

VILNIAUS UNIVERSITETAS
Kietojo kūno elektronikos katedra
Vyksmų puslaidininkiniuose prietaisuose modeliavimas

Darbas Nr. 1

Priemaišų jonų implantavimo ir jų difuzijos silicio padėkle modeliavimas

Parengė A. Poškus

2007

1. Užduotys

1. Iširti implantuotų priemaišinių atomų erdvinį pasiskirstymą silicio padėkle (**MicroTec** projektas Nr. 1.1).
2. Viename grafike atvaizduoti priemaišinių atomų koncentracijos pasiskirstymo pjūvius išilgai Y ašies (t.y., gilyn į padėklo tūrį), esant įvairioms atkaitinimo trukmėms. Visus pjūvius išsaugoti vėlesnei analizei programos „SibGraf 2D“ duomenų failų pavidalu.
3. Empiriškai nustatyti, kokia reikalinga atkaitinimo trukmė, kad implantuoti jonai tolygiai pasiskirstytų $0.7 \mu\text{m}$ gylyje.
4. Pagal jonų koncentracijos pasiskirstymą, kai nėra atkaitinimo, apytiksliai įvertinti didžiausią implantuotų atomų koncentraciją silicyje (N_{max}) ir implantuotų atomų pasiskirstymo pusplotį ΔR . Apskaičiuoti N_{max} pagal teorinę formulę (7), palyginti teorinį rezultatą su modeliavimo rezultatu.

Žemiau pateiktos priemaišų rūšys ir implantuojamų jonų kinetinės energijos įvairiems variantams.

- | | |
|--|--|
| 1. Boro implantavimas, jonų energija $E = 10 \text{ keV}$. | 18. Boro implantavimas, jonų energija $E = 5 \text{ keV}$. |
| 2. Boro implantavimas, jonų energija $E = 20 \text{ keV}$. | 19. Boro implantavimas, jonų energija $E = 15 \text{ keV}$. |
| 3. Boro implantavimas, jonų energija $E = 40 \text{ keV}$. | 20. Boro implantavimas, jonų energija $E = 30 \text{ keV}$. |
| 4. Boro implantavimas, jonų energija $E = 60 \text{ keV}$. | 21. Boro implantavimas, jonų energija $E = 50 \text{ keV}$. |
| 5. Boro implantavimas, jonų energija $E = 100 \text{ keV}$. | 22. Boro implantavimas, jonų energija $E = 80 \text{ keV}$. |
| 6. Boro implantavimas, jonų energija $E = 150 \text{ keV}$. | 23. Boro implantavimas, jonų energija $E = 120 \text{ keV}$. |
| 7. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 20 \text{ keV}$. | 24. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 10 \text{ keV}$. |
| 8. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 40 \text{ keV}$. | 25. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 30 \text{ keV}$. |
| 9. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 70 \text{ keV}$. | 26. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 50 \text{ keV}$. |
| 10. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 125 \text{ keV}$. | 27. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 100 \text{ keV}$. |
| 11. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 200 \text{ keV}$. | 28. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 150 \text{ keV}$. |
| 12. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 300 \text{ keV}$. | 29. Fosforo implantavimas, jonų energija $E = 250 \text{ keV}$. |
| 13. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 100 \text{ keV}$. | 30. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 50 \text{ keV}$. |
| 14. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 200 \text{ keV}$. | 31. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 150 \text{ keV}$. |
| 15. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 300 \text{ keV}$. | 32. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 250 \text{ keV}$. |
| 16. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 400 \text{ keV}$. | 33. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 350 \text{ keV}$. |
| 17. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 600 \text{ keV}$. | 34. Arseno implantavimas, jonų energija $E = 500 \text{ keV}$. |

Kontroliniai klausimai

1. Integrinių grandinių gamybos technologija.
2. Jonų difuzijos fizikinis mechanizmas.
3. Pirmasis ir antrasis Fiko dėsniai. Difuzijos lygtis.
4. Difuzijos lygtis sprendiniai „baigtinio šaltinio“ atveju ir „begalinio šaltinio“ atveju.
5. Jonų implantavimo metodo esmė. Nuo ko priklauso jonų koncentracijos maksimumo padėtis?
6. Kodėl implantuotų jonų koncentracijos profilis keičiasi, laikui bėgant? Nuo ko priklauso šio kitimo sparta?
7. Kas yra atkaitinimas ir kodėl jis yra reikalingas praktikoje?
8. Difuzijos lygties sprendimas baigtinių skirtumų metodu. Algoritmo stabilumo sąvoka. Išreikštinis ir neišreikštinis algoritmai.

Literatūra

1. **Mouthaan** T. Semiconductor Devices Explained Using Active Simulation. – Baffins Lane, Chichester, England: John Wiley & Sons Ltd., 1999. – 326 p.
2. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов. В 2-х кн. – М.: Мир, 1984.
3. Numerical Recipes in Fortran 77. The Art of Scientific Computing. 2nd Edition. V.1,2. – Cambridge University Press, 1997. – 1486 p.

2. Darbo teorija

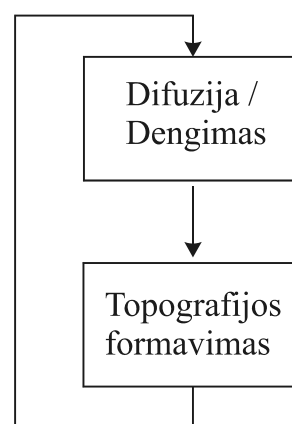
2.1. Integrinės grandinės gamybos procesas

Puslaidininkinės struktūros formavimui reikia atlikti tris elementarius veiksmus:

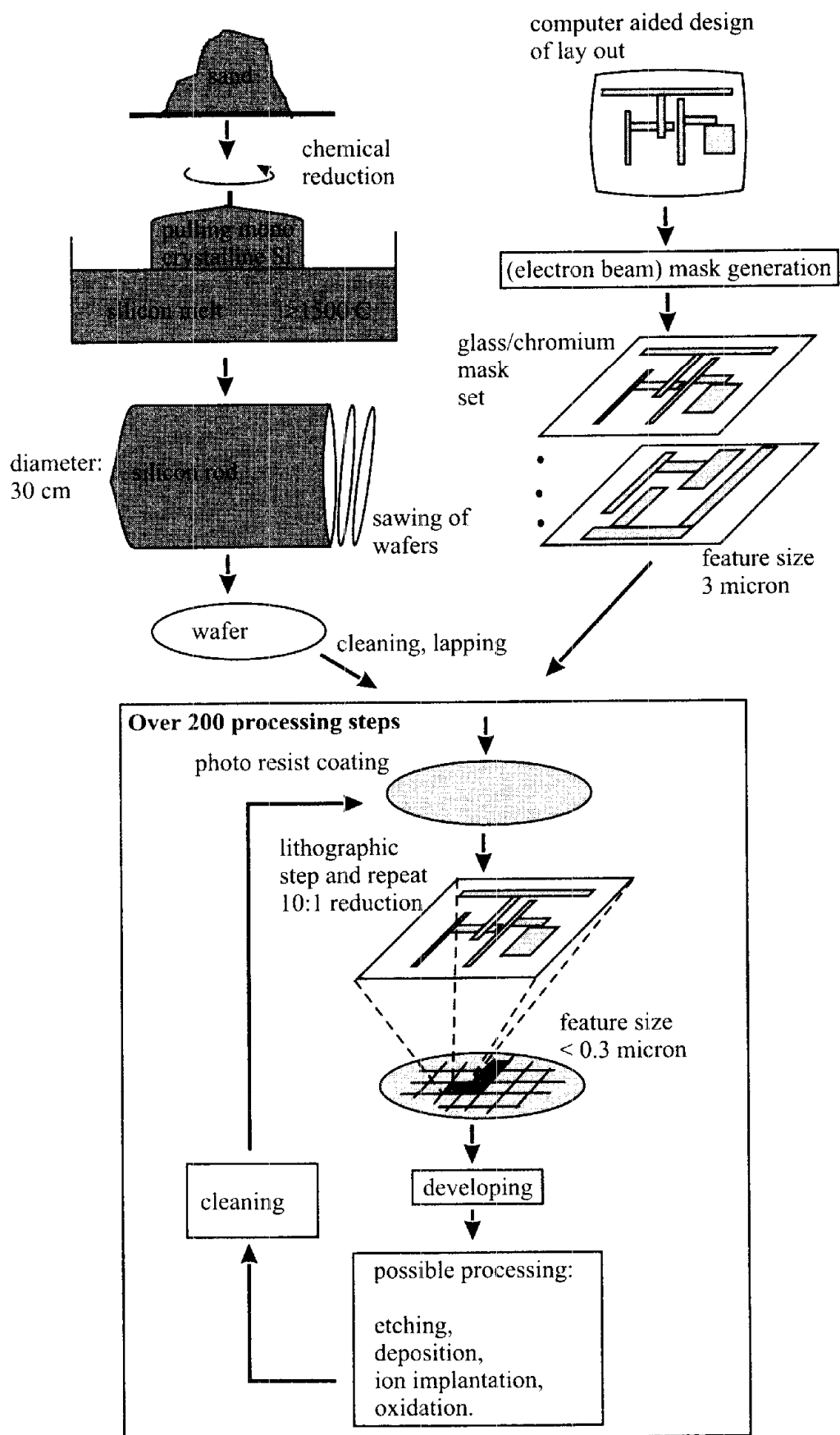
- 1) priemaišų atomai turi būti difuzijos arba jonų implantavimo būdu įvesti į padėklą, kad ant padėklo paviršiaus susidarytų kitokio tipo laidumo sritys (pvz., ištakos ir santakos sritys MDP tranzistoriuje),
- 2) sluoksniai turi būti nusodinti arba užauginti ant padėklo paviršiaus (pvz., SiO₂ sluoksnis ir kontaktai),
- 3) reikalingas būdas formuoti struktūros topografiją (t.y., įvairių sričių ir kontaktų matmenis bei tarpusavio išsidėstymą).

Gaminant integrinę grandinę, reikia nuolat kartoti šiuos tris žingsnius. Išdėstymo (topografijos) veiksmas yra pats dažniausias: po kiekvieno difuzijos arba dengimo žingsnio reikia apibrėžti sekančio sluoksnio topografiją (1 pav.). Tai atliekama fotolitografijos metodu (žr. žemiau).

