

FABRICACIÓ D'UNIONS POC PROFUNDES AMB IMPLANTACIÓ IÒNICA D'ARSÈNIC I RECUITA TÈRMICA RÀPIDA

per

GONÇAL BADENES GUIA

Centre Nacional de Microelectrònica. CSIC. Bellaterra (Barcelona)

1. INTRODUCCIÓ I MOTIVACIÓ

Una de las tendències més acusades en l'evolució actual de la tecnologia microelectrònica és la reducció de les dimensions dels dispositius fabricats. Aquesta reducció de dimensions, juntament amb l'augment de les dimensions dels xips i de les oblies, permet la integració d'un gran nombre de dispositius en cada xip i la reducció del cost de fabricació dels circuits.

La disminució de les dimensions laterals dels dispositius comporta la necessitat d'una disminució paral·lela en les seves dimensions verticals, per tal de no comprometre les característiques dels dispositius fabricats.

En el cas de l'estructura més important en la tecnologia microelectrònica actual: el transistor MOS, la velocitat de resposta està dominada per la constant de temps RC, associada a la resistència total font-canal-drenador i a les capacitats de les unions *pn* que el formen. A mesura que es disminueixen les dimensions laterals d'aquest dispositiu, també disminueix la resistència deguda al canal i, per tant, les resistivitats de font i drenador afecten significativament la resistència total associada al dispositiu. Una possible solució a aquest problema seria augmentar la profunditat de les zones de font i drenador, però això significaria un augment en les capacitats paràsites, que inlueixen fortament en la capacitat total associada al dispositiu a mesura que se'n disminueixen les dimensions.

El compromís a què s'ha d'arribar consisteix, doncs, a fabricar dispositius amb unions de font i drenador de poca profunditat (per disminuir les capacitats paràsites) i amb altes concentracions de dopants (per disminuir la resistivitat d'aquestes zones).

Dins el marc de la disminució de dimensions verticals dels dispositius microelectrònics, en aquest treball estudiem un dels processos tecnològics

que intervenen en la fabricació de circuits integrats: la fabricació d'unions *pn* mitjançant la implantació d'arsènic en un substrat de silici tipus *p* i la posterior recuita tèrmica necessària per tal de restaurar la qualitat del substrat.

La implantació iònica és el procés tecnològic més àmpliament estès per al dopatge de substrats de silici de manera que ha deixat obsoleta la tècnica de difusió de dopants sòlids o gasosos per a aquest fi. Per tal de disminuir la profunditat de penetració dels ions implantats, actualment la tendència predominant apunta cap a l'ús d'ions pesants, com és el cas de l'arsènic, en la implantació.

La tècnica de recuita tèrmica ràpida, consistent a sotmetre el substrat a temperatures molt altes durant períodes de temps curts, és una de les tècniques que avui dia estan en evolució. En contraposició amb la tècnica més clàssica i més àmpliament estudiada de recuita en forn convencional, la recuita tèrmica ràpida permet sobretot obtenir una major activació elèctrica dels dopants implantats i l'eliminació dels defectes cristal·lins, al mateix temps que es limita la redistribució dels dopants.

Una part d'aquest treball s'ha dedicat a l'estudi dels diversos fenòmens físics que intervenen en la implantació iònica. Pel que fa a la recuita tèrmica, hem estudiat la distribució de dopants que comporta aquest procés, i hem comparat els diversos models existents per a la descripció d'aquest fenomen.

2. IMPLANTACIÓ IÒNICA

Un dels processos bàsics en tecnologia microelectrònica és el dopatge de semiconductors amb la finalitat d'alterar les seves propietats elèctriques. Les dues tècniques més importants que es fan servir a tal efecte són la difusió i la implantació iòniques.

El procés d'implantació iònica consisteix a extreure ions d'un plasma accelerar-los fins a una energia ben determinada i implantar-los dins un sòlid. Aquest procés permet definir amb precisió les característiques elèctriques del substrat semiconductor implantat.

Entre els avantatges que la implantació iònica presenta respecte a la difusió, cal esmentar:

- El nombre d'ions implantats és controlat externament i no per les propietats físiques del substrat, com passa en el cas de la difusió. Això permet l'obtenció de distribucions d'impureses molt ben determinades, tant en concentració com en profunditat, i d'altra banda, la implantació de concentracions de dopants molt per sobre de la solubilitat de la impuresa en el substrat.

- Produeix una dispersió lateral de dopants molt petita.
- Permet processos autoalineats.
- Permet el dopatge a través d'altres capes.
- Produeix resultats d'una gran repetibilitat i homogeneïtat.
- El procés pot ser dut a terme a baixa temperatura.

Les característiques més atractives de la implantació iònica com a medi d'introducció de dopants dins un cristall són el control precís que permet, tant de l'energia com del flux d'ions, i també la puresa química dels ions incidents.

Un dels paràmetres més importants per a la descripció de les característiques d'una implantació iònica és la distribució d'impureses que aquesta produeix en el substrat. Aquesta distribució depèn, naturalment de tota la sèrie de processos físics que intervenen en el frenat d'ions en un sòlid, que estudiarem amb més profunditat més endavant.

Un dels primers treballs teòrics que intenta determinar la distribució d'ions implantats dins un sòlid és degut a Lindhard, Scharff i Schiott¹, que dona lloc a la coneguda teoria LSS. Aquest model parteix de la suposició que la distribució és gaussiana, i els càlculs es reduïxen a la determinació dels dos primers moments de la distribució (la mitjana i la desviació estàndard). Els resultats que s'obtenen d'aquesta teoria són vàlids en una primera aproximació, i en la pràctica l'ús de taules de valors basades en aquests resultats és bastant freqüent². Tot i això, mesures experimentals precises han mostrat que les distribucions d'impureses que s'obtenen amb implantació iònica no són simètriques.

Un model més elaborat, proposat per Winterbon *et al.*³, descriu més acuradament les distribucions d'impureses a partir del càlcul dels quatre primers moments de la distribució: la mitjana \bar{x} , la desviació estàndard σ , l'asimetria o *skewness* γ , i l'excés o *kurtosis* β . Aquests moments poden ser utilitzats per a reconstruir la distribució d'ions implantats fent servir una distribució de Pearson.

Una alternativa al càlcul dels moments de la distribució consisteix en el càlcul numèric de les distribucions a base del mètode de Montecarlo. Un d'aquests tipus de càlcul ha estat presentat per Biersack i Haggmark⁴, i es coneix amb el nom de TRIM (*transport of ions in matter*). Aquest serà el mètode en què estarà basat aquest treball. En aquest model, la trajectòria d'un gran nombre d'ions és seguida al llarg de les col·lisions binàries amb els nuclis del substrat i el frenat viscos a causa dels electrons fins que, bé la seva energia cinètica cau per sota d'un valor determinat, moment en el qual es suposa que l'ió queda en repòs, o bé l'ió surt dels límits establerts per al substrat.

2.1. Canalització

En el cas que la implantació es realitzi sobre un substrat cristal·lí, cal tenir en compte el fenomen de la canalització o *channeling*. Aquest fenomen consisteix en el fet que els ions que penetren en el sòlid en una direcció que coincideix amb un dels eixos cristal·lins poden penetrar més profundament que els altres, atès que la seva interacció amb els nuclis dels substrats és molt menor.

En principi, el fenomen de la canalització presenta l'avantatge de permetre la implantació d'altres concentracions de dopants a grans profunditats i que produeix un dany menor a la xarxa cristal·lina. En la pràctica, però, s'intenten evitar els efectes d'aquest fenomen, ja que implica una baixa reproductibilitat del procés; això és degut, fonamentalment, al fet que aquest fenomen és *molt* sensible a petites variacions en l'angle de penetració dels ions en el sòlid, i al fet que seria necessari fer la implantació a través de superfícies sense cap mena de defecte.

Per tal de minimitzar els efectes de la canalització, en la pràctica es fa servir algun dels mètodes següents:

- Es col·loca l'òbvia de manera que la seva normal formi un angle d'uns 7° , amb una inclinació lateral d'uns 10° respecte a la direcció d'escombratge del feix d'ions per tal d'evitar que els ions puguin entrar paral·lelament a un dels eixos cristal·logràfics.
- La implantació es realitza a través d'una capa amorfa, com pot ser una capa d'òxid o nitrur de silici.
- Es realitza la implantació a través d'una capa amorfa formada mitjançant la implantació d'ions energètics d'argó, silici, germani o d'altres ions sense activitat elèctrica.
- La implantació es realitza a alta temperatura perquè l'agitació tèrmica dels àtoms del substrat disminueixi l'amplada efectiva dels canals.
- S'implanta a baixa temperatura perquè els ions implantats puguin amortitzar més fàcilment la superfície del substrat.

2.2. Dany produït al cristall

A causa de la interacció que té lloc entre l'ió i els àtoms que formen la xarxa cristal·lina del substrat, pot produir-se la pèrdua d'aquestes característiques cristal·lines. Efectivament, si l'energia transferida per l'ió incident a un àtom del substrat és major que l'energia de desplaçament E_d que el manté lligat a la xarxa (que, en el cas del silici, és d'uns 15 eV), aquest àtom sortirà de la seva posició en la xarxa, crearà una vacant i, si

la seva energia és prou gran, podrà arribar a desplaçar altres àtoms. Aquest fenomen pot arribar a crear una capa amorfa en la superfície del substrat si la dosi implantada és prou gran.

Segons el model de Kinchin i Paese^{5, 6}, que és vàlid a ions pesants, el nombre d'ions desplaçats v per un ió incident en un blanc amorf és, aproximadament:

$$v(E) = \frac{E}{2E_d} \quad [1]$$

on E és l'energia de l'ió incident.

Un dels paràmetres que té una forta influència en el dany produït per la implantació en el substrat és la temperatura a què es fa la implantació. Així, a mesura que la temperatura del substrat augmenta, el dany produït per a implantació disminueix, atès que la major mobilitat de les vacants permet la reconstrucció de l'estructura cristal·lina.

Cal assenyalar que no sempre el dany produït per la implantació és perjudicial. Així, els defectes creats en la cara posterior d'una oblia per una implantació d'argó poden actuar com a centres d'atrapament d'impureses metàl·liques i de defectes existents en l'oblia quan s'efectua un tractament tèrmic posterior a la implantació. Aquesta tècnica es coneix amb el nom de *gettering*.

Els efectes negatius que té la implantació iònica sobre les propietats elèctriques dels substrats cristal·lins de silici fan necessari sotmetre aquests a un procés tèrmic, conegut amb el nom de recuita o *annealing*, l'objectiu del qual és l'eliminació dels defectes cristal·lins i l'activació elèctrica de les impureses implantades.

2.3. Unions poc profundes

Com s'ha dit abans, la disminució de les dimensions laterals dels dispositius microelectrònics fa necessària la disminució de les determinades en profunditat i, en particular, de les profunditats d'unió, per tal d'obtenir característiques elèctriques bones.

Amb processos de difusió no és possible aconseguir unions *pn* d'una profunditat al voltant de 0,2 μm o menors, com exigeixen les tecnologies VLSI. En aquestes condicions, per a aconseguir concentracions de dopants en superfície acceptables i, per tant, resistències per quadre baixes, seria necessari fer les difusions a temperatures tan altes que això faria impossible mantenir la profunditat d'unió per sota de les cotes esmentades.

La implantació iònica fa possible la fabricació d'aquest tipus d'unions. Les consideracions que s'han de verificar perquè això sigui cert són:

- L'implantador ha de ser capaç de proporcionar corrents iònics alts (de l'ordre d'alguns mA) que permetin la implantació de dosis elevades (entre 10^{15} i 10^{16} cm⁻²) en temps compatibles amb processos industrials (de l'ordre de minuts).
- L'energia d'implantació ha de ser baixa, de manera que puguin aconseguir perfils d'impureses de poca profunditat.

Quan es fixen els paràmetres per a l'obtenció d'una determinada distribució d'impureses amb implantació iònica, s'ha de tenir sempre en compte que el procés de recuita que necessàriament seguirà al procés d'implantació produeix una certa redistribució dels dopants implantats i augmenta la profunditat de la unió.

En el cas de la tecnologia CMOS, és necessària la implantació d'impureses de tipus *p* (bor) per a la fabricació de les fonts i drenadors dels transistors *p* i la implantació d'impureses tipus *n* (fòsfor, arsènic, antimoni) per a la fabricació dels transistors tipus *n*.

Considerem, en primer lloc, el cas de les implantacions de bor. En aquest cas, a causa de la baixa massa atòmica els ions implantats, que fa molt difícil l'amorfització del substrat de silici, la influència dels efectes de la canalització en la distribució d'ions implantats és molt important. Efectivament, les «cues» degudes a la canalització que s'obtenen en les distribucions d'impureses arriben a ser de 0,35 μm o majors.⁷

Per tal d'evitar al màxim els efectes de la canalització del bor, han estat proposades diverses tècniques, com és la preamorfització del substrat per implantació de silici i la posterior implantació de BF₂⁺, que, d'una banda, augmenta el poder amorfitzador de la implantació i, de l'altra, disminueix l'energia efectiva d'implantació dels ions de bor. La molècula de BF₂⁺ es dissocia pràcticament en la seva primera interacció amb els àtoms de la xarxa, i dona lloc a àtoms de bor d'energia més baixa. D'aquesta manera, pot aconseguir una disminució del rang projectat de la implantació, des de 1.000 Å (corresponents a una implantació de B⁺ a energia 30 keV) fins a només uns 300 Å (BF₂⁺, 50 keV).⁸ Amb aquesta tècnica s'han aconseguit unions amb una profunditat, després de la recuita, al voltant de 0,2 μm.^{7, 9, 10}

Anàlogament al cas del bor, en el cas de les implantacions de dopants de tipus *n*, la tendència general és reemplaçar els ions lleugers per ions pesants, així, habitualment es tendeix a substituir el fòsfor per l'arsènic. Precisament en aquest treball ens centrarem en l'estudi d'unions fabricades a partir d'implantacions d'arsènic sobre un substrat de silici tipus *p*.

