

T.C.

GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ  
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



BOR UN SİLİKONDAKİ DİFÜZYON  
MEKANİZMASI

Sinan KAZAN  
YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI

98293

TEZ DANIŞMANI  
Yrd.Doç.Dr. Engin BAŞARAN

GEBZE

2000

Bu tez çalışması, G.Y.T.E. Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ....24/10/1999... tarih ve ...39/32... sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından .....Fizik..... Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.



JÜRI

ÜYE  
(Tez Danışmanı)

: Yrd. Doç. Dr. Engin Bozaran

ÜYE

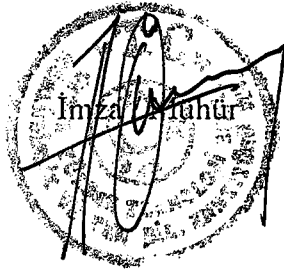
: Prof. Dr. Bekir Aktaş

ÜYE

: Doç. Dr. Orhan Sahin

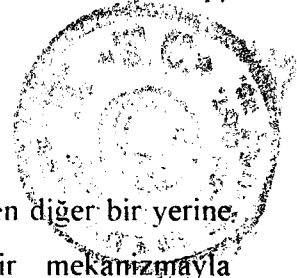
ONAY

G.Y.T.E. Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun  
17.01.2000 tarih ve 2000/1.2 sayılı kararı.



T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU  
DOKÜMANİSYON BİRİMİ

## ÖZET



Difüzyon en genel anlamda maddenin, sistemin bir yerinden diğer bir yerine transfer edilmesi sürecidir. Bu difüzyon sürecinin nasıl bir mekanizmayla gerçekleştiği, bu konunun yarıiletken cihaz teknolojisinde oynadığı *oskarlık* rolü nedeniyle, yarım yüzyıldır çok yoğun olarak çalışılmış ve bu çalışmaların neticesinde yarıiletken cihazlar günlük hayatımızın vaz geçilemez ihtiyaçları olmuştur.

Bor' un silikon içerisindeki difüzyonu yarıiletken cihazlarda p-tipi bölgeler elde etmek için evrensel bir teknik olup, günümüze kadar yarıiletken cihazların fabrikasyonunda kullanılmıştır. Silikon kristali içerisindeki bor katkı profilini hemen hemen bütün araştırmacılar p-n eklem tekniğiyle elde etmiştir.

Cihaz teknolojisinde çok önemli bir aşama olan silikon yüzeyin oksitle kaplanması, araştırmacıların çalışmalarını oksit ortamda difüzyonun hızlanmasından dolayı bu yöne çekmiştir. Bor' un difüzyon mekanizması tam olarak, noktasal kusurların özelliklerinin ve silikon yüzeydeki oksidasyon kinetiğinin araştırılması ile anlaşılmıştır. Bu çalışmaların sonucunda, bor ve fosfor gibi katkı maddelerinin difüzyon mekanizmaları ve bu mekanizmanın difüzyon parametrelerine karşı gösterdikleri davranış anlaşılmıştır.

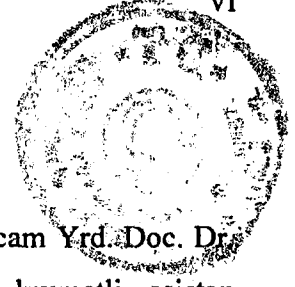
## SUMMARY

Generally, diffusion is a transfer process in which matter is transferred from one place to another place of system. The mechanism of this diffusion process have studied more intensively for last half century due to crucial role in semiconductor device technology and the result of this interest, semiconductor devices have become more important necessity of our day life.

The diffusion of Boron in semiconductor devices is a universal technique to obtain p-type regions. The characteristic concentration profile of boron in silicon is obtained by using p-n junction methode.

The oxidation process, which is one of the most important part of devices fabrication, guided to the researcher to this research area due to enhancement of diffusion in oxidizing ambient. The diffusion mechanism of boron is understood after the determination of the properties of point defects and the oxidation kinetics at silicon surface. Finally, the diffusion mechanism of boron and phosphorus and behaviour with diffusion parameter, is understood.

## TEŞEKKÜR



Bu tez çalışması sırasında gösterdiği yardımlarından dolayı danışman hocam Yrd. Doc. Dr. Engin Başaran'a, bölüm başkanımız Prof. Dr. Bekir Aktaş'a, ve kıymetli asistan arkadaşlarıma teşekkürü bir borç bilirim.



# İÇİNDEKİLER



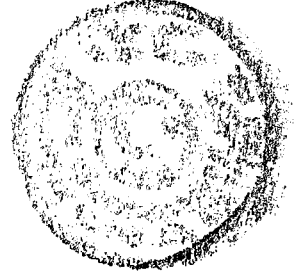
|                                                        |     |
|--------------------------------------------------------|-----|
| <b>ÖZET</b> .....                                      | iv  |
| <b>ABSTRACT</b> .....                                  | v   |
| <b>TEŞEKKÜR</b> .....                                  | vi  |
| <b>İÇİNDEKİLER</b> .....                               | vii |
| <b>SİMGELER VE KISALTMALAR</b> .....                   | ix  |
| <b>ŞEKİL DİZİNİ</b> .....                              | xi  |
| <b>ÇİZELGELER DİZİNİ</b> .....                         | xiv |
| <b>1. GİRİŞ</b> .....                                  | 1   |
| 1.1.Difüzyonun tanımı.....                             | 1   |
| 1.2.Difüzyon modelleri.....                            | 3   |
| <b>2. DİFÜZYONUN MATEMATİĞİ</b> .....                  | 6   |
| 2.1.Basit difüzyon denklemleri.....                    | 6   |
| 2.2.Difüzyon Sabitinin Sıcaklığa Olan Bağımlılığı..... | 13  |
| 2.3.Yoğunluğa Bağlı Difüzyon Sabiti.....               | 15  |
| 2.3.1. Boltzman-Matano Analizi.....                    | 15  |
| 2.3.2. Atomik Yaklaşım.....                            | 17  |
| 2.4.Doğrusal Olmayan Difüzyon Denkleminin Çözümü.....  | 23  |
| <b>3. ATOMİK DİFÜZYON MEKANİZMASI</b> .....            | 27  |
| 3.1.Silikonda Noktasal Kusurlar.....                   | 27  |
| 3.1.1. Fıtri Kusurlar.....                             | 27  |
| 3.1.2. Katkı İçerikli Noktasal Kusurlar.....           | 28  |
| 3.2.Silikonda Noktasal Kusurların Kaynağı.....         | 30  |
| 3.2.1. Yüzey ve Külçe Etkisi.....                      | 30  |
| 3.2.2. Silikon Yüzeydeki Kimyasal Reaksiyonlar.....    | 31  |
| 3.2.3. Katkı Difüzyonu.....                            | 31  |
| 3.2.4. Radyasyon Zararları.....                        | 32  |

|                                                                                     |           |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.3.Fitri Noktasal Kusurların Termodinamiği.....                                    | 32        |
| 3.3.1. Yüklü Noktasal Kusurlar.....                                                 | 34        |
| <b>4. ÖLÇÜM TEKNİKLERİ.....</b>                                                     | <b>36</b> |
| 4.1.Birleşme Mesafesi ve Yüzey Direnci.....                                         | 36        |
| 4.1.1. Birleşme Mesafesi.....                                                       | 36        |
| 4.1.2. Dört Noktalı Uç Tekniği.....                                                 | 38        |
| 4.1.3. Van der Pauw Tekniği.....                                                    | 40        |
| 4.2.Profil Ölçümleri.....                                                           | 41        |
| 4.2.1. Kapasitans-Voltaj (C-V) Profil Tekniği.....                                  | 42        |
| 4.2.2. Boşaltım Kapasitansı.....                                                    | 42        |
| 4.2.3. Shottky Engelleri ve p-n Eklemleri.....                                      | 42        |
| 4.2.4. İkincil İyon Kütle Spektrometresi.....                                       | 48        |
| <b>5. BOR'UN SİLİKONDA DİFÜZYONU.....</b>                                           | <b>51</b> |
| 5.1.Giriş.....                                                                      | 51        |
| 5.2.Bor'un SiO <sub>2</sub> den Difüzyonu.....                                      | 61        |
| 5.3.Silikondaki Bor Difüzyonunun Kristaliyografik<br>Yöneline olan bağımlılığı..... | 63        |
| <b>6. SONUÇ.....</b>                                                                | <b>67</b> |
| <b>KAYNAKLAR.....</b>                                                               | <b>68</b> |
| <b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>                                                                | <b>71</b> |
| <b>EKLER</b>                                                                        |           |