2 pav. pavaizduota apibendrinta integrinių grandinių gamybos schema. Visų pirma silicis, kuris yra pagrindinė integrinių grandinių sudėtinė medžiaga, yra chemiškai išskiriamas iš smėlio ir išgryninamas. Po to monokristalinis silicio strypas yra užauginamas iš lydalo. Tokių strypų skersmuo siekia 30 cm, o ilgis yra apie metrą. Po to, naudojant deimantinį pjūklą, strypas yra supjaustomas į plokšteles, kurių storis yra apie 1 mm. Kiekviena tokia plokštelė atlieka integrinių grandinių padėklo vaidmenį. Sekantis žingsnis – tai puslaidininkinės struktūros formavimas ant padėklo *fotolitografijos* metodu. Jo esmė yra ta, kad prieš kiekvieną difuzijos arba dengimo žingsnį struktūra padengiama plonu sluoksniu specialios medžiaga, kurios tirpumas priklauso nuo apšvietimo (ši medžiaga vadinama *fotorezistu*). Fotorezisto paviršius apšviečiamas ultravioletine šviesa pro specialų šabloną, kuris atlieka puslaidininkinės struktūros “negatyvo” vaidmenį. Šablonai gaminami iš kvarco stiklo, kuris padengtas chromu. Siekiant padidinti tikslumą, šablonai yra 10 kartų didesni už formuojamą struktūrą, ir yra sumažinami, optiškai projektuojant juos į plokštelę (žr. 2 pav.). Po to paviršius paveikiamas specialiu tirpikliu. Neapšviestose srityse fotorezisto tirpumas yra didelis, todėl jis yra pašalinamas nuo paviršiaus, o apšviestose srityse tirpumas yra sumažėjęs, todėl tos sritys lieka padengtos fotorezistu (šis etapas vadinamas *ryškinimu*). Tokiu būdu fotorezisto sluoksnyje sudaromi “langai”, pro kuriuos sekančiame etape į padėklą difuzijos arba implantacijos būdu įterpiami priemaišų atomai, arba ant padėklo nusodinami sluoksniai, arba nuėsdinama dalis po fotorezistu esančio sluoksnio. Po to fotorezisto likučiai pašalinami nuo struktūros paviršiaus, ir visas procesas kartojamas, tačiau naudojant kitokius šablonus ir kitas nusodinamas medžiagas.



1 pav. Pagrindiniai puslaidininkinės struktūros formavimo žingsniai



2 pav. Integrinės grandinės gamybos proceso schema

2.2. Difuzija, jonų implantavimas ir oksidavimas

Gaminant integrines grandines iš silicio, priemaišų vaidmenį dažniausiai atlieka fosforas, arsenas arba boras. Šių trijų elementų atomų jonizavimo energijos silicyje yra labai mažos (< 0.06 eV), todėl aukštesnėse už 75 K temperatūrose daugiau kaip 99% priemaišinių atomų yra jonizuoti. Būtent todėl tie elementai turi didelę įtaką puslaidininkio elektrinėms savybėms. Visi šie elementai gerai tirpsta silicyje, ir jų koncentracija gali siekti 10^{20} cm^{-3} . Pagrindinis praktinis klausimas yra: koku būdu pasiekti reikalingą priemaišinių atomų pasiskirstymą padėklo tūryje?

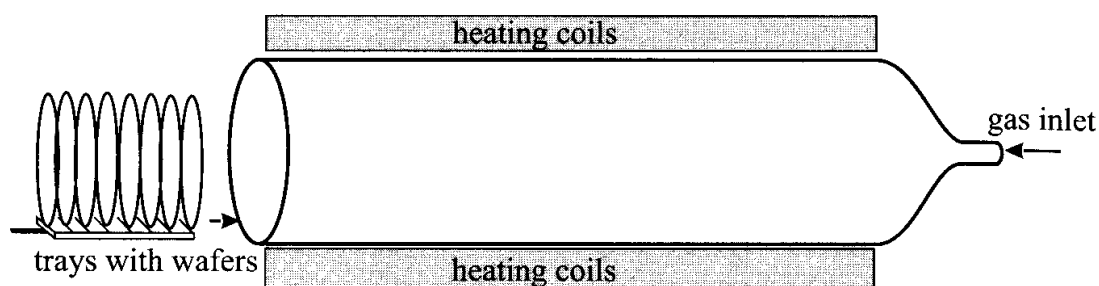
2.2.1. Difuzija

Norint “išsprauti” priemaišos atomą į kietojo kūno kristalinę gardelę, reikalinga palyginti didelė energija. Priemaišos atomai gali judėti kristalo gardelė tik labai aukštos temperatūrose (maždaug 1000°C). Tokiu atveju priemaišos atomai juda šiluminės energijos sąskaita, dėl nuolatinių susidūrimų su aplinkiniais atomais. Jeigu tam tikroje srityje palaikomas priemaišinių atomų koncentracijos gradientas (t.y., kitimas erdvėje), tuomet priemaišiniai atomai judės koncentracijos mažėjimo kryptimi, t.y., vyks priemaišinių atomų **difuzija**. Difuzija yra pagrindinis praktinis metodas, kuriuo formuojamas priemaišų pasiskirstymas padėkle.

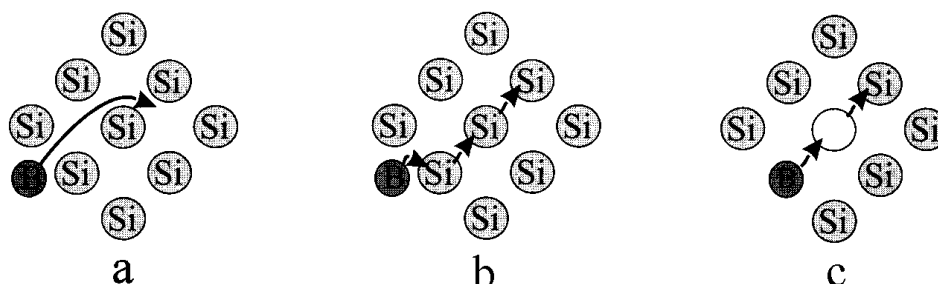
Difuzija vykdoma krosnyse, kurios pagamintos iš kvarco stiklo vamzdžių (žr. 3 pav.). Šie stiklo vamzdžiai yra atviri abiejuose galuose; priekinis galas yra naudojamas padėklų įvedimui į krosnį, o užpakalinis galas turi angą, pro kurią į krosnį įvedamos dujos. Vamzdžiai yra kaitinami, naudojant kaitinimo spirales, kurios supa vamzdį (3 pav.).

Difuzija gali vykti keliais būdais, kuriuos iliustruoja 4 pav. Idealiame kristale be defektų priemaišos atomas gali judėti Si gardelė dviem būdais: tarp gardelės mazgų (4a pav.) arba “išstumdamas” Si atomus iš gardelės mazgų (4b pav.). Abu procesai reikalauja daug energijos. Pvz., tam, kad išstumti Si atomą iš pusiausvyros padėties, reikia išseikvoti iki 3 eV. Vidutinė atomo šiluminio judėjimo energija lygi maždaug $k_B T$. Jeigu $T = 1200$ K, tuomet $k_B T = 0.1$ eV. Tokiu atveju tikimybė, kad priemaišos atomas per vieną virpesių periodą išstums gretimą Si atomą iš gardelės mazgo, yra apytiksliai lygi $e^{-3/0.1} = e^{-30} \approx 10^{-13}$ (Bolcmano pasiskirstymas). Kitais žodžiais, tokiu atveju priemaišinių atomų persiskirstymas vyktų labai ilgai.

Difuzija vyksta greičiau, jeigu priemaišiniai atomai juda silicio gardelės defektais. Gardelės **defektas** – tai pašalinis atomas arba laisva vieta gardelėje. Tokių defektų koncentracija padėkle yra 10^{10} cm^{-3} eilės. Praktikoje šis difuzijos mechanizmas visuomet yra pagrindinis. Šiuo atveju priemaišų (ir silicio) atomai juda iš vieno defekto į kitą (4c pav.).



3 pav. Difuzijos proceso technologija



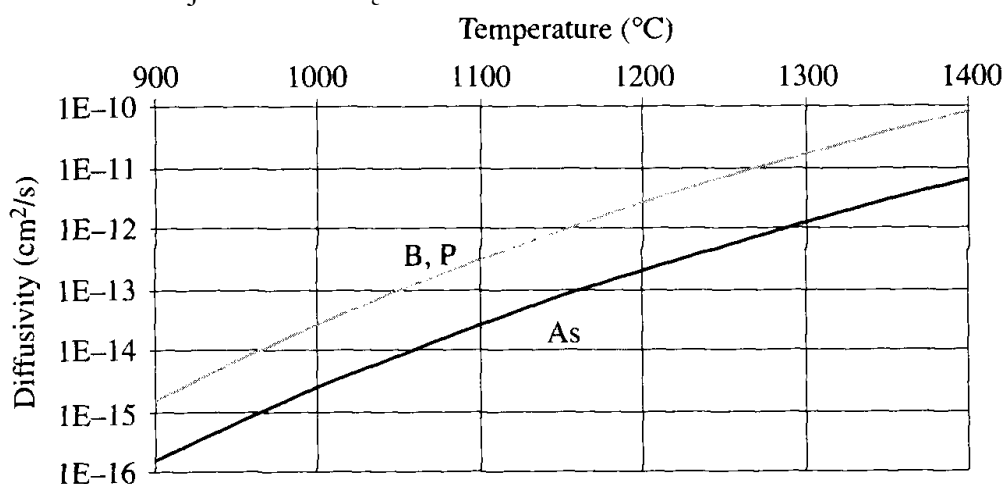
4 pav. Priemaišinių atomų difuzijos tipai

Vienmačio judėjimo atveju difuziją aprašo lygtis

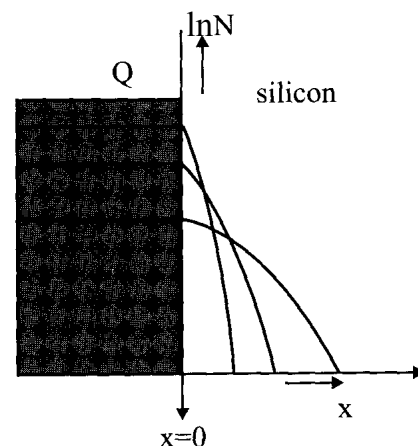
$$J = -D \frac{\partial N}{\partial x}; \quad (1)$$

čia J yra atomų *srauto tankis*, t.y., skaičius per laiko vienetą į ploto vienetą (matuojamas $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$), N yra atomų koncentracija (cm^{-3}), o D yra priemaišų atomų difuzijos koeficientas (cm^2s^{-1}). Difuzijos koeficientas priklauso nuo difunduojančių atomų rūšies. (1) lygtis galioja ne vien priemaišų atomų difuzijos atveju, bet apskritai visiems difuzijos reiškiniams. Ši lygtis vadinama *pirmuoju Fiko dėsnium*.

Norint išsiaiškinti, ar 1000°C temperatūra yra pakankama tam, kad priemaišų atomai nueitų kelių mikronų atstumą per pakankamai trumpą laiką, reikia visų pirma žinoti difuzijos koeficiento vertę. B, P ir As atomų difuzijos koeficientų silicijoje priklausomybės nuo temperatūros pateiktos 5 pav. Antra, reikia žinoti, kaip apskaičiuoti priemaišų koncentraciją duotajame taške, žinant difuzijos koeficientą.



