το πρώτο να επιδεικνύει εμφανώς καλύτερη συμπεριφορά. Σε επόμενο βήμα, ελέγχθηκε η ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα. Τα αποτελέσματα είναι πανομοιότυπα, με ελάχιστη αύξηση της ακρίβειας της προσομοίωσης στην ουρά του προφίλ να παρουσιάζεται όσο μεγαλώνουμε το υπολογιστικό πεδίο και την πυκνότητα του πλέγματος. Στη συνέχεια, υπολογίσαμε το προφίλ για διαφορετικές ακολουθίες εμφύτευσης, όπου και πάλι τα αποτελέσματα παρουσίασαν αρκετά ικανοποιητική ομοιότητα μεταξύ τους, με αποκλίσεις της τάξης του 1 nm το πολύ για το βάθος επαφής. Η διάρκεια του χρόνου εμφύτευσης δε φάνηκε να επηρεάζει τη μορφή του προφίλ σε αξιόλογο βαθμό. Επίσης, η προσομοίωση δεν εμφάνισε στατιστικό θόρυβο, αφού έδινε τα ίδια αποτελέσματα σε διαδοχικές αλλαγές του αριθμού των ψευδοσωματιδίων και του αριθμού seed. Τέλος, η χρήση ή μη του μοντέλου cascades δεν έδειξε να επηρεάζει τη μορφή του προφίλ παρά μόνο λίγο στην ουρά της κατανομής.

Στα διαγράμματα 6.13α και β παρουσιάζονται τα προσομοιωμένα και τα πειραματικά προφίλ εμφύτευσης για τα δείγματα 37N και 39N αντίστοιχα, τα οποία προέκυψαν με χρήση του Advanced Calibration έκδοσης 2007.03 για εμφύτευση Βορίου αλλά και BF_2 . Και από τα δυο γραφήματα προκύπτει η πολύ καλή συμφωνία μεταξύ μετρήσεων και προσομοίωσης. Όσον αφορά την εμφύτευση BF_2 , ο αλγόριθμος θεωρεί ότι κατά την είσοδο του μορίου στο πλέγμα αυτό διασπάται σε 3 μόρια (ένα B και 2 F). Αν και τα λαμβάνει υπόψιν του ξεχωριστά, δεν τα θεωρεί τελείως ανεξάρτητα λόγω της αλληλεπίδρασης τους με την ζημιά που εισάγεται στον κρυσταλλικό όγκο. Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε ορισμένα ενδεικτικά διαγράμματα για την εξάρτηση του προσομοιωθέντος προφίλ εμφύτευσης από τις σημαντικότερες παραμέτρους, συγκρίνοντας πάντοτε τις κατανομές με τα πειραματικά προφίλ, όπως αυτά προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS (Toulouse).

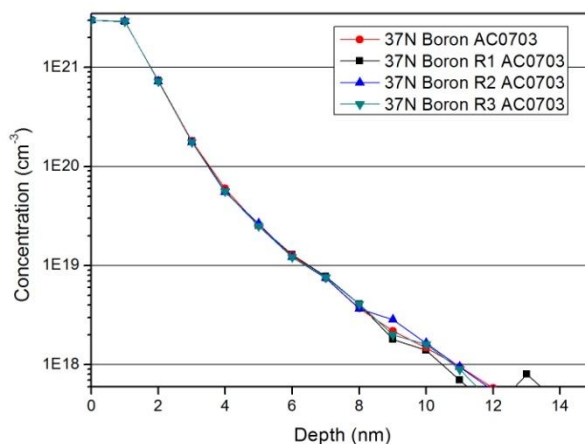


Εικόνα 6.13 Κατανομές συγκέντρωσης Βορίου, όπως αυτές προέκυψαν από προσομοίωση με B και BF_2 (με χρήση Advanced Calibration 2007.03) μαζί με πειραματικά προσδιορισθείσες από SIMS για δυο διαφορετικά δείγματα α) 37N και β) 39N.



Εικόνα 6.14 Διερεύνηση της εξάρτησης της κατανομής συγκέντρωσης Βορίου ανάλογα με το εάν και ποιά έκδοση των προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration, χρησιμοποιήθηκε, όπως αυτές προέκυψαν από προσομοίωση με α) Βόριο και β) BF_2 . Παρουσιάζονται τα προφίλ με χρήση 2007.03 και 2008.09 και χωρίς χρήση μαζί με πειραματικά προσδιορισθείσες από SIMS δείγματα 37N.

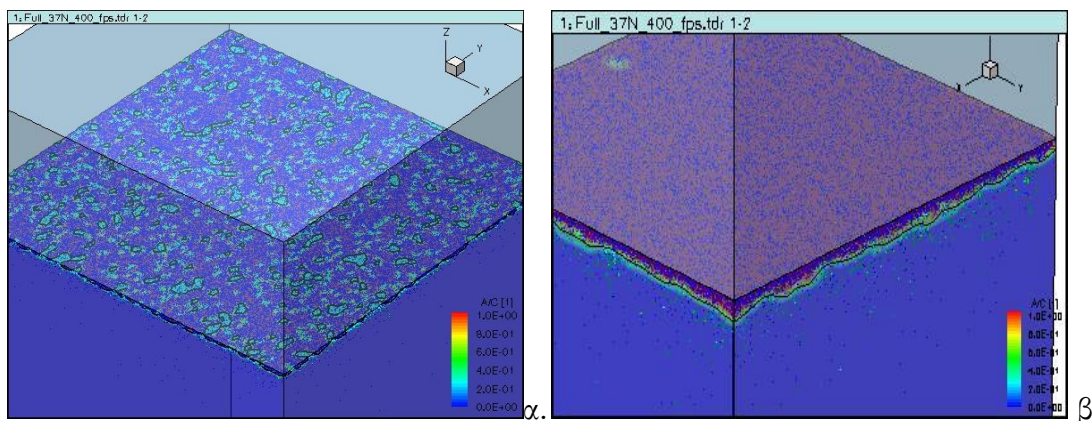
Κατόπιν, παρουσιάζουμε την διαδικασία διερεύνησης για την επίδραση του πλέγματος (πυκνότητα και στρατηγικές πύκνωσης). Δοκιμάστηκαν τρεις διαφορετικές στρατηγικές πύκνωσης του πλέγματος κατά τον κατακόρυφο άξονα, με την R1 να αντιστοιχεί στην λιγότερο πυκνή και την R3 στην πιο πυκνή. Σε κάθε περίπτωση το πλέγμα ήταν πολύ περισσότερο πυκνό κοντά στην κορυφή του υπολογιστικού χωρίου, σε σχέση με τις περιοχές που βρίσκονταν στον πυθμένα. Επίσης δοκιμάστηκαν διάφορες στρατηγικές αυτόματης πύκνωσης, οι οποίες έδωσαν και παρόμοια αποτελέσματα.



Εικόνα 6.15 Διερεύνηση της επίδρασης της πύκνωσης του πλέγματος στην πρόβλεψη του προφίλ συγκέντρωσης κατά την εμφύτευση δειγμάτων 37N με χρήση πλάσματος και με την ενσωμάτωση προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2007.03. Η R1 αντιστοιχεί στην λιγότερο πυκνή και η R3 στην πιο πυκνή διαμόρφωση του πλέγματος.

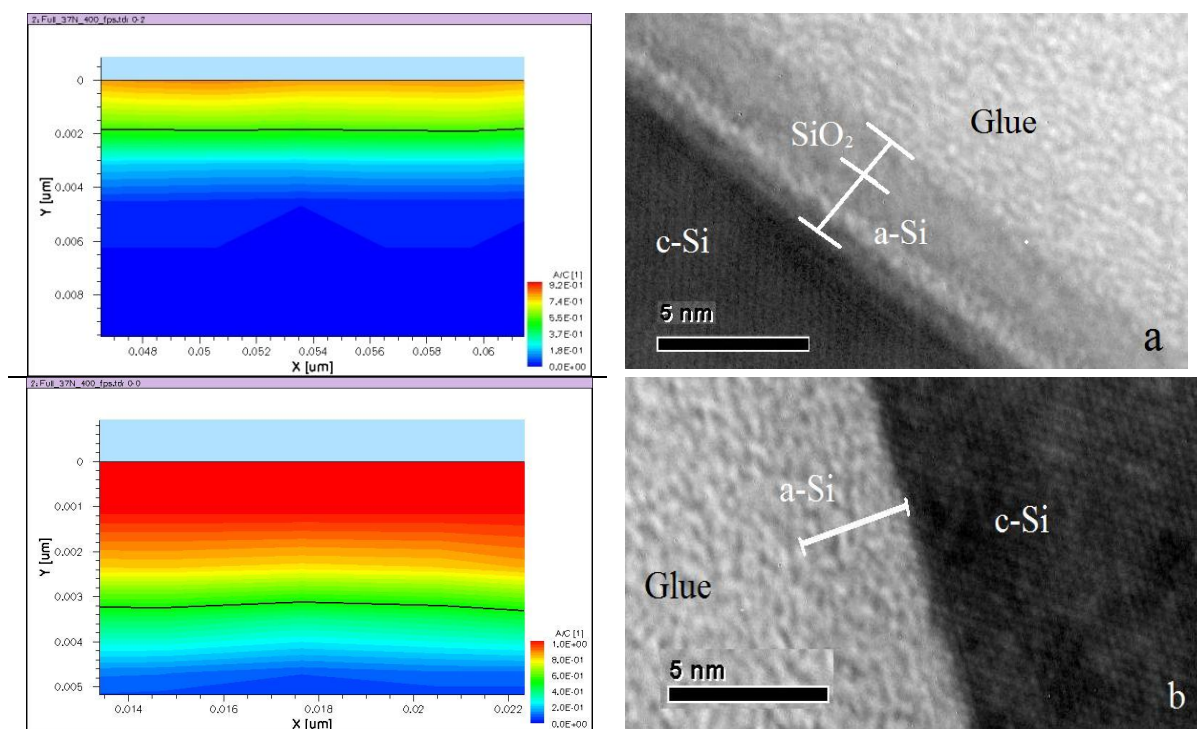
Τέλος, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η επίδραση της εμφύτευσης στην δημιουργία αμορφοποιημένων περιοχών, η ύπαρξη των οποίων έχει επιβεβαιωθεί και πειραματικά μέσω μετρήσεων Μικροσκοπίας Ηλεκτρονιακής Διέλευσης (TEM). Παρατηρούμε ότι όταν κάνουμε μοριακή αντί για ιοντική εμφύτευση έχουμε σαφώς μεγαλύτερη αμορφοποίηση, η έκταση της οποίας συμφωνεί και με τις προαναφερθείσες μετρήσεις TEM. Στο 37N έχουμε μια αμορφοποιημένη περιοχή πάχους 1.9 nm (TEM 2.5 nm), ενώ για τα 39N και 40N έχουμε 3 nm (η αντίστοιχη ζώνη σύμφωνα με τη μέτρηση TEM, ενός δείγματος με ίδια ενέργεια εμφύτευσης ήταν

3nm). Ως κατώφλι αμορφοποίησης θεωρείται το γεγονός η συγκέντρωση κάθε μορφής ατελειών να είναι το 25% της πυκνότητας του πλέγματος πυριτίου, ήτοι $1.15 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Στις εικόνες 6.16α και β, δίνουμε μια τρισδιάστατη απεικόνιση της κατανομής των αμορφοποιημένων θυλάκων μέσα στον όγκου του πυριτίου αμέσως μετά την εμφύτευση, όπως εμφανίζεται από το σχεδιαστικό πακέτο Tecplot, το οποίο έχει την δυνατότητα να επικοινωνεί σε πραγματικό χρόνο με το Sentaurus Process, για τα δείγματα 37N και 39N.



Εικόνα 6.16 Τρισδιάστατη απεικόνιση των αμορφοποιημένων περιοχών για τα δείγματα 37N και 39N αντίστοιχα

Στις εικόνες 6.17 παρουσιάζουμε τα αντίστοιχα δισδιάστατα γραφήματα στα οποία εμφανίζεται με μαύρη γραμμή η διεπιφάνεια αμορφοποιημένου/κρυσταλλικού πυριτίου για τα δείγματα 37N και 39N αντίστοιχα. Μαζί τους παρατίθενται οι αντίστοιχες μικρογραφίες TEM, στις οποίες διακρίνονται ευκρινώς οι τρεις ζώνες (κρυσταλλικό πυρίτιο, άμορφο και οξείδιο).



Εικόνα 6.17 Αναπαράσταση της έκτασης της αμορφοποιημένης περιοχής όπως αυτή προκύπτει από την προσομοίωση (αριστερά) και από απεικόνιση μέσω TEM (δεξιά) για δυο διαφορετικά δείγματα: α) 37N και β) 39N. Στα γραφήματα της προσομοίωσης, με μαύρη γραμμή απεικονίζεται η διεπιφάνεια αμορφοποιημένου / κρυσταλλικού πυριτίου

Τέλος, στον πίνακα 6.V συγκρίνονται οι τιμές για το βάθος επαφής (στα $1E18 \text{ cm}^{-3}$) και το πάχος της αμορφοποιημένης ζώνης, όπως αυτές προέκυψαν από την προσομοίωση και από πειραματικές μετρήσεις (SIMS και TEM αντίστοιχα).

Πίνακας 6.V

| Κωδικός δείγματος | Βάθος επαφής και πάχος a-Si | | | |
|----------------------|-----------------------------|-----------|-----------------|-----------|
| | Βάθος επαφής (nm) | | Πάχος a-Si (nm) | |
| | SIMS | Simulated | TEM | Simulated |
| 37N | 13 | 12 | 1.9 | 2.5 |
| 38N | 13 | 13 | - | |
| 39N | 18 | 17 | 3.0 | 3.0 |
| 40N | 22 | 19 | 3.0 | 3.0 |

6.6 Ανακεφαλαίωση

Η εμφύτευση με πλάσμα είναι μια ιδιαίτερα υποσχόμενη τεχνική για την δημιουργία ρηχών επαφών που πληρούν τις προδιαγραφές για τις επόμενες γενιές επεξεργαστών, καθώς συνδυάζουν την δυνατότητα εμφύτευσης σε πολύ μικρό βάθος (έως και κάτω από 10 nm), χωρίς τα προβλήματα ενεργειακής επιμόλυνσης που παρουσιάζουν οι συμβατικές τεχνικές ιοντικής εμφύτευσης πολύ χαμηλής ενέργειας. Η δυνατότητα αυτή επιβεβαιώνεται από τις μετρήσεις SIMS, οι οποίες κατέδειξαν τη δυνατότητα σχηματισμού επαφών με προφίλ στα 12 nm αν και η ονομαστική ενέργεια ήταν τέσσερεις φορές υψηλότερη από την ελάχιστη ονομαστική ενέργεια που μπορεί να επιτευχθεί από την συγκεκριμένη τεχνική. Επιπλέον είναι δυνατή η επίτευξη πολύ υψηλών συγκεντρώσεων (έως και $7E21 \text{ cm}^{-3}$). Από την άλλη πλευρά, οι μετρήσεις SIMS κατέδειξαν και την μεγαλύτερη αδυναμία της μεθόδου, η οποία είναι η πολύ μεγάλη απόκλιση ανάμεσα στην ονομαστική και στην πραγματικά εμφυτευθείσα δόση. Σε συμφωνία με την βιβλιογραφία, η απόκλιση αυτή αυξάνει όσο μεγαλώνει η ονομαστική δόση και όσο μειώνεται η τάση του παλμού που πυροδοτεί το πλάσμα.

Η τεχνική αυτή, αντίθετα με την συμβατική ιοντική εμφύτευση που είναι μονοενεργειακή και εισάγει μόνο ένα είδος, οδηγεί στην είσοδο στον κρύσταλλο μιας ποικιλίας ειδών τα οποία παρουσιάζουν μεγάλο εύρος ενεργειών. Το γεγονός αυτό καθιστά αδύνατη την προσομοίωση της διαδικασίας με την χρήση των συμβατικών μεθόδων. Ως εκ τούτου ακολουθήσαμε την προσέγγιση των Walther et al., οι οποίοι με χρήση φασματοσκοπίας μάζας-ενέργειας αναπαριστούν την εμφύτευση με πλάσμα με μια ακολουθία από οχτώ διαφορετικές εμφυτεύσεις, στις οποίες μέσω κατάλληλων κανονικοποιήσεων έχει κατανεμηθεί η δόση ανά ενέργεια. Με βάση την μεθοδολογία αυτή, προβήκαμε στην προσομοίωση της διαδικασίας της εμφύτευσης χρησιμοποιώντας τόσο συνεχείς (continuum) προσεγγίσεις όσο και την KMC. Αν και τα αποτελέσματα της χρήσης αναλυτικών μεθόδων, παρουσίαζαν ικανοποιητική ταύτιση με τις πειραματικά προσδιορισθείσες καμπύλες, παρουσιάζεται μια σχετική απόκλιση στην ουρά της κατανομής. Από την άλλη πλευρά, κατόπιν διεξαγωγής μεγάλου αριθμού δοκιμών και διερεύνησης της επίδρασης πολλών παραμέτρων, η χρήση της μεθόδου Monte Carlo, οδήγησε στην επίτευξη πολύ μεγάλου βαθμού ταύτισης ανάμεσα στις καμπύλες συγκέντρωσης από την προσομοίωση και τις πειραματικές μετρήσεις μέσω

SIMS. Στις προσομοιώσεις αυτές διερευνήθηκε η εμφύτευση όσο ατόμων Βορίου, όσο και BF₂. Και οι δυο προσεγγίσεις έδωσαν πολύ καλά αποτελέσματα, με την τελευταία να οδηγεί και σε καλές προβλέψεις της έκτασης της αμορφοποίησης που προκλήθηκε λόγω της εμφύτευσης.

Βιβλιογραφικές αναφορές 6^{ου} κεφαλαίου

“Silicon VLSI Technology”, J.D. Plummer et al, εκδόσεις Prentice Hall 2000.

Synopsys Sentaurus Process User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Carlo User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Advanced Calibration User Guide ver. 2008.09

¹ D. Lenoble and A. Grouillet, Surf. And Coat. Technol. 156 (2002) 262-266

² Lee K December in *Ext. Absr. Int. Workshop Junction Technol. 2001 (Tokyo, Japan)* p 21

³ Chu P K, Felch S B, Kellerman et al., *Solid State Technol.* **42** 55(2002)

⁴ Chu P K, Felch S B, Kellerman P et al., *Solid State Technol.* **42** 77

⁵ S.B. Felch, Z. Fang, B.-W. Koo et al., Surf. Coatings Technol., 156, 229-236 (2002)

⁶ L. Godet, Z. Fang, S. Radovanov et al., J. Vac. Sci. Technol. B 24 (5), Sep/Oct 2006, 2391

⁷ Ankur Agarwal and Mark J. Kushner “Computational Investigation of Pulsed Plasma Doping”, Varian Semiconductor Equipment Associates, October 2004

⁸ Ankur Agarwal and Mark J. Kushner, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, Vol. 33, No. 2 (2005) 252

⁹ D. Lenoble, M.J. Goeckner, S.B. Felch et al., in *Proceedings of Ion Implant Technology 1998*, Kyoto (Japan)

¹⁰ K.K. Bourdelle, H.J. Gossmann, S. Chaudhry et al., in: *Proceedings of Ion Implant Technology Conference*, Alpbach, Austria.

¹¹ Y. Nishioka, Y. Ohli, K. Mukai et al., *Appl. Phys. Lett.* 54 (12) (1989) 1127.

¹² Paul K. Chu “Plasma Doping: Theoretical Simulation Use of Safer Gas”

¹³ S.B. Felch*, Z. Fang, B.-W. Koo et al., *Surf. Coatings Technol.* 156 (2002) 229–236

¹⁴ J. Borland, in the *7th International Workshop on Junction Technology (IWJT 2007)*, June 8-9, 2007 in Kyoto, Japan, p.39.

¹⁵ R. G. Wilson, *J. Appl. Phys.*, **54**, 6879 (1983).

¹⁶ D. F. Downey, J. W. Chow, E. Ishida et al., *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1263(1998).

¹⁷ Y. J. Park and J. J. Kim, *J. Appl. Phys.*, **85**, 803 (1999).

¹⁸ K. Ohyu, T. Itoga, and N. Natasuaki, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1*, **29**, 457 (1990).

¹⁹ 15. D. Fan, J. M. Parks, and R. J. Jaccodine, *Appl. Phys. Lett.*, **5**, 1212 (1991)

²⁰ L. Y. Kransnobaev, N. M. Omelyanovskaya, and V. V. Makarov, *J. Appl. Phys.*, **74**, 6020 (1993).

²¹ H. A. W. El Mubarek, J. M. Bonar, G. D. Dillway et al., *J. Appl. Phys.*, **96**, 4114 (2004).

²² L. S. Robertson, P. N. Warnes, M. E. Law et al., *Proc. of the Int. l Conf. on Ion Impl. Tech.*, p. 171 (2000).

²³ D. Lee, S. Baek, S. Heo, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 9 1 G19-G21 (2006).

²⁴ R.P. Webb, S.H. Winston, R.M. Gwilliam et al., *Nucl. Instr. Meth. B* 202 (2003) 143–148

²⁵ S. Walther, L. Godet, T. Buyuklimanli et al., *J. Vac Sci. Technol. B* 24 (1) (2006) 489.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΜΕ ΧΡΗΣΗ CO₂ LASER ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΜΕΝΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ

7.1 Ανόπτηση πυριτίου με χρήση CO₂ laser

Η προοπτική της χρήσης CO₂ laser για την θερμική επεξεργασία δοκιμίων πυριτίου εμφανίζεται ήδη από τα τέλη της δεκαετίας του 1970^{1 2 3}, ως μια εναλλακτική πρόταση στη ανόπτηση με φούρνο. Ένα από τα μεγαλύτερα πλεονέκτημα της συγκεκριμένης προσέγγισης έγκειται στο γεγονός ότι η απορρόφηση του πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος (10.6 μm) εξαρτάται ισχυρά από την θερμοκρασία και από τα επίπεδα νόθευσης με αποτέλεσμα να είναι δυνατή η τροποποίηση της, κατά βούληση, και ισοδύναμα του οπτικού μήκους απορρόφησης. Με αυτό τον τρόπο μπορούσε να επιτευχθεί απόλυτος έλεγχος του βάθους τήξης, έτσι ώστε να καταστεί δυνατή η πλήρης ανακρυστάλλωση όλων των περιοχών που είχαν υποστεί καταστροφές από την ιοντική εμφύτευση. Η πολύπλοκη φύση της αλληλεπίδρασης αποτέλεσε αντικείμενο μελέτης πλήθους ερευνητών, οι οποίοι κατόρθωσαν να ποσοτικοποιήσουν την εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση των φορέων^{4 5 6}, αλλά και να περιγράψουν τους βασικότερους μηχανισμούς αλληλεπίδρασης^{7 8}. Η διερεύνηση περιελάμβανε ανόπτηση τόσο σε καθεστώς nsecⁱ, όσο και msec αλλά και σε sec⁹. Καθώς όμως, οι απαιτήσεις που είχαν τεθεί για τις παλαιότερες γενιές επεξεργαστών, ήταν αισθητά μικρότερες σε σχέση με τις σημερινές, η ικανοποίηση τους ήταν δυνατή και με τη χρήση λιγότερο εξεζητημένων και δαπανηρών τεχνικών (πρώτα συμβατικοί φούρνοι και αργότερα RTA), το ερευνητικό ενδιαφέρον σύντομα ατόνησε. Να όμως που στα μέσα της δεκαετίας του 2000, και περίπου 25 χρόνια μετά τις πρώτες δημοσιεύσεις πάνω στο θέμα, η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής έστρεψε ξανά την προσοχή της στα laser διοξειδίου του άνθρακα, για να καλύψει τις ολοένα και αυξανόμενες απαιτήσεις που τίθενται τα τελευταία χρόνια για την κατασκευή υπερ-ρηχών επαφών και ιδιαίτερα για τις γενιές από 32nm και κάτω.

Όπως προαναφέρθηκε και στο πρώτο κεφάλαιο οι δυο σημαντικότεροι λόγοι που αναθέρμαναν το ερευνητικό ενδιαφέρον σε αυτό το είδος laser, είναι οι εξής:

A) η θέρμανση είναι αφενώς μεν εντοπισμένη χωρικά και αφετέρου γίνεται με σταδιακό τρόπο λόγω της προθέρμανσης, με αποτέλεσμα να αποφεύγονται φαινόμενα θερμικού σοκ, τα οποία θα μπορούσαν να οδηγήσουν στην εμφάνιση παραμορφώσεων ή ακόμα και μικρορωγμών στο δοκίμιο.

B) πέραν των καλύτερων μηχανικών χαρακτηριστικών που επιδεικνύουν τα δοκίμια πυριτίου που έχουν ανοπτηθεί με laser CO₂, το μεγαλύτερο πλεονέκτημα των τελευταίων είναι η έλλειψη θερμοκρασιακών ανομοιομορφιών που σχετίζονται με οπτικά φαινόμενα περίθλασης του φωτός πάνω στις ήδη υπάρχουσες δομές, εφόσον χρησιμοποιηθεί κατάλληλα πολωμένο φως^{10 11}.

Αυτά τα δυο στοιχεία αποτέλεσαν και το βασικό εφαλτήριο για να διερεύνηση της ανόπτησης με χρήση CO₂ σε καθεστώς msec παράλληλα με την χρήση KrF excimer laser σε

nanosecond. Φυσικά και στις δυο περιπτώσεις ο στόχος της ακτινοβόλησης ήταν η αποφυγή τήξης, έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί η διάχυση των προσμίξεων. Στη συνέχεια, αφού κάνουμε μια σύντομη αναφορά στις αρχές λειτουργίας των CO₂ laser, θα περιγράψουμε την διαδικασία δημιουργίας της διάταξης που χρησιμοποιήσαμε αναλύοντας ξεχωριστά τα σημαντικότερα υποσυστήματα αλλά και τις παραμέτρους που ελήφθησαν υπόψη κατά την σχεδίαση της.

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε στην περιγραφή των συνθηκών ακτινοβόλησης και στον επακόλουθο χαρακτηρισμό των δειγμάτων. Οι ακτινοβολήσεις που διεξήχθησαν με την διάταξη που περιελάμβανε το laser του διοξειδίου του άνθρακα, μπορούν να διακριθούν σε αυτές που έγιναν κυρίως για λόγους βαθμονόμησης και ελέγχου της διαδικασίας ακτινοβόλησης και σε αυτές που έγιναν με αντικειμενικό σκοπό την δημιουργία ρηχών επαφών, ικανών να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις όπως αυτές παρουσιάστηκαν στο πρώτο κεφάλαιο. Στο επόμενο εδάφιο θα αναφερθούν οι κυριότερες συνθήκες ακτινοβόλησης που χρησιμοποιήθηκαν ανεξαρτήτως από το λόγο για τον οποίο αυτές διεξήχθησαν, ενώ στη συνέχεια θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα από τον ηλεκτρικό (μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης) και μορφολογικό χαρακτηρισμό (μετρήσεις SIMS) των δειγμάτων εκείνων που προορίζονταν για την δημιουργία των επαφών. Επισημαίνεται πως η μεγαλύτερη έμφαση θα δοθεί στις συνθήκες ακτινοβόλησης οι οποίες οδήγησαν στο σχηματισμό επαφών με τα βέλτιστα χαρακτηριστικά, με γνώμονα την ελαχιστοποίηση της διάχυσης και την επίτευξη όσο το δυνατόν μεγαλύτερων επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης.

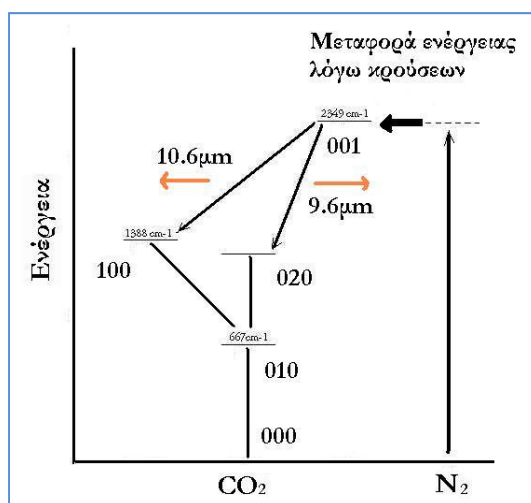
7.2 Περιγραφή λειτουργίας των laser διοξειδίου του άνθρακα

Τα CO₂ laser ανήκουν στην κατηγορία των δονητικών – περιστροφικών laser των οποίων αποτελούν και τον πιο χαρακτηριστικό εκπρόσωπο. Το ενεργό μέσο του laser είναι ένα αέριο μείγμα που αποτελείται από CO₂, N₂ και He. Έχουμε ταλάντωση μεταξύ δυο δονητικών επιπέδων του CO₂, ενώ τα N₂ και He χρησιμοποιούνται για την βελτιστοποίηση της αποδοτικότητας της δράσης laser. Τα CO₂ αποτελούν ένα από τα πιο ισχυρά laser, αφού έχει επιτευχθεί ισχύς έως και 80 kW. Ένα ακόμα μεγάλο τους πλεονέκτημα το οποίο έχει συμβάλλει στην ευρεία βιομηχανική τους χρήση είναι η υψηλή απόδοση που επιτυγχάνουν, η οποία μπορεί να φτάσει ακόμα και το 15 με 20%.

Η βασική αρχή λειτουργίας του CO₂ laser καταδείχτηκε από τους Patel et al.¹² Η παρουσία μιας ηλεκτρικής εκκένωσης μέσα σε CO₂ χαμηλής πίεσης μπορεί κάτω από κατάλληλες συνθήκες να δημιουργήσει αντιστροφή πληθυσμών στα διεγερμένα επίπεδα ταλάντωσης περιστροφής του αερίου. Η τελευταία, με τη βοήθεια ενίσχυσης μέσω ενός συστήματος οπτικών αντηχείων οδηγεί σε εκπομπή ακτινοβολίας laser στα 9.6 και στα 10.6 μm. Οι πρώτες διατάξεις laser διοξειδίου του άνθρακα είχαν πολύ χαμηλή απόδοση και ισχύ εξόδου. Η προσθήκη όμως Αζώτου και Ηλίου στο αέριο ενεργό CO₂ αύξησε δραματικά την ισχύ του.

Στη συνέχεια θα προχωρήσουμε σε μια σύντομη περιγραφή των μηχανισμών που οδηγούν στην αντιστροφή πληθυσμών. Το μόριο του CO₂ δύναται να ταλαντωθεί με τρεις διαφορετικούς τρόπους: α) συμμετρικό, β) λυγισμό (bending) και γ) αντισυμμετρικό. Κάθε ένας από αυτούς τους βαθμούς ελευθερίας περιγράφεται από έναν αντίστοιχο αριθμό, έστω n₁, n₂, και n₃. Οι ενεργειακές καταστάσεις ταλάντωσης του μορίου δίνονται από τρεις κβαντικούς αριθμούς ν₁, ν₂ και ν₃ που δείχνουν σε πόσες βασικές καταστάσεις-ρυθμούς n₁, n₂, και n₃ αντιστοιχεί το διεγερμένο επίπεδο

στο οποίο βρίσκεται το διεγερμένο μόριο. Άρα το κάθε επίπεδο θα περιγράφεται από τρεις ακέραιους αριθμούς v_1 , v_2 και v_3 . Στην εικόνα 7.1 παριστάνεται ένα ενεργειακό διάγραμμα των CO₂ και N₂.



Εικόνα 7.1 Ενεργειακό διάγραμμα για τις καταστάσεις του CO₂ laser. Lasing στα 10.6 μm έχουμε κατά την αποδιέγερση από την στάθμη 001 στην 100.

Η όλη διεργασία ξεκινά από την μετάβαση ατόμων N₂ από την βασική, στην διεγερμένη κατάσταση του σχήματος. Η φύση όμως του μορίου του N₂ δεν του επιτρέπει γρήγορη αποδιέγερση με αποτέλεσμα να παραμένει μεγάλο πλήθος μορίων στην διεγερμένη κατάσταση. Παρατηρούμε όμως ότι η διαφορά ανάμεσα στα ενεργειακά επίπεδα 001 του CO₂ και της διεγερμένης κατάστασης του N₂ είναι πολύ μικρή (της τάξεως των 18 cm⁻¹). Έτσι, συγκρούσεις μεταξύ μορίων CO₂ της βασικής στάθμης και μορίων Αζώτου, οδηγούν στην δημιουργία διεγερμένων μορίων CO₂* στο επίπεδο (001). Το επίπεδο (001) αποτελεί και το υψηλότερο επίπεδο σε ένα σύστημα laser τεσσάρων επιπέδων. Και από δω και πέρα ξεκινάει μια ακολουθία αποδιεγέρσεων, μερικές εκ των οποίων προοικαλούν εκπομπή ακτινοβολίας laser. Πράγματι, επειδή οι χρόνοι των μεταπτώσεων 100→010 και 020 → 010 είναι τουλάχιστον μια τάξη μεγέθους πιο γρήγοροι από τον αντίστοιχο της 010 → 000, δημιουργείται αντιστροφή πληθυσμών ανάμεσα στα επίπεδα 001-100 καθώς και 001-020. Η ύπαρξη κατάλληλου οπτικού αντηχείου οδηγεί σε εκπομπή ακτινοβολίας laser 10.6 και 9.6 μm αντίστοιχα. Υπάρχει όμως ακόμα μια σημαντική παράμετρος. Η αποδιέγερση της 010 προς την 000 είναι αργή με αποτέλεσμα να εγκλωβίζονται μόρια στην 010, κάτι το οποίο φυσικά παρεμποδίζει και την αποδιέγερση των ανώτερων της σταθμών προς αυτή. Είναι λοιπόν απαραίτητο να επιτύχουμε ταχύτερη αποδιέγερση της 010, κάτι το οποίο γίνεται δυνατό με την εισαγωγή μορίων He ή F. Τα τελευταία συγκρούονται με τα μόρια CO₂ της στάθμης 010 και τα αποδιεγείρουν.

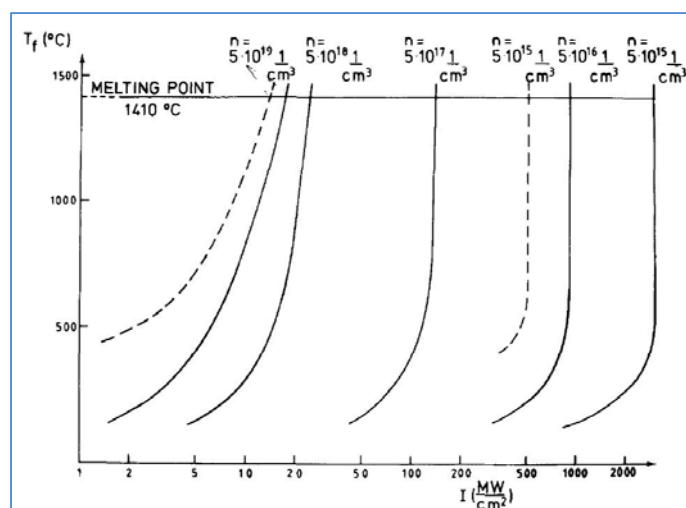
7.3 Περιγραφή της κατασκευής της διάταξης ακτινοβόλησης CO₂

Η κατασκευή της διάταξης ακτινοβόλησης με laser CO₂ αποτέλεσε το πιο απαιτητικό, αλλά και χρονοβόρο κομμάτι της παρούσας ερευνητικής προσπάθειας. Στις εγγενείς κατασκευαστικές και σχεδιαστικές προκλήσεις προστέθηκε και η προβληματική λειτουργία του συγκεκριμένου laser, και η οποία κόστισε περισσότερο από ένα χρόνο καθυστέρηση στην έναρξη των πειραμάτων.

Πριν αναφερθούμε στα επιμέρους τμήματα της διάταξης ακτινοβόλησης θα προχωρήσουμε σε μια σύντομη περιγραφή των χαρακτηριστικών και των απαιτήσεων που καθόρισαν αποφασιστικά τον σχεδιασμό αλλά και την τελική υλοποίηση της διάταξης. Οι περισσότερες από αυτές απορρέουν από την ιδιαίτερη φύση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας σε αυτό το μήκος κύματος (10.6μm) με το πυρίτιο. Ο βασικός στόχος είναι η θέρμανση δισκιδίων πυριτίου σε θερμοκρασίες 1100-1300°C σε όσο το δυνατόν μικρότερους χρόνους (της τάξης των μερικών millisecond), έτσι ώστε να επιτευχθούν υψηλά επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης και αποκατάσταση της ζημιάς λόγω της εμφύτευσης, με ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση των φαινομένων διάχυσης των προσμίξεων. Πέραν του βασικού αυτού στόχου, η διάταξη σχεδιάστηκε έτσι ώστε να πληρεί τα παρακάτω χαρακτηριστικά:

- Δυνατότητα προθέρμανσης του δείγματος έτσι ώστε κατά την διάρκεια της ακτινοβόλησης να βρίσκεται στους 600-650°C.
- Παρακολούθηση και καταγραφή της επιφανειακής θερμοκρασίας σε πραγματικό χρόνο μέσω κατάλληλης διάταξης πυρομετρίας υπερέρυθρου.
- Χρήση κατάλληλων οπτικών εργαλείων έτσι ώστε η διαδικασία ευθυγράμμισης αλλά και η εστίαση της δέσμης να γίνεται ευκολότερα και μεγαλύτερη ακρίβεια. Το γεγονός ότι η δέσμη είναι στο υπέρυθρο, η ύπαρξη αρκετών οπτικών στοιχείων αλλά και το ότι το δείγμα βρίσκεται υπό γωνία και σε μεγάλη θερμοκρασία, καθιστούν την ευθυγράμμιση μια αρκετά απαιτητική διαδικασία.
- Δυνατότητα ηλεκτρονικής ρύθμισης (modulation) του παλμού (χρονική διάρκεια, ρυθμός επαναληψιμότητας καθώς και ρύθμιση της ισχύος).

Στη συνέχεια θα αναφερθούμε αναλυτικά στα ζητήματα αυτά και στον τρόπο με τον οποίο αντιμετωπίστηκαν, ξεκινώντας από την προθέρμανση του δισκίου, η οποία αποτέλεσε και την μεγαλύτερη πρόκληση στο σχεδιασμό. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, το πυρίτιο είναι πρακτικά διάφανο στα 10.6 μm σε θερμοκρασία δωματίου, αφού ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης είναι πολύ μικρός.

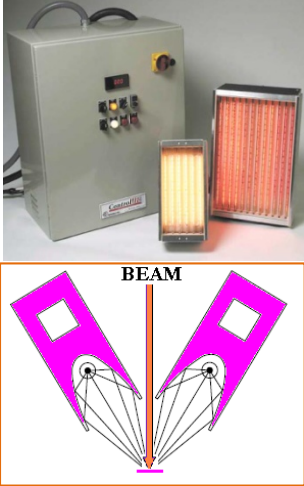

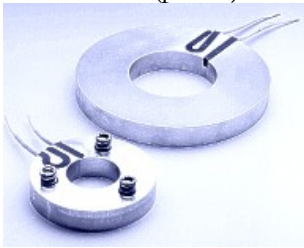


Εικόνα 7.2 Επιφανειακή θερμοκρασία T_f ως συνάρτηση της έντασης της προσπίπτουσας δέσμης laser I για διαφορετικές συγκεντρώσεις προσμίξεων n από τους Naukarinen et al.^{xiii}. Η διάρκεια παλμού του laser είναι 100 ns. Οι διακεκομμένες γραμμές αναφέρονται στην προθέρμανση του δείγματος στους 300°C, ενώ οι κανονικές γραμμές αναφέρονται στην περίπτωση που δεν γίνεται προθέρμανση. Η δραματική βελτίωση που επιτυγχάνεται είτε από την αύξηση της συγκέντρωσης, είτε από την προθέρμανση είναι προφανής.

Από την σχέση του Blomberg^{iv} προκύπτει η εντονότατη εξάρτηση του συντελεστή αυτού από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση των φορέων. Όσον αφορά το δεύτερο σκέλος, η ισχυρή επιφανειακή νόθευση που έχουν υποστεί τα υπό ακτινοβόληση δισκία, μειώνει σημαντικά το βάθος στο οποίο η οπτική ενέργεια μετατρέπεται σε θερμότητα. Σε κάθε περίπτωση όμως, και πάλι η απορρόφηση δεν είναι αρκούντως μεγάλη, και επομένως για την επίτευξη της επιθυμητής επιφανειακής θερμοκρασίας σε λίγα milliseconds, απαιτείται πάρα πολύ μεγάλη πυκνότητα ισχύος, η οποία δεν μπορεί πρακτικά να επιτευχθεί με το laser που έχουμε στην διάθεση μας. Οι K. Naukkarinen et al.¹³, κατέδειξαν την μείωση στην πυκνότητα ισχύος του laser που απαιτείται για την επίτευξη τήξης, όπως αυτή επιτυγχάνεται από την προθέρμανση του δείγματος στους 300°C. Αν και η συγκεκριμένη εργασία αναφέρεται στην ανόπτηση με laser διοξειδίου του άνθρακα σε καθυστάς nanosecond, τα συμπεράσματα αυτά ισχύουν φυσικά και στην περίπτωση της ανόπτησης σε χρόνους nanosecond. Η έντονη εξάρτηση της απαιτούμενης πυκνότητας ισχύος για την επίτευξη τήξης από την συγκέντρωση των προσμίξεων και από την θερμοκρασία προθέρμανσης αποτυπώνεται καθαρά στο γράφημα της εικόνας 7.2 από τους Naukkarinen et al.

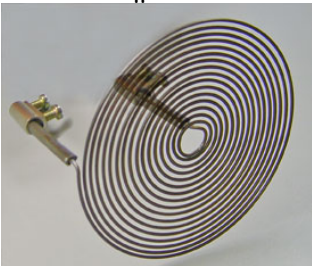

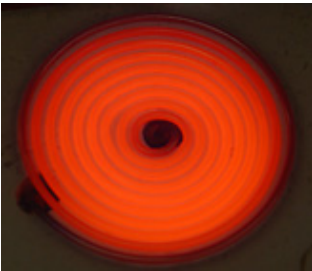
Τόσο οι G.K. Celler et al.¹⁴ όσο και οι Blomberg et al.^{iv} ενισχύουν το επιχειρήμα της προανόπτησης με στόχο την αύξηση της απορρόφησης με τον τελευταίο να προτείνει προθέρμανση σε ένα εύρος των 600-650°C. Και οι δυο μελέτες συντείνουν στο γεγονός ότι η προανόπτηση μειώνει την πιθανότητα πρόκλησης θερμικού σοκ στον όγκο του υλικού, γεγονός το οποίο θα μπορούσε να οδηγήσει στην εμφάνιση παραμορφώσεων ή ακόμα και μικρορωγμών στο πυρίτιο. Ακόμα, οι Y.Liu et al.¹⁵ πραγματοποιώντας μια θεωρητική μελέτη της αλληλεπίδρασης κατέληξαν ότι η βέλτιστη θερμοκρασία προανόπτησης είναι στους 600-670°C. Τέλος, οι P.H. Tsien et al.^{ix} που δεν προθέρμαναν το δείγμα κατά την ακτινοβόληση με CO₂ laser ισχύος 40 W, χρειάστηκαν έως και 90 sec για την επίτευξη 1065°C με αντίστοιχο φυσικά κόστος στην εμφάνιση διάχυσης. Με βάση την παραπάνω βιβλιογραφική μελέτη, ο σχεδιασμός της διάταξης ακτινοβόλησης ξεκίνησε από την δημιουργία μιας θερμαντικής μονάδας η οποία θα έπρεπε να είναι σε θέση να ανεβάσει την επιφανειακή θερμοκρασία του δείγματος από στους 600-650°C εντός λίγων λεπτών. Η βάση αυτή έπρεπε να κρατάει κάθετα το δείγμα χωρίς να έρχεται σε επαφή με το δείγμα κάποιο μεταλλικό της στέλεχος (για την αποφυγή επιμόλυνσης) και να έχει τη δυνατότητα στροφής αλλά και μετακίνησης προς όλους τους άξονες. Επιπλέον, το δείγμα πρέπει να μην έρχεται σε επαφή με υλικά που είναι καλοί αγωγοί θερμότητας για να μειωθούν φαινόμενα θερμικής διαφυγής. Τέλος, το ενδεχόμενο η δέσμη να διαπεράσει το δισκίο και να προκαλέσει καταστροφές σε οτιδήποτε υπάρχει από πίσω, έπρεπε να ληφθεί σοβαρά υπόψη. Οι παραπάνω απαιτήσεις μας έστρεψαν σε μια διεξοδική αναζήτηση λύσεων από την αγορά, είτε αυτές θα ήταν έτοιμες, είτε θα κατασκευάζονταν κατά παραγγελία (customized). Στον πίνακα 7.I συνοψίζονται οι κυριότερες ιδέες καθώς και τα μειονεκτήματά τα οποία οδήγησαν στη μη υιοθέτησή τους.

Πίνακας 7.1

| Είδος θερμαντικής διάταξη | Χαρακτηριστικά & Πλεονεκτήματα | Σημαντικότερα Μειονεκτήματα |
|--|---|---|
| <p>Υπέρυθροι ακτινοβολητές</p>  | <ul style="list-style-type: none"> • Διατάξεις που θερμαίνουν τον στόχο από απόσταση μέσω εκπομπής υπέρυθρης ακτινοβολίας • Δεν έρχονται σε επαφή με το δείγμα αποτρέποντας τον κίνδυνο επιμόλυνσης • Επίτευξη υψηλών θερμοκρασιών, ιδανικά έως και 870°C • Το δείγμα μπορεί να στηριχθεί μέσω κατάλληλων κλιπ, χωρίς να υπάρχει κίνδυνο καταστροφής σε περίπτωση που η δέση διαπεράσει το δείγμα • Ελευθερία περιστροφής / μετακίνησης προς κάθε κατεύθυνση | <ul style="list-style-type: none"> • Φτωχή σύζευξη της ακτινοβολίας σε αυτό το μήκος κύματος με το πυρίτιο • Αρκετά ογκώδης διάταξη, καθώς απαιτούνται δυο ακτινοβολητές μήκους 13cm έκαστος • Πολύ υψηλές τιμές απαιτούμενης ισχύος (minimum 500 W έκαστος) • Η εκπομπή σε IR θα προκαλέσει πιθανόν σημαντικά προβλήματα στη διαδικασία πυρομέτρησης που βασίζεται στην εκπομπή IR |
| <p>Κυλινδρικοί φούρνοι</p>  | <ul style="list-style-type: none"> • Επίτευξη πολύ υψηλών θερμοκρασιών, ιδανικά έως και 1200°C • Δυνατότητα πραγματοποίησης της ακτινοβόλησης σε αδρανές περιβάλλον μέσω ελεγχόμενης παροχής αζώτου, η οποία μειώνει φαινόμενα οξείδωσης στην επιφάνεια του υλικού • Αξιόπιστη και εύκολη ρύθμιση της επιθυμητής θερμοκρασίας | <ul style="list-style-type: none"> • Η εκπεμπόμενη από τα τοιχώματα IR ακτινοβολία θα προκαλέσει πρόβλημα στην πυρομέτρηση • Δυσκολία ευθυγράμμισης, αυξημένος κίνδυνος ανεπιθύμητης ανάκλασης • Μεγάλες διαστάσεις, ιδιαίτερα όσον αφορά το ύψος |
| <p>Εστίες (plates)</p>  | <ul style="list-style-type: none"> • Αξιόπιστη και εύκολη ρύθμιση της επιθυμητής θερμοκρασίας • Δυνατότητα μέτρησης της θερμοκρασίας μέσω ενσωματωμένου θερμοζεύγους • Εισάγονται μικρότερα σφάλματα στην διαδικασία πυρομέτρησης | <ul style="list-style-type: none"> • Επίτευξη χαμηλών θερμοκρασιών στην περίπτωση της διάταξης σχήματος δακτυλίου • Συνήθως είναι σχεδιασμένα για οριζόντια τοποθέτηση του δειγματος, προβληματική η κάθετη τοποθέτηση τους |

Αφού απορρίφθηκαν οι παραπάνω υλοποιήσεις, στραφήκαμε στον εξαρχής σχεδιασμό μιας θερμαντικής βάσης που θα μπορούσε να ικανοποιήσει τις βασικότερες απαιτήσεις. Πυρήνα αυτής της διάταξης αποτέλεσε ένας μικροθερμαντήρας σχήματος σπιράλ, που κατασκευάζεται από την MHI Inc. στις ΗΠΑ. Τα βασικά χαρακτηριστικά αλλά και τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα του συγκεκριμένου θερμαντήρα (με τον κωδικό MC-GAXP-130) περιγράφονται στον πίνακα 7.11:

Πίνακας 7.ΙΙ

| Αναπαράσταση | Βασικά χαρακτηριστικά | Σημαντικότερα πλεονεκτήματα |
|--|---|--|
| <p>Νημάτιο</p>  <p>Κεραμική βάση</p>  <p>Διάταξη σε λειτουργία</p>  | <ul style="list-style-type: none"> Χρήση σπιδράλ νηματίου πολύ υψηλής θερμικής αντοχής και αντίστασης 1 Ohm. Μέγιστη ισχύς λειτουργίας 130 Watt Το σπιδράλ νημάτιο ενσωματώνεται εντός κατάλληλης κεραμικής βάσης η οποία παρέχει την απαραίτητη θερμική μόνωση για την μείωση μετάδοσης της θερμότητας προς το περιβάλλον (βάση του θερμαντικού στοιχείου αλλά και αέρα), γεγονός που συμβάλλει τόσο στην αποτελεσματικότερη θέρμανση όσο και στην ασφάλεια της διάταξης. Διάμετρος σπιδράλ νηματίου 2'' Διάμετρος κεραμικής βάσης 2.5'' Απαιτείται τροφοδοτικό, το οποίο να είναι σε θέση να αποδώσει έως και 15 A. | <ul style="list-style-type: none"> Επίτευξη υψηλών θερμοκρασιών, ιδανικά έως και 1385⁰C σε σχετικά μικρούς χρόνους Πολύ μικρές διαστάσεις και βάρος. Μπορεί να ενσωματωθεί εύκολα σε μια βάση στήριξης σε κάθετη θέση Χαμηλή ισχύς λειτουργίας σε σχέση με άλλες θερμαντικές διατάξεις (130 W). Η χαμηλή τιμή αντίστασης βέβαια, απαιτεί τον τροφοδοσία με υψηλής έντασης ρεύμα (έως και 15 A) Η ύπαρξη της κεραμικής βάσης οδηγεί στη μείωση των φαινομένων θερμικής διαφυγής αλλά και σε ασφαλέστερες συνθήκες λειτουργίας Το δείγμα έρχεται σε επαφή με τη κεραμική βάση μειώνοντας την πιθανότητα επιμόλυνσης του. |

Αφού καταλήξαμε στην επιλογή της συγκεκριμένης λύσης, το επόμενο βήμα ήταν ο σχεδιασμός και η κατασκευή της βάσης στήριξης καθώς και η προμήθεια του τροφοδοτικού. Ο σχεδιασμός έγινε με βάση τις παρακάτω κατευθύνσεις:

- Δυνατότητα περιστροφής της βάσης και μικρομετρικής μετατόπισης της, και προς τους τρεις άξονες. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιήσαμε περιστρεφόμενη βάση και τρεις βερνιέρους με ελάχιστο βήμα 50 μm από την εταιρία STANDA.
- Ελαχιστοποίηση φαινομένων θερμικής διαστολής για την αποφυγή παραμορφώσεων της διάταξης. Αυτό έγινε εφικτό μέσω της χρησιμοποίησης αλουμινίου αλλά και της κεραμικής θερμομονωτικής βάσης.
- Αποτελεσματική στήριξη του δείγματος σε κάθετη θέση, μέσω κατάλληλων κλιπ τα οποία έρχονται σε επαφή με ελάχιστο τμήμα της επιφάνειας του δισκίου.
- Η όλη διάταξη έχει σχεδιαστεί ώστε να ολισθαίνει πάνω σε μια βαθμονομημένη ράγα για την διευκόλυνση της διαδικασίας ευθυγράμμισης
- Τέλος, έχει ληφθεί κάθε μέριμνα ώστε η λειτουργία της διάταξης να είναι κατά το δυνατόν ασφαλέστερη, τόσο από άποψη πιθανών ηλεκτρικών κινδύνων όσο και αυτών που απορρέουν από το γεγονός ότι αναπτύσσονται πολύ υψηλές θερμοκρασίες εντός αυτής (έως και 1000⁰C).

Όσον αφορά την κατασκευή απευθυνθήκαμε στον εξειδικευμένο μηχανουργό τον κ. Δαβίδη ο οποίος κατάφερε μέσα σε σύντομο χρονικό διάστημα να δημιουργήσει μια ιδιαίτερα χρηστική διάταξη που ικανοποιούσε πλήρως όλες τις προαναφερθείσες απαιτήσεις. Το τελικό αποτέλεσμα, εμφανίζεται στις εικόνες 7.3 α έως και δ:



Εικόνα 7.3 α) πλάγια β) οπίσθια γ) εμπρόσθια άποψη της θερμαντικής βάσης που χρησιμοποιήθηκε. Διακρίνονται εκτός των άλλων το σπιδράλ νημάτιο, η κεραμική βάση στήριξης του και τα κλιπ που συγκρατούν το δείγμα και δ) το τροφοδοτικό τύπου Siemens.

Εκτεταμένες δοκιμές πυρομετρίας, κατέδειξαν την δυνατότητα θέρμανσης του προσαρτημένου δοκιμίου στους 650°C σε λιγότερο από 10 min. Ένα από τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά της διάταξης είναι η επίτευξη θερμικής ισορροπίας χωρίς να υπάρχουν σημαντικές ταλαντώσεις της θερμοκρασίας γύρω από την επιθυμητή τιμή. Αν και αναπτύσσονται υψηλές θερμοκρασίες εντός της διάταξης, η κατάλληλη θερμομόνωση καθιστά αρκετά ασφαλή την εργασία κοντά σε αυτή. Τέλος η χρήση των κλιπ επιτρέπει την εύκολη φόρτωση και εκφόρτωση των δειγμάτων από την βάση, έτσι ώστε να μπορούμε να βάζουμε δείγματα ενώ η διάταξη είναι σε λειτουργία, μειώνοντας έτσι σημαντικά τον χρόνο που απαιτείται για την θέρμανση του δισκίου. Με τον τρόπο αυτό ο χρόνος μεταξύ των ακτινοβολήσεων μπορεί να μειωθεί στα 3-4 min σε σχέση με τα 2015- min που θα απαιτούντο στη περίπτωση που θα περιμέναμε τη διάταξη να κρυώσει και να ξαναζεσταθεί.

Στη συνέχεια θα περιγράψουμε το βασικότερο στοιχείο της διάταξης ακτινοβόλησης το οποίο δεν θα μπορούσε να είναι τίποτα άλλο από αυτό καθεαυτό το laser. Πρόκειται για ένα CO₂ σφραγιστού τύπου ML70 της Αγγλικής εταιρίας Millennium. Τα βασικά χαρακτηριστικά του συνοψίζονται στον πίνακα 7.III:

Πίνακας 7.III

| Ιδιότητα | Τιμή |
|----------------------|----------------|
| Ισχύς εξόδου | 70 W |
| Εύρος λειτουργίας | 5-70 W |
| Σταθερότητα ισχύος | <5% |
| TEM ₀₀ | <1.1 |
| Διάμετρος δέσμης | 6.0 mm |
| Απόκλιση | 2.6 mrad |
| Τροφοδοσία | 230 V : 5A max |
| Laser On/Off | +5 V analogue |
| Ρύθμιση ισχύος Laser | 0-5 V analogue |
| Τύπος ψύξης | Υδροψυκτο |

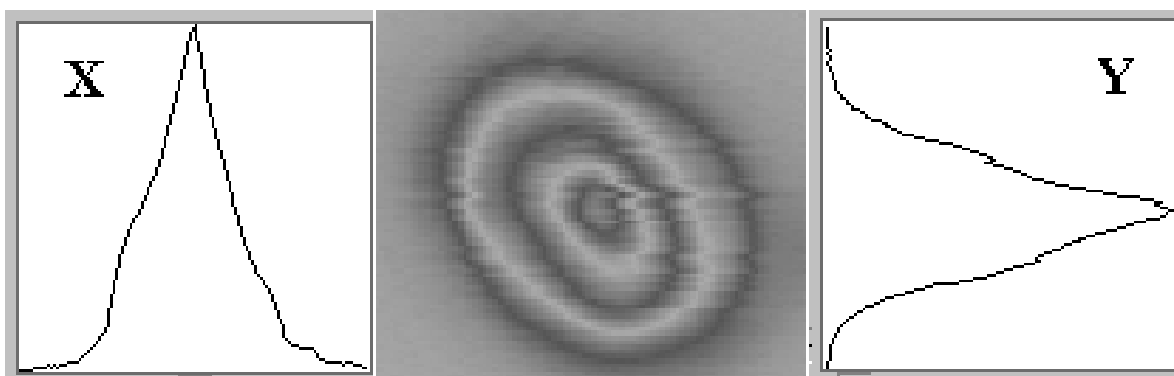
Ως διακόπτη λειτουργίας ON-OFF του laser αλλά και για την ρύθμιση της διάρκειας της ακτινοβόλησης, χρησιμοποιούμε δυο διαφορετικές διατάξεις ανάλογα με τον χρόνο διάρκειας του παλμού, οι οποίες παρέχουν την απαιτούμενη τάση λειτουργίας (αναλογικό σήμα 5 V) υπό μορφή προγραμματιζόμενων κύκλων λειτουργίας (duty cycles). Σε αυτούς, η παρεχόμενη τάση είναι 0 V όταν το laser δεν ακτινοβολεί και 5 V για ένα προκαθορισμένο διάστημα (που αποτελεί και την διάρκεια του παλμού) στο οποίο έχουμε εκπομπή. Οι διατάξεις αυτές είναι συνδεδεμένες με το τροφοδοτικό του laser (εικ. 7.4.1). Κατά την διάρκεια των πρώτων ακτινοβολήσεων όπου οι επιθυμητές διάρκειες παλμού ήταν σχετικά μεγάλες (20 έως και 100 ms), χρησιμοποιήθηκε μια προγραμματιζόμενη γεννήτρια τάσης τύπου 230 της Keithley (εικ. 7.4.2). Επειδή η τελευταία δεν ήταν σε θέση να παρέχει τετραγωνικούς παλμούς με διάρκεια κάτω από 10 ms, για τις ακτινοβολήσεις σε μικρούς χρόνους, χρησιμοποιήθηκε μια γεννήτρια παλμών τύπου 33120A της Agilent (εικ. 7.4.4). Η διάταξη αυτή έχει μέγιστη συχνότητα 15MHz και επομένως είναι με το παραπάνω ικανή να δημιουργήσει τους επιθυμητές διάρκειας παλμούς. Σε κάθε περίπτωση, το σήμα ON-OFF προτού διέρθει στο τροφοδοτικό του laser, διέρχεται μέσω ενός παλμογράφου (εικ. 7.4.5) για να εξακριβωθεί εάν πληροί τα απαιτούμενα χαρακτηριστικά.



Εικόνα 7.4 Ηλεκτρονικές διατάξεις – παρελκόμενα του laser: 1. τροφοδοτικό 2. προγραμματιζόμενη γεννήτρια τάσης τύπου 230 της Keithley 3. προγραμματιζόμενο τροφοδοτικό τάσης tti QL355P, 4. γεννήτρια παλμών τύπου Agilent 33120A, 5. παλμογράφος

Όσον αφορά την ρύθμιση της ισχύος του laser, αυτή επιτυγχάνεται μέσω ενός προγραμματιζόμενου τροφοδοτικού τάσης QL355P της tti (εικ. 7.4.3), το οποίο παρέχει την δυνατότητα παροχής σταθερής τάσης (με ελάχιστο εύρος απόκλισης), γεγονός ιδιαίτερα σημαντικό, καθώς οποιαδήποτε αστάθεια της παρεχόμενης τάσης, θα οδηγούσε σε αντιστοιχες αυξομειώσεις της ισχύος εξόδου του laser. Επιπλέον, παρέχει τη δυνατότητα ρύθμισης της τάσης με ακρίβεια 1mV. Η τάση εισόδου του laser είναι στο εύρος 0.6 έως και 4.7 V, η οποία αντιστοιχεί σε ένα εύρος τιμών της ισχύος εξόδου της τάξης των 15 με 67 W. Με την βοήθεια ισχυόμετρου αντιστοιχήθηκε η τάση εισόδου από τον τροφοδοτικό QL 355P με την ισχύ εξόδου, σύμφωνα με το διάγραμμα 7.11. Παρατηρείται η παρουσία κόρου πρακτικά από τα 4 V και μετά. Η τάση εξόδου του laser εξαρτάται από την θερμοκρασία του μείγματος ψύξης. Οι ισχύς εξόδου που παριστάνονται στο διάγραμμα μετρήθηκαν για θερμοκρασία δείγματος στους 15.5°C, τιμή που ανήκει στο θερμοκρασιακό εύρος βέλτιστης λειτουργίας.

Τα laser CO₂ σφραγισμένου τύπου προσφέρουν το πλεονέκτημα ότι το αέριο μείγμα ανακυκλώνεται, οπότε ο χρόνος ανατροφοδότησης αυξάνεται δραστικά. Δυστυχώς, το συγκεκριμένο laser παρουσίασε σημαντικά προβλήματα από κατασκευής, τα οποία οδήγησαν στην επιστροφή του στην Αγγλία τρεις φορές για επισκευή. Πιο συγκεκριμένα, την πρώτη φορά υπήρχε διαρροή στον εξωτερικό υαλοσωλήνα μέσα στον οποίο κυκλοφορεί το ψυκτικό μείγμα, με αποτέλεσμα την σύντομη υποβάθμιση της απόδοσης του laser, η οποία ποτέ δεν ξεπέρασε το 50% της ονομαστικής τιμής. Επιπλέον, η καταγραφή του προφίλ της χωρικής κατανομής της δέσμης με χρήση ειδικού προφίλερόμετρου κατέδειξε ότι το σχήμα της δέσμης ήταν ακανόνιστα ελλειπτικό αντί για κυκλικό και ότι αντί να έχει Γκαουσιανή μορφή, ήταν τύπου ακίδας, γεγονός το οποίο θα μπορούσε να αποδοθεί σε απευθυγράμμιση του ενός εκ των δύο οπτικών αντηχείων. Στην εικόνα 7.5 δίνεται η χωρική κατανομή της δέσμης, όπως αυτή προέκυψε μέσω μετρήσεων με κατάλληλο όργανο (προφίλερόμετρο).

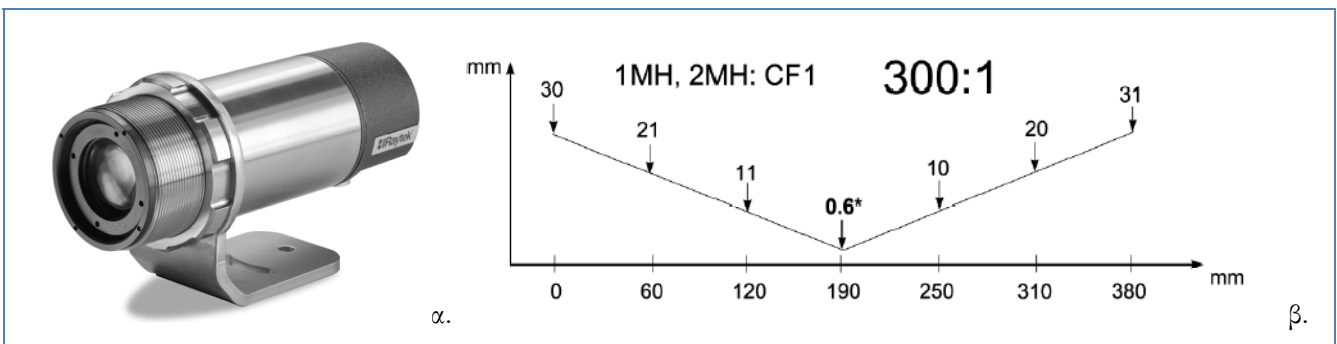


Εικόνα 7.1 Χωρική κατανομή της πυκνότητας ισχύος του laser κατά την πρώτη παραλαβή του: α) κατά τη διεύθυνση x, β) χωρική κατανομή του σποτ και γ) κατά τη διεύθυνση y. Το ελλειπτικό σχήμα του σποτ αλλά και η κατανομή τύπου ακίδας (spike) είναι προφανή

Εξαιτίας των προβλημάτων αυτών ο υαλοσωλήνας του laser στάλθηκε στην κατασκευάστρια εταιρία. Όταν επισκευάστηκε και επέστρεψε στην Ελλάδα η ενδελεχής εξέταση του έδειξε ότι υπήρχε ρωγμή στον εσωτερικό υαλοσωλήνα (ο οποίος περιέχει το αέριο μείγμα και τα ηλεκτρόδια 18 kV). Σε περίπτωση που δεν είχε παρατηρηθεί αυτή η ρωγμή και είχε κυκλοφορήσει το ψυκτικό υγρό, ανάμεσα στους δυο υαλοσωλήνες τότε το πιθανότερο είναι να υπήρχε εισροή νερού στον

σωλήνα εικένωσης, με ότι κίνδυνο συνεπάγεται αυτό. Φυσικά το laser συσκευάστηκε ξανά και στάλθηκε στην Αγγλία για νέα επισκευή. Τέλος, επανέλεγχος από ειδικευμένο τεχνικό προσωπικό του τροφοδοτικού του laser φανέρωσε νέα προβλήματα με αποτέλεσμα να απαιτηθεί η αντικατάστασή του. Τελικά, ύστερα από συνολικά περίπου 10 μήνες, τόσο ο υαλοσωλήνας όσο και το τροφοδοτικό του laser επέστρεψαν στην Ελλάδα, και αφού ο ενδεδειγμένος έλεγχος δεν φανέρωσε κάτι ανησυχητικό, πλέον ήταν έτοιμο να ενσωματωθεί στην διάταξη ακτινοβόλησης.

Στο διάστημα αυτό αγοράστηκαν και δοκιμάστηκαν όλα τα υπόλοιπα τμήματα της διάταξης ακτινοβόλησης, με κυριότερο το πυρόμετρο. Όπως προαναφέραμε, το ζήτημα της διεξαγωγής πυρομετρίας σε πραγματικό χρόνο είναι κομβικής σημασίας, τόσο για τον έλεγχο της διαδικασίας ακτινοβόλησης όσο και για την σύγκριση με τα αποτελέσματα που θα προέκυπταν από την προσομοίωση όσον αφορά την μελέτη της επίδρασης της ακτινοβολίας στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής του πυριτίου. Λόγω της ακτινοβόλησης αλλά και του κινδύνου επιμόλυνσης του δείγματος, η μέτρηση της θερμοκρασίας έπρεπε να γίνεται από απόσταση. Επιπλέον, οι εξαιρετικά μικροί χαρακτηριστικοί χρόνοι της αλληλεπίδρασης καθιστούν απαγορευτική την χρήση οποιαδήποτε διάταξης που να περιέχει θερμοζεύγος, καθώς τα τελευταία παρουσιάζουν σημαντική θερμική αδράνεια. Επομένως, η μόνη αξιόπιστη λύση που θα μπορούσε να ανταποκριθεί με σχετική επιτυχία στις απαιτήσεις αυτές ήταν η πυρομετρία υπέρυθρου, η οποία βασίζεται στην καταγραφή της υπέρυθρης ακτινοβολίας που εκπέμπει οποιοδήποτε σώμα βρίσκεται σε θερμοκρασία πάνω από το απόλυτο μηδέν, μέσω ενός κατάλληλου συστήματος φακών. Στη συνέχεια και μέσω κατάλληλων αναγωγών και κανονικοποιήσεων με βάση πρότυπα φάσματα εκπομπής στο υπέρυθρο¹⁶, το πυρόμετρο εμφανίζει σε πραγματικό χρόνο την θερμοκρασία του τμήματος της επιφάνειας πάνω στο οποίο εστιάζει. Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι η καταγραφή σε πραγματικό χρόνο της θερμοκρασίας του πυριτίου κατά την διάρκεια υπερτάσεων ανοπτήσεων αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα που αντιμετωπίζει η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής κατά την κατασκευή των διατάξεων CMOS. Αρκετές τεχνικές έχουν αναπτυχθεί^{17 18} μερικές από τις οποίες ενσωματώνουν ιδιαίτερα εξεζητημένες τεχνολογίες (virtual metrology). Στην περίπτωση μας φυσικά, καταφύγαμε σε σαφώς πιο απλές λύσεις χρησιμοποιώντας ένα πυρόμετρο υπέρυθρου τύπου Marathon MM της Raytek. (Βλ. εικόνα 7.6 α).



Εικόνα 7.6 Το πυρόμετρο υπέρυθρου τύπου Marathon της Raytek που χρησιμοποιήθηκε και β) εξάρτηση του σποτ στο οποίο εστιάζει το σύστημα φακών του πυρόμετρου για να διεξάγει μέτρηση από την απόσταση του δείγματος από τον φακό. Η απόσταση για την λήψη δειγματοληψίας από την ελάχιστη δυνατή περιοχή, είναι 190 mm.

Το πυρόμετρο εδράζεται σε μια ειδική βάση μεταβλητού ύψους με τον φακό του να απέχει 19 cm από το δοκίμιο και υπό γωνία 15⁰, η οποία είναι αρκετά μικρή για να λαμβάνεται αξιόπιστη μέτρηση σύμφωνα με τις οδηγίες της κατασκευάστριας εταιρίας (Εικ. 7.6.β). Ο ενσωματωμένος καταδείκτης laser επιτρέπει την ευθυγράμμιση και την εστίαση του στο σημείο πρόσπτωσης της πρωτεύουσας δέσμης laser. Τέλος, μέσω κατάλληλης κάρτας και μετασχηματιστών σήματος, το πυρόμετρο επικοινωνεί με ηλεκτρονικό υπολογιστή. Έτσι παρέχεται η δυνατότητα στο χρήστη να καταγράφει ηλεκτρονικά την εξέλιξη της θερμοκρασίας.

Ο αρχικός σχεδιασμός των ακτινοβολήσεων προέβλεπε την ακτινοβόληση σε ένα σποτ διαμέτρου 2 με 3 mm για χρόνους 20 έως και 100 ms. Καθώς το ελάχιστο σποτ στο οποίο εστιάζει το πυρόμετρο για να πάρει μέτρηση είναι 0.6 mm, όπως φαίνεται και στο σχήμα 7.6 β, είναι εφικτή η εστίαση του στο κέντρο της δέσμης έτσι ώστε να λαμβάνει ενδείξεις από την κεντρική περιοχή, ενώ και οι χαρακτηριστικοί χρόνοι είναι αρκετά μεγάλοι για να πραγματοποιηθεί μέτρηση. Όμως, όπως θα δούμε και στη συνέχεια, τέτοιοι χαρακτηριστικοί χρόνοι ανόπτησης οδηγούν σε σημαντική διάχυση. Έτσι αναγκάζομαστε να εστιάσουμε την δέσμη σε μικρότερη περιοχή πάνω στο πυρίτιο, αυξάνοντας έτσι την πυκνότητα ισχύος και μειώνοντας δραστικά τον απαιτούμενο χρόνο για την επίτευξη των επιθυμητών θερμοκρασιών. Δυστυχώς όμως η πυρομέτρηση μιας τόσο γρήγορης διαδικασίας η οποία λαμβάνει χώρα σε τόσο μικρό εμβαδό, παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες. Καταρχάς ο χρόνος έκθεσης είναι θεωρητικά 1 ms, αλλά στην πραγματικότητα υπάρχει σημαντική υστέρηση, η οποία εμποδίζει την μέτρηση της θερμοκρασίας σε χρόνους κάτω από 8-10 ms. Επιπλέον, η ελάχιστη διάμετρος της περιοχής στην οποία μπορεί να ληφθεί μέτρηση είναι 0.6 mm. Αυτή είναι η διάμετρος της ελάχιστης περιοχής, η οποία είναι απαραίτητη για την διεξαγωγή αξιόπιστης πυρομέτρησης. Ανάλογα με την επιθυμητή πυκνότητα ενέργειας, η διάμετρος του σποτ του laser, επάνω στο δισκίο πυρίτιο είναι από 1.1 έως 2 mm. Αν τώρα λάβουμε υπόψη ότι η κατανομή της πυκνότητας ισχύος των laser διοξειδίου του άνθρακα είναι Γκαουσιανή, η επιφανειακή θερμοκρασία του πυριτίου στην περιοχή μέτρησης παρουσιάζει σημαντικές διακυμάνσεις, οπότε ακόμα και στην καλύτερη περίπτωση, το πυρόμετρο θα μετράει την μέση εκπομπή (και επομένως θερμοκρασία) και όχι την πραγματική. Επομένως, υπεισέρχεται σημαντικό σφάλμα στην μέτρηση της θερμοκρασίας στην ακτινοβολούμενη περιοχή το οποίο αυξάνεται ελαττωμένης της διαμέτρου του σποτ. Τέλος, υπάρχει ένα γενικότερο θέμα για το κατά πόσον η μετρούμενη συνιστώσα της εκπνεψιμότητας αντιστοιχεί στο υπό εξέταση τμήμα ή υπάρχει και επίδραση από το περιβάλλον. Έχουν προταθεί κάποιες λύσεις σε βιομηχανικό επίπεδο, οι οποίες δεν θα ήταν δυνατόν να εφαρμοστούν στην παρούσα πειραματική διάταξη. Ο συνδυασμός των παραπάνω παραγόντων μας αναγκάζει να είμαστε επιφυλακτικοί με τα δεδομένα της πυρομέτρησης, για τις περιπτώσεις ακτινοβόλησης με διάρκεια κάτω από 10 ms.

Καθώς το CO₂ laser που χρησιμοποιείται είναι υψηλής ισχύος, επιλέχθηκε από την κατασκευάστρια εταιρία, η λύση της υδροψύξης για την απαγωγή της θερμότητας που αναπτύσσεται στον εσωτερικό σωλήνα του laser (η οποία μπορεί να φτάσει και τα 380W). Έτσι, ο σωλήνας στον οποίο γίνεται η ηλεκτρική εκκένωση, περιβάλλεται από ένα δεύτερο σωλήνα μέσα στον οποίο κυκλοφορεί, υπό πίεση, ψυκτικό υγρό το οποίο απάγει δια της επαφής την θερμότητα από τον εσωτερικό σωλήνα. Το υγρό αυτό είναι ένα μείγμα απιονισμένου νερού και αιθυλικής γλυκόλης σε αναλογία 80:20. Για την κυκλοφορία του μείγματος, αλλά και κυρίως για την διατήρηση του στην επιθυμητή θερμοκρασία χρησιμοποιείται ένας κυκλοφορητής – υδροψύκτης TAE eno M10 της

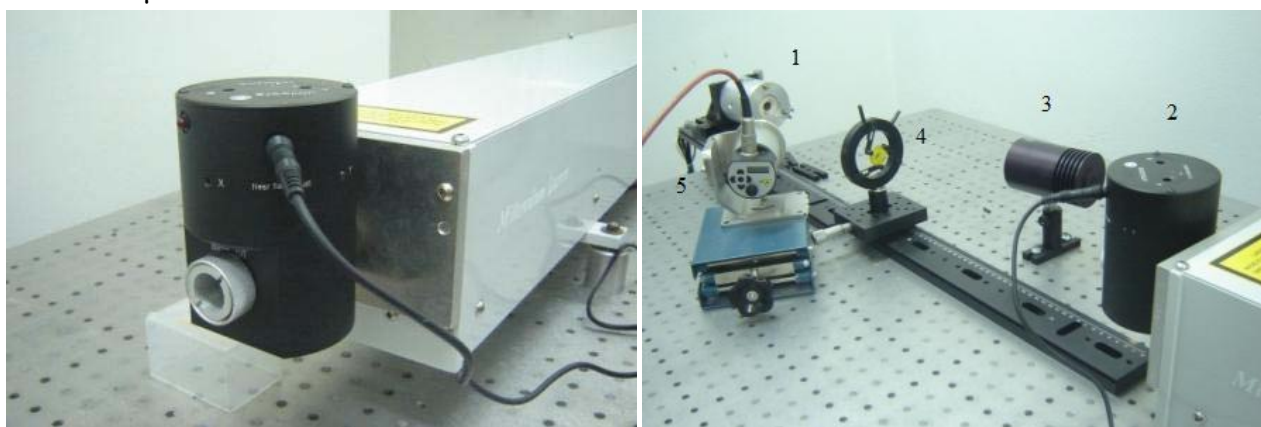
ΜΤΑ. Ο κυκλοφορητής αυτός είναι ικανός να κυκλοφορεί μεγάλες ποσότητες υγρού, ενώ ταυτόχρονα είναι δυνατή η ρύθμιση της θερμοκρασίας του με ακρίβεια 0.2°C. Επειδή η ροή του υγρού μέσα στον σωλήνα του laser έπρεπε να είναι 1.5 lit/min και η ελάχιστη παροχή του κυκλοφορητή είναι 7.0 lit/min, χρειάστηκε να γίνει μια παράκαμψη μέσω ενός κατάλληλου συστήματος σωληνώσεων, ώστε να επιστρέφει το πλεονάζων υγρό στο δοχείο του κυκλοφορητή, αντί αυτό να εισέρχεται στο laser. Στις εικόνες 7.7 α και β., παρουσιάζονται ο κυκλοφορητής και το σύστημα παράκαμψης που χρησιμοποιήθηκαν αντίστοιχα, ενώ στην 7.7 γ., μία κάτοψη των εσωτερικών σωλήνων μέσω των οποίων ρέει το μείγμα, με το καπάκι του laser ανοιγμένο.

Το τελευταίο σημαντικό υποσύστημα της διάταξης ακτινοβόλησης αποτελείται από οπτικά στοιχεία τα οποία χρησιμεύουν για την ευθυγράμμιση και την εστίαση της δέσμης, αλλά και την στόχευση του δείγματος. Ένα σύστημα, του οποίου η ενσωμάτωση στην διάταξη διευκόλυνε σε μεγάλο βαθμό την διαδικασία της ακτινοβόλησης, ήταν ο ομοαξονικός προβολέας δέσμης (beam injector) της Ulo Optics (εικ. 7.8 α). Ο προβολέας δέσμης, προσαρμόζεται στην έξοδο του laser και προβάλλει ομοαξονικά επί της υπεριώδους δέσμης, μια δέσμη στο κόκκινο. Εάν οι δέσμες ευθυγραμμιστούν κατάλληλα, τότε προκύπτει μια ορατή δέσμη, αντί της κανονικής που είναι άορατη με αποτέλεσμα η διαδικασία της ευθυγράμμισης να καθίσταται πιο εύκολη, αλλά και πιο ακριβής. Επιπλέον, κρατώντας την ορατή δέσμη (χωρίς να λειτουργεί το laser), μπορούμε με ασφάλεια να σηματοδέψουμε το δείγμα – στόχο, αλλά και το σποτ του πυρόμετρου. Με τον τρόπο αυτό, είναι δυνατή η ευθυγράμμιση του σποτ της δέσμης του laser, με το σποτ που αποτελεί το κέντρο της περιοχής δειγματοληψίας του πυρομέτρου, ακριβώς στην περιοχή του δείγματος που πρόκειται να γίνει η ακτινοβόληση. Επειδή η ανόπτηση πραγματοποιείται σε καθεστώς μη τήξης, δεν παρατηρούνται ορατές μεταβολές στην ανακλαστικότητα της ανοπτηθείσας περιοχής. Επομένως, για να είναι δυνατός ο προσδιορισμός της ακτινοβολημένης περιοχής, γεγονός κομβικής σημασίας κατά τον μορφολογικό και ηλεκτρικό χαρακτηρισμό της επαφής, της ακτινοβόλησης προηγείται χάραξη κυκλικού σποτ στην επιφάνεια του δείγματος, με διάμετρο μίσο χιλιοστό μεγαλύτερη από αυτή της δέσμης. Ζητούμενο λοιπόν είναι, το σποτ της δέσμης και του πυρόμετρου να βρίσκονται στο κέντρο της χαραγμένου κύκλου, έτσι ώστε να γίνεται η δειγματοληψία του πυρόμετρου από το κέντρο της γκαουσιανής κατανομής της πυκνότητας ισχύος. Για την εστίαση της δέσμης του laser στην επιθυμητή διάμετρο πάνω στο δείγμα φροντίζει ένας φακός ZnSe, εστιακής απόστασης $f=254$ mm, ο οποίος για την διευκόλυνση της διαδικασίας ευθυγράμμισης μπορεί να ολισθαίνει επί μιας τροχιάς, σταθερά προσαρτημένης στην οπτική τράπεζα (7.8 β). Πέραν της τυπικής μεθόδου υπολογισμού της διαμέτρου του σποτ μέσω ακτινοβόλησης σε ειδικό χαρτί, προηγήθηκε υπολογισμός της θέσης του φακού σε σχέση με το δείγμα, αλλά και την έξοδο του laser, μέσω κατάλληλων τύπων. Με τον τρόπο αυτό έχουμε μια αρχική θεωρητική θέση, και στη συνέχεια πραγματοποιώντας πολύ μικρές μετατοπίσεις του φακού μπορούμε να επιτύχουμε την επιθυμητή εστίαση με μεγάλο βαθμό ακρίβειας. Ο φακός αυτός είναι ειδικά κατασκευασμένος για να εστιάζει την δέσμη του CO₂, ανακλώντας πάρα πολύ μικρό ποσοστό της (<0.5%). Επίσης, για λόγους ασφαλείας είναι στραμμένος υπό μικρή γωνία ως προς την προσπίπτουσα δέσμη για την αποφυγή επιστροφής της πίσω στο laser. Ακριβώς για τον ίδιο σκοπό, και η βάση που συγκρατεί το δείγμα είναι και αυτή υπό μικρή γωνία σε σχέση με την προσπίπτουσα.



Εικόνα 7.7 Σύστημα υδρόψυξης του laser: α) κυκλοφορητής ΤΑΕ ενο M10 της MTA, β) σύστημα παράκαμψης του πλεονάζοντος ψυκτικού μείγματος και γ) άποψη του εσωτερικού του laser, στην οποία διακρίνεται εκτός των άλλων και το σύστημα σωληνώσεων για την κυκλοφορία του μείγματος

Τέλος, για την ασφαλή απορρόφηση της ανακλώμενης δέσμης χρησιμοποιείται μια κατάλληλη διάταξη που λειτουργεί ως μέλαν σώμα και τοποθετείται στην πορεία της ανακλώμενης συνιστώσας. Η διάταξη αυτή ονομάζεται καταβόθρα δέσμης (beam dump) και απεικονίζεται στην εικόνα 7.8 β2.

