

روشی جدید برای محاسبه‌ی تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌های پرتاب شده در نیمه هادی‌ها

محمد مولوی کاخکی (دانشیار)

حسین سالاری (کارشناس ارشد)

دانشکده‌ی مهندسی، گروه برق - دانشگاه فردوسی مشهد

کاشت یون نقش بسیار مهمی در ساخت انواع ادوات نیمه هادی و مدارات مجتمع ایفا می‌کند و شبیه‌سازی کاشت یون و محاسبه‌ی تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌ها، یکی از مبنای اصلی در طراحی VLSI است. در این نوشتار نیز یک مدل فیزیکی جدید برای این منظور ارائه می‌شود. این مدل که مبتنی است بر تکنیک معادله‌ی انتقال به کار گرفته شده توسط فوروکاوا و ایشیورا^[۱] ولی با در نظر گرفتن پراکندگی زاویه‌ی یون‌ها، قابلیت به کارگیری انواع مقاطع برهمکنش‌های هسته‌ی را دارد. مقایسه‌ی نتایج حاصل از این شبیه‌سازی با نتایج اندازه‌گیری شده و سایر کارهای نظری انجام شده در این زمینه، صحت و دقت زیاد این مدل فیزیکی را تأیید می‌کند.

مقدمه

استفاده از همان تکنیک معادله‌ی انتقال به کار رفته توسط فوروکاوا و ایشیورا، و با در نظر گرفتن زاویه‌ی انحراف یون‌ها در یک مدل سه بعدی، عمق نفوذ را محاسبه کردند.^[۱۳ و ۱۲] در اینجا نیز با استفاده از همان تکنیک معادله انتقال به کار رفته توسط فوروکاوا و ایشیورا ولی با در نظر گرفتن زاویه انحراف یون‌ها در یک مدل دو بعدی، عمق نفوذ محاسبه می‌شود که مزیت آن نسبت به روش فوروکاوا، در نظر گرفتن زاویه‌ی انحراف یون‌ها و در نتیجه امکان استفاده از آن برای ترکیبات مختلف یون و هدف است، (روش فوروکاوا فقط برای یون‌های سنگین پرتاب شده به داخل هدف‌های سبک قابل قبول است) و همچنین مزیت عمده‌ی آن نسبت به روش محاسبات مولوی و همکاران، ساده شدن معادلات و محاسبات مربوطه (به دلیل ساده‌سازی مدل حرکت یون پرتاب شده)، کاهش خطا و مهم‌تر از همه همگرا شدن منحنی‌های به دست آمده به ازاء کوچک در نظر گرفتن ضخامت لایه‌های هدف است.

مدل فیزیکی

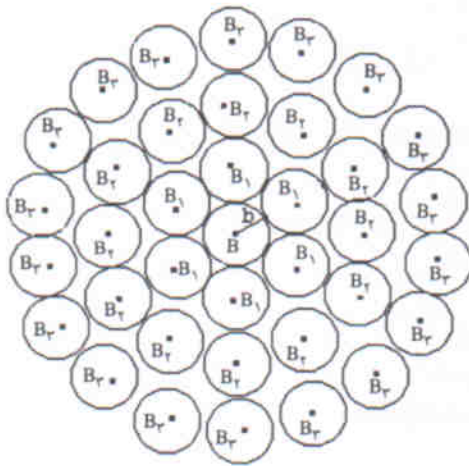
در این مدل، ماده هدف با لایه‌هایی با ضخامت نازک و مساوی با Δz تقسیم می‌شود که همگی با سطح نیمه‌هادی که در معرض بمباران یونی است، موازی‌اند. تابع توزیع انرژی یون‌های کاشته شده، در عمق‌های مختلف ماده هدف محاسبه می‌شود (شکل ۱).

چنان‌که در شکل ۱ نشان داده شده، هر چه عمق نفوذ یون بیشتر می‌شود احتمال انرژی‌های بزرگ‌تر به تدریج کم و انرژی‌های کم‌تر،

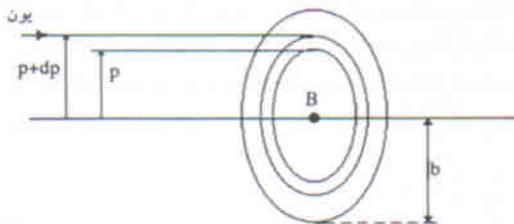
کاشت یون به عنوان فناوری برتر در ناخالص‌سازی مدارات مجتمع، کاربردهای گسترده‌ی پیدا کرده است. پاکیزگی، کاهش ابعاد قطعات نیمه هادی، دقت خوب در کنترل عمق نفوذ یون‌ها و... از مزایای این تکنیک نسبت به روش دیفیوژن^۱ می‌باشند. شبیه‌سازی کاشت یون و محاسبه عمق نفوذ یون‌های پرتاب شده در نیمه هادی اهمیت فراوانی دارد و تا به حال کارهای مختلفی در این زمینه انجام شده است. تئوری LSS یکی از قدیمی‌ترین و مشهورترین آنهاست که توسط لیندرهارد، اسکارف و اسکپوت ارائه شد^[۴] و براساس محاسبه‌ی میان‌های متغیر تصادفی برد، توزیع برد (فاصله‌ی نقطه‌ی برخورد یون به هدف تا نقطه‌ی توقف یون در هدف) را به دست می‌آورد. در این نظریه برای کاهش حجم محاسبات، تابع توزیع برد یون را گوسی و یا اتصال دو نیمه گوسی در نظر می‌گیرند، و یا از توزیع اجورث (Edgeworth) استفاده می‌کنند.^[۳]

اسمیت، گیونز و کریستل با استفاده از معادله‌ی انتقال بولتزمن^۲ عمق نفوذ یون را محاسبه کردند.^[۴-۶] اون، رابینسون و پاولف، و همچنین دیگر محققان با استفاده از روش مونت کارلو این محاسبات را انجام دادند. بیرساک با استفاده از معادله‌ی انتشار، عمق نفوذ را محاسبه کرد.^[۷-۱۱]

ایشیورا و فوروکاوا با معرفی مدل فیزیکی مونت کارلو، بر مبنای محاسبه‌ی تابع توزیع انرژی یون‌ها و بدون در نظر گرفتن زاویه‌ی انحراف، برد یون را محاسبه کردند.^[۱] مولوی و همکاران نیز با



شکل ۳. ترتیب قرار گرفتن اتم‌ها در هر لایه.



شکل ۴. برخورد یون با اتم با پارامتر برخورد بین p و $p+dp$.

انحراف‌های ناشی از برخورد با اتم‌های دور (یعنی اتم‌های مجاور اتم B) یکدیگر را خنثی می‌کنند و نقشی در انحراف یون ندارند، بلکه فقط موجب تلفات انرژی یون می‌شوند. چون یون پرتاب شده به مراتب سنگین‌تر از الکترون است، انحراف ناشی از برخورد یون با الکترون‌های هدف نیز بسیار ناچیز است. بدین ترتیب برخورد یون با الکترون‌های هدف یک برخورد غیرکشسانی است که فقط باعث کاهش انرژی یون می‌شود، ولی بر جهت حرکت آن تأثیری نمی‌گذارد.