5 pav. Boro, fosforo ir arseno difuzijos koeficientų priklausomybė nuo temperatūros



6 pav. Difuzija iš šaltinio, kuris turi Q priemaišinių atomų cm^{-2}

Sprendžiant šį uždavinį vienmačio judėjimo atveju, užduodama pradinė sąlyga, t.y., užduodamas priemaišų šaltinis taške $x = 0$, kuris atitinka Si kristalo paviršių (kristalo tūris atitinka sritį $x \geq 0$). Pradiniu laiko momentu srityje $x < 0$ egzistuoja kažkokia priemaišų atomų koncentracija (praktikoje tai yra dujos), o srityje $x \geq 0$ priemaišų atomų koncentracija lygi nuliui. T.y., pradiniu laiko momentu išvestinė $\partial N/\partial x$ taške $x = 0$ lygi $-\infty$. Aukštoje temperatūroje atomai pradeda difunduoti į silicį, todėl išvestinė $\partial N/\partial x$ pasikeičia ir silicio tūryje susiformuoja taip vadinamas priemaišų koncentracijos „profilis“ (žr. 6 pav.). Kiekvienam taškui $x \geq 0$ galioja lygybė

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}. \quad (2)$$

Tai yra tolydumo lygtis, kuri išplaukia iš akivaizdaus teiginio, kad atomų skaičiaus pokytis per laiką Δt duotajame sluoksnyje, kuris užima koordinatų intervalą nuo x_1 iki $x_1 + \Delta x$, turi būti lygus skirtumui tarp atomų skaičiaus, kuris per laiką Δt įėjo į sluoksnį pro paviršių $x = x_1$, ir atomų skaičiaus, kuris per tą patį laiką išėjo iš to sluoksnio pro paviršių $x = x_1 + \Delta x$. Tolydumo lygtis (2) vadinama *antruoju Fiko dėsnium*. Įrašę J išraišką (1) į (2), gauname antrosios eilės diferencialinę lygtį dalinėmis išvestinėmis N atžvilgiu:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}. \quad (3)$$

Priemaišų koncentracijos profilio kitimas laike yra (3) lygties sprendinys. Šį kitimą iliustruoja 6 pav. Bendroju atveju lygties (3) matematinis sprendimas yra gana sudėtingas. Atskiru atveju, kai implantuotieji priemaišų atomai pradiniu laiko momentu sudaro labai ploną sluoksnį arti paviršiaus, o jų pilnutinis skaičius nekinta („baigtinio šaltinio“ atvejis),

$$N(x,t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left[-\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)^2\right]; \quad (4)$$

čia Q yra priemaišinių atomų skaičius, kuris tenka Si kristalo paviršiaus ploto vienetui (cm^{-2}). Tai yra **Gauso funkcija**. Jeigu priemaišinių atomų koncentracija srityje $x < 0$ yra pastovi („begalinio šaltinio“ atvejis), tuomet lygties (3) sprendinys yra

$$N(x,t) = N_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right); \quad (5)$$

čia N_0 yra priemaišinių atomų koncentracija srityje $x < 0$, o $\operatorname{erfc}(x)$ yra specialioji funkcija, kuri vadinama **papildomąja paklaidų funkcija**:

$$\operatorname{erfc}(y) \equiv 1 - \operatorname{erf}(y) \equiv 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-x^2) dx.$$

Sprendinys (5) atitinka tą atvejį, kai silicis yra kaitinamas dujose, į kurių sudėtį įeina priemaišų atomai. Funkcijos $\operatorname{erfc}(x)$ pavidalas srityje $x \geq 0$ yra panašus į Gauso funkcijos pavidalą.

Jeigu priemaišų šaltinis yra baigtinis, tuomet, laikui bėgant, priemaišų koncentracija prie pat paviršiaus (taške $x = 0$) mažėja (žr. 6 pav.). Jeigu priemaišų šaltinis yra begalinis, tuomet priemaišų koncentracija taške $x = 0$ visą laiką lieka lygi N_0 .

Remiantis formulėmis (4) ir (5), galima padaryti išvadą, kad atstumas, kuriuo išsiskverbia priemaišos atomai per laiką t į silicio tūrį, yra dydžio \sqrt{Dt} eilės: kai $x = 2\sqrt{Dt}$, eksponentinis daugiklis formulėje (4) yra lygus $\exp(-1) \approx 0.37$, o kai $x = \sqrt{Dt}$, papildomoji paklaidų funkcija formulėje (5) yra lygi 0.2. Dabar galima apytiksliai įvertinti šį gylį konkrečioms atvejams. Pvz., tarkime, kad temperatūra $T = 1000$ °C, o difuzijos trukmė $t = 1$ h. Pagal 5 pav., B ir P difuzijos koeficientas šioje temperatūroje yra apytiksliai lygus $3 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Taigi, šiuo atveju $\sqrt{Dt} = 0.1$ μm .

Vadinasi, kad priemaišų atomai išsiskverbtų į dešimtujų mikrono dalių gylį, 1000 °C temperatūroje difuzijos trukmė turi būti valandų eilės.

Priemaišų atomai gali būti įterpiami į padėklą ne vien difuzijos iš aplinkinių dujų būdu. Kitas praktikoje naudojamas metodas yra jonų implantavimas, apie kurį kalbama kitame poskyryje.

2.2.2 Jonų implantavimas

Jonų implantavimas – tai priemaišų jonų įterpimas į padėklo tūrį, naudojant dalelių greitintuvą. Jonų implantavimas leidžia tiksliau reguliuoti priemaišų pasiskirstymą sluoksnyje, negu difuzija iš aplinkinių dujų. Jonų implantavimo įrenginio schema pavaizduota 7 pav. Implantavimas vyksta vakuume, siekiant išvengti jonų susidūrimų. Jonai generuojami, kaitinant dujas, į kurių sudėtį įeina reikalingos priemaišos. Dėl aukštos temperatūros dujų atomai praranda vieną arba kelis elektronus ir virsta teigiamais jonais, kurie turi palyginti didelį greitį. Jonų šaltinį ir dalelių greitintuvą jungia siauras lanko formos kanalas. Šis kanalas yra stipriame magnetiniame lauke. Magnetiniame lauke judantį krūvininką veikia Lorencio jėga. Šios jėgos kryptis yra statmena judėjimo kryptčiai, o didumas yra proporcingas krūvininko judėjimo greičiui ir krūviui. Dėl Lorencio jėgos jonų trajektorijos užsilenkia. Trajektorijos kreivumas priklauso nuo jono greičio, krūvio ir masės. Todėl skirtingos masės jonų trajektorijų kreivumai yra skirtingi. Į dalelių greitintuvą patenka tik tie jonai, kurių trajektorijų kreivumas atitinka kanalo kreivumą. Tiksliai parinkus magnetinio lauko stiprumą, tokiu būdu galima „atrinkti“ tik reikalingos priemaišos jonus. Dalelių greitintuve jonai praeina aukštą potencialų skirtumą, kuris gali siekti 1 MV. Todėl jonai pagreitinami iki labai didelių greičių, kurie gali siekti kelis tūkstančius km/s. Šis jonų pluoštas yra skanuojamas padėklo paviršiumi, naudojant horizontalaus ir vertikalios nuokrypio elektrinį lauką (panašiai kaip elektronų pluoštas televizoriuje skanuojamas ekrano paviršiumi). Implantuotas jonas sukuria teigiamą krūvį padėkle. Kadangi padėklas yra įžemintas, tai tas teigiamas krūvis neutralizuojasi ir dėl to padėklu teka srovė. Matuojant šią srovę, galima gana tiksliai išmatuoti implantuotų jonų skaičių.

Nors implantuojamų jonų energija yra maždaug vienoda, tačiau jie išsiskverbia į padėklą skirtingu atstumu, nes kiekvienas jonas susiduria su silicio atomais daug kartų, o po kiekvieno

susidūrimo jonas gali įgyti įvairų greitį. Jonų koncentracijos profilis yra beveik Gauso funkcijos pavidalo. 8, 9 ir 10 pav. pavaizduoti B, P ir As koncentracijų dešimtainiai logaritmai skirtingoms jonų energijoms. Šiuos profilius apytiksliai aprašo Gauso formulė

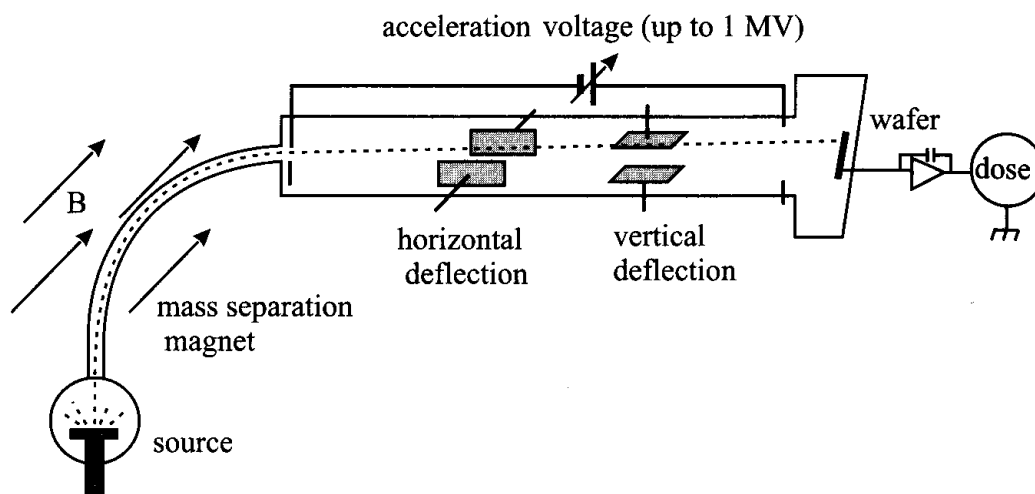
$$N(x) = N_{\max} \exp\left(-\frac{(x - R_{\max})^2}{2\Delta R^2}\right); \quad (6)$$

čia R_{\max} yra vidutinis jonų išskverbimo gylis, kuris atitinka jonų koncentracijos profilio maksimumą, o ΔR yra standartinis nuokrypis, t.y., atstumas tarp taško, kuriame koncentracija yra didžiausia (N_{\max}) ir taško, kuriame koncentracija lygi $e^{-0.5} \cdot N_{\max} \approx 0.61 \cdot N_{\max}$. Parametras ΔR dar vadinamas jonų **pasiskirstymo puspločiu**. Iš (6) išplaukia, kad jonų koncentracijos logaritmo priklausomybė nuo koordinatės yra parabolės pavidalo (tai akivaizdu ir 8–10 pav.). Implantuotų jonų skaičius, tenkantis vienam padėklo paviršiaus ploto vienetui, vadinamas **implantacijos doze** (cm^{-2}). Implantacijos dozė – tai implantuotų jonų profilio integralas x atžvilgiu. Šios dozės išraiška gaunama, suintegrus (6):

