Εθνικο Μετσοβιο Πολυτεχνειο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθη-
ματικών & Φυσικών Επιστημών

Προσομοίωση Ανόπτησης Πυριτίου με laser KrF και CO_2

Ανδρέας Τριανταφυλλόπουλος

Διπλωματική Εργασία

Αθηνα - Οκτωβριος 2012

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή - Θεωρητικές Βάσεις **4**
1.1 Θέμα - Σκοπός 4
1.2 Προσομοίωση με το Sentaurus Process 5
1.3 Εμφύτευση προσμίξεων 11
1.4 Εγχάραξη πυριτίου - Διαμόρφωση stripe 18
1.5 Διάχυση - Ανόπτηση δισκιδίου 22
1.5.1 Μακροσκοπική θεώρηση 23
1.5.2 Μικροσκοπική θεώρηση 25
1.5.3 Προσομοίωση διάχυσης με το Sentaurus Process 29
1.6 Ακτινοβολία laser και ύλη, αλληλεπίδραση και ιδιότητες 35

2 Ανόπτηση με KrF laser παλμού ns **42**
2.1 Το KrF Excimer laser 42
2.2 Προσομοίωση του KrF laser με το Sentaurus 44
2.3 Ανόπτηση του δοκιμίου - Αποτελέσματα Προσομοίωσης 51
2.3.1 Bulk Πυρίτιο 51
2.3.2 Επίπεδο SOI 58
2.3.3 SOI stripe 66

3 Ανόπτηση με CO2 laser παλμού ms **81**
3.1 Το CO2 laser 82
3.2 Προσομοίωση του CO2 laser με το Sentaurus 85
3.3 Ανόπτηση δισκιδίου - Αποτελέσματα Προσομοιώσεων 89
3.3.1 Bulk πυρίτιο 90
3.3.2 Επίπεδο SOI 98

4 Συμπεράσματα **106**

English Abstract

The aim of the current thesis is to observe and describe the effects of laser annealing on Silicon and SOI (Silicon on Insulator) structures via simulation. Main focus is the extraction and study of the temperature and active Boron distributions resulting from the annealing processes, as well as their comparison for different laser settings. Two different lasers were used, the KrF Excimer Laser of ns pulse and the Carbon Dioxide (CO_2) laser of ms pulse. The software used for the process simulations was Synopsys' Sentaurus Process, a widely used advanced 1D, 2D and 3D process simulator suitable for silicon and semiconductor microelectronic processes.

More specifically, in SOI annealing our purpose was to keep the silicon dioxide layer and top silicon layer at low thicknesses about 200-400nm for the oxide and 30-100nm for the silicon, in order to note down the relation between temperature and boron activation in small dimensions. We also run simulations where we etch the top silicon layer in the form of a slim stripe of about 20-100nm width in a way of forming a kind of silicon wire on the top of the oxide. By annealing the etched SOI with the KrF laser we got some interesting results for the temperature - activation ratio.

For the CO2 laser annealing we made simulations for bulk silicon and planar SOI that resulted in very good activation rates with the temperature remaining well below silicon's melting point. Due to various computational load and time issues we didn't include simulations for SOI stripe annealing in the present project. Although the planar SOI results for CO2 and the SOI stripe results for KrF give us a solid base and encouraging results for a possible further study on slim stripe annealing and plenty of suggestions for further research.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή - Θεωρητικές Βάσεις

1.1 Θέμα - Σκοπός

Στην παρούσα διπλωματική εργασία κύριος σκοπός ήταν η μελέτη και καταγραφή των ιδιοτήτων δομών SOI (Silicon on Insulator) υπό την επίδραση ανόπτησης με laser (laser annealing) με τη βοήθεια κατάλληλου λογισμικού προσομοίωσης μικροηλεκτρονικών διεργασιών. Η μελέτη των θερμοκρασιακών κατανομών καθώς και η καταγραφή της συμπεριφοράς των προσμίξεων του πυριτίου. Το λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε είναι το Sentaurus Process από την Synopsys. Πιο συγκεκριμένα για την ανόπτηση με laser χρησιμοποιήθηκαν δύο τύποι laser. Ακτινοβόληση με excimer laser (KrF) το οποίο λειτουργεί σε καθεστώς παλμών νανοσεκόντ (ns) και με laser διοξειδίου του άνθρακα (CO_2) σε καθεστώς παλμών μιλισεκόντ (ms). Η χρήση της ανόπτησης με laser επιλέχτηκε στη γενικότερη προσπάθεια να μελετηθούν όσο το δυνατόν μικρότερες δομές SOI και κατά πόσο μπορούν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτών να είναι ρεαλιστικά. Η καταλληλότητα της ανόπτησης με laser για αυτό το σκοπό έγκειται στην ικανότητα ανόπτησης σε πολύ μικρές χρονικές διάρκειες που παρέχει, και ώς εκ τούτου την δυνατότητα ενεργοποίησης προσμίξεων σε “ρηχά” βάθη και φυσικά την αποφυγή της περαιτέρω διάχυσης των προσμίξεων που παρατηρείται σε μακρόχρονες διαδικασίες ανόπτησης.

Αρχικά μελετήθηκε η διαδικασία της ανόπτησης με laser σε απλό στρώμα πυριτίου με χρήση ενός ή πολλαπλών παλμών ακτινοβολίας, έπειτα στο υπόστρωμα πυριτίου προστέθηκε το στρώμα του μονωτή, στην περίπτωση μας οξείδιο του πυριτίου (SiO_2), και στη συνέχεια και δεύτερο στρώμα πυριτίου πάνω από τον μονωτή. Σε κάθε βήμα της κατασκευής του SOI αντίστοιχες

προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για την καταγραφή των ιδιοτήτων της δομής και των αλλαγών που προέκυπταν σε αυτές. Το πάχος των στρωμάτων μονωτή και "υπερ-στρώματος" πυριτίου αποτέλεσε πηγή διάφορων δοκιμών υπό τον στόχο όμως το ανώτερο στρώμα πυριτίου να παραμένει αρκετά λεπτό. Τέλος στο ανώτερο στρώμα πυριτίου δίνεται η έννοια της "δομής" ξεκινώντας από την απλή δομή μιας ράβδωσης (stripe) πυριτίου δεδομένου πλάτους πάνω στο στρώμα του οξειδίου σαν μια υποτυπώδη μορφή πυριτικού σύρματος πάνω στον μονωτή. Σε αυτό το σημείο αφού διαμορφώνεται το υπερ-στρώμα του πυριτίου στην εν λόγω μορφή ακολουθούν δοκιμές στις διαστάσεις του stripe (πλάτος και πάχος) με κριτήριο τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται και την συμπεριφορά των προσμίξεων στη ράβδωση πυριτίου.

Όπως αναφέρθηκε και στην αρχή όλες οι προσομοιώσεις έγιναν με το λογισμικό Sentaurus Process της Synopsys το οποίο παρέχει μια ευρεία συλλογή λειτουργιών και μικροηλεκτρονικών διεργασιών που μπορούν να προσομοιωθούν και να δώσουν ρεαλιστικά αποτελέσματα αντίστοιχα των συνθηκών των πραγματικών εργαστηρίων. Ωστόσο στο θέμα της ανόπτησης με laser η εξέλιξη του λογισμικού πραγματοποιείται στις σχετικά πρόσφατες εκδόσεις του, πράγμα που σε αρκετές περιπτώσεις δυσκόλεψε την αναζήτηση τρόπων για τη σωστή χρήση του από μέρους μας και την ανάδειξη σωστών αποτελεσμάτων. Περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τις μεθόδους που ακολουθήθηκαν και τις αντίστοιχες προσομοιώσεις θα δούμε αναλυτικότερα στη συνέχεια.

1.2 Προσομοίωση με το Sentaurus Process

Αρχικά θα αναφερθούμε στο μέσο με το οποίο πραγματοποιήθηκε η εν λόγω μελέτη, δηλαδή το λογισμικό με το οποίο κάναμε τις προσομοιώσεις, και στον τρόπο λειτουργίας του. Το Sentaurus Process είναι ένα πλήρες, συνεχώς εξελισσόμενο, περιβάλλον για τη μοντελοποίηση διεργασιών, την κατασκευή μικροηλεκτρονικών διατάξεων και της προσομοίωσης των λειτουργιών τους. Συμβαδίζει με τις τελευταίες τεχνολογίες στον εν λόγω τομέα και παρέχει λειτουργίες και αποτελέσματα βασισμένα στα πιο πρόσφατα εργαστηριακά δεδομένα ακόμα και για το, υπολογιστικά απαιτητικό, κομμάτι της τρισδιάστατης προσομοίωσης. Έτσι αποτελεί ένα βασικό εργαλείο μελέτης αλλά και πρόγνωσης των σύγχρονων πυριτικών μικροηλεκτρονικών τεχνολογιών. Αξίζει να αναφερθεί άλλωστε ότι χρησιμοποιείται ευρέως από εταιρείες που δραστηριοποιούνται σε αυτές τις τεχνολογίες και στην ανάπτυξη ηλεκτρονικών

υπολογιστών.

Η λειτουργία του βασίζεται στην είσοδο ενός συνόλου εντολών, είτε μέσω ειδικών αρχείων scripts (.tcl, .cmd), είτε άμεσα μέσα από ένα διαδραστικό περιβάλλον που επιτρέπει στον χρήστη να ορίζει τις εντολές για την πραγματοποίηση των διεργασιών που επιθυμεί σε πραγματικό χρόνο. Γενικά είναι προτεινόμενο η χρήση του λογισμικού να γίνεται μέσω αρχείων εντολών (scripts) για την αποφυγή λαθών και την απρόσκοπτη λειτουργία των αλγορίθμων. Μέσω αυτών των εντολών ορίζεται η ακολουθία βημάτων που χρειάζονται για να προσομοιωθεί το εκάστοτε φαινόμενο που επιθυμεί ο χρήστης, καθώς και ο καθορισμός διαφόρων φυσικών μεταβλητών ή ο ορισμός των φυσικών μοντέλων που είναι προς προσομοίωση. Επίσης είναι δυνατόν να επιλέγουμε μεταξύ διαφορετικών μοντέλων προσομοίωσης ενός φαινομένου και να καθορίζουμε τη μορφή και άλλες γραφικές επιλογές με τα οποία θα εξαχθούν τα αποτελέσματα. Εντός των αρχείων εντολών μπορεί να γίνεται χρήση της προγραμματιστικής γλώσσας TCL (tool command language) για την δημιουργία επαναληπτικών βρόχων, δομών ελέγχου, για τον ορισμό περίπλοκων αριθμητικών πράξεων, την εισαγωγή και αλλαγή τιμών μεταβλητών κλπ. Αυτό είναι εφικτό αφού το ίδιο το Sentaurus είναι γραμμένο στη γλώσσα TCL και άρα είναι σε θέση να αναγνωρίζει την προγραμματιστική μας επέμβαση ως μέρος της διαδικασίας προσομοίωσης και να την υλοποιεί.

Αξίζει ακόμα να αναφερθεί πώς το πρόγραμμα παρέχει τη δυνατότητα επίλυσης εξισώσεων και υλοποίησης των προσομοιώσεων μέσω αριθμητικών μεθόδων αλλά και της μεθόδου Monte Carlo ή και τον συνδυασμό αυτών, προσφέροντας έτσι επιπλέον επιλογές στον χρήστη για την εξαγωγή καλύτερων αποτελεσμάτων χρησιμοποιώντας τις εκάστοτε μεθόδους. Επίσης ο χρήστης μπορεί να επιλέγει μεταξύ διαφορετικών επιλυτών (π.χ. PARDISO, ILS) που κάνουν διαφορετική χρήση των υπολογιστικών δυνατοτήτων του υπολογιστή, ώστε να έχει την καλύτερη δυνατή απόδοση όσον αφορά τον υπολογιστικό χρόνο σε σχέση πάντα με τα επιθυμητά αποτελέσματα των αλγορίθμων. [1]

Η ακολουθία εντολών για την παραγωγή των προσομοιώσεων που χρησιμοποιήθηκε στα αρχεία εντολών script βασίζεται στα παρακάτω βήματα:

- Δήλωση μεταβλητών περιβάλλοντος/συστήματος, καθορισμός μοντέλων, επιλυτών κλπ.
- Κατασκευή/ορισμός πλέγματος.
- Αρχικοποίηση προσομοίωσης, δήλωση ιδιοτήτων του δισκιδίου.

- Κυρίως μέρος εντολών υλοποίησης των διεργασιών (εμφύτευση, διάχυση, εγχάραξη κλπ.)
- Καταχώρηση δεδομένων προσομοίωσης, κατασκευή αρχείων εξόδου.

η κατασκευή των επιμέρους αυτών κομματιών μας δίνει το βασικό πρότυπο αλγορίθμου για την υλοποίηση των προσομοιώσεων.

Στο πρώτο βήμα όπως αναφέρεται ορίζουμε κάποιες μεταβλητές συστήματος που έχουν να κάνουν με τους πόρους του υπολογιστή που θα χρησιμοποιήσει το πρόγραμμα για την προσομοίωση, πχ τον αριθμό των διαθέσιμων επεξεργαστών που θα χρησιμοποιηθούν για τους υπολογισμούς. Επίσης μπορεί να δηλωθεί ποιος επιλυτής θα χρησιμοποιηθεί, αν θα γίνεται παράλληλη χρήση πολλαπλών επεξεργαστών ή όχι και δίνονται εντολές που με την δήλωση τους ενεργοποιούν ή καθιστούν δυνατή τη χρήση συγκεκριμένων μοντέλων ή μεθόδων. Όπως η χρήση πακέτων πιο λεπτομερούς μελέτης διαδικασιών ή πακέτων με πιο ενημερωμένες λειτουργίες για την προσομοίωση (πχ Adcanced Calibration, AdvancedMethods κλπ).

Στο δεύτερο βήμα πρόκειται για την καταχώρηση των εντολών που δημιουργούν το “πλέγμα” που είναι η βάση της προσομοίωσης που θα ακολουθήσει. Η κατασκευή του πλέγματος έχει το νόημα του ορισμού των διαστάσεων πάνω στις οποίες θα επιλυθούν οι εξισώσεις και ο ορισμός της πυκνότητας του πλέγματος συνεπάγεται την ακρίβεια της προσομοίωσης. Πιο συγκεκριμένα το πλέγμα είναι ένα σύνολο κόμβων στους οποίους επιλύεται κάθε φορά η εξίσωση ή οι εξισώσεις που προσομοιώνουν μια διαδικασία. Όσο περισσότεροι κόμβοι ορίζονται τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια έχουμε στο αποτέλεσμα αλλά αυτό έχει ως συνέπεια και την αύξηση του υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται. Ειδικά για διαδικασίες που απαιτούν τη λύση πολύπλοκων εξισώσεων για να προσομοιωθούν. Είναι βέβαια δυνατό να ορίζουμε κατα το δοκούν την επιθυμητή πυκνότητα του πλέγματος ανά σημείο και έτσι παραδείγματος χάρη όπου χρειαζόμαστε μεγάλη ακρίβεια να έχουμε πυκνό πλέγμα και όπου αυτό δεν είναι απαραίτητο να κρατάμε το πλέγμα αραιό. Με λίγα λόγια ο ορισμός του πλέγματος είναι ουσιαστικά ο ορισμός του δισκιδίου μας, των διαστάσεων που θα έχει αυτό και ο καθορισμός των μερών αυτού που θέλουμε να γίνει λεπτομερέστερη μελέτη ή όχι μέσω της προσομοίωσης. Ένα παράδειγμα ορισμού του πλέγματος φαίνεται παρακάτω:

```
line x location=  0.0            spacing=  5<nm> tag=SiTop
line x location= 50.0<nm>        spacing=  10<nm>
```

```
line x location=100.0<nm>        spacing=  20<nm>
line x location=500.0<nm>        spacing= 100<nm>
line x location= 50.0<um>        spacing= 50<um>
line x location=500.0<um>        spacing= 100<um> tag=SiBottom
```

Εδώ με την εντολή **spacing** ορίζουμε την απόσταση μεταξύ των διαδοχικών κόμβων μεταξύ δύο σημείων στον άξονα χ, έτσι ορίζουμε από που έως που στον άξονα χ θα κυμαίνεται το πλέγμα μας (διάσταση δισκιδίου, 500μm) και την επιθυμητή ακρίβεια στα εκάστοτε σημεία του δισκιδίου. Π.χ. στο παραπάνω παράδειγμα είναι εμφανής η μεγαλύτερη ακρίβεια που επιδιώκουμε στα πρώτα νανόμετρα του άξονα χ (κατακόρυφος άξονας στο πρόγραμμα) και πως αυτή μειώνεται σταδιακά καθώς προχωράμε σε μεγαλύτερα βάθη. Ομοίως γίνεται η δήλωση και για τον άξονα y ή z αν θέλουμε πλέγμα δύο ή τριών διαστάσεων αντίστοιχα.

Έπειτα ακολουθεί το τρίτο βήμα όπου έχοντας φτιάξει το πλέγμα μας ορίζουμε το υλικό από το οποίο θα αποτελείται το δισκίδιο (πυρίτιο) και τις ιδιότητες του. Όπως το αν θα είναι p-type ή n-type, δηλαδή τι είδους προσμίξεις θα έχει, την συγκέντρωσή τους και τον προσανατολισμό των κρυσταλλικών επιπέδων (π.χ. 100). Αυτό το σημείο αποτελεί και την αρχικοποίηση της περαιτέρω προσομοίωσης όπου μπορούμε πλέον να προχωρήσουμε στην εφαρμογή πυριτικών διεργασιών πάνω στο δισκίδιο που ορίσαμε. Παραδείγματος χάρη:

```
region substrate xlo=SiTop xhi=SiBottom ylo=Left yhi=Right Silicon
init concentration=1e15 field=Phosphorus wafer.orient=100
```

όπου εδώ καθορίζουμε ότι το υλικό του πλέγματος που ορίσαμε παραπάνω θα είναι πυρίτιο (Silicon) με προσμίξεις φωσφόρου σε περιεκτικότητα 10^{15} και κρυσταλλικό προσανατολισμό (100).

Έτσι μετά την αρχικοποίηση της προσομοίωσης μπαίνουμε στο κυρίως μέρος των εντολών που προσομοιώνουν τις πυριτικές διεργασίες που υλοποιούν τις δομές που επιθυμούμε. Τέτοιες διεργασίες είναι η εναπόθεση οξειδίων ή νιτριδίων, η εμφύτευση προσμίξεων, η εγχάραξη για την κατασκευή συγκεκριμένων δομών, η ανόπτηση του δισκιδίου είτε μέσω φούρνων είτε με laser και λοιπές μεθόδους, και άλλες πολλές διαδικασίες. Ένα παράδειγμα τέτοιων εντολών βλέπουμε παρακάτω:

```
deposit Oxide   fill coord=-200<nm>


implant Boron energy=500<eV> dose=1e13<cm-2> tilt=0<degree>
```

```
diffuse time=30<s> temp=900.0<C>
```

εδώ οι εντολές **deposit**, **implant** και **diffuse** θέτουν σε λειτουργία τις διεργασίες της εναπόθεσης, εμφύτευσης και διάχυσης/ανόπτησης αντίστοιχα. Βλέπουμε ένα απλό παράδειγμα εναπόθεσης διοξειδίου του πυριτίου πάχους 200 nm, έπειτα ένα παράδειγμα εμφύτευσης Βορίου σε δόση 10^{13} με ενέργεια 500 eV υπό μηδενική γωνία κλήσης. Τέλος ένα απλό παράδειγμα ανόπτησης του δισκιδίου στους 900 βαθμούς Κελσίου για 30 δευτερόλεπτα. Για τις εν λόγω διαδικασίες θα αναφερθούμε αναλυτικότερα στη συνέχεια.

Τέλος στο επόμενο βήμα μένει να καταχωρήσουμε τα δεδομένα που προκύπτουν από τις παραπάνω διεργασίες σε κατάλληλα αρχεία πράγμα που θα μας βοηθήσει έπειτα να τα επεξεργαστούμε. Αυτά τα δεδομένα είναι ουσιαστικά τα αποτελέσματα της προσομοίωσης και μπορούμε να τα συγκρίνουμε είτε με εργαστηριακά δεδομένα είτε ξέροντας την εγκυρότητα τους να βγάλουμε συμπεράσματα για την εκάστοτε μελέτη μας. Μεταξύ των πολλών επιλογών που παρέχει το πρόγραμμα είναι δυνατή η αποθήκευση της κατανομής της θερμοκρασίας χωρικά και της εξέλιξής της χρονικά, του προφίλ των προσμίξεων (ενεργοποιημένων και μη) και η δημιουργία ειδικών αρχείων (.tdr) με γραφική υποστήριξη που συμπυκνώνουν όλα τα δεδομένα που παράγονται από την προσομοίωση. Ένα παράδειγμα τέτοιων εντολών είναι το παρακάτω:

```
SetPlxList {Temperature}
WritePlx Katanomh thermokrasias

struct tdr=Dedomena prosomoiwshs
```

όπου οι δύο εντολές **SetPlxList** και **WritePlx** δημιουργούν ένα αρχείο δεδομένων .plx με όνομα “Katanomh thermokrasias” που καταχωρεί την κατανομή της θερμοκρασίας σε μορφή κειμένου, και η τρίτη εντολή **struct tdr** κατασκευάζει ένα αρχείο .tdr με το όνομα “Dedomena prosomoiwshs”.

Όπως προαναφέρθηκε, σκοπός είναι η δημιουργία μιας δομής SOI (Silicon on Insulator) με το ανώτερο πυριτικό επίπεδο σχηματισμένο σε μορφή ράβδωσης, η εμφύτευση προσμίξεων σε αυτό και η ανόπτηση με τη μέθοδο laser έτσι

ώστε να μελετήσουμε τις ιδιότητες που θα παρουσιάσει η δομή μας. Ιδιότητες όσον αφορά την θερμοκρασιακή κατανομή κατά βάθος της δομής και την κατανομή των ενεργοποιημένων προσμίξεων. Η μελέτη μας γίνεται για λεπτά πάχη SOI της τάξης των 200-400 nm για το οξείδιο και των 20-100 nm για το ανώτερο πυρίτιο. Η μέθοδος της ανόπτησης με laser θα περιγραφεί αναλυτικότερα για το κάθε laser από τα δύο που χρησιμοποιήθηκαν παρακάτω.

Αφού ξεκινήσουμε κατασκευάζοντας το δισκίδιο και ορίζοντας το πλέγμα και την πυκνότητα κόμβων που επιθυμούμε σε κάθε σημείο, αρχικοποιούμε την προσομοίωση ορίζοντας ότι το δισκίδιο μας είναι πυρίτιο n-type με προσμίξεις φωσφόρου σε πυκνότητα 10^{15}. Επόμενο βήμα είναι η δημιουργία του στρώματος διοξειδίου του πυριτίου (SiO_2) πάνω από το υπόστρωμα. Γενικά ο πιο συνηθισμένος τρόπος δημιουργίας στρώματος οξειδίου πάνω από το πυρίτιο είναι μέσω της θερμικής οξείδωσης με θέρμανση του δισκιδίου σε περιβάλλον αερίου οξυγόνου για κατάλληλη διάρκεια ώστε να δημιουργείται το επιθυμητό πάχος στρώματος διοξειδίου του πυριτίου. Επίσης για επιθυμητά πάχη οξειδίου της τάξεως 10 - 1000 nm είναι δυνατή η χρήση των μεθόδων εναπόθεσης λεπτών φίλμ, PVD (Physical Vapour Deposition) και CVD (Chemical Vapour Deposition). Σε αυτές τις μεθόδους έχουμε συνθήκες κενού ή υψηλού κενού και προκαλούμε την εξάτμιση ή αποσύνθεση των υλικών που θέλουμε να εναποθέσουμε πάνω στο πυρίτιο είτε με θέρμανση είτε με ιοντικό βομβαρδισμό του υλικού. Στην περίπτωση της PVD το υλικό είναι σε στέρεα μορφή και κατά κύριο λόγο το βομβαρδίζουμε με διάφορους τρόπους ώστε να αποκολληθεί υλικό και να εναποτεθεί στο δισκίδιο του πυριτίου. Ενώ στην περίπτωση CVD το υλικό εισάγεται υπό μορφή αερίου και, αφού αποσυντεθεί μέσω θέρμανσης ή με τη χρήση πλάσματος, αλληλεπιδρά με το πυρίτιο δημιουργώντας λεπτά φιλμ επίστρωσης. Στην περίπτωσή μας στον αλγόριθμο δεν χρησιμοποιούμε την μέθοδο της οξείδωσης (ή ανάπτυξης οξειδίου) λόγω οικονομίας υπολογιστικών πόρων, μιας και υλοποιείται ως διεργασία διάχυσης και η προσομοίωση τέτοιων διεργασιών από το sentaurus συνήθως είναι ιδιαίτερα απαιτητική υπολογιστικά, ειδικά για αυξημένη λεπτομέρεια στο πλέγμα. Επίσης χρησιμοποιώντας απλά την εντολή **deposit** της εναπόθεσης μπορούμε να πάρουμε εξίσου αξιόπιστα αποτελέσματα για τη συνέχεια της προσομοίωσης μας. Έτσι φτιάχνουμε το στρώμα του οξειδίου πάνω από το υπόστρωμα πυριτίου με το συγκεκριμένο πάχος που επιθυμούμε και στη συνέχεια ομοίως κάνουμε εναπόθεση του λεπτού στρώματος πυριτίου πάνω απο το οξείδιο.

Εδώ η δομή SOI έχει κατασκευαστεί και τα ζητούμενα στη συνέχεια είναι η εμφύτευση των προσμίξεων, η εγχάραξη του ανώτερου στρώματος στο επι-

θυμητό σχήμα και η ανόπτηση του δοκιμίου για την αφαίρεση βλαβών και την ενεργοποίηση των προσμίξεων. Στη συνέχεια θα αναφερθούμε στις αρχές που διέπουν κάθε διεργασία που υλοποιεί τα παραπάνω και πώς αυτές επηρεάζουν το δοκίμιο και την περαιτέρω πορεία του πειράματος.

1.3 Εμφύτευση προσμίξεων

Ιοντική Εμφύτευση

Η ιοντική εμφύτευση είναι μια διαδικασία κατά την οποία ιόντα που έχουν επιταχυνθεί "βομβαρδίζουν" το πυρίτιο, εισχωρούν σε αυτό και επιβραδύνονται λόγω συγκρούσεων με τα άτομα του πυριτίου ακολουθώντας τυχαία, στοχαστική πορεία. Τελικά σταματούν μετά από πολύ μικρή χρονική διάρκεια και σε μία απόσταση, συνήθως εντός του πρώτου μικρόμετρου του πυριτίου, η οποία εξαρτάται απο την ενέργεια που χρησιμοποιήθηκε για την εμφύτευση. Εκτός απο την εισαγωγή προσμίξεων σε δισκίδια πυριτίου η ιοντική εμφύτευση μπορεί να έχει κι άλλες εφαρμογές όπως η χρήση βαρέων ιόντων για την διαμόρφωση διάφορων υλικών μέσω σκόπιμης δημιουργίας αμορφοποιήσεων και τοπικής καταστροφής του υλικού. Επίσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εισαγωγή ιόντων οξυγόνου σε συγκεκριμένο βάθος του πυριτίου με σκοπό τη δημιουργία στρώματος διοξειδίου του πυριτίου στο πλαίσιο μιας μεθόδου δημιουργίας δομών SOI.

Με την χρήση της ιοντικής εμφύτευσης μπορούμε να έχουμε διάφορες κατανομές προσμίξεων στο εσωτερικό του πυριτίου ελέγχοντας το βάθος στο οποίο θέλουμε να είναι η μέγιστη πυκνότητα της πρόσμιξης και τον αριθμό των ατόμων ανά μονάδα όγκου που επιθυμούμε. Άλλα προτερήματα της μεθόδου εκτός αυτού είναι η δυνατότητα των ιόντων να ξεπερνάνε ορισμένα επιφανειακά στρώματα πάνω απο το πυρίτιο ενώ μπορεί και να περιορίζεται απο κάποια άλλα. Έτσι μπορούμε να χρησιμοποιούμε επιφανειακά στρώματα με τη μορφή μάσκας για τον έλεγχο της περιοχής που θέλουμε να εισέλθουν οι προσμίξεις. Εδώ σημαντικό χαρακτηριστικό της μεθόδου είναι η μικρή πλευρική εξάπλωση των προσμίξεων που παρουσιάζει κατά την χρήση μασκών (συνήθως στο ένα τρίτο της κατά βάθος εισχώρησης). Ωστόσο η ιοντική εμφύτευση προκαλεί αμορφοποιήσεις και καταστροφές στο κρυσταλλικό πλέγμα του υλικού πράγμα που απαιτεί τη χρήση ανόπτησης μετά την εμφύτευση. Επίσης οι προσμίξεις που εισάγουμε πρέπει να ενεργοποιηθούν πράγμα που συχνά επι-

τυγχάνεται μέσω της ίδιας ανόπτησης αλλά αυτό δεν είναι πάντα δεδομένο.

Πιο λεπτομερώς, κατα την εισχώρηση τους στο υλικό τα ιόντα ακολουθούν μία τυχαία τροχιά απόστασης R η οποία χαρακτηρίζεται από την κατά βάθος απόσταση R_P (που είναι η απόσταση που καλύπτουν τα ιόντα στην κατεύθυνση της αρχικής τροχιάς τους) και την πλευρική απόσταση R_L (που είναι η πλευρική απόκλιση ουσιαστικά από την αρχική τροχιά). Κατά την πορεία τους μέσα στο υλικό τα ιόντα αντιμετωπίζουν 2 παράγοντες επιβράδυνσης. Τον πυρηνικό παράγοντα με τον οποίο εννοούμε τις συγκρούσεις με τους ατομικούς πυρήνες του υλικού με ατομικό αριθμό Z και μάζα M, και τον ηλεκτρονικό παράγοντα ο οποίος παραπέμπει στις συγκρούσεις με τα ηλεκτρονικά "νέφη". Αν συμβολίσουμε τον πυρηνικό παράγοντα S_n και τον ηλεκτρονικό S_e σύμφωνα με την προσέγγιση του Lindhard [2] έχουμε τους εξής τύπους:

$$S_n = 2.8 * 10^{-15}(Z_1 Z_2 / Z) * (M_1/(M_1 + M_2)) \tag{1.1}$$

όπου (Z_1, M_1) και (Z_2, M_2) είναι οι ατομικοί αριθμοί και μάζες των ιόντων που χρησιμοποιούμε και του υλικού που βομβαρδίζεται αντίστοιχα, και όπου $Z = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$. Παρατηρούμε την ανεξαρτησία του πυρηνικού παράγοντα επιβράδυνσης απο την ενέργεια των ιόντων σε αυτή την προσέγγιση.

Τώρα για τον ηλεκτρονικό παράγοντα έχουμε:

$$S_e = 3.3 * 10^{-17}(Z_1 + Z_2)(E/M_1)^{1/2} \tag{1.2}$$

ο οποίος όπως φαίνεται είναι ανάλογος της τετραγωνικής ρίζας της ενέργειας (E) των ιόντων.

Η ολική απώλεια ενέργειας τώρα υπολογίζεται ως:

$$dE/dx = -(S_n + S_e)N \tag{1.3}$$

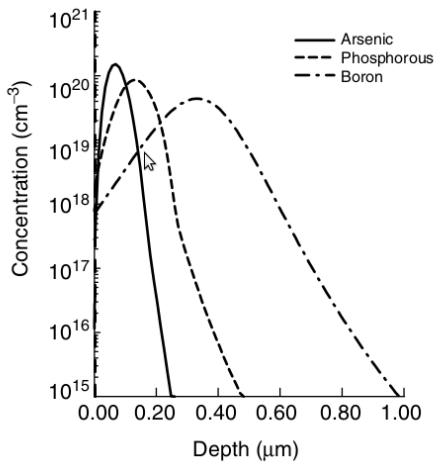
όπου N είναι η πυκνότητα ατόμων του πυριτίου, $5 * 10^{22}\ cm^{-3}$.

Στο **Σχήμα 1.1** βλέπουμε ένα παράδειγμα υπολογισμού των παραγόντων επιβράδυνσης για το Αρσενικό, τον Φώσφορο και το Βόριο. Όπως συμπεραίνεται απο τα παραπάνω, τα ελαφρύτερα ιόντα αντιμετωπίζουν μικρότερους παράγοντες επιβράδυνσης απο τους πυρήνες και τα ηλεκτρονικά νέφη και συνεπώς έχουν μικρότερη απώλεια ενέργειας. Άρα για ίδιες ενέργειες εμφύτευσης διεισδύουν βαθύτερα στο εσωτερικό του πυριτίου (**Σχήμα 1.2**).

Μέσω του πυρηνικού παράγοντα επιβράδυνσης όμως προκαλείται και καταστροφή της δομής του πυριτικού υλικού αφού μετακινούνται άτομα πυριτίου λόγω των συγκρούσεων με τα ιόντα. Εξαρτώμενη απο διάφορους παράγοντες

Nuclear stopping in silicon (independent of energy) in keV/μm			
Boron		92	
Phosphorus		447	
Arsenic		1160	
Electronic stopping in silicon in keV/μm			
E/keV	Boron	Phosphorus	Arsenic
10	65	88	90
50	145	196	200
100	205	277	283
200	290	391	401

Σχήμα 1.1 – Απώλεια ενέργειας εμφυτευμένων ιόντων στο πυρίτιο [2]



Σχήμα 1.2 – Εμφύτευση ενέργειας 100keV για Αρσενικό, Φώσφορο και Βόριο [2]

η καταστροφή στο πυρίτιο μπορεί να κυμαίνεται απο μικρές σημειακές ατέλειες έως και αμορφοποίηση. Τέτοιοι παράγοντες είναι το είδος των ιόντων που εμφυτεύουμε (βαρύτερα ιόντα προκαλούν μεγαλύτερη ζημιά στο υλικό), η ενέργεια εμφύτευσης και η δόση εμφύτευσης (μεγαλύτερη ενέργεια και δόση, μεγαλύτερη καταστροφή υλικού). Για την επαναφορά του υλικού και την εξομάλυνση των όποιων ατελειών ή καταστροφών απαιτείται το βήμα της ανόπτησης/θέρμανσης του δισκιδίου σε αρκετά υψηλές θερμοκρασίες όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως.

Όσον αφορά τώρα στην προσομοίωση της εμφύτευσης, το Sentaurus Process για να προσομοιώσει την κατανομή των εμφυτευμένων ιόντων μέσα στο υλικό του δισκιδίου χρησιμοποιεί είτε αναλυτικές μεθόδους είτε μεθόδους Μόντε Κάρλο. Τα αναλυτικά μοντέλα προσομοίωσης χρησιμοποιούν τις Gaussian και Pearson συναρτήσεις καθώς και τις dual Pearson συναρτήσεις. Επίσης για τον υπολογισμό και την προσομοίωση της καταστροφής που εισάγεται στο υλικό απο την εμφύτευση χρησιμοποιείται το μοντέλο Hobler. Για την απόδοση της χωρικής κατανομής των εμφυτευμένων ιόντων η αναλυτική μέθοδος λαμβάνει υπόψη το είδος των ιόντων, την ενέργεια και την δόση της εμφύτευσης, τη γωνία βολής και με τη βοήθεια συγκεκριμένων πινάκων αναφοράς επιλύει τις εξισώσεις που δίνουν το προφίλ των προσμίξεων. Η μέθοδος Monte Carlo απο την άλλη πλευρά χρησιμοποιεί μια στατιστική προσέγγιση βασισμένη σε γνωστές μεθόδους προσομοίωσης της συμπεριφοράς των ιόντων καθώς εισέρχονται σε ένα υλικό και συγκρούονται με τα άτομα του. [1]

Για την υλοποίηση των προσομοιώσεων μας έγινε ευρύτερη χρήση της εμφύτευσης μέσω της αναλυτικής μεθόδου επίλυσης λόγω των καλύτερων αποτελεσμάτων που παρέχει με μικρότερο υπολογιστικό κόστος απο την μέθοδο KMC (Kinetic Monte Carlo). Χρήση της μεθόδου Μόντε Κάρλο έγινε κυρίως στην περίπτωση των προσομοιώσεων για το laser διοξειδίου του άνθρακα λόγω προβλημάτων συμβατότητας μεταξύ των αλγορίθμων του προγράμματος, περισσότερο όμως σε αυτό θα αναφερθούμε παρακάτω. Επίσης πέρα απο την συμβατική μέθοδο εμφύτευσης έγιναν και δοκιμές με την χρήση της εμφύτευσης μέσω πλάσματος (Plasma Doping) λόγω της καταλληλότητας της για περιπτώσεις όπου θέλουμε να πετύχουμε πρόσμιξη σε ρηχά βάθη.

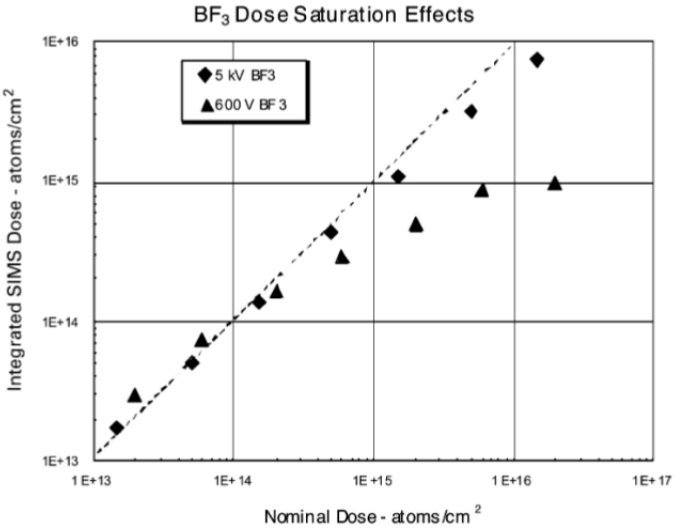
Εμφύτευση μέσω πλάσματος, PLAD

Το κυριότερο πρόβλημα της απλής ιοντικής εμφύτευσης είναι ότι για να έχουμε εμφύτευση σε πολύ ρηχά βάθη χρειαζόμαστε πολύ χαμηλές ενέργειες

και ειδικά όταν πρόκειται για εμφύτευση βορίου το οποίο είναι πολύ ελαφρύ ιόν και διεισδύει ευκολότερα στο υλικό. Επίσης οι ακόλουθοι θερμικοί κύκλοι στους οποίους υποβάλλεται το δισκίδιο προκαλούν διάχυση των προσμίξεων συντελώντας έτσι στην αύξηση του βάθους της κατανομής των εμφυτευμένων ιόντων. Με τη μέθοδο του πλάσματος όμως η εμφύτευση γίνεται σε χαμηλές ενέργειες (εως και 100 eV) και το προφίλ της εμφύτευσης είναι πολύ πιο ρηχό απο αυτό που προκύπτει απο την απλή ιοντική μέθοδο. Ακόμα παρατηρείται πως και η διάχυση των προσμίξεων λόγω της μετέπειτα ανόπτησης είναι μικρότερη. Επίσης η μέθοδος προσφέρει καλύτερο έλεγχο της ενέργειας της εμφύτευσης και είναι δυνατή η χρήση πολλαπλών ενεργειών, παρέχει βελτιωμένο ρεύμα οδήγησης των ιόντων και λόγω και της χαμηλής ενέργειας λειτουργίας μειώνει τις μόνιμες ατέλειες που προκύπτουν στο υλικό.

Η εμφύτευση μέσω πλάσματος (PLAD) χρησιμοποιεί αέριο BF_3 για τη δημιουργία πλάσματος και στη συνέχεια αυτό εκχωρείται στον περιβάλλοντα χώρο του δισκιδίου. Το δισκίδιο τοποθετείται στην κάθοδο της κατασκευής όπου και αναπτύσσονται παλμοί δυναμικού που επιταχύνουν τα ιόντα του πλάσματος προς την κατεύθυνση της καθόδου. Έτσι αυτά εισχωρούν στο δισκίδιο και εμφυτεύονται στο πυρίτιο με ενέργειες που εξαρτώνται απο το δυναμικό του παλμού της καθόδου, το φορτίο τους και τη μοριακή τους δομή. Σημαντικός παράγοντας είναι και η πίεση του πλάσματος αφού επηρεάζει τις συγκρούσεις μεταξύ των ιόντων και ουδέτερων ειδών και μπορεί να μεταβάλλει την ενέργεια τους. Επίσης το πλάτος και η διάρκεια του παλμού που ενεργοποιεί το πλάσμα επηρεάζουν την καταστροφή στο υλικό και την διάρκεια έκθεσης του δισκιδίου στο πλάσμα. Η αυξημένη έκθεση του υλικού στο πλάσμα έχει και αρνητικές συνέπειες μέσω παρασιτικών φαινομένων όπως η χάραξη του επιφανειακού υλικού του δισκιδίου. Η τεχνική που ακολουθείται για το πλάσμα BF_3 κατά την οποία ιόντα BF_3^+, BF_2^+, BF^+ και B^+ εισάγονται στο υλικό σε αναλογίες 70:10:10:10 αποδεδειγμένα κρατάνε φαινόμενα χάραξης και ενεργειακής επιμόλυνσης σε αρκετά χαμηλά επίπεδα.