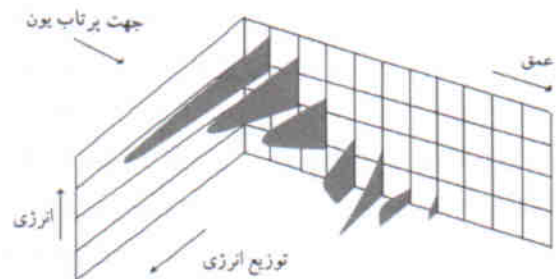
با توجه به آنچه گفتیم، مجموع تلفات انرژی هسته‌یی ناشی از برخورد با اتم‌های مجاور و همچنین تلفات انرژی الکترونیکی کل اتم‌های هر لایه محاسبه شده و با $g(E_0)$ نشان داده می‌شود.^[۱۴] در این مدل فرض می‌کنیم که حرکت یون‌ها از لحظه‌ی پرتاب تا زمان توقف، در یک صفحه که عمود بر سطح هدف است انجام می‌گیرد. به علت آنکه در این حالت ماده‌ی هدف را بی‌شکل در نظر گرفته و از آنجا که محاسبه‌ی عمق نفوذ مدنظر است، و نیز به علت تقارن سیستم، قابل قبول است و در ساده‌سازی محاسبات بسیار مؤثر است. این ساده‌سازی، ضمن کاهش حجم محاسبات، خطاهای افزاینده‌ی محاسبات عددی را به‌طور محسوسی کاهش داده و به کسب نتایج بسیار مطلوبی منجر می‌شود.

محتمل‌تر می‌شوند و همچنین سطح زیر منحنی تابع احتمال توزیع انرژی کاهش می‌یابد. سپس تابع توزیع عمق نفوذ، با در نظر گرفتن این نکته که احتمال توقف یون در یک لایه با محاسبه‌ی اختلاف بین سطوح زیر منحنی‌های توزیع انرژی، در شروع و پایان آن لایه مرتبط است، به دست می‌آید (شکل ۲).

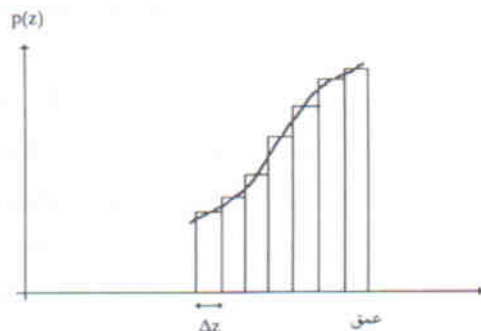
برای هدف‌های بی‌شکل (آمورف)، همه‌ی اتم‌های یک لایه در یک سطح و با فواصل مساوی یکدیگر فرض می‌شود. با صرف نظر کردن از پدیده‌ی کانال‌زنی^۳، می‌توان هر اتم را به عنوان یک مرکز پراکندگی با شعاع b در نظر گرفت (شکل ۳)، که برابر است با:

$$b = [\cos\alpha / \pi N \Delta z]^{1/2} \quad (1)$$

N چگالی اتم‌های هدف و α زاویه‌ی مسیر حرکت یون با امتداد عمود بر آن لایه است. برای برخورد یک یون با اتم، کمیتی به نام پارامتر برخورد^۴ (P) وجود دارد که برابر است با فاصله‌ی بین اتم تا امتداد مسیر حرکت یون (قبل از برخورد). در هر برخورد با یک لایه، بیشترین تلفات انرژی مربوط به اتمی است که در مرکز دایره‌ی برخورد قرار دارد؛ به عبارت دیگر در این مدل فرض می‌شود بیشترین تلفات انرژی مربوط به پارامتر برخوردی بین صفر و b (شکل ۴) است و همین برخورد باعث انحراف یون می‌شود (شکل ۳، اتم B).



شکل ۱. تابع توزیع انرژی یون در عمق‌های مختلف هدف.



شکل ۲. نمودار تابع چگالی احتمال عمق نفوذ.

روش محاسبات برای لایه اول

محاسبه‌ی تابع چگالی احتمال یون پرتاب شده به لایه‌ی اول یون پرتاب شده به لایه‌ی اول E_0 ، به علت تصادفی بودن پارامتر برخورد آن با اتم B پس از خروج از لایه، دارای انرژی با مقدار تصادفی ξ ، و تابع چگالی احتمال $f(\xi, E_0)$ خواهد بود و داریم: [12]

$$\frac{d\sigma}{\pi b^2} = \frac{\gamma \pi p dp}{\pi b^2} = f(\xi, E_0) d\xi \quad (2)$$

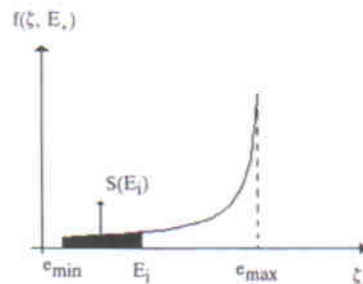
$d\sigma$ سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی و برابر با $\gamma \pi p dp$ است، و منظور از آن، سطح مقطع حلقوی دیفرانسیلی است که بین دو دایره با شعاع‌های p و $p+dp$ واقع است (شکل ۴). در واقع $d\sigma/\pi b^2$ برابر با احتمال برخورد یون با اتم با پارامتر برخوردی بین p و $p+dp$ است. رابطه‌ی ۲ بیانگر آن است که احتمال آن که یون با اتم B دارای پارامتر برخورد بین p و $p+dp$ باشد، برابر با احتمال آن است که بعد از برخورد با اتم B دارای انرژی بین ξ و $\xi+d\xi$ باشد.

همچنین اگر $S(\xi)$ تابع توزیع تجمعی متغیر تصادفی ξ باشد، احتمال آن که انرژی یون پس از برخورد با لایه‌ی اول از هر مقدار دلخواه E_i کم‌تر باشد به صورت زیر است:

$$S(E_i) = \int_{e_{min}}^{E_i} f(\xi, E_0) d\xi = \int_0^{P_i} \frac{\gamma \pi p dp}{\pi b^2} = \frac{P_i^2}{b^2} \quad (3)$$

e_{min} حداقل مقدار ممکن برای ξ بوده و متناظر با پارامتر برخورد $p=0$ است. به همین ترتیب پارامتر برخورد متناظر با انرژی خروجی E_i است. لازم به ذکر است که E_i ، آمین نمونه انرژی ξ است که نحوه‌ی انتخاب و محاسبه‌ی آن در مبحث بعد ارائه خواهد شد.

در شکل ۵ نمونه‌ی از تابع $f(\xi, E_0)$ و همچنین $S(E_i)$ نمایش داده می‌شود. در ادامه خواهیم دید که محاسبه‌ی $S(E_i)$ به ازای E_i ‌های مختلف نقش کلیدی در کار حاضر دارد و برای محاسبه‌ی $S(E_i)$ ، با توجه به رابطه‌ی ۳، نیازمند رابطه‌ی بین P_i ، E_0 و E_i هستیم. چنین رابطه‌ی براساس فرضیات و شرایط گوناگون توسط محققان متعددی ارائه شده‌اند که در بخش‌های بعد به آن خواهیم پرداخت.



شکل ۵. نمونه‌ی از منحنی تابع توزیع انرژی.

ابتدا به منظور سهولت در معرفی معادلات و روابط، سطح مقطع مورد بحث را سطح مقطع قانون توانی^۵ در نظر گرفته [11] که بعداً به سطح مقطع توماس فرمی و ویلسن تعمیم داده می‌شود. [14] برای سطح مقطع قانون توانی، پارامتر برخورد p برحسب ξ (انرژی بعد از برخورد) یا T (تلفات انرژی)، و طبق رابطه‌ی تحلیلی ۴ بیان می‌شود [۱۵] که $d\sigma$ را برحسب ξ یا T قابل انتگرال‌گیری می‌کند (برای سطوح مقطع توماس فرمی و ویلسن که در بخش‌های بعدی توضیح داده می‌شوند این‌گونه نیست).

$$p^2 = c \frac{[\cos^{-1}(\gamma T/T_m - 1)]^2}{[\pi^2 - [\cos^{-1}(\gamma T/T_m - 1)]^2]} \quad (4)$$

T_m ماکزیم تلفات انرژی است و c عبارت است از: [11]

$$c = \frac{Z_1 Z_2 q^2 (M_1 + M_2) \times a_0 \times (Z_1^2/r^2 + Z_2^2/r^2)^{1/2}}{4\pi \epsilon_0 \times \exp(1) \times M_2 E_0} \quad (5)$$

a_0 شعاع بور و برابر 0.529 \AA است. Z_1 ، Z_2 ، M_1 و M_2 به ترتیب عبارت‌اند از اعداد اتمی و جرم‌های اتمی یون و هدف، و q بار یک الکترون است.