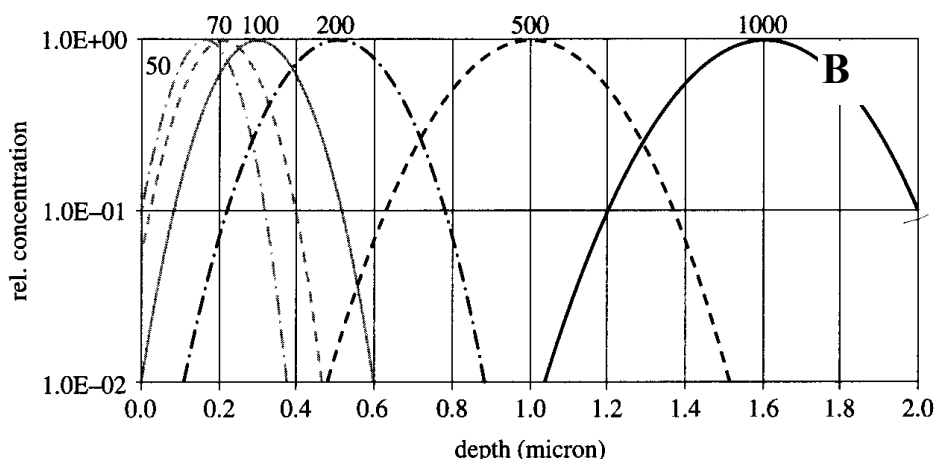
$$Q = \sqrt{2\pi} N_{\max} \Delta R. \quad (7)$$

Implantuotų jonų koncentracijos maksimumo padėtis (t.y., vidutinis išskverbimo gylis) R_{\max} ir plotis ΔR priklauso nuo jonų energijos. Todėl, keičiant greitinimo įtampą, galima tiksliai reguliuoti vidutinį jonų išskverbimo gylį. Tai yra pagrindinis jonų implantavimo metodo pranašumas, lyginant su difuzija. Jonų implantavimo metodo trūkumas yra tas, kad viename dalelių greitintuve vienu metu galima apdoroti tik vieną padėklą, tuo tarpu difuzijos krosnyje vienu metu galima apdoroti daug padėklų (žr. 3 pav.). Kitas trūkumas yra tas, kad dėl aukštos jonų energijos kristalo gardelė yra pažeidžiama, t.y., kristalo atomai išmušami iš gardelės mazgų; implantuotieji jonai taip pat atsiduria tarp mazgų. Atitinkamai, pakinta kristalo savybės (pvz., draustinės energijos juostos plotis, būsenų tankiai laidumo ir valentinėje juostose, laidumas). Ši problema praktikoje išsprendžiama, patalpinus apdorotus padėklus į bent 800°C krosnį. Atomų šiluminis judėjimas aukštoje temperatūroje atstato tvarkingą atomų išsidėstymą gardelėje, t.y., sugražina atomus į gardelės mazgus. Šis procesas vadinamas **atkaitinimu** arba **iškaitinimu** (*annealing*).

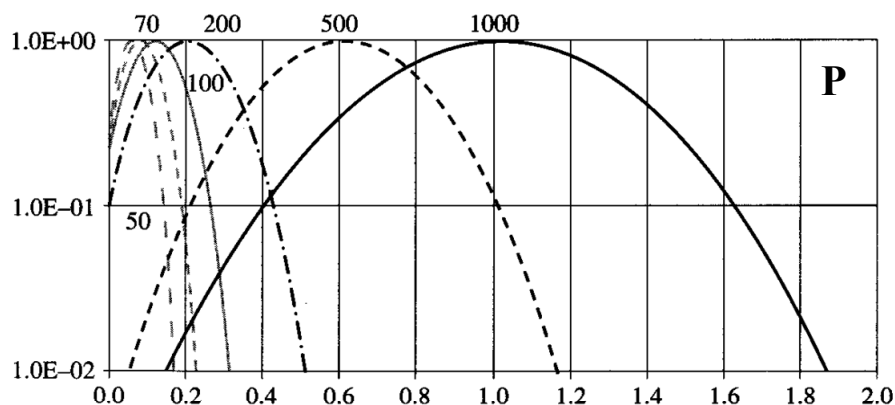
Implantuotų jonų vidutinis gylis (R_{\max}) ir profilio pusplotis (ΔR) nėra nepriklausomi, nes jie priklauso nuo tų pačių dydžių – implantuojamų jonų rūšies ir energijos. Norint praplatinti jonų koncentracijų profilį (t.y., padidinti ΔR), nekeičiant jonų vidutinio gylio, reikia patalpinti padėklą į aukštą temperatūrą, kad implantuotieji jonai pradėtų difunduoti tolyn nuo koncentracijos maksimumo. Be to, tuo pačiu atstatomas tvarkingas atomų išsidėstymas gardelėje (žr. aukščiau). T.y., sąvokos “difuzija” ir “atkaitinimas” šiuo atveju reiškia tą patį.



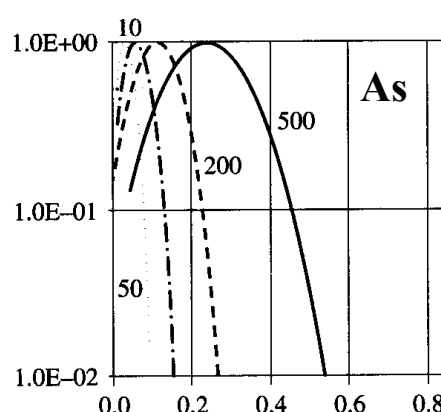
7 pav. Jonų implantavimo įrenginio schema



8 pav. Boro koncentracijos profiliai įvairioms implantuojamų jonų energijoms (ordinačių ašies mastelis yra logaritminis)



9 pav. Fosforo koncentracijos profiliai įvairioms jonų kinetinėms energijoms



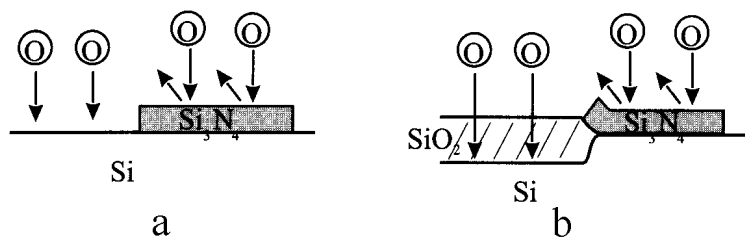
10 pav. Arseno koncentracijos profiliai

Jeigu difuzijos metu bandinio aplinkoje yra deguonies, tuomet kartu su difuzija vyksta ir cheminė oksidacijos reakcija. Apie tai kalbama sekančiame poskyryje.

2.2.3. Oksidacija

Silicio **oksidacija** pasireiškia silicio dioksido (SiO_2) sluoksnio susidarymu ant padėklo paviršiaus. Šis procesas tampa pastebimas tik pakankamai aukštoje temperatūroje (kaip ir difuzija) ir tik esant pakankamai aukštai deguonies koncentracijai aplinkoje. Susidarius SiO_2 sluoksniui, jis sumažina tolimesnės oksidacijos spartą, nes, kad vyktų cheminė reakcija, deguonies atomai turi pradifunduoti pro SiO_2 sluoksnį ir pasiekti ribą tarp Si ir SiO_2 . Taigi, oksidacija yra fizikinio proceso (difuzijos) ir cheminio proceso (oksido susidarymo reakcijos) derinys. Bendrąją oksidacijos spartą lemia lėtesnysis iš šių dviejų procesų, t.y., difuzija. Todėl oksidaciją galima aprašyti kaip atskirą difuzijos atvejį. Oksidacija vykdoma tose pačiose krosnyse, kaip ir difuzija (žr. 3 pav.).

Deguonies difuziją pro SiO_2 galima aprašyti tuo pačiu metodu, kaip ir priemaišų atomų difuziją pro silicį. Augant silicio dioksidui, gryno silicio kiekis mažėja. Tai reiškia, kad oksido sluoksnis auga ne tik į viršų, bet ir gilyn į padėklą. 11 pav. iliustruoja silicio lokalinės oksidacijos procesą. Dalį silicio paviršiaus dengia sluoksnis medžiagos, kuri nepraleidžia deguonies atomų (Si_3N_4). Tačiau deguonies atomai difunduoja ne tik statmenai paviršiui, bet ir į šonus, todėl oksido sluoksnio pjūvis yra toks, kaip pavaizduota 11b pav.



11 pav. Silicio lokalinė oksidacija, naudojant Si_3N_4 šablona

Deguonies difuzijos pro SiO₂ sluoksnį sparta žymiai padidėja, jeigu aplinkinėje atmosferoje yra vandens garų. Drėgnoje aplinkoje oksido sluoksnis auga greičiau, negu sausoje, tačiau yra blogesnės kokybės. Puslaidininkinių struktūrų izoliavimui “drėgnas” oksidas yra pakankamai geras, tačiau MDP tranzistoriaus užtūros oksido sluoksnis turi būti gaminamas sausoje aplinkoje.

Oksido sluoksnio storio (d) priklausomybę nuo laiko (t) aprašo kvadratinė lygtis:

$$d^2 + Ad = B(t + \tau); \quad (8)$$

čia A ir B yra konstantos, kurios priklauso nuo temperatūros ir nuo atmosferos drėgmės, o τ priklauso nuo pradinio oksido storio d_0 :

$$\tau = \frac{d_0^2 + Ad_0}{B}.$$

Mažiams laikams $t + \tau$, kai oksido augimo spartą riboja paviršinės oksidacijos reakcijos sparta, (1.4.8) lygties apytikslis sprendinys yra

$$d(t) = \frac{B}{A}(t + \tau). \quad (9a)$$

Dideliems laikams, kai oksido augimo spartą riboja deguonies difuzijos sparta SiO₂ sluoksnyje, SiO₂ storio apytikslė priklausomybė nuo laiko yra tokio pavidalo:

$$d(t) = \sqrt{Bt}. \quad (9b)$$

Šis silicio oksidacijos modelis vadinamas *Deal'o ir Grove'o modeliu* (*Deal-Grove model*).

2.3. Puslaidininkinės struktūros gamybos proceso modeliavimas

Technologinio proceso simulatorius – tai kompiuterio programa, kuri apskaičiuoja priemaišinių atomų koncentracijos profilius ir oksido sluoksnio storį, naudodama aukščiau aprašytus modelius. Paprasčiausi simulatoriai atlieka vienmačius skaičiavimus (vienmačių profilių pavyzdžiai pateikti 6 pav. ir 8–10 pav.). Žemiau trumpai aprašytas vienas iš galimų vienmatės difuzijos lygties (3) skaitmeninio sprendimo algoritmų. Nors šios lygties sprendinius dažnai galima išreikšti analiziškai (pvz., (4) ir (5)), tačiau algoritmo aprašymas padės suprasti kai kurias skaitmeninio modeliavimo sąvokas, kurios bendros daugeliui skaitmeninio modeliavimo uždavinių.