Els avantatges que presenta la utilització d'ions pesants estan relacionats amb el fet que aquests experimenten un major frenat nuclear, que és el que influeix més fortament en l'amortització, i per tant amortitzen més

fàcilment la superfície del silici; d'aquesta manera pot evitar-se la canalització i l'augment en la profunditat del perfil implantat que aquesta comporta.

En els casos en què les implantacions hagin de fer-se a energies molt baixes per aconseguir una penetració mínima, o bé quan les dosis implantades siguin baixes, és necessària la preamortització del substrat mitjançant la implantació d'ions sense activitat elèctrica, per tal de minimitzar els efectes de la canalització. En el cas d'implantacions d'arsènic en dosis majors de 10^{14} cm^{-2} , aquesta preamortització no és necessària, atès que els mateixos ions d'arsènic fan la preamortització. En aquests casos, doncs, els resultats que s'obtenen amb preamortització o sense són pràcticament idèntics.¹¹

Les profunditats d'unió estàndard que s'obtenen amb implantacions de As, tenint en compte la posterior recuita tèrmica, són al voltant de 0,2 μm ,^{12, 9} tot i que poden aconseguir-se unions de profunditat molt menor.¹³

Una de les tècniques utilitzades recentment per a millorar les característiques elèctriques de les unions consisteix en el tractament de la superfície de silici ja implantada i recuita per a la formació de siliciürs de platí o titani.^{7, 10, 14} Això permet augmentar considerablement la conductivitat de les zones de font i drenador construïdes amb aquesta tècnica, i s'aconsegueixen disminucions en la resistència per quadre des de valors de $200 \Omega/\square$ fins a valors de $8 \Omega/\square$,⁷ que, juntament amb la baixa capacitat paràsitica que s'obté en fer unions poc profundes, dona lloc a dispositius amb característiques elèctriques molt bones.

2.4. Modelització

El model teòric que descriu els processos d'implantació iònica ha de contenir una descripció física acurada dels fenòmens associats amb la penetració d'ions energètics dins dels sòlids. En particular, ha de permetre calcular la pèrdua d'energia de l'ió en travessar el sòlid i la distribució final d'ions implantats en el sòlid un cop aquests han quedat en repòs. A més, ha de tenir en compte efectes com són l'excitació electrònica dels àtoms, el desplaçament dels àtoms de la xarxa cristal·lina i la producció de fonons i plasmons deguda al pas dels ions.

Els ions implantats en el sòlid perden mitjançant col·lisions successives amb els nuclis i a causa d'interaccions amb els electrons del material que forma el blanc del feix d'ions, que anomenarem *substrat*.

Els mecanismes bàsics que determinen el procés de frenat dels ions són:

- Col·lisions entre l'ió incident i els nuclis (frenat nuclear). Aquest procés

produeix una part de l'intercanvi energètic i, sobretot, la desviació de la trajectòria de l'ió.

- Interaccions entre l'ió i els electrons del substrat (frenat electrònic). El resultat d'aquestes interaccions és bàsicament la pèrdua d'energia de l'ió. No es produeixen desviacions angulars apreciables en la trajectòria de l'ió.

Tot i que aquests processos estan correlacionats, normalment es considera que són independents, atès que la influència d'aquesta correlació en la distribució d'ions calculada és negligible.¹⁶

Per a aquest treball hem optat per utilitzar un programa de simulació que fa servir el mètode de Montecarlo per al càlcul de la pèrdua d'energia i la dispersió d'ions energètics dins substrats amorfs. Aquest programa, TRIM (*transport of ions in matter*), que va ser desenvolupat per Biersack i Ziegler,^{4, 17} ha estat utilitzat àmpliament al llarg de bastants anys, i la seva validesa sembla provada.^{17, 18}

L'elecció d'aquest programa ha estat motivada per diversos factors. En primer lloc, i potser el més important, està la disponibilitat del codi font del programa, àmpliament documentat, en FORTRAN IV, cosa que permet fer-hi modificacions per adequar-lo a les necessitats particulars de cada cas. La disponibilitat del codi font, combinat amb la utilització del mètode e Montecarlo dóna un control total sobre la simulació, que seria impossible si s'hagués fet servir una formulació basada en la teoria de transport. Així, és possible el tractament rigorós de la dispersió elàstica i la determinació amb facilitat de distribucions energètiques i angulars. Com a aplicació, és possible incloure en el programa la descripció dels fenòmens de canalització que tenen lloc en substrats cristal·lins.¹⁹

Un altre dels factors a tenir en compte per a l'elecció d'aquest programa de simulació és el fet que permet la simulació bidimensional dels processos d'implantació. A més, el resultat proporcionat pel programa inclou, a més dels moments de la distribució d'ions implantats que pot proporcionar qualsevol mètode de simulació analítica,¹⁶ la distribució d'ions obtinguda numèricament.

En els apartats que segueixen descriurem, en primer lloc, els models que utilitza aquest programa per a la descripció dels fenòmens de frenat nuclear i electrònic i després farem una breu descripció del funcionament del programa.

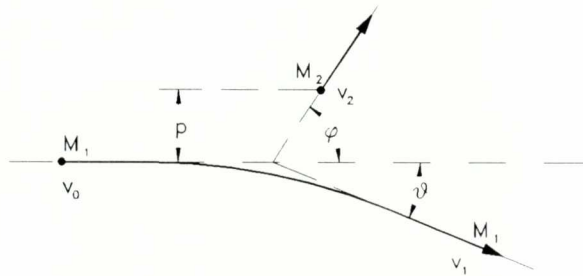
2.4.1. Frenat nuclear

Com s'ha dit abans, amb aquest nom es coneixen els resultats de la interacció entre l'ió incident i els nuclis del substrat. En el rang d'energies

que es fa servir normalment en la implantació iònica de substrats de silici (entre 5 i 500 keV), la contribució més important a les pèrdues enegètiques degudes a col·lisions nuclears és la causada per les interaccions elàstiques; les pèrdues energètiques degudes col·lisions inelàstiques són negligibles. A més, normalment es poden negligir els efectes derivats del fet que els nuclis del substrat formin part d'una xarxa cristal·lina, ja que la implantació iònica normalment es realitza en condicions que tenen com a finalitat minimitzar aquests efectes.

Les col·lisions entre ions i nuclis poden ser considerades segons un model clàssic no relativista. Considerem un ió de massa M_1 i velocitat v_0 que es dirigeix cap a un àtom de massa M_2 . Sigui p el paràmetre d'impacte de la col·lisió (vegeu la figura 1).

a) Sistema de laboratori



b) Sistema de centre de masses

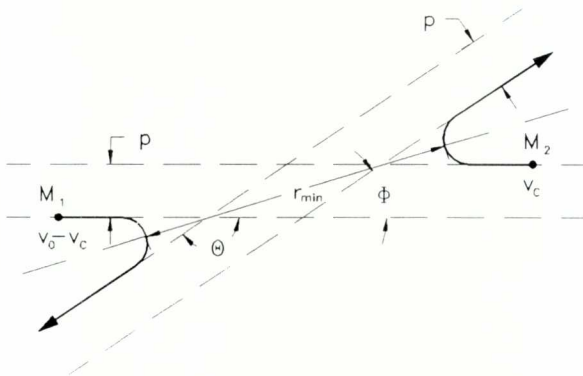


Figura 1. Col·lisió entre un ió i un nucli en repòs. a) Sistema de laboratori. a) Sistema de centre de masses.

Imposant la conservació de l'energia:

$$E_0 = \frac{1}{2} M_1 v_0^2 = \frac{1}{2} M_1 v_1^2 + \frac{1}{2} M_2 v_2^2 \quad [2]$$

i la conservació del moment lineal:

$$M_1 v_0 = M_1 v_1 \cos \vartheta + M_2 v_2 \cos \varphi \quad [3]$$

$$0 = M_1 v_1 \sin \vartheta + M_2 v_2 \sin \varphi \quad [4]$$

podríem obtenir una solució eliminant, per exemple, l'angle φ . D'altra banda, atès que el potencial $V(r)$ que descriu el camp de forces entre les dues partícules és central en tots els casos d'interès, i per tant aquest potencial només depèn de la separació entre les partícules, és molt convenient la introducció del sistema de centre de masses (CM), que permetrà la descripció del problema amb una única equació del moviment.

En aquestes condicions, les velocitats de l'ió i de l'àtom són:

$$v_{\text{ió}} = v_0 - v_c = \frac{M_c}{M_1} v_0 \quad [5]$$

$$v_{\text{àtom}} = v_c = \frac{M_c}{M_2} v_0 \quad [6]$$

on v_c és la velocitat del centre de masses i M_c , la massa reduïda.

Mitjançant una mica de trigonometria, podem calcular fàcilment la relació entre les variables en el sistema de laboratori i el sistema CM. En particular, podem veure que

$$\Phi = \pi - \Theta = 2\varphi \quad [7]$$

$$\tan \vartheta = \frac{M_2 \sin \Theta}{M_1 + M_2 \cos \Theta} \quad [8]$$

$$v_2 = 2v_0 \frac{M_c}{M_2} \cos \varphi \quad [9]$$

i per tant, l'energia T transferida per l'ió a l'àtom inicialment en repòs és:

$$T = \frac{1}{2} M_2 v_2^2 = \frac{2}{M_2} (v_0 M_c \cos \varphi)^2 = \frac{4E_0 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{\Theta}{2} \quad [10]$$

La relació [10] permet el càlcul de l'energia transferida per l'ió a l'àtom si es coneix l'angle de desviació Θ . Ara bé, per a poder calcular la secció eficaç associada a la col·lisió, és necessari conèixer la probabilitat d'obtenir un angle de desviació donat. Per a això, és necessari conèixer la natura de la interacció existent entre ambdues partícules. Nosaltres supo-

sarem que la força que actua entre elles actua únicament en la línia que les uneix. Això, juntament amb l'elecció del sistema CM, ens permetrà reduir el problema a la interacció d'una única partícula amb massa M_c i velocitat v_c , amb un potencial central $V(r)$ centrat a l'origen del sistema CM. Un cop resolt el problema en aquest sistema de referència podem obtenir els angles de desviació corresponents al sistema de laboratori mitjançant les relacions [7] i [8].

Tenint en compte que l'energia en el sistema CM, $E_c = E_0 M_2 / (M_1 + M_2)$ és donada per

$$E_c = \frac{1}{2} M_c (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\Theta}^2) + V(r) \quad [11]$$

i que el moment angular J_c és

$$J_c = M_c v_0 p = M_c r^2 \dot{\Theta} \quad [12]$$

arribem a l'equació radial de moviment:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = v_0 \left[1 - \frac{V(r)}{E_c} - \left(\frac{p}{r} \right)^2 \right]^{1/2} \quad [13]$$

I d'altra banda, atès que $\Theta = v_0 \xi / r^2$, arribem a

$$\frac{d\Theta}{dr} = \frac{d\Theta}{dt} \frac{dt}{dr} = \frac{\dot{\Theta}}{\dot{r}} = \frac{p}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2} \right)^{1/2}} \quad [14]$$

Finalment, integrant aquesta equació al llarg de tot el recorregut, tenim que

$$\Theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{p dr}{r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2} \right)^{1/2}} \quad [15]$$

on r_{min} és la distància mínima de separació entre les partícules (vegeu la figura 1).

Com podem veure, aquesta equació ens permet calcular l'angle de desviació Θ en funció de l'energia E_c , del potencial $V(r)$ i del paràmetre d'impacte p . Per tant, substituint en l'equació [10], podem calcular l'energia transferida a l'àtom, i integrant per a tots els paràmetres d'impacte possibles, obtenir la secció eficaç de frenat nuclear.

En el cas que ens ocupa, el potencial d'interacció $V(r)$ entre l'ió i l'àtom del substrat serà un potencial de coulomb apantallat. En realitat, per al càlcul del poder de frenat han estat utilitzats un gran nombre de models per a la descripció de l'apantallament. Els models més comunament acceptats són l'aproximació del potencial de Thomas-Fermi, l'aproximació de Molière i el potencial de Bohr. Tots aquests models consisteixen en un terme de tipus coulombià en $1/r$ multiplicat per una funció d'apantallament $\Phi(r)$:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r) \quad [16]$$

on e és la càrrega electrònica, i Z_1 i Z_2 són els números atòmics dels dos àtoms que hi intervenen.

Els mètodes més acurats que es coneixen per al càlcul de $\Phi(r)$ consisteixen a aplicar el model de Hartree-Fock per a dos àtoms que s'apropen progressivament fent servir mètodes de càlcul autoconsistent del camp.¹⁷ Altres mètodes fan servir els resultats que es deriven dels models clàssics estadístics de Bohr, Thomas-Fermi, Lenz-Jensen o Molière per a les distribucions de càrrega dels àtoms.