اگر تلفات انرژی ناشی از برخورد یون با اتم B و مربوط به نمونه انرژی خروجی E_i باشد، داریم:

$$T_i = E_0 - E_i = g(E_0) \quad (6)$$

که $g(E_0)$ مجموع تلفات انرژی ناشی از برخورد یون با اتم‌های دور (اتم‌های مجاور اتم B) و تلفات الکترونیکی است. برای نمونه E_i ، طبق روابط ۳ و ۴ داریم:

$$S(E_i) = c \frac{[\cos^{-1}(\gamma T_i/T_m - 1)]^2}{b^2 [\pi^2 - [\cos^{-1}(\gamma T_i/T_m - 1)]^2]} \quad (7)$$

و همچنین داریم: [۱۵]

$$T_m = \gamma E_0 \quad (8)$$

که:

$$\gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (9)$$

در ادامه نحوه‌ی انتخاب و محاسبه‌ی نمونه‌های انرژی E_i (ها) ارائه می‌شود.

تولید نمونه‌های انرژی خروجی در انتهای لایه‌ی اول

برای تعیین نمونه‌های انرژی خروجی E_i از روی تابع پیوسته $f(\xi, E_0)$

بنابراین از روابط ۱۱ و ۱۲ داریم:

$$\int_{E_{i-1}}^{E_i} f(\xi, E_*) d\xi = S(E_i) - S(E_{i-1}) = \frac{1}{n_p} \quad (13)$$

بنابراین سطح زیرمنحنی $f(\xi, E_*)$ بین هر دو E_i متوالی برابر با $\frac{1}{n_p}$ است. بر این اساس، چنان‌که در شکل ۷ نشان داده شده، می‌توان گفت که تمامی سطح زیرمنحنی $f(\xi, E_*)$ به n_p قسمت مساوی تقسیم می‌شود که هر کدام از این قسمت‌ها به یکی از E_i ها تعلق دارد. مثلاً، سطح متعلق به E_i در بین دو خط چین نشان داده شده واقع می‌شود. این سطوح مساوی $(\frac{1}{n_p})$ ، معرف احتمال وقوع نمونه‌های E_i هستند. یعنی n_p نمونه، با احتمال مساوی $(p_1 = \frac{1}{n_p})$ تولید می‌شود. λ معرف درصدی از این سطح $\frac{1}{n_p}$ است که در سمت چپ E_i واقع می‌شود و این قدر مورد تمام E_i ها صادق است، یعنی:

$$\int_{E_{i-1}}^{E_i} f(\xi, E_*) d\xi = \frac{\lambda}{n_p} \quad (14)$$

بدین ترتیب $u(i)$ ابتدا از رابطه‌ی 10 به ازاء هر $1 < i < n_p$ محاسبه می‌شود و سپس از رابطه‌ی $S(E_i) = u(i)$ و با استفاده از رابطه‌ی 7 در حالت سطح مقطع قانون توانی (نمونه انرژی‌ی E_i محاسبه می‌شود. برای حالت‌های غیر قانون توانی، چنان‌که ذکر شد، به روش‌های محاسباتی بسیار پیچیده‌تری نیاز داریم که در بخش‌های بعد به آن خواهیم پرداخت. برای سطح مقطع قانون توانی چنین به دست می‌آید:

$$E_i = E_* - \frac{\gamma E_*}{\gamma} (\cos(\pi b \sqrt{\frac{u(i)}{c+bu(i)}}) + 1) - g(E_*) \quad (15)$$

مقدار λ در رابطه‌ی 10 ، برای سطح مقطع قانون توانی برابر با 0.5 انتخاب شده است. انتخاب این مقدار برای λ در سطح مقطع قانون توانی بر این اساس انجام شده که از نتایج حاصل از این شبیه‌سازی برای چندین ترکیب مختلف یون - هدف - انرژی، نزدیک‌ترین جواب‌ها به نتایج آزمایشگاهی به دست خواهد آمد.

برای هر E_i ، زاویه‌ی انحراف یون از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید: ^[۱۷]

$$\alpha_i = \cos^{-1} \left(\frac{1 - hT_i/E_*}{\sqrt{1 - T_i/E_*}} \right) \quad (16)$$

که در آن:

$$h = \frac{1 + M_p/M_1}{\gamma} \quad (17)$$

چنان‌که پیش‌تر گفته شد، فرض می‌شود که تمامی این نمونه‌ها روی صفحه‌ی شامل امتداد مسیر پرتاب یون و عمود بر سطح هدف (xy) واقع بوده و همچنین با توجه به تقارن سیستم و از آنجا که

از روش شبیه به روش مونت کارلو استفاده می‌کنیم ^[۱۶] E_i ها نمونه‌های ξ هستند). طبق روش مونت کارلو، نمونه‌های متغیر تصادفی ξ (E_i ها)، با تابع چگالی احتمال $f(\xi, E_*)$ و تابع توزیع تجمعی $S(\xi)$ ، از رابطه‌ی $S(E_i) = u(i)$ برای $i = 1, 2, \dots$ که u یک متغیر تصادفی با توزیع یکنواخت بین صفر و یک است، به دست می‌آیند (شکل ۶). در اینجا نیز برای تبدیل تابع توزیع پیوسته به تابع توزیع گسسته از همین روش استفاده می‌شود، با این تفاوت که برخلاف روش مونت کارلو که در آن متغیر $u(i)$ به شکل تصادفی تولید می‌شود، در کار حاضر $u(i)$ توسط رابطه‌ی زیر تعیین شده است:

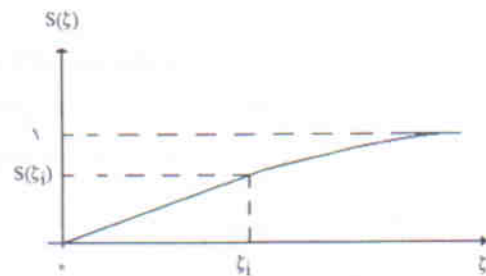
$$u(i) = \frac{i-1+\lambda}{n_p} \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (10)$$

n_p تعداد نمونه‌های انرژی مورد نیاز، و λ پارامتری است با مقداری بین صفر و 0.5 که برای تعریف آن باید به شکل ۷ مراجعه شود. همان‌طور که از شکل ۷ پیداست و بر اساس روش گفته شده برای تولید نمونه‌های E_{i-1} داریم:

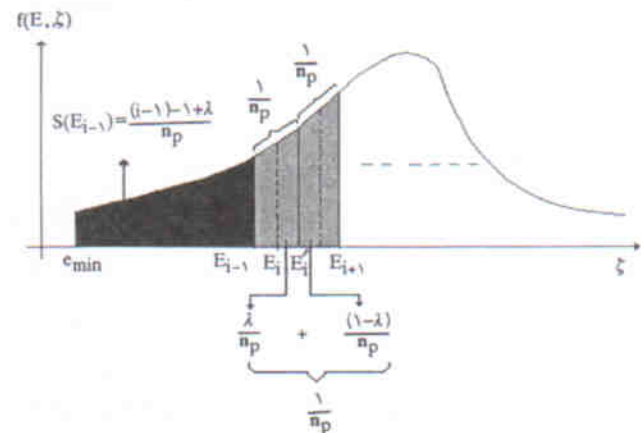
$$S(E_{i-1}) = \int_{c_{min}}^{E_{i-1}} f(\xi, E_*) d\xi = \frac{(i-1)-1+\lambda}{n_p} = \frac{i-2+\lambda}{n_p} \quad (11)$$

و نیز برای تولید نمونه E_i داریم:

$$S(E_i) = \int_{c_{min}}^{E_i} f(\xi, E_*) d\xi = \frac{(i-1)-1+\lambda}{n_p} \quad (12)$$



شکل ۶ تولید متغیر تصادفی با کمک تابع توزیع تجمعی.