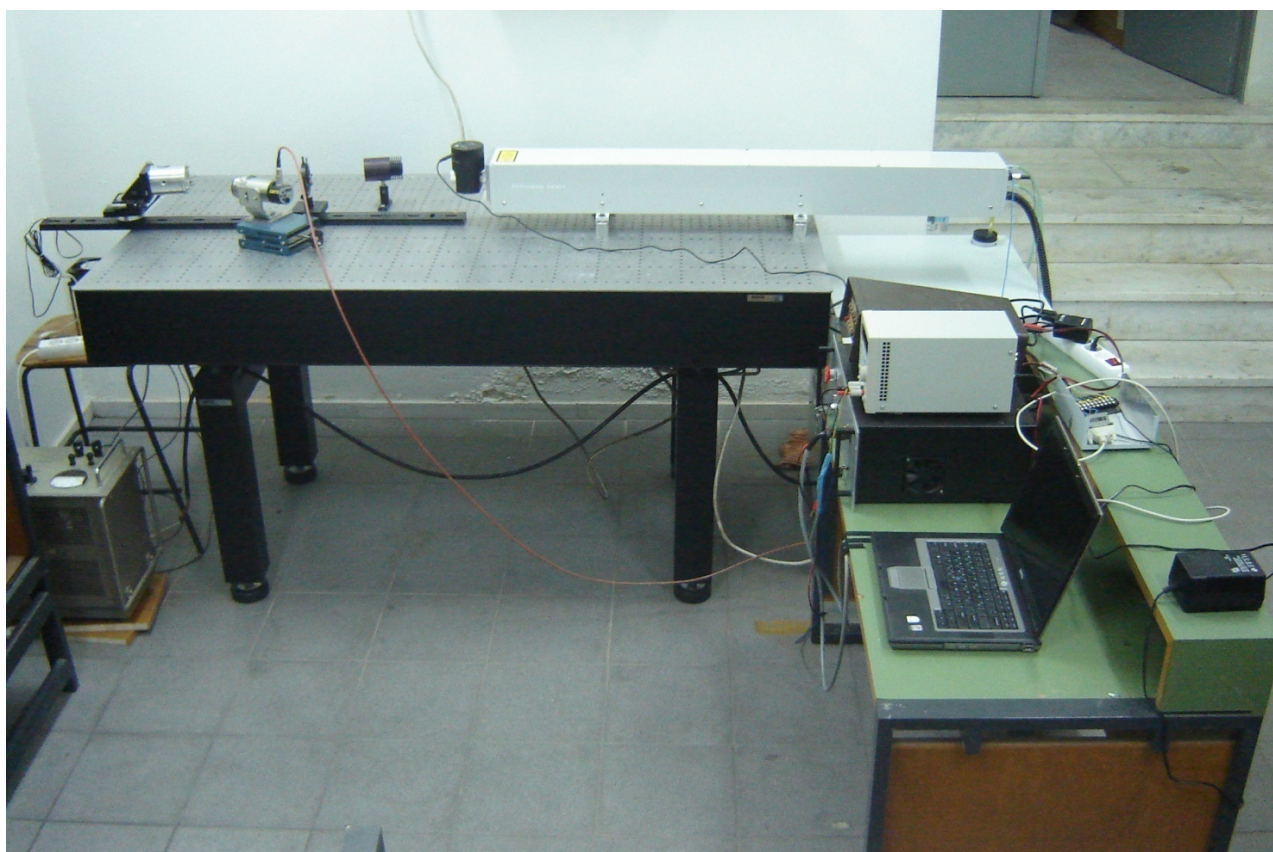


Εικόνα 7.8 α) Ομοαξονικός προβολέας δέσμης αναρτημένος επί του laser, β) 1. Θερμαντική βάση, 2. Ομοαξονικός προβολέας δέσμης (Beam Injector), 3. Καταβόθρα δέσμης (Beam dump), 4. Φακός ZnSe και 5. Πυρόμετρο υπέρυθρου

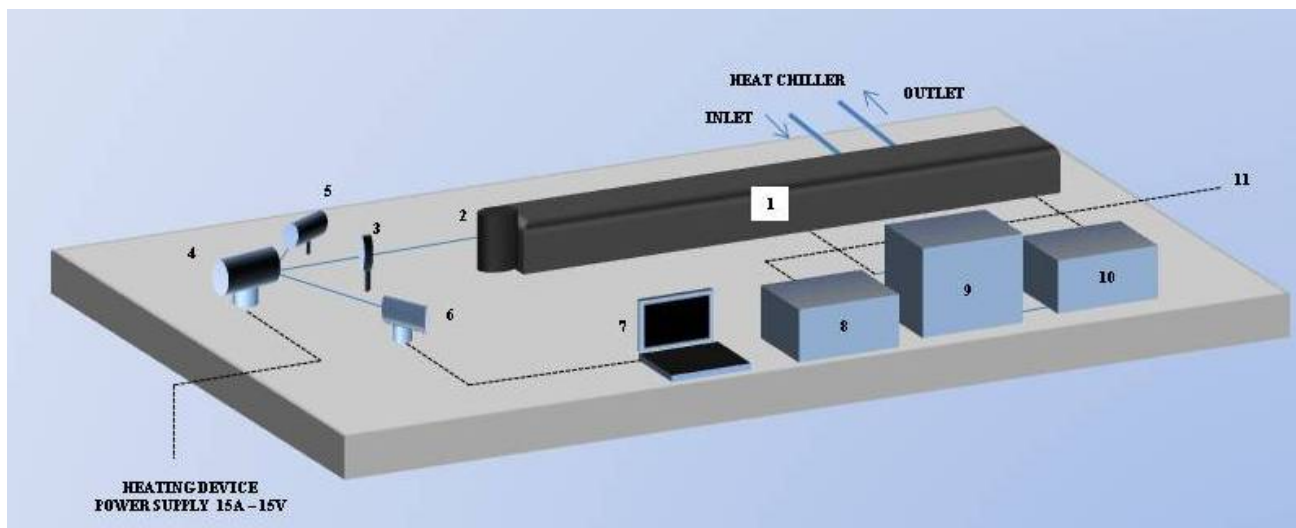
Αφού παρουσιάστηκαν τα σημαντικότερα υποσυστήματα της διάταξης ακτινοβόλησης, θα δώσουμε μια συνοπτική περιγραφή της λειτουργίας της. Με τη βοήθεια μιας συστοιχίας ηλεκτρονικών που είναι συνδεδεμένα με το τροφοδοτικό του laser, είμαστε σε θέση να μεταβάλλουμε κατά το δοκούν τα βασικά χαρακτηριστικά του παλμού (διάρκεια και ισχύ). Της ακτινοβόλησης προηγείται πάντοτε ο έλεγχος της ισχύος του laser με τη βοήθεια κατάλληλης για το μήκος κύματος, μετρητικής διάταξης, καθώς επίσης και της διαμέτρου της δέσμης πάνω στο δείγμα. Δύο ακόμα παράμετροι που εξετάζονται είναι η θερμοκρασία του νερού του κυκλοφορητή και η διάρκεια του εξερχόμενου παλμού (με την βοήθεια του παλμογράφου). Στη συνέχεια τοποθετούμε το δείγμα πάνω στην θερμαντική βάση, προσέχοντας το σποτ που εξέρχεται από τον ομοαξονικό προβολέα δέσμης να βρίσκεται στο κέντρο της περιχαραγμένης περιοχής. Μόλις γίνει αυτό,

θέτουμε σε λειτουργία την θερμαντική βάση, και εστιάζουμε το πυρόμετρο έτσι ώστε το σποτ του να συμπίπτει με το σποτ του ομοαξονικού προβολέα δέσμης. Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι το πυρόμετρο είναι σταθερά πακτωμένο σε μια θέση που μέσω δοκιμών έχει βρεθεί ότι είναι η κατάλληλη για την διεξαγωγή μετρήσεων με βάση την δεδομένη θέση του δείγματος πάνω στην θερμαντική βάση, οπότε απαιτούνται μονάχα πολύ μικρές μετατοπίσεις. Μόλις η ένδειξη του πυρόμετρου στην οθόνη του υπολογιστή φτάσει την επιθυμητή θερμοκρασία (600 ή 650°C), τότε προβαίνουμε στην ακτινοβόληση του. Το σύστημα είναι κατασκευασμένο ώστε η ακτινοβόληση να μπορεί να διεξαχθεί από ένα μόνο άτομο, αλλά ιδανικά πρέπει να βρίσκονται δυο στον χώρο έτσι ώστε να ελέγχονται όλες οι παράμετροι αποτελεσματικά. Στις εικόνες 7.9 και 7.10 παρουσιάζονται μια φωτογραφία, αλλά και μια σχηματική αναπαράσταση της διάταξης αντιστοίχως:

:



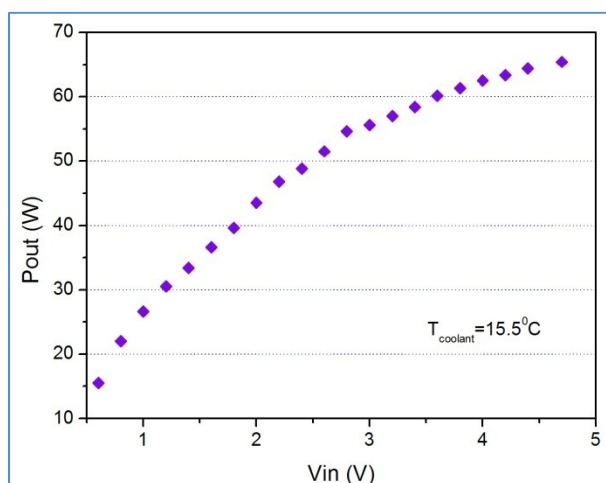
Εικόνα 7.9 Η διάταξη CO₂ laser. Διακρίνονται το laser, η θερμαντική βάση, το πυρόμετρο, τα ηλεκτρονικά τους, ο ομοαξονικός προβολέας δέσμης (beam injector), η καταβόθρα δέσμης (beam dump) και στο βάθος η ψυκτική διάταξη.



Εικόνα 7.10 Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης ακτινοβόλησης με όλα τα παρελκόμενα. 1. CO₂ laser, 2. Ομοαξονικός προβολέας δέσμης, 3. Φακός ZnSe, 4. Θερμαντική βάση, 5. Καταβόθρα ανακλώμενης δέσμης, 6. Πυρόμετρο υπεράυθρου, 7. Υπολογιστής – θερματικό πυρομέτρου, 8. Τροφοδοτικό laser, 9. Τροφοδοτικό τάσης (για τον έλεγχο της μορφής του παλμού), 10. Γεννήτρια ρεύματος (για την ρύθμιση της έντασης της δέσμης), 11. Παλμογράφος για τον έλεγχο της μορφής του παλμού

7.4 Βαθμόνομηση της διάταξης ακτινοβόλησης CO₂

Η διαδικασία αξιολόγησης της διάταξης ξεκινά φυσικά από την αντιστοίχιση της τάσης τροφοδοσίας με την ισχύ εξόδου. Με την βοήθεια ισχυόμετρου αντιστοιχήθηκε η τάση εισόδου από τον τροφοδοτικό QL355P με την ισχύ εξόδου, σύμφωνα με το διάγραμμα 7.11. Παρατηρείται η παρουσία κόρου πρακτικά από τα 4 V και μετά. Η τάση εξόδου του laser εξαρτάται από την θερμοκρασία του μείγματος ψύξης. Η ισχύς εξόδου που παριστάνεται στο διάγραμμα μετρήθηκαν για θερμοκρασία δείγματος στους 15.5^oC, τιμή που ανήκει στο εύρος βέλτιστης λειτουργίας. Αν και διεξήχθη μεγάλος αριθμός τέτοιων μετρήσεων και υπό διαφορετικές θερμοκρασίες του ψυκτικού υγρού, σε καμία από αυτές η μετρούμενη ισχύς δεν έφτασε την τιμή των 70 W που ήταν και η αναμενόμενη με βάση τις τιμές που δίνει ο κατασκευαστής. Σε κάθε περίπτωση φυσικά, τα 67 W που έδινε το laser είναι αρκετά κοντά στην τιμή αυτή.



Εικόνα 7.11 Ισχύς εξόδου του laser συναρτήσει της τάσης εισόδου στο τροφοδοτικό

Το επόμενο βήμα είναι η εξακριβωση της σταθερότητας της ισχύος της δέσμης από παλμό σε παλμό (pulse to pulse repeatability), με άλλα λόγια της επαναληψιμότητας της διαδικασίας. Αυτό καθίσταται δυνατό, με τη βοήθεια του πυρόμετρου, εξαπολύοντας μια ακολουθία παλμών ίδιας διάρκειας και μετρώντας την αναγραφόμενη τιμή της θερμοκρασίας κάθε φορά. Για κάθε συνθήκη διάρκειας παλμού η τυπική απόκλιση δεν ξεπέρασε το 4%, ενώ ειδικά για τις μεγαλύτερες διάρκειες παλμού, η απόκλιση ήταν ακόμα μικρότερη. Η ίδια διαδικασία θα μπορούσε να γίνει και με τη βοήθεια του ισχυόμετρου, αλλά δυστυχώς το συγκεκριμένο που είχαμε στην διάθεση μας, είχε σχετικά μεγάλο χρόνο απόκρισης και δεν μπορούσε να καταγράψει αποτελεσματικά την ισχύ για τους παλμούς μικρότερης διάρκειας.

Στη συνέχεια προβήκαμε στην μελέτη της χωρικής κατανομής της δέσμης. Για τον σκοπό αυτό προβήκαμε σε μια προκαταρκτική εξέταση του ίχνους της δέσμης, όπως αυτό αποτυπώνεται σε ειδικό χαρτί. Η διάμετρος ήταν πράγματι 6 mm, αλλά το σποτ δεν ήταν και τελείως κυκλικό. Σε σχέση με την πρώτη φορά (πριν σταλεί το laser για την πρώτη επισκευή στην Αγγλία) το σποτ ήταν αισθητά λιγότερο ελλειπτικό, αλλά όχι και ακριβώς όπως θα επιθυμούσαμε, γεγονός που υποδεικνύει ότι η επισκευή του laser δεν ήταν απολύτως αποτελεσματική. Για να λάβουμε μια πιο εμπειριστατωμένη εικόνα της κατανομής της ισχύος στους δυο άξονες προβήκαμε στην μέθοδο cutting knife edge. Σε αυτή το ισχύόμετρο τοποθετείται πίσω από μια βάση με δυνατότητα μικρομετρικής μετατόπισης η οποία στο άνω άκρο της έχει τοποθετημένο ένα αιχμηρό αντικείμενο (π.χ. ξυράφι). Παρεμβάλλοντας το ξυράφι ανάμεσα στην έξοδο του laser και το ισχύόμετρο και το μετακινούμε κατά ένα προκαθορισμένο βήμα (0.25 mm), μετρώντας κάθε φορά την ισχύ στο ισχύόμετρο, σαρώνοντας όλο το μήκος και το πλάτος της δέσμης. Με βάση τις τιμές αυτές και με τη βοήθεια ενός αλγόριθμου, ο οποίος παραχωρήθηκε ευγενικά από τον H. Kattelaarj της Philips Applied Technologies, κατασκευάσαμε μια προσεγγιστική κατανομή της πυκνότητας ισχύος, και για τους δυο άξονες από την οποία προκύπτει ότι αυτή δεν είναι αυτή που αντιστοιχεί ακριβώς στον ρυθμό TEM₀₀, αλλά τουλάχιστον μας επιτρέπει να θεωρούμε κατά προσέγγιση ότι δεν απέχει και πάρα πολύ.

Τον χαρακτηρισμό των βασικών χαρακτηριστικών της δέσμης ακολούθησε η διαδικασία αξιολόγησης των αποτελεσμάτων της ακτινοβόλησης στο δείγμα. Η προσπάθεια αυτή αποτέλεσε και τον πυρήνα των πειραμάτων ανόπτησης με CO₂ laser, αφού το σημαντικότερο ζητούμενο είναι η εύρεση των συνθηκών εκείνων που θα οδηγήσουν στην ταχύτερη δυνατή θέρμανση της επιφάνειας του πυριτίου, μένοντας πάντα σε καθεστώς μη τήξης. Η διαδικασία αυτή θα περιγραφεί αναλυτικά στις επόμενες παραγράφους.

7.5 Συνθήκες ακτινοβόλησης

Οι πρώτες ακτινοβολήσεις που πραγματοποιηθήκαν έγιναν αφενός μεν για την βαθμονόμηση και τον έλεγχο της διαδικασίας αλλά και για την απόκτηση εξοικείωσης με αυτή. Κατά το πρώτο κύκλο πειραμάτων διεξήχθησαν περίπου εκατό ακτινοβολήσεις σε δείγματα τύπου 38N (με ονομαστικές συνθήκες εμφύτευσης 0.4 keV/6E15 cm⁻²) και 39N (0.6 keV/3E15 cm⁻² αντίστοιχα) δοκιμάζοντας διαφορετικούς συνδυασμούς παραμέτρων. Ανάμεσα σε αυτές τις παραμέτρους περιλαμβάνονται η ισχύς εξόδου του laser (σε ένα εύρος τιμών από 17 έως και 67 W που καλύπτει όλο το εύρος λειτουργίας του συγκεκριμένου laser), η διάμετρος στην οποία

εστιάζεται το σποτ μέσω του φακού ZnSe (χωρίς εστίαση, και διαμέτροι 2 και 3 mm), η διάρκεια παλμού (από 30 έως και 500 ms), καθώς και η θερμοκρασία προθέρμανσης του δείγματος (από 600 έως και 650°C). Κατά τις ακτινοβολήσεις αυτές διενεργούνται μετρήσεις της επιφανειακής θερμοκρασίας, ενώ ταυτόχρονα γινόταν έλεγχος για τυχόν μεταβολές στην ανακλαστικότητα ή και ακόμα χειρότερα, ορατές παραμορφώσεις στην επιφάνεια οι οποίες θα μαρτυρούσαν τήξη ή και καταστροφή του δείγματος αντίστοιχα. Μόνο στις συνθήκες από 100 ms (και για εστίαση στα 2 mm), παρατηρήθηκαν ορατές παραμορφώσεις σε ένα μικρό μέρος της επιφάνειας, το οποίο προφανώς αντιστοιχούσε στο κέντρο του σποτ. Επίσης αποφασίστηκε όλες οι ακτινοβολήσεις να διεξαχθούν με την μέγιστη ισχύ εξόδου που είναι 67 W, αφού πρώτα εξαιριβώθηκε η δυνατότητα του laser να αποδίδει με σταθερότητα αυτή την τιμή ισχύος.

Καθώς αυτοί οι χρόνοι ακτινοβόλησης ήταν αισθητά μεγαλύτεροι από αυτούς που αναφέρονται στην βιβλιογραφία όσον αφορά την ανόπτηση σε καθεστώς millisecond^{19 20 21 22 23 24 25 26 27 28} είτε αναφερόμαστε σε spike, είτε flash ή CO₂, (από μερικές εκατοντάδες μs έως και περίπου 30ms), αποφασίστηκε η μείωση του χρόνου ανόπτησης με παράλληλη αύξηση της πυκνότητας ενέργειας μέσω εστίασης της δέσμης σε σποτ μικρότερης διαμέτρου. Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να παράσχουμε πρακτικά το ίδιο ποσό θερμότητας σε μικρότερο χρονικό διάστημα έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε την εμφάνιση φαινομένων διάχυσης, τα οποία εν μέρει είναι ανάλογα και της διάρκειας της θερμικής επεξεργασίας του δοκιμίου. Έτσι οι επόμενοι δυο κύκλοι ακτινοβολήσεων έγιναν με συνεχώς ελαττωμένη διάρκεια παλμού, ξεκινώντας από δείγματα 39N και συνεχίζοντας σε δείγματα 38N. Στα τελευταία μάλιστα, για πρώτη φορά χαρακτηρίστηκε μέσω ηλεκτρικών μετρήσεων και SIMS, η επίδραση της θερμοκρασίας προθέρμανσης, ανάλογα με το εάν αυτή είναι 600 ή 650°C. σύμφωνα με την βιβλιογραφία^{29 30 31} και όπως επισημάνθηκε και νωρίτερα στο κεφάλαιο αυτό, η προθέρμανση σε αυτό το θερμοκρασιακό εύρος, αφενός μεν αποτρέπει την εμφάνιση θερμικού σοκ, το οποίο θα μπορούσε να καταστρέψει το δοκίμιο, αφετέρου δε μειώνει δραστικά το απαιτούμενο ποσό θερμότητας (και ισοδύναμα την πυκνότητα ισχύος αλλά και την διάρκεια της ανόπτησης) για την επίτευξη δεδομένης θερμοκρασίας στην επιφάνεια του δείγματος. Η δέσμη εστιάστηκε σε σποτ διαμέτρου 1.8 mm με αποτέλεσμα η μέση πυκνότητα ισχύος της προσπίπτουσας δέσμης να είναι 2637 W/cm². Στους πίνακες 7.IV και 7.V δίνονται οι συνθήκες ανόπτησης που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτά τα στάδια ακτινοβολήσεων (σημειώνεται πως σε κάθε συνθήκη γίνεται ακτινοβόληση σε τρία ή τέσσερα δισκία):

Πίνακας 7.IV Δείγμα 39N P=67 W, $d_{spot}=2$ & 3 mm

| Θερμοκρασία προ ανόπτησης(°C) | Διάρκεια παλμού laser (ms) | | |
|-------------------------------------|-------------------------------|----|----|
| | | 40 | 50 |
| 600 | • | • | • |

Πίνακας 7.V Δείγμα 38N P=67 W, d_{spot}=1.8 mm

| Θερμοκρασία προ ανόπτησης (°C) | Διάρκεια παλμού laser (ms) | | | | |
|--------------------------------------|-------------------------------|----|----|----|----|
| | 15 | 20 | 25 | 30 | 40 |
| 600 | • | • | • | • | • |
| 650 | • | • | • | • | • |

Καθώς (όπως θα δειχτεί και στο εδάφιο που πραγματεύεται τις μετρήσεις SIMS), οι συνθήκες αυτές οδήγησαν σε αρκετά μεγάλη διάχυση των προσμιξεων, αποφασίστηκε η περαιτέρω μείωση της διάρκειας της ανόπτησης. Η μείωση αυτή φυσικά συνοδεύτηκε από επανεστίαση της δέσμης σε σποτ μικρότερης διαμέτρου (1.1 mm). Η μέση ισχύς της προσπίπτουσας δέσμης είναι 7060 W/cm². Τα δείγματα αυτά υπέστησαν μια προκαταρκτική θέρμανση για 1-2 λεπτά, είτε στους 600°C είτε στους 650°C και στη συνέχεια ανόπτηση με χρήση CO₂ laser. Η διάρκεια παλμού ήταν 4, 6, 8 και 10 ms. Στον πίνακα 7.VI εμφανίζονται όλες οι συνθήκες ανόπτησης, οι οποίες είναι και πανομοιότυπες για τις δυο κατηγορίες δειγμάτων 38N και 39N, ενώ και πάλι έγινε ακτινοβόληση σε τέσσερα δείγματα για κάθε συνθήκη.

Πίνακας 7.VI (Δείγματα 38N και 39N) P=67 W, d_{spot}=1.1 mm

| Θερμοκρασία προ ανόπτησης (°C) | Διάρκεια παλμού laser (ms) | | | |
|--------------------------------------|-------------------------------|---|---|----|
| | 4 | 6 | 8 | 10 |
| 600 | • | | | |
| | | • | | |
| | | | • | |
| | | | | • |
| 650 | • | | | |
| | | • | | |
| | | | • | |
| | | | | • |

Τέλος πρέπει να σημειωθεί πως η τοποθέτηση των δειγμάτων κάθετα και επί της θερμαντικής βάσης η οποία βρίσκεται σε θερμοκρασία 700°C, αποτελεί μια αρκετά δύσκολη διαδικασία, καθώς πρέπει να γνωρίζουμε που ακριβώς προσπίπτει η δέσμη ενώ ταυτόχρονα το κέντρο του σποτ πρέπει να είναι όσο το δυνατόν εγγύτερα στο κέντρο της περιοχής που εστιάζει το πυρόμετρο για να διεξάγει την μέτρηση. Για τον λόγο αυτό, της ανόπτησης με laser προηγείται η χάραξη ενός κυκλικού σποτ διαμέτρου 3 mm, δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στην ορθή τοποθέτηση του δείγματος επί της βάσης με τη βοήθεια των ειδικών κλιπ, έτσι ώστε το σποτ του ομοαξονικού προβολέα και το σποτ του laser του πυρόμετρου να συμπίπτουν μεταξύ τους, αλλά και με το κέντρο του κύκλου. Από το γεγονός ότι όλες οι κρίσιμες αποστάσεις είναι μικρότερες από χιλιοστό, είναι προφανής η όλη δυσκολία του εγχειρήματος ειδικά αν καταλάβουμε πως η τοποθέτηση γίνεται με λαβίδα και με χρήση ειδικών αντιπυρικών γαντιών. Η χρήση των τελευταίων επιτρέπει την μείωση του χρόνου μεταξύ των ακτινοβολήσεων στα 3-4 min σε σχέση με τα 15-20 min που θα απαιτούντο στη περίπτωση που θα περιμέναμε τη διάταξη να κρυώσει και να ξαναζεσταθεί.

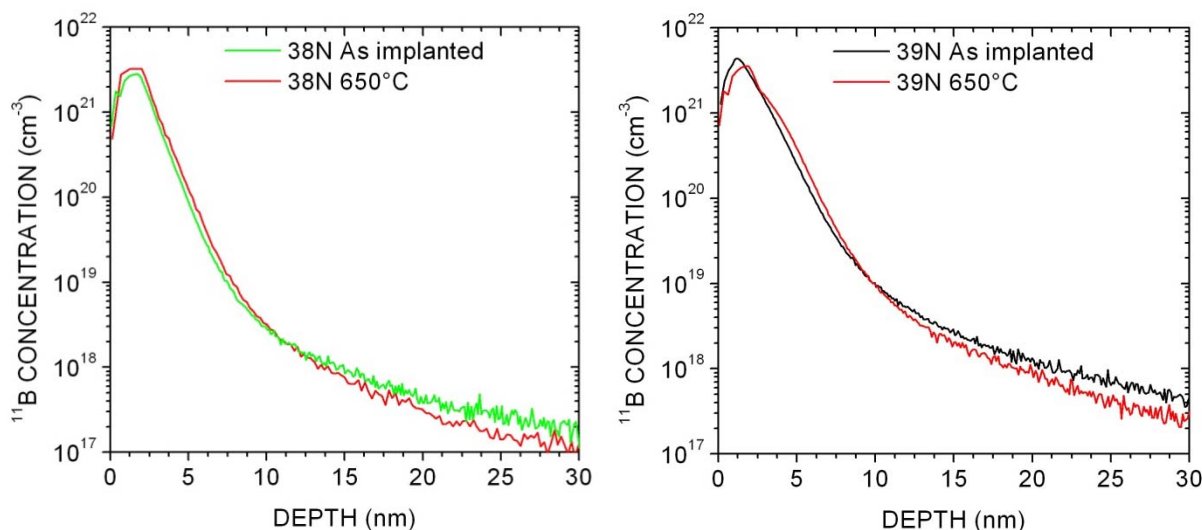
7.6 Χαρακτηρισμός των κατανομών συγκέντρωσης μέσω μετρήσεων SIMS

Ο χαρακτηρισμός των προφίλ συγκέντρωσης έγινε από κοινού με τον ερευνητή Damiano Giubertoni στο ινστιτούτο FBK στο Τρέντο της Ιταλίας. Το όργανο SIMS που χρησιμοποιήθηκε είναι ένα Cameca WF/Sc-ULTRA. Η πρωτογενής ιοντική δέσμη O₂⁺ είναι στα 500eV (με γωνία πρόσπτωσης 68°). Τα δευτερογενή ιόντα ¹¹B⁺ και ²⁸Si⁺ συλλέγονται από κυκλική περιοχή διαμέτρου 66 μm η οποία βρίσκεται στο κέντρο της τετραγωνικής περιοχής με διαστάσεις 350x350 μm². Η ανάλυση διεξήχθη υπό συνθήκες πλήρους οξειδωσης (full oxidizing condition), εισάγοντας ελεγχόμενη ποσότητα οξυγόνου (πίεση 5x10⁻⁶ mbar) στον θάλαμο ανάλυσης. Το δείγμα ήταν τοποθετημένο επί περιστρεφόμενης πλατφόρμας έτσι ώστε τα τοιχώματα του κρατήρα να είναι ομοιόμορφα και να μην επηρεαστεί ο βαθμός απόδοσης ιοντοβολής (sputtering and ion yield)^{32 33}.

Ο χρόνος της ιοντοβολής μετατράπηκε σε ισοδύναμο βάθος χρησιμοποιώντας το ρυθμό ιοντοβολής (sputtering rate, SR) που προσδιορίστηκε από μετρήσεις σε πρότυπα δείγματα, στα οποία είχαν εμφυτευθεί αλληπάλληλες κορυφές βορίου. Ελήφθη πρόνοια για την διόρθωση των σφαλμάτων που εισάγει η παρουσία του επιφανειακού στρώματος SiO₂, μέσω κατάλληλων κανονικοποιήσεων με τη βοήθεια του παράγοντα SR. Η ένταση του σήματος του ¹¹B⁺ μετατράπηκε σε συγκέντρωση κατόπιν κανονικοποίησης του σήματος ²⁸Si⁺ και εφαρμογής του παράγοντα ευαισθησίας ο οποίος προσδιορίζεται από ένα δείγμα Si, που έχει υποστεί ομοιόμορφη εμφύτευση βορίου σύμφωνα με τα πρότυπα που έχουν τεθεί από τον NIST. Σημειώνεται πως όλες οι μετρήσεις διεξάγονται στο κέντρο της ανοπτημένης περιοχής και όπως αυτό έχει προκύψει μέσω της χαρτογράφησης της αντίστασης. Στο σημείο αυτό αναμένεται και η μέγιστη διάχυση. Φυσικά, λόγω της γκαουσιανής μορφής της χωρικής κατανομής ισχύος ακόμα και μια ελάχιστη μετατόπιση από το κέντρο μπορεί να σημαίνει σημαντικές μεταβολές.

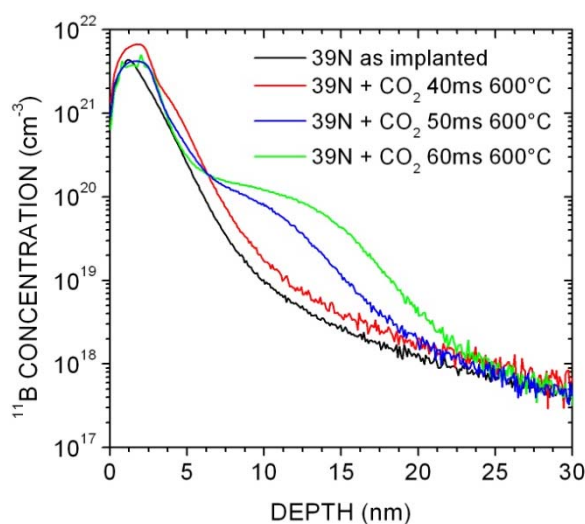
Καθώς της ανόπτησης με laser, προηγείται η θέρμανση του δείγματος σε ένα εύρος από 600 έως 650°C (το οποίο είναι 50 με 100 βαθμούς χαμηλότερο από την “επικίνδυνη” για την εμφάνιση μεταβατικών φαινομένων διάχυσης) περιοχή, η ανάλυση ξεκίνησε υποχρεωτικά από την διερεύνηση της επίδρασης της προανόπτησης στις κατανομές της συγκέντρωσης. Οι προσομοιώσεις με χρήση του λογισμικού Sentauros Process κατέδειξαν ότι η θέρμανση για 3 με 4 λεπτά (που ήταν και ο μέγιστος χρόνος παραμονής του δείγματος πάνω στην βάση) σε αυτές τις θερμοκρασίες οδηγεί σε πρακτικά αμελητέα διάχυση, της τάξης του μισού νανομέτρου. Παρόλα αυτά, κρίθηκε σκόπιμο να εξακριβωθεί και πειραματικά η απουσία διάχυσης. Ως εκ τούτου διενεργήθηκαν μετρήσεις SIMS σε δείγματα 38N και 39N τα οποία είχαν υποβληθεί σε θέρμανση στους 650°C για το μέγιστο χρονικό διάστημα που χρησιμοποιήθηκε πειραματικά (τέσσερα λεπτά). Τα αποτελέσματα των μετρήσεων, παρατίθενται μαζί με τις αντίστοιχες καμπύλες δειγμάτων που δεν έχουν υποστεί θερμική επεξεργασία, στα διαγράμματα 7.12.α και β.

Και από τα δυο διαγράμματα προκύπτει ότι σε συμφωνία με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, η διάχυση είναι αμελητέα, γεγονός που μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε την συγκεκριμένη τεχνική προανόπτησης. Στην αντίθετη περίπτωση που η θερμική προεπεξεργασία οδηγούσε σε σημαντική διάχυση, τότε η περεταίρω ανόπτηση με laser θα ήταν μάταιη.



Εικόνα 7.12 Επίδραση της προθέρμανσης των δειγμάτων α) 38N και β) 39N στις κατανομές συγκέντρωσης. Τα δείγματα αυτά είχαν υποστεί θέρμανση στους 650°C για τέσσερα λεπτά. Παρατηρείται ότι η μετατόπιση των προφίλ σε σχέση με αυτά των αντίστοιχων δειγμάτων που δεν έχουν υποστεί θερμική επεξεργασία είναι αμελητέα.

Στη συνέχεια προβήκαμε στον χαρακτηρισμό μερικών από των δειγμάτων που προέκυψαν από τις ακτινοβολήσεις που παρατίθενται στον πίνακα 7.IV. Στο διάγραμμα 7.13 παρουσιάζονται οι κατανομές δειγμάτων τύπου 39N που ανοπτήθηκαν με εστίαση σε σποτ διαμέτρου 2 mm, και χρόνους 40, 50 και 80 ms.

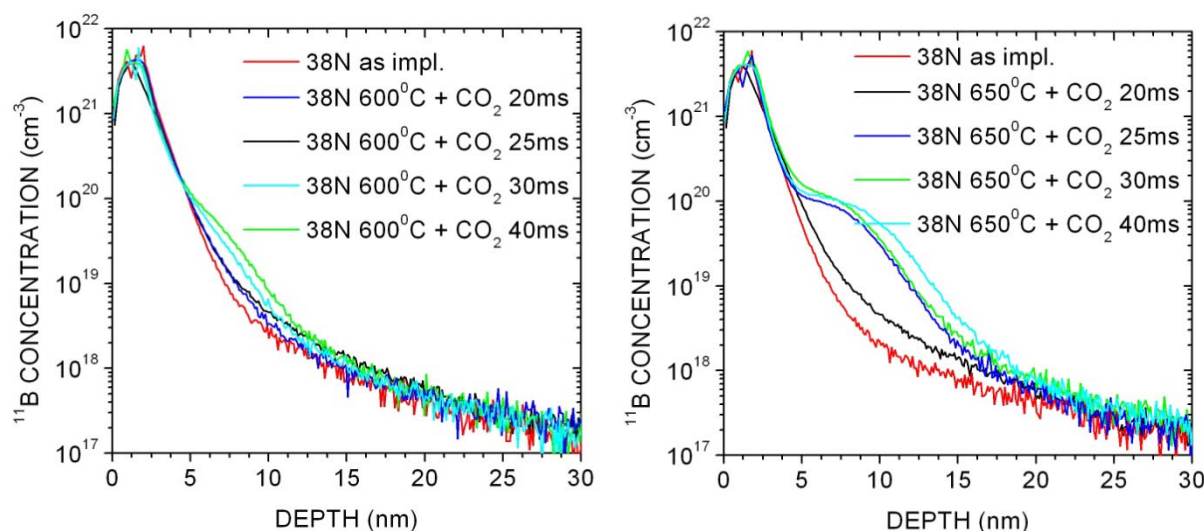


Εικόνα 7.13 Προφίλ συγκέντρωσης δειγμάτων 39N που ανοπτήθηκαν με παλμούς διάρκειας 40, 50 και 60 ms κατόπιν προθέρμανσης στους 600°C. Η δέση ήταν εστιασμένη σε σποτ διαμέτρου 2 mm. Οι παρατηρούμενες μετατοπίσεις των προφίλ σε σχέση με αυτό του δείγματος που δεν έχει υποστεί θερμική επεξεργασία είναι 2, 5.5 και 8.5 nm αντίστοιχα.

Από το διάγραμμα αυτό προκύπτει η σημαντική μετατόπιση των προφίλ για τα δείγματα που ανοπτήθηκαν με παλμούς διάρκειας 50 και 60 ms, ενώ για την συνθήκη των 40 ms η παρατηρούμενη διάχυση δεν είναι και τόσο έντονη. Οι μέγιστες μετρούμενες μετατοπίσεις (στα 1E19 cm⁻²) είναι 5.5, 8.5 και 2 nm. Σύμφωνα με τις μετρήσεις από την πυρομετρία αλλά και από τα αποτελέσματα της πυρομετρίας, οι μέγιστες θερμοκρασίες που επιτυγχάνονται στην επιφάνεια του δοκιμίου είναι 1080, 1100 και 1050°C αντίστοιχα. Εδώ πρέπει να επισημάνουμε ότι με βάση το

ποσά θερμότητας που εισάγονται, θα αναμέναμε μεγαλύτερη σχετική μετατόπιση από τα 50 στα 60ms, σε σχέση από αυτή από τα 40 στα 50 ms. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποδοθεί ίσως σε πιθανή μέτρηση σε περιοχή που να μην ήταν ακριβώς το κέντρο της ανόπτησης. Στην σειρά αυτή των μετρήσεων η χαρτογράφηση της επιφανειακής αντίστασης ήταν λιγότερη συστηματική καθώς διεξάγονταν περίπου 10 μετρήσεις ανά δείγμα σε σχέση με τις 15-20 που λαμβάνονταν στις επόμενες σειρές. Έτσι, υπάρχει σημαντική πιθανότητα η χαρτογράφηση να μην κατέδειξε με ακρίβεια το κέντρο της ανοπτημένης περιοχής στην συγκεκριμένη συνθήκη. Σε γενικές γραμμές πάντως οι παρατηρούμενες σχετικές μετατοπίσεις είναι σε συμφωνία με τις αναμενόμενες για ακτινοβολήσεις κάτω από αυτές τις συνθήκες θερμοκρασίας / διάρκειας ανόπτησης.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα προφίλ συγκέντρωσης δειγμάτων 38N που προθερμάνθηκαν σε δυο διαφορετικές θερμοκρασίες 600 και 650°C (διαγράμματα 7.14 α και β αντίστοιχα) και ακτινοβολήθηκαν σε χρόνους από 20 έως 40ms και με τη δέσμη εστιασμένη σε σποτ διαμέτρου 1.8 mm.

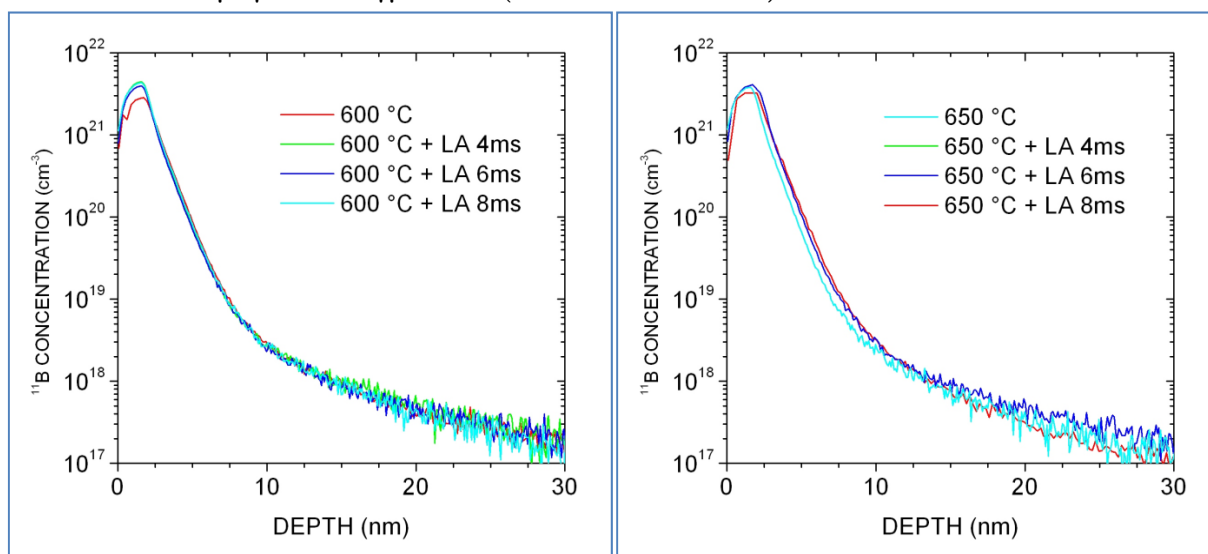


Εικόνα 7.14 Προφίλ συγκέντρωσης δειγμάτων 38N που ανοπτήθηκαν με παλμούς διάρκειας 20, 25, 30 και 40 ms κατόπιν προθέρμανσης στους α) 600°C και β) 650°C. Η δέσμη ήταν εστιασμένη σε σποτ διαμέτρου 1.8 mm. Οι παρατηρούμενες μετατοπίσεις των προφίλ σε σχέση με αυτό του δείγματος που δεν έχει υποστεί θερμική επεξεργασία είναι 3.5 και 7nm για τους α) 600°C και β) 650°C αντίστοιχα.

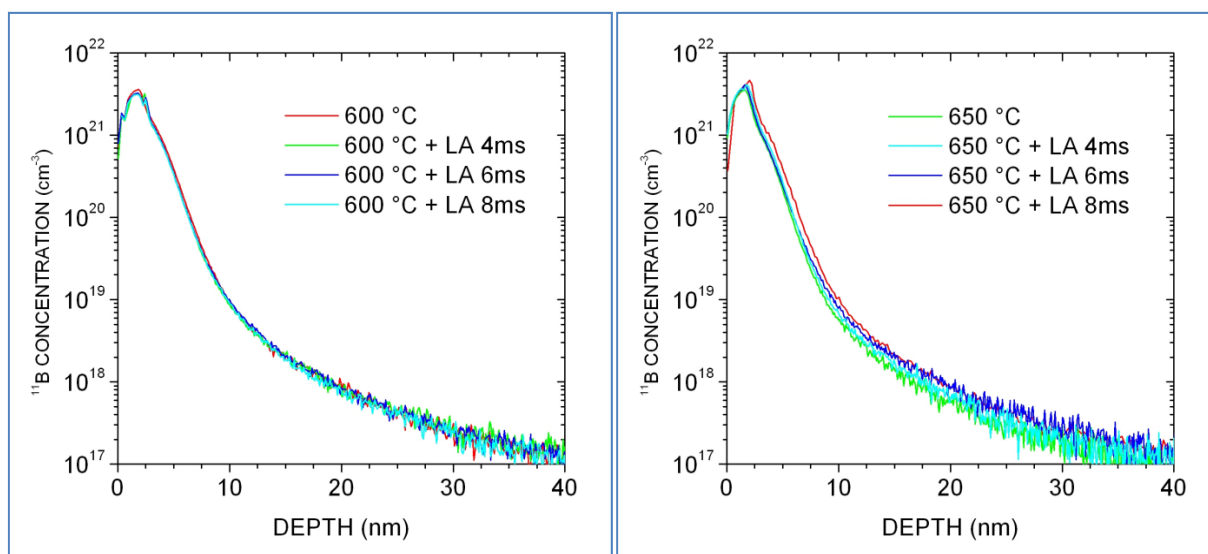
Οι μέγιστες μετρούμενες μετατοπίσεις (στα 1E19 cm⁻²) είναι 3.5 και 7 nm για τις δυο διαφορετικές θερμοκρασίες προανόπτησης. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την διαδικασία της πυρομετρίας, οι μέγιστες θερμοκρασίες που επιτυγχάνονται στην επιφάνεια του δοκιμίου είναι 1050 και 1110°C αντίστοιχα για προθέρμανση στους 600 και 650°C. Η σημαντική διαφοροποίηση στην διάχυση ανάμεσα στις δυο συνθήκες προανόπτησης μπορούν να αποδοθεί εν μέρει στο γεγονός ότι στους 650°C το εισαγόμενο ποσό θερμότητας είναι αισθητά υψηλότερο.

Τέλος, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα από την ακτινοβόληση σε μικρούς χρόνους και με εστίαση σε μικρότερο σποτ διαμέτρου 1.1 mm. Όλες οι μετρήσεις έγιναν περίπου στο σημείο που εμφανίστηκε η ελάχιστη τιμή αντίστασης και επομένως, είμαστε σε θέση να παρακολουθήσουμε την μέγιστη δυνατή διάχυση που συντελέστηκε, ενώ πρέπει να σημειωθεί ότι η χαρτογράφηση έγινε πιο συστηματικά και με λήψη 15-20 μετρήσεων ανά δείγμα. Για λόγους καλύτερης κατανόησης έχουμε χωρίσει την παρουσίαση των αποτελεσμάτων, ανάλογα με το δείγμα και την θερμοκρασία που

βρίσκεται το δοκίμιο πριν την ακτινοβόληση του με το laser CO₂. Έτσι παρουσιάζουμε τέσσερα ξεχωριστά διαγράμματα. Καθώς η θέρμανση στο εύρος των 600-650°C δεν προκαλεί διάχυση, τα προφίλ συγκέντρωσης των δειγμάτων που έχουν υποστεί απλή θέρμανση υπερτίθενται στις καμπύλες των δειγμάτων που δεν έχουν υποστεί θερμική επεξεργασία. Αυτό έρχεται και σε συμφωνία με τις προβλέψεις από την προσομοίωση. Έτσι, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζουμε μόνο τις καμπύλες των δειγμάτων που έχουν υποστεί μόνο θέρμανση και όχι των μη ανοπτημένων. Στις εικόνες 7.15 α και β παρουσιάζουμε τα προφίλ για τα δείγματα 38N (συνθήκες εμφύτευσης 0.4 keV/6E15 cm⁻²), ενώ στις 7.16 α και β, για το δείγμα 39N (0.6 keV/3E15 cm⁻²).



Εικόνα 7.15 Κατανομές συγκέντρωσης των δειγμάτων με κωδικό 38N (συνθήκες εμφύτευσης: 0.4 keV/6E15 cm⁻²), τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600°C και β) 650°C. Για κάθε συνθήκη παρουσιάζονται οι καμπύλες για τρεις διαφορετικές τιμές διάρκειας του παλμού, 4, 6 και 8 ms. Η μέγιστη διάχυση που παρατηρείται είναι 1 nm.



Εικόνα 7.16 Κατανομές συγκέντρωσης των δειγμάτων με κωδικό 39N (συνθήκες εμφύτευσης: 0.6 keV/3E15 cm⁻²), τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600°C και β) 650°C. Για κάθε συνθήκη παρουσιάζονται οι καμπύλες για τρεις διαφορετικές τιμές διάρκειας του παλμού, 4, 6 και 8 ms. Η μέγιστη διάχυση που παρατηρείται είναι 2 nm.

Από την μελέτη των παραπάνω διαγραμμάτων προκύπτει καταρχάς ότι τα βάθη επαφής για τα δείγματα 38N και 39N πριν αυτά υποστούν ανόπτηση με laser, είναι 13.8 nm και 16.8 nm αντίστοιχα (θεωρώντας την συγκέντρωση υποστρώματος ίση με 10^{18}cm^{-3}). Η διαφορά αυτή είναι απόρροια της μεγαλύτερης ενέργειας εμφύτευσης που χρησιμοποιήθηκε στο δείγμα 39N. Για το δείγμα 38N η κίνηση του προφίλ συγκέντρωσης είναι το πολύ 1 nm, και για τις δυο τιμές της θερμοκρασίας που βρισκόταν το δείγμα πριν την ακτινοβόληση, ενώ για το δείγμα 39N η μέγιστη παρατηρούμενη διάχυση είναι 2 nm. Ένα άλλο σημαντικό μέγεθος όσον αφορά τα χαρακτηριστικά της επαφής είναι η κλίση της καμπύλης. Από τα διαγράμματα αυτά προκύπτει ότι για τα μεν δείγματα 38N η κλίση είναι 2.2 nm/δεκάδα, ενώ για τα 39N, 2.7 nm/δεκάδα. Από τα δεδομένα αυτά είναι προφανές ότι η ανόπτηση με χρήση laser διοξειδίου του άνθρακα σε αυτές τις συνθήκες πυκνότητας ισχύος και διάρκειας παλμού, οδηγεί σε σχεδόν αμελητέα διάχυση. Η παρατηρούμενη διάχυση, μπορεί να αποδοθεί αφενός μεν στην πολύ μικρή ποσότητα θερμικής ενέργειας που εισάγεται στον όγκο του υλικού και αφετέρου στην παρουσία του φθορίου (λόγω της εμφύτευσης πλάσματος BF₃), η οποία έχει την τάση να περιορίζει την διάχυση του βορίου^{34 35 36}. Συμπερασματικά, η ανόπτηση με laser CO₂ σε συνδυασμό με προθέρμανση στο εύρος των 600-650°C. επιτρέπει την κατασκευή επαφών οι οποίες να ικανοποιούν τις απαιτήσεις για τις επερχόμενες γενιές επεξεργασιών, όπως αυτές αντανακλώνονται στις ετήσιες χάρτες ITRS³⁷.

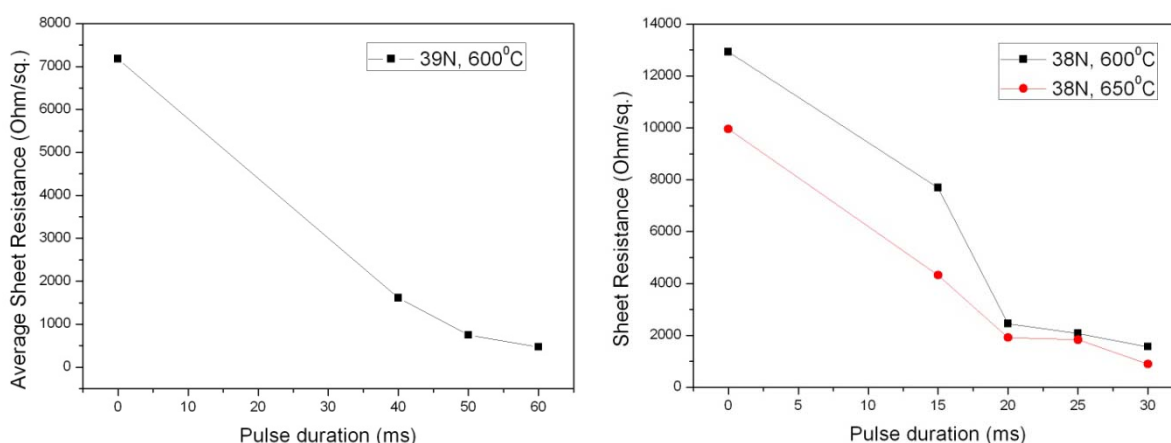
Όλες οι παραπάνω συνθήκες ακτινοβόλησης, όπως προαναφέρθηκε, κράτησαν την θερμοκρασία του δοκιμίου, χαμηλότερα από το κατώφλι τήξης του πυριτίου, που είναι 1410°C (το οποίο ήταν και το ζητούμενο). Για λόγους πληρότητας όμως, αποφασίστηκε να πραγματοποιηθούν ακτινοβολήσεις και για συνθήκες οι οποίες θα οδηγούσαν σε τήξη. Έτσι διερευνήθηκε και η διάρκεια παλμού της τάξης των 10 ms. Οι παρατηρούμενες μέσω SIMS, μετατοπίσεις των προφίλ συγκέντρωσης για προθέρμανση στους 600 και 650°C, είναι της τάξης των 4 και 8.5 nm αντίστοιχα, τιμές οι οποίες είναι αισθητά μεγαλύτερες από τις προηγούμενες. Στο δείγμα 650°C+10 ms, παρατηρήθηκε μια ασθενής διαφοροποίησης της ανακλαστικότητας στο κέντρο του σποτ, η οποία υποδηλώνει πιθανότατα την αλλαγή φάσης. Την πιθανότητα αλλαγής φάσης, πέρα από την αυξημένη διάχυση και την αλλαγή στην ανακλαστικότητα, υποστηρίζουν και τα αποτελέσματα από την προσομοίωση, τα οποία δείχνουν μια μικρή υπέρβαση της θερμοκρασία τήξης, στην επιφάνεια του δείγματος (η οποία βέβαια είναι στα όρια του υπολογιστικού σφάλματος).

7.7 Ηλεκτρικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων μέσω μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης

Αν και ο ηλεκτρικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων προηγήθηκε του μορφολογικού χαρακτηρισμού, καθώς χρησίμευε και για την κατάδειξη του κέντρου της ανοπτημένης περιοχής, τα αποτελέσματα από τον τελευταίο παρουσιάστηκαν πρώτα, καθώς το κυριότερο ζητούμενο είναι να μην έχουμε έντονη μετατόπιση του προφίλ. Έτσι εστιάζουμε στις συνθήκες ανόπτησης εκείνες που οδηγούν σε όσο το δυνατόν μικρότερη διάχυση. Όπως είδαμε και στο προηγούμενο εδάφιο, μόνο οι τελευταίες συνθήκες (μικρή διάρκεια παλμού και εστίαση στα 1.1mm) επιτρέπουν την ελαχιστοποίηση των φαινομένων διάχυσης, για αυτό και τα αποτελέσματα των μετρήσεων για τις συνθήκες αυτές θα παρουσιαστούν διεξοδικά. Παρόλα αυτά θα παρουσιάσουμε υπό τη μορφή πινάκων τα κυριότερα αποτελέσματα από τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό για όλες τις συνθήκες δειγμάτων.

Στο κεφάλαιο 3 που πραγματεύεται τις μεθόδους χαρακτηρισμού παρουσιάζεται αναλυτικά η διαδικασία μέτρησης της επιφανειακής αντίστασης μέσω γεωμετρίας Van der Pauw. Υπενθυμίζεται πάντως ότι για κάθε μέτρηση απαιτείται η μέτρηση της τάσης σε οκτώ διαφορετικές γεωμετρίες και υπό τρεις διαφορετικές τιμές έντασης κάθε φορά. Καταρχάς, μετρήσαμε την αντίσταση στα τέσσερα δείγματα τα οποία είχαν υποστεί μόνο θερμική ανόπτηση, έτσι ώστε να παρατηρήσουμε την επίδραση της ανόπτησης με laser στην αγωγιμότητα.

Στη γραφική παράσταση του διαγράμματος 7.17 α παρουσιάζεται η εξέλιξη της μέσης επιφανειακής αντίστασης για διαφορετικές διάρκειες παλμού για το δείγμα 39N το οποίο είχε προθερμανθεί στους 600°C. Για την λήψη της μέσης τιμής της λαμβάνονται υπόψη όλες οι μετρηθείσες τιμές αντίστασης σε μια ακτίνα 0.6 mm από το κέντρο, όπως αυτό προσδιορίζεται από την ελάχιστη τιμή που μετράται. Η χρονική στιγμή $t=0$, εκφράζει κάθε φορά το δείγμα που έχει υποστεί μόνο θερμική επεξεργασία. Το αντίστοιχο διάγραμμα 7.17 β, αποδίδει την εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης για δείγμα 38N για δυο διαφορετικές θερμοκρασίες προανόπτησης.



Εικόνα 7.17 Εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης ανάλογα με την διάρκεια παλμού α) για δείγματα 39N που προθερμάνθηκαν στους 600°C και β) για δείγματα 38N που προανοπτήθηκαν σε δυο θερμοκρασίες, 600 και 650°C. Σε κάθε περίπτωση, η επιφανειακή αντίσταση είναι φθίνουσα συνάρτηση της διάρκειας παλμού, ενώ οι χαμηλές τιμές αντίστασης αποδίδονται εν μέρει και στην ευρύτερη κατανομή των προσμίξεων μέσα στο υλικό.

Καταρχάς, παρατηρούμε ότι η επιφανειακή αντίσταση είναι φθίνουσα συνάρτηση της διάρκειας παλμού, ενώ οι χαμηλές τιμές αντίστασης για τους μεγαλύτερους παλμούς, οφείλονται εν μέρει και στην έντονη διάχυση, η οποία προκαλεί την μετατόπιση του προφίλ σε ένα μεγαλύτερο εύρος. Καθώς η δόση πλέον είναι κατανεμημένη σε μεγαλύτερο εύρος, η μέση συγκέντρωση είναι χαμηλότερη. Επειδή η ευκινησία των φορέων είναι φθίνουσα συνάρτηση της συγκέντρωσης, η χαμηλότερη μέση τιμή της τελευταίας οδηγεί και σε μεγαλύτερη αγωγιμότητα, ακόμα και αν το ποσοστό των ενεργοποιημένων προσμίξεων σε σχέση με τον συνολικό αριθμό των προσμίξεων, μπορεί να παραμένει το ίδιο.

Όσον αφορά τα δείγματα με τα πλέον ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά, όσον αφορά την απουσία διάχυσης, συνολικά, πραγματοποιήσαμε χαρτογράφηση της επιφανειακής αντίστασης σε 14 συνολικά δείγματα, όπως αυτά απεικονίζονται στον πίνακα 7.VI. Με βάση την χάραξη που προηγήθηκε και με τη βοήθεια της βάσης του probe που επιτρέπει μικρομετρική μετακίνηση, πραγματοποιήσαμε σάρωση της επιφάνειας της ανοπτημένης περιοχής. Θεωρητικά η χαρτογράφηση της επιφανειακής αντίστασης θα έπρεπε να ακολουθήσει και αυτή την γκαουσιανή

κατανομή. Δυστυχώς όμως η ενδεδειγμένη μέτρηση της, κατέδειξε κατανομή τύπου αιίδας. Με άλλα λόγια υπάρχει μια οξύτερη κατανομή της ενέργειας, με την κορυφή να έχει πολύ μεγαλύτερη ένταση σε σχέση με μια αντίστοιχη Γκαουσιανή. Το φαινόμενο αυτό σχετίζεται με μια κατασκευαστική δυσλειτουργία του συγκεκριμένου laser, η οποία είχε καταδειχτεί πριν την πρώτη αποστολή του στην Αγγλία για επισκευή, με τη βοήθεια ειδικού προφίλερόμετρου. Το πρόβλημα αυτό είχε επισημανθεί στον κατασκευαστή, ο οποίος ανέλαβε και την επισκευή του, αλλά με μέτρια αποτελέσματα. Στα σημεία τα οποία δίνεται η σήμανση “com: compliance” δεν στάθηκε δυνατόν να πάρουμε μέτρηση, λόγω είτε αυξημένου θορύβου, είτε μεγάλων διακυμάνσεων στις ενδείξεις της μετρούμενης τάσης.

Τα αποτελέσματα αυτής της χαρτογράφησης παρουσιάζονται στους πίνακες 7.VII και VIII. Δίνεται η ελάχιστη μετρούμενη τιμή η οποία προκύπτει από μέση τιμή της επιφανειακής αντίστασης σε απόσταση 0.25 mm, από την περιοχή που μετριέται η ελάχιστη τιμή της αντίστασης και η οποία θεωρείται προσεγγιστικά ως το κέντρο του σποτ. Επίσης, δίνεται η μέση τιμή $R_{averaged}$ σε μια περιοχή διαμέτρου 0.5 mm. Πρέπει να τονιστεί ότι οι διάμετροι των νοητών κύκλων στους οποίους πραγματοποιείται η δειγματοληψία έχουν ληφθεί προσεγγιστικά. Θυμίζουμε ότι η διάμετρος της δέσμης στο σημείο πρόσπτωσης έχει μετρηθεί ίση με 1.1 mm.

Πίνακας 7.VII Δείγμα 38N

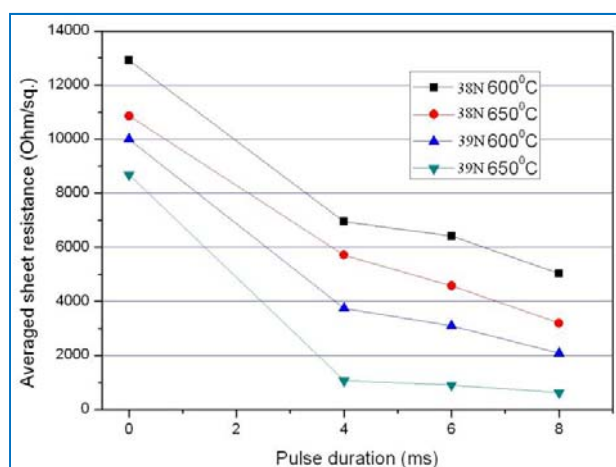
| Θερμοκρασία προ ανόπτησης (°C) | Διάρκεια παλμού laser (ms) | | | | | |
|--------------------------------------|-------------------------------|-----------|----------------|-----------|----------------|-----------|
| | 4 | | 6 | | 8 | |
| | $R_{averaged}$ | R_{min} | $R_{averaged}$ | R_{min} | $R_{averaged}$ | R_{min} |
| 600 | 12925 | 6593 | | | | |
| | | | 10092 | 6420 | | |
| | | | | | 10787 | 5031 |
| 650 | 9956 | 5714 | | | | |
| | | | 10860 | 4567 | | |
| | | | | | 10229 | 2226 |

Πίνακας 7.VIII Δείγμα 39N

| Θερμοκρασία προ ανόπτησης (°C) | Διάρκεια παλμού laser (ms) | | | | | | | |
|---|-------------------------------|-----------|----------------|-----------|----------------|-----------|----------------|-----------|
| | 4 | | 6 | | 8 | | 10 | |
| | $R_{averaged}$ | R_{min} | $R_{averaged}$ | R_{min} | $R_{averaged}$ | R_{min} | $R_{averaged}$ | R_{min} |
| 600 | 7174 | 3743 | | | | | | |
| | | | 9207 | 3102 | | | | |
| | | | | | 11526 | 2081 | | |
| 650 | 8685 | 1528 | | | | | 3678 | 750 |
| | | | 7218 | 1070 | | | | |
| | | | | | 7251 | 623 | | |
| | | | | | | 1075 | 250 | |

Τέλος, στο διάγραμμα 7.18 παρουσιάζεται η μεταβολή της μέσης τιμής της επιφανειακής αντίστασης με την διάρκεια του παλμού για κάθε έναν από τους τέσσερις δυνατούς συνδυασμούς δείγματος και αρχικής θερμοκρασίας. Η χρονική στιγμή $t=0$, εκφράζει κάθε φορά το δείγμα που έχει υποστεί μόνο θερμική επεξεργασία και όχι ανόπτηση με laser.

Η συνθήκη των 650°C και για τις δυο κατηγορίες δειγμάτων, παρουσιάζει μεγαλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης σε σχέση με την 600°C. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποδοθεί στην μεγαλύτερη αρχική συγκέντρωση θερμικά ενεργοποιημένων φορέων. Καθώς ο συντελεστής απορρόφησης εξαρτάται ισχυρά από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση φορέων, αυτή η αρχική θερμοκρασιακή διαφορά, οδηγεί σε αποδοτικότερη απορρόφηση της φωτεινής ενέργειας και μάλιστα σε μειωμένο όγκο του υλικού. Η αυξημένη ποσότητα οπτικής ενέργειας μεταφέρεται στο πλέγμα μέσω σκεδάσεων ηλεκτρονίου-φωτονίου. Ως αποτέλεσμα περισσότερα άτομα Βορίου ανακατανέμονται από ενδοπλεγματικές σε πλεγματικές θέσεις. Επιπλέον αυτή η ενέργεια συνεισφέρει και στην θεραπεία της ζημιάς που είχε εισαχθεί πρωτογενώς στο πλέγμα κατά την εμφύτευση. Η συνθήκη 650°C+LA 8 ms για το δείγμα με την συνθήκη εμφύτευσης 600 eV/3E15 cm⁻² οδηγεί σε ενεργοποίηση πάνω από το θεωρητικό όριο στερεάς διαλυτότητας ($R_s=650\Omega/\text{sq}<740\Omega/\text{sq}$). Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με την ελάχιστη διάχυση που παρατηρείται είναι μια εξαιρετική ένδειξη για την αποτελεσματικότητα της ανόπτησης με χρήση laser διοξειδίου του άνθρακα. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ότι τα δείγματα τύπου 38N εμφανίζουν αισθητά μεγαλύτερες τιμές επιφανειακής αντίστασης σε σχέση με τα δείγματα τύπου 39N παρά το γεγονός ότι η ονομαστική δόση εμφύτευσης του πρώτου είναι διπλάσια σε σχέση με αυτή του δεύτερου (6E15 cm⁻² σε σχέση με τα 3E15 cm⁻²). Το παράδοξο αυτό γεγονός μπορεί εν μέρει να αποδοθεί στο ότι οι πραγματικές εμφυτευθείσες δόσεις είναι 5.41 και 8.56E14 cm⁻² αντίστοιχα, η εμφυτευθείσα δόση στο δείγμα 39N είναι τελικά μεγαλύτερη από αυτή στο 38N. Επιπλέον, η δόση του 39N είναι κατανομημένη σε μεγαλύτερο εύρος, και ως εκ τούτου, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως αναμένονται μικρότερες τιμές επιφανειακής αντίστασης ακόμα και αν η δόση ήταν ίδια.



Εικόνα 7.18 Εξέλιξη της μέσης τιμής της επιφανειακής αντίστασης με την διάρκεια του παλμού laser. Οι γραμμές υπάρχουν, μόνο για να καθοδηγούν το μάτι. Η συνθήκη των 650°C και για τις δυο κατηγορίες δειγμάτων, παρουσιάζει μεγαλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης σε σχέση με την 600°C, εξαιτίας της μεγαλύτερης αρχικής απορρόφησης, η οποία οδηγεί τελικά σε μεγαλύτερη θερμοκρασία κορυφής. Η

συνθήκη 650°C+LA 8ms για το δείγμα με την συνθήκη εμφύτευσης 600 eV/3E15 cm⁻² οδηγεί σε ενεργοποίηση πάνω από το θεωρητικό όριο στερεάς διαλυτότητας ($R_s=650\Omega/\text{sq}<740\Omega/\text{sq}$.)

7.8 Ανακεφαλαίωση

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφηκε καταρχάς η διαδικασία κατασκευής της διάταξης ακτινοβόλησης με χρήση CO₂, η οποία αποτέλεσε και τον πυρήνα της πειραματικής προσπάθειας. Παρά τα σημαντικά προβλήματα που προέκυψαν από την προβληματική κατασκευή του laser αλλά και κυρίως από τις σχεδιαστικές προκλήσεις που τέθηκαν, τελικώς κατέστη δυνατή η δημιουργία μιας αξιόπιστης, ασφαλούς και χρηστικής διάταξης η οποία είναι ικανή να θερμάνει το δισκία πυριτίου στο επιθυμητό εύρος θερμοκρασιών μέσα σε πολύ μικρούς χρόνους.

Στα πλαίσια της μελέτης της χρήσης CO₂ laser για την κατασκευή ρηχών επαφών, πραγματοποιήθηκε πλήθος ακτινοβολήσεων στις οποίες δοκιμάστηκε ένα μεγάλο εύρος συνδυασμών διάρκειας παλμού, θερμοκρασίας προανόπτησης και διαμέτρου του σποτ. Στις ακτινοβολήσεις χρησιμοποιήσαμε δυο διαφορετικά δείγματα και διεξήχθη τόσο μορφολογικός όσο και ηλεκτρικός χαρακτηρισμός με τη βοήθεια μετρήσεων SIMS και επιφανειακής αντίστασης αντιστοίχως. Οι πλέον ενδιαφέρουσες συνθήκες ακτινοβόλησης είναι αυτές με την μικρότερη διάρκεια παλμού και την εστίαση στην μικρότερη διάμετρο (1.1 mm). Οι μετρήσεις κατέδειξαν πολύ περιορισμένη διάχυση, της τάξης των 2 nm, τιμή που πληροί τις απαιτήσεις για τον σχηματισμό των ρηχών επαφών για τις επόμενες γενιές CMOS από τον τεχνολογικό κόμβο των 32nm και κάτω. Επιπλέον, και οι μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης κατέδειξαν την επίτευξη υψηλών επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης, ειδικά για την συνθήκη 650°C+LA 8ms για το δείγμα 39N με την συνθήκη εμφύτευσης 600eV/3E15 cm⁻² οδηγεί σε ενεργοποίηση πάνω από το θεωρητικό όριο στερεάς διαλυτότητας ($R_s=650\Omega/\text{sq}<740\Omega/\text{sq}$). Με βάση τα παραπάνω και σε συνδυασμό με τα εγγενή πλεονεκτήματα ³⁸ ³⁹που προσφέρει η χρήση CO₂, η τελευταία καθίσταται ως ιδιαίτερα υποσχόμενη για την κατασκευή ρηχών επαφών.

Βιβλιογραφικές αναφορές 7^{ου} κεφαλαίου

D. Bauerle “Laser Processing and Chemistry” εκδ. Springer 2000

O. Svelto, “Αρχές των lasers”, Μτφ. Γ.Α. Κουρούκλης, Α.Α. Σεραφεινίδης Εκδ. Συμμετρία 1986

“Silicon VLSI Technology”, J.D. Plummer et al, εκδόσεις Prentice Hall 2000.

“Low Level Measurements” 5th edition, εκδόσεις KEITHLEY

“Semiconductor Material & Device Characterization” D. K. Schroder εκδ. Wiley-Interscience 1998

¹ G.K. Celler, R. Borutta, W.L. Brown et al., *Proceedings laser-solid interactions and laser proceedings* 1978, edited by S.D. Ferris et al. (AIP, New York, 1979), p. 381

- ² M. Takai, P.H. Tsien, S.C. Tsu et al., *Appl. Phys.* 22, 129 (1980)
- ³ R.B. James, G.D. Jeist, R.T. Young et al., *J. Appl. Phys.* 62 (7) 1987 p. 2981
- ⁴ M. Blomberg, K. Naukkarinen, T. Tuomi et al. *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 2327
- ⁵ A. Bhattacharyya, B.G Streetman, *Sol. State Com.*, **36** (1980) 671-675
- ⁶ A. Bhattacharyya B.G. Streetman J., *Phys. D: Appl. Phys.*, 14 (1981) L67-72.
- ⁷ J. Narayan, R.B. James, O.W. Holland et al. *J. Vac. Sci. Technol. A* 3(4) (1985) 1836
- ⁸ Meyer et al.
- ⁹ P.H. Tsien, J. Gotzlich, H. Ryssel et al., *J. Appl. Phys.* Vol. 53 (1) (1982) 663
- ¹⁰ T. Ito et al., *Ext. Abs. of 5th Intel Workshop on Junction Technol.* (Osaka 2005) 59
- ¹¹ K. Adashi et al., *Symp. VLSI Tech. Dig.*, (2005) 142
- ¹² C.K.N. Patel et al., *Phys. Rev. Lett.* 12, 588 (1964)
- ¹³ K. Naukkarinen, T. Tuomi, M. Blomeberg et al., *J. Appl. Phys.*, Vol. 53, No. 8 (1982) 5634
- ¹⁴ G.K. Celler, J.M. Poate, G.A. Rozgonyi et al., *J. Appl. Phys.* Vol. 50 No. 11 (1979) 7265
- ¹⁵ Y. Liu and E. Wang, *J. Appl. Phys.* 62 (3) 1987 p. 1006
- ¹⁶ T. Sato, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol 6, no 3 March 1967, 339
- ¹⁷ M. Doubenskaia, Ph. Bertrand, I. Smurov, *Surf. & Coat. Tech.* 201 (2006) 1955
- ¹⁸ W. Lerch, S. Paul, J. Niess et al. *Ext. Abs. the 7th International Workshop on Junction Tech.* 2007
- ¹⁹ C. T. M. Kwok, R. D. Braatz, S. Paul et al., *J. Appl. Phys.* **105**, 063514 (2009)
- ²⁰ T. Noda, W. Vandervorst, S. Felch et al., “Analysis of Dopant Diffusion and Defect Evolution during sub-millisecond Non-melt Laser Annealing based on an Atomistic Kinetic Monte Carlo Approach”, (2006)
- ²¹ C. H. Poon, A. See, Y. Tan, *J. Appl. Phys.* **103**, 084906 (2008).
- ²² K. T. Nishinohara, T. Ito, and K. Suguro, *IEEE Trans. Semicond. Manuf.*, vol. 17, no. 3, pp. 286–291, Aug. 2004.
- ²³ Z. Luo, Y. F. Chong, J. Kim et al., in *IEDM Tech. Dig.*, Dec. 2005, pp. 725–729.
- ²⁴ K. Adachi, K. Ohuchi, N. Aoki et al, in *VLSI Symp. Tech. Dig.*, 2005, pp. 142–143.
- ²⁵ A. Shima, Y. Wang, D. Upadhyaya et al. in *VLSI Symp. Tech. Dig.*, 2005, pp. 144–145.
- ²⁶ K. Yamashita, H. Nishimori, M. Yoshioka, in *Proc. IEEE Symp. Semicond. Manuf.*, 2003, pp. 153–156.
- ²⁷ C. F. Nieh, K. C. Ku, C. H. Chen et al., *IEEE Elec. Dev. Lett.*, Vol. 27, no. 12, (2006) 969
- ²⁸ A. Shima, Y. Wang, S. Talwar et al., 2004 *Symposium on VLSI Technology Digest of Technical Papers* (2004) 174
- ²⁹ G.K. Celler, J.M. Poate, G.A. Rozgonyi et al., *J. Appl. Phys.* Vol. 50 No. 11 (1979) 7265
- ³⁰ M. Blomberg, K. Naukkarinen, T. Tuomi et al. *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 2327
- ³¹ Y. Liu and E. Wang, *J. Appl. Phys.* 62 (3) 1987 p. 1006
- ³² M. Bersani et al., *Appl. Surf. Sci.* 252 (2006) 7315.
- ³³ W. Vandervorst et al., *Appl. Surf. Sci.* 203–204 (2003) 371.
- ³⁴ S.C. Jain et al., *J. Appl. Phys.* 91 (11) (2002) 8919. 230
- ³⁵ D.F. Downey et al., *Solid State Technol.* 40 (1997) 1340.
- ³⁶ D. Lee et al., *Electrochemical and Solid-State Letters*, **9** 1 G19-G21 2006
- ³⁷ International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2005, [Online], Available: <http://public.itrs.net>
- ³⁸ K. Adashi et al., *Symp. VLSI Tech. Dig.*, (2005) 142
- ³⁹ C.K.N. Patel et al., *Phys. Rev. Lett.* 12, 588 (1964)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ CO₂ LASER ΜΕ ΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ

8.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η διαδικασία προσομοίωσης της ανόπτησης πυριτίου με CO₂ laser με χρήση του λογισμικού Sentaurus, τα προβλήματα που αντιμετωπίστηκαν και οι στρατηγικές που εφαρμόστηκαν για την επίλυσή τους. Στο εδάφιο αυτό, το πρόβλημα θα εξεταστεί αρχικά από τη σκοπιά της θερμοκρασιακής εξέλιξης του φαινομένου. Παράλληλα με τις προσομοιώσεις, που πραγματοποιήθηκαν τόσο για μονοδιάστατες όσο και για δισδιάστατες περιπτώσεις, παρατίθενται και αποτελέσματα από πειραματικές μετρήσεις της θερμοκρασίας μέσω πυρομέτρου που διενεργήθηκαν κατά την διάρκεια των ακτινοβολήσεων. Η σύγκριση αυτών με τα δεδομένα των προσομοιώσεων, προσφέρει την δυνατότητα ελέγχου και αξιολόγησης των υπολογισμών.

Το επόμενο, αλλά και όχι λιγότερο σημαντικό τμήμα της προσομοίωσης της διαδικασίας δημιουργίας ρηχών επαφών αποτελεί η μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων Βορίου. Είναι προφανές ότι η μελέτη αυτή προϋποθέτει την γνώση των αποτελεσμάτων, τόσο της διαδικασίας εμφύτευσης όσο και της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με το υλικό, όσον αφορά στην εξέλιξη της κατανομής της θερμοκρασίας μέσα στον όγκο του. Έτσι λοιπόν, θα χρησιμοποιήσουμε τα αποτελέσματα που εξάγαμε στα προηγούμενα στάδια, για να μοντελοποιήσουμε την κινητική της διάχυσης του Βορίου. Όπως θα δείξουμε και στη συνέχεια, η χρήση αναλυτικών υπολογιστικών εργαλείων έδωσε πολύ ικανοποιητικά αποτελέσματα, ιδιαίτερα όσον αφορά στη διάχυση.

Ο αρχικός μας σχεδιασμός περιελάμβανε την μελέτη του φαινομένου, τόσο με αναλυτικούς αλγορίθμους, όσο και με Kinetic Monte Carlo (KMC). Μια διεξοδικότερη διερεύνηση όμως κατέδειξε ότι η προσπάθεια προσομοίωσης με την χρήση της μεθόδου KMC, προσκρούει σε σημαντικά «τεχνικά» προβλήματα. Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν αναλυτικά τόσο τα κυριότερα προβλήματα που ενέχει η χρήση της μεθόδου KMC, όσο και οι ανεπιτυχείς προσπάθειες που έγιναν για να αρθούν αυτά τα προβλήματα. Η αποτυχία αυτή μπορεί να αποδοθεί αφενός μεν σε αυτή καθεαυτή τη φύση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολήσεως σε αυτό το μήκος κύματος αλλά και της μεθόδου KMC. Πρώτα όμως, θα ξεκινήσουμε από την παρουσίαση των αποτελεσμάτων που προήλθαν από την χρήση των αριθμητικών - συνεχών μοντέλων.

8.2 Το πρόβλημα της ανόπτησης πυριτίου με χρήση CO₂ laser

Το σημαντικότερο πρόβλημα που αντιμετωπίστηκε κατά τη προσπάθεια προσομοίωσης της ανόπτησης πυριτίου με CO₂ laser είναι το γεγονός ότι η σχετική βιβλιογραφία ήταν εξαιρετικά περιορισμένη, με συνέπεια η διαδικασία να πρέπει να ξεκινήσει εκ του μηδενός. Πιο συγκεκριμένα, η συντριπτική πλειοψηφία των σχετικών δημοσιεύσεων^{1 2 3 4 5 6}, αφορούσε ακτινοβολήσεις σε καθεστώς nanosecond ή second, με αποτέλεσμα τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της αλληλεπίδρασης να διαφοροποιούνται αισθητά σε σχέση με την δική μας περίπτωση που είναι της τάξης των

millisecond. Αυτή η έλλειψη βιβλιογραφίας απαντήθηκε, τόσο στο επίπεδο της ανάλυσης του φαινομένου της αλληλεπίδρασης του CO₂ laser με το πυρίτιο από άποψη θεωρίας αλλά και διαθέσιμων πειραματικών αποτελεσμάτων όσο και στο επίπεδο της υλοποίησης της προσομοίωσης μέσω του λογισμικού Sentaurus Process, αφού σύμφωνα με τη κατασκευάστρια εταιρία (Synopsys) το κομμάτι αυτό τελεί ακόμα υπό μελέτη

Όσον αφορά στο πρώτο κομμάτι, αυτό δηλαδή της θεωρητικής ανάλυσης του φαινομένου της αλληλεπίδρασης του CO₂ laser με το πυρίτιο και τις δυσκολίες που εμπεριέχει, οι βασικές πτυχές του φαινομένου αναλύθηκαν στο κεφάλαιο 4 με τίτλο “Αλληλεπίδραση ακτινοβολίας CO₂ laser με την ύλη”. Με βάση αυτή την ανάλυση θα ήταν χρήσιμο εδώ, να συζητήσουμε συνοπτικά δυο βασικά προβλήματα που κάνουν την περίπτωση του CO₂ laser να ξεχωρίζει σε σχέση με την αλληλεπίδραση των υπολοίπων τύπων laser με το πυρίτιο ανεβάζοντας σημαντικά το δείκτη δυσκολίας για την προσομοίωση των σχετικών φαινομένων.

Το πρώτο πρόβλημα έγκειται στον υπολογισμό του συντελεστή απορρόφησης a του πυριτίου για το μήκος κύματος του CO₂ laser (10.6 μm). Σε παλιότερες δημοσιεύσεις λαμβανόταν υπόψη μόνο η εξάρτηση του συντελεστή από τη θερμοκρασία T . Στη συνέχεια, με βάση νέους κβαντομηχανικούς υπολογισμούς που πραγματοποιήθηκαν σε δημοσιεύσεις των Bhattacharyya⁷ και Blomberg⁸ αποδείχθηκε ότι ο συντελεστής a εξαρτάται τόσο από τη θερμοκρασία T , όσο και από τη συγκέντρωση ελεύθερων φορέων n επομένως και από τη συγκέντρωση προσμίξεων N . Συνολικά, το a είναι συνάρτηση δυο μεταβλητών $a(N,T)$. Την ακριβή μορφή της πολύπλοκης συνάρτησης αυτής μας δίνει ο Blomberg, όπως έχουμε ξαναδεί στο κεφάλαιο 4. Επιπλέον, προσεγγιστικούς τύπους εξάρτησης του a μόνο από τη θερμοκρασία T για σταθερά επίπεδα συγκέντρωσης προσμίξεων N δίνει και ο Bhattacharyya σε αντίστοιχη δημοσίευση.

Το δεύτερο πρόβλημα έχει να κάνει με τη μορφή του παλμού του CO₂ laser. Σε αντίθεση με το KrF laser το οποίο έχει παλμό σταθερό χωρικά (top hat) και Γιαουσιανό χρονικά, το CO₂ laser έχει παλμό σταθερό χρονικά και Γιαουσιανό χωρικά. Αυτό αποτελεί μεγάλο πρόβλημα κατά την προσομοίωση με το Sentaurus, καθώς το πρόγραμμα θεωρεί εξ' ορισμού κάθε παλμό laser σταθερό χωρικά. Η χρήση παλμού σταθερής μορφής αντί Γιαουσιανής έχει σημαντικές συνέπειες στο προκύπτον θερμοκρασιακό προφίλ του ανοπτημένου πυριτίου, και κυρίως στον υπολογισμό της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας, καθώς δεν αναπαριστά ορθά το φαινόμενο, όπως θα συζητηθεί και παρακάτω. Ως εκ τούτου πρέπει να ληφθεί ειδική μέριμνα για την εισαγωγή τη χωρικής μορφής του παλμού.

Στη συνέχεια, παρουσιάζονται τα βήματα που ακολουθήθηκαν κατά την επίλυση των ζητημάτων αυτών, αρχικά σε (πρακτικά) μονοδιάστατο επίπεδο και κατόπιν σε διδιάστατο, σειρά η οποία αντανάκλα και την εξέλιξη της διαδικασίας της προσομοίωσης στην οποία προβήκαμε.

8.3 Διαδικασία επίλυσης των κυριότερων ζητημάτων που άπτονται της προσομοίωσης

8.3.1 Γενικά

Η μορφή των προκαθορισμένων μοντέλων του λογισμικού αλλά και η ανάγκη ελαχιστοποίησης του υπολογιστικού χρόνου για την διενέργεια όσο το δυνατόν μεγαλύτερου αριθμού δοκιμών επέβαλλε η μελέτη να γίνει σε πρώτο στάδιο σε μια διάσταση. Σε αντίθεση με το

KrF laser το οποίο λόγω της μορφής του παλμού και του εξ ορισμού σταθερού συντελεστή απορρόφησης a , ήταν θεωρητικά και πρακτικά, όπως αποδείχθηκε, δυνατόν να προσομοιωθεί μονοδιάστατα, στην περίπτωση του CO₂ laser η προσέγγιση αυτή είναι προβληματική. Άλλωστε είναι αυτονόητο το γεγονός ότι προσπαθώντας να λύσουμε πραγματικά τρισδιάστατα προβλήματα στα οποία εμπλέκονται εξισώσεις θερμικές και διάχυσης, σε μία διάσταση, εξ ορισμού έχουμε σφάλματα διότι δεν υπάρχει τρόπος υπολογισμού της διαφυγής θερμότητας προς στις πλευρικές διαστάσεις. Παρόλα αυτά, επιλέχθηκε να ξεκινήσει η προσπάθεια προσομοίωσης στη μία διάσταση ώστε να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος σε χρόνο και μνήμη και να αποκτηθεί μια αρχική εξοικείωση με το πρόβλημα και τη διερεύνηση όλων των παραμέτρων που εμπλέκονται.

Η πρώτη ιδέα ήταν να χρησιμοποιηθεί στην βάση του ο αλγόριθμος για την διάχυση που χρησιμοποιήθηκε σε προηγούμενη δουλειά για το KrF laser με την προσδοκία ότι θα μπορούσε να αναπαράγει τις διαδικασίες που σχετίζονται με την κινητική των προσμίξεων. Προσομοιώσεις έγιναν για παλμούς 40, 50, 80 και 100 ms χρησιμοποιώντας έτοιμους θερμικούς κύκλους για το CO₂ laser που είχαν ληφθεί μέσω πυρομετρίας κατά την διάρκεια ακτινοβολήσεων ώστε να αποφευχθεί ο ορισμός της εξίσωσης του συντελεστή απορρόφησης a και της ιδιότυπης μορφής του παλμού. Τα αποτελέσματα όσον αφορά στην κινητική και ενεργοποίηση των προσμίξεων, παρουσίαζαν μεγάλη απόκλιση από τα αναμενόμενα και κυρίως, όσον αφορά στη διάχυση που παρατηρείται και η οποία ήταν υπερβολικά μεγάλη. Αυτό εν μέρει, μπορεί να αποδοθεί στη σχετικά μειωμένη αξιοπιστία των δεδομένων του πυρομέτρου λόγω των ζητημάτων που αναλύθηκαν διεξοδικά στο προηγούμενο κεφάλαιο⁹.

Σε κάθε περίπτωση, από την στιγμή που δεν είναι δυνατόν να στηριχθούμε απόλυτα στα θερμοκρασιακά προφίλ που έχουν προκύψει από το πυρόμετρο για να τα χρησιμοποιήσουμε σαν είσοδο για την μελέτη των φαινομένων κινητικής, είμαστε αναγκασμένοι να προβούμε στην κατασκευή ενός νέου αλγορίθμου που να προσομοιώνει την επίδραση της ανόπτησης με laser CO₂ στην θερμοκρασιακή εξέλιξη από την αρχή. Έπρεπε λοιπόν να βρεθούν τρόποι να ξεπεραστούν τα δυο βασικά προβλήματα, αυτά της μορφής του παλμού και του συντελεστή απορρόφησης, τα οποία και θα παρουσιάσουμε αναλυτικότερα στην συνέχεια.

8.3.2 Συντελεστής απορρόφησης α

A. Προκαταρκτικές διερευνήσεις προσομοιώσεων στην βιβλιογραφία

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, το πρόβλημα με τον συντελεστή απορρόφησης πήγαζε από την εξάρτησή του από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση των προσμίξεων. Το πρώτο βήμα ήταν η επίτευξη εισαγωγής της μορφής του συντελεστή μέσω κατάλληλων αναθέσεων μεταβλητών στον κώδικα. Κατόπιν τούτου πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας τους δυο προτεινόμενους τύπους για τη μορφή της συνάρτησης $a(N,T)$ από τις δυο δημοσιεύσεις που ήταν διαθέσιμες από την βιβλιογραφία. Στις πρώτες δοκιμές που διεξήχθησαν, παρατηρήθηκε ότι το λογισμικό αδυνατούσε να δεχτεί την παρούσα μορφή του συντελεστή απορρόφησης, με αποτέλεσμα να λαμβάνει μια προκαθορισμένη τιμή $\alpha = 2000 \text{ cm}^{-1}$. Επιπλέον, αντίθετα με ό, τι αναμενόταν σε πρώτη εκτίμηση, η καμπύλη θερμοκρασίας – χρόνου όχι μόνο έστρεφε τα κοίλα προς τα κάτω, αλλά επιπλέον παρουσίαζε κορεσμό. Εξ' αιτίας της έντονης μεταβατικότητας του φαινομένου, όπως αυτή είχε περιγραφεί στο κεφάλαιο της αλληλεπίδρασης, αναμέναμε να στρέφει τα κοίλα προς τα

πάνω. Έτσι αποφασίσαμε προτού αναπτύξουμε από την αρχή τον αλγόριθμο, να προβούμε στην αναπαραγωγή κάποιων βιβλιογραφικών περιπτώσεων για να δούμε κατά πόσον ισχύουν μερικά από τα επιμέρους τμήματα του αλγόριθμου.

i. Προσέγγιση κατά Bhattacharrya

Αρχικά χρησιμοποιήθηκε ο τύπος που δίνει ο Bhattacharrya [Bhattacharrya 1980]. Στην αντίστοιχη δημοσίευσή του, αν και δηλώνει την εξάρτηση του a από τα N και T , αντιμετωπίζει τη συγκέντρωση N ως παράμετρο και επιλύει τις θερμοικές εξισώσεις δίνοντας έναν αναλυτικό τύπο της εξάρτησης του a μόνο από τη θερμοκρασία T . Η έκφραση που προτείνει λαμβάνει σταθερή την συγκέντρωση N ίση με 10^{19} cm^{-3} και έχει την μορφή:

$$a(T) = a_0 \cdot \exp\left(\frac{T}{T_1}\right) \quad (8.1)$$

με τις σταθερές να παίρνουν τις τιμές $a_0 = 3,17 \cdot 10^{-4}$ και $T_1 = 346 \text{ K}$.