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ



|            |                                                              |
|------------|--------------------------------------------------------------|
| $J$        | : Difüzyon akısı                                             |
| $J_d$      | : Deşik akısı                                                |
| $D$        | : Difüzyon başkatsayısı                                      |
| $C$        | : Yoğunluk                                                   |
| $C_s$      | : Yüzey yoğunluğu                                            |
| $x$        | : Uzay koordinatı                                            |
| $t$        | : Zaman                                                      |
| $Q_T$      | : Silikon yüzeyde biriken toplam katkı yoğunluğu             |
| $V_b$      | : Örgü üzerindeki atomların titreşim frekansı                |
| $V$        | : Debye frekansı                                             |
| $E_b$      | : Aktivasyon enerjisi                                        |
| $k_B$      | : Boltzmann sabiti                                           |
| $T$        | : Sıcaklık                                                   |
| $P$        | : Atomların sıçradıkları yerin boş olma olasılığı            |
| $Z_{AX}$   | : AX çiftinin yük sayısı                                     |
| $\mu_{AX}$ | : AX çiftinin iyonik mobilitesi                              |
| $E_f$      | : Fermi enerjisi                                             |
| $E_f^i$    | : Düşük katkı yoğunlağındaki fermi enerjisi                  |
| $\Phi$     | : Potansiyel farkı                                           |
| $n$        | : n-tipi yarı iletkendeki yük taşıyıcılarının yoğunluğu      |
| $p$        | : p-tipi yarı iletkendeki yük taşıyıcılarının yoğunluğu      |
| $n_i$      | : Düşük katkı mertebelerindeki yük taşıyıcılarının yoğunluğu |
| $K(T)$     | : Kimyasal denge sabiti                                      |
| $\Theta_x$ | : Serbestlik derecesi                                        |
| $S_x^f$    | : X noktasal kusurunun oluşma entalpisi                      |
| $H_x^f$    | : X noktasal kusurunun oluşma entropisi                      |
| $h$        | : Düzeltme faktörü                                           |
| $P_x$      | : X kusurunu oluşturmak için mümkün olan yolların sayısı     |
| $U$        | : İç enerji                                                  |
| $F$        | : Serbest enerji                                             |



- $F_p$  : Plastik bozulmadan dolayı hızlanma faktörü  
 $F_F$  : Alandan dolayı hızlanma faktörü  
 $G_x^f$  : X kusurunun oluşma enerjisi  
 $X_j$  : Eklem mesafesi  
 $R_s$  : Yüzey direnci  
 $R$  : Gaz sabiti  
 $V$  : Voltaj  
 $I$  : Akım  
 $C.F.$  : Geometrik düzeltme faktörü  
 $\rho$  : Yüzey öz direnci  
 $\epsilon(x)$  : İç elektriksel alan  
 $V_{bi}$  : İç elektriksel alandan dolayı oluşan potansiyel fark  
 $Q_d$  : Uzay-yük yoğunluğu  
 $X_d$  : Boşalma bölgesi genişliği  
 $\epsilon_s$  : Elektriksel duymumluluk  
 $C$  : Kapasitans  
 $N_d$  : Boşalma bölgesindeki net katkı yoğunluğu  
 $a$  : Örgü sabiti  
 $m$  : Dağılım başkatsayısı

## ŞEKİLLER DİZİNİ



### Şekil

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1. İki Boyutlu Örgü İçin Difüzyon Modelleri. (A) Boşluk Ve Dokular Arası Difüzyon Mekanizması. (B) Genişletilmiş Dokular Arası Difüzyon Mekanizması. İşareti Kristalin Örgü Atomunu, İşareti Doku Arasına Yerleşmiş Kristal Atomunu, İşareti Katkı Atomunu, İşareti Boşluğu Temsil Etmektedir.                                                                                                                                                                                                                          | 6  |
| 2.1. Birim Hacim Elemanı.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 7  |
| 2.1.1. İki Yüzey Arasındaki Net Akı                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 13 |
| 2.2. Düşük Katkı Yoğunluğu ve Sabit Yüzey Yoğunluğu Şartı Altında Fick'in Difüzyon Denkleminin Çözümü İle Elde Edilen Yoğunluk Profili                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 11 |
| 2.3. Düşük Katkı Mertebelerinde Difüzyon Başkatsayısının $1/T$ İle Değişimi                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 14 |
| 2.4. Elde Edilen Yoğunluk Profili, Difüzyon Sabitini Hesaplamak İçin Kullanılır                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 17 |
| 3.1. Boşluk-Tipi, Doku-Arası ve Genişletilmiş Doku-Arası Noktasal Kusurların Basit Gösterimi. (A) Değişik Yük Durumlarındaki (+, 0, -) Boşluklar. Koyu Siyah Renkle Gösterilen Bağlar, ESR (Elektron Spin Resonans) De Gözlenebilen $V^+$ ve $V^-$ Un Oluşmasına Neden Olan Çiftlenmemiş Spinlerin Bağlarını Temsil Etmektedir. (B) Koyu Renkle Gösterilen Küreler Değişik Yerlerdeki Doku-Arası Boşluklara Yerleşmiş Katkı Atomlarını Temsil Etmektedir (C) Genişletilmiş Doku Arası Noktasal Kusuru Temsil Edilmektedir | 28 |
| 3.2. Katkı İçerikli Noktasal Kusurların Silikon Yüzeyin (001) Düzleminde O-Temsili Gösterimidir. İşareti Örgü Noktası Üzerindeki Silikon Atomunu Temsil Etmektedir. İşareti Örgü Noktası Üzerindeki Katkı Atomunu Temsil Etmektedir. (A):Herhangi Bir Şekilde Oluşmuş AV Çifti.(B):Dokular Arasına Yerleşmiş Katkı Atomunun Silikon Atomunun Yerine                                                                                                                                                                       | 29 |

Geçmesi.(C):Doku Arasına Yerleşmiş Bir Slikon Atomunun Örgü Üzerindeki Bir Katkı Atomuna Çarparak Onun Yerine Geçmesi Ve Katkı Atomunun Doku Arasına Yerleşmesi (D):Örgü Üzerine Yerleşmiş Bir Katkı Atomunun Yerinden Ayrılması İle Bir Boşluk Oluşması

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.1. Eklem Bölgesinin Ölçülebilmesi İçin Yüzeyin Eğimli Kesilmesi...                                                                                                                                                                                                                                    | 37 |
| 4.2. Yüzey Yoğunluğunun Yüzey Öz Direnci İle Değişimi                                                                                                                                                                                                                                                   | 38 |
| 4.3. Dört Nokta Uç Tekniği İle Bir Kristalin Yüzey Direnci Ölçümü..                                                                                                                                                                                                                                     | 39 |
| 4.4. Van Der Pauw Tekniği İçin Düzensiz Yüzey Üzerinde Rastgele Alınmış Dört Nokta                                                                                                                                                                                                                      | 40 |
| 4.5. Oksitle Kaplanmamış Yüzeylerden Kelvin Direnci Kullanılarak Yüzey Direnci Ölçümü                                                                                                                                                                                                                   | 41 |
| 4.6. Düzenli Katkılandırılmış Yarıiletkenlerin Oluşturduğu P-N Eklemineki Yerel Elektriksel Alan                                                                                                                                                                                                        | 43 |
| 4.7. Boşalma Bölgesi Genişliğinin, Değişik Besleme Voltajları Altında Değişmesi.                                                                                                                                                                                                                        | 43 |
| 4.8.(A) N-Tipi Yarı İletken İçin Enerji-Band Diyagramının Basit Gösterimi. (B) P-Tipi Yarı İletken İçin Enerji-Band Diyagramının Basit Gösterimi. (C) Bir P-N Eklemi İçin Enerji-Band Diyagramının Basit Gösterimi. (D) Termal Denge Durumunda Keskin Bir P-N Eklemine Yük Dağılımının Basit Gösterimi. | 45 |
| 4.9. Yüzeysel P <sup>+</sup> N Veya N <sup>+</sup> P Diyot İçin C-V Yapısı                                                                                                                                                                                                                              | 46 |
| 4.10. SIMS İn Çalışma Prensipleri Gösterilmiştir. Yüzey Üzerinde Açılan Oyuğun Boyutları 5x5 $\mu\text{M}^2$ İle 500x500 $\mu\text{M}^2$ Arasında Değişmektedir. Modern Cihazlarda Şekilde Gösterile Çıktıların Üçü Birden Alınabilmektedir.                                                            | 48 |
| 4.11. O <sub>2</sub> <sup>+</sup> İle Bombardıman Edilen Si' Un Doğrusal Y Eksenli Kütle Spektrumu                                                                                                                                                                                                      | 49 |
| 4.12. SIMS Sırasında Hedef Atomlar İle Malzeme Atomları Arasındaki Etkileşme.                                                                                                                                                                                                                           | 50 |