شکل ۷ تولید نمونه‌های با احتمال مساوی از تابع چگالی احتمال $f(\xi, E_*)$.

کدام از انرژی های E_i (حاصل از معادله ۱۶) را به یکی از n_e انرژی e_i طبق روابط زیر می دهیم:

$$e_i = e_{\min} + i \cdot \Delta E \quad (19)$$

$$\Delta E = \frac{e_{\max} - e_{\min}}{n_e} \quad (20)$$

هر نمونه انرژی (E_m) به دو e_i متوالی که مقدار آن بین آنها قرار بگیرد نگاشت می شود (احتمال نمونه E_m به آنها اختصاص می یابد، یعنی اگر:

$$e_{\min} + i \cdot \Delta E \leq E_m < e_{\min} + (i+1) \cdot \Delta E$$

در این صورت نمونه E_m با احتمال P_1 و زاویه θ_j به دو انرژی e_i با احتمال $p_{m,i}$ و انرژی e_{i+1} با احتمال $p_{m,i+1}$ و هر دو با زاویه انحراف θ_j نگاشت می شود. $p_{m,i}$ و $p_{m,i+1}$ احتمالات به دست آمده از p_1 مطابق با اصل بقاء احتمال هستند که توسط دسته معادلات زیر محاسبه می شوند.

$$\begin{cases} p_{m,i} \cdot e_i + p_{m,i+1} \cdot e_{i+1} = p_1 \cdot E \\ p_{m,i} + p_{m,i+1} = p_1 \end{cases} \quad (21)$$

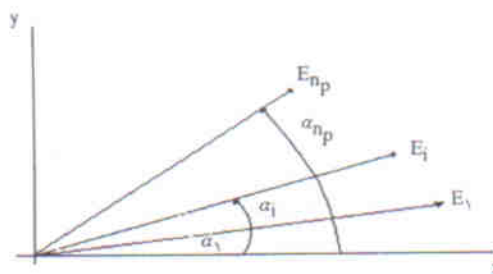
اگر $P_b(j,i)$ احتمال آن باشد که یونی در انتهای لایه اول دارای انرژی e_i و زاویه انحراف θ_j باشد، در این صورت $P_b(j,i)$ جمع تمام $P_{m,i}$ ها برای انرژی هایی است که بعد از گام اول دارای زاویه انحراف θ_j هستند؛ یعنی:

$$P_b(j,i) = \sum_{m=1}^{n_p} P_{m,i} \cdot \delta \left(\left[\frac{\theta_m}{\Delta \alpha} \right] - j + 1 \right) \quad (22)$$

که در آن، $\left[\frac{\theta_m}{\Delta \alpha} \right]$ جزء صحیح مقدار $\frac{\theta_m}{\Delta \alpha}$ و δ تابع ضربه واحد است.

بعد از این که تمام $P_b(j,i)$ ها محاسبه شدند، هر کدام در خانهی متناظر با خود (سطر زام و ستون i) در یک جدول قرار می گیرند. این جدول، جدول احتمال نامیده می شود (شکل ۹).

هنگام دسته بندی نمونه ها در گام اول، اگر زاویهی انحراف نمونهیی از 90° بزرگ تر باشد، مقدار احتمال صفر به آن اختصاص می یابد؛ زیرا انحراف به عقب در اثر برخورد تقریباً سر به سر یون با هسته اتم هدف یعنی با پارامتر برخورد P نزدیک به صفر صورت پذیرفته و چنین برخوردی باعث کاهش بسیار چشم گیر انرژی آن می شود و به همین دلیل این یون را با تقریب بسیار خوبی می توان متوقف شده در همین لایه فرض کرد. بنابراین احتمال این که یون بعد از لایه ی اول موفق نشده باشد برابر است با:



شکل ۸. نمونه های E_i و α_i در صفحه xy

محاسبه ی عمق نفوذ یون ها مد نظر است. کلیدی α_j ها در این صفحه، نسبت به راستای پرتاب یون، در جهت مثبت مثلثاتی در نظر گرفته می شوند (شکل ۸).

دسته بندی نمونه های انرژی خروجی بر حسب مقدار انرژی و زاویه ی انحراف آنها

چنان که گفته شد، در انتهای لایه ی اول، تعداد n_p نمونه انرژی هم احتمال (p_1) وجود دارند. هر کدام از این نمونه ها در برخورد به لایه ی دوم، تولید n_p نمونه انرژی می کنند و بنابراین در انتهای لایه ی دوم تعداد $n_p \times n_p$ نمونه انرژی وجود خواهند داشت، و مسلماً با این وضعیت بعد از گذشتن از چند لایه تعداد نمونه ها آن قدر زیاد می شود که ادامه ی محاسبات را عملاً غیر ممکن می کند. بنابراین لازم است که نمونه های انرژی در انتهای هر لایه دسته بندی شوند. برای این منظور در انتهای هر لایه با دسته بندی مناسب حالت یون را به n_θ تعداد زاویه انحراف (نسبت به جهت تابش اولیه) و n_e تعداد انرژی محدود می کنیم. n_θ و n_e به گونه یی انتخاب می شوند که افزایش آنها نتیجه ی محاسبات را تغییر ندهد و چنان که خواهیم دید: $n_p = 100$ و $n_e = 30$ و $n_\theta = 20$ به همگرایی نتایج محاسبات می انجامد. برای لایه ی اول این کار با طی مراحل زیر انجام می گیرد:

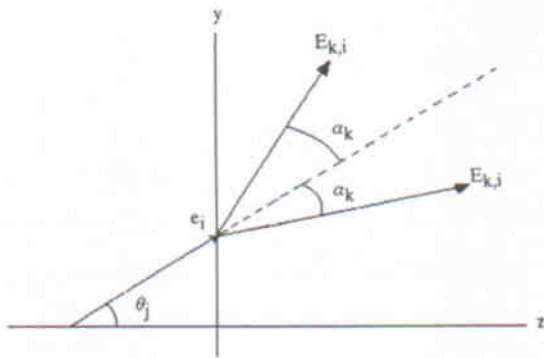
گام اول) دسته بندی زاویه ی انحراف. هر کدام از زاویه ی انحراف α_i (حاصل از معادله ی ۱۷) را به یکی از n_θ زاویه انحراف جدیدی θ_j طبق رابطه ی ۱۹ نگاشت می دهیم:

$$\theta_j = (2j - 1) \cdot \Delta \theta / 2 \quad (18)$$

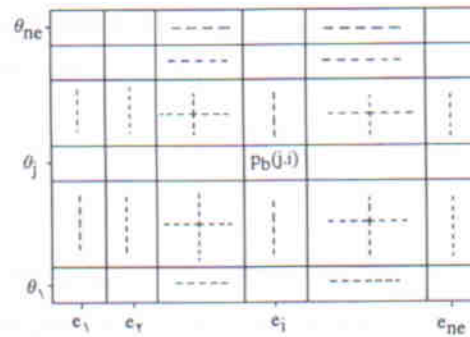
$$\Delta \theta = 90^\circ / n_\theta \quad j = 1, 2, 3, \dots, n_\theta$$

روش کار به این شکل است که مثلاً برای نمونه انرژی E_m با زاویه انحراف α_m ، به شرطی که $(j-1) \cdot \Delta \theta \leq \alpha_m < j \cdot \Delta \theta$ باشد، با طی گام اول، نمونه انرژی E_m با زاویه انحراف θ_j که از رابطه ی ۱۸ به دست می آید، وجود خواهد داشت.