Donat l'enorme nombre de possibles combinacions d'àtoms que s'han de tenir en compte (8.000 combinacions àtom-àtom), és molt convenient disposar d'una fórmula que permeti una predicció acurada del potencial interatòmic per a qualsevol d'aquestes combinacions. Una d'aquestes fórmules ha estat trobada per Ziegler, Biersack i Littmack¹⁷ que han fet servir un càlcul autoconsistent i dona lloc a l'anomenada *funció d'apantallament universal*, Φ_U :

$$\Phi_U(x) = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9432x} + 0,2802e^{-0,4028x} + 0,02817e^{-0,2016x} \quad [17]$$

on $x \equiv r/a_U$, amb

$$a_U = \frac{0,8854a_0}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}} \quad [18]$$

on a_0 és el radi de Bohr. a_U rep el nom de longitud d'apantallament universal. Aquesta fórmula prediu resultats amb desviacions menors que el 5 % respecte als resultats experimentals.

Un cop escollida la funció d'apantallament que farem servir en el nostre model, reprenem el càlcul del poder de frenat que havíem emprès abans. Substituint l'equació [16] en [15] i definint els paràmetres adimensionals $\beta \equiv p/a_U$, $x \equiv r/a_U$ i $\varepsilon \equiv E_c/(Z_1 Z_2 e^2/a_U)$, obtenim:

$$\Theta = \pi - 2 \int_{x_0}^{\infty} \frac{b dr}{x^2 \left(1 - \frac{\Phi(x)}{x\varepsilon} - \frac{b^2}{x^2}\right)^{1/2}} \quad [19]$$

Aquesta equació ens permet calcular l'angle de desviació Θ a partir dels nous paràmetres ϵ i b .

El poder de frenat nuclear $S_n(E_0)$ està relacionat amb l'energia perduda per unitat de longitud per la relació $dE/dR = NS_n(E_0)$, on N és la densitat atòmica del substrat, i es defineix com l'energia mitjana transmesa en sumar sobre tots els possibles paràmetres d'impacte. Per tant:

$$S_n(E_0) = \int_0^\infty T d\sigma = \int_0^\infty T(E_0, p) 2\pi p dp = 2\pi\gamma E_0 \int_0^{p_{max}} \sin^2 \frac{\Theta}{2} p dp \quad [20]$$

on p_{max} és la suma dels dos radis atòmics, i amb

$$\gamma \equiv \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad [21]$$

o bé, introduint els paràmetres adimensionals abans definits,

$$S_n(\epsilon) = \epsilon \int_0^\infty \sin^2 \frac{\Theta}{2} d(b^2) \quad [22]$$

A efectes pràctics, en comptes de calcular la integral de l'equació anterior per a cada cas, el poder de frenat nuclear pot aproximar-se per:¹⁷

$$S_n(E_0) = \frac{8,462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \frac{\text{eV}}{\text{àtom/cm}^2} \quad [23]$$

amb l'expressió següent per a l'energia reduïda ϵ :

$$\epsilon = \frac{32,53 M_2 E_0}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \quad [24]$$

i amb

$$S_n(\epsilon) = \begin{cases} \frac{\ln(1 + 1,1383\epsilon)}{2(\epsilon + 0,01321^{0,21226} + 0,19593^{0,5})} & \text{per } a \epsilon \leq 30 \\ \frac{\ln \epsilon}{2\epsilon} & \text{per } a \epsilon > 30 \end{cases} \quad [25]$$

Finalment, és molt convenient disposar d'una aproximació que ens permeti obtenir estimacions de la integral de dispersió [15] sense necessitat de calcular-la. La solució proposada per Biersack i Haggmark consisteix a utilitzar l'anomenada *fórmula màgica de dispersió de Biersack-Haggmark*, una expressió del tipus

$$\cos \frac{\Theta}{2} = \frac{B + R_c + \Delta}{R_0 + R_c} \quad [26]$$

amb

$$\begin{aligned} B &\equiv p/a \\ R_c &\equiv \rho/a \\ R_0 &\equiv r_0/a \\ \Delta &\equiv \delta/a \end{aligned}$$

on r_0 és la mínima distància de separació entre ió i àtom, a és la distància d'apantallament, Δ és un paràmetre de correcció, el valor del qual es determina mitjançant un ajust, i p és el radi de curvatura en el punt de màxima aproximació i és donat per

$$\rho = -2 \frac{E_c - V(r_0)}{V'(r_0)} \quad [27]$$

El terme Δ conté informació sobre la dispersió interatòmica, i és expressat així:

$$\Delta = A \frac{R_0 - B}{1 + G} \quad [28]$$

on

$$\begin{aligned} A &= 2\alpha\epsilon B^\beta \\ G &= \frac{\gamma}{(1 + A^2)^{1/2} - A} \\ \alpha &= 1 + \frac{C_1}{\epsilon^{1/2}} \\ \beta &= \frac{C_2 + \epsilon^{1/2}}{C_3 + \epsilon^{1/2}} \\ \gamma &= \frac{C_4 + \epsilon}{C_5 + \epsilon} \end{aligned}$$

i $C_1 - C_5$ són paràmetres que han d'ajustar-se segons el potencial interatòmic escollit.

L'error mitjà comès en fer servir la fórmula màgica al llarg dels set ordres de magnitud de variació de ϵ és del 2 %.¹⁷ Cal notar, però, que aquest ajust perd validesa per a valors de $\sin^2(\Theta/2)$ menors que 10^{-4} .

2.4.2. Frenat electrònic

Dins d'aquest fenomen queden englobats tota una sèrie de mecanismes físics, com són:

- Col·lisions electró-electró, resultats en transferències directes d'energia cinètica.

- Excitació o ionització dels electrons de les capes més internes dels àtoms del substrat.
- Excitació d'electrons de la banda de conducció, és a dir, d'electrons lligats feblement al nucli.
- Excitació, ionització o captura d'electrons pel mateix ió.

Un dels models més acceptats per a l'estudi d'aquest fenomen és el de Lindhard.²⁰ Aquest és un tractament autoconsistent d'un gas d'electrons que respon a les perturbacions produïdes per una partícula carregada. Les suposicions en què es basa aquest model són que el gas d'electrons està sobre un fons uniforme de càrrega positiva amb neutralitat de càrrega global, que la densitat inicial del gas d'electrons és constant i que totes les partícules són no relativistes.

El poder de frenat electrònic s_e té la forma

$$S_e = \int I(v, \rho) Z_1^2 \rho dV \quad [29]$$

on I és la funció d'interacció de frenat d'una càrrega unitària de velocitat v amb un gas d'electrons lliures de densitat p , Z_1 és la càrrega de la partícula, i la integral s'avalua sobre tot el volum del substrat. La densitat electrònica p d'un àtom del substrat de nombre atòmic Z_2 es suposa normalitzada, de manera que $Z_2 = \int p dV$, on la integral s'avalua sobre el volum atòmic.

Amb aquestes suposicions, Lindhard²⁰ arribà al resultat que la funció d'interacció I pot escriure's de la manera següent:

$$I = \frac{4\pi e^4}{mv^2} \frac{i}{\pi \omega_0^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} \omega d\omega \left(\frac{1}{\epsilon^l(k, \omega)} - 1 \right) \quad [30]$$

on la constant dielèctrica longitudinal ϵ^l és donada per:

$$\epsilon^l(k, \omega) = 1 + \frac{2m^2 \omega_0^2}{\hbar^2 k^2} \sum_n \frac{f(E_n)}{N} \left(\frac{1}{k^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{k}_n - 2m(\omega - i\delta)/\hbar} + \frac{1}{k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}_n + 2m(\omega - i\delta)/\hbar} \right) \quad [31]$$

on e i m són la càrrega i la massa de l'electró, respectivament, ω_0 és la freqüència clàssica del plasma, donada per $\omega_0 = 4\pi e^2 p/m$, E_n i k_n són l'energia i el vector d'ona de l'electró en enèsim estat (m), $f(E_n)$ és la funció de distribució, i δ és un petit factor d'esmoreïment.

La pèrdua d'energia corresponent a un protó en un sòlid es calcula mitjançant l'aproximació de la densitat local. Aquesta aproximació pressuposa que cada element de volum del sòlid pot ser considerat com un plasma independent. El poder de frenat es calcula, en aquest cas, fent la mitjana dels poders de frenat corresponents a la partícula en el plasma de cadascun dels elements de volum:

$$S_e = \int I(v, \rho) [Z_1^*(v)]^2 \rho dV \quad [32]$$

on I és la interacció de la partícula amb velocitat v en un plasma de densitat p . L'asterisc en l'expressió Z_1^* indica que la càrrega de l'ió pot ser diferent del seu nombre atòmic en cas que l'ió no hagi perdut tots els seus electrons. Això implica, doncs, la necessitat d'avaluar la càrrega efectiva Z_1^* dels ions. Aquesta és una qüestió delicada, en la qual no hi ha consens, tot i el gran esforç que s'hi ha dedicat.¹⁷ En el model utilitzat aquí es suposa que un protó que viatja en un sòlid té sempre càrrega unitària, és a dir, que ha perdut totalment el seu electró.

Donada la dificultat en descriure de forma acurada i amb models fiables tots els fenòmens que intervenen en el frenat electrònic d'ions, el càlcul d'aquests poders de frenat es basa en un procediment empíric consistent a distingir diversos casos particulars.

En el cas d'ions lleugers, com són els ions d'hidrogen i d'heli, es parteix bàsicament dels resultats de mesures experimentals. En el cas de l'heli, es disposa d'una extensa base de dades de poders de frenat en gran part dels substrats que tenen interès. Això es deu al fet que aquestes dades han estat necessàries per al desenvolupament de la tècnica d'anàlisi per *backscattering* al llarg dels anys setanta. Aquesta àmplia base de dades és fàcilment escalable per a obtenir resultats utilitzables en el cas de l'hidrogen.

En el cas d'ions pesants, es distingeixen tres zones diferenciades, en les quals són aplicables models diferents. En el rang de baixes velocitats, quan l'ió es mou a velocitats per sota de la velocitat de Fermi del material que travessa, la pèrdua d'energia electrònica és proporcional a la velocitat de l'ió; a altes velocitats, quan la velocitat de l'ió és molt superior a la de Fermi; els poders de frenat poden ser obtinguts simplement aplicant factors d'escala als poders de frenat corresponents als protons. Finalment, en el rang de velocitats intermedi pot aplicar-se un model basat en les idees de Kreussler, Varelas i Brandt,²¹ i Brandt i Kitagawa,²² que serveix de pont entre els dos extrems anteriors.

Frenat electrònic d'ions lleugers. Els resultats de Ziegler, Biersack i

Littmark¹⁷ indiquen que la relació entre el poder de frenat d'ions de He S_{He} i el d'ions de HS_H és donada per

$$\gamma_{He}^2 = \frac{1}{2^2} \frac{S_{He}}{S_H} \tag{33}$$

on γ_{He} és la càrrega efectiva fraccionària, definida $\gamma \equiv Z^*/Z$, que pot ajustar-se a l'expressió:

$$\gamma_{He} = 1 - \exp \left(- \sum_{i=0}^5 a_i \ln E^i \right) \tag{34}$$

i els coeficients a_i són ajustats a les dades experimentals.

Frenat electrònic d'ions pesants. Com s'ha dit abans, en el cas d'ions pesants, es distingeixen tres casos diferenciats: velocitats menors que la de Fermi, superiors a tres cops la de Fermi i intermèdies.

En el cas que l'ió es mogui amb velocitats inferiors a la velocitat de Fermi del substrat, els electrons del substrat es mouen molt més ràpidament que l'ió, i les col·lisions són bàsicament adiabàtiques, sense pèrdua directa d'energia. Els diferents models teòrics fets servir per a estudiar aquest fenomen preveuen unes seccions eficaces de frenat proporcionals a la velocitat. Experimentalment, s'obté $S_e \propto v$ per a la major part dels materials, amb l'excepció dels semiconductors, en el qual cas es troba $S_e \propto v^{0,7}$. A més, s'ha observat que el frenat electrònic de protons a molt baixa velocitat obeeix a una relació dels tipus $S_e \propto v^{0,9}$, mentre que a velocitats altes el frenat és proporcional a la velocitat.

Per contra, en el cas d'ions amb gran velocitat, una regla empírica àmpliament usada per al càlcul de poders de frenat electrònic consisteix a aplicar factors d'escala sobre els poders de frenat corresponents a ions de H:

$$\frac{S_H(v_1, Z_2)}{S_H(v_2, Z_2)} = \frac{S_{HI}(v_1, Z_2)}{S_{HI}(v_2, Z_2)} \tag{35}$$

on S_{HI} és el poder de frenat electrònic de l'ió pesant i S_H és el frenat electrònic per a l'àtom d'hidrògen.

Segons indica aquesta relació, el poder de frenat electrònic corresponent a un ió pesant a dues velocitats és directament proporcional al poder de frenat electrònic corresponent a l'hidrogen a les mateixes velocitats i en el mateix material.

La relació anterior pot escriure's d'una manera més senzilla:

$$S_{HI} = S_H(Z_{HI}^*)^2 = S_H Z_{HI}^2 \gamma^2 \tag{36}$$

La càrrega efectiva γ pot ser estimada amb una parametrització de la relació de Bohr.Northcliffe:²³

$$\gamma^2 = 1 - \exp\left(\frac{-0,92v_1}{v_0 Z_1^{2/3}}\right) \quad [37]$$

on v_0 és la velocitat de Bohr i v_1 és la velocitat de l'ió.