|                                                                                                                                                                                                                                                     |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 5.1. Silikonda Değişik Katkı Maddelerinin Çözünürlük Sınırları.                                                                                                                                                                                     | 52 |
| 5.2. Difüzyon Başkatsayısının Sıcaklığa Olan Bağımlılığı. (A) Kurtz Ve Yee [], (B) Fuller Ve Ditzzenberger [], (C) Williams []                                                                                                                      | 55 |
| 5.3. $\frac{D^*(C)}{D} = [Ac^2 + 1] \left[ 1 + \frac{c}{[(c - c_b)^2 + B]^{1/2}} \right], \quad A = (C_s/C_0)^2,$<br>$B = (2n_i/C_s)^2, \quad c = C/C_s \quad \text{ve} \quad c_b = C_B/C_s$ İçin Genel Difüzyon Denkleminin Çözümü..               | 57 |
| 5.4. Gastagore'nin Kullandığı Difüzyon Çiftinin Şematik Gösterimi...                                                                                                                                                                                | 57 |
| 5.5. Yayılmış Öz direnç Verilerinden Elde Edilmiş N-Tipi Katkılı Silikonda Bor'un Yoğunluk Profili. $T=1342^\circ\text{C}$ , $T=10^4\text{s}$ .....                                                                                                 | 58 |
| 5.6. A) Yüzey Yoğunluğu Ve Eklem Mesafesine Göre Normalize Edilmiş Yoğunluk Profili. Bütün Veriler $C_s > 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ Ve $C_B \approx 0.01 C_s$ B) Normalize Edilmiş Difüzyon Başkatsayısı İle Boron Yoğunluğunun Değişimi. [] | 59 |
| 5. 7. Aşırı As Katkılı Silikonda Boronun Yoğunluk Profili [].                                                                                                                                                                                       | 61 |
| 5.8. Buhar Formundaki Boronun $\text{SiO}_2$ Geçerek Si İçine Difüzyonu..                                                                                                                                                                           | 62 |
| 5.9. Boronun, $\text{SiO}_2$ Den Si İçine Difüzyonundan Alınmış Ve Normalize Olmuş Eklem Derinliği İle Normalize Olmuş Oksit Kalınlığını Gösteren Grafik. ( $C_B = 5 \times 10^{14}$ )                                                              | 63 |
| 5.10. Oksidasyon Süresince, Yönelime Bağlılığın Sıcaklıkla Değişimi                                                                                                                                                                                 | 66 |

## TABLolar DİZİNİ

**Tablo**

|                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------|----|
| 5.1. Değişik Külçe Yoğunluklarında Difüzyon Başkatsayısı                | 56 |
| 5.2. Difüzyonun Ortama, Depolama Süresine Ve Yöneline Olan Bağımlılığı. | 64 |
| 5. 3. Silikonun 111, 110 Ve 100 Yüzeylerinin Karakteristiği             | 64 |



# 1. GİRİŞ

## 1.1. Difüzyonun Tanımı



Difüzyon, rastgele moleküler hareketin bir neticesi olarak, en basit anlamda maddenin sistemin bir yerinden başka bir yerine transfer edilme sürecidir. Genellikle aşağıdaki klasik deneyle izah edilir.

Yarısına kadar renkli iyodik bir çözelti ile dolu silindirik cam kabın üst kısmına iyodik çözelti ile karışmayacak şekilde su eklenir. Daha sonra suyun yavaşça renkli çözeltiye karışması sağlanır. Karışımın ilk zamanlarında renkli çözelti ve su keskin sınırlarla birbirinden ayrılmış olarak gözlenir. Zaman ilerledikçe renkli iyodik çözelti kabın üst kısımlarına doğru ilerleyerek suyun zayıf yoğunlukta renklenmesine neden olur. Yeterli zaman geçtikten sonra çözeltinin tümü aynı rengi alır. Bu durum silindirik cam kabın alt kısımlarında bulunan iyot moleküllerinin kabın üst kısımlarına doğru hareket etmesi ile açıklanır ve renkli iyot suyun iç kısımlarına doğru yayılmıştır veya difüzyon olmuştur denir.

Her bir iyot molekülünün hareketini gözlemek mümkün olsaydı, her molekülün rastgele hareket ettiği gözlenecekti. Sulandırılmış çözeltideki her bir iyot molekülü birbirinden bağımsız hareket eder. Çok nadir olarak ortak hareket ederler.ve hiç durmadan çözücü maddenin atomları veya molekülleri ile çarpışarak, ya yoğun oldukları bölgeden az yoğun oldukları bölgeye yada tam tersine hareket ederler. Moleküllerin tercih ettikleri özellikli bir yön yoktur. Yani çarpışmalar izotropiktir.

Tek bir molekülün hareketi düzensiz-yürüyüş (Random-walk) problemine [1] benzetilerek belirli bir zaman aralığında aldığı ortalama yol hesaplanabilir. Fakat o molekül için verilen zaman aralığında hangi yönde net hareket ettiği söylenemez. Ancak iyot molekülleri için düzensiz hareketin ortalaması alındığında, çok yoğun oldukları bölgeden az yoğun oldukları bölgeye doğru hareket ettikleri söylenebilir.

Katılarda difüzyon konusu, silikon içerisindeki katkı difüzyonu çalışmalarının bir neticesidir. Bu çalışmaların en zorlayıcı kuveti, silikon tabanlı entegre devrelerinin fabrikasyonu sırasında karşılaşılan katkı difüzyonu ve bu entegrelerin teknolojiye önemi. Katkı maddesi periyodik tablonun V-grup elementlerinden olan P, As ve Sb, III-grup elementlerinden B, Ga, In veya Al gibi elementlerden seçilir. Bu katkı maddelerinin atomları birkaç aşamadan sonra silikon alt tabanının içerisinde sınırlı bir bölgeye yerleştirilir. Bu aşamaya kadar süren difüzyon sürecini kontrol etmek ve sonuçlarını tahmin etmek, silikon tabanlı entegre devrelerinin (IC) dizaynı ve geliştirilmesi açısından çok önemlidir. Eğer katkı difüzyonu Fick'in difüzyon denklemleri ile tarif edilen basit davranışlı difüzyon ise silikon yüzeyde biriktirilen sabit yüzey yoğunluğu ile erfc-tipi yoğunluk profili elde edilir. İyon aşılama yönteminde ise yaklaşık olarak Gaussian dağılımı elde edilir. Silikondaki dağılım süreci 1960 lı yıllardan başlayarak günümüze gelen difüzyon modellerinden oldukça karmaşıktır. Modern cihaz yapıları katkı dağılımının çok sıkı kontrolünü gerektirir ve IC yapımındaki yeni teknolojiler katkı difüzyonunda beklenmedik sonuçlar karşımıza çıkarır. Bütün karmaşıklığına rağmen en genel sonuç olarak katkı atomları silikon kristalin örgü yapısı içerisindeki fitri noktasal kusurlar ile etkileşerek çözünürler. Dolayısı ile silikon kristalindeki difüzyonu anlamak için ilk önce kristal içindeki kusurları sonra da bu kusurlar ile katkı atomlarının kusurlarını etkileşimini anlamak gerekir.