گام دوم) دسته بندی انرژی های خروجی. پس از انجام گام اول، هر



شکل ۸. نمونه‌های هم‌احتمال در جهت‌های مثبت و منفی مثلثاتی.



شکل ۹. جدول احتمال.

۲. به ازاء هر کدام از عناصر غیر صفر جدول احتمال لایه‌ی اول، e_{max} و e_{min} را بعد از برخورد به لایه‌ی دوم محاسبه کرده و بزرگ‌ترین و کوچک‌ترین e_{min} برای تشکیل جدول احتمال لایه‌ی دوم انتخاب کنیم.

۳. متناظر با هر کدام از خانه‌های جدول احتمال لایه‌ی اول، جدول احتمالی جدیدی با طی مراحل ۱ و ۲ به دست می‌آید و تمامی اعداد هر کدام از این جداول، طبق قانون احتمالات شرطی، در احتمال خانه جدول احتمال قبلی متناظر با آن ضرب می‌شوند.

۴. تمامی اعداد خانه‌های جداول تهیه شده در مرحله‌ی ۳، نظیر به نظیر با هم جمع می‌شوند که حاصل، یک جدول احتمال نهایی است که مربوط به لایه‌ی دوم است.

۵. احتمال این که یون بعد از لایه‌ی دوم متوقف نشده باشد $(SP(2))$ به همان شکلی که در مورد لایه‌ی اول گفته شد (رابطه ۲۳) محاسبه می‌شود.

۶. برای لایه‌ی سوم به بعد نیز مراحل ۱ تا ۵ عیناً انجام می‌گیرد.

محاسبه‌ی تمرکز ناخالصی

با توجه به آنچه که در مبحث «مدل فیزیکی» گفته شد و معرفی کمیت SP که در بخش‌های پیشین انجام شد، تمرکز ناخالصی در لایه‌ی n ام از رابطه‌ی ۲۴ به دست می‌آید:

$$Pdf(n) = \frac{SP(n-1) - SP(n)}{\Delta Z} \quad (24)$$

تعمیم محاسبات فوق به سطح مقطع توماس فرمی و سطح مقطع ویلسن

روابط مورد نظر برای سطوح مقطع توماس فرمی و ویلسن عبارتند از: [۱۷]

$$SP(1) = \sum_{j=1}^{n_\theta} \sum_{i=1}^{n_e} P_b(j,i) \quad (23)$$

در واقع سطح زیر منحنی تابع توزیع احتمال انرژی یون بعد از عبور از لایه‌ی اول است.

روش محاسبات برای لایه‌های دوم و بعد از آن

چنان‌که ذکر کردیم در انتهای لایه‌ی اول یون‌ها با تعدادی انرژی مشخص (e_i) و زاویه‌ی انحراف معین (θ_i) و احتمال مربوطه $P_b(j,i)$ (متناظر با خانه‌های جدول احتمال لایه‌ی اول) وجود دارند که به لایه‌ی دوم برخورد می‌کنند. برای هر کدام از آنها، مراحل شیبیه به مراحل محاسبات مربوط به لایه‌ی اول و با در نظر گرفتن نکات زیر انجام می‌گیرد:

۱. برای تولید نمونه‌ها در انتهای لایه‌ی دوم برای یون تأیید شده از لایه‌ی اول (شکل ۱۰) با انرژی e_i و زاویه‌ی θ_i ، به ازای هر نمونه با انرژی $E_{k,i}$ و زاویه‌ی انحراف α_k در جهت مثبت مثلثاتی (نسبت به امتداد پرتاب θ_j) نمونه‌یی با همان انرژی و با زاویه‌ی انحراف α_k در جهت منفی مثلثاتی نیز در نظر گرفته می‌شود. دلیل آن این است که چنان‌که قبلاً گفته شده است، مسیر حرکت یون دوبعدی (روی سطح) در نظر گرفته می‌شود و بنابراین هر یون بعد از برخورد با لایه می‌تواند با احتمال مساوی در جهت مثبت و منفی مثلثاتی نسبت به راستای برخورد با لایه از آن دور شود.

در مورد لایه‌ی اول که فرض شده یون به‌طور عمود به آن برخورد کرده، چون محاسبه‌ی عمق نفوذ مدنظر است فقط جهت مثبت مثلثاتی در نظر گرفته شده، اما برای لایه‌های بعدی که یون به‌طور مایل با آنها برخورد می‌کند، هر دو جهت را باید مدنظر داشت، که زاویه یکی از آنها نسبت به امتداد پرتاب اولیه برابر با $\alpha_k + \theta_j$ و برای دیگری $|\theta_j - \alpha_k|$ است. علامت قدر مطلق برای این است که همواره مقدار مطلق زاویه نسبت به امتداد پرتاب اولیه، مدنظر است. بنابراین در این جا تعداد نمونه‌ها دو برابر حالت قبلی بوده

این رابطه جایگزین رابطه ی ۹ می شود و بقیه ی مراحل محاسبات به همان شکل قبلی انجام می شود.

محاسبه ی پارامتر λ

از آنجا که سطح مقطع های توماس فرمی و ویلسن برای ترکیبات مختلف یون - هدف و با هر مقدار انرژی از دقت بسیار بالایی برخوردار است، استفاده از این سطح مقطع ها نسبت به سطح مقطع قانون توانی که فقط در ناحیه ی محدودی از انرژی ها قابل قبول است، ارجحیت دارد و بنابراین مقدار λ را باید با دقت زیادی برای آنها محاسبه کرد.

تابع توزیع احتمال انرژی $f(\xi, E_0)$ تابع بسیار تیزی است که در انرژی های خروجی کوچک تغییرات آن تقریباً خطی است و هر چه جرم اتمی یون کم تر و هدف سنگین تر و همچنین انرژی یون ورودی بیشتر باشد، شیب قسمت خطی آن کم تر می شود و این منجر به ایجاد خطا در محاسبات می شود زیرا سطح زیر منحنی تابع توزیع انرژی در انرژی های کوچک، کاهش یافته و هنگام تولید نمونه های انرژی، نمونه یی در انرژی های کوچک وجود نخواهد داشت؛ لذا برای جبران این خطا باید λ را کوچک تر انتخاب کرد. هدف ما تعیین مقدار λ بر حسب شرایط مسئله یعنی ترکیب یون - هدف - انرژی بود که برای این کار، ابتدا با روش سعی و خطا مقدار λ برای چند ترکیب (یون - هدف - انرژی) که نتایج آزمایشگاهی آنها در اختیار باشد، چنان تعیین شد که جواب های حاصل از این روش شبیه سازی، نزدیک ترین پاسخ ها به نتایج آزمایشگاهی باشد، و بدین ترتیب چند مقدار λ برای چند ترکیب معین به دست آمد. گام بعدی پیدا کردن کمیتی از هر ترکیب بود که با λ ارتباط داشته باشد، و در این راستا سطح زیر منحنی تابع توزیع احتمال انرژی لایه ی اول از انرژی حداقل تا یک انرژی کوچک (E_0) که به صورت رابطه ی ۳۵ تعریف می شود، به عنوان کمیت مورد نظر انتخاب شد.

$$E_s = 0.5(e_{\max} - e_{\min}) + e_{\min} \quad (35)$$

لذا سطح زیر منحنی تابع $f(\xi, E_0)$ از e_{\min} تا E_s را برای چند ترکیبی که نمی مربوط به آنها پیدا شده بود محاسبه و این سطوح را با تقسیم بر یک مقدار معین نرمالیزه کرده و بدین ترتیب چند نقطه از تابع مورد نظر حاصل شد که با انطباق یک منحنی بر آن نقاط، به خود تابع، یعنی رابطه یی بین λ و کمیت «سطح نرمالیزه شده» هر ترکیب یون - هدف - انرژی دست یافتیم (شکل ۱۱).