Ωστόσο η εμφύτευση με χρήση πλάσματος έχει και κάποια αρνητικά στοιχεία με χαρακτηριστικότερο το γεγονός ότι δεν έχουμε απόλυτο έλεγχο της πραγματικής δόσης προσμίξεων που εμφυτεύεται. Η ονομαστική δόση προσμίξεων με την οποία πραγματοποιούμε την διεργασία διαφέρει απο το πραγματικό ποσοστό προσμίξεων που εισάγονται στο πυρίτιο και η διαφορά τους αυξάνεται όσο μεγαλύτερη είναι η ονομαστική δόση (**Σχήμα 1.3**). Οπότε για να ελέγχεται η πραγματική δόση προσμίξεων απαιτούνται συγκρίσεις των ονομαστικών δόσεων με μετρήσεις SIMS που καταγράφουν τα πραγματικά προφίλ



Σχήμα 1.3 – Διαφορά ονομαστικής δόσης και μετρήσεων SIMS κατά την εμφύτευση PLAD με BF_3 για δύο διαφορετικούς παλμούς ενεργοποίησης [3]

εμφύτευσης ώστε να γίνει μια βαθμονόμηση της μεθόδου. Ακόμα κατα την εμφύτευση με πλάσμα παρατηρείται εισαγωγή πολλών ειδών στον κρύσταλλο του υλικού εκτός απο τα επιθυμητά ιόντα, καθώς και η εισαγωγή ενός σημαντικού ποσοστού Φθορίου. Το Φθόριο λειτουργεί θετικά όταν πρόκειται για φαινόμενα μεταβατικής διάχυσης αφού την περιορίζει, αλλά μπορεί να έχει και αρνητικές συνέπειες κατα την λειτουργία δομών τρανζίστορ. [3]

Ωστόσο το λογισμικό Sentaurus δεν υποστηρίζει την μέθοδο της εμφύτευσης πλάσματος και δεν υπάρχει κάποιο υπολογιστικό πακέτο που να την προσομοιώνει, δεδομένης και της δυσκολίας να ελέγχουμε με ακρίβεια την πραγματική δόση προσμίξεων και την διαφορά της απο την ονομαστική. Παρόλα αυτά έχουν γίνει ερευνητικές προσπάθειες προς την κατεύθυνση να βρεθεί μία μέθοδος που να δίνει αποτελέσματα παρόμοια με την PLAD εμφύτευση και να είναι δυνατόν να προσομοιωθεί υπολογιστικά. Οι Walther et al [4] εισήγαγαν μια τέτοια μέθοδο που προβλέπει το προφίλ εμφύτευσης που θα προέκυπτε απο εμφύτευση PLAD με BF_3 εφόσον ξέρουμε την δόση προσμίξεων. Η μέθοδος με το πλάσμα δεν είναι μονοενεργειακή εμφύτευση οπότε εισάγονται στον όγκο του υλικού ιόντα υπό διαφορετικές ενέργειες. Η βασική ιδέα ήταν να κατηγοριοποιηθούν αυτά τα ιόντα και η ποικιλία στις ενέργειες και να προσομοιωθεί αυτή η διαδικασία με μιά ακολουθία ορισμένων μονοενεργειακών απλών ιοντικών εμφυτεύσεων Βορίου με διαφορετικές ενέργειες και δόσεις. Δεδο-

Ενέργεια (eV)	Ποσοστό δόσης %
450	2.60
350	1.95
250	1.87
150	10.1
100	40.66
80	19.29
50	16.62
20	6.83

Πίνακας 1.1 – Κανονικοποίηση ενεργειών και δόσεων των Walther et al [4] για ονομαστική ενέργεια **500 eV**.

μένης μιας αρχικής-ονομαστικής δόσης προσμίξεων γίνεται κανονικοποίηση των ενεργειών και ποσοστών της αρχικής δόσης και αυτές οι τιμές εφαρμόζονται στην ακολουθία των μονοενεργειακών εμφυτεύσεων. Η υπέρθεση αυτών των εμφυτεύσεων δίνει προφίλ συγκέντρωσης προσμίξεων που αποτελεί μια πολύ καλή προσομοίωση του αντίστοιχου προφίλ της μεθόδου πλάσματος όπως παρατηρήθηκε απο μετρήσεις SIMS. Οι Walther et al πραγματοποίησαν εμφύτευση με ονομαστική ενέργεια $500eV$ και η κανονικοποίηση στις ενέργειες και δόσεις φαίνεται στον Πίνακα 1.1.

Ακολουθώντας αυτό το πρότυπο κανονικοποίησης και βρίσκοντας τις αντίστοιχες τιμές ενέργειας ένα παράδειγμα ακολουθίας εμφυτεύσεων που πραγματοποιήσαμε ήταν για ενέργεια $600eV$ και για ονομαστική δόση προσμίξεων την τιμής της πραγματικής δόσης όπως αυτή προέκυπτε απο τις μετρήσεις SIMS [3]. Εφαρμόζοντας τα παραπάνω ποσοστά που αντιστοιχούν σε κάθε μια απο τις 8 διαδοχικές εμφυτεύσεις και ενέργειες παίρνουμε τις τιμές που φαίνονται στον Πίνακα 1.2.

Δοκιμές αυτής της μεθόδου εμφύτευσης έγιναν μέσω αναλυτικών μεθόδων επίλυσης αλλά και με χρήση της μεθόδου Μόντε Κάρλο η οποία μπορεί να δώσει πολύ αξιόπιστα αποτελέσματα αλλα με μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Στην περίπτωση των προσομοιώσεων για ανόπτηση με το CO_2 laser υπήρξαν κάποια προβλήματα ασυμβατότητας του αλγορίθμου με τις τελευταίες μεθόδους αναλυτικής επίλυσης και έγινε ευρύτερη χρήση της KMC μεθόδου για την εμφύτευση αλλά σε αυτό θα αναφερθούμε αναλυτικότερα και στη συνέχεια.

Ενέργεια (eV)	Ποσοστό δόσης %
540	2.23
420	1.67
300	1.60
180	8.64
120	34.98
96	16.51
60	13.90
24	5.84

Πίνακας 1.2 – Τιμές για ονομαστική ενέργεια **600 eV** και αντίστοιχες κανονικοποιημένες τιμές δόσης. [3]

1.4 Εγχάραξη πυριτίου - Διαμόρφωση stripe

Η Εγχάραξη είναι η διαδικασία που μας επιτρέπει να διαμορφώσουμε γεωμετρικές κατασκευές και να δώσουμε μορφή σε συγκεκριμένα υλικά ή σε σημεία στο δισκίδιο μας. Παρέχει την δυνατότητα εγχάραξης πολλών υλικών και αρκετών διαφορετικών μεθόδων προς επιλογή σύμφωνα με το αποτέλεσμα που θέλουμε να επιτύχουμε. Μπορούμε να αφαιρούμε επιλεκτικά μέρη απο εναποθετημένα λεπτά φίλμ ρητινών ή οξειδίων και νιτριδίων ή και να διαμορφώνουμε το υπόστρωμα πυριτίου δημιουργώντας αυλακώσεις ή διάφορες άλλες δομές. Επίσης είναι δυνατή η χρήση μασκών απο ειδικές ρητίνες ή φωτοευπαθή υλικά, που δημιουργούνται μέσω λιθογραφίας, για να ελέγχουμε ποια κομμάτια του υλικού κάτω απο τη μάσκα θέλουμε να αφαιρέσουμε. Το υλικό της μάσκας είναι ανθεκτικό στο υλικό που χρησιμοποιείται για την εγχάραξη και έτσι όπου η μάσκα δεν έχει κενό το υλικό απο κάτω προστατεύεται ενώ στα σημεία που έχουμε αφήσει απροστάτευτα ο εγχαράκτης αφαιρεί τη δεδομένη ποσότητα του υποκείμενου υλικού που έχουμε καθορίσει.

Υπάρχουν δύο κατηγορίες εγχάραξης, η υγρή εγχάραξη και η ξηρή, ή αλλιώς εγχάραξη πλάσματος όπως ονομάζεται λόγω της χρήσης αερίου σε μορφή πλάσματος. Η υγρή εγχάραξη κάνει χρήση χαρακτικών υλικών υπο υγρή μορφή. Το δισκίδιο βυθίζεται στο εγχαρακτικό διάλυμα και η εγχάραξη του εκτεθειμένου υλικού γίνεται κυρίως μέσω χημικών αντιδράσεων, το υγρό εγχαράκτης αντιδρά με το υλικό προς εγχάραξη λύνοντας τους υπάρχοντες δεσμούς του υλικού και δημιουργώντας υποπροϊόντα με ισχυρότερους δεσμούς που μπο-

ρούν να αφαιρεθούν στη συνέχεια. Στην ξηρή εγχάραξη έχουμε χρήση αέριων εγχαρακτών υπό μορφή πλάσματος και εδώ η εγχάραξη γίνεται ως συνδυασμός χημικών αλλά και φυσικών φαινομένων λόγω της χρήσης των ιόντων του πλάσματος. Η εγχάραξη πλάσματος είναι και η πιο διαδεδομένη στις μοντέρνες τεχνολογίες λόγω της μεγαλύτερης ακρίβειας και της κατευθυντικότητας που προσφέρει. Τα βασικά στάδια της διαδικασίας είναι η μεταφορά του υλικού εγχάραξης σε επαφή με την επιφάνεια του δισκιδίου, η πραγματοποίηση των αντιδράσεων εγχάραξης και τέλος η απομάκρυνση των προϊόντων υλικών απο την επιφάνεια του δισκιδίου. Εδώ είναι σημαντικό οι εγχαράκτες να δημιουργούν υποπροϊόντα υπο μορφή κατάλληλη ώστε να αφαιρούνται εύκολα στη συνέχεια, δηλαδή στην υγρή εγχάραξη τα προϊόντα πρέπει να είναι υγρά και διαλυτά και στην ξηρή να είναι υπο μορφή αερίων ή γρήγορα αφαιρούμενα μέσω εξάτμισης. Δύο παραδείγματα αντιδράσεων για την υγρή εγχάραξη και την ξηρή αντίστοιχα φαίνονται παρακάτω [2].

Υγρή εγχάραξη:

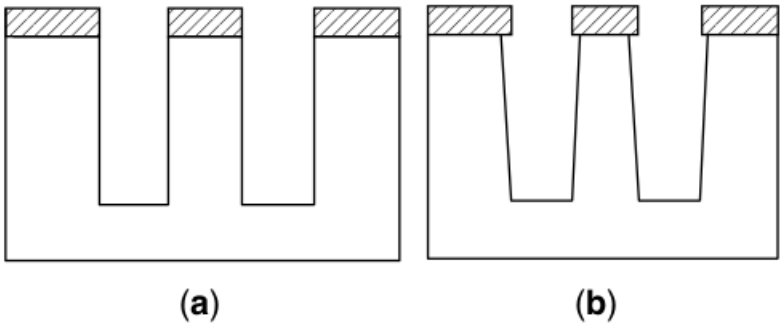
$$Si(s) + 2OH^- + 2H_2O \rightarrow Si(OH)_2(O^-)_2(aq) + 2H_2(g) \tag{1.4}$$

Εγχάραξη πλάσματος:

$$SiO_2(s) + CF_4(g) \rightarrow SiF_4(g) + CO_2(g) \tag{1.5}$$

Δύο βασικά χαρακτηριστικά της διαδικασίας της εγχάραξης είναι ο ρυθμός εγχάραξης και η κατευθυντικότητα. Ο ρυθμός εγχάραξης είναι η ποσότητα υλικού που αφαιρείται απο τον εγχαράκτη σε δεδομένο χρόνο. Κάθε υλικό που χρησιμοποιείται ως εγχαράκτης αντιδρά διαφορετικά για κάθε υλικό με το οποίο έρχεται σε επαφή. Για κάποια υλικά εμφανίζει μεγάλο ρυθμό εγχάραξης ενώ σε κάποια άλλα πολύ μικρότερο ή και μηδαμινό. Εδώ βασίζεται και η χρήση μασκών απο υλικά που για συγκεκριμένο εγχαράκτη παρουσιάζουν πολύ μικρό ρυθμό εγχάραξης έτσι ώστε να προστατεύεται το υποκείμενο υλικό, το οποίο όπου έρχεται σε επαφή με τον εγχαράκτη, αντιθέτως, παρουσιάζει μεγάλο ρυθμό εγχάραξης. Έτσι έχει σημασία για κάθε υλικό που θέλουμε να διαμορφώσουμε να επιλέγουμε τον κατάλληλο εγχαράκτη και αντίστοιχα τα κατάλληλα υλικά για χρήση μάσκας.

Η κατευθυντικότητα έχει να κάνει με την κατεύθυνση στην οποία επιδρά η εγχάραξη ή αλλιώς η σχέση μεταξύ των ρυθμών εγχάραξης που παρουσιάζονται για κάθε κατεύθυνση. Κυρίως μας ενδιαφέρουν η κατακόρυφη και η οριζόντια επίδραση της εγχάραξης. Για παράδειγμα η εγχάραξη κατά την οποία



Σχήμα 1.4 – Ανισοτροπική εγχάραξη πλάσματος. **(a)** ιδανική κατακόρυφη εγχάραξη, **(b)** πραγματική κατακόρυφη εγχάραξη [2]

έχουμε τους ίδιους ρυθμούς εγχάραξης προς όλες τις κατευθύνσεις λέγεται ισοτροπική, και αντίστοιχα ανισοτροπική είναι η περίπτωση όπου έχουμε αυξημένη κατευθυντικότητα στην εγχάραξη. Στην κατευθυντικότητα της διαδικασίας συμβάλλουν και φυσικά φαινόμενα όπως ιόντα που βομβαρδίζουν το υλικό και επίσης παρατηρείται ότι όσο περισσότερα φυσικά (και όχι χημικά) φαινόμενα εμπλέκονται στην διαδικασία της εγχάραξης τόσο πιο αυξημένη είναι η κατευθυντικότητα.

Στην υγρή εγχάραξη πιο διαδεδομένη είναι η ισοτροπική επέκταση του φαινομένου και έτσι η εγχάραξη όσο επεκτείνεται κατα βάθος τόσο επεκτείνεται και στον οριζόντιο άξονα, για παράδειγμα αν στον κατακόρυφο άξονα εγχαράξουμε το υλικό κατα 500nm τόσο υλικό θα αφαιρεθεί και στον οριζόντιο άξονα. Έτσι όταν χρησιμοποιούμε μάσκες και η εγχάραξη είναι ισοτροπική το υλικό υποσκάπτεται κατα ένα μέρος κάτω απο τα όρια της μάσκας. Οπότε στην παραπάνω περίπτωση το υλικό θα εγχαρασσόταν κατα 1000nm παραπάνω απο το πρότυπο της μάσκας. Σε μερικές περιπτώσεις η ισοτροπική εγχάραξη είναι επιθυμητή αλλά συνήθως όταν θέλουμε μεγαλύτερη ακρίβεια στην τήρηση του προτύπου της μάσκας χρειαζόμαστε ανισοτροπική ή πλήρως ανισοτροπική (κατα το δυνατόν) εγχάραξη.

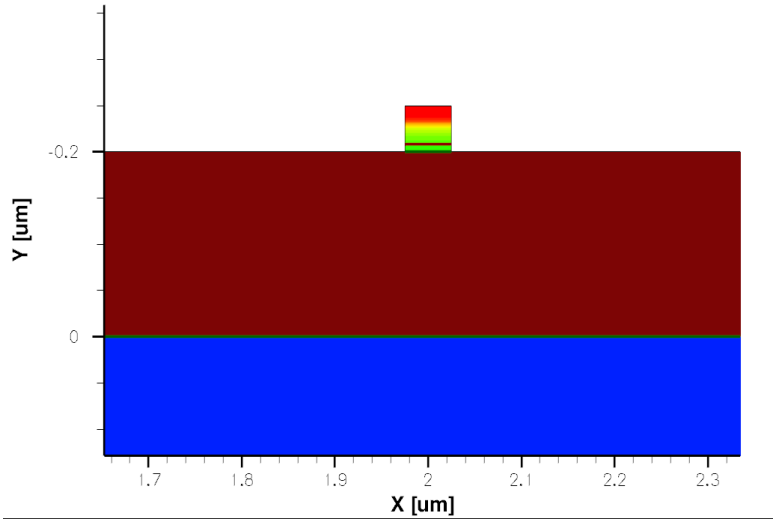
Στην ξηρή εγχάραξη πλάσματος η δυνατότητα για ανισοτροπική εγχάραξη είναι πολύ καλύτερη απο ότι στην υγρή και αγγίζει τα όρια της ιδανικής ανισοτροπικής αφού μπορούμε να επιτύχουμε εγχάραξη με πολύ μικρό ποσοστό του υλικού κάτω απο τη μάσκα να υποσκάπτεται και με κατακόρυφη εγχάραξη με πολύ μικρές γωνίες απόκλισης απο το ιδανικό (**Σχήμα 1.4**). Η αυξημένη κα-

τευθυντικότητα αυτής της μεθόδου οφείλεται κυρίως στην ύπαρξη των ιόντων που υπάρχουν στο πλάσμα και κατευθύνονται προς το δισκίδιο μέσω των ηλεκτρικών πεδίων που αναπτύσσονται κατα την λειτουργία της μεθόδου. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω η εγχάραξη πλάσματος χρησιμοποιεί και τον χημικό παράγοντα που συντελεί στην εγχάραξη αλλά και τον φυσικό, ο οποίος μεταφράζεται στα κατευθυνόμενα ιόντα. Μάλιστα μπορεί να γίνει συνδυασμός των δύο παραγόντων επιλέγοντας ποιος θέλουμε να είναι ο επικρατέστερος αναλόγως τα αποτελέσματα που θέλουμε να έχουμε. Για παράδειγμα όταν επικρατεί ο χημικός παράγοντας έχουμε λιγότερη κατευθυντικότητα αλλα μας προσφέρει καλύτερη διαφορά στους ρυθμούς εγχάραξης μεταξύ μάσκας και υποστρώματος, ενώ κατα την επικράτηση του φυσικού παράγοντα έχουμε μεγαλύτερη κατευθυντικότητα αλλα μικρότερη επιλεκτικότητα μεταξύ των ρυθμών εγχάραξης των δύο υλικών. Επίσης ο κατάλληλος συνδυασμός των δύο μάλιστα μπορεί να μας δώσει συνολικά μεγαλύτερους ρυθμούς εγχάραξης απο ότι θα παρείχε καθένας απο τους δύο παράγοντες ξεχωριστά.[2]

Ακόμα αξίζει να αναφερθεί ότι για κάποια υλικά δεν μπορούν να βρεθούν κατάλληλοι συνδυασμοί εγχαράκτη και παραγόμενων υποπροϊόντων ώστε να μπορούμε να τα εγχαράξουμε χρησιμοποιώντας τον χημικό παράγοντα είτε στην υγρή είτε στην ξηρή μέθοδο. Σε αυτή την περίπτωση γίνεται χρήση μόνο του φυσικού παράγοντα εγχάραξης δηλαδή του βομβαρδισμού με ιόντα τα οποία καταστρέφουν το υλικό στο σημείο που κατευθύνονται και το αποκολλούν, αυτή η μέθοδος ονομάζεται εγχάραξη με δέσμη ιόντων η οποία με χρήση κατάλληλων βαρέων ιόντων μπορεί να διαβρώσει σχεδόν οποιοδήποτε υλικό.

Για την προσομοίωση της διαδικασίας της εγχάραξης το Sentaurus Process προσφέρει αρκετούς τύπους εγχάραξης εκ των οποίων οι βασικότεροι είναι η ισοτροπική (**isotropic**), η ανισοτροπική (**anisotropic**) με την οποία το πρόγραμμα αναφέρεται αποκλειστικά στην κατακόρυφη εγχάραξη, και την κατευθυντική (**directional**) με την οποία μπορεί ο χρήστης να επιλέξει κάποια άλλη συγκεκριμένη κατεύθυνση εγχάραξης. Αρκεί να επιλέξουμε τύπο εγχάραξης, το υλικό που είναι προς εγχάραξη και την ποσότητα του υλικού που επιθυμούμε να αφαιρέσουμε. Η ποσότητα του υλικού συνήθως ορίζεται είτε ορίζοντας το πάχος υλικού προς αφαίρεση είτε ορίζοντας τον ρυθμό εγχάραξης και τον χρόνο της διαδικασίας. Επίσης είναι δυνατός ο ορισμός μασκών και η χρήση τους για την μέθοδο της εγχάραξης, δημιουργούμε την μάσκα ορίζοντας το υλικό που θα την αποτελεί (πχ photoresist) και το γεωμετρικό της πρότυπο και την εισάγουμε ως όρισμα στην εντολή της εγχάραξης.

Έτσι λοιπόν στην δικιά μας περίπτωση όπου θέλουμε να δημιουργήσουμε



Σχήμα 1.5 – Stripe πυριτίου μετά την εγχάραξη: με μπλέ χρώμα είναι το υπόστρωμα πυριτίου, με κόκκινο το οξείδιο και στην κορυφή το stripe πυριτίου (εδώ πλάτους 50nm. Η χρωματική απόχρωση στο stripe μπορεί να αγνοηθεί)

μία ράβδωση πυριτίου (stripe) στο επιφανειακό στρώμα του δισκιδίου, ορίζουμε μία μάσκα σύμφωνα με το επιθυμητό πλάτος του stripe έτσι ώστε ένα μέρος στο κέντρο του δισκιδίου κατά τον οριζόντιο άξονα με το δεδομένο πλάτος να προστατεύεται και όλο το υπόλοιπο υλικό δεξιά και αριστερά να είναι εκτεθειμένο στον εγχαράκτη. Εφαρμόζουμε την εγχάραξη με χρήση της ανισοτροπικής μεθόδου και αφαιρούμε όλο το εκτεθειμένο πυρίτιο απο το επιφανειακό στρώμα. Τέλος αφαιρούμε την μάσκα και αυτό που μένει είναι το επιθυμητό stripe πυριτίου με το πλάτος που ορίσαμε (**Σχήμα 1.5**).

1.5 Διάχυση - Ανόπτηση δισκιδίου

Μετά απο τη διαδικασία εμφύτευσης προσμίξεων στο πυρίτιο προκαλούνται καταστροφές στο κρυσταλλικό πλέγμα του υλικού καθώς τα ιόντα διεισδύουν και συγκρούονται με τα άτομα του πυριτίου. Αναλόγως την ενέργεια και τη δόση της εμφύτευσης οι εν λόγω ατέλειες και βλάβες στα κρυσταλλικά στρώματα του υλικού μπορεί να ποικίλουν από μικρές και λιγοστής σημασίας σε πολλαπλές και μεγάλης κλίμακας έως και την πρόκληση αμορφοποίησης. Επίσης οι εμφυτευμένες προσμίξεις στο υλικό στη μεγάλη τους πλειοψηφία είναι ηλεκτρικά ανενεργές, δηλαδή δεν καταλαμβάνουν πλεγματικές θέσεις

μεταξύ των ατόμων του πυριτίου ώστε να μπορούν να συνεισφέρουν διαθέσιμα ηλεκτρόνια-φορείς ηλεκτρικής αγωγιμότητας. Χρησιμοποιώντας διαδικασίες θέρμανσης του δισκιδίου σε υψηλές θερμοκρασίες (θερμική ανόπτηση) μπορούμε να λύσουμε ταυτόχρονα (συνήθως) και τα δύο αυτά προβλήματα. Η υψηλή θέρμανση του υλικού οδηγεί σε αναδιάρθρωση των ατόμων, αφαίρεση των ατελειών και συσσωματωμάτων και στην ηλεκτρική ενεργοποίηση των προσμίξεων. Οι ίδιες οι ατέλειες όπως θα δούμε συμβάλλουν σημαντικά στην περαιτέρω διάχυση των προσμίξεων βαθύτερα στον όγκο του υλικού και έτσι οι νόμοι που διέπουν τη διάχυση και τα χαρακτηριστικά της κίνησης των προσμίξεων μέσα στο υλικό είναι μεγάλης σημασίας.

Διαχρονικά η μελέτη της διάχυσης χωρίζεται σε δύο κατηγορίες, στην μακροσκοπική θεώρηση και την μικροσκοπική ή ατομιστική. Η μακροσκοπική θεώρηση της διάχυσης λαμβάνει κυρίως υπόψη της την ύπαρξη μόνο των προσμίξεων στο εσωτερικό του υλικού και περιγράφει την "ροή" τους σε σχέση με την συγκέντρωσή τους μέσα σε αυτό. Ωστόσο όσο η τεχνολογία της μικροηλεκτρονικής βελτιωνόταν και επικεντρωνόταν σε όλο και μικρότερες διαστάσεις έγινε κατανοητό ότι είναι σημαντική η επιρροή ατομιστικών παραγόντων στην λειτουργία της διάχυσης. Η μικροσκοπική θεώρηση λοιπόν περιγράφει την διάχυση μέσω της αλληλεπίδρασης όχι μόνο των προσμίξεων με το υλικό αλλα και των ατελειών που προϋπάρχουν ή δημιουργούνται κατα την εισαγωγή των προσμίξεων. Πλέον βλέπουμε πως αλληλεπιδράσεις προσμίξεων-ατελειών, ατελειών-ατόμων του υλικού αλλα και των ατελειών μεταξύ τους επηρεάζουν την εξέλιξη της διάχυσης αλλα και της ενεργοποίησης των προσμίξεων. [5] [3]

1.5.1 Μακροσκοπική θεώρηση

Η μακροσκοπική μελέτη λοιπόν της διάχυσης περιγράφεται κυρίως απο τους 2 νόμους του Fick, ο πρώτος νόμος περιγράφει την ροή των προσμίξεων σε ένα υλικό συναρτήσει της διαχυτότητας και της χωρικής μεταβολής της συγκέντρωσής τους σε αυτό. Η εξίσωση που τον περιγράφει φαίνεται εδώ:

$$F = -D\frac{\partial C}{\partial x} \tag{1.6}$$

F (Flux) είναι η ροή των προσμίξεων στο υλικό, D είναι ο συντελεστής διάχυσης του υλικού και $\frac{\partial C}{\partial x}$ η χωρική μεταβολή της συγκέντρωσής τους. Γίνεται άρα κατανοητό πως σύμφωνα με αυτή την εξίσωση όπου υπάρχουν μεγάλες

μεταβολές στην συγκέντρωση των προσμίξεων προκαλείται και μεγαλύτερη διάχυσή τους, ανομοιομορφίες άρα στην κατανομή προσμίξεων προκαλούν και ενισχύουν την ροή τους στο υλικό. Το αρνητικό πρόσημο στην εξίσωση καταδεικνύει την κίνηση της διάχυσης προς την κατεύθυνση όπου η χωρική συγκέντρωση προσμίξεων μειώνεται. Η διαχυτότητα D είναι σταθερά που χαρακτηρίζεται απο το υλικό στο οποίο γίνεται η διάχυση αλλά και το υλικό που διαχέεται και εξαρτάται απο παράγοντες οπως η πίεση, η δομή του κρυστάλλου και άλλα χαρακτηριστικά του υλικού, αλλά κυρίως απο την θερμοκρασία. Όπως φαίνεται και απο την εξίσωση Arrhenious:

$$D = D_0 \exp(-\frac{E_A}{kT}) \tag{1.7}$$

Εδώ D_0 είναι η διαχυτότητα του υλικού σε άπειρη θερμοκρασία και E_A η ενέργεια ενεργοποίησης, τιμές οι οποίες για δεδομένο υλικό πρόσμιξης και υλικό στο οποίο συμβαίνει η διάχυση είναι γνωστές και δίνουν συγκεκριμένη τιμή στον συντελεστή D για δεδομένη θερμοκρασία (και εφόσον πρόκειται για χωρικά ανεξάρτητο συντελεστή διάχυσης).

Ο δεύτερος νόμος του Fick τώρα εισάγει και τον παράγοντα του χρόνου στην μακροσκοπική θεώρηση της διάχυσης και συσχετίζει την χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης των προσμίξεων με την χωρική μεταβολή της ροής τους στο υλικό. Για την ακρίβεια θεωρεί τις δύο αυτές μεταβολές ίσες και καταλήγει στην έκφραση του 2ου νόμου όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{F_{in} - F_{out}}{\Delta x} = -\frac{\Delta F}{\Delta x} \tag{1.8}$$

τώρα αν πάρουμε τα όριο $\Delta t \to 0$ και $\Delta x \to 0$ έχουμε:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \tag{1.9}$$

Έτσι αν αντικαταστήσουμε εδώ την εξίσωση του πρώτου νόμου του Fick παίρνουμε την έκφραση:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(D\frac{\partial C}{\partial x}) \tag{1.10}$$

η οποία είναι και η μαθηματική έκφραση του 2ου νόμου.

Οι νόμοι του Fick αποτέλεσαν την βάση για την κατανόηση της διάχυσης και για την πρόβλεψη των αποτελεσμάτων της για αρκετό καιρό, όμως με την εξέλιξη των τεχνολογιών στην μικροηλεκτρονική όλο και νέοι παράγοντες ανακαλύπτονταν για την περιγραφή της διάχυσης και οι νόμοι του Fick

βελτιώνονταν με κατάλληλες προσθήκες. Παραδείγματος χάρη δύο τροποποιήσεις που έγιναν στους νόμους του Fick ήταν η προσθήκη της εξάρτησης της ροής απο το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται απο τα άτομα των προσμίξεων όταν η συγκέντρωση αυτών είναι στο ίδιο επίπεδο με την ενδογενή συγκέντρωση φορέων του πυριτίου. Και η εξάρτηση της διαχυτότητας και απο την συγκέντρωση των προσμίξεων. Στην πρώτη περίπτωση για μεγάλες συγκεντρώσεις πρόσμιξης λόγω της μεγαλύτερης διαχυτότητας των φορέων και των ηλεκτρονίων απο αυτή των ιόντων, αυτά κινούνται πιο γρήγορα προς το βάθος του υλικού με αποτέλεσμα να δημιουργείται ηλεκτροστατικό πεδίο το οποίο συμβάλλει στην μεταβολή της ροής των ιόντων πρόσμιξης. Τέτοιου τύπου φαινόμενα και παράγοντες που προέκυπταν συνεχώς με την εξέλιξη της μελέτης της διάχυσης δεν ήταν πάντα δυνατόν να καλυφθούν με αναδιατυπώσεις των νόμων Fick και έτσι ανέδειξαν την ανάγκη για περαιτέρω μελέτη της διάχυσης σε μικροσκοπική κλίμακα και την καταγραφή των ατομιστικών φαινομένων που συμβάλλουν σε αυτή ή την προκαλούν.[5] [3]

1.5.2 Μικροσκοπική θεώρηση

Όπως αναφέραμε και πιο πριν η μικροσκοπική μελέτη της διάχυσης περιγράφει την διάχυση μέσω ατομιστικών φαινομένων αλληλεπίδρασης μεταξύ των ιόντων πρόσμιξης και των διάφορων ατελειών που υπάρχουν στο πλέγμα του πυριτίου. Έτσι η περιγραφή του φαινομένου γίνεται μέσω της επίλυσης διαφορικών εξισώσεων που αντιπροσωπεύουν την κινητική συμπεριφορά των παραγόντων που επηρεάζουν τη διάχυση, ατέλειες, προσμίξεις και ζεύγη ατελειών και ατελειών-προσμίξεων. Οι σημαντικότερες ατέλειες που παρατηρούνται στο κρυσταλλικό πλέγμα του υλικού φαίνονται παρακάτω:

- Πλεγματικά κενά ή ατέλειες V (Vacancies): Αυτές οι ατέλειες είναι απλά πλεγματικά κενά, ακάλυπτες πλεγματικές θέσεις που μπορεί να έχουν προκύψει απο συγκρούσεις μεταξύ ιόντων και ατόμων ή να είναι προϋπάρχουσες ατέλειες του υλικού. Πολλές φορές παρατηρούνται ατέλειες και με δύο συνεχόμενα πλεγματικά κενά (διπλά πλεγματικά κενά).

- Ενδοπλεγματικές ατέλειες ή ατέλειες I (Interstitials): Εδώ πρόκειται για επιπλέον μονά άτομα πυριτίου (άτομα του πλέγματος) που καταλαμβάνουν ενδοπλεγματικές θέσεις χωρίς να ακολουθούν την κανονική πλεγματική διάταξη του κρυστάλλου.

- Ενδοπλεγματικότητες (Interstitialcies): Πρόκειται για ενδοπλεγματικές ατέλειες όπως παραπάνω αλλα αυτή τη φορά για δύο άτομα πυριτίου που συσσωματώνονται και λαμβάνουν την ίδια ενδοπλεγματική θέση. Τέτοιες ατέλειες μπορούν να οδηγήσουν σε μεγαλύτερα συσσωματώματα και εκτεταμένες ατέλειες οι οποίες συμβάλλουν σε μεγάλο βαθμό σε φαινόμενα μεταβατικής διάχυσης κατα την ανόπτηση του υλικού (φαινόμενο TED).
- Πρόσμιξη σε ενδοπλεγματική ή πλεγματική θέση: Αυτές είναι ατέλειες που αφορούν ιόντα πρόσμιξης που λαμβάνουν θέσεις είτε πλεγματικών κενών είτε ενδοπλεγματικές θέσεις με ιδιαίτερη σημασία να έχουν οι περιπτώσεις που τα ιόντα πρόσμιξης είναι δότες ή αποδέκτες, δηλαδή άτομα των ομάδων V και III του περιοδικού πίνακα αντίστοιχα, τα οποία συμβάλλουν κατα πολύ στην ηλεκτρική αγωγιμότητα του υλικού.
- Ζεύγη πρόσμιξης-πλεγματικού κενού και πρόσμιξης-ενδοπλεγματικής ατέλειας: Τέτοιες ατέλειες προκύπτουν απο την αλληλεπίδραση των ιόντων πρόσμιξης με τα επιπλέον άτομα πυριτίου που λαμβάνουν ενδοπλεγματικές θέσεις ή με ενδοπλεγματικότητες και πλεγματικά κενά.

Σύμφωνα λοιπόν με την μικροσκοπική θεώρηση της διάχυσης όλοι αυτοί οι τύποι ατελειών έχουν σημαντικό ρόλο στην διαδικασία της διάχυσης και στην εξέλιξή της. Παραδείγματος χάρη ιόντα πρόσμιξης στο υλικό ευρισκόμενα κοντά σε οπές (πλεγματικά κενά) δύνανται να κινηθούν προς τα εκεί και να "συμπληρώσουν" τη θέση των κενών πραγματοποιώντας έτσι μια διαχυτική διαδικασία. Επίσης μια ενδοπλεγματική ατέλεια δηλαδή ένα επιπλέον άτομο πυριτίου μπορεί να εξωθήσει ένα ιόν πρόσμιξης που βρίσκεται σε μια θέση αντικατάστασης κάνοντας το να κινηθεί μέσα στο υλικό ώσπου να καταλάβει μια άλλη θέση μέσα στο πλέγμα ή να εξωθήσει με το μέρος του ένα άτομο πυριτίου σε κάποια ενδοπλεγματική θέση. Με αυτό τον τρόπο η διαδικασία μπορεί να επαναλαμβάνεται συνεχώς συμβάλλοντας στην κίνηση (διάχυση) των προσμίξεων μέσα στο υλικό. Ομοίως το ίδιο μπορεί να συμβαίνει και με στην περίπτωση της ενδοπλεγματικότητας όπου απλά έχουμε ένα ζεύγος ατόμων πυριτίου αντί για ένα άτομο.

Επίσης, ένας άλλος μηχανισμός διάχυσης έχει παρατηρηθεί με τις ατέλειες που έχουν μορφή ζεύγους πρόσμιξης-ενδοπλεγματικής ατέλειας να παίζουν καθοριστικό ρόλο. Σύμφωνα με αυτή τη θεωρία το ζεύγος ιόντος και ατόμου πυριτίου μπορεί να κινείται μέσω των δεσμών μέσα στον κρύσταλλο του υλικού και μετά απο τυχαίο χρονικό διάστημα να σπάει με αποτέλεσμα το ιόν

της πρόσμιξης να λαμβάνει μια πλεγματική θέση και το άτομο του πυριτίου εφόσον αποκόπηκε απο το ζεύγος να λαμβάνει μια ενδοπλεγματική θέση και να αποτελεί πλέον μια νέα ενδοπλεγματική ατέλεια. Όλοι αυτοί οι τρόποι μετακίνησης των προσμίξεων μέσα στο υλικό και η αλληλεπίδραση τους με τις εκάστοτε ατέλειες αποτελούν τρόπους διάχυσης και ενίσχυσης του φαινομένου. Για κάθε περίπτωση τα φαινόμενα μπορούν να περιγραφούν μέσα απο την κατασκευή διάφορων εξισώσεων που "αποτυπώνουν" την εξάρτηση της ροής των προσμίξεων απο την αλληλεπίδραση τους με κάθε ατέλεια.

Πιο συγκεκριμένα για την περίπτωση των πλεγματικών κενών V (Vacancies) και των ενδοπλεγματικών ατελειών I (Interstitials) είναι πλέον αποδεδειγμένο ότι και οι δύο μορφές ατέλειας συμμετέχουν μαζί σε έναν διπλό μηχανισμό διάχυσης των προσμίξεων. Τα πειραματικά αποτελέσματα που αποδεικνύουν την ύπαρξη του εν λόγω διπλού μηχανισμού βασίζονται στο γεγονός ότι κατα τη διάρκεια διαδικασιών διάχυσης που συμβαίνουν σε μη αδρανές περιβάλλον κάτω απο συνθήκες οξείδωσης ή "νιτρίδωσης" του πυριτίου πχ, παρατηρείται πως για ίδιες συνθήκες η διάχυση ενός είδους πρόσμιξης επιταχύνεται ενώ η διάχυση ενός άλλου είδους επιβραδύνεται. Παραδείγματος χάρη κατα την οξείδωση του πυριτίου παρατηρείται πως η διάχυση του αρσενικού επιταχύνεται ενώ αυτή του αντιμονίου επιβραδύνεται σε επίπεδο χαμηλότερο απο ότι θα συνέβαινε αν είχαμε κανονική διάχυση αντιμονίου σε αδρανές περιβάλλον. Διαδικασίες όπως η οξείδωση και η νιτρίδωση λόγω των επιπλέον ατόμων που εισάγουν στο κρυσταλλικό πλέγμα του υλικού συμβάλλουν είτε στην αύξηση είτε στη μείωση των ενδοπλεγματικών ατελειών ή των πλεγματικών κενών. Έτσι παρατηρείται ότι διαταράσσοντας τους πληθυσμούς των σημειακών ατελειών (V και I) μέσω της οξείδωσης αποτυπώνεται αυτός ο διττός μηχανισμός διάχυσης όπου πχ οι αυξημένες ατέλειες V θα ευνοήσουν την διάχυση μιας πρόσμιξης ενώ θα επιβραδύνουν αυτής μιας άλλης και αντίστοιχα για τις ατέλειες I.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις μπορούν να αποδοθούν μαθηματικά αν θεωρήσουμε ότι οι προσμίξεις διαχέονται κατα ένα μέρος f_I λόγω ενδοπλεγματικών ατελειών και κατα το υπόλοιπο $f_V = 1 - f_I$ λόγω πλεγματικών κενών. Έτσι υπο διαταραγμένες συνθήκες όπου οι συγκεντρώσεις των δύο ειδών ατελειών C_I και C_V διαφέρουν απο τις αντίστοιχες συγκεντρώσεις σε συνθήκες ισορροπίας (C_I^* και C_V^*), η διαχυτότητα μιας πρόσμιξης μπορεί να γραφεί όπως παρακάτω:

$$D_A^{eff} = D_A^*(f_I \frac{C_I}{C_I^*} + f_V \frac{C_V}{C_V^*}) \tag{1.11}$$

όπου D_A^{eff} είναι η ενεργός διαχυτότητα μιας πρόσμιξης σε διαταραγμένες συνθήκες πληθυσμού ατελειών και D_A^* είναι η αντίστοιχη διαχυτότητα σε συνθήκες ισορροπίας.

Πλέον ουσιαστικά έχουμε χωρίσει το φαινόμενο σε δύο μηχανισμούς διάχυσης, αυτής που πραγματοποιείται μέσω ενδοπλεγματικών ατελειών και αυτής μέσω πλεγματικών κενών. Αν αναπαραστήσουμε με D_{AI} την διαχυτότητα της πρόσμιξης A στο μηχανισμό μέσω ενδοπλεγματικών ατελειών και με D_{AV} την αντίστοιχη διαχυτότητα μέσω των πλεγματικών κενών, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε πως η ενεργός διαχυτότητα μπορεί να γραφεί ως:

$$D_A^{eff} = D_{AI} + D_{AV} \tag{1.12}$$

και ύστερα απο μια πιο λεπτομερή μαθηματική θεώρηση:

$$D_A^{eff} = d_{AI}[\frac{C_{AI}}{C_A}] + d_{AV}[\frac{C_{AV}}{C_A}] \tag{1.13}$$

όπου d_{AI} και d_{AV} είναι οι παράγοντες διαχυτότητα για το πραγματικό στοιχείο πρόσμιξης που πραγματοποιεί τη διάχυση για κάθε τρόπο αντίστοιχα, και $\frac{C_{AI}}{C_A}$, $\frac{C_{AV}}{C_A}$ είναι τα ποσοστά των συγκεντρώσεων της πρόσμιξης που πραγματοποιούν διάχυση με το εκάστοτε είδος ατέλειας.

Τα παραπάνω βασίζονται στον χωρισμό του φαινομένου της διάχυσης σε φαινόμενα αλληλεπίδρασης του ιόντος της πρόσμιξης A με μια ατέλεια I ή V

$$A + I \leftrightarrow AI \tag{1.14}$$

ή αντίστοιχα

$$A + V \leftrightarrow AV \tag{1.15}$$

με τη διαδικασία να είναι αμφίδρομη, δηλαδή θεωρείται πως η αλληλεπίδραση αυτή είναι ένα ζεύγος μεταξύ της ατέλειας και της πρόσμιξης που κινείται αυτό μέσα στο υλικό συμβάλλοντας στη διάχυση της πρόσμιξης και κάποια στιγμή διασπάται με την πρόσμιξη να καταλαμβάνει μια άλλη θέση και μια νέα ατέλεια να δημιουργείται. Αυτό είναι ακριβώς το μοντέλο που αναφέραμε νωρίτερα με τα ζεύγη ενδοπλεγματικών ατελειών και ενδοπλεγματικοτήτων με προσμίξεις όσο και προσμίξεις με πλεγματικά κενά, τα οποία αναπαριστούν τον μηχανισμό της διάχυσης κατα τον οποίο μια ατέλεια καταναλώνεται προσωρινά δημιουργώντας ένα κινούμενο στοιχείο μαζί με μία πρόσμιξη ώσπου να αποκοπεί ξανά και να εμφανιστεί ως ατέλεια σε άλλο σημείο του υλικού έχοντας μεταφέρει ωστόσο το ιόν πρόσμιξης βαθύτερα στο υλικό.

Ο εν λόγω μηχανισμός είναι πιο πολύπλοκος φυσικά απο ότι φαίνεται και υπο διαφορετικές συνθήκες μπορεί να συμπεριφέρεται διαφορετικά, πχ υπο συνθήκες υπερκορεσμού ενδοπλεγματικών ατελειών η διάχυση συγκεκριμένων προσμίξεων όπως το βόριο ευνοείται λόγω του υπερκορεσμού ατελειών και στην αντίθετη περίπτωση η διάχυση επιβραδύνεται. Επίσης μέσω αυτής της αλληλεπίδρασης ατελειών προσμίξεων και της κίνησής τους σε ζεύγη εκτός απο τα ιόντα πρόσμιξης μετατοπίζονται και ατέλειες βαθύτερα στο υλικό πράγμα που δίνει εκκίνηση αφενός σε επιπλέον διάχυση αλλα και γίνεται πιο δύσκολο για τις ατέλειες να αφαιρεθούν.[5] [3]

1.5.3 Προσομοίωση διάχυσης με το Sentaurus Process

Εδώ αξίζει να αναφερθεί πως τα περισσότερα μοντέλα διάχυσης της μικροσκοπικής θεώρησης που βασίζονται στην αλληλεπίδραση των προσμίξεων και των ατελειών επιλύονται με εξισώσεις που θεωρούν την αντίδραση $A + I \rightarrow AI$ σε ισορροπία, ενώ οι μοντέρνες τεχνικές ανόπτησης που χρησιμοποιούνται για τις πιο εξελιγμένες τεχνολογίες μικροηλεκτρονικής, όπου ζητάμε πολύ ρηχές επαφές και μεγαλύτερη ακρίβεια στα προφίλ προσμίξεων και διάχυσης, σπάνια λειτουργούν υπο συνθήκες ισορροπίας. Έτσι για την προσομοίωση διαχυτικών διαδικασιών και πολύ ταχέων ανοπτήσεων χρειαζόμαστε μια περιγραφή που να θεωρεί πως οι ρυθμοί της αντίδρασης δεν είναι σε ισορροπία. Ένα παράδειγμα είναι αυτός ο τύπος που περιγράφει τον ρυθμό της αντίδρασης R ώς συνάρτηση ενός παράγοντα ευθύ ρυθμού αντίδρασης και ενός παράγοντα αντίστροφου ρυθμού.

$$R = k_f C_A C_I - k_r C_{AI} \tag{1.16}$$

όπου k_f και k_r είναι οι ευθύς και αντίστροφος ρυθμοί αντίστοιχα. Έτσι είναι εφικτό η διάχυση να επιλυθεί μέσω εξισώσεων που αντιπροσωπεύουν μια σειρά ξεχωριστών αντιδράσεων.