1960 lı yıllarda entegre devrelerinde baskın olarak kullanılan cihaz npn bipolar transistörü idi. Bu cihazın performansı fosfor katkılandırılarak elde edilen n-tipi dağıtıcı ve toplayıcı arasında sandwich edilen p-tipi tabanın (Boron katkılandırılarak elde edilir) katkı profilinin genişliğine bağlıdır. Çok geçmeden dağıtıcı oluşturmak için yapılan fosfor difüzyonunun alttaban içine difüzyon olmuş boronun difüzyonunu hızlandırdığı anlaşıldı. Bu durum cihaz dizaynını zorlaştırıyordu. Bugün fosfor difüzyonunun çok sayıda noktasal kusur oluşumuna neden olduğu anlaşıldı. 1970 lerde n tipi katkı maddesi olarak fosforun yerini, düşük difüzyon sabiti ve kontrolü kolay difüzyon davranışı sergilediğinden arsenik almaya başladı. O sıralarda başka bir problemin kaynağı da keşfedildi. Bipolar transistörlerin ve MOS tipi cihazların fabrikasyonu sırasında çok önemli bir aşama olan silikon yüzeyin oksitle kaplanması (yüzeyde  $\text{SiO}_2$ ) süreci difüzyonu hızlandırıyordu. Bu

durum OED(Oxygen Enhanced Difusion) mekanizması olarak bilinir ve bugüne kadar deneysel verilerle uyum içerisinde olan bir teori ile açıklanamamıştır. Katkı atomlarının hızlandırılmış difüzyonu, silikon yüzeyin oksitlenmesi ile olur. Oksitlenme reaksiyonları kristalde çok sayıda noktasal kusurun oluşmasına neden olur (Silikon atomlarının örgü arasındaki boşluklara yerleşmesi). Oksitlendirilmiş yüzey, bir maske gibi davranarak hem yüzey etkilerini pasifleştirir hemde katkı ile dielektrik arasında cihazın işlevine göre birleştirici görevi görür. Bu beklenmedik difüzyon durumlarından dolayı cihaz yapımında kullanılan teknikler, çalışmalarını düşük sıcaklıkta sürdürmektedirler veya katkı maddesinin kontrollü bir biçimde silikon alt tabana dağıtmak için iyon aşılama yöntemi kullanırlar. Sıcaklığın düşürülmesi ile birlikte noktasal kusurların denge yoğunluğu hızla düşerek difüzyonun yavaşlamasına neden olur.

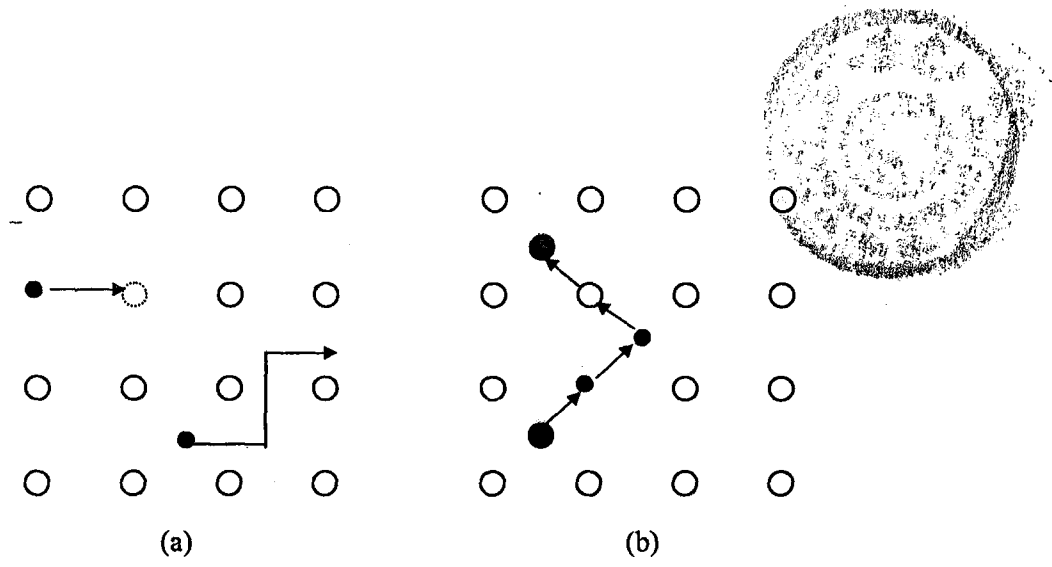
Verilen örneklerin hepsi; silikondaki difüzyon sürecini anlamak ve tahmin yeteneğimizin geliştirilmesi için sürekli yeni gelişmelere ihtiyaç olduğuna işaret eder. Bugünkü araştırma gayretlerini karşılayacak iki boyutlu ve üç boyutlu problemlere uygulanabilir yeni fiziksel modeller ve onların matematiksel formülasyonları elde edilmelidir. İki veya üç boyutlu difüzyon modelleri, cihaz yapısını kapsayan katkı atomlarının, iki veya üç boyuttaki dağılımının belirlediği cihaz çalışması ve küçülmeye devam eden cihaz geometrisi gibi çok önemli olabilir. Ek olarak iki boyutlu ve üç boyutlu yoğunluk profilini ölçebilen deneysel bir teknik henüz gerçekleştirilememiştir. Malesef hemen hemen bütün difüzyon modelleri yalnızca bir uzaysal boyuta dayandırılarak geliştirilmiştir. 1980 li yıllarda Stanford Üniversitesinde P.M:Fahey ve arkadaşları SUPREM (Sanford University PProcess and Engineering Models) olarak bilinen iki boyutlu difüzyonu simule edebilen bir bilgisayar programı geliştirildi [2].

## 1.2. Difüzyon Modelleri

Mükemmel bir kristal örgü ancak matematiksel olarak mümkündür. Termodinamiğin bir sonucu olarak, kristal yapı içerisinde kusurlar her zaman mevcuttur. Kusurların varlığı kristallerin fiziksel özellikleri üzerinde çok önemli rol oynar. 1950 lili yıllardan bu yana geliştirilen, katılarda difüzyon teorileri de kristal yapı içerisinde var olan kusurlara dayanır.

En genel anlamda kusurlar iki kısım altında toplanabilir. Birinci kısım elektronlar, fononlar ve deşikler olarak bilinen dinamik kusurlardır. İkinci grupta ise noktsal, çizgisel ve yüzeysel kusurlardır. Kusurlar, üçüncü bölümde daha detaylı olarak incelenecektir. Kristal içerisinde katkı atomu gradiyenti var olduğu zaman noktsal kusurlar katkı atomlarının hareketini etkilerler. Dolayısı ile difüzyon katkı atomlarının hareketi olarak tasavvur edilebilir. Şekil 1.2.1'de, katılarda en yaygın olan bazı atomik difüzyon modelleri gösterilmektedir. İçi boş daireler kristal atomlarının düşük sıcaklıktaki konumlarını, içi dolu daireler katkı atomlarını temsil etmektedir. Kristal sıcaklığı artırıldığı zaman örgü atomları denge noktaları civarında titreşirler. Yeteri kadar enerji kazandıkları zaman en yakınlarındaki boşluğa sıçrarlar. Başka bir örgü atomu veya katkı atomu yerinden sıçrayarak örgü atomun bıraktığı boşluğa yerleşirse bu **boşluk-türü difüzyon mekanizması** olarak adlandırılır (Şekil 1.2.1.a). Boşluğa yerleşen atom, kristalin kendi atomuysa bu difüzyon **öz difüzyon**, eğer katkı atomuysa **katkı difüzyonu** olarak adlandırılır. Eğer katkı atomları kristalin örgü yapısı arasındaki boşluklarda (doku-arası boşlukları) ilerliyorsa buna **dokular arası difüzyon mekanizması** denir. Katkı atomlarının iyonik yarıçapı yeterince ufak olduğu zaman kristal atomları ile bağ yapmadan dokular arasındaki boşluklarda rahatça ilerleyebilir. Kristal içerisindeki bir atomun bulunduğu bir noktadan başka bir noktaya sıçraması için gerekli olan enerjiye **aktivasyon enerjisi** denir. Dokular arası difüzyon mekanizması için aktivasyon enerjisi, boşluk tipi difüzyon mekanizması için gerekli olan aktivasyon enerjisinden daha küçüktür. Çünkü boşluk oluşturmak için enerjiye ihtiyaç yoktur ve boşluk-tipi difüzyon mekanizmasında örgü atomlarının bağları kırıldığı için aktivasyon enerjisi daha fazladır. Şekil 1.2.1(b) de birinci adımda, katkı atomunun yerine geçen kristal atomunun hareketi iki boyutlu olarak gösterilmektedir. İkinci adımda, katkı atomu doku arasına yerleşmiş durumdadır. Üçüncü adımda katkı atomu başka bir kristal atomunun yerine geçerek, kristal atomunun doku arasına yerleşmesine sebep olur. Bu durum **genişletilmiş dokular arası difüzyon mekanizması** olarak bilinir.