Diferencialinės lygtys su dalinėmis išvestinėmis (pvz., (3)) skaitmeniškai sprendžiamos *baigtinių skirtumų metodu*, kurio esmė ta, kad kintamųjų (šiuo atveju – x ir t) kitimo intervalai padalinami į tam tikrą skaičių mažesnių intervalų ir visos dalinės išvestinės pakeičiamos ieškomosios funkcijos verčių kiekvieno intervalų kraštuose skirtumo ir to intervalo pločio santykiais. Koordinatės ir laiko intervalų kraštus žymėsime, atitinkamai, x_j ir t_l ($j = 0, 1, \dots, J$; $l = 0, 1, \dots, L$). Praktikoje intervalai dažniausiai būna vienodo pločio, t.y.,

$$x_j = x_0 + j \Delta x, \quad (10a)$$

$$t_l = t_0 + l \Delta t; \quad (10b)$$

čia Δx yra x intervalo plotis, o Δt yra t intervalo plotis. Priemaišų koncentracijos N vertę taške x_j laiko momentu t_l žymėsime N_j^l (t.y., $N_j^l \equiv N(x_j, t_l)$). Tuomet, naudojant baigtinių skirtumų metodą, priemaišų koncentracijos N laikinę išvestinę taške x_j laiko momentu t_l galima apytiksliai išreikšti šitaip:

$$\left. \frac{\partial N}{\partial t} \right|_{x_j, t_l} \approx \frac{N_j^{l+1} - N_j^l}{\Delta t}, \quad (11)$$

o N antrąją dalinę išvestinę x atžvilgiu tame pačiame taške galima apytiksliai išreikšti šitaip:

$$\left. \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \right|_{x_j, t_l} \approx \frac{N_{j+1}^l - 2N_j^l + N_{j-1}^l}{(\Delta x)^2}. \quad (12)$$

Irašę (11) ir (12) į (3), gauname *baigtinių skirtumų lygtį*:

$$\frac{N_j^{l+1} - N_j^l}{\Delta t} = D \frac{N_{j+1}^l - 2N_j^l + N_{j-1}^l}{(\Delta x)^2}. \quad (13)$$

Iš čia galime išreikšti N_j^{l+1} :

$$N_j^{l+1} = N_j^l + D\Delta t \frac{N_{j+1}^l - 2N_j^l + N_{j-1}^l}{(\Delta x)^2}. \quad (14)$$

Kaip matome, visi dydžiai, kurie yra lygties (14) dešiniojoje pusėje, yra apibrėžti laiko momentu t_l . Vadinasi, žinodami priemaišų pasiskirstymą pradinio laiko momentu t_0 (t.y., žinodami $N_j^0, j = 0, 1, \dots, J$), pagal (14) galime apskaičiuoti priemaišų pasiskirstymą laiko momentu t_1 . Po to, įrašę gautąsias N_j^1 vertes į lygties (14) dešiniąją pusę, galime apskaičiuoti N_j^2 ($j = 0, 1, \dots, J$) ir t.t.

Aukščiau aprašytasis vienmatės difuzijos lygties skaitmeninio sprendimo algoritmas leidžia apskaičiuoti priemaišų koncentracijos pasiskirstymo evoliuciją laike, esant bet kokiam pradiniam priemaišų pasiskirstymui, o ne vien 2.2.1 poskyryje minėtais paprasčiausiais atvejais. Tačiau šis algoritmas turi vieną trūkumą: esant dideliems Δt , jis tampa nestabilus. Algoritmo stabilumas yra susijęs su apvalinimo paklaidom. Mat, kompiuterio atmintyje skaičiai saugomi ne begaliniu tikslumu. Pvz., pridėjus prie skaičiaus 1 skaičių 10^{-17} , dauguma šiuolaikinių kompiuterių gaus skaičių 1 (o ne $1 + 10^{-17}$). **Apvalinimo paklaida** – tai mažiausias skaičius, kurį pridėjus prie vieneto, gaunamas skaičius, kuris skiriasi nuo vieneto. Kadangi priemaišų pasiskirstymas laiko momentu t_{l+1} išreiškiamas priemaišų pasiskirstymu laiko momentu t_l (žr. (14)), tai apvalinimo paklaidos duotuoju laiko momentu įtakoja sprendinį visais vėlesniais laiko momentais. Algoritmo **nestabilumas** pasireiškia tuo, kad šios apvalinimo paklaidos kaupiasi skaičiavimų eigoje ir galų gale viršija tikrąjį lygties sprendinį. Algoritmo **stabilumas** pasireiškia tuo, kad apvalinimo paklaidų duotuoju laiko momentu įtaka vėlesniems laiko momentams silpsta, einant į ateitį. Kitais žodžiais, algoritmas turi savybę "užmiršti" apvalinimo paklaidas, kurios egzistavo prieš tam tikrą laiko žingsnių skaičių. Stabilumo analizės teorijoje įrodoma, kad algoritmas, kurį nusako (13) arba (14) lygtis, yra stabilus tik tuomet, kai tenkinama sąlyga

$$\frac{2D\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1. \quad (15)$$

Vadinasi, algoritmo (13) stabilumui reikia, kad Δt būtų pakankamai mažas, o Δx – pakankamai didelis. Tačiau praktikoje Δx negali būti padidintas virš tam tikros vertės. Taip yra dėl dviejų priežasčių. Visų pirma, didinant Δx , mažėja x taškų skaičius J , t.y., rastasis sprendinys suteikia mažiau informacijos. Praktikoje J dažniausiai turi būti dešimčių arba šimtų eilės. Antra, didindami Δx , mes įnešame kito pobūdžio paklaidas – **narių atmetimo paklaidas**, kurios susijusios su tuo, kad išvestinių išraiška baigtiniais skirtumais (11) ir (12) yra apytikslė. Toks šių paklaidų pavadinimas kilo iš to, kad formulės (11) ir (12) yra gautos iš funkcijos $N(x,t)$ išraiškos Teiloro eilute, kurioje atmeti visi nariai, pradedant nuo trečiojo arba ketvirtojo nario. Narių atmetimo paklaida auga, didinant duotojo argumento intervalą (Δt arba Δx). Dėl šių priežasčių Δt vertė, kuri tenkina (13), gali būti per maža, norint sužinoti priemaišų pasiskirstymą, praėjus dideliame laiko tarpui nuo pradinio laiko momento, nes tam reikėtų per daug laiko žingsnių.

Taigi, jeigu mus domina priemaišų pasiskirstymas toli ateityje (t.y., dideliu atstumu nuo pradinio pasiskirstymo krašto), tuomet algoritmą (13) reikia modifikuoti. Viena iš galimų modifikacijų yra tokia:

$$\frac{N_j^{l+1} - N_j^l}{\Delta t} = D \frac{N_{j+1}^{l+1} - 2N_j^{l+1} + N_{j-1}^{l+1}}{(\Delta x)^2}. \quad (16)$$

Palyginę šią baigtinių skirtumų lygtį su lygtimi (13), matome, kad vienintelis pakeitimas yra tas, jog dešiniojoje lygties pusėje antroji dalinė išvestinė x atžvilgiu skaičiuojama ne laiko momentu t_l , o laiko momentu t_{l+1} . Algoritmas (16) yra stabilus, esant bet kokiems Δt . Jo trūkumas yra tas, kad jis yra nėra tikslus mažiems laikams, kai Δt yra didelis. Be to, priemaišų koncentracijos verčių N_j^{l+1} ($j = 0, 1, \dots, J$) skaičiavimas pagal (16) yra sudėtingesnis, negu pagal (13). Norint apskaičiuoti N_j^{l+1} ($j = 0, 1, \dots, J$) pagal (16), reikia išspręsti $J+1$ tiesinių algebrinių lygčių sistemą, kuri gaunama, užrašius lygtį (16) kiekvienam j . Tuo tarpu algoritmo (13) atveju N_j^{l+1} tiesiogiai išsireiškia dydžiais N_j^l, N_{j-1}^l ir N_{j+1}^l . Todėl algoritmas (13) vadinamas **išreikštiniu**, o algoritmas (16) – **neišreikštiniu** algoritmu.

Jeigu sprendžiamas dvimatės difuzijos uždavinys, tuomet difuzijos lygtis yra šitokia:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right). \quad (17)$$

Vėl pritaikę baigtinių skirtumų metodą, vietoj dviejų lygybių (10a,b) gauname tris lygybes – dvi erdvinėms koordinatėms x, y ir vieną laikui t :

$$x_j = x_0 + j \Delta x \quad (j = 0, 1, \dots, J) \quad (18a)$$

$$y_k = y_0 + k \Delta y, \quad (k = 0, 1, \dots, K) \quad (18b)$$

$$t_l = t_0 + l \Delta t. \quad (l = 0, 1, \dots, L) \quad (18c)$$

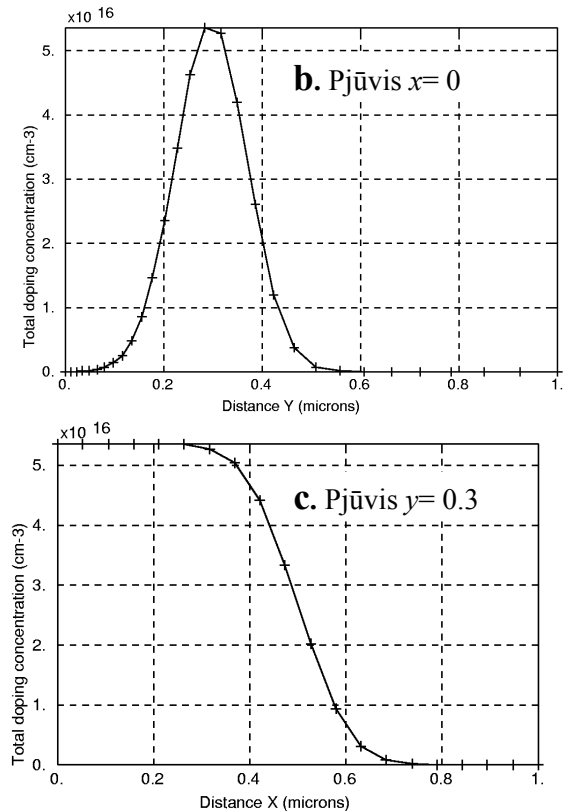
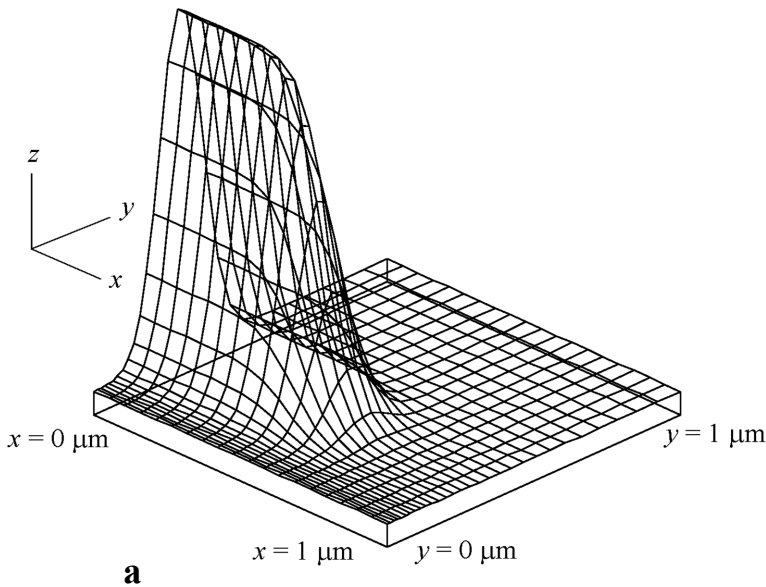
Lygybės (18a) ir (18b) nusako stačiakampį tinklą, į kurį dalijamas bandinio skerspjūvis. Dažniausiai $\Delta x = \Delta y$, t.y., tinklas yra kvadratinis. Priemaišų koncentracijos N vertę tinklo mazge (x_j, y_k) laiko momentu t_l žymėsime $N_{j,k}^l$ (t.y., $N_{j,k}^l \equiv N(x_j, y_k, t_l)$). Algoritmų (13) ir (16) apibendrinimas dvimatei lygčiai (17) yra akivaizdus: laikinė išvestinė ir išvestinė x atžvilgiu išreiškiamos taip pat, kaip vienmateje lygtyje (pagal (11) ir (12)), o išvestinė y atžvilgiu išreiškiamą formule, kuri analogiška (12). Tuomet išreikštinio algoritmo atveju $N_{j,k}^{l+1}$ tiesiogiai išsireiškia dydžiais $N_{j,k}^l, N_{j-1,k}^l, N_{j+1,k}^l, N_{j,k-1}^l, N_{j,k+1}^l$. Neišreikštinio algoritmo atveju kiekviename laiko žingsnyje reikia spręsti $J \cdot K$ tiesinių algebrinių lygčių sistemą atžvilgiu $J \cdot K$ nežinomųjų $N_{j,k}^{l+1}$.