Για την προσομοίωση της κινητικής της διάχυσης το Sentaurus Process διαθέτει ένα πολύ εξελιγμένο μοντέλο επίλυσης το οποίο είναι ιδανικό για συνθήκες μή ισορροπίας των αντιδράσεων. Είναι το Charged React το οποίο παρέχει πολύ καλά αποτελέσματα για περιπτώσεις ταχείας ανόπτησης υπο πολύ υψηλές θερμοκρασίες όπως αυτή της ανόπτησης με laser. Η βασική λειτουργία του μοντέλου περιγράφεται μέσω των αντιδράσεων που παραθέτουμε παρακάτω και των αντίστοιχων εξισώσεων που τις επιλύουν [1]:

$$A^z + I^i \leftrightarrow AI^{(z+j)} - (i-j)e \tag{1.17}$$

$$A^z + V^i \leftrightarrow AV^{(z+j)} - (i-j)e \tag{1.18}$$

$$I^i + V^j \leftrightarrow -(i+j)e \tag{1.19}$$

$$AI^{(z+i)} + V^j \leftrightarrow A^z - (i+j)e \tag{1.20}$$

$$AV^{(z+i)} + I^j \leftrightarrow A^z - (i+j)e \tag{1.21}$$

όπου A είναι ένα ιόν πρόσμιξης, I μια ενδοπλεγματική ατέλεια (intestitial) και V ένα πλεγματικό κενό (vacancy). Παρακάτω φαίνονται οι εξισώσεις που επιλύουν το μοντέλο των αντιδράσεων:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -R_{AI} - R_{AV} + R_{AI,V} + R_{AI,I} - R_A^{clus} \tag{1.22}$$

$$\frac{\partial C_{AI}}{\partial t} = -\nabla \bullet J_{AI} + R_{AI} - R_{AI,V} - R_{AI}^{clus} \tag{1.23}$$

$$\frac{\partial C_{AV}}{\partial t} = -\nabla \bullet J_{AV} + R_{AV} - R_{AV,I} - R_{AV}^{clus} \tag{1.24}$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = -\nabla \bullet J_I - R_{IV} - R_{AI} - R_{AV,I} - R_I^{clus} \tag{1.25}$$

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = -\nabla \bullet J_V - R_{IV} - R_{AV} - R_{AI,V} - R_V^{clus} \tag{1.26}$$

όπου C οι συγκεντρώσεις του εκάστοτε στοιχείου X είτε αυτό είναι πρόσμιξη (A) είτε ατέλεια ή ζεύγος πρόσμιξης-ατέλειας. Οι ρυθμοί R δίνονται απο εξισώσεις που θα δούμε παρακάτω.

Η ροή του ευκίνητου ζεύγους ατέλειας δίνεται απο τον τύπο:

$$J_{A^c} = -d_{A^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c} \nabla \left(A^c \left(\frac{n}{n_i}\right)^c\right) \tag{1.27}$$

Η αντίδραση δημιουργίας αυτών των ζευγών θεωρείται ότι βρίσκεται σε ισορροπία και έτσι μπορεί να οριστεί ένα σετ σταθερών του τύπου:

$$C_{AX^{z+c}} = k_{AX^c} C_{AX^z} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-(z+c)} \tag{1.28}$$

όπου X είναι I ή V, z το φορτίο της πρόσμιξης A και k_{AX^c} η σταθερά αντίδρασης του ζεύγους AX που δίνεται απο τον τύπο :

$$k_{AX^c} = k^0_{AX^c} \exp\left(\frac{-k^E_{AX^c}}{k_B T}\right) \tag{1.29}$$

Γνωρίζοντας αυτά υπολογίζουμε την ροή των ζευγών μέσω της σχέσης:

$$J_{AX} = -\sum J_{AX^c} = \sum_c D_{AX^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c-z} \nabla \left(\frac{C_{AX}}{C^+_{X^0} \sum_q k_{AX^q} k_{X^q} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-q}} \left(\frac{n}{n_i}\right)^z\right) \tag{1.30}$$

όπου C_{AX} 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:

$$D_{AX^c} = C^+_{X^0} k_{AX^c} k_{X^c} d_{AX^c} = D^0_{AX^c} \exp\left(\frac{-D^E_{AX^c}}{k_B T}\right) \tag{1.31}$$

εδώ ο όρος $C^+_{X^0}$ συμβολίζει την συγκέντρωση των ουδέτερων ατελειών σε κατάσταση ισορροπίας και δίνεται συναρτήσει της ολικής εσωτερικής συγκέντρωσης της ατέλειας X απο τον τύπο:

$$C^+_{X^0} = \frac{C^+_{X(intrinsic)}}{\sum_c k_{X^c}} \tag{1.32}$$

όπου οι συγκεντρώσεις $C^+_{V(intrinsic)}$ και $C^+_{X(intrinsic)}$ ακολουθούν το νόμο Arrhenious και ορίζονται στο πρόγραμμα απο τον χρήστη. Ομοίως με την περίπτωση των ζευγών τώρα ορίζεται και η ροή των ατελειών:

$$J_X = -\sum J_{X^c} = \frac{\sum_c k_{X^c} D_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c} C^+_X}{\sum_q k_{X^q} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-q}} \nabla \left(\frac{C_X}{C^+_X}\right) \tag{1.33}$$

όπου C_X είναι η ολική συγκέντρωση των ατελειών και D_{X^c} η διαχυτότητα των ατελειών X σε κατάσταση φόρτισης c:

$$D_{X^c} = d_{X^c} = D^0_{X^c} \exp\left(\frac{-D^E_{X^c}}{k_B T}\right) \tag{1.34}$$

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

$$A^a + B^b \leftrightarrow AB^c + (c-a-b)e \tag{1.35}$$

$$R_{A^a,B^b,c} = k^f_{A^a,B^b,c}\left(C_{A^a}C_{B^b} - k^r_{A^a,B^b,c}C_{AB^c}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{(c-a-b)}\right) \tag{1.36}$$

Έτσι αθροίζοντας για όλες τις πιθανές καταστάσεις φόρτισης έχουμε:

$$R_{AX} \equiv -R^f_{AX}\left(C_A C_X - \frac{C_{AX}}{\bar{K}^r_{AX}}\right) \tag{1.37}$$

$$R_{AI,V} \equiv \bar{K}^f_{AI,V}\left(C_{AI}C_V - \bar{K}^r_{AX}C^+_I C^+_V C^+_A\right) \tag{1.38}$$

$$R_{AV,I} \equiv \bar{K}^f_{AV,I}\left(C_{AV}C_I - \bar{K}^r_{AX}C^+_I C^+_V C^+_A\right) \tag{1.39}$$

όπου:

$$\bar{K}^f_{AX} \equiv \frac{\sum\limits_i K_{f_x KOi}k_{X^i}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-i}}{\sum\limits_c k_{X^c}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}} \tag{1.40}$$

$$\bar{K}^r_{AX} \equiv \frac{\sum\limits_i K_{AX^i}k_{X^i}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-i}}{\sum\limits_c k_{X^c}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}} \tag{1.41}$$

$$\bar{K}^f_{AI,V} \equiv \frac{\sum\limits_i\sum\limits_j K_{f_{AI^i,V^i}FT^kAI^k}k_{V^j}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-(i+j)}}{\sum\limits_c k_{AI^c}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}\sum\limits_z k_{V^z}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-z}} \tag{1.42}$$

Η αντίδραση επανασύνδεσης I - V γράφεται ως:

$$R_{IV} = \Re_{IV}(C_I C_V - C^+_I C^+_V) \tag{1.43}$$

όπου

$$\Re_{IV} = \frac{C^+_{I(intrinsic)}C^+_{V(intrinsic)}}{C^+_I C^+_V \sum\limits_z k_{I^z}\sum\limits_z k_{V^z}}\sum_i\sum_j K_{I^iV^j}k_{I^i}k_{V^j}\left(\frac{n}{n_i}\right)^{-(i+j)} \tag{1.44}$$

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 $K_{I^iV^j}$ 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 :

$$C_X^+ = C_{X(intrinsic)}^+ \frac{\sum_c k_{X^c} \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-c}}{\sum_c k_{X^c}^s} \tag{1.45}$$

όπου το $k_{X^c}^s$ είναι ο προσαρμοσμένος συντελεστής φόρτισης για την ατέλεια X. Με τη χρήση αυτών των εξισώσεων λοιπόν επιλύει το φαινόμενο της διάχυσης το μοντέλο Charged React του Sentaurus Process.[1]

Μέσα απο όλες αυτές τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατελειών και προσμίξεων συντελείται το φαινόμενο της διάχυσης υπο την μικροσκοπική θεώρηση του φαινομένου αλλά εκτός απο την διάχυση των προσμίξεων όλη αυτή η αναδιανομή και μετακίνηση των ατελειών και των ατόμων προσμίξεων έχει ως αποτέλεσμα και την αφαίρεση του μεγαλύτερου μέρους των ατελειών με επαναφορά του κρυσταλλικού πλέγματος στην φυσιολογική του κατάσταση αλλα και στην ηλεκτρική ενεργοποίηση των προσμίξεων. Τα άτομα του πυριτίου που βρίσκονται σε ενδοπλεγματικές θέσεις και αποτελούν ατέλειες ή που έχουν αφήσει πίσω τους κενή μια πλεγματική θέση κατα τη διάρκεια της ανόπτησης ή αφού κινηθούν με ένα ιόν πρόσμιξης και το αποχωριστούν, αναδιατάσσονται και προτιμούν να λαμβάνουν πλεγματικές θέσεις και να επαναφέρουν το πλέγμα στην κανονική κρυσταλλική δομή. Επίσης κατα την ανόπτηση επωφελείται η κατάληψη "συμμετρικών" ενδοπλεγματικών θέσεων απο τις προσμίξεις ελευθερώνοντας ένα ηλεκτρόνιο ή μια οπή συμβάλλοντας στην ηλεκτρική αγωγιμότητα.

Γενικά οι απλούστερες των ατελειών είναι εύκολα αναστρέψιμες και αφαιρούνται στα πρώτα στάδια της θερμικής ανόπτησης απο τις χαμηλές θερμοκρασίες των 400 βαθμών Κελσίου, ενώ συσσωματώματα και πιο πολύπλοκες ατέλειες είναι πιο δύσκολα αναστρέψιμες και απαιτούνται υψηλότερες θερμοκρασίες μέχρι και τους 1000 βαθμούς Κελσίου. Ομοίως όσον αφορά την ενεργοποίηση των προσμίξεων, για μικρή εισαγωγή καταστροφής στην πλεγματική δομή του υλικού υψηλά επίπεδα ενεργοποίησης των προσμίξεων επιτυγχάνονται σχετικά εύκολα, ενώ για μεγαλύτερα επίπεδα καταστροφής και όσο πλησιάζουμε στο όριο της αμορφοποίησης (μεγαλύτερες δόσεις εμφύτευσης) η ενεργοποίηση είναι όλο και δυσκολότερη και απαιτούνται υψηλές θερμοκρα-

σίες για να την πετύχουμε στα επιθυμητά επίπεδα.

Είναι προφανής η εξάρτηση της ενεργοποίησης των προσμίξεων απο τη θερμοκρασία η οποία καθώς αυξάνεται δίνει και μεγαλύτερη ενεργοποίηση. Ωστόσο αυτή η σχέση δεν είναι πάντα γραμμική, για μικρές δόσεις πρόσμιξης (10^{12} cm^{-2}) η γραμμικότητα κυριαρχεί και οι προσμίξεις ενεργοποιούνται σχετικά εύκολα και γρήγορα απο τις χαμηλές ακόμα θερμοκρασίες. Για μεγαλύτερες όμως δόσεις της τάξεως 10^{14}, 10^{15} η ενεργοποίηση είναι δυσκολότερη και στις χαμηλές θερμοκρασίες αυξάνεται με χαμηλούς ρυθμούς λόγω των αυξημένων και πολυπλοκότερων ατελειών που δημιουργούνται κατα την εμφύτευση με υψηλές δόσεις πρόσμιξης. Μάλιστα για αυτό το λόγο παρατηρούνται και φαινόμενα αντίστροφης ενεργοποίησης στις θερμοκρασίες μεταξύ 500 και 600 βαθμών τα οποία όμως αυξανομένης της θερμοκρασίας προσπερνώνται και η ενεργοποίηση αυξάνεται πάλι για να γίνει τελικά πλήρης αλλά πλέον σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες της τάξης των 1000-1100 βαθμών Κελσίου.[5]

Αυτές όμως οι θερμοκρασίες που απαιτούνται για να επιτύχουμε υψηλά επίπεδα αφαίρεσης της καταστροφής και ενεργοποίησης των προσμίξεων προσθέτουν και ένα πρόβλημα, καθώς αυξάνουν την περαιτέρω διάχυση των προσμίξεων και την επέκταση τους σε μεγαλύτερο βάθος. Κάθε θερμικός κύκλος που επιτελείται πάνω στο υλικό προκαλεί τη διάχυση των προσμίξεων και σκοπός είναι να βρεθεί η βέλτιστη ισορροπία μεταξύ αποδοτικής ανόπτησης και ενεργοποίησης και όσο δυνατόν λιγότερης επιπρόσθετης διάχυσης των προσμίξεων. Αυτή η πρόσθετη διάχυση επιδεινώνεται σημαντικά και απο το φαινόμενο της Ταχείας Μεταβατικής Διάχυσης (Transient-Enhanced Diffusion, TED) το οποίο οφείλεται στην δημιουργία μεγάλων συσσωματωμάτων ατελειών (τις ενδοπλεγματικότητες ή interstitialcies που αναφέραμε παραπάνω) που όπως είδαμε η κινητική τους συμπεριφορά λειτουργεί ευνοϊκά στην διάχυση των προσμίξεων. Με την όλο και αυξανόμενη κατανόηση του εν λόγω φαινομένου παρατηρήθηκε ότι σε υψηλά επίπεδα καταστροφής απο την εμφύτευση το φαινόμενο ενισχύεται αν έχουμε ανόπτηση μεγαλύτερης διάρκειας και σε χαμηλές θερμοκρασίες. Ενώ σε μικρότερης διάρκειας ανοπτήσεις και με μεγαλύτερη θερμοκρασία η επίδραση του είναι σημαντικά μικρότερης εμβέλειας. Αυτό οφείλεται στην σημαντική εξάρτηση του φαινομένου απο τις ατέλειες του πλέγματος οι οποίες σε υψηλές θερμοκρασίες αφαιρούνται γρήγορα και το φαινόμενο επιδρά ελάχιστα ενώ σε χαμηλές θερμοκρασίες οι ατέλειες διατηρούνται και το φαινόμενο ευνοείται. Έτσι στην προσπάθεια μείωσης των φαινομένων πρόσθετης διάχυσης δικαιολογημένα έχουν αναζητηθεί μέθοδοι ταχείας ανόπτησης (Rapid Thermal Annealing, RTA) σε σημαντικά υψηλές θερ-

μοκρασίες έτσι ώστε και η μικρή διάρκεια να μειώνει την αναπόφευκτη θερμική διάχυση που προκαλείται αλλα και σε συνδυασμό με τις υψηλές θερμοκρασίες να μειώνεται και το φαινόμενο TED.[5]

Εδώ ξανά δικαιολογείται η καταλληλότητα της ανόπτησης με laser για τις μοντέρνες τεχνολογίες, την ανόπτηση πολύ μικρών δομών και τη διατήρηση ρηχών επαφών, αφού παρέχει τη δυνατότητα για πολύ μικρή διάρκεια θέρμανσης στις υψηλές θερμοκρασίες που απαιτούνται.

1.6 Ακτινοβολία laser και ύλη, αλληλεπίδραση και ιδιότητες

Η χρήση της ακτινοβολίας laser είναι ευρέως διαδεδομένη στις μοντέρνες τεχνολογίες και οι εφαρμογές της είναι ήδη πολυάριθμες και συνεχώς αυξανόμενες και εξελισσόμενες. Εφαρμογές στον τομέα της επιστήμης, της βιομηχανίας (βαριάς και μή), της ιατρικής και ακόμα και της συντήρησης πολιτιστικής κληρονομιάς. Στον τομέα της μικροηλεκτρονικής η φύση και οι ιδιότητες της ακτινοβολίας laser παρέχει τη δυνατότητα για χρήση της σε πολλές διαδικασίες όπως η κοπή υλικών, η εγχάραξη δισκιδίων, η χρήση laser για εναπόθεση λεπτών φιλμ υλικού, η δημιουργία πλάσματος καθώς και η ταχεία θερμική ανόπτηση δισκιδίων. Η υψηλή πυκνότητα ενέργειας που χαρακτηρίζει την ακτινοβολία laser καθώς και η μονοχρωματικότητα της σε συνδυασμό με την μεγάλη χωρική συμφωνία που επιτρέπει ακριβή εστίαση και κατευθυντικότητα είναι οι σημαντικές ιδιότητες που έχουν συμβάλλει στην εξέλιξη και ανάπτυξη αυτής της ποικιλίας εφαρμογών.

Είναι επομένως πολύ σημαντική η μελέτη και περιγραφή των βασικών χαρακτηριστικών της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με το υλικό το οποίο ακτινοβολείται και των φαινομένων που παρατηρούνται. Σε ένα σύστημα αλληλεπίδρασης laser και στόχου τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα εξαρτώνται απο παράγοντες που χαρακτηρίζουν τη συγκεκριμένη ακτινοβολία και αντίστοιχα το υλικό του στόχου. Τέτοιοι παράγοντες είναι το μήκος κύματος της ακτινοβολίας (ή η συχνότητα αντίστοιχα), η διάρκεια του παλμού, η πυκνότητα ενέργειας του συγκεκριμένου laser, το μέσο διάδοσης καθώς και ιδιότητες του υλικού του στόχου όπως οι συντελεστές απορρόφησης, ειδικής θερμοχωρητικότητας κ.α.

Κατά την έκθεση του υλικού του δισκιδίου στην δέσμη laser τα άτομα του υλικού δέχονται μεγάλη πυκνότητα ενέργειας απο το laser και διεγείρονται

σε υψηλότερες καταστάσεις ενέργειας. Στα πολύ αρχικά στάδια της διαδικασίας το φαινόμενο δεν είναι θερμικό. Το πρώτο στάδιο είναι η απορρόφηση της ενέργειας που δέχεται το υλικό απο τη δέσμη φωτός και στη συνέχεια η μετατροπή της σε θερμότητα. Ο ρυθμός απορρόφησης της ενέργειας απο το υλικό εξαρτάται όχι μόνο απο την ένταση της ακτινοβολίας αλλά και απο το ίδιο το υλικό του δισκιδίου και παράγοντες όπως η θερμοκρασία και η συγκέντρωση φορέων. Η απορρόφηση της ενέργειας γίνεται μέσω της διέγερσης των ατόμων και οι διαφορετικοί τρόποι διέγερσης λαμβάνοντας υπόψη και την ένταση ακτινοβολίας που προσπίπτει στο υλικό είναι μεγάλης σημασίας για τη διαδικασία απορρόφησης και μετατροπής αυτής της ενέργειας σε θερμότητα.

Τρόποι διέγερσης - Απορρόφηση ακτινοβολίας

Οι τρόποι διέγερσης χωρίζονται σε διάφορες ηλεκτρονικές διεγέρσεις όπως διαζωνικές διεγέρσεις, ενδοζωνικές, πλασμόνια, εξιτόνια κ.α. Και στις φονονικές διεγέρσεις, διεγέρσεις πολαριτονίων, μανγητονίων κ.α. Επίσης είναι πιθανή η ύπαρξη και ηλεκτρονικών ή ταλαντωτικών διεγερμένων καταστάσεων που οφείλονται σε ατέλειες και προσμίξεις.Οι διαζωνικές ηλεκτρονικές διεγέρσεις συμβαίνουν όταν έχουμε απορρόφηση φωτονίου ενέργειας μεγαλύτερης απο το ενεργειακό χάσμα του υλικού μεταξύ της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας ($hv > E_g$). Κατα τη διάρκεια αυτών των διεγέρσεων τα ηλεκτρόνια διεγείρονται και δημιουργούνται ζεύγη ηλεκτρονίων-οπών, και μπορούν να προκληθούν απο ακτινοβολία κοντά στο υπέρυθρο και το ορατό για ημιαγωγούς και υπεριώδης ακτινοβολία για τους μονωτές. Ένα άλλο είδος διεγέρσεων είναι αυτών που επιτρέπουν την απορρόφηση φωτονίων και τη μετάβαση σε καταστάσεις ατελειών ή προσμίξεων οι οποίες μπορούν να συμβούν και για ενέργειες μικρότερες του ενεργειακού χάσματος ($hv < E_g$). Επίσης είναι πιθανή η απορρόφηση 2 φωτονίων στη σειρά μέσω των μεταβατικών διεγέρσεων απο τις καταστάσεις ατελειών είτε η απευθείας απορρόφηση 2 φωτονίων και μετάβαση στη ζώνη αγωγιμότητας. Τέλος οι ενδοζωνικές ηλεκτρονικές μεταβάσεις είναι ένα συχνό φαινόμενο στις διεγέρσεις απο laser, συμβαίνουν εντός της ζώνης αγωγιμότητας και είναι συχνό φαινόμενο κυρίως στα μέταλλα και σε ημιαγωγούς για πολύ υψηλές θερμοκρασίες (όπου συμβαίνουν πάνω απο την ενέργεια Fermi E_F).

Μετά την απορρόφηση φωτονίων τα διεγερμένα είδη αλληλεπιδρούν ή αποδιεγείρονται με αποτέλεσμα η ενέργεια να ανακατανέμεται στο υλικό και να μετατρέπεται σε θερμότητα. Οι φορείς συγκρούονται μεταξύ τους, τα ηλεκτρό-

νια αποδιεγείρονται εκπέμποντας φωτόνια, τα ζεύγη ηλεκτρονίων οπών επανασυνδέονται και φονόνια αλληλεπιδρούν με ηλεκτρόνια εκπέμποντας φωτόνια και συμβάλλουν έτσι στην μετάδοση και αύξηση της θερμότητας. Ο χρόνος που λαμβάνει χώρα η μετατροπή της ενέργειας της διέγερσης σε θερμότητα εξαρτάται απο παράγοντες όπως τα στοιχεία της ακτινοβολίας του laser και ο τύπος του υλικού. Παραδείγματος χάρη στα μέταλλα που διαθέτουν πολλά ελεύθερα ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας η ενέργεια της ακτινοβολίας απορροφάται γρήγορα απο αυτά τα ηλεκτρόνια στα πρώτα 10 nm του υλικού και η πλειοψηφία των διεγέρσεων που παρατηρούνται είναι ενδοζωνικές στην ζώνη αγωγιμότητας. Ο χρόνος μεταξύ των συγκρούσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου τ_e είναι της τάξης των 10^{-14} με 10^{-12} sec. Οι αντίστοιχοι χαρακτηριστικοί χρόνοι της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φονονίου τ_{e-ph} είναι αρκετά μεγαλύτεροι λόγω της διαφοράς μαζών ηλεκτρονίων και ιόντων ($10^{-12}s \leq \tau_{e-ph} \leq 10^{-10}s$). Παρόμοιους χαρακτηριστικούς χρόνους έχουμε και για ήμι-ελεύθερα ηλεκτρόνια σε ημιαγωγούς όπως το πυρίτιο.[6]

Στα μη μεταλλικά υλικά οι διαζωνικές διεγέρσεις διαρκούν πολύ περισσότερο και κυμαίνονται από 10^{-12} έως και 10^{-6} sec. Οι διεγέρσεις εντοπισμένων καταστάσεων που σχετίζονται με ατέλειες και προσμίξεις μπορεί να έχουν πολύ μεγαλύτερους χαρακτηριστικούς χρόνους αποδιέγερσης. Επίσης τα οπτικά ενεργά φονόνια μπορούν να διεγερθούν απευθείας μέσω υπέρυθρης ακτινοβολίας. Εδώ πρέπει να αναφερθεί και ότι με την μεγάλη ένταση ακτινοβολίας που επιτυγχάνεται με τα laser, οι μηχανισμοί διέγερσης και αποδιέγερσης στις υψηλές εντάσεις μπορούν να διαφέρουν αρκετά απο τους αντίστοιχους σε χαμηλές εντάσεις ακτινοβολίας.

Ακόμα είναι σημαντική η εξάρτηση της διαδικασίας απορρόφησης απο την ενέργεια της δέσμης του laser και την φύση του υλικού που δέχεται την ακτινοβολία. Για πολύ μεγάλες τιμές ενέργειας, που ξεπερνούν σημαντικά την τιμή του ενεργειακού χάσματος η απορρόφηση γίνεται εύκολα μέσω πληθώρας διαζωνικών διεγέρσεων, η απορρόφηση πραγματοποιείται γρήγορα και η μετατροπή της ενέργειας σε θερμότητα δεν προλαβαίνει να επηρεάζει σημαντικά την απορρόφηση. Ειδικά αν σε συνδυασμό με την υψηλή ενέργεια ακτινοβολίας έχουμε και μικρή χρονική διάρκεια παλμού (πχ KrF excimer laser). Έτσι σε αυτή την περίπτωση η εξάρτηση της απορρόφησης απο τη θερμοκρασία είναι πολύ μικρή και ακόμα και αμελητέα. Αυτό αποτυπώνεται φυσικά και στον συντελεστή απορρόφησης του οποίου η τιμή είναι αναμενόμενα πολύ υψηλή. Τώρα σε περιπτώσεις όπου η ενέργεια της ακτινοβολίας είναι χαμηλή (πχ CO2 laser) και δεν αρκεί για να έχουμε διαζωνικές μεταβάσεις η διέγερση γίνε-

ται με άλλους τρόπους που όπως αναφέραμε πιο πάνω έχουν και μεγαλύτερους χαρακτηριστικούς χρόνους αποδιέγερσης. Έτσι η απορρόφηση πραγματοποιείται αργά και η θερμότητα που αναπτύσσεται σε αυτή την περίπτωση πλέον την επηρεάζει σημαντικά. Επίσης εδώ σημαντικότερο ρόλο παίζει και η συγκέντρωση των προσμίξεων αφού η διέγερση γίνεται κυρίως μέσω των ελεύθερων φορέων που αυτές παρέχουν.

Γενικά ο συντελεστής απορρόφησης για έναν ημιαγωγό μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$\alpha = \alpha_f + \alpha_c = \alpha_f + \sigma_\alpha N_c \tag{1.46}$$

όπου α_f είναι ο συντελεστής απορρόφησης λόγω πλεγματικών και διαζωνικών διεγέρσεων αναλόγως την ενέργεια της ακτινοβολίας και παρουσιάζει πολύ μικρή εξάρτηση απο την θερμοκρασία. Ο συντελεστής α_c αντιπροσωπεύει την απορρόφηση μέσω ελεύθερων φορέων η οποία εξαρτάται απο την συγκέντρωση ζευγών ηλεκτρονίου-οπής N_c και απο τις ενεργές διατομές τους σ_α. Για ημιαγώγιμα υλικά όπου και τα ηλεκτρόνια και οι οπές είναι ευκίνητα και άρα συμβάλλουν στην αγωγιμότητα η ενεργή διατομή των ζευγών τους δίνεται απο την εξίσωση:

$$\sigma_\alpha = \frac{e^2}{\varepsilon_0 n c \omega^2}\left(\frac{1}{m_e^* \tau_e} + \frac{1}{m_h^* \tau_h}\right) \tag{1.47}$$

όπου e είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου, n ο πραγματικός συντελεστής διάθλασης, c η ταχύτητα του φωτός και $\omega = 2\pi v$. Τα m_e^* και m_h^* είναι οι ενεργές μάζες και τα τ_e και τ_h οι χαρακτηριστικοί χρόνοι συγκρούσεων για τα ηλεκτρόνια και τις οπές αντίστοιχα. Στην εξίσωση παρατηρούμε την αντιστρόφως ανάλογη εξάρτηση των ενεργών διατομών απο την ενέργεια των φωτονίων (μέσω του ω) πράγμα που αναδεικνύει αυτό που αναφέραμε πιο πάνω. Για χαμηλές ενέργειες έχουμε μεγαλύτερη ενεργό διατομή ζευγών ηλεκτρονίων-οπής και άρα μεγαλύτερο συντελεστή α_c. Επίσης ο συντελεστής α_f είναι μικρότερος άρα στην απορρόφηση κυριαρχεί ο παράγοντας των ελεύθερων φορέων.[6] [3]

Όσο για την εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης απο τη θερμοκρασία πηγάζει κυρίως απο την θερμοκρασιακή εξάρτηση της συγκέντρωσης των ζευγών οπών-ηλεκτρονίων. Όπως αναφέραμε για την περίπτωση ακτινοβολίας laser με μεγάλη ενέργεια (μικρό μήκος κύματος) όπως το KrF η θερμοκρασιακή εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης είναι πολύ μικρή και ο συντελεστής θεωρείται σταθερός. Για περιπτώσεις σαν το laser CO2 όμως η θερμοκρασιακή εξάρτηση είναι σημαντική. Σύμφωνα με τους Blomberg et al. [7] ο συντελεστής απορρόφησης για νοθευμένο πυρίτιο δίνεται προσεγγιστικά απο τον πα-

ρακάτω τύπο:

$$\alpha(N,T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2}[N + n_i(T)] \tag{1.48}$$

όπου N είναι η συγκέντρωση των προσμίξεων και $n_i(T)$ η ενδογενής συγκέντρωση φορέων και δίνεται απο τη σχέση:

$$n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \tag{1.49}$$

απο όπου είναι προφανής η εκθετική εξάρτηση της απορρόφησης απο την θερμοκρασία. Παρατηρείται αυτός ο κύκλος γεγονότων όπου η απορρόφηση αυξάνει τη θερμοκρασία και ως εκ τούτου αυξάνονται και οι φορείς στο υλικό με συνέπεια να αυξάνεται περαιτέρω ο συντελεστής απορρόφησης και ούτω καθεξής.

Εξίσωση θερμότητας

Μεγάλη σημασία έχει κατα την απορρόφηση της ενέργειας του laser και τη μετατροπή της σε θερμότητα ο τρόπος που αυτή κατανέμεται και διαδίδεται μέσα στο υλικό. Αυτές οι κατανομές υπολογίζονται με χρήση της εξίσωσης θερμότητας. Γενικά η θερμοκρασία είναι συνάρτηση των χωρικών συντεταγμένων χ_α και του χρόνου t: $T \equiv T(\mathbf{x},t) \equiv T(x_\alpha,t)$. Για δεδομένες παραμέτρους του laser η κατανομή της θερμοκρασίας εξαρτάται απο την οπτική απορρόφηση στην περιοχή του υλικού που ακτινοβολείται, την μεταφορά της θερμότητας απο εκεί προς το υπόλοιπο υλικό και από ενθαλπίες μετατροπής, κρυστάλλωσης, τήξης ή εξάτμισης και χημικές ενθαλπίες αντιδράσεων εφόσον υπάρχουν τέτοιες μετατροπές φάσης. Σε ένα κατάλληλο σύστημα συντεταγμένων σύμφωνα και με τη ρύθμιση του laser η εξίσωση της θερμότητας μπορεί να γραφεί ως εξής[6]:

$$\rho(T)c_p(T)\frac{\partial T(\mathbf{x},t)}{\partial t} - \nabla[k(T)\nabla T(\mathbf{x},t)] + \rho(T)c_p(T)v_s\nabla T(\mathbf{x},t) = Q(\mathbf{x},t) \tag{1.50}$$

όπου $\rho(T)$ είναι η πυκνότητα μάζας, $c_p(T)$ η ειδική θερμοχωρητικότητα υπο σταθερή πίεση, T(x,t) η κατανομή της θερμοκρασίας και v_s η ταχύτητα του υποστρώματος σε σχέση με την πηγή θερμότητας. κ(T) είναι η θερμική αγωγιμότητα και το Q περιγράφει την ισχύ της πηγής (W/cm^3). Αν το υλικό του δοκιμίου είναι ομογενές και ισοτροπικό τότε χαρακτηρίζεται και απο μία θερμική διαχυτότητα D η οποία βρίσκεται σε εξάρτηση με την θερμική αγωγιμότητα k

και είναι της μορφής:

$$D = \frac{k}{\rho c_p} \tag{1.51}$$

Στην περίπτωση που το υπόστρωμα παραμένει ακίνητο σε σχέση με την δέσμη ($v_s = 0$) και έχουμε μονοδιάστατο πρόβλημα η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφεί ως:

$$\rho(T)c_p(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right) = Q(x,t) \tag{1.52}$$

με τον όρο της πηγής να δίνεται απο τη σχέση:

$$Q(x_\alpha, t) = I_0(x,y,t)(1-R)f(z) = I_\alpha(x,y)f(z)q(t) \tag{1.53}$$

όπου $_\alpha = I_0(1 - R(T))$ είναι η μέγιστη ένταση της ακτινοβολίας που δεν ανακλάται απο την επιφάνεια του δισκιδίου, $_0$ η ένταση εξόδου του laser και συνολικά η $I_\alpha(x,y)$ περιγράφει την χωρική κατανομή της έντασης της δέσμης. Η f(z) αντιπροσωπεύει την εξασθένιση της ισχύος της ακτινοβολίας κατα τη διάδοση στον άξονα z και q(t) είναι ένας παράγοντας που αναπαριστά την χρονική εξάρτηση της ισχύς της πηγής. Η ανακλαστικότητα $R = R(T,\lambda)$ κανονικοποιείται για την δεδομένη περιοχή που προσπίπτει η δέσμη και εξαρτάται απο την θερμοκρασία και το μήκος κύματος της δέσμης. Ακόμα εξαρτάται απο την γωνία πρόσπτωσης, την τραχύτητα της επιφάνειας, την πόλωση της δέσμης και το πάχος του οξειδίου όταν αυτό είναι αρκετά μικρό ώστε να βρίσκεται σε ανάλογες διαστάσεις με το μήκος οπτικής απορρόφησης l_α.

Η συνάρτηση f(z) που αναπαριστά την εξασθένιση της ισχύος της ακτινοβολίας κατα την κατεύθυνση διάδοσης της δέσμης για ένα ομογενές υλικό μπορεί να γραφτεί υπο τη μορφή:

$$f(z) = \alpha(T(z))\exp\left(-\int_0^z \alpha(T(z'))dz'\right) \tag{1.54}$$

όπου $\alpha(T)$ είναι ο θερμοκρασιακά εξαρτώμενος συντελεστής απορρόφησης για την εκάστοτε ενέργεια (ή μήκος κύματος) της δέσμης. Παραδείγματος χάρη όπως αναφέραμε και πιο πριν αν πρόκειται για το KrF laser ο συντελεστής θα είναι σταθερός ενώ για το CO2 όπου υπάρχει θερμοκρασιακή εξάρτηση αλλα και εξάρτηση απο τους φορείς, η συνάρτηση f(z) γίνεται αρκετά πιο πολύπλοκη. Έτσι στην περίπτωση που έχουμε σταθερό συντελεστή απορρόφησης η παραπάνω εξίσωση γίνεται:

$$f(z) = \alpha\exp(-\alpha z) \tag{1.55}$$

Για να έχουμε επιφανειακή απορρόφηση, όπου στην συγκεκριμένη περίπτωση $l_\alpha = \alpha^{-1}$ και έχουμε εξασθένιση α/e, το μήκος οπτικής απορρόφησης είναι πολύ μικρότερο απο το μήκος θερμικής διάχυσης ($l_{th} \approx 2(Dt_l)^{1/2}$) και απο τα χαρακτηριστικά μεγέθη του δοκιμίου όπως είναι το πάχος του υποστρώματος, η διάμετρος της δέσμης w, η καμπυλότητα της επιφάνειας και άλλα. Αν το εκάστοτε μικρότερο απο αυτά τα χαρακτηριστικά μεγέθη το συμβολίσουμε ως L τότε γενικά για να έχουμε επιφανειακή απορρόφηση μπορούμε να πούμε πως πρέπει να ισχύει $l_\alpha \ll min(l_{th}, L)$. Με αυτή τη συνθήκη "κερδίζουμε" και την μη εξάρτηση της επιφανειακής ανακλαστικότητας απο το πάχος του δοκιμίου όπου σε αντίθετη περίπτωση κατα την πρόσπτωση της δέσμης στο υλικό θα είχαμε φαινόμενα συμβολής που μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά την απορρόφηση και εξασθένιση της ακτινοβολίας.[6]

Κεφάλαιο 2

Ανόπτηση με KrF laser παλμού ns

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφερθούμε στην ανόπτηση του δισκιδίου μας με τη χρήση excimer laser και συγκεκριμένα του KrF laser. Όπως αναφέραμε και παραπάνω μία εκ των εφαρμογών των laser που αναπτύσσεται στις τελευταίες τεχνολογίες είναι και η χρήση του για ανόπτηση δοκιμίων. Ειδικά σε περιπτώσεις που θέλουμε ταχείες ανοπτήσεις με υψηλές θερμοκρασίες προκειμένου να έχουμε αποτελεσματική αφαίρεση των ατελειών στο κρυσταλλικό πλέγμα του δοκιμίου με αντίστοιχη ενεργοποίηση των προσμίξεων αλλά και αποφυγή της περαιτέρω διάχυσης των ιόντων πρόσμιξης στο υλικό. Πρώτα θα περιγράψουμε τις βασικές αρχές του laser και μετά θα προχωρήσουμε στην περιγραφή της προσομοίωσης με το Sentaurus Process και των αποτελεσμάτων που πήραμε.

2.1 Το KrF Excimer laser

Τα excimer lasers (excited dimer lasers) ή laser διεγερμένων διμερών όπως λέγονται, ανήκουν στην ευρύτερη κατηγορία των μοριακών laser και χαρακτηρίζονται απο τους πολύ μικρής διάρκειας παλμούς τους της τάξης του ns και την υψηλή ενέργεια ακτινοβολίας (της τάξης των 5 eV). Τα συνηθέστερα μήκη κύματος ακτινοβολίας τους είναι μεταξύ 150 - 350 nm (υπεριώδης ακτινοβολία) και η λειτουργία τους βασίζεται στην δημιουργία διατομικών μορίων που υφίστανται μόνο σε διεγερμένη κατάσταση. Για παράδειγμα ένα μονοατομικό μόριο A που υφίσταται ως μονομερές στην βασική του κατάσταση, αν διεγερθεί δημιουργεί μαζί με ένα άλλο διεγερμένο A ένα διατομικό μόριο A_2 που μπορεί να υφίσταται μόνο σε αυτή τη διεγερμένη κατάσταση (η βασική κα-

τάσταση είναι απωστική). Έτσι αποδιεγειρόμενο στη βασική κατάσταση διασπάται σε δύο μονομερή Α στην βασική τους κατάσταση. Αυτό το διατομικό μόριο ονομάζεται διμερές και έτσι η παραγωγή ακτινοβολίας laser απο αυτό έχει ονομαστεί laser διηγερμένων διμερών.

Δράση laser λοιπόν παράγεται απο τα διεγερμένα διμερή κατα την αποδιέγερση απο μια υψηλότερη κατάσταση σε μια χαμηλότερη, με την υψηλότερη κατάσταση να είναι δέσμια και την χαμηλότερη ελεύθερη (δέσμια - ελεύθερη μετάπτωση). Έτσι το διηγερμένο διμερές αποδιεγείρεται εκπέμποντας ένα φωτόνιο laser και στη συνέχεια φθάνει στην βασική κατάσταση όπου και διασπάται λόγω της απωστικής φύσης αυτής. Φθάνοντας στην βασική κατάσταση το διμερές μόριο διασπάται σε δύο μονομερή και αυτό το γεγονός είναι πολύ σημαντικό για την δράση laser αφού έτσι το χαμηλότερο επίπεδο laser είναι πάντα κενό. Επίσης άλλο ένα σημαντικό χαρακτηριστικό των διηγερμένων διμερών είναι ότι δεν έχουν καλά ορισμένες δονητικές και περιστροφικές μεταπτώσεις οπότε η μεταπτώσεις laser είναι ευρείας ζώνης, πράγμα που μας προσφέρει τη δυνατότητα για καλή επιλεκτικότητα ακτινοβολίας. [8]

Laser διμερών μπορούμε να έχουμε όχι απαραίτητα με διατομικά μόρια ίδιων μονομερών αλλα και με συνδυασμούς δύο διαφορετικών μονομερών που μπορούν να σχηματίζουν διεγερμένα διατομικά μόρια (άτυπα αποκαλούμενα κι αυτά ως διμερή) μεταξύ τους. Αυτό το είδος διμερών είναι που απασχολεί και εμάς μιας και το KrF είναι ένας τέτοιος ακριβώς συνδυασμός. Σε αυτή την κατηγορία χαρακτηριστικότερες είναι οι περιπτώσεις όπου ένα μονομερές άτομο ευγενούς αερίου (Ar, Kr, Xe) συνδέεται στη διεγερμένη κατάσταση με ένα άτομο αλογόνου (F, Cl) και σχηματίζουν διεγερμένα διμερή ευγενούς αερίου - αλογόνου. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι τα ArF ($\lambda = 193nm$), XeCl ($\lambda = 308nm$), XeF ($\lambda = 351nm$) και φυσικά το KrF ($\lambda = 248nm$).

Η διαδικασία άντλησης στο laser KrF και γενικότερα στα laser ευγενούς αερίου - αλογόνου είναι αρκετά σύνθετη γιατί εμπλέκονται πολλά ιοντικά και διεγερμένα ατομικά ή μοριακά είδη. Ωστόσο το KrF χαρακτηρίζεται απο τους δύο παρακάτω σημαντικούς μηχανισμούς που συμβάλλουν στην άντληση ακτινοβολίας laser. 1)

$$Kr^* + F_2 \rightarrow KrF^* + F \tag{2.1}$$

Εδώ έχουμε την άμεση αντίδραση του διεγερμένου ευγενούς αερίου με το αλογόνο, και 2):

$$e + F_2 \rightarrow F^- + F \tag{2.2}$$

ακολουθούμενη απο την:

$$F^- + Kr^+ + M \rightarrow KrF^* + M \tag{2.3}$$

όπου εδώ πρόκειται για διασπαστική προσκόλληση ενός ηλεκτρονίου στο αλογόνο ακολουθούμενη απο μια επανασύνδεση τριών σωμάτων του αρνητικού ιόντος του αλογόνου. Το M στην παραπάνω αντίδραση είναι ένα άτομο ουδέτερου αερίου που χρησιμοποιείται προκειμένου να διατηρείται η ορμή και η ενέργεια των αντιδρώντων σωμάτων, συνήθως είναι αέριο Ar ή He.