Αν και ήταν προφανές ότι ο τύπος του Bhattacharrya δεν ήταν τόσο πλήρης όσο αυτός του Blomberg που είδαμε στο κεφάλαιο 4 και θα αναλύσουμε και παρακάτω, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις έτσι ώστε να γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων αυτών με τα αποτελέσματα που δίνει ο Bhattacharrya στη δημοσίευσή του και έτσι να ελεγχθεί ο αλγόριθμός μας ως προς τη συνοχή του, όσον αφορά στα υπόλοιπα κομμάτια του ασχέτως με την ανόπτηση (εμφύτευση, διάχυση, υπολογιστική ακρίβεια επίλυσης θερμοικών εξισώσεων, συνοχή πλέγματός και υπολογιστικού βήματος). Ο Bhattacharrya προσομοίωσε διαδικασίες ακτινοβόλησης με παλμούς που παρουσιάζουν σχεδόν γκαουσιανή χρονική κατανομή, και οι οποίοι είναι παρόμοιας μορφής με αυτούς που προσομοιώνει το στάνταρντ μοντέλο του Sentaurus με αποτέλεσμα να μην απαιτούνται σημαντικές τροποποιήσεις. Ένας ακόμα σημαντικός παράγοντας, ο οποίος μας έστρεψε στην αναπαραγωγή των αλγορίθμων του Bhattacharrya, είναι το γεγονός ότι προσομοιώνει ανόπτηση σε καθεστώς ns, στο οποίο όλα τα χαρακτηριστικά της μεταβατικής αύξησης της θερμοκρασίας τα οποία συζητήσαμε στο κεφάλαιο της αλληλεπίδρασης είναι πιο έκδηλα. Με άλλα λόγια, λόγω του εξαιρετικά μικρού χρόνου ανόπτησης, τα φαινόμενα θερμοικής διάχυσης είναι ασήμαντα, με αποτέλεσμα να κυριαρχούν τα οπτικά φαινόμενα. Έτσι η θερμοκρασία αυξάνει σημαντικά με αποτέλεσμα να μεγαλώνει αντίστοιχα και ο συντελεστής απορρόφησης, δίνοντας με την σειρά του το έναυσμα για ακόμα πιο έντονη αύξηση της θερμοκρασίας. Στο διάγραμμα της εξέλιξης της θερμοκρασίας με τον χρόνο λοιπόν παρατηρήθηκε ότι η καμπύλη στρέφει τα κοίλα προς τα πάνω, όπως θα αναμενόταν σε ένα τόσο μεταβατικό φαινόμενο. Εδώ, αν και οι απόλυτες τιμές της θερμοκρασίας μεταξύ των προσομοιώσεών μας και του Bhattacharrya δεν έρχονται σε συμφωνία, η γενική τάση και η μορφολογία των καμπυλών είναι παρόμοια. Η διαφορά αυτή ανάμεσα στις τιμές μπορεί να αποδοθεί αφενός μεν στις διαφορετικές εκφράσεις για την απορρόφηση, και αφετέρου στο γεγονός ότι ο παλμός που χρησιμοποιεί σαν είσοδο ο Bhattacharrya είναι περίπου γκαουσιανός και όχι γκαουσιανός, όπως είναι το προκαθορισμένο μοντέλο του Sentaurus. Επιπλέον, έχει προβεί σε ένα πλήθος προσεγγίσεων και απλοποιήσεων, με αποτέλεσμα τα αποτελέσματα που δίνει να έχουν αμφισβητούμενη αξιοπιστία.

ii. Προσέγγιση κατά Blomberg

Αφότου ελέγχθησαν τα παραπάνω και τα αποτελέσματα ήταν σχετικά ικανοποιητικά, το επόμενο βήμα ήταν και το τελικό ζητούμενο, δηλαδή η ενσωμάτωση της εξίσωσης του Blomberg

για το συντελεστή a . Ο Blomberg στην αντίστοιχη δημοσίευσή του, βασιζόμενος στο γεγονός ότι η απορρόφηση της ακτινοβολίας του CO₂ laser στο πυρίτιο πραγματοποιείται κυρίως από τη δέσμευση ελεύθερων φορέων, οδηγείται στο συμπέρασμα ότι ο συντελεστής απορρόφησης είναι εξαρτώμενος από τη συγκέντρωση φορέων και συνεπώς από τη συγκέντρωση προσμίξεων και τη θερμοκρασία. Επίσης, καταλήγει στο συμπέρασμα ότι η ενεργός διατομή απορρόφησης ανά ελεύθερο φορέα σ εξαρτάται από τη θερμοκρασία αλλά και στο ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες ο παράγοντας της απορρόφησης λόγω των φωνονίων του πλέγματος αρχίζει να έχει σημασία. Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω καταλήγει στον εξής τύπο για το a :

$$a(N, T) = \sigma(T) \cdot [N + n_i(T)] + a_0 \quad (8.2)$$

με $n_i(T)$ να είναι η εξαρτημένη από την θερμοκρασία ενδογενής συγκέντρωση φορέων σε μονάδες cm⁻³ η οποία μπορεί να εκφραστεί ως:

$$n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \quad (8.3)$$

και a_0 να είναι ο συντελεστής απορρόφησης πλέγματος με τιμή περίπου 2cm⁻¹. Τέλος η διατομή σ δίνεται από τον τύπο:

$$\sigma(T) = CT^{3/2} \quad (8.4)$$

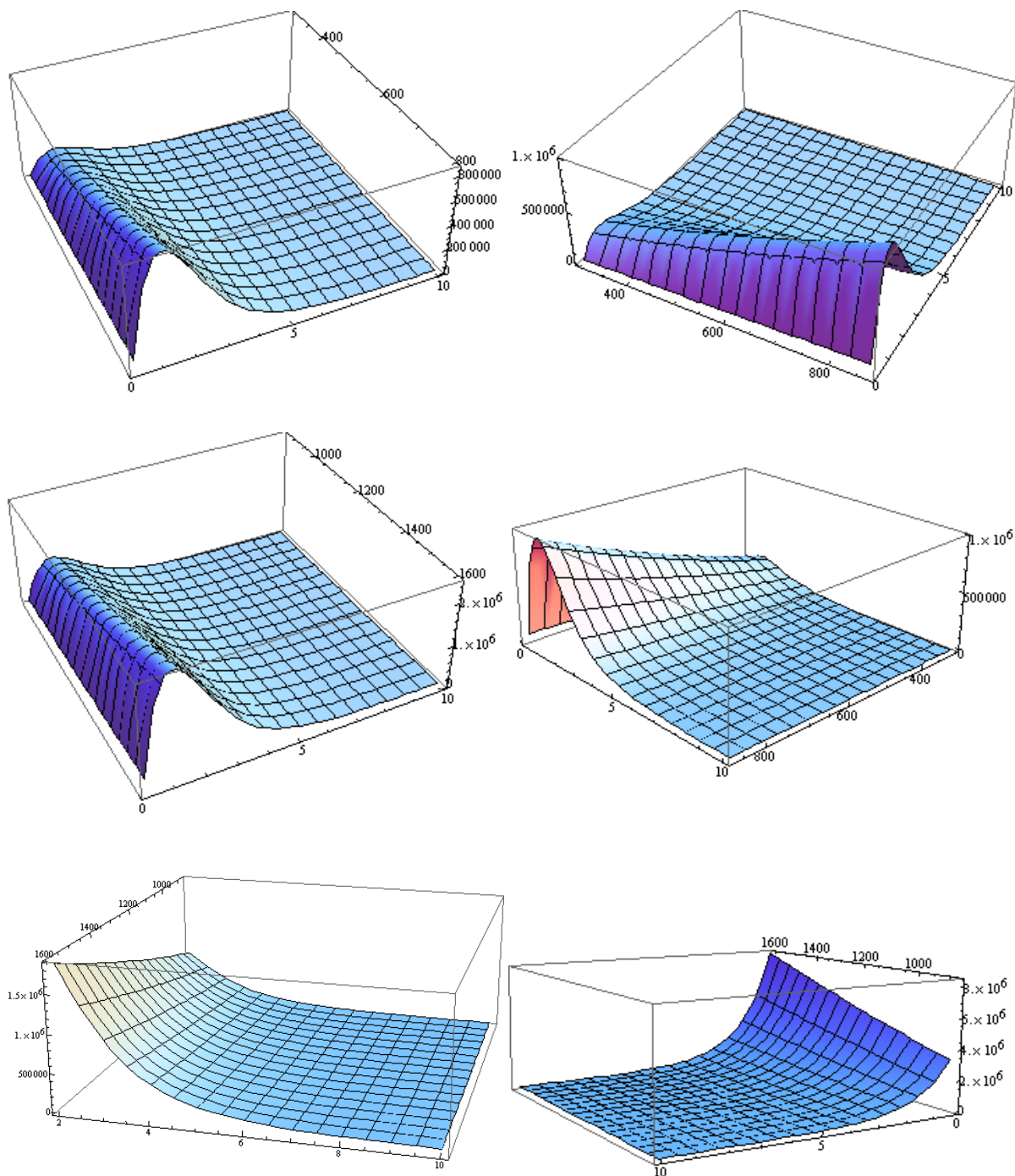
με το συντελεστή C να ισούται με $C = 1,9 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^{-2} \text{ K}^{-3/2}$. Συνολικά λοιπόν η εξίσωση για το a θα μπορούσε να γραφτεί ως εξής:

$$a(N, T) = 1,9 \cdot 10^{-20} T^{3/2} \cdot \left[N + 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \right] + 2 \quad (8.5)$$

Εύκολα παρατηρεί κανείς ότι η προκύπτουσα εξίσωση είναι αρκετά πολύπλοκη και υπερεπιθετικά εξαρτώμενη από τη θερμοκρασία T γεγονός που δυσχεραίνει τους υπολογισμούς και αυξάνει αντίστοιχα τον υπολογιστικό χρόνο, ιδιαίτερα στις δισδιάστατες προσομοιώσεις, όπως άλλωστε θα δείξουμε και στη συνέχεια.

Από την στιγμή που θα καταφέρναμε να εισάγουμε την έκφραση της απορρόφησης, το επόμενο ζήτημα ήταν η εισαγωγή του προφίλ της συγκέντρωσης των προσμίξεων Βορίου, όπως αυτή προκύπτει μετά από την εμφύτευση, έτσι ώστε να δημιουργηθεί δυναμικά η κατανομή του συντελεστή απορρόφησης τόσο σε συνάρτηση με τον χρόνο όσο κυρίως και κατά βάθος. Για να γίνει αυτό εφικτό, μπορούμε να ακολουθήσουμε δυο προσεγγίσεις. Η πρώτη και πιο απλή είναι να βασιστούμε στην κατανομή συγκέντρωσης όπως αυτή προκύπτει από την εμφύτευση μέσω του λογισμικού και η οποία ήταν αυτή που τελικά και επιλέχθηκε. Εναλλακτικά μπορεί να γίνει εισαγωγή του προφίλ συγκέντρωσης όπως αυτό έχει προσδιορισθεί πειραματικά από μετρήσεις SIMS. Το πρόβλημα με αυτή την προσέγγιση είναι ότι παρόλο που η μορφή της κατανομής συγκέντρωσης του Βορίου ανταποκρίνεται πλήρως στα πειραματικά δεδομένα, δεν μπορούμε να είμαστε καθόλου σίγουροι για το κατά πόσο αυτό ισχύει όσον αφορά τις κατανομές I, V, ενώ ταυτόχρονα δεν λαμβάνεται καθόλου υπόψη η καταστροφή που έχει εισαχθεί στο πλέγμα λόγω της εμφύτευσης. Καθώς αυτές οι δυο παράμετροι διαδραματίζουν αποφασιστικότερο ρόλο στην μετέπειτα κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων κατά την διάρκεια της ανόπτησης, αποφασίστηκε να χρησιμοποιήσουμε ως είσοδο τα αρχεία που προέκυψαν από την προσομοίωση της διαδικασίας εμφύτευσης και όπως αυτά προέκυψαν σύμφωνα με το κεφάλαιο 6 “Εμφύτευση με πλάσμα”.

Με βάση λοιπόν το προφίλ προσμίξεων των δειγμάτων που δεν έχουν υποστεί ανόπτηση (as implanted) προβήκαμε στην γραφική αναπαράσταση των σχέσεων **XX1** και **XX2** για τα δείγματα 38N και 39N:



Εικόνα 8.1 Συντελεστής απορρόφησης a του πυριτίου σε συνάρτηση της θερμοκρασίας και του βάθους από την επιφάνεια του δείγματος για τα πρώτα 10nm, στα οποία και η απορρόφηση λαμβάνει τις μεγαλύτερες τιμές για το δείγμα 38N (αριστερά) και το δείγμα 39N (δεξιά). Οι μονάδες είναι σε cm^{-1} .

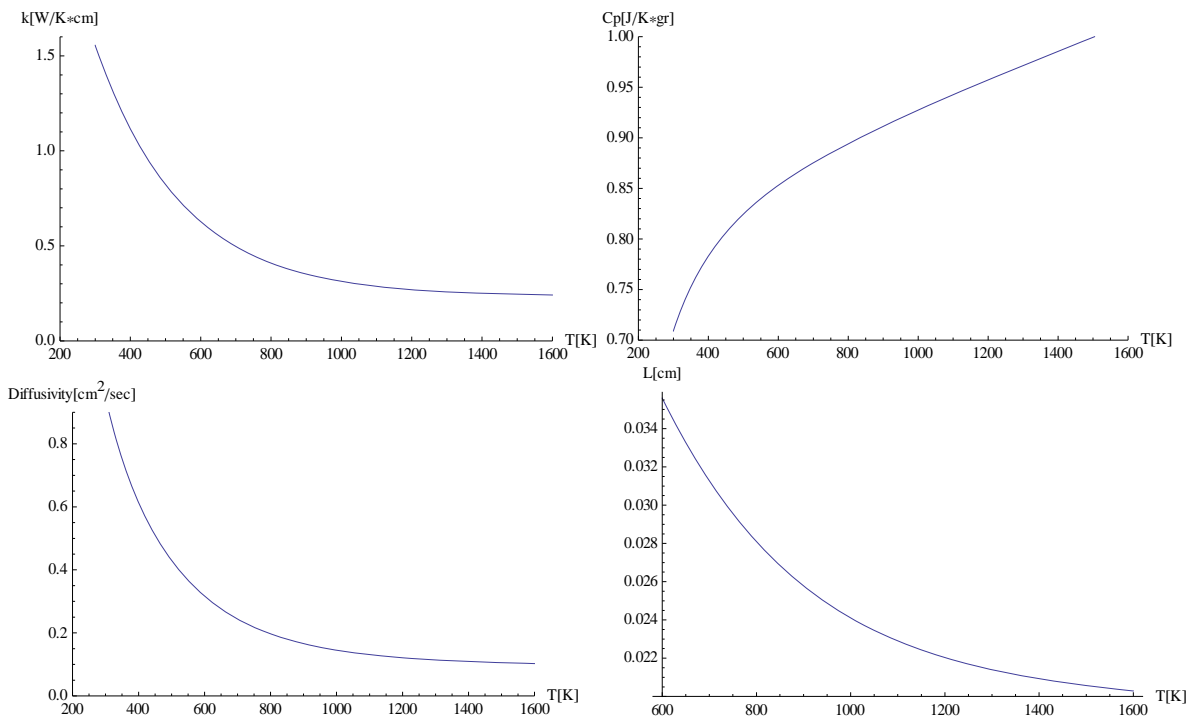
Από τα παραπάνω διαγράμματα είναι προφανής η επίδραση τόσο της θερμοκρασίας, όσο και του προφίλ της συγκέντρωσης στην κατανομή του συντελεστή απορρόφησης. Παρατηρούμε ότι τα δείγματα 38N παρουσιάζουν χαμηλότερη τιμή του a σε σχέση με τα δείγματα 39N. Σε μια

πρώτη ματιά, θα αναμενόταν το αντίθετο καθώς τα 38N έχουν διπλάσια ονομαστική δόση ενώ παράλληλα τα 39N έχουν μεγαλύτερη ονομαστική ενέργεια εμφύτευσης και ως εκ τούτου οι προσμίξεις θα έπρεπε να διεισδύσουν πιο βαθιά. Αυτό θα έπρεπε να ωθεί την κορυφή της συγκέντρωσης που είναι κοντά στην επιφάνεια να είναι υψηλότερη στα 38N σε σχέση με τα 39N. Στην πραγματικότητα όμως, η μεγαλύτερη μέση τιμή ενέργειας των ιόντων των δειγμάτων 39N οδηγεί σε μεγαλύτερο ποσοστό διείσδυσης μέσα στον όγκο του πυριτίου σε σχέση με αυτόν του δείγματος 38N, καθώς παρουσιάζουν μικρότερη πιθανότητα σκέδασης από την επιφάνεια κατά την πρόσπτωση τους. Έτσι, η ολοκλήρωση των προφίλ συγκέντρωσης των δυο δειγμάτων δείχνει ελαφρώς μεγαλύτερη πραγματική δόση για τα δείγματα 39N και ως εκ τούτου λίγο υψηλότερη τιμή για την κορυφή. Σε κάθε περίπτωση, όπως θα δείχτει και στη συνέχεια, η κυριαρχία των θερμοικών φαινομένων λόγω των μεγάλων χαρακτηριστικών χρόνων ανόπτησης, μειώνει την επίδραση αυτής της μικρής διαφοροποίησης του a . Επιπλέον, είναι εμφανής η σημασία της προθέρμανσης του δισκίου πριν την ακτινοβόληση, αφού ο αρχικός συντελεστής απορρόφησης είναι σαφώς πιο υψηλός και επομένως ο ρυθμός απορρόφησης της οπτικής ενέργειας είναι πολύ μεγαλύτερος.

Κατόπιν της επιτυχούς εισαγωγής της συγκέντρωσης στον αλγόριθμο της ανόπτησης στο Sentaurus προέκυψαν δύο βασικά προβλήματα. Το πρώτο είχε να κάνει με το εάν ο τύπος αυτός πραγματικά περιελάμβανε την ολική συγκέντρωση προσμίξεων N ή την συγκέντρωση των ηλεκτρικά ενεργοποιημένων φορέων, η οποία και φυσικά αποτελεί κλάσμα της πρώτης. Ο Blomberg αναφέρει το N , γενικά ως συγκέντρωση προσμίξεων χωρίς να ξεκαθαρίζει σαφώς αν εννοεί τη συνολική συγκέντρωση Βορίου που προκύπτει στον αλγόριθμο ακριβώς μετά το βήμα της εμφύτευσης και την οποία το πρόγραμμα ονομάζει BTotal και παραμένει σταθερή ή την ανά πάσα στιγμή τιμή του μη ενεργοποιημένου Βορίου την οποία ονομάζει Boron. Η τελευταία, μεταβάλλεται με βάση τον τύπο $Boron = BTotal - BActive$ όπου BActive η ανά χρονικό βήμα τιμή συγκέντρωσης του ενεργοποιημένου Βορίου. Εφόσον αυτό δεν ήταν σαφές, αναγκαστικά έγινε διερεύνηση όπου και διαπιστώθηκε ότι στην περίπτωση χρήσης του Boron στη θέση του N τα αποτελέσματα για τις επιφανειακές θερμοκρασίες προέκυπταν αρκετά χαμηλότερα από τη πραγματικότητα. Έτσι καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι η σωστή τιμή για το N στο τύπο του Blomberg είναι η τιμή του προφίλ της συνολικής συγκέντρωσης Βορίου μέσα στο πυρίτιο, BTotal.

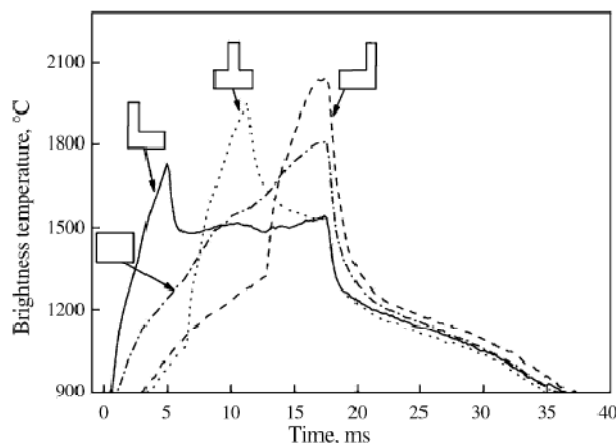
Το δεύτερο πρόβλημα που προέκυψε είχε να κάνει με την εισαγωγή του όρου $n_i(T)$ στο πεδίο ορισμού του a . Το Sentaurus δε μπορούσε να δεχτεί ως είσοδο τον υπερειθετικό όρο $\exp(-7020/T)$ με αποτέλεσμα, άλλοτε να μηδενίζει και άλλοτε να απειρίζεται τον όρο $n_i(T)$ συνολικά. Μετά από πλήθος δοκιμών αποδείχτηκε ότι το πρόβλημα εντοπιζόταν στο γεγονός ότι στο πεδίο ορισμού του a δε δύναται να θέσει κανείς μια συνάρτηση, έστω ζ , σαν όρισμα μιας άλλης συνάρτησης, της $\exp()$. Το πρόβλημα αυτό ξεπεράστηκε χρησιμοποιώντας προσεγγίσεις των εν λόγω συναρτήσεων με πολυώνυμα Taylor. Με χρήση του λογισμικού Mathematica πραγματοποιήθηκαν δυο σενάρια, προσέγγιση με Taylor μόνο του όρου $\exp(-7020/T)$ και προσέγγιση ολόκληρου του όρου $n_i(T)$. Προέκυψε ότι το αποτέλεσμα είναι το ίδιο και στις δυο περιπτώσεις. Οι προσεγγίσεις Taylor έγιναν μέχρι πολυωνύμων 4^{ου} βαθμού, εφόσον από το συγκριτικό διάγραμμα της προσέγγισης με το διάγραμμα της αναλυτικής συνάρτησης προκύπτει ότι το σφάλμα είναι αμελητέο για πολυώνυμο 4^{ου} βαθμού και πάνω.

Επιπλέον, πρέπει να ληφθεί υπόψη και η μεταβολή των συντελεστών θερμικής αγωγιμότητας και ειδικής θερμοκρασίας με την θερμοκρασία για το πυρίτιο. Η θερμική αγωγιμότητα μειώνεται αυξανόμενη της θερμοκρασίας με αποτέλεσμα να εγκλωβίζεται μεγαλύτερο ποσοστό θερμότητας σε δεδομένο όγκο υλικού. Από την άλλη πλευρά, η αύξηση της ειδικής θερμότητας με την θερμοκρασία καθιστά πιο δύσκολη την άνοδο της θερμοκρασίας. Συνολικά η εξάρτηση της θερμικής διαφυγής, δίνεται από την έκφραση: $k/\rho \cdot c_p$, η οποία και υποδεικνύει ότι αυξανόμενη της θερμοκρασίας η θερμότητα έχει την τάση να εγκλωβιστεί στον αρχικό όγκο. Η εξάρτηση των παραπάνω μεγεθών από την θερμοκρασία παριστάνεται στα διαγράμματα 8.2 α, β και γ. Επομένως, για πολύ μικρούς χρόνους ανόπτησης, αυτός ο περιορισμός της θερμικής διαφυγής θα έπρεπε να οδηγεί και σε εκθετική αύξηση της θερμοκρασίας (με άλλα λόγια τη $T_{surf}(t)$ θα έπρεπε να στρέφει τα κοίλα προς τα άνω). Αυτό ακριβώς παρατηρήσαμε όταν αναπαραστήσαμε τις προσομοιώσεις του Bhattacharrya, που ήταν σε καθεστώς nanosecond. Στην περίπτωση των δικών μας πειραμάτων όμως, όπως θα αναλύσουμε και στην συνέχεια, οι χαρακτηριστικοί χρόνοι ανόπτησης της τάξης των ms, οδηγούν σε σχετικά μεγάλα θερμικά μήκη της τάξης των μερικών δεκάδων ή ακόμα και εκατοντάδων μm (όπως φαίνεται και στο διάγραμμα 8.2 δ, για ένα παλμό 4ms), με αποτέλεσμα ένα σημαντικό ποσοστό της θερμότητας να διεισδύει μέσα στον όγκο του υλικού.



Εικόνα 8.2 Εξάρτηση από την θερμοκρασία (σε Kelvin) των σημαντικότερων παραμέτρων που υπεισέρχονται έμμεσα ή άμεσα, στην εξίσωση της θερμότητας. α) συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας, β) Ειδική θερμότητα, γ) Θερμική διαχυτότητα και δ) θερμικό μήκος (για παλμό διάρκειας 4ms) ^{10 11 12}

Επομένως, το φαινόμενο της θέρμανσης λόγω του παλμού κατά την διάρκεια της ανόπτησης παύει να είναι ιδιαίτερα μεταβατικό και ο ρυθμός αύξησης της θερμοκρασίας για την δεδομένη πυκνότητα ισχύος είναι σχετικά μικρός, οπότε θα μπορούσαμε να αναμένουμε ότι η καμπύλη $T_{surf}(t)$ θα έστρεφε τα κοίλα προς τα άνω, γεγονός το οποίο έχει επιβεβαιωθεί και από πειραματικές μετρήσεις (πυρομετρία) από τους M. Doubenskaia et al.¹³ για παλμούς laser παρόμοιας διάρκειας (βλ. εικόνα 8.3).



Εικόνα 8.3 Πειραματική μέτρηση της θερμοκρασίας στην επιφάνεια του πυριτίου σύμφωνα με τους Doubenskaia et al., για διαφορετικές χρονικές μορφές παλμού laser, και διάρκεια συγκρίσιμη με αυτή που χρησιμοποιήθηκε κατά τις δικές μας ακτινοβολήσεις. Ο παλμός που χρησιμοποιήθηκε στην δική μας περίπτωση έχει την πρώτη μορφή από τα αριστερά [M. Doubenskaia et al.]

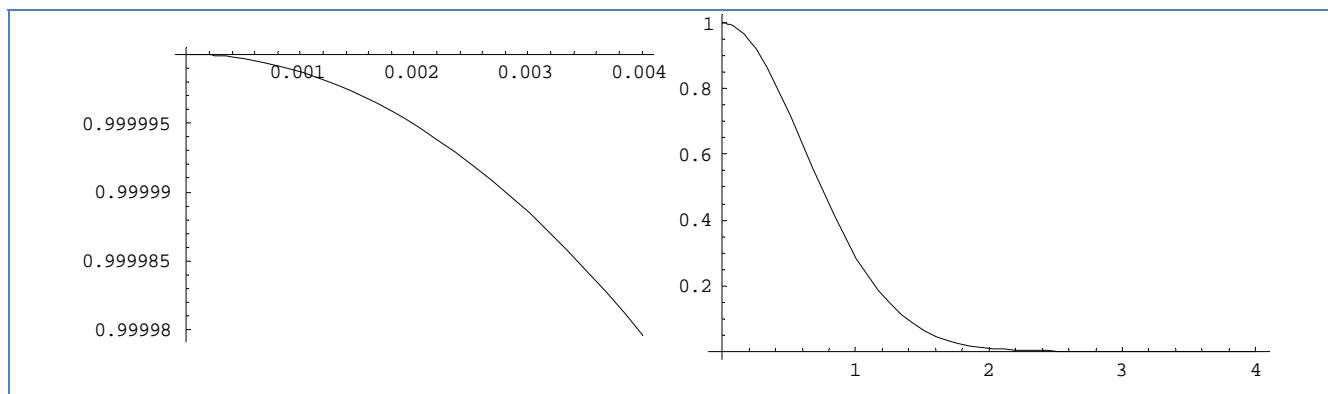
8.3.3 Μορφή παλμού του CO₂ laser

Το επόμενο σημαντικό πρόβλημα που συναντήσαμε κατά την προσπάθεια προσομοίωσης, ήταν η ιδιότυπη μορφή του παλμού του CO₂ laser. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, σε αντίθεση με το KrF, το CO₂ laser έχει χωρικά Γκαουσιανή κατανομή ενέργειας και χρονικά σταθερή (top hut). Αυτό αποτελεί σημαντικό πρόβλημα, καθώς το ελλειπώς ανεπτυγμένο για χρήση σε προσομοίωση ανόπτησης με χρήση laser, λογισμικό Sentauros Process δεν παρέχει ελευθερία στον ορισμό της μορφής του παλμού. Αντί αυτού, παρέχει ορισμένα συγκεκριμένα σενάρια παλμών laser με τον προκαθορισμένο ορισμό του παλμού να είναι Γκαουσιανός χρονικά και σταθερός χωρικά.

Μελετώντας το εγχειρίδιο προέκυψε ότι υπάρχει τρόπος να επέμβει κανείς στο χρονική εξέλιξη του παλμού ορίζοντας μάλιστα και τη συγκεκριμένη συνάρτηση που απαιτούμε να υπακούει. Με βάση το δεδομένο αυτό ήταν δυνατόν να επιλύσουμε το πρόβλημα της χρονική εξέλιξης ορίζοντας μια σταθερή τιμή. Αυτή η προσέγγιση όμως, εμπεριείχε θέματα ασυνέχειας στη μορφή του παλμού τα οποία θα δημιουργούσαν μεγάλα υπολογιστικά προβλήματα, οπότε χρησιμοποιήθηκε μια καλύτερη προσέγγιση. Επειδή όμως η συνάρτηση $f[x_] := \text{Erfc}[-x] * \text{Erfc}[x]$ είναι σχεδόν σταθερή για τιμές του x στο εύρος που μας ενδιαφέρει, μπορούμε να την χρησιμοποιήσουμε για την εισαγωγή του παλμού, πολλαπλασιάζοντας την τιμή της πυκνότητας ισχύος με αυτή την έκφραση, οπότε και παρακάμπτουμε τα υπολογιστικά προβλήματα ασυνέχειας. Παρατηρώντας τη γραφική της παράσταση (Εικ. 8.4 α) προκύπτει ότι με χρήση της συνάρτησης αυτής επιτυγχάνεται η ζητούμενη top hut χρονική εξέλιξη για το παλμό, ενώ στις άκρες της η συνάρτηση ανεβαίνει και κατεβαίνει με ομαλό και συνεχή τρόπο και όχι απότομα. Πιο συγκεκριμένα και για λόγους πληρότητας, αναφέρεται ότι στον ορισμό της χρονικής εξέλιξης του παλμού αντί του Γκαουσιανού εκθετικού, χρησιμοποιήθηκε επακριβώς ο τύπος:

$$f[x_] := \text{Intensity} * \text{Erfc}[-\text{simDelay Double Heat time}] * \text{Erfc}[\text{simDelay Double Heat time}]$$

Η μεταβλητή Intensity αναπαριστά την ενεργειακή πυκνότητα του παλμού, ενώ η simDelay Double Heat time είναι μια εσωτερική μεταβλητή που ανανεώνει δυναμικά τον χρόνο κατά την εξέλιξη των υπολογισμών. Πρέπει φυσικά να τονιστεί ότι η προσέγγιση αυτή, μπορεί να εφαρμοσθεί μόνο για πολύ μικρούς χρόνους ανόπτησης (κάτω από 20ms), καθώς από και πέρα το γινόμενο αρχίζει να αποκλίνει σημαντικά από την μονάδα.



Εικόνα 8.4 Γραφικές αναπαραστάσεις της συνάρτησης $f[x_] := \text{Erfc}[-x] \cdot \text{Erfc}[x]$ για α) μικρές (0 έως 0.004) και β) μεγάλες (0 έως 1) τιμές του x . Παρατηρούμε ότι στο εύρος 0 έως 0.008, η τιμή της συνάρτησης είναι σχεδόν σταθερή και ίση με την μονάδα. Επομένως, αν αναθέσουμε αυτές τις τιμές σε second, τότε μπορούμε πολλαπλασιάζοντας με την πυκνότητα ισχύος να πάρουμε μια σχεδόν σταθερή χρονικά τιμή της πυκνότητας ισχύος, προσομοιώνοντας με αυτό τον τρόπο τον τετραγωνικής μορφής (rectangular) παλμό.

8.3.4 Λοιπές υπολογιστικές παράμετροι προσομοίωσης

Πριν περάσουμε στην περιγραφή των προσπαθειών για μονοδιάστατες και δισδιάστατες προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν είναι απαραίτητο να γίνει αναφορά σε κάποιες παραμέτρους που άπτονται περισσότερο της λειτουργίας του αλγορίθμου και του λογισμικού Sentauros από άποψης αριθμητικών υπολογισμών και λιγότερο από άποψης φυσικής. Πέραν των προβλημάτων που παρουσιάστηκαν παραπάνω, δηλαδή τους ορισμούς του συντελεστή απορρόφησης και της μορφής του παλμού, χρειάστηκε κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων να δοκιμαστούν και εν τέλει να επιλεγούν και άλλες παράμετροι που αφορούν τόσο το πλέγμα το οποίο χρησιμοποιήθηκε, όσο και τις μεθόδους με τις οποίες επιλύθηκαν οι εξισώσεις θερμοτήτας και διάχυσης. Οι εν λόγω παράμετροι που συνοπτικά θα αναλυθούν παρακάτω είναι οι εξής :

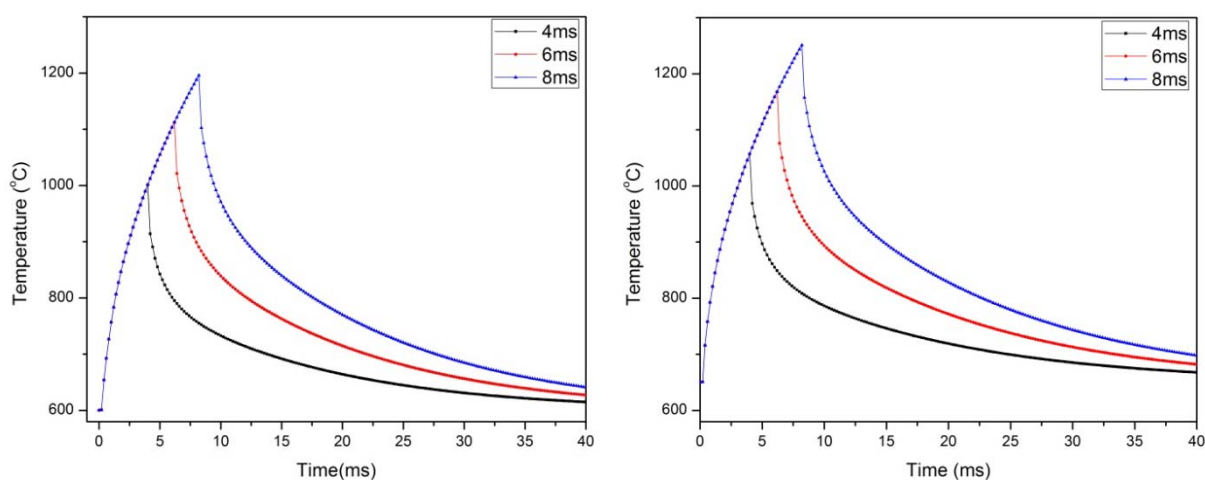
- Χρονικό βήμα (Time step dependency)
- Πλέγμα (mesh dependency)
- Επιλύτες (Solvers): ILS, PARDISO
- Χρήση ή όχι αρχείων προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration
- Παράλληλη επεξεργασία (Multi threading)
- Χρήση επέκτασης δομής κατά την επίλυση της εξίσωσης θερμοτήτας.

Ας δούμε όμως λίγο πιο αναλυτικά τι σημαίνει ο κάθε ένας από τους παραπάνω όρους

Χρονικό βήμα

Μία πολύ σημαντική παράμετρος σε κάθε προσομοίωση είναι το χρονικό βήμα βάσει του οποίου επιλέγουμε να εκτελέσει το λογισμικό Sentauros τους υπολογισμούς. Είναι αναγκαία η

διερεύνηση διαφόρων χρονικών βημάτων, έτσι ώστε να βρεθεί ένα κατώτερο όριο για το χρονικό βήμα, από το οποίο και κάτω δεν έχει νόημα να δοκιμάσουμε ακόμα μικρότερα βήματα, καθώς τα αποτελέσματά θα συγκλίνουν. Όταν το εν λόγω όριο βρεθεί, λέμε ότι από το βήμα αυτό και κάτω υπάρχει ανεξαρτησία χρονικού βήματος (Time – Step Independancy). Στις προσομοιώσεις που εκτελέσαμε στην παρούσα μελέτη έγιναν δοκιμές για την εύρεση των ορίων ανεξαρτησίας χρονικών βημάτων, ξεκινώντας τις δοκιμές για χρονικά βήματα 10 φορές μικρότερα από τον χρόνο ακτινοβολίας του laser και κατεβαίνοντας τάξεις μεγέθους. Τα αποτελέσματα ήταν αρκετά ικανοποιητικά και γενικά τόσο στις 2-D και 1-D περιπτώσεις δεν χρειάστηκε να μειώσουμε υπερβολικά τα χρονικά βήματα για την επίτευξη ανεξαρτησίας από το χρόνο. Στις εικόνες 8.5 α και β παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για δυο διαφορετικά χρονικά βήματα, για δείγμα 38N το οποίο έχει υποστεί προθέρμανση στους 600°C.



Εικόνα 8.5 Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για παλμούς διάρκειας 4, 6 και 8 msec για δείγμα 38N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C, χωρίς την χρήση Advanced Calibration, για δυο διαφορετικά χρονικά βήματα, που διαφέρουν μεταξύ τους κατά μια τάξη μεγέθους.

Πλέγμα

Εξίσου σημαντική παράμετρος με το χρονικό βήμα ήταν και η επιλογή του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε τόσο στις μονοδιάστατες αλλά κυρίως στις διδιάστατες περιπτώσεις. Γενικά, εφόσον η συνολική μελέτη γίνεται με γνώμονα την κατασκευή υπερ-ρηχών επαφών, το πλέγμα έπρεπε να είναι αρκετά πυκνό κατά βάθος (απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών πλεγματικών γραμμών μικρότερη από 1 nm) τουλάχιστον για τα πρώτα 50 nm. Φυσικά και εδώ, όπως και στο χρονικό βήμα, ανάλογα πάντα με την ελάχιστη προσομοίωση υπάρχει ένα όριο στην πύκνωση του πλέγματος από το οποίο και κάτω (ορίζοντας δηλαδή ένα ακόμα πυκνότερο) τα αποτελέσματα συγκλίνουν, εξ' ου και ο όρος ανεξαρτησία πλέγματος (Mesh Independancy). Μια τυπική κατανομή πύκνωσης του πλέγματος κατά βάθος που χρησιμοποιήσαμε τόσο στις 1-D όσο και στις 2-D περιπτώσεις και στο οποίο παρατηρήθηκε ότι τα αποτελέσματα συγκλίνουν ήταν η εξής:

```
line x location= 0.0 spacing= 0.5<nm> tag=SiTop
line x location=50.0<nm> spacing=2.0<nm>
line x location= 0.5<um> spacing=20.0<nm>
```

```
line x location= 2.0<um> spacing= 0.1<um>  
line x location= 15.0<um> spacing= 5<um>  
line x location=700.0<um> spacing= 10.0<um> tag=SiBottom
```

Όσον αφορά τώρα στη μορφολογία του πλέγματος κατά πλάτος, σε γενικές γραμμές επιλέχθηκε σταθερή απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών πλεγματικών γραμμών: 10 nm ή του 1 nm ή ακόμα και 10 μm, ανάλογα με την εκάστοτε προσομοίωση. Για την μορφή του πλέγματος κατά πλάτος όμως θα συζητήσουμε αναλυτικότερα σε παρακάτω κομμάτι που πραγματεύεται τις προσομοιώσεις σε δυο διαστάσεις.

Επιλογή επιλύτη

Οι επιλύτες (Solver), είναι έτοιμες υπορουτίνες που παρέχει η Synopsys και οι οποίες περιέχουν επαναληπτικούς αλγόριθμους αριθμητικής επίλυσης των συστημάτων εξισώσεων Διάχυσης και Θερμότητας. Στο εγχειρίδιο αναφέρεται ότι εξ' ορισμού για συστήματα 1D και 2D εξισώσεων χρησιμοποιείται ο (ευθύς – παράλληλος) direct solver PARDISO ενώ για τα 3D ο (επαναληπτικός) iterative ILS. Φυσικά παρέχεται η ελευθερία να ορίσει ο χρήστης ποιόν solver θέλει να χρησιμοποιήσει σε κάθε προσομοίωση. Πραγματοποιήθηκαν δοκιμές και με τους δυο solvers, και παρατηρήθηκε είναι ότι ο PARDISO είναι ιδανικός για προβλήματα μίας διάστασης καθώς είναι χρονικά οικονομικότερος από τον ILS στη περίπτωση προσομοίωσης σε μια διάσταση. Στις προσομοιώσεις των δυο διαστάσεων, είδαμε ότι για σχετικά αραιά πλέγματα – δηλαδή πλέγματα με μικρό αριθμό κόμβων – οι δυο solver έδιναν με μηδαμινές αποκλίσεις τα ίδια αποτελέσματα σε αριθμητική ακρίβεια και σε χρόνους. Διαφορές υπήρξαν όταν πραγματοποιήθηκαν δισδιάστατες προσομοιώσεις με μεγάλο αριθμό κόμβων, όπου ο ILS έδινε πολύ μικρότερους (και επομένως καλύτερους) υπολογιστικούς χρόνους.

Χρήση ή μη, προηγμένων βιβλιοθηκών παραμέτρων τύπου Advanced Calibration

Στην προσπάθεια της να εξελίξει διαρκώς το Sentaurus Process, η Synopsys, βάση νεότερων δεδομένων που προέκυψαν είτε από πειραματικές μετρήσεις είτε από ab initio υπολογισμούς, δημοσιεύει ανά περιόδους αρχεία που περιέχουν έτοιμα σετ παραμέτρων, εντολών και μοντέλων για προσομοίωση διάφορων μικρο-διεργασιών (εμφύτευση, διάχυση, ενεργοποίηση κλπ). Τα αρχεία αυτά είναι της μορφής AdvCal_2008.09.fps και με κατάλληλες εντολές δύναται να προσαρτηθούν στον εκάστοτε κώδικα. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν οι εκδόσεις 2007.03, 2008.09 και 2007.12. Στις προσομοιώσεις δεν παρατηρήθηκαν διαφορές όσον αφορά στα θερμοκρασιακά προφίλ, αλλά όπως θα δειχτεί και στη συνέχεια, υπήρξε σημαντική διαφοροποίηση στις προβλέψεις της κινητικής της διάχυσης. Μια σύντομη παρουσίαση των κυριότερων χαρακτηριστικών των προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration δίνεται παρακάτω.

Επέκταση δομής

Η αγωγή θερμότητας είναι μια διαδικασία αρκετά ταχύτερη σε σύγκριση με τη διάχυση ατελειών ή προσμίξεων. Συγκεκριμένα στο πυρίτιο, το μήκος διάχυσης θερμότητας είναι 20 με 30 φορές μεγαλύτερο από αυτό της διάχυσης των προσμίξεων. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται ότι η επίλυση των εξισώσεων θερμότητας απαιτεί αρκετά μεγαλύτερο μέγεθος δομής από αυτό που

απαιτούν οι εξισώσεις διάχυσης. Για το λόγο αυτό, αναπτύχθηκε το μοντέλο επέκτασης δομής, το οποίο παρέχει στο χρήστη την δυνατότητα να επεκτείνει προσωρινά την υπολογιζόμενη δομή για την επίλυση του θερμικού μέρους της προσομοίωσης και στη συνέχεια να ανακτά την αρχική δομή και να επιλύει τις υπόλοιπες εξισώσεις. Είναι αυτονόητο, ότι κατά την ανόπτηση, ο παλμός του laser δε επιδρά καθόλου στο επεκταθέν κομμάτι της δομής. Βέβαια, η όλη διαδικασία προσθέτει ουσιαστικά επιπλέον κόμβους στους υπολογισμούς, με ανάλογο κόστος στον υπολογιστικό χρόνο. Παρόλα αυτά, παρέχεται η δυνατότητα να περικοπούν λίγο οι υπολογιζόμενοι κόμβοι, ορίζοντας επέκταση δομής από τη μία πλευρά του χωρίου και στη συνέχεια ανακλώντας την επέκταση από την άλλη μεριά.

Πολυπλεξία (Multi threading)

Το Sentaurus παρέχει την δυνατότητα πλήρους εκμετάλλευσης των μοντέρνων επεξεργαστών που διαθέτουν πολλαπλούς πυρήνες με τη χρήση της εντολής multi threading, η οποία φροντίζει ώστε οι υπολογισμοί της προσομοίωσης να εκτελούνται παράλληλα σε περισσότερους από έναν επεξεργαστές. Σύμφωνα με το εγχειρίδιο μπορούμε να δηλώσουμε/χρησιμοποιήσουμε όσους επεξεργαστές θέλουμε. Η κλήση για χρήση του multi threading μέσα στον κώδικα γίνεται μέσω της εντολής :

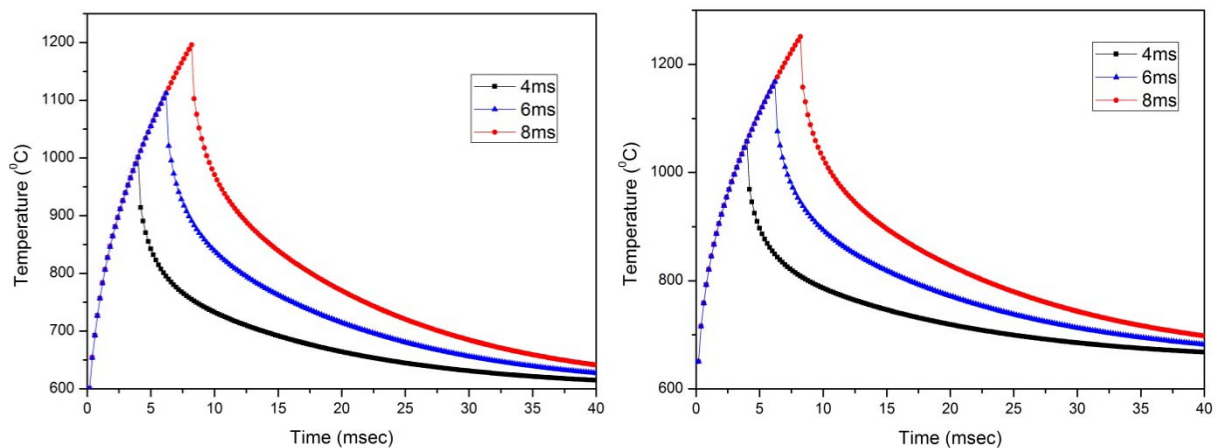
```
math [ numThreads = <n> ]
```

όπου n, είναι ο αριθμός των πυρήνων που έχει ο επεξεργαστής (π.χ. 2 ή 4).

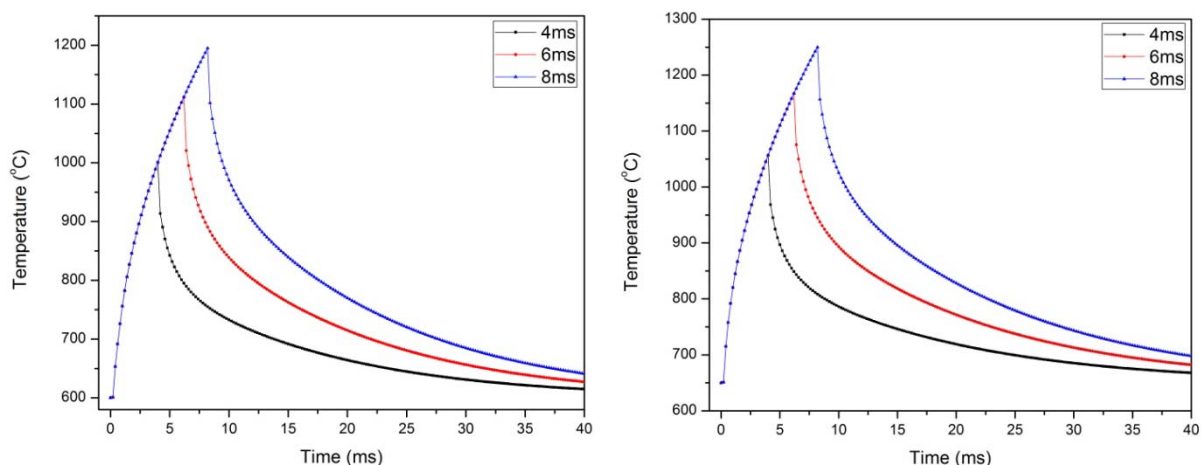
Γενικά έγιναν δοκιμές χρησιμοποιώντας μηχανήματα με 2 και 4 πυρήνες και παρατηρήθηκε ότι η χρήση του multi threading, αν και σαφέστατα περισσότερο απαιτητική σε μνήμη, σε σχέση με τη χρήση ενός μόνο επεξεργαστή, επιτάχυνε αρκετά τις προσομοιώσεις, ειδικά στις δυσδιάστατες περιπτώσεις βοηθώντας και του επιλύτη ILS.

8.4 Αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις σε μια διάσταση

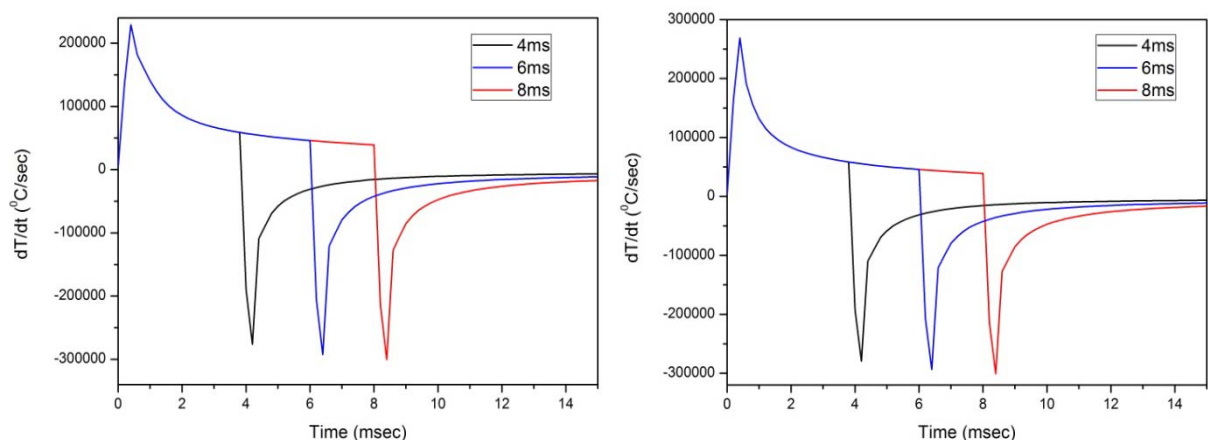
Στη παρούσα παράγραφο παρατίθενται τα αποτελέσματα των μονοδιάστατων προσομοιώσεων της ανόπτησης με CO₂ laser για παλμούς 4, 6 και 8 ms για αρχικές θερμοκρασίες 600 και 650°C. Στην μονοδιάστατη περίπτωση, προφανώς δεν μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε μια μεταβλητή έκφραση για την πυκνότητα ισχύος, και επομένως αρκεστήκαμε σε μια μέση τιμή της πυκνότητας ισχύος, η οποία προέκυψε απλά διαιρώντας την ισχύ εξόδου (67 W) με την επιφάνεια του κυκλικού σποτ, το οποίο έχει διάμετρο 1.1 mm. Η τιμή αυτή είναι **4937 W/cm²**. Φυσικά, αυτή η θεώρηση είναι αρκετά προβληματική για μια σειρά από λόγους, κάτι το οποίο μας ώθησε να στραφούμε σε δισδιάστατες προσομοιώσεις, στις οποίες θα μπορούσαμε να εισάγουμε μια μεταβλητή (στην προκειμένη περίπτωση γκαουσιανή) μορφή του παλμού. Σε κάθε περίπτωση όμως, καθώς οι υπολογισμοί σε μια διάσταση είναι πολύ πιο «οικονομικοί» από άποψη χρόνου, προσφέρονται για δοκιμές και κάποια προκαταρκτικά συμπεράσματα. Με βάση τα παραπάνω λοιπόν, θα παραθέσουμε αποτελέσματα, τα οποία δεν πρέπει να ληφθούν υπόψη, παρά μόνο με την επισήμανση ότι είναι αρκετά προσεγγιστικά. Στις εικόνες 8.6 α και β παραθέτουμε την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για τις τρεις διάρκειες παλμού που χρησιμοποιήσαμε για δείγμα 38N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C. Όπως θα δείξουμε και παρακάτω, οι τιμές αυτές της θερμοκρασίας είναι χαμηλότερες σε κάθε περίπτωση από τις αντίστοιχες που προέκυψαν από την ανάλυση σε δυο διαστάσεις.



Εικόνα 8.6 Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για παλμούς διάρκειας 4, 6 και 8 msec για δείγμα 38N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C, χωρίς την χρήση προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration.

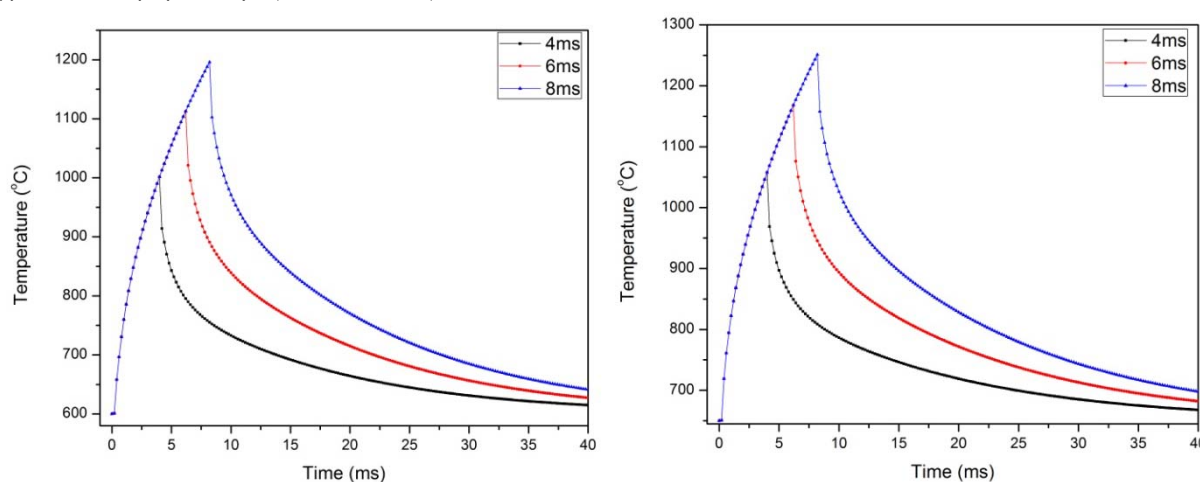


Εικόνα 8.7 Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για παλμούς διάρκειας 4, 6 και 8 msec για δείγμα 38N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C, με χρήση προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration 2008.09. Παρατηρούμε ότι οι τιμές της θερμοκρασίας είναι ίδιες, σε σχέση με αυτές του διαγράμματος 8.6.



Εικόνα 8.8 Εξέλιξη του ρυθμού μεταβολής της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για παλμούς διάρκειας 4, 6 και 8 msec για δείγμα 38N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C. Οι ρυθμοί αυτοί είναι χωρίς την χρήση Advanced Calibration 2008.09.

Σημειώνεται ότι ανάλογα αποτελέσματα δίνει και η χρήση προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration, 2007.03 και 2007.12. Σε απόλυτη αναλογία με τα παραπάνω αποτελέσματα είναι και η υπολογισθείσα θερμοκρασιακή εξέλιξη για κάθε συνθήκη ακτινοβολήσης (διάρκεια, αρχική θερμοκρασία δοκιμίου, χρήση ή μη Advanced Calibration) για τα δείγματα 39N (εικόνες 8.9). Οι ονομαστικές συνθήκες εμφύτευσης για τα δείγματα αυτά είναι 0.6 keV/3E15 cm⁻². Σε σχέση με τα δείγματα 38N, η ονομαστική δόση είναι διπλάσια, αλλά η πραγματικά εμφυτευμένη δόση είναι περίπου ίδια (38N: 4.2-5.3E14 cm⁻², 39N: 5E14 cm⁻²). Οι διαφορές στην κατανομή της συγκέντρωσης είναι σχετικά μικρές, με αποτέλεσμα η διαφορά στην απορρόφηση να μην είναι πολύ μεγάλη. Καθώς λοιπόν οι χαρακτηριστικοί χρόνοι ανόπτησης είναι τέτοιοι ώστε να κυριαρχούν τα θερμικά φαινόμενα, είναι λογικό οι θερμοκρασιακές κατανομές στην επιφάνεια για τους δυο τύπους δειγμάτων να μην διαφέρουν ιδιαίτερα.



Εικόνα 8.9 Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο για παλμούς διάρκειας 4, 6 και 8msec για δείγμα 39N που προθερμάνθηκε στους α) 600 και β) 650°C, με χρήση Advanced Calibration 2008.09. Ακριβώς ίδιες είναι και οι τιμές που προέκυψαν χωρίς την χρήση του Advanced Calibration.

8.5 Προσομοίωση ανόπτησης σε δυο διαστάσεις

8.5.1 Γενικά

Αφότου ολοκληρώθηκαν οι προσομοιώσεις σε μία διάσταση, το επόμενο λογικό βήμα ήταν το πέρασμα σε προσομοιώσεις δύο διαστάσεων, το οποίο άλλωστε είναι και το ζητούμενο καθώς όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, λόγω των φαινομένων θερμικής διάχυσης είναι εξ' ορισμού αδύνατον κάποιος να προσομοιώσει πραγματικά φυσικά φαινόμενα χρησιμοποιώντας μόνο μία διάσταση χωρίς να έχει σημαντικά σφάλματα. Ειδικά στην περίπτωση μας, λόγω της Γκαουσιανής χωρικής μορφής του παλμού του CO₂ laser, είναι επιτακτική η ανάγκη χρήσης περισσότερων από μιας διαστάσεων στη προσομοίωση, καθώς είναι αυτονόητο ότι στο μονοδιάστατο επίπεδο δεν μπορεί να οριστεί η Γκαουσιανή συνάρτηση που θα περιγράφει την πυκνότητα ενέργειας του παλμού. Συνεπώς, όπως καταλαβαίνει κανείς, προσομοιώνοντας στις 2 διαστάσεις καταφέρνουμε αφενός να επιτύχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια στην επίλυση των θερμικών εξισώσεων και αφετέρου μας παρέχεται η δυνατότητα να αποτυπώσουμε με ακρίβεια τη χωρική μορφή του παλμού του CO₂ laser, κάτι που θα μας δώσει ακριβέστερα θερμοκρασιακά προφίλ. Ας δούμε όμως πιο αναλυτικά τα

βήματα που ακολουθήσαμε για να επιτευχθεί η αναγωγή της προσομοίωσης από τη μία στις δύο διαστάσεις.

8.5.2 Διαμόρφωση δυσδιάστατης προσομοίωσης

Το πρώτο βασικό πρόβλημα ήταν το πώς θα «επιβάλλουμε» στο πρόγραμμα να κάνει υπολογισμούς στις δύο διαστάσεις. Το πρόβλημα εντοπιζόταν στο γεγονός ότι (όπως άλλωστε αναφερόταν και στο εγχειρίδιο) το Sentaurus όταν κάνει ανόπτηση σε μία δομή η οποία είναι συμμετρική κατά ένα άξονα, την υπολογίζει σα να ήταν μονοδιάστατη ακόμα και αν έχει οριστεί δισδιάστατο πλέγμα που να την περιγράφει. Έτσι μια πρώτη προσπάθεια επίλυσης αυτού του προβλήματος έγινε με χρήση της εντολής :

Grid 2D

η οποία προστίθεται στον κώδικα, αμέσως μετά τον ορισμό της εμφύτευσης (Implant) και εξαναγκάζει το πρόγραμμα να αντιμετωπίσει τη δομή ως δισδιάστατη. Κάνοντας δοκιμές με βάση αυτή την ιδέα και εξετάζοντας τα αποτελέσματα, προέκυψε ότι αν και όντως το Sentaurus ανήγαγε τη δομή σε δυο διαστάσεις αρχικά, όταν πραγματοποιούσε την ανόπτηση συνέχιζε να κάνει υπολογισμούς μόνο κατά βάθος, δηλαδή σε μία διάσταση. Συνεπώς αυτή η προσέγγιση δεν ήταν ικανή να λύσει το πρόβλημα.

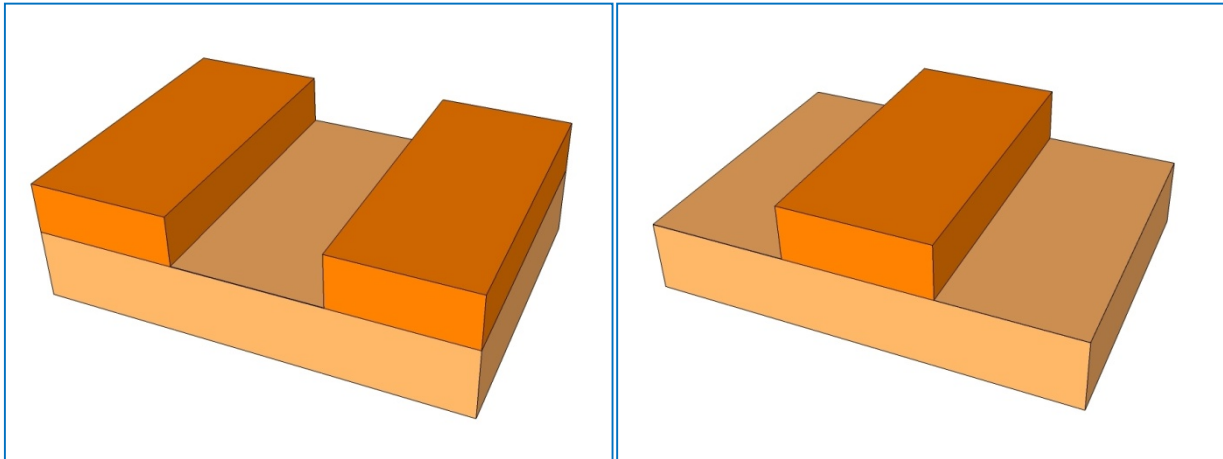
Μία άλλη πιθανή λύση στο πρόβλημα βρέθηκε, όταν μετά από ενδελεχή μελέτη των εγχειριδίων προέκυψε ότι το Sentaurus πραγματοποιεί εξ αρχής σε δύο διαστάσεις όλους τους υπολογισμούς, όταν στον κώδικα εμπλέκονται διαδικασίες όπως η εναπόθεση, εγχάραξη ή οξείδωση (Deposit, etch και oxidation αντίστοιχα). Συνεπώς η βασική ιδέα ήταν, κατά τη συνολική διαδικασία και ακριβώς μετά την εμφύτευση του Βορίου (που πραγματοποιούνταν σε μια διάσταση), να ζητηθεί από το λογισμικό να πραγματοποιήσει μία από τις παραπάνω διεργασίες και στη συνέχεια την ανόπτηση, έτσι ώστε να αναγκαστεί να υπολογίσει την ανόπτηση σε δυο διαστάσεις. Η διαδικασία που επιλέχθηκε ήταν ο σχηματισμός κάποιας μάσκας και στη συνέχεια με τη βοήθεια αυτής της μάσκας η εναπόθεση υλικού, π.χ. οξειδίου ή «νιτρίδιου» πάνω στο πυρίτιο. Προγραμματιστικά αυτό είναι αρκετά εύκολο να γίνει στο Sentaurus, καθώς με την εντολή Mask ορίζεται η θέση, το είδος και οι ακριβείς διαστάσεις της μάσκας ενώ με την εντολή Deposit γίνεται η εναπόθεση του υλικού που επιλέξαμε μέσω της αντίστοιχης μάσκας. Το πραγματικό πρόβλημα σε αυτή τη διαδικασία ήταν η επιλογή του υλικού που θα τοποθετούνταν πάνω στο πυρίτιο έτσι ώστε το υλικό αυτό να μην επηρεάζει με κανένα τρόπο τη συνολική διαδικασία της ανόπτησης. Γενικά χρησιμοποιήθηκαν δύο υλικά των οποίων τις θερμικές ιδιότητες όπως και την πυκνότητα μπορούσαμε να ορίζουμε κατά βούληση, ένα “οξείδιο” και ένα εικονικό “νιτρίδιο”. Ο στόχος ήταν το “νιτρίδιο” να είναι ένα υλικό το οποίο να απορροφά το laser δίχως να μεταδίδει θερμότητα στο πυρίτιο ενώ το οξείδιο να απορροφά όσο το δυνατόν λιγότερο από τη δέσμη του laser. Ένα άλλο ερώτημα που είχε προκύψει ήταν το τι θα συνέβαινε στο κενό που θα απέμενε, εάν τοποθετούσαμε ένα υλικό πάνω στο πυρίτιο και στη συνέχεια το αφαιρούσαμε με εγχάραξη. Σε εκείνη την περιοχή το laser θα διαδιδόταν μεταδίδοντας ενέργεια στο πυρίτιο ή όχι; Γενικά έγιναν διάφορες δοκιμές ώστε να γίνει σαφές το τι ακριβώς συμβαίνει. Αρχικά έγιναν δοκιμές καλύπτοντας τη συνολική επιφάνεια του πυριτίου με υλικό, βάζοντας “νιτρίδιο” στις περιοχές όπου δε θέλαμε να ανοπτήσουμε και οξείδιο στις υπόλοιπες. Τα αποτελέσματα ήταν διαφορετικά καθώς το μεν οξείδιο μετέδιδε τον

παλμό στο πυρίτιο, αλλά αντάλλαξε και θερμότητα με αυτό, ενώ το μεν “νιτρίδιο” δε φαινόταν να δύναται να απορροφήσει τον παλμό εντελώς, με αποτέλεσμα αυτός να αλληλεπιδρά με περιοχές της επιφάνειας του πυριτίου με τις οποίες δε θέλαμε να αλληλεπιδράσει. Το επόμενο βήμα ήταν να αφαιρεθεί με εγχάραξη το οξείδιο της προηγούμενης δομής αφήνοντας μόνο το “νιτρίδιο” για να «κόβει» τον παλμό. Τελικά, κάνοντας αρκετές δοκιμές καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι όντως το laser αλληλεπιδρά κανονικά με την επιφάνεια του πυριτίου στην οποία προηγουμένως έχει εναποτεθεί και στη συνέχεια αφαιρεθεί με εγχάραξη οξείδιο, οπότε το μόνο πρόβλημα που απέμενε να λυθεί ήταν η εισαγωγή ενός υλικού με ιδιότητες τέτοιες ώστε να αποκόπτει εντελώς το παλμό στην περιοχή που αυτό θα εναποτίθεντο, και το οποίο δε θα αλληλεπιδρούσε θερμικά με το πυρίτιο. Το πρόβλημα αυτό επιλύθηκε με κατάλληλο ορισμό των θερμικών σταθερών καθώς και του συντελεστή απορρόφησης του “νιτρίδιου”, παραμέτρους στις οποίες όπως προαναφέρθηκε, ήταν εφικτό να επέμβουμε. Η γενική ιδέα ήταν να ορισθεί ένα υλικό το οποίο θα έχει πολύ μεγάλο συντελεστή απορρόφησης ώστε να απορροφά τον παλμό στην περιοχή που αυτό βρίσκεται, παράλληλα όμως να μην ανεβάζει θερμοκρασία και να μην μεταδίδει θερμότητα στο πυρίτιο. Αυτό δύναται να επιτευχθεί, ορίζοντας τις παρακάτω τιμές για τις ιδιότητες του εναποτιθέμενου “νιτρίδιου”:

```
##---Nitride---
```

```
pdbSetDouble Nitride MassDensity 40.0
pdbSetString Nitride Absorptivity 1000000
pdbSetString Nitride SpecificHeatCapacity 10000000
pdbSetString Nitride ThermalConductivity 0.000005
```

Συνοψίζοντας, βάσει δοκιμών, καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι ο πιο αποδοτικός και απλός τρόπος να εξαναγκάσουμε το πυρίτιο να εκτελεί τους υπολογισμούς για την ανόπτηση σε δύο διαστάσεις είναι μέσω εναπόθεσης δυο μικρών τμημάτων «νιτρίδιου», ένα στο κάθε άκρο της επιφάνειας του πυριτίου, με τις ιδιότητες που περιγράψαμε προηγουμένως. Με αυτό το τρόπο το Sentaurus θα κρατάει τη δομή δισδιάστατη κατά την διαδικασία της ανόπτησης καθώς το laser θα αλληλεπιδρά κανονικά με την ακάλυπτη επιφάνεια του πυριτίου αλλά όχι με το κομμάτι που είναι καλυμμένο από το «νιτρίδιο». Επίσης, το «νιτρίδιο» ενώ θα απορροφά την ενέργεια του παλμού, δε θα ανεβάζει θερμοκρασία αλλά ούτε και θα αλληλεπιδρά θερμικά με το πυρίτιο ώστε να εισάγει σφάλματα στους υπολογισμούς. Επιπλέον, με τον τρόπο αυτό δημιουργούμε τεχνητά δυο ζώνες εκατέρωθεν της ανοπτημένης περιοχής οι οποίες δεν δέχονται ακτινοβολία και ως εκ τούτου λειτουργούν ως ζώνες υποδοχής της πλευρικά διαδομένης θερμότητας. Σε κάθε περίπτωση, μέσω της διαδικασίας του Side extension, δημιουργούμε ένα τεχνητό υπολογιστικό χωρίο στο οποίο δεν επιδρά η δέσμη και επομένως λαμβάνει υπόψη την πλευρική διάχυση θερμότητας. Οι συνδυασμός των δυο μηχανισμών εγγυάται την ορθότητα των υπολογισμών της θερμότητας που διαχέεται πλευρικά, και η οποία θα έχει σημαντική επίδραση στην μείωση της μέσης θερμοκρασίας σε κάθε στρώμα κάτω από την ανοπτημένη περιοχή. Στην εικόνα 8.10 παρουσιάζονται δυο διαφορετικές διαμορφώσεις του στρώματος «νιτρίδιου» πάνω στο υπόστρωμα πυριτίου:



Εικόνα 8.10 Οι δυο δυνατές διατάξεις για το εναποτιθέμενο στρώμα «νιτριδίου» (πορτοκαλί χρώμα), πάνω σε υπόστρωμα Πυριτίου (ώχρα).

8.5.3 Διαμόρφωση Γκαουσιανού χωρικά παλμού

Το δεύτερο βασικό πρόβλημα κατά τη μετάβαση σε δισδιάστατες περιπτώσεις ήταν η ακριβής προσομοίωση της χωρικά Γκαουσιανής μορφής του παλμού του CO₂ laser, ένα πρόβλημα στο οποίο έγινε αναφορά και παραπάνω. Το πρόβλημα πηγάζει από το γεγονός ότι ο παλμός του CO₂ laser είναι Γκαουσιανός χωρικά και σταθερός χρονικά, το ακριβώς ανάποδο δηλαδή από την προκαθορισμένη μορφή του παλμού που χρησιμοποιεί το Sentaurus για να προσομοιώσει την ανόπτηση. Η μετατροπή του παλμού σε σταθερό χρονικά έγινε εύκολα, όπως είδαμε και στο παραπάνω κομμάτι των μονοδιάστατων προσομοιώσεων, μέσω της παραλλαγής ενός κομματιού κώδικα που προτεινόταν στο εγχειρίδιο για τη μετατροπή του παλμού από Γκαουσιανό σε διπλό Γκαουσιανό, χρησιμοποιώντας αντί αυτού τη συνάρτηση $I \cdot \operatorname{erfc}[ttime] \cdot \operatorname{erfc}[-ttime]$, η οποία παράγει ένα σταθερό προφίλ (τουλάχιστον για μικρούς χρόνους). Η μετατροπή του όμως από σταθερό σε Γκαουσιανό χωρικά δεν ήταν εξίσου εύκολη υπόθεση, καθώς πουθενά στα εγχειρίδια δε περιγραφόταν παρόμοια περίπτωση αλλά ούτε και υπήρχε αναφορά στο αν αυτό ήταν καν τεχνικά εφικτό. Πριν δούμε όμως πώς ακριβώς λύθηκε και αυτό το πρόβλημα, ας παρουσιάσουμε πιο συγκεκριμένα τι εννοεί κανείς με την έκφραση Γκαουσιανή χωρικά κατανομή παλμού, όπως και ποιά είναι τελικά η ακριβής Γκαουσιανή κατανομή του παλμού του δικού μας laser.

Η πυκνότητα ενέργειας του παλμού μέσα στη περιοχή εστίασης έχει Γκαουσιανή μορφή η οποία περιγράφεται από τη συνάρτηση :

$$I(r) = I_0 \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{w_0^2}\right) \quad (8.6)$$

όπου w_0 αντιπροσωπεύει την ακτίνα της εστιασμένης περιοχής η οποία καθορίζεται από την εξίσωση $I(w_0) = I_0/e$. Συχνά βέβαια αντί αυτού χρησιμοποιείται και ο ισοδύναμος ορισμός $I(w_e) = I_0/e^2$, με το $w_e = \sqrt{2}w_0$ να αντιπροσωπεύει την ενεργό, δηλαδή την πραγματική ακτίνα εστιασμένης περιοχής. Με βάση αυτή τη μορφή για την πυκνότητα ενέργειας του παλμού, μπορεί κανείς να υπολογίσει την συνολική ισχύ που αυτό αποδίδει :

$$P = 2\pi \int_0^\infty r \cdot I(r) dr = \pi w_0^2 I_0 \quad (8.7)$$

Λέγοντας συνολική ισχύς, προφανώς εννοούμε ουσιαστικά την πραγματικά διαδιδόμενη ισχύ στην επιφάνεια του πυριτίου αν ληφθούν υπόψη οι απώλειες λόγω ανάκλασης κ.λ.π.

Με βάση τα παραπάνω λοιπόν, έπεται ότι η πυκνότητα ενέργειας που επιθυμούμε να δώσουμε στο laser που χρησιμοποιούμε, κατά την προσομοίωση θα είναι της μορφής :

$$I(y) = I_o \cdot \exp\left(-\frac{(y - y_o)^2}{w_o^2}\right) \quad (8.8)$$

όπου το y αναπαριστά την εγκάρσια συντεταγμένη κατά πλάτος και το y_o τη συντεταγμένη του σημείου που βρίσκεται στην μέση του πλάτους του υπολογιστικού χωρίου, ενώ το w_o την ακτίνα της εστιασμένης περιοχής. Συγκεκριμένα, για την περίπτωση του δικού μας laser, μετά από δοκιμές και για λόγους που αναπτύχθηκαν στο 7^ο κεφάλαιο, η εστίαση της δέσμης έγινε σε σποτ διαμέτρου 1.1 mm, οπότε η ακτίνα της εστιασμένης περιοχής παίρνει την τιμή 0.55 mm. Αυτή η τιμή όμως αναφέρεται ουσιαστικά στην ενεργό ακτίνα w_e , συνεπώς η w_o θα παίρνει την τιμή $w_o = w_e / \sqrt{2} = 0.0055 / \sqrt{2} \text{ cm}$. Όσον αφορά την τιμή της I_o αυτή δύναται να υπολογιστεί από την εξίσωση :

$$P = \pi w_o^2 I_o \Leftrightarrow I_o = \frac{P}{\pi w_o^2} \quad (8.9)$$

όπου η τιμή της ισχύος P, ισούται με το γινόμενο της θεωρητικής ισχύος (67 W) επί το συντελεστή ανακλαστικότητας (0.30 στην περίπτωσή μας).

Κάνοντας τις πράξεις καταλήγουμε στο αποτέλεσμα :

$$I_o = \frac{P}{\pi w_o^2} = \frac{67 \cdot 0,7}{3.14 \cdot (0.0055 / \sqrt{2})^2} = 9874 \frac{\text{W}}{\text{cm}^2} \quad (8.10)$$

Καταλήξαμε λοιπόν ότι η μορφή της πυκνότητας ενέργειας του παλμού θα περιγράφεται από τη συνάρτηση Γκαουσιανής κατανομής :

$$I(y) = 9874 \cdot \exp\left(-\frac{(y - y_o)^2}{1512}\right) \frac{\text{W}}{\text{cm}^2} \quad (8.11)$$

Εφόσον πλέον έχουμε τη σωστή μορφή της Γκαουσιανής συνάρτησης κατανομής της πυκνότητας ενέργειας που επιθυμούμε, μένει να εισαγάγουμε αυτή στο Sientaurus.

Βασιζόμενοι στη προηγούμενη προσέγγιση που έγινε για τη διαμόρφωση της επιθυμητής χρονικής μορφής του παλμού όπως αυτή περιγράφηκε παραπάνω, και εφόσον δεν υπήρχαν πουθενά στο εγχειρίδιο οδηγίες ή προτάσεις για το πώς θα μπορούσε κανείς να αλλάξει τη χωρική κατανομή, η μόνη λογική αντιμετώπιση ήταν να δοκιμάσουμε να ορίσουμε τη χωρική κατανομή μέσω του κώδικα της χρονικής. Η γενική ιδέα ήταν να αποθηκεύεται το αρχικό πλέγμα της εγκάρσιας συντεταγμένης y σε μια προσωρινή μεταβλητή με τη βοήθεια της εντολής :

```
| sel z="y" name=xdim store
```

και στη συνέχεια με διαδοχικές πράξεις πάνω στην xdim να σχηματίζεται η απαιτούμενη συνάρτηση για την $I(y)$. Στη συνέχεια θα εισάγεται η $I(y)$ στο κομμάτι του κώδικα που περιγράφει τη χρονική κατανομή στη θέση του I της εξίσωσης $I \cdot \text{erfc}[ttime] \cdot \text{erfc}[-ttime]$, παίρνοντας συνολικά την συνάρτηση :

$$I(y) \cdot \text{erfc}[ttime] \cdot \text{erfc}[-ttime] \quad (8.12)$$

μια έκφραση δηλαδή που περιγράφει ταυτόχρονα τη χωρική και χρονική κατανομή της πυκνότητας ενέργειας $I(x,t)$.

8.5.4 Διερεύνηση της επίδρασης υπολογιστικών παραγόντων στις δυο διαστάσεις

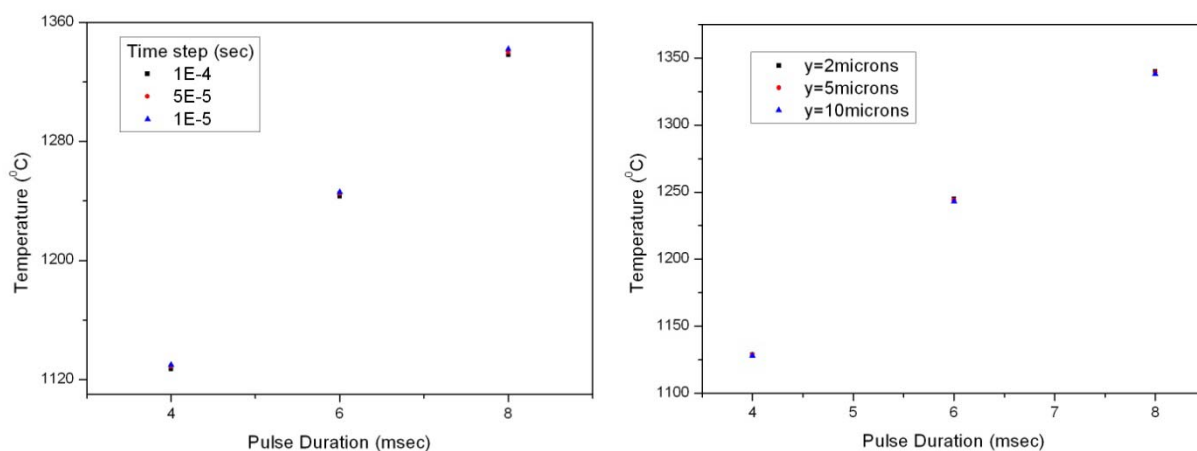
Κατ' αναλογία με τους υπολογισμούς σε μια διάσταση, είμαστε υποχρεωμένοι να προβούμε σε μια ανάλυση για να εξακριβώσουμε την επίδραση διαφόρων παραγόντων που εμπεριέχονται στους υπολογισμούς, έτσι ώστε να αυξήσουμε την αξιοπιστία της διαδικασίας προσομοίωσης. Οι σημαντικότερες παράμετροι είναι η πυκνωση του πλέγματος κατά τον κατακόρυφο αλλά και κατά τον διαμήκη άξονα του υπολογιστικού χωρίου, το χρονικό βήμα μεταξύ των υπολογισμών, και η χρήση αλγορίθμων Advanced Calibration. Δευτερευόντως, και κυρίως όσον αφορά στην ελάττωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου, διερευνήθηκε η χρήση παράλληλης επεξεργασίας με χρήση κατάλληλων εντολών. Ειδικά όσον αφορά στην πυκνωση κατά τους δυο άξονες, ο στόχος ήταν η επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας με όσο το δυνατόν μικρότερο υπολογιστικό κόστος. Και επειδή πλέον βρισκόμαστε σε δυο διαστάσεις, έστω και μικρή αύξηση της πυκνωσης, οδηγεί σε αισθητά μεγαλύτερο αριθμό κόμβων, σε κάθε έναν από τους οποίους επιλύονται οι διαφορικές εξισώσεις της θερμοκρασίας και της διάχυσης. Στην καλύτερη περίπτωση αυτό μεταφράζεται σε πολλαπλασιασμό του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου και στην χειρότερη περίπτωση σε αδυναμία εκτέλεσης της υπολογιστικής διαδικασίας, λόγω έλλειψης φυσικής μνήμης (RAM) του υπολογιστή. Κατά την διάρκεια προσομοιώσεων σε υπολογιστή με πολύ μεγάλη φυσική μνήμη (12GB RAM), διαφάνηκαν τα όρια στο κατά πόσο μπορούμε να «πυκνώσουμε» ή να «αραιώσουμε» το πλέγμα, για να επιτύχουμε την χρυσή τομή ανάμεσα στην ακρίβεια και την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ. Όσον αφορά στην κατακόρυφη διάσταση, η ανάγκη ενσωμάτωσης της συγκέντρωσης του Βορίου που είναι ιδιαίτερα αυξημένη στα πρώτα νανόμετρα από την επιφάνεια, μας υποχρέωσε να διατηρήσουμε σχεδόν την ίδια πυκνωση που ακολουθήσαμε και στη μονοδιάστατη επίλυση, τουλάχιστον κατά τα πρώτα μικρά. Καθώς κατεβαίναμε σε βάθος φυσικά, προβήκαμε σε μια προοδευτική αύξηση μεταξύ των πλεγματικών γραμμών, η οποία οδήγησε και σε συνολική μείωση του αριθμού των κόμβων. Πραγματοποιήθηκε ένας πολύ μεγάλος αριθμός δοκιμών ώστε να βρεθεί μια «ιδανική» μεταβαλλόμενη πυκνωση. Όσον αφορά πάλι στο διαμήκη άξονα, εδώ χρησιμοποιήσαμε ομοιόμορφη πυκνωση, με γνώμονα να είναι αρκετά πυκνά ώστε να αποδώσει την γκαουσιανή μορφή του παλμού. Επιπλέον, οι αποστάσεις μεταξύ των γραμμών του πλέγματος πρέπει να είναι τέτοιες ώστε να επιτευχθεί η επέκταση του υπολογιστικού χωρίου όσο το δυνατόν περισσότερο, χωρίς να απαιτείται πάρα πολύ μεγάλος υπολογιστικός χρόνος ή να εξαντλείται η φυσική μνήμη. Παρά την προσπάθεια εξοικονόμησης υπολογιστικών πόρων, και την χρησιμοποίηση αλγορίθμων πολυπλεξίας (multithreading), τελικά κάθε διδιάστατη προσομοίωση απαιτούσε σημαντικό υπολογιστικό χρόνο, ο οποίος ποίκιλε ανάλογα με την διάρκεια του παλμού, την αρχική θερμοκρασία, την χρήση βιβλιοθηκών advanced calibration και την χρήση ή μη πολυπλεξίας (multithreading). Σαν γενική αρχή μπορούμε να τονίσουμε ότι ένα βήμα το οποίο εκτελείτο σε υψηλότερη θερμοκρασία απαιτούσε μεγαλύτερο υπολογιστικό χρόνο για να πραγματοποιηθεί σε σχέση με ένα βήμα που εκτελείται σε μικρότερη θερμοκρασία. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στο γεγονός, ότι μεγαλύτερη θερμοβαθμίδα απαιτεί και μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων (iterations) για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων, κυρίως της διάχυσης. Ανάλογη δουλειά έγινε και για την εύρεση του κατάλληλου χρονικού βήματος το οποίο χρησιμοποιήθηκε. Μέσω

δοκιμών καταλήξαμε σε μία βέλτιστη τιμή της τάξης του 10^{-4} sec, για τον οποίο βρέθηκε ότι υπάρχει σύγκλιση. Ο παρακάτω πίνακας παρουσιάζει μερικούς ενδεικτικούς χρόνους που απαιτήθηκαν για την εκτέλεση δεδομένων υπολογισμών. Ο πάνω χρόνος αντιστοιχεί σε υπολογισμούς χωρίς την χρήση advanced calibration, ενώ ο κάτω με την χρήση advanced calibration, η οποία έδωσε και πολύ καλά αποτελέσματα όσον αφορά την πρόβλεψη της κινητικής της διάχυσης του Βορίου (όπως θα δούμε και στο αντίστοιχο κεφάλαιο). Οι χρόνοι αυτοί αφορούν συνολική διάρκεια υπολογισμών 50 ms και ανόπτηση με laser σε δείγμα με κωδική ονομασία 38N και χρονικό βήμα 10^{-4} sec. Σημειώνεται ότι χάριν οικονομίας, δεν πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις για τα 10ms, χωρίς την χρήση βιβλιοθηκών Advanced Calibration, αφού, όταν αυτές εκτελέστηκαν, είχε ήδη καταδειχτεί η ανάγκη για χρήση A.C.

Πίνακας 8.1 Διάρκεια προσομοιώσεων

| T_{init} (°C) | | 4 ms | 6 ms | 8 ms | 10 ms |
|-----------------|--------------|------|-------|-------|-------|
| 600 | No A.C. | 7:05 | 13:16 | 19:23 | - |
| | A.C. 2008.09 | 7:30 | 13:52 | 20:12 | 26:32 |
| 650 | No A.C. | 8:21 | 15:33 | 21:11 | - |
| | A.C. 2008.09 | 8:40 | 15:50 | 22:42 | 29:55 |

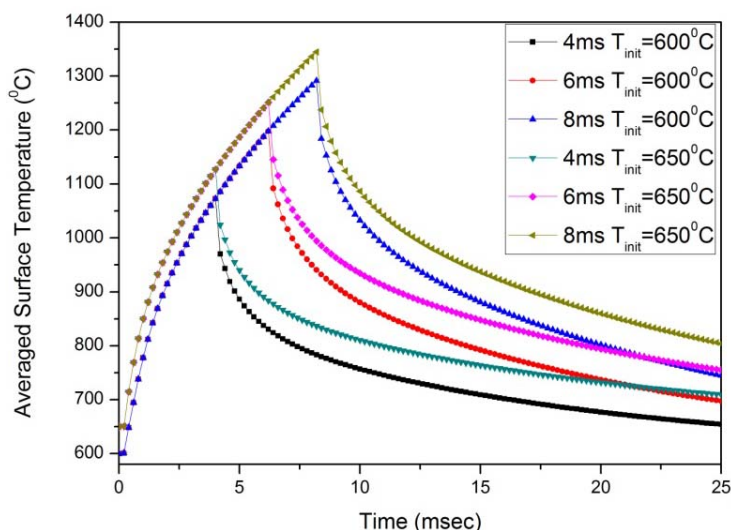
Στα διαγράμματα 8.11 α και β παριστάνονται οι μέγιστες θερμοκρασίες που επετεύχθησαν με διαφορετικά χρονικά βήματα και διαφορετική πυκνωση κατά τον διαμήκη άξονα για δείγματα 38N και αρχική θερμοκρασία 650°C. Από τα παραπάνω διαγράμματα μπορούμε να καταλάβουμε ότι η επίδραση του χρονικού βήματος και του πλέγματος με τον τρόπο που τα λαμβάνουμε, είναι ικανά για να προσδώσουν την απαιτούμενη σταθερότητα στα αποτελέσματα μας. Αυτό μπορεί να γίνει ακόμα περισσότερο αντιληπτό λαμβάνοντας τους λόγους της σχετικής μεταβολής της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας. Όσον αφορά την εξάρτηση από το χρονικό βήμα δεν ξεπερνάει το 0.5%, ενώ για την εξάρτηση από την πυκνωση κατά τον διαμήκη άξονα δεν ξεπερνά το 0.3%.



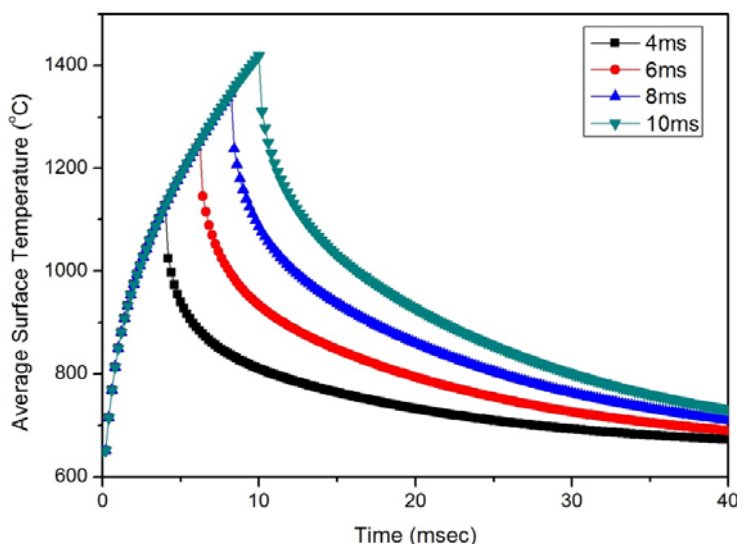
Εικόνα 8.11 Εξάρτηση της μέγιστης θερμοκρασίας ανά διάρκεια παλμού για δείγματα 38N που υπέστησαν προθέρμανση στους 650°C, α) από το χρονικό βήμα και β) από την απόσταση μεταξύ των γραμμών του υπολογιστικού χωρίου κατά τον διαμήκη άξονα. Και στις δυο περιπτώσεις, οι λύσεις φαίνονται να συγκλίνουν.