Kaip matome, dvimačio uždavinio atveju skaičiavimų apimtis yra žymiai didesnė, negu vienmačio uždavinio atveju. Taip yra dėl to, kad žymiai padidėja skaičius taškų, kuriuose reikia apskaičiuoti N . Pvz., jeigu $J = K = 100$, tuomet dvimačio uždavinio atveju taškų skaičius lygus $J \cdot K = 10000$, t.y., 100 kartų didesnis, negu vienmačio uždavinio atveju. Todėl dvimačiai ir trimačiai simulatoriai yra žymiai sudėtingesni už vienmačius. Skaičiavimų metu sprendžiamos algebrinių lygčių sistemos, kurias sudaro tūkstančiai lygčių (žr. aukščiau apie neišreikštinius algoritmus). Anksčiau tokius skaičiavimus buvo įmanoma atlikti tik su dideliais kompiuteriais. Išaugus personalinių kompiuterių skaičiavimo greičiui, vienmačius ir dvimačius skaičiavimus tapo įmanoma atlikti personaliniu kompiuteriu.

Programų paketas, kuris naudojama šiame kurse, yra vadinamas **MicroTec**TM v.3.05 (Student Version). Programų paketą MicroTec sudaro trys programos: pirmoji programa (**SiDif**) skirta technologinio proceso modeliavimui; antroji programa (**MergeIC**) skirta puslaidininkinės struktūros konstravimui, naudojantis SiDif skaičiavimo rezultatais; trečioji programa (**SemSim**) skirta užbaigtos puslaidininkinės struktūros elektrinių savybių modeliavimui. Be to, egzistuoja programa dvimačių profilių vizualizavimui ir jų pjūvių braižymui. Programos MicroTec studentiškojoje versijoje yra apribotas pilnutinis mazgų skaičius $J \cdot K$: šis skaičius neturi viršyti 600. Jeigu vartotojas įveda didesnę mazgų skaičių, tuomet jis automatiškai sumažinamas iki 600.

12a pav. parodytas implantuotų priemaišų atomų koncentracijos dvimačio profilio pavyzdys. Šį profilį apskaičiavo programa SiDif. Šios struktūros ilgis (x matmuo) lygus $1 \mu\text{m}$; struktūros gylis (y matmuo) taip pat lygus $1 \mu\text{m}$. Ant vertikaliosios ašies atidėta priemaišų atomų koncentracija. Šiame pavyzdyje boro jonai buvo implantuojami pro šablona, kurio langas yra intervale nuo $x = -\infty$ iki $x = 0.5 \mu\text{m}$. Boro jonų energija 100 keV , o implantacijos dozė 10^{12} cm^{-2} . Tinklo mazgai, kuriuose programa skaičiavo priemaišų koncentraciją, – tai x ir y koordinatinių linijų sankirtos taškai.

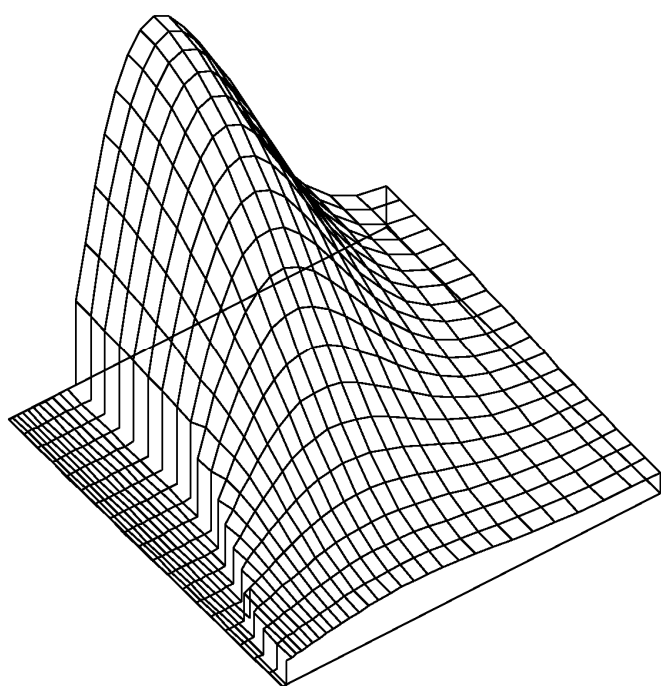
12b pav. pavaizduotas to paties priemaišų pasiskirstymo pjūvis išilgai tiesės $x = 0$. Akivaizdu, kad šiuo atveju boro koncentracijos maksimumas pasiekiamas maždaug $0.3 \mu\text{m}$ gylyje, ir ši didžiausioji koncentracija lygi maždaug $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. 12c pav. pavaizduotas pjūvis išilgai tiesės $y = 0.3 \mu\text{m}$. Čia matomas priemaišų išplitimas x kryptimi, t.y., kai $x > 0.5 \mu\text{m}$, priemaišų koncentracija sumažėja iki nulio ne šuoliškai, o palaipsniui. Taip yra dėl to, kad po susidūrimo su Si atomu boro jonas gali atšokti bet kuria kryptimi, o kiekvienas jonas patiria daug tokių susidūrimų, kol praranda visą savo kinetinę energiją.



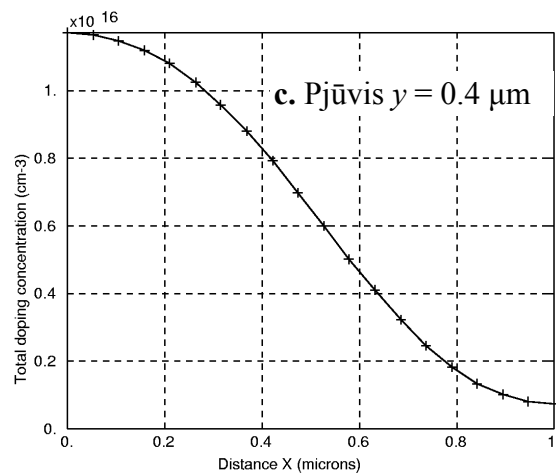
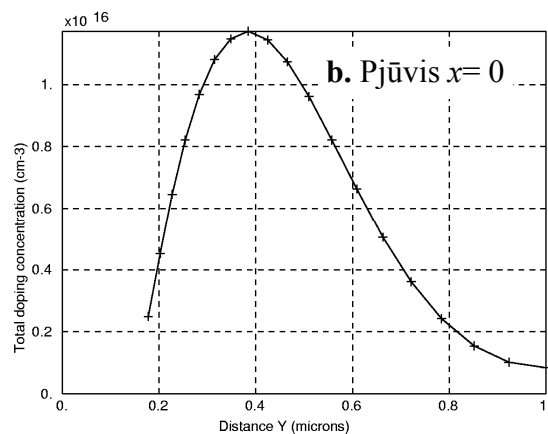
12 pav. Boro atomų koncentracijos dvimatis profilis (a) ir du jo pjūviai – plokštuma $x=0$ ir plokštuma $y=0.3 \mu\text{m}$. Implantavimo langas nuo $x=0$ iki $x=0.5 \mu\text{m}$, jonų energija 100 keV , implantacijos dozė 10^{12} cm^{-2} .

13a pav. pavaizduotas boro atomų koncentracijos profilis tuo atveju, kai po implantavimo bandinys buvo 1 h atkaitinamas 1000°C temperatūroje drėgnoje aplinkoje, esant 1 atmosferos slėgiui. Taigi, šiuo atveju vyko implantuotų atomų difuzija ir silicio oksidacija. Šiame pavyzdyje oksidacijos šablonas yra toks pats, kaip implantacijos šablonas, t.y., oksidacijos lango dešinysis kraštas yra $x=0.5 \mu\text{m}$. Boro atomai difunduoja ne tik į silicio tūrį, bet ir į oksido tūrį, ir skaičiavimų metu į tai atsižvelgiama. Tačiau vizualizavimo programa pavaizduoja priemaišų pasiskirstymą silicyje, ir neparodo jų pasiskirstymo oksido sluoksnyje. 13a pav. “tuščia vieta” mažuose gyliuose atitinka silicio dioksido sluoksnio dalį, kuri išiskverbė į silicio tūrį. Maždaug tokio paties storio oksido sluoksnis susiformuoja srityje $y < 0$ (virš padėklo), kuri nėra pavaizduota. Akivaizdu, kad oksidas auga ne tik y didėjimo kryptimi (gilyn į sluoksnį), bet ir x didėjimo kryptimi (išilgai sluoksnio paviršiaus). 13b pav. pavaizduotas boro koncentracijos pjūvis išilgai tiesės $x=0$. Matome, kad dėl difuzijos boro atomų pasiskirstymas išplito (plg. su 12b pav.) ir deformavosi, o maksimumas atsidūrė $0.4 \mu\text{m}$ gylyje. Be to, maksimalus boro atomų koncentracija sumažėjo nuo $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ iki maždaug $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. 13c pav. pavaizduotas pjūvis išilgai tiesės $y=0.4 \mu\text{m}$. Palyginus su 12c pav., akivaizdu, kad priemaišų profilis išplito ir x didėjimo kryptimi.