Η άντληση του laser ξεκινά είτε μέσω ηλεκτρονικής δέσμης είτε προϊονίζοντας τον όγκο του υλικού με e-δέσμες και στη συνέχεια εφαρμόζοντας μια ηλεκτρική εκκένωση. Όπως αναφέραμε και παραπάνω το laser είναι παλμικό με μικρής διάρκειας παλμούς της τάξης των λίγων δεκάδων ns και εκπέμπει με ισχείς μέχρι 100W, επαναληπτικότητες μέχρι 1 kHz και ηλεκτρική απόδοση περίπου στο 1%. Συγκρινόμενο με το παρόμοιο σε σχεδιασμό TEA CO_2 laser αυτή η απόδοση είναι μικρή κάτι που αποτελεί ένα απο τα μειονεκτήματα του KrF γενικότερα, αλλά η πολύ καλή αλληλεπίδραση που παρουσιάζει με το πυρίτιο και η καταλληλότητα του για ταχεία ανόπτηση με υψηλές θερμοκρασίες το καθιστά μια πολύ καλή επιλογή για την ανόπτηση του πυριτίου στην εν λόγω περίπτωση.[8]

2.2 Προσομοίωση του KrF laser με το Sentaurus

Όπως έχουμε αναφέρει το πρόγραμμα Sentaurus Process στις τελευταίες του εκδόσεις δύναται να προσομοιώνει και ανοπτήσεις δοκιμίων με χρήση lasers εφόσον πρόκειται για μονοδιάστατες ή δισδιάστατες δομές. Εδώ θα αναφερθούμε στις μεθόδους που ακολουθεί το πρόγραμμα για την προσομοίωση της laser ανόπτησης και πιο συγκεκριμένα πως υλοποιείται η μέθοδος για το KrF laser. Αξίζει να αναφερθεί ότι σε σύγκριση με το CO_2 laser που επίσης χρησιμοποιήσαμε για την ανόπτηση η περίπτωση του KrF είναι πολύ πιο εύκολη στην διαμόρφωση του κατάλληλου αλγορίθμου ώστε να γίνει η προσομοίωση με το Sentaurus. Ο σταθερός συντελεστής απορρόφησης που το διακρίνει και η σταθερή χωρική κατανομή της ενέργειας στον παλμό της ακτινοβολίας διευκολύνουν πολύ τη διαδικασία και αρκούν οι προεπιλεγμένες εξισώσεις του Sentaurus process για να επιλύσουν το πρόβλημα της ανόπτησης. Ενώ στην περίπτωση του CO_2 laser ο συντελεστής απορρόφησης δεν είναι σταθερός (εξάρτηση απο θερμοκρασία και συγκέντρωση φορέων), η χωρική κατανομή του παλμού δεν είναι σταθερή οπότε οι προεπιλεγμένες ρυθμίσεις του

προγράμματος όπως θα εξηγήσουμε παρακάτω έπρεπε να αλλαχθούν και να εισάγουμε εμείς τα προφίλ της έντασης και της κατανομής της ενέργειας του παλμού. Αυτά θα γίνουν περισσότερο κατανοητά στη συνέχεια όπου περιγράφουμε την αντιμετώπισης της ανόπτησης με laser απο το Sentaurus.

Σύμφωνα με το μοντέλο επίλυσης του προγράμματος για την προσομοίωση των κατανομών θερμότητας επιλύεται η παρακάτω εξίσωση θερμότητας [1]:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \bullet (k \nabla T) + G \tag{2.4}$$

όπου k είναι η θερμική αγωγιμότητα, ρ η πυκνότητα και C_p η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο. Επίσης η αγωγιμότητα και η ειδική θερμοχωρητικότητα είναι εξαρτώμενες απο τη θερμοκρασία. G είναι ο ρυθμός παραγωγής θερμότητας και έχει τη μορφή [1]:

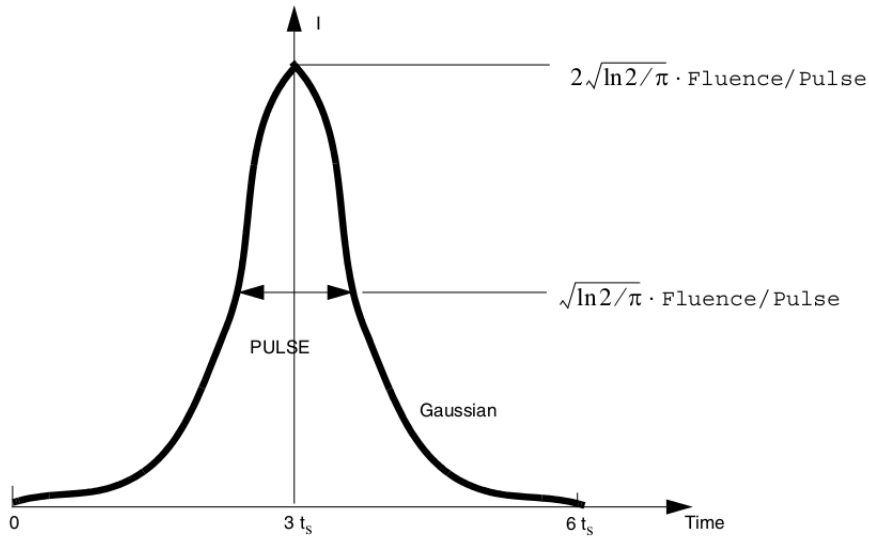
$$G = I\alpha \exp\left(-\int_{l=0}^{l=d} \alpha dl\right) \tag{2.5}$$

όπου I είναι η ένταση της ακτινοβολίας, α ο συντελεστής απορροφητικότητας και d το βάθος. Εδώ η έκφραση της απορροφητικότητας εισάγεται απο τον χρήστη αναλόγως τον τύπο laser και το υλικό.

Γενικά η διαδικασία της ανόπτησης με laser αρχικοποιείται στο πρόγραμμα όπως κάθε άλλη διαδικασία διάχυσης (εντολή diffusion) προσθέτοντας και την παράμετρο *laser* στην εντολή της διάχυσης. Εκτός απο αυτό όμως η λειτουργία της μεθόδου βασίζεται σε ένα σύνολο παραμέτρων του προγράμματος που πρέπει να οριστούν ώστε να υλοποιηθεί η επιθυμητή διεργασία. Αυτές οι παράμετροι είναι μεταβλητές συστήματος που αντιπροσωπεύουν για παράδειγμα την απορροφητικότητα, την πυκνότητα, την ειδική θερμοχωρητικότητα και άλλα. Ορίζοντας αυτές τις μεταβλητές ορίζουμε ουσιαστικά τι υλικά συμμετέχουν στη διαδικασία, τι τύπος laser και πολλές απο τις ιδιότητες του laser αλλά και του δισκιδίου όπως θα δούμε παρακάτω.

Δύο απο αυτές τις παραμέτρους που είναι βασικές για τη λειτουργία του προ-επιλεγμένου μοντέλου του προγράμματος είναι αυτές που αντιπροσωπεύουν την πυκνότητα ενέργειας του laser (Fluence) και την διάρκεια του παλμού (Pulse). Στο μοντέλο του προγράμματος η ένταση I της ακτινοβολίας δίνεται υπο γκαουσιανή μορφή σύμφωνα με τα παρακάτω [1]:

$$I = \frac{Fluence}{\sqrt{2\pi} t_s} \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2t_s^2}\right) \tag{2.6}$$



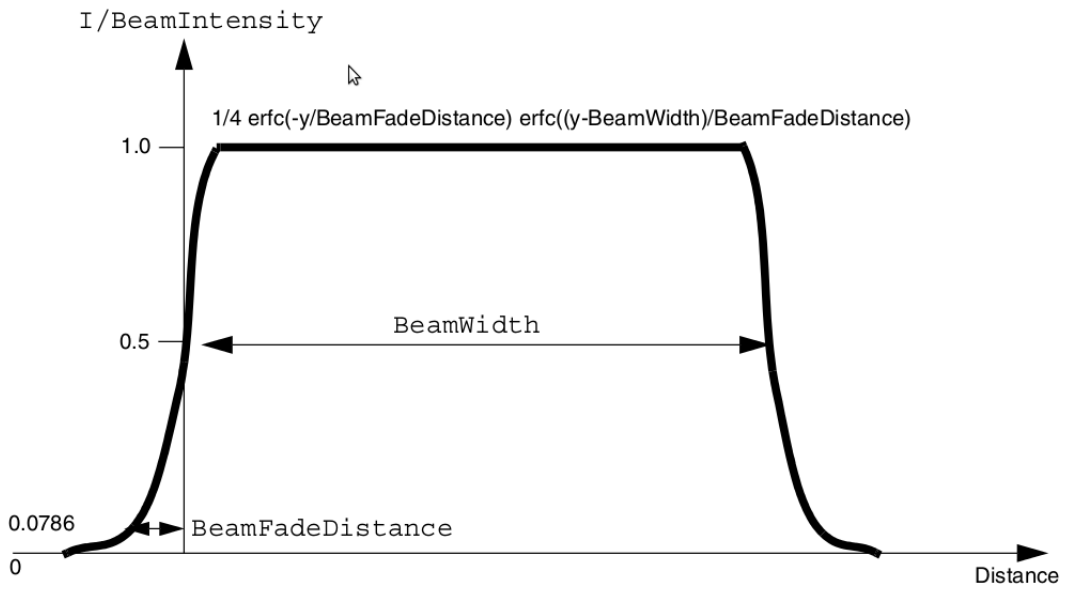
Σχήμα 2.1 – Χρονική εξέλιξη της έντασης της ακτινοβολίας, όπου Fluence η πυκνότητα ενέργειας και Pulse ο παλμός του laser [1]

με

$$t_s = \frac{Pulse}{2\sqrt{2\ln 2}} \tag{2.7}$$

όπου *Fluence* όπως αναφέραμε είναι η πυκνότητα ενέργειας σε J/cm^2 και με *Pulse* συμβολίζεται το Full-Width-Half-Maximum χρονικό διάστημα της κανονικής διάρκειας του παλμού. Η Gaussian χρονική κατανομή της έντασης του laser κατα το μοντέλο του Sentaurus φαίνεται στο **Σχήμα 2.1**. Όσον αφορά τη χωρική κατανομή της έντασης του παλμού στο μοντέλο του προγράμματος αυτή είναι σταθερή, σε μορφή top-hat για την ακρίβεια, και η μορφή της μπορεί να φανεί στο **Σχήμα 2.2**.

Πιο συγκεκριμένα για το KrF laser, η ευκολία στην κατασκευή του αλγορίθμου που το προσομοιώνει στην οποία αναφερθήκαμε πιο πάνω προκύπτει απο την συμφωνία του με το πρότυπο μοντέλο του Sentaurus. Δηλαδή η μορφή του παλμού του είτε χωρικά είτε χρονικά ακολουθεί το ίδιο πρότυπο, γκαουσιανή χρονική εξέλιξη της έντασης και σταθερή (top-hat) χωρική κατανομή. Σε αντίθετη περίπτωση όπως συμβαίνει πχ με το CO_2 όπου οι πραγματικές κατανομές της έντασης δεν συμφωνούν με το πρότυπο του Sentaurus, θα έπρεπε να ορίσουμε εμείς την εξίσωση που περιγράφει το προφίλ της έντασης ακτινοβολίας όπως θα δούμε παρακάτω. Ενώ τώρα στο KrF αρκεί να ορίσουμε τις βασικές παραμέτρους Fluence και Pulse για να προσδιορίσουμε με τι ποσό ενέργειας



Σχήμα 2.2 – Χωρική κατανομή της έντασης της ακτινοβολίας σε μορφή top-hat (ουσιαστικά σταθερή) [1]

θα γίνει η ακτινοβόληση και σε τι διάρκεια παλμού. Ακόμα πρέπει να ορίσουμε και τις άλλες παραμέτρους της εξίσωσης θερμότητας όπως αναφέραμε και παραπάνω. Οπότε συνοψίζοντας, για την πλήρη προσομοίωση της ανόπτησης με KrF χρειαζόμαστε τις παρακάτω μεταβλητές.

Παράμετροι που αφορούν την πηγή laser και διάφορες τεχνικές ή μεθόδους επίλυσης των εξισώσεων [1]:

- Heat Fluence (J/cm^2): Η πυκνότητα ενέργειας με την θα λειτουργήσει το laser.

- Heat Pulse (msec): Ο παλμός τον οποίο θέλουμε να παράγει η πηγή laser. Στην πραγματικότητα είναι το Full-Width-Half-Maximum της κανονικής διάρκειας του παλμού που παράγει η πηγή.

- Heat ExtendBottom (0 ή 1): Πρόκειται για μια παράμετρο που έχει να κάνει με την επίλυση των εξισώσεων του μοντέλου. Πολλές φορές το πρόγραμμα προκειμένου να κάνει ευκολότερα και γρηγορότερα τους υπολογισμούς χρειάζεται να επεκτείνει τις διαστάσεις του πλέγματος που έχουμε ορίσει είτε κατά βάθος είτε προς την πλευρική κατεύθυνση. Εδώ πρόκειται για την παράμετρο που επιτρέπει (τιμή 1) ή όχι (τιμή 0) την

επέκταση του πλέγματος κατα βάθος μέχρι μία τιμή που επίσης πρέπει να οριστεί απο εμάς μέσω τις παραμέτρου WaferThickness. Μετά το πέρας των υπολογισμών το πρόγραμμα επαναφέρει το πλέγμα στην αρχική του κατάσταση διαστάσεων.

- Heat WaferThickness (μm): Δηλώνει το κάτω άκρο μέχρι το οποίο θα επεκταθεί το πλέγμα για τους υπολογισμούς εφόσον η εντολή ExtendBottom έχει την τιμή 1.

- Heat MaxTimeStep (sec): Καθορίζει το μέγιστο χρονικό βήμα που θα ακολουθείται κατα την επίλυση της εξίσωσης θερμότητας.

- Heat TimeSampleSize: Καθορίζει τον αριθμό των χρονικών βημάτων που θα πραγματοποιηθούν κατα τη διάρκεια της ακτινοβόλησης.

- Heat UpdateHeatRate (0 ή 1): Ορίζει την ανανέωση ή όχι του ρυθμού θέρμανσης σε κάθε χρονικό βήμα της διαδικασίας.

Θερμικές παράμετροι όπως αυτοί καθορίζονται για το πυρίτιο και laser KrF [9] [6] [3]:

- Absorptivity: Πρόκειται για την απορροφητικότητα της ακτινοβολίας του KrF απο το πυρίτιο η οποία είναι $\alpha = 1.65 \times 10^6 cm^{-1}$.

- MassDensity: Ορίζει την τιμή της πυκνότητας μάζας του πυριτίου $\rho = 2.32 g/cm^3$.

- SpecificHeatCapacity: Δέχεται ώς όρισμα την τιμή ή την μαθηματική έκφραση της ειδικής θερμοχωρητικότητας C_p του πυριτίου σε (J/KgK) η οποία δίνεται απο τον τύπο:

$$C_p = 1000\left(0.81 + 1.3 \times 10^{-4}T - \frac{1.26 \times 10^{-4}}{T^2}\right) \tag{2.8}$$

- ThermalConductivity: Δέχεται ως όρισμα την μαθηματική έκφραση της θερμικής αγωγιμότητας k του πυριτίου σε (W/cmK) η οποία είναι της μορφής:

$$k = 0.235 + 4.45\exp\left(-\frac{T}{247}\right) \tag{2.9}$$

Εδώ πρέπει να αναφέρουμε ότι γενικά σημαντικό ρόλο παίζει και η ανακλαστικότητα του πυριτίου υπο ακτινοβόληση laser ακτινοβολίας, η οποία είναι της μορφής $R(T) = 0.66 + 1.8 \times 10^{-5}T$ για το KrF [9], αλλά όπως είναι προφανές η εξάρτηση απο την θερμοκρασία είναι αρκετά μικρή και για τα επίπεδα μέγιστης θερμοκρασίας που επιτυγχάνονται στο KrF laser (της τάξης 10^3) θεωρούμε την τιμή της προσεγγιστικά σταθερή $R = 0.68$ και την εισάγουμε απευθείας στην τιμή της πυκνότητας ενέργειας (fluence) ώς παράγοντα εξασθένισης.

Με τις παραπάνω παραμέτρους λοιπόν ορίζουμε τα χαρακτηριστικά της πηγής και της θερμικές ιδιότητες των υλικών που συμμετέχουν στη διαδικασία και είναι απαραίτητες για τον υπολογισμό της κινητικής της διάχυσης και της ανόπτηση μεσω laser. Φυσικά στην περίπτωση όπου έχουμε πάνω απο ένα διαφορετικά υλικά να συμμετέχουν στην διαδικασία πρέπει να ορίσουμε με παρόμοιο τρόπο τις θερμικές τους ιδιότητες μέσω των αντίστοιχων παραμέτρων. Για παράδειγμα όπως θα δούμε παρακάτω στην περίπτωση που έχουμε δομή SOI πρέπει να ορίσουμε και τις θερμικές παραμέτρους για το πυρίτιο αλλά και για το οξείδιο αφού αυτές θα επηρεάσουν διαφορετικά την όλη διαδικασία της διάχυσης. Ένα παράδειγμα του ορισμού των παραπάνω παραμέτρων μέσα στον αλγόριθμο φαίνεται παρακάτω:

```
pdbSetDouble Heat Fluence 0.625

pdbSetDouble Heat Pulse 20

pdbSetBoolean Heat ExtendBottom 1
pdbSetDouble Heat WaferThickness 500.0

pdbSetBoolean Heat UpdateHeatRate 1

# ---- time stepping controls ----
pdbSetDouble Heat TimeSampleSize 20
pdbSetDouble Heat MinTimeStep 0.5e-9
pdbSetDouble Heat MaxTimeStep 1e-9

# ---- thermal properties ----
pdbSetDouble Silicon MassDensity 2.33
pdbSetString Silicon Absorptivity "1.65e6"
```

```
pdbSetString Silicon SpecificHeatCapacity \
"1000*(0.81+1.3*1e-4*HeatTempK-1.26*1e+4*HeatTempK^(-2))"

pdbSetString Silicon \
ThermalConductivity "0.235+4.45*exp(-HeatTempK/247)"
```

Όπως βλέπουμε στο τελευταίο κομμάτι όπου ορίζονται οι θερμικές ιδιότητες, δηλώνουμε το υλικό και στη συνέχεια την τιμή του μεγέθους που θέλουμε να ορίσουμε, αν η τιμή δεν είναι σταθερή και δίνεται απο μια μαθηματική έκφραση ορίζουμε την εξίσωση σε μορφή "συμβολοσειράς". Την μεταβλητή της θερμοκρασίας την εισάγουμε χρησιμοποιώντας την μεταβλητή συστήματος που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα για να συμβολίζει την εκάστοτε τιμή της θερμοκρασίας (HeatTempK) ή εναλλακτικά μπορούμε να εκχωρήσουμε την τιμή της θερμοκρασίας σε μία καινούργια μεταβλητή και να αντικαταστήσουμε κατάλληλα στην αναπαράσταση της εξίσωσης.

Έτσι πλέον έχοντας δηλώσει τα χαρακτηριστικά της πηγής αλλα και τις ιδιότητες των υλικών που θα εκτεθούν στην ακτινοβολία, μπορεί να εκτελεστεί η διαδικασία της ανόπτησης με laser με μια εντολή του τύπου:

```
 diffuse time=34<ns> laser \ temp=30.0<C> \ minT=250.0<C>
```

όπου η λέξη laser δηλώνει την μέθοδο διάχυσης, ανόπτησης που θα ακολουθηθεί, ο παράγοντας time καθορίζει την διάρκεια της διαδικασίας και οι παράγοντες temp και minT ορίζουν την αρχική θερμοκρασία του δοκιμίου (θερμοκρασία δωματίου) και την ελάχιστη θερμοκρασία απο όπου θα αρχίσει η προσομοίωση της διάχυσης αντίστοιχα. Επίσης στο τέλος κάθε προσομοίωσης αποθηκεύουμε τα αποτελέσματα των μεγεθών που χρειαζόμαστε σε αντίστοιχα αρχεία για περαιτέρω χρήση. Ένα παράδειγμα φαίνεται παρακάτω:

```
SetPlxList {Temperature}
WritePlx KrF_Temperature_500mj_PLAD

SetPlxList {BActive}
WritePlx KrF_BActive_500mj_PLAD
```

όπου η εντολή SetPlxList συγκεντρώνει τα δεδομένα για το δοσμένο μέγεθος στην παρένθεση και η WritePlx δημιουργεί ένα αρχείο .plx με το δοσμένο όνομα όπου αποθηκεύει τα εν λόγω δεδομένα. Στη συνέχεια θα προχωρήσουμε στην αναλυτικότερη περιγραφή των προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε και την παρουσίαση των αποτελεσμάτων.

2.3 Ανόπτηση του δοκιμίου - Αποτελέσματα Προσομοίωσης

Όπως έχει αναφερθεί και παραπάνω σκοπός μας ήταν η παρατήρηση των θερμοκρασιών που αναπτύσσονται σε μια δομή SOI με το ανώτερο στρώμα πυριτίου σε σχήμα stripe και στη συνέχεια η καταγραφή της ενεργοποίησης των προσμίξεων για τις θερμοκρασιακές συνθήκες όπου δεν έχουμε τήξη του πυριτίου. Δηλαδή κατα πόσο μπορούμε με ακτινοβολήσεις laser που προκαλούν θερμοκρασίες κάτω του σημείου τήξης, να επιτύχουμε ικανοποιητική ενεργοποίηση προσμίξεων σε μία πολύ μικρή δομή πυριτίου πάνω απο το οξείδιο του SOI. Αρχικά ξεκινήσαμε κάνοντας προσομοιώσεις για σκέτο πυρίτιο (bulk) και στη συνέχεια για SOI planar δηλαδή δομή SOI χωρίς ενγάραξη αποτυπώνοντας κάθε φορά τις κατανομές της θερμοκρασίας και των ενεργοποιημένων προσμίξεων για κάθε περίπτωση.

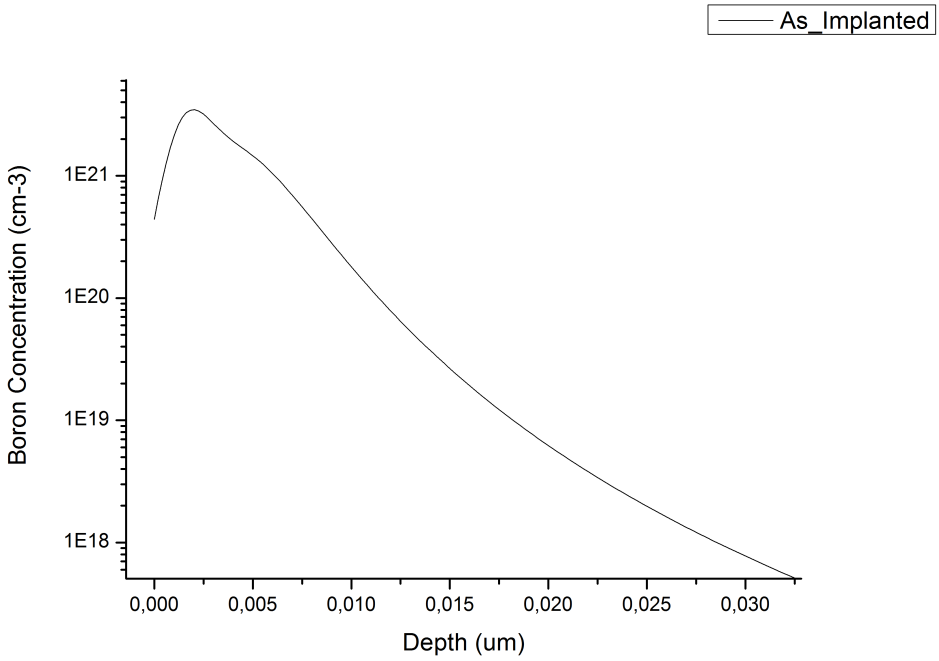
2.3.1 Bulk Πυρίτιο

Στην περίπτωση του bulk πυριτίου πραγματοποιήσαμε μια απλή εμφύτευση προσμίξεων αρκετή για να δούμε την κατανομή της ενεργοποίησης των προσμίξεων ύστερα απο laser ακτινοβόληση. Έγινε μία μονή απλή εμφύτευση ιόντων Βορίου σε δόση 1.5×10^{15} και ενέργεια 500 eV. Η εντολή στον αλγόριθμο και το προφίλ εμφυτευμένων προσμίξεων που προκύπτει φαίνονται παρακάτω (**Σχήμα 2.3**):

```
implant Boron energy=500<eV> dose=1.5e15<cm-2> tilt=0<degree>
```

Τώρα για την ακτινοβόληση σε σκέτο πυρίτιο δηλώνουμε τις θερμικές του ιδιότητες όπως είδαμε παραπάνω στην προηγούμενη παράγραφο με την χρήση των παραμέτρων συστήματος για την απορροφητικότητα, την πυκνότητα μάζας, την ειδική θερμοχωρητικότητα και την θερμική αγωγιμότητα του πυριτίου. Οι προσομοιώσεις έγινα για πυκνότητες ενέργειας (fluence) 300, 400, 500 και 600 mJ/cm^2 και για παλμούς laser διάρκειας 10, 20 και 50 ns.

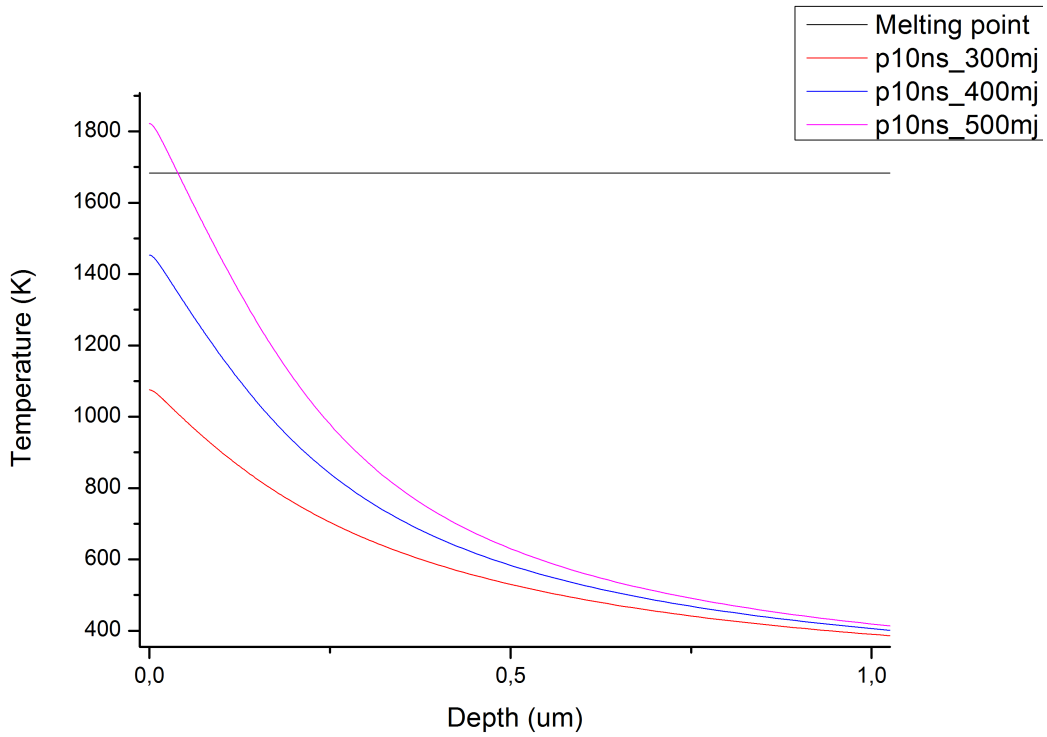
Όπως αναφέραμε και παραπάνω οι παλμοί αυτοί αντιπροσωπεύουν το Full-Width-Half-Maximum της γκαουσιανής χρονικής κατανομής του παλμού οπότε οι κανονικές διάρκειες των παλμών, δηλαδή οι χρόνοι όπου σταματάει η δέσμη του laser να προσκρούει στο υλικό είναι αντίστοιχα 17, 34 και 81 ns. Αυτοί είναι και οι χρόνοι όπου παρατηρούνται οι μέγιστες θερμοκρασίες που



Σχήμα 2.3 – Κατανομή προσμίξεων μετά την εμφύτευση σε bulk πυρίτιο, δόση 1.5e15 και ενέργεια 500 eV

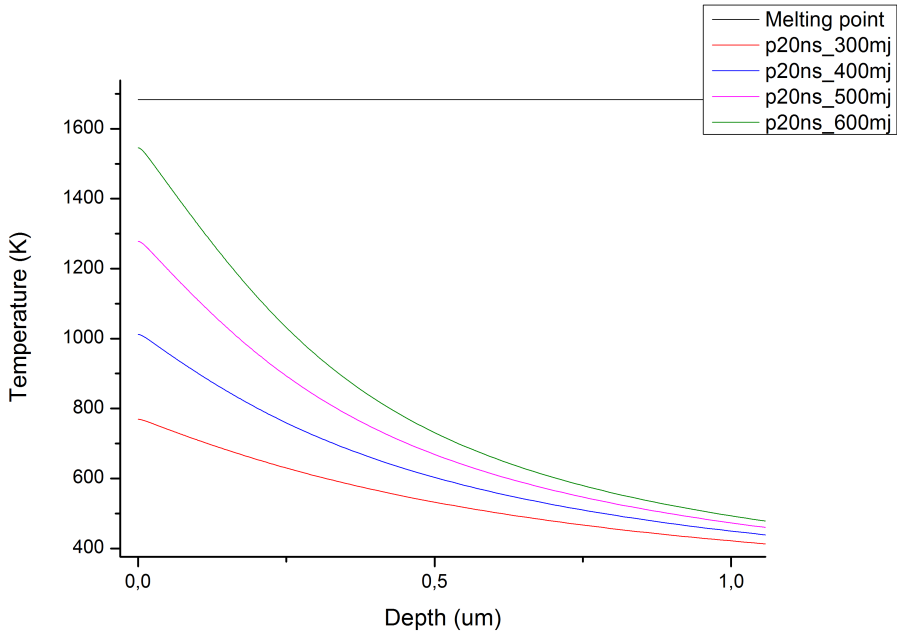
αναπτύσσονται στο υλικό λόγω φυσικά της πλήρης απορρόφησης της δέσμης σε αυτές τις χρονικές στιγμές.Έτσι για να καταγράψουμε τις μέγιστες θερμοκρασίες ορίζουμε την προσομοίωση να σταματάει την συγκεκριμένη χρονική στιγμή κατα την οποία επίσης συλλέγονται και αποθηκεύονται τα δεδομένα.

Στο **Σχήμα 2.4** βλέπουμε τις μέγιστες θερμοκρασίες για τον παλμό των 10 ns και για τρεις διαφορετικές πυκνότητες ενέργειας. Στο διάγραμμα σημειώνεται και το σημείο τήξης στους 1683,15 βαθμούς Κέλβιν (ή 1410 Κελσίου) το οποίο όπως φαίνεται ξεπερνάται για την πυκνότητα ενέργειας των 500mj (προφανώς και για την 600mj η οποία παραλείπεται). Για παλμούς όπως τα 10ns όπου η διάρκεια ακτινοβόλησης είναι πολύ μικρή η απορρόφηση της ακτινοβολίας συμβαίνει σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα στην επιφάνεια του δισκιδίου και οι μέγιστες θερμοκρασίες που αναπτύσσονται εκεί είναι λογικό να είναι πολύ υψηλές. Όπως θα δούμε τώρα οι αντίστοιχες θερμοκρασίες για μεγαλύτερες διάρκειες παλμών είναι σημαντικά χαμηλότερες.

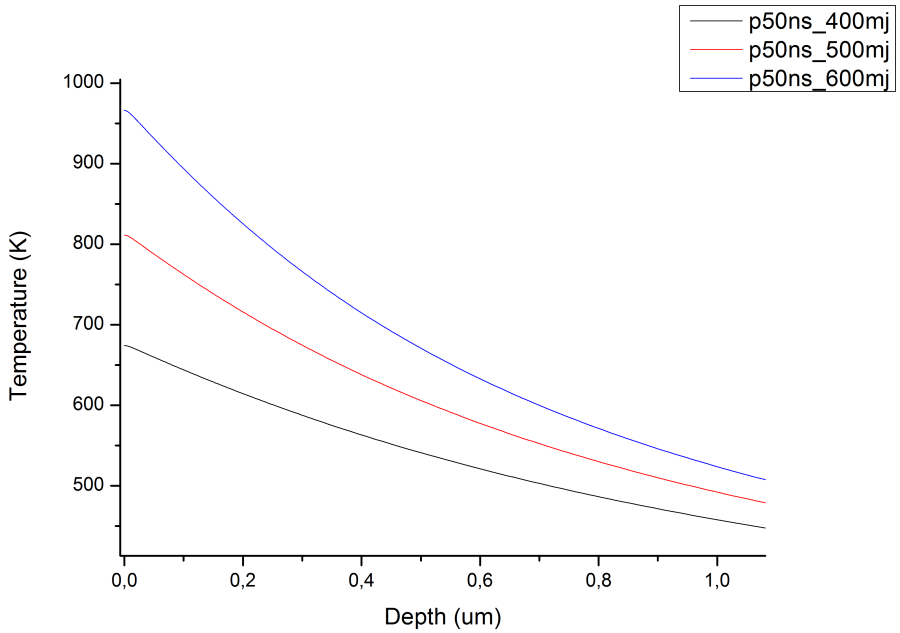


Σχήμα 2.4 – Μέγιστες θερμοκρασίες για Bulk πυρίτιο υπο 10ns παλμό.

Εμφανής είναι η διαφορά για τον παλμό 20 ns όπου πλέον οι ενέργειες 500 και 600 mJ δεν ξεπερνούν πλέον το σημείο τήξης, όπως φαίνεται και στο **Σχήμα 2.5**. Εδώ πλέον η απορρόφηση και στη συνέχεια η μεταφορά της θερμότητας κατα βάθος στο υλικό γίνεται πιο ομαλά απο την περίπτωση των 10ns και έτσι οι μέγιστες θερμοκρασίες είναι εμφανώς χαμηλότερες. Ακόμα εντονότερο είναι το φαινόμενο στην περίπτωση του παλμού 50ns όπου οι θερμοκρασίες πλέον είναι αρκετά μακριά απο το σημείο τήξης, **Σχήμα 2.6**.

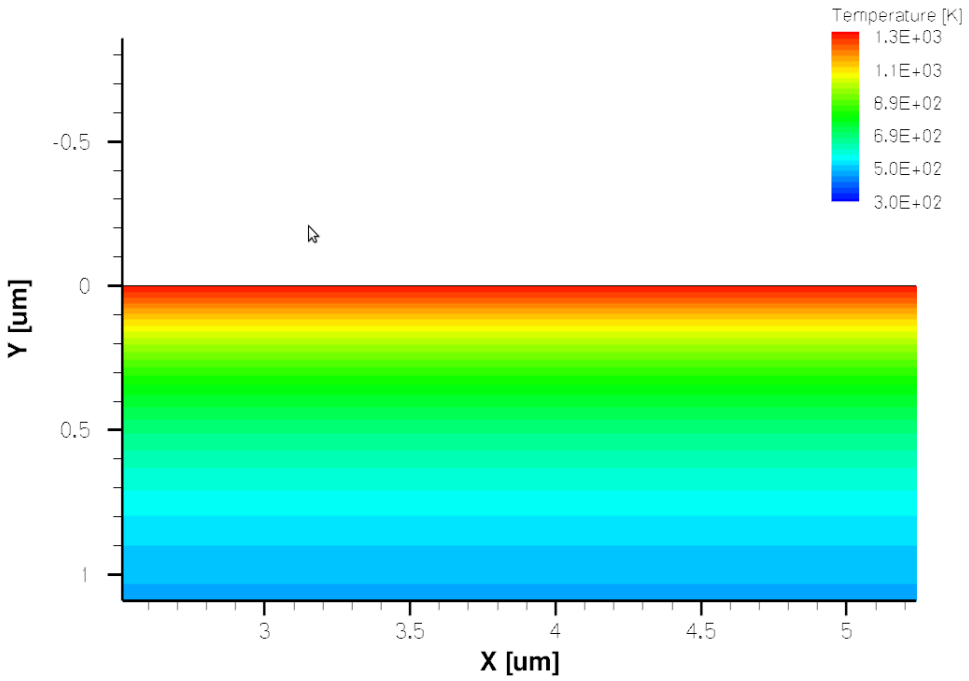


Σχήμα 2.5 – Μέγιστες θερμοκρασίες για Bulk πυρίτιο υπο 20ns παλμό.



Σχήμα 2.6 – Μέγιστες θερμοκρασίες για Bulk πυρίτιο υπο 50ns παλμό.

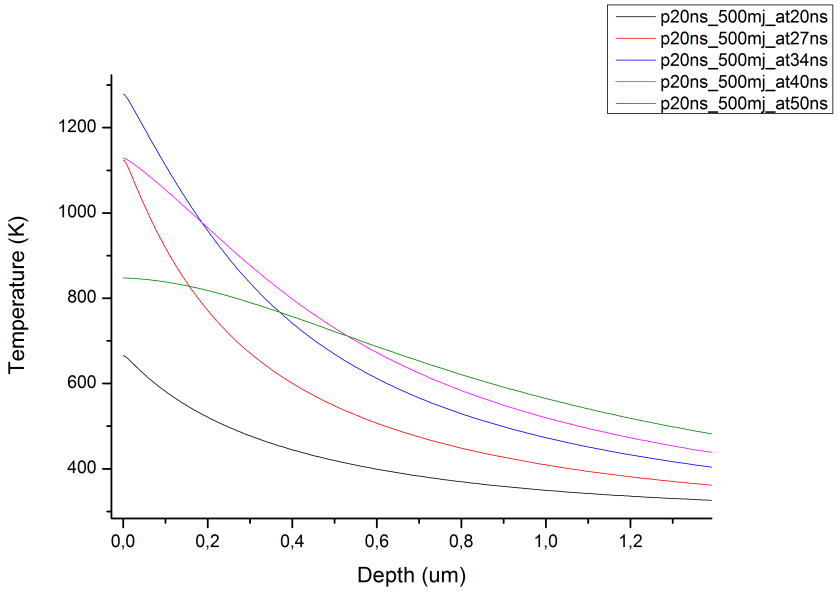
Την διαμόρφωση της θερμοκρασίας και την κατανομή της κατα βάθος του υλικού μπορούμε να δούμε και στο παρακάτω γράφημα (**Σχήμα 2.7**)



Σχήμα 2.7 – Κατανομή θερμοκρασίας για 20ns παλμό και ενέργεια 500mj.

Επίσης μπορούμε να δούμε την χρονική εξέλιξη της κατανομής της θερμοκρασίας πριν φτάσει τη μέγιστη θερμοκρασία και μετά. Για παράδειγμα πήραμε τον παλμό 20 ns και την ενέργεια 500mJ στις χρονικές στιγμές 20, 27, 34 (μέγιστη), 40 και 50 ns. Όπως φαίνεται και στο **Σχήμα 2.8** στα 20ns, όπου ο παλμός που έχει πραγματική διάρκεια 34ns μόλις έχει πιάσει τη μέγιστη του ένταση (σύμφωνα με την γκαουσιανή κατανομή), το υλικό δεν έχει απορροφήσει παρά το μισό σχεδόν παλμό οπότε η θερμοκρασία είναι ακόμα σε χαμηλό επίπεδο. Στα 27 ns η απορρόφηση προχωράει και η θερμοκρασία αυξάνεται μέχρι να φτάσει στην μέγιστη στα 34 ns. Μετά απο αυτό το χρονικό σημείο το υλικό δεν δέχεται άλλη ακτινοβολία οπότε η θερμοκρασία αρχίζει να μειώνεται και να μεταφέρεται όλο και περισσότερο κατα βάθος. Είναι εμφανής στα 40 και 50 ns η ελάττωση του μέγιστου σημείου στην κατανομή και η κατα βάθος μεταφορά της θερμότητας.

Γενικά οι προσομοιώσεις με παλμό 20ns προτιμήθηκαν μιας και είναι μια μέση επιλογή όσον αφορά τις θερμοκρασίες και δίναν αρκούντως καλά αποτελέσματα σε όλες τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήσαμε ανεξαρτήτως

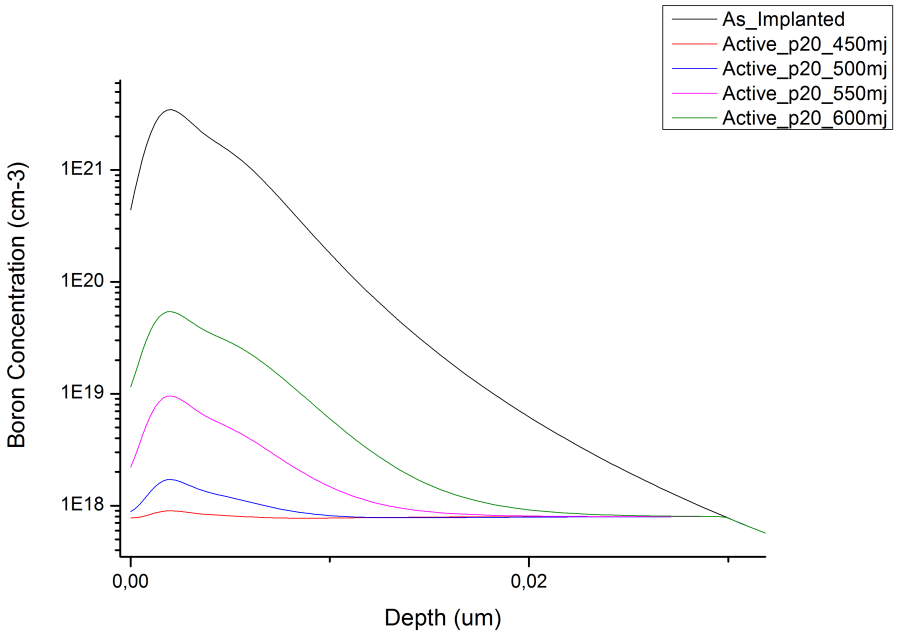


Σχήμα 2.8 – Χρονική εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής υπό παλμό 20ns και ενέργεια 500mJ.