Cal notar que aquesta regla és vàlida només per a velocitats per sobre de les quals la variació de l'ió és superior a tres cops la velocitat de Fermi del material.

Finalment, el model que descriu el frenat d'ions amb velocitats intermèdies, basat en les idees de Kreussler, Varelas i Brandt,²¹ i de Brandt i Kitagawa,²² parteix de les suposicions següents:

- L'estat de càrrega de l'ió queda determinat suposant que aquest perd tots els electrons de velocitat menor que la velocitat relativa entre l'ió i la velocitat de Fermi dels electrons del substrat.
- En el cas de col·lisions distants, pot aplicar-se la teoria estàndard.
- En el cas de col·lisions properes (quan els electrons penetren dins l'estructura electrònica de l'ió), la pèrdua energètica augmenta a causa de la disminució de l'apantallament.

El resultat que s'obté d'aquest model és que la càrrega efectiva γ de l'ió és donada per:^{22, 17}

$$\gamma = q + (1 - q) \frac{(v_0/v_F)^2}{2} \ln \left[1 + \left(\frac{2\Lambda v_F}{a_0 v_0} \right)^2 \right] \quad [38]$$

on v_F és la velocitat de Fermi corresponent al substrat, q és el grau d'ionització de l'ió, que pot ser aproximat per

$$q = 1 - \exp\left(-\frac{0,92v_r}{v_0 Z_1^{2/3}}\right) \quad [39]$$

amb

$$v_r \equiv \langle |\vec{v}_1 - \vec{v}_F| \rangle = \begin{cases} v_1 \left(1 + \frac{v_F^2}{5v_1^2} \right) & \text{per a } v_1 \geq v_F \\ \frac{3v_F}{4} \left(1 + \frac{2v_1^2}{3v_F^2} - \frac{v_1^4}{15v_F^4} \right) & \text{per a } v_1 \leq v_F \end{cases} \quad [40]$$

La longitud d'apantallament Λ de l'ió és donada per:

$$\Lambda = \frac{2a_0(1 - q)^{2/3}}{Z_1^{1/3} \left(1 - \frac{1-q}{7} \right)} \quad [41]$$

En realitat, el valor de q pot obtenir-se fent servir la relació empírica proposada per Ziegler Biersack i Littmark,¹⁷ que difereix poc de la relació [39], però s'ajusta millor als valors experimentals per a ions amb velocitats baixes:

$$q = 1 - \exp(0,803y_r^{0,3} - 1,3167y_r^{0,6} - 0,38157y_r - 0,008983y_r^2) \quad [42]$$

on $y_r \equiv v_r/(v_0 Z_1^{2/3})$.

Per acabar aquest apartat, podem fer un resum del mètode seguit per a calcular el poder de frenat d'un ió en un determinat material:

- En el cas d'ions d'hidrogen, fem servir directament funcions derivades d'ajustar els valors experimentals. Per a energies que estiguin per sota de 25 keV/uma fem servir $S_e \propto v^{0,9}$, excepte quan $Z_2 \leq 6$, en el qual cas posem $S_e \propto v^{0,5}$, tal com es deriva dels resultats experimentals.
- En el cas d'ions d'heli posem $S_{He} = S_H(Z_{He}\gamma_{He})^2$, i quan l'energia està per sota de 1 keV/uma, posem $S_e \propto v$.
- En el cas d'ions pesants ($Z_1 > 2$), fem servir el model de Brandt-Kitagawa, seguint els passos següents:
 1. Es calcula la velocitat relativa de l'ió v_r amb equació [40].
 2. Es calcula el grau d'ionització de l'ió amb l'equació [42].
 3. Es calcula la longitud d'apantallament de l'ió amb la relació [41].
 4. Calculem la càrrega efectiva γ amb l'equació [38].
 5. Finalment, calculem el poder de frenat electrònic fent servir $S_e = S_H(Z_1\gamma)^2$, on S_H és el poder de frenat equivalent corresponent al protó.
- En el cas d'ions de velocitat molt baixa, fem servir poders de frenat proporcionals a la velocitat, excepte en el cas de $Z_1 \leq 19$ en substrats semiconductors, en el qual cas fem servir $S_e \propto v^{0,75}$.

2.5. Funcionament del programa TRIM

La versió estàndard del programa TRIM permet, a més de calcular el frenat i la dispersió d'ions en substrats amorfs, la determinació de les distribucions monodimensionals o bidimensionals d'ions implantats, la distribució de dany produït en la implantació i les distribucions angulars i de l'energia, tant dels ions retrodifosos com dels transmesos.

El procés de simulació es basa en la tècnica de Montecarlo. Es parteix d'un gran nombre d'ions amb una energia i direcció donades, la història dels quals serà estudiada individualment. Es suposa que la partícula canvia

de direcció com a resultat de col·lisions binàries amb els nuclis del substrat i que es desplaça en línia recta entre col·lisió i col·lisió. La pèrdua d'energia és deguda tant a interaccions amb els nuclis com amb els electrons del substrat. La història de cadascuna de les partícules es segueix fins que, o bé aquesta es queda parada dins el substrat, o bé fins que surt d'aquest. Es suposa que el substrat és amorf i isòtrop, amb els àtoms situats en posicions aleatòries.

Aquest model és vàlid per a ions incidents amb energies compreses entre 0,1 keV i alguns MeV/ima. El límit inferior queda fixat perquè només es tenen en compte col·lisions binàries, i el límit superior perquè es suposa que les partícules són no relativistes.

En aquest programa es fan servir els models de frenat nuclear i electrònic descrits en les seccions anteriors (2.4.1 i 2.4.2). A més, els resultats de l'energia transferida als àtoms del substrat són tinguts en compte per a obtenir estimacions dels efectes d'ionització produïda pel retrocés d'àtoms en cascada, del nombre de vacants produïdes i de l'energia transferida a la xarxa en forma de fonons.

La determinació de la distància recorreguda per l'ió entre col·lisions i del paràmetre d'impacte corresponent a cada col·lisió a energies altes es fa imposant que tant la desviació produïda com la pèrdua energètica siguin petites. Sigui $W_1(p)\delta p$ la probabilitat de trobar un àtom situat a una distància entre p i $p + \delta p$ al llarg d'un recorregut de distància L :

$$W_1(p)\delta p = NL2\pi p \delta p \quad [43]$$

on N és la densitat atòmica del substrat. La probabilitat de no trobar cap àtom amb paràmetre d'impacte entre 0 i p és donada per

$$W_2(p) = \exp(-NL\pi p^2) \quad [44]$$

i, per tant, la probabilitat que l'àtom més proper al llarg del recorregut estigui a una distància entre p i $p + \delta p$ és:

$$W(p)\delta p = W_1(p)W_2(p)\delta p = NL2\pi \exp(-NL\pi p^2)p \delta p \quad [45]$$

En definitiva, el paràmetre d'impacte pot determinar-se a partir de la relació

$$p = \sqrt{-\frac{\ln R_n}{\pi NL}} \quad [46]$$

on R_n és un número aleatori distribuït uniformement en l'interval (0, 1).

En la figura 2 es comparen els resultats de la simulació amb TRIM i amb Suprem III, corresponents a una implantació de As a 50 keV, dosi

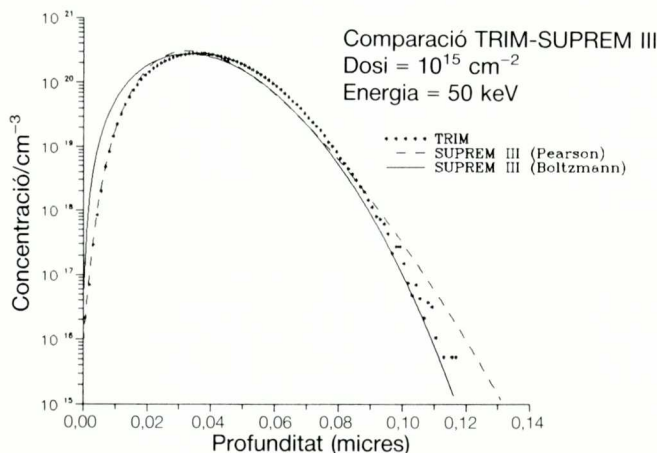


Figura 2. Comparació entre els resultats del programa TRIM i els de Suprem III corresponents a una implantació d'arsenic.

de 10^{15} cm^{-2} . Els models que han estat utilitzats en la simulació Suprem III són, d'una banda, el de Pearson, que és un model analític que consisteix a reconstruir el perfil de dopants implantats a partir dels quatre primers moments de la distribució, que estan emmagatzemats en una base de dades; i, d'altra banda, el model de Boltzmann, que és un model numèric consistent a resoldre l'equació de transport. Segons la documentació del programa de simulació,²⁴ el mètode més acurat d'aquests dos és el que resol l'equació de transport de Boltzmann, però, naturalment, aquest mètode també és el que consumeix més recursos de l'ordinador.

Arribats a aquest punt, cal observar que els resultats obtinguts amb el programa TRIM són consistents, tant amb els resultats que s'obtenen de Suprem III com amb les mesures experimentals realitzades amb la tècnica SIMS, una de les més fiables per a la mesura de distribucions d'impureses.¹⁸ Ara bé, l'ús d'un programa de simulació com és TRIM presenta clars avantatges respecte a altres simuladors de processos com és Suprem III. En primer lloc, la disponibilitat del codi font del programa permet la modificació d'aquest per a ajustar-lo a les necessitats particulars de cada cas. A més, la flexibilitat que representa l'ús del mètode de Monte-carlo permet el control d'una manera precisa de la modelització de cadascun dels processos físics que intervenen en el fenomen que es vol simular. D'altra banda, cal esmentar que TRIM proporciona resultats bidimensionals de distribucions de portadors i de dany que podrien ser utilitzats com a dades d'entrada per a simuladors bidimensionals. Per acabar, comentarem que un dels principals problemes que presenta l'ús del mètode de

Montecarlo i, per tant, un dels problemes de TRIM és que el procés de simulació consumeix temps relativament elevats de la CPU de l'ordinador.

2.5.1. Posada a punt del TRIM

Una part d'aquest treball ha consistit a posar en funcionament el programa TRIM per al càlcul de distribucions iòniques resultants de la implantació. Aquest programa és descrit en detall a la referència.¹⁷

TRIM fa una discretització del substrat en segments o quadrats de dimensió finita, segons si els resultats que volen obtenir-se són monodimensionals o bidimensionals. Els resultats que s'obtenen com a sortida del programa consisteixen en diverses magnituds corresponents a cadascuna de les zones en què s'ha subdividit el substrat; així, un dels resultats que s'obtenen és el nombre de partícules que queden en repòs en cadascuna d'aquestes zones.

Com ja hem dit, el TRIM es basa en el mètode de Montecarlo, consistent en el seguiment d'un determinat nombre de partícules a través del sòlid en què s'implanten, fent servir un model aleatori.

Per al correcte funcionament de tot programa basat en el mètode Montecarlo, és necessari disposar d'un *bon* generador de nombres aleatoris. Tot i que la majoria de sistemes informàtics porten incorporat un generador d'aquest tipus, la seva qualitat sol ser, en el millor dels casos, dubtosa. Per tant, hem optat per utilitzar un dels millors algorismes coneguts per a la generació de nombres aleatoris, combinació d'una seqüència de Fibonacci i d'una seqüència aritmètica. Aquest algorisme, implementat en FORTRAN IV, passa tots els tests dissenyats per a generadors de nombres aleatoris,²⁵ i és portable a qualsevol màquina la representació en punt flotant de la qual sigui de vint-i-quatre bits de mantissa, com a mínim.

Una de les variables que poden influir fortament en el resultat obtingut d'una simulació Montecarlo és el nombre de partícules estudiades. Per a obtenir resultats fiables, serà necessari que el nombre de partícules sigui suficientment gran com perquè les fluctuacions aleatòries no afectin sensiblement el resultat. Per estudiar l'efecte que té el nombre d'ions estudiats en una simulació sobre el resultat final, hem fet simulacions d'una implantació d'arsènic en silici a una energia de 50 keV amb diferents nombres d'ions: 1.500, 15.000, 150.000 i 1.500.000 ions.

Els valors que proporciona el TRIM com a sortida, que consisteixen en el nombre d'ions que queden en repòs en cadascuna de les cel·les de la xarxa de discretització, han de ser renormalitzats per convertir-los en valors de concentració. El factor α pel qual han de ser multiplicats els nombres d'ions que hi ha a cada cel·la és:

$$\alpha = \frac{N_D}{N_{tot}\Delta} \tag{47}$$

on N_D és la dosi implantada, N_{tot} és el nombre total d'ions emprat en la simulació TRIM i Δ és l'amplada de les cel·les de la xarxa de discretització.

Si apliquem aquest factor de renormalització a les dades obtingudes fent servir un valor per a la dosi de $N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, obtenim els valors de la concentració en funció de la profunditat que hem representat en la figura 3.