برای هر ترکیب یون - هدف - انرژی دلخواه، سطح نرمالیزه شده را مطابق با آنچه گفته شده محاسبه کرده و از منحنی (شکل ۱۱) λ یی

$$d\delta = \pi a^2 p dp = \frac{-\pi a^2}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) dt = -\pi a^2 F(t^{1/2}) dt \quad (25)$$

که در آن t تلفات انرژی نرمالیزه شده، و برابر است با:

$$t = \epsilon^2 \frac{T}{T_m} \quad (26)$$

ϵ انرژی نرمالیزه شده، و برابر است با:

$$\epsilon = \frac{\pi \pi e^2 a M_T}{Z_1 Z_T q^2 (M_1 + M_T)} E_0 \quad (27)$$

همچنین:

$$a = 0.18853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_T^{2/3}) - 0.5 \quad (28)$$

و

$$f(t^{1/2}) = \frac{\lambda t^{1/6}}{[1 + (\lambda t^{2/3})^{2/3}]^{3/2}} \quad (29)$$

که $\lambda = 1/30.9$ و:

$$F(t^{1/2}) = \frac{f(t^{1/2})}{2t^{3/2}}$$

داشتن یک رابطه ی تحلیلی بین ξ (انرژی خروجی) و P (پارامتر برخورد)، به نحوی که P بر حسب ξ و ξ بر حسب P قابل بیان باشد، برای انجام محاسبات ضروری است. رابطه ی ۲۵ قابل انتگرال گیری نیست و به علت شیب بسیار زیاد تابع توزیع انرژی، محاسبات عددی مربوطه بسیار مشکل و طولانی و در پاره یی موارد غیر ممکن می شود، اما خوشبختانه رابطه یی بین t و P [۱۸] به صورت رابطه ی ۳۱ معرفی شده که از انطباق یک تابع تحلیلی با $F(t^{1/2})$ به دست آمده است:

$$t = A \exp(-h \{ [K(p^2 - p_1^2) + c]^{1/2} - m \}^k) \quad (31)$$

که در آن:

$$K = 2(hka^2)^{-1} \quad (32)$$

و

$$c = \{ m + [h^{-1} \ln(A/t_1)]^{1/k} \}^2 \quad (33)$$

ضرایب m و c و h و A ، برای دو سطح مقطع توماس فرمی و ویلسن در سه ناحیه تعریف شده اند [۱۴] و p_1 و t_1 شرایط اولیه در هر ناحیه اند که از $p_1 = 0$ و $t_1 = \epsilon^2$ شروع می شوند.

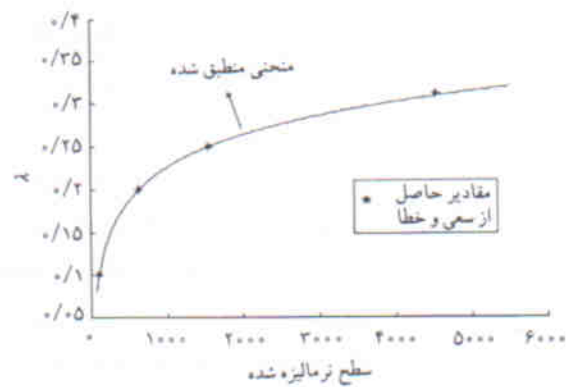
از این روابط، p بر حسب t و نتیجتاً بر حسب ξ به دست می آید:

$$p^2 = \sqrt{K} \left[\left(\frac{1}{h} \ln(At) \right)^{1/k} + m \right]^2 - c + p_1^2 \quad (34)$$

در محاسبات انجام شده برای سطح مقطع های توماس فرمی و ویلسن

ضمن آن‌که پاسخ‌های مناسبی را به دست می‌دهند برای محاسبات زمان زیادی را از رایانه، طلب نمی‌کند و یک ترکیب مناسب‌اند. شکل‌های ۱۲ و ۱۳، تابع چگالی احتمال عمق نفوذ (برد تصویر شده) را برای یون‌های آلومینیوم پرتاب شده در ژرمانیم با انرژی اولیه 20 keV نشان می‌دهد. در شکل ۱۲ در هر دو کار از سطح مقطع توانی و در شکل ۱۳ از سطح مقطع توماس فرمی در محاسبات استفاده شده است و نزدیکی جواب‌ها در هر دو مورد کاملاً مشهود است.

شکل ۱۴ تابع چگالی عمق نفوذ را برای یون‌های آنتیموان پرتاب شده در سیلیکون با انرژی اولیه 50 keV نشان می‌دهد که در آن نتایج حاصله و همچنین محاسبات ایشیوارا و فوروکاوا مقایسه شده‌اند. سطح مقطع مورد استفاده در هر روش قانون توانی است. شکل ۱۵ تابع توزیع تمرکز ناخالصی را برای یون‌های بور در سیلیکون با انرژی اولیه 100 keV و $\text{dose} = 10^{15}\text{ (Ion/cm}^2\text{)}$ نشان



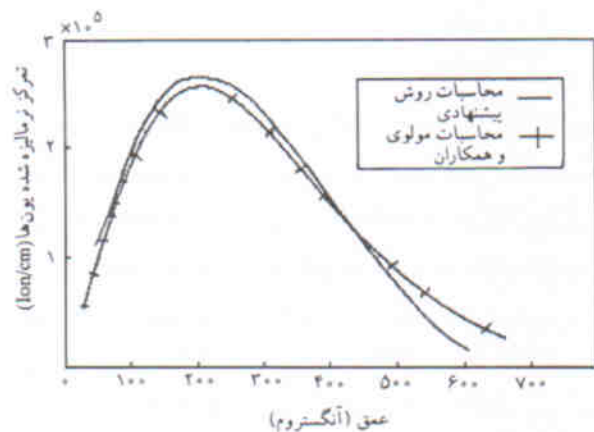
شکل ۱۱. متحنی منطبق شده نسبت به مقادیر سطح نرمالیزه شده.

مربوط به آن پیدا می‌شود. انتخاب مقدار 0.2 در رابطه‌ی 35 اختیاری است، چون اصولاً نتایج بررسی‌ها نشان داده که به علت تغییرات خطی تابع توزیع انرژی در انرژی‌های کوچک، انتخاب مقدار 0.1 و یا 0.3 نیز تغییر محسوسی در نتیجه‌ی به دست آمده ندارد.

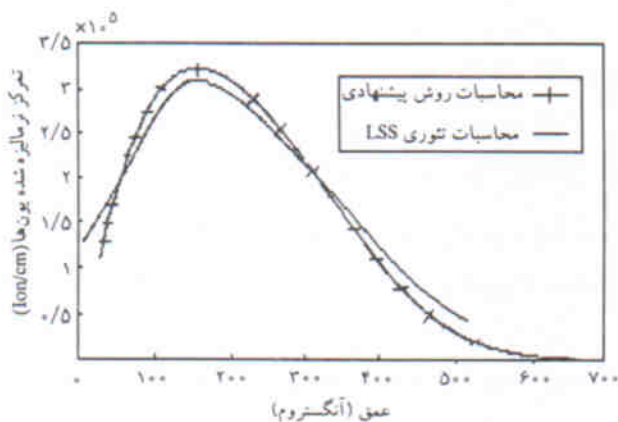
نتایج محاسبات

شکل‌های ۱۲ تا ۲۱ نشان‌دهنده‌ی نتایج حاصل از شبیه‌سازی این مدل فیزیکی توسط یک برنامه‌ی رایانه‌ی و مقایسه‌ی آن با نتایج آزمایشگاهی هیرانو، نتایج حاصل از تئوری LSS، محاسبات مولوی و همکاران، محاسبات کریستل، محاسبات روش مونت کارلو و غیره‌اند که نشان‌دهنده‌ی دقت بسیار بالای مدل است. مهم‌ترین ویژگی این مدل که محاسبات دیگران فاقد آن است، همگرا شدن منحنی‌های به دست آمده با کم کردن اندازه ضخامت لایه‌ها (ΔZ) است. [۱۳، ۱۲، ۶] این مدل فیزیکی به علت اینکه کلیه‌ی محاسبات را در دو بعد انجام می‌دهد، نسبت به مدل‌های قبلی از پیچیدگی بسیار کم‌تری برخوردار است. پیاده‌سازی این مدل توسط یک برنامه‌ی شبیه‌سازی، به داشتن رابطه‌ی تحلیلی بین P و ξ نیازمند است که هر یک برحسب دیگری قابل بیان باشند و بنابراین چنان‌که نشان داده شد برای سطوح مقطع قانون توانی، توماس فرمی و ویلسن قابل پیاده‌سازی است و نیز برای هر سطح مقطع دیگری که بتوان با انطباق یک منحنی با نتایج محاسبات عددی، این ویژگی را برای آن ایجاد کرد قابل اجرا است.