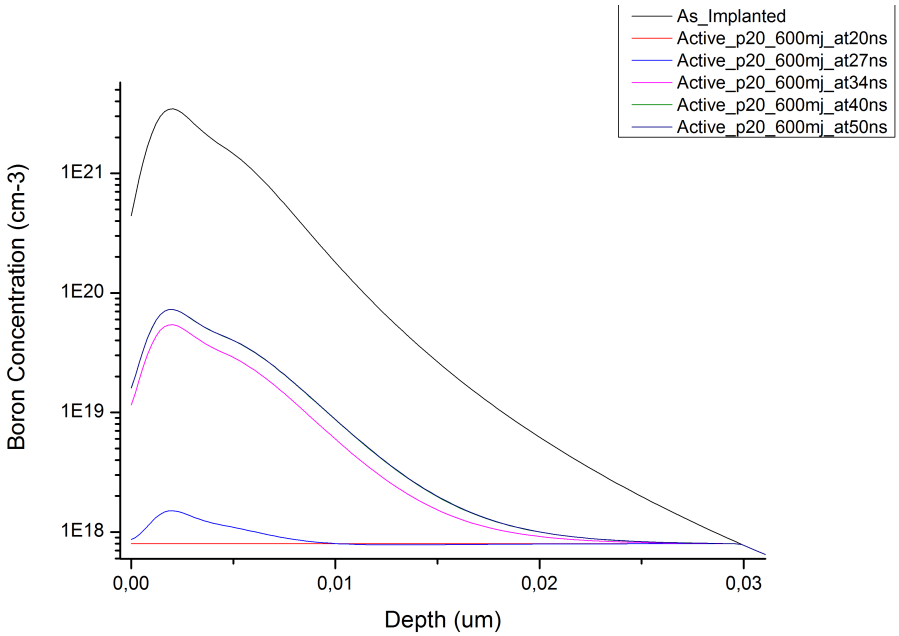
δομής.

Όσον αφορά την ενεργοποίηση των προσμίξεων γενικά δοκιμάστηκαν αρκετοί τρόποι υπολογισμού της με πολλές εκδοχές να είναι προβληματικές ιδιαίτερα στις προσομοιώσεις που έγιναν σε δομές SOI όπως θα αναφέρουμε παρακάτω. Το πρόγραμμα Sentaurus Process έχει έναν αριθμό δυνατών υπολογιστικών μοντέλων για τον υπολογισμό της ενεργοποίησης προσμίξεων αλλα τα περισσότερα δεν κατέστη δυνατό να λειτουργήσουν αποδοτικά. Τελικά με τη χρήση και των τελευταίων πακέτων AdvancedCalibration και AdvancedModels και άλλοτε με το μοντέλο Solid του προγράμματος καταφέραμε να πάρουμε θετική αναπαράσταση της κατανομής.

Στο **Σχήμα 2.9** βλέπουμε ένα παράδειγμα ενεργοποίησης για διαφορετικές πυκνότητες ενέργειας στον παλμό 20 ns. Όπου βλέπουμε ότι για υψηλότερες ενέργειες του laser, που προκαλούν και υψηλότερες θερμοκρασίες στο υλικό, παρατηρείται μεγαλύτερη ενεργοποίηση των προσμίξεων, και για τις πολύ χαμηλές ενέργειες η ενεργοποίηση είναι ελάχιστη. Ενδιαφέρον έχει και η χρονική εξέλιξη της ενεργοποίησης κατα τη διάρκεια της έκθεσης του υλικού στον παλμό. Ομοίως με τη χρονική εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής που δείξαμε παραπάνω, βλέπουμε στο **Σχήμα 2.10** την εξέλιξη της ενεργοποίησης απο παλμό 20 ns στα χρονικά στιγμιότυπα 20, 27, 34, 40 και 50 ns.



Σχήμα 2.9 – Ενεργοποίηση προσμίξεων για διαφορετικές ενέργειες υπο laser παλμό 20ns.



Σχήμα 2.10 – Χρονική εξέλιξη της κατανομής ενεργοποιημένων προσμίξεων κατα την ακτινοβόληση υπό παλμό 20ns και 500mJ

Εδώ όπως αναμένεται βλέπουμε ελάχιστη ενεργοποίηση στα πρώτα στάδια έκθεσης του πυριτίου στον παλμό και την άνοδο της προς το μέγιστο επίπεδο που επιτυγχάνεται απο τον παλμό. Σε αυτή την περίπτωση, αντιθέτως απο την θερμοκρασιακή κατανομή, παρατηρούμε ότι μετά τα 34ns η ενεργοποίηση αυξάνεται λίγο ακόμα πιθανώς λόγω της παραμένουσας θερμότητας που υπάρχει στο υλικό ακόμα και μετά το πέρας της χρονικής διάρκειας του παλμού. Έτσι στα 40 ns έχουμε λίγο αυξημένη ενεργοποίηση η οποία παραμένει μετά σταθερή για τα επόμενα χρονικά στιγμιότυπα όπως τα 50ns.

Αφού είδαμε τη συμπεριφορά του σκέτου πυριτίου υπό την ανόπτηση με το KrF τώρα προχωράμε στην κατασκευή της δομής SOI (πυρίτιο πάνω σε μονωτή) και θα δούμε πως διαμορφώνονται οι θερμοκρασιακές κατανομές και κατανομές ενεργοποιημένων προσμίξεων σε αυτή.

2.3.2 Επίπεδο SOI

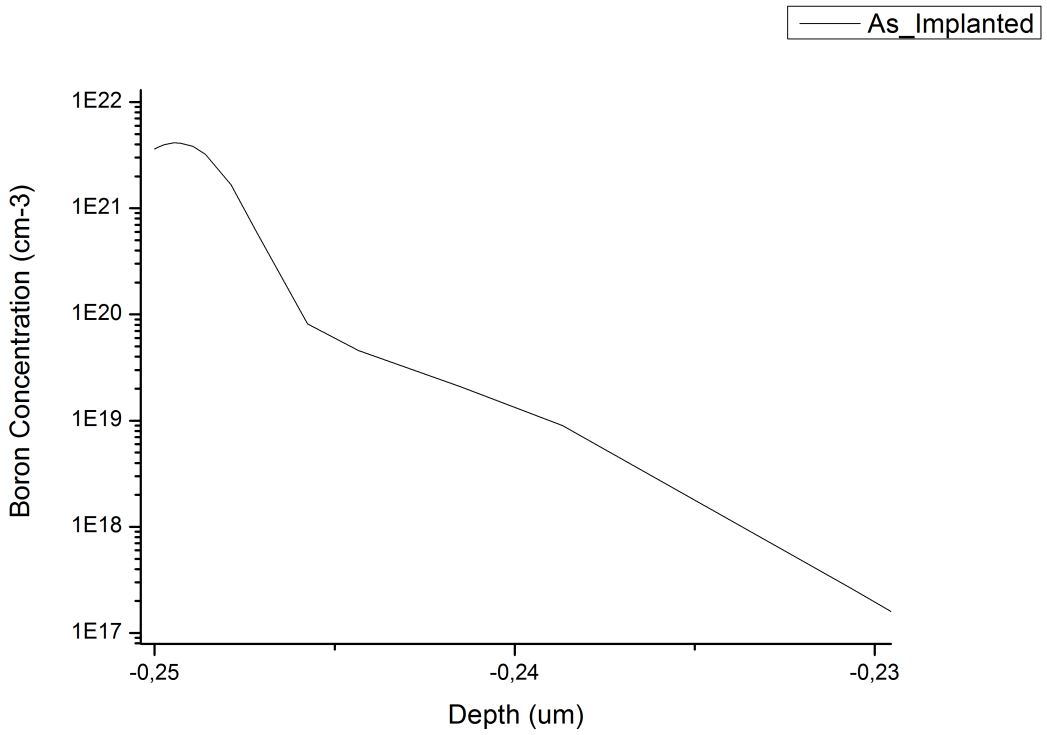
Εδώ θέλουμε να καταγράψουμε τη συμπεριφορά του πυριτίου όταν βρίσκεται πάνω απο στρώμα μονωτή, στην περίπτωση μας διοξειδίου του πυριτίου (SiO_2). Έτσι στο αρχικό υπόστρωμα πυριτίου εναποθέτουμε ένα λεπτό στρώμα οξειδίου, περί των 200 - 400 nm, και έπειτα ένα στρώμα πυριτίου. Φυσικά ενδιαφερόμαστε για λεπτά έως πολύ λεπτά πάχη του ανώτερου στρώματος πυριτίου αφού σε αντίθετη περίπτωση το λεπτό πάχος οξειδίου στο μεσαίο στρώμα έχει ελάχιστη επιρροή και η όλη κατασκευή συμπεριφέρεται ομοίως με το bulk πυρίτιο.

Στην περίπτωση του SOI όπου έχουμε λεπτό στρώμα πυριτίου στην κορυφή, θέλουμε εμφύτευση προσμίξεων κατάλληλη για μικρά βάθη (ρηχές επαφές). Έτσι χρησιμοποιούμε την PLAD εμφύτευση (εμφύτευση πλάσματος) με την μέθοδο προσομοίωσης της πραγματικής PLAD με BF_3 των Walther et al στην οποία αναφερθήκαμε παραπάνω αναλυτικότερα. Ουσιαστικά είναι μια σειρά απο 8 απλές εμφυτεύσεις Βορίου με κανονικοποιημένες όμως δόσεις και ενέργειες για ονομαστική ενέργεια 600 eV και δόση $1e15\ cm^{-2}$. Η σειρά εντολών που την πραγματοποιεί στον αλγόριθμο είναι η εξής:

```
##----------PLAD implantation--------------##
implant Boron energy=0.540<keV> dose=0.223e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.420<keV> dose=0.167e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.300<keV> dose=0.160e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.180<keV> dose=0.864e14<cm-2> tilt=0<degree>
```

```
implant Boron energy=0.120<keV> dose=3.498e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.096<keV> dose=1.651e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.060<keV> dose=1.390e14<cm-2> tilt=0<degree>
implant Boron energy=0.024<keV> dose=0.584e14<cm-2> tilt=0<degree>
```

Το προφίλ εμφυτευμένου Βορίου που παράγεται απο την παραπάνω μέθοδο φαίνεται στο **Σχήμα 2.11**.



Σχήμα 2.11 – Κατανομή Βορίου μετά την εμφύτευση σε SOI 200-50 με την μέθοδο PLAD προσομοίωσης

Πλέον εισάγεται και το οξείδιο στο δοκίμιο που ακτινοβολείται απο το laser το οποίο όπως θα δούμε επηρεάζει σημαντικά τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στο πάνω στρώμα του πυριτίου. Καθώς το πάνω στρώμα του πυριτίου απορροφά την ακτινοβολία και η θερμότητα μεταφέρεται κατα βάθος, φτάνει στο στρώμα του οξειδίου του οποίου τα θερμικά χαρακτηριστικά είναι διαφορετικά απο το πυρίτιο. Πολύ μικρότερη απορροφητικότητα, διαφορετική ειδική θερμοχωρητικότητα και μικρότερη θερμική αγωγιμότητα ως μονωτής. Έτσι λοιπόν πρέπει να ορίσουμε και τις θερμικές παραμέτρους του οξειδίου στον αλγόριθμο μας για την σωστή προσομοίωση της διάχυσης.

Θερμικές ιδιότητες διοξειδίου του πυριτίου:

- *Πυκνότητα μάζας* $\rho = 2.648\ g/cm^3$
- *Απορροφητικότητα* $\alpha = 0.80$: Σύμφωνα με τις μετρήσεις των Weeks et al [10] η απορροφητικότητα του οξειδίου σε ακτινοβολία "φωτός" με ενέργεια στα 5 eV όπως το KrF laser κινείται περίπου στην τιμή 0,80 cm^-1, κάτι που επαληθεύεται και απο τον Bauerle [6] όπου πιο γενικά αναφέρεται ότι η απορροφητικότητα είναι μικρότερη της μονάδας ($\alpha < 1$) για το KrF.
- *Ειδική θερμοχωρητικότητα* C_p: Όπως και στο πυρίτιο η θερμοχωρητικότητα του οξειδίου εξαρτάται απο την εκάστοτε θερμοκρασία και μπορεί να δοθεί απο την μαθηματική έκφραση [11]:

$$C_p = 1178\exp(3.005 \times 10^{-5}T) - 1279\exp(-0.003448T) \tag{2.10}$$

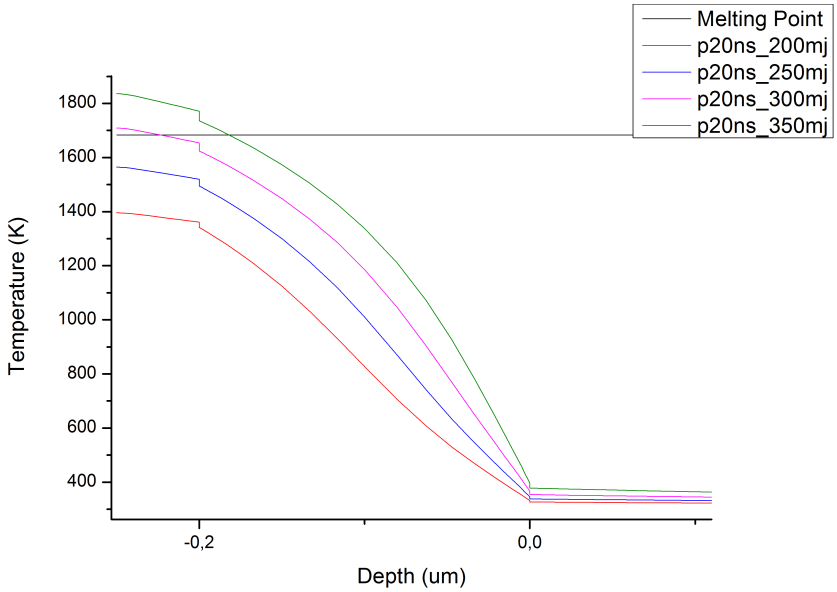
- *Θερμική αγωγιμότητα* k: Και εδώ έχουμε εξάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας απο την θερμοκρασία η οποία αποτυπώνεται στον τύπο [6]:

$$k = 5.81 \times 10^{-11}T^3 - 9.57 \times 10^{-8}T^2 + 6.47 \times 10^{-5}T + 0.0006739 \tag{2.11}$$

Έτσι όμοια με το πυρίτιο οι θερμικές παράμετροι του οξειδίου για τον αλγόριθμο της προσομοίωσης θα οριστούν όπως παρακάτω:

```
pdbSetDouble Oxide MassDensity 2.648

pdbSetString Oxide Absorptivity "0.80"

pdbSetString Oxide SpecificHeatCapacity \
"1178*exp(3.005e-5*HeatTempK)-1279*exp(-0.003448*HeatTempK)"

pdbSetString Oxide ThermalConductivity \
"5.81e-11*HeatTempK^3 - 9.57e-8*HeatTempK^2 + 6.47e-5*HeatTempK + 0.0006739"
```

Αρχικά πραγματοποιήσαμε προσομοιώσεις για στρώμα οξειδίου 200nm και πυριτίου 50nm και έπειτα δοκιμάσαμε και τους συνδυασμούς οξείδιο 400nm - πυρίτιο 50nm και οξείδιο 200nm - πυρίτιο 100nm. Παρακάτω (**Σχήμα 2.12**) φαίνονται οι μέγιστες κατανομές θερμοκρασίας για παλμό 20ns και 4 διαφορετικές ενέργειες ακτινοβολίας:

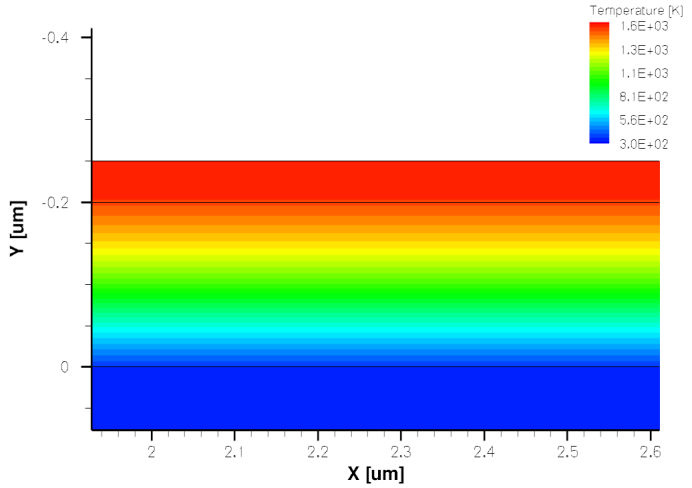


Σχήμα 2.12 – Μέγιστες θερμικές κατανομές για SOI 200-50 υπο παλμό 20ns

Όπως βλέπουμε εδώ έχουμε πολύ υψηλότερες θερμοκρασίες για πυκνότητες ενέργειας κατα πολύ μικρότερες απο αυτές με τις οποίες ακτινοβολούσαμε το σκέτο πυρίτιο. Αυτό οφείλεται στην παρουσία του οξειδίου. Το οξείδιο ώς μονωτής δεν απάγει την θερμοκρασία εύκολα και αυτή δεν μεταφέρεται γρήγορα κατά βάθος του υλικού. Όπως φαίνεται και στο διάγραμμα η διαφορά μεταξύ του ανώτερου στρώματος πυριτίου και του υποστρώματος κάτω απο το οξείδιο είναι πολύ μεγάλη και η μείωση της θερμοκρασίας κατα βάθος εντός του πάχους του οξειδίου πολύ απότομη.

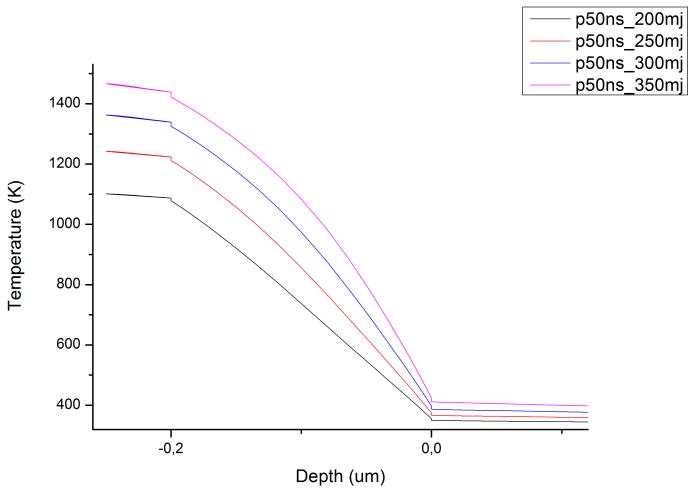
Αυτό όμως συντελεί στην διατήρηση υψηλής θερμοκρασίας απο το οξείδιο η οποία δεν επιτρέπει στην επίσης υψηλή θερμοκρασία του ανώτερου στρώματος πυριτίου να διαφύγει. Έτσι η θερμότητα δεν απάγεται γρήγορα απο το λεπτό στρώμα του πυριτίου και συνεπώς αναπτύσσονται με μικρή ενέργεια ακτινοβολίας πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Χαρακτηριστικά βλέπουμε ακόμα και την πυκνότητα ενέργειας των 300 mJ/cm^2 να παράγει θερμοκρασίες ανώτερες του σημείου τήξης. Σημαντικό ρόλο σε αυτό βέβαια παίζει και το γεγονός ότι το στρώμα του πυριτίου είναι πολύ λεπτό πράγμα που επιδεινώνει την παγίδευση της θερμότητας αφού δεν υπάρχει πολύ υλικό για την γρήγορη απαγωγή της και "συναντάει" γρήγορα το οξείδιο που την εμποδίζει. Η θερμική κατανομή κατα βάθος του δοκιμίου μπορεί να φανεί και στο παρακάτω γράφημα:

Προφανώς για την περίπτωση του παλμού 10ns το φαινόμενο θα είναι ακόμα



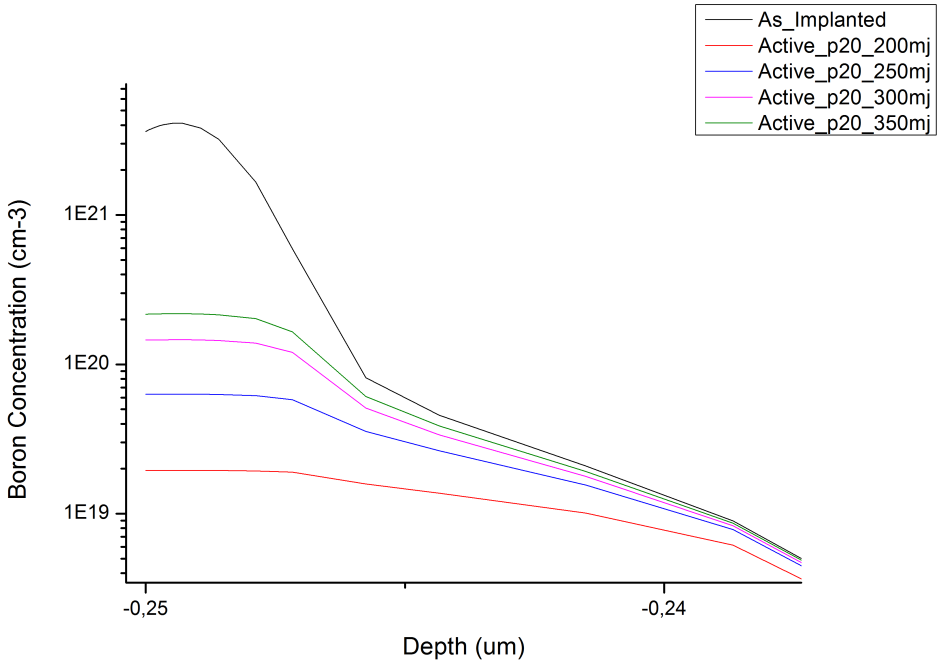
Σχήμα 2.13 – Θερμική κατανομή SOI 200-50 παλμού 20ns και ενέργειας 250mJ

πιο έντονο λόγω της μικρότερης διάρκειας της όλης διαδικασίας και της ακόμα μεγαλύτερης απορρόφησης ακτινοβολίας ανά μονάδα χρόνου. Ωστόσο για τον παλμό των 50ns το φαινόμενο είναι πιο ήπιο όπως φαίνεται στο **Σχήμα 2.14**.

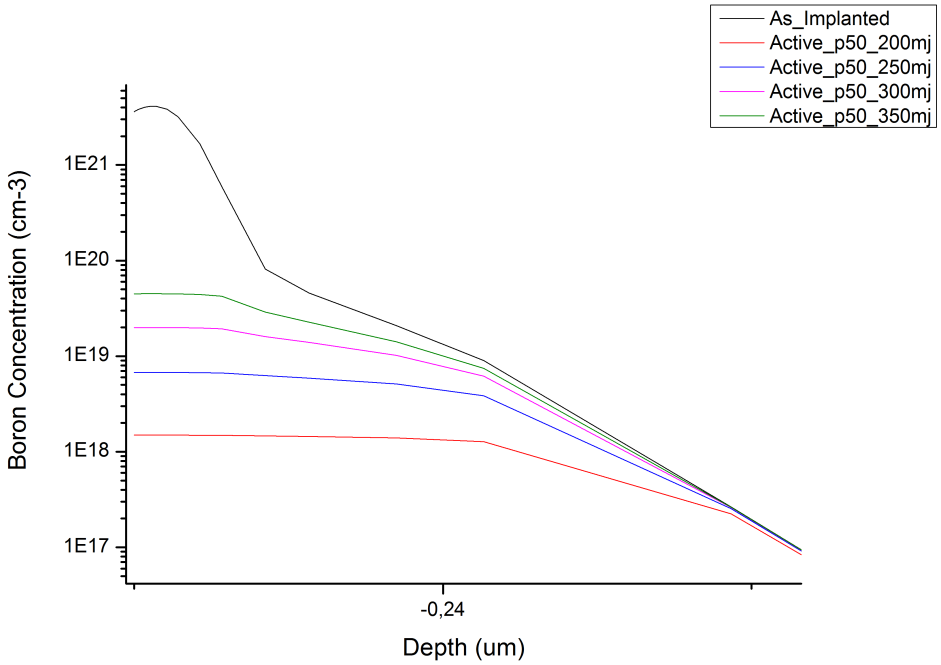


Σχήμα 2.14 – Μέγιστες θερμικές κατανομές για SOI 200-50 υπο παλμό 50ns

Όπως βλέπουμε, θερμοκρασιακά ο παλμός των 50nm θα μπορούσε να είναι προτιμητέος για την συγκεκριμένη κατασκευή ωστόσο η ενεργοποίηση των προσμίξεων διαφέρει αρκετά μεταξύ των δύο παλμών, με αυτόν στα 20ns να εμφανίζει καλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης όπως φαίνεται παρακάτω.



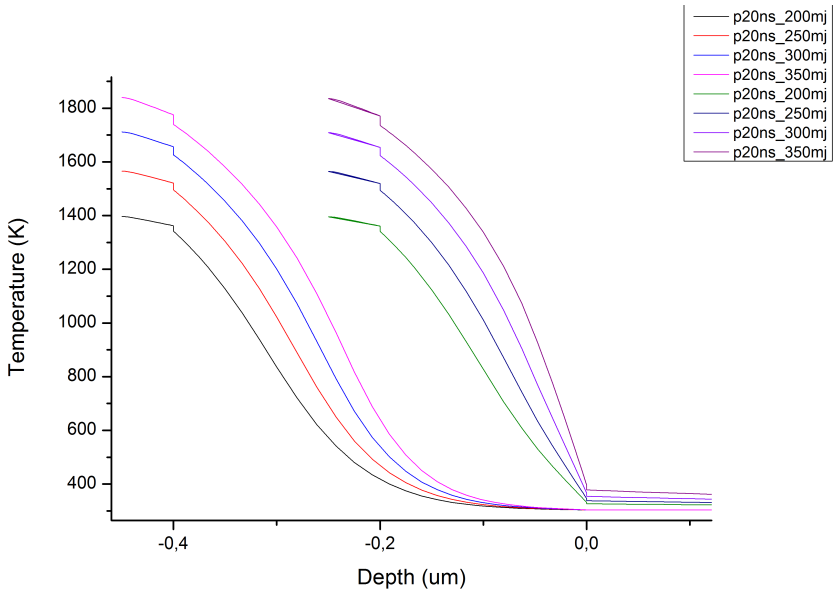
Σχήμα 2.15 – Ενεργοποίηση προσμίξεων για SOI 200-50 υπο παλμό 20ns



Σχήμα 2.16 – Ενεργοποίηση προσμίξεων για SOI 200-50 υπο παλμό 50ns

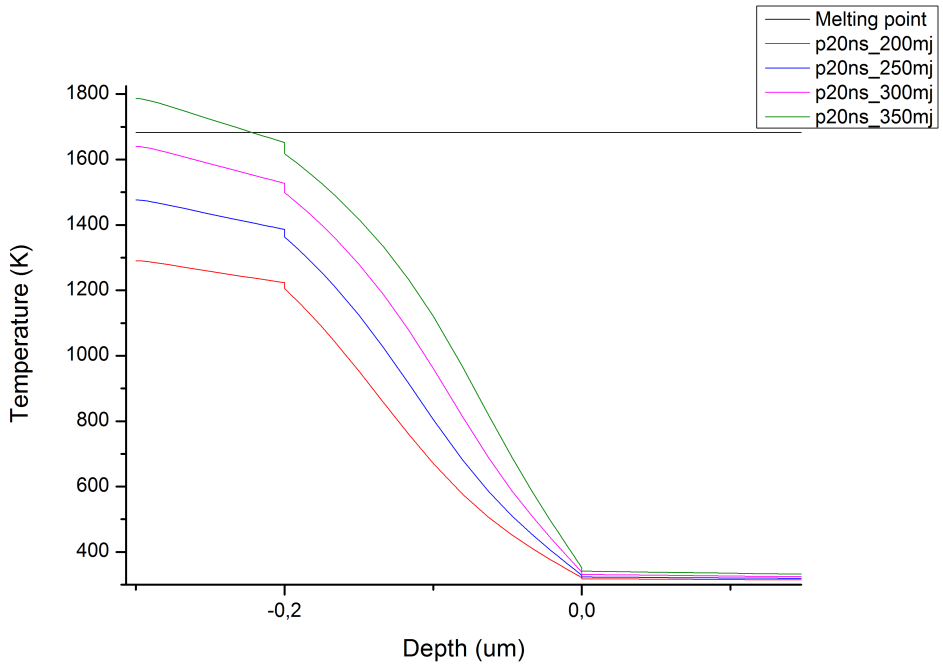
Η όχι και τόσο ακριβής απόδοση της κατανομής των ενεργοποιημένων προσμίξεων στα γραφήματα οφείλεται στα προβλήματα προσομοίωσης που αναφέραμε παραπάνω σχετικά με τα μοντέλα του προγράμματος που υπολογίζουν τις κατανομές ενεργοποιημένων προσμίξεων. Το συγκεκριμένο μοντέλο φαίνεται να αποτυπώνει πιο ρεαλιστικά τα επίπεδα ενεργοποίησης αλλα έχει μειωμένη ακρίβεια στην ακριβή αναπαράσταση της κατανομής.

Τώρα όσον αφορά το πάχος του στρώματος οξειδίου αφού πραγματοποιήσαμε δοκιμές για διπλάσιο πάχος οξειδίου (400nm) και ίδιο πάχος πυριτίου, παρατηρήθηκε ότι δεν επηρεάζει τις μέγιστες θερμοκρασίες και τις κατανομές ενεργών προσμίξεων. Εδώ φαίνεται μία σύγκριση των μέγιστων κατανομών θερμότητας (**Σχήμα 2.17**).

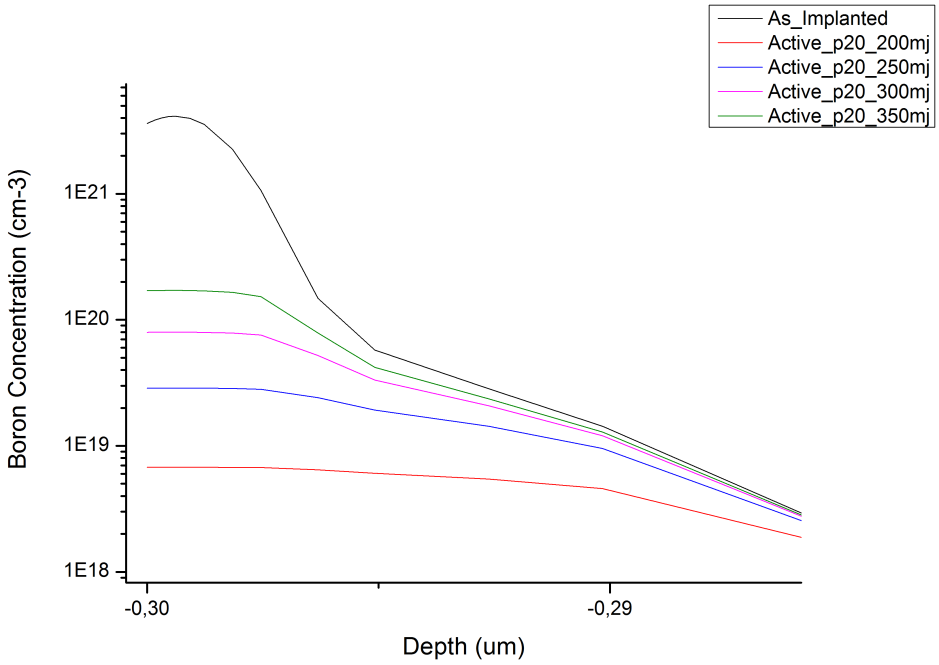


Σχήμα 2.17 – Σύγκριση θερμικών κατανομών SOI 200-50 και SOI 400-50

Επίσης έγιναν δοκιμές και για διπλασιασμό του πάχους του ανώτερου στρώματος πυριτίου (SOI 200-100). Σε αυτή την περίπτωση οι μέγιστες θερμοκρασίες ήταν ελαφρώς χαμηλότερες (50-80 K) μεν αλλά παρατηρήθηκαν και χαμηλότερα ποσοστά ενεργοποίησης **Σχήματα 2.18** και **2.19**. Έτσι αν και το μικρότερο πάχος των 50nm αναπτύσσει μεγαλύτερες θερμοκρασίες η κατεύθυνση μας προς μικρότερες διαστάσεις για την συνέχεια των προσομοιώσεων όπου θα εφαρμόσουμε και εγχάραξη στο πυρίτιο, αλλα και η καλή αναλογία ενεργοποίησης που φαίνεται να παρουσιάζει μας οδηγούν να το προτιμήσουμε.



Σχήμα 2.18 – Μέγιστες κατανομές θερμοκρασίας για SOI 200-100 υπο παλμό 20ns



Σχήμα 2.19 – Ενεργοποίηση προσμίξεων για SOI 200-100 υπο παλμό 20ns

2.3.3 SOI stripe

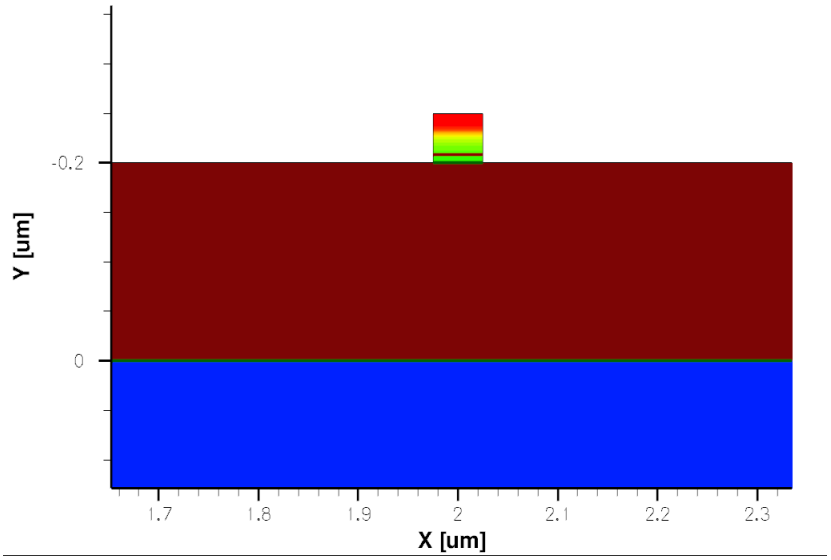
Σε αυτό το σημείο θα δούμε πώς διαμορφώνονται τα παραπάνω εάν εγχαράξουμε το SOI στη μορφή μιας λεπτής ράβδωσης πυριτίου πάνω στο οξείδιο, το περισσότερο υλικό του ανώτερου πυριτίου απομακρύνεται και μένει ένα λεπτό ορθογώνιο κομμάτι πυριτίου το οποίο σε τρισδιάστατη και μεγαλύτερη κλίμακα μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα "σύρμα" πυριτίου πάνω στο οξείδιο. Το πάχος της ράβδωσης είναι όσο και το πάχος του ανώτερου πυριτίου στο SOI (πχ 50nm) και το πλάτος της επιλέγεται κατα την διαδικασία της εγχάραξης και αποτέλεσε παράμετρο δοκιμών. Γενικά όπως θα φανεί και παρακάτω όσο μεγαλύτερο ήταν το πλάτος της ράβδωσης τόσο αυτή προσομοίαζε στο κανονικό επίπεδο SOI.

Η διαδικασία της εγχάραξης πραγματοποιείται αφού έχουμε εμφυτεύσει τις προσμίξεις Βορίου στην κατασκευή μας και άρα δεν έχουμε κάποια διαφορά στο προφίλ κατανομής τους. Η προσομοίωσης της εγχάραξης με το πρόγραμμα είναι απλή διαδικασία και πραγματοποιείται ορίζοντας μία μάσκα με γεωμετρία ανάλογη του πλάτους της ράβδωσης που θέλουμε να φτιάξουμε και την χρήση της εντολής etch με παράλληλη δήλωση της ποσότητας υλικού που θέλουμε να αφαιρεθεί. Ένα παράδειγμα για την περίπτωσή μας είναι το παρακάτω:

```
mask name=screen left=1.975<um> right=2.025<um>
etch mask=screen Silicon anisotropic thickness=50<nm>
```

όπου σε ένα δισκίδιο πλάτους 4 μm ορίζουμε την μάσκα με το όνομα screen και ένα κενό 50 νανομέτρων στην μέση του πλάτους του δισκιδίου. Έτσι στην επόμενη εντολή που πραγματοποιεί την εγχάραξη δηλώνουμε ποια μάσκα θέλουμε να χρησιμοποιηθεί, ορίζουμε ότι θέλουμε να εγχαραχθεί το υλικό του πυριτίου και να κοπεί κατα βάθος 50nm (δηλαδή όλο το πάχος του στρώματος SOI.) Το αποτέλεσμα θα είναι μία ράβδωση πυριτίου πλάτους όσο και το κενό της μάσκας δηλαδή 50nm στην παραπάνω περίπτωση και σε μια δισδιάστατη τομή του δισκιδίου θα έχει την μορφή που φαίνεται στο **Σχήμα 2.20**.

Όσον αφορά τα θερμικά χαρακτηριστικά της νέας δομής που θα υποστεί ακτινοβόληση δεν έχουμε κάποια αλλαγή στα υλικά που συμμετέχουν και οι θερμικές παράμετροι που πρέπει να δηλωθούν είναι αυτές του πυριτίου και του οξειδίου ομοίως με το επίπεδο SOI. Ωστόσο σε αυτή την περίπτωση παρουσιάζεται ένα πρόβλημα για την σωστή προσομοίωση. Στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις η επιφάνεια στην οποία προσέπιπτε η δέσμη του laser ήταν



Σχήμα 2.20 – Ράβδωση πυριτίου μετά την εγχάραξη

ομοιόμορφο επίπεδο ενός υλικού (πυριτίου), ενώ τώρα η δέσμη συναντά στην επιφάνεια του δοκιμίου δύο διαφορετικά υλικά, το οξείδιο σε μεγαλύτερο ποσοστό αλλά και τη λεπτή ράβδωση πυριτίου. Όμως το οξείδιο και το πυρίτιο έχουν διαφορετικές ανακλαστικότητες πράγμα που επηρεάζει την ένταση ακτινοβολίας που διέρχεται και απορροφάται απο το καθένα. Έτσι λοιπόν για την σωστή προσομοίωση της ανόπτησης με το laser αυτή η παράμετρος πρέπει να εισαχθεί στις εξισώσεις θερμότητας που επιλύονται.

Το πρόβλημα που δημιουργήθηκε έγκειται στο γεγονός ότι στο Sentaurus δεν μπορούμε να ορίσουμε μία κατα-y μεταβαλλόμενη ανακλαστικότητα (όπου y η μεταβλητή του πλάτους του δοκιμίου) ούτε να δηλώσουμε την ανακλαστικότητα για κάθε στοιχείο χωριστά όπως κάνουμε με τις θερμικές παραμέτρους, και έτσι έπρεπε να βρούμε μια εναλλακτική έτσι ώστε να ρυθμίζεται η ένταση που δέχεται στην πραγματικότητα η ράβδωση πυριτίου και αντίστοιχα το οξείδιο. Το οξείδιο είναι ελάχιστα ανακλαστικό με ανακλαστικότητα μόλις 4%, δηλαδή το 96% της ακτινοβολίας διέρχεται του οξειδίου. Επίσης ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης του είναι πολύ μικρός πράγμα που όπως θα δούμε παρακάτω επηρεάζει σημαντικά τις θερμικές κατανομές της κατασκευής μας. Έτσι ενώ το οξείδιο ανακλά ελάχιστη ακτινοβολία, η ράβδωση πυριτίου στην κορυφή αφήνει να το διαπεράσει το 32% της ακτινοβολίας (ανακλαστικότητα 68%) την οποία και απορροφά μαζικά.