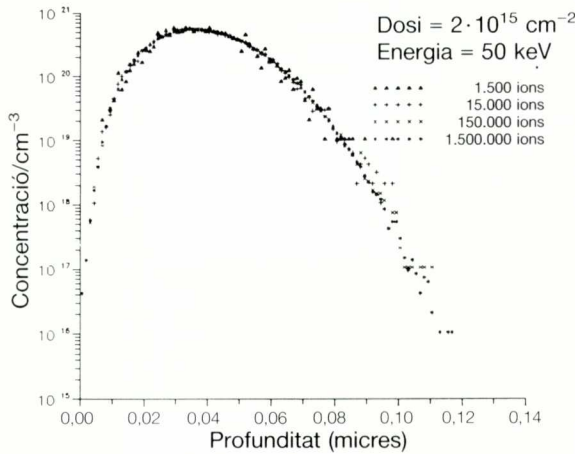


Figura 3. Comparació dels resultats renormalitzats d'una simulació TRIM d'implantació de As a 50 keV amb diferents nombres d'ions.

Els resultats obtinguts d'aquestes simulacions mostren que tant la situació del màxim de la distribució com la seva forma són similars en totes les simulacions. Això encara és més evident quan es comparen els resultats obtinguts per als quatre primers moments de les distribucions obtingudes, que es mostren a la taula 1. Com podem veure, les variacions en aquests valors degudes a la variació del nombre d'ions implantats són certament petites.

Com ja havíem comentat abans, a partir dels valors dels moments de la distribució és possible reconstruir el perfil de dopants. En la figura 4 mostrem els valors obtinguts de TRIM en una simulació amb 1.500.000 ions, juntament amb la reconstrucció de la distribució que s'obté de fer servir els moments corresponents (vegeu la taula 1), que, en aquest cas, és del tipus Pearson VI. Com podem observar, la concordància obtinguda és molt bona i, a més, la utilització dels moments per a la reconstrucció

Taula 1. Comparació dels moments de les distribucions obtingudes amb simulacions TRIM amb diferents nombres d'ions. Implantació d'arsenic en silici. $E = 50$ keV.

Nombre d'ions	Moment de la distribució			
	Rang projectat \bar{x}	Desviació estàndard σ	<i>Skewness</i> γ	<i>Kurtosis</i> β
1.500	0,03910 μm	0,01372 μm	0,44	3,16
15.000	0,03898 μm	0,01396 μm	0,43	3,05
150.000	0,03914 μm	0,01398 μm	0,41	2,99
1.500.000	0,03916 μm	0,01396 μm	0,40	2,96

de la distribució permet, d'una banda, l'eliminació del soroll característic de les simulacions Montecarlo, sobretot en les zones on hi pocs ions per cel·la, i l'altra banda, augmentar el rang dinàmic en què s'estenen els resultats.

Tornant a les distribucions numèriques obtingudes, la diferència principal que s'observa en les simulacions d'un gran nombre d'ions respecte a les de menor nombre és un major rang dinàmic dels valors obtinguts i una major suavitat de la distribució, sobretot en la zona del màxim. Cal tenir en compte, però, que el temps de CPU d'ordinador involucrat en cada simulació està directament relacionat amb el nombre d'ions estudiats. Així, la simulació amb 1.500.000 ions consumeix aproximadament

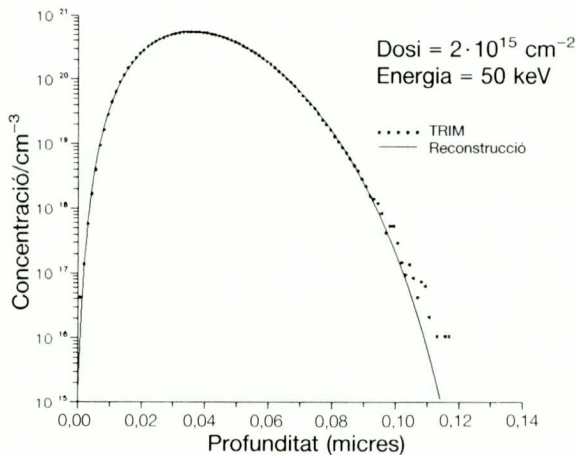


Figura 4. Reconstrucció de la distribució de dopants obtinguda amb una simulació TRIM a partir dels moments d'aquesta distribució.

vint-i-una hores de CPU d'un ordinador VAX 8810 sota VMS o vuit hores de CPU d'un IBM 3090 sota VM/CMS, mentre que la simulació amb 1.500 ions només consumeix al voltant d'un minut de CPU de VAX.

En resum, podem dir que, en el cas que es vulgui treballar directament amb les distribucions numèriques que s'obtenen de TRIM, cal fer simulacions amb un gran nombre d'ions, sobretot perquè això ofereix resultats amb un major rang dinàmic; en el cas que el que interessi siguin els paràmetres característics de la implantació (els moments de les distribucions) o bé quan es vulguin construir les distribucions a partir dels moments que les caracteritzen, serà suficient una simulació amb un nombre reduït d'ions (uns deu mil és, la majoria de cops, més que suficient), cosa que, d'altra banda, estalvia molt temps de CPU.

3. RECUITA TÈRMICA

L'aplicació pràctica de la implantació iònica per a la fabricació de circuits integrats fa necessària la recuita tèrmica posterior al procés d'implantació. Les finalitats d'aquesta recuita tèrmica són:

- Restaurar la qualitat cristal·lina del substrat mitjançant el recreixement del cristall i disminuir l'existència de defectes cristal·lins.
- Activar elèctricament els ions implantats mitjançant la incorporació d'aquests a la xarxa cristal·lina.
- Controlar la difusió dels dopants implantats fins a la profunditat desitjada.

Bàsicament, hi ha dos tipus de recuita tèrmica: la recuita en forn convencional, que s'esdevé a temperatures relativament baixes (entre 500 i 1.000 °C, aproximadament), i al voltant d'una hora; i la recuita tèrmica ràpida (RTA), amb temperatures entre 1.000 i 1.300 °C durant temps curts. Els mètodes que es fan servir per escalfar en aquestes recuites ràpides poden ser la il·luminació amb llum incoherent (llums halògens), cas en què la recuita té lloc al llarg d'uns segons, o bé llum coherent (làser) o mitjançant la utilització d'un feix d'electrons (*electron beam*); en aquests casos, la recuita té lloc al llarg de microsegons o mil·lisegons.

3.1. Eliminació de defectes cristal·lins

Les característiques cristal·lines del material sobre el qual es fabriquen els dispositius microelectrònics determina de forma crítica les propietats d'aquests dispositius. Així, per exemple, una alta densitat de defectes cris-

tal·lins en la zona de buidament d'un diode en inversa produeix corrents de fuga elevats. D'altra banda, els transistors MOS són molt sensibles a densitats altes de defectes puntuals en la zona del canal, tot i que admeten sense massa deterioració de les seves característiques elèctriques defectes de dislocacions verticals. Això permet la realització pràctica de tecnologies *silicon on insulator* (SOI).

Un dels possibles defectes que usualment es troba després d'una implantació iònica és una capa amorfizada. Una capa amorfa "recreix" a partir del substrat cristal·lí per epitàxia de fase sòlida a temperatures a partir al voltant dels 550 °C. A temperatures de 1.100 °C, el recreixement del cristall sobre substrats de silici $\langle 100 \rangle$ té lloc en només alguns mil·lsegons.²⁶ El recreixement en substrats amb orientació $\langle 110 \rangle$ o $\langle 111 \rangle$ és més lent, però s'hi observa una cinètica similar.²⁷

Altres tipus de defectes, com són els diversos tipus de defectes puntuals, són més difícils d'eliminar. Efectivament, mentre que un procés de recuita a 600 °C durant trenta minuts permet la recristal·lització de la capa amorfa, les dislocacions, *stacking faults*, *dislocation loops*... es mantenen sense ser eliminats fins a temperatures de 1.200 °C.^{27, 18}

Donada la dificultat que suposa l'eliminació dels defectes que hi ha a la interfície silici amorf-cristal·lí (α -c), consistents en dislocacions localitzades, un procediment àmpliament utilitzat per tal de minimitzar els efectes d'aquests defectes consisteix a fer que les impureses es difonguin de manera que la unió *pn* estigui situada més enllà d'aquesta interfície.^{13, 10} D'aquesta manera poden reduir-se considerablement els corrents de fuga corresponents a les unions polaritzades en inversa.

Segons Seidel,¹¹ per eliminar els defectes més enllà de la interfície α -c són necessàries recuites mínimes de 1.200 °C durant 1,8 segons, 1.100 °C durant 10 segons, 950 °C durant 60 minuts o bé 850 °C durant 50 hores.

3.2. Activació d'impureses

La major part dels àtoms d'impureses implantades queden ocupant posicions intersticials de la xarxa danyada. Això, juntament amb la gran quantitat de defectes locals i la baixa mobilitat dels portadors de càrrega en l'estructura cristal·lina fortament danyada, fa que la resistivitat de les zones dopades immediatament després de la implantació sigui extremament alta (fins a 10 k Ω /□).

En el cas que la implantació formi una capa amorfa sobre el substrat cristal·lí, la incorporació dels dopants a la xarxa, i per tant la seva activació elèctrica, pot tenir lloc al mateix temps que el creixement epitaxial quan s'efectua una recuita tèrmica.

El procés d'activació elèctrica es veu influït fortament per interaccions entre defectes residuals creats per la implantació iònica, *clustering* i precipitació de dopants. Segons sembla,²⁸ s'obté una millor activació elèctrica de les impureses si aquestes han estat implantades que si han estat introduïdes en el substrat mitjançant un procés de difusió. Això és degut al fet que en el procés d'implantació no es formen complexos d'arsènic, cosa que sí que passa en el cas de la difusió.

L'activació elèctrica d'àtoms d'arsènic en concentracions per sobre de 10^{20} àtoms/cm³ queda restringida pel límit de solubilitat sòlida dels àtoms de As ocupant posicions substitucionals a la xarxa. Aquest límit de solubilitat elèctric és similar a la solubilitat atòmica a temperatures de l'ordre de 1.200 °C, però s'ha trobat que és un ordre de magnitud menor a 800 °C.

Un dels avantatges importants que presenta la tècnica de RTA respecte a les recuites en forn convencional consisteix en el fet que produeix una major activació elèctrica dels dopants.^{10, 29, 30, 31, 32}

3.3. Difusió

A més d'efectes beneficiosos de la recuita tèrmica, com ho són l'activació elèctrica dels dopants i l'eliminació del dany produït en la xarxa per la implantació, els processos de recuita produeixen també la redistribució dels dopants per difusió. Tot i que aquesta redistribució pot ser un efecte útil en processos com el *drive-in*, quan el que es vol és fabricar unions poc profundes, com és el cas que ens ocupa, cal evitar al màxim la difusió de les impureses.

Per tal de minimitzar la difusió no desitjada de dopants, una de les tècniques que pot ser utilitzada és la de recuita tèrmica ràpida. Aquesta tècnica permet controlar la difusió dels dopants al mateix temps que s'elimina el dany fent servir processos a alta temperatura i curt temps.

La modelització de la difusió la farem fent servir el model proposat per Hu i Schmidt^{33, 34} i per Warner i Wilson,³⁵ amb coeficient depenent de la concentració, que incorpora els efectes de les vacants carregades i del camp elèctric autoinduït.

Considerem l'equació de continuïtat

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J} \quad [48]$$

on N és la densitat d'impureses i \vec{J} és la densitat de corrent d'impureses.

La densitat de corrent queda determinada per

$$\vec{J} = -D_N \nabla N + Z \mu_N N \vec{E} \quad [49]$$

on D_N és el coeficient de difusió, Z és la càrrega corresponent a la impuressa, μ_N és la mobilitat i ε és el camp elèctric. $D_N \nabla N$ rep el nom de *terme de difusió*, mentre que $Z\mu_N N \varepsilon$ és el terme d'arrossegament degut al camp elèctric.

Podem obtenir una aproximació per al camp elèctric autoinduit a partir de la concentració N fent servir la hipòtesi de neutralitat de càrrega local $n - p - ZN = 0$. En aquestes condicions, el potencial ψ referit al centre del *gap* queda determinat per

$$\psi = \frac{kT}{q} \operatorname{arg} \sin h \left(\frac{ZN}{2n_i} \right) \quad [50]$$

on n_i és la concentració intrínseca de portadors. Per tant:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\psi = -\frac{kT}{q} \frac{Z\nabla N}{2n_i \sqrt{(ZN/2n_i)^2 + 1}} \quad [51]$$

Fent servir l'equació d'Einstein $D_N = \mu_n kT/q$ i substituint a l'equació [49], arribem a

$$\vec{J} = -D_N \left(1 + \frac{Z^2 N}{2n_i \sqrt{(ZN/2n_i)^2 + 1}} \right) \nabla N \quad [52]$$

i definint

$$\alpha \equiv \frac{N}{2n_i} \quad [53]$$

$$h(\alpha) \equiv 1 + \frac{Z^2 \alpha}{\sqrt{(Z\alpha)^2 + 1}} \quad [54]$$

arribem a

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \nabla \cdot (D_N h(\alpha) \nabla \alpha) \quad [55]$$

o bé, posant $D(\alpha) \equiv D_N h(\alpha)$,

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \nabla \cdot (D(\alpha) \nabla \alpha) \quad [56]$$

on $D(\alpha)$ és el coeficient total de difusió, definit com $D(\alpha) \equiv D_N h(\alpha)$, amb

$$\alpha \equiv \frac{N}{2n_i} \quad [57]$$

$$h \equiv 1 + \frac{Z^2 \alpha}{\sqrt{(Z\alpha)^2 + 1}} \quad [58]$$

n_i és la concentració intrínseca de portadors i Z és la càrrega de les impuresses implantades.