8.5.5 Παρουσίαση αποτελεσμάτων σε δυο διαστάσεις

Πριν παρουσιάσουμε τα επιμέρους αποτελέσματα για κάθε μια από τις συνθήκες, θα παρουσιάσουμε συγκεντρωτικά τις καμπύλες της μέσης επιφανειακής θερμοκρασίας, για όλες τις συνθήκες για λόγους σύγκρισης. Στην εικόνα 8.12, δίνονται τα αποτελέσματα και για τις δυο θερμοκρασίες προανόπτησης και για διάρκειες παλμού έως 8 ms, ενώ στην εικόνα 8.13 δίνεται η εξέλιξη της θερμοκρασίας για δείγμα 39N προθερμασμένο στους 650⁰C για όλες τις τιμές διάρκειας του παλμού.

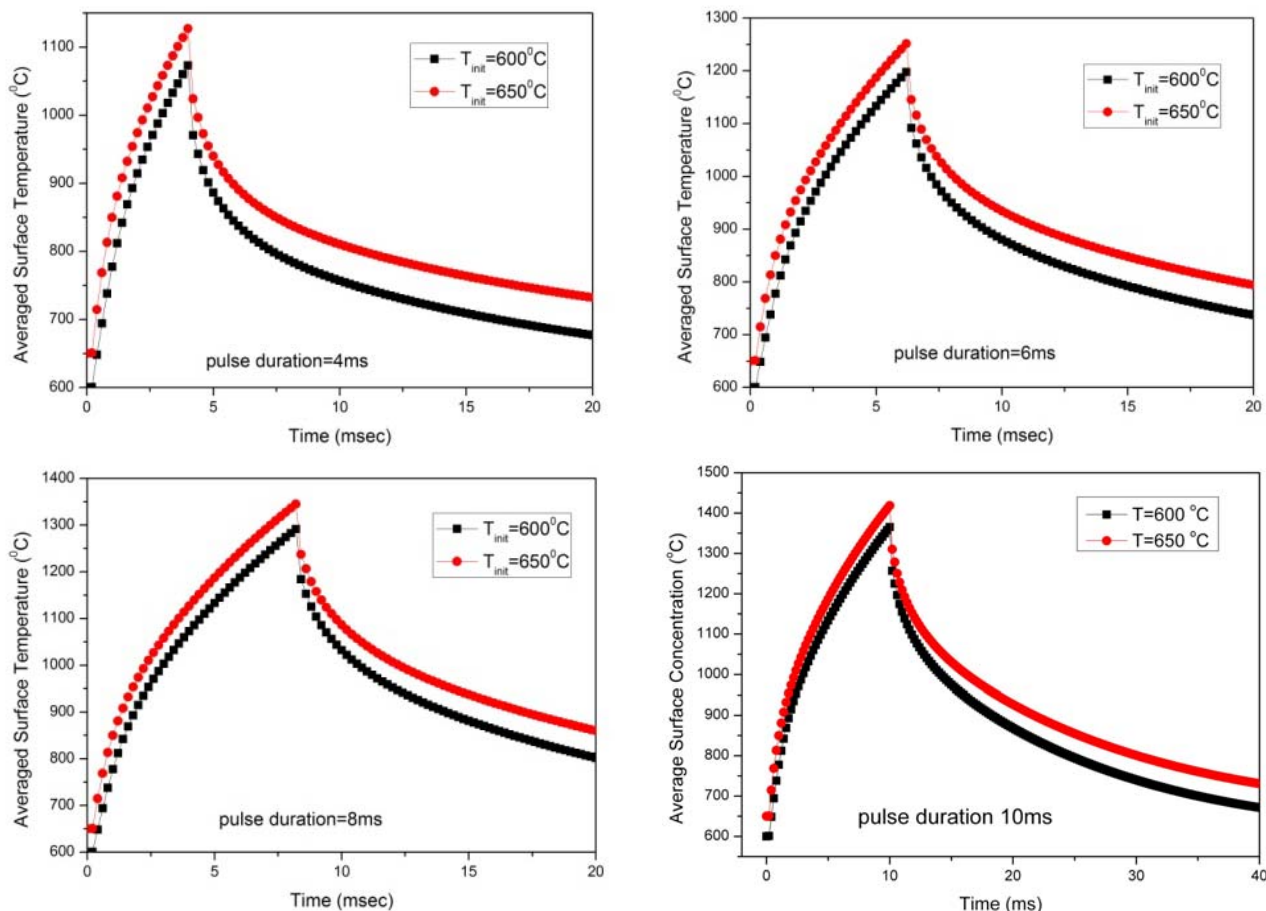


Εικόνα 8.12 Συγκεντρωτικό διάγραμμα της εξέλιξης της θερμοκρασιακής κατανομής στην επιφάνεια του πυριτίου για τρεις διαφορετικές διάρκειες παλμού και δυο τιμές θερμοκρασίας στην οποία έχουμε προθερμάνει το δοκίμιο, 600 και 650⁰C.



Εικόνα 8.13 Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας για δείγμα 39N, που έχει υποστεί προανόπτηση στους 650⁰C για τις τέσσερες διαφορετικές διάρκειες παλμού που χρησιμοποιήθηκαν.

Στην συνέχεια συγκρίνουμε τις μέσες επιφανειακές θερμοκρασίες για κάθε μια από τις διάρκειες παλμού, για 600 και 650⁰C.

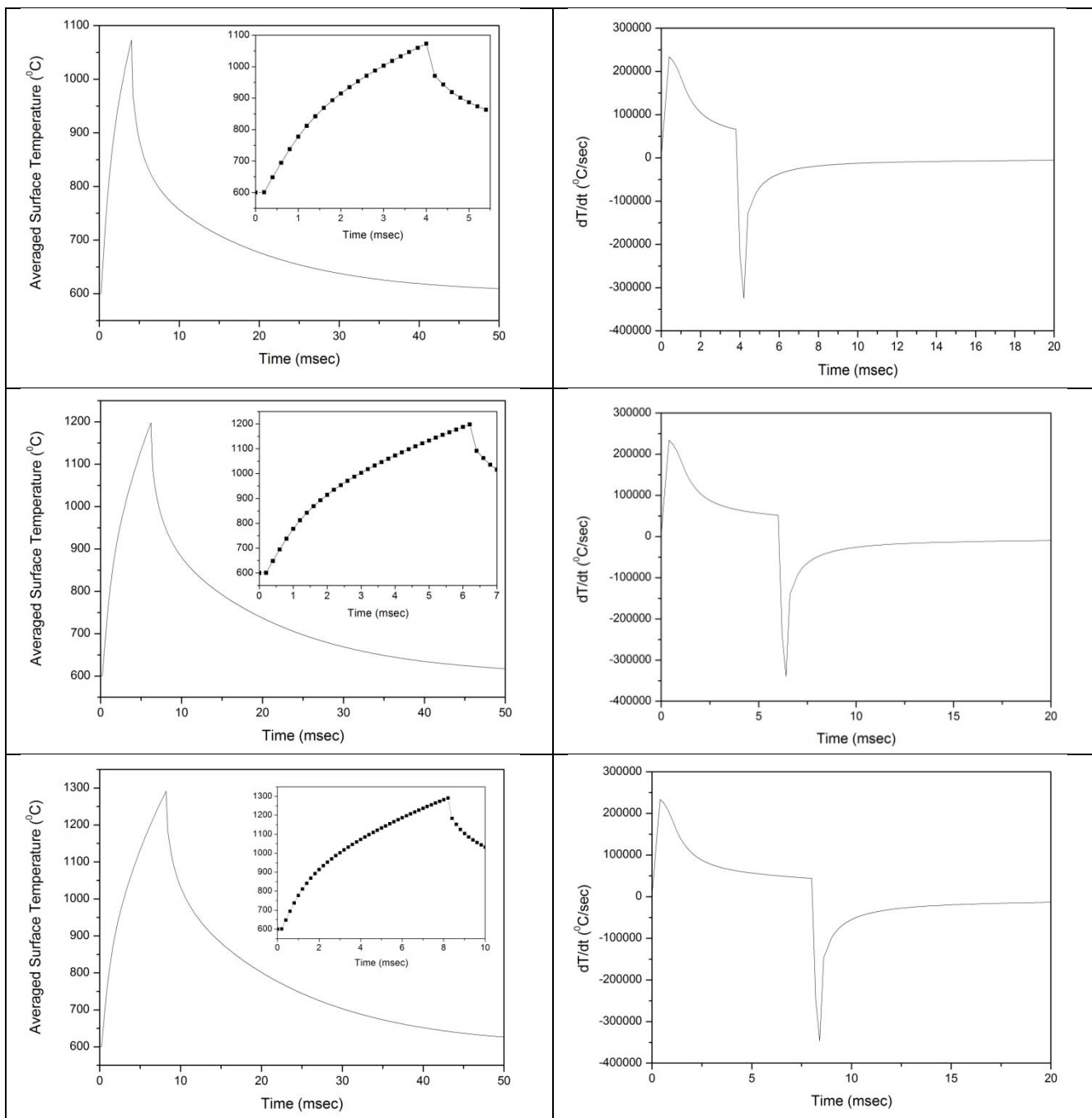


Εικόνα 8.14 Συγκριτικά διαγράμματα της χρονικής εξέλιξης της μέσης επιφανειακής θερμοκρασίας για τις δυο θερμοκρασίες προθέρμανσης του δείγματος (600 και 650°C) για τρεις διαφορετικές διάρκειες παλμού α) 4 ms, β) 6 ms, γ) 8 ms και δ) 10 ms.

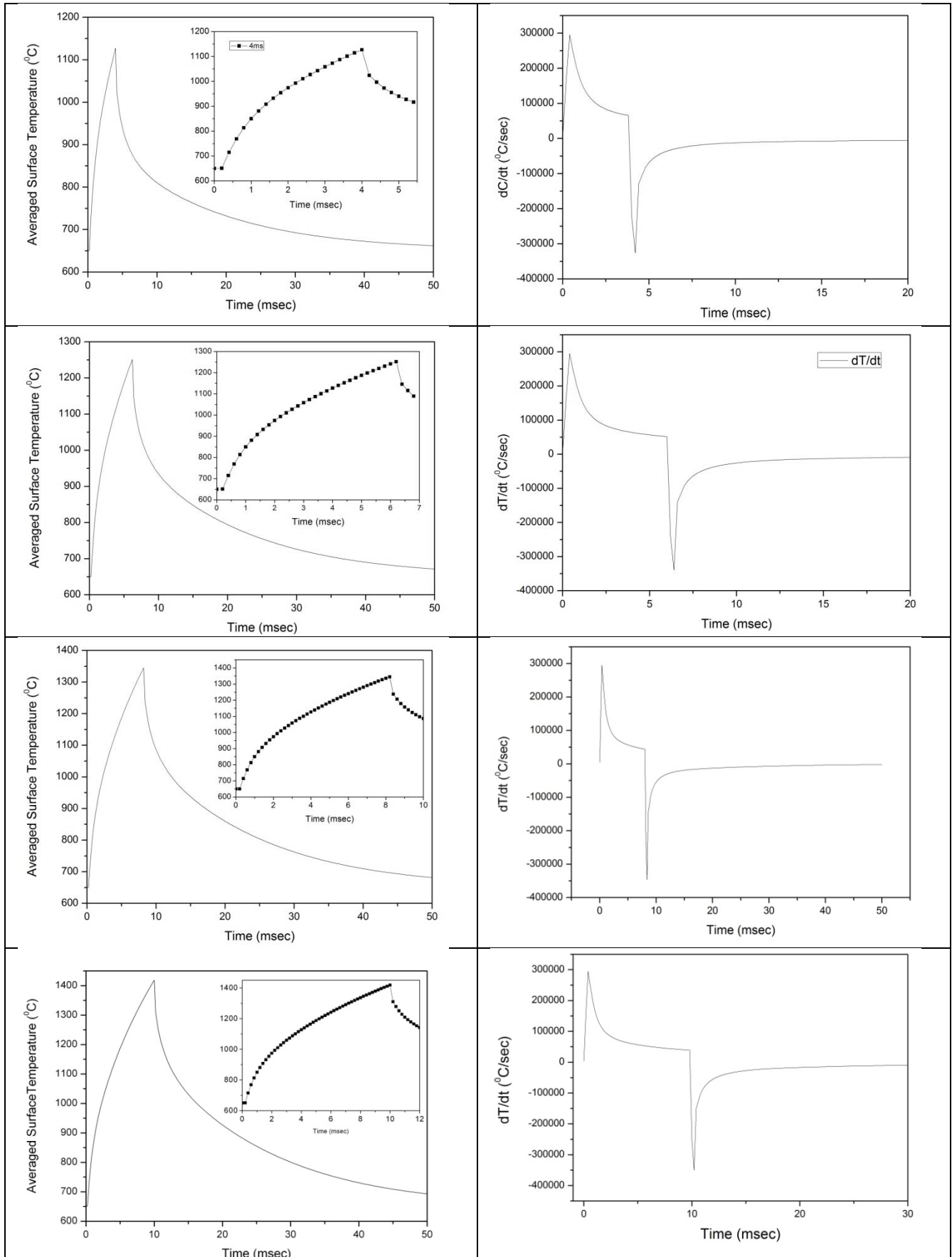
Παρατηρούμε ότι η μεταβολή της αρχικής θερμοκρασίας κατά 50°C , επιφέρει αύξηση της μέγιστης θερμοκρασίας κατά 55 - 60°C , γεγονός το οποίο αποδίδεται στην σχετικά υψηλότερη απορρόφηση λόγω της υψηλότερης αρχικής θερμοκρασίας. Εδώ θα πρέπει να τονιστεί πως η αύξηση του συντελεστή απορρόφησης δεν συνεπάγεται και γραμμικά ανάλογη αύξηση της θερμοκρασίας, γεγονός που απεικονίζεται ανάγλυφα στις εξισώσεις 4.7 έως και 4.10.

Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε τα επιμέρους αποτελέσματα όσον αφορά την επίδραση της ακτινοβολίας στην εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής, για κάθε μια από τις συνθήκες ακτινοβολίας. Για κάθε μια από αυτές, θα παρουσιαστούν στιγμιότυπα της θερμοκρασιακών κατανομών σε δύο διαστάσεις, οι οποίες ελήφθησαν στο χρονικό διάστημα, στο οποίο παρατηρήθηκε η μέγιστη επιφανειακή θερμοκρασία για κάθε δεδομένη συνθήκη. Επίσης, δίνονται οι κατανομές της θερμοκρασίας στην επιφάνεια και σε διάφορα βάθη του δοκιμίου, καθώς και η χρονική εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας στην επιφάνεια του δοκιμίου. Τέλος παρουσιάζεται δίνεται και η εξέλιξη του ρυθμού μεταβολής της θερμοκρασίας, με άλλα λόγια το πως μεταβάλλεται η χρονική παράγωγος της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο.

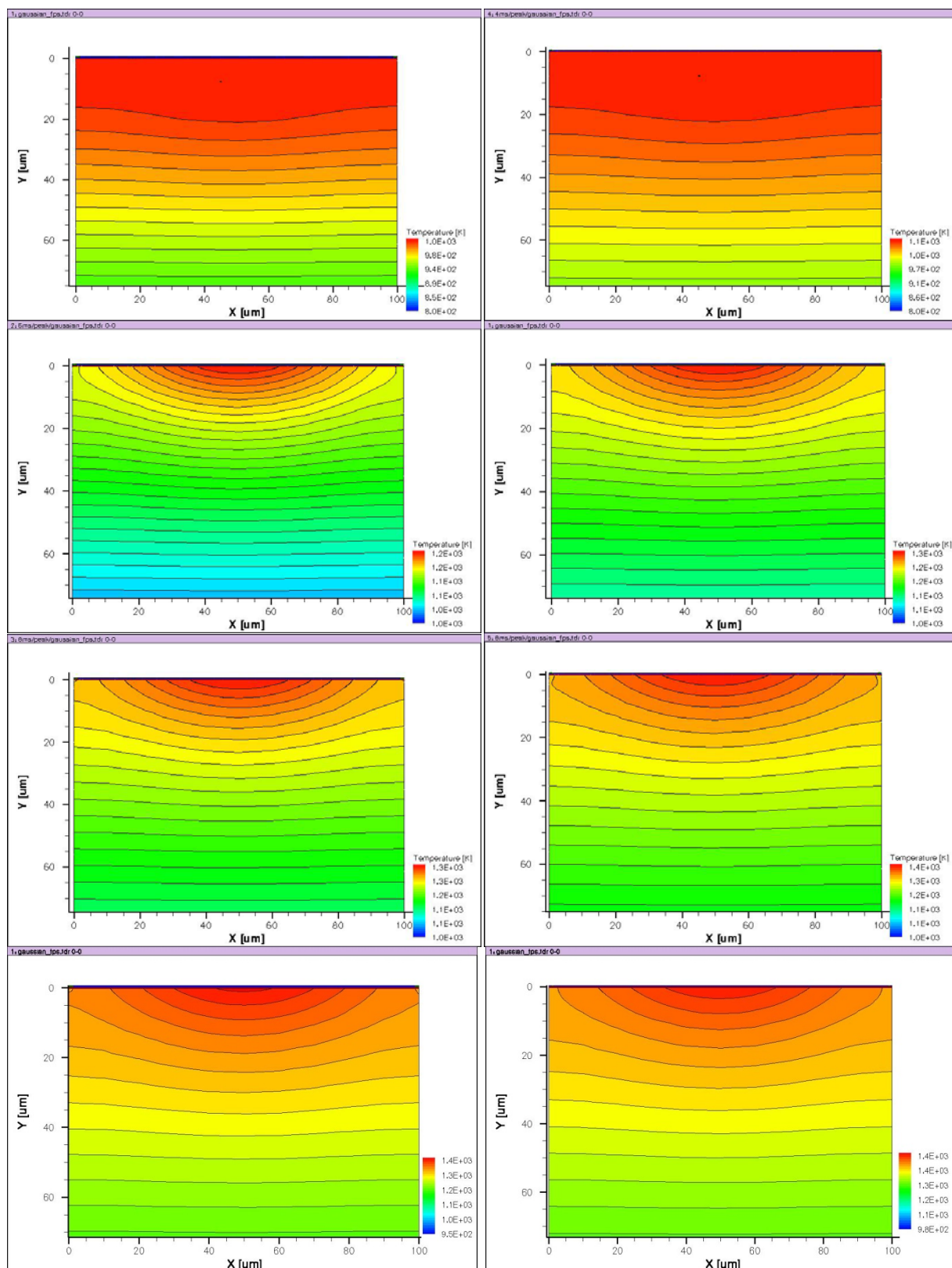
Ξεκινάμε την παρουσίαση των αποτελεσμάτων, από την εξέλιξη της κατανομής της μέσης επιφανειακής κατανομής με τον χρόνο. Σε κάθε περίπτωση, στο ένθετο γράφημα παρέχεται μια λεπτομερέστερη απεικόνιση στο διάστημα που ο παλμός του laser επενεργεί στο υλικό. Ταυτόχρονα παρουσιάζουμε τον αντίστοιχο ρυθμό μεταβολής της θερμοκρασίας για κάθε συνθήκη.



Εικόνα 8.15 α) Εξέλιξη της μέσης επιφανειακής θερμοκρασίας με το χρόνο και β) εξέλιξη του ρυθμού μεταβολής θερμοκρασίας για ακτινοβόληση διάρκειας 4, 6 και 8 ms και προθέρμανσης στους 600°C.

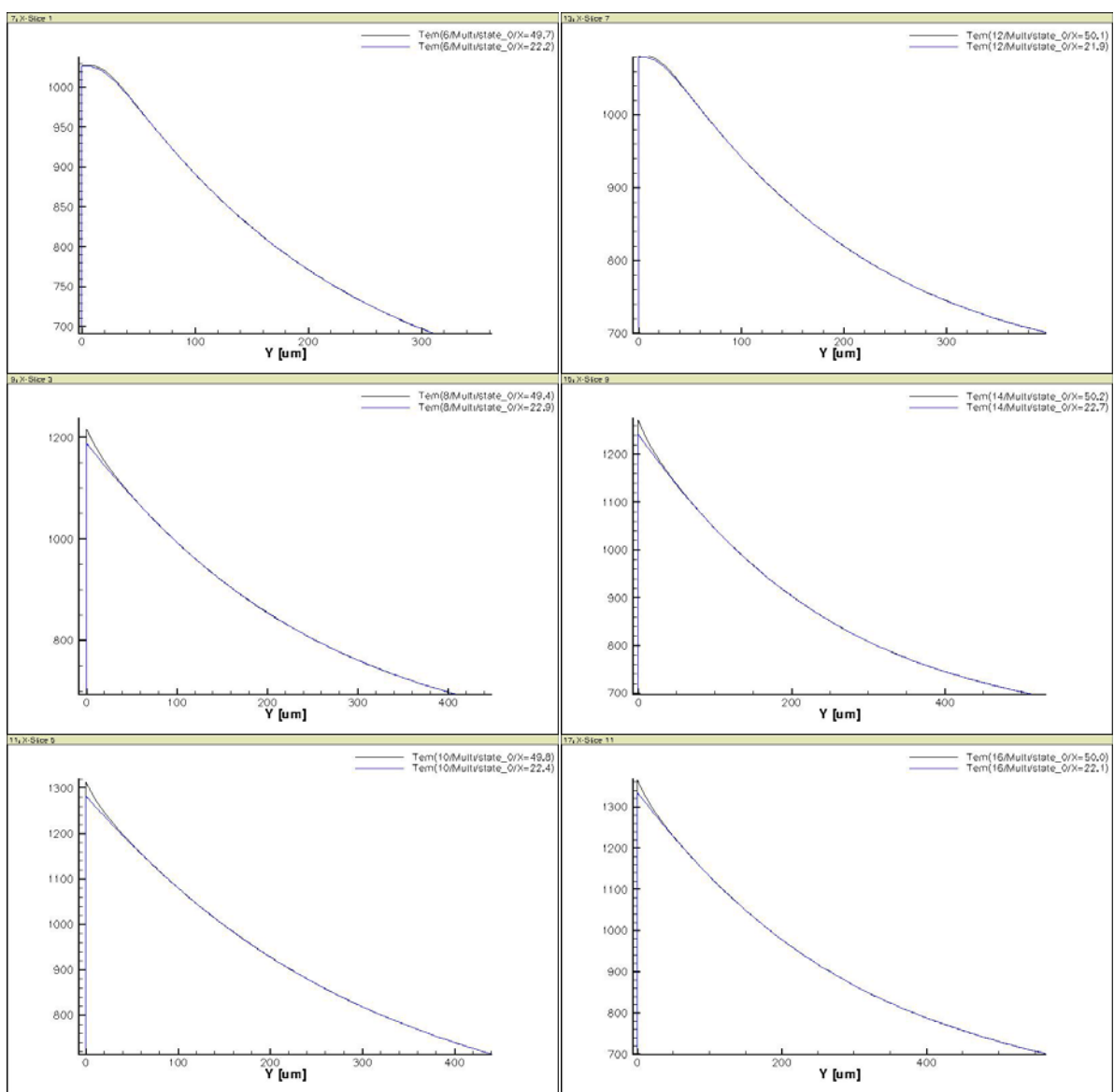


Εικόνα 8.16 α) Εξέλιξη της μέσης επιφανειακής θερμοκρασίας με το χρόνο και β) εξέλιξη του ρυθμού μεταβολής θερμοκρασίας για ακτινοβολή διάρκειας 4, 6 και 8 ms και προθέρμανσης στους 650°C.

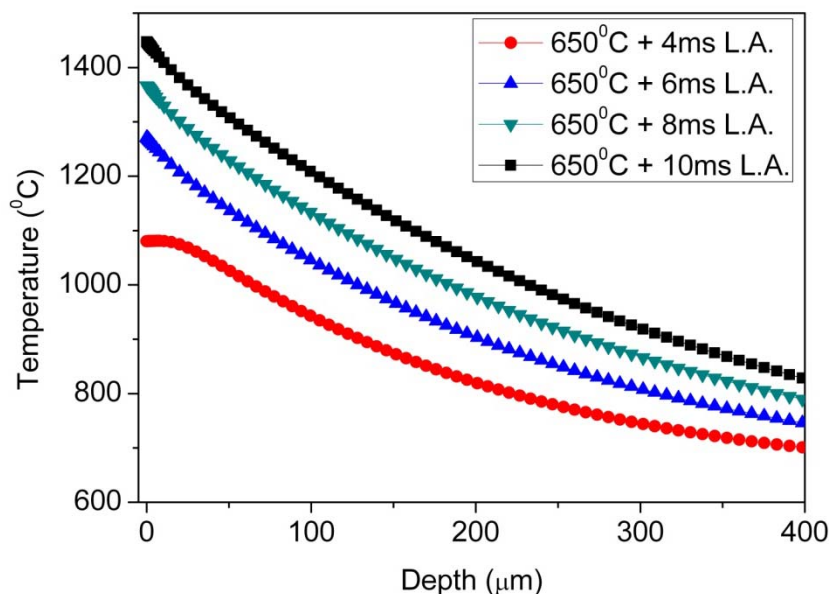


Εικόνα 8.17 Ισόθερμες καμπύλες θερμοκρασίας στα πρώτα 80 μm του υπολογιστικού χωρίου. Οι καμπύλες ελήφθησαν στα χρονικά σημεία μέγιστης θερμοκρασίας για ακτινοβολή διάρκειας 4, 6, 8 και 10 ms (από πάνω προς τα κάτω) σε δείγματα 38N τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανσης στους 600^oC (αριστερή στήλη) και στους 650^oC (δεξιά στήλη)

Παραπάνω, παρατέθηκαν ισόθερμες θερμοκρασιακές καμπύλες, όπως αυτές ελήφθησαν κατά την στιγμή που η μέση επιφανειακή θερμοκρασία είχε λάβει την μέγιστη τιμή της. Από τις εικόνες αυτές γίνεται φανερή η γκαουσιανή μορφή του παλμού, ο οποίος με την σειρά του δημιουργεί καμπυλόγραμμες ισόθερμες, με αποτέλεσμα η θερμοκρασία να είναι πιο έντονη στο κέντρο του υπολογιστικού χωρίου. Για κάθε συνθήκη, παρουσιάζουμε και την θερμοκρασιακή κατανομή κατά βάθος για την ίδια χρονική στιγμή. Διαφάνεται το μεγάλο μήκος θερμικής διάχυσης, το οποίο είναι απόρροια αφενός μεν της σχετικά μεγάλης θερμικής διαχυτότητας του πυριτίου και κυρίως των μεγάλων (σε σχέση με την ακτινοβόληση σε καθεστώς ns, όπως στην περίπτωση των Excimer laser) χαρακτηριστικών χρόνων απόπτωσης. Είναι εμφανές το «άπλωμα» των ισόθερμων καμπυλών, καθώς αυξάνεται ο χρόνος ακτινοβόλησης, καθώς τα στιγμιότυπα λαμβάνονται κάθε φορά σε μεγαλύτερους χρόνους, με αποτέλεσμα να υπάρχει μεγαλύτερη διάχυση της θερμότητας.



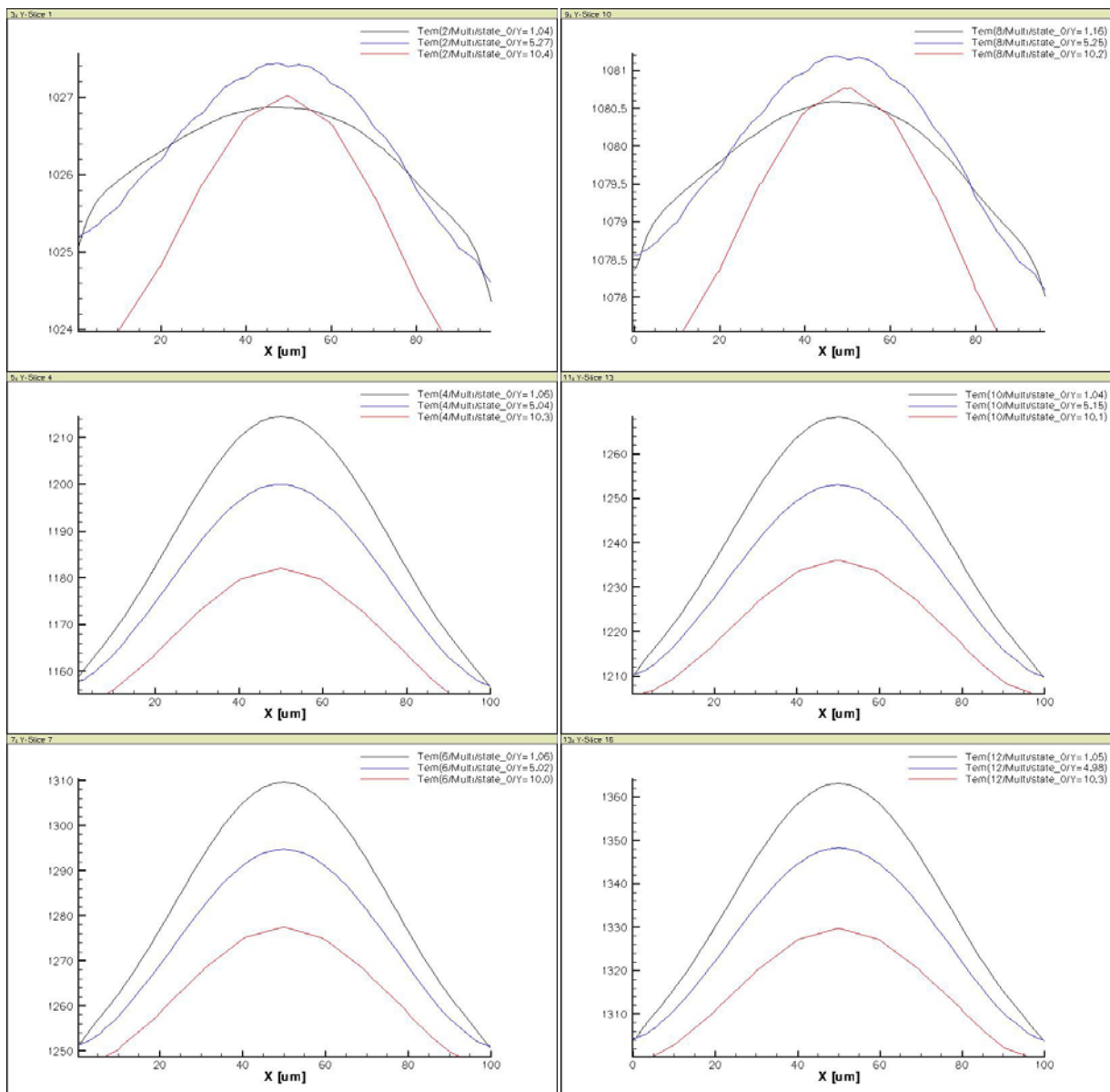
Εικόνα 8.18 Κατανομές της θερμοκρασίας κατά βάθος του υλικού. Έχουν ληφθεί δυο καμπύλες για κάθε συνθήκη, η μια από το κέντρο του υπολογιστικού χωρίου ($y=50 \mu\text{m}$) και μια στα $y=22 \mu\text{m}$. Οι καμπύλες ελήφθησαν στα χρονικά σημεία μέγιστης θερμοκρασίας για ακτινοβόληση διάρκειας 4, 6 και 8 ms (από πάνω προς τα κάτω) σε δείγματα 38N τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανσης στους 600°C (αριστερή στήλη) και στους 650°C (δεξιά στήλη).



Εικόνα 8.19 Θερμοκρασιακή κατανομή κατά βάθος, για τέσσερες διαφορετικές διάρκειες παλμού, από 4 έως 10 ms.

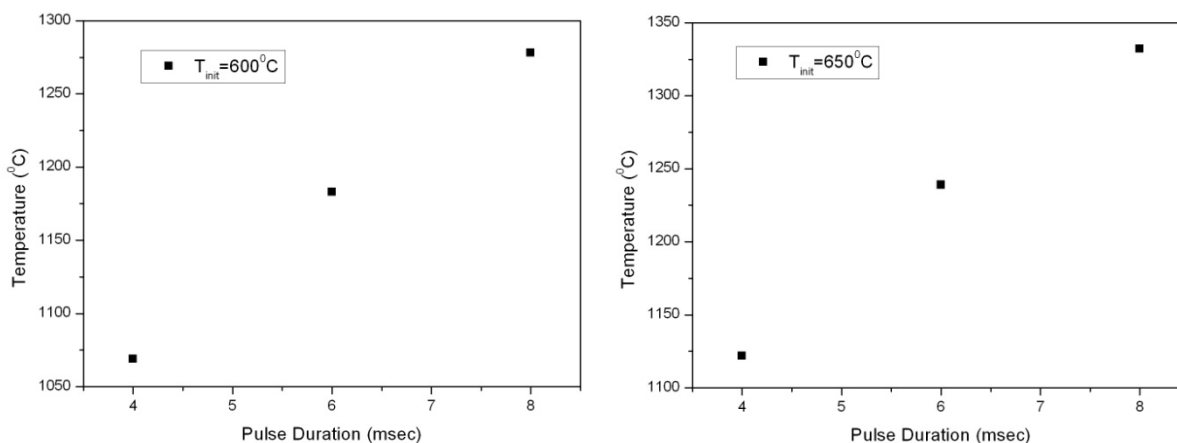
Στο διάγραμμα 8.19, δίνεται συγκεντρωτικά η κατανομή της θερμοκρασίας, όπως αυτή προέκυψε από την προσομοίωση, για κάθε μια από τις τέσσερες τιμές διάρκειας παλμού για δείγματα 39N που προθερμάνθηκαν στους 650°C. Οι καμπύλες αυτές ελήφθησαν από το κέντρο του υπολογιστικού χωρίου και αντιστοιχούν σε χρόνο ίσο με αυτό της εκάστοτε διάρκειας παλμού που χρησιμοποιήθηκε σε κάθε περίπτωση. Παρατηρούμε την έντονη διείδυση της θερμότητας στον όγκο του υλικού.

Τέλος παραθέτονται και δυο ενδεικτικές καμπύλες της κατανομής της θερμοκρασίας, τόσο στην επιφάνεια του πυριτίου, όσο και σε επίπεδο το οποίο απέχει από την επιφάνεια του δοκιμίου μερικά μικρόμετρα. Ακριβώς όπως και στην περίπτωση των διαγραμμάτων που απεικόνιζαν τις ισόθερμες καμπύλες, και εδώ είναι έκδηλη η γκαουσιανής μορφής, κατανομή της θερμοκρασίας απόρροια της μορφής της κατανομής ισχύος της δέσμης. Οι κατανομές αυτές έχουν ληφθεί για τρία διαφορετικά βάθη για κάθε μια συνθήκη. Η αριστερή στήλη παρουσιάζει τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση δειγμάτων 39N που προθερμάνθηκαν στους 600°C, ενώ η δεξιά για δείγματα που ανοπτήθηκαν στους 650°C. Παρουσιάζονται τα δεδομένα για διάρκειες παλμού, 4, 6 και 8 ms, ενώ τα αποτελέσματα για τους παλμούς διάρκειας 10 ms, είναι παρόμοια.



Εικόνα 8.20 Κατανομές της θερμοκρασίας κατά μήκος του δοκιμίου. Έχουν ληφθεί τρεις καμπύλες για κάθε συνθήκη, που αντιστοιχούν σε 3 βάρη από την επιφάνεια (1, 5 και 10 μm). Οι καμπύλες ελήφθησαν στα χρονικά σημεία μέγιστης θερμοκρασίας για ακτινοβολήση διάρκειας 4, 6 και 8ms (από πάνω προς τα κάτω) σε δείγματα 38N τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανσης στους 600⁰C (αριστερή στήλη) και στους 650⁰C (δεξιά στήλη).

Σε πλήρη αναλογία με την μονοδιάστατη προσομοίωση, τα αποτελέσματα για την θερμοκρασιακή κατανομή για τα δείγματα 39N σχεδόν ταυτίζονται με αυτά των δειγμάτων 38N για κάθε συνθήκη ακτινοβολήσης, είτε με χρήση Advanced Calibration, είτε όχι. Στα γραφήματα 8.21, παρουσιάζονται οι μέγιστες θερμοκρασίες ανά διάρκεια παλμού, για δείγματα 39N που έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600 και β) 650⁰C, με χρήση αρχείων Advanced Calibration 2008.09.

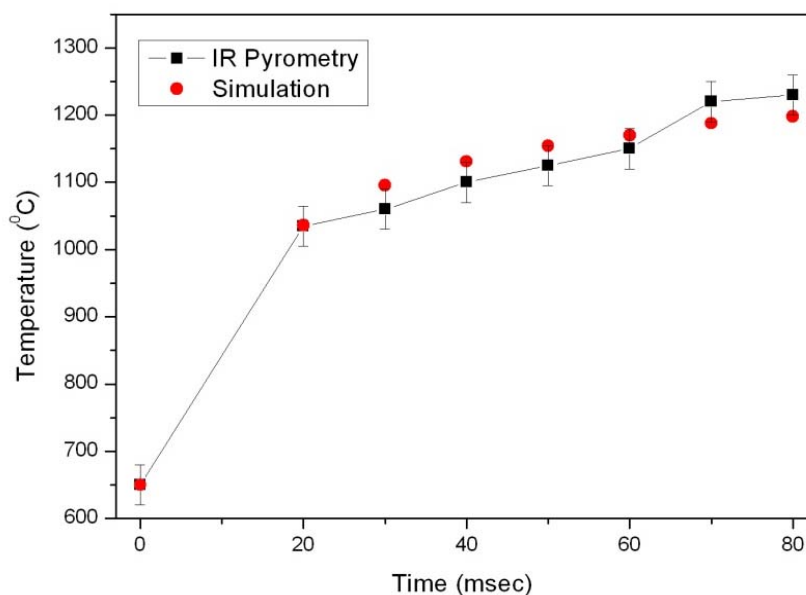


Εικόνα 8.21 Μέγιστες θερμοκρασίες ανά διάρκεια παλμού, για δείγματα 39N που έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600 και β) 650°C, με χρήση αρχείων Advanced Calibration 2008.09.

8.5.6 Σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με πειραματικά δεδομένα

Όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενο εδάφιο, η διαδικασία της μέτρησης της θερμοκρασίας σε πραγματικό χρόνο μέσω πυρομετρίας, παρουσιάζει σημαντικά προβλήματα. Η δυσκολία αυτή γίνεται πιο έντονη, όσο μειώνεται η διάμετρος του σποτ ή/και η διάρκεια του παλμού. Ειδικά στην περίπτωση των δικών μας ακτινοβολήσεων, η διάμετρος του σποτ είναι μόλις 1.1 mm, και καθώς το πυρόμετρο εκτελεί δειγματοληψία της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας¹⁴ από μια περιοχή διαμέτρου τουλάχιστον 0.6 mm, είναι προφανές ότι η μετρούμενη θερμοκρασία θα εμπεριέχει πολύ μεγάλο σφάλμα. Επιπρόσθετα, καθώς το πυρόμετρο λαμβάνει μετρήσεις ανά χρονικά διαστήματα της τάξεως, το λιγότερο, των 0.3-0.5 ms, αναγκαστικά η δειγματοληψία που εκτελείται σε για τις χρησιμοποιούμενες διάρκειες παλμού είναι αραιή. Επομένως, αν θέλουμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με πειραματικά δεδομένα, είμαστε υποχρεωμένοι να προσομοιώσουμε ακτινοβολήσεις μεγαλύτερης διάρκειας με εστίαση σε σποτ σημαντικά μεγαλύτερης διαμέτρου (π.χ. 2 mm). Οι πρώτες ακτινοβολήσεις που είχαν διεξαχθεί ήταν ακριβώς υπό τέτοιες συνθήκες και έτσι είχαμε προβεί σε μετρήσεις της θερμοκρασίας. Αν και οι μετρήσεις αυτές δεν στερούνται κάποιας αβεβαιότητας, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μια πρώτη προσέγγιση για την επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την προσομοίωση. Έτσι λοιπόν, αναπαραστήσαμε υπολογιστικά ακτινοβολήσεις, στις οποίες η δέσμη είχε εστιαστεί στα 1.8 mm, και με διάρκεια παλμού που ποίκιλε από 20 έως 80 msec. Εμφανίζουμε τα αποτελέσματα για ακτινοβολήση με $I_0=3687 \text{ W/cm}^2$, σε δείγμα τύπου 39N, το οποίο έχει προθερμανθεί στους 650°C. Παρά το γεγονός ότι αυξήσαμε το χρονικό βήμα κατά ένα παράγοντα 2, η διαδικασία της προσομοίωσης της παρούσας περίπτωσης αποδείχθηκε εξαιρετικά χρονοβόρα. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι χρειάστηκαν περίπου 120 ώρες για την προσομοίωση μιας και μόνο μιας περίπτωσης! Στην εικόνα 8.22, παρουσιάζουμε τις μέγιστες θερμοκρασίες ανά συνθήκη, όπως αυτές προέκυψαν από την πυρομέτρηση (κόκκινοι κύκλοι) και από την προσομοίωση (μαύρα τετράγωνα). Όσον αφορά στο σφάλμα που εμφανίζεται, αυτό έχει προκύψει από την διακύμανση των τιμών που έχουν μετρηθεί (3 τιμές ανά συνθήκη) και είναι της τάξης των 30°C. Επιλέξαμε να ενώσουμε τα σημεία που αντιστοιχούν στις πειραματικές μετρήσεις για να καταδείξουμε την τάση της θερμοκρασίας σε σχέση με την προσομοίωση, αλλά και την ανακρίβεια της μέτρησης. Παρά τις

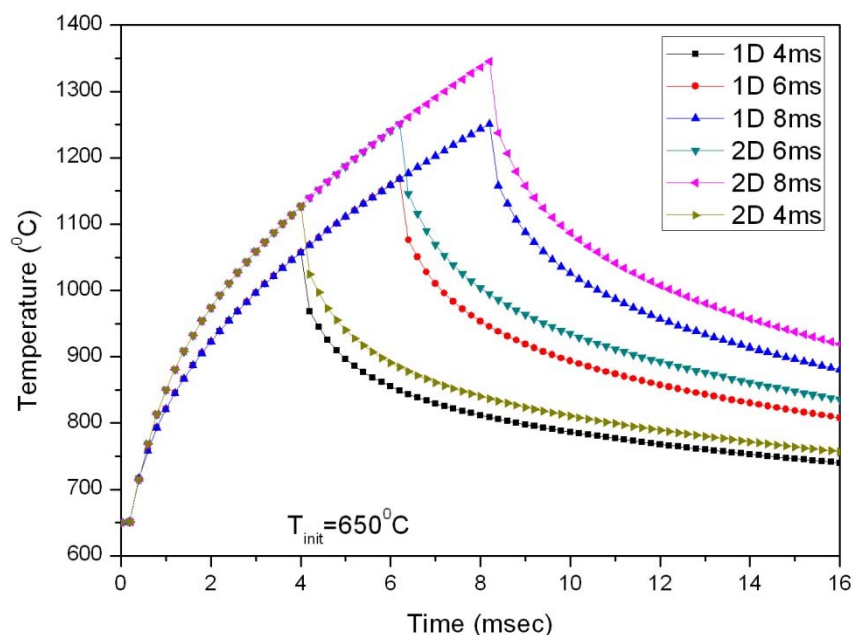
όποιες διαφορές στην απόλυτη τιμή μεταξύ των πειραματικά μετρημένων και των υπολογισθέντων, είναι προφανές ότι καταφέραμε να προσομοιώσουμε την μορφή της καμπύλης με πολύ καλή ακρίβεια. Επιπλέον φαίνεται ότι μέχρι τα 50 msec οι τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση είναι κάπως χαμηλότερες από τις πειραματικές, ενώ μετά τα 50 msec η τάση αυτή αντιστρέφεται, γεγονός που υποδεικνύει ότι οι διαφορές οφείλονται περισσότερο στην αβεβαιότητα της διαδικασίας της πυρομέτρησης και λιγότερο σε σφάλμα των υπολογισμών. Το παραπάνω διάγραμμα ενισχύει περαιτέρω την αξιοπιστία της διαδικασίας της προσομοίωσης που ακολούθηθηκε, και μας επιτρέπει να εμπιστευτούμε τα αποτελέσματα που εξάγαμε για τις ακτινοβολήσεις με μικρότερη διάρκεια παλμού, στις οποίες δεν μπορούσαμε να λάβουμε απευθείας μετρήσεις της θερμοκρασίας.



Εικόνα 8.22 Σύγκριση των μέγιστων τιμών της επιφανειακής θερμοκρασίας ανά συνθήκη ακτινοβολήσης, όπως αυτές προέκυψαν από μέτρηση μέσω IR πυρομέτρου και από την προσομοίωση για ακτινοβολήση laser σε ένα δείγμα τύπου 39N, το οποίο έχει προθερμανθεί στους 650⁰C. Η δέσμη είχε εστιαστεί στα 1.8 mm. Οι πειραματικά προσδιορισθείσες τιμές έχουν ενωθεί για να καταδείξουν την διακύμανση σε σχέση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

8.6 Σύγκριση μονοδιάστατων και δισδιάστατων υπολογισμών

Στο διάγραμμα 8.23 παραθέτουμε καμπύλες της χρονικής εξέλιξης της επιφανειακής θερμοκρασίας για προσομοίωση σε μια και δυο διαστάσεις για τις διάρκειες παλμού 4, 6 και 8 ms για δείγμα τύπου 38N το οποίο έχει υποστεί προθέρμανση στους 650⁰C. Είναι προφανές ότι για κάθε συνθήκη, η μονοδιάστατη ανάλυση οδηγεί σε χαμηλότερη επιφανειακή θερμοκρασία σε σχέση με τους δισδιάστατους υπολογισμούς. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποδοθεί στο ότι η μέση τιμή της πυκνότητας ισχύος είναι αισθητά μικρότερη σε σχέση με την τιμή της πυκνότητας ισχύος που έχει ανατεθεί στο κέντρο της επιφάνειας, και στο οποίο αντιστοιχεί το κέντρο του γκαουσιανού παλμού.



Εικόνα 8.23 Συγκεντρωτικό διάγραμμα της εξέλιξης της θερμοκρασιακής κατανομής στην επιφάνεια του πυριτίου για τρεις διαφορετικές διάρκειες παλμού για προσομοίωση σε μια και δυο διαστάσεις για δείγμα με κωδική ονομασία 38N που έχει προθερμανθεί στους 650°C, και με χρήση προηγμένων βιβλιοθηκών advanced calibration 2008.09.

8.7 Προσομοίωση της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων βορίου κατά την ανόπτηση με CO₂ laser - Εισαγωγή

Αφού κατέστη δυνατή η προσομοίωση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με CO₂ laser με το πυρίτιο, όσον αφορά στην εξέλιξη της κατανομής της θερμοκρασίας στο εσωτερικό του υλικού, το επόμενο βήμα ήταν η προσπάθεια μελέτης της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων του Βορίου. Η μελέτη αυτή είναι ιδιαίτερα σημαντική, διότι η τελική κατανομή της συγκέντρωσης των ατόμων Βορίου καθώς και τα ποσοστά ηλεκτρικής ενεργοποίησης που επιτυγχάνονται μέσω της ανόπτησης, είναι τα στοιχεία που θα καθορίσουν την επιτυχία ή μη της ακτινοβόλησης αυτής καθεαυτής. Επομένως, η πρόβλεψη εκ των προτέρων της διάχυσης των προσμίξεων αλλά και της ενεργοποίησής τους, είναι απαραίτητη για την κατάλληλη επιλογή των συνθηκών ακτινοβόλησης, για την επίτευξη των βέλτιστων αποτελεσμάτων.

Το Sentaurus Process, προσφέρει τη δυνατότητα επιλογής μεταξύ δυο διαφορετικών προσεγγίσεων για την μελέτη της κινητικής της διάχυσης. Η πρώτη στηρίζεται σε αριθμητικές τεχνικές, ενώ η δεύτερη, σε αλγορίθμους Kinetic Monte Carlo. Τα βασικά χαρακτηριστικά των δυο τεχνικών παρουσιάζονται στο 3ο κεφάλαιο, ενώ το θεωρητικό υπόβαθρο της κινητικής της διάχυσης, δίνεται στο 5ο κεφάλαιο.

Η περιγραφή της προσπάθειας προσομοίωσης θα ξεκινήσει από την συνεχή – αριθμητική προσέγγιση, η οποία απέδωσε και τα καλύτερα αποτελέσματα (όπως προέκυψαν από την σύγκριση με τα δεδομένα που προέκυψαν από τον μορφολογικό και ηλεκτρικό χαρακτηρισμό που περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο). Στη συνέχεια θα αναφερθούμε συνοπτικά στην μελέτη με χρήση KMC αλγορίθμων, η οποία δεν στέφθηκε με την επιτυχία, για μια σειρά από λόγους οι οποίοι θα αναφερθούν αναλυτικά.

8.8 Προσομοίωση με χρήση της συνεχούς προσέγγισης

8.8.1 Συνοπτική παρουσίαση της μεθοδολογίας

Η αριθμητική – συνεχής προσέγγιση της μοντελοποίησης των φαινομένων της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων μέσα στον όγκο του πυριτίου, λόγω ανόπτησης, βασίζεται στην ταυτόχρονη επίλυση συστημάτων χρονοεξαρτώμενων εξισώσεων, τα οποία περιλαμβάνουν τόσο την εξίσωση της θερμότητας, όσο και εξισώσεις που περιγράφουν την κινητική των προσμίξεων αλλά και των ατελειών. Όπως αναφέρθηκε και στο κεφάλαιο 3, στο οποίο περιγράφεται η λειτουργία του Sentaurus Process, δίνεται η δυνατότητα επιλογής ανάμεσα σε διάφορα μοντέλα για την περιγραφή των φαινομένων μεταφοράς. Από τα μοντέλα αυτά επιλέχθηκε το Charged React, το οποίο αποτελεί το πιο γενικό μοντέλο διάχυσης στο Sentaurus (five stream model) και περιλαμβάνει μία ακίνητη, σε θέση αντικατάστασης, πρόσμιξη και μέχρι δυο κινητά φορτισμένα ζεύγη πρόσμιξης-ατέλειας. Επίσης μπορεί να συμπεριλάβει κινητές σημειακές ατέλειες. Όπως αναφέρεται και στο εγχειρίδιο χρήσης του λογισμικού, για εξαιρετικά υψηλούς ρυθμούς ανόδου της θερμοκρασίας ή για επιλεγόμενες από το χρήστη αρχικές συνθήκες, τα μοντέλα Charge React και React, φαίνεται να είναι οι καλύτερες επιλογές, παρά τις μεγαλύτερες απαιτήσεις σε όρους υπολογιστικής ισχύος. Κατά την επίλυση των εξισώσεων λαμβάνεται υπόψη μια πληθώρα φαινομένων που σχετίζονται με την κινητική των προσμίξεων αλλά και των ατελειών, όπως αυτά περιγράφονται στην βιβλιογραφία^{15 16 17 18 19 20}. Επίσης, όσον αφορά κάποιες από τις βασικές στρατηγικές μοντελοποίησης με χρήση αναλυτικών εργαλείων, υπάρχουν αρκετά παραδείγματα στην βιβλιογραφία^{21 22 23}. Όσον αφορά στη μοντελοποίηση του σχηματισμού συσσωματωμάτων ενδοπλεγματικών ατελειών χρησιμοποιείται το μοντέλο “1Moment”, βάση του οποίου αποτελεί η αναφορά από τους C. S. Rafferty et al.²⁴. Το μοντέλο αυτό χρησιμοποιεί μόνο μια εξίσωση για την περιγραφή της χρονικής εξέλιξης των συσσωματωμάτων ενδοπλεγματικών ατελειών και θεωρείται ως ένας καλός συμβιβασμός ανάμεσα στην ακρίβεια και στον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Από την στιγμή που το Sentaurus Process, επιλύει ταυτόχρονα σε κάθε κόμβο και για κάθε χρονικό βήμα, τόσο την εξίσωση θερμότητας όσο και τις εξισώσεις διάχυσης, οι αλγόριθμοι για την εξεύρεση των θερμοκρασιακών προφίλ και για την μελέτη της διάχυσης πρακτικά είναι το ένα και το αυτό. Επομένως ο αναγνώστης παραπέμπεται στο κεφάλαιο 8, για τις βασικές αρχές που ακολουθήθηκαν για την προσομοίωση, τόσο σε μια όσο και σε δυο διαστάσεις.

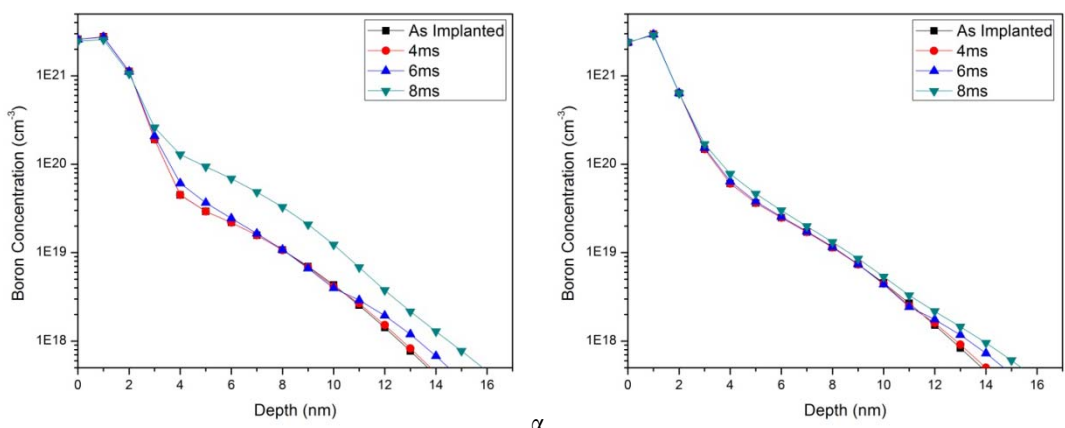
Ομοίως, όσον αφορά στη διερεύνηση για την επίτευξη σύγκλισης και της βελτιστοποίησης της απόδοσης, πραγματοποιήσαμε ακριβώς την ίδια μελέτη που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 8. Η μοναδική διαφορά που μπορούμε να τονίσουμε έγκειται στην περαιτέρω διερεύνηση για την επίδραση των αρχείων που περιέχουν προηγμένες βιβλιοθήκες παραμέτρων αλλά και δεδομένων με την ονομασία Advanced Calibration. Τα αρχεία αυτά περιέχουν τις πιο ενημερωμένες τιμές για όλα τα φυσικά μεγέθη που εμπεριέχονται στους υπολογισμούς. Οι περισσότερες από τις τιμές των παραμέτρων προέρχονται από το βιβλίο “Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon” από τον Peter Pichler [1]. Στο βιβλίο αυτό γίνεται αναφορά σε περισσότερες από 3000 δημοσιεύσεις και δίνεται μια εμπειριστατωμένη οπτική τεχνολογίας αιχμής για τα πειραματικά δεδομένα που είναι διαθέσιμα από την βαθμονόμηση των κυριότερων παραμέτρων για την διάχυση στο πυρίτιο. Για πολλές σχετιζόμενες παραμέτρους, ο Pichler συγκρίνει τα αποτελέσματα από

πολλές πηγές προσφέροντας την δυνατότητα υπολογισμού των σφαλμάτων στην τιμή κάθε παραμέτρου. Στην ουσία ένα τέτοιο αρχείο χωρίζεται σε τέσσερις υποενότητες, κάθε μια από τις οποίες εκτελείται με την σειρά. Στο πρώτο, περιέχονται τα βασικά μοντέλα που διέπουν τα φαινόμενα μεταφοράς, ενεργοποίησης και συσσωμάτωσης. Στο δεύτερο περιέχονται οι πιο ενημερωμένες τιμές για τις σταθερές παραμέτρους που εμπλέκονται στους υπολογισμούς. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε πως δίνονται παράμετροι για την κινητική των ενδοπλεγματικών ατελειών και των πλεγματικών κενών^{25 26 27 28 29 30 31 32}, του Βορίου [Pichler], για την εμφάνιση μεταβατικών φαινομένων διάχυσης^{33 34 35} και απώλειας δόσης Βορίου³⁶ καθώς και της επίδρασης του φθορίου στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων^{37 38 39 40}. Στο τρίτο δίνονται διάφοροι πίνακες που περιέχουν δεδομένα αρχικοποίησης με βάση μετρήσεις SIMS, που προέκυψαν από ένα μεγάλο εύρος συνθηκών ιοντικής εμφύτευσης, έτσι ώστε να γίνει η κατάλληλη επιλογή αρχικών συνθηκών. Πιο συγκεκριμένα παρέχονται με μεγαλύτερη ακρίβεια οι κατανομές των σημειακών ατελειών ή των συσσωματωμάτων σημειακών ατελειών, αναλόγως της δόσης, της ενέργειας και του είδους των εμφυτευμένων ιόντων. Γενικά, οι αρχικές συνθήκες είναι ιδιαίτερα σημαντικές για ανοπτήσεις με μικρές ποσότητες θερμότητας, όπως ακριβώς συμβαίνει και στην περίπτωση μας. Στο τέταρτο και τελευταίο μέρος δίνεται μια σειρά από πιο εξεζητημένα και υπολογιστικά απαιτητικά μοντέλα, όπως το Full [Zographos et al.] και το ChargedCluster model, το οποίο εστιάζει στον σχηματισμό των boron–interstitial clusters (BIC's), καθώς και των συσσωματωμάτων ατόμων φθορίου. Το ChargedCluster μοντέλο δίνει ιδιαίτερα ακριβή αποτελέσματα όσον αφορά τις ανοπτήσεις που εισάγουν μικρό ποσό θερμότητας, όπως το millisecond. Ο συνδυασμός των παραπάνω, οδηγεί κατά την Synopsys σε μεγαλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, ειδικά για την περιγραφή μεταβατικών φαινομένων σε πολύ μικρή κλίμακα. Επομένως, η χρήση των βιβλιοθηκών καθώς είναι ιδιαίτερα απαιτητική υπολογιστικά πρέπει να χρησιμοποιείται μόνο για την περιγραφή συγκεκριμένων φαινομένων, όπως η εμφύτευση και η ανόπτηση σε πολύ μικρούς χρόνους και με εισαγωγή μικρών ποσοτήτων θερμότητας. Με άλλα λόγια, στην περίπτωση μας η χρήση των βιβλιοθηκών Advanced Calibration, αποτελεί μονόδρομο. Και όπως θα δείξουμε στη συνέχεια, αν και όπως δείχτηκε στο κεφάλαιο 8, η ενσωμάτωση ή μη, τέτοιων αρχείων οδηγεί πρακτικά σε ίδια θερμοκρασιακά προφίλ, υπάρχουν αισθητές διαφορές όσον αφορά την παρατηρούμενη διάχυση του προφίλ συγκέντρωσης καθώς και στα επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης που επιτυγχάνονται. Καθώς η έκφραση που έχουμε χρησιμοποιήσει για την συγκέντρωση φορέων είναι σταθερή και δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο, παρά την δυναμική φύση της διάχυσης, και παρά την τελική διαφορά στις συγκεντρώσεις ανάλογα με την ενσωμάτωση ή μη των αρχείων Advanced Calibration, τελικά οι θερμοκρασιακές κατανομές θα είναι ίδιες. Όπως ακριβώς και στο κεφάλαιο 8, η διερεύνηση ξεκίνησε από υπολογισμούς σε μια διάσταση για λόγους δοκιμών αλλά και εξοικείωσης με τις διαδικασίες, παρά τα εγγενή προβλήματα περιγραφής της αλληλεπίδρασης σε μια διάσταση.

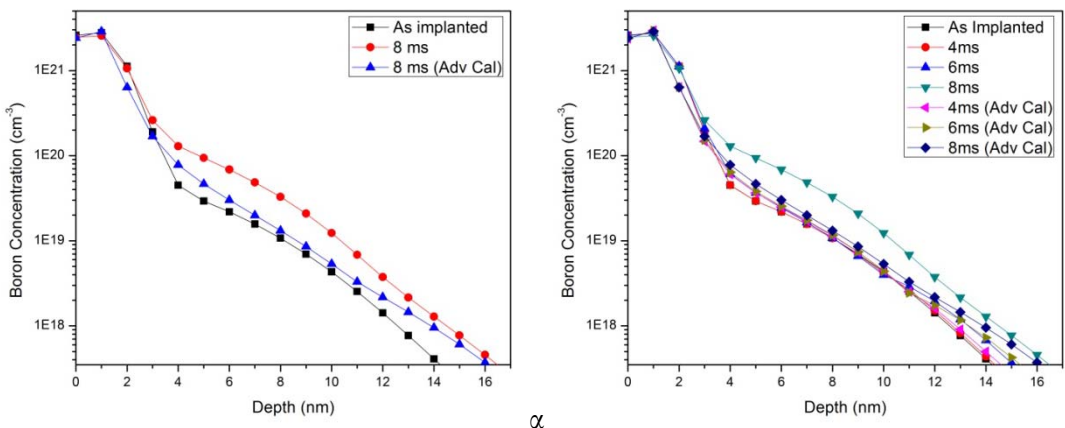
8.8.2 Παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τους υπολογισμούς σε μια διάσταση

Ξεκινάμε την παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τους υπολογισμούς που έγιναν πρακτικά σε μια διάσταση. Καθώς όπως δείχτηκε και στο κεφάλαιο 8, τα θερμοκρασιακά προφίλ που εξάγαμε

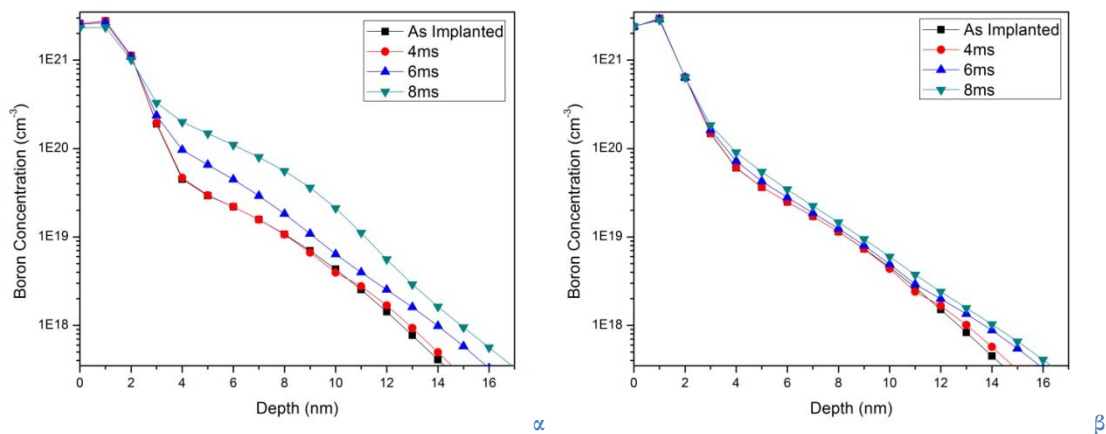
ήταν αισθητά χαμηλότερα σε σχέση με τα δισδιάστατα, αναμένουμε μικρότερη διάχυση σε σχέση με τις δισδιάστατες περιπτώσεις. Αν και η χρήση των αρχείων Advanced Calibration, δεν διαφοροποίησε τις θερμοκρασιακές κατανομές, όμως θα δούμε, ότι υπάρχει σημαντική μεταβολή όσον αφορά στην επίδραση στην κινητική της διάχυσης αλλά και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Θα χωρίσουμε την παρουσίαση των αποτελεσμάτων ανάλογα με το είδος του δείγματος (38N ή 39N). Για κάθε ένα από τα δείγματα, θα παρουσιάζουμε πρώτα την επίδραση της ακτινοβολίας για δείγμα που βρίσκεται στους 600°C, και στη συνέχεια στους 650°C.



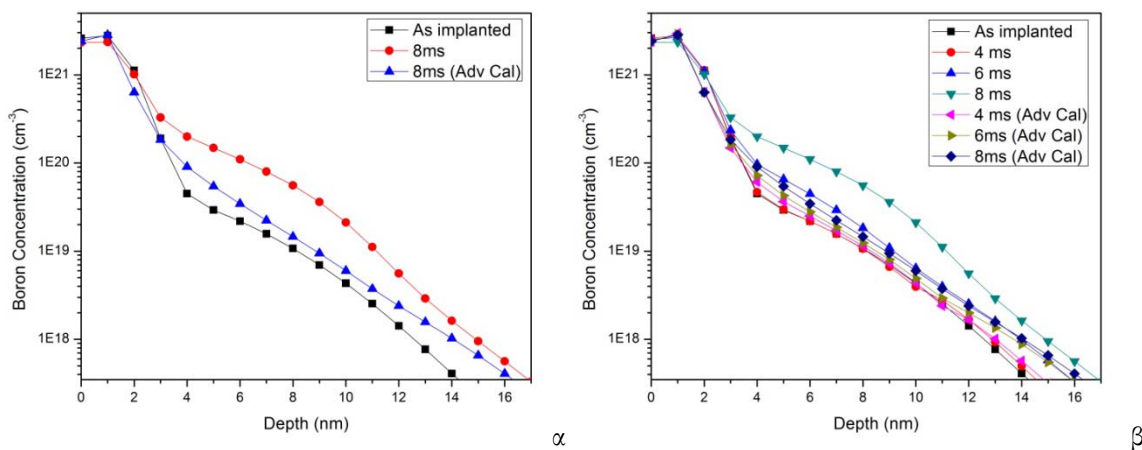
Εικόνα 8.24 Προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 38N που έχει προθερμανθεί στους 600°C. Παρατίθενται τόσο το προφίλ που προέκυψε μετά την εμφύτευση, όσο και το προφίλ για ανόπτηση σε 3 διαφορετικούς χρόνους, χωρίς (α) και με χρήση (β) βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2007.03.



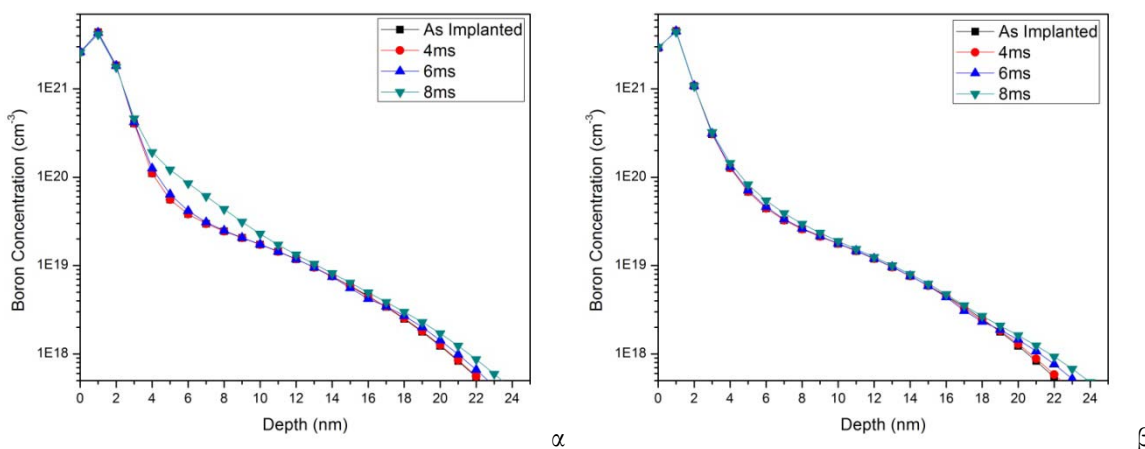
Εικόνα 8.25 α) Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 38N που έχει προθερμανθεί στους 600°C και έχει ανοπτηθεί με παλμό διάρκειας 8 ms, με και χωρίς χρήση βιβλιοθηκών A.C. 2007.03 β) συγκεντρωτικό διάγραμμα για όλες τις συνθήκες με και χωρίς Advanced Calibration



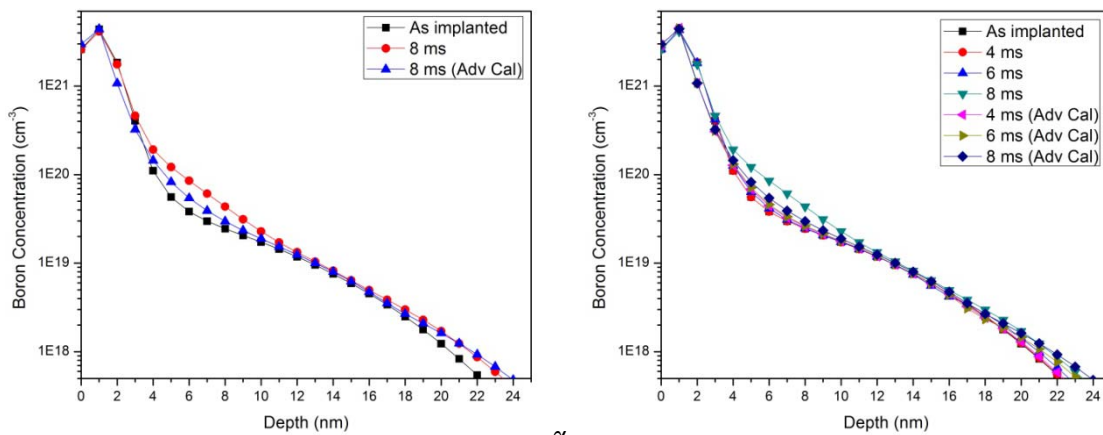
Εικόνα 8.25 Προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 38N που έχει προθερμανθεί στους 650⁰C. Παραθέτουμε τόσο το προφίλ που προέκυψε μετά την εμφύτευση, όσο και το προφίλ για ανόπτηση σε 3 διαφορετικούς χρόνους, χωρίς (α) και με χρήση (β) βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2007.03.



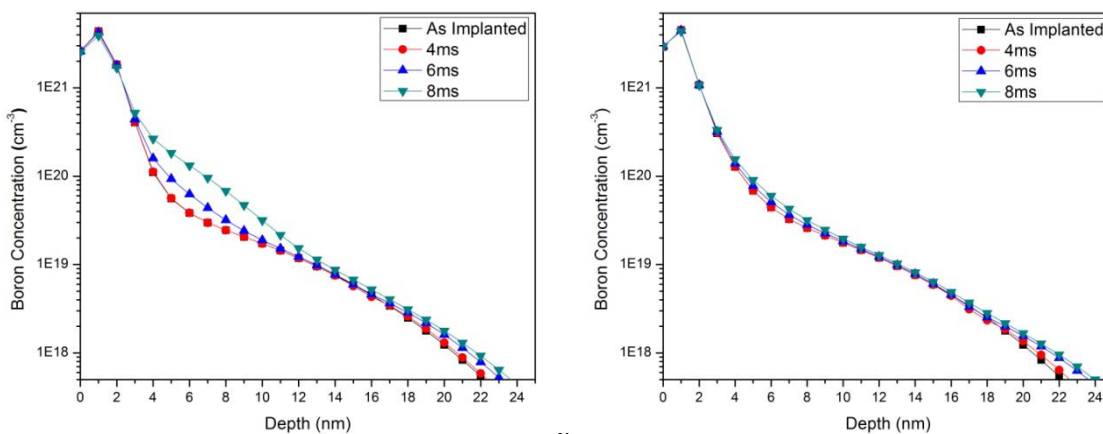
Εικόνα 8.26 α) Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 38N που έχει προθερμανθεί στους 650⁰C και έχει ανοπτηθεί με παλμό διάρκειας 8 ms, με και χωρίς χρήση αρχείου Advanced Calibration. β) συγκεντρωτικό διάγραμμα για όλες τις συνθήκες με και χωρίς Advanced Calibration



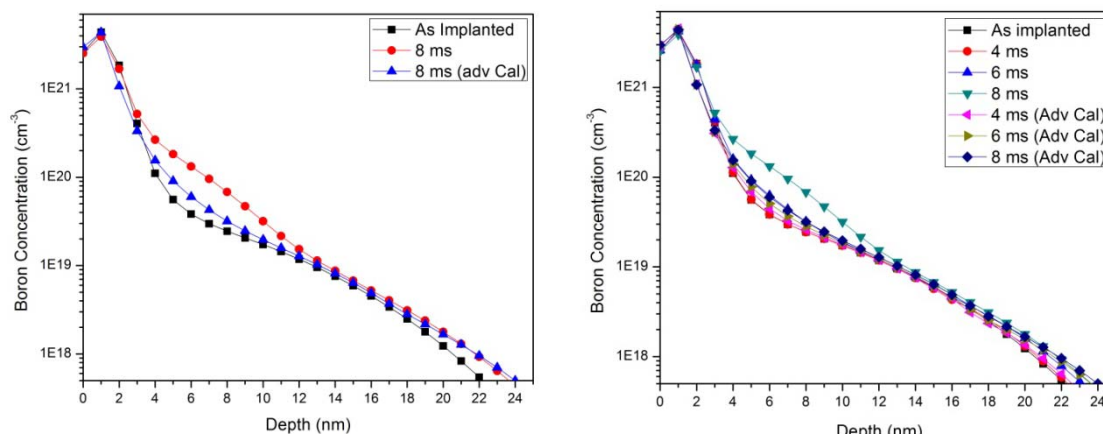
Εικόνα 8.27 Προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 39N που έχει προθερμανθεί στους 600⁰C. Παραθέτουμε τόσο το προφίλ που προέκυψε μετά την εμφύτευση, όσο και το προφίλ για ανόπτηση σε 3 διαφορετικούς χρόνους, χωρίς (α) και με χρήση (β) αρχείου Advanced Calibration.



Εικόνα 8.28 α) Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 39N που έχει προθερμανθεί στους 600°C και έχει ανοπτηθεί με παλμό διάρκειας 8ms, με και χωρίς χρήση αρχείου Advanced Calibration. β) συγκενρωτικό διάγραμμα για όλες τις συνθήκες με και χωρίς Advanced Calibration



Εικόνα 8.29 Προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 39N που έχει προθερμανθεί στους 650°C. Παραθέτουμε τόσο το προφίλ που προέκυψε μετά την εμφύτευση, όσο και το προφίλ για ανόπτηση σε 3 διαφορετικούς χρόνους, χωρίς (α) και με χρήση (β) αρχείου Advanced Calibration 2007.03.



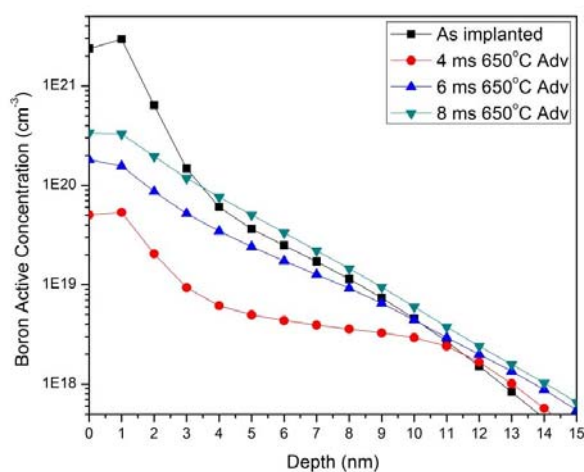
Εικόνα 8.30 α) Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης Βορίου για δείγμα 39N που έχει προθερμανθεί στους 600°C και έχει ανοπτηθεί με παλμό διάρκειας 8 ms, με και χωρίς χρήση αρχείου Advanced Calibration. β) συγκενρωτικό διάγραμμα για όλες τις συνθήκες με και χωρίς Advanced Calibration

Με βάση τα παραπάνω διαγράμματα προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

Όπως δείχτηκε και προηγουμένως, οι μονοδιάστατες προσομοιώσεις οδηγούν σε χαμηλότερες κατανομές θερμοκρασίας, με ανάλογο αντίκτυπο στην προκαλούμενη διάχυση. Ειδικά για τους παλμούς μικρής διάρκειας δεν πρέπει να μας ξενίζει η πάρα πολύ μικρή παρατηρούμενη διάχυση (ειδικά με την χρήση των αρχείων Advanced Calibration), καθώς η ποσότητα θερμότητας που εισάγεται στον όγκο του υλικού είναι περιορισμένη. Οι παρατηρούμενες μετατοπίσεις είναι μικρότερες σε σχέση με τις πειραματικά προσδιορισθείσες μέσω μετρήσεων SIMS.

Η χρήση του αρχείου Advanced Calibration στις εκδόσεις 2007.03 και 2008.09, οδηγεί σε μειωμένη διάχυση, ιδιαίτερα για τις συνθήκες στις οποίες εισάγεται μεγαλύτερη ποσότητα ενέργειας. Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε κάποια ενδεικτικά αποτελέσματα για την ποσοστό των ενεργοποιημένων προσμίξεων, το οποίο δηλώνεται από το λογισμικό ως BActive. Στην Εικόνα 8.9 δίνεται η επίδραση της διάρκειας του παλμού στην ενεργοποίηση για ένα δείγμα 38N, στους 650°C, και με χρήση Advanced Calibration. Όπως αναμενόταν, αυξανόμενης της διάρκειας παλμού, αυξάνεται το ποσοστό των ατόμων Βορίου που βρίσκονται σε πλεγματικές θέσεις και ως εκ τούτου συνεισφέρουν στην αγωγιμότητα. Αυτό εξηγείται από το γεγονός, ότι η αυξημένη ποσότητα θερμότητας που εισάγεται στον όγκο του υλικού ωθεί περισσότερες προσμίξεις σε θέσεις αντικατάστασης.

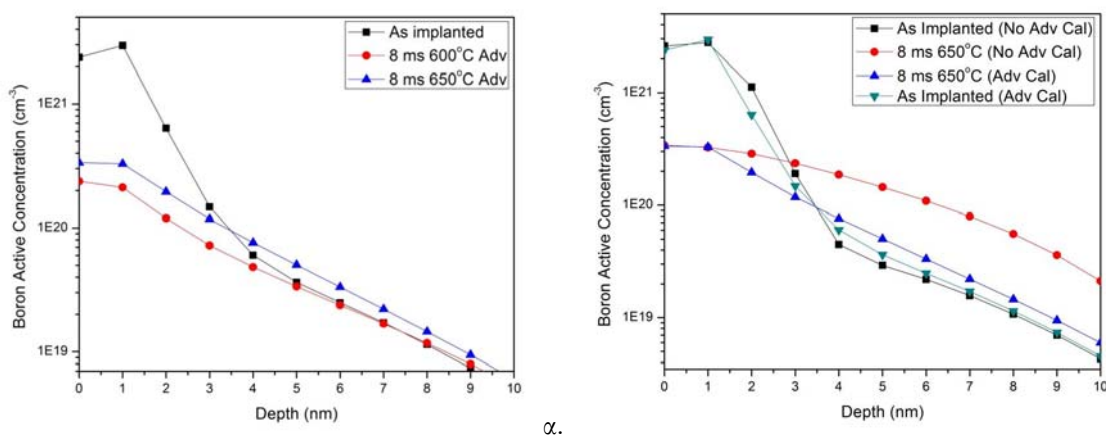
Ακριβώς ανάλογη είναι και η εικόνα για δείγματα που έχουν υποστεί προανόπτηση στους 600°C, καθώς και για τα δείγματα 39N σε κάθε θερμοκρασία.



Εικόνα 8.31 Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης ενεργοποιημένου βορίου για δείγμα 38N που έχει προθερμανθεί στους 650°C με χρήση αρχείου Advanced Calibration, για τρεις διαφορετικές διάρκειες παλμού. Η μαύρη καμπύλη αντιπροσωπεύει την συνολική συγκέντρωση Βορίου για λόγους σύγκρισης.

Στην Εικόνα 8.32.α συγκρίνονται οι συγκεντρώσεις των ενεργοποιημένων ατόμων για δυο διαφορετικές θερμοκρασίες προθέρμανσης, 600 και 650°C, για ένα δείγμα 38N που ανοπτήθηκε με παλμό διάρκειας 8 ms, και με χρήση Advanced Calibration. Και στην περίπτωση αυτή, τα αποτελέσματα είναι σε συμφωνία με τα αναμενόμενα, καθώς η υψηλότερη αρχική θερμοκρασία (η οποία και οδηγεί και σε αρκετά υψηλότερη τελική θερμοκρασία), οδηγεί σε αισθητά υψηλότερο ποσοστό ενεργοποιημένων ατόμων. Εξαιτίας μάλιστα και της μεγαλύτερης διάχυσης που παρατηρείται στο δείγμα με την υψηλότερη θερμοκρασία, το προφίλ ενεργοποιημένων προσμίξεων BActive για τους 650°C, είναι σχετικά μετατοπισμένο (περίπου 0.7 nm) σε σχέση με το προφίλ για τους 600, καθώς οι κατανομές συγκέντρωσης BActive, ακολουθούν τις κατανομές ολικής συγκέντρωσης ατόμων Βορίου, BTotal, από κάποια συγκέντρωση και κάτω. Τέλος, η εικόνα 8.10β παρουσιάζει τα προφίλ BActive αλλά και As implanted για ένα δείγμα 38N που ανοπτήθηκε με παλμό διάρκειας 8 ms, με και χωρίς χρήση βιβλιοθηκών Advanced Calibration. Τα αρχικά προφίλ

συγκέντρωσης Βορίου όπως αυτά προκύπτουν από την εμφύτευση πλάσματος, παρουσιάζουν μια ελαφρά διαφοροποίηση, ανάλογα με το αν έχει ενσωματωθεί στον κώδικα, το αρχείο Advanced Calibration ή όχι. Όπως δείχτηκε και προηγουμένως, η απουσία αυτού του αρχείου οδηγεί γενικά σε μεγαλύτερη διάχυση, και ως εκ τούτου, η κατανομή BActive, η οποία ακολουθεί από ένα σημείο και κάτω την αντίστοιχη κατανομή BTotal, είναι ιδιαίτερα μετατοπισμένη σε σχέση με την BActive που προέκυψε με την χρήση Advanced Calibration.



Εικόνα 8.32 α) Σύγκριση προφίλ συγκέντρωσης ενεργοποιημένου βορίου για δείγμα 38N, ανοιχθέν για 8msec, με χρήση αρχείου Advanced Calibration, που έχει προθερμανθεί στους 600 και στους 650°C, β) αντίστοιχο διάγραμμα που δείχνει την επίδραση της χρήσης βιβλιοθηκών Advanced Calibration στην κατανομή των ενεργοποιημένων προσμίξεων.

Στην συνέχεια παραθέτουμε σε δυο πίνακες (έναν για κάθε δείγμα) την εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης, ανάλογα με τον διάρκεια του παλμού και το εάν χρησιμοποιήθηκαν βιβλιοθήκες Advanced Calibration.

Πίνακας 8. II Επιφανειακή αντίσταση για δείγμα 38N

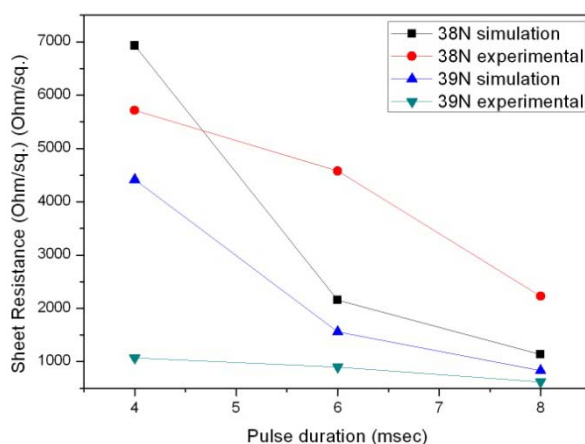
| T _{init} (°C) | 4 ms | 6 ms | 8 ms |
|------------------------|------------------|------------------|------------------|
| 600 | No A.C. 9902 Ω/□ | No A.C. 3460 Ω/□ | No A.C. 1211 Ω/□ |
| | A.C. 10880 Ω/□ | A.C. 3548 Ω/□ | A.C. 1637 Ω/□ |
| 650 | No A.C. 6637 Ω/□ | No A.C. 1778 Ω/□ | No A.C. 698 Ω/□ |
| | A.C. 6298 Ω/□ | A.C. 2154 Ω/□ | A.C. 1134 Ω/□ |

Πίνακας 8. III Επιφανειακή αντίσταση για δείγμα 39N

| T _{init} (°C) | 4ms | 6ms | 8ms |
|------------------------|------------------|------------------|-----------------|
| 600 | No A.C. 6246 Ω/□ | No A.C. 2493 Ω/□ | No A.C. 951 Ω/□ |
| | A.C. 7180 Ω/□ | A.C. 2537 Ω/□ | A.C. 1188 Ω/□ |
| 650 | No A.C. 4490 Ω/□ | No A.C. 1344 Ω/□ | No A.C. 829 Ω/□ |
| | A.C. 4413 Ω/□ | A.C. 1554 Ω/□ | A.C. 830 Ω/□ |

Παρατηρούμε καταρχάς, ότι αυξανόμενης της διάρκειας του παλμού ή της αρχικής θερμοκρασίας στην οποία βρίσκεται το δείγμα, η επιφανειακή αντίσταση μειώνεται. Το γεγονός αυτό αποδίδεται αφενός μεν στην μεγαλύτερη ποσότητα της θερμικής ενέργειας που εισάγεται (η οποία ωθεί περισσότερα άτομα βορίου, σε θέσεις ενεργοποίησης) και αφετέρου στο ότι η μεγαλύτερη ενέργεια, οδηγεί σε μεγαλύτερη διάχυση και επομένως σε ταπείνωση της κατανομής συγκέντρωσης του βορίου. Η ευκινησία των φορέων γενικά αυξάνεται μειούμενης της συγκέντρωσης. Επειδή η αγωγιμότητα εξαρτάται από το ολοκλήρωμα του γινομένου της συγκέντρωσης επί την ευκινησία για δεδομένο βάθος (και αφού το συνολικό ποσό ατόμων βορίου διατηρείται σχεδόν σταθερό), τελικά η αγωγιμότητα ενισχύεται.

Επίσης στην γενικότερη περίπτωση (με εξαίρεση την συνθήκη 650°C/8 ms και για τα δυο δείγματα που ισχύει το αντίστροφο) η χρήση του αρχείου Advanced Calibration 2008.09, οδηγεί σε μικρότερες τιμές επιφανειακής αντίστασης (για τον ίδιο λόγο που αναλύσαμε και στην προηγούμενη περίπτωση). Για το τέλος, στο διάγραμμα 8.33 συγκρίνουμε την μετρημένη μέση επιφανειακή αντίσταση (με τον τρόπο που προσδιορίστηκε στο κεφάλαιο 3) με τις αντίστοιχη που υπολογίστηκε από την προσομοίωση σε μια διάσταση, για δείγματα 38N και 39N που προθερμάνθηκαν στους 650°C. Παρατηρούμε τις έντονες αποκλίσεις για κάθε συνθήκη, οι οποίες είναι απόρροια της μονοδιάστατης μοντελοποίησης.