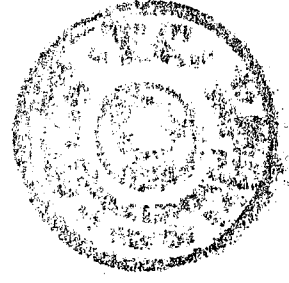
Boşluk ve genişletilmiş dokular arası difüzyon mekanizmaları genellikle silikon kristali içerisinde P, B, As, Sb gibi katkı elementlerinin difüzyonunu açıklayan mekanizmalardır. Periyodik tablonun I ve III-grup elementleri küçük iyonik yarı çapa sahip olduklarından çok hızlı şekilde dokular arası difüzyon mekanizmasını kullanarak difüzyon olurlar.



**Şekil 1.1** İki boyutlu örgü için difüzyon modelleri. (a) Boşluk ve dokular arası difüzyon mekanizması. (b) Genişletilmiş dokular arası difüzyon mekanizması.

○ İşareti kristalin örgü atomunu, ● işareti doku arasına terleşmiş kristal atomunu, ● işareti katkı atomunu ○ işareti boşluğu temsil etmektedir.

## 2. DİFÜZYONUN MATEMATİĞİ



### 2.1. Basit difüzyon denklemleri

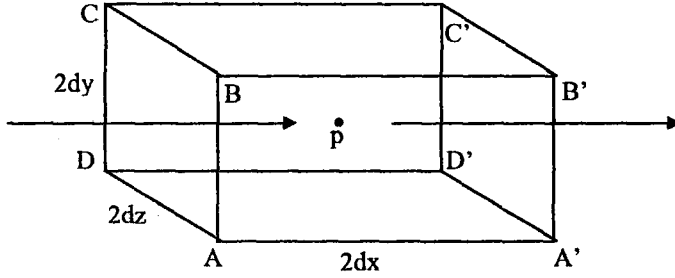
1855 de Fick [3] ısı aktarımı ile ilgili denklemleri difüzyon için uyarlayarak, difüzyon teorisini matematiksel temele oturtmuştur. İzotropik ortamlarda difüzyonun matematiksel teorisi; difüzyon olan maddenin, seçilen kesitin birim alanından birim zamanda aktarılma oranına dayanır.

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.1)$$

J seçilen kesitin birim alanından aktarılma oranı, C difüzyona maruz kalan katkı maddesinin yoğunluğu, x kesitin normali yönündeki uzay koordinatı ve D difüzyon sabiti olarak adlandırılır. Bazı durumlarda örneğin sulandırılmış solüsyonlarda D makul surette sabit alınabilir. Diğer durumlarda örneğin, yüksek polimerlerde veya kristallerde katkı maddesinin yoğunluğu yüksek mertebelerde olduğu zaman difüzyon sabiti katkı maddesinin yoğunluğuna bağlıdır. J nin birimi olarak, birim zamanda birim alandan geçen madde miktarına karşılık gelen  $\text{gr/cm}^2\text{s}$  kullanılır. C nin birimi olarak, yoğunluğa karşılık gelen  $\text{gr/cm}^3$  kullanılırsa D nin birimi  $\text{cm}^2\text{s}^{-1}$  olur. Eşitlik 2.1 in sağ tarafında görülen eksi işareti difüzyonun azalan yoğunluk gradiyenti boyunca olmasından ileri gelir. Şu önemle vurgulanmalıdır ki eşitlik 2.1 izotropik ortamlarda geçerli olmaktadır. Yani kristal içindeki bir noktanın yapı ve difüzyon özellikleri kendisine komşu olan başka bir nokta içinde geçerlidir. Bu simetriden dolayı katkı maddesinin akış yönü seçilen kesitin normali boyunca olur. İzotropik olmayan ortamlarda ise difüzyonunun özellikleri tamamen yöne bağlıdır [4].

Difüzyonun izotropik ortamlarda geçerli olan temel differansiyel denklemi maddenin korunumu ilkesi baz alınarak eşitlik 2.1 den elde edilebilir. Bunun için seçilen dikdörtgenler prizması şeklindeki hacim elemanının boyutları  $2dx$ ,  $2dy$ ,  $2dz$

olsun. Bu hacim elemanın merkezi  $P(x,y,z)$  ve difüzyona maruz kalan katkı maddesinin bu noktadaki yoğunluğu  $C$  olsun. Prizmanın ABCD ve A'B'C'D' yüzeyleri şekildeki gibi  $x$  eksenine diktir.



Şekil 2.1 Birim hacim eleman

ABCD yüzeyinden prizmaya giren madde oranı

$$4dydz \left( J_x - \frac{\partial J_x}{\partial x} dx \right) \quad (2.2)$$

olarak verilir.  $F_x$ , P noktasındaki uygun kesit alanının birim yüzeyinde aktarılma oranı olarak tarif edilir. Benzer şekilde katkı maddesinin A'B'C'D' yüzeyinden prizmayı terk eden katkı madde miktarı yada prizma içerisindeki kayıp oranı aşağıdaki gibi verilir.

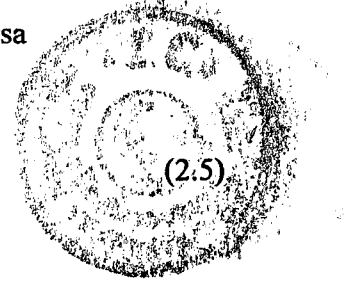
$$4dydz \left( J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} dx \right) \quad (2.3)$$

Dolaysı ile bu iki yüzey arasında hacim elemanı içerisindeki artış oranı

$$-8dx dy dz \frac{\partial J_x}{\partial x} \quad (2.4)$$

olarak bulunur. Benzer şekilde diğer yüzeyler için aynı işlem yapılırsa

$$-8dx dy dz \frac{\partial J_y}{\partial x}, -8dx dy dz \frac{\partial J_z}{\partial x} \quad (2.5)$$



olarak bulunur. Maddenin korunumu ilkesi baz alınarak prizma şeklinde seçilen hacim elemanının içerisinde kalan katkı madde miktarı aşağıdaki gibi verilir. Yalnızca x eksenini için eşitlik yazılırsa

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (2.6)$$

Eşitlik 2.1 de verilen J nin karşısı eşitlik 2.6 da yerine yazılırsa

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

Eşitlik 2.1 ve 2.7 Fick'in birinci ve ikinci difüzyon denklemleri olarak bilinirler. Bazı durumlarda D katkı maddesinin yoğunluğuna bağlıdır ve ortamın homojenliği D'nin yöne bağımlılığını gerektirir. Bu durumda daha genel olarak eşitlik 2.7 aşağıdaki gibi yazılır.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (2.8)$$

Eşitlik 2.7 difüzyon tekniğine uygun olarak tespit edilen başlangıç ve sınır şartları altında çözülebilir. Çok yaygın olarak kullanılan difüzyon tekniklerinden biri olan sonuz kaynaktan yarı sonsuz ortama doğru difüzyon için eşitlik 2.7'nin çözümü aşağıda verilmiştir. Bunun için katkı maddesi silikon kristalin bir yüzeyinde katman halinde biriktirilir. Başlangıç şartı olarak; katkı maddesinin kristal içerisindeki ilk dağılımı sıfır olsun,  $(t=0, C(x,0)=0)$ . Sınır şartı olarak  $C(0,t)=C_s$  ve  $C(\infty,t)=0$  olarak seçilirse Fick'in difüzyon denklemi Laplas dönüşümü kullanılarak aşağıdaki

ğibi çözülebilir. Eşitlik 2.7'nin her iki tarafı  $e^{-pt}$  ile çarpılıp,  $t$  ye göre 0'dan  $\infty$ 'a kadar integre edelim.



$$\int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt - \frac{1}{D} \int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial C}{\partial t} dt = 0 \quad (2.9)$$

Sol taraftaki integral için, integralin ve diferansiyelin dereceleri yer değiştirilirse sağ taraftaki integral

$$\int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} C e^{-pt} dt \quad (2.10)$$

Herhangi bir  $f(t)$  fonksiyonunun laplas dönüşümü  $F(t) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt$  şeklinde verilir. Bu sonuca göre eşitlik 2.10'un sağ tarafı yeniden düzenlenirse

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} C e^{-pt} dt = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.11)$$

Eşitlik 2.9'in sağ tarafı kısmi integrasyon yöntemi ile integre edilebilir.