Sembla clar [36, 37] que el mecanisme de difusió d'impureses en silici dominant a les temperatures habituals en què es fan les recuites tèrmiques és l'anomenada *difusió per vacants*, que té lloc a base de l'intercanvi de posicions de la xarxa cristal·lina entre vacants i impureses.

Les vacants de la xarxa cristal·lina de Si existeixen en quatre estats de càrrega: V^+ , V^0 , V^- i V^- . Un coeficient de difusió que tingui en compte les contribucions de tots aquests possibles estats de càrrega de les vacants pot escriure's de la forma

$$D_N = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right)^2 + D_i^+ \left(\frac{N}{n_i} \right) \quad [59]$$

on D_i^V és el coeficient intrínsec de difusió deguda a cada estat de càrrega V de les vacants i els termes N/n_i tenen en compte les variacions en les concentracions de vacants amb el dopatge o el nivell de Fermi.

El coeficient de difusió total $D \equiv hD_N$, que inclou l'efecte del camp elèctric autoinduit és, per tant:

$$D = h \left[D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right)^2 + D_i^+ \left(\frac{N}{n_i} \right) \right] \quad [60]$$

Observem que multiplicar el terme h per tots els termes D_i^V no és estrictament correcte, atès que l'estat de càrrega dels parells impuresa⁺-vacant⁻ o bé impuresa⁻-vacant⁺ és neutre, i per tant la seva difusió no es veu influïda pel camp elèctric. Tot i això, s'ha trobat empíricament que l'equació [60] és correcta per a les impureses on D_i^0 és important respecte a D_i^+ o D_i^- .³⁶ Aquesta condició és verificada per l'arsènic.

3.3.1. Difusió d'arsènic en silici

Per a cada impuresa s'ha trobat que els mecanismes de difusió dominants estan lligats a un determinat estat de càrrega de les vacants. En particular, els donadors, com és el cas de l'arsènic, en estar carregats positivament es difonen amb vacants neutres o carregades negativament. En conseqüència, el terme $D_i^+(N/n_i)$ no té cap influència en la seva difusió.

En principi [36], s'havia pensat que per als elements de tipus n del Grup V (excepte el fòsfor) la influència del terme $D_i^-(N/n_i)^2$ era negligible. Per tant, el coeficient efectiu de difusió de As en Si segons aquest model seria:

$$D_N(\text{As}) = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right) \quad [61]$$

Tot i que la validesa d'aquest model sembla provada quan s'utilitza per predir la difusió d'arsènic que té lloc en recuites en forn convencional,^{33, 38, 28, 18, 39} els resultats que s'hi deriven quan s'aplica a recuites tèrmiques ràpides són incorrectes. Efectivament, les mesures experimentals de distribucions d'impureses corresponents a RTA (*rapid thermal annealing*) mostren sistemàticament que l'arsènic es difon més enllà d'allò que caldria esperar si el model de l'equació [61] fos aplicable en aquests casos.

Com a solució a aquest problema, inicialment es va proposar fer servir un model de *transient enhanced diffusion* (TED) o augment transitori de la difusió [12, 26, 40]. Segons aquest model en els primers instants de la recuita es produeix una redistribució ràpida dels dopants relacionada amb la formació i atrapament de defectes puntuals, probablement vacants, durant el procés d'implantació. Al llarg de la recuita tèrmica ràpida, aquests defectes queden inicialment alliberats, i produeixen un moviment ràpid de l'arsènic durant un temps breu, que acaba amb un procés de recombinació [12].

La modelització de l'efecte TED proposada per Fair²⁶ consisteix a multiplicar el coeficient efectiu de difusió [61] per un terme dependent del temps que afecti només durant un curt espai de temps:

$$D_N^{\text{TED}} = D_N \left[1 + K'(T) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] \quad [62]$$

Els valors per als paràmetres K' i τ proposats per Fair²⁶ són:

$$K'(T) = 1,3 \cdot 10^{-6} \left(\frac{E(\text{keV})}{200} \right) \exp\left(\frac{2,0 \text{ eV}}{kT}\right) \quad [63]$$

$$\tau = 4,4 \text{ s} \quad [64]$$

on E és l'energia amb la qual han estat implantats els ions.

Ara bé, si el model TED fos vàlid, caldria esperar, aproximadament, la mateixa difusió en un temps d'1 o 2s que en 10s.⁴¹ Atès que aquest efecte no s'observa,^{41, 11} actualment el model més acceptat sembla ser el de *concentration enhanced diffusion* (CED) o augment de la difusió degut a altes concentracions.^{9, 10, 30}

Aquest model inclou un terme de tipus $D_i^-(N/n_i)^2$ en el coeficient efectiu de difusió $D_N(\text{As})$. D'aquesta manera poden obtenir-se resultats que s'ajusten als valors experimentals, tant en el cas de temps de difusió curts com en el de temps llargs. Així doncs, segons aquest model, tenim:

$$D_N(\text{As}) = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right) + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right)^2 \quad [65]$$

Farem servir aquest model amb els valors de D_i^0 i D_i^- comunament acceptats, proposats per Fair:³⁶

$$D_i^0 = 0,066 \exp\left(-\frac{3,44 \text{ eV}}{kT}\right) \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [66]$$

$$D_i^- = 12,0 \exp\left(-\frac{4,05 \text{ eV}}{kT}\right) \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [67]$$

D'altra banda, Fair proposa un valor per a l'energia d'activació corresponent al terme D_i^- igual a 4,32eV. Per tant, tenim

$$D_i^- = D_0^- \exp\left(-\frac{4,32 \text{ eV}}{kT}\right) \quad [68]$$

on D_0^- és un paràmetre que intenterem determinar en aquest treball, atès que el seu valor no es troba en la literatura.

Cal esmentar finalment que s'ha dedicat un considerable esforç a resoldre l'equació [56] analíticament en diversos casos particulars. Per exemple, hi ha diversos treballs que donen una solució analítica de l'equació diferencial suposant que el coeficient de difusió és independent de la concentració [42], o que el coeficient de difusió és lineal.^{33, 34, 38, 28, 39} Altres pressuposen una forma determinada de la distribució inicial d'impureses,^{33, 43, 44} usualment en delta de Dirac. D'altra banda, tenint en compte que l'equació [56] no té solucions analítiques exactes en el cas general de coeficient de difusió arbitrari, el mètode actualment utilitzat per al càlcul de la solució d'aquesta equació diferencial consisteix a resoldre-la numèricament.³⁵

3.3.2. Integració numèrica de l'equació diferencial

L'equació diferencial [56] és una equació diferencial no lineal en derivades parcials, de tipus parabòlic,⁴⁵ i en una variable espacial. Cal notar, a més, que, tal com s'ha definit el problema, la solució que s'hi obtingui $\alpha(x, t)$ o, alternativament, $N(x, t)$ ha de ser positiva i els seus valors tindran variacions de, com a mínim, cinc ordres de magnitud.

Aquestes variacions tan grans en els ordres de magnitud esperats per a la solució fan recomanable l'ús d'una transformació logarítmica, com la proposada per Warner i Wilson.³⁵ D'aquesta manera poden obtenir-se resultats numèrics molt més acurats.

La transformació logarítmica consisteix a definir una nova variable $u(x, t) \equiv \ln \alpha(x, t)$. En aquestes condicions, tenim

$$\frac{\partial \alpha(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial e^{u(x, t)}}{\partial t} = e^{u(x, t)} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \quad [69]$$

i, d'altra banda,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D(\alpha) \frac{\partial \alpha(x, t)}{\partial x} \right) = e^{u(x, t)} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{D}(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \hat{D}(u) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] \quad [70]$$

on hem posat $D(u) \equiv D(\alpha)$.

Per tant, substituint en l'equació [56] arribem a:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{D}(u) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) + \hat{D}(u) \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)^2 \quad [71]$$

Aquesta equació és equivalent a l'equació [56] i, a més, presenta l'avantatge que el rang de variació de la variable $u(x, t)$ ha estat reduït considerablement gràcies a la transformació logarítmica. Cal notar que [71] també és una equació diferencial parabòlica en derivades parcials amb una variable espacial, tal com ho és [56].

Les condicions de contorn que imposarem per a la resolució de l'equació [71] són:

- La distribució inicial d'impureses $N(x, t = 0)$ serà el resultat de la simulació d'implantació iònica; normalment utilitzarem els resultats obtinguts del programa TRIM.
- Imposarem

$$\left. \frac{\partial \alpha}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad [72]$$

Aquesta condició correpon a suposar que no hi ha fuites de dopants per la superfície, i la seva validesa està justificada pel fet que totes les difusions que s'han fet en aquest treball han estat realitzades amb la deposició prèvia d'una capa de SiO_2 sobre la superfície del silici, precisament per evitar l'exodifusió d'impureses implantades.

- S'ha imposat

$$\alpha(x \rightarrow \infty, t) = 0 \quad [73]$$

És a dir, s'ha suposat que la concentració d'impureses a una distància gran de la superfície és nul·la.

Naturalment, la implementació numèrica d'aquesta condició de contorn consisteix a imposar que la concentració N , més enllà d'una distància —que pot ser, per exemple, d'uns deu cops la profunditat d'unió—, sigui menor que un valor donat.

Per a la integració de l'equació [71] amb aquestes condicions de contorn s'ha fet servir un dels procediments inclosos en la llibreria de mètodes numèrics NAG; més concretament, hem fet servir la subrutina anomenada

D03PAF.⁴⁶ La resolució del problema es fa mitjançant l'aproximació de l'equació parabòlica a un sistema d'equacions diferencials ordinàries a través del mètode de diferències finites. Aquest sistema d'equacions diferencials s'integra llavors al llarg del temps fent servir el mètode de Gear,⁴⁷ amb una discretització uniforme de la variable espacial.

Per acabar, assenyalarem que en la pràctica s'han observat certs problemes de convergència numèrica cap a la solució tant de l'equació [56] com de l'equació [71] quan la variació del terme $D(u)$ és molt ràpida, cosa que pot tenir lloc, per exemple, quan es fa servir el model de les equacions [65-68]. La solució a aquest problema ha consistit a fer servir una xarxa de discretització més densa, de manera que la variació de D entre dos punts consecutius d'aquesta xarxa també es redueixi.

4. EXPERIMENTAL

Han estat implantats amb arsènic una sèrie de deu substrats de silici tipus p , la concentració nominal de bor dels quals és de $9 \cdot 10^{14}$ àtoms cm^{-3} .

La implantació ha estat feta en un implantador EATON NV-4206 a la temperatura ambient. L'energia d'implantació de l'arsènic ha estat de 50 keV. Vuit de les deu oblies han estat implantades a una dosi de $2 \cdot 10^{15}$ cm^{-2} , mentre que, de les dues restants, una ha estat implantada amb 10^{14} àtoms de As/ cm^2 i l'altra amb una dosi de 10^{13} cm^{-2} .

La implantació ha estat realitzada de manera que la normal a les oblies formés un angle d'uns 7° respecte a la direcció d'incidència dels ions, i que el *flat* d'aquestes formés un angle d'uns 10° respecte a la direcció d'escombratge del feix d'ions. La finalitat d'aquestes mesures és minimitzar els efectes d'una possible canalització.

Posteriorment a la implantació, s'ha procedit a dipositar una capa d'òxid de silici sobre les oblies. Aquesta deposició ha estat feta a baixa temperatura (300°C), i el gruix dipositat ha estat d'uns 1.000 \AA . El fet que la deposició s'hagi fet a una temperatura tan baixa com 300°C ens permet assegurar que la redistribució de dopants produïda és negligible.

La capa d'òxid dipositada ens permetrà, d'una banda, evitar l'exodifusió de l'arsènic quan es faci la recuita tèrmica; de l'altra, permetrà eliminar l'efecte de l'arrodoniment produït pel bisellament que precedeix a la mesura de *spreading resistance*; i finalment, ens permetrà la mesura de l'angle de bisellament de la mostra mitjançant l'ús d'un anell SAM.

Després de la deposició d'òxid s'ha procedit a dividir algunes de les oblies en dues parts o més per tal de disposar de més mostres sobre les quals treballar.

A continuació s'ha sotmès algunes de les mostres a processos de

recuita tèrmica, tant en forn convencional com a processos RTA, a diverses temperatures i temps de procés. Tots aquests processos de recuita tèrmica han estat realitzats en atmòsfera inert (N_2). Els processos de recuita tèrmica ràpida (RTA) han estat fets en un AET ADDAX R 1000 4'' *Manual Rapid Annealing System*. El control de temperatura s'ha fet per mitjà d'un termoparell, i la mesura de temperatura ha estat enregistrada tant amb termoparell com amb piròmetre.

Finalment, s'ha procedit a mesurar les mostres amb la tècnica de *spreading resistance*. Per a aquestes mesures s'ha fet servir un aparell Solid State Measurements SSM-130, amb separació entre puntes de mesura $s = 0,1$ mm i càrrega de 10g. Els passos de mesura utilitzats ha estat compresos entre 1 i $5\mu\text{m}$ i l'angle de bisellament de les mostres ha estat de 17° ; per tant, la resolució efectiva en profunditat obtinguda varia entre 5 i 25 nm. El SSM-130 porta incorporat un microordinador amb un programa que permet el càlcul de les concentracions de portadors a partir de les mesures de *spreading resistance* obtingudes per l'aparell. Segons sembla, l'algorisme utilitzat es basa en el model de Schumann-Gardner i fa servir un integrador de Gauss-Laguerre.