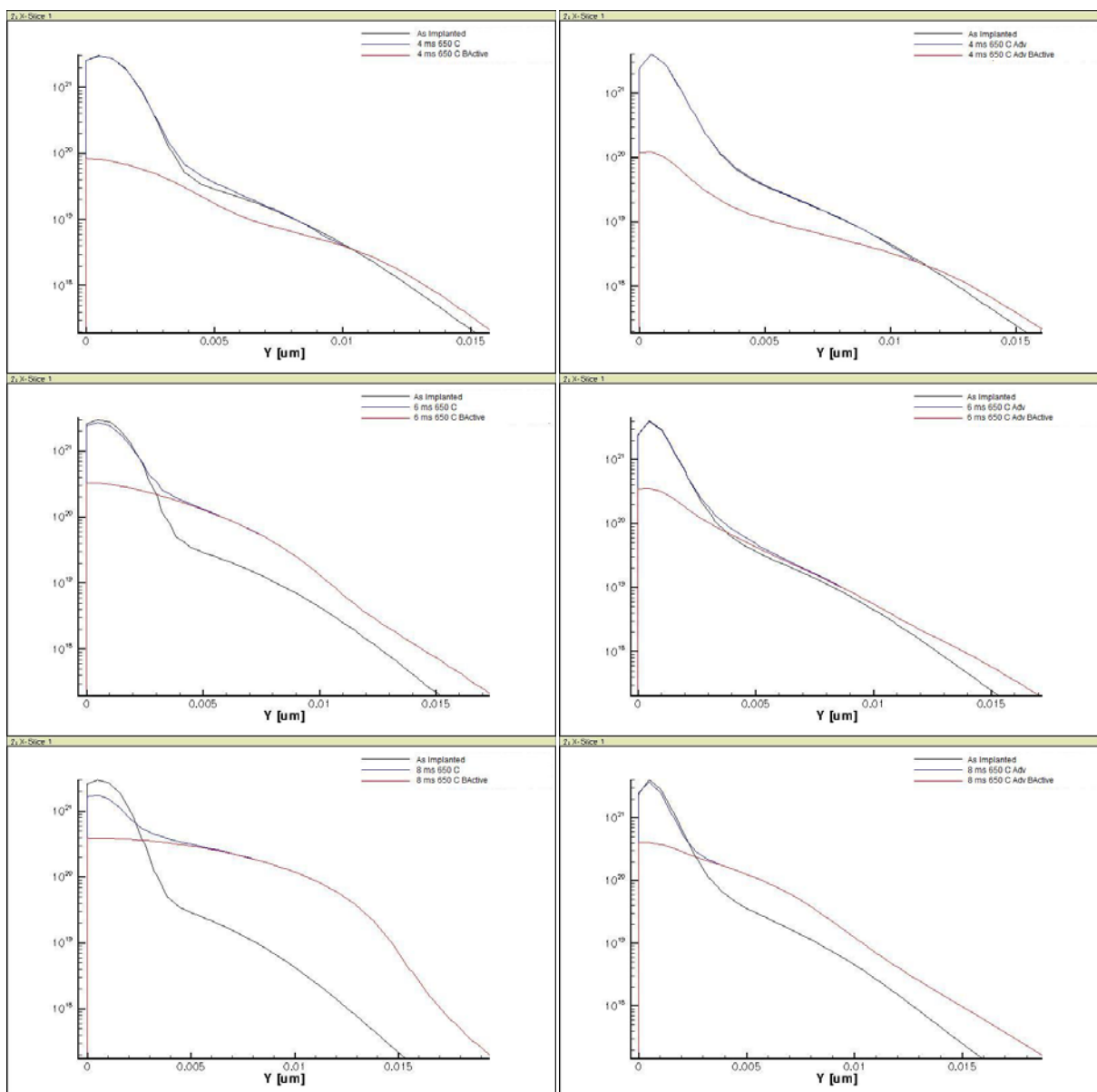


Εικόνα 8.33 Σύγκριση της πειραματικά προσδιορισμένης μέσης επιφανειακής αντίστασης με τις αντίστοιχη που υπολογίστηκε από την προσομοίωση σε μια διάσταση, για δείγματα 38N και 39N που προθερμάνθηκαν στους 650°C με χρήση προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2008.09

8.8.3 Παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τους υπολογισμούς σε μια διάσταση

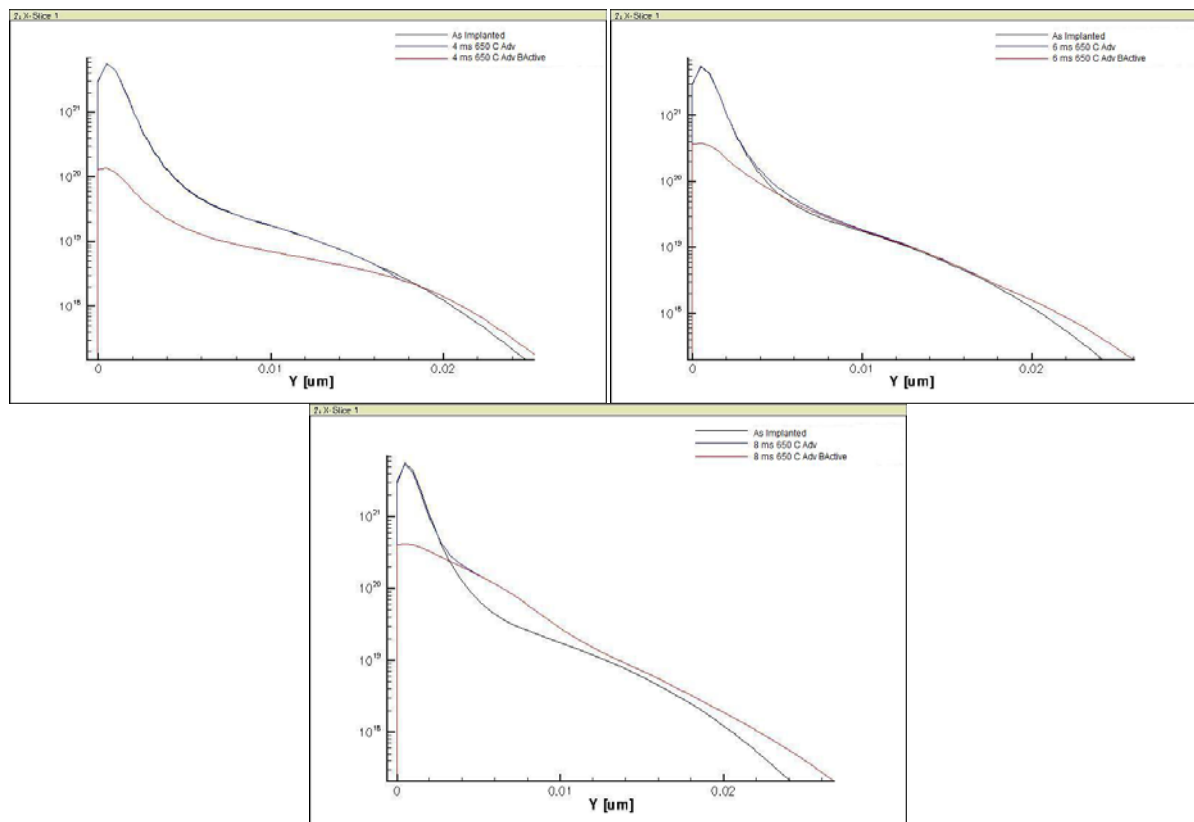
Από την στιγμή που η γκαουσιανή χωρική μορφή του παλμού εισάγει ισόθερμες καμπύλες μέσα στην επιφάνεια του υλικού, ήμασταν υποχρεωμένοι να προβούμε και σε υπολογισμούς σε δυο διαστάσεις. Η ανάγκη αυτή καθίσταται πιο επιτακτική από το γεγονός ότι οι υπολογισμοί σε μια διάσταση οδηγούν στην εισαγωγή χαμηλότερων θερμοκρασιακών προφίλ μέσα στον όγκο του υλικού, λόγω κυρίως του τρόπου με τον οποίο γίνεται ο ορισμός της έντασης της δέσμης στην μονοδιάστατη περίπτωση. Καταρχάς θα παρουσιάσουμε τα προκύπτοντα προφίλ ολικής συγκέντρωσης Βορίου (B_{Total}) και ενεργοποιημένων ατόμων Βορίου (B_{Active}), όπως αυτά προέκυψαν από τους υπολογισμούς για κάθε μια συνθήκη ακτινοβολίας και αρχικής θερμοκρασίας

ξεχωριστά, και ανάλογα με την ταυτότητα του δείγματος και το εάν χρησιμοποιήθηκαν αρχεία Advanced Calibration ή όχι. Λόγω του μεγάλου όγκου αποτελεσμάτων θα παρουσιαστούν κάποιες ενδεικτικές καμπύλες και στη συνέχεια θα δοθούν συγκεντρωτικά αποτελέσματα. Τα διαγράμματα 8.34 παρουσιάζουν τα προφίλ BTotal και BActive, μαζί με το αρχικό προφίλ συγκέντρωσης αμέσως μετά την εμφύτευση για να δείχτει και η διάχυση για δείγμα 38N στους 650°C, χωρίς και αλλά με την χρήση Advanced Calibration (αριστερή και δεξιά στήλη αντίστοιχα), για 4, 6 και 8 ms. Από την μελέτη αυτών των διαγραμμάτων προκύπτει ότι η ενσωμάτωση του αρχείου Advanced Calibration οδηγεί σε πολύ πιο περιορισμένη διάχυση, η οποία είναι και σε συμφωνία με αυτή που έχει προσδιοριστεί πειραματικά μέσω μετρήσεων SIMS.



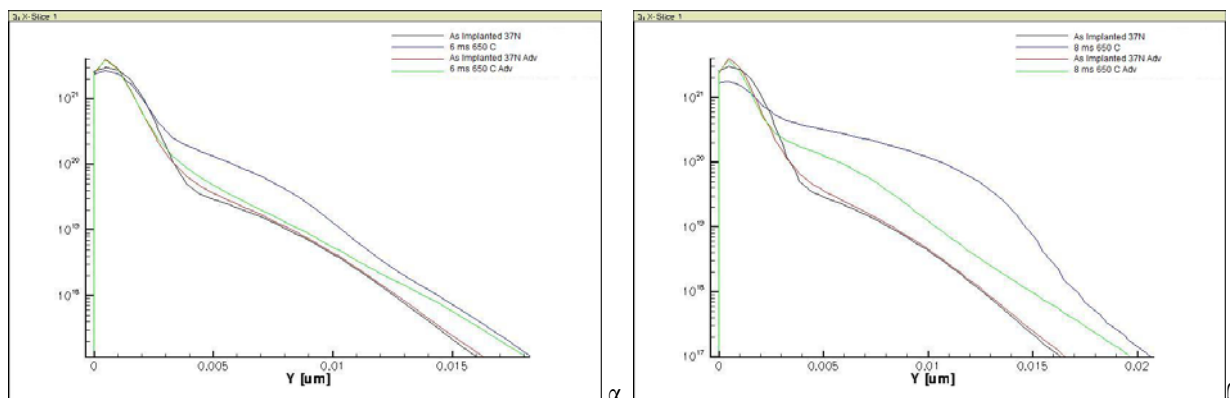
Εικόνα 8.34 Προσομοιωμένα προφίλ ολικής συγκέντρωσης Βορίου, BTotal και ενεργοποιημένων ατόμων, BActive, μαζί με το αρχικό προφίλ συγκέντρωσης αμέσως μετά την εμφύτευση για να δείχτει και η διάχυση για δείγμα 38N στους 650°C, χωρίς και με την χρήση βιβλιοθηκών Advanced Calibration (αριστερή και δεξιά στήλη αντίστοιχα), για 4, 6 και 8 ms. Η χρήση αυτών οδηγεί σε πολύ πιο περιορισμένη διάχυση, σε συμφωνία με τις μετρήσεις SIMS.

Ανάλογη εικόνα προκύπτει και για τα δείγματα 39N, στα οποία παρουσιάζουμε μόνο τα προφίλ που προέκυψαν με τη χρήση του A.C., τα οποία είναι και τα πιο ενδιαφέροντα από άποψη συμφωνίας με το πείραμα.



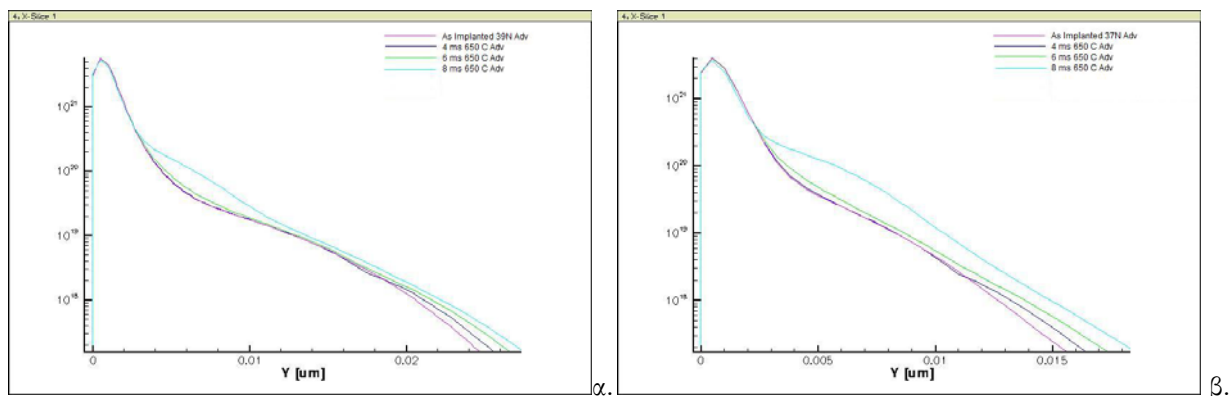
Εικόνα 8.35 Προφίλ BTot και BActive, μαζί με το αρχικό προφίλ συγκέντρωσης αμέσως μετά την εμφύτευση για να δείχτει και η διάχυση για δείγμα 39N στους 650⁰C, με την χρήση Advanced Calibration για 4, 6 και 8 ms.

Στα διαγράμματα 8.36 συγκρίνουμε την επίδραση στην διάχυση ανάλογα με τη χρήση A.C. ή όχι, για δείγμα 38N το οποίο προθερμάνθηκε στους 650⁰C και υπέστη ακτινοβόληση για α) 6 και β) 8 ms. Η διαφορά είναι προφανής και στις δυο περιπτώσεις. Δίνονται δυο διαφορετικά αρχικά προφίλ συγκέντρωσης, ένα εκ των οποίων αντιστοιχεί στο A.C. και ένα χωρίς A.C., καθώς υπάρχει μια μικρή διαφοροποίηση.



Εικόνα 8.36 Επίδραση στην διάχυση ανάλογα με τη χρήση A.C. ή όχι, για δείγμα 38N το οποίο προθερμάνθηκε στους 650⁰C και υπέστη ακτινοβόληση για α) 6 και β) 8 ms.

Το επόμενο βήμα είναι η διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας παλμού α) για δείγμα 38N και β) σε δείγμα 39N. Αμφότερα ακτινοβολήθηκαν υπό αρχική θερμοκρασία 650°C. Και στις δυο περιπτώσεις έχει χρησιμοποιηθεί το αρχείο A.C. 2008.09. Όπως αναμενόταν και στις δυο περιπτώσεις, αυξανόμενης της διάρκειας του παλμού, η διάχυση αυξάνεται, αφού αυξάνεται το συνολικό ποσό θερμότητας που εισάγεται μέσα στον όγκο του υλικού.

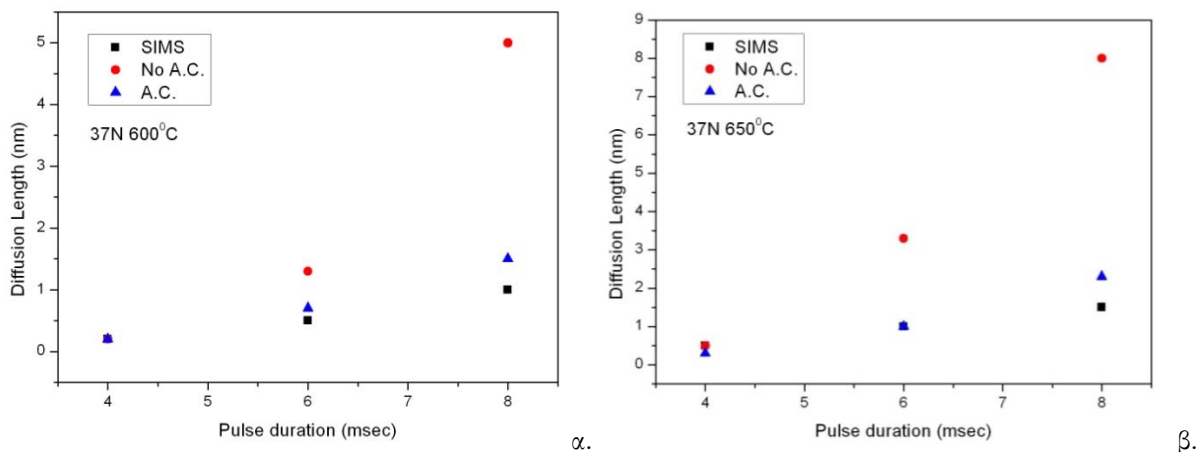


Εικόνα 8.37 Διερεύνηση της επίδρασης της διάρκειας παλμού α) για δείγμα 38N και β) σε δείγμα 39N. Αμφότερα ακτινοβολήθηκαν υπό αρχική θερμοκρασία 650°C. Και στις δυο περιπτώσεις, έχει χρησιμοποιηθεί το αρχείο A.C. 2008.09. Όπως αναμενόταν, και στις δυο περιπτώσεις, αυξανόμενης της διάρκειας του παλμού, η διάχυση αυξάνεται.

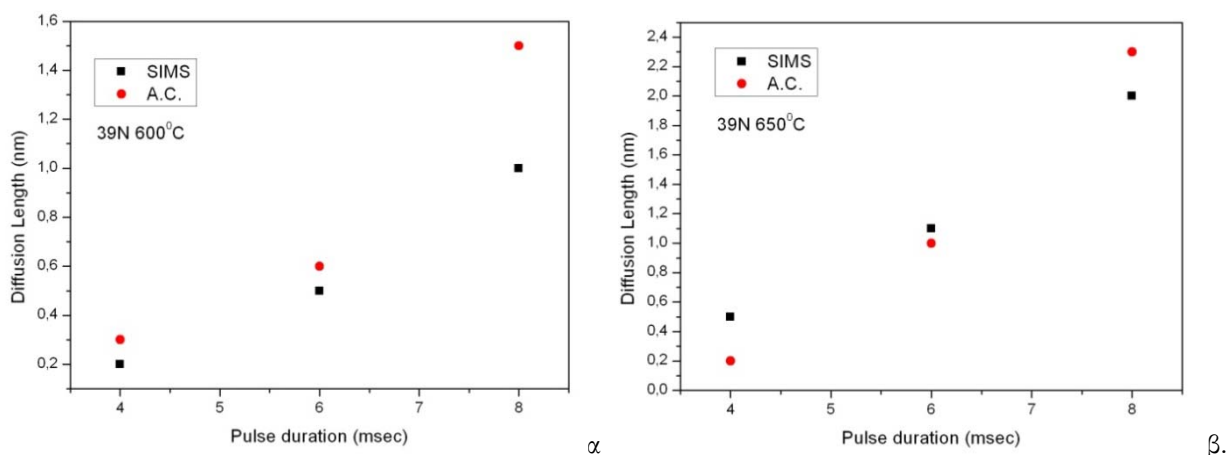
Στη συνέχεια παραθέτουμε τα σχετικά μήκη διάχυσης για τα δυο δείγματα, ανάλογα με την αρχική τους θερμοκρασία, συγκρίνοντας τις δυο προσεγγίσεις (με και χωρίς την χρήση Advanced Calibration) με τα προφίλ που προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS. Τα δυο αυτά διαγράμματα παρουσιάζουν με πιο εύληπτο τρόπο την μέγιστη διάχυση που παρατηρήθηκε ανά συνθήκη. Από τα διαγράμματα αυτά προκύπτει με σαφήνεια ότι η ενσωμάτωση της έκδοσης 2008.09 του αρχείου Advanced Calibration οδηγεί σε πολύ ακριβείς προβλέψεις όσον αφορά την διάχυση. Αντιθέτως, η μη χρησιμοποίηση αυτού του αρχείου οδηγεί σε πολύ μεγαλύτερη μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης σε σχέση με αυτή που προσδιορίστηκε από τα SIMS. Όσον αφορά τα δείγματα 39N δεν έχουμε διενεργήσει υπολογισμούς χωρίς Advanced Calibration, καθώς είχε ήδη καταδειχτεί η αποτελεσματικότητα της χρήσης του, από τις προσομοιώσεις για τα δείγματα 38N οι οποίες προηγήθηκαν και χρονικά. Έτσι στα γραφήματα 8.38 και 8.39 αντιπαραβάλλονται μόνο οι υπολογισμοί με χρήση του A.C. με τις πειραματικά προσδιορισθείσες τιμές.

Ένας από τους κυριότερους λόγους που μας υποχρεώνουν να παραθέτουμε διαγράμματα που παριστάνουν την σχετική μετακίνηση του προφίλ (με άλλα λόγια, το μήκος διάχυσης της εκάστοτε κατανομής), είναι και το γεγονός ότι οι καμπύλες που προκύπτουν από τις πειραματικές μετρήσεις SIMS, διαφέρουν αισθητά μεταξύ τους, ανάλογα με το εργαστήριο που ελήφθησαν. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι ακόμα και για δείγματα που δεν έχουν υποστεί καμία θερμική επεξεργασία (as implanted) έχουμε λάβει τρεις διαφορετικές μορφές καμπυλών, οι οποίες διαφέρουν τόσο όσον αφορά το βάθος επαφής, όσο και την ολική πραγματική δόση που έχει εμφυτευθεί. Το γεγονός αυτό σχετίζεται με τις δυσκολίες που υπάρχουν στην μέτρηση της κατανομής των προσμίξεων σε τόσο ρηχά βάθη, όπως αυτά που μελετάμε. Αυτό όμως που έχει μεγάλη σημασία είναι τί διάχυση πραγματικά προκαλείται για μια δεδομένη συνθήκη. Επομένως αυτά τα διαγράμματα εμπεριέχουν την βασική πληροφορία (μήκος διάχυσης), για να καταλήξουμε

για την αποτελεσματικότητα της ανόπτησης κάθε φορά. Ένας ακόμα λόγος είναι ότι χρησιμοποιήσαμε αναλυτική εμφύτευση και όχι τεχνικές KMC. Η τελευταία, όπως είχε δείξει [Florakis2009] είναι πιο ακριβής τόσο, όσον αφορά στην πρόβλεψη της εμφύτευσης και της διάχυσης. Όπως όμως θα δείξουμε στη συνέχεια, δεν είναι δυνατή στη συγκεκριμένη περίπτωση η χρήση αυτής της υλοποίησης.



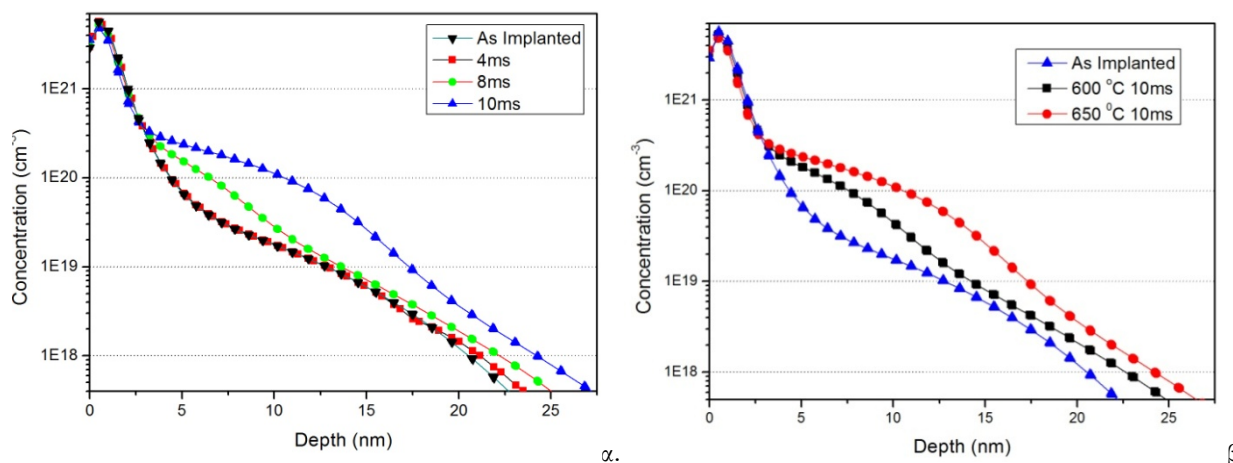
Εικόνα 8.38 Σχετικά μήκη διάχυσης όπως προέκυψαν από μετρήσεις SIMS, αλλά και προσομοίωση με και χωρίς χρήση αρχείου Advanced Calibration, για δείγματα 38N τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600 και β) 650°C.



Εικόνα 8.39 Σχετικά μήκη διάχυσης όπως προέκυψαν από μετρήσεις SIMS, αλλά και προσομοίωση με χωρίς χρήση αρχείου Advanced Calibration, για δείγματα 39N τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανση στους α) 600 και β) 650°C.

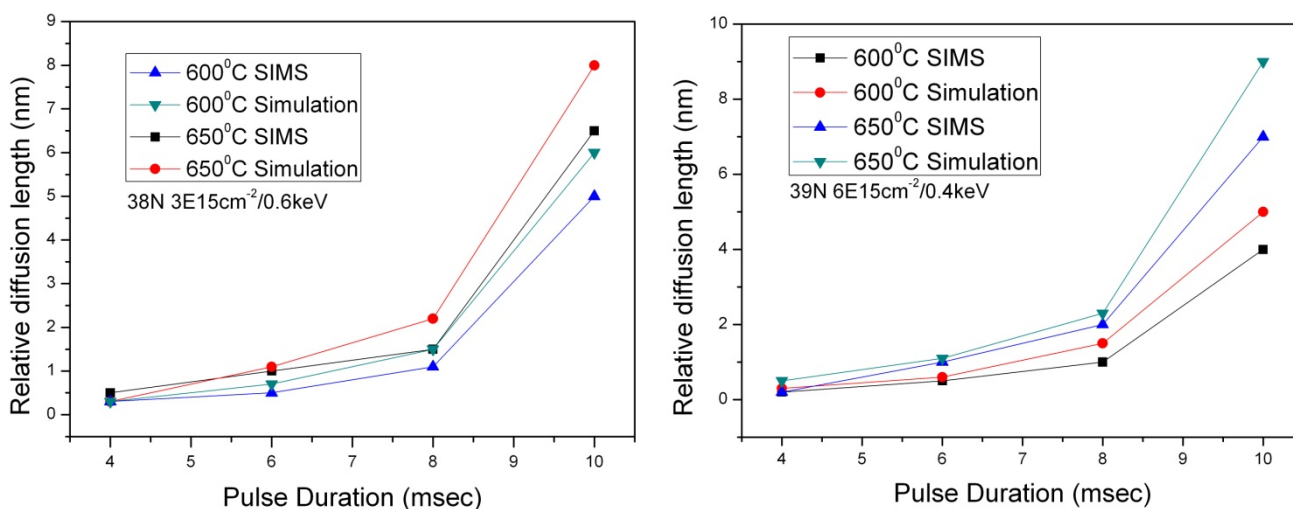
Από την στιγμή που η παραπάνω μελέτη κατέδειξε τις βέλτιστες υπολογιστικές συνιστώσες, προχωρήσαμε και στην προσομοίωση της ανόπτησης για μια διάρκεια παλμού η οποία θεωρείτο ότι θα οδηγούσε στην ανάπτυξη επιφανειακών θερμοκρασιών κοντά στο κατώφλι τήξης με αποτέλεσμα την εμφάνιση σημαντικής διάχυσης. Η προσομοίωση της διαδικασίας για την συνθήκη αυτή (10 ms), όπως αποδείχτηκε, ήταν μια ιδιαίτερα χρονοβόρα διαδικασία καθώς η ανάπτυξη υψηλών θερμοκρασιών οδηγούσε σε μεγάλο αριθμό υπολογιστικών γεγονότων με συνεπακόλουθο κόστος στον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Στη συνέχεια θα παραθέσουμε συγκριτικά τα προφίλ συγκέντρωσης προσμίξεων για δείγματα 39N τα οποία ανοπτήθηκαν με παλμούς 4,8 και 10 ms, όπως αυτά προέκυψαν από την προσομοίωση. Στο διάγραμμα 8.40α, δίνονται αποτελέσματα για εμφύτευση μέσω B και θερμοκρασία προανόπτησης τους 650°C και για τις τέσσερις διάρκειες

παλμού, ενώ στο β, δίνεται η επίδραση της αρχικής θερμοκρασίας στην τελική κατανομή του προφίλ προσμίξεων, σε δείγματα που ανοπτήθηκαν με παλμό διάρκειας 10 ms.



Εικόνα 8.40 α) Προσομοίωση της επίδρασης της διάρκειας παλμού σε δείγματα τύπου 39N, τα οποία έχουν υποστεί προθέρμανση στους 650°C. Είναι εμφανής η σημαντική διάχυση στα 10 ms, απόρροια της υψηλής θερμοκρασίας που αναπτύσσεται και η οποία είναι κοντά στην θερμοκρασία τήξης. β) επίδραση της θερμοκρασίας προανόπτησης σε δείγματα που υπέστησαν ακτινοβόληση στα 10 ms. Σε όλους τους υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες Advanced Calibration.

Από τα διαγράμματα αυτά είναι προφανής η σημαντική διάχυση που εμφανίζεται για την συνθήκη των 10 ms, η οποία είναι απόρροια των πολύ υψηλών θερμοκρασιακών προφίλ που εισάγονται στον όγκο του υλικού, και οι οποίες κοντά στην επιφάνεια αγγίζουν την θερμοκρασία τήξης του πυριτίου. Σημειώνεται, ότι η μετατόπιση της κατανομής συγκέντρωσης παρατηρείται σε όλη την έκταση της καμπύλης, με εξαίρεση τα πρώτα 3-4 νανόμετρα, στα οποία οι καμπύλες ταυτίζονται. Η τάση αυτή γίνεται έκδηλη στα παρακάτω διαγράμματα, στα οποία δίνονται τα σχετικά μήκη μετατόπισης που προέκυψαν από την προσομοίωση τόσο για δείγματα 38N όσο και 39N, μαζί με τα αντίστοιχα που προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS για δυο διαφορετικές θερμοκρασίες προανόπτησης.



Εικόνα 8.41 Σχετικά μήκη διάχυσης όπως αυτά προέκυψαν τόσο από προσομοίωση, όσο και από μετρήσεις SIMS, για δείγματα 38N και 39N, τα οποία υπέστησαν ακτινοβόληση κάτω από διαφορετικές συνθήκες προθέρμανσης και διάρκειας παλμού. Παρατηρείται ο πολύ ικανοποιητικός βαθμός συμφωνίας ανάμεσα στην προσομοίωση και τις πειραματικές μετρήσεις με εξαίρεση κάποιες από τις συνθήκες για τα 10 ms, στις οποίες υπάρχει μια μικρή διαφορά.

Από τα παραπάνω διαγράμματα είναι προφανής η καλή συμφωνία μεταξύ πειραματικών και υπολογιστικών δεδομένων, με εξαίρεση την συνθήκη για τα 10 ms, στα οποία παρατηρείται μια σχετική ασυμφωνία, η οποία όμως δεν είναι πολύ μεγάλη.

Ολοκληρώνουμε την μελέτη μας για την κινητική και την διάχυση των προσμίξεων παραθέτοντας μερικούς υπολογισμούς για την επιφανειακή αντίσταση που προκύπτει από την προσομοίωση. Σε αντίθεση με τα μονοδιάστατα μοντέλα, όπου μέσω κατάλληλης τομής, το πρόγραμμα δίνει ως έξοδο την τιμή της επιφανειακής αντίστασης σε ένα δεδομένο επίπεδο του υπολογιστικού χωρίου, στα διδιάστατα μοντέλα, αυτό δεν είναι εφικτό. Επομένως είμαστε υποχρεωμένοι να υπολογίσουμε την επιφανειακή αντίσταση, μέσω κατάλληλης μεθοδολογίας, η οποία να λαμβάνει υπόψη την συγκέντρωση των ενεργοποιημένων ατόμων Βορίου καθώς και την εξάρτηση της ευκινησίας των φορέων από την συγκέντρωσή τους.

Η μεθοδολογία που ακολουθείται είναι η εξής: Εξάγουμε τα προφίλ BActive και BTotal για κάθε περίπτωση. Στη συνέχεια, υπολογίζουμε την ευκινησία των φορέων για δεδομένο βάθος, η οποία εξαρτάται από την συγκέντρωση φορέων BTotal, είναι δηλαδή μια συνάρτηση της μορφής $\mu(BTotal(x))$, η οποία δίνεται από την σχέση:

$$\mu = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{C}{N_a}\right)^r} \tag{8.13}$$

όπου $\mu_{\min}=44.9 \text{ cm}^2/\text{Volt}\cdot\text{sec}$, $\mu_{\max}=470.5 \text{ cm}^2/\text{Volt}\cdot\text{sec}$ δυο σταθερές που σχετίζονται με την ευκινησία του Βορίου στο πυρίτιο, $r=0.719$, $N_a=2.23 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, ενώ η $C(x)$ υποδηλώνει την ολική συγκέντρωση Βορίου, η οποία στο Sentaurus δηλώνεται ως BTotal. Για κάθε βάθος x πολλαπλασιάζουμε το γινόμενο της συγκέντρωσης B με την αντίστοιχη ευκινησία. Στη συνέχεια ολοκληρώνουμε το γινόμενο αυτό με μεταβλητή το βάθος. Το αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης επί το φορτίο του ηλεκτρονίου εκφράζει την επιφανειακή αγωγιμότητα και ως εκ τούτου το αντίστροφο αυτού του γινομένου είναι η επιφανειακή αγωγιμότητα.

Καθώς οι καμπύλες BActive και BTotal ελήφθησαν στο κέντρο του υπολογιστικού χωρίου, οι θεωρητικές τιμές για την επιφανειακή αντίσταση, όπως αυτές προσδιορίστηκαν με την προαναφερθείσα μέθοδο, αντιστοιχούν στις πειραματικές που βρίσκονται στη κεντρική περιοχή της δέσμης. Επομένως, θα τις αντιπαραβάλουμε με τις ελάχιστες μετρηθείς τιμές ανά συνθήκη, με την υποσημείωση ότι μπορεί να υπάρχει σφάλμα, καθώς δεν μπορούμε να είμαστε εκ των προτέρων σίγουροι ότι η μέτρηση έγινε όντως επί της κέντρου της ακτινοβολημένης περιοχής.

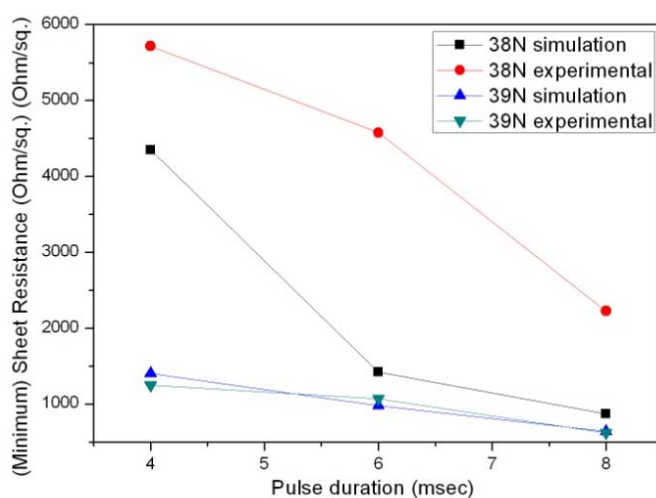
Πίνακας 8.IV Επιφανειακή αντίσταση για δείγμα 38N (600°C)

| | 4ms | 6ms | 8ms |
|--|------|------|------------|
| Πειραματική Q_{sheet} στο κέντρο της δέσμης | 5714 | 4570 | 1016? 2206 |
| Q_{sheet} προσομοιωμένη | 4350 | 1420 | 870 |

Πίνακας 8.V Επιφανειακή αντίσταση για δείγμα 39N (650°C)

| | 4ms | 6ms | 8ms |
|--|------|------|-----|
| Πειραματική Q_{sheet} στο κέντρο της δέσμης | 1250 | 1070 | 623 |
| Q_{sheet} προσομοιωμένη | 1400 | 978 | 640 |

Με βάση τα δεδομένα από τους παραπάνω πίνακες προκύπτει εξαιρετικός βαθμός συμφωνίας για το δείγμα 39N, αλλά και μεγάλη απόκλιση για το δείγμα 38N. Ειδικά για το τελευταίο, υπάρχουν βάσιμες υποψίες η εμφύτευση ήταν προβληματική. Αυτό διαφάνηκε και από τις ηλεκτρικές μετρήσεις για τον προσδιορισμό της επιφανειακής αντίστασης, οι οποίες έδειξαν πολύ μεγαλύτερες τιμές από τις αναμενόμενες. Πράγματι, με βάση τις ονομαστικές συνθήκες εμφύτευσης του δείγματος 38N (0.4 keV, 6E15 cm⁻²) θα αναμέναμε μεγάλη πραγματική συγκέντρωση ατόμων Βορίου, και σίγουρα μεγαλύτερη από αυτή του 39N, η οποία έχει την μισή ονομαστική δόση. Η διαφοροποίηση αυτή (και παρά την μείωση της ευκινησίας των φορέων λόγω αυξημένης συγκέντρωσης) θα οδηγούσε σε μικρότερες τιμές για την επιφανειακή αντίσταση. Οι ηλεκτρικές μετρήσεις όμως έδειξαν πολύ χαμηλή αγωγιμότητα (περίπου διπλάσια επιφανειακή αντίσταση). Μια πρώτη εξήγηση δόθηκε από τις μετρήσεις SIMS, η ολοκλήρωση των οποίων έδειξε ότι η πραγματική δόση που είχε εμφυτευθεί ήταν το 1/10 της ονομαστικής (5.4-6E14 cm⁻²). Σε άλλα δείγματα που είχαμε μετρήσει (37N και 39N) ο λόγος ονομαστικής προς πραγματική ήταν της τάξεως 3-3.5. Επομένως η πραγματική συγκέντρωση που είχε εισαχθεί ήταν μικρότερη από αυτή στο 39N (περίπου 0.7-1E15 cm⁻²) και επομένως είναι τελικά λογικό να εμφανίζει μεγαλύτερες τιμές επιφανειακής αντίστασης. Παρόλα αυτά υπάρχει ακόμα ασυμφωνία μεταξύ της προσομοίωσης και των πειραματικά προσδιορισμένων τιμών της επιφανειακής αντίστασης, καθώς οι τελευταίες είναι αισθητά μεγαλύτερες. Σε κάθε περίπτωση όμως η προσομοίωση ήταν επιτυχής όσον αφορά στην κινητική των προσμίξεων. Πιθανόν η προβληματική εμφύτευση να οδήγησε ένα μεγαλύτερο αριθμό ατόμων Βορίου σε συσσωματώματα ή σε ενδοπλεγματικές θέσεις σε σχέση με αυτά που υπολογιστήσαν αρχικά από την προσομοίωση της διαδικασίας εμφύτευσης. Στην Εικόνα 8.42 συγκρίνουμε την πειραματικά μετρομένη ελάχιστη επιφανειακή αντίσταση (με βάση της μεθοδολογία που παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 9) με τις αντίστοιχη που υπολογίσθηκε από την προσομοίωση σε δυο διαστάσεις, για δείγματα 38N και 39N που προθερμάνθηκαν στους 650°C. Παρατηρούμε πολύ καλή συμφωνία για το δείγμα 39N αλλά και την σημαντική απόκλιση για το δείγμα 38N.



Εικόνα 8.42 Σύγκριση της πειραματικά προσδιορισμένης μέσης επιφανειακής αντίστασης με τις αντίστοιχη που υπολογίσθηκε από την προσομοίωση σε μια διάσταση, για δείγματα 38N και 39N που προθερμάνθηκαν στους 650°C.

8.9 Προσπάθεια προσομοίωσης με χρήση τεχνικών Kinetic Monte Carlo

8.9.1 Εισαγωγή

Σε προηγούμενο στάδιο αυτής της μελέτης κατέστη δυνατή η πρόβλεψη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων κατά την ανόπτηση δισκίων πυριτίου με χρήση CO₂ laser, με χρήση αναλυτικών (συνεχών) τεχνικών. Ο αρχικός μας σχεδιασμός περιελάμβανε την μελέτη του φαινομένου, τόσο με αναλυτικούς αλγορίθμους, όσο και με χρήση Kinetic Monte Carlo (KMC). Μια διεξοδικότερη διερεύνηση όμως κατέδειξε ότι η προσπάθεια προσομοίωσης με την χρήση της μεθόδου KMC, προσκρούει σε σημαντικά «τεχνικά» προβλήματα. Η προσπάθεια επίλυσης αυτών των ζητημάτων, αποτελεί το αντικείμενο αυτού του εδαφίου. Πριν προχωρήσουμε στην παρουσίαση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν, θα συνοψίσουμε τα κυριότερα προβλήματα που ενέχει η χρήση της μεθόδου KMC.

Η μέθοδος KMC, από την φύση της δεν δύναται να επιλύσει προβλήματα που σχετίζονται με την κατανομή και την διάδοση της θερμότητας, όπως αυτές προκύπτουν από την επίλυση της Εξίσωσης Διάδοσης της Θερμότητας (ΕΔΘ). Αν και είναι εξαιρετικά αποτελεσματική στην πρόβλεψη φαινομένων που έχουν να κάνουν με την κίνηση σωματιδίων, δεν μπορεί να επιλύσει την ΕΔΘ, και ως εκ τούτου είμαστε υποχρεωμένοι να εισάγουμε την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής στον όγκο του υλικού, όπως αυτός προκύπτει από την αναλυτική επίλυση της ΕΔΘ, και στη συνέχεια να αφήσουμε τους αλγορίθμους KMC να κατανειμουν την θερμότητα στο προς επίλυση σύνολο σωματιδίων, το οποία θα εκτελέσουν συγκεκριμένα βήματα - γεγονότα, ανάλογα με τις επιμέρους ενέργειες ενεργοποίησης για κάθε συμβάν. Η έκφραση κλειδί, η οποία είναι και ο πυρήνας του προβλήματος, είναι η «εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής μέσα στον όγκο του υλικού». Μέχρι στιγμής τουλάχιστον, και με βάση το εγχειρίδιο του λογισμικού, το μόνο αποτέλεσμα που μπορεί να εξαχθεί και να τυπωθεί ως αρχείο, το οποίο να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν είσοδος για τους KMC υπολογισμούς, είναι η εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής στην επιφάνεια. Και αυτό στην περίπτωση της μονοδιάστατης επίλυσης, καθώς στην διδιάστατη περίπτωση αυτό που αποθηκεύεται είναι η μέση επιφανειακή θερμοκρασία, η οποία προκύπτει προσθέτοντας τις θερμοκρασίες σε κάθε κόμβο της επιφάνειας δια τον συνολικό αριθμό κόμβων. Όπως είναι κατανοητό, η γνώση της θερμοκρασίας σε ένα μόνο επίπεδο (1D) ή ακόμα χειρότερα της μέσης θερμοκρασίας σε ένα επίπεδο (2D) πόρρω απέχει από την γνώση της κατανομής της θερμοκρασίας σε κάθε κόμβο του υπολογιστικού χωρίου. Ας εξετάσουμε τι συνέπεια έχει η αδυναμία αυτή στον υπολογισμό της κινητικής της διάχυσης.

Λαμβάνοντας ως δεδομένο, ότι έχουμε σαν είσοδο την κατανομή της θερμοκρασίας μόνο στην επιφάνεια, τότε αν το προς επίλυση πρόβλημα σχετίζεται με φαινόμενα επιφανειακής θέρμανσης, δεν υπάρχει πρόβλημα. Στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με Excimer KrF laser, η πολύ ισχυρή απορρόφηση του πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος διασφαλίζει πολύ μικρό οπτικό μήκος απορρόφησης, l_{abs} . Με άλλα λόγια, η ενέργεια των φωτονίων της δέσμης μετατρέπεται σε θερμότητα σε πάρα πολύ μικρό βάθος από την επιφάνεια (περίπου 5 nm). Επιπλέον, η πολύ μικρή διάρκεια του παλμού (μερικές δεκάδες ns) εξασφαλίζει τον περιορισμό του μήκους θερμικής διάχυσης $l_{thermal}$, καθώς ο τελευταίος εξαρτάται από την τετραγωνική ρίζα της διάρκειας παλμού. Αποδεικνύεται ότι στην περίπτωση αυτή, η τιμή του $l_{thermal}$ είναι της τάξης των 1-2 μm . Συνολικά

λοιπόν, στην περίπτωση του Excimer KrF laser, το μεγαλύτερο ποσοστό της θερμότητας κατανέμεται στα πρώτα επίπεδα του υπολογιστικού χωρίου, ακολουθώντας φθίνουσα εκθετική κατανομή. Έτσι, καθώς ικανοποιείται το κριτήριο $l_{\text{abs}} + l_{\text{thermal}} \ll w$, (όπου w είναι η διάσταση του σποτ του laser, 5 mm στην περίπτωση μας) δυνάμεθα να θεωρήσουμε την ακτινοβολή ως επιφανειακή. Το γεγονός αυτό μας επιτρέπει να θέσουμε ως είσοδο την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας για την επίλυση της κινητικής της διάχυσης με τη μέθοδο KMC. Αυτήν ακριβώς την προσέγγιση ακολουθούν και στην Synopsys, αλλά και σε άλλες μελέτες στην βιβλιογραφία [Florakis2009] για την επίλυση προβλημάτων αλληλεπίδρασης laser.

Δυστυχώς, στην περίπτωση του CO₂ laser δεν μπορούμε να κάνουμε την ίδια θεώρηση για δυο λόγους. Καταρχάς ο συντελεστής απορρόφησης εξαρτάται τόσο από την θερμοκρασία, όσο και την συγκέντρωση φορέων, με άλλα λόγια παρουσιάζει μια εξάρτηση της μορφής $a(T(t,x), N(t,x))$. Όπως έχει δειχτεί και στο κεφάλαιο της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με την ύλη, ο a λαμβάνει ένα πολύ μεγάλο εύρος τιμών, με αποτέλεσμα το οπτικό μήκος απορρόφησης να είναι αισθητά μεγαλύτερο σε σχέση με το αντίστοιχο του KrF Excimer laser. Ακόμα χειρότερα, οι χρόνοι ανόπτησης, καθώς είναι 5 τάξεις μεγέθους μεγαλύτεροι, οδηγούν σε πολύ μεγαλύτερα μήκη θερμικής διάχυσης (της τάξης των 100μm). Οι δυο παράγοντες, αν συνδυαστούν, δεν επιτρέπουν την θεώρηση της ακτινοβολήσης ως επιφανειακής. Επομένως για να ορισθεί σωστά το πρόβλημα δεν αρκεί η γνώση της εξέλιξης της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο, αλλά πρακτικά απαιτείται να εισάγουμε την εξέλιξη της κατανομής της θερμοκρασίας σε κάθε κόμβο του υπολογιστικού χωρίου. Μέχρι στιγμής, δεν έχει γίνει εφικτή η δημιουργία ενός αρχείου το οποίο να γράφει την θερμοκρασία σε κάθε κόμβο για κάθε χρονικό βήμα. Μελετώντας το εγχειρίδιο καθώς και κάποιες βασικές περιπτώσεις – παραδείγματα που παρέχει η Synopsys, προκύπτει σε πρώτη ανάγνωση ότι δεν μπορεί να γίνει. Επίσης, στην περίπτωση που χρησιμοποιήσουμε τελικά το θερμοκρασιακό προφίλ, επειδή η μέγιστη κατακόρυφη διάσταση που μπορεί να λάβει το λογισμικό είναι 10 μm, και τα μήκη της θερμικής διάχυσης είναι της τάξεως των εκατοντάδων μικρομέτρων, τότε εάν με κάποιο τρόπο γίνεται κάποιου είδους ανακατανομή της θερμικής ενέργειας μέσα στο πλέγμα (μέσω κατάλληλων αναθέσεων στις εκφράσεις Arrhenius, για κάθε γεγονός), τότε θα είχαμε την εμφάνιση φαινομένων θερμικού περιορισμού (thermal confinement). Τα τελευταία, με την σειρά τους θα οδηγήσουν σε αύξηση της τοπικής θερμοκρασίας, με αποτέλεσμα την αύξηση της διάχυσης. Σε κάθε περίπτωση πάντως, και με βάση αυτά που γνωρίζουμε για την φύση της μεθόδου, η KMC λογικά αναθέτει μια προκαθορισμένη κατανομή θερμότητας κατά βάθος, η οποία εξαρτάται αποκλειστικά από την εξέλιξη της θερμοκρασίας στην επιφάνεια, και όπως αυτή εισάγεται μέσω του αντίστοιχου αρχείου. Παρόλα αυτά, για λόγους πληρότητας είμαστε υποχρεωμένοι να διερευνήσουμε εάν όλα τα παραπάνω ισχύουν, προβαίνοντας σε μια σειρά από δοκιμές προσομοίωσης της διαδικασίας ανόπτησης με χρήση τεχνικών KMC. Οι δοκιμές αυτές απέβλεπαν κυρίως, αφενός μεν στην δημιουργία όσο το δυνατόν βαθύτερου πλέγματος για να μελετηθεί η εμφάνιση φαινομένων θερμικού περιορισμού και αφετέρου στην δημιουργία υπολογιστικών καταβόθρων θερμότητας για την αποφυγή του παραπάνω φαινομένου. Όπως θα δειχτεί και στη συνέχεια, η επίλυση δεν παρουσιάζει ευαισθησία σε αυτές τις παραμέτρους, τουλάχιστον για τις μέγιστες επιτρεπτές τιμές κατακόρυφης διάστασης (10 μm). Επιπλέον δεν στάθηκε δυνατή η τροποποίηση της κατανομής της θερμότητας μέσω του αλγορίθμου KMC, η οποία είναι προφανώς διαφορετική από την κατανομή που πραγματικά δημιουργείται κατά την ανόπτηση με CO₂ laser.

Κατά την προσομοίωση με KMC χρησιμοποιούνται μια σειρά από μοντέλα και προσεγγίσεις που βρέθηκαν στην βιβλιογραφία^{41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52}. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τις βασικότερες προσπάθειες που έγιναν με χρονολογική σειρά.

8.9.2 Σύνοψη των βασικότερων προσπαθειών

Αρχική μας επιδίωξη ήταν η διεξαγωγή δοκιμών για την διερεύνηση της συμπεριφοράς και της αποτελεσματικότητας της μεθόδου, συγκρινόμενη πάντα με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την αναλυτική προσέγγιση. Η βασική λογική που ακολουθήθηκε ήταν η δημιουργία υπολογιστικών χωρίων με τα επιθυμητά χαρακτηριστικά όσον αφορά στις διαστάσεις, το είδος εμφύτευσης (Bόριο ή BF₂) και την τυχόν ύπαρξη άλλων υλικών πέραν του πυριτίου, και στη συνέχεια η μεταφόρτωσή τους σε αλγόριθμους ανόπτησης με χρήση KMC. Με τον τρόπο αυτό, και αφού εξασφαλιστηκε πως τα προκύπτοντα αποτελέσματα ήταν ίδια, είναι δυνατή η εξοικονόμηση σημαντικού υπολογιστικού χρόνου. Ο βασικός στόχος ήταν η παρατήρηση τυχόν αλλαγών στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων που θα προέκυπταν από την μεταβολή των χαρακτηριστικών του πλέγματος αλλά και την εισαγωγή υλικών που παρουσιάζουν διαφορετικές θερμικές ιδιότητες. Μια τέτοια αλλαγή θα υποδήλωνε μια ευαισθησία του τρόπου κατανομής της θερμότητας στον όγκο του υλικού και θα έδινε ελπίδες για την μετρική επίλυση του προβλήματος με χρήση αλγορίθμων KMC. Σε κάθε περίπτωση, τα προφίλ που προέκυπταν από την προσομοίωση της εμφύτευσης υπόκειντο σε επιλεγμένους θερμικούς κύκλους, οι οποίοι προέκυψαν ως μέσες τιμές επιφανειακής θερμοκρασίας από την αναλυτική προσομοίωση της διαδικασίας ανόπτησης με laser CO₂. Τονίζεται ότι τα θερμοκρασιακά αυτά προφίλ, προέκυψαν από διασδιάστατους υπολογισμούς, των οποίων τα αποτελέσματα, όσον αφορά στην πρόβλεψη όχι μόνο της εξέλιξης της θερμοκρασίας αλλά και της κινητικής της διάχυσης, είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

Τα βασικά βήματα που ακολουθήσαμε κατά την διερεύνηση της προσομοίωσης με χρήση της KMC προσέγγισης ήταν:

- Χρήση ή μη προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration
- Επίδραση των πλευρικών διαστάσεων του υπολογιστικού χωρίου
- Επίδραση της κατακόρυφης διάστασης του υπολογιστικού χωρίου
- Χρήση δομών που άγουν την θερμότητα
- Χρήση προφίλ κύκλων θέρμανσης (ramp rate) αντί της φόρτωσης αρχείων που περιέχουν την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας.

Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν ξεχωριστά τα αποτελέσματα από την διερεύνηση κάθε παράγοντα.

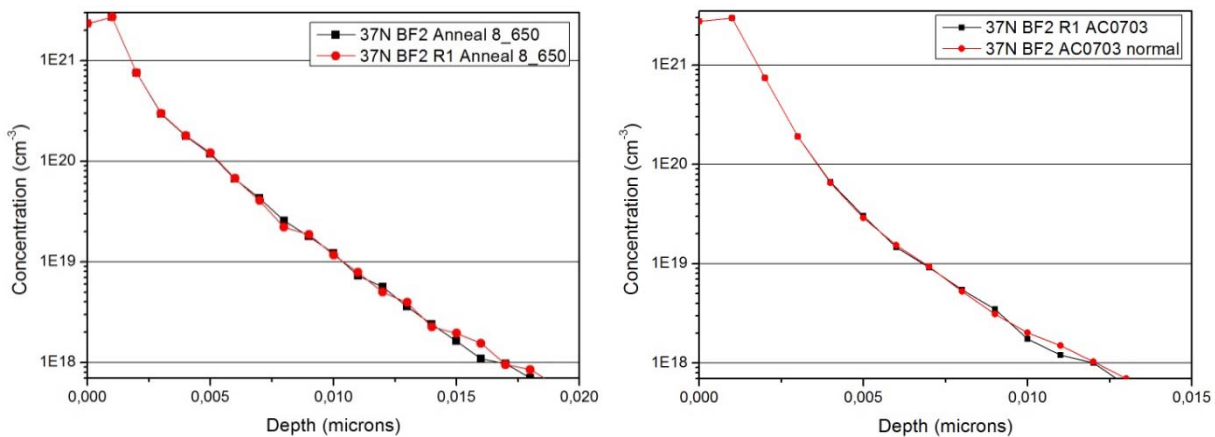
A. Χρήση ή μη προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration

Όπως δείχτηκε και στο κεφάλαιο της εμφύτευσης με πλάσμα η ενσωμάτωση βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2007.03 οδηγεί στον σχηματισμό προφίλ συγκέντρωσης που παρουσιάζουν το βέλτιστο βαθμό συμφωνίας με τις πειραματικές καμπύλες από τις μετρήσεις SIMS. Οι βιβλιοθήκες αυτές περιέχουν μια σειρά μοντέλων και παραμέτρων, τα οποία προέκυψαν από βαθμονομήσεις και ab initio υπολογισμούς, και που είναι ιδανικές για την πρόβλεψη φαινομένων που σχετίζονται με την κατασκευή υπέρ-ρηχών επαφών. Επιπλέον, οι προκαταριθμικές δοκιμές

προσομοίωσης της ανόπτησης με laser CO₂ διάρκειας 4 και 8 ms και υπό αρχική θερμοκρασία 650°C, κατέδειξαν ότι με την χρήση A.C. 2007.03 επιτυγχάνονται καλύτερες προβλέψεις της μετατόπισης. Πρέπει όμως να τονιστεί πως τα αποτελέσματα αυτά δεν είναι σε μεγάλη συμφωνία με την πειραματικώς προσδιορισθείσα διάχυση. Αρχικά, δημιουργήσαμε ένα υπολογιστικό χωρίο διαστάσεων $x=1.0 \mu\text{m}$ και $y=0.1 \mu\text{m}$ με την z διάσταση να δημιουργείται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης από το λογισμικό. Για εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου χρησιμοποιήθηκαν τα αρχεία εμφυτευμένων προφίλ Βορίου και BF₂ τα οποία είχαν επιλεγεί ώστε να προσεγγίζουν καλύτερα τις μετρήσεις SIMS.

B. Επίδραση των πλευρικών διαστάσεων του υπολογιστικού χωρίου

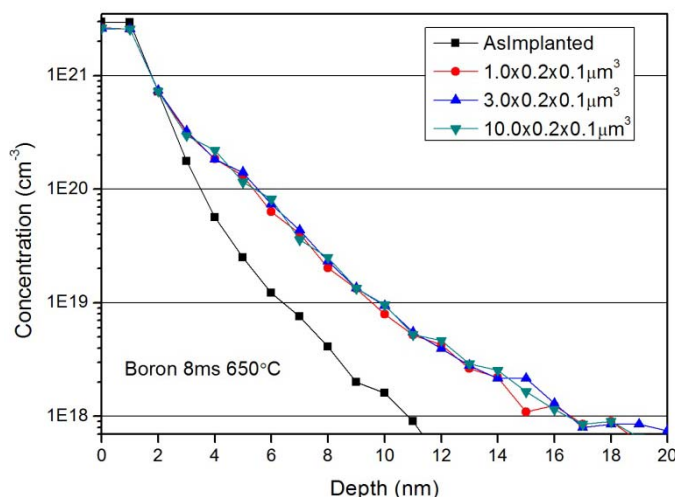
Καθώς τα προκαταρκτικά αποτελέσματα δεν ήταν ιδιαίτερα ικανοποιητικά, αποφασίσαμε να διερευνήσουμε το κατά πόσο επηρεάζονται τα αποτελέσματα μεταβάλλοντας διάφορες παραμέτρους, αναζητώντας τη βέλτιστη δυνατή περίπτωση. Πρώτα περιορίσαμε το πλάτος του υπολογιστικού χωρίου –διάσταση y - από το 1 μm στα 0.2 μm με αποτέλεσμα την σημαντική εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου, χωρίς όπως αποδείχτηκε, να επηρεαστεί το αποτέλεσμα. Το σημαντικό στην περίπτωση αυτή, είναι ο αριθμός των σωματιδίων που λαμβάνονται υπόψη στους υπολογισμούς να μην μειωθεί πάρα πολύ, με αποτέλεσμα την εμφάνιση στατιστικού θορύβου. Το κατώτατο όριο που θέτει η κατασκευάστρια του λογισμικού, για τις πλευρικές διαστάσεις είναι 40 nm, και επομένως η τιμή των 200 nm, κρίνεται επαρκής. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε ότι στην περίπτωση της προσομοίωσης της ανόπτησης διάρκειας 8 ms, ο χρόνος μειώθηκε από τις 4 ώρες και 31 λεπτά, στα 44 λεπτά. Έτσι αποφασίστηκε η διατήρηση αυτής της δομής του πλέγματος στις υπόλοιπες τροποποιήσεις που θα κάναμε. Η τροποποίηση αυτή ήταν αναγκαία, καθώς στη συνέχεια, η αύξηση στην κατακόρυφη διάσταση του πλέγματος θα οδηγούσε σε υπολογισμούς πολύ μεγάλης διάρκειας. Στο διάγραμμα 8.43 παρουσιάζονται τα προφίλ κατανομής της συγκέντρωσης Βορίου μετά από ανόπτηση στα 8 ms και με αρχική θερμοκρασία 650°C, όπως προέκυψαν από την προσομοίωση για εμφύτευση α) με Βόριο και β) BF₂ αντίστοιχα.



Εικόνα 8.43 Προφίλ κατανομής συγκέντρωσης Βορίου όπως αυτά προέκυψαν από την προσομοίωση της ανόπτησης διάρκειας παλμού 8ms και σε προθέρμανση στους 650°C με χρήση δυο διαφορετικών πλευρικών διαστάσεων (1.0 μm και για το 0.2 μm R1). Παρατηρούμε ότι η επίδραση και στις δυο περιπτώσεις ειδών που εμφυτεύθηκαν (α. Βόριο και β. BF₂) είναι αμελητέα.

Γ. Επίδραση της κατακόρυφης διάστασης του υπολογιστικού χωρίου

Το επόμενο βήμα της διερεύνησης περιελάμβανε την μελέτη της επίδρασης της κατακόρυφης διάστασης του υπολογιστικού χωρίου. Το βήμα αυτό είναι ιδιαίτερα κρίσιμο, καθώς η παρατήρηση τυχόν αλλαγών στα τελικά προφίλ συγκέντρωσης θα καταδείκνυε τυχόν ευαισθησία της εσωτερικής κατανομής της θερμότητας του αλγόριθμου. Αυτό θα ήταν το πρώτο βήμα για την υλοποίηση της KMC, αφού μέσω κατάλληλων υπολογιστικών τεχνασμάτων θα ήταν πιθανή η μεταβολή της κατανομής της θερμοκρασίας, έτσι ώστε να προσομοιώσουμε αυτή που πραγματικά εισάγεται κατά την ανόπτηση με CO₂. Δυστυχώς η KMC υλοποίηση, δεν επιτρέπει την επιμήκυνση του υπολογιστικού χωρίου περισσότερο από τα 10 μm, κατά τον κατακόρυφο άξονα, τιμή που είναι πολύ μικρότερη από τα 700 μm. Οποιαδήποτε άλλη τιμή που ανατίθεται μεγαλύτερη από τα 10 μm, αναπροσαρμόζεται αυτόματα. Με βάση αυτόν τον περιορισμό, προβήκαμε στην προσομοίωση τριών περιπτώσεων με βάθη 1, 3 και 10 μm. Τα αποτελέσματα από την προσομοίωση της ανόπτησης στα 8 ms και με αρχική θερμοκρασία 650°C και είδος εμφύτευσης το Βόριο, δίνονται στο διάγραμμα 8.44.



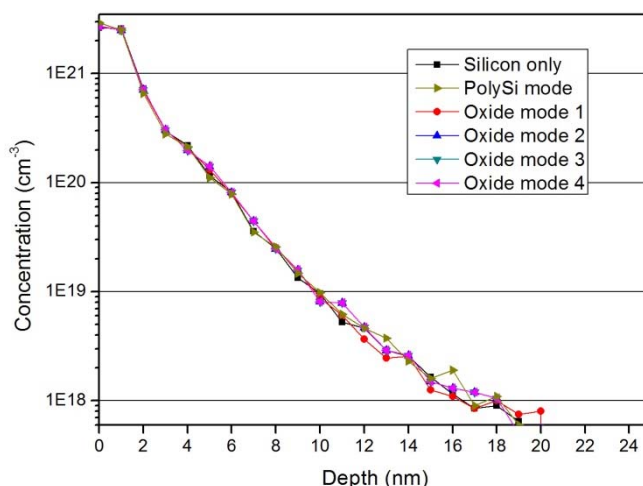
Εικόνα 8.44 Επίδραση της κατακόρυφης διάστασης του υπολογιστικού χωρίου στην κινητική της διάχυσης λόγω ανόπτησης διάρκειας παλμού 8ms και σε προθέρμανση στους 650°C. Η παρατηρούμενη ανεξαρτησία από την κατακόρυφη διάσταση δίνει μια πρώτη ένδειξη ότι η επίλυση είναι ανεξάρτητη από φαινόμενα θερμικού περιορισμού.

Δ. Χρήση δομών που άγουν την θερμότητα

Επιδιώκοντας την εξάλειψη της πιθανότητας εμφάνισης φαινομένων θερμικού περιορισμού, λόγω του πολύ μικρού μεγέθους του χωρίου κατά την κατακόρυφη διάσταση ορίστηκε μια εικονική δομή στο κάτω μέρος του υπολογιστικού χωρίου, η οποία θα διαδραμάτιζε τον ρόλο της θερμικής καταβόθρας. Το αρχικό πάχος της δομής αυτής είναι 2 μm, ενώ οι τιμές για την θερμική αγωγιμότητα και την ειδική θερμοχωρητικότητα ήταν 75 W/K.cm και 10000 J/kg.K. Διαπιστώθηκε ότι παρά το γεγονός ότι το Sentaurus αναγνώριζε το υλικό (ως μονοκρυσταλλικό πυρίτιο), δεν καταχωρούσε τις καθορισμένες από το χρήστη τιμές της θερμικής αγωγιμότητας και ειδικής θερμοχωρητικότητας, γεγονός που μας οδήγησε στο να αλλάξουμε το υλικό με κάποιο, του οποίου οι ιδιότητες θα οδηγούσαν στην καλύτερη απαγωγή της θερμότητας προς το βάθος του υλικού. Για το λόγο αυτό επιλέξαμε το SiO₂ με τις ιδιότητες του υλικού όπως καθορίζονται από τη

βάση δεδομένων του λογισμικού. Επίσης, θέλοντας να βεβαιωθούμε ότι το Sentaurus αντιλαμβάνεται και επεξεργάζεται σωστά τα διαφορετικά υλικά χωρίς να δημιουργεί κάποιου είδους ασυνέχεια στη επιφάνεια μεταξύ πυριτίου και οξειδίου, ελαττώσαμε το βάθος του χωρίου που περιέχει πυρίτιο αρχικά στα 20 nm και στη συνέχεια στα 30 nm, ενώ στο εναπομένον κομμάτι του υπολογιστικού χωρίου θέσαμε σαν υλικό το οξείδιο.

Στην εικόνα 8.45 παρουσιάζονται τα προφίλ κατανομής της συγκέντρωσης βορίου, όπως αυτά προέκυψαν από την προσομοίωση ανόπτησης διάρκειας 8 ms υπό αρχική θερμοκρασία 650°C. Από το διάγραμμα αυτό είναι προφανές τα προφίλ δεν παρουσιάζουν διαφοροποιήσεις, γεγονός που μαρτυρά ότι οι υπολογισμοί με χρήση KMC δεν παρουσιάζουν εξάρτηση από εξωγενείς παράγοντες, που θα μπορούσαν να μεταβάλλουν την θερμοκρασία. Και αυτό παρά το γεγονός ότι χρησιμοποιήθηκαν δομές που θα έπρεπε να απάγουν καλύτερα την θερμότητα, οδηγώντας έτσι σε ταπείνωση της κατανομής θερμοκρασιών μέσα στον όγκο του υλικού, και επομένως ελάττωση της διάχυσης.



Εικόνα 8.45 Προφίλ συγκέντρωση Βορίου όπως αυτά προέκυψαν από προσομοίωση της ανόπτησης δειγμάτων 38N διάρκειας παλμού 8ms και σε προθέρμανση στους 650°C.

8.9.3 Σύγκριση με αποτελέσματα από πειραματικές μετρήσεις και αναλυτικές προσομοιώσεις

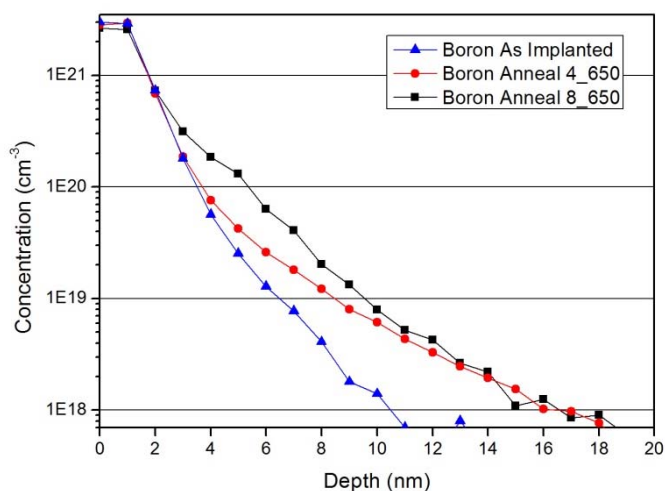
Από το παραπάνω διάγραμμα είναι προφανές ότι η επίδραση της κατακόρυφης διάστασης είναι αμελητέα. Πρέπει όμως να τονιστεί ότι αυτές οι τρεις τιμές διάστασης είναι πολύ μικρές σε σύγκριση με τα θερμικά μήκη απορρόφησης που μετρήθηκαν (μερικές εκατοντάδες μικρόμετρα) με αποτέλεσμα να μην μπορούμε να αποκλείσουμε απόλυτα κατηγορηματικά την εμφάνιση φαινομένων θερμικού περιορισμού. Αν η επιτρεπόμενη κατακόρυφη διάσταση ήταν κοντά στο θερμικό μήκος της ακτινοβολήσης, τότε θα μπορούσαμε να είμαστε σίγουροι για το εάν οι υπολογισμοί παρουσιάζουν ευαισθησία όσον αφορά την κατανομή θερμότητας.

Οι προσομοιώσεις με χρήση αλγορίθμων Kinetic Monte Carlo οδήγησαν σε έντονη μετατόπιση των συγκεντρώσεων προσμίξεων Βορίου και δει σε τιμές πολύ μεγαλύτερες από αυτές που προσδιορίστηκαν είτε πειραματικά είτε μέσω της συνεχούς προσομοίωσης για τις αντίστοιχες συνθήκες ανόπτησης. Στον πίνακα 8.VI παρουσιάζονται οι μέγιστες μετατοπίσεις που παρατηρήθηκαν, για ανόπτηση στα 8 ms και με αρχική θερμοκρασία 650°C, όπως αυτές προέκυψαν από την προσομοίωση με αναλυτικές και KMC τεχνικές καθώς και από μετρήσεις SIMS.

Πίνακας 8. VI (Οι τιμές αναφέρονται σε ανόπτηση 8 ms και με αρχική θερμοκρασία 650°C)

| Προέλευση προφίλ συγκέντρωσης | Μέγιστη παρατηρούμενη μετατόπιση προφίλ (nm) | Βάθος επαφής για $C_B=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (nm) |
|-------------------------------|--|---|
| Μετρήσεις SIMS | 2 | 13.8 |
| Αριθμητική προσομοίωση | 2.2 | 14 |
| Προσομοίωση με KMC | 5.5 | 17 |

Στον παραπάνω πίνακα αναφέρονται οι βέλτιστες τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση ανόπτησης δειγμάτων 38N για κάθε προσέγγιση. Παρατηρούμε ότι η συνεχής – αριθμητική προσέγγιση οδηγεί σε πολύ ικανοποιητικές προβλέψεις όσον αφορά στην κινητική της διάχυσης, ενώ αντίθετα οι υπολογισμοί με χρήση KMC, προβλέπουν αυξημένη διάχυση, γεγονός που αποδίδεται στη μη ρεαλιστική κατανομή της θερμοκρασίας μέσα στον όγκο του υλικού. Μια ακόμα ενδιαφέρουσα παρατήρηση έχει να κάνει με την συνθήκη ανόπτησης στα 4 ms και 650°C, η οποία σύμφωνα με τις προσομοιώσεις με χρήση KMC οδηγεί σε αυξημένη μετατόπιση του προφίλ, ιδιαίτερα στην ουρά της κατανομής. Η παρατηρούμενη αυτή συμπεριφορά έρχεται σε πλήρη αντίθεση τόσο με τα πειραματικά μεγέθη, όσο και με τα αποτελέσματα από την προσομοίωση συνεχούς προσέγγισης.



Εικόνα 8.46 Προσομοιωμένα προφίλ συγκέντρωσης για δείγματα 38N που έχουν υποστεί ανόπτηση διάρκειας 4 και 8ms κατόπιν προθέρμανσης στους 650°C. Παρατηρείται η έντονη μετατόπιση για την συνθήκη των 4 ms, και ειδικά στην ουρά της κατανομής.

Οι διαφορές αυτές απεικονίζονται ανάγλυφα στον πίνακα 8.VII, και δίνουν μια ακόμα έμμεση μαρτυρία ενάντια στην αξιοπιστία της προσομοίωσης με χρήση αλγορίθμων KMC.

Πίνακας 8. VII (Οι τιμές αναφέρονται σε ανόπτηση 4ms και με αρχική θερμοκρασία 650°C)

| Προέλευση προφίλ συγκέντρωσης | Μέγιστη παρατηρούμενη μετατόπιση προφίλ (nm) | Βάθος επαφής για $C_B=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (nm) |
|-------------------------------|--|---|
| Μετρήσεις SIMS | 0.5 | 12 |
| Αριθμητική προσομοίωση | 0.2 | 11.7 |
| Προσομοίωση με KMC | 5.3 | 17 |

Τα παραπάνω αποτελέσματα, σε συνδυασμό με την δεδομένη αδυναμία τροποποίησης της κατανομής της θερμοκρασίας μέσα στον όγκο του υλικού, και όπως αυτή εξελίσσεται κατά την διάρκεια της ανόπτησης, μας υποχρεώνει να καταλήξουμε στο συμπέρασμα, ότι η χρήση αριθμητικών – συνεχών τεχνικών οδηγεί σε καλύτερες αλλά και πιο αξιόπιστες προβλέψεις όσον αφορά στην κινητική της διάχυσης των προσμίξεων για ανόπτηση σε αυτούς τους χαρακτηριστικούς χρόνους, αλλά και στις δεδομένες συνθήκες εμφύτευσης.

8.10 Ανακεφαλαίωση

Στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάζεται η προσπάθεια προσομοίωσης της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας CO₂ laser με πυρίτιο που έχει νοθευτεί με Βόριο μέσω εμφύτευσης πλάσματος BF₃, όσον αφορά στην εξέλιξη των θερμοκρασιακών προφίλ κατά βάθος και κατά πλάτος του υλικού. Το λογισμικό που χρησιμοποιούμε, το Sentaurus Process της Synopsys παρουσιάζει το σημαντικό πλεονέκτημα, ότι πέραν της εξίσωσης της θερμότητας, είναι σε θέση να επιλύει σε κάθε κόμβο ταυτόχρονα, τόσο τις εξισώσεις διάχυσης, όσο και αυτές που σχετίζονται με τις μηχανικές τάσεις. Έτσι είναι δυνατή η επίλυση του προβλήματος της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με υλικά, των οποίων οι οπτικές ιδιότητες εξαρτώνται από την συγκέντρωση των προσμίξεων. Ένα τέτοιο πρόβλημα ακριβώς, είναι η αλληλεπίδραση του CO₂ laser με πυρίτιο το οποίο έχει νοθευτεί ισχυρά με προσμίξεις, π.χ. Βόριο. Ενδελεχής αναζήτηση, κατέδειξε ότι η βιβλιογραφία είναι πολύ φτωχή όσον αφορά αυτό το θέμα, ιδιαίτερα όταν πραγματευόμαστε ανόπτηση σε καθεστώς millisecond, το οποίο είναι και το ζητούμενο στην περίπτωση μας. Το γεγονός αυτό, σε συνδυασμό με την ελλιπή τεκμηρίωση του αντικειμένου στα εγχειρίδια του λογισμικού, μας ανάγκασε να ξεκινήσουμε την διαδικασία της προσομοίωσης από ένα πολύ προκαταρκτικό στάδιο, και με μια πληθώρα προβλημάτων προς επίλυση. Τα σημαντικότερα ανάμεσα σε αυτά, είναι η περίπλοκη εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης, τόσο από την θερμοκρασία, όσο και από την συγκέντρωση των φορέων (με άλλα λόγια από το προφίλ της κατανομής της συγκέντρωσης του Βορίου) κατά βάθος του υλικού, καθώς και η εγγενής δυσκολία του λογισμικού στο να λάβει ως είσοδο κατανομή πυκνότητας ισχύος, η οποία να είναι γκαουσιανή χωρικά και top-hut χρονικά. Η προκαθορισμένη μορφή του παλμού, όπως την ορίζει το λογισμικό, είναι ακριβώς το αντίθετο, δηλαδή γκαουσιανή χωρικά και σταθερή χωρικά. Ένα τελευταίο πρόβλημα ανέκυψε από το γεγονός ότι έπρεπε να ωθήσουμε το λογισμικό να εκτελεί τους υπολογισμούς σε δυο διαστάσεις. Τελικά με μια σειρά, υπολογιστικών τεχνασμάτων και εργαλείων κατέστη δυνατή η επίλυση αυτών των προβλημάτων. Αρχικά πραγματοποιήθηκαν μονοδιάστατοι υπολογισμοί, και στη συνέχεια προβήκαμε σε προσομοίωση του φαινομένου σε δυο διαστάσεις. Οι τιμές θερμοκρασίας που εξήχθησαν είναι σε συνάφεια με τις αναμενόμενες τιμές, για τους μικρούς χρόνους ακτινοβολήσης που πρακτικά χρησιμοποιήσαμε (4, 6, 8 και 10 ms). Επιπλέον, διενεργήθηκαν υπολογισμοί για ακτινοβολήση σε μεγαλύτερους χρόνους αλλά και διάμετρο σποτ, στις οποίες είναι δυνατή η πυρομέτρηση, έστω και με σημαντικό σφάλμα. Βρέθηκε, ότι τα πειραματικά μας δεδομένα είναι γενικά σε συμφωνία με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση. Ακόμα, η μορφή της καμπύλης που παριστάνει την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με το χρόνο συμφωνεί απολύτως με την αντίστοιχη που έχει προκύψει από πειραματικά προσδιορισμένη (μέσω πυρομετρίας) από άλλη ερευνητική ομάδα. Πέραν των παραπάνω, όπως δείξαμε, τα προσομοιωμένα προφίλ θερμοκρασίας οδηγούν στην ικανοποιητική

πρόβλεψη της κινητικής της διάχυσης των προσμίξεων (όπως αυτή έχει προσδιοριστεί πειραματικά μέσω μετρήσεων SIMS).

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων όσον αφορά στα προφίλ των προσμίξεων ήταν αρκετά ικανοποιητικά και για τα δυο είδη δειγμάτων καθώς τα μήκη διάχυσης όπως αυτά προέκυψαν από την προσομοίωση (μέχρι 1 nm στην περίπτωση των 38N και μέχρι 2 nm στην περίπτωση των 39N) ταιριάζουν με αυτά που παρατηρήθηκαν κατά τις μετρήσεις SIMS.

Τόσο τα δείγματα 38N όσο και τα 39N υπέστησαν προθέρμανση στους 600°C και στους 650°C πριν την ακτινοβολήση, γεγονός το οποίο οδήγησε σε διαφοροποιήσεις στα τελικά προφίλ, όπως άλλωστε και αναμενόταν. Όντως, όπως επαληθεύτηκε από το πείραμα και την προσομοίωση, τα προαναπηθέντα στους 650°C δείγματα υπέστησαν περισσότερη διάχυση σε σχέση με τα 600°C ενώ ταυτόχρονα παρουσίασαν αυξημένη ενεργοποίηση. Επίσης, αυξανομένης της διάρκειας του παλμού παρατηρήθηκε μείωση της επιφανειακής αντίστασης και ταυτόχρονα μεγαλύτερη μετατόπιση του προφίλ. Αυτό ουσιαστικά σημαίνει ότι μεγαλώνοντας τη χρονική διάρκεια ακτινοβολήσης επιτυγχάνονται καλύτερες τιμές αγωγιμότητας αλλά και περισσότερη διάχυση. Το γεγονός αυτό επαληθεύτηκε τόσο από τα πειραματικά δεδομένα όσο και από τα δεδομένα των προσομοιώσεων. Από θεωρητικής άποψης η παρατήρηση αυτή δύναται να εξηγηθεί από το ότι αύξηση της χρονικής διάρκειας του παλμού μεταφράζεται σε αύξηση της συνολικής θερμικής ενέργειας που εισάγεται ωθώντας περισσότερα άτομα βορίου σε θέσεις ενεργοποίησης προκαλώντας παράλληλα μείωση της κατανομής συγκέντρωσης Βορίου (περισσότερη διάχυση).

Ειδικά στις προσομοιώσεις διάρκειας παλμού 4 ms η προσομοίωση προέβλεψε αμελητέα διάχυση, ιδιαίτερα στην περίπτωση της προθέρμανσης στους 600°C και με Advanced Calibration. Αυτή η παρατήρηση επιβεβαιώθηκε και πειραματικά, και δεν πρέπει να μας ξενίζει, καθώς η ποσότητα θερμότητας που εισάγεται στον όγκο του υλικού είναι περιορισμένη σε σχέση με τις περιπτώσεις των 6 ms ή 8 ms. Η χρήση της έκδοσης 2008.09 του αρχείου Advanced Calibration κατά τις προσομοιώσεις έδωσε πολύ πιο ακριβείς προβλέψεις όσον αφορά στη διάχυση αλλά και στην τελική τιμή της επιφανειακής αντίστασης σε σχέση με τις προσομοιώσεις όπου δεν έγινε χρήση Advanced Calibration. Συγκεκριμένα, συγκρίνοντας τις δυο προσεγγίσεις (με και χωρίς την χρήση Advanced Calibration) με τα προφίλ που προέκυψαν από τις μετρήσεις SIMS, παρατηρεί κανείς ότι η μη χρησιμοποίηση αυτού του αρχείου οδηγεί σε πολύ μεγαλύτερη μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης σε σχέση με αυτή που προσδιορίστηκε πειραματικά. Συμπερασματικά, από την μελέτη αυτών των διαγραμμάτων προκύπτει ότι η ενσωμάτωση του αρχείου Advanced Calibration οδηγεί σε πολύ πιο περιορισμένη διάχυση, η οποία είναι και σε συμφωνία με αυτή που έχει προσδιοριστεί πειραματικά μέσω μετρήσεων SIMS. Βέβαια, εδώ πρέπει να αναφερθεί ότι, προσομοιώσεις τόσο με χρήση όσο και χωρίς χρήση Advanced Calibration για όλες τις αρχικές θερμοκρασίες και όλους τους παλμούς πραγματοποιήθηκαν μόνο στα δείγματα 38N και από εκεί εξήχθησαν τα συμπεράσματα που αναφέρονται σε αυτή την παράγραφο. Βασίζόμενοι σε αυτά, πραγματοποιήσαμε τις δισδιάστατες προσομοιώσεις των 39N χρησιμοποιώντας αποκλειστικά το Advanced Calibration εν γνώση ότι έτσι θα λαμβάναμε εξ' αρχής το καλύτερο δυνατόν υπολογισθέν προφίλ, σχετικά με την κινητική των προσμίξεων. Άλλη μια σημαντική παρατήρηση έχει να κάνει με τη σύγκριση αποτελεσμάτων ανάμεσα στις μονοδιάστατες και δισδιάστατες προσομοιώσεις και στα

πραγματικά πειραματικά δεδομένα. Όπως αναμενόταν, στις προσομοιώσεις στη μια διάσταση υπολογίστηκε μικρότερη διάχυση και μεγαλύτερες τιμές επιφανειακής αντίστασης σε σχέση με τις προσομοιώσεις στις δυο διαστάσεις. Το αποτέλεσμα ήταν αναμενόμενο καθώς οι υπολογισμοί στη μια διάσταση έγιναν με πυκνότητα ενέργειας ακτινοβόλησης αρκετά μικρότερη από αυτή που χρησιμοποιήθηκε στις δυο διαστάσεις. Συνεπώς, δόθηκε συνολικά μικρότερο ποσό θερμότητας, με αποτέλεσμα μικρότερη μετατόπιση του προφίλ βορίου αλλά ταυτόχρονα και μικρότερα ποσοστά ενεργοποίησης, και επομένως μεγαλύτερες τιμές επιφανειακής αντίστασης. Όσον αφορά τώρα στη σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα, σαφώς και τα δεδομένα από τις διδιάστατες προσομοιώσεις ήτανε πολύ πιο κοντά σε αυτά σε σχέση με αυτά που προέκυψαν από τις μονοδιάστατες. Μάλιστα στις περιπτώσεις των 39N δειγμάτων, τα αποτελέσματα της κινητικής των προσμίξεων συγκρινόμενα με το πακέτο των πειραματικών μετρήσεων παρουσίασαν εντυπωσιακό βαθμό συμφωνίας.

Βιβλιογραφικές αναφορές 8^{ου} κεφαλαίου

D. Bauerle “Laser Processing and Chemistry” εκδ. Springer

Synopsys Sentaurus Process User Guide 2008.09

“Simulation of laser annealing with Sentaurus Process” Synopsys Case

O. Svelto, “Αρχές των lasers”, Μτφ. Γ.Α. Κουρούκλης, Α.Α. Σεραφετινίδης Εκδ. Συμμετρία 1986

¹ G.K. Celler, R. Borutta, W.L. Brown et al., *Proceedings laser-solid interactions and laser proceedings* 1978, edited by S.D. Ferris et al. (AIP, New York, 1979), p. 381

² M. Takai, P.H. Tsien, S.C. Tsu et al., *Appl. Phys.* 22, 129 (1980)

³ R.B. James, G.D. Jeist, R.T. Young et al., *J. Appl. Phys.* 62 (7) 1987 p. 2981

⁴ A. Bhattacharyya B.G. Streetman J., *Phys. D: Appl. Phys.*, 14 (1981) L67-72.

⁵ J. Narayan, R.B. James, O.W. Holland et al., *J. Vac. Sci. Technol. A* 3(4) (1985) 1836

⁶ P.H. Tsien, J. Gotzlich, H. Ryssel et al., *J. Appl. Phys.* Vol. 53 (1) (1982) 663

⁷ A. Bhattacharyya, B.G Streetman, *Sol. State Com.*, 36 (1980) 671-675

⁸ M. Blomberg, K. Naukkarinen, T. Tuomi, *J. Appl. Phys.* 54, 2327 (1983)

⁹ W. Lerch, S. Paul, J. Niess et al., *Ext. Abs. the 7th International Workshop on Junction Tech.* 2007

¹⁰ V. Gonda, J. Slabbekoorn and L.K. Nanver *15th IEEE 2007 RTP proceedings* p. 257-261.

¹¹ M. Hernandez. J. Venturini. D. Zahorski et al. *Appl. Surf. Sci* 208-209 (2003) 345-351.

¹² W. Szyszko *Appl. Surf. Sci.* 90 (1995) 325-331

¹³ M. Doubenskaia, Ph. Bertrand, I. Smurov, *Surf. & Coat. Tech.* 201 (2006) 1955

¹⁴ T. Sato, *Jpn. J. Appl. Phys*, Vol 6, no 3 March 1967, 339

¹⁵ Caturla M-J, Diaz de la Rubia T, Zhu et al., In: *Mater Res Soc Symp Proc*, vol. 469; 1997. p. 335-40.

¹⁶ Pichler P., in: *Mater Res Soc Symp Proc*, vol. 717; 2002. p. 103-14

¹⁷ Cristiano, F., Hebras, X., Cherkashin et al., *Appl. Phys. Lett.*, 83 (26), pp. 5407-5409, 2003

¹⁸ I. Avci et al., *J. Appl. Phys*, vol. 95, no. 5, pp. 2452–2460, 2004.