Για να ρυθμίσουμε αυτή την αλλαγή στο ποσό της έντασης που δέχεται

η ράβδωση πυριτίου χρησιμοποιήσαμε έναν θεωρητικό απορροφητή τον οποίο τοποθετούμε πάνω απο τη ράβδωση πυριτίου και στον οποίο μπορούμε να δώσουμε τις θερμικές ιδιότητες που θα είχαν αποτέλεσμα την μείωση της έντασης πάνω απο τη ράβδωση κατά το επιθυμητό ποσό. Για ειδική θερμοχωρητικότητα και θερμική αγωγιμότητα του απορροφητή ορίσαμε αυτές του αέρα και ρυθμίσαμε κατάλληλα τον συντελεστή απορροφητικότητας με τον παρακάτω τρόπο:

Σύμφωνα με τον νόμο των Beer - Lambert για την ένταση της ακτινοβολίας ισχύει:

$$I = I_0 \exp(-\alpha x) \tag{2.12}$$

όπου $_0$ είναι η αρχική ένταση ακτινοβολίας της πηγής, α ο συντελεστής απορροφητικότητας και x το πάχος του υλικού. Όπως αναφέραμε πιο πάνω, τον παράγοντα της ανακλαστικότητας R, όταν έχουμε μόνο ένα υλικό στην επιφάνεια όπου προσπίπτει η δέσμη, τον εισάγουμε απευθείας στις εξισώσεις πολλαπλασιάζοντας την αρχική πυκνότητα ενέργειας με $(1 - R)$ δηλαδή με το ποσό της ακτινοβολίας που διέρχεται στο επιφανειακό υλικό. Σε αυτή την περίπτωση κάνουμε το ίδιο σαν να είχαμε μόνο οξείδιο στην επιφάνεια, για το οποίο η ένταση που δέχεται είναι $0,96I_0$, και εισάγοντας τον απορροφητή θα του ορίσουμε τέτοια απορροφητικότητα ώστε να μειώνεται η ένταση σε αυτήν που θα δεχόταν το πυρίτιο λόγω της ανακλαστικότητας του, δηλαδή $(1 - 0,68)I_0 = 0,32I_0$. Έτσι έχουμε τα παρακάτω:

$$0.32I_0 = 0.96I_0 \exp(-\alpha d) \tag{2.13}$$

όπου α είναι ο συντελεστής απορροφητικότητας του απορροφητή που θέλουμε να βρούμε και d είναι το πάχος του, το οποίο επιλέγουμε στο 1 μm (0.0001 σε cm αφού οι προεπιλεγμένες μονάδες για το α ειναι cm^{-1}). Άρα:

$$0.32 = 0.96 \exp(-\alpha 0.0001) \Rightarrow \alpha = -\frac{\ln\left(\frac{0.32}{0.96}\right)}{0.0001} \Rightarrow \tag{2.14}$$

$$\alpha = 10986 cm^{-1} \tag{2.15}$$

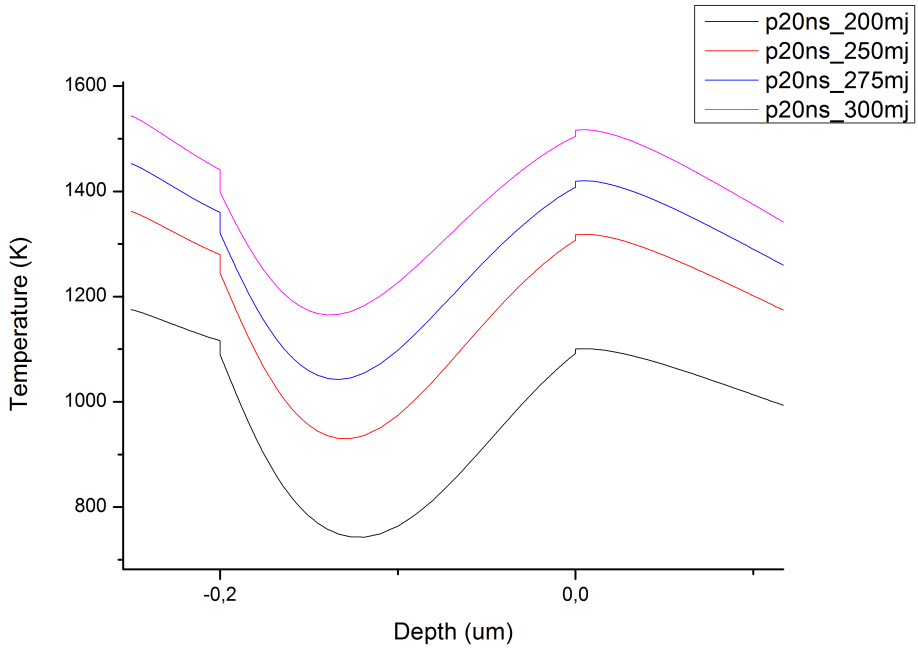
Άρα με τη δυνατότητα που μας δίνει το Sentaurus να χρησιμοποιήσουμε θερμικό απορροφητή με τις επιθυμητές θερμικές ιδιότητες, ορίζουμε την κατάλληλη απορροφητικότητα που βρήκαμε παραπάνω και καταφέρνουμε να μειώσουμε έτσι την ένταση της ακτινοβολίας στο ποσό που δέχεται κανονικά το πυρίτιο. Επίσης δίνοντας στον θερμικό απορροφητή τις θερμικές ιδιότητες του

αέρα (εκτός της απορροφητικότητας) προσομοιώνουμε όσο μπορούμε την ιδανική συνθήκη όπου ο θερμικός απορροφητής δεν επηρεάζει θερμικά την υποκείμενη κατασκευή περισσότερο απο ότι θα έκανε ο αέρας παρα μόνο απορροφά το επιθυμητό ποσό ακτινοβολίας. Επίσης για τον καθορισμό της τιμής της πυκνότητας μάζας που θα δίναμε στον θερμικό απορροφητή έγινε μια μικρή βαθμονόμηση σε σχέση με τις θερμοκρασίες του πυριτίου που είχαμε απο τις προσομοιώσεις για επίπεδα SOI και πήραμε την αυθαίρετη τιμή $\rho = 0.575\ g/cm^3$. Παρακάτω βλέπουμε την εναπόθεση και την δήλωση των θερμικών ιδιοτήτων του θερμικού απορροφητή στον αλγόριθμο της προσομοίωσης:

```
deposit HeatAbsorber thickness=1<um> isotropic

pdbSetString HeatAbsorber Absorptivity "10986"
pdbSetString HeatAbsorber SpecificHeatCapacity \
"1277 + (997-1277)/(1 + (HeatTempK/983)^(2.87103))"
pdbSetString HeatAbsorber ThermalConductivity \
"6.987*exp(0.0002364*$texp)-7.02*exp(-0.001212*$texp)"
pdbSetDouble HeatAbsorber MassDensity 5.75e-1
```

Φυσικά η εναπόθεση του απορροφητή γίνεται πριν την εγχάραξη πάνω στο επίπεδο SOI και τέλος με την ίδια μάσκα που πρόκειται να εγχαραχθεί το πυρίτιο χαράσσουμε και τον απορροφητή και παίρνουμε την επιθυμητή δομή με τον απορροφητή μόνο πάνω απο την ράβδωση πυριτίου.

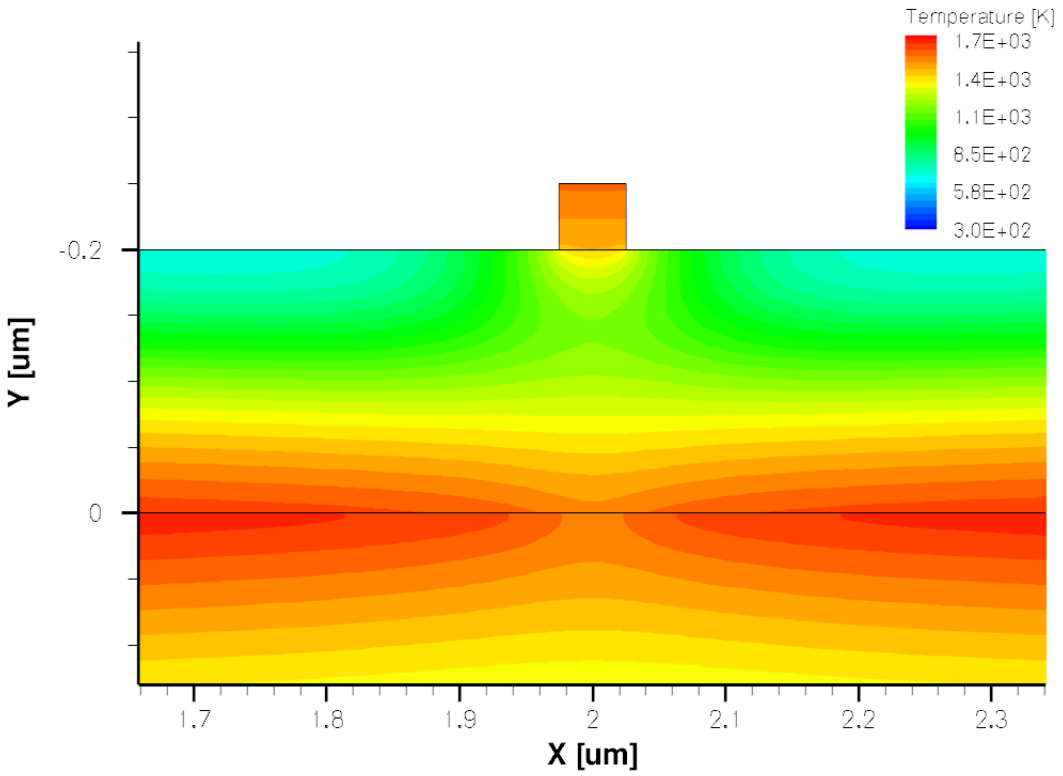
Τώρα μπορούμε να προχωρήσουμε στην ακτινοβόληση του δοκιμίου και να δούμε πως διαφοροποιούνται τα αποτελέσματα σε σχέση με το επίπεδο SOI. Οσον αφορά τα πάχη των στρωμάτων οξειδίου και πυριτίου τα κρατήσαμε σταθερά στα 200nm και 50nm αντίστοιχα. Για το πλάτος της ράβδωσης ωστόσο κάναμε δοκιμές για 50 και 100 nm και τέλος έγινε και μια δοκιμή του συνδυασμού πάχος οξειδίου 200nm, πάχος πυριτίου 30nm και πλάτος ράβδωσης 20nm.



Σχήμα 2.21 – Κατανομή θερμοκρασίας για SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 20ns.

Παραπάνω στο **Σχήμα 2.21** βλέπουμε την κατανομή της θερμοκρασίας κατα βάθος του υλικού στο κέντρο (κατα πλάτος) της ράβδωσης 50nm για παρόμοιες πυκνότητες ενέργειας με αυτές που ακτινοβολούσαμε και το επίπεδο SOI και υπό παλμό 20 ns. Παρατηρούμε ότι οι μέγιστες θερμοκρασίες είναι χαμηλότερες κατα περίπου 100 βαθμούς απο αυτές στο επίπεδο SOI αλλά και τελείως διαφορετική θερμοκρασιακή κατανομή κατα βάθος του δοκιμίου. Είναι εμφανής η θέρμανση του πυριτίου κάτω απο το οξείδιο σε θερμοκρασίες στα ίδια επίπεδα με το ανώτερο πυρίτιο και αυτό οφείλεται φυσικά στο γεγονός ότι τώρα έχουμε αφαιρέσει το μεγαλύτερο μέρος του πυριτίου στην κορυφή εκτός απο τη λεπτή ράβδωση.

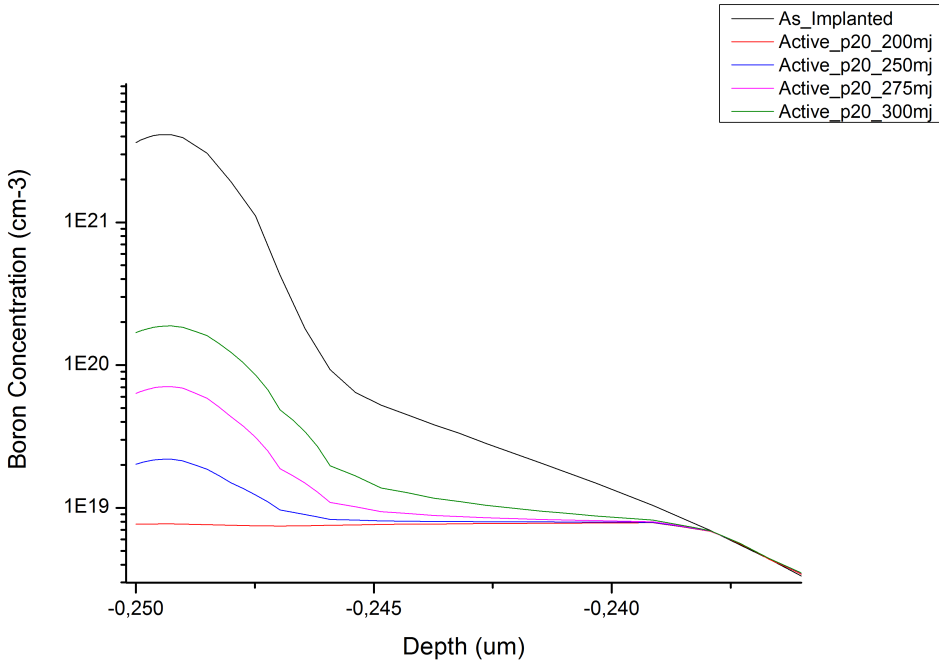
Όπως αναφέραμε πρίν το οξείδιο έχει πολύ μικρή ανακλαστικότητα και μικρή απορροφητικότητα οπότε ουσιαστικά “αφήνει” να το διαπεράσει το μεγαλύτερο μέρος της ακτινοβολίας η οποία στη συνέχεια απορροφάται μαζικά απο το πυρίτιο κάτω απο το οξείδιο. Το οξείδιο θερμαίνεται κυρίως απο την μεταφορά θερμότητας απο την ράβδωση στην κορυφή και το πυριτικό υπόστρωμα. Αυτό το φαινόμενο φαίνεται καλύτερα και στο **Σχήμα 2.22** όπου φαίνονται οι θερμοκρασιακές ζώνες και η εντονότερη απορρόφηση απο το πυρίτιο.



Σχήμα 2.22 – Θερμοκρασιακό προφίλ για SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 20ns.

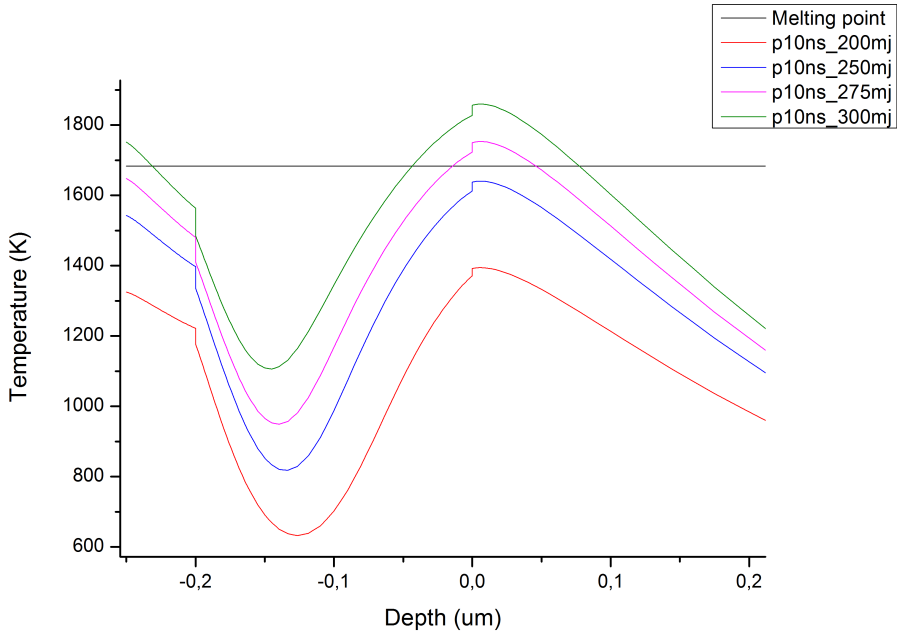
Επίσης το μικρό πλάτος της ράβδωσης πυριτίου έχει αποτέλεσμα την ανάπτυξη ελαφρώς χαμηλότερων θερμοκρασιών στην κορυφή λόγω της μείωσης του φαινομένου της παγίδευσης της θερμότητας. Όσο πιο μικρό το πλάτος της τόσο πιο έντονο είναι αυτό το φαινόμενο. Ωστόσο οι θερμοκρασίες εξακολουθούν να είναι πολύ υψηλές αφού το οξείδιο αφού θερμανθεί απάγει δύσκολα την θερμότητα και συντελεί στην διατήρηση υψηλών θερμοκρασιών στο πυρίτιο.

Όσον αφορά την ενεργοποίηση των προσμίξεων στην ράβδωση του πυριτίου τα αποτελέσματα είναι αρκετά καλά με το προφίλ της κατανομής να κινείται στα επίπεδα ενεργοποίησης που είχαμε στο επίπεδο SOI και υπό καλύτερες θερμοκρασίες. Η ενεργοποίηση για τον παλμό των 20ns φαίνεται παρακάτω:

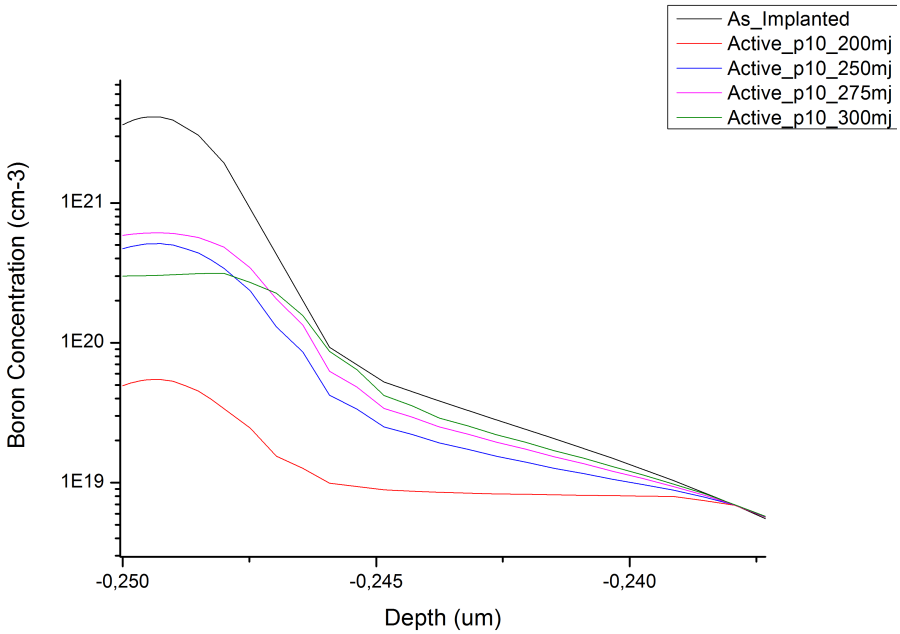


Σχήμα 2.23 – Κατανομή προσμίξεων Βορίου στο SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 20ns.

Όπως είναι αναμενόμενο για την περίπτωση του παλμού των 10ns οι θερμοκρασίες που αναπτύσσονται είναι υψηλότερες, και μάλιστα με αυτές του υποστρώματος πυριτίου να ξεπερνάνε αυτές της ράβδωσης. Επίσης παρατηρείται μεγαλύτερη ενεργοποίηση των προσμίξεων λόγω της πιο γρήγορης ανόπτησης και μεγαλύτερης θέρμανσης αλλά οι θερμοκρασίες στο σύνορο οξειδίου - πυριτίου στο υπόστρωμα ξεπερνάνε το σημείο τήξης του πυριτίου και αγγίζουν και το σημείο τήξης του οξειδίου (1873 K) όπως φαίνεται στα **Σχήματα 2.24** και **2.25**.

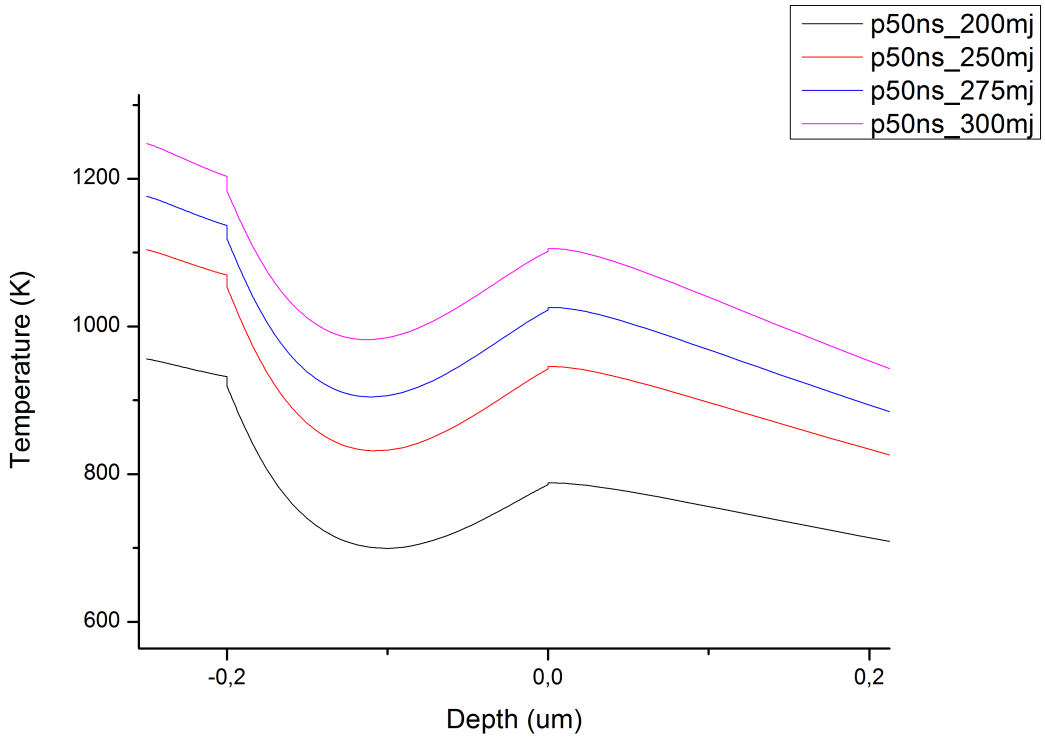


Σχήμα 2.24 – Κατανομή θερμοκρασίας για SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 10ns.

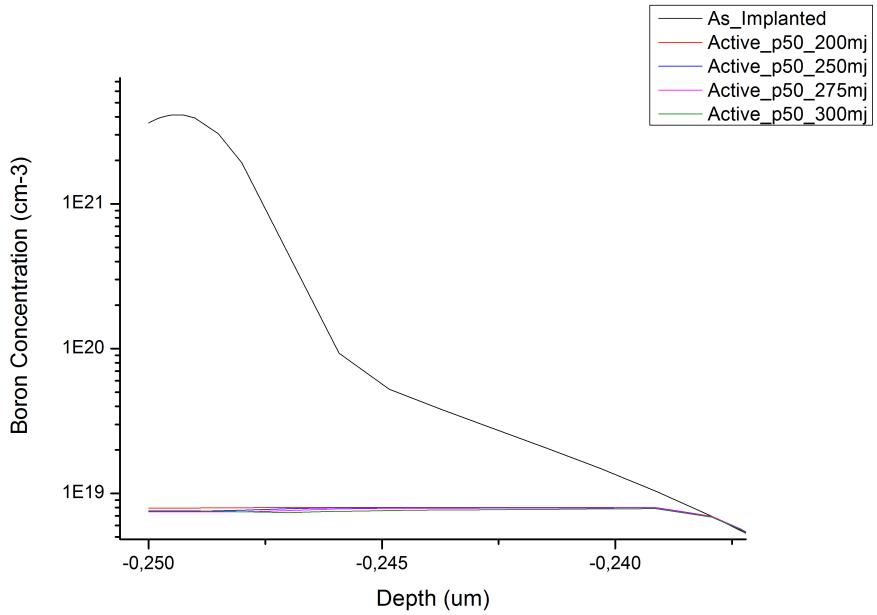


Σχήμα 2.25 – Κατανομή προσμίξεων Βορίου στο SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 10ns.

Η υψηλότερη θερμοκρασία στο υπόστρωμα δικαιολογείται αφού η ακτινοβολία όπως είπαμε πρίν διαπερνάει το οξείδιο και το υπόστρωμα πυριτίου απορροφά μαζικότερα την ακτινοβολία απο ότι η μικρή ποσότητα πυριτίου της ράβδωσης και επίσης έχοντας το πλήρες στρώμα του οξειδίου απο πάνω του η θερμοκρασία διατηρείται πολύ ψηλά. Στην περίπτωση του παλμού 50ns οι θερμοκρασίες είναι χαμηλότερες όπως αναμένεται λόγω της μεγαλύτερης διάρκειας του παλμού και η κατανομή της θερμότητας στο υλικό πιο ομαλή αφού υπάρχει χρόνος για να απαχθεί περισσότερο προς το βάθος του υλικού. Ωστόσο η μεγάλη διάρκεια και οι χαμηλότερες θερμοκρασίες για αυτές τις χαμηλές εντάσεις ακτινοβολίας KrF έχουν ως αποτέλεσμα η ενεργοποίηση του Βορίου να είναι ελάχιστη για αυτόν τον παλμό. (**Σχήματα 2.26** και **2.27**)



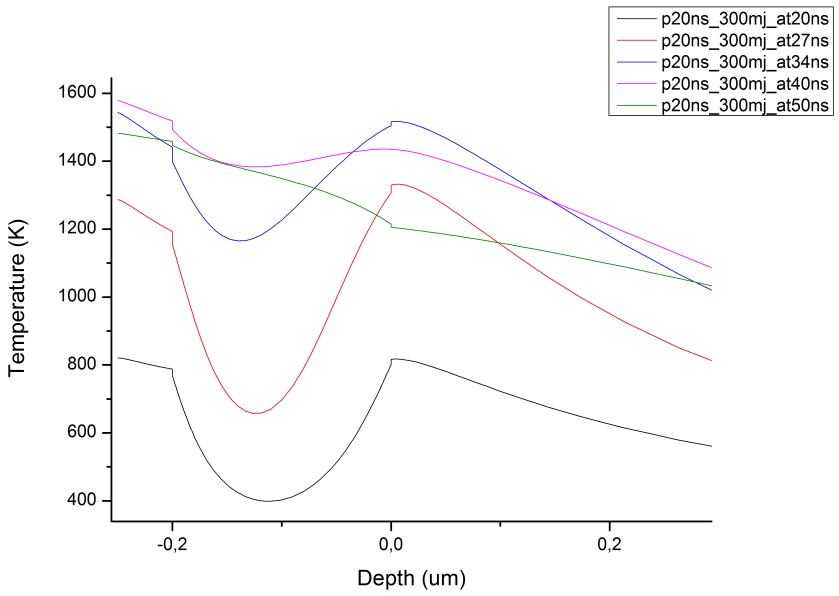
Σχήμα 2.26 – Θερμοκρασία σε SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 50ns.



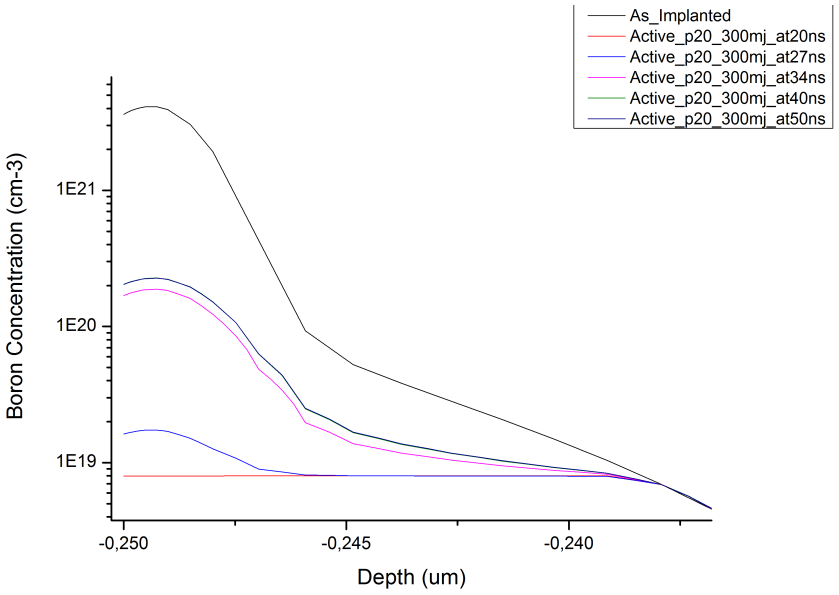
Σχήμα 2.27 – Κατανομή Βορίου στο SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 50ns.

Όπως και στις προηγούμενες προσομοιώσεις έτσι και εδώ η χρήση του παλμού των 20ns φαίνεται να είναι η καλύτερη επιλογή ως συνδυασμός θερμοκρασιακών κατανομών και κατανομών ενεργοποιημένων προσμίξεων. Στη συνέχεια θα δούμε και την χρονική εξέλιξη των εν λόγω κατανομών υπο ακτινοβόληση 20ns και πυκνότητα ενέργειας 300 mJ.

Στο **Σχήμα 2.28** έχουμε την χρονική εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής όπου βλέπουμε την ταυτόχρονη αύξηση της θερμοκρασίας του υποστρώματος πυριτίου με την ράβδωση στην κορυφή της διάταξης μέχρι τα 34 ns όπου τελειώνει ο παλμός. Έπειτα αφού έχει σταματήσει η απορρόφηση νέας ακτινοβολίας η θερμοκρασία του υποστρώματος πυριτίου αρχίζει να μειώνεται μεταφερόμενη προς το οξείδιο και κατα βάθος του υλικού, ωστόσο δεν ισχύει το ίδιο για την ράβδωση στην κορυφή όπου καθώς φαίνεται λόγω του εγκλωβισμού της θερμότητας με το οξείδιο θερμαίνεται σε ένα διάστημα 50 βαθμών παραπάνω. Στα 50 ns πλέον έχει περάσει αρκετός χρόνος και η θερμοκρασία έχει αρχίσει να μειώνεται σε όλη την διάταξη μεταφερόμενη προς μεγαλύτερα βάθη. Ομοίως βλέπουμε και την χρονική εξέλιξη για το ενεργοποιημένο Βόριο υπό τις ίδιες συνθήκες ακτινοβόλησης η οποία αναμενόμενα ακολουθεί την λογική που περιγράψαμε και στην περίπτωση του Bulk πυριτίου, **Σχήμα 2.29**

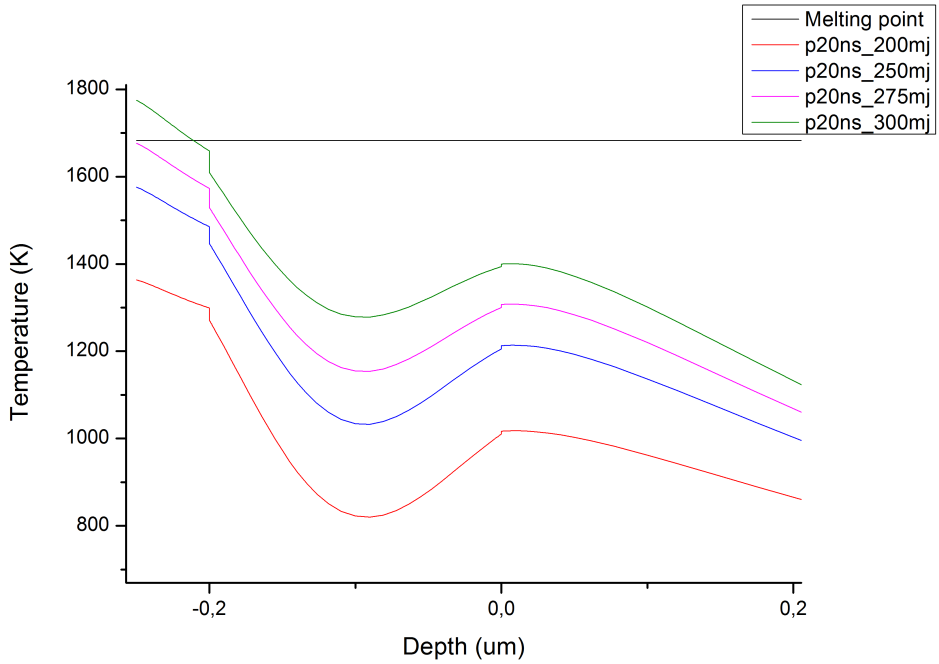


Σχήμα 2.28 – Διαχρονική εξέλιξη της θερμοκρασίας σε SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 20ns και ενέργεια 300mJ.



Σχήμα 2.29 – Διαχρονική εξέλιξη της κατανομής ενεργού Βορίου σε SOI 200-50 με ράβδωση 50nm υπό παλμό 20ns και ενέργεια 300mJ.

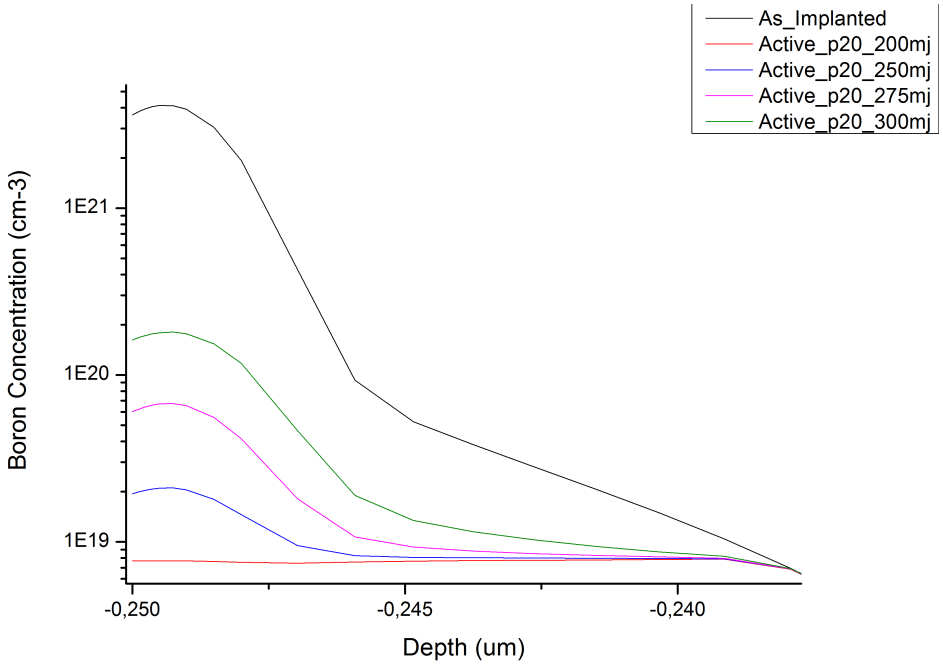
Μετά τις προσομοιώσεις για πλάτος 50nm του πυριτικού stripe έγιναν δοκιμές για 100nm stripe πάντα διατηρώντας τα πάχη των στρωμάτων οξειδίου και ανώτερου πυριτίου στα 200 και 50 nm αντίστοιχα. Η θερμοκρασιακή κατανομή που προέκυψε για 20ns παλμό και ίδιες ενέργειες με τις προηγούμενες προσομοιώσεις φαίνεται στο **Σχήμα 2.30**. Παρατηρούμε ότι έχουμε αρκετά υψηλότερες θερμοκρασίες στην κορυφή της διάταξης σε σχέση με την περίπτωση της ράβδωσης πάχους 50nm, περίπου 200 με 250 βαθμούς υψηλότερες που αγγίζουν και ξεπερνούν το σημείο τήξης, ενώ αντίθετα στο υπόστρωμα πυριτίου δεν παρατηρούνται πλέον το ίδιο υψηλές θερμοκρασίες. Αυτό οφείλεται στο μεγαλύτερο πλάτος του stripe που έχουμε.



Σχήμα 2.30 – Θερμοκρασιακή κατανομή σε SOI 200-50 με ράβδωση 100nm υπό παλμό 20ns.

Υπενθυμίζουμε ότι η θερμοκρασία μετράται στον κατακόρυφο άξονα που περνάει απο το κέντρο (κατα y) της ράβδωσης. Έτσι το κομμάτι του υποστρώματος πυριτίου που αντιστοιχεί στην θέση κάτω ακριβώς απο τη θέση της ράβδωσης προστατεύεται απο την ακτινοβολία αφού αυτή απορροφάται απο τη ράβδωση. Θερμαίνεται μόνο απο τη μεταφορά θερμότητας απο τα πλαϊνά ακάλυπτα μέρη του υποστρώματος που εκτίθενται στην ακτινοβολία την διερχόμενη απο το οξείδιο. Έτσι όσο μεγαλύτερο πλάτος stripe έχουμε το αντίστοιχο

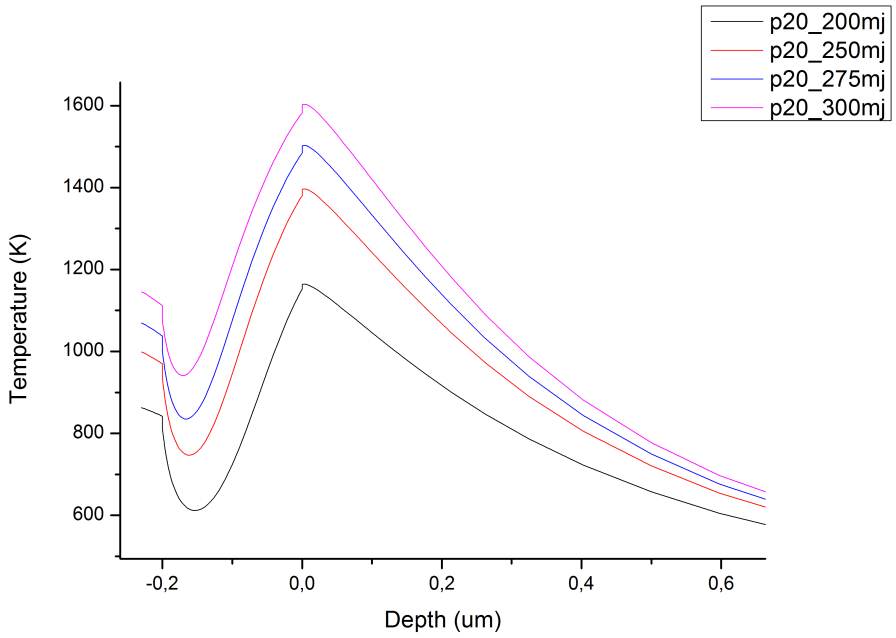
κομμάτι του υποστρώματος όλο και περισσότερο προσομοιάζει στην συμπεριφορά με το επίπεδο SOI. Εμφανές είναι αυτό το φαινόμενο και στο **Σχήμα 2.22** που παραθέσαμε στην αρχή της παραγράφου. Την αντίστοιχη ενεργοποίηση των προσμίξεων Βορίου βλέπουμε στο **Σχήμα 2.31**



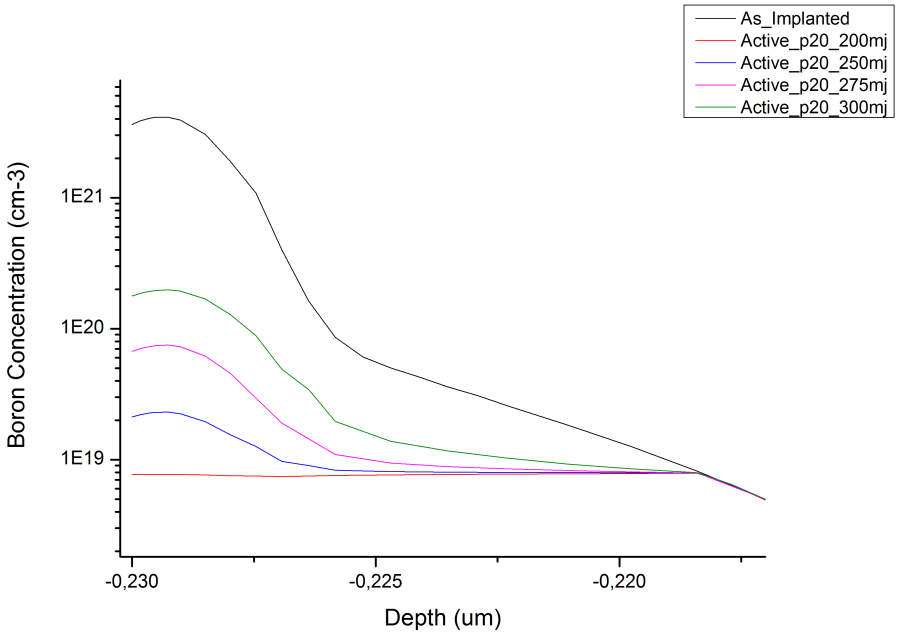
Σχήμα 2.31 – Κατανομή ενεργών προσμίξεων σε SOI 200-50 με ράβδωση 100nm υπό παλμό 20ns.

Εδώ παρατηρούμε ότι η ενεργοποίηση κινείται στα ίδια επίπεδα με την περίπτωση της ράβδωσης πλάτους 50 nm όμως εδώ οι θερμοκρασίες στην ράβδωση είναι αρκετά υψηλότερες οπότε αυτή η εκδοχή είναι λιγότερο προτιμητέα.

Τέλος μπορούμε να παραθέσουμε και τα αποτελέσματα για ακόμα μικρότερες διαστάσεις της ράβδωσης πυριτίου όπου έχουμε οξείδιο με πάχος 200nm, και η ράβδωση έχει πάχος/ύψος 30nm (πάχος στρώματος πυριτίου) και πλάτος 20nm. Σε αυτή την περίπτωση αναμένουμε λόγω της πολύ μικρής ράβδωσης οι θερμοκρασίες σε αυτήν να είναι μικρότερες σχετικά με το υπόστρωμα πυριτίου το οποίο θα απορροφά μεγαλύτερη ποσότητα ακτινοβολίας. Υπό ακτινοβόληση παλμού 20ns λοιπόν τα παραπάνω επαληθεύονται στο **Σχήμα 2.32** με την ενεργοποίηση του Βορίου να κινείται στα ίδια επίπεδα, **Σχήμα 2.33**.



Σχήμα 2.32 – Θερμοκρασιακή κατανομή σε SOI 200-30 με ράβδωση 20nm υπό παλμό 20ns.



Σχήμα 2.33 – Κατανομή ενεργών προσμίξεων σε SOI 200-30 με ράβδωση 20nm υπό παλμό 20ns.

Έτσι έχουμε καλή ενεργοποίηση Βορίου και σχετικά χαμηλές θερμοκρασίες στην ράβδωση του πυριτίου αλλά οι πολύ μεγάλες θερμοκρασίες στο σύνορο οξειδίου - υποστρώματος παραμένουν. Και σε ενδεχόμενη αύξηση της ενέργειας ακτινοβόλησης μπορούν να ξεπεράσουν αρκετά το όριο της τήξης. Υπό συνθήκες που η τήξη του υλικού στο σύνορο οξειδίου - υποστρώματος δεν μας απασχολούν μπορούμε να κάνουμε χρήση λεπτών ραβδώσεων και να δοκιμάσουμε μεγαλύτερες ενέργειες που ίσως να δώσουν μεγαλύτερα επίπεδα ενεργοποίησης προσμίξεων. Σε αντίθετη περίπτωση το όριο της τήξης μας περιορίζει στις χαμηλές πυκνότητες ενέργειας.

Κεφάλαιο 3

Ανόπτηση με CO2 laser παλμού ms

Για την ανόπτηση των δοκιμίων με laser εκτός απο το KrF κάναμε και μερικές δοκιμές ακτινοβόλησης με CO_2 laser έτσι ώστε να δούμε πώς διαμορφώνονται οι θερμοκρασίες στο δοκίμιο και η ενεργοποίηση των προσμίξεων υπο ακτινοβόληση ενός διαφορετικού τύπου laser απο το KrF. Το CO2 είναι απο τα πιο ισχυρά και αποδοτικά laser και ήδη χρησιμοποιείται σε πολυάριθμες εφαρμογές στην τεχνολογία, έτσι αν μπορούσε να χρησιμοποιηθεί και στην ανόπτηση του πυριτίου και πολύ μικρών δομών παρουσιάζοντας καλά επίπεδα ενεργοποίησης των προσμίξεων θα ήταν μια πολύ καλή επιλογή.

Τα χαρακτηριστικά του διαφέρουν αρκετά απο αυτά του KrF με μία βασική να είναι η διάρκεια του παλμού ή η διάρκεια της ακτινοβόλησης. Αυτές οι διαφορές απαιτούν διαφορετική προσέγγιση κατα τη δημιουργία των κατάλληλων αλγορίθμων έτσι ώστε να επιτευχθεί η προσομοίωση της λειτουργίας του. Η χρήση του εν λόγω laser για ανόπτηση δοκιμίων δεν είναι ακόμα ευρέως ανεπτυγμένη οπότε και στο Sentaurus δεν υπάρχει προκαθορισμένο μοντέλο προσομοίωσης της CO2 ακτινοβολίας laser. Έτσι, όπως θα δούμε παρακάτω έπρεπε αναγκαστικά να ορίσουμε κάποιες βασικές ιδιότητες και εξισώσεις του "χειροκίνητα". Επίσης οι αλγόριθμοι που κατασκευάστηκαν και υλοποιούν την ανόπτηση με το CO2 είναι αρκετά απαιτητικοί σε υπολογιστική δύναμη, λόγω των πολλών παραμέτρων που μπαίνουν στην αλληλεπίδραση ακτινοβολίας και ύλης για το συγκεκριμένο laser, και οι προσομοιώσεις μπορούν να διαρκέσουν πολλές ώρες. Έτσι στις προσομοιώσεις μας φτάσαμε μόνο μέχρι την ανόπτηση σε SOI και δεν προχωρήσαμε στην εγχάραξη του πυριτίου πάνω απο το οξείδιο. Παρακάτω θα δούμε τα βασικά χαρακτηριστικά του laser, πως

αυτό προσομοιώθηκε με το πρόγραμμα Sentaurus και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων μας.