A la taula 2 es mostra un resum dels processos a què han estat sotmeses cadascuna de les mostres processades en aquest treball.

4.1. Simulació de la redistribució

Per a l'estudi de la redistribució de dopants que té lloc quan es sotmet un substrat de silici a un procés de recuita tèrmica, sigui ràpida o no, hem desenvolupat un programa que a partir d'una distribució numèrica d'àtoms d'arsènic implantats (en particular, nosaltres fem servir la sortida del programa TRIM), permet resoldre l'equació de difusió (amb transformada logarítmica) i calcular la distribució final d'impureses.

Finalment, per a l'ajust del coeficient D_0^- de l'equació [68] hem desenvolupat una variant d'aquest programa que incorpora un procediment que permet la minimització de la funció χ^2 -reduïda.⁴⁸ D'aquesta manera és possible ajustar un determinat paràmetre d'un model (en el nostre cas, el paràmetre que s'ha d'ajustar és D_0^-), de manera que la concordança entre dades experimentals i resultats derivats del model sigui màxima.

4.1.1. Ajust del coeficient de difusió

Un cop comparades les dades experimentals amb els resultats de fer servir el model de difusió proposat per Fair³⁶ (equació [61]), és evident que aquest model subestima la difusió de dopants que té lloc en processos RTA (vegeu les gràfiques que es presenten més endavant). Per tant, hem

Taula 2. Resum dels processos realitzats.

Recuita tèrmica ràpida					
Implantació		Deposició òxid	Recuita tèrmica		<i>Spreading resistance</i>
Energia	Dosi		Temperatura	temps	
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	400 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	500 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	600 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	700 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	800 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	900 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	1.000 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	1.100 °C	3s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	1.100 °C	6s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	1.100 °C	10s	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	1.200 °C	10s	✓

Recuita en forn convencional					
Implantació		Deposició òxid	Recuita tèrmica		<i>Spreading resistance</i>
Energia	Dosi		Temperatura	temps	
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	700 °C	30 min	✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓	900 °C	30 min	✓

Sense recuita tèrmica					
Implantació		Deposició òxid	Recuita tèrmica		<i>Spreading resistance</i>
Energia	Dosi		Temperatura	temps	
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓			✓
50 keV	2·10 ¹⁵ cm ²	✓			✓

decidit considerar el model de *concentration enhanced diffusion*, segons el qual el coeficient efectiu de difusió D_N és donat per l'equació [65], amb els valors per als coeficients D_i^0 , D_i^- i D_i^+ proposats per Fair (equacions [66-68]).

Tenint en compte que les diferències entre el model de l'equació [61] i el de l'equació [65] es van accentuant a mesura que augmenta la temperatura de recuita, hem decidit ajustar el coeficient D_0^- fent servir les dades experimentals corresponents al procés de recuita tèrmica ràpida efectuat a una temperatura més alta, és a dir, el procés RTA a 1.200 °C durant deu segons.

Un cop fet això, hem obtingut el següent valor per a D_0^- :

$$D_0^- = 15 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [74]$$

i, per tant, finalment tenim la següent expressió per al coeficient efectiu de difusió:

$$D_N(\text{As}) = D_i^0 + D_i^- \left(\frac{N}{n_i} \right) + D_i^{\overline{-}} \left(\frac{N}{n_i} \right)^2 \quad [75]$$

on

$$D_i^0 = 0,066 \exp \left(-\frac{3,44 \text{ eV}}{kT} \right) \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [76]$$

$$D_i^- = 12,0 \exp \left(-\frac{4,05 \text{ eV}}{kT} \right) \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [77]$$

$$D_i^{\overline{-}} = 15 \exp \left(-\frac{4,32 \text{ eV}}{kT} \right) \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \quad [78]$$

Arribats a aquest punt, cal dir que aquests ajustos s'han fet sense tenir en compte l'efecte de *spilling* que pot afectar les mesures de resistència distribuïda. Tot i això, hem fet una estimació amb el simulador Piscess-2B⁴⁹ de l'efecte que pot tenir aquest fenomen sobre els resultats obtinguts. Aquestes simulacions indiquen que les mesures de *spreading resistance* donen com a resultat unions la profunditat de les quals és menor que la real. Les diferències obtingudes segons les simulacions estan compreses entre un valor de 0,016 μm (corresponent a la distribució implantada, sense difondre) i un valor de 0,025 μm (corresponent al procés realitzat a 1.200 °C, 10s), i per tant, l'error comès a causa de l'*spilling* en l'estimació de la profunditat d'unió és de l'ordre del 10 %.

Observem que l'efecte de *spilling* fa que les distribucions de dopants s'estenguin més endins del substrat d'allò que indiquen les mesures de resistència distribuïda, i, per tant, la necessitat d'incloure un terme en $(N/n_i)^2$ en el coeficient efectiu de difusió és més accentuada encara d'allò que sembla a les gràfiques que deriven de les mesures de *spreading*.

El fet que no haguem tingut en compte l'efecte de l'*spilling* a l'hora de fer els ajustos és degut al fet que, tot i que disposem d'un mètode per

estimar l'efecte d'aquest fenomen sobre la mesura de la profunditat d'unió, l'estudi del seu efecte sobre la forma de la distribució encara està en desenvolupament. Per tant, més endavant pot ser necessari un reajustament més precís del coeficient D_0 (eq. [74], quan es disposi de mètodes de simulació complets de l'*spelling*, o bé quan es disposi de mesures fetes amb altres mètodes més fiables que el de resistència distribuïda, com ho és SIMS.

4.2. Processos RTA

A continuació presentem algunes de les gràfiques corresponents als diferents processos de recuit tèrmica ràpida que s'han realitzat en aquest treball (figures 5-8), on es mostren els valors obtinguts de les mesures de *spreading resistance* (punts); en línia discontinua, els resultats de la simulació del procés d'acord amb el model de l'equació [61] i, finalment, en línia contínua, els resultats d'acord amb el model de l'equació [75].

En cadascuna de les gràfiques mostren superposats els resultats de totes les mesures de resistència distribuïda que s'han fet de cada mostra. Això permet fer una estimació a simple vista de la fluctuació que s'obté en aquestes mesures. Cal observar també que tot i que en alguns casos s'han barrejat mesures amb diferent pas d'una mateixa mostra (com s'ha dit abans, el pas de mesura ha variat entre 1 i 5 μm), això no ha presentat cap problema, i els resultats que s'obtenen amb diferents passos són bastant coherents.

Cal fer una sèrie de comentaris sobre els resultats obtinguts en aquestes gràfiques. En primer lloc, observem que, en els processos realitzats a temperatures iguals o menors de 500 $^{\circ}\text{C}$ (figura 5), no s'aconsegueix l'acti-

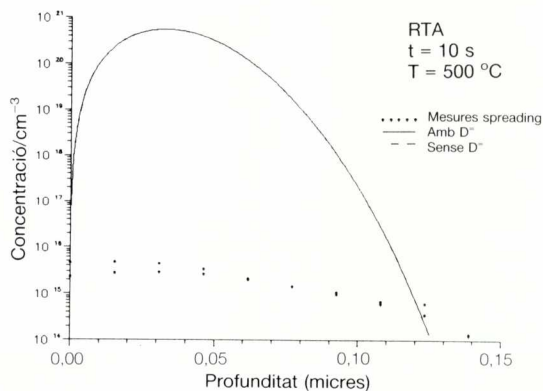


Figura 5. Resultats corresponents a un procés RTA a 500 $^{\circ}\text{C}$, 10s.

vació elèctrica dels dopants. En realitat, tot i que en els processos a 600 i 700 °C sí que s'observa una activació elèctrica apreciable, cal dir que a simple vista podia observar-se que la superfície de les oblies no havia recristal·litzat. Per tant, qualsevol dispositiu fabricat amb una unió d'aquestes característiques presentaria un comportament elèctric molt pobre, amb corrents de fuga elevats.

D'altra banda, hem de notar que, per sota la temperatura de 900 °C (figura 6), no hi ha cap diferència entre el resultat obtingut utilitzant el model de l'equació [61] i el de l'equació [75]. En realitat, la concordança entre les corbes obtingudes és tal que aquestes queden perfectament superposades. Això és degut al fet que l'energia d'activació corresponent a la difusió amb vacants doblement carregades (4,32eV) és lleugerament superior a la de les vacants sense càrrega (3,44eV) i la de les vacants simplement carregades (4,05eV), i, per tant, el resultat és que l'efecte del terme [78] només es posa de manifest a temperatures altes.

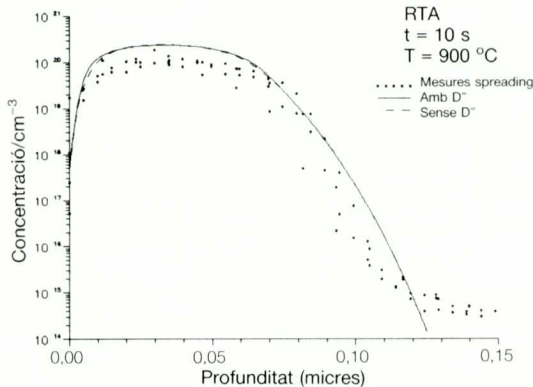


Figura 6. Resultats corresponents a un procés RTA a 900 °C, 10s.

L'efecte d'incorporar un terme de tipus [78] en el coeficient efectiu de difusió D_N és evident en les figures 7-8: el resultat és una difusió ràpida de s dopants, sobretot en les zones on la concentració d'aquestes és més alta. Això és encara més evident si es comparen els resultats corresponents a processos de recuita tèrmica ràpida a temperatura fixada (1.100 °C) i temps de procés creixents (3, 6 i 19 segons, respectivament), on es pot observar clarament l'evolució temporal del perfil de dopants al llarg d'un procés RTA.⁵⁰

Quant a la bondat dels ajustos, cal dir que en tots els casos les corbes corresponents al model de *concentration enhanced diffusion* [75] s'acosten més als resultats obtinguts experimentalment que les que s'obtenen amb

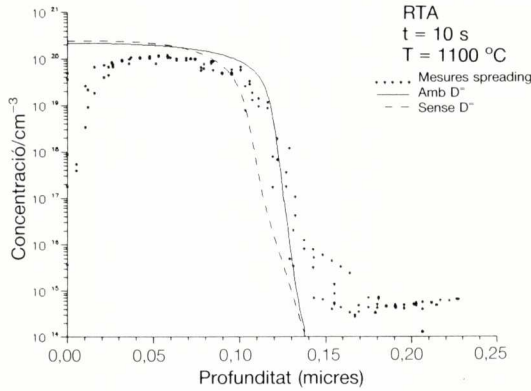


Figura 7. Resultats corresponents a un procés RTA a 1.100 °C, 10s.

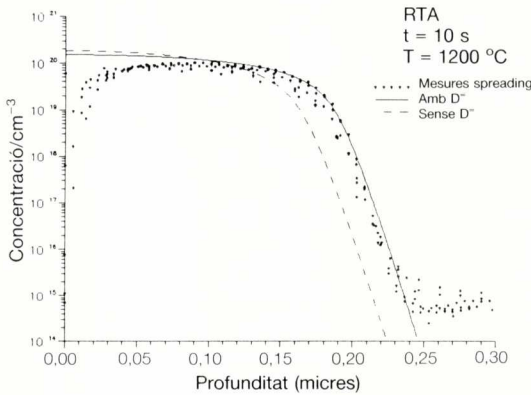


Figura 8. Resultats corresponents a un procés RTA a 1.200 °C, 10s.

el model clàssic [61]. Això és més evident a mesura que les temperatures de procés augmenten per sobre dels 900 °C, ja que, com hem dit abans, és en el rang d'altres temperatures on les diferències entre aquests models s'accentuen.

Basant-nos en els resultats obtinguts de les mesures de *spreading resistance*, podem dir que a partir de 900 °C l'activació dels dopants és pràcticament total.

Finalment, observem que la profunditat d'unió obtinguda en els processos per sobre de 900 °C està sempre al voltant de 0,15 μm, però en el procés realitzat a 1.200 °C la redistribució de dopants es dispara fins a 0,25 μm. Per tant, tenint en compte que l'activació elèctrica obtinguda és similar, considerem que el procés òptim dels presentats fins ara per a la

fabricació d'unions poc profundes és el de 1.100 °C, 10s (figura 7). Tot i això, hem de dir que perquè aquesta afirmació estigués més fonamentada caldria estudiar a fons les característiques elèctriques de dispositius fabricats amb aquest procés i l'eliminació de defectes cristal·lins. Ara bé, sembla que els resultats elèctrics que s'obtenen d'un procés d'aquest tipus són bons.¹¹

4.3. Resultats obtinguts en forn convencional

Per tal de comparar els resultats que s'obtenen en processos RTA amb els que s'obtenen en processos de recuita en forn convencional hem realitzat uns processos d'aquest últim tipus.