¹⁹ C. J. Ortiz et al., *Mater. Sci. Eng., B*, vol. 114–115, pp. 184–192, December 2004.

²⁰ E. Lampin et al., *J. Appl. Phys*, vol. 94, no. 12, pp. 7520–7525, 2003.

- ²¹ Cherkaev, A.S. Makarov, E.A. Kalinin, S., *International Workshop and Tutorials on Electron Devices and Materials, EDM - Proceedings*, art. no. 4585873, (2008) pp. 79-83
- ²² Cherkaev, A.S. Makarov, E.A. Kalinin, S.V et al., *2007 8th Annual International Workshop and Tutorials on Electron Devices and Materials, EDM'07 - Proceedings*, art. no. 4292923, (2007) pp. 100-102
- ²³ Martin-Bragado, I., Avci, I., El Sayed, K., et al., *Journal of Computational Electronics* 7 (3), (2008) pp. 103-106
- ²⁴ C. S. Rafferty et al., *Appl. Phys. Lett.*, vol. 68, no. 17, pp. 2395–2397, 1996.
- ²⁵ H. Bracht, N. A. Stolwijk, and H. Mehrer, in *Proceedings of the Seventh International Symposium on Silicon Materials Science and Technology (Semiconductor Silicon)*, vol. 94-10, San Francisco, CA, USA, pp. 593–602B, May 1994.
- ²⁶ H. Bracht, E. E. Haller, and R. Clark-Phelps, *Phys. Rev. Lett*, vol. 81, no. 2, pp. 393–396, 1998.
- ²⁷ A. Ural, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Phys. Rev. Lett*, vol. 83, no. 17, pp. 3454–3457, 1999.
- ²⁸ N. E. B. Cowern et al., *Phys. Rev. Lett*, vol. 82, no. 22, pp. 4460–4463, 1999.
- ²⁹ B. Colombeau and N. E. B. Cowern, *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 19, no. 12, pp. 1339–1342, 2004.
- ³⁰ P. M. Fahey, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 61, no. 2, pp. 289–388, 1989.
- ³¹ M. D. Giles, *IEEE Transactions on Computer-Aided Design*, vol. 8, no. 5, pp. 460–467, 1989.
- ³² I. Bork and H. Matsumoto, in *International Conference on Simulation of Semiconductor*
- ³³ P. A. Stolk et al., *Journal of Applied Physics*, vol. 81, no. 9, pp. 6031–6050, 1997.
- ³⁴ H. Saleh et al., *Appl. Phys. Lett.*, , vol. 77, no. 1, pp. 112–114, 2000.
- ³⁵ L. F. Giles et al., *Solid-State Electronics*, vol. 49, no. 4, pp. 618–627, 2005.
- ³⁶ Y.-S. Oh and D. E. Ward, in *IEDM Technical Digest*, San Francisco, CA, USA, pp. 509–512, December 1998.
- ³⁷ G. Impellizzeri et al., *Appl. Phys. Lett.*, , vol. 84, no. 11, pp. 1862–1864, 2004.
- ³⁸ M. Diebel and S. T. Dunham, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, no. 24, p. 245901, 2004.
- ³⁹ M. Diebel and S. T. Dunham, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 039602, January 2006.
- ⁴⁰ B. Sahli et al., to be published in *Proceedings of International Workshop on INSIGHT in Semiconductor Device Fabrication, Metrology, and Modeling*, Napa, CA, USA, April 2009.
- ⁴¹ I. Martin-Bragado, Simulación atomística de procesos para Microelectrónica, Ph.D. thesis, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain, 2004.
- ⁴² M. Jaraiz et al., in *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, Athens, Greece, pp. 10–17, September 2001.
- ⁴³ N. Strecker, V. Moroz, and M. Jaraiz, in *Technical Proceedings of the International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems (Nanotech 2002)*, vol. 1, San Juan, P. Rico, USA, pp. 462–465, April 2002.
- ⁴⁴ Pichler, P., Jüngling, W., Selberherr et al., (1985) *IEEE T Comput Aid D*, 4 (4), pp. 384-397.
- ⁴⁵ Pelaz, L., Gilmer, G.H., Gossmann et al., (1999) *Appl. Phys. Lett.*, , 74 (24), pp. 3657-3659.
- ⁴⁶ Schermer, J., Pichler, P., Zechner, C. et al., (2007) *ESSDERC 2007*, pp. 342-345.
- ⁴⁷ Waite, T.R., (1957) *Physical Review*, 107 (2), pp. 463-470
- ⁴⁸ Giles, Martin D., (1991) *Journal of the Electrochemical Society*, 138 (4), pp. 1160-1165.
- ⁴⁹ Zographos N, Zechner C, Avci I., in: *Mat Res Soc Symp Proc*, vol. 994; 2007. 0994-F10-01.
- ⁵⁰ Adey, J., Goss, J.P., Jones, R. et al., (2003) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 67 (24), art. no. 245325, pp. 2453251-2453255.
- ⁵¹ F. Cristiano, X. Hebras, N. Cherkashin et al., *Appl Phys Lett* 83 (26) (2003), pp. 5407–5409.
- ⁵² Pichler P, Burenkov A, Lerch W. et al., in: Öchsner A, Grácio J, editors. *Diffusion in Solids and Liquids*. vol. 258–260 of *Defect and Diffusion Forum*; 2006. p. 510–21.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9

ΑΝΟΠΤΗΣΗ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΜΕ ΧΡΗΣΗ KrF EXCIMER LASER ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΕΩΝ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ

9.1 Ανόπτηση πυριτίου με χρήση KrF Excimer laser

Το κεφάλαιο πραγματεύεται την διαδικασία ακτινοβόλησης πυριτίου με χρήση KrF Excimer laser σε καθεστώς μη τήξης για την κατασκευή ρηχών επαφών. Όπως αναφέρθηκε και στο πρώτο κεφάλαιο, ήδη από την δεκαετία του 70 η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής διερεύνησε διεξοδικά την δυνατότητα χρήσης laser^{1 2} ως μια εναλλακτική της συμβατικής ανόπτησης με χρήση φούρνου. Οι κυριότεροι στόχοι ήταν η ενεργοποίηση των προσμίξεων και η θεραπεία της καταστροφής που είχε εισαχθεί στον όγκο του υλικού κατά την ιοντική^{3 4 5 6 7 8}, και στη συνέχεια με πλάσμα⁹, εμφύτευση. Ιδιαίτερα, η ακτινοβολία των Excimer laser (των οποίων το μήκος κύματος ποικίλει από 193 έως 351nm, αναλόγως του διμερούς που χρησιμοποιείται) απορροφάται πολύ ισχυρά από το πυρίτιο με αποτέλεσμα η επίδραση της ακτινοβόλησης να περιορίζεται στα πρώτα στρώματα του όγκου του πυριτίου. Επιπλέον, η χρήση προηγμένων τεχνολογικά οπτικών διατάξεων επιτρέπει την δημιουργία δέσμης με ομογενή χωρική κατανομή πυκνότητας ενέργειας και με μεγάλη διάμετρο. Καθώς η ελαχιστοποίηση του βάθους επαφής δεν ήταν το κυριότερο ζητούμενο στην κατασκευή των παλαιότερων γενιών ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, η ανόπτηση γινόταν σε θερμοκρασία πάνω από το κατώφλι τήξης του πυριτίου, καθώς ο κύκλος τήξης / επανακρυσταλλοποίησης οδηγούσε σε αποτελεσματική διάλυση των ατελειών τύπου EOR. Ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα των Excimer laser είναι η δυνατότητα ακριβούς ελέγχου του βάθους τήξης, καθώς αυτό εξαρτάται από την πυκνότητα ενέργειας της ακτινοβόλησης¹⁰. Με τον τρόπο αυτό ο κατασκευαστής είχε την δυνατότητα να τήξει κατά βούληση τα πρώτα στρώματα του πυριτίου έως και την ζώνη των EOR ατελειών.

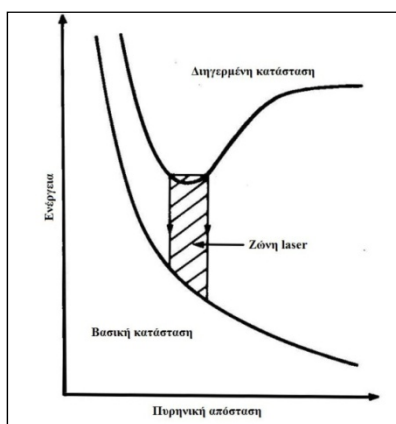
Καθώς όμως οι νεότερες γενιές επεξεργασιών απαιτούν την ελαχιστοποίηση του βάθους επαφής, η μείωση ή ιδανικά η εξάλειψη της επίδρασης των φαινομένων που σχετίζονται με την διάχυση του πυριτίου αποκτά πρωταρχική σημασία. Επειδή η εισαγωγή του κύκλου τήξης-επαναστερεοποίησης συνδέεται άρρηκτα με την εμφάνιση της διάχυσης (η στερεά διαχυτότητας του Βορίου είναι 8 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη στην υγρή φάση του πυριτίου σε σχέση με την στερεή), τα τελευταία χρόνια η ερευνητική προσπάθεια στράφηκε στην ακτινοβόληση σε καθεστώς μη τήξης^{11 12 13 14}. Η επανακρυσταλλοποίηση στην περίπτωση αυτή γίνεται στην στερεά φάση, με κατάλληλη αναδιάταξη των πλεγματικών επιπέδων λόγω της θερμότητας που εισάγεται στον κρύσταλλο, φροντίζοντας πάντα να μην λάβει χώρα αλλαγή φάσης μέσα στον όγκο του υλικού. Η μέθοδος αυτή απαιτεί πολύ προσεκτικό σχεδιασμό, για την επίτευξη του βέλτιστου ισοζυγίου ανάμεσα στην αύξηση των επιπέδων ενεργοποίησης και της αποφυγής της διάχυσης. Τα χαρακτηριστικά των Excimer laser (πολύ μικρά οπτικά και θερμικά μήκη) επιτρέπουν την θέρμανση του πυριτίου σε ένα καλά εντοπισμένο όγκο πλησίον της επιφάνειας του δισκίου. Με τον τρόπο αυτό απαιτείται πολύ μικρό ποσό θερμότητας, το οποίο μάλιστα κατανέμεται στα πρώτα στρώματα του πυριτίου. Όπως θα δειχτεί και στη συνέχεια η ανόπτηση με χρήση Excimer laser σε

καθεστώς μη τήξης είναι ένας ιδιαίτερα ανταγωνιστικός υποψήφιος για την δημιουργία ρηχών επαφών που να πληρούν τις προϋποθέσεις που επιβάλλονται από τους χάρτες ITRS.

9.2 Βασικά χαρακτηριστικά και αρχές λειτουργίας

Τα Excimer laser χρησιμοποιούνται ευρέως τα τελευταία χρόνια σε μια πληθώρα εφαρμογών, όπως εναπόθεση λεπτών υμενίων και διεργασίες τροποποίησης επιφανειακών δομών. Το γεγονός αυτό σχετίζεται με την υψηλή ενέργεια φωτονίων (κοντά στα 5 eV), την μικρή διάρκεια παλμού (τυπικά από 10 έως 40 ns). Τα laser αυτά προσφέρουν υψηλότερους βαθμούς θέρμανσης και ψύξης, ενώ ταυτόχρονα η επίδραση τους είναι πολύ καλά εντοπισμένη τοπικά. Από την άλλη πλευρά, τα σημαντικότερα μειονεκτήματα αυτής της κατηγορίας laser, είναι ο μικρός βαθμός απόδοσης (1-3%), η σχετική αστάθεια απόδοσης από παλμό σε παλμό (αλλά και μεταξύ διαφορετικών σετ ακτινοβολήσης), τα υψηλά κόστη κτήσης και λειτουργίας και τέλος το γεγονός ότι εμπεριέχουν ορισμένα τοξικά αέρια. Παρά τα προβλήματα αυτά πάντως, οι εξαιρετικές ιδιότητες τους, όσον αφορά την αλληλεπίδραση τους με το πυρίτιο, τα καθιστούν μια ιδιαίτερα ελκυστική επιλογή για την ανόπτηση του πυριτίου.

Τα laser διεγερμένων διημερών (excimer lasers, με τον όρο να προέρχεται από την συνένωση των λέξεων excited dimer) εμπλέκουν μεταπτώσεις μεταξύ διαφορετικών ηλεκτρονικών καταστάσεων. Όλα τα είδη excimer laser εκπέμπουν στο φάσμα του υπεριώδους. Ένα τυπικό laser αυτής της κατηγορίας περιέχει συνδυασμό δυο αερίων, ενός αδρανούς (Αργό, Κρυπτό ή Ξένο) και ενός δραστικού (Φθόριο ή Χλώριο). Όταν το μείγμα αυτό διεγερθεί μέσω κατάλληλης ηλεκτρικής εκκένωσης, τότε δημιουργείται ένα ψευδομόριο, το οποίο καλείται διημερές (dimer). Αυτό μπορεί να υπάρξει μόνο σε διεγερμένη κατάσταση, όπως χαρακτηριστικά φαίνεται και στο σχήμα 9.1. Όταν στη συνέχεια, έχουμε μετάπτωση από την υψηλότερη (δέσμια) στην χαμηλότερη (ελεύθερη) κατάσταση, τότε αυτή συνοδεύεται από εκπομπή φωτονίων στο υπεριώδες φάσμα. Ένα laser διεγερμένων διημερών έχει δυο βασικές ιδιότητες, που και οι δυο οφείλονται στο γεγονός ότι η βασική κατάσταση είναι απωστική: α) όταν το μόριο, αφού έχει ήδη υποστεί τη μετάπτωση laser, φτάνει στη βασική κατάσταση, διασπάται αμέσως με αποτέλεσμα το βασικό επίπεδο laser να είναι πάντα κενό, β) δεν υπάρχουν καλές ορισμένες περιστροφικές-δονητικές μεταπτώσεις και η μετάπτωση είναι ευρείας ζώνης. Αυτό επιτρέπει τη δυνατότητα επιλεγόμενης ακτινοβολίας laser μέσα σε αυτή τη μετάπτωση ευρείας ζώνης.



Εικόνα 9.1 Ενεργειακό διάγραμμα που παριστάνει τις δυο σημαντικότερες ενεργειακές στάθμες, μεταξύ των οποίων πραγματοποιείται η μετάβαση για το lasing.

Οι μηχανισμοί άντλησης σ' ένα laser ευγενούς αερίου-αλογόνου είναι μάλλον σύνθετοι και εμπλέκουν αρκετά ιοντικά, διεγερμένα ατομικά και μοριακά είδη. Στην περίπτωση του KrF, οι παρακάτω μηχανισμοί διαδραματίζουν κυρίαρχο ρόλο: α) άμεση αντίδραση του διεγερμένου ευγενούς αερίου με το αλογόνο:



και β) διασπαστική προσκόλληση ενός ηλεκτρονίου στο αλογόνο, ακολουθούμενη από μια επανασύνδεση τριών σωμάτων του αρνητικού ιόντος του αλογόνου, δηλαδή:



και



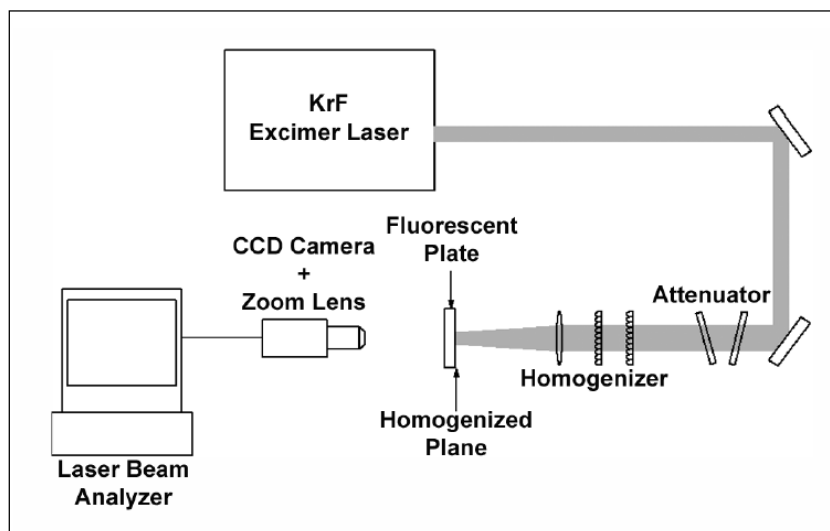
όπου M είναι το άτομο του ουδέτερου αερίου (Ar ή He).

Laser διεγερμένων διμερών ευγενούς αερίου-αλογόνου μπορεί να αντληθούν είτε με μια ηλεκτρονική δέσμη είτε με μια ηλεκτρική εκκένωση. Στην τελευταία περίπτωση, χρησιμοποιούνται τεχνικές προϊονισμού, είτε δέσμες ηλεκτρονίων είτε UV, το laser είναι παλμικό και ο σχεδιασμός του σε πολλά είναι παρόμοιος μ' εκείνον ενός TEA CO₂ laser. Η διάρκεια του παλμού του laser είναι της τάξης των λίγων ns, περιοριζόμενος από την έναρξη ασταθειών στην εκκένωση (δημιουργία τόξου).

9.3 Διάταξη ακτινοβολήσης

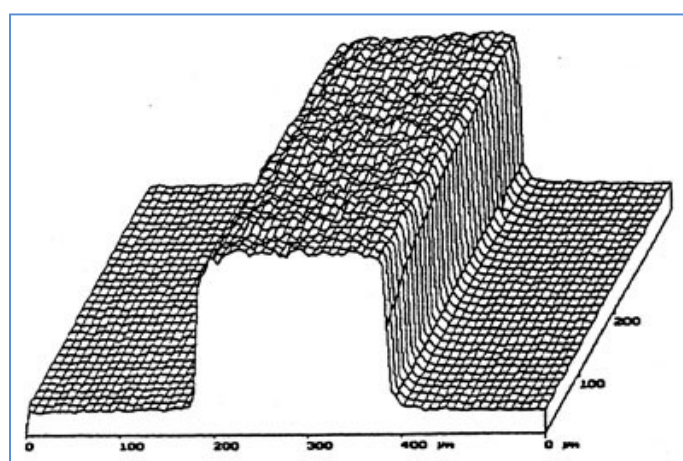
Οι ακτινοβολήσεις πυριτίου με χρήση Excimer KrF laser, διεξήχθησαν στο Laser Thermal Lab, το οποίο υπάγεται στο πανεπιστήμιο της Καλιφόρνια, Μπέρκλεϊ (University of California, Berkeley) και βρίσκεται στις εγκαταστάσεις του Lawrence Livermore National Laboratories, από τον Δρ. Nirun Misra και υπό την καθοδήγηση του Καθηγητή Κώστα Γρηγορόπουλου.

Η διάταξη ακτινοβολήσης παριστάνεται στην Εικόνα 9.2. Περιλαμβάνει την βασική μονάδα του laser, διάφορα οπτικά στοιχεία για εκτροπή της δέσμης, έναν εξασθενητή δέσμης (attenuator) για την επίτευξη της επιθυμητής πυκνότητας ενέργειας, μια συστοιχία από ομογενοποιητές που μετατρέπουν το προφίλ της δέσμης από γκαουσιανό σε top-hat και ένα σύστημα ανάλυσης και βαθμονόμησης του προφίλ της δέσμης που περιλαμβάνει εκτός των άλλων και μια CCD κάμερα. Η διάταξη επιλεκτικής εξασθένησης της δέσμης (attenuator) προσφέρει δυνατότητα ρύθμισης της πυκνότητας ενέργειας σε ένα εύρος 10 με 90% της αρχικής. Το laser που χρησιμοποιήθηκε είναι ένα υδρόψυκτο Lambda Physik LXP 210 KrF στα 248nm και FWHM=20 ns. Η χρονική μορφή του παλμού είναι γκαουσιανής μορφής. Η ακτινοβολήση έγινε σε θερμοκρασία δωματίου και με μέσο διάδοσης τον ατμοσφαιρικό αέρα. Με τη βοήθεια του υπολογιστή είναι δυνατή η ρύθμιση της τάσης λειτουργίας του laser, της συχνότητας επανάληψης και του αριθμού των παλμών. Ο μέγιστος ρυθμός επανάληψης είναι 100 Hz.



Εικόνα 9.2 Διάταξη ακτινοβόλησης Excimer. Περιλαμβάνει πλήρη διάταξη ομογενοποίησης, attenuator, CCD camera και αναλυτή δέσμης.

Με την χρήση της παραπάνω διάταξης μπορούμε να επιτύχουμε σποτ τετραγωνικού σχήματος διαστάσεων από $5 \times 5 \text{ mm}^2$ έως και $1 \times 1 \text{ cm}^2$, πυκνότητα ενέργειας σε ένα εύρος από 300 έως 800 J/cm^2 , και ομοιομορφία που ξεπερνά το 98%. Στην Εικόνα 9.3 παριστάνεται ένα ενδεικτικό δυσδιάστατο διάγραμμα της χωρικής κατανομής της δέσμης, όπως αυτή προκύπτει μετά την διέλευση της από την διάταξη ομογενοποίησης. Η διάταξη αυτή αποτελείται στην ουσία από τρία διαφορετικά οπτικά στοιχεία. Το πρώτο είναι short axis homogenizer, το δεύτερο είναι short axis/ long axis homogenizer και το τρίτο είναι long axis homogenizer και φακό συμπύκνωσης (condenser lens). Στο εστιακό σημείο του condenser lens σχηματίζεται μια top-hut τετραγωνική δέσμη, της οποίας το μέγεθος μεταβάλλεται ανάλογα με την θέση των παραπάνω οπτικών στοιχείων του ομογενοποιητή.



Εικόνα 9.3 Σχηματική αναπαράσταση του χωρικού προφίλ κατανομής της ενέργειας της δέσμης μετά την διέλευση της από την διάταξη του ομογενοποιητή [Πηγή: Coherent Inc.].

Τέλος, στην Εικόνα 9.4 παρουσιάζουμε το laser LXP 210 της σειράς LXP Pro της Coherent Inc. που χρησιμοποιήσαμε.



Εικόνα 9.4 Άποψη του laser LXP 210 της Coherent Inc. που χρησιμοποιήθηκε κατά τις ακτινοβολήσεις

9.4 Κατάλογος συνθηκών ακτινοβολήσεων

Όπως προαναφέρθηκε, οι ακτινοβολήσεις με χρήση Excimer KrF laser, διεξήχθησαν στο Laser Thermal Lab, το οποίο υπάρχει στο πανεπιστήμιο της Καλιφόρνια, Μπέριλεϊ (University of California, Berkeley) στα πλαίσια της συνεργασίας της ομάδας αυτής, με το δικό μας γκρουπ.

Ο βασικότερος στόχος της διερεύνησης αυτής ήταν ο προσδιορισμός των βέλτιστων συνθηκών ανόπτησης. Καθώς η διάρκεια του παλμού ήταν σταθερή, η μελέτη περιορίστηκε στην επίδραση δυο μεταβλητών, αυτών της πυκνότητας ενέργειας και του αριθμού των παλμών. Όσον αφορά την πυκνότητα ενέργειας, το εύρος ακτινοβολήσεων ήταν στα 375 έως 625 mJ/cm², ενώ για τους παλμούς από 10 έως 1000. Μετά από κάθε σετ ακτινοβολήσεων ακολουθούσε ο ηλεκτρικός και μορφολογικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων, βάσει των οποίων σχεδιάζόταν η επόμενη σειρά ανοπτήσεων. Σε κάθε περίπτωση, όπως θα δειχτεί και στη συνέχεια, η ανόπτηση διεξήχθη σε καθεστώς μη τήξης, το μήκος κύματος του laser είναι 248 nm, το FWHM είναι 20 ns ενώ η ακτινοβολήση έγινε με μέσο διάδοσης τον αέρα και σε θερμοκρασία δωματίου. Το σποτ της ακτινοβολήσης ήταν τετραγωνικής μορφής με διαστάσεις 5×5 mm², ενώ η χρήση ομογενοποιητή εξασφάλισε υψηλό βαθμό ομοιογένειας στην κατανομή της πυκνότητας ενέργειας, γεγονός που όπως θα δούμε εξακριβώθηκε και πειραματικά μέσω μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης.

Συνολικά διενεργήθηκαν τέσσερα σετ ακτινοβολήσεων, σε ένα μόνο είδος δείγματος, το 37N (συνθήκες εμφύτευσης: ονομαστική δόση 3×10^{15} cm⁻² και ονομαστική ενέργεια 400 eV). Η διαδικασία επαναβαθμονόμησης της διάταξης κατέδειξε το γεγονός ότι κατά την πρώτη ακτινοβολήση οι τιμές της πυκνότητας ενέργειας είχαν υπερεκτιμηθεί κατά 15%. Γενικότερα, τέθηκε το ζήτημα αξιοπιστίας όσον αφορά τον ακριβή προσδιορισμό της πυκνότητας ενέργειας σε αυτές τις σειρές ακτινοβολήσεων. Παρόμοια πάντως προβλήματα είχαμε αντιμετωπίσει και στα πλαίσια προηγούμενης ερευνητικής προσπάθειας, στην οποία χρησιμοποιήθηκε Excimer laser του ΙΤΕ, στην Κρήτη. Στον πίνακα 9.1 συνοψίζονται όλες οι συνθήκες ακτινοβολήσης, όπως αυτές έχουν προκύψει από την αναθεώρηση της πυκνότητας ενέργειας. Τονίζεται, ότι για μια σειρά από λόγους που θα αναλυθούν στη συνέχεια, σε ορισμένες συνθήκες δεν στάθηκε δυνατό να πραγματοποιηθεί μέτρηση.

Πίνακας 9.1 Συνθήκες ακτινοβόλησης

| Πυκνότητα Ενέργειας (mJ/cm ²) | Αριθμός παλμών | | | | |
|---|----------------|----|-----|-----|------|
| | 10 | 50 | 100 | 500 | 1000 |
| 375 | | | ■ | ■ | ■ |
| 458 | | | ■ | ■ | |
| 500 | ■ | ■ | ■ | ■ | ■ |
| 542 | ■ | ■ | ■ | | ■ |
| 562 | ■ | ■ | ■ | | ■ |
| 583 | ■ | ■ | | | ■ |
| 625 | ■ | ■ | | | |

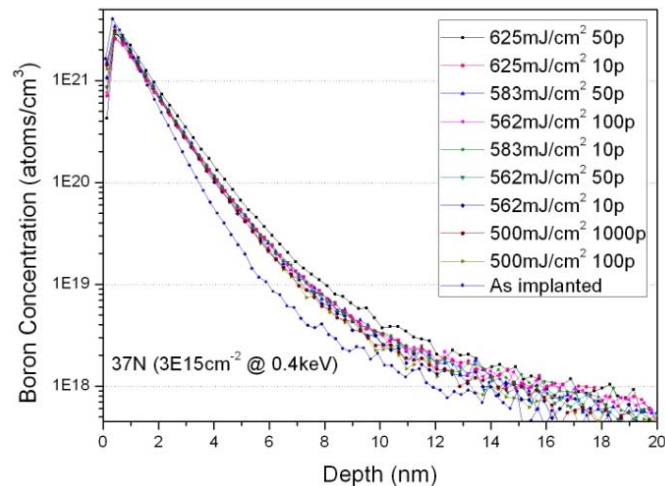
9.5 Χαρακτηρισμός δειγμάτων - Εισαγωγή

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα σημαντικότερα αποτελέσματα από τον μορφολογικό και τον ηλεκτρικό χαρακτηρισμό δειγμάτων που υπέστησαν ακτινοβόληση με χρήση KrF Excimer. Ο χαρακτηρισμός αυτός περιλαμβάνει μετρήσεις TEM, AFM, SIMS και μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης μέσω της τεχνικής Van der Pauw, όπως αυτές περιγράφηκαν αναλυτικά στο κεφάλαιο 2 «Μέθοδοι χαρακτηρισμού». Πριν όμως προχωρήσουμε στην περιγραφή των αποτελεσμάτων του χαρακτηρισμού, θα δώσουμε μερικές λεπτομέρειες για τις συνθήκες ακτινοβόλησης.

9.6 Προσδιορισμός της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων Βορίου μέσω SIMS

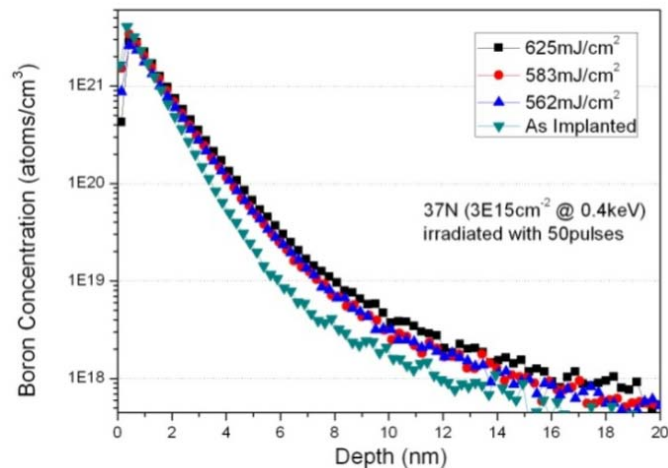
Ο προσδιορισμός της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων Βορίου είναι το πρώτο βήμα στον κύκλο χαρακτηρισμού των επαφών που σχηματίστηκαν από την εμφύτευση και την ανόπτηση με laser. Ο προσδιορισμός του προφίλ συγκέντρωσης, είναι εφικτός μέσω μετρήσεων φασματοσκοπίας μάζας δευτερογενών ιόντων (SIMS), και προσφέρει δυο πολύτιμες πληροφορίες: την έκταση των φαινομένων διάχυσης λόγω της ανόπτησης και μέσω αυτής, το καθεστώς στο οποίο διεξήχθη η ακτινοβόληση (σε τήξη ή μη). Επειδή η διαχυτότητα των προσμίξεων Βορίου είναι οκτώ τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη στο υγρό πυρίτιο σε σχέση με το στερεό, τυχόν εισαγωγή κύκλου τήξης / επανακρυστάλλωσης στον όγκο του πυριτίου θα οδηγούσε στην έντονη μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης σε σχέση με αυτό πριν την ανόπτηση¹⁵. Με άλλα λόγια, η απουσία έντονης διάχυσης είναι μια αδιάψευστη ένδειξη ότι η ακτινοβόληση δεν προκάλεσε τήξη στο υλικό. Όπως προαναφέρθηκε και στο εισαγωγικό κεφάλαιο, ο κυριότερος στόχος των στρατηγικών ανόπτησης που έχουμε ακολουθήσει (και οι οποίες επιτάσσουν η ακτινοβόληση να διεξάγεται σε καθεστώς μη τήξης), είναι η παρατηρούμενη μετατόπιση του προφίλ να μην ξεπερνάει τα 2 με 3 νανόμετρα. Εφόσον ο στόχος αυτός επιτευχθεί, τότε η ανόπτηση αυτή σε συνδυασμό με την χρήση δειγμάτων με πολύ ρηχό προφίλ (βάθος επαφής γύρω στα 8-10 nm), θα είναι σε θέση να δημιουργήσει επαφές οι οποίες να ανταποκρίνονται στις απαιτήσεις για τους τεχνολογικούς κόμβους από τα 32 nm και κάτω. Οι μετρήσεις SIMS έγιναν στο CEMES/CNRS της Τουλούζης από τον Δρ. G. Bennassayag, χρησιμοποιώντας μια διάταξη IMS Cameca και δέσμη O₂ στα 1.1 keV. Τα

αποτελέσματα θα παρουσιαστούν αρχικά συνολικά, και στη συνέχεια ομαδοποιημένα ώστε να καταδεικνύουν την επίδραση κάθε μιας από τις παραμέτρους που επιδρούν στην ακτινοβόληση (πυκνότητα ενέργειας και αριθμός παλμών). Στο διάγραμμα της εικόνας 9.5 δίνονται συγκεντρωτικά τα προφίλ συγκέντρωσεων για εννέα διαφορετικούς συνδυασμούς συνθηκών πυκνότητας ενέργειας και αριθμού παλμών, μαζί με το αντίστοιχο προφίλ δείγματος το οποίο δεν έχει υποστεί ανόπτηση με laser. Από το διάγραμμα αυτό προκύπτει ότι ακόμα και για την συνθήκη που οδηγεί στην μεγαλύτερη διάχυση, η μετατόπιση του προφίλ δεν ξεπερνά τα 2.5 nm, ενώ για τις περισσότερες συνθήκες η μετατόπιση αυτή κυμαίνεται ανάμεσα στα 1.5 και 2 νανόμετρα. Είναι λοιπόν προφανές ότι η ανόπτηση διεξήχθη σε καθεστώς μη τήξης, αφού πρακτικά η διάχυση μπορεί να θεωρηθεί σχεδόν αμελητέα. Ακόμα, η σχετική μετατόπιση ικανοποιεί τις απαιτήσεις για την κατασκευή υπέρ-ορθών επαφών, όπως αυτές τίθενται από τους οδικούς χάρτες ITRS για τους τεχνολογικούς κόμβους από 32 nm και κάτω. Για τις συγκεκριμένες συνθήκες ονομαστικής ενέργειας και δόσης το βάθος επαφής (για τα $1E18 \text{ cm}^{-3}$) προσδιορίζεται στα 15 nm, ενώ η μέση κλίση του προφίλ είναι ιδιαίτερα έντονη καθώς κυμαίνεται στα 2.4 nm/δεκάδα.



Εικόνα 9.5 Κατανομές συγκέντρωσης προσμίξεων βορίου όπως αυτές προέκυψαν μετά από ανόπτηση με χρήση KrF Excimer laser, και κάτω από διαφορετικούς συνδυασμούς πυκνότητας ενέργειας και αριθμού παλμών, μαζί με ένα προφίλ δείγματος το οποίο δεν έχει υποστεί ανόπτηση για να διαφανεί η σχετική μετατόπιση λόγω της ακτινοβόλησης. Από αυτή, προκύπτει ότι η μέγιστη παρατηρούμενη διάχυση δεν ξεπερνά τα 2.5 nm, ενώ οι περισσότερες συνθήκες οδηγούν σε μετατόπιση του προφίλ της τάξης των 1.5 με 2 nm.

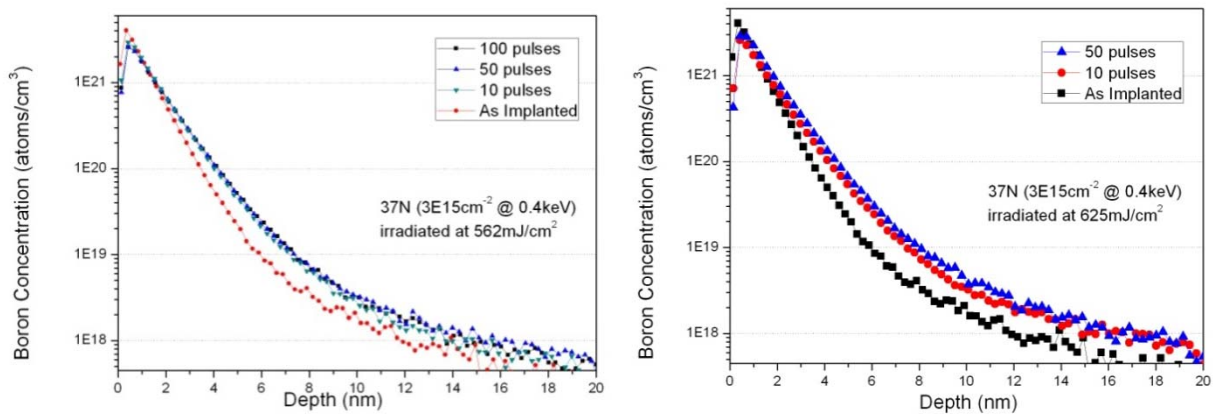
Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε την επίδραση των δυο σημαντικότερων παραμέτρων που υπεισέρχονται στην ακτινοβόληση, αυτές της πυκνότητας ενέργειας και του αριθμού των διαδοχικών παλμών που υφίσταται το δείγμα. Στην Εικόνα 9.6 παριστάνεται η επίδραση της πυκνότητας ενέργειας στην μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης για δείγματα που ακτινοβολήθηκαν με πενήντα παλμούς laser. Όπως ήταν αναμενόμενο, η αύξηση της πυκνότητας ισχύος οδηγεί σε μεγαλύτερη διάχυση των προσμίξεων, όμως ακόμα και στη περίπτωση της ανόπτησης με την μέγιστη πυκνότητα ενέργειας (625 mJ/cm^2) η μετατόπιση είναι πολύ μικρή, γεγονός που μαρτυρά ότι η ακτινοβόληση έλαβε χώρα σε καθεστώς μη τήξης.



Εικόνα 9.6 Επίδραση της πυκνότητας ενέργειας στην μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης για δείγματα που ακτινοβολήθηκαν με πενήντα παλμούς laser. Ακόμα και στην περίπτωση της ακτινοβολήσης την μέγιστη πυκνότητα ισχύος που χρησιμοποιήθηκε (625 mJ/cm^2), η παρατηρούμενη διάχυση δεν ξεπέρασε τα 2.5 nm .

Η επόμενη παράμετρος της οποίας η επίδραση διερευνήθηκε είναι αυτή του αριθμού των διαδοχικών παλμών με τους οποίους ακτινοβολήθηκε το κάθε δείγμα. Γενικά, με βάση τα διαγράμματα συγκέντρωσης των εικόνων 9.7. α και β, η αύξηση του αριθμού των παλμών οδηγεί σε μεγαλύτερη διαχυτότητα, σε συμφωνία με την βιβλιογραφία^{xiii}. Ειδικότερα όμως, ανάλογα με την πυκνότητα ισχύος, μπορούμε να διακρίνουμε δυο διαφορετικές συμπεριφορές στην μετατόπιση του προφίλ. Για τα δείγματα που ανοπτήθηκαν με μικρές ή μεσαίες τιμές πυκνότητας ενέργειας, η επίδραση του αριθμού των παλμών στην διάχυση, είναι σχετικά μικρότερη σε σχέση με αυτή που παρατηρείται στα δείγματα που ακτινοβολήθηκαν με μεγαλύτερες τιμές ενέργειας. Η συμπεριφορά αυτή μπορεί να ερμηνευτεί από την διαφορά στην ποσότητα θερμότητας που εισάγεται στο όγκο του υλικού στην κάθε περίπτωση, καθώς και στην αντίστοιχη τιμή της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας που επιτυγχάνεται. Προφανώς, στην περίπτωση της συνθήκης με πυκνότητα ισχύος 417 mJ/cm^2 , όπου η μέγιστη επιφανειακή θερμοκρασία (σύμφωνα με την προσομοίωση) είναι 862°C , η αναμενόμενη διάχυση θα είναι πολύ μικρότερη σε σχέση με την συνθήκη των 625 mJ/cm^2 , όπου η αντίστοιχη τιμή είναι 1350°C . Φυσικά πρέπει να τονιστεί, ότι αν και η θερμοκρασία των 862°C , είναι εντός της θερμοκρασιακής περιοχής που ευνοεί την εμφάνιση μεταβατικών φαινομένων διάχυσης (TED), εν τούτοις, το χρονικό διάστημα κατά το οποίο το πυρίτιο βρίσκεται σε αυτό το θερμοκρασιακό εύρος είναι πολύ μικρότερο από τους χαρακτηριστικούς χρόνους των φαινομένων που είναι οι γενεσιουργοί παράγοντες του TED (όπως η διάλυση των BIC's).

Μια τελευταία παράμετρος έχει να κάνει με το κατά πόσο η εμφυτευθείσα δόση διατηρείται κατά την ανόπτηση ή όχι (να υπάρχουν δηλαδή φαινόμενα “έξω-διάχυσης”, outdiffusion). Ολοκληρώνοντας τα προφίλ συγκέντρωσης προκύπτει ότι η μέγιστη απώλεια δόσης είναι γύρω στο 15%, αν και για τα περισσότερα δείγματα δεν ξεπερνά το 10%. Από την μελέτη των εναπομενουσών δόσεων δεν προκύπτει κάποιο συγκεκριμένο μοτίβο, αλλά γενικά υπάρχει μια σχετική τάση η εναπομένουσα δόση να ελαττώνεται ελαφρώς, αυξανομένης της πυκνότητας ενέργειας. Αντίστοιχο μοτίβο όσον αφορά την επίδραση του αριθμού των παλμών δεν κατέστη δυνατό να εξαχθεί.



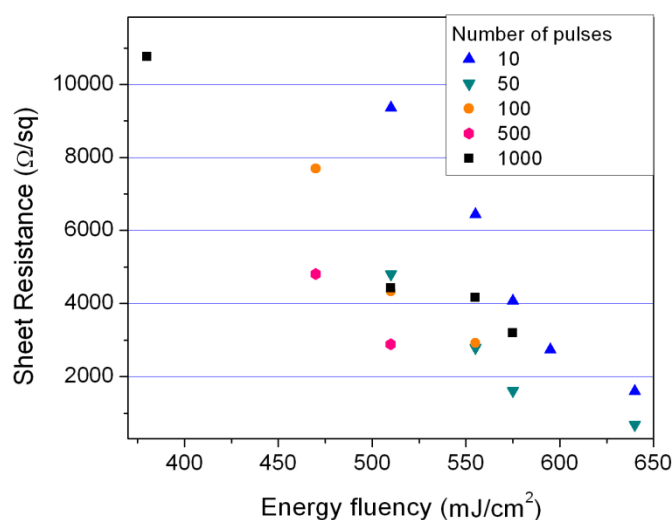
Εικόνα 9.7 Επίδραση της πυκνότητας ενέργειας στην μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης για δείγματα που ακτινοβολήθηκαν με δυο διαφορετικές τιμές πυκνότητας ενέργειας α) 562 mJ/cm^2 και β) 625 mJ/cm^2 . Παρατηρείται ότι στην περίπτωση της υψηλότερης τιμής της πυκνότητας ενέργειας η επίδραση αυτή γίνεται εντονότερη απόρροια της αυξημένης διάχυσης ανά παλμό λόγω μεγαλύτερου ποσού θερμότητας που εισάγεται στον όγκο του υλικού.

9.7 Χαρακτηρισμός των ηλεκτρικών ιδιοτήτων μέσω μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης

Μαζί με το βάθος της σχηματιζόμενης επαφής, η τιμή της επιφανειακής αντίστασης αποτελεί την σημαντικότερη τεχνολογική παράμετρο που λαμβάνεται υπόψη κατά τον σχεδιασμό και υλοποίηση των υπέρ-ρηχών επαφών. Η παρατήρηση αυτή απορρέει από το γεγονός ότι η μείωση της επιφανειακής αντίστασης συνεπάγεται αυτομάτως ότι το PMOS ή το NMOS θα άγουν αποτελεσματικότερα τα ρεύματα, δρώντας ως διακόπτες. Έτσι λοιπόν, τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης των προσμίξεων ακολουθεί η μέτρηση της επιφανειακής αντίστασης με την χρήση της τεχνικής Van der Pauw, και όπως αυτή αναλύεται στο κεφάλαιο 2 «Μέθοδοι χαρακτηρισμού».

Από την στιγμή που η κατανομή της πυκνότητας ενέργειας του laser είναι τύπου top hat, η επιφανειακή αντίσταση του δείγματος θα πρέπει να είναι ομοιόμορφη σε όλη την επιφάνεια της ανοπτημένης περιοχής και επομένως να απαιτείται η διενέργεια μιας μόνο μέτρησης σε ένα τυχαίο σημείο για τον χαρακτηρισμό της συγκεκριμένης συνθήκης. Παρά το γεγονός ότι η παρουσία του ομογενοποιητή εγγυάται ομοιομορφία της τάξης του 98% στην κατανομή της πυκνότητας ενέργειας, αποφασίστηκε να εξακριβώσουμε το γεγονός αυτό και πειραματικά. Για τον σκοπό αυτό, κατασκευάσαμε με την βοήθεια ενός laser Nd:YAG μια διάτρητη μάσκα από δισκίο πυρίτιο (το οποίο προηγουμένως είχε υποστεί ειλέπτυνση έτσι ώστε το πάχος του να μην ξεπερνά τα $300 \mu\text{m}$). Η μάσκα αυτή είναι τετραγωνικού σχήματος με διάστασεις τέτοιες ώστε να μπορεί να καλύψει ολόκληρη την ανοπτημένη επιφάνεια και έχει επάνω της τέσσερες τετράδες οπών. Η μάσκα αυτή χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή, μέσω εναπόθεσης αλουμινίου, τεσσάρων τετράδων αγώγιμων επαφών έτσι ώστε να καταστεί δυνατή η διενέργεια τεσσάρων μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης σε διαφορετικά σημεία της ανοπτημένης περιοχής. Στη συνέχεια αυτή προβήκαμε σε μετρήσεις σε δείγματα με τρεις διαφορετικές συνθήκες ακτινοβολήσης (375 mJ/cm^2 - 1000 παλμοί, 562 mJ/cm^2 50 παλμοί και 583 mJ/cm^2 - 10 παλμοί). Σε κάθε περίπτωση η μετρηθείσα διακύμανση και για τις τέσσερες τετράδες επαφών, δεν ξεπέρασε το 5%, γεγονός που αποδεικνύει την ομοιογένεια στον καταμερισμό της ενέργειας του laser.

Αφού εξακριβώθηκε η ομοιομορφία της επιφανειακής αντίστασης επί της ανοπτημένης επιφάνειας, το επόμενο βήμα ήταν η διενέργεια μετρήσεων σε όλα τα δείγματα που είχαμε στην διάθεση μας. Της διεξαγωγής κάθε μέτρησης προηγείτο η δημιουργία τεσσάρων επαφών σε διάταξη σταυρού μέσω εναπόθεσης Αλουμινίου. Επί των επαφών αυτών ακουμπάνε οι τέσσαρες ακίδες του prober. Για κάθε μέτρηση απαιτούνται οκτώ διαφορετικές συνδεσμολογίες ρεύματος τάσης, ενώ λαμβάνονται μετρήσεις για τουλάχιστον τρεις ή τέσσαρες διαφορετικές τάξεις ρεύματος (συνήθως από 10^{-2} έως 10^{-5} A). Η υιοθέτηση της μεθόδου Van der Pauw, σε συνδυασμό με την σταυροειδή διάταξη των αγώγιμων επαφών και την χρήση κριτηρίων αξιοπιστίας επιτρέπει την αυτοδιόρθωση των μετρήσεων. Καθώς σε πολλές από τις μετρήσεις είχαμε την εμφάνιση σημαντικού θορύβων αναγκαστήκαμε να προσβούμε σε διάφορες δοκιμές αλλά και σε τροποποιήσεις της συνδεσμολογίας έως ότου επιτύχουμε αξιόπιστες μετρήσεις κάθε φορά. Στο διάγραμμα της εικόνας 9.8 παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα των μετρήσεων με την επισήμανση ότι προβήκαμε σε μετρήσεις σε όλα τα δείγματα που εμφανίζονται στον πίνακα 9.1, αλλά η ύπαρξη σχετικά υψηλών επιπέδων ηλεκτρικού θορύβου δεν επέτρεψε την λήψη αξιόπιστων αποτελεσμάτων. Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι για τα δείγματα αυτά διεξήχθη συστηματική προσπάθεια λήψης μετρήσεων με την μεταβολή μιας σειράς παραμέτρων οι οποίες θα μπορούσαν θεωρητικά να βελτιώσουν την μέτρηση, αλλά χωρίς τελικά να επιτευχθεί σημαντική βελτίωση.

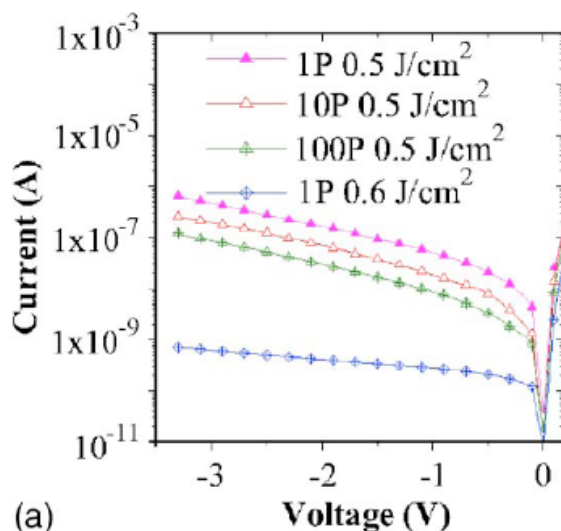


Εικόνα 9.8 Εξάρτηση της επιφανειακής αντίστασης δειγμάτων 37N, ακτινοβολημένων με χρήση KrF excimer laser, από τον αριθμό των παλμών και την πυκνότητα ενέργειας του laser.

Από το διάγραμμα της εικόνας 9.8, παρατηρείται ότι γενικά η αύξηση της πυκνότητας ισχύος οδηγεί σε μείωση της επιφανειακής αντίστασης. Το μεγαλύτερο ποσό θερμότητας που εισάγεται και η επακόλουθη επίτευξη υψηλότερων θερμοκρασιών, αφενός μεν ωθεί περισσότερα άτομα που καταλάμβαναν ενδοπλεγματικές θέσεις, σε θέσεις αντικατάστασης, αφετέρου δε καθιστά την επανακρυστάλλωση και την απομάκρυνση των ατελειών πιο αποτελεσματική. Όσον αφορά την επίδραση του αριθμού των παλμών τα πράγματα δεν είναι τόσο ξεκάθαρα, παρά το ότι υπάρχει μια γενική τάση αυξανόμενων των παλμών να μειώνεται η επιφανειακή αντίσταση. Στις περιπτώσεις που η πυκνότητα ισχύος λαμβάνει από μεσαίες ως υψηλές τιμές, παρατηρείται συστηματικά πως η ανόπτηση με 1000 παλμούς οδηγεί σε μεγαλύτερες τιμές επιφανειακής αντίστασης σε σχέση με τους 50 ή τους 100 παλμούς. Η συμπεριφορά αυτή έχει αναφερθεί στην βιβλιογραφία¹⁶ από τους K. Ong

et al., τόσο για την περίπτωση του κρυσταλλικού πυριτίου όσο και στην περίπτωση ακτινοβόλησης προαμορφοποιημένου πυριτίου, καθώς από τους 80 παλμούς και πάνω (και ειδικά για τις υψηλές τιμές πυκνότητας ενέργειας), η επιφανειακή αντίσταση αυξανόταν. Το γεγονός αυτό ίσως θα μπορούσε να αποδοθεί στην μείωση της ευκινησίας Hall, όπως αυτή έχει δείχτει από τους S. Earles et al.¹⁷ Μια ακόμα εξήγηση θα μπορούσε να είναι η εξέλιξη των εκτεταμένων ατελειών και της επακόλουθης υπερσυγκέντρωσης σημειακών ατελειών η οποία θα έδινε έναυσμα σε διαδικασίες αποενεργοποίησης¹⁸. Από την άλλη πλευρά οι K. Ong et al. αναφέρουν ότι η αύξηση του αριθμού των παλμών οδηγεί σε αποτελεσματικότερη εξάλειψη των ατελειών με αποτέλεσμα την μείωση των ρευμάτων διαρροής, όπως χαρακτηριστικά φαίνεται και από το διάγραμμα της εικόνας 9.9.

Ένα ακόμα ιδιαίτερα αξιοσημείωτο χαρακτηριστικό είναι ότι για την συνθήκη των 625 mJ/cm² - 50 παλμοί, η μετρηθείσα τιμή της επιφανειακής αντίστασης (680 Ω/□) είναι πάρα πολύ κοντά στην ελάχιστα θεωρητικά προβλεπόμενη τιμή, όπως αυτή προσδιορίζεται από τους F. Cristiano et al.¹⁹, η οποία είναι κοντά στα 550 Ω/□.

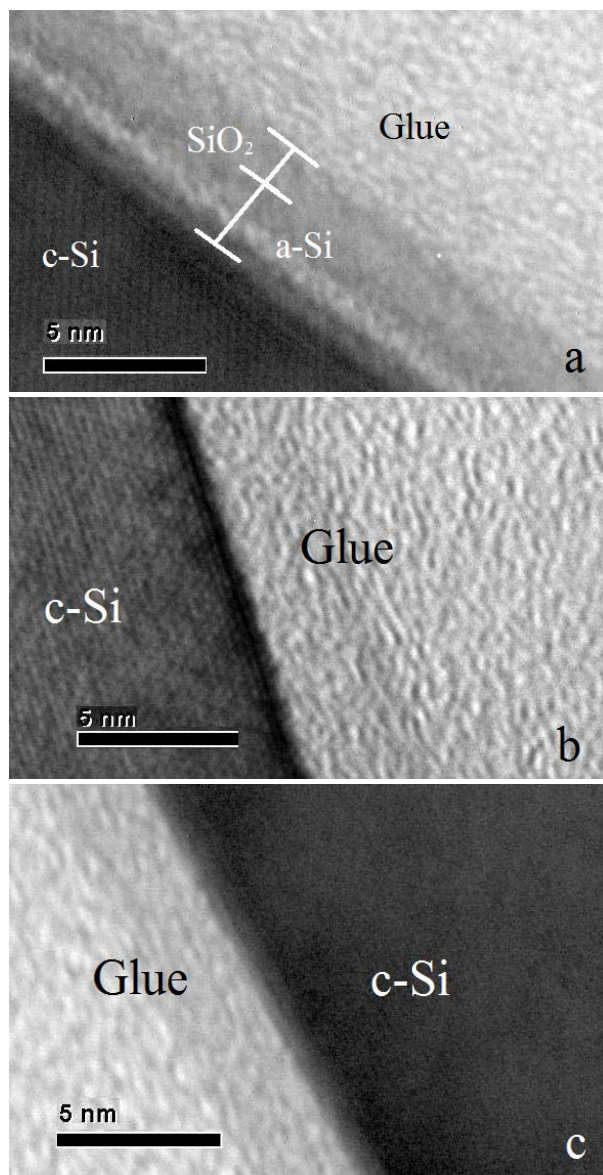


Εικόνα 9.9 Χαρακτηριστικές των ρευμάτων διαρροής για επαφές p⁺/n κρυσταλλικού πυριτίου για δείγματα που έχουν υποστεί ανόπτηση με 1 παλμό στα 0.6 mJ/cm² και 1, 10 και 100 παλμούς στα 0.5 mJ/cm² [K. Ong et al.]

9.8 Μορφολογικός χαρακτηρισμός με Μικροσκοπία Ηλεκτρονικής Διέλευσης (TEM)

Το επόμενο βήμα είναι ο μορφολογικός χαρακτηρισμός κατά τον εγκάρσιο άξονα του δισκίου με χρήση Μικροσκοπίας Ηλεκτρονικής Διέλευσης (TEM), με στόχο την διερεύνηση της επίδρασης της ακτινοβόλησης στην αποκατάσταση των κατεστραμμένων από την εμφύτευση περιοχών. Ο χαρακτηρισμός έγινε μέσω μιας διάταξης HRTEM, στο Ινστιτούτο Επιστήμης Υλικών από τον Δρ. Κωνσταντίνο Γιαννακόπουλο. Στις εικόνες 9.10 α, β και γ, δίνονται μικρογραφίες TEM για δείγματα 37N, που α) δεν έχουν υποστεί ανόπτηση (As implanted), και που έχουν υποστεί ανόπτηση σε 50 παλμούς με πυκνότητα ενέργειας β) 500 και γ) 562 mJ/cm². Από την σύγκριση των μικρογραφιών είναι προφανής η επίτευξη πλήρους επανακρυστάλλωσης της αμορφοποιημένης περιοχής (που ήταν της τάξης των 1.0 nm). Δεν παρατηρούνται ατέλειες εκτός προβεβλημένης εμβέλειας (EOR defects), καθώς και οποιαδήποτε άλλης μορφής εκτεταμένη ατέλεια. Φυσικά, δεν μπορούμε να αποκλείσουμε την ύπαρξη ατελειών οι οποίες να είναι μικρότερες από την διακριτική

ικανότητα της μικροσκοπίας. Η γκριζα περιοχή στο πάνω μέρος της μικρογραφίας είναι η κόλλα που χρησιμοποιείται για την συγκράτηση του δείγματος. Η γκριζα ζώνη εντός της άμορφης περιοχής και πλησίον της διεπιφάνειας άμορφου / κρυσταλλικού πυριτίου στην μικρογραφία του μη ανοπτημένου δείγματος, θεωρείται πως είναι τεχνητή (artifact). Οι εικόνες αυτές από το HRTEM, αποδεικνύουν την δυνατότητα επίτευξη υψηλών επιπέδων ανακρυστάλλωσης ακόμα και σε καθεστώς μη τήξης.



Εικόνα 9.10 Μικρογραφίες TEM κατά την εγκάρσια διεύθυνση ως προς το δείγμα για δείγματα 37N α) χωρίς ανόπτηση και ανόπτηση με 50 παλμούς στα β) 510 και γ) 575 mJ/cm². Στο δείγμα που δεν έχει υποστεί ακτινοβόληση μπορούμε να διακρίνουμε μια άμορφη περιοχή και ένα υπερκείμενο στρώμα SiO₂ πάχους 1.0 και 2.5 nm αντίστοιχα. Η ακτινοβολήση οδήγησε σε πλήρη επανακρυσταλλοποίηση των κατεστραμμένων περιοχών. Η σκοτεινή περιοχή θεωρείται ότι είναι τεχνητή.

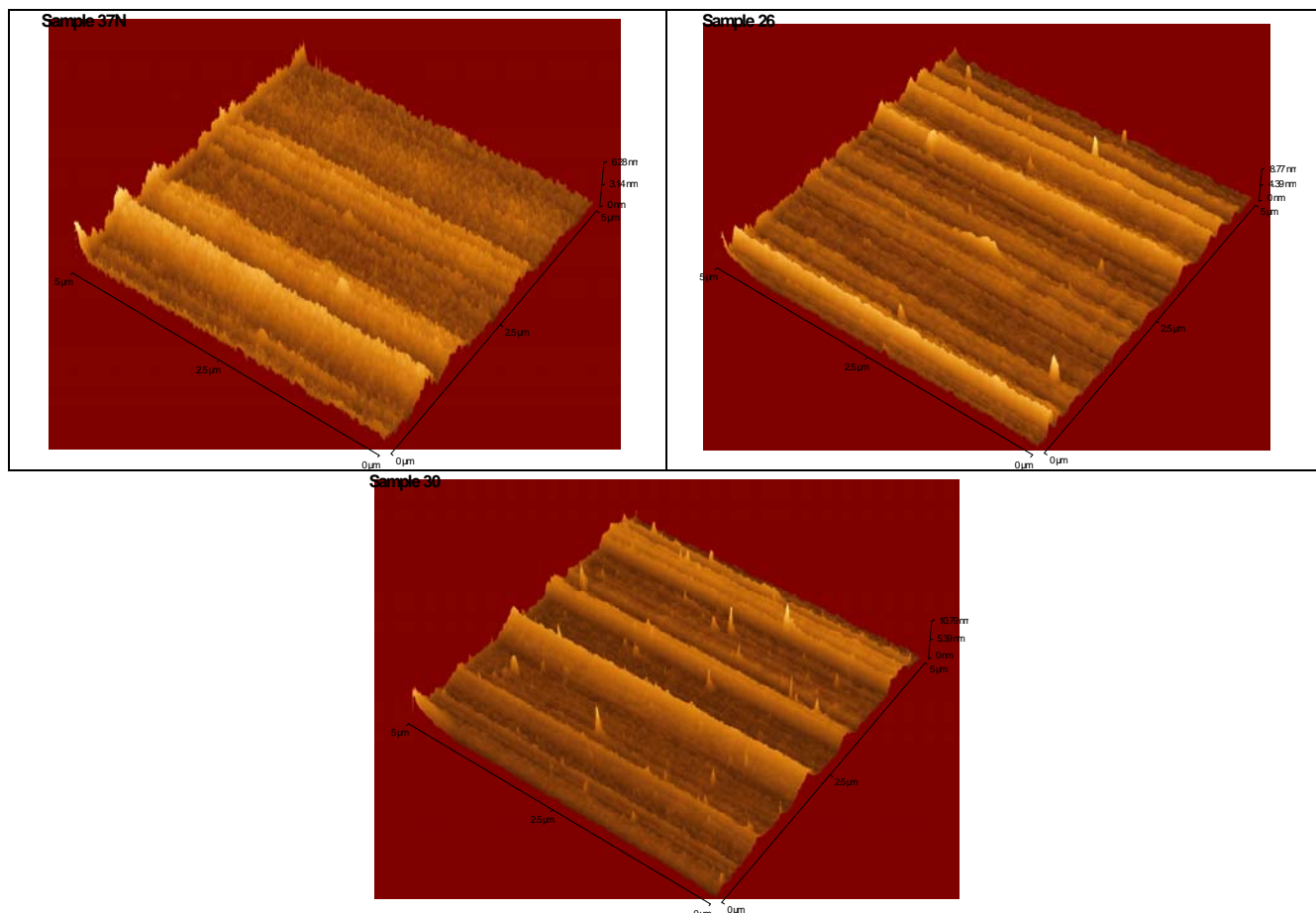
9.9 Μορφολογικός χαρακτηρισμός με Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (AFM)

Ο μορφολογικός χαρακτηρισμός των δειγμάτων που υπέστησαν ανόπτηση με Excimer KrF laser ολοκληρώθηκε με μετρήσεις της μέσης επιφανειακής τραχύτητας, για να διαπιστωθεί η επίδραση της ακτινοβόλησης όσον αφορά τις επιφανειακές ιδιότητες. Σε προηγούμενη μελέτη^{xxi},

είχε καταδειχτεί η σημαντική αλλοίωση που προκαλείται στην επιφάνεια του δείγματος λόγω του κύκλου τήξης – επαναστερεοποίησης. Οι μετρήσεις AFM έδειξαν ότι η αλληλεπίδραση της δέσμης laser με τα επιφανειακά στρώματα οδηγεί στην κατά τόπους εξάχνωση του πυριτίου, η οποία αποτυπώνεται στην δραστική αύξηση της μέσης επιφανειακής τραχύτητας από 0.79 nm του δείγματος αναφοράς (40N), στα 6.59 nm για τα 0.72 J/cm². Αντίθετα - και αυτό αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα της ανόπτησης σε καθεστώς μη τήξης - η τελευταία οδηγεί σε πολύ μικρότερες μεταβολές στην επιφανειακή τραχύτητα, όπως φαίνεται και από τον πίνακα 9.II.

Πίνακας 9.II RMS επιφανειακή τραχύτητα

| Πυκνότητα ενέργειας (mJ/cm ²) | Αριθμός παλμών | Μέση επιφανειακή τραχύτητα (nm) |
|---|----------------|---------------------------------|
| - | - | 0.84 |
| 375 | 1000 | 1.24 |
| 583 | 50 | 1.14 |



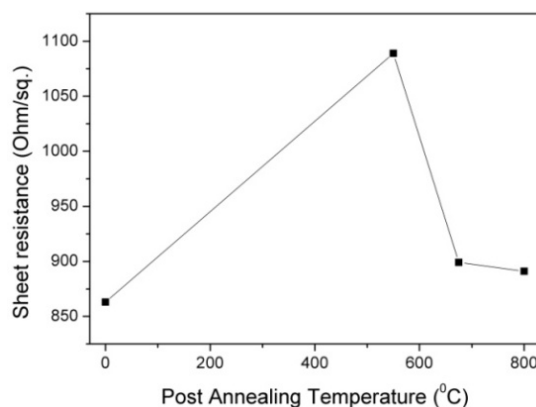
Εικόνα 9.11 Διακυμάνσεις της επιφανειακής τραχύτητας που προέκυψαν από μετρήσεις AFM, δειγμάτων 37N: α) χωρίς ανόπτηση β) ανόπτηση με 1000 παλμούς στα 375 mJ/cm² και γ) 50 παλμούς στα 583 mJ/cm².

Από τα δεδομένα του παραπάνω πίνακα προκύπτει ότι η ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης οδηγεί σε πολύ μικρές μεταβολές στην επιφανειακή μορφολογία (μέχρι και 0.4 nm). Επιπλέον, οι μετρούμενες τιμή της μέσης επιφανειακής τραχύτητας του δείγματος που ανοπτήθηκε με

μεγαλύτερο αριθμό παλμών είναι σχετικά αυξημένη σε σχέση με αυτή του δείγματος που ανοπτήθηκε με λιγότερους παλμούς έστω και αν η πυκνότητα ενέργειας του τελευταίου είναι σημαντικά υψηλότερη. Το γεγονός αυτό ίσως υποδηλώνει ότι ο αριθμός των παλμών διαδραματίζει πιο σημαντικό ρόλο σε σχέση με την πυκνότητα ενέργειας όσον αφορά την μεταβολή της μορφολογίας της επιφάνειας.

9.10 Μελέτη των φαινομένων απενεργοποίησης των προσμίξεων

Η ανάλυση μας όσον αφορά την ανόπτηση με χρήση Excimer KrF laser, ολοκληρώνεται με την διερεύνηση των φαινομένων απενεργοποίησης των προσμίξεων τα οποία μπορούν να εμφανιστούν κατά την διάρκεια των επόμενων θερμικών κύκλων που πρόκειται να υποστεί η επαφή κατά την διαδικασία κατασκευής του ολοκληρωμένου κυκλώματος. Για το σκοπό αυτό, χρησιμοποιήθηκαν τέσσερα δείγματα, τα οποία έχουν υποστεί ανόπτηση με 50 παλμούς στα 625 mJ/cm². Τα δείγματα αυτά επιλέχθηκαν καθώς παρουσιάζουν την χαμηλότερη τιμή επιφανειακής αντίστασης (680 Ω/□), και τα οποία είναι τα πλέον ενδιαφέροντα καθώς συνδυάζουν καλά ηλεκτρικά χαρακτηριστικά, με πολύ μικρή μετατόπιση του προφίλ. Με στόχο την αποφυγή απώλειας μέρους της εμφυτευθείσας δόσης κατά την διάρκεια της μετέπειτα θερμικής επεξεργασίας, εναποτέθηκε ένα υμένιο Si₃N₄ πάχους 50 nm επί της επιφάνειας του κάθε δοκιμίου. Η εναπόθεση έγινε σε θερμοκρασία 200°C. Στη συνέχεια, τα τρία από τα τέσσερα δείγματα υπεβλήθησαν σε θερμική ανόπτηση σε αδρανές περιβάλλον σε τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες, που ποικίλουν από 550 έως και 800°C για 30 λεπτά. Κατόπιν, το υμένιο Si₃N₄ αφαιρέθηκε με χρήση HF και τέσσαρες επαφές αλουμινίου εναποτέθηκαν επί της επιφάνειας, για την διενέργεια μετρήσεων επιφανειακής αντίστασης με χρήση της γεωμετρίας Van der Pauw. Στην Εικόνα 9.12 παρουσιάζεται η εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης καθώς η θερμοκρασία της μετέπειτα θερμικής επεξεργασίας αυξάνεται.



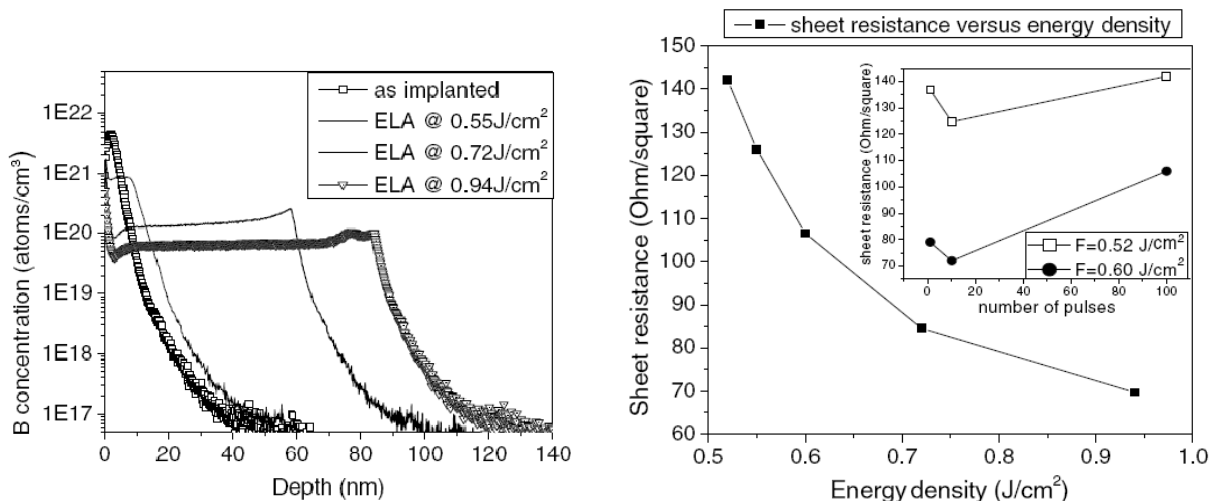
Εικόνα 9.12 Εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης καθώς η θερμοκρασία της μετέπειτα θερμικής επεξεργασίας αυξάνεται. Η επίδραση των φαινομένων απενεργοποίησης γίνεται σημαντική, περίπου στους 600°C.

Παρά την εναπόθεση του προστατευτικού υμενίου (capping layer) το οποίο μειώνει την απώλεια δόσης, η επακόλουθη αφαίρεση υμενίου προκάλεσε μια μικρή μείωση της δόσης, η οποία αντανάσσεται στην αύξηση της επιφανειακής αντίστασης στο δοκίμιο που δεν υπέστη θερμική ανόπτηση, από τα 680 στα 860 Ω/□. Η μακροχρόνια ανόπτηση σε αυτό το θερμοκρασιακό εύρος, οδηγεί σε σημαντική μετατόπιση των προφίλ, όπως επιβεβαιώνεται και από την προσομοίωση. Έτσι

λοιπόν η παρατηρούμενη - μικρότερη του αναμενομένου²⁰ - αύξηση της επιφανειακής αντίστασης, πρέπει να αποδοθεί σε ένα ισοζύγιο ανάμεσα στην μείωση της ηλεκτρικά ενεργής δόσης και στην αύξηση της ευκινησίας (ως αποτέλεσμα της ευρύτερης κατανομής του Βορίου λόγω της διάχυσης).

9.11 Αντιπαράβολή με δείγματα τα οποία έχουν ακτινοβοληθεί σε καθεστώς τήξης

Η διερεύνηση για την δημιουργία ρηχών επαφών ξεκίνησε από ακτινοβολήσεις σε καθεστώς τήξης²¹ σε δείγματα των οποίων οι ονομαστικές τιμές για την ενέργεια και την δόση ήταν 0.6keV και $6E15cm^{-2}$ αντιστοίχως. Η ανόπτηση σε καθεστώς τήξης οδηγούσε σε πολύ μικρές τιμές επιφανειακής αντίστασης (όπως προκύπτει και από το διάγραμμα α της εικόνας 9.13). Ταυτόχρονα, συνοδεύτηκε με έντονη εμφάνιση διάχυσης, πολύ πάνω από οποιοδήποτε ανεκτό όριο για τον σχηματισμό ρηχής επαφής, όπως φαίνεται και από το διάγραμμα 9.13.β. Το laser που χρησιμοποιήθηκε ήταν ένα Excimer KrF (στα 248 nm και διάρκεια παλμού=20 ns) και οι ακτινοβολήσεις διεξήχθησαν στο ΙΤΕ στο Ηράκλειο Κρήτης, από την Δρ, Ιωάννα Ζεργιώτη και τον Παναγιώτη Τερζή. Οι πολύ μικρές τιμές της επιφανειακής αντίστασης, φυσικά οφείλονται εν μέρει και στην πολύ μεγάλη τιμή της πραγματικά εμφυτευθείσας δόσης του συγκεκριμένου δείγματος ($1.65 E15cm^{-2}$) η οποία είναι τριπλάσια σε σχέση με αυτή του δείγματος που χρησιμοποιήθηκε στην μελέτη σε καθεστώς μη τήξης. Επιπλέον, οι μικρογραφίες TEM δείχνουν πλήρη ανακρυστάλλωση των κατεστραμμένων περιοχών, όπως αναμενόταν λόγω της εισαγωγής του κύκλου τήξης επαναστεροποίησης.



Εικόνα 9.13 Αποτελέσματα για ακτινοβολήση 100 παλμών σε καθεστώς τήξης σε δείγματα 40N (600 eV, $6E15 cm^{-2}$): α) Προφίλ συγκέντρωσης Βορίου. Παρατηρείται η πολύ έντονη μετατόπιση του προφίλ ακόμα και για πυκνότητες μόλις πάνω από το κατώφλι τήξης β) Εξέλιξη της επιφανειακής αντίστασης με το πυκνότητα ενέργειας. Παρατηρούμε την συνεχή μείωση της αυξανόμενης της πυκνότητας ενέργειας, η οποία οφείλεται εν μέρει και στην διαπλάτυνση των προφίλ κατανομής της συγκέντρωσης (και της επακόλουθης αύξησης της ευκινησίας λόγω ταπείνωσης του προφίλ). Οι εξαιρετικά μικρές τιμές επιφανειακής αντίστασης αποδίδονται κατά ένα μέρος και στην πολύ μεγάλη τιμή της πραγματικά εμφυτευθείσας δόσης του συγκεκριμένου δείγματος ($1.65E15 cm^{-2}$) η οποία είναι τριπλάσια σε σχέση με αυτή του δείγματος που χρησιμοποιήθηκε στην μελέτη σε καθεστώς μη τήξης (37N). Στο ένθετο διάγραμμα απεικονίζεται η αύξηση της επιφανειακής αντίστασης από κάποιο αριθμό παλμών και πέρα. Αυτή η τάση παρατηρείται και στα δείγματα που υπέστησαν ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης.

Τέλος, ενδιαφέρον παρουσιάζει το διαφορετικό σημείο τήξης που εμφανίζεται ανάμεσα στις δυο ακτινοβολήσεις. Για τα πειράματα σε καθεστώς τήξης, αυτό προσδιορίζεται περίπου στα 0.5 J/cm^2 , ενώ για αυτά σε καθεστώς μη τήξης είναι λίγο πάνω από τα 0.65 J/cm^2 . Η διαφορά αυτή (ο λόγος των κατωφλίων είναι της τάξης του 1.3) αποδίδεται σε δυο λόγους. Πρώτα και κυρία στην διαφορετική διάρκεια παλμού. Στις ακτινοβολήσεις σε καθεστώς μη τήξης η διάρκεια παλμού ήταν 38 ns , η οποία μεταφράζεται σε $\text{FWHM}=20 \text{ ns}$, ενώ στις ακτινοβολήσεις σε καθεστώς τήξης η διάρκεια παλμού ήταν 20 ns , και επομένως το $\text{FWHM}=11 \text{ ns}$. Η μικρότερη διάρκεια παλμού ισοδυναμεί με μεγαλύτερο ρυθμό εναπόθεσης της θερμότητας και μάλιστα εντονότερα αδιαβατικά²². Επιπλέον τα νέα δείγματα έχουν υποστεί μικρότερης έκτασης αμορφοποίηση λόγω των μικρότερων τιμών ενέργειας και δόσης (πάχος αμορφοποιημένης περιοχής 1.0 έναντι 2.5 nm). Καθώς οι θερμοκρασία τήξης αλλά και η ενθαλπία μετασχηματισμού φάσης είναι μεγαλύτερες στο κρυσταλλικό πυρίτιο σε σχέση με το άμορφο^{23 24 25}, η απαιτούμενη ενέργεια για την επίτευξη τήξης είναι μεγαλύτερη στα νέα πειράματα. Φυσικά, επειδή χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές διατάξεις ακτινοβολήσης, ένα μέρος της διαφοράς μπορεί να αποδοθεί και σε διαφορές στην βαθμονόμηση και μέτρηση των διαδικασιών ακτινοβολήσης.

9.12 Ανακεφαλαίωση

Η χρήση Excimer KrF laser σε καθεστώς μη τήξης και για διάρκεια ακτινοβολήσης τις μερικές δεκάδες nanosecond οδηγεί σε ιδιαίτερα ενθαρρυντικά αποτελέσματα για τον σχηματισμό υπερ-ρηχών επαφών ικανών να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις των CMOS μελλοντικών γενεών επεξεργαστών. Πιο συγκεκριμένα, η μέγιστη παρατηρούμενη μετατόπιση του προφίλ συγκέντρωσης δεν ξεπερνάει για κανένα συνδυασμό πυκνότητας ενέργειας / αριθμού παλμών τα 2 nm , ενώ ταυτόχρονα η κλίση τους είναι πολύ απότομη (μέση τιμή 2.4 nm ανά δεκάδα). Η ελάχιστη αυτή διάχυση είναι απόρροια της πολύ μικρής ποσότητας θερμικής ενέργειας και της πολύ μικρής διάρκειας της ανόπτησης, η οποία είναι μικρότερη από τους χαρακτηριστικούς χρόνους των φαινομένων που σχετίζονται με την διάχυση. Η αποτελεσματικότητα της μεθόδου γίνεται ακόμα πιο ένδηλη, αντιπαραβάλλοντας την παρατηρούμενη διάχυση με αυτή δειγμάτων που έχουν υποστεί ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης, όπου η ελάχιστη μετατόπιση του προφίλ ήταν κοντά στα 10 nm και η μέγιστη κοντά στα 80 nm . Από την άλλη πλευρά οι πολύ υψηλές θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στην επιφάνεια του υλικού σε συνδυασμό με την μεγάλο αριθμό παλμών οδηγεί σε πολύ υψηλά επίπεδα ενεργοποίησης, καθώς στην βέλτιστη συνθήκη ανόπτησης (625 mJ/cm^2 50 παλμοί) η μετρηθείσα τιμή της επιφανειακής αντίστασης ($680 \Omega/\square$) είναι πάρα πολύ κοντά στην ελάχιστα θεωρητικά προβλεπόμενη τιμή που είναι κοντά στα 550 . Το γεγονός αυτό έρχεται και σε συμφωνία με αποτελέσματα από την προσομοίωση σύμφωνα με τα οποία η συνθήκη αυτή είναι πολύ κοντά στο αναμενόμενο κατώφλι τήξης, το οποίο προσδιορίστηκε γύρω στα 650 mJ/cm^2). Όσον αφορά την επίδραση των επιμέρους παραμέτρων προκύπτει πως η πυκνότητα ενέργειας διαδραματίζει σημαντικότερο ρόλο τόσο όσον αφορά την μετατόπιση του προφίλ όσο και για την αύξηση των επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης, σε σχέση με τον αριθμό των παλμών. Μάλιστα, ενώ η αύξηση της πυκνότητας ενέργειας οδηγεί μονοτονικά σε μείωση της επιφανειακής αντίστασης, η επίδραση του αριθμού των παλμών δεν είναι αμφιμονοσήμαντη, και αυτό γιατί η ακτινοβολήσεις με μεγάλο αριθμό παλμών επέφεραν μια συστηματική αύξηση της επιφανειακής αντίστασης. Από

την άλλη πλευρά, οι μετρήσεις TEM κατέδειξαν την πλήρη ανακρυστάλλωση των αμορφοποιημένων από την εμφύτευση περιοχών καθώς και την απουσία εκτεταμένων ατελειών ή ατελειών εκτός προβεβλημένης εμβέλειας. Επίσης, οι μετρήσεις AFM κατέδειξαν την περιορισμένη αλλοίωση που επιφέρει η ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης στην επιφανειακή μορφολογία σε σχέση με την ανόπτηση πάνω από το κατώφλι τήξης, απόρροια της μερικής εξάχνωσης επιφανειακών στρωμάτων κατά τον κύκλο τήξης επαναστερεοποίησης.

Βιβλιογραφικές Αναφορές 9^ο κεφαλαίου

D. Bauerle “Laser Processing and Chemistry” εκδ. Springer 2000

O. Svelto “Αρχές των laser” 2^η έκδοση Εκδόσεις Συμμετρία

http://www.coherent.com/downloads/LPXpro_series_2008.pdf

¹ I.B. Khaibullin, V.V. Titov, E.I. Shtyrkov in: J. Gyulai, T. Lohner, E. Pastor (Eds.), Proc. Int. Conf. Ion Implantation, Budapest, pp. 212, 1973.

² G. Foti, E. Rimini, E. Vitali, M. Bertolotti, *Appl. Phys. Lett.* 14 (1977) 189.

³ X. Zhang, J.R. Ho, C.P. Grigoropoulos, *Int. J. Heat. Mass Transfer* 39 (1996) 91.

⁴ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* 124–125 (2005) 228–231

⁵ J. Venturini, M. Hernandez, G. Kerrien et al., *Thin Solid Films* 453–454 (2004) 145–149

⁶ V. Privitera, A. La Magna, G. Fortunato et al., *Mat. Sci. Eng. B* 114–115 (2004) 92–99

⁷ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* 114–115 (2004) 114–117

⁸ E.V. Monakhov, B.G. Svensson, M.K. Linnarsson et al., *Mat. Sci. Eng. B* 124–125 (2005) 232–234

⁹ F. Torregrosa, C. Laviron, F. Milesi et al., *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 237 (2005) 18–24

¹⁰ S. Whelan, V. Privitera, M. Italia et al., *Sci. Technol. B* 20 (2002) 644.

¹¹ Susan Earles, Mark Law, Kevin Jones, Somit Talwar et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 669 2001

¹² S. Earles, M. Law, K. Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp.* Vol. 610 (2000)

¹³ K.K. Ong et al., *Appl. Phys. Lett.* 89, 082101 (2006).

¹⁴ D. Lee, S. Baek, S. Heo et al., *Elect. Sol. State Lett.* 9 (1) G19-G21 (2006).

¹⁵ C. H. Poon, B. J. Cho, Y. F. Lu, M. Bhat, and A. See, *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 21, no. 2, pp. 706-709, 2003.

¹⁶ K.K. Ong, K.L. Pey, P.S. Lee et al., *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) 082101.

¹⁷ Susan Earles, Mark Law, Kevin Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 669 © 2001 Materials Research Society J4.1.1

¹⁸ J. A. Sharp, N.E.B. Covern, et al. *Appl. Phys. Lett.* 89, 192105 (2006).

¹⁹ F. Cristian, C. Cherkashin, P. Calvo, et al. / *Mat. Sci. and Eng. B* 114–115 (2004) 174–179

²⁰ D. Lee, S. Baek, S. Heo et al., *Electrochemical and Solid-State Letters*, 9 (1) G19-G21 (2006)

²¹ A. Florakis, D. Tsoukalas, I. Zergioti et al. *Nucl. Instr. And Meth. B* 253 13-17 (2006).

²² M. Hernandez, J. Venturini et al., *Appl. Surf. Sci.* 208-209, 345-351 (2003).

²³ R.F. Wood and G.E. Jellison, Jr., Vol. 23 Academic Press, New York, 1984 ch. 4.

²⁴ M. Toulemonde, R. Heddache et al., Strasbourg, Rapport CRN-CPR 83-18 (1983).

²⁵ E.P. Donovan, F. Speapen et al., *Appl. Phys. Letters* 42 (1983) 698.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 10

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ EXCIMER LASER ΜΕ ΤΟ ΠΥΡΙΤΙΟ

10.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό, θα παρουσιαστούν συνολικά, τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας του Excimer laser με το πυρίτιο, τόσο όσον αφορά την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής, όσο και της επίδρασης της ανόπτησης στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Πρέπει να τονιστεί, ότι αν και η προσπάθεια προσομοίωσης της ανόπτησης με KrF laser, παρουσιάζεται τελευταία, στην πραγματικότητα προηγήθηκε αυτής για την πρόβλεψη της ανόπτησης με CO₂ laser, καθώς ήταν σαφώς λιγότερο περίπλοκη, και πιο κοντά στα προκαθορισμένα μοντέλα επίλυσης που προσέφερε το λογισμικό που είχαμε στην διάθεση μας (Synopsys Sentaurus Process). Θα ξεκινήσουμε την περιγραφή, από το κομμάτι που πραγματεύεται τα αποτελέσματα της ανόπτησης, όσον αφορά την εισαγωγή των θερμοκρασιακών προφίλ μέσα στον όγκο του υλικού.

Η δυνατότητα ακριβούς πρόβλεψης της επίδρασης της ακτινοβολίας πυριτίου με laser όσον αφορά την εξέλιξη των θερμοκρασιακών κατανομών που εισάγονται στον όγκο του υλικού είναι ιδιαίτερα κρίσιμη, και αυτό για δυο λόγους:

α) επιτρέπει τον προσδιορισμό εκ των προτέρων της μέγιστης θερμοκρασίας που αναπτύσσεται στην ακτινοβολούμενη περιοχή, ανά συνθήκη πυκνότητας ενέργειας. Με τον τρόπο αυτό, αφενός είναι δυνατός ο καλύτερος σχεδιασμός των πειραμάτων, έτσι ώστε να μειωθεί ο αριθμός των ακτινοβολήσεων που απαιτείται για την επίτευξη του επιθυμητού αποτελέσματος και αφετέρου θα διασφαλιστεί ότι αυτές θα διεξαχθούν σε καθεστώς μη τήξης έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθούν τα ανεπιθύμητα φαινόμενα διάχυσης

β) εφόσον είναι γνωστή η εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας του δοκιμίου, είναι δυνατή η εισαγωγή της ως δεδομένο στους υπολογισμούς για την επίδραση της ακτινοβολίας στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων, καθώς και της αποκατάστασης των κατεστραμμένων από την εμφύτευση περιοχών, είτε αυτοί γίνουν με χρήση συνεχών είτε KMC τεχνικών.

Στα πλαίσια της συνολικής διερεύνησης απαιτείται η προσομοίωση της αλληλεπίδρασης του πυριτίου με δυο τύπους laser, το KrF Excimer στα 248nm και το CO₂ στα 10.6μm. Λόγω των διαφορετικών χαρακτηριστικών των παλμών των δυο laser, αλλά και κυρίως των διαφορετικών μηχανισμών απορρόφησης των ακτινοβολιών από το πυρίτιο, είμαστε υποχρεωμένοι να ακολουθήσουμε δυο τελείως διαφορετικές στρατηγικές για την προσομοίωση, έχοντας ως μόνο κοινό χαρακτηριστικό την χρήση του ίδιου λογισμικού, του Sentaurus Process, από την Synopsys. Στον πίνακα 10.1 συνοψίζονται τα βασικότερα χαρακτηριστικά που πρέπει να ληφθούν υπόψη κατά την κατάστρωση των υπολογισμών. Υπενθυμίζεται, ότι τα αποτελέσματα από την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης του CO₂ laser με το πυρίτιο, παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 8. Τα χαρακτηριστικά, παρουσιάζονται από κοινού ξανά, για λόγους σύγκρισης.