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial C}{\partial t} dt &= C e^{-pt} \Big|_{t=0}^{\infty} + p \int_0^{\infty} C e^{-pt} dt \\ &= pC \end{aligned} \quad (2.12)$$

Köşeli parantezin içi başlangıç şartı gereği sıfır olur. Eşitlik 2.7 yeniden düzenlenirse

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = pC \quad (2.13)$$

Eşitlik 2.13 difüzyon denkleminin laplas dönüşümü yapılarak elde edilmiş halidir. Uygun sınır ve başlangıç şartları da laplas dönüşümüne tabi tutulursa

$$C=C_0; x=0 \longrightarrow C = \int_0^{\infty} C_0 e^{-pt} dt = \frac{C_0}{p}, x=0 \quad (2.14)$$

Laplas dönüşümü eşitlik 2.6 da verilen kısmi diferansiyel denklemini eşitlik 2.13 deki gibi sıradan diferansiyel denkleme dönüştürdü. Bu sıradan diferansiyel denklemin eşitlik 2.14 te verilen sınır şartı ile birlikte çözümü aşağıda verilmiştir.

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{p}{D} C = 0 \quad (2.15)$$

$q^2 = p/D$  olmak üzere eşitlik 2.15'in çözümü eşitlik 2.16 dır.

$$C = \frac{C_s}{p} e^{-pt} \quad (2.16)$$

Ekte verilen tablo 2.1 yardımıyla eşitlik 2.16'in aslında ters hata fonksiyonunun laplas dönüşümü olduğu anlaşılır. Dolayısı ile eşitlik 2.7'nin aranan çözümü

$$C = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (2.17)$$

Bu çözüm eşitlik 2.7 yi ve verilen bütün sınır şartlarını sağlar.  $C_s$  sabit yüzey yoğunluğu ( $\text{atom}/\text{cm}^3$ ),  $\operatorname{erfc}$  ise ters hata fonksiyonudur. Bu çözümde katkı maddesinin miktarı hakkında hiç bir sınırlama getirilmemiştir. Silikon kristalin bir yüzeyinde ince bir katman halinde biriktirilen katkı maddesinin, sınırlı sayıda kristal içerisine difüz etmeleri sağlanabilir. Bu durumda başlangıç şartı olarak

$$C(x,0)=0 \quad t=0 \quad (2.18)$$

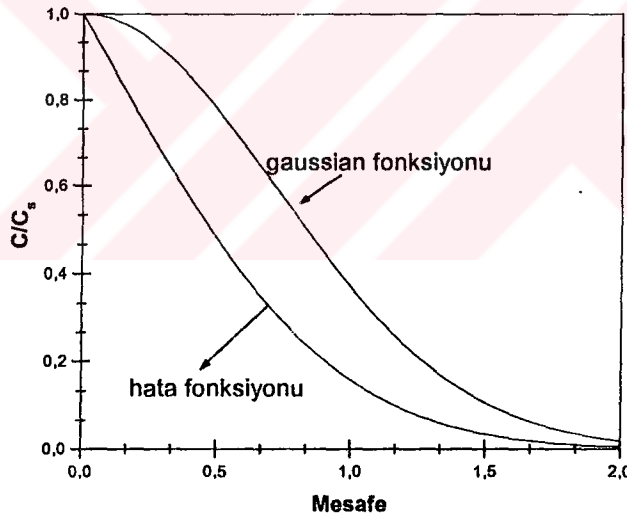
ve sınır şartı olarakta,

$$\int_0^{\infty} C(x, t) dx = Q_T \quad \text{ve } C(\infty, t) = 0 \quad (2.19)$$

tain edilirse eşitlik 2.7'nin çözümü bilinen Gaussian Dağılım fonksiyonudur.

$$C = \frac{Q_T}{\sqrt{\pi Dt}} e^{\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)} \quad (2.20)$$

$Q_T$  silikon kristali yüzeyinde biriktirelen katkı maddesi miktarı yada difüzyon olduktan sonra kristal içindeki toplam katkı yoğunluğudur.  $t$  difüzyon süresi olup değişik difüzyon süreleri için eşitlik 2.17 aşağıdaki şekilde gösterilmektedir.



Şekil 2.2: Düşük katkı yoğunluğu ve sabit yüzey yoğunluğu şartı altında Fick'in difüzyon denkleminin çözümü ile elde edilen yoğunluk profili

Difüzyon denkleminin, difüzyon tekniğine bağlı olarak çözülebildiğini belirtmiştik. Eşitlik 2.6 daki difüzyon denklemi kalınlığı  $l$  olan düzgün levha (plane-sheet) için çözülmek istendiğinde bu duruma uygun başlangıç ve sınır şartları eşitlik 2.18 deki gibi olur.

$$\begin{aligned}
C &= 0, & 0 < x < 1, & t = 0 \\
C &= C_0, & x = 1, & t \geq 0 \\
\frac{\partial C}{\partial x} &= 0, & x = 0, & t \geq 0
\end{aligned}$$



Laplas dönüşümü neticesinde eşitlik 2.7 ve 2.18 aşağıdaki formu alır.

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 C}{dx^2} - q^2 C &= 0, & 0 < x < 1 \\
\frac{dC}{dx} &= 0, & x = 0 \\
C &= C_0/p, & x = 1
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Dönüşüme uğramış eşitlik 2.22 deki difüzyon denkleminin çözümü

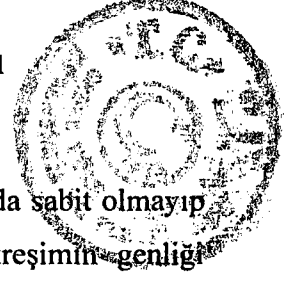
$$C = \frac{C_0 \cosh(qx)}{p \cosh(ql)} \tag{2.23}$$

Eşitli 2.23 deki hiperbolik trigonometrik fonksiyonlar, eksponansiyel fonksiyonlar şeklinde yazılıp binom teoremi kullanılarak seriye açılabilir. Bu işlemler yapılırsa eşitlik 2.23 ün çözümü aşağıdaki gibi olur.

$$C = \frac{C_0}{p} \sum (-1)^n e^{-q\{(2n+1)l-x\}} + \frac{C_0}{p} \sum (-1)^n e^{-q\{(2n+1)l+x\}} \tag{2.24}$$

Tablo 2.1 deki dönüşüm ifadelerinde faydalanılarak eşitlik 2.21 in aslında hata fonksiyonunun seriye açılmış hali olduğu anlaşılır. Serinin elemanları yarı sonsuz ortamdaki her  $l-x$ ,  $l+x$ ,  $3l-x$ ,  $3l+x$ ,... mesafesindeki yoğunluklardır. Seri  $Dt/l^2$  nin küçük değerleri için yakınsaktır.

## 2.2. Difzyon Sabitinin Sıcaklığa Olan Bağımlılığı

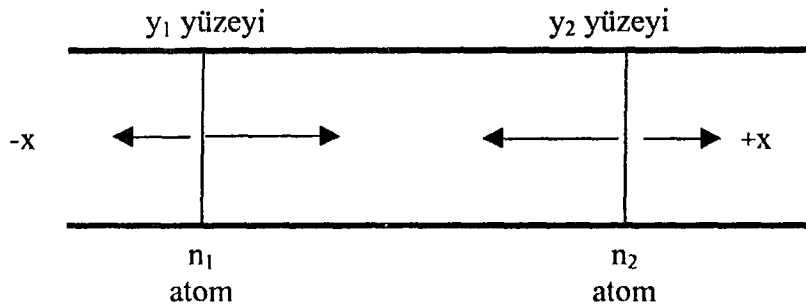


Kristalin örgü yapısını oluşturan atomlar bulundukları noktada sabit olmayıp bir denge noktası civarında salınım (titreşirler) yaparlar. Bu titreşimin genliği sıcaklığa bağlı olarak artar. Örgü üzerindeki atomların titreşim frekansı

$$V_b = V \exp\left(\frac{-E_b}{k_B T}\right) \quad (2.25)$$

olarak verilir.  $V$  debye frekansı (silikon için  $10^{13}$  Hz),  $E_b$  aktivasyon enerjisi  $k_B$  boltzman sabiti ve  $T$  de sıcaklıktır. Titreşim genliği kritik değerini aştığı zaman bulunduğu yüzeyden komşu yüzeye sıçrar. Sıçradığı yerde bir boşluk olmayabilir. Dolayısı ile sıçradığı yerin boş olma olasılığı  $P$  düşünülmelir. Şekil 2.2 de  $s$  atomunun bulunduğu  $y_1$  yüzeyinden  $y_2$  yüzeyine sıçraması sembolize edilmiştir.  $y_1$  yüzeyindeki atomların sayısı  $n_1$  (atom/cm<sup>2</sup>) ve  $y_2$  yüzeyindeki atomların sayısı  $n_2$  (atom/cm<sup>2</sup>) olsun. Her yüzeydeki atomlar  $+x$  ve  $-x$  yönünde sıçrama olasılıkları eşittir. Her hangi bir yüzeyden birim zamanda sıçrayan atomların sayısı  $nV_bP$  ile verilir. Buna göre  $y_1$  yüzeyindeki net akı

$$J = \frac{V_b P}{2} (n_2 - n_1) \quad (2.26)$$



Şekil 2. 1.1: İki yüzey arasındaki net akı

olarak verilir. İki komşu yüzey arasındaki mesafe  $\Delta x$  ve yoğunluk gradyenti