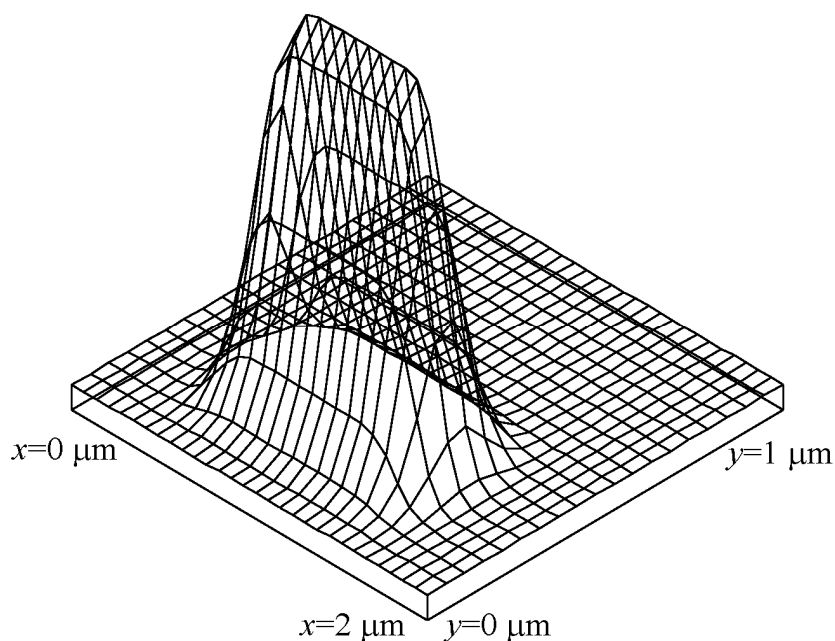
Technologinio proceso modeliavimo programa SiDif naudoja pusiau begalinį implantavimo langą: nuo $-\infty$ iki duotojo x , arba nuo duotojo x iki $+\infty$. Lankstesniam struktūros topografijos formavimui naudojama programa MergeIC. Ši programa leidžia išplėsti arba paslinkti apskaičiuotąjį priemaišų pasiskirstymą bet kuri kryptimi išilgai X ašies arba jį simetrizuoti. Simetrizavimo esmė yra ta, kad duotasis struktūros fragmentas atspindimas atžvilgiu savo kairiojo arba dešiniojo krašto ir apjungiamas su pradiniu fragmentu. Pvz., 14 pav. pavaizduotas boro atomų koncentracijos profilis, kuris gaunamas, simetrizavus 12a pav. pavaizduotąjį fragmentą atžvilgiu kairiojo krašto ($x=0$). Tokiu būdu gavome $2 \mu\text{m}$ pločio struktūrą su p tipo sritimi viduryje. Jeigu padėklas yra n tipo, tai šios struktūros pagrindu galima sukonstruoti puslaidininkinį diodą. Šio diodo vienas kontaktas turėtų jungtis prie p srities, o kitas – prie padėklo apatinio paviršiaus ($y=1 \mu\text{m}$).



a



13 pav. a) Boro atomų koncentracijos dvimatis profilis po 1 val. atkaitinimo 1000°C temperatūroje, drėgnoje atmosferoje. Oksidacijos lango dešinysis kraštas yra $x = 0.5 \mu\text{m}$. b) pjūvis plokštuma $x = 0$; c) pjūvis plokštuma $y = 0.4 \mu\text{m}$.



14 pav. Boro atomų koncentracijos dvimatis profilis, simetrizavus 12a pav. pavaizduotąją struktūrą atžvilgiu kairiojo krašto.

3. Modeliavimo metodika

1. Programos **MicroTec** lange „Select Project“ pasirenkamas projektas „1.1“. Po to atidaromas langas „Project Settings“, kuriame užduodamos parametrų vertės. Projekto parametrai sugrupuoti į direktyvas. Kiekviena direktyva atitinka giminingų parametrų grupę. Norint pakeisti parametro vertę, reikia du kartus spragtelėti ant jos. Norint įterpti direktyvą, reikia kairiuoju mygtuku spragtelėti ant projekto pavadinimo (jis nurodytas pirmojoje eilutėje), po to spragtelėti dešiniuoju mygtuku ir pasirinkti "Add Directive", o po to pasirinkti reikalingą direktyvą. Parametrai įterpiami analogiškai, tačiau spragtelėti reikia ne ant projekto pavadinimo, o ant parametrų grupės (direktyvos) pavadinimo. Norint pašalinti direktyvą arba parametą, reikia spragtelėti dešiniuoju pelės mygtuku ant direktyvos arba parametro pavadinimo ir pasirinkti „Delete“. Kiekvieno projekto skaičiavimo rezultatai įrašomi į failą, kurio vardo plėtinys yra „.3D“ arba „.2D“ (atliekant kai kuriuos projektus, sukuriama ir „.3D“, ir „.2D“ failas). Rezultatų failų vardai būna nurodyti lango „Project Settings“ pirmoje eilutėje, šalia projekto pavadinimo. Tie failai būna tame pačiame kataloge, kuriame įdiegta programa **MicroTec**.

Dėmesio! Kartais dėl netinkamų parametrų verčių arba dėl modeliavimo programos klaidų rezultatų failai nėra sukuriama. Tada, jeigu su tuo kompiuteriu anksčiau jau buvo atliekamas tas projektas, programos **MicroTec** kataloge išliks nepakitę senieji rezultatų failai, kurie gali atitikti visiškai kitokias parametrų vertes. Todėl, siekiant išvengti nesusipratimų, prieš pradėdant skaičiavimus patartina ištrinti senuosius rezultatų failus.

2. Parametrų grupė „Domain and Mesh“ apibrėžia visos struktūros matmenis bei koordinatinį tinklą. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Number of nodes NX	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius X kryptimi (išilgai padėklo paviršiaus)	4
Number of nodes NY	Koordinatinio tinklo mazgų skaičius Y kryptimi (gilyn į padėklą)	150
Domain size in X -direction (um)	Struktūros matmenys X kryptimi (μm)	0.7
Domain size in Y -direction (um)	Struktūros matmenys Y kryptimi (μm)	0.7
Mesh generation	Jeigu šis parametras lygus 1, tuomet intervalai tarp gretimų koordinatinių linijų yra vienodo pločio, o jeigu 0, tuomet linijų tankis auga, artėjant prie koordinatinių pradžios taško.	0
X -mesh exponent (um)	Parametras, kuris nusako, kaip sparčiai koordinatinės linijos turi tankėti, artėjant prie kairiojo struktūros krašto ($x = 0$) išilgai X ašies (šis parametras naudojamas tik tuomet, kai "Mesh generation" lygus 0). Kuo didesnis šis parametras, tuo didesnis koordinatinių linijų tankis prie kairiojo struktūros krašto ir tuo jis mažesnis prie dešiniojo krašto.	0
Y -mesh exponent (um)	Analogiškas parametras Y kryptimi	2

3. Parametrų grupė „Numerical solution“ apibrėžia kai kuriuos diferencialinių lygčių skaitmeninio sprendimo parametrus (pvz., parametrus, kurie lemia skaičiavimo rezultatų tikslumą). Šioje parametrų grupėje turi būti tik vienas parametras:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Batch mode switch	Jeigu 1, tuomet visi skaičiavimo proceso žingsniai atliekami be pauzių, o jeigu 0, tuomet po kiekvieno žingsnio programa sustabdoma ir laukiama, kol vartotojas nuspaus klavišą "Enter".	1

4. Parametrų grupė „Substrate“ apibrėžia silicio padėklo orientaciją ir pradinę priemaišų koncentraciją jame. Šioje parametrų grupėje turi būti tik vienas parametras:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Lattice Orientation	Padėklo kristalo gardelės orientacija (t.y., padėklo paviršiaus Milerio indeksai)	100


5. Parametrų grupė „Boron implant“ (arba „Arsenic implant“, arba „Phosphorus implant“) apibrėžia boro, arseno arba fosforo implantavimo langą, implantacijos dozę ir implantuojamų jonų energiją. Pradiniame parametrų rinkinio variante yra direktyva „Boron implant“. Jeigu darbo užduotis reikalauja naudoti arseną arba fosforą, tuomet šią direktyvą reikia pašalinti ir vietoj jos įterpti reikalingą direktyvą, kaip paaiškina 1 punkte. Parametrų vertės:

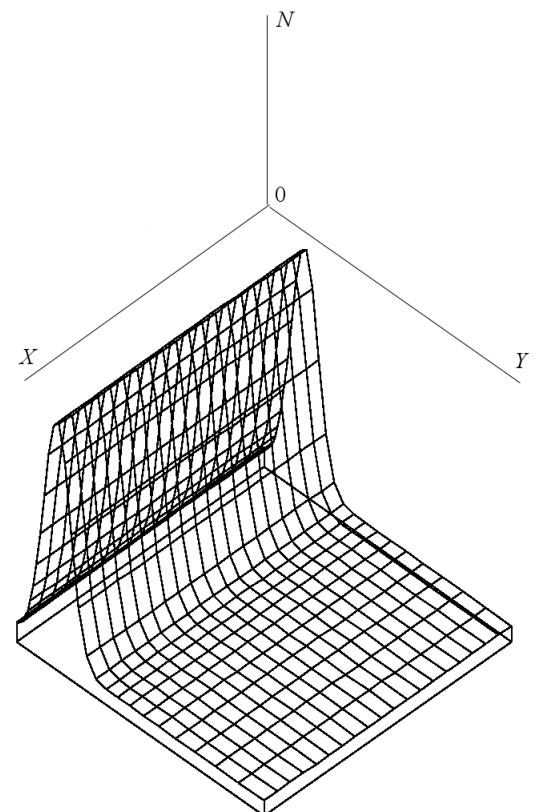
Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Boron implant mask (um)	Pusiau begalinio lango, pro kurį implantuojamas boras (arsenas, fosforas), dešiniojo krašto x koordinatė (μm) arba kairiojo krašto x koordinatė su minuso ženklu. Šiame darbe priemaišiniai atomai implantuojami tolygiai visame paviršiuje, todėl krašto koordinatė turi būti žymiai didesnė už struktūros matmenis X kryptimi (pvz., 10, 50, 100 ir pan.).	100
Boron implant dose (cm-2)	Implantacijos dozė (cm^{-2}), t.y., implantuotų atomų skaičius, kuris tenka paviršiaus ploto vienetui. Ši dozė turi būti 10^{12}cm^{-2} (užrašoma „1e12“).	1e12
Boron implant energy (keV)	Implantuojamų jonų energija (keV). Ši energija nurodyta darbo užduotyse (žr. 1 p.).	E

6. Parametrų grupė „Annealing“ apibrėžia atkaitinimo sąlygas. Šioje parametrų grupėje užduodami šie parametrai:

Parametro pavadinimas	Parametro prasmė	Vertė
Temperature (degrees C)	Atkaitinimo temperatūra ($^{\circ}\text{C}$).	1000
Annealing time (s)	Atkaitinimo trukmė (s).	3600
Time step	Difuzijos proceso modeliavimo laiko žingsnis (s), t.y., parametras Δt lygtyje (16).	100

Pastaba: Norint pašalinti atkaitinimą, nėra būtina išmesti direktyvą „Annealing“. Pakanka užduoti žemiausią leidžiamą atkaitinimo temperatūrą (0°C). Tokioje žemoje temperatūroje jonų difuzija praktiškai nevyksta.