Πίνακας 10.1 Βασικά χαρακτηριστικά προσομοίωσης των δυο ειδών laser

| | KrF Excimer | CO ₂ |
|------------------------------------|-------------------|--|
| Συντελεστής απορρόφησης | Σταθερός | Εξάρτηση από T και συγκέντρωση φορέων N(x,T) |
| Χωρική κατανομή παλμού f(x,y) | Σταθερή (top-hut) | Γκαουσιανή |
| Χρονική κατανομή παλμού q(t) | Γκαουσιανή | Σταθερή (top-hut) |
| Μονοδιάστατη αντιμετώπιση | Ναι | Όχι |
| Επιφανειακή ακτινοβολία | Ναι | Όχι |
| Προθέρμανση δείγματος | Όχι | Ναι (600-650°C) |
| Μέσο οπτικό μήκος απορρόφησης (μm) | 0.0055 | Εξαρτάται από N και T |
| Μήκος θερμικής διάχυσης (μm) | 0.90 | Μερικές εκατοντάδες (ανάλογα με την διάρκεια του παλμού) |

Όπως θα αναλυθεί και στην συνέχεια, οι προκαθορισμένες στρατηγικές επίλυσης προβλημάτων αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας laser και πυριτίου στο λογισμικό Sentaurus Process, απηχούν τα χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας με χρήση KrF Excimer, καθιστώντας έτσι την προσπάθεια προσομοίωσης της διαδικασίας σαφώς ευκολότερη σε σχέση με αυτή της ακτινοβολίας με laser διοξειδίου του άνθρακα. Για το λόγο αυτό, η προσπάθεια προσομοίωσης ξεκίνησε από το KrF Excimer laser, με στόχο η εμπειρία που στο μεταξύ θα αποκομιζόταν να χρησιμοποιηθεί στους υπολογισμούς της αλληλεπίδρασης του CO₂ με το πυρίτιο. Θα ξεκινήσουμε την περιγραφή της προσπάθειας ξεκινώντας από μια γενική περιγραφή του τρόπου με τον οποίο το Sentaurus προσομοιώνει την ανόπτηση με laser και στη συνέχεια θα περιγράψουμε τα βασικά χαρακτηριστικά της στρατηγικής που ακολουθήσαμε στους υπολογισμούς και θα δώσουμε τα κυριότερα αποτελέσματα όσον αφορά την πρόβλεψη των θερμοκρασιακών κατανομών που εισήχθησαν στον όγκο του πυριτίου λόγω της ακτινοβολίας.

10.2 Γενική περιγραφή της ανόπτησης με laser με τη χρήση του Sentaurus Process

Το λογισμικό Sentaurus Process της Synopsys, από την έκδοση 2007.03 και μετά, παρέχει τη δυνατότητα της προσομοίωσης ανόπτησης τόσο με χρήση laser όσο και με flash. Μέχρι τότε, μόνο οι συμβατικές διαδικασίες ανόπτησης μέσω φούρνου μπορούσαν να μελετηθούν. Τα μοντέλα αυτά συμπληρώνονται και βελτιώνονται σε κάθε έκδοση από κει και πέρα, καθώς στην πορεία διαπιστώθηκαν αρκετά προβλήματα, πολλά εκ των οποίων ίσως δεν έχουν ξεπεραστεί ούτε και στην πλέον πρόσφατη έκδοση (2010).

Για την επίλυση του προβλήματος ακολουθήσαμε την αριθμητική προσέγγιση η οποία στηρίζεται στην δημιουργία ενός κατάλληλου πλέγματος σημείων με κατάλληλες οριακές συνθήκες και στην επίλυση ενός συστήματος χρονικά εξαρτώμενων μερικών διαφορικών εξισώσεων σε κάθε σημείο-κόμβο. Φυσικά, η μέθοδος Monte Carlo δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί λόγω της φύσεως του προβλήματος.

Το πρώτο βήμα είναι η κατασκευή του πλέγματος, το οποίο αφενός μεν θα πρέπει να περιγράφει ρεαλιστικά το υπό εξέταση χωρίο, και αφετέρου να είναι υπολογιστικά «οικονομικό». Με

τον όρο οικονομικό εννοούμε να μην περιέχει περιττά σημεία που όχι μόνο δεν προσφέρουν στην επίτευξη της σύγκλισης αλλά και επιβαρύνουν με πράξεις τόσο την μνήμη όσο και τον επεξεργαστή. Ένα τέτοιο πλέγμα θα πρέπει να πληροί τις παρακάτω προϋποθέσεις:

α) να είναι πυκνότερο κοντά στην επιφάνεια και πιο αραιό προς το βάθος του δισκίου. Αυτό επιβάλλεται από το γεγονός ότι όλες οι κρίσιμες διαδικασίες απορρόφησης και διάχυσης λαμβάνουν χώρα στα πρώτα 50-100 nm. Πρέπει λοιπόν το πλέγμα να είναι αρκετά πυκνό κοντά στην επιφάνεια για να αντανακλά τις μεγάλες βαθμίδες συγκέντρωσης και θερμοκρασίας, έτσι ώστε να επιτευχθεί σύγκλιση. Αντίθετα, από ένα σημείο και κάτω, η πυκνωση δεν βοηθά πουθενά καθώς οι βαθμίδες έχουν ελαττωθεί δραματικά ή έχουν εξαλειφθεί.

β) το πάχος του δισκιδίου να ισούται με το πραγματικό, καθώς έχειδειχτεί¹ ότι μικρότερα πάχη από το πραγματικό μπορεί να οδηγήσουν σε εσφαλμένα αποτελέσματα λόγω επίδρασης στις αρχικές συνοριακές συνθήκες στο κάτω μέρος του χωρίου.

γ) το πλέγμα να είναι δισδιάστατο καθώς προς το παρόν, το laser μοντέλο του Sentaurus Process δεν υποστηρίζει επίλυση σε τρεις διαστάσεις.

Με βάση τα παραπάνω, κατασκευάζουμε ένα αρχικό πλέγμα, το οποίο ελέγχεται σχολαστικά, πυκνώνοντας και αραιώνοντας το κατά τόπους με στόχο την εύρεση της χρυσής τομής ανάμεσα στην επίτευξη σύγκλισης και τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Επιπλέον, το λογισμικό μας παρέχει την δυνατότητα για μετέπειτα επεξεργασία του πλέγματος, έτσι ώστε να διορθώσουμε τυχόν ατέλειες. Η φύση του δικού μας προβλήματος δεν επέβαλλε ιδιαίτερες απαιτήσεις στην κατασκευή του πλέγματος (π.χ. εξεζητημένες γεωμετρίες, ανάγκη για τρισδιάστατο πλέγμα ή διεπιφάνειες μεταξύ διαφορετικών υλικών).

Η βασική εξίσωση που επιλύει το μοντέλο είναι η εξίσωση της διάδοσης θερμότητας. Για να ληφθεί υπόψη η επίδραση της ακτινοβολίας θεωρείται ως μια πηγή θερμότητας που εισάγεται στην επιφάνεια του υλικού. Ταυτόχρονα όμως λύνονται και πέντε ακόμα εξισώσεις διάχυσης (five stream model), όπως αυτές περιγράφονται στο κεφάλαιο 3.

Το όνομα της λύσης για την τοπική θερμοκρασία είναι HeatTempK και δίνεται σε βαθμούς Kelvin. Το μοντέλο laser ενεργοποιείται μέσω της σήμανσης της λογικής παραμέτρου laser στην εντολή diffuse. Για παράδειγμα η εντολή:

```
diffuse temperature=500 time=1(ms) laser
```

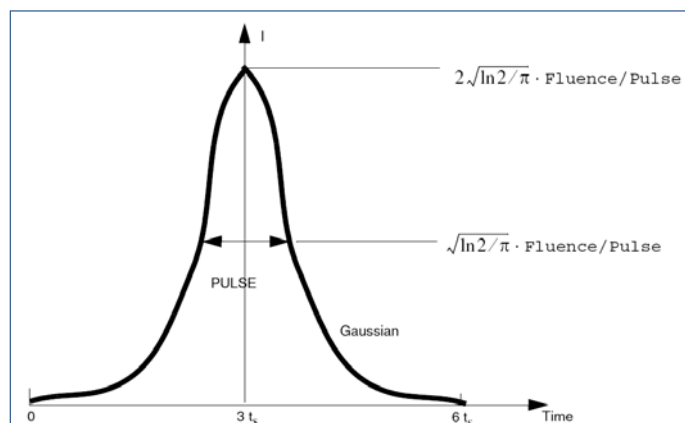
ενεργοποιεί το μοντέλο laser, θέτοντας ως οριακή συνθήκη την θερμοκρασία 500K στην επιφάνεια του υλικού και ως χρόνο στον οποίο θα προσομοιωθεί η εξέλιξη του φαινομένου το 1ms.

Το προκαθορισμένο μοντέλο για τον παλμό του laser θεωρεί χρονική εξέλιξη γκαουσιανής μορφής και ομοιόμορφη χωρική κατανομή. Η ένταση του παλμού του σχήματος 10.1 δίνεται από τις σχέσεις:

$$I = \frac{Fluence}{\sqrt{2\pi}t_s} \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2t_s^2}\right), \quad (10.1)$$

$$t_s = \frac{Pulse}{2\sqrt{2\ln 2}}, \quad (10.2)$$

όπου Pulse είναι το Full-Width Half-Maximum (FWHM) χρονικό διάστημα, ενώ η παράμετρο Fluence είναι η πυκνότητα ενέργειας ειπεφρασμένη σε J/cm².



Εικόνα 10.1 Ένταση του laser συναρτήσει του χρόνου σύμφωνα με το μοντέλο επίλυσης του Sentaurus Process

Επίσης, το πρόγραμμα παρέχει την δυνατότητα στον χρήστη να καθορίσει αυτός ένα προφίλ έντασης της δέσμης σύμφωνα με την εντολή IntensityProfile (J/cm²sec). Ο χρόνος ανόπτησης δίνεται από την παράμετρο HeatingTime.

Στον πίνακα 10.II αναφέρουμε τις βασικές παραμέτρους επίλυσης, με την επισήμανση KrF, CO₂ και Both ανάλογα για την προσομοίωση ποιού laser χρησιμοποιήθηκαν. Οι τιμές σε παρένθεση δηλώνουν τις προκαθορισμένες (default) τιμές.

Πίνακας 10.II Βασικές παράμετροι επίλυσης

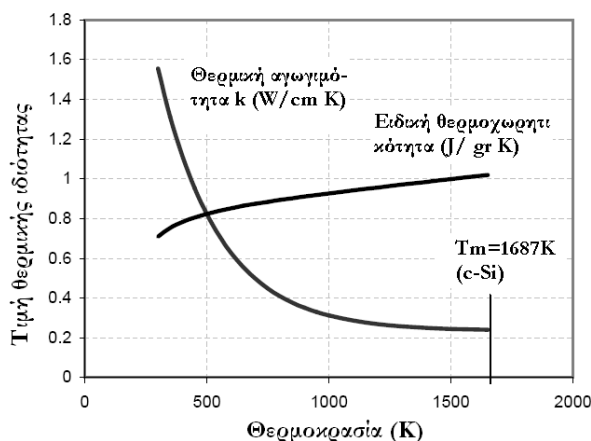
| Παράμετρος | Περιγραφή | Laser |
|--|---|-----------------|
| Heat Fluence (J/cm ²) | Πυκνότητα ενέργειας (15.0) | KrF |
| Heat Pulse (msec) | Καθορίζει την διάρκεια του Full Width at Half Maximum (FWHM) για Γκαουσιανό παλμό (0.3) | KrF |
| Heat BeamWidth (μm) | Εύρος δέσμης laser (70.0) | CO ₂ |
| Heat BeamFadeDistance (μm) | Fading δέσμης λόγω περίθλασης(1.0μm) | CO ₂ |
| Heat BeamIntensity (J/cm ² s) | Πυκνότητα έντασης της δέσμης (0.0) | CO ₂ |
| Heat IntensityProfile “έκφραση” | Έκφραση για το προφίλ της έντασης της δέσμης. | CO ₂ |
| Heat ExtendBottom (0 ή 1) | Δηλώνει ότι το κάτω μέρος της δομής θα επεκταθεί έως την τιμή wafer thickness | Both |
| Heat WaferThickness (μm) | Δηλώνει το κάτω άκρο του πλέγματος μέχρι το οποίο θα γίνουν υπολογισμοί (700.0) | Both |
| Heat SideExtension (μm) | Πλευρική επέκταση του πεδίου | CO ₂ |
| Heat ReflectSide (Left ή Right ή None) | Περιγράφει το σε ποιά πλευρά θα γίνει τυχόν πλευρική επέκταση | CO ₂ |
| Heat HeatingTime (msec) | Καθορίζει τον χρόνο για τον οποίο η πηγή laser είναι ανοιχτή | |
| Heat MaxTimeStep (seconds) | Καθορίζει το μέγιστο χρονικό βήμα για την επίλυση της εξίσωση θερμοτήτας (600) | Both |
| Heat TimeSampleSize | Καθορίζει τον αριθμό των χρονικών βημάτων κατά την διάρκεια της ακτινοβολήσης (20.0) | Both |
| Heat UpdateHeatRate (0 ή 1) | Ανανέωση του ρυθμού θέρμανσης σε κάθε χρονικό βήμα (0.0) | Both |

Οι παραπάνω παράμετροι σχετίζονται με την πηγή του laser, την επίλυση της διαφορικής καθώς και διάφορες τεχνικές για την επέκταση του υπολογιστικού πεδίου έτσι ώστε να εξοικονομηθούν υπολογιστικοί πόροι.

Στη συνέχεια ορίζονται οι οπτικές και θερμικές παράμετροι του πυριτίου για τους δυο διαφορετικούς τύπους laser, ενώ στο σχήμα 10.2 παριστάνονται γραφικά οι συντελεστές θερμικής αγωγιμότητας και ειδικής θερμοχωρητικότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Πίνακας 10.III Τιμές ιδιοτήτων^{2 3 4 5}

| Παράμετρος | KrF | CO ₂ |
|---|---|--|
| Απορρόφηση α (cm ⁻¹) | 1.65-1.7×10 ⁶ | $a(N, T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2} [N + n_i(T)]$ $n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right)$ |
| Πυκνότητα Si (g/cm ³) | 2.32 | |
| Ειδική θερμοχωρητικότητα (J/Kg K) | 1000(0.81+1.3×10 ⁻⁴ T-1.26×10 ⁻⁴ T ²) | |
| Θερμική αγωγιμότητα (W/cm K) | 0.235+4.45exp(-T/247) | |
| Ανακλαστικότητα | 0.66+1.8×10 ⁻⁵ T | 0.30 |



Εικόνα 10.2 Εξάρτηση των συντελεστών θερμικής αγωγιμότητας και ειδικής θερμοχωρητικότητας από την θερμοκρασία

Η πηγή θερμότητας δίνεται από μια γκαουσιανής μορφής κατανομή, η οποία συνοδεύεται από τις παραμέτρους Pulse και Fluence. Εναλλακτικά, μπορεί να καθοριστεί από τον χρήστη μέσω της έκφρασης IntensityProfile (όπως στην περίπτωση του CO₂ laser). Η κορυφή της έντασης επέρχεται μετά από 3 τυπικές αποκλίσεις του παλμού. Μετά από 6 τυπικές αποκλίσεις η πηγή του laser σταματάει να λειτουργεί (βλ. Σχήμα 10.1).

Οι απώλειες ενέργειας λόγω της ακτινοβολίας Planck και της θερμότητας που διαδίδεται στο περιβάλλον είναι πολύ μικρές σε σχέση με την ολική ενέργεια της δέσμης laser, και ως εκ τούτου δεν λαμβάνονται υπόψιν στον όρο της πηγής ($\Delta Q_{loss} < 10^{-3} Q_{pulse}$)^v. Η ολική θερμοκρασία, η

οποία υπολογίζεται από τον μέσο όρο των τοπικών κατανομών θερμοκρασίας, χρησιμοποιείται για την επίλυση των εξισώσεων της διάχυσης. Δίνεται δε, από την σχέση:

$$T_{global} = \frac{\sum_i^n V_i T_i}{\sum_i^n V_i}, \quad (10.3)$$

όπου V_i και T_i είναι ο όγκος και η τοπική θερμοκρασία σε κάθε κόμβο του υπό προσομοίωση χωρίου.

10.3 Περιγραφή της διαδικασίας προσομοίωσης της ακτινοβόλησης με Excimer KrF laser

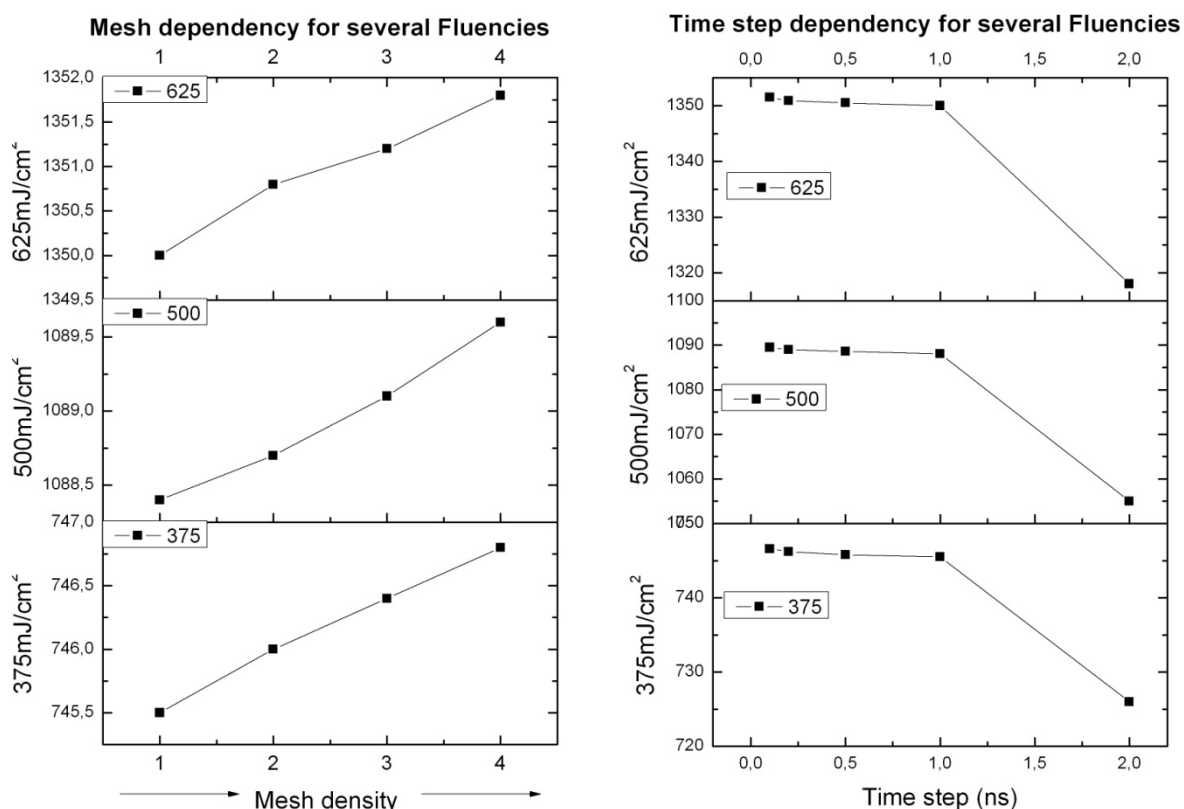
Επειδή τα προκαθορισμένα μοντέλα του Sentaurus Process περιγράφουν τα βασικά χαρακτηριστικά της ανόπτησης με Excimer (γκουσιανή χρονική εξέλιξη παλμού και ομοιόμορφη, top-hut κατανομή ενέργειας), η κατασκευή του κυρίως σκέλους του αλγορίθμου δεν παρουσίασε ιδιαίτερες δυσκολίες. Η γκουσιανή μορφή του παλμού εισάγεται άμεσα προσδίδοντας μόνο την διάρκεια και την πυκνότητα ενέργειας, με τον αλγόριθμο να προβαίνει στις κατάλληλες κανονικοποιήσεις και αναγωγές, έτσι ώστε να δημιουργηθεί ένας παλμός, με τα χαρακτηριστικά που δίνονται στην Εικόνα 10.1. Στην συνέχεια, θα αναφερθούμε στις βασικότερες παραμέτρους που διερευνήθηκαν έως ότου καταστεί δυνατή η προσομοίωση της διαδικασίας ακτινοβόλησης.

I. Διερεύνηση της εξάρτησης από το πλέγμα

Το πρώτο στάδιο περιελάμβανε την δημιουργία του πλέγματος και την διενέργεια ελέγχων για την εύρεση της βέλτιστης πυκνώσεως του, σε όρους σύγκλισης και υπολογιστικής ταχύτητας. Η βασική λογική που ακολούθηθηκε, στηρίχθηκε στην δημιουργία ενός πλέγματος με μεταβλητή πυκνότητα κατά βάθος, όπου στις πρώτες δεκάδες νανόμετρα θα ήταν εξαιρετικά πυκνό (έως και 0.25 nm απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών γραμμών του πλέγματος, και στη συνέχεια όλο και πιο αραιό (μέχρι και τα 700 μm, όπου πλέον η απόσταση μεταξύ δυο διαδοχικών πλεγματοειδών γραμμών θα έφτανε και τα 5 μm, αφού εκεί πλέον τα οπτικά και θερμικά φαινόμενα θα ήταν πρακτικά αμελητέα. Στην Εικόνα 10.3 α δίνονται τιμές της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας που επιτυγχάνονται για τέσσερις διαφορετικές στρατηγικές πυκνώσεις του πλέγματος κατά την κατακόρυφη διεύθυνση, και για τρεις διαφορετικές συνθήκες πυκνότητας ενέργειας. Καθώς η κατανομή της πυκνότητας ενέργειας ήταν top-hut, και τα φαινόμενα πλευρικής διάδοσης της θερμότητας ήταν πρακτικά αμελητέα (π.χ. το μέσο μήκος θερμικής διάχυσης ήταν της τάξης των 0.90 μm λόγω των εξαιρετικά μικρών χρόνων ακτινοβόλησης), πρακτικά η επίλυση του προβλήματος γινόταν αυτοματοποιημένα από το λογισμικό σε μια διάσταση και κατόπιν γινόταν αναγωγή σε δυο, χάριν οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων. Το γεγονός αυτό οδήγησε στην δραστηκή μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Δοκιμές που έγιναν στη συνέχεια με προσομοίωση του φαινομένου σε δυο διαστάσεις κατέδειξε ότι οι διαφορές σε όρους της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας που επιτυγχάνεται ήταν της τάξης των 1-2⁰C, σε συμφωνία με την βιβλιογραφία^v. Παρόλα αυτά, έγινε και μια διερεύνηση για την ύπαρξη τυχόν εξάρτησης από την

πύκνωση του πλέγματος κατά τον οριζόντιο άξονα, η οποία φυσικά κατέδειξε την πλήρη ανεξαρτησία του προβλήματος από αυτή την παράμετρο.

Όπως είχε δείχτει και στο κεφάλαιο 4 που πραγματεύεται τα φαινόμενα αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας laser με την ύλη, η πολύ μικρή διάρκεια παλμού (FWHM=20 ns) οδηγεί σε μια σχετικά, αδιαβατικής φύσεως θέρμανση του υλικού. Το άθροισμα $I_a + I_T$ είναι πολύ μικρότερο από το πλάτος του τετραγωνικού spot του laser (5 mm) οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε την ακτινοβολή ως επιφανειακή, και να την αναπαραστήσουμε με μια πηγή θερμότητας που δρα στην επιφάνεια. Για το κρυσταλλικό πυρίτιο αυτή η προσέγγιση ικανοποιείται για laser με μήκος κύματος μικρότερο από 0.5 μm και διάρκεια παλμού κάτω από 10^{-7}s . Επιπλέον, η χρήση ομογενοποιητή εισάγει ένα ομοιόμορφο προφίλ πυκνότητας ενέργειας επί της ακτινοβολούμενης περιοχής. Το γεγονός αυτό, σε συνδυασμό με το πολύ μικρό μήκος πλευρικής θερμικής διάχυσης σε σχέση με το πλάτος του τετραγωνικού spot του laser (0.9 μm σε σχέση με 5.0 mm, όπως προαναφέρθηκε) οδηγεί στην εισαγωγή παράλληλων ισόθερμων καμπυλών μέσα στον όγκο του υλικού, επιτρέποντας την μονοδιάστατη αντιμετώπιση του προβλήματος.



Εικόνα 10.3 Διερεύνηση της επίτευξης της σύγκλισης α) από την πύκνωση του πλέγματος (1: πιο αραιό έως 4: πιο πυκνό) και β) από το χρονικό βήμα για τρεις διαφορετικές πυκνότητες ενέργειας (375, 500 και 625 mJ/cm^2)

II. Εξάρτηση από το χρονικό βήμα

Στη συνέχεια, πραγματοποιήσαμε δοκιμές για την εύρεση του κατάλληλου χρονικού βήματος, πάλι με γνώμονα την επίτευξη σύγκλισης με το ελάχιστο δυνατό υπολογιστικό κόστος. Βρέθηκε ότι οι τιμές 0.5 και 1 nsec για ελάχιστο και μέγιστο χρονικό βήμα αντίστοιχα, ήταν οι

πλέον αποδοτικές, υπό την έννοια ότι έδιναν τα ίδια αποτελέσματα όσον αφορά την μέγιστη θερμοκρασία με τις προσομοιώσεις με χρονικά βήματα 0.25-0.5 ns, 0.1-0.2 ns και 0.05-0.1 ns, με απόκλιση μόλις 1-2°C. Πρακτικά, οι υπολογισμοί με βήματα 0.05-0.1ns διαρκούσαν περίπου 12-15 φορές περισσότερο, αλλά έδιναν σχεδόν τα ίδια αποτελέσματα. Το γεγονός αυτό κατέστησε δυνατή την μετέπειτα εκτέλεση προσομοιώσεων με 10, 50 και 100 παλμών για την μελέτη της επίδρασης της ακτινοβολήσεως με πολλούς παλμούς στην κινητική των προσμίξεων, καθώς στην αντίθετη περίπτωση η διαδικασία αυτή θα ήταν υπερβολικά χρονοβόρα. Από την άλλη πλευρά, η υιοθέτηση μεγαλύτερου χρονικού βήματος (π.χ. 2-4 ns), οδηγούσε σε λανθασμένα αποτελέσματα καθώς τα διαστήματα μεταξύ διαδοχικών υπολογισμών πλέον γίνονταν αρκετά μεγάλα για να παρακολουθηθούν αποτελεσματικά την εξέλιξη του φαινομένου. Φυσικά πρέπει να τονιστεί ότι μέσω της εντολής Heat TimeSampleSize, είναι δυνατή η περαιτέρω μείωση των χρονικών διαστημάτων ανάμεσα στα οποία εκτελούνται οι υπολογισμοί επίλυσης της εξίσωσης της θερμότητας, καθώς αυξάνονται και οι διαδοχικές επαναλήψεις (iterations), που εκτελούνται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση. Τα αποτελέσματα της διερεύνησης για την ανεξαρτησία από το χρονικό βήμα για τρεις διαφορετικές συνθήκες πυκνότητας ενέργειας, απεικονίζεται στο διάγραμμα 10.3 β.

III. Έκφραση συντελεστή απορρόφησης και των θερμικών ιδιοτήτων

Η πολύ μεγάλη τιμή του συντελεστή απορρόφησης εγγυάται ότι η φωτεινή ενέργεια θα μετατραπεί σε θερμότητα μέσα στα πρώτα 5.5 nm. Στη συνέχεια η θερμότητα αυτή δεν θα διεισδύσει σε μεγάλο βάθος, αφού το μέσο μήκος θερμικής διάχυσης είναι γύρω στα 900 nm. Επομένως η κατανομή ενέργειας με το βάθος του υλικού θα είναι φθίνουσα εκθετική, λόγω της μορφής της έκφρασης της εξασθένισης της δέσμης μέσα στον όγκο του υλικού (νόμος Beer Lambert), ενώ παρόμοια μορφή (αλλά φυσικά πιο διευρυμένη) θα έχει και η κατανομή της θερμοκρασίας σε κάθε χρονική στιγμή.

Επιπλέον, η σταθερή τιμή του συντελεστή απλοποιεί σημαντικά την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης διάχυσης της θερμότητας. Φυσικά, ακόμα και με το a σταθερό, η εξάρτηση όλων σχεδόν των παραμέτρων που εμπεριέχονται στην εξίσωση από την θερμοκρασία, δεν επιτρέπει την αναλυτική επίλυση της. Από την άλλη πλευρά, δεν απαιτείται η δημιουργία ειδικών εκφράσεων που να δίνουν την εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης από την θερμοκρασία και κυρίως από την κατανομή των προσμίξεων. Τέλος, η υψηλή τιμή του συντελεστή απορρόφησης ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου επιτρέπει την διενέργεια ακτινοβολήσεων σε θερμοκρασία δωματίου χωρίς την χρήση υμενίων που να απορροφούν την ακτινοβολία (absorbing layers).

Όσον αφορά τις υπόλοιπες ιδιότητες του υλικού – υποστρώματος (πυκνότητα, συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας και ειδική θερμοχωρητικότητα), αυτές δίνονται μέσω κατάλληλων εκφράσεων οι οποίες λαμβάνουν υπόψη την εξάρτηση της εκάστοτε ιδιότητας από την εσωτερική μεταβλητή της θερμοκρασίας σε κάθε κόμβο, της HeatTempK (σε βαθμούς Kelvin). Παραδειγματος χάριν, η εισαγωγή της εξάρτησης του συντελεστή ειδικής θερμοχωρητικότητας του πυριτίου από την θερμοκρασία δίνεται από την έκφραση:

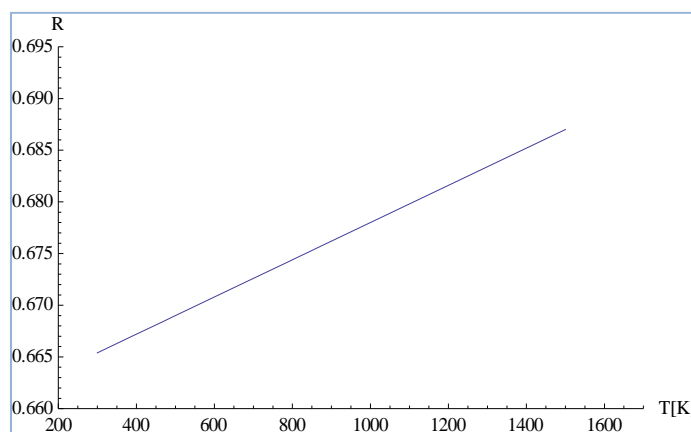
```
pdbsSetString Silicon SpecificHeatCapacity {1176.0+HeatTempK*(1.3e4*HeatTempK-0.252)-1.19e5/HeatTempK}
```

IV. Αμορφοποίηση και εξάρτηση της ανακλαστικότητας

Η ανακλαστικότητα του κρυσταλλικού πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος παρουσιάζει μια μικρή αλλά όχι αμελητέα εξάρτηση από την θερμοκρασία της μορφής:

$$R(T)=0.66+1.8\times 10^{-5}T, \quad (10.4)$$

η οποία αποδίδεται γραφικά στην Εικόνα 10.4. Η γραμμική αύξηση αυτή της ανακλαστικότητας, εισάγεται μέσα στον αλγόριθμο μέσω τροποποίησης της έκφρασης που εισάγει την πυκνότητα ενέργειας, και έχει ως αποτέλεσμα την ταπείνωση της καμπυλών που αναπαριστούν την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με το χρόνο, σε σχέση με αυτές που θα προέκυπταν εάν δεν λαμβάναμε υπόψη την εξάρτηση της ανακλαστικότητας από την θερμοκρασία.



Εικόνα 10.4 Εξάρτηση της ανακλαστικότητας του πυριτίου στα 248nm από την θερμοκρασία.

V. Έμμεση επιβεβαίωση της διαδικασίας προσομοίωσης

Δυστυχώς, δεν υπήρχαν πειραματικές μετρήσεις της χρονικής εξέλιξης της επιφανειακής θερμοκρασίας (μέσω πυρομέτρου), παρά μόνο η πληροφορία ότι ακόμα και στην υψηλότερη πυκνότητα δεν σημειώθηκε τήξη του υλικού. Διάφορες μετρήσεις και αντιστοίχιση με κάποιες αναμενόμενες τιμές επιφανειακής αντίστασης έδειξαν πάντως ότι στην υψηλότερη συνθήκη η επιφανειακή θερμοκρασία πρέπει να πλησίασε το κατώφλι τήξης (1683K). Μια έμμεση απαίτηση (η ικανοποίηση της οποίας θα μπορούσε όμως να επιβεβαιωθεί μόνο μετά από διενέργεια προσομοιώσεων της κινητικής του Βορίου) είναι ότι η ακτινοβολία με τις δεδομένες πυκνότητες ενέργειας οδηγεί σε πολύ περιορισμένη διάχυση της τάξης των 1-2 nm. Λόγω των περιορισμένων πειραματικών δεδομένων ήμασταν υποχρεωμένοι να διεξάγουμε μια σειρά ελέγχων για να επιβεβαιώσουμε τη ορθότητα της διαδικασίας προσομοίωσης. Για το σκοπό αυτό, αναπαράγαμε τους υπολογισμούς των Gonda et al.⁶ και των Hernandez et al.⁷, οι οποίοι αμφότεροι χρησιμοποίησαν Excimer XeCl στα 308nm, με διαφορετικές διάρκειες παλμού. Γενικά καταφέραμε να αναπαράγουμε τα αποτελέσματά τους με αρκετή επιτυχία γεγονός το οποίο πιστοποίησε την ορθότητα της διαδικασίας προσομοίωσης που ακολουθούμε.

10.4 Αποτελέσματα της προσομοίωσης

Μετά από όλα αυτά τα βήματα, προχωρήσαμε στην διενέργεια προσομοιώσεων για τις συνθήκες ακτινοβολίας των δικών μας δειγμάτων. Το FWHM του laser είναι 20 ns. Οι τιμές των

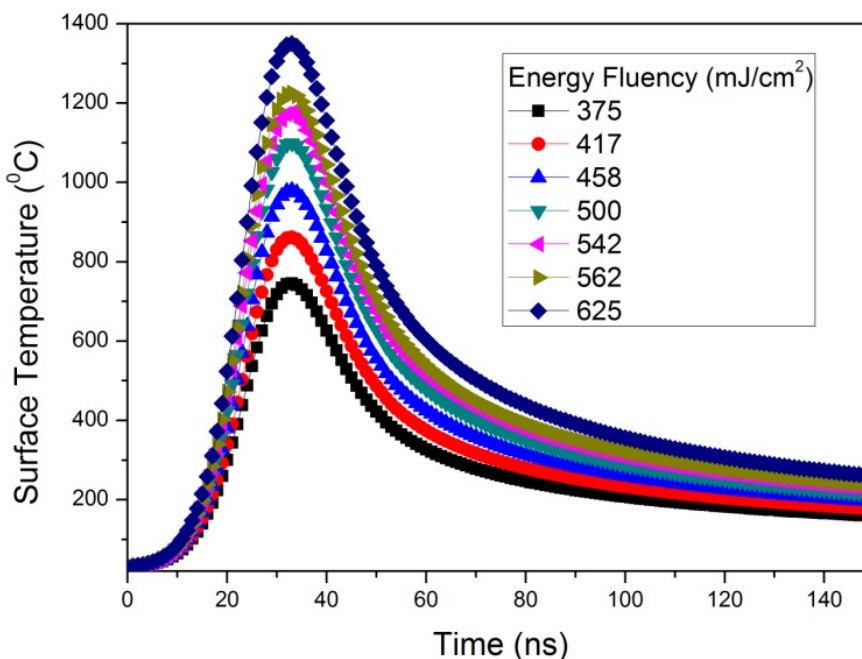
οπτικών και θερμικών συντελεστών αναφέρονται στον πίνακα 10.III, ενώ οι πυκνότητες ενέργειας της προσπίπτουσας δέσμης δίνονται από τον πίνακα 10.IV. Στον ίδιο πίνακα δίνονται και οι πραγματικές τιμές πυκνότητας ενέργειας που εισέρχεται μέσα στον όγκο του υλικού, έχοντας αφαιρέσει την συνιστώσα της ανάκλασης, η οποία έχει μια πολύ ασθενή εξάρτηση από την επιφανειακή θερμοκρασία. Καθώς οι ακτινοβολήσεις διενεργήθηκαν σε θερμοκρασία δωματίου θεωρούμε ως αρχική θερμοκρασία τους 30°C. Επίσης λαμβάνουμε ως μέσο διάδοσης τον αέρα.

Πίνακας 10.IV Τιμές πυκνότητας ενέργειας

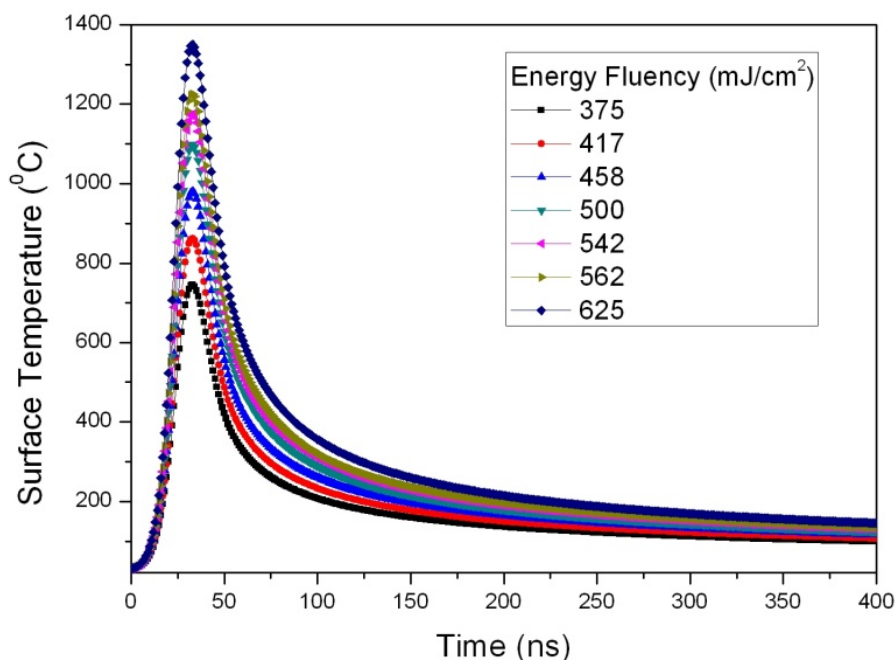
| F_{incident} (mJ/cm ²) | $F_{\text{trans}} = (1-R) F_{\text{incident}}$ (mJ/cm ²) |
|--|---|
| 625 | 200 |
| 583 | 187 |
| 562 | 185 |
| 542 | 179 |
| 500 | 170 |
| 458 | 156 |
| 417 | 142 |
| 375 | 128 |

I. Εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο

Στις εικόνες 10.5 και 10.6 παριστάνεται η εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας για ακτινοβόληση με ένα παλμό. Το πρώτο διάγραμμα παρουσιάζει με μεγαλύτερη λεπτομέρεια το χρονικό διάστημα των πρώτων 100ns, το οποίο εμφανίζει και το μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Το διάγραμμα 10.6 δείχνει ότι η επιφανειακή θερμοκρασία τείνει πολύ γρήγορα στην αρχική θερμοκρασία.



Εικόνα 10.5 Προσομοίωση της εξέλιξης της επιφανειακής θερμοκρασίας για διάφορες πυκνότητες ενέργειας του KrF excimer laser για τα πρώτα 100 ns από την έναρξη της ακτινοβόλησης.



Εικόνα 10.6 Αντίστοιχο διάγραμμα για τα πρώτα 400 ns. Η ταχύτερη μείωση της θερμοκρασίας του πυριτίου είναι εμφανής

Από τα παραπάνω διαγράμματα, προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

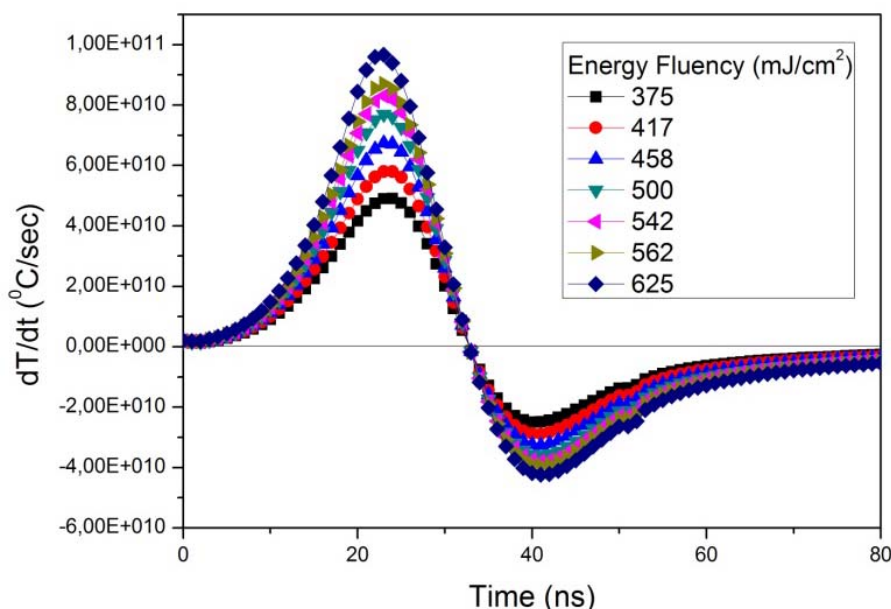
α) Η θερμοκρασιακή κατανομή για όλες τις πυκνότητες ενέργειας παρουσιάζει μια κορυφή στα 34 ns, γεγονός το οποίο είναι λογικό από φυσικής άποψης. Καθώς το FWHM είναι 20 ns, το μοντέλο επίλυσης του Senturus Process τοποθετεί την κορυφή της γκαουσιανής κατανομής στα $3 \times t_s = 3 \times 8.4 = 25.2$ ns. Από κει και πέρα φυσικά υπάρχει μια υστέρηση έως ότου επιτευχθεί η μέγιστη θερμοκρασία.

β) Η μέγιστη θερμοκρασία που επιτυγχάνεται είναι περίπου 1350°C (1620K) και επομένως χαμηλότερη από το σημείο τήξης του κρυσταλλικού πυριτίου. Αυτό έρχεται σε συμφωνία με τα πειραματικά ευρήματα. Καταρχάς δεν έχει παρατηρηθεί μεταβολή της ανακλαστικότητας στην επιφάνεια των δειγμάτων, η οποία θα μαρτυρούσε αλλαγή φάσης. Το ίδιο κατέδειξαν και οι μετρήσεις AFM, οι οποίες δείχνουν πολύ μικρές διακυμάνσεις στην επιφανειακή τραχύτητα⁸ σε σχέση με δείγματα τα οποία είχαν ανοπτηθεί σε καθεστώς τήξης⁹. Τέλος, οι μετρήσεις SIMS κατέδειξαν ελάχιστη μετακίνηση της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων, γεγονός το οποίο επιβεβαιώνει ότι δεν σημειώθηκε τήξη (η οποία συνεπάγεται και υψηλή διάχυση).

γ) Η κατανομή της θερμοκρασίας ακολουθεί –όπως αναμενόταν– την γκαουσιανή μορφή του παλμού.

δ) Μετά από σύντομο χρονικό διάστημα η θερμοκρασία αποκαθίσταται. Ήδη μετά από 400 ns η θερμοκρασία είναι από 130 έως 220 °C ανάλογα με την συνθήκη. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο σε προσομοιώσεις ακτινοβολήσεων με πολλούς παλμούς. Καθώς ο μέγιστος ρυθμός επανάληψης (repetition rate) του συγκεκριμένου laser είναι 100Hz, το διάστημα που μεσολαβεί μεταξύ δυο παλμών είναι 10ms. Έτσι είναι βέβαιο πως στο χρόνο αυτό η θερμοκρασία μέσα στον όγκο του υλικού θα έχει αποκατασταθεί στα επίπεδα θερμοκρασία δωματίου. Αυτό μας δίνει την δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε την τελευταία, ως αρχική συνθήκη στην έναρξη κάθε παλμού που αποτελεί μέρος ακολουθίας πολλών παλμών.

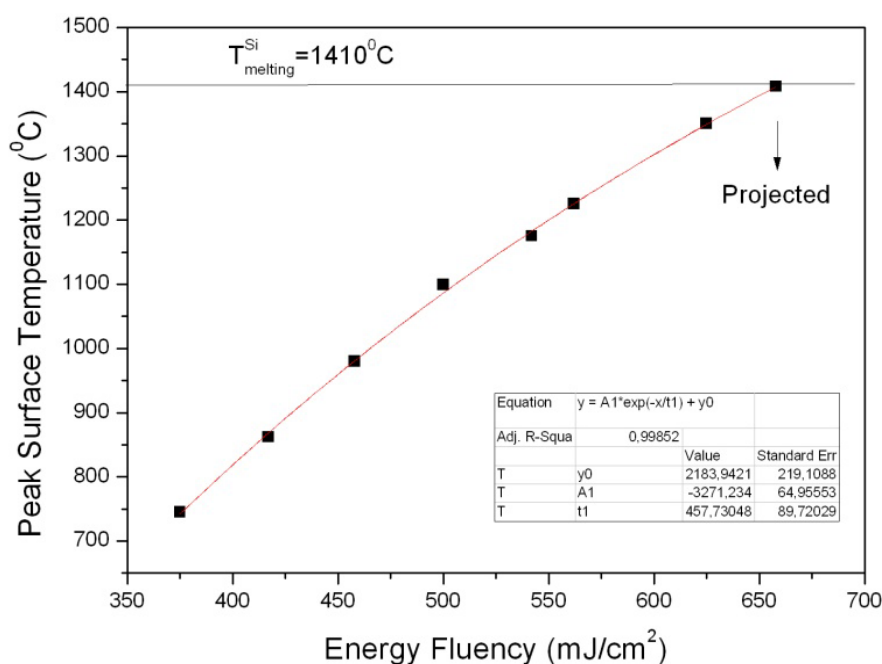
Στο διάγραμμα της εικόνας 10.7 παρουσιάζουμε τις βαθμίδες ανόδου και καθόδου της επιφανειακής θερμοκρασίας. Η δυνατότητα των ns laser να ανεβάζουν και να κατεβάζουν την θερμοκρασία με τόσο γρήγορους ρυθμούς αποτελεί και το μεγαλύτερο πλεονέκτημα τους, καθώς το υλικό διέρχεται από την «επικίνδυνη» για αυξημένη διάχυση περιοχή των 700-900°C για ελάχιστο χρονικό διάστημα. Έτσι οι πιθανότητες για την εμφάνιση του φαινομένου TED είναι ελάχιστες, γεγονός που εξηγεί και την ελάχιστη διάχυση που παρατηρείται στις μετρήσεις SIMS.



Εικόνα 10.7 Ρυθμοί ανόδου και καθόδου της θερμοκρασίας για διάφορες πυκνότητες ενέργειας του KrF excimer laser. Η επίτευξη πολύ υψηλών ρυθμών ανόδου (έως και περίπου 10^{11} °C/sec) δεν ευνοεί την εμφάνιση TED, γεγονός το οποίο αποτελεί και ένα από τα μεγαλύτερα πλεονεκτήματα των ns laser.

Καθώς όλες οι ακτινοβολήσεις διεξήχθησαν σε καθεστώς μη τήξης, η προσομοίωση θα μας βοηθήσει να προσδιορίσουμε το κατώφλι της πυκνότητας ενέργειας που απαιτείται για την επίτευξη τήξης. Πριν προχωρήσουμε στην παρουσίαση των προβλέψεων, θα προβούμε σε μια σύντομη ανάλυση για την επίδραση της αύξησης της πυκνότητας στην επιφανειακή θερμοκρασία. Οι παράγοντες που επιδρούν συνολικά, είναι το οπτικό μήκος απορρόφησης, το μήκος θερμικής απορρόφησης και η ανακλαστικότητα. Επειδή ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης είναι σταθερός για αυτό το μήκος κύματος, το οπτικό μήκος απορρόφησης είναι επίσης σταθερό με αποτέλεσμα ο όγκος του πυριτίου μέσα στον οποίο η οπτική ενέργεια μετασχηματίζεται σε θερμότητα, να παραμένει αμετάβλητος. Το θερμικό μήκος δίνεται από την σχέση $(D\tau)^{1/2}$, όπου D είναι ο συντελεστής θερμικής διαχυτότητας και τ ο χρόνος που διαρκεί η ακτινοβολήση. Καθώς σε κάθε συνθήκη η διάρκεια του παλμού παραμένει σταθερή, αυτό που μεταβάλλεται είναι μόνο το D , το οποίο γενικά μειώνεται αυξανόμενης της θερμοκρασίας (από $0.85\text{cm}^2\text{s}$ στους 300K, στους 0.10 στους 1500K). Παρόλα αυτά, αυτή η τάση του πυριτίου να διαχέει την θερμότητα με μικρότερο ρυθμό αυξανόμενης της θερμοκρασίας, απλά μειώνει τον ρυθμό με το οποίο η θερμότητα θα διαχυθεί τελικά στο πυρίτιο, χωρίς όμως να οδηγεί σε ελάττωση του όγκου μέσα στον οποίο η θερμότητα θα κατανομηθεί, όπως φαίνεται καθαρά και από τις εικόνες που δείχνουν στιγμιότυπα της κατανομής της θερμοκρασίας μέσα στον όγκο του υλικού. Επομένως, το ποσό της θερμότητας θα

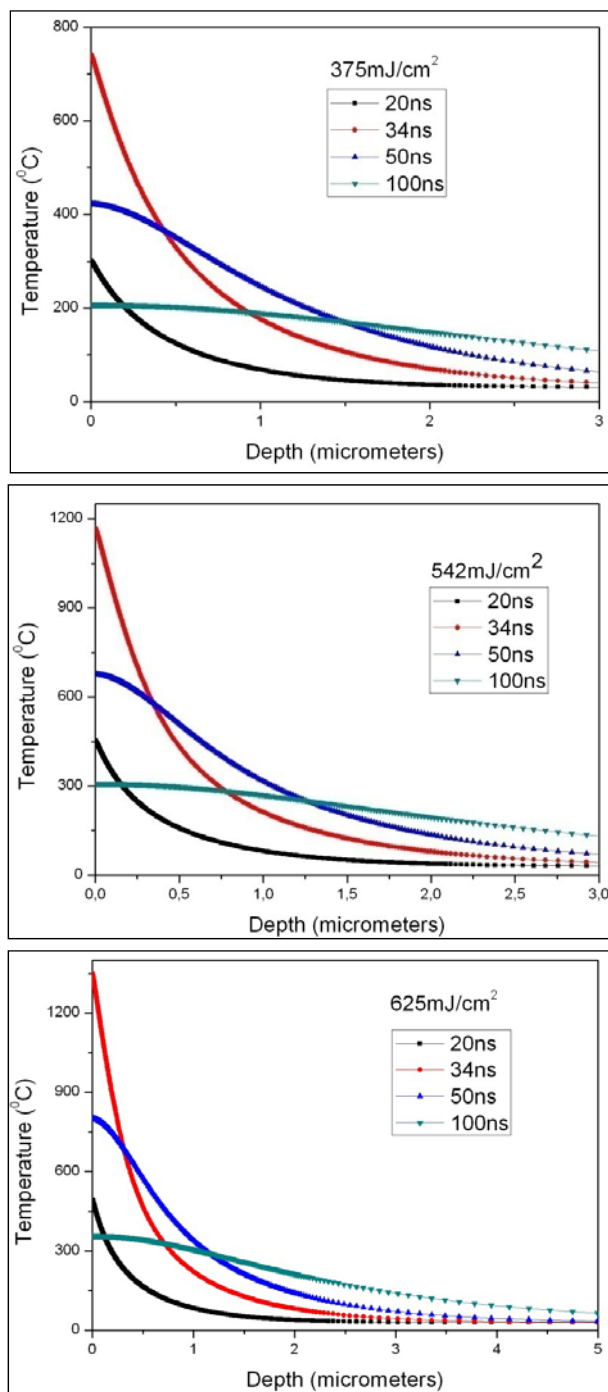
καταμεριστεί τελικά σε μεγαλύτερο βάθος. Επιπλέον, η εξάρτηση της ανακλαστικότητας από την θερμοκρασία, οδηγεί σε μείωση του ποσοστού της δέσμης που εισάγεται στον όγκο του υλικού. Με βάση τα παραπάνω αναμένεται μια υπογραμμική μορφή εξάρτησης της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας που επιτυγχάνεται από την πυκνότητα ενέργειας. Πράγματι, το διάγραμμα της εικόνας 10.8 πιστοποιεί την υπογραμμική μορφή, η οποία συγκεκριμένα είναι φθίνουσα εκθετική. Κάνοντας κατάλληλη προσαρμογή της καμπύλης μέσω μιας φθίνουσας εκθετικής συνάρτησης, και θέτοντας ως θερμοκρασία την θερμοκρασία τήξης του πυριτίου (1410°C), βρίσκουμε μια τιμή κατωφλίου για την πυκνότητα ενέργειας ίση με $0.658\text{mJ}/\text{cm}^2$. Θέτοντας την τιμή αυτή στους υπολογισμούς, το λογισμικό δίνει μια τιμή μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας ίση 1408°C . Επομένως το κατώφλι τήξης πρέπει να βρίσκεται στην περιοχή ($655\text{-}660\text{mJ}/\text{cm}^2$).



Εικόνα 10.8 Εξάρτηση της μέγιστης επιφανειακής θερμοκρασίας από την πυκνότητα ενέργειας, όπως αυτά προέκυψαν από την προσομοίωση. Η κόκκινη καμπύλη αποτελεί προσαρμογή των σημείων μέσω φθίνουσας εκθετικής συνάρτησης. Το τελευταίο σημείο αποτελεί την πρόβλεψη για την πυκνότητα ενέργειας που απαιτείται για την επίτευξη τήξης.

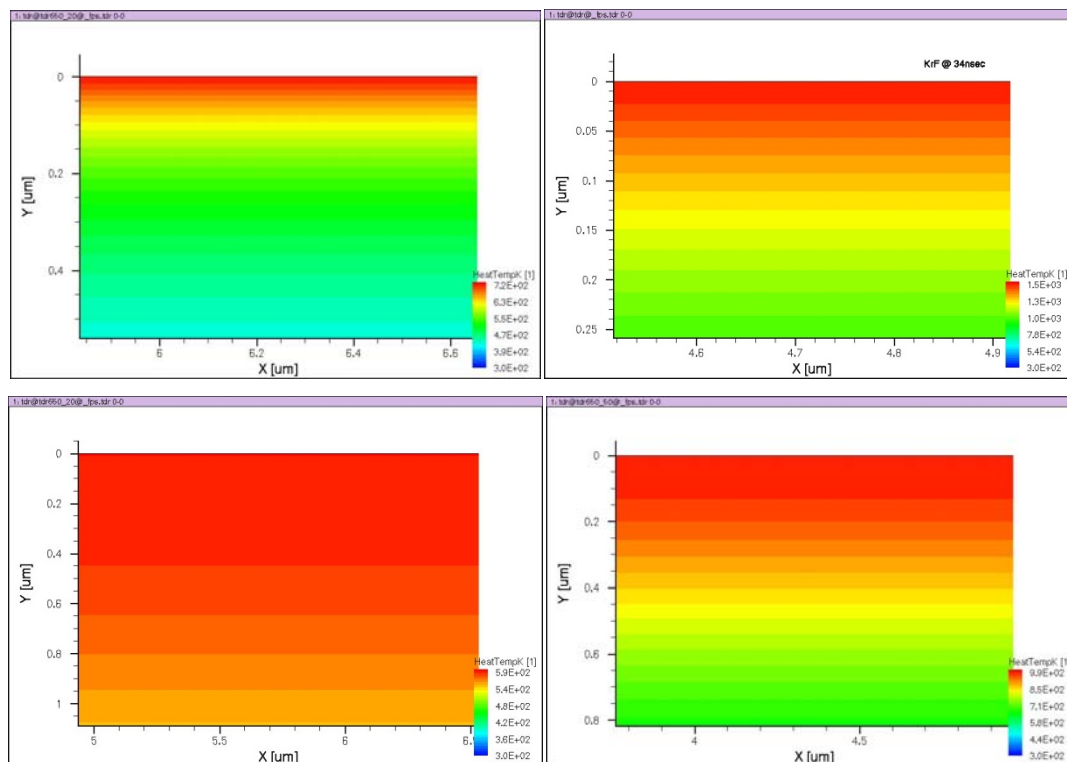
II. Κατανομή της θερμοκρασίας προς το βάθος του δοκιμίου

Στη συνέχεια εξάγαμε διαγράμματα για την κατανομή της θερμοκρασίας μέσα στον όγκο του υλικού. Επειδή η κατανομή της πυκνότητας ενέργειας είναι ομοιόμορφη, οι ισόθερμες καμπύλες κάτω από την ακτινοβολημένη περιοχή είναι παράλληλες μεταξύ τους. Το λογισμικό αναγνωρίζει άμεσα αυτό το γεγονός και επιλύει την Εξίσωση Θερμότητας σε μια διάσταση (κατά βάθος). Έτσι επιτυγχάνεται σημαντική μείωση του υπολογιστικού χρόνου, ενώ παράλληλα όλη η πληροφορία περιέχεται σε διαγράμματα μιας μεταβλητής. Στις εικόνες 10.9α, β, και γ, παρουσιάζουμε την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής μέσα στον όγκο του υλικού για ακτινοβολή στα 375 , 542 και $625\text{ mJ}/\text{cm}^2$ αντίστοιχα, όπως αυτή λαμβάνεται σε τέσσερα διαφορετικά στιγμιότυπα για $t=20$, 34 , 50 και 100 ns .



Εικόνα 10.9 Εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής μέσα στον όγκο του υλικού αντίστοιχα, λαμβάνοντας υπόψη τέσσερα διαφορετικά στιγμιότυπα για $t=20, 34, 50$ και 100 ns, για ακτινοβολή στα α) $375, 542$ και 625 mJ/cm².

Από τις εικόνες αυτές φαίνεται καθαρά η εκθετική μείωση της θερμοκρασίας καθώς εισέρχεται μέσα στον όγκο του υλικού, η οποία είναι και σύμφωνη με το νόμο Beer-Lambert. Τέλος, παρουσιάζουμε ενδεικτικά χρονικά στιγμιότυπα των ισόθερμων καμπυλών που σχηματίζονται στον όγκο του πυριτίου για $t=20, 34, 50$ και 100 ns, για την συνθήκη 625 mJ/cm².



Εικόνα 10.10 Αντίστοιχα γραφήματα που παρουσιάζουν στιγμιότυπα της θερμοκρασιακής κατανομής μέσα στον όγκο του υλικού για $t=20, 34, 50$ και 100 ns, για την συνθήκη $625 \text{ mJ}/\text{cm}^2$

Κλείνοντας την περιγραφή της προσομοίωσης της επίδρασης της ακτινοβολίας laser στο πυρίτιο, είμαστε σε θέση να δηλώσουμε ότι όλα μας τα αποτελέσματα έρχονται σε πλήρη συμφωνία με τα έως τώρα πειραματικά ευρήματα καθώς και με ότι αναμενόταν από τα φυσικά μοντέλα.

10.5 Προσομοίωση της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμιξεων βορίου κατά την ανοπτηση με Excimer KrF Laser - Εισαγωγή

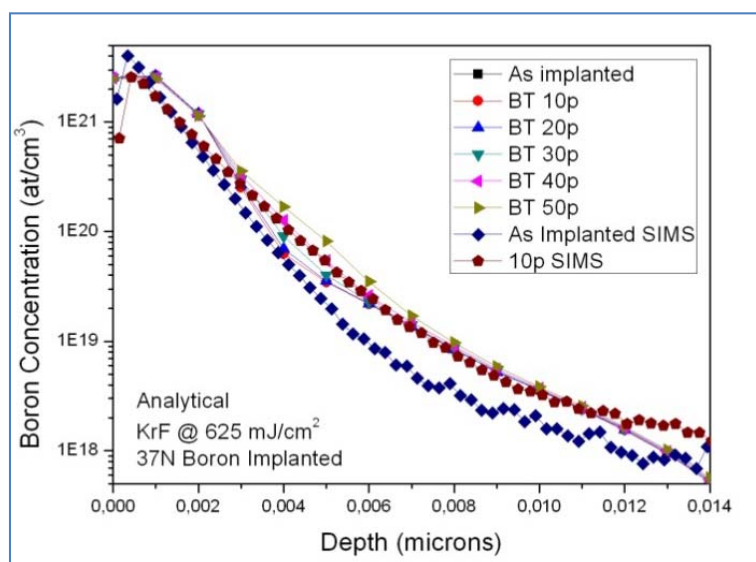
Κατόπιν, θα αναφερθούμε την προσπάθεια προσομοίωσης της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης προσμιξεων Βορίου κατά την ανοπτηση με χρήση Excimer KrF laser, με την βοήθεια του λογισμικού Sentaurus Process από την Synopsys. Το πακέτο αυτό προσφέρει τη δυνατότητα μελέτης των φαινομένων διάχυσης με χρήση τόσο της συνεχούς (continuum), όσο και της KMC προσέγγισης. Φυσικά, για να χρησιμοποιηθούν οι αλγόριθμοι Monte Carlo, είναι απαραίτητη η γνώση της εξέλιξης της θερμοκρασιακής κατανομής στην επιφάνεια του υλικού, πληροφορία η οποία λαμβάνεται από την προσομοίωση της επίδρασης της ακτινοβολίας στο υλικό, όπως περιγράφηκε αναλυτικά στα προηγούμενα εδάφια αυτού του κεφαλαίου. Αν και όπως θα δειχτεί στη συνέχεια, τα αποτελέσματα από την υλοποίηση KMC έρχονται σε μεγαλύτερη συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, για λόγους πληρότητας θα αναφερθούμε πρώτα στις προσπάθειες προσομοίωσης με χρήση συνεχών μεθόδων, οι οποίες άλλωστε προηγούνται χρονικά καθώς είναι απαραίτητες για την λήψη των θερμοκρασιακών προφίλ που θα χρησιμοποιηθούν ως είσοδο στους αλγορίθμους KMC.

10.6 Προσομοίωση με χρήση αναλυτικών - συνεχών μεθόδων

Η αναλυτική μέθοδος βασίζεται στην επίλυση ενός συστήματος εξισώσεων (Θερμότητας, Διάχυσης και αν χρειαστεί Τάσεων) σε κάθε έναν από τους κόμβους του πλέγματος. Ιδιαίτερα η μορφή της εξίσωσης της διάχυσης μπορεί να υπακούει σε μια σειρά από μοντέλα διάχυσης, όπως Charge React, React, Pair Diffusion κ.α. Εμείς εστιάσαμε περισσότερο στο Charge React, το οποίο θεωρεί την πρόσμιξη σε θέση αντικατάστασης ως ακίνητη, και έως και δυο ευκίνητα φορτισμένα ζεύγη πρόσμιξης-ατέλειας. Επίσης λαμβάνονται υπόψη και φορτισμένες σημειακές ατέλειες. Τα συστήματα εξισώσεων που επιλύονται κατά την υλοποίηση του Charged React μοντέλου περιγράφονται αναλυτικά στο κεφάλαιο 3. Σημειώνεται ότι και η Synopsys συνιστά το μοντέλο αυτό λόγω της μεγαλύτερης ακρίβειας που προσφέρει, με την επισήμανση όμως ότι είναι και το πιο απαιτητικό από υπολογιστικής απόψεως.

Σημειώνεται πως η επίλυση των εξισώσεων διάχυσης γίνεται ταυτόχρονα με την επίλυση της εξίσωσης θερμότητας, και επομένως τα αποτελέσματα που θα παρουσιαστούν στη συνέχεια παρήχθησαν με βάση την διερεύνηση που περιγράφεται αναλυτικά προηγουμένως.

Με βάση αυτό το μοντέλο προχωρήσαμε σε μια σειρά από υπολογιστικά επίπονες προσομοιώσεις ακτινοβολήσης με πολλούς παλμούς. Στο διάγραμμα 10.11 παριστάνεται η εξέλιξη του προφίλ συγκέντρωσης του Βορίου από 10 έως και 50 παλμούς και γίνεται αντιπαραβολή με τα αντίστοιχα προφίλ από SIMS για as-implanted και ακτινοβολημένα με 10 παλμούς. Αν και στην περιοχή των $3E20$ έως $3E19$ cm^{-3} υπάρχει σχετική συμφωνία μεταξύ θεωρίας και πειράματος όσον αφορά την διάχυση, στο υπόλοιπο κομμάτι, η σχετικές μετατοπίσεις λόγω ανόπτησης δεν συμπίπτουν καθόλου. Αν μάλιστα παρατηρήσουμε την καμπύλη για τους 10 παλμούς πιο προσεκτικά, θα παρατηρήσουμε ότι η προσομοιωθείσα διάχυση είναι τελικά πολύ μικρότερη από την μετρηθείσα.

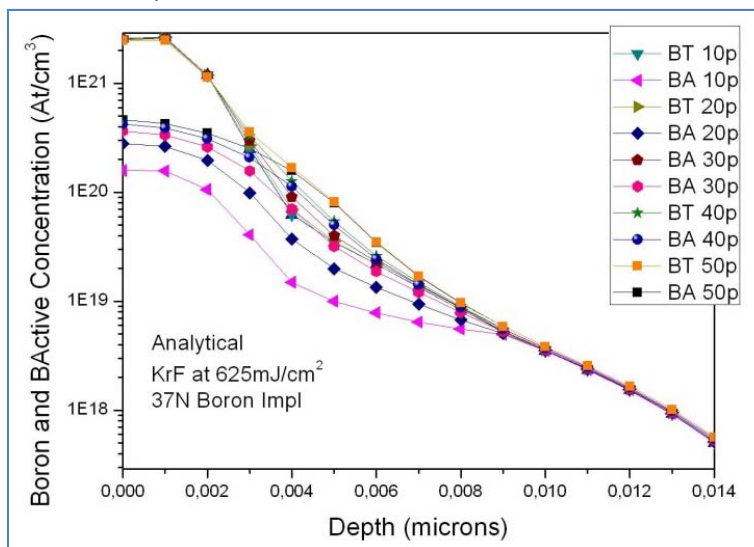


Εικόνα 10.11 Εξέλιξη κατανομής συγκέντρωσης Βορίου για 10 έως 50 παλμούς KrF, με πυκνότητα ενέργειας $625 \text{ mJ}/\text{cm}^2$ με χρήση αναλυτικής μεθόδου. Δίνονται για σύγκριση και πειραματικά δεδομένα για το as-implanted και το δείγμα που ανοπτήθηκε με 10 παλμούς.

Τα αποτελέσματα όσον αφορά την επιφανειακή αντίσταση για την πυκνότητα ενέργειας $625 \text{ mJ}/\text{cm}^2$, είναι ενθαρρυντικά. Ειδικά για τους 50 παλμούς η τιμή των $767 \text{ } \Omega/\text{sq}$. Είναι πολύ

κοντά στην πειραματικώς προσδιορισθείσα των 680. Γενικά παρατηρείται μια συνεχής μείωση της επιφανειακής αντίστασης αυξανόμενων των παλμών, κάτι το οποίο είναι και αναμενόμενο.

Στο γράφημα 10.12 παρουσιάζουμε συγκεντρωτικά τα προφίλ συγκέντρωσης, τόσο όλων των ιόντων Βορίου όσο και των ενεργοποιημένων προσμίξεων, όπου παρατηρούμε την αύξηση των τελευταίων όσο αυξάνουν οι παλμοί.



Εικόνα 10.12 Συγκεντρωτικές κατανομές προσμίξεων Βορίου (BT) και ενεργοποιημένων προσμίξεων (BA), για πυκνότητα ενέργειας $625\text{mJ}/\text{cm}^2$, και πέντε διαφορετικούς αριθμούς παλμών, όπως αυτές προέκυψαν από την προσομοίωση.

Δυστυχώς, αυτή η σχετική συμφωνία πειραματικών και προσομοιωθέντων τιμών που παρατηρείται στην συνθήκη με την μεγαλύτερη πυκνότητα ενέργειας, δεν παρατηρείται και στις συνθήκες χαμηλότερης πυκνότητας ενέργειας, όπως μπορεί να διαφανεί και από τον πίνακα 10.V. Με πλάγια γράμματα αναφέρεται ο χρόνος που απαιτήθηκε για την διεξαγωγή των υπολογισμών, ενώ μέσα σε παρενθέσεις δίνονται οι πειραματικές τιμές επιφανειακής αντίστασης. Όλες οι τιμές είναι σε Ω/\square . Ειδικότερα για την συνθήκη των $542\text{ mJ}/\text{cm}^2$, καταλήγουμε σε μη αναμενόμενα αποτελέσματα (αύξηση της επιφανειακής αντίστασης και παράλογα μεγάλες τιμές). Μέχρι στιγμής δεν έχει καταστεί δυνατή η ερμηνεία αυτής της συμπεριφοράς.

Πίνακας 10.V Τιμές επιφανειακής αντίστασης ανά συνθήκη

| Αριθμός παλμών | F=542mJ/cm ² | F=562 mJ/cm ² | F=625 mJ/cm ² |
|----------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|
| | 40h | 14:25h | 15:30h |
| 1 | 12250 | 12180 | 10200 |
| 10 | 11650 (9353) | 9511 (4065) | 2533 (1603) |
| 20 | 11730 | 14886 | 1576 |
| 30 | 56600 | 9208 | 1134 |
| 40 | 46480 | 6541 | 907 |
| 50 | 28650 (4798) | 4868 (1605) | 767 (680) |

Συνολικά, η αδυναμία υπολογισμού αυτοσυνεπών τιμών επιφανειακής αντίστασης και παρακολούθησης της διάχυσης καθιστούν σε πρώτη εκτίμηση το μοντέλο αναξιόπιστο. Το τέλος

της προσπάθειας αυτής συνέπεσε και με τις πρώτες δοκιμές της μεθόδου KMC καθώς και της Υβριδικής, οι οποίες σύμφωνα με την βιβλιογραφία φαίνονταν πιο ελκυστικές. Παρόλα αυτά, η αριθμητική μέθοδος χρήζει περαιτέρω διερεύνησης, ιδιαίτερα όσον αφορά τα μοντέλα διάχυσης.

10.7 Προσομοίωση με χρήση της προσέγγισης Kinetic Monte Carlo

10.7.1 Επίδραση της ακτινοβολήσης με ένα παλμό

Η μέθοδος Kinetic Monte Carlo (KMC), δεν μπορεί να προσομοιώσει την αλληλεπίδραση της δέσμης laser με το υλικό. Επομένως πριν την χρήση αλγορίθμων KMC για την μελέτη της κινητικής των προσμίξεων, είναι απαραίτητη η εισαγωγή του θερμοκρασιακού προφίλ που έχει προκύψει από την αναλυτική επίλυση του φαινομένου της ανόπτησης. Το θερμοκρασιακό προφίλ δίνεται υπό την μορφή ενός αρχείου .dat με τη χρήση της εντολής write.temp.file. Το αρχείο αυτό περιλαμβάνει 2 στήλες, όπου στην πρώτη είναι ο χρόνος σε sec και στην δεύτερη η θερμοκρασία σε βαθμούς κελσίου, όπως φαίνεται και στο παρακάτω παράδειγμα:

```

0.          30.
9.99999972E-010 32.22612
1.99999994E-009 33.8769112
3.00000003E-009 36.0908699
3.99999989E-009 38.9755211
4.99999997E-009 42.7732315
6.00000005E-009 47.7392616
7.00000014E-009 54.1771584
7.99999977E-009 62.4415894
8.99999986E-009 72.9455032
9.99999994E-009 86.1663818
1.1E-008      102.653099
1.20000001E-008 123.0326
...
...
2.05999996E-007 210.685104
2.06999999E-007 210.050598
2.08000003E-007 209.422104
2.09000007E-007 208.799606
2.24999994E-007 199.582108
2.49999999E-007 187.488297
3.00000011E-007 169.113297
4.00000005E-007 145.357101
4.49999987E-007 80.
4.99000009E-007 25.

```

Η εισαγωγή της θερμοκρασιακής εξέλιξης σαν δεδομένο στον αλγόριθμο KMC μπορεί να γίνει με δυο τρόπους: είτε με απευθείας επικόλληση της παραπάνω στήλης σαν ramp_rate στην εντολή diffuse, είτε ευκολότερα με την ανάγνωση του παραπάνω αρχείου με χρήση της εντολής read.temp.file. Ο υψηλός συντελεστής απορρόφησης του πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος και οι πολύ μικροί χαρακτηριστικοί χρόνοι ανόπτησης, συνεπάγονται αντίστοιχα πολύ μικρά βάρη

οπτικής και θερμικής απορρόφησης. Το γεγονός αυτό μας επιτρέπει να θεωρήσουμε ότι η ακτινοβολή είναι επιφανειακή και επομένως το κυριότερο μέγεθος που πρέπει να εισαχθεί είναι η χρονική εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας, η γνώση της οποίας είναι ικανή για την περιγραφή του φαινομένου της διάχυσης. Στην περίπτωση που είτε ο a ήταν μικρός, είτε οι χαρακτηριστικοί χρόνοι της ανόπτησης ήταν μεγαλύτεροι (π.χ. msec ή sec), μια τέτοια θεώρηση δεν θα ευσταθούσε, όπως ακριβώς συμβαίνει και στην περίπτωση του CO₂ laser, όπου δεν αρκεί η εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας, αλλά η εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής κατά βάθος. Στην περίπτωση αυτή μάλιστα τα πράγματα περιπλέκονται ακόμα περισσότερο από το γεγονός ότι οι ισόθερμες δεν είναι παράλληλες, αλλά περίπου γκαουσιανές (ακολουθώντας την χωρική μορφή της δέσμης). Έτσι είμαστε πρακτικά αναγκασμένοι να εισάγουμε την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής τόσο κατά βάθος, όσο και κατά πλάτος του δοκιμίου. Ευτυχώς, στην περίπτωση του KrF laser, η χρήση πλήρους διάταξης ομογενοποίησης της δέσμης, εγγυάται ότι τουλάχιστον στην περιοχή της ακτινοβολήσης, οι ισόθερμες είναι παράλληλες μεταξύ τους, επιτρέποντας την προσομοίωση του φαινομένου πρακτικά σε μια διάσταση. Το γεγονός αυτό, όπως είναι αντιληπτό, συνεπάγεται σημαντική μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου, κάτι το οποίο έχει ιδιαίτερη σημασία καθώς προσομοιώνουμε ακολουθίες μεγάλου αριθμού παλμών.

Ξεκινάμε την παρουσίαση των αποτελεσμάτων από την διερεύνηση για την επίδραση ενός παλμού και στη συνέχεια θα αναφερθούμε στην επίδραση των πολλών παλμών. Τρεις ήταν οι βασικές παράμετροι των οποίων μελετήσαμε την επίδραση σε αυτούς τους υπολογισμούς (πέραν φυσικά της πυκνότητας ενέργειας):

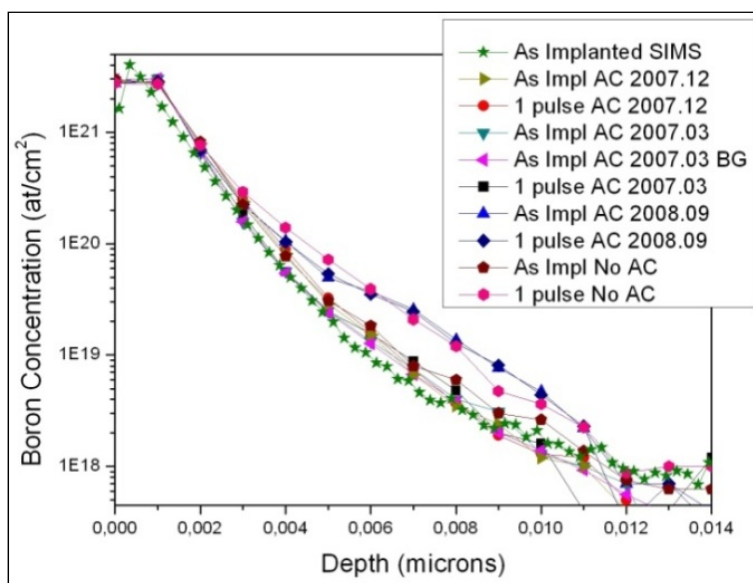
- Χρήση ή όχι μοριακής εμφύτευσης (BF₂ ή Βόριο)
- Διάσταση πλέγματος
- Χρήση ή όχι προηγμένων βιβλιοθηκών Advanced Calibration

Επίσης, πρέπει να επισημανθεί πως οι υπολογισμοί δεν παρουσίασαν εμφανή στατιστικό θόρυβο, δεδομένου ότι τα αποτελέσματα που έδιναν δεν είχαν εξάρτηση από αλλαγές του αριθμού seed ή του αριθμού των ψευδο-σωματιδίων.

Η διαφοροποίηση ανάμεσα στην μοριακή και την ατομική εμφύτευση οδηγεί καταρχάς σε διαφορετικά προφίλ ολικής συγκέντρωσης Βορίου, ατελειών αλλά και κυρίως αμοφοποίησης. Θα διερευνήσουμε την επίδραση της ακτινοβολήσης πάνω σε δείγματα που εμφυτεύθηκαν είτε ιοντικά είτε μοριακά, και θα προβούμε στην σύγκριση των δυο ειδών. Τα αποτελέσματα που θα παρουσιάσουμε προέκυψαν με πλέγμα ιδίων διαστάσεων ($0.3 \times 0.1 \times 0.1 \mu\text{m}$), με το οποίο επιτυγχάνουμε ικανοποιητική υπολογιστική ακρίβεια και ευστάθεια χωρίς μεγάλο κόστος σε υπολογιστικό χρόνο. Επίσης χρησιμοποιήσαμε τα προκαθορισμένα υπολογιστικά μοντέλα και σταθερές ενεργοποίησης και διαχυτότητας, με χρήση αρχείων Advanced Calibration 2007.03, καθώς όπως θα δείξουμε και στη συνέχεια φαίνεται να αντανakλούν όλες τις προβλεπόμενες μεταβολές στην μορφολογία του προφίλ συγκέντρωσης λόγω ανόπτησης. Για την προσομοίωση των διαδικασιών ανόπτησης το λογισμικό ακολουθεί μια σειρά μοντέλων, τα οποία περιγράφονται αναλυτικά στην βιβλιογραφία^{10 11 12 13 14 15} και στα οποία γίνεται ιδιαίτερη αναφορά στο κεφάλαιο 3 που πραγματεύεται την μοντελοποίηση όλων των διαδικασιών με την χρήση του Sentaurus Process από την Synopsys.

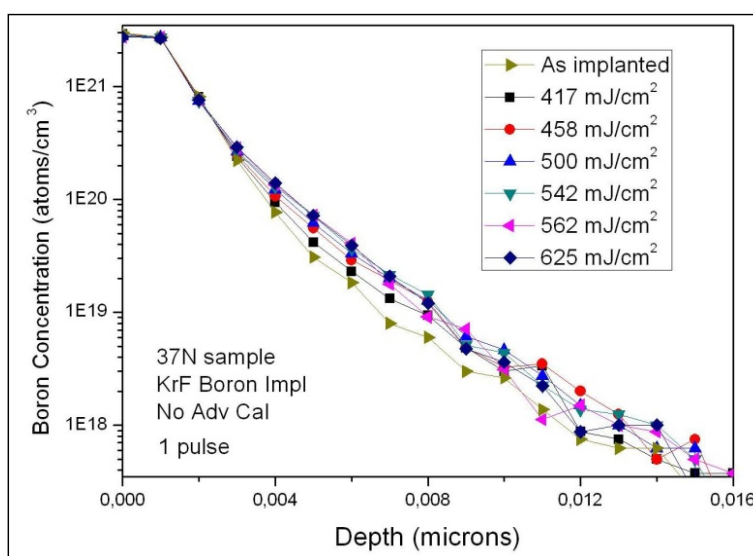
Η πρώτη παράμετρος της οποίας η επίδραση διερευνήθηκε είναι η χρήση των προηγμένων βιβλιοθηκών τύπου Advanced Calibration. Από το διάγραμμα 10.13 όπου παρουσιάζεται η

επίδραση τους στην σχετική μετατόπιση του προφίλ είναι προφανές ότι η χρήση διαφορετικών βιβλιοθηκών οδηγεί σε παρόμοια συμπεριφορά διάχυσης. Στο διάγραμμα αυτό παρουσιάζεται επίσης και ένα προφίλ που προέκυψε από την χρήση A.C. 2007.03 σε μεγαλύτερο πλέγμα (Big Grid, BG).

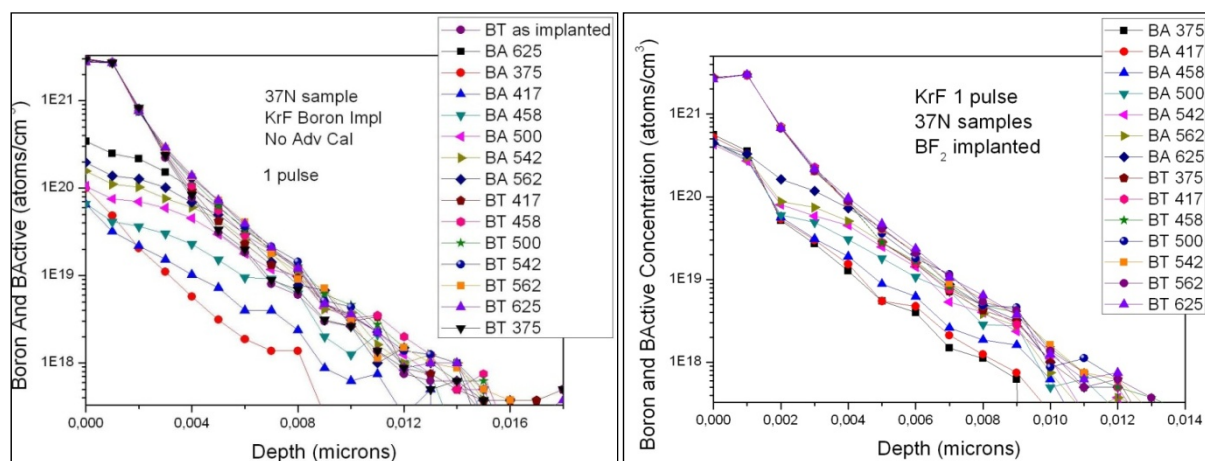


Εικόνα 10.13 Σύγκριση των προφίλ συγκέντρωσης για ανόπτηση με ένα παλμό δείγματος που έχει εμφυτευθεί με Βόριο, κατόπιν προσομοίωσης με χρήση διαφορετικών βιβλιοθηκών. Παρατηρούμε ότι η χρήση διαφορετικών βιβλιοθηκών οδηγεί σε παρόμοια συμπεριφορά διάχυσης.

Στα διαγράμματα 10.14 και 10.15 παρουσιάζουμε τα προφίλ συγκέντρωσης του Βορίου αλλά και του ενεργοποιημένου Βορίου αντίστοιχα για ακτινοβόληση με ένα παλμό στις εικονιζόμενες τιμές πυκνότητας ενέργειας, για δείγματα 37N που προέκυψαν από εμφύτευση α) Βορίου και β) BF_2 .



Εικόνα 10.14 Επίδραση της πυκνότητας ενέργειας στις κατανομές προφίλ για ακτινοβόληση δειγμάτων 37N με ένα παλμό, όπως αυτές προέκυψαν από την προσομοίωση με χρήση βιβλιοθηκών Advanced Calibration 2007.03. Στην προσομοίωση των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε Βόριο.



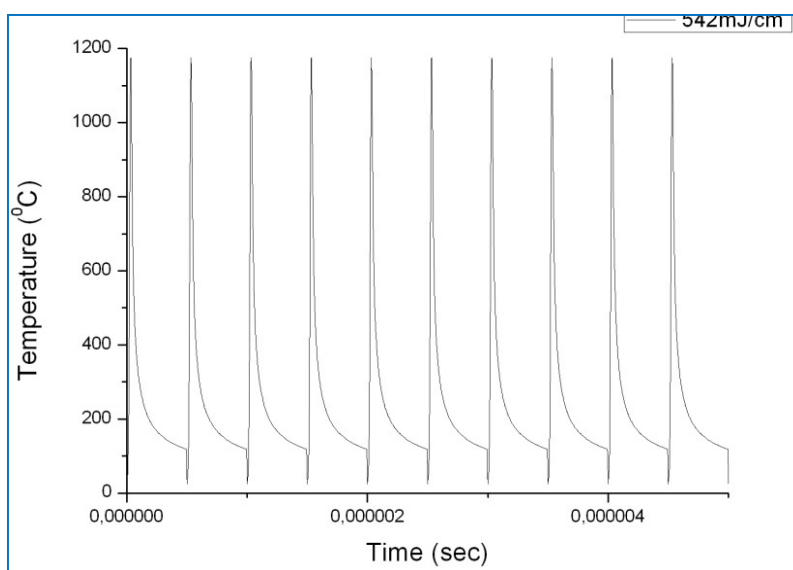
Εικόνα 10.15 Επίδραση της πυκνότητας ενέργειας στις κατανομές προφίλ ατόμων Βορίου (BT) και ενεργών ατόμων Βορίου (BA) για ακτινοβόληση δειγμάτων 37N με ένα παλμό, όπως αυτές προέκυψαν από την προσομοίωση. Στην προσομοίωση των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε α) Βόριο και β) BF_2 αντίστοιχα.

10.7.2 Επίδραση της ακτινοβόλησης με ακολουθία παλμών

Καθώς διενεργήθηκε ανόπτηση με χρήση πολλαπλών παλμών KrF Excimer laser, ήταν αναγκαία η επανάληψη των θερμοκρασιακών κύκλων με κάποια ενδιάμεσα χρονικά διαστήματα ανάμεσα τους, έτσι ώστε να προσομοιωθεί η δράση των πολλαπλών παλμών τόσο στην αποκατάσταση της καταστροφής που είχε εισαχθεί στον όγκο του υλικού κατά την διάρκεια της εμφύτευσης, όσο και στην διάχυση αλλά και την ενεργοποίηση των προσμίξεων.

Στις πρώτες προσπάθειες χρησιμοποιήσαμε μια ακολουθία εντολών `read.temp.file`, προτρέποντας το πρόγραμμα να διαβάσει τόσες φορές το θερμοκρασιακό προφίλ όσος ήταν και ο αριθμός των παλμών στην πραγματικότητα, για κάθε συνθήκη πυκνότητας ενέργειας. Κατόπιν της διεξαγωγής μεγάλου αριθμού προσομοιώσεων και προσεκτικής παρατήρησης των αρχείων `.log`, στα οποία δίνονται όλοι οι έξοδοι του προγράμματος παρατηρήθηκε το εξής φαινόμενο: κατά την εκτέλεση του πρώτου παλμού-θερμοκρασιακού προφίλ εκτελεί μια επανάληψη, στο δεύτερο 2, στην τρίτη 3 και στην νιοστή n . Επομένως ενώ στον αλγόριθμο ορίζαμε n παλμούς, τελικά στην πραγματικότητα εκτελούνταν $n!$ θερμοικοί κύκλοι. Το γεγονός αυτό, αφενός μεν δεν απεικόνιζε το πραγματικό φαινόμενο, αφετέρου αυξανόμενου του αριθμού n υπήρχε δραματική επίπτωση στον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι για 100 παλμούς η προσομοίωση διήρκησε περίπου 80 ώρες! Υστερα από μια σειρά δοκιμών, το πρόβλημα αυτό ξεπεράστηκε με τη χρήση ενός αλγορίθμου σε Fortran οποίος λαμβάνει ως είσοδο το θερμοκρασιακό προφίλ που παράγεται από την προσομοίωση ενός παλμού KrF Excimer laser καθώς και τον αριθμό των παλμών. Ο αλγόριθμος αυτός δίνει ως έξοδο μια ακολουθία παλμών έτσι ώστε να ανανεώνεται ο χρόνος στην αριστερή στήλη μετά την παρέλευση κάθε παλμού. Με τον τρόπο αυτό όλη η ακολουθία παλμών δίνεται σε ένα αρχείο, στο οποίο ο συνολικός χρόνος που παρέχεται είναι ίσος με το γινόμενο του αριθμού των παλμών επί το διάστημα που προσομοιώνεται το φαινόμενο της ανόπτησης. Το τελευταίο, επιλέγεται με τέτοιο τρόπο ώστε η επιφανειακή θερμοκρασία να πλησιάζει την θερμοκρασία δωματίου έτσι ώστε να προλαβαίνει το πυρίτιο να ψυχθεί. Με τον τρόπο αυτό προσεγγίζεται το διάστημα ανάμεσα στους παλμούς και το σενάριο της προσομοίωσης είναι πιο ρεαλιστικό.