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{\Delta N}{\Delta x} = \frac{N_1 - N_2}{\Delta x} \text{ olmak üzere eşitlik 2.26 yeniden düzenlenirse}$$

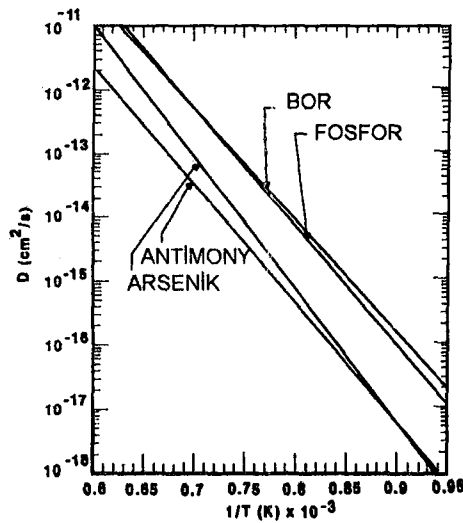
$$J = \frac{-PV_b \Delta x^2}{2} \frac{\partial N}{\partial x} \quad (2.27)$$

eşitlik 2.27 deki  $\frac{-PV_b \Delta x^2}{2}$  difüzyon sabiti olarak adlandırılır.

$$D = \frac{-PV_b \Delta x^2}{2} = \frac{-PV \Delta V^2}{2} \exp\left(\frac{-E_b}{k_B T}\right) \quad (2.28)$$

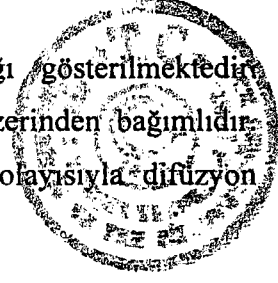
$$D = D_0 \exp\left(\frac{-E_b}{k_B T}\right) \quad (2.29)$$

Silikon kristali için iki komşu 400 yüzeyinden sıçrama düşünüldüğünde  $\Delta x = a_0/4$  olacaktır ve atomların bu yüzeyden sıçrama yönü için, tek boyutta formülasyon düşünüldüğünde, muhtemel iki sıçrama yönü vardır. Silikon kristali için Debye frekansı  $10^{13}$  Hz olarak hesaplanmıştır.



Şekil 2.3 Düşük katkı mertebelerinde difüzyon sabitinin  $1/T$  ile değişimi. [5]

Şekil 2.3 de difüzyon sabitinin sıcaklığa olan bağımlılığı gösterilmektedir. Anlaşıldığı üzere difüzyon sabiti sıcaklığa, titreşim genliği üzerinden bağımlıdır. Sıcaklık arttığında birim zamanda yapılan sıçrama artacak dolayısıyla difüzyon hızlanacaktır.



## 2.3. Yoğunluğa Bağlı Difüzyon Sabiti

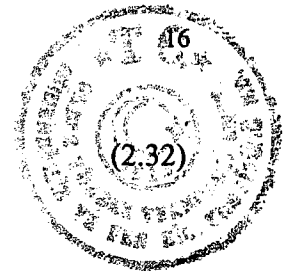
### 2.3.1. Boltzmann-Matano Analizi

Bir önceki bölümde Fick in difüzyon denklemlerinin, difüzyon katsayısının sabit olması şartı altında, çözümü gösterilmişti. Ancak, gerçekte difüzyon katsayısı, difüzyon süresine, sıcaklığa ve katkı atomlarının yoğunluk gradiyentine bağımlıdır. Katkı yoğunluğu özük yük yoğunluğunu aştığı zaman deneysel olarak elde edilen yoğunluk profili şekil 2.1 deki profilden sapar. Dolayısı ile genel difüzyon denklemi eşitlik 2.8.deki gibi yazılmalıdır.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.30)$$

$\frac{\partial D}{\partial x}$  terimi eşitlik 2.30 un homojen diferansiyel denklem olmasını engeller. Fakat eşitlik 2.30 Boltzmann dönüşümleri neticesinde sıradan homojen diferansiyel denkleme dönüştürülerek çözülebilir. Bu denklem ilk defa sayısal yöntemlerle Philip tarafından IBM360 kullanılarak çözüldü [6] . Eğer başlangıç şartları yalnızca bir değişken cinsinden,  $\eta = \frac{x}{\sqrt{t}}$ , ifade edilebilirse C yalnızca  $\eta$  in bir fonksiyonu olur ve eşitlik 2.30 sıradan homojen bir diferansiyel denkleme dönüştürülebilir.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{-1}{2} \frac{x}{(\sqrt{t})^3} \frac{dC}{d\eta} \quad (2.31)$$



$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{dC}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{dC}{d\eta}$$

Bu denklemler eşitlik 2.30 da yerine konulursa,

$$-\frac{x}{2t^{3/2}} \frac{dC}{d\eta} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{D}{t^{1/2}} \frac{dC}{d\eta} \right) = \frac{1}{t} \frac{d}{d\eta} \left( D \frac{dC}{d\eta} \right) \quad (2.33)$$

$$-\frac{\eta}{2} \frac{dC}{d\eta} = \frac{d}{d\eta} \left( D \frac{dC}{d\eta} \right) \quad (2.34)$$

Eşitlik 2.34 Boltzmann dönüşümünün bir uygulamasıdır ve ilk defa  $D(C)$  yi belirlemek için Matano tarafından uygulanmıştır [7]. Tayin edilen başlangıç ve sınır şartlarına boltzman dönüşümü uygulanırsa

$$\begin{aligned} C=C_0, x<0 \text{ ve } t=0 &\longrightarrow C=C_0, \eta=-\infty \\ C=0, x>0 \text{ ve } t=0 &\longrightarrow C=0, \eta=\infty \end{aligned} \quad (2.35)$$

Eşitlik 2.34 ün her iki tarafı  $C=0$  dan  $C=C'$  ne kadar integre edilirse ( $C'$ ,  $0 < C' < C_0$  aralığında bir yoğunluk değeridir.)

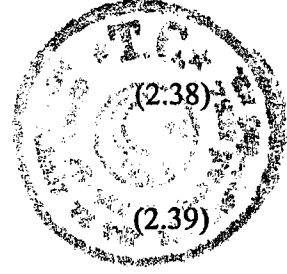
$$-\frac{1}{2} \int_{C=0}^{C=C'} \eta dC = D \frac{dC}{d\eta} \Big|_{C=0}^{C=C'} \quad (2.36)$$

Yoğunluk profiline ait bütün deney verileri sabit difüzyon zaman içinde alınır. Dolayısı ile  $\eta$  in içindeki  $t$  sabit kabul edilip eşitlik 2.36 daki türev ifadesinin dışına çıkartılabilir.

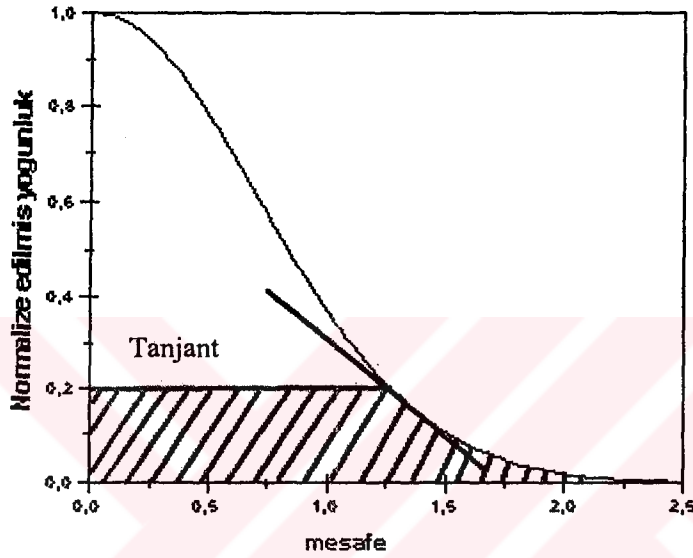
$$-\frac{1}{2} \int_{C=0}^{C=C'} \left( \frac{x}{\sqrt{t}} \right) dC = D \frac{dC}{d\left( \frac{x}{\sqrt{t}} \right)} \Big|_{C=0}^{C=C'} \quad (2.37)$$

$$-\frac{1}{2} \int_{C=0}^{C=C'} x dC = Dt \left( \frac{dC}{dx} \right)_{C=C'}$$

$$D(C) = -\frac{1}{2t} \left( \frac{dx}{dC} \right)_{C'} \int_0^{C'} x dC$$



Eşitlik 2.39, deney sonunda alınan yoğunluk mesafe profili kullanılarak  $D(C)$  nin hesaplanabileceğini gösterir. Bu yöntem Boltzman-Matano analizi olarak bilinir.