7. Uždavus visų parametrų vertes, nuspaudžiamas mygtukas „Run“. Užsidarius DOS langui, reikia nuspausti mygtuką "3D Output" – tuomet atsidaro dvimačių profilių atvaizdavimo programa "SibGraf 3D". Norint atvaizduoti fosforo, boro arba arseno atomų koncentracijos profilį, reikia pasirinkti šios programos meniu juostos punktą „Plot“ (senesnėje versijoje – „Surface“) ir atsidariusiame meniu pasirinkti "Phosphorus concentration" arba "Boron concentration" arba "Arsenic concentration". Dvimačio profilio pavyzdys ir koordinačių ašių kryptys pavaizduoti 15 pav. Norint atvaizduoti šio profilio pjūvį statmena padėklo paviršiui kryptimi (t.y., gilyn į padėklą), reikia nuspausti programos "SibGraf 3D" mygtuką "ZY" . Tuomet atsidaro vienmačių profilių atvaizdavimo programa "SibGraf 2D", kurioje atvaizduotas pasirinktasis pjūvis.



15 pav. Dvimačio priemaišų koncentracijos profilio pavyzdys ir koordinačių ašių kryptys.

Pastabos:

1) Jeigu programa "SibGraf 2D" jau atidaryta, tuomet, spaudžiant programos "SibGraf 3D" mygtuką "ZY", naujas langas neatsidaro, o pjūvis atvaizduojamas jau atidarytame "SibGraf 2D" lange. Tokiu būdu viename "SibGraf 2D" lange galima atvaizduoti kelis pjūvius. Kitas būdas įterpti kreivę į "SibGraf 2D" grafiką: galima pasinaudoti programos „SibGraf 2D“ meniu komandomis „Plot/Copy“ ir „Plot/Paste“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“ ir „Curve/Paste“).

2) Norint išsaugoti „SibGraf 2D“ grafiką vėlesnei analizei, reikia įvykdyti programos SibGraf 2D meniu komandą „File/Save As“. Standartinis „SibGraf 2D“ duomenų failo vardo plėtinys yra „mtp“. Jeigu failas buvo įrašytas į diską, naudojant plėtinį „mtp“, tuomet to failo vardas matysis, įvykdžius „SibGraf 2D“ komandą „File/Open“. SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 4, šį plėtinį prideda automatiškai. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, šio plėtinio neprideda automatiškai, todėl vartotojas turi įvesti pilną failo vardą.

3) Jeigu "SibGraf 2D" grafike atvaizduotos kelios kreivės, tuomet, vykdant komandą „Plot/Copy“ (senesnėje „SibGraf 2D“ versijoje – „Curve/Copy“), į atmintį nukopijuojama tik aktyvioji kreivė, kuri pavaizduota raudona spalva (senesnėje versijoje – geltona spalva). Norint pakeisti aktyviają kreivę, reikia naudoti klavišus „↑“ arba „↓“.

4) "SibGraf 2D" aktyvioji kreivė turi aktyvųjį tašką, kuris pažymėtas juodu kryželiu (senesnėje versijoje – raudonu kryželiu). To taško abscisė ir ordinatė yra pateiktos laukuose „X“ ir „Y“, kurie yra po grafiku. Norint pakeisti aktyvųjį tašką, reikia naudoti klavišus „→“ arba „←“. Aktyvųjį tašką galima panaudoti, matuojant įvairius atstumus (pvz., priemaišų profilio plotį).

5) "SibGraf 2D" versija, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelių pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Jeigu grafike yra kelios kreivės, tada išsaugoma tik pirmoji kreivė. „SibGraf 2D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, tokios galimybės neturi.

6) "SibGraf 3D" versija, kuri įeina į MicroTec 4, turi meniu komandas „File/Export Data“ ir „File/Import Data“, kurios leidžia išsaugoti duomenis teksto (ASCII) faile (skaičių stulpelio pavidalu) bei grafiškai atvaizduoti ASCII formato duomenis. Išsaugomas tik vienas dvimatis profilis, kuris matomas programos lange. „SibGraf 3D“ versija, kuri įeina į programų paketą MicroTec 3, tokios galimybės neturi.

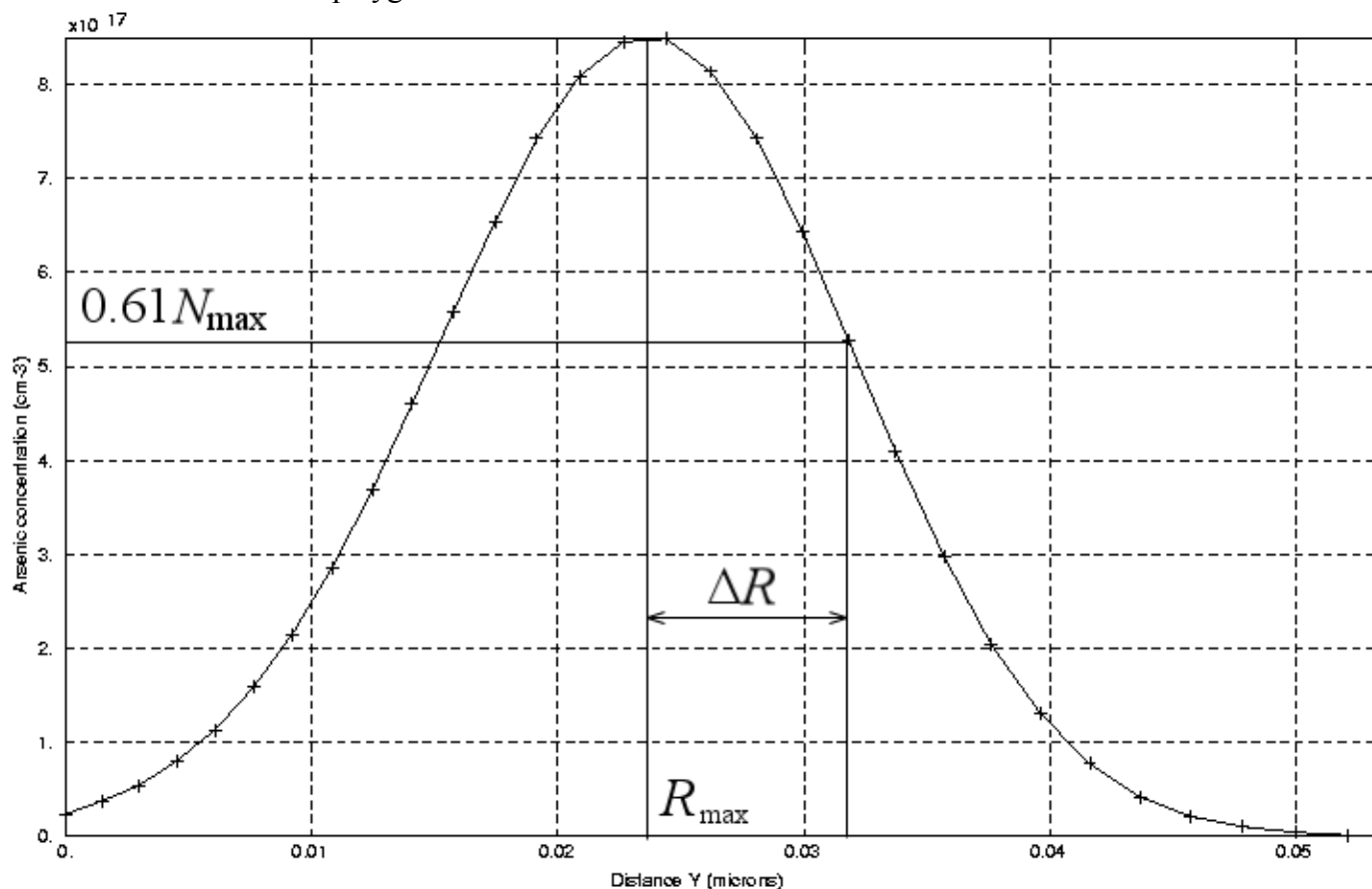
8. Punktai 6 ir 7 atliekami, naudojant 4 atkaitinimo trukmes: be atkaitinimo, 1800 s, 3600 s ir 7200 s. Tokiu būdu gaunami keturi jonų koncentracijos profiliai. Jie visi turi būti atvaizduoti viename grafike (žr. pastabą Nr. 1 aukščiau).

9. Norint rasti mažiausią atkaitinimo trukmę, kuri reikalinga, kad implantuoti jonai tolygiai pasiskirstytų visoje modeliuojamoje struktūroje, reikia bandyti įvairias atkaitinimo trukmes. Po kiekvieno atkaitinimo trukmės pakeitimo reikia pakartoti punktą 7. Ieškomoji trukmė atitinka tokių jonų pasiskirstymą, kai didžiausios ir mažiausios jonų koncentracijų santykinis skirtumas yra maždaug 10%. Boro ir fosforo atvejais šią atkaitinimo trukmę reikia nustatyti 10000 s tikslumu (t.y., maždaug 3 val. tikslumu), o arseno atveju – 50000 s tikslumu (t.y., maždaug 14 val. tikslumu). Pvz., jeigu, esant atkaitinimo trukmei 100000 s, didžiausia ir mažiausioji jonų koncentracijos dar skiriasi daugiau negu 10%, o esant 110000 s trukmei, jos skiriasi jau mažiau negu 10%, tuomet galima laikyti, kad ieškomoji trukmė yra lygi $(110000 \pm 10000) \text{ s} \approx (31 \pm 3) \text{ val.}$ Jonų koncentracijos profilis, kuris atitinka tokiu būdu gautąją atkaitinimo trukmę, turi būti pavaizduotas tame pačiame grafike, kaip ir 8 punkte minėtosios kreivės. Taigi, iš viso grafike turi būti pavaizduotos 5 kreivės.

4. Modeliavimo duomenų analizė

1. Pagal jonų koncentracijos pasiskirstymo kreivę, kai nėra atkaitinimo, apytiksliai įvertinami didžiausia implantuotų atomų koncentracija silicyje (N_{\max}) ir implantuotų atomų pasiskirstymo pusplotis ΔR (atstumas, kuriame jų koncentracija sumažėja nuo N_{\max} iki $0.61 \cdot N_{\max}$). Jeigu maksimumas yra labai arti kažkurio krašto ($y = 0$ arba $y = 0.7 \mu\text{m}$), tuomet pusplotį ΔR reikia matuoti nuo maksimumo gilyn į padėklą (kaip 16 pav.).

2. N_{\max} apskaičiuojama pagal teorinę formulę (7), naudojant iš grafiko gautą pusplotio ΔR vertę. Teorinis rezultatas palyginamas su modeliavimo rezultatu.



16 pav. Jonų koncentracijos pasiskirstymo pusplotio ΔR matavimas pagal modeliavimo rezultatus