3.1 Το CO2 laser

Το laser διοξειδίου του άνθρακα ανήκει στην κατηγορία των δονητικών - περιστροφικών lasers όπως ονομάζονται λόγω της παραγωγής ακτινοβολίας laser μέσω μεταπτώσεων μεταξύ των δονητικών επιπέδων του μορίου του CO2. Το αέριο μείγμα που χρησιμοποιείται δεν αποτελείται μόνο απο διοξείδιο του άνθρακα αλλα συμπληρώνεται και απο άζωτο N_2 και ήλιο He τα οποία χρησιμοποιούνται για την βελτίωση της αποδοτικότητάς της δράσης laser. Το μόριο του CO2 είναι τριατομικό και παρουσιάζει τρείς διαφορετικούς τρόπους ταλάντωσης, άρα τρία διαφορετικά δονητικά ενεργειακά επίπεδα. Η διέγερση του μορίου στο ψηλότερο ενεργειακά δονητικό επίπεδο και η δημιουργία αντιστροφής πληθυσμών παράγει την δράση laser καθώς το μόριο αποδιεγείρεται προς τις άλλες δύο χαμηλότερες ενεργειακά δονητικές καταστάσεις.

Οι τρείς ρυθμοί που αντιστοιχούν στα τρία δονητικά επίπεδα είναι ο **συμμετρικός τρόπος έκτασης**, ο **ρυθμός κάμψης** και ο **ασύμμετρος τρόπος έκτασης** όπως ονομάζονται. Τα ενεργειακά επίπεδα τώρα μπορούν να συμβολιστούν με τη χρήση τριών κβαντικών αριθμών που αναπαριστούν τον αριθμό των κβάντων σε κάθε δονητικό επίπεδο. Ο πρώτος ρυθμός συμβολίζεται με (100), ο δεύτερος με (010) και ο τρίτος με (001) ο οποίος είναι και ο υψηλότερος ενεργειακά. Έτσι διεγειρόμενα τα μόρια του CO2 στο επίπεδο (001) αποδιεγείρονται προς το επίπεδο (100) και παράγουν ακτινοβολία laser 10,6 μm ενώ είναι δυνατή και η αποδιέγερση απο το (001) στο (020) επίπεδο που είναι μια υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση του δεύτερου δονητικού ρυθμού και η οποία παράγει ακτινοβολία 9,6 μm.

Η διέγερση του μείγματος γίνεται μέσω μιας ηλεκτρικής εκκένωσης η οποία διεγείρει τα μόρια στο τρίτο δονητικό επίπεδο, αυτή η αντλητική διεργασία είναι πολύ αποδοτική στο CO2 laser και συμβαίνει μέσω δύο διεργασιών. Ένας τρόπος είναι μέσω κρούσεων των μορίων διοξειδίου του άνθρακα με ηλεκτρόνια τα οποία διεγείρουν τα μόρια με σημαντική προτίμηση την διέγερση στο τρίτο επίπεδο (001), επίσης τα μόρια του CO2 μπορούν να διεγείρονται και μέσω της αλληλεπίδρασης τους με τα μόρια του αζώτου. Τα ηλεκτρόνια διεγείρουν το N_2 του οποίου η διεγερμένη κατάσταση είναι σχεδόν στο ίδιο επίπεδο με το ψηλότερο δονητικό επίπεδο του CO2 και η φύση του ώς διατομικό

μόριο δεν του επιτρέπει γρήγορες αποδιεγέρσεις, έτσι μέσω συγκρούσεων που συμβαίνουν μεταξύ των μορίων CO2 με διεγερμένα άτομα αζώτου εξελίσσεται ένας μηχανισμός μεταφοράς ενέργειας απο τα διεγερμένα N_2 με αποτέλεσμα να διεγείρονται επιπλέον μόρια CO2, μία διαδικασία που είναι επίσης πολύ αποδοτική.

Το δεύτερο δονητικό επίπεδο (010) είναι το χαμηλότερο ενεργειακά και παρουσιάζει μεγάλους χρόνους αποδιέγερσης προς την βασική κατάσταση, αρκετά μεγαλύτερους απο τους αντίστοιχους χρόνους των αποδιεγέρσεων (001) $\rightarrow$ (100) και (001) $\rightarrow$ (020). Έτσι δημιουργείται αντιστροφή πληθυσμών μεταξύ των επιπέδων (001) και (010) και έχουμε δράση laser στα μήκη κύματος που αναφέραμε πιο πάνω. Μάλιστα είναι αρκετά μεγάλος ο χρόνος "ζωής" της εν λόγω κατάστασης που συχνά εμποδίζει τις υψηλότερες αποδιεγέρσεις προς αυτό το επίπεδο αφού αυτό παραμένει κατειλημμένο για μεγάλες διάρκειες. Προκειμένου λοιπόν να έχουμε αποδοτικότερη δράση laser εισάγουμε το μόριο του He στο μείγμα το οποίο αλληλεπιδρά με τα μόρια στο επίπεδο (010) και τα αποδιεγείρει ταχύτερα. Έτσι δεν μπλοκάρονται οι υψηλότερες αποδιεγέρσεις, διατηρώντας όμως την αντιστροφή πληθυσμών, και έτσι η αποδοτικότητα του laser αυξάνεται.[8]

Η μορφή του παλμού που εκπέμπει το CO2 χρονικά έχει top-hat κατανομή, ουσιαστικά σταθερή δηλαδή, και χωρικά γκαουσιανή, ακριβώς το αντίθετο του KrF που περιγράψαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Επίσης λόγω του ιδιαίτερου μήκους κύματος των 10,6 μm της ακτινοβολίας του η απορροφητικότητα του πυριτίου υπό την ακτινοβολία του CO2 διαφοροποιείται σημαντικά σε σχέση με το KrF. Στο KrF είχαμε πολύ μικρή εξάρτηση της απορρόφησης απο την θερμοκρασία και απο τις προσμίξεις και ουσιαστικά η απορροφητικότητα ήταν σταθερή και με πολύ μεγάλη τιμή. Στην προκειμένη περίπτωση έχουμε σημαντική εξάρτηση του συντελεστή απορρόφησης απο την θερμοκρασία και απο τον αριθμό των προσμίξεων στο υλικό. Επίσης η ανακλαστικότητα του πυριτίου είναι διαφορετική για αυτό το μήκος κύματος ακτινοβολίας με την τιμή της να είναι χαμηλότερα απο το μισό της αντίστοιχης στο KrF (0.30 και 0.68 αντίστοιχα).

Σύμφωνα με τους Blomberg et al [7] ο συντελεστής απορροφητικότητας του πυριτίου για το laser CO2 δίνεται απο την παρακάτω εξίσωση όπου φαίνεται η εξάρτηση απο την θερμοκρασία T και την συγκέντρωση φορέων N:

$$\alpha(N,T) = \sigma(T)\left[N + n_i(T)\right] + \alpha_0 \tag{3.1}$$

όπου α_0 ο συντελεστής απορρόφησης πλέγματος που ισούται με περίπου 2

cm^{-1}, $n_i(T)$ η συγκέντρωση ενδογενών φορέων η οποία εξαρτάται απο τη θερμοκρασία T και μπορεί να αποδοθεί απο τον τύπο:

$$n_i(T) = 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right) \tag{3.2}$$

και η διατομή $\sigma(T)$:

$$\sigma(T) = CT^{3/2} \tag{3.3}$$

με το $C = 1.9 \times 10^{-20}\ cm^{-2}K^{-3/2}$. Έτσι τελικά η συνολική έκφραση της απορροφητικότητας δίνεται απο την εξίσωση:

$$\alpha(N,T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2} \left[N + 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T}\right)\right] + 2 \tag{3.4}$$

Οι υπόλοιπες θερμικές ιδιότητες του πυριτίου, η ειδική θερμοχωρητικότητα και η θερμοαγωγιμότητα, παραμένουν ίδιες αφού δεν εξαρτώνται απο την διαφορετική ακτινοβολία που δέχεται το πυρίτιο. Η ανακλαστικότητα όπως είπαμε αλλάξει και η τιμή της για την ακτινοβολία του CO2 laser είναι $R = 0.30$. Εδώ πρέπει να αναφέρουμε πώς λόγω της μικρής απορροφητικότητας που παρουσιάζει το πυρίτιο στο laser CO2 στις χαμηλές θερμοκρασίες, η επίτευξη των υψηλών θερμοκρασιών που χρειάζονται για να έχουμε καλή ενεργοποίηση προσμίξεων μέσα στη διάρκεια του παλμού του laser είναι αρκετά δύσκολη και απαιτεί μεγάλες πυκνότητες ενέργειας. Απο διάφορες μελέτες έχει διαπιστωθεί πως μπορούμε να προσπεράσουμε αποτελεσματικά αυτό το πρόβλημα εφαρμόζοντας μία προανόπτηση, θέρμανση στο δοκίμιο που ακτινοβολείται φέρνοντας το στη θερμοκρασία των 600 βαθμών Κελσίου απο όπου στη συνέχεια αρχίζει η ακτινοβόληση και η θέρμανση σε υψηλές θερμοκρασίες έπειτα είναι πιο εύκολη. Έτσι για να προσομοιώσουμε και εμείς σωστά τη λειτουργία της ανόπτησης με το laser CO2 ξεκινάμε την διαδικασία προσομοίωσης της διάχυσης/ανόπτησης με το CO2 αφού πρώτα θερμανθεί το δοκίμιο στους 600-650 βαθμούς Κελσίου. Παρακάτω θα δούμε λεπτομερέστερα πως κατασκευάσαμε τους αλγορίθμους για την προσομοίωση της εν λόγω ανόπτησης και πως υλοποιείται η προσομοίωση της λειτουργίας του CO2.

3.2 Προσομοίωση του CO2 laser με το Sentaurus

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο η προσομοίωση της λειτουργίας του KrF laser με το Sentaurus ήταν σχετικά εύκολη αφού υπάρχει προκαθορισμένο μοντέλο στο πρόγραμμα που υλοποιεί την ακτινοβόληση με laser με τα χαρακτηριστικά που έχει και το KrF. Δηλαδή το πρόγραμμα διαθέτει το κατάλληλο μοντέλο που προσομοιώνει την μορφή του παλμού της ακτινοβολίας και την κατανομή της έντασης στο χρόνο και στο χώρο. Έτσι εμείς το μόνο που έπρεπε να κάνουμε ήταν να ορίσουμε την διάρκεια του παλμού, την πυκνότητα ενέργειας που θα χρησιμοποιούσαμε και τα θερμικά χαρακτηριστικά των υλικών με τα οποία θα ερχόταν σε επαφή η ακτινοβολία. Στην περίπτωση του CO2 όμως δεν υπάρχει αντίστοιχο μοντέλο προκαθορισμένο στο πρόγραμμα. Και αφού οι ιδιότητες του παλμού και της κατανομής της έντασης ακτινοβολίας δεν συμφωνούν με το υπάρχον μοντέλο θα πρέπει να ορίσουμε "χειροκίνητα" κάποια στοιχεία που θα υλοποιήσουν την διαδικασία ακτινοβόλησης, όπως την κατανομή της έντασης στο χώρο και στο χρόνο, την διάρκεια του παλμού αλλά και την λειτουργία της ανανέωσης της ροής ενέργειας όσο ο παλμός διαρκεί, και άλλα.

Όπως είπαμε ο παλμός του CO2 χωρικά έχει γκαουσιανή μορφή και άρα η πυκνότητα ενέργειας δίνεται απο μια εξίσωση στην μορφή:

$$I(r) = I_0 \exp\left(-\frac{r^2}{w_0^2}\right) \tag{3.5}$$

όπου w_0 είναι η ακτίνα της εστιασμένης περιοχής της δέσμης για την οποία ισχύει $I(w_0) = I_0/e$ ή απο την $I(w_e) = I_0/e^2$ όπου $w_e = \sqrt{2}w_0$ είναι η ενεργός ή πραγματική ακτίνα εστιασμένης περιοχής. Έτσι δεδομένης αυτής της κατανομής για την πυκνότητα ενέργειας η συνολική ισχύς της ακτινοβολίας δίνεται απο τον τύπο:

$$P = 2\pi \int_0^\infty rI(r)dr = \pi w_0^2 I_0 \tag{3.6}$$

όπου το P αναπαριστά την πραγματική ισχύ ακτινοβολίας που δέχεται το υλικό χωρίς τις ανακλάσεις κλπ.

Έτσι πιο συγκεκριμένα στην περίπτωσή μας και για το Sentaurus στο οποίο η μεταβλητή που μετράει εγκάρσια κατα πλάτος πάνω απο το δοκίμιο συμβολίζεται με y, η συνάρτηση της έντασης γίνεται:

$$I(y) = I_0 \exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{w_0^2}\right) \tag{3.7}$$

με το y_0 να συμβολίζει τη συντεταγμένη του μέσου σημείου κατα πλάτος στον άξονα y. Επίσης το I_0 απο τα παραπάνω μπορούμε να το υπολογίσουμε ως:

$$I_0 = \frac{P}{\pi w_0^2} = \frac{P_0(1-R)}{\pi w_0^2} \tag{3.8}$$

όπου P_0 είναι η ονομαστική (αρχική) ισχύς της εκπομπής του laser, και R η ανακλαστικότητα του υλικού.

Εφαρμόζοντας τα παραπάνω σε ένα παράδειγμα για μια ονομαστική ισχύ πχ 60 Watt και για πραγματική ακτίνα εστίασης $w_e = 1.1mm$ έχουμε:

$$I_0 = \frac{60(1-0.3)}{3.14(0.0055/\sqrt{2})^2} = 8844W/cm^2 \tag{3.9}$$

Άρα βλέπουμε πως το I_0 είναι ένας δυναμικός όρος που εξαρτάται απο την ονομαστική ισχύ του laser και την ακτίνα εστίασης στην οποία είναι ρυθμισμένο για την ακτινοβολία. Και η ολική τιμής της έντασης της ακτινοβολίας δίνεται απο το γινόμενο αυτού του δυναμικού όρου με την εκθετική ποσότητα $\exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{w_0^2}\right)$ που είναι συνάρτηση της θέσης κατα y.

Για να τα εισάγουμε τώρα αυτά στον αλγόριθμό μας χρησιμοποιούμε την πηγαία μεταβλητή του προγράμματος που αντιπροσωπεύει την κατα πλάτος μετατόπιση και με μια ακολουθία δήλωσης νέων μεταβλητών κατασκευάζουμε την εκθετική ποσότητα. Στη συνέχεια ορίζουμε και τον δυναμικό όρο του I_0 ο οποίος μεταβάλλεται κάθε φορά που αλλάζουμε την ισχύ του laser ή την ακτίνα εστίασης. Το γινόμενο των δύο τέλος το καταχωρούμε στην μεταβλητή του συστήματος που αντιπροσωπεύει το προφίλ της έντασης της ακτινοβολίας (Heat IntensityProfile). Ένα παράδειγμα βλέπουμε παρακάτω:

```
##--------gaussian pulse-----------##

sel z="y" name=ydim store

#---------- [(y-yo)^2] ------------#
sel z="(ydim-50.0)^2" name=sqx store

#----- (y-yo)^2/[[2*sigma^2]] -----#
sel z="sqx/1252" name=sqx2 store

#---- [[-]](x-mu)^2/(2*sigma^2) ---#
```

```
sel z="-sqx2" name=minus store

#--- exp(-(x-mu)^2/(2*sigma^2)) ---#
sel z="exp(minus)" name=expo store
```

Αυτή η σειρά εντολών δημιουργεί την εκθετική ποσότητα και την αποθηκεύει στη μεταβλητή *expo*. Στη συνέχεια πρέπει να δηλώσουμε στο πρόγραμμα ότι θα κάνουμε χρήση ενός προφίλ έντασης ακτινοβολίας το οποίο θα το ορίσουμε εμείς και για να ενεργοποιήσουμε αυτή τη δυνατότητα χρησιμοποιούμε την μεταβλητή συστήματος *Heat UseIntensityProfile* και της δίνουμε τη λογική τιμή 1.

```
pdbSetBoolean Heat UseIntensityProfile 1
```

Και έπειτα φυσικά μένει να ορίσουμε το προφίλ της έντασης με τον εξής τρόπο:

```
pdbSetString Heat IntensityProfile "8844*expo"
```

όπου πολλαπλασιάζοντας τη μεταβλητή *expo* με τον εκάστοτε δυναμικό όρο της έντασης I_0 έχουμε την πλήρη κατανομή για την ένταση της ακτινοβολίας.

Επόμενο σημαντικό βήμα είναι να ορίσουμε την διάρκεια του παλμού, τις θερμικές ιδιότητες των υλικών που λαμβάνουν μέρος στην ακτινοβόληση και μια σειρά απο άλλες παραμέτρους του συστήματος που χρειάζονται για τους υπολογισμούς και την σωστή επίλυση του μοντέλου. Κάποιες απο αυτές τις παραμέτρους τις είδαμε και στο laser KrF και παραμένουν ίδιες ενώ κάποιες άλλες έχουν να κάνουν με τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά του CO2.

Παραδείγματος χάρη ο παλμός του laser πλέον δεν ορίζεται με την μεταβλητή συστήματος *Heat Pulse* όπως γινόταν στο KrF αφού αυτή η μεταβλητή αντιστοιχεί στο μοντέλο ακτινοβολίας laser του Sentaurus το οποίο όμως όπως είπαμε διαφέρει απο τη λειτουργία του CO2. Εδώ ο παλμός ορίζεται με την μεταβλητή *Heat HeatingTime* η οποία γενικότερα αντιπροσωπεύει το χρονικό διάστημα που υπάρχει ροή ακτινοβολίας, τη διάρκεια του παλμού δηλαδή στην περίπτωση που το μοντέλο προσομοίωσης της laser ακτινοβόλησης ορίζεται απο εμάς. Έτσι πχ για 10 ms παλμό θα είναι:

```
pdbSet Heat HeatingTime 10
```

Επίσης ένα άλλο χαρακτηριστικό του CO2 laser είναι όπως είπαμε το γεγονός ότι χωρικά ο παλμός δεν έχει σταθερή κατανομή της έντασης αλλά αυτή μεταβάλλεται κατα πλάτος (y) σε γκαουσιανή μορφή. Στο KrF είχαμε σταθερή

χωρική κατανομή κατα y και έτσι κατα ένα μεγάλο βαθμό η προσομοίωση μπορούσε να προσεγγιστεί ώς μονοδιάστατη, δηλαδή οι σημαντικότερες μεταβολές της θερμοκρασίας πχ συνέβαιναν κατα βάθος του υλικού, δηλαδή κατα την διάσταση x. Τώρα που έχουμε την γκαουσιανή καμπύλη της έντασης κατα y στο CO2 υπάρχουν διαφοροποιήσεις καθώς οι θερμότητα κινείται κατα βάθος του υλικού. Έτσι πρέπει να εισάγουμε μια υπολογιστική παράμετρο του προγράμματος η οποία επεκτείνει και προς τα πλάγια το πεδίο υπολογισμού των εξισώσεων. Είναι κάτι αντίστοιχο της *ExtendBottom* που χρησιμοποιήθηκε στο KrF και συνήθως συνοδεύεται απο την *Heat ReflectSide* με την οποία επιλέγουμε προς τα πού θα επεκταθεί το πεδίο των υπολογισμών. Εδώ στην περίπτωση του CO2 η χρήση της *ExtendBottom* δεν είναι απαραίτητη.

Όσον αφορά τις θερμικές ιδιότητες τώρα του πυριτίου όπως αναφέραμε και παραπάνω η μόνη που αλλάξει για την περίπτωση του CO2 είναι ο συντελεστής απορροφητικότητας τον όποιο και ορίσαμε παραπάνω ως:

$$\alpha(N,T) = 1.9 \times 10^{-20} T^{3/2} \left[N + 3.87 \times 10^{16} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{7020}{T} \right) \right] + 2 \tag{3.10}$$

Εδώ για να εισάγουμε την συγκέντρωση προσμίξεων ανά σημείο που γίνονται οι υπολογισμοί θα χρησιμοποιήσουμε την κατανομή των προσμίξεων που προκύπτει μετά την εμφύτευση. Μετά την εμφύτευση αποθηκεύουμε την κατανομή των εμφυτευμένων ιόντων σε μία μεταβλητή (πίνακα) την οποία και χρησιμοποιούμε μέσα στη συνάρτηση της απορροφητικότητας. Έτσι για κάθε κομβικό σημείο που επιλύεται η εξίσωση θερμότητας αντιστοιχεί η αντίστοιχη τιμή της συγκέντρωσης προσμίξεων σε αυτό το σημείο. Ο ορισμός της απορροφητικότητας λοιπόν γίνεται ώς εξής:

Μετά την εμφύτευση έχει εκτελεσθεί η εντολή:

```
sel z="Boron" name=Zbor store
```

η οποία καταχωρεί την κατανομή των προσμίξεων στη μεταβλητή *Zbor*. Έτσι ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης ορίζεται ως:

```
pdbSetString Silicon Absorptivity
\ {1.9*1e-20*HeatTempK^1.5*(Zbor-4.73*1e18+1.14*1e16*HeatTempK+ \
4.56*1e12*HeatTempK^2-2.93*1e10*HeatTempK^3+1.92*1e7*HeatTempK^4)+2}
```

σύμφωνα με τη συνάρτηση που παραθέσαμε παραπάνω.

Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος που χρησιμοποιούνται και αναφέραμε πιο πάνω ορίζονται σύμφωνα με τα παρακάτω:

```
pdbSetDouble Silicon MassDensity 2.33

pdbSetString Silicon SpecificHeatCapacity \
{1000*(0.81+1.3*1e-4*HeatTempK-1.26*1e+4*HeatTempK^(-2))}
#Units:J/K*Kg

pdbSetString Silicon ThermalConductivity
 \ {0.235+4.45*exp(-HeatTempK/247)}
#Units: W/K*cm

## --- structure extension for heat simulation ----#
pdbSetDouble Heat SideExtension 200
pdbSetSwitch Heat ReflectSide  Left
pdbSetBoolean Heat ExtendBottom 0
pdbSetDouble Heat WaferThickness 700

# ---- update heat generation rate ----
pdbSetBoolean Heat UpdateHeatRate 1

# ---- time stepping controls ----
pdbSetDouble Heat TimeSampleSize 20
pdbSetDouble Heat MinTimeStep 1e-4
pdbSetDouble Heat MaxTimeStep 2e-4
```

Έτσι αφού κατασκευάσαμε σύμφωνα με τα παραπάνω τον αλγόριθμο για την υλοποίηση της ανόπτησης με το laser CO2, πραγματοποιήσαμε ακτινοβολήσεις για bulk πυρίτιο και επίπεδο SOI. Παρακάτω θα δούμε αναλυτικότερα τα αποτελέσματα και τα προφίλ κατανομών θερμοκρασίας αλλά και προσμίξεων που προέκυψαν και πως αυτά διαφέρουν απο το KrF.

3.3 Ανόπτηση δισκιδίου - Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

Όπως θα δούμε τα αποτελέσματα των ακτινοβολήσεων με το CO2 laser διαφέρουν αρκετά απο αυτά του KrF. Ο μεγαλύτερης διάρκειας παλμός (κατα έξι τάξεις μεγέθους) που το διακρίνει και η διαφορετική φύση της απορρόφησης

υπό τη συγκεκριμένη ακτινοβολία δίνει πιο ομαλές θερμοκρασιακές κατανομές. Η διαδικασία εξακολουθεί να είναι ταχεία ανόπτηση όμως σχετικά με τους παλμούς ns οι παλμοί ms του CO2 παρέχουν αρκετό χρονικό διάστημα για τη θερμότητα να διαχέεται περισσότερο απο ότι στο KrF.

Ένα παράδειγμα που απορρέει απο αυτό το γεγονός είναι η μακράν λιγότερη εμφάνιση εγκλωβισμού της θερμότητας απο το οξείδιο κατα τις ακτινοβολήσεις σε SOI. Βέβαια η απορροφητική συμπεριφορά του οξειδίου είναι διαφορετική απο ότι στο KrF κατι που συνδράμει επίσης σε αυτό το φαινόμενο όπως θα δούμε. Άξιο αναφοράς είναι το γεγονός ότι ενώ στις ακτινοβολήσεις σε bulk πυρίτιο η μέγιστη ισχύς του laser όπου δεν είχαμε τήξη ήταν περίπου στα 64W, στην ακτινοβόληση SOI η αντίστοιχη μέγιστη ισχύς για μη τήξη ήταν μόλις 6-7W μικρότερη περίπου στα 57-58W. Ενώ στην περίπτωση του KrF για τις ακτινοβολήσεις σε SOI έπρεπε να μειώσουμε τις τιμές ενέργειας περίπου κατα το ήμισυ για να μην έχουμε τήξη του ανώτερου στρώματος πυριτίου.

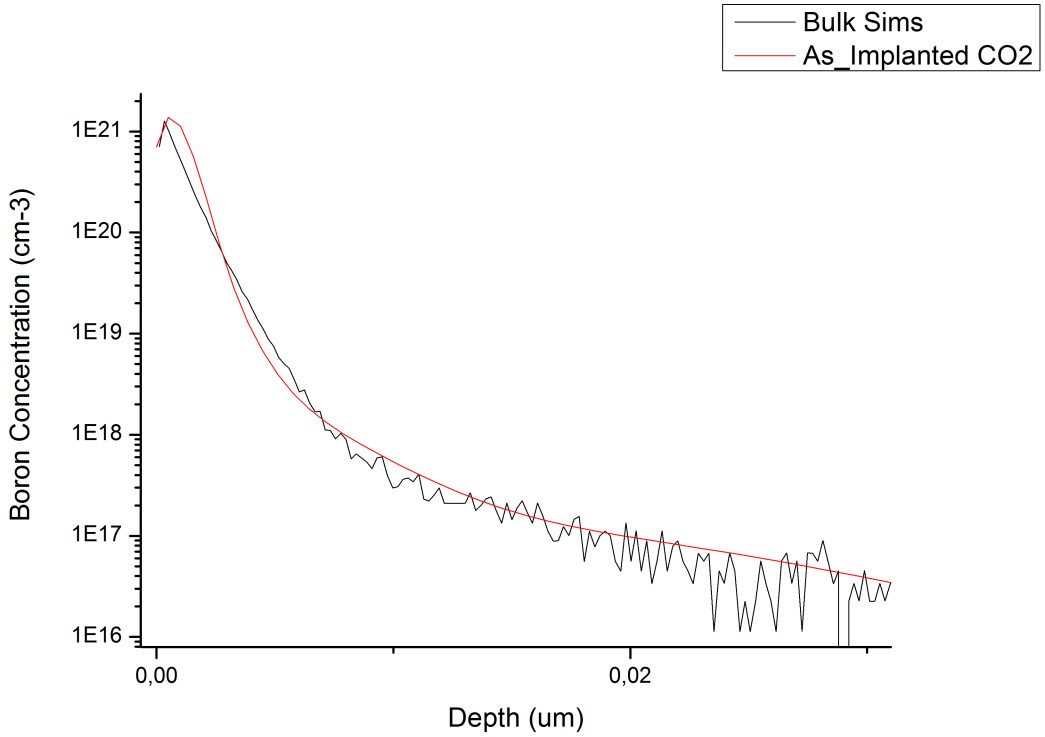
Αρχικά έγιναν ακτινοβολήσεις σε σκέτο όγκο πυριτίου για παλμό του laser στα 10ms και ένα εύρος ισχύων απο 56 έως 65 Watt, και έπειτα ακτινοβολήσεις σε επίπεδο SOI με τον ίδιο παλμό και ρυθμίζοντας δοκιμάζοντας ανάλογα τις τιμές της ισχύος του laser ώστε να μην έχουμε τήξη.

3.3.1 Bulk πυρίτιο

Στην περίπτωση του CO2 laser για τις εμφυτεύσεις που έγιναν για την εισαγωγή των προσμίξεων στο δοκίμιο και για το bulk αλλά και για το SOI, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος εμφύτευσης πλάσματος με τις τελευταίες προσθήκες και αναβαθμίσεις των μοντέλων προσομοίωσης του Sentaurus. Το τελευταίο μοντέλο για την προσομοίωση της εμφύτευσης με πλάσμα δεν το διέθετε το πρόγραμμα κατα τη διάρκεια που πραγματοποιήσαμε τις προσομοιώσεις για το KrF οπότε εδώ το χρησιμοποιήσαμε μόνο για τις προσομοιώσεις του CO2. Με χρήση του στοιχείου BF_2 πραγματοποιήσαμε την ακολουθία εμφυτεύσεων κανονικοποιημένων δόσεων και ενεργειών όπως φαίνεται παρακάτω. Το προφίλ της κατανομής των προσμίξεων Βορίου που προκύπτει φαίνεται στο **Σχήμα 3.1**.

```
implant plasma.source=BF2 dose=2e14<cm-2> energy=0.55<keV> \
tilt=0 rotation=0
implant plasma.source=BF2 dose=0.5e12<cm-2> energy=1<keV> \
tilt=0 rotation=0
```

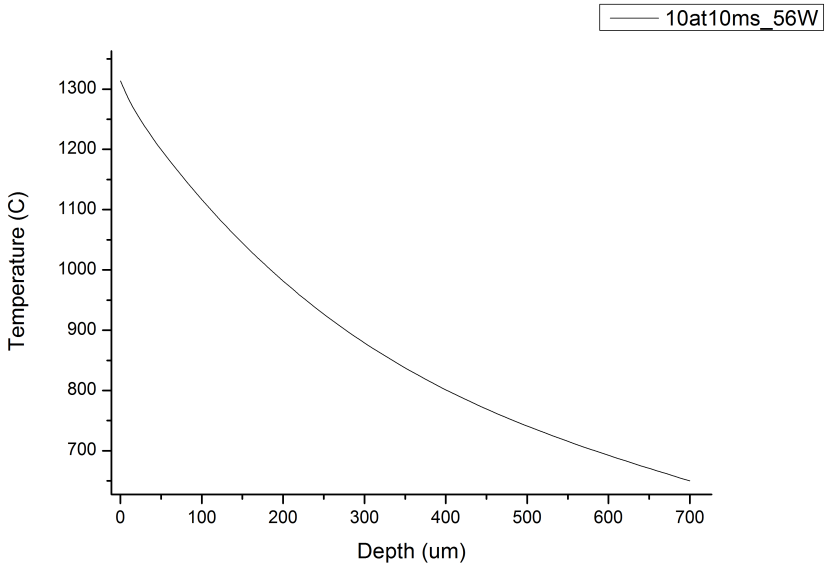
```
implant plasma.source=BF2 dose=0.65e12<cm-2> energy=4<keV> \
tilt=0 rotation=0
implant plasma.source=BF2 dose=0.095e12<cm-2> energy=5.5<keV> \
tilt=0 rotation=0
implant plasma.source=BF2 dose=0.02e12<cm-2> energy=6<keV> \
tilt=0 rotation=0
implant plasma.source=BF2 dose=0.02e12<cm-2> energy=9<keV> \
tilt=0 rotation=0
implant plasma.source=BF2 dose=0.05e12<cm-2> energy=11<keV> \
tilt=0 rotation=0
```



Σχήμα 3.1 – Κατανομή προσμίξεων μετά την εμφύτευση PLAD σε bulk πυρίτιο, προσομοίωση και SIMS.

Εδώ μπορούμε να δούμε και την σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με τις μετρήσεις SIMS ([3]) για μια πραγματική εμφύτευση πλάσματος, όπου και βλέπουμε πόσο καλή είναι η προσέγγιση της προσομοίωσης.

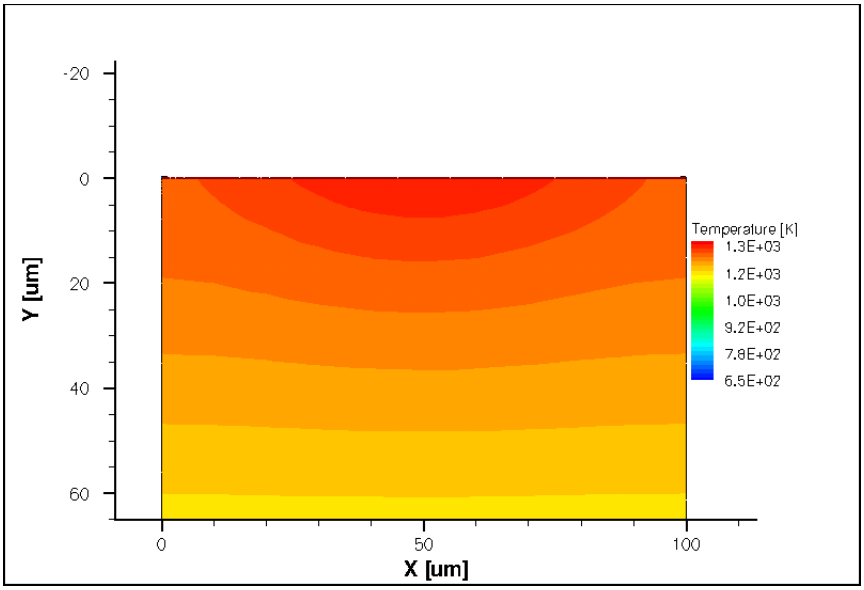
Έπειτα για την ακτινοβόληση του δοκιμίου ορίσαμε τις θερμικές ιδιότητες του πυριτίου όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο και υποβάλαμε το δοκίμιο σε ανόπτηση για ισχείς του laser στα 56, 60 και 65W. Οι δοκιμές έγιναν για παλμό στα 10ms. Όπως είπαμε ο παλμός του CO2 είναι σταθερός χρονικά και επομένως η μέγιστη τιμή της θερμοκρασίας που αναπτύσσεται στο υλικό παρουσιάζεται στο τέλος της διάρκειας του παλμού. Επίσης λόγω της σταθερής τιμής χρονικά ένας παλμός των 6ms στο στιγμιότυπο των 6ms θα αναπτύσσει την ίδια θερμοκρασία με ένα παλμό των 10ms στο στιγμιότυπο των 6ms, κάτι που στο KrF δεν ίσχυε. Έτσι αν θέλουμε παραδείγματος χάρη να συγκρίνουμε δύο διαφορετικούς παλμούς αρκεί να εκτελέσουμε τον μεγαλύτερο σε διάρκεια και να συγκρίνουμε τα στιγμιότυπα που αντιστοιχούν στους δύο παλμούς προς σύγκριση. Στο **Σχήμα 3.2** μπορούμε να δούμε την κατανομή της θερμοκρασίας κατα βάθος του υλικού για παλμό 10ms στο στιγμιότυπο 10ms για ισχύ 56 Watt.



Σχήμα 3.2 – Θερμοκρασία κατα την ανόπτηση με παλμό 10ms και ισχύ 56W σε bulk πυρίτιο.

Επίσης μπορούμε να δούμε και την διαφοροποίηση της μεταφοράς της θερμότητας και κατά το πλάτος του υλικού γιατί όπως είπαμε πλέον στο CO2 δεν έχουμε χωρικά σταθερή ένταση ακτινοβολίας αλλά γκαουσιανή κατανομή της κατα y. Στο **Σχήμα 3.3** βλέπουμε την εμφανώς μεγαλύτερη ένταση ακτινοβο-

λίας στο κέντρο του παλμού όπως αποτυπώνεται απο την εξέλιξη της θερμοκρασίας κατα πλάτος του υλικού.

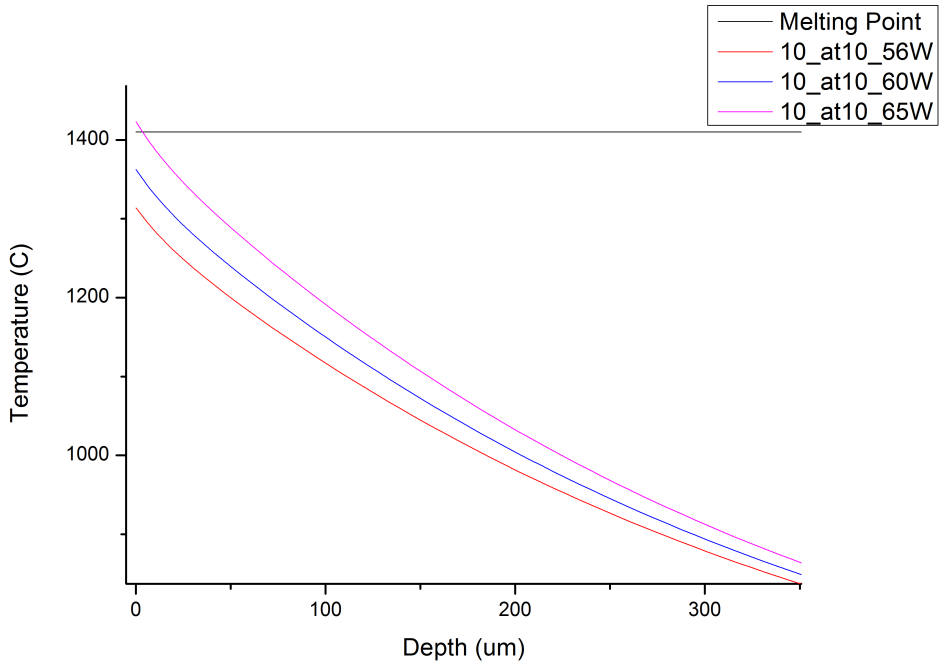


Σχήμα 3.3 – Κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό του υλικού.

Εδώ να αναφέρουμε ότι τα X και Y που φαίνονται στους άξονες του σχήματος είναι τυχαίες ονομασίες των αξόνων, στο σύστημα του Sentaurus το y αντιπροσωπεύει την μετατόπιση κατα το πλάτος του υλικού και το x την μετατόπιση κατα βάθος.

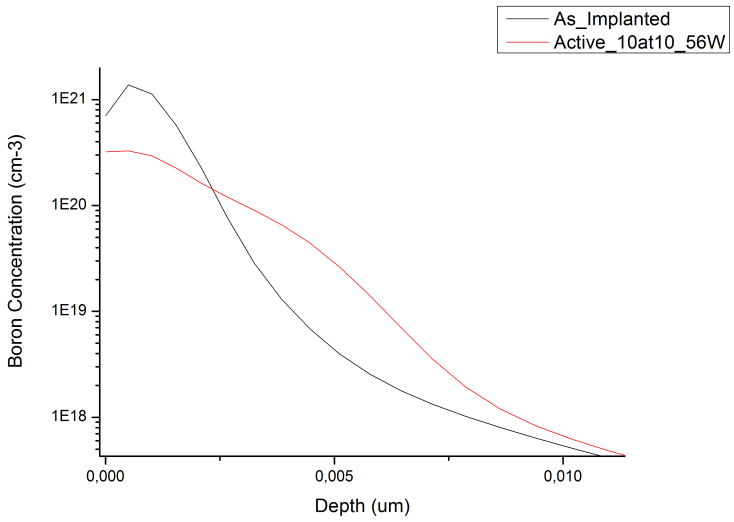
Στα 56 Watt για το bulk πυρίτιο έχουμε καλές θερμοκρασίες, 100 βαθμούς χαμηλότερα απο το σημείο τήξης, ωστόσο αυτό μπορεί να ξεπεραστεί για ισχείς μεγαλύτερες των 64 περίπου Watt. (**Σχήμα 3.4**) Όπως βλέπουμε οι θερμοκρασιακές κατανομές στην ανόπτηση με το CO2 παρουσιάζουν ομοιόμορφη εξέλιξη κατα βάθος του υλικού και έχουμε υψηλότερες θερμοκρασίες σε μεγαλύτερα βάθη του υλικού. Στο KrF μετά το πρώτο μm κατα το βάθος του υλικού η θερμοκρασία ήταν σχεδόν στα επίπεδα του περιβάλλοντος ή της αρχικής θερμοκρασίας της διεργασίας, ενώ στο CO2 βλέπουμε ότι οι θερμοκρασίες φτάνουν στο επίπεδο της αρχικής (650 λόγω της προθέρμανσης του δοκιμίου) στα τελευταία μm του βάθους του δοκιμίου. Αυτό προφανώς έχει να κάνει με αυτό που αναφέραμε και παραπάνω για την διαφορά στις απορροφητικότητες και ανακλαστικότητες του πυριτίου αλλά και στην διάρκεια των παλμών των δύο lasers. Στον παλμό των ms υπάρχει περισσότερος χρόνος για την θερμότητα να διαχυθεί σχετικά με τον παλμό των ns και σε συνδυασμό με

την μικρότερη ανακλαστικότητα που παρουσιάζει το πυρίτιο για την ακτινοβολία CO2 σχετικά με το KrF (δηλαδή μεγαλύτερη διαπερατότητα διαμέσου του υλικού), οι θερμοκρασίες αυξάνονται ομοιόμορφα και σε μεγαλύτερα βάθη.

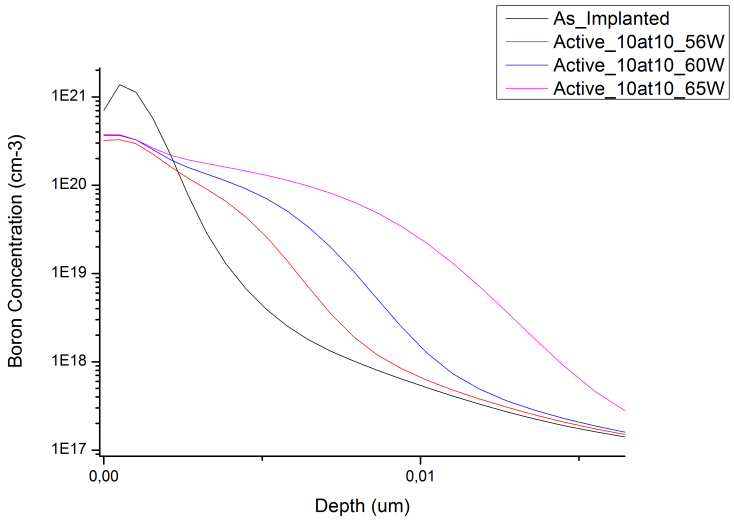


Σχήμα 3.4 – Κατανομή θερμοκρασίας για παλμό 10ms και ισχείς 56, 60 και 65W.

Όσον αφορά τώρα την ενεργοποίηση των προσμίξεων παρατηρούμε πως έχουμε ένα πολύ καλό ποσοστό ενεργοποιημένων προσμίξεων στα πρώτα νανόμετρα του πυριτίου (ανώτερο του 10%) καθώς και εμφανή μετακίνηση προσμίξεων κατά βάθος του υλικού προς σημεία που μετά την εμφύτευση είχαμε λιγότερες προσμίξεις. Αυτό καταδεικνύει την ελαφρά διάχυση των προσμίξεων προς το βάθος του υλικού πράγμα που γίνεται εδώ εμφανές λόγω της μεγαλύτερης διάρκειας του παλμού. Στο **Σχήμα 3.5** βλέπουμε την κατανομή του ενεργού Βορίου για την ακτινοβόληση με 10ms παλμό στα 56W και στο **Σχήμα 3.6** τη διαφοροποίηση και για τις ισχείς των 60 και 65W.