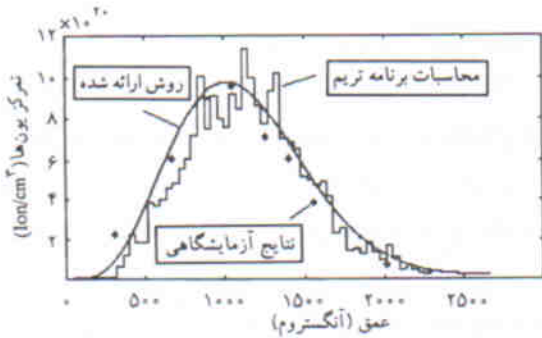
در تمامی محاسباتی که در ادامه تشریح می‌شود (شکل‌های ۱۲ الی ۲۰) $n_p = 100$ و $n_e = 30$ و $n_\theta = 20$ در نظر گرفته شده‌اند و مقدار ΔZ هرکجا ذکر نشده است، برابر با 10 \AA انتخاب شده است. محاسبات انجام شده نشان داده‌اند که منحنی‌های حاصل از افزایش n_θ و n_e همگرا می‌شوند و این مقدار انتخاب شده برای آنها،



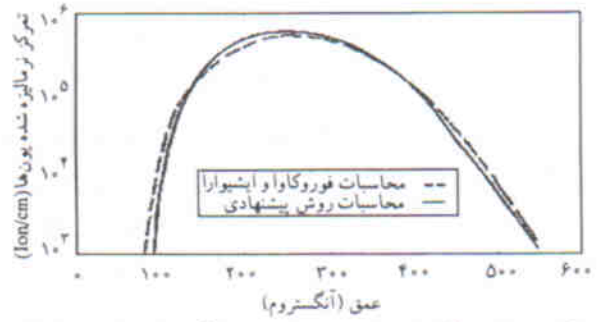
شکل ۱۲. تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌های آلومینیوم در ژرمانیم، انرژی اولیه 20 keV با سطح مقطع قانون توانی.



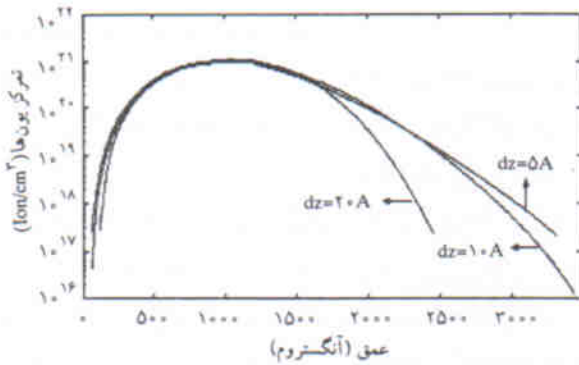
شکل ۱۳. تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌های آلومینیوم در ژرمانیم، انرژی اولیه 20 keV با سطح مقطع توماس فرمی.



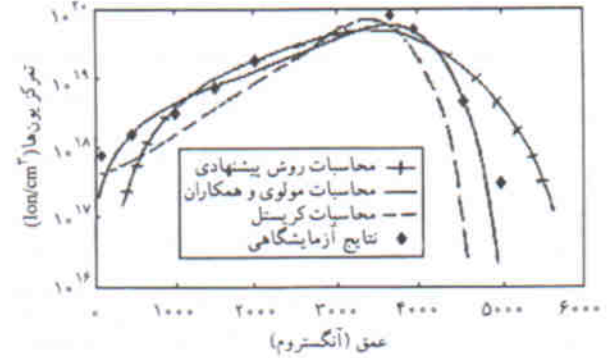
شکل ۱۸. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های آرسنیک با انرژی ۱۸=keV در سیلیکون و مقایسه با محاسبات برنامه TRIM.



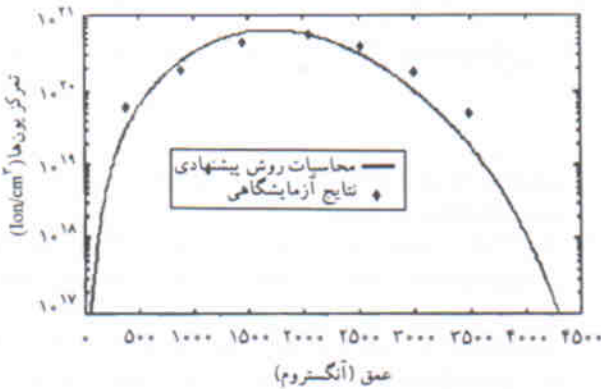
شکل ۱۴. تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌های آنتیموان با انرژی ۵۰=keV در سیلیکون.



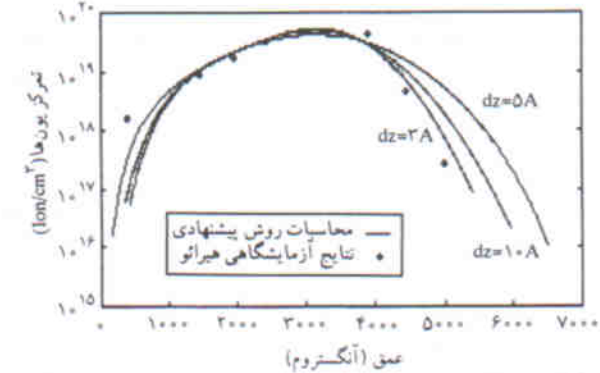
شکل ۱۹. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های آرسنیک با انرژی ۱۸=keV در سیلیکون به ازاء dz های مختلف.



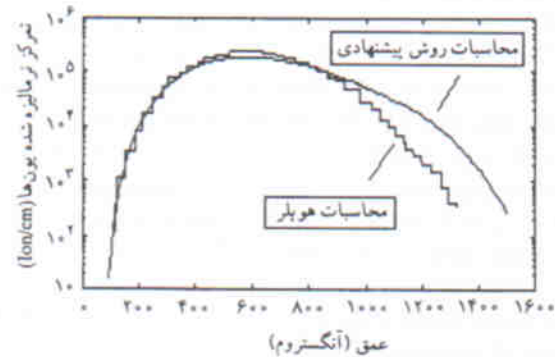
شکل ۱۵. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های بور با انرژی ۱۰۰=keV در سیلیکون با استفاده از سطح مقطع ویلسون.



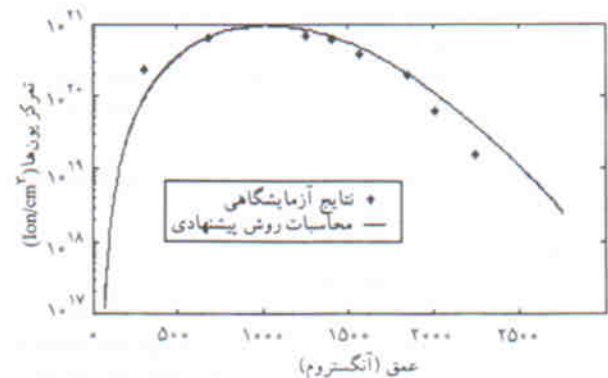
شکل ۲۰. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های فسفر با انرژی ۱۶=keV در سیلیکون.