D'una banda, hem fet dos processos durant 30 minuts, a 700 i 900 °C, respectivament, que donen resultats de profunditats d'unió similars a les que poden obtenir-se en processos de recuita tèrmica ràpida. Els resultats obtinguts en el procés a 700 °C, 30 min (figura 9), són comparables als d'un RTA a 1.100 °C, 10s.⁵⁰ Malgrat tot, la diferència que hi ha entre els dos tipus de procés és òbvia: si comparem els resultats d'un procés en forn convencional amb un RTA, a igual profunditat d'unió, el procés RTA presenta una major activació elèctrica. Per tant, l'avantatge principal que ofereix la tècnica de recuita tèrmica ràpida és que permet la fabricació d'unions de poca profunditat amb una activació elèctrica més alta que la que pot aconseguir-se en processos en forn convencional. A més, segons els resultats obtinguts per Seidel,¹¹ mentre que el procés RTA a 1.100 °C, 10s, permet l'eliminació dels efectes cristal·lins, perquè en el procés de recuita en forn convencional a 900 °C s'aconseguís eliminar els defectes,

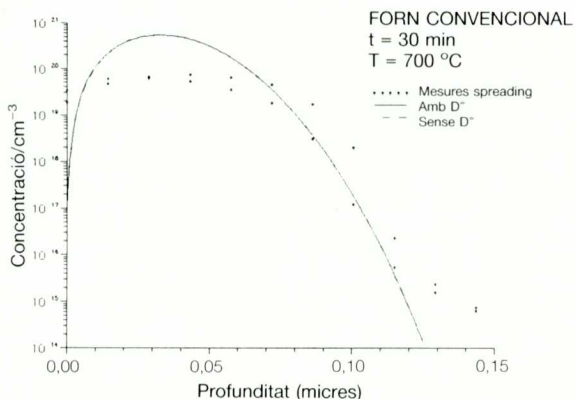


Figura 9. Resultats corresponents a un procés RTA a 700 °C, 10s.

seria necessari un temps de recuita superior a una hora, cosa que faria augmentar la difusió dels dopants.

Per acabar, direm que, segons els resultats de simulacions Suprem III, la diferència entre fer servir el model de *concentration enhanced diffusion* (CED)⁶⁵ i el model clàssic, on no es té en compte el terme de difusió amb vacant doblement carregades (equació [61]), és molt petita en el cas de recuites durant un temps llarg.

5. CONCLUSIONS

La finalitat d'aquest treball és l'estudi de la combinació dels processos de recuita tèrmica ràpida (RTA) i implantació iònica d'arsenic per a la fabricació d'unions poc profundes.

Un dels objectius assolits és la creació d'un entorn en què sigui possible la simulació per ordinador de cadascun dels processos que intervenen en la fabricació d'aquest tipus d'unions,, posant un èmfasi especial en el fet que aquests simuladors no siguin "caixes negres", sinó que sigui possible modificar qualsevol dels seus paràmetres interns. Dins aquesta línia, hem posat a punt TRIM i hem desenvolupat un programa propi que permet la simulació dels processos de difusió.

Paral·lelament al procés de desenvolupament dels programes de simulació, s'han realitzat una sèrie de processos amb la finalitat de comparar els resultats experimentals amb els quals s'obtenen del diferents models teòrics que es fan servir en les simulacions.

Han estat estudiats les diferents possibles modificacions existents dels processos de difusió d'arsenic en silici. En vista dels resultats obtinguts i d'acord amb la tendència actual, hem optat per usar el model de *concentration enhanced diffusion*, que és el que permet un millor ajust entre les dades experimentals i els resultats de les simulacions.

Ha estat determinat el valor del coeficient de difusió amb vacants doblement carregades corresponent al model de *concentration enhanced diffusion*, atès que el seu valor no es troba en la literatura.

Finalment, hem comparat els resultats obtinguts en processos RTA amb els que s'obtenen en recuites en forn convencional. Dels resultats obtinguts es dedueix que les unions obtingudes amb recuites tèrmiques ràpides presenten una major activació elèctrica dels dopants implantats, i per tant, les unions fabricades amb aquesta tècnica presentaran millors característiques elèctriques.

BIBLIOGRAFIA

1. LINDHARD, J., SCHARFF, M., and SCHIOTT, H. E., "Range concepts and heavy ion ranges", *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **33** (14), 1-39 (1963).
2. GIBBONS, J. F., JOHNSON, W. S., and MYLORIE, S. W., *Projected Range Statistics*, John Wiley & Sons, second edition, 1975.
3. WINTERBON, K. B., SIGMUND, P., and SANDERS, "Spatial distribution of energy deposited by atomic particles in elastic collisions", *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **37** (14), 1-73 (1970).
4. BIRSACK, J. P. and HAGGMARK, L. G., "A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets", *Nucl. Instr. and Meth.* **174**, 257-269 (1980).
5. KINCHIN, G. H. and PEASE, R. S., *Rep. Prog. Phys.* **18** (1) (1955).
6. KINCHIN, G. H. and PEASE, R. S., *J. Nucl. Energy* **1** (200) (1955).
7. BUTLER, A. L. and FOSTER, D. J., "The formation of shallow low-resistance source-drain regions for VLSI CMOS technologies", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-32** (2), 150-155 (Feb. 1985).
8. SEIDEL, T. E., "Ion implantation", McGraw-Hill Series in Electrical Engineering, chapter 6, p. 219-265, McGraw-Hill Book Company, 1983.
9. GROB, J. J., UNAMUNO, S., GROB, A., AJAKA, M., SLAOUI, A. and STUCK, R., "Activation and diffusion during rapid thermal annealing of arsenic and boron implanted silicon". *Nucl. Instr. and Meth.* **B19/20**, 501-506 (1987).
10. HILL, C., "Shallow junctions by ion implantations and rapid thermal annealing". *Nucl. Instr. and Meth.* **B19/20**, 348-358 (1987).
11. SEIDEL, T. E., "Rapid thermal processing (RTP) of shallow junctions", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **45**, 7-20 (1985).
12. KALISH, R., SEDGWICK, T. O., MADER, S. and SHATAS, S., "Transient enhanced diffusion in arsenic-implanted short time annealed silicon". *Appl. Phys. Lett.* **44** (1), 107-109 (1 Jan. 1984).
13. DAVIES, D. E. and KENNEDY, E. F., "Arsenic implants for shallow n^+ Si layers", *Nucl. Instr. and Meth.* **B19/20**, 359-362 (1987).
14. HORIUCHI, M. and YAMAGUCHI, K., "SOLID-II: High voltage high gain kilo ångstrom channel length CMOSFET's using silicide with self-aligned ultrashallow (3S) junction", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-33** (2), 260-269 (Feb. 1986).
15. STONE, J. L. and PLUNKETT, J. C., "Ion implantation processes in silicon", In WANG,⁵⁴ chapter 2.
16. MAES, H., VANDERVORST, W. and OVERSTRAETEN, R. VAN, "Impurity profile of implanted ions in silicon", In WANG,⁵⁴ chapter 8, pp. 443-643.
17. ZIEGLER, J. F., BIRSACK, J. P. and LITTMARK, U., *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Volume 1 of Ziegler,⁵² 1985.
18. ALBERS, J., ROITMAN, P. and WILSON, C. L., "Verification of models for fabrication of arsenic source-drains in VLSI MOSFET's", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-30** (11), 1453-1462 (Nov. 1983).

19. BAUSELLS, J., BADENES, G. and LORA-TAMAYO, E., "Calculation of channeling effects in ion implantation", *Nucl. Instr. and Meth.* **B55**, 666-670 (1991).
20. LINDHARD, J., *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **28** (8) (1954).
21. KREUSSLER, S., VARELAS and BRANDT, W., "Target dependence of effective projectile charge in stopping powers", *Phys. Rev. B* **23** (1), 82-84 (1 Jan. 1981).
22. BRANDT, W. and KITAGAWA, M., "Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter", *Phys. Rev. B* **25** (9), 5631-5637 (1 May 1982).
23. NORTHCLIFFE, L. C., "Energy loss and effective charge of heavy ions in aluminium". *Phys. Rev.* **120** (5), 1744-1757 (1 Dec. 1960).
24. TECHNOLOGY MODELING ASSOCIATES, INC., Third Floor, 300 Hamilton Avenue, Palo Alto, CA 94301 USA, *TMA Suprem-3. One-Dimensional Process Analysis Program*, Dec. 1988.
25. KNUTH, D. E., *Seminumerical Algorithms*, chapter 3, Volume 2 of *The Art of Computer Programming*,⁵³ second edition, 1981.
26. FAIR, R. B., WORTMAN, J. J. and LIU, J., "Modeling rapid thermal diffusion of arsenic and boron in silicon", *J. Electrochem. Soc.* **131** (10), 2387-2394 (Oct. 1984).
27. NISHI, H., SAKURAI, T. and FURUYA, T., "Electrical activation of implanted arsenic in silicon during low temperature anneal", *J. Electrochem. Soc.* **125** (3), 461-466 (Mar. 1978).
28. FAIR, R. B. and TSAI, J. C. C., "The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon", *J. Electrochem. Soc.* **122** (12), 1689-1696 (Dec. 1975).
29. KWOR, R., KWONG, D. L., HO, C. C., TSAUR, B. Y. and BAUMANN, S., "Effect of furnace preanneal and rapid thermal annealing on arsenic-implanted silicon", *J. Electrochem. Soc.* **132** (5), 1201-1206 (May 1985).
30. SHIRYAEV, S. Y., NYLANDSTED LARSEN, A., SCHWARTZ SØRENSEN, E. and TIDEMAND-PETERSSON, P., "Redistribution and activation of ion implanted As in Si during RTA for concentrations around solid solubility". *Nucl. Instr. and Meth.* **B19/20**, 507-511 (1987).
31. MCMAHON, R. A., AHMED, H., GODFREY, D. and YALLUP, K. J., "Rapid electron-beam isothermal processing of arsenic-implanted NMOS devices", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-30** (11), 1550-1555 (Nov. 1983).
32. WILSON, S. R., PAULSON, W. M., GREGORY, R. B., HAMDI, A. H. and McDANIEL, F. D., "Rapid isothermal annealing of As-, P-, and B-implanted silicon", *J. Appl. Phys.* **55** (12), 4162-4170 (June 1984).
33. HU, S. M. and SCHMIDT, S., "Interactions in sequential diffusion processes in semiconductors", *J. Appl. Phys.* **39** (9), 4272-4283 (Aug. 1968).
34. HU, S. M., "General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism", *Phys. Rev.* **180** (3), 773-784 (15 Apr. 1969).
35. WARNER, D. D. and WILSON, C. L., "Two-dimensional concentration dependent diffusion", *Bell Syst. Tech. J.* **59** (1), 1-41 (Jan. 1980).

36. FAIR, R. B., "Concentration profiles of diffused dopants in silicon", In WANG,⁵⁴ chapter 7, pp. 315-442.
37. HO, C. P., PLUMMER, J. D., HANSEN, S. E. and DUTTON, R. W., "VLSI process modeling—SUPREM III", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-30** (11), 1438-1453 (Nov. 1983).
38. FAIR, R. B., "Profile estimation of high-concentration arsenic diffusion in silicon", *J. Appl. Phys.* **43** (3), 1278-1280 (Mar. 1972).
39. WANG, W.-S. and LO, Y.-H., "Profile estimation of high concentration arsenic or boron diffusion in silicon", *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-30** (12), 1828-1831 (Dec. 1983).
40. KÖGLER, R., WIESER, E., VOELSKOW, M. and OTTO, G., "Transient enhanced diffusion and electrical activation of As in Si during rapid thermal annealing", *Nucl. Instr. and Meth.* **B19/20**, 516-520 (1987).
41. SEIDEL, T. E., PAI, C. S., LISCHNER, D. J., MAHER, D. M., KNOELL, R. V., WILLIAMS, J. S., PENUMALLI, B. R. and JACOBSON, D. C., "Rapid thermal annealing in Si", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **35**, 329-340 (1985).
42. GHEZ, R., OEHRLEIN, G. S., SEDGWICK, T. O., MOREHEAD, F. F. and LEE, Y. H., "Exact description and data fitting of ion-implanted dopant profile evolution during anneal", *Appl. Phys. Lett.* **45** (8), 881-883 (15 Oct. 1984).
43. GHEZZO, M., "Diffusion from a thin layer into a semi-infinite medium with concentration dependent diffusion coefficient", *J. Electrochem. Soc.* **119** (7), 977-979 (July 1972).
44. GHEZZO, M., "Diffusion from a thin layer into a semi-infinite medium with concentration dependent diffusion coefficient". Part II, *J. Electrochem. Soc.* **119** (7), 1123-1127 (Aug. 1973).
45. PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSY, S. A. and VETTERLING, W. T., *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1988.
46. NAG, D03PAF-NAG *Fortran Library Routine Document*.
47. GEAR, W. C., *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, 1971.
48. BEVINGTON, P. R., *Data Reduction an Error Analysis for the Physical Sciences*, McGraw-Hill Book Company, 1969.
49. TECHNOLOGY MODELING ASSOCIATES, INC., Third Floor, 300 Hamilton Avenue, Palo Alto, CA 94301 USA, *TMA Pisces-2B. Two-Dimensional Device Analysis Program*, Feb. 1989.
50. BADENES, G., *Recuita tèrmica ràpida de silici implantat amb arsènic per a la fabricació d'unions poc profundes*, Treball de recerca, Universitat Autònoma de Barcelona, Facultat de Ciències, Setembre 1989.
51. SZE, S. M., *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, second edition, 1981.
52. ZIEGLER, J. F., editor, *Stopping and Range of Ions in Matter*, Pergamon Press.
53. KNUTH, D. E., *The Art of Computer Programming*, Addison-Wesley Series

- in Computer Science and Information Processing, Addison-Wesley Publishing Company, 1968-90.
54. WANG, F. F. Y., editor, *Impurity Doping Processes in Silicon*, volume 2 of *Materials Processing—Theory and Practices*, North Holland Publishing Company, 1981.