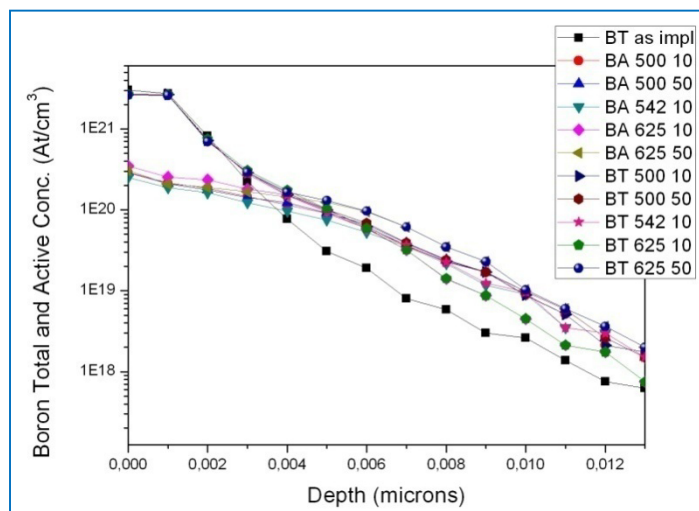
Σε κάθε περίπτωση, οι υπολογισμοί αυτοί είναι μονοδιαστάτοι. Στην Εικόνα 10.16 παρουσιάζουμε μια ακολουθία 10 θερμοκρασιακών κύκλων για την συνθήκη $542\text{mJ}/\text{cm}^2$.



Εικόνα 10.16 Ακολουθία 10 θερμοκρασιακών κύκλων για την συνθήκη $542\text{mJ}/\text{cm}^2$, όπως αυτοί προέκυψαν από την εφαρμογή του αλγόριθμου.

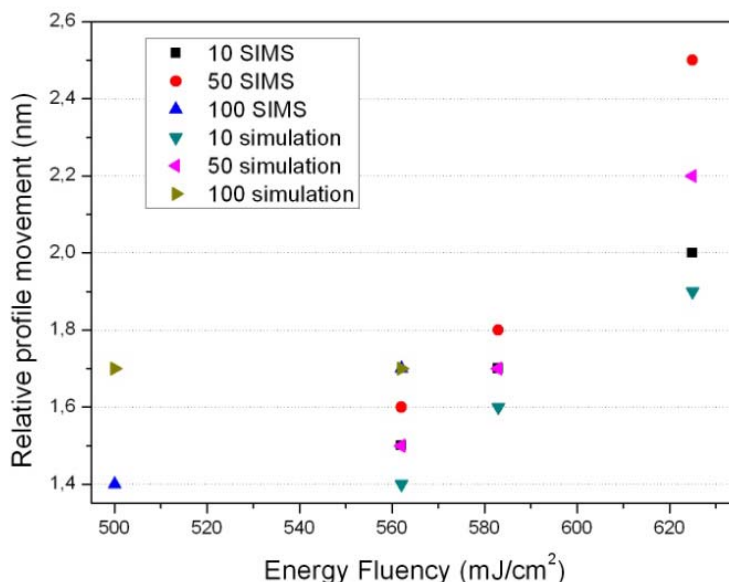
I. Μελέτη της κινητικής των προσμίξεων

Με την χρήση της παραπάνω μεθόδου ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος μειώθηκε σημαντικά. Στην Εικόνα 10.17 παρουσιάζουμε τις κατανομές συγκέντρωσης ατόμων Βορίου και ηλεκτρικά ενεργών ατόμων Βορίου για 3 διαφορετικές πυκνότητες ενέργειας και 10 και 50 παλμούς. Η μέγιστη παρατηρούμενη διάχυση είναι περίπου 2nm , γεγονός το οποίο έρχεται σε συμφωνία με τις αντίστοιχες μετρήσεις SIMS. Σημειώνεται ότι αντίστοιχα αποτελέσματα προκύπτουν και από την ανόπτηση προφίλ που προέκυψαν από εμφύτευση BF_2 . Η μοναδική διαφοροποίηση έγκειται στην ελαφρά μικρότερη μετατόπιση του προφίλ στην περίπτωση του BF_2 , η οποία έρχεται και σε συμφωνία με την βιβλιογραφία^{16 17} που αναφέρει ότι η παρουσία του Φθορίου οδηγεί σε ελάττωση της διάχυσης. Πρέπει όμως να τονιστεί ότι στην περίπτωση της εμφύτευσης με πλάσμα BF_3 η επίδραση του Φθορίου στην κινητική του Βορίου είναι μικρότερη σε σχέση με αυτή στην περίπτωση εμφύτευσης μοριακού BF_2 , για αυτό και οι παρατηρούμενες μεταβολές είναι πολύ μικρές^{xviii}. Το γεγονός αυτό οφείλεται σε φαινόμενα συσσωμάτωσης ατόμων Φθόριου με ενδοπλεγματικές ατέλειες τύπου I, με αποτέλεσμα την μείωση του ελεύθερου πληθυσμού των τελευταίων. Καθώς η διάχυση των ατόμων Βορίου είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την παρουσία περισσειας I, τελικά έχουμε και ελάττωση της διάχυσης.



Εικόνα 10.17 Κατανομές συγκέντρωσης ατόμων Βορίου και ηλεκτρικά ενεργών ατόμων Βορίου για 3 διαφορετικές πυκνότητες ενέργειας και 10 και 50 παλμούς. Η μέγιστη παρατηρούμενη διάχυση είναι περίπου 2nm, γεγονός το οποίο έρχεται σε συμφωνία με τις αντίστοιχες μετρήσεις SIMS. Η προσομοίωση της εμφύτευσης έγινε με χρήση Βορίου, ενώ χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες Advanced Calibration 2007.03.

Στο διάγραμμα 10.18 δίνονται οι σχετικές μετατοπίσεις των προφίλ συγκέντρωσης όπως αυτές προέκυψαν από μετρήσεις SIMS αλλά και από προσομοίωση για λόγους σύγκρισης. Λαμβανομένου υπόψη ότι όλες οι μετατοπίσεις είναι της τάξης των ελάχιστων νανομέτρων, από το διάγραμμα αυτό είναι προφανής η ικανοποιητικότερη περιγραφή της κινητικής της διάχυσης από την προσομοίωση.



Εικόνα 10.18 Σύγκριση αποτελεσμάτων SIMS και προσομοίωσης για την σχετική μετατόπιση των προφίλ συγκέντρωσης σε σχέση με το προφίλ πριν την απόπτωση για διάφορους συνδυασμούς πυκνοτήτων ενέργειας και αριθμού παλμών. Η προσομοίωση της εμφύτευσης έγινε με χρήση Βορίου, ενώ χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες Advanced Calibration 2007.03.

II. Μελέτη της ενεργοποίησης των προσμίξεων

Πέραν της ελαχιστοποίησης της διάχυσης, η επίτευξη όσο το δυνατόν μεγαλύτερων επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης αποτελεί προτεραιότητα κατά την σχεδίαση και κατασκευή των ρηχών επαφών. Είναι λοιπόν αναγκαία η εξαγωγή των τιμών επιφανειακής αντίστασης από τα προφίλ συγκέντρωσης των προσομοιωθέντων κατανομών, έτσι ώστε να καταστεί δυνατή η σύγκριση τους με τις πειραματικά προσδιορισθείσες τιμές, όπως αυτές προκύπτουν από τις μετρήσεις με γεωμετρία Van der Pauw. Για την εξαγωγή της τιμής της επιφανειακής αντίστασης από το προφίλ συγκέντρωσης όπως αυτό προέκυψε από την προσομοίωση της ελάχιστης συνθήκης ανόπτησης πρέπει να χρησιμοποιηθεί μια μεθοδολογία¹⁸, η οποία να λαμβάνει υπόψη την ολική συγκέντρωση των ενεργοποιημένων ατόμων Βορίου καθώς και την εξάρτηση της ευκινησίας των φορέων από την συγκέντρωσή τους.

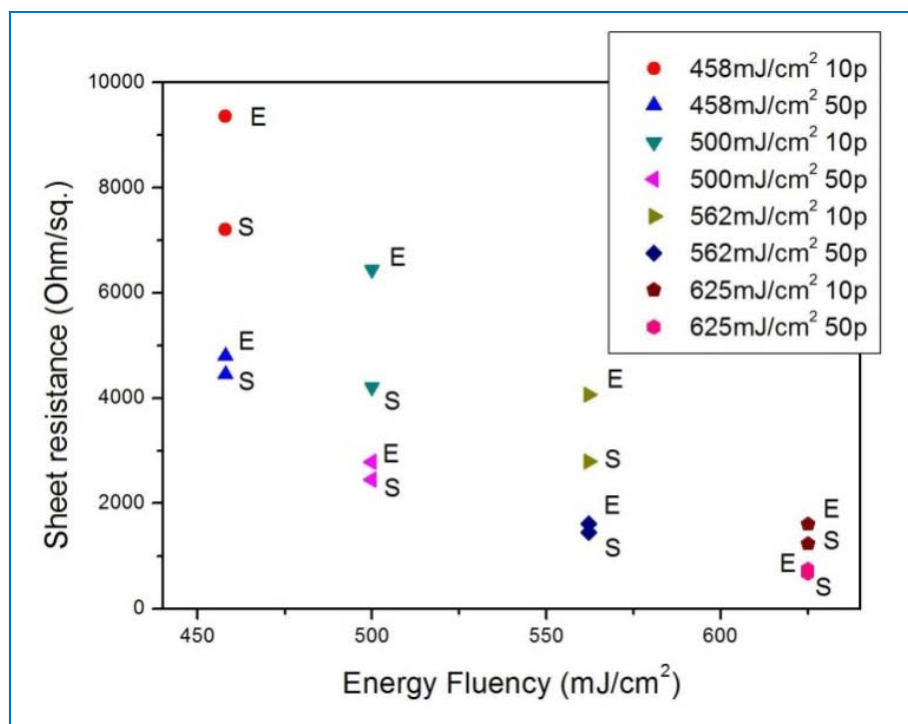
Η μεθοδολογία που ακολουθείται είναι η εξής: Εξάγουμε τα προφίλ BActive (άτομα Βορίου που βρίσκονται σε θέσεις αντικατάστασης και επομένως ηλεκτρικώς ενεργά) και BTotal για κάθε περίπτωση. Στη συνέχεια υπολογίζουμε την ευκινησία των φορέων για δεδομένο βάθος, η οποία εξαρτάται από την συγκέντρωση φορέων BTotal, είναι δηλαδή μια συνάρτηση της μορφής $\mu(BTotal(x))$, η οποία δίνεται από την σχέση:

$$\mu = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{C}{N_a}\right)^r} \quad (14.1)$$

όπου $\mu_{\min}=44.9\text{cm}^2/\text{Volt}\cdot\text{sec}$, $\mu_{\max}=470.5\text{cm}^2/\text{Volt}\cdot\text{sec}$ ¹⁹ δυο σταθερές που σχετίζονται με την ευκινησία του Βορίου στο πυρίτιο, $r=0.719$, $N_a=2.23\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$, ενώ η $C(x)$ υποδηλώνει την ολική συγκέντρωση Βορίου, η οποία στο Sentaurus δηλώνεται ως BTotal. Για κάθε τιμή του βάθους (από την επιφάνεια του δοκιμίου), x πολλαπλασιάζουμε το γινόμενο της ενεργούς συγκέντρωσης B με την αντίστοιχη ευκινησία. Στη συνέχεια ολοκληρώνουμε το γινόμενο αυτό με μεταβλητή το βάθος. Το αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης επί το φορτίο του ηλεκτρονίου εκφράζει την επιφανειακή αγωγιμότητα και ως εκ τούτου το αντίστροφο αυτού του γινομένου είναι η επιφανειακή αγωγιμότητα.

Στην Εικόνα 10.19 παρουσιάζουμε τιμές της επιφανειακής αντίστασης, που προέκυψαν τόσο από ηλεκτρικές μετρήσεις VDP (με τον τρόπο που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 3) όσο και από την επεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης για δείγματα 37N στα οποία η προσομοίωση της εμφύτευσης έγινε με χρήση Βορίου, ενώ κατά την μοντελοποίηση της ανόπτησης με KMC ενσωματώθηκαν οι προηγμένες βιβλιοθήκες Advanced Calibration 2007.03. Καταρχάς τόσο η αύξηση της πυκνότητας ενέργειας όσο και του αριθμού των παλμών οδηγεί σε ελάττωση της επιφανειακής αντίστασης όπως και αναμενόταν^{20 21}. Παρατηρούμε ότι για τους 50 παλμούς, η συμφωνία μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης είναι πολύ καλή, ενώ υπάρχει σημαντικότερη απόκλιση για τους 10 παλμούς. Η απόκλιση αυτή ελαττώνεται, αυξανόμενης της πυκνότητας ενέργειας. Οι υπολογισμοί μας, σε συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις, κατέδειξαν την σημαντική βελτίωση που προκαλεί η ακτινοβόληση στα επίπεδα ηλεκτρικής ενεργοποίησης

(περίπου μια τάξη μεγέθους ανάμεσα στις τιμές επιφανειακής αντίστασης για τις συνθήκες με την μέγιστη και την ελάχιστη ηλεκτρική ενεργοποίηση).

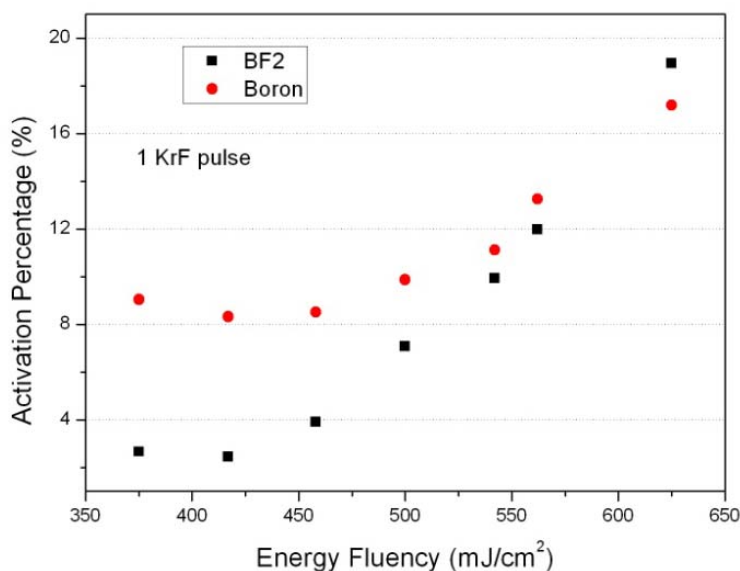


Εικόνα 10.19 Υπολογισθείσες (S) και πειραματικές (E) τιμές επιφανειακής αντίστασης για διάφορες τιμές πυκνότητας ενέργειας / αριθμό παλμών, για δείγμα 37N. Η ελάχιστη τιμή επιφανειακής αντίστασης επιτυγχάνεται στην συνθήκη 625 mJ/cm² - 50 παλμοί. Η προσομοίωση της εμφύτευσης έγινε με χρήση Βορίου, ενώ χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες Advanced Calibration 2007.03.

Η ασυμφωνία αυτή στους 10 παλμούς, μπορεί ίσως να αποδοθεί στο γεγονός ότι η προσομοίωση της εμφύτευσης, μπορεί μεν να αποδίδει πολύ ικανοποιητικά την μορφή του προφίλ προσμίξεων, αλλά δεν μπορούμε να είμαστε καθόλου σίγουροι για το κατά πόσο προσομοιώνει επακριβώς τις κατανομές όλων των μεγεθών (V, I, εκτεταμένες ατέλειες, κ.α.) και οι οποίες έχουν σημαντική επίδραση για την εξέλιξη της ηλεκτρικής ενεργοποίησης των ατόμων βορίου κατά την ανόπτηση. Με άλλα λόγια, αν οι αρχικές θέσεις των ατόμων βορίου καθώς και κάθε μορφής ατέλειας δεν είναι πλήρως καθορισμένες στην αρχή, τότε είναι πιθανό όσο η επίδραση του laser είναι ακόμα μικρή (μικρός αριθμός παλμών), η απόκλιση να είναι μεγαλύτερη. Η παρατήρηση αυτή ενισχύεται και από το γεγονός ότι η αναντιστοιχία πειράματος και προσομοίωσης αμβλύνεται όσο αυξάνει η πυκνότητα ενέργειας, καθώς μεγαλύτερη ποσότητα ενέργειας οδηγεί και σε πιο καθορισμένη κινητική των προσμίξεων. Πρέπει όμως να τονίσουμε ότι αυτές οι μικρές αποκλίσεις στις αρχικές συνθήκες μπορούν εύκολα να παρουσιαστούν λόγω της ίδιας της φύσης της μεθόδου εμφύτευσης. Μια ενδεχόμενη ανάλυση της εξέλιξης της πραγματικής εξέλιξης της συγκέντρωσης ενεργών ατόμων Βορίου, από την εμφύτευση μέχρι και τις ανοπτήσεις με πολλούς παλμούς, με χρήση SRP ή XPS πιθανόν να έριχνε περισσότερο φως στους ακριβείς μηχανισμούς της ενεργοποίησης των προσμίξεων.

Όσον αφορά την επίδραση της συνεμφύτευσης φθορίου στον όγκο του υλικού, οι υπολογισμοί κατέδειξαν ελαφρώς αυξημένες τιμές επιφανειακής αντίστασης στην περίπτωση που η

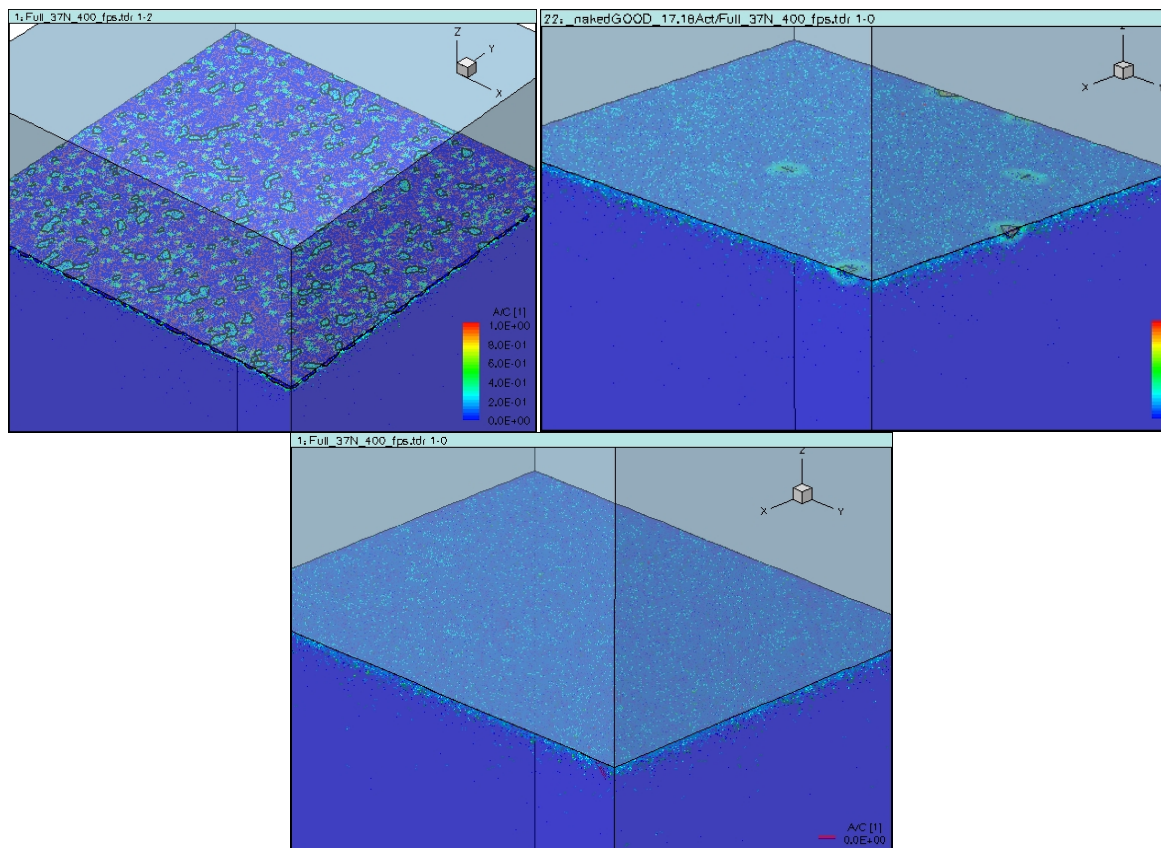
εμφύτευση γίνει λαμβάνοντας άτομα BF_2 αντί για Βόριο. Η εξάρτηση αυτής της αύξησης από τις συνθήκες ανόπτησης δεν είναι σταθερή, αλλά μπορούμε να πούμε ότι είναι της τάξης του 15 με 20%, γεγονός που απαντάται και στην βιβλιογραφία^{22 xviii}, ενώ μια εξήγηση του φαινομένου μπορεί να αποδοθεί σε χημικές αντιδράσεις Βορίου και Φθορίου που να οδηγούν σε απενεργοποίηση^{23 xviii}. Πιο συγκεκριμένα, ένα ποσοστό του Φθορίου κινείται προς την επιφάνεια κατά την ανόπτηση σχηματίζοντας συσσωματώματα τα οποία είτε αποτελούνται αποκλειστικά από Φθορίου είτε Φθόριο και Βόριο. Τελικώς τα συσσωματώματα αυτά, που στην ουσία πρόκειται για ατέλειες, που προκαλούν μείωση στα επίπεδα ενεργοποίησης των προσμίξεων βορίου. Στο διάγραμμα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από την προσομοίωση, της ακτινοβόλησης με ένα παλμό δειγμάτων 37N που έχουν υποστεί εμφύτευση με Βόριο και BF_2 αντίστοιχα, ανάλογα με την πυκνότητα ενέργειας.



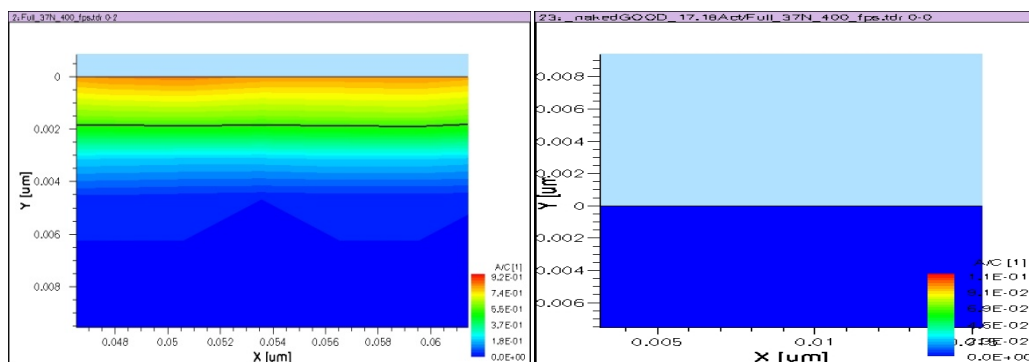
Εικόνα 10.1 Ποσοστό ενεργοποιημένων ατόμων Βορίου σε σχέση με τον ολικό αριθμό ατόμων Βορίου συναρτήσει της πυκνότητας ενέργειας για ακτινοβόληση με ένα παλμό, όπως προέκυψε από την προσομοίωση για δείγματα 37N για δυο διαφορετικά είδη εμφύτευσης (Βόριο και BF_2).

III. Επίδραση στην ανακρυστάλλωση

Στο κεφάλαιο που πραγματεύεται την εμφύτευση με πλάσμα είχαμε αναφερθεί στην αμορφοποίηση²⁴ που προκαλείται στα επιφανειακά στρώματα κατά την εμφύτευση με μόρια BF_2 . Η έκταση της αμορφοποίησης που εμφανίζεται είναι σε συμφωνία με τις μετρήσεις TEM για τα as-implanted δείγματα. Καθώς όμως οι μετρήσεις TEM δείχνουν σταδιακή εξάλειψη της καταστροφής και επανακρυσταλλοποίηση κατόπιν της ανόπτησης, θα πρέπει να έχουμε παρόμοια συμπεριφορά και στα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Οι εικόνες 10.21 και 10.22 παρουσιάζουν ακριβώς αυτό το γεγονός:



Εικόνα 10.21 Τρισδιάστατη απεικόνιση των εμφυτευμένων ιόντων και των αμορφοποιημένων περιοχών για δείγμα : α) που δεν έχει υποστεί εμφύτευση και ακτινοβόληση με β) ένα παλμό και γ) δέκα παλμούς 625 mJ/cm^2 . Η προσομοίωση της διαδικασίας εμφύτευσης έγινε με χρήση BF_2 .



Εικόνα 10.22 Δισδιάστατη απεικόνιση του ποσοστού αμορφοποίησης για : α) Απλή εμφύτευση β) ένα παλμό 625 mJ/cm^2 . Η μαύρη γραμμή απεικονίζει τη διεπιφάνεια άμορφου-κρυσταλλικού πυριτίου.

Οι παραπάνω εικόνες καταδεικνύουν εμφανώς την εξάλειψη, ουσιαστικά, της αμορφοποιημένης περιοχής από τον πρώτο κιόλας παλμό του laser για πυκνότητα ενέργειας 625 mJ/cm^2 , όπως ακριβώς αναμενόταν με βάση τα πειραματικά δεδομένα. Το βάθος της αμορφοποιημένης περιοχής μετά την εμφύτευση είναι κοντά στα 2 nm , παρουσιάζοντας ικανοποιητική ταύτιση με τις μετρήσεις TEM. Από αντίστοιχες εικόνες για την έκταση της αμορφοποίησης κατόπιν ανόπτησης με παλμούς διαφορετικής ενέργειας, γίνεται φανερό πως, αυξανόμενης της πυκνότητας ενέργειας του παλμού του laser, μεγαλώνει αντίστοιχα και ο βαθμός επανακρυσταλλοποίησης.

10.8 Ανακεφαλαίωση

Το κεφάλαιο αυτό αρχικά πραγματεύεται την προσπάθεια προσομοίωσης της αλληλεπίδρασης του KrF Excimer laser με το πυρίτιο όσον αφορά την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής, τόσο στη επιφάνεια όσο και κατά βάθος του δοκιμίου. Τα δεδομένα αυτά όχι μόνο περιγράφουν το φαινόμενο αυτό κάθε αυτό, αλλά και επιπλέον θα χρησιμοποιηθούν ως είσοδος για την μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων, τόσο με αναλυτικές όσο και με ΚΜC τεχνικές. Η προσομοίωση αυτή έγινε με χρήση αναλυτικών μεθόδων και κατόπιν μιας πολυπαραμετρικής διερεύνησης, με τα αποτελέσματα να είναι ιδιαίτερα ικανοποιητικά, αφού έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά ευρήματα αλλά και την θεωρία.

Η προσομοίωση της επίδρασης της ανόπτωσης με χρήση του KrF Excimer laser στην κινητική της διάχυσης των προσμίξεων, στέφθηκε με επιτυχία στο μεγαλύτερο βαθμό της, κυρίως με την χρήση αλγορίθμων ΚΜC αντί της συνεχούς προσέγγισης. Πιο συγκεκριμένα, ενώ τα αποτελέσματα της αριθμητικής επίλυσης όσον αφορά την κινητική των προσμίξεων Βορίου ήταν σε σχετική συνάφεια με τα πειραματικώς προσδιορισθέντα προφίλ, παρατηρήθηκαν σημαντικά προβλήματα όσον αφορά την περιγραφή της συμπεριφοράς της ενεργοποίησης των προσμίξεων, ιδιαίτερα για μικρές τιμές πυκνότητας ενέργειας. Έτσι, αρκετά γρήγορα καταφύγαμε στην ΚΜC προσέγγιση, η οποία ήταν δυνατόν να εφαρμοσθεί λόγω των συγκεκριμένων χαρακτηριστικών της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας του KrF laser με το πυρίτιο σε αυτό το εύρος διάρκειας παλμού. Καταρχάς, η επιφανειακή ακτινοβολία επιτρέπει την αναπαράσταση του laser ως πηγή θερμότητας στην επιφάνεια μέσω ενός αρχείου που δίνει την εξέλιξη της επιφανειακής θερμοκρασίας με τον χρόνο, ενώ η εισαγωγή παράλληλων ισοθερμοκρασιακών γραμμών στον όγκο του υλικού, επιτρέπει την αντιμετώπιση του προβλήματος σε μια διάσταση. Με βάση τα θερμοκρασιακά προφίλ που προέκυψαν από την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας του KrF laser με το πυρίτιο, προχωρήσαμε στην μελέτη της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων, κατά την ανόπτωση. Ως αρχικές κατανομές προσμίξεων χρησιμοποιήθηκαν τα προφίλ που προέκυψαν από την προσομοίωση της εμφύτευσης έχοντας ως είδη είτε Βόριο, είτε BF_2 . Τα κυριότερα αποτελέσματα μπορούν να συνοψισθούν ως εξής:

Η μετατόπιση των προφίλ συγκέντρωσης βορίου που προέκυψαν ακολούθησαν πιστά τα αντίστοιχα πειραματικά μετρημένα σε όλο το εύρος των συνδυασμών πυκνότητας ενέργειας / αριθμών παλμών που στάθηκε δυνατόν να προσομοιωθούν. Αυτό ισχύει τόσο στην περίπτωση που το είδος εμφύτευσης ήταν το Βόριο, όσο και στην περίπτωση που ήταν BF_2 . Ιδιαίτερα για το τελευταίο, η παρατηρούμενη μετατόπιση του προφίλ ήταν ελαφρώς μικρότερη σε συμφωνία με την βιβλιογραφία. Σε κάθε περίπτωση η μέγιστη μετατόπιση δεν ξεπέρασε τα 2.5 nm, γεγονός που αποτελεί ακόμα μια μαρτυρία για τον ισχυρισμό ότι η ανόπτωση διεξήχθη σε καθεστώς μη τήξης. Παράλληλα, η σημαντική επιτυχία πρόβλεψης της συμπεριφοράς της μετατόπισης δεν αναφέρεται μόνο, σε αυτό καθεαυτό το φαινόμενο της ανόπτωσης, αλλά καθιστά έγκυρες ως ένα βαθμό και όλες τις προηγούμενες διαδικασίες που ακολουθήσαμε για τη μοντελοποίηση της εμφύτευσης και ακτινοβολήσης των δειγμάτων μέσω του Sentaurus.

Μια ακόμα επιτυχία της προσομοίωσης στάθηκε η περιγραφή της εξάλειψης του αμορφοποιημένου στρώματος στην επιφάνεια του δισκίου σε συμφωνία με τις μετρήσεις TEM. Τέλος, όσον αφορά την πρόβλεψη της επιφανειακής αντίστασης, τα αποτελέσματα για την επίδραση

της ακτινοβόλησης με 50 παλμούς ήταν σε απόλυτη συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις. Από την άλλη πλευρά, η ασυμφωνία αυτή στους 10 παλμούς, μπορεί ίσως να αποδοθεί στο γεγονός ότι η προσομοίωση της εμφύτευσης, μπορεί μεν να αποδίδει πολύ ικανοποιητικά την μορφή του προφίλ προσμίξεων, αλλά δεν μπορούμε να είμαστε καθόλου σίγουροι για το κατά πόσο προσομοιώνει επακριβώς τις κατανομές όλων των μεγεθών (V, I, εκτεταμένες ατέλειες, κ.α.) και οι οποίες έχουν σημαντική επίδραση για την εξέλιξη της ηλεκτρικής ενεργοποίησης των ατόμων βορίου κατά την ανόπτηση.

Μια ενδεχόμενη ανάλυση της εξέλιξης της πραγματικής εξέλιξης της συγκέντρωσης ενεργών ατόμων Βορίου, από την εμφύτευση μέχρι και τις ανοπτήσεις με πολλούς παλμούς, με χρήση SRP ή XPS θα προσφέρει σημαντική πληροφορία σχετικά με τους ακριβείς ακριβείς μηχανισμούς της ενεργοποίησης των προσμίξεων.

Βιβλιογραφικές Αναφορές 10^{ου} κεφαλαίου

Synopsys Sentaurus Process User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Carlo User Guide ver. 2008.09

Synopsys Sentaurus Monte Advanced Calibration User Guide ver. 2008.09

D. Bauerle “Laser Processing and Chemistry” εκδ. Springer 2000

¹ “Simulation of laser annealing with Sentaurus Process” Synopsys Case

² M. Blomberg, K. Naukkarinen, T. Tuomi et al., *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 2327

³ J. Narayan, R.B. James, O.W. Holland et al., *J. Vac. Sci. Technol. A* 3(4) (1985) 1836

⁴ S. De. Unamuno, E. Fogarassy, *Appl. Surf. Sci.* 36 (1989) 1-11

⁵ W. Szyszko, *Appl. Surf. Sci.* 90 (1995) 325-331

⁶ V. Gonda et al., *15th IEEE 2007 RTP proceedings* p. 257-261

⁷ M. Hernandez. J. Venturini. D. Zahorski et al., *Ap. Surf. Sci.* 208-209 (2003) 345-351

⁸ A. Florakis, N. Misra, C. Grigoropoulos et al., *Mat. Sci. and Eng. B* 154-155 (2008) 39-42

⁹ A. Florakis, D. Tsoukalas, I. Zergioti et al., *Nucl. Instr. Mat. B* 253 1-2 (2006) 13-17

¹⁰ I. Martin-Bragado, Ph.D. thesis, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain, 2004.

¹¹ M. Jaraiz et al., in *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*, Athens, Greece, pp. 10–17, September 2001.

¹² N. Strecker, V. Moroz, and M. Jaraiz, in *Technical Proceedings of the International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems (Nanotech 2002)*, vol. 1, San Juan, Puerto Rico, USA, pp. 462–465, April 2002.

¹³ Martin-Bragado, Avci, I., Zographos, N. et al., *ESSDERC 2007 - Proceedings of the 37th European Solid-State Device Research Conference*, art. no. 4430946, pp. 334-337 (2008)

¹⁴ V. Moroz, I. Martin-Bragado, S. Felch et al., *J. Vac. Sci. Technol., B* 26 (1), pp. 439-442 (2008)

¹⁵ I. Martin-Bragado, S. Tian, M. Johnson et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 253 (1-2), pp. 63-67 (2006)

¹⁶ S.B. Felch, Z. Fang, B.-W. Koo et al., *Surface and Coatings Technology* 156 (2002) 229–236

¹⁷ D. Lee, S. Baek, S. Heo et al., *Electrochem. Solid-State Lett.* 9 (1) G19-G21 (2006)

¹⁸ F. Cristiano, N. Cherkashin and P. Calvo et al. *Mat. Sci. Eng. B* 114–115 (2004), pp. 174–175.

¹⁹ W.R. Thurber, R.L. Mattis, Y.M. Liu et al., *Natl. Bureau Standards Special Publ.* 400 (1981).

²⁰ K.K. Ong, K.L. Pey, P.S. Lee et al., *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006) 082101.

²¹ Susan Earles, Mark Law, Kevin Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 669 © 2001 Materials Research Society J4.1.1

²² T. Noda, W. Vandervorst, S. Felch et al., “Analysis of Dopant Diffusion and Defect Evolution during sub-millisecond Non-melt Laser Annealing based on an Atomistic Kinetic Monte Carlo Approach”, (2006)

²³ N. Cowern et al., *Appl. Phys. Lett.* 86, 101905 (2005).

²⁴ N. Zographos, I. Martin-Bragado, *Materials Research Society Symposium Proceedings* 1070, pp. 93-98 (2008)

ΕΠΙΛΟΓΟΣ

1. Ανακεφαλαίωση και συμβολή στην έρευνα

Ένας από τους κινητήριους μοχλούς πάνω στους οποίους στηρίζεται η ραγδαία τεχνολογική ανάπτυξη στις μέρες μας αποτελεί αναμφίβολα η ταχύτατη εξέλιξη των επεξεργαστών, οι οποίοι παρέχουν την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ για την διεκπεραίωση αναρίθμητων εφαρμογών σε οποιοδήποτε τομέα της ανθρώπινης δραστηριότητας. Η έντονη ανάδραση ανάμεσα στη βιομηχανία μικροηλεκτρονικής και τις αυξημένες απαιτήσεις που ανακύπτουν, ωθεί την πρώτη στον σχεδιασμό και την υλοποίηση ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, με κλιμακούμενη επεξεργαστική ισχύς. Η βελτίωση αυτή, καθίσταται εφικτή διάμεσο της αύξησης του αριθμού των τρανζίστορ που ολοκληρώνονται. Αυτή, με την σειρά της απαιτεί ανάλογη μείωση των πλευρικών διαστάσεων της στοιχειώδους δομικής κυψελίδας επεξεργασίας, η οποία είναι γνωστή ως τρανζίστορ CMOS. Η σμίκρυνση στις διαστάσεις αυτή, οδηγεί για λόγους διατήρησης της συμμετρίας των εσωτερικών ηλεκτρικών πεδίων και σε αναπόφευκτη μείωση των κατακόρυφων διαστάσεων των επαφών. Η έλευση κάθε καινούργιου τεχνολογικού κόμβου οριοθετεί και μια νέα σειρά προκλήσεων, με τις οποίες έρχεται αντιμέτωπη η βιομηχανία, το μέγεθος των οποίων κλιμακώνεται όσο οι χαρακτηριστικές διαστάσεις τείνουν σε νανομετρική κλίμακα. Η μείωση των βάθους των επαφών προϋποθέτει την υιοθέτηση νέων στρατηγικών εμφύτευσης και ανόπτησης των προσμίξεων.

Το πρώτο βήμα για τον σχηματισμό υπέρ-ρηχών επαφών ικανών να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις όπως αυτές διαμορφώνονται για τον ελάχιστο τεχνολογικό κόμβο από τον οδικό χάρτη ITRS¹, είναι η εμφύτευση των προσμίξεων να γίνεται με την ελάχιστη δυνατή ενέργεια, έτσι ώστε οι προσμίξεις να κατανεμηθούν όσο το δυνατόν εγγύτερα στην επιφάνεια. Οι απαιτήσεις όσον αφορά το αρχικό βάθος επαφής μετά την εμφύτευση για την γενιά επεξεργαστών στα 32 nm διαμορφώνονται στο εύρος των 5-9 nm, λαμβάνοντας ως συγκέντρωση αναφοράς τα $5E18\text{cm}^{-3}$ ⁱⁱⁱ. Για την επίτευξη των τιμών αυτών, οι συμβατικές τεχνικές ιοντικής εμφύτευσης χαμηλής ενέργειας κρίνονται ακατάλληλες καθώς οδηγούν σε επιμόλυνση των δισκίων. Έτσι, όταν άρχισαν να διαφαίνονται τα κατασκευαστικά όρια αυτής της μεθόδου, η βιομηχανία μικροηλεκτρονικής στράφηκε από νωρίς στον σχεδιασμό εναλλακτικών τεχνικών εμφύτευσης, οι οποίες θα ήταν απαλλαγμένες από τα εγγενή μειονεκτήματα της ιοντικής εμφύτευσης. Ανάμεσα στις λύσεις που προτάθηκαν ξεχωρίζουν οι μέθοδοι Plasma Immersion Ion Implantation (PIII)², η μοριακή εμφύτευση (με $B_{10}H_{14}$, $B_{18}H_{22}$ κ.α.)³, η GILD (Gas immersion laser doping)⁴ και η (Plasma Doping, PLAD)^{5 6 7}, κάθε μια από τις οποίες παρουσιάζει μια σειρά πλεονεκτημάτων και μειονεκτημάτων, με αποτέλεσμα να μην έχει κριθεί ακόμα το ποια θα αποτελέσει τον διάδοχο της ιοντικής εμφύτευσης. Καθώς τα δείγματα που είχαμε στην διάθεση μας προήλθαν από εμφύτευση BF_3 μέσω της PLAD, εστιάσαμε σε αυτή την τεχνική και διερευνήσαμε την επίδραση της ακτινοβόλησης με δυο διαφορετικά είδη laser στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των κατανομών Βορίου που σχηματίστηκαν μέσω της PLAD.

Το δεύτερο, αλλά εξίσου σημαντικό βήμα στην διαδικασία κατασκευής των ρηχών επαφών είναι η θερμική ανόπτηση των δειγμάτων. Ο στόχος είναι διττός: ανακρυστάλλωση των κατεστραμμένων από την εμφύτευση πλεγματικών περιοχών και τοποθέτηση όσο το δυνατόν

περισσότερων ατόμων προσμίξεων σε θέσεις αντικατάστασης έτσι ώστε να βελτιωθούν τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά των διατάξεων CMOS. Η θερμική αυτή επεξεργασία απαιτεί ιδιαίτερα προσεκτικό σχεδιασμό, όσον αφορά το ποσό της θερμότητας που θα εισαχθεί, έτσι ώστε να επιτευχθεί το βέλτιστο ισοζύγιο ανάμεσα στις απαιτήσεις για ελαχιστοποίηση της διάχυσης και την αύξηση των επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης της διάταξης. Με στόχο την ελαχιστοποίηση της διάχυσης, η βιομηχανία στράφηκε από τις συμβατικές τεχνικές ανόπτησης σε ειδικούς φούρνους, σε διατάξεις Rapid Thermal Annealing (RTA) και στη συνέχεια σε διατάξεις spike και flash⁸. Τα τελευταία χρόνια, σημαντική έρευνα έχει διεξαχθεί στην χρησιμοποίηση διατάξεων laser, αρχικά σε καθοστώσ τήξης και στη συνέχεια σε καθοστώσ μη τήξης, έτσι ώστε να αξιοποιηθούν τα εξαιρετικά χαρακτηριστικά των διατάξεων αυτών. Διάφοροι τύποι laser δοκιμάστηκαν, ανάμεσα στα οποία, Excimer^{9 10 11 12 13}, CO₂^{14 15 16 17 18}, Nd:YAG¹⁹, Στερεάς Κατάστασης²⁰. Η χρήση laser επιτρέπει την θέρμανση και ψύξη των δοκιμών σε χρόνους, πολύ μικρότερους από τους χαρακτηριστικούς χρόνους των μηχανισμών που σχετίζονται με την διάχυση. Επιπλέον προσφέρει ικανοποιητική ανακρυστάλλωση και απομάκρυνση των ατελειών και κυρίως την επίτευξη υψηλών συγκεντρώσεων ενεργοποιημένων προσμίξεων, σε τιμές ακόμα και πάνω από τα όρια που προβλέπει η θερμοδυναμική σε κατάσταση ισορροπίας. Τέλος, η επιταξιακή ανάπτυξη σε στερεά φάση (Solid State Epitaxial Regrowth, SPER) αποτελεί έναν ακόμα πιθανό υποψήφιο για την κατασκευή ρηχών επαφών²¹.

Στην παρούσα ερευνητική προσπάθεια, εστίασαμε στην υιοθέτηση δυο διαφορετικών προσεγγίσεων για την ανόπτηση δοκιμών πυριτίου εμφυτευμένων μέσω της τεχνικής PLAD, με κοινό χαρακτηριστικό την απουσία τήξης. Στόχος μας, δεν ήταν φυσικά η δημιουργία ρηχών επαφών οι οποίες θα μπορούσαν να είναι άμεσα συγκρίσιμες με αυτές στα CMOS, που κατασκευάζονται από εταιρίες κολοσσούς, όπως η Intel ή η AMD, καθώς κάθε τέτοια προσπάθεια θα ήταν ουτοπική. Η βασική μας επιδίωξη είναι η ανάπτυξη και επίδειξη τεχνολογιών ανόπτησης, οι οποίες θα ήταν σε θέση να οδηγήσουν σε υψηλά ποσοστά ενεργοποίησης των προσμίξεων, με την αντίστοιχη διάχυση να κυμαίνεται εντός των ορίων που έχουν τεθεί από την χάρτα ITRS. Καθώς τα δείγματα που είχαμε στην διάθεση μας, συν τω χρόνο, δεν ήταν στην αιχμή, αναγκαστικά, οι επαφές που σχηματίζαμε δεν ήταν πλέον στο state of art. Άλλωστε, τα τέσσερα χρόνια που μεσολάβησαν από την παραλαβή των δειγμάτων, είναι πραγματικά πολύ μεγάλος στον χώρο της μικροηλεκτρονικής, όπου οι εξελίξεις είναι ταχύτατες. Όμως, αποδείξαμε, ότι αν είχαμε στην διάθεση μας, νέα δείγματα, τα οποία θα παρουσίαζαν χαμηλότερο αρχικό βάθος εμφύτευσης, τότε οι εφαρμοζόμενες τεχνικές ανόπτησης θα οδηγούσαν σε ένα τελικό αποτέλεσμα, αρκετά ανταγωνιστικό. Η πρώτη έγκριεται στην χρήση Excimer KrF laser ($\lambda=248$ nm) για ανόπτηση σε καθοστώσ nanosecond, έτσι ώστε να εκμεταλλευτούμε τους υπερβραχείς παλμούς για την επίτευξη αδιαβατικής θέρμανσης σε χρόνους πολύ μικρότερους από αυτούς που απαιτούνται για την εμφάνιση φαινομένων διάχυσης. Στα πλαίσια της δεύτερης προσέγγιση σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε μια διάταξη ακτινοβολήσης με βάση ένα CO₂ laser ($\lambda=10.6$ μm) και διάρκεια παλμού της τάξης των λίγων millisecond. Η ακτινοβολήση με αυτού του είδους laser, και εφόσον έχει προηγηθεί προθέρμανση του δειγματος στο εύρος των 600-650°C, προσφέρει μια σειρά από σημαντικά πλεονεκτήματα. Ανάμεσα σε αυτά, ξεχωρίζουν η αποφυγή εμφάνισης φαινομένων θερμικού σοκ, τα οποία είναι συχνά κατά την ανόπτηση με διατάξεις flash, και τα οποία μπορούν να προκαλέσουν παραμορφώσεις ή ακόμα και μικρορωγμές στο δισκίο. Ένα ακόμα ιδιαίτερα

ενδιαφέρον χαρακτηριστικό, το οποίο μπορεί να προκύψει εφόσον η δέσμη είναι p πολωμένη και η γωνία ακτινοβολήσης ταυτίζεται με την γωνία Brewster's. Στην περίπτωση αυτή, τα φαινόμενα μεταβλητής ανακλαστικότητας, λόγω των δομών που έχουν αποτυπωθεί στην επιφάνεια μειώνεται δραστηρικά. Αν και η ακτινοβολήση υπό γωνία Brewster's έχει ευεργετική επίδραση σε κάθε μήκος κύματος, τα οφέλη μεγιστοποιούνται όσο αυξάνει το μήκος κύματος του laser, καθώς έτσι είναι λιγότερο ευαίσθητο σε φαινόμενα interference²². Καθώς στις σύγχρονες γραμμές παραγωγής, η θερμική ανόπτηση διεξάγεται αφού έχει προηγηθεί η εναπόθεση διάφορων επιφανειακών δομών, η δυνατότητα αυτή μείωσης της επίδρασης της μορφολογίας στην ανακλαστικότητα, αποτελεί ένα σημαντικό πλεονέκτημα της χρήσης laser διοξειδίου του άνθρακα. Ήδη αυτή η τάση, άρχισε να μπαίνει και στην παραγωγική διαδικασία με την παρουσίαση της διάταξης ακτινοβολήσης LSA 100, από την Ultratech. Η διάταξη αυτή, είναι ικανή να θερμάνει, μέσω σάρωσης, δισκία 13", και απευθύνεται στις μεγάλες εταιρίες κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων.

Κατά την ειπώνηση αυτής της διδακτορικής διατριβής, είχαν τεθεί τρεις κύριοι στόχοι:

α) Η ανάπτυξη τεχνικών ανόπτησης που να οδηγούν στην επίτευξη των μέγιστων δυνατών επιπέδων ηλεκτρικής ενεργοποίησης με παράλληλη ελαχιστοποίηση της διάχυσης των προσμίξεων. Αντικειμενικός στόχος ήταν ο ακριβής προσδιορισμός των βέλτιστων συνθηκών ακτινοβολήσης, μέσω της πολυπαραμετρικής διερεύνησης και ενδεδειγμένους ηλεκτρικού και μορφολογικού χαρακτηρισμού των ανοπτηθέντων δειγμάτων.

β) Η σχεδίαση και κατασκευή μιας πρότυπης διάταξης ακτινοβολήσης με βάση ένα laser διοξειδίου του άνθρακα, η οποία θα επέτρεπε την θέρμανση του πυριτίου εντός ελαχίστων ms, σε θερμοκρασίες μέχρι και 1300°C με ταυτόχρονη δυνατότητα παρακολούθησης της επιφανειακής θερμοκρασίας.

γ) Η μοντελοποίηση όλων των διαδικασιών που ενέχονται στην διαδικασία παρασκευής των ρηχών επαφών, ήτοι της εμφύτευσης με πλάσμα, και της αλληλεπίδρασης των δυο ειδών ακτινοβολίας με το πυρίτιο, τόσο όσον αφορά τις κατανομές θερμότητας που εισάγονται αλλά και την επίδραση αυτών στην κινητική της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων.

Όσον αφορά τον πρώτο στόχο, αν και τα χαρακτηριστικά των δυο laser, οδηγούν σε τελείως διαφορετικούς μηχανισμούς απορρόφησης και αλληλεπίδρασης τους από το πυρίτιο, εν τούτοις, σε γενικές γραμμές και οι δυο, οδήγησαν στον σχηματισμό ρηχών επαφών. Οι επαφές αυτές πληρούν τα βασικότερα χαρακτηριστικά που έχουν τεθεί για τον σχηματισμό των επόμενων γενεών ολοκληρωμένων κυκλωμάτων, κυρίως όσον αφορά την παρατηρούμενη διάχυση αλλά και την ενεργοποίηση των προσμίξεων. Πιο συγκεκριμένα, η ανόπτηση με χρήση Excimer KrF laser, οδήγησε στην ανακρυστάλλωση²³ των κατεστραμμένων περιοχών, όπως αποδείχτηκε από τις μετρήσεις TEM και στην σημαντική βελτίωση των αγωγιμων χαρακτηριστικών της επαφής, όπως αυτή εκφράζεται με την μείωση κατά μια τουλάχιστον τάξη μεγέθους της επιφανειακής αγωγιμότητας. Ιδιαίτερα για την συνθήκη των 650 mJ/cm² – 50 παλμοί η τιμή της επιφανειακής αντίστασης που μετρήθηκε (680Ω/□) είναι πολύ κοντά στην ελάχιστη δυνατή τιμή (550 Ω/□), όπως προβλέπεται από την θεωρία για την δεδομένη κατανομή συγκέντρωσης, γεγονός που αποδεικνύει την αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Ακόμα, καθώς σε όλη την διαδικασία το πυρίτιο παραμένει σε στερεά κατάσταση και η διάρκεια του παλμού είναι πολύ μικρή (FWHM=20 ns), η παρατηρούμενη μετατόπιση του προφίλ, ακόμα και για τις συνθήκες που οδηγούν σε πολύ καλά επίπεδα ενεργοποίησης είναι το πολύ 2.5 nm, τιμή που είναι μικρότερη από τις απαιτήσεις που

τίθενται από την χάρτα ITRS για την επόμενη γενιά επεξεργαστών. Επίσης η μεγάλη κλίση του προφίλ (2.4nm/δεκάδα) αποτρέπει την εμφάνιση παρασιτικών φαινομένων, όπως punch trough. Συνολικά, η ακτινοβόληση με KrF laser σε καθεστώς μη τήξης, είναι ιδιαίτερα υποσχόμενη όσον αφορά την δημιουργία επαφών, καθώς πληροί όλα τα βασικά χαρακτηριστικά (ανακρυστάλλωση, απομάκρυνση των ατελειών, αποτελεσματική ενεργοποίηση και ελάχιστη διάχυση των προσμίξεων). Το γεγονός αυτό, συνδυασμό με τα εγγενή πλεονεκτήματα της χρήσης Excimer laser, καθιστά τα laser αυτά ως ένα πολύ ελκυστικό υποψήφιο για την ενσωμάτωση τους στην γραμμή παρασκευής των ρηχών επαφών.

Από την άλλη πλευρά η ανόπτηση με CO₂ laser, σε χρόνους της τάξης των λίγων ms, δειγμάτων που έχουν υποστεί προθέρμανσης στους 600 με 650°C, είχε ως αποτέλεσμα την επίτευξη επιπέδων ενεργοποίησης ακόμα και πάνω από τα μέγιστα προβλεπόμενα από το όριο στερεάς διαλυτότητας του Βορίου στο πυρίτιο για τα δεδομένα προφίλ συγκέντρωσης. Πραγματοποιήθηκε διερεύνηση για διάφορες παραμέτρους, οι κυριότερες εκ των οποίων ήταν η πυκνότητα ισχύος, η διάρκεια παλμού και η θερμοκρασία προθέρμανσης του δείγματος. Ειδικά για το δείγμα με ονομαστικές συνθήκες εμφύτευσης ενέργειας – δόσης, 0.6keV / 3E15cm², και ακτινοβόληση επί 8ms η βέλτιστη μετρηθείσα μέση τιμή στο κέντρο της σποτ ήταν 623 Ω/□. Και αυτό, χωρίς να παρατηρηθεί σημαντική διάχυση. Και στην περίπτωση αυτή, η σημαντική βελτίωση των ηλεκτρικών ιδιοτήτων συνοδεύεται με ελαχιστοποίηση της διάχυσης (από 1 έως 2nm)²⁴, τουλάχιστον στις συνθήκες διάρκειας παλμού μέχρι και τα 8ms, καθώς στα 10ms παρατηρείται σημαντική μετατόπιση του προφίλ. Η δουλειά που έγινε με ακτινοβόληση με χρήση CO₂ είναι από τις ελάχιστες που έχουν γίνει την τελευταία δεκαετία, τουλάχιστον σε μη βιομηχανικό επίπεδο. Ταυτόχρονα όμως βρίσκεται σε ένα πεδίο, στο οποίο αναμένεται να στραφεί σημαντικό μέρος της ερευνητικής κοινότητας, λόγω των πλεονεκτημάτων που παρουσιάζει. Σε κάθε περίπτωση, τα πορίσματα της προσπάθειας αυτής προσφέρουν ένα σύνολο συνθηκών ακτινοβόλησης τα οποία οδηγούν σε πολύ καλές ηλεκτρικές και μορφολογικές ιδιότητες.

Της ακτινοβόλησης με laser διοξειδίου του άνθρακα, προηγήθηκε η σχεδίαση και υλοποίηση μιας πλήρους διάταξης ακτινοβόλησης η οποία δημιουργήθηκε με γνώμονα την θέρμανση δισκίων πυριτίου σε ένα εύρος από 1100 έως 1300°C σε ένα χρονικό διάστημα της τάξης των μερικών ms. Λόγω της ανάγκης για προθέρμανση των δειγμάτων στους 600-650°C, σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε μια θερμαντική διάταξη, ειδικά προσαρμοσμένη στις ανάγκες της ανόπτησης με CO₂. Η ανάγκη για την προθέρμανση πηγάζει από το γεγονός ότι το πυρίτιο είναι διαπερατό στα 10.6 μm σε θερμοκρασία δωματίου, με τον συντελεστή απορρόφησης να αυξάνει υπερειθετικά με την θερμοκρασία. Έτσι, η προθέρμανση συντελεί στην ελαχιστοποίηση του ποσού θερμότητας που απαιτείται για την επίτευξη δεδομένης επιφανειακής θερμοκρασίας, αλλά και στην αποφυγή φαινομένων θερμικής διαφυγής και θερμικού σοκ. Παράλληλα, η χρήση πυρόμετρου υπερύθρου έδωσε την δυνατότητα προσδιορισμού της επιφανειακής θερμοκρασίας σε πραγματικό χρόνο, γεγονός που επιτρέπει τον αποτελεσματικότερο έλεγχο και καταγραφή της διαδικασίας ακτινοβόλησης. Η διαδικασία πυρομέτρησης παρά τα εγγενή προβλήματα που παρουσίασε, ειδικά σε ακτινοβολήσεις μικρής διάρκειας και διαμέτρου του σποτ (λόγω των χαρακτηριστικών του πυρόμετρου), έδωσε επιπλέον την δυνατότητα βαθμονόμησης και ελέγχου της αξιοπιστίας της προσομοίωσης της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας CO₂ με το πυρίτιο. Πρέπει τέλος να τονίσουμε ότι η διάταξη αυτή είναι η μοναδική (που τουλάχιστον έχει δημοσιευτεί την χρονική

στιγμή, Ιανουάριος 2010 που έγινε η συγγραφή της παρούσας διατριβής) σε ακαδημαϊκό επίπεδο παγκοσμίως¹.

Μια τελευταία, αλλά όχι λιγότερο σημαντική πτυχή της προσπάθειας ήταν η μοντελοποίηση και προσομοίωση όλων των διαδικασιών από την εμφύτευση με πλάσμα μέχρι και την ανόπτηση με laser, τόσο από θερμικής σκοπιάς, όσο και από αυτή της πρόβλεψης της κινητικής της διάχυσης και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. Η προσπάθεια μοντελοποίησης της εξέλιξης της κατανομής της θερμοκρασίας στον όγκο του υλικού κατά την διάρκεια της ακτινοβόλησης ξεκίνησε με χρήση άλλων λογισμικών πακέτων, αλλά καταλήγοντας τελικά στο λογισμικό Sentaurus Process της Synopsys, το οποίο αποτελεί το Industry standard στον χώρο της μικροηλεκτρονικής και το οποίο από το 2007, συμπεριέλαβε ρουτίνες μοντελοποίησης της ακτινοβόλησης με laser. Το μεγάλο πλεονέκτημα του συγκεκριμένου λογισμικού αποτελεί η δυνατότητα επίλυσης πολύ προηγμένων μοντέλων διάχυσης παράλληλα με την επίλυση της εξίσωσης της θερμότητας. Τα παραπάνω, σε συνδυασμό με το γεγονός ότι το λογισμικό είναι σχεδιασμένο για διεργασίες που σχετίζονται με το πυρίτιο, προσφέρουν εξαιρετικές δυνατότητες δυναμικής πρόβλεψης όχι μόνο των θερμοκρασιακών προφίλ που εισάγονται στον όγκο του πυριτίου αλλά και της επίδρασης τους στην κατανομή των προσμίξεων. Επιπλέον, το Sentaurus είναι σε θέση να προσομοιώσει την κατανομή της συγκέντρωσης των προσμίξεων όπως αυτό προκύπτει από την διαδικασία της εμφύτευσης και το οποίο στη συνέχεια μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως είσοδος στους μετέπειτα υπολογισμούς για την εξέλιξη της θερμοκρασίας και της διάχυσης.

Η πρώτη διαδικασία που μοντελοποιήθηκε ήταν η εμφύτευση με πλάσμα, διεργασία για την οποία δεν υπήρχε έτοιμη ρουτίνα στο λογισμικό και η οποία διαφοροποιείται από τα προκαθορισμένα μοντέλα συμβατικής ιοντικής εμφύτευσης. Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, ακολουθήσαμε την προσέγγιση των Walther et al.^{vii}, οι οποίοι με την βοήθεια φασματοσκοπίας μάζας αντιστοίχησαν τις πειραματικές δόσεις και ενέργειας σε νέα κανάλια ενέργειας και δόσης, με στόχο την δημιουργία μιας ακολουθίας εμφυτεύσεων. Το συνολικό αποτέλεσμα ισοδυναμεί τελικά με την κατανομή συγκέντρωσης που τελικά προέκυψε από την εμφύτευση της τεχνικής PLAD. Με την βοήθεια κατάλληλων αναγωγών και κανονικοποιήσεων με βάση τα δικά μας δεδομένα, και χρησιμοποιώντας την πραγματική δόση όπως αυτή προσδιορίστηκε από μετρήσεις SIMS, κατέστη δυνατή η πρόβλεψη των αποτελεσμάτων της εμφύτευσης και για τις τέσσαρες συνθήκες εμφύτευσης για τις οποίες είχαμε πειραματικά δεδομένα στην διάθεση μας. Η ταύτιση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από τις πειραματικές μετρήσεις και την προσομοίωση είναι εντυπωσιακή²⁵ είτε χρησιμοποιήσαμε ως είδος εμφύτευσης το Βόριο είτε μοριακό BF₂. Στην τελευταία περίπτωση μάλιστα οι προβλέψεις όσον αφορά την έκταση της - αμοροφοποιημένης λόγω της εμφύτευσης περιοχής - παρουσιάζουν μεγάλο βαθμό συμφωνίας με τις τιμές που προκύπτουν από τις μικρογραφίες TEM.

Η προσομοίωση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το πυρίτιο χωρίστηκε σε δυο επιμέρους τμήματα, ανάλογα με τον τύπο του laser που χρησιμοποιήθηκε κάθε φορά εξ' αιτίας των διαφορετικών μηχανισμών απορρόφησης αλλά και της μορφής των προκαθορισμένων μοντέλων επίλυσης που προσφέρει το λογισμικό. Πράγματι, η μοντελοποίηση της επίδρασης της

¹ Τον Νοέμβριο του 2010, παρουσιάστηκε στο RTP2010, μια παρόμοια εργασία, από τους K.A. Iyengar, P. Clancy, M. Thompson.

ακτινοβόλησης του πυριτίου με χρήση KrF Excimer laser, διευκολύνεται αφενός μεν από το γεγονός ότι ο συντελεστής απορρόφησης του πυριτίου σε αυτό το μήκος κύματος δεν παρουσιάζει σημαντική εξάρτηση από την θερμοκρασία και την συγκέντρωση φορέων, και αφετέρου από το ότι το προκαθορισμένο μοντέλο επίλυσης του λογισμικού ταιριάζει απόλυτα με τα επιμέρους χωρικά και χρονικά χαρακτηριστικά του παλμού του συγκεκριμένου τύπου laser. Με τον τρόπο αυτό στάθηκε δυνατή η πρόβλεψη της εξέλιξης της θερμοκρασιακής κατανομής που εισήχθη στον όγκο του πυριτίου για κάθε συνθήκη πυκνότητας ενέργειας που χρησιμοποιήθηκε. Αν και δεν υπήρχαν στην διάθεση μας πειραματικές μετρήσεις της θερμοκρασίας για να τις συγκρίνουμε άμεσα με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, μολαταύτα, η αξιοπιστία των υπολογισμών ενισχύεται από ένα πλήθος έμμεσων παρατηρήσεων, καθώς και από το γεγονός ότι με την χρήση αυτών των αλγορίθμων στάθηκε δυνατή η αναπαραγωγή αποτελεσμάτων από την σχετική βιβλιογραφία. Επίσης, η χρήση των θερμοκρασιακών αυτών προφίλ ως είσοδο σε μετέπειτα προσομοιώσεις της κινητικής της διάχυσης των προσμίξεων (είτε χρησιμοποιήθηκε η KMC είτε η αριθμητική προσέγγιση) οδήγησε σε πολύ ακριβείς προβλέψεις²⁶, οι οποίες συνηγορούν με την σειρά τους για την ορθότητα της προσομοίωσης. Σε κάθε περίπτωση πάντως οι υπολογισμοί κατέδειξαν – σε συμφωνία με τις πειραματικές ενδείξεις – ότι ακόμα και στην συνθήκη μέγιστης πυκνότητας ενέργειας, δεν επέρχεται τήξη, ενώ στάθηκε δυνατός και ο θεωρητικός προσδιορισμός του κατωφλίου τήξης για την δεδομένη διάταξη ακτινοβόλησης.

Αφού στάθηκε δυνατή η προσομοίωση όσον αφορά την επίδραση της ακτινοβόλησης με KrF laser στην θερμοκρασιακή κατανομή του πυριτίου, το επόμενο βήμα ήταν η διερεύνηση της επίδρασης της, τόσο όσον αφορά στην θεραπεία των κατεστραμμένων από την εμφύτευση περιοχών του πλέγματος όσο και στην μεταβολή των κατανομών ολικής συγκέντρωσης προσμίξεων του Βορίου, αλλά και της ενεργοποιημένης συνιστώσας. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκαν τόσο αριθμητικές τεχνικές, όσο και υλοποιήσεις Kinetic Monte Carlo. Και στις δυο περιπτώσεις εξετάστηκε η επίδραση μιας πληθώρας παραμέτρων, ενώ ταυτόχρονα έγινε χρήση των πλέον προηγμένων μοντέλων που είναι διαθέσιμα και τα οποία είναι ειδικά σχεδιασμένα για την προσομοίωση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στις νανομετρικές διαστάσεις που είναι τα χαρακτηριστικά μεγέθη κατά την κατασκευή υπερ-ρηχών επαφών. Παράλληλα, έγιναν εκτεταμένες προσπάθειες για την βελτιστοποίηση των αλγορίθμων από υπολογιστικής απόψεως καθώς και την επίτευξη πλήρους ανεξαρτησίας της λύσης από τα χαρακτηριστικά του πλέγματος και από το χρονικό βήμα. Τελικά, αποδείχτηκε πως η KMC προσέγγιση οδηγεί σε αποτελέσματα που παρουσιάζουν μεγαλύτερο βαθμό συμφωνίας με τις πειραματικές μετρήσεις, τόσο όσον αφορά την παρατηρούμενη μετατόπιση του προφίλ όσο και την ενεργοποίηση που επιτυγχάνεται. Τέλος, καθώς διεξήχθησαν ακτινοβολήσεις με μεγάλο αριθμό παλμών, απαιτήθηκε η ανάπτυξη κατάλληλων αλγορίθμων για την ορθή εισαγωγή των αλληλεπιδράσεων θερμικών κύκλων, καθώς και για τη μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου, ο οποίος αυξάνεται σημαντικά με τον αριθμό των παλμών. Συνολικά, σημειώθηκε πολύ καλή ταύτιση πειράματος και προσομοίωσης για τις σχεδόν όλες τις συνθήκες ακτινοβόλησης όσον αφορά την διάχυση, αλλά και καλή συμφωνία όσον αφορά την ηλεκτρική αγωγιμότητα, ειδικά για τις ακτινοβολήσεις που διεξήχθησαν με 50 παλμούς.

Στη συνέχεια, ακολούθησε το πιο απαιτητικό και πρωτότυπο κομμάτι της παρούσας διδακτορικής διατριβής, η μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας CO₂ με το πυρίτιο, η οποία παρουσιάζει μια σειρά από προκλήσεις που απορρέουν κυρίως από την περίπλοκη

εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης σε αυτό το μήκος κύματος τόσο από την θερμοκρασία όσο και από την συγκέντρωση των ελεύθερων φορέων. Μια ακόμα σημαντική δυσκολία ανακύπτει από το γεγονός ότι τα χωρικά και χρονικά χαρακτηριστικά του παλμού του CO₂ είναι τελείως διαφορετικά από τα προκαθορισμένα μοντέλα που προσφέρει το λογισμικό, με αποτέλεσμα να απαιτούνται εκτεταμένες τροποποιήσεις στον αλγόριθμο. Σε αντίθεση με τις προηγούμενες προσπάθειες που απαντήθηκαν στην βιβλιογραφία και οι οποίες καταφεύγουν σε μια πληθώρα προσεγγίσεων και απλοποιήσεων κατά την μοντελοποίηση της διαδικασίας, στην περίπτωση μας έγιναν ελάχιστες και άνευ ουσιαστικής σημασίας προσεγγίσεις. Μάλιστα, χάρη στην ταυτόχρονη επίλυση των εξισώσεων θερμότητας και διάχυσης το λογισμικό προσέφερε την δυνατότητα της δυναμικής ανατροφοδότησης του συντελεστή απορρόφησης από την δυναμική μεταβολή του προφίλ συγκέντρωσης και αντιστρόφως. Όλα τα παραπάνω είχαν ως αποτέλεσμα την επίτευξη μεγάλου βαθμού συμφωνίας ανάμεσα στις υπολογιστικά προσδιορισθείσες τιμές για την επιφανειακή θερμοκρασία και αυτές που προέκυψαν από την διαδικασία πυρομέτρησης²⁷. Πέραν της άμεσης πειραματικής επιβεβαίωσης, η ορθότητα των υπολογισμών επιβεβαιώνεται εμμέσως και από μια πληθώρα άλλων στοιχείων, όπως και στην περίπτωση της προσομοίωσης με KrF laser. Η προσομοίωση αυτή και τα αποτελέσματα που προέκυψαν είναι πρωτότυπα, καθώς δεν υπάρχει κάτι αντίστοιχο στην βιβλιογραφία μέχρι στιγμής¹, ενώ παρέχουν την δυνατότητα πρόβλεψης της επίδρασης της ακτινοβολήσεως συντελώντας στην ουσιαστική μείωση των ακτινοβολήσεων που απαιτούνται για την εύρεση των βέλτιστων συνθηκών για την δημιουργία ρηχών επαφών.

Τέλος, όσον αφορά την μοντελοποίηση της επίδρασης της ανόπτησης στην διάχυση και την ενεργοποίηση των προσμίξεων, μόνο η αριθμητική – συνεχής προσέγγιση οδήγησε σε καλά αποτελέσματα, καθώς εξαιτίας του μεγάλου βάθους θερμικής διάδοσης, η KMC στερείται αξιοπιστίας. Παρόλα αυτά, η αριθμητική προσέγγιση προσέφερε μια αρκετά ικανοποιητική περιγραφή κυρίως όσον αφορά την μετατόπιση της κατανομής συγκέντρωσης λόγω της θέρμανσης, αλλά και της αντίστοιχης ενεργοποίησης των προσμίξεων. Σε συμφωνία με τις μετρήσεις SIMS, οι υπολογισμοί έδειξαν ότι η ανόπτηση σε καθεστώς μη τήξης και για κατάλληλες τιμές πυκνότητας ισχύος και διάρκειας παλμού οδηγούν σε πολύ μικρή διάχυση, η οποία σε συνδυασμό με την σημαντική ενίσχυση της αγωγιμότητας. Ειδικά, για ανόπτηση με αρχική θερμοκρασία τους 650°C, οι σχηματισθείσες επαφές πληρούν τα χαρακτηριστικά που τίθενται από την βιομηχανία μικροηλεκτρονικής για τους επόμενους τεχνολογικούς κόμβους (32 και 22 nm).

2. Προτάσεις για βελτιώσεις των υπάρχουσων τεχνικών

➤ Όσον αφορά την διάταξη ακτινοβολήσεως με laser CO₂ υπάρχουν σημαντικά περιθώρια βελτίωσης τόσο όσον αφορά αυτή καθαυτή τη διαδικασία ακτινοβολήσεως όσο και την διαδικασία πυρομέτρησης. Η εστίαση της δέσμης σε μικρότερο σποτ ή αντικατάσταση του υπάρχοντος laser με ένα μεγαλύτερης ισχύος εξόδου (ενδεικτικά διπλάσια από αυτή του υπάρχοντος που είναι περίπου 70W), θα προσέφερε την δυνατότητα ταχύτερης θέρμανσης με στόχο την περεταίρω ελαχιστοποίηση της διάχυσης, χωρίς όμως αρνητικό αντίκτυπο στην ενεργοποίηση των προσμίξεων. Με βάση την βιβλιογραφία η ιδανικοί χρόνοι ανόπτησης είναι στο εύρος του 0.5 με 3 ms. Η μείωση της απαιτούμενης διάρκειας παλμού θα μπορούσε να γίνει και μέσω εστίασης σε σποτ μικρότερης διαμέτρου, αλλά αυτό θα δημιουργούσε ακόμα

μεγαλύτερα προβλήματα στην διαδικασία ηλεκτρικού και μορφολογικού χαρακτηρισμού. Επιπλέον, η ενσωμάτωση κατάλληλου μικρομετρικού μοτέρ για κίνηση σε δυο διαστάσεις, θα επέτρεπε την σάρωση του δοκιμίου για την επίτευξη ομοιόμορφης ακτινοβολήσης και μάλιστα σε σχετικά μεγάλη περιοχή, γεγονός το οποίο θα διευκόλυνε σημαντικά τον χαρακτηρισμό των δειγμάτων. Επίσης, με χρήση κατάλληλου πετάσματος (μάσκα), θα ήταν δυνατή η αποκοπή του κεντρικού τμήματος της γκαουσιανής δέσμης, το οποίο θα ήταν και σχετικά ομογενές. Κάνοντας και πάλι χρήση σάρωσης, θα μπορούσαμε να επιτύχουμε το ίδιο αποτέλεσμα.

- Καθώς η εξερχόμενη δέσμη από το υπάρχον laser, δεν είναι πολωμένη, η χρήση κατάλληλων πολωτών τύπου p θα επιτρέπει την εκμετάλλευση του μεγαλύτερου πλεονεκτήματος που προσφέρει η ανόπτηση με CO₂ laser, αυτού της ελάττωσης της εξάρτησης της ανακλαστικότητας από την μορφολογία των επιφανειακών δομών.
- Διεξαγωγή της ανόπτησης σε ελεγχόμενο περιβάλλον με παράλληλη έκχυση Αζώτου, για την ελάττωση των φαινομένων οξείδωσης στην επιφάνεια.
- Όσον αφορά την διαδικασία πυρομετρίας, η χρήση ενός πυρομέτρου με μικρότερο χρόνο απόκρισης και μικρότερο απαιτούμενο εμβαδό για την διεξαγωγή μέτρησης, θα επέτρεπε την διεξαγωγή πιο αξιόπιστων μετρήσεων στο εύρος των συνθηκών που παρουσιάζουν μεγαλύτερο εύρος (διάρκεια ανόπτησης μικρότερη από 10 ms).

3. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

- Οι μετρήσεις SIMS αν και προσφέρουν ακριβή προσδιορισμό της ολικής συγκέντρωσης βορίου, δεν δίνουν καμία πληροφορία για το ποσοστό των ενεργοποιημένων προσμίξεων. Οι μετρήσεις επιφανειακής αντίστασης από την άλλη, δίνουν μια εικόνα για το ποσοστό αυτό, αλλά και πάλι δεν είναι δυνατός ο προσδιορισμός της κατανομής των ενεργών προσμίξεων. Οι μετρήσεις SRP, αν χρησιμοποιούνται εκτενώς για την χαρτογράφηση των ενεργοποιημένων προσμίξεων, στα εξαιρετικά μικρά βάθη στα οποία κατανέμεται η πλειοψηφία των φορέων στις σύγχρονες επαφές, η αξιοπιστία της μεθόδου είναι χαμηλή. Από την άλλη πλευρά οι Tsutsui et al.²⁸, πρότειναν μια τεχνική, η οποία μέσω μετρήσεων XPS, επιτρέπει όχι μόνο τον προσδιορισμό της κατανομής συγκέντρωσης των προσμίξεων που βρίσκονται σε θέσεις αντικατάστασης, αλλά και των ατόμων Βορίου που βρίσκονται σε συσσωματώματα. Έτσι αποκτάται μια πολύ σημαντική πληροφορία για την εξέλιξη της κινητικής της ενεργοποίησης. Η τεχνική αυτή απαιτεί την χρήση σύγχροτου για την παραγωγή των ακτίνων X, γεγονός που περιορίζει σημαντικά τον αριθμό των ιδρυμάτων που διαθέτουν τον συνολικό εξοπλισμό.
- Ένα ακόμη ενδιαφέρον πεδίο έρευνας θα μπορούσε να αποτελέσει η μελέτη της χρήσης υμενίων SiO₂ ως στρώματα απορρόφησης της θερμότητας για την έμμεση θέρμανση των του πυριτίου.
- Τέλος, η μελέτη της επίδρασης της μεταβολής στην ανακλαστικότητα ανάλογα με το πάχος της αμορφοποιημένης και για τα δυο είδη laser θα μπορούσε να συμβάλλει στην αύξηση της ακρίβειας των προσομοιώσεων, καθώς θα μπορούσε να μεταβάλλεται δυναμικά το ποσοστό της δέσμης που διαδίδεται μέσα στον όγκο καθώς η τελευταία επανακρυσταλλοποιεί τα επιφανειακά στρώματα που υπέστησαν αμορφοποίηση κατά την εμφύτευση.

Excimer ή CO₂ laser;

Η παρούσα προσπάθεια ποτέ δεν εστίασε στην σύγκριση των δυο διαφορετικών ειδών laser, για το ποιο από τα δυο είναι πιο κατάλληλο για την ενσωμάτωση του στην διαδικασία παραγωγής CMOS. Ένας από τους λόγους που οδήγησαν στην ταυτόχρονη μελέτη και των δυο τύπων, είχε να κάνει με τους διαφορετικούς μηχανισμούς αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας σε αυτά τα μήκη κύματος, γεγονός που τα καθιστά ενδιαφέροντα κυρίως από υπολογιστικής σκοπιάς.

Παρόλα αυτά, σε τελική ανάλυση, δεν θα ήταν παράλογο να τεθεί το ερώτημα, ποιά από τις δυο στρατηγικές ανόπτησης είναι η βέλτιστη. Όπως προαναφέρθηκε, και οι δυο οδήγησαν σε παρόμοια αποτελέσματα, τόσο όσον αφορά το ποσοστό ενεργοποίησης, όσο και την παρατηρούμενη διάχυση. Επομένως, και στις δυο περιπτώσεις, η ανόπτηση με laser φαίνεται ικανή να οδηγήσει στην κατασκευή ρηχών επαφών με τα επιθυμητά χαρακτηριστικά. Όμως, τα παραπάνω, αποτελούν την αναγκαία, αλλά και όχι ικανή προϋπόθεση για την ενσωμάτωση τους στην γραμμή παραγωγής. Υπάρχουν μια σειρά από ζητήματα (κυρίως τεχνολογικής και τεχνοοικονομικής φύσεως), τα οποία κρίνουν το μέλλον κάθε υλοποίησης. Μερικά από αυτά έχουν να κάνουν με την επαναληψιμότητα, την αξιοπιστία, την δυνατότητα ομοιόμορφης ακτινοβολήσης σε όλη την επιφάνεια ενός σύγχρονου wafer, τα κόστη κτήσης και λειτουργίας, και μια σειρά από άλλες παραμέτρους όπως η συμβατότητα της τεχνικής ανόπτησης με τα υπόλοιπα κατασκευαστικά βήματα των διατάξεων CMOS.

Είναι προφανές, ότι μια προσπάθεια σε ακαδημαϊκό επίπεδο, θα ήταν πρακτικά αδύνατο να δώσει απάντηση σε όλα αυτά τα ερωτήματα. Η μόνη παρατήρηση που θα μπορούσε να γίνει, έχει να κάνει με τα προβλήματα επαναληψιμότητας που παρατηρήθηκαν στην περίπτωση του KrF laser. Φυσικά, σε βιομηχανικό επίπεδο αυτά τα προβλήματα έχουν επιλυθεί, όπως αποδεικνύει η χρήση UV laser σε διάφορους τομείς που σχετίζονται με την μικροηλεκτρονική, όπως η λιθογραφία και η κατασκευή TFT panels.

Η απάντηση λοιπόν σε αυτό το ερώτημα, θα μπορούσε να δοθεί μόνο από την καθ' ύλην αρμόδια, που δεν είναι άλλη, από την βιομηχανία μικροηλεκτρονικής. Η βιβλιογραφική αναζήτηση, έδειξε ότι υπάρχουν, εμπορικά διαθέσιμες, δυο τουλάχιστον διατάξεις ακτινοβολήσης CO₂ laser, από την Ultratech, Το γεγονός, ότι η τελευταία παρουσίασε πρόσφατα μια καινούργια διάταξη, την LSA100A, αποδεικνύει το εμπορικό ενδιαφέρον προς αυτή την κατεύθυνση. Από την άλλη πλευρά, και η Coherent παρουσίασε μια σειρά διατάξεων ανόπτησης με χρήση Excimer laser, την Lambda SX. Γενικά πάντως, παρατηρείται μια γενικότερη στροφή στην βιβλιογραφία από την ανόπτηση σε καθεστώς nanosecond, σε millisecond, κυρίως για λόγους αξιοπιστίας. Οι δυο παραπάνω παρατηρήσεις, μας κάνουν να κλίνουμε προς την άποψη ότι η Laser Spike Annealing με χρήση CO₂, είναι ένας υπολογίσιμος αντίπαλος για την αντικατάσταση των σημερινών διατάξεων flash annealing.

¹ International Technology Roadmap for Semiconductors: www.itrs.net

² P. K. Chu, *Plasma Phys. Control. Fusion* 45 (2003) 555–570

³ J. O. Borland, *Proc. of 15th IEEE Int. Conf. on Adv. RTP of Sem.*, Catania 2007, p.181

⁴ G.Kerrien, T.Sarnet, D.Debarre et al., *Thin Solid Films* 453 – 454 (2004) 106–109

-
- ⁵ D. Lenoble, A. Grouillet, *Surf. And Coat. Technol.* 156 (2002) 262-266
- ⁶ A. Agarwal and M. J. Kushner, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 33, no 2, April 2005
- ⁷ S.R. Walther, S. Mehta, U. Jeong, D. Lenoble, *Surf. & Coat. Tech.* 186 (2004) 68– 72
- ⁸ W. Lerch, S. Paul, J. Niess et al., *Mater. Sci. Eng., B* 124–125, 24 (2005).
- ⁹ I.B. Khaibullin, V.V. Titov, E.I. Shtyrkov, in: J. Gyulai, T. Lohner, E. Pastor (Eds.), *Proc. Int. Conf. Ion Implantation*, Budapest, pp. 212, 1973.
- ¹⁰ G. Foti, E. Rimini, E. Vitali et al., *Appl. Phys. Lett.* 14 (1977) 189.
- ¹¹ X. Zhang, J.R. Ho, C.P. Grigoropoulos, *Int. J. Heat. Mass Transfer* 39 (1996) 91.
- ¹² Susan Earles, Mark Law, Kevin Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* Vol. 669 2001
- ¹³ S. Earles, M.Law, K. Jones et al., *Mat. Res. Soc. Symp.* Vol. 610 (2000)
- ¹⁴ G.K. Celler, R. Borutta, W.L. Brown et al., *Proceedings laser-solid interactions and laser proceedings 1978*, edited by S.D. Ferris et al. (AIP, New York, 1979), p. 381
- ¹⁵ M. Takai, P.H. Tsien, S.C. Tsu et al., *Appl. Phys.* 22, 129 (1980)
- ¹⁶ R.B. James, G.D. Jeist, R.T. Young et al., *J. Appl. Phys.* 62 (7) 1987 p. 2981
- ¹⁷ S.B. Felch, D.F. Downey et al., *Proceedings of the ICIIT* (2000) 167
- ¹⁸ T. Ito et al., *Ext. Abs. of 5th Intel Workshop on Junction Technol.* (Osaka 2005) 59
- ¹⁹ P. Baeri, E. Rimini, *Materials Chemistry and Physics* 46 (1996) I69-177
- ²⁰ K. Yamazaki, T. Kudo, K. Seike et al., *Dig. Tech. Pap.* (2002) 149.
- ²¹ R. Lindsay, K. Henson, W. Vandervorst et al., *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 22, no. 1, pp. 306-311, 2004.
- ²² L.M. Feng, Yun Wang and D.A. Markle. *Junction Technology*, 2006. IWJT apos;06. International Workshop on Volume , Issue , 0-0 0 :25 - 30
- ²³ Florakis, A., Misra, N., Grigoropoulos et al.,(2008). *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, 154-155(1-3), 39-42.
- ²⁴ Florakis, A., Verrelli, E., Giubertoni et al., (2010). *Thin Solid Films*, 518(9), 2551-2554.
- ²⁵ Florakis, A., Papadimitriou, A., Chatzipanagiotis et al., (2009). Paper presented at the *39th ESSDERC Proceedings* p.284-287.
- ²⁶ Florakis, A., Papadimitriou, A., Chatzipanagiotis et al., (2010). *Solid-State Electronics*, 54(9), 903-908.
- ²⁷ A. Florakis, T. Laspas, G. Tzortzos et al., submitted for publication in *IEEE Trans. Elec. Devices*
- ²⁸ K. Tsutsui, M. Watanabe, Y. Nakagawa et al., *ESSDERC 2008 - Proceedings of the 38th European Solid-State Device Research Conference*, art. no. 4681719, pp. 142-145

Στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής, προέκυψαν οι παρακάτω δημοσιεύσεις και παρουσιάσεις σε διεθνή συνέδρια:

Δημοσιεύσεις σε διεθνή περιοδικά

1. **Florakis, A.**, Tzortzis, G., Laspas, T. et al., (2011) CO₂ laser annealing for Ultra Shallow Junction formation in Silicon. Comparison of simulation with experiment. Submitted for publication in IEEE Electron Devices Transactions.
2. **Florakis, A.**, Papadimitriou, A., Chatzipanagiotis et al., (2010). Formation of silicon ultra shallow junction by non-melt excimer laser treatment. Solid-State Electronics, 54(9), 903-908.
3. **Florakis, A.**, Verrelli, E., Giubertoni et al., (2010). Non-melting annealing of silicon by CO₂ laser. Thin Solid Films, 518(9), 2551-2554.
4. **Florakis, A.**, Papadimitriou, A., Chatzipanagiotis et al., (2009). Formation of silicon USJ using nonmelt excimer laser. Simulations and experiments. Paper presented at the 39th ESSDERC Proceedings p.284-287.
5. **Florakis, A.**, Misra, N., Grigoropoulos et al.,(2008). Non-melt laser annealing of plasma implanted boron for ultra shallow junctions in silicon. Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology, 154-155(1-3), 39-42.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. **A Florakis** et al. (2010) “Simulation of CO₂ laser annealing for USJ formation in Silicon”. Poster presented at the 2010 Micro and Nano Conference, Athens.
2. **A. Florakis** et al. (2009) “Formation of Silicon Ultra Shallow Junction by non melt excimer laser treatment” Paper presented at the 2009 ESSDERC-ESSCIRC, Athens.
3. **A. Florakis** et al. (2009) “Non-melting annealing of silicon by CO₂ laser”. Paper presented at the 2009 EMRS Spring Meeting, Strasbourg.
4. **A. Florakis** et al. (2008) “Activation and diffusion studies for boron ultra shallow junctions in Silicon after non-melting Excimer laser annealing”. Paper presented at the 2008 EMRS Spring Meeting, Strasbourg.
5. **A. Florakis** et al. (2008) “Diffusion and activation of Phosphorus in Germanium” Paper presented at the 2008 EMRS Spring Meeting, Strasbourg.
6. **A. Florakis** et al. (2007) “Non-Melt Laser annealing of Plasma Implanted Boron for ultra shallow junctions in Silicon” Paper presented at the 2007 MiAcro and Nano, Athens.