شکل ۱۶. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های بور با انرژی ۱۰۰=keV در سیلیکون به ازاء ΔZ های مختلف و سطح مقطع ویلسون.



شکل ۲۱. تابع چگالی احتمال عمق نفوذ یون‌های آنتیموان با انرژی ۱۲=keV در سیلیکون.



شکل ۱۷. تابع تمرکز ناخالصی یون‌های آرسنیک با انرژی ۱۸=keV در سیلیکون.

ناخالصی مورد نظر در شکل ۱۷ است که در آن محاسبات ما با محاسبات حاصل از برنامه TIRM که برای شبیه‌سازی کاشت یون از روش شبیه‌سازی مونت کارلو تهیه شده است و همچنین با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است. شکل ۱۹ نیز تابع تمرکز ناخالصی مورد نظر در شکل ۱۷ است که توسط محاسبات ما، به‌ازاء سه مقدار متفاوت ΔZ (۵ و ۱۰ و ۲۰ آنگستروم) محاسبه و رسم شده است. مجدداً همان پدیده‌ی همگرایی منحنی‌ها به‌ازاء کوچک‌تر کردن ΔZ به‌وضوح در شکل مشاهده می‌شود. شکل ۲۰ تابع توزیع تمرکز ناخالصی برای یون‌های فسفر با انرژی ۱۶۰ keV در سیلیکون را که حاصل محاسبات ما (سطح مقطع توماس فرمی) و همچنین نتایج آزمایشگاهی هیراتو است نشان می‌دهد و مشاهده می‌شود که منحنی حاصل از محاسبات ما به نتایج آزمایشگاهی نزدیک است.

در شکل ۲۱ تابع چگالی احتمال عمق نفوذ برای یون‌های آنتیموان با انرژی ۱۲۰ keV در سیلیکون را از روش محاسبات ما با سطح مقطع توماس فرمی و همچنین محاسبات انجام گرفته در روش مدل دوبعدی کاشت یون با کمک ممان‌های فضایی^[۲۰] نشان می‌دهد، و نزدیکی جواب‌ها به‌خوبی آشکار است.

نزدیکی نتایج محاسبات انجام شده با سایر محاسبات عملی در ترکیب‌های منحنی یون - هدف - انرژی اولیه، صحت مدل و دقت روش محاسبات را نشان می‌دهد.

می‌دهد. در این حالت انحراف زاویه‌ی یون کاملاً زیاد است و نتایج محاسبات معرف صحت و دقت بالای مدل برای زاویه انحراف یون در حین حرکت است. نتایج حاصل از چهار روش محاسباتی (روش فعلی، محاسبات مولوی، محاسبات کریستل و نتایج آزمایشگاهی هیراتو) باهم مقایسه شده‌اند و نشان می‌دهند که نتایج محاسبات در روش فعلی از دقت کاملاً مطلوبی برخوردارند و نزدیک به نتایج آزمایشگاهی‌اند. سطح مقطع مورد استفاده در محاسبات فعلی و محاسبات مولوی، سطح مقطع ویلسن است، و سطح مقطع به‌کار برده شده توسط کریستل، سطح مقطع کالیبتزر (Calbitzer) است که به سطح مقطع ویلسن بسیار نزدیک است.

شکل ۱۶ همان تابع بحث شده در شکل ۱۵ است که توسط روش محاسباتی ما به‌ازاء سه مقدار متفاوت ΔZ (۱۰ و ۵ و ۴ آنگستروم) رسم شده است. همگرایی منحنی‌ها به‌ازاء کوچک‌تر کردن ΔZ در شکل به‌خوبی نمایان است. این همگرایی از نقاط قوت مدل ارائه شده بوده و در کارهای دیگران گزارشی از چنین همگرایی‌یی ارائه نشده است. شکل ۱۷ تابع تمرکز ناخالصی را برای یون‌های آرسنیک در سیلیکون با انرژی اولیه ۱۸۰ keV و $dose = 10^{16}$ (Ion/cm²) که حاصل محاسبات ما (سطح مقطع توماس فرمی) و همچنین نتایج آزمایشگاهی هیراتو هستند را نشان می‌دهد. نزدیکی بسیار زیاد نتایج صحت محاسبات را تأیید می‌کند. شکل ۱۸ همان تابع تمرکز

پانوش

1. Diffusion
2. equation Boltzman Transport
3. Channeling
4. Impact Parameter
5. power law

منابع

1. Furukawa, S. and Ishiwara, H. "Calculation of range distribution based on energy distribution of implanted ions", *J. Appl. Phys.*, **43**, pp. 1268 (1972).
2. Lindhard, J., Scharff, M. and Schiott, H.E. "Range concepts and heavy ion ranges", *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **33** (14) (1963).
3. Johnson, N.L. and Kots, S. "Continus univariate distributions", **II**. Wiley, New York (1970).
4. Smith, D.H. and Gibbons, J.F. "Ion implantation in semiconductors", Plenum, New York, pp 33 (1977).
5. Christel, L.A., Gibbons, J.f. and Mylroie, S.W. "An application of the boltzman transport equation in ion range and damage distributions in multilayered targest", *J. Appl Phys.* **51**, pp. 6176 (1980).
6. Christel, A. "An application of the Boltzman transport equation to ion implantation in multilayered targets", Ph.D thesis, Stanford university (1981).
7. Oen, O.S., Holmes, D.K. and Robinson, M.T. "Ranges of energetics atoms in solids", *J. Appl. Phys.* **34** (2) pp. 302 (1962).
8. Pavlov, P.V., Tetel, Baum, D.I., Zorin, E.I. and Alekseev, V.I. "Distribution of implanted atoms and radiation defects in the ion bombardment of silicon (Monte-Carlo calculation method)", *Soviet physics solid-State*, **8**, (9) pp. 2141 (1967).
9. Srinivasan, G.R. "Monte carlo modeling of ion implantation for silicon devices", IEEE, Electron Device meeting (1989).
10. Tian, S., Morris, S.J., Morris, M., Obradovic, b., and Tasch, A.F. "Montecarlo simulation of ion implantation damage process in silicon", IEEE, Electron Device Meetin (1996).
11. Klein, K.M., Park, H. and Tash, A.F. "Monte carlo simulation of ion implantation in to single-Cyrstal silicon including new models for electronic stopping and cumulative damage", IEEE, Electron Device meetin (1990).
12. Moulavi-Kakhaki, M. "Projected range distibutions of implanted ions in multilayer targets" Phd thesis, University of kent at canterbury (1982).
13. Moulavi Kakhaki, M. and Ashworth, D.G. "Calculation of projected range distibutions in multilayer substrates", *J. Phys.*

- C:solid state phys.* **18** (1985).
14. Wilson, W.D., Hagmark, L.G. and Biersack, J.P. "Calculation of nuclear stopping, ranges and straggling in the low energy region", *Phys. Rev.* B15, pp. 2458 (1977).
 15. Carter, G. and Grant, W.A. "Ion implantation of semiconductors", Edward Arnold (Publisher) LTD, London (1979).
 16. Rubinstein, R.Y. "Simulation and the Monte carlo method", Jhon wiley publisher (1981).
 17. Lindhard, J., nilsen, V. and scharf, M. "Approximation method in classical scattering by screened coulomb field", *Mat. Fys. Medd. Den. Vid. Selsk.* **36** (10) (1968).
 18. Ashworth, D.G., and Moulavi Kakhaki, M. "Analytical integration of the thomas-fermi scattering cross", *J. App. phys.* **55** (2) (15 january 1984).
 19. Hobler, G., Länger, E. and Seleberherr, S. "Two-dimensional modeling of ion implantation with spatial moments", *Solid-state electronics*, **30** (4), pp 445-455 (1987).