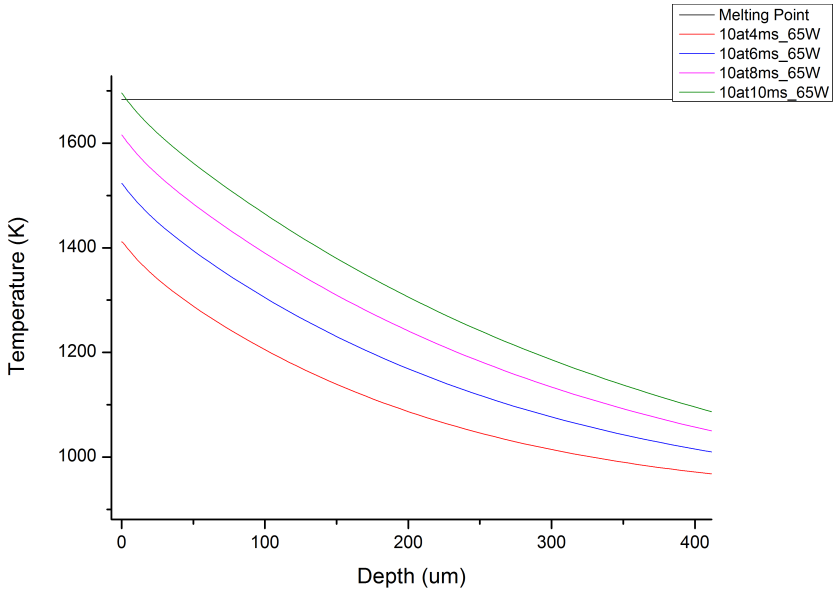
Σχήμα 3.5 – Ενεργές προσμίξεις Βορίου υπό παλμό 10ms και ισχύ 56W.



Σχήμα 3.6 – Ενεργές προσμίξεις Βορίου για ακτινοβόληση παλμού 10ms και ισχείς 56, 60 και 65W.

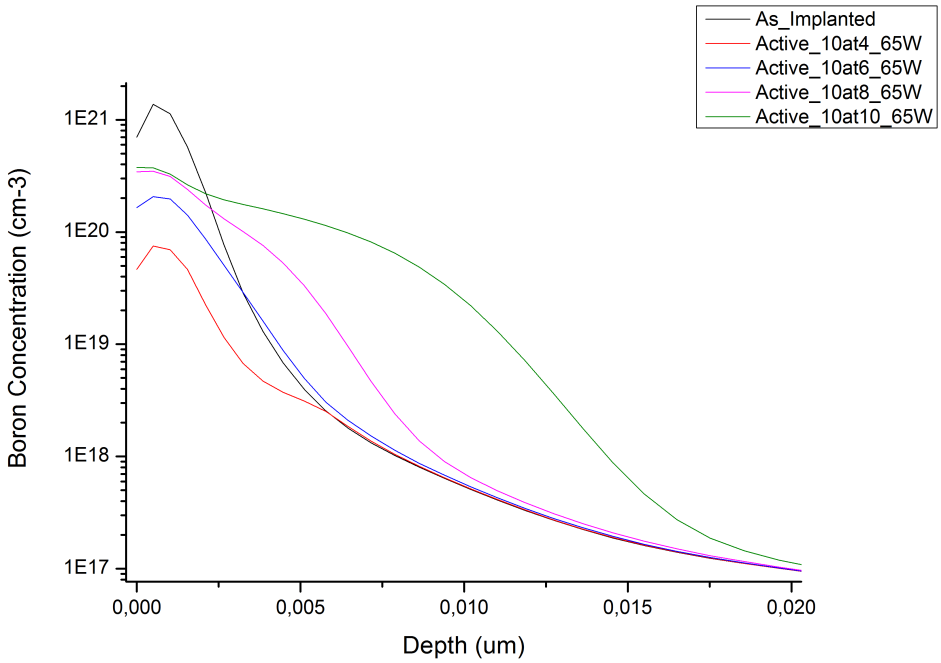
Είναι εμφανές πως για μεγαλύτερες εντάσεις ακτινοβολίας η μέγιστη ενεργοποίηση παραμένει περίπου στα ίδια επίπεδα με μία ελαφρά αύξηση, αλλά έχουμε μεγαλύτερη μετατόπιση των προσμίξεων προς το βάθος του υλικού, πράγμα που συμβαίνει λόγω των μεγαλύτερων θερμοκρασιών που αναπτύσσονται στις μεγαλύτερες εντάσεις και άρα της πιο έντονης διαχυτικής διαδικασίας. Ωστόσο αυτή η διάχυση προς το βάθος του υλικού εξακολουθεί να είναι πολύ μικρής εμβέλειας εφόσον συμβαίνει στα πρώτα 15 με 20 nm του πυριτίου στα οποία αναφερόμαστε.

Επίσης μπορούμε να δούμε την χρονική εξέλιξη των θερμοκρασιακών κατανομών και των προσμίξεων Βορίου. Τα στιγμιότυπα που χρησιμοποιήθηκαν είναι στα 4, 6, 8 και 10 ms τα οποία αντιπροσωπεύουν όπως είπαμε και παραπάνω τους αντίστοιχους παλμούς αν οι μετρήσεις γίνονταν στο τέλος του καθένα απο αυτούς. Στο **Σχήμα 3.7** όπου βλέπουμε την εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής είναι εμφανές το εν λόγω φαινόμενο. Έχουμε σταθερή χρονική κατανομή της έντασης και έτσι η θερμοκρασία στο υλικό είναι σταθερά και ομοιόμορφα αυξανόμενη. Έτσι βλέπουμε την χρονική εξέλιξη του παλμού των 10ms αλλά το διάγραμμα θα ήταν ίδιο αν βλέπαμε 4 διαφορετικούς παλμούς στα τελικά τους στιγμιότυπα.



Σχήμα 3.7 – Χρονική εξέλιξη της θερμοκρασιακής κατανομής για παλμό 10ms και ισχύ 65W.

Στα διαγράμματα βλέπουμε την περίπτωση των 65 Watt ως ένα τυχαίο παράδειγμα, για την οποία η θερμοκρασία στο τελικό στιγμιότυπο των 10ms μόλις ξεπερνάει το σημείο τήξης. Παρακάτω στο **Σχήμα 3.8** φαίνεται η αντίστοιχη χρονική εξέλιξη της ενεργοποίησης των προσμίξεων για τα ίδια στιγμιότυπα.



Σχήμα 3.8 – Χρονική εξέλιξη της κατανομής ενεργού Βορίου για παλμό 10ms και ισχύ 65W.

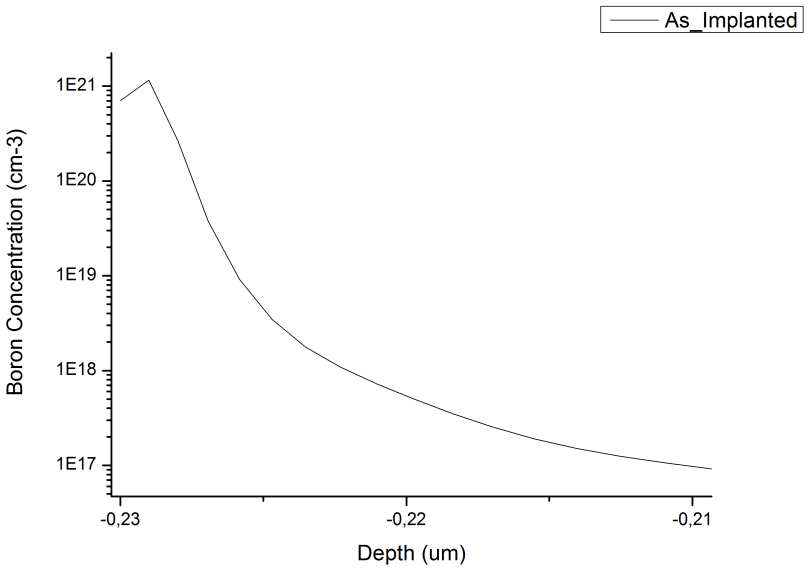
Γενικά παρατηρήθηκε ότι η ενεργοποίηση των προσμίξεων ξεκινάει στα 3-4 ms του παλμού αφού οι θερμοκρασίες ακόμα δεν έχουν φτάσει στα υψηλά επίπεδα που απαιτείται για την ενεργοποίηση. Έτσι, όπως φαίνεται και στο διάγραμμα στα 4ms η συγκέντρωση του ενεργού Βορίου είναι σχετικά χαμηλά και καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία στα επόμενα στιγμιότυπα αυξάνεται και η ενεργοποίηση. Επίσης μετά και τα 6ms γίνεται πιο έντονο και το φαινόμενο της μεταφοράς των προσμίξεων βαθύτερα στο υλικό με τη μέγιστη τιμή ενεργού Βορίου όμως να μην αυξάνεται σημαντικά.

Με τα παραπάνω συνοψίζεται η γενική "συμπεριφορά" του σκέτου πυριτίου και των προσμίξεων εντός αυτού υπό την ανόπτηση με CO2 laser. Στη συνέχεια θα δούμε τι συμβαίνει στην περίπτωση που έχουμε επίπεδο SOI, δηλαδή υπόστρωμα πυριτίου, λεπτό στρώμα οξειδίου και στην κορυφή ένα λεπτό στρώμα

πυριτίου. Έχει ενδιαφέρον να δούμε πώς θα διαφοροποιηθούν οι θερμοκρασιακές κατανομές τώρα που στη διάταξη θα υπάρχει και το μονωτικό οξείδιο και πως οι διαφορετικές θερμοκρασίες θα επηρεάσουν την μέγιστη ένταση του laser που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αλλά και τις συγκεντρώσεις ενεργών προσμίξεων που αυτές θα παράγουν.

3.3.2 Επίπεδο SOI

Τώρα όπως και στην περίπτωση του KrF προχωράμε στην ανόπτηση με το CO2 μιας δομής SOI, δηλαδή στο προηγούμενο υπόστρωμα πυριτίου τώρα έχουμε εναποθέσει ενα λεπτό στρώμα οξειδίου και πάνω απο αυτό ένα λεπτότερο στρώμα πυριτίου. Στο KrF είδαμε πως το στρώμα του οξειδίου επηρέαζε σημαντικά τις θερμοκρασιακές κατανομές και την μετάδοση της θερμότητας στο δισκίδιο, μονώνοντας το υπόστρωμα του πυριτίου και διατηρώντας τις θερμοκρασίες πολύ υψηλές στο ανώτερο στρώμα πυριτίου. Στο CO2 όπως αναφέραμε και παραπάνω το οξείδιο απορροφά διαφορετικά την ακτινοβολία όπως και το πυρίτιο. Επίσης έχουμε πολύ μεγαλύτερη διάρκεια παλμού του laser και πλέον δεν έχουμε την μονοδιάστατη αντιμετώπιση που κατα μεγάλο βαθμό είχαμε στο KrF, αφού ο παλμός του CO2 μεταβάλλει την ένταση του χωρικά κατα το πλάτος y.



Σχήμα 3.9 – Κατανομή προσμίξεων Βορίου μετα την εμφύτευση σε SOI 200-30

Για το επίπεδο SOI (planar SOI) χρησιμοποιήθηκε η ίδια μέθοδος εμφύτευσης όπως και στο bulk πυρίτιο με την προκύπτουσα κατανομή προσμίξεων Βορίου να είναι παρόμοια και η οποία φαίνεται στο **Σχήμα 3.9**

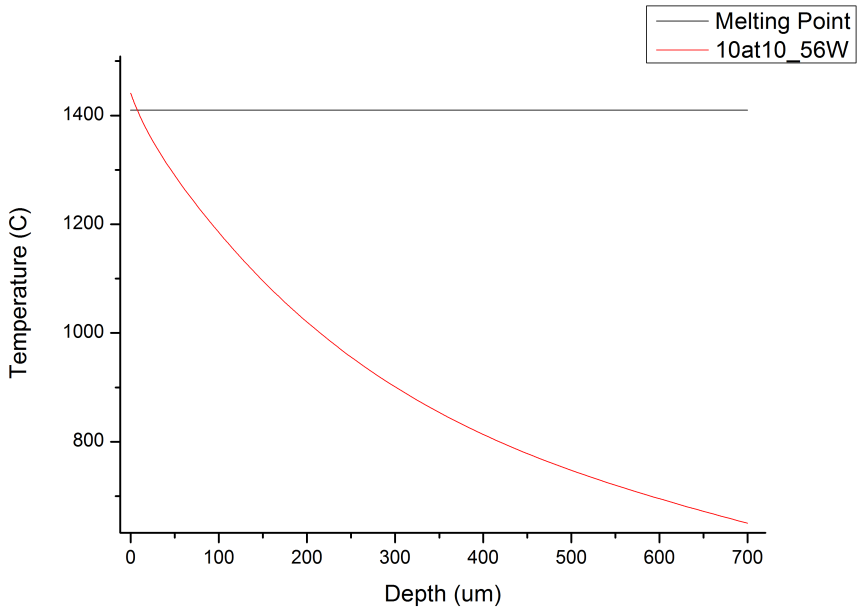
Στη συνέχεια για να προχωρήσουμε στην ακτινοβόληση των διατάξεων SOI πρέπει να ορίσουμε και τις θερμικές ιδιότητες του οξειδίου όπως είδαμε και στην περίπτωση της ακτινοβόλησης με το KrF. Η θερμική αγωγιμότητα, η ειδική θερμοχωρητικότητα και φυσικά η πυκνότητα μάζας δεν εξαρτώνται απο τη διαφορετική ακτινοβολία του CO2 έτσι παραμένουν ίδιες όπως τις ορίσαμε στο KrF. Ωστόσο ο συντελεστής οπτικής απορρόφησης είναι διαφορετικός και πλέον εξαρτάται σημαντικά απο την θερμοκρασία. Για την ακρίβεια, σύμφωνα με διάφορες μελέτες (πχ [12]) είναι ανάλογος της θερμοκρασίας και ο συντελεστής αναλογίας που αντιστοιχεί στο μήκος κύματος των 10.6 μm είναι περίπου 1.2 ($\alpha_{ox} = 1.2 * T$).

Άρα ορίζουμε τις θερμικές παραμέτρους του οξειδίου στον αλγόριθμο με τον παρακάτω τρόπο και μπορούμε να υλοποιήσουμε τις ακτινοβολήσεις.

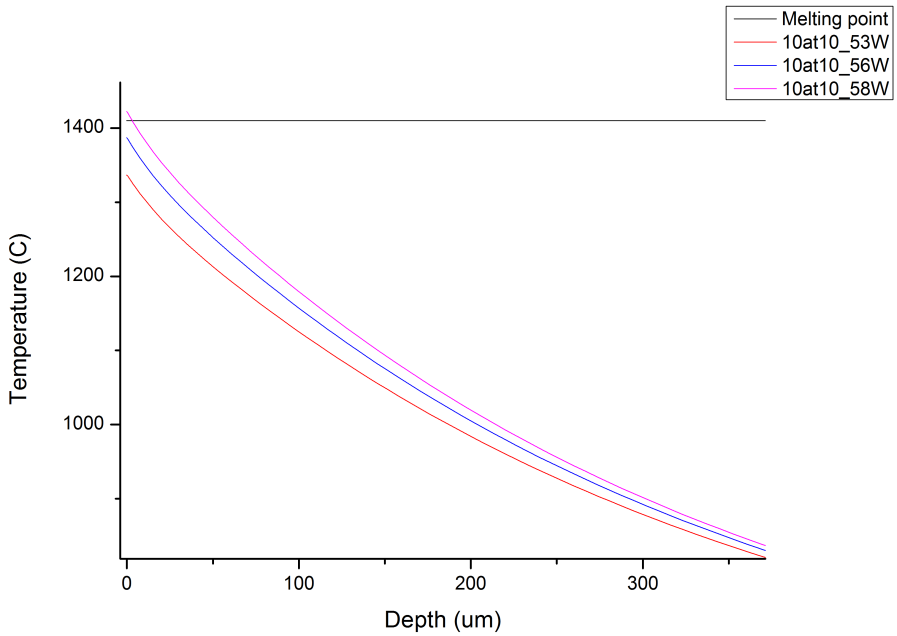
```
#--------Oxide thermal properties-----------#

pdbSetDouble Oxide MassDensity 2.648

pdbSetString Oxide SpecificHeatCapacity /
{1175*exp(2.617e-5*HeatTempK)-1322*exp(-0.003708*HeatTempK)}

pdbSetString Oxide ThermalConductivity {5.81e-11*HeatTempK^3 /
- 9.57e-8*HeatTempK^2 + 6.47e-5*HeatTempK + 0.0006739}

pdbSetString Oxide Absorptivity "1.197*HeatTempK"
```

Οι ακτινοβολήσεις που πραγματοποιήσαμε έγιναν σε διατάξεις SOI 200-50 και 200-30, με προτίμηση στο δεύτερο λόγω της μικρότερης διάστασης και των ελαφρώς καλύτερων θερμοκρασιακών αποτελεσμάτων. Ο παλμός του laser διατηρήθηκε στα 10ms όπως και στο bulk πυρίτιο και έγιναν δοκιμές των ισχύων του laser με κριτήριο την θερμοκρασία στην κορυφή του ανώτερου στρώματος πυριτίου και την αποφυγή της τήξης.

Ένα παράδειγμα της θερμοκρασιακής κατανομής για την διάταξη των 200nm οξειδίου και 50nm πυριτίου στα 56 Watt ισχύος φαίνεται παρακάτω στο **Σχήμα 3.10** ενώ στο **Σχήμα 3.11** έχουμε τις αντίστοιχες κατανομές για 3 δοκιμές ισχύος στην διάταξη των 200nm οξειδίου και 30nm πυριτίου.



Σχήμα 3.10 – Κατανομή θερμοκρασίας για ακτινοβόληση παλμού 10ms και 56W σε SOI 200-50.



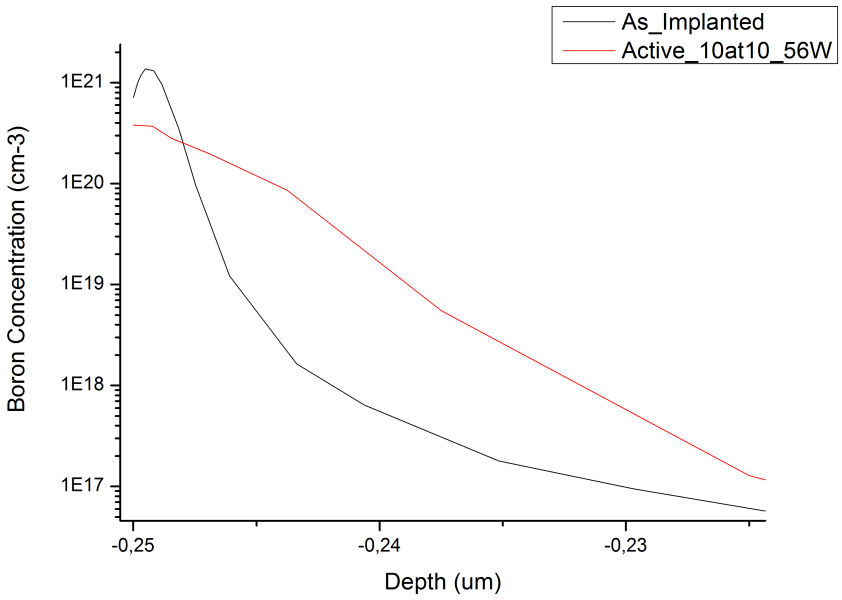
Σχήμα 3.11 – Θερμοκρασιακές κατανομές για ισχείς laser 53, 56 και 58W σε SOI 200-30

Βλέπουμε ότι στα 56W στον συνδυασμό SOI 200-50 η μέγιστη θερμοκρασία στην κορυφή της διάταξης ξεπερνάει το σημείο τήξης ενώ στο SOI 200-30 αυτό συμβαίνει για ισχείς 58W και πάνω.

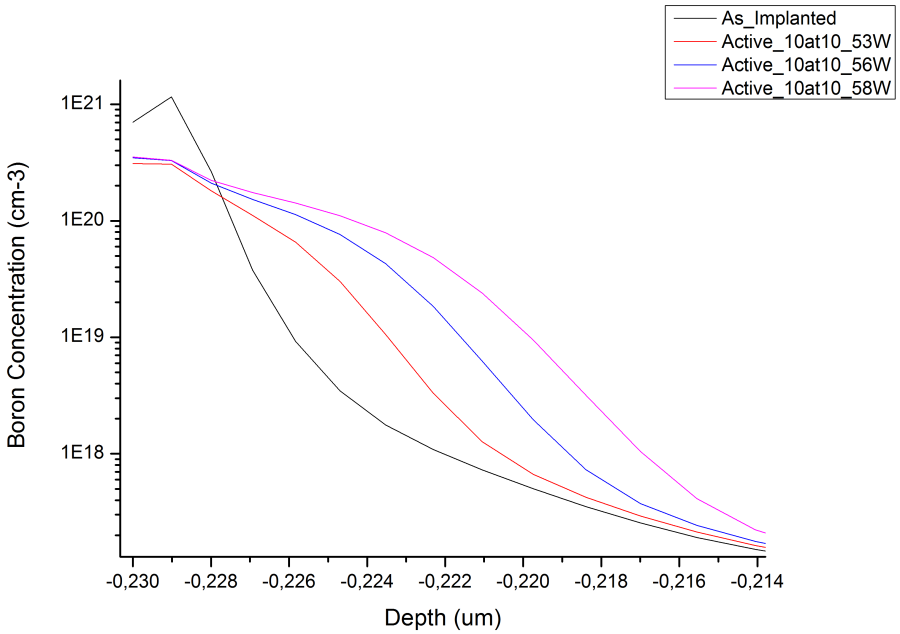
Αν εξαιρέσουμε αυτή τη μικρή διαφορά στις μέγιστες θερμοκρασίες που αναπτύσσονται οι κατανομές των δύο συνδυασμών ελάχιστα διαφέρουν μεταξύ τους όπως διαφέρουν ελάχιστα και με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που είχαμε για την περίπτωση του bulk πυριτίου. Και εδώ οι θερμοκρασιακές κατανομές είναι ομοιόμορφες και η θερμότητα κινείται ομαλά προς το βάθος του υλικού παρά την παρουσία του στρώματος οξειδίου. Αυτό οφείλεται κυρίως στην απορρόφηση του οξειδίου που είναι αναλογικά αυξανόμενη με την αύξηση της θερμοκρασίας, με αποτέλεσμα η θερμότητα να μεταφέρεται πιο εύκολα μέσω του οξειδίου προς τα κάτω καθώς αυξάνουν οι θερμοκρασίες.

Επίσης στην περίπτωση του KrF κατά τις ακτινοβολήσεις σε SOI παρατηρούσαμε πολύ υψηλές θερμοκρασίες στο ανώτερο στρώμα πυριτίου ενώ οι αντίστοιχες θερμοκρασίες του υποστρώματος πυριτίου διατηρούνταν πολύ χαμηλές, στο επίπεδο της θερμοκρασίας περιβάλλοντος. Αυτό συνέβαινε λόγω της θερμικής μόνωσης που παρείχε ουσιαστικά το οξείδιο. Η μεγάλη διαφορά μεταξύ των συντελεστών απορρόφησης πυριτίου και οξειδίου που παρουσιάζεται για το laser KrF, στην περίπτωση του CO2 δεν υπάρχει. Στο KrF το πάνω στρώμα πυριτίου απορροφούσε μαζικά την ακτινοβολία λόγω της πολύ υψηλής απορροφητικότητας του και οι θερμοκρασίες αυξάνονταν σημαντικά με το οξείδιο, όντας ελάχιστα απορροφητικό, να εγκλωβίζει την θερμότητα και αυτή να μην μεταφέρεται προς τα κάτω. Τώρα στο CO2 το πυρίτιο παρουσιάζει αρκετά χαμηλότερη απορροφητικότητα και το οξείδιο με τη σειρά του αρκετά μεγαλύτερη. Και οι δύο απορροφητικότητες εξαρτώνται απο την αύξηση της θερμοκρασίας και έτσι αφενός δεν έχουμε σημαντικό εγκλωβισμό θερμότητας απο το οξείδιο και αφετέρου η μεταφορά αυτής προς το βάθος του υλικού γίνεται πιο ομαλά.

Επίσης και η ενεργοποίηση των προσμίξεων έχει μικρή διαφορά μεταξύ των δύο διατάξεων SOI όπως και με το bulk πυρίτιο. Στο σκέτο πυρίτιο είναι ελαφρώς χαμηλότερη λόγω τον ελαφρώς χαμηλότερων θερμοκρασιών που αναπτύσσονται υπό ίδιες ισχείς ακτινοβολίας σε σχέση με το SOI. Παρακάτω βλέπουμε την ενεργοποίηση για την ακτινοβόληση στο SOI 200-50 και την διαφοροποίηση μεταξύ των ισχύων του laser για το SOI 200-30 (**Σχήματα 3.12** και **3.13**).



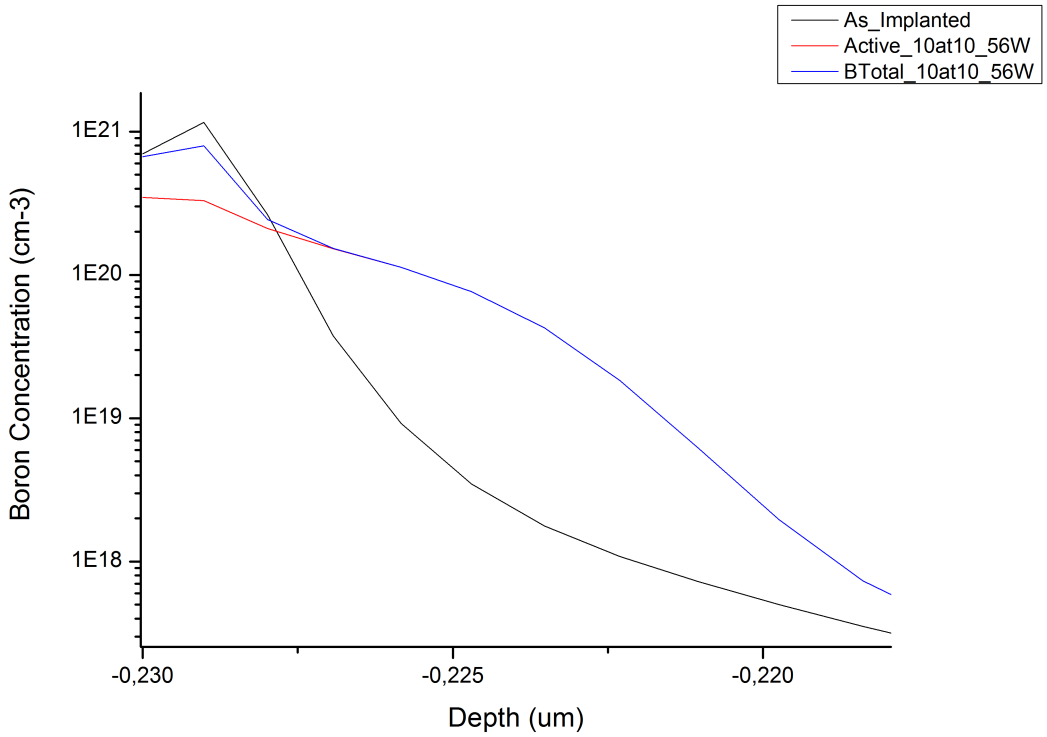
Σχήμα 3.12 – Κατανομή ενεργού Βορίου για ακτινοβόληση παλμού 10ms και 56W σε SOI 200-50.



Σχήμα 3.13 – Κατανομή ενεργού Βορίου για ισχείς laser 53, 56 και 58W σε SOI 200-30

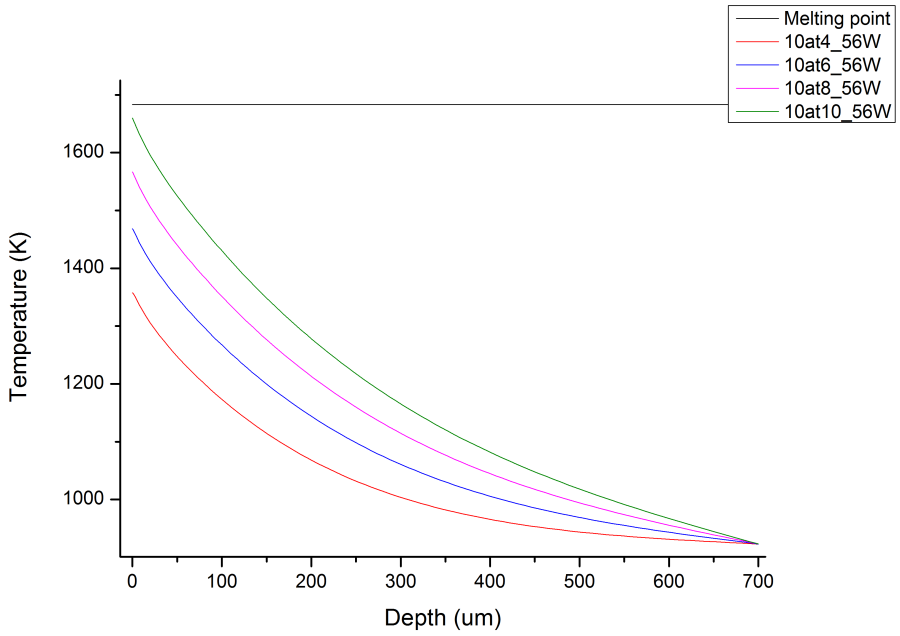
Όπως είδαμε και στο bulk έτσι και εδώ καθώς μεγαλώνει η ισχύς του laser έχουμε όλο και μεγαλύτερη μετακίνηση των ενεργών προσμίξεων προς το βάθος του υλικού και η μέγιστη ενεργοποίηση κινείται σε υψηλά επίπεδα της τάξης του 20-30%. Ομοίως με τις θερμοκρασιακές κατανομές και εδώ υπάρχει ελάχιστη διαφορά μεταξύ των δύο διατάξεων SOI.

Ένα ακόμα διάγραμμα που δείχνει την συμπεριφορά των προσμίξεων Βορίου είναι το παρακάτω όπου βλέπουμε εκτός απο τις κατανομές του εμφυτευμένου Βορίου μετά την εμφύτευση και του ενεργοποιημένου μετά την ανόπτηση, έχουμε και την κατανομή του συνόλου των ιόντων Βορίου (BTotal). Οι μικρότερες συγκεντρώσεις που παρουσιάζει το σύνολο των προσμίξεων στα πρώτα νανόμετρα μαρτυρούν την μεταφορά προσμίξεων κατα την ενεργοποίηση βαθύτερα στο υλικό:

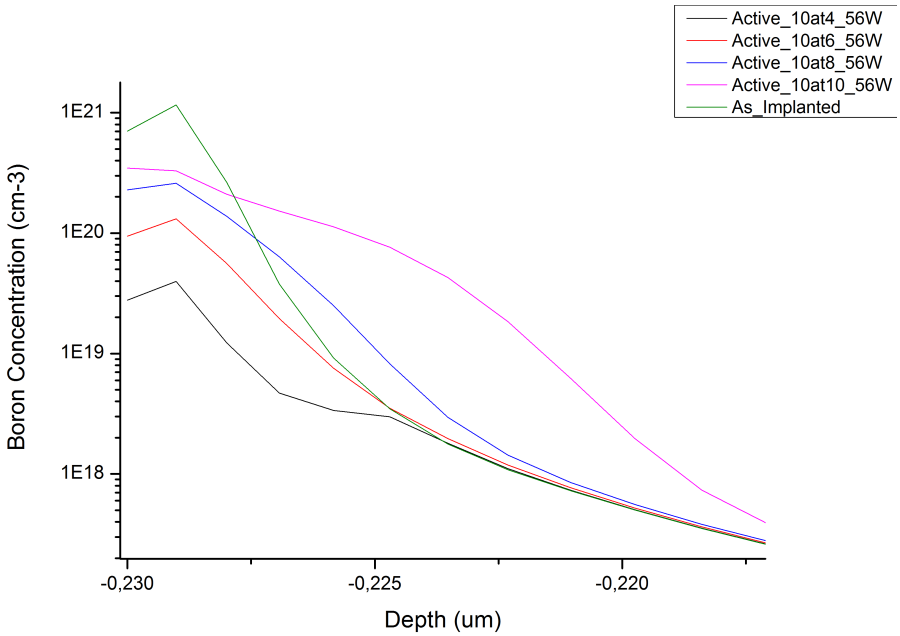


Σχήμα 3.14 – Συγκεντρώσεις Βορίου πριν και μετά την ακτινοβόληση παλμού 10ms και ισχύος 56W σε SOI 200-30.

Τέλος μια εικόνα για την εξέλιξη της ενεργοποίησης καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία κατα τη διάρκεια του παλμού μπορούμε να δούμε στα **Σχήματα 3.15** και **3.16**.



Σχήμα 3.15 – Διαχρονική εξέλιξη θερμοκρασίας κατα την ακτινοβόληση παλμού 10ms και 56W σε SOI 200-30.



Σχήμα 3.16 – Διαχρονική εξέλιξη ενεργού Βορίου κατα την ακτινοβόληση παλμού 10ms και 56W σε SOI 200-30.

Έτσι μπορούμε να δούμε και τις κατανομές που θα έδιναν οι αντίστοιχοι παλμοί 4, 6, και 8 ms αν χρησιμοποιούσαμε αυτούς για την ακτινοβόληση και όχι τον παλμό 10ms. Αλλά όπως αναφέραμε και παραπάνω λόγω της σταθερής χρονικής κατανομής της έντασης κατα τη διάρκεια του παλμού αρκεί να τρέξουμε έναν μεγαλύτερης διάρκειας και τα εκάστοτε στιγμιότυπα του μας δίνουν τα αποτελέσματα των αντίστοιχων παλμών.

Όμοια με το bulk πυρίτιο βλέπουμε την σταθερή και ομοιόμορφη εξέλιξη της θερμοκρασίας λόγω της σταθερής έντασης του παλμού και την βαθμωτή ενεργοποίηση του Βορίου καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται με την ταυτόχρονη μετακίνηση ενεργού Βορίου 5 με 10 nm βαθύτερα στο υλικό.

Εδώ θα είχε ενδιαφέρον να δούμε πως θα διαφοροποιούνταν όλα αυτά αν διαμορφώναμε το ανώτερο στρώμα του πυριτίου στη μορφή ράβδωσης όπως κάναμε στο KrF, αλλά λόγω της ανάγκης για ευρύτερη μελέτη για την υλοποίηση της σωστής προσομοίωσης του προβλήματος, των μεγάλων υπολογιστικών απαιτήσεων (μεγαλύτερων απο τις ήδη μακρόχρονες προσομοιώσεις του SOI) που θα είχαν οι αντίστοιχες προσομοιώσεις και την έλλειψη του αντίστοιχου χρόνου, αυτό δεν κατέστη δυνατό στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Κεφάλαιο 4

Συμπεράσματα

Συμπερασματικά, απο τα παραπάνω αποτελέσματα των προσομοιώσεων βλέπουμε ότι κατά την ανόπτηση δομών επίπεδου SOI και ράβδωσης πυριτίου πάνω σε οξείδιο με το laser KrF μπορούμε να πάρουμε ικανοποιητικές κατανομές ενεργοποίησης προσμίξεων αλλά αναγκαζόμαστε να διατηρούμε τις εντάσεις ακτινοβόλησης χαμηλές λόγω των υψηλών θερμοκρασιών που αναπόφευκτα αναπτύσσονται. Όσον αφορά τους διαφορετικούς παλμούς του laser KrF είδαμε ότι ο παλμός των 10ns μπορεί να επιτύχει υψηλότερα επίπεδα ενεργοποίησης αλλά δίνει και πολύ μεγάλες θερμοκρασίες επίσης που είναι απαγορευτικές για την διάταξη. Αντίθετα ο παλμός των 50nm δίνει πιο χαμηλές θερμοκρασίες αλλά υστερεί των άλλων στην ενεργοποίηση του Βορίου.

Ο παλμός των 20ns είναι αυτός που δείχνει να επιτυγχάνει μια καλή ισορροπία μεταξύ των δύο και δίνοντας αποδεκτές θερμοκρασίες αποδίδει ικανοποιητικά επίπεδα ενεργοποίησης. Λόγω των πολύ υψηλών θερμοκρασιών που αναπτύσσονται στο ανώτερο πυριτικό στρώμα προκειμένου να επιτύχουμε ακόμα υψηλότερα επίπεδα ενεργοποίησης ίσως σε ένα επόμενο στάδιο μελέτης θα μπορούσαν να γίνουν δοκιμές για έκθεση των δοκιμίων σε πολλαπλούς παλμούς ακτινοβολίας. Αφήνοντας αρκετό χρονικό διάστημα μεταξύ των παλμών ώστε να μειώνεται η θερμοκρασία στην διάταξη πριν απο κάθε παλμό, το υλικό θερμαίνεται επαναλαμβανόμενα και θα μπορούσε να μελετηθεί κατα πόσο η ενεργοποίηση αυξάνεται με κάθε κύκλο θέρμανσης.

Στην περίπτωση του CO2 laser κατά την ακτινοβόληση σκέτου πυριτίου και πυριτίου πάνω σε οξείδιο παρατηρούμε ότι μπορούμε να έχουμε πολύ καλά αποτελέσματα ενεργοποίησης προσμίξεων υπό θερμοκρασίες χαμηλότερες απο το σημείο τήξης του πυριτίου, στα επίπεδα των 1250 - 1300 βαθμών Κελσίου. Η ενεργοποίηση φαίνεται να αγγίζει το 30% της εμφυτευμένης συγκέντρωσης

Βορίου σε πολλές περιπτώσεις, και σε σύγκριση με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που πήραμε για bulk πυρίτιο και SOI για KrF ακτινοβόληση είναι αρκετά υψηλότερη. Στο KrF αντιμετωπίσαμε τη μεγάλη απορροφητικότητα του πυριτίου στο συγκεκριμένο μήκος κύματος πράγμα που οδηγούσε εύκολα σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα, και έτσι έπρεπε να διατηρούμε τις πυκνότητες ενέργειας του laser χαμηλά με αποτέλεσμα να μην φτάνουμε σε πολύ υψηλά επίπεδα ενεργοποίησης. Ενώ στο CO2 η απορροφητικότητα του πυριτίου είναι χαμηλότερη και σε συνδυασμό με τον μεγαλύτερης διάρκειας παλμό η απορρόφηση γίνεται ομαλότερα, έχουμε πιο ομοιόμορφη θέρμανση και παίρνουμε καλύτερα αποτελέσματα ενεργοποίησης των προσμίξεων Βορίου.

Όσον αφορά τη διαφοροποίηση μεταξύ παλμών του laser CO2 είδαμε ότι λόγω της σταθερής χρονικής κατανομής της έντασης της ακτινοβολίας ουσιαστικά αυτό που έχει σημασία είναι πότε σταματάμε την διαδικασία της ανόπτησης. Εκτός απο τις περιπτώσεις όπου μελετάμε την κατάσταση του δοκιμίου σε χρονικά στιγμιότυπα μετά το πέρας της διάρκειας των παλμών, μπορούμε να χρησιμοποιούμε έναν μεγάλης διάρκειας παλμό και μελετώντας τα στιγμιότυπα τις εξέλιξής του να παίρνουμε τα αποτελέσματα και για τους μικρότερους παλμούς. Παραδείγματος χάρη αν θέλουμε να δούμε τι αποτελέσματα θα δώσει ο παλμός των 8 ms μπορούμε χρησιμοποιώντας τον παλμό των 10 ms απλά να καταγράψουμε τις κατανομές θερμοκρασίας και προσμίξεων κατα το στιγμιότυπο των 8 ms. Επίσης ο παλμός των 10ms παρατηρήθηκε πως για την πλήρη διάρκεια του δίνει θερμοκρασίες κοντά στο όριο της τήξης στην περιοχή των μέγιστων ισχύων που μπορεί να φτάσει το διαθέσιμο laser CO2 που θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την εργαστηριακή επαλήθευση των αποτελεσμάτων. Έτσι τα 10ms αποτέλεσαν και την μέγιστη τιμή παλμού που μπορούσαμε να επιλέξουμε έτσι ώστε να έχουμε θερμοκρασίες οριακά κάτω απο το σημείο τήξης σε συνδυασμό με πολύ καλά αποτελέσματα ενεργοποίησης των ιόντων Βορίου.

Όπως αναφέραμε και παραπάνω η παρούσα προσπάθεια που σταματάει εδώ θα μπορούσε να συνεχιστεί με την ακτινοβόληση της δομής ράβδωσης και με το CO2, με την δοκιμή έκθεσης των διατάξεων σε πολλαπλούς παλμούς ακτινοβολίας, πιθανώς την εργαστηριακή επαλήθευση και έλεγχο των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων ή και την επέκταση σε πιο πολύπλοκα προβλήματα όπως η ακτινοβόληση δύο ή και πολλαπλών ραβδώσεων στο πυριτικό στρώμα πάνω απο το οξείδιο.

Βιβλιογραφία

[1] Synopsys. Sentaurus process user guide version a-2008.09.

[2] Sami Franssila. Introduction to microfabrication. 2004.

[3] Αντώνιος Π. Φλωράκης. Ταχεία ανόπτηση πυριτίου με χρήση laser σε καθεστώς μη τήξης για το σχηματισμό ρηχών επαφών. 2011.

[4] S. Walther L. Godet T. Buyuklimanli et al. J. vac sci. technol. B 24 (1) (2006) 489.

[5] Peter B. Griffin James D. Plummer, Michael D. Deal. Silicon vlsi technology, fundamentals, practice and modelling. 2000.

[6] Dieter Bäuerle. Laser processing and chemistry. 2011 Fourth Edition.

[7] M. Blomberg K. Naukkarinen T. Tuomi et al. J. appl. phys. 54 (1983) 2327.

[8] O. Svelto. Αρχές των lasers. Εκδόσεις Συμμετρία 1986.

[9] W. Szyszko. Applied surface science. 90 (1995) 325-331.

[10] R.A. Weeks et al. Journal of non-crystalline solids. 149 (1992) 122-136.

[11] P. Richet et al. Geochimica et cosmochimica acta. Vol. 46 (1982) 2639-2658.

[12] Anthony D. McLachlan and Fred P. Meyer. Temperature dependence of the extinction coefficient of fused silica for co2 laser wavelengths. May 1987 Vol. 26 No. 9 APPLIEDOPTICS.