Şekil 2.4. Elde edilen yoğunluk profili, difüzyon sabitini hesaplamak için kullanılır.

$D$  yi hesaplamak için gerekli yoğunluk profili şekilde gösterilmektedir.  $\frac{dx}{dC}$  ve

$\int_0^{C'} x dC$ , yoğunluk profili grafiğinden yararlanarak hesaplanabilmektedir.

### 2.3.2. Atomik Yaklaşım

Yüklü-kusur modeline göre, kristalin örgü yapısı üzerine yerleşmiş olan katkı atomları silikon kristali içerisindeki boşluklarla etkileşerek difüzyon olurlar. Bu boşluklar yüksüz oldukları gibi elektiriksel yüke de sahip olabilirler. Genelleme için difüzyon sabiti, katkı atomlarının her yük durumundaki boşluk-tipi kusur ile

etkileşiminin toplamı şeklinde yazılabilir. Düşük katkı yoğunluğu mertebelerinde difüzyon sabiti

$$D = D^0 + D^+ + D^- + D^=$$

şeklinde genelleştirilebilir. Yüksüz boşluk yoğunluğu herhangi bir sıcaklıkta katkı yoğunluğundan bağımsızdır. Yüksek katkı seviyelerinde ise  $D^+$ ,  $D^-$ ,  $D^=$  katkı atomlarının yoğunluğuna bağlıdır. Yüksek difüzyon sıcaklığına ulaşıldığında, hemen hemen bütün katkı atomları iyonize olur. İyonlaşmış katkı atomları, yüklü boşluklarla etkileşerek yeni bir iç elektriksel alanın oluşmasına sebep olur. Bu durum difüzyon denklemlerinde, fermi seviyesindeki değişmeye karşı, bir düzeltme faktörü gerektirir. E elektriksel alanı altında difüzyon akısı

$$J_{AX} = -D_{AX} \frac{\partial C_{AX}}{\partial x} + Z_{AX} \mu_{AX} C_{AX} E \quad (2.41)$$

olarak bilinir. AX katkı atomunun etkileştiği noktasal kusur (X) ile birlikte gösterilmesidir. Z, AX çiftinin yük sayısı,  $\mu_{AX}$  çiftinin iyonik mobilitesidir.  $C_{AX}$ , X noktasal kusuru ile etkileşerek difüzyon olan katkı atomu yoğunluğu, E oluşan iç elektriksel alandır. Fermi seviyesindeki değişimin sebebi olan potansiyel farkı dolayısı ile elektriksel alan aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\Phi = \frac{E_f - E_f^i}{q} \quad (2.42)$$

$$E = -\nabla \Phi = -\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{E_f^i - E_f}{q} \right) \quad (2.43)$$

$E_f$ , iç elektriksel alan neticesinde değişen fermi enerji seviyesini,  $E_f^i$  de düşük katkı seviyesindeki fermi enerji seviyesini temsil eder. Yüklü noktasal kusur yoğunluğu için boltzmann istatistiği kullanılarak aşağıdaki eşitlik yazılabilir [8].

$$\frac{C_{X^-}}{(C_{X^-})^i} = \frac{n}{n_i} = \exp\left(\frac{E_f - E_f^i}{k_B T}\right) \quad (2.44)$$



Eşitlik 2.44 deki  $(E_f - E_f^i)$  nin karşısı bulunup eşitlik 2.43 te yerine yazılır. Daha sonra E çekilip eşitlik 2.41 de yerine yazılır. Mobilite yerinede karşısı yazılarak AX çifti için difüzyon flaksı belirlenir.

$$\mu_{AX} = \frac{q}{k_B T} D_{AX} \quad (2.45)$$

$$J_{AX} = -D_{AX} \frac{\partial C_{AX}}{\partial x} + Z_{AX} C_{AX} D_{AX} \frac{\partial}{\partial x} \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad (2.46)$$

Çalışılan difüzyon sıcaklığında hemen hemen bütün katkı atomları iyonize olurlar ( $C_A \approx C_{A^+}$ ). Yükün korunumu ilkesi ve mass-action kuralı kullanılarak

$$\begin{aligned} n &= p + C_{A^+} \\ n_i^2 &= np \end{aligned} \quad (2.47)$$

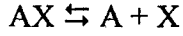
Eşitlik 2.46 yeniden düzenlenirse

$$J_{AX} = -D_{AX} \frac{\partial C_{AX}}{\partial x} + Z_{AX} C_{AX} D_{AX} \frac{1}{2n_i} \left[ \left( \frac{C_{A^+}}{2n_i} \right)^2 + 1 \right]^{-1/2} \frac{\partial C_A}{\partial x} \quad (2.48)$$

Yukarıdaki eşitlik genel bir ifadedir. Çünkü katkı atomları noktasal kusurlarla etkileşerek difüzyon olurlar ve noktasal kusurlar değişik yük durumlarında bulunabilir. Dolayısı ile katkı atomlarının difüzyon akısı için, değişik elektriksel yüke sahip kusurlarla etkileşimide göz önüne alınmalıdır.

$$J_{A^+} = J_{A^+X^0} + J_{A^+X^-} + J_{A^+X^+} \quad (2.49)$$

AX çifti A ve X gibi iki noktasal kusuru temsil eder ve ayrı ayrı her iki kusurun yoğunluğuna bağlıdır.



(2.50)

Yukarıdaki reaksiyon için kimyasal denge sabiti aşağıdaki gibi yazılır.

$$K(T) = \frac{C_A C_X}{C_{AX}} \quad (2.51)$$

$K(T)$  yalnızca sıcaklığa bağlıdır ve sabit difüzyon sıcaklığında difüzyon profilinin her noktasında aynıdır. Düşük katkı yoğunluğu mertebelerinde, noktasal kusurların yoğunluğu bütün difüzyon profili boyunca sabittir. Yüksek katkı yoğunluğu mertebelerinde ise noktasal kusurların yoğunluğu yerel yük taşıyıcıların yoğunluğu (n) ile değişmektedir. Eşitlik 2.51 kullanılarak AX çifti için

$$\frac{\partial C_{AX}}{\partial x} = \frac{C_{AX}}{C_{A^+}} \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} + \frac{C_{AX}}{C_X} \frac{\partial C_X}{\partial x} \quad (2.52)$$

$J_{A^+}$  için katkı atomunun  $X^0$ ,  $X^-$  ve  $X^+$  ile etkileşimleri göz önüne alınarak (n-tipi katkı atomunun bulunduğu yarıiletkende  $X^+$  ve  $X^{++}$  in yoğunluğu  $X^0$  veya  $X^-$  e göre kıyaslanmayacak kadar ufaktır) genel bir ifade türetilecektir.

#### a) $A^+X^0$ için akı

Bu durumda  $A^+X^0$  çiftinin yük durumu  $Z_{A^+X^0} = 1$  dir.  $X^0$  noktasal kusurunun yoğunluğu yalnızca sıcaklığa bağlıdır (profil boyunca sabittir).  $X^0$  in yoğunluğu [9] için

$$\frac{C_X}{C_S} = \Theta_X \exp\left(\frac{S_X^f}{k_B}\right) \exp\left(\frac{-H_X^f}{k_B T}\right) \quad (2.53)$$

$C_s$ , bir kristalin örgü yapısı üzerindeki noktaların sayısı,  $\Theta_X$ , serbestlik derecesi,  $H_X^f$ ,

oluşma entalpisi ve  $S_X^f$ , oluşma entropisidir [9].  $X^0$  için eşitlik 2.52 deki  $\frac{\partial C_{X^0}}{\partial x} = 0$

olur. Eşitlik 2.52  $A^+X^0$  için yeniden yazılırsa

$$\frac{\partial C_{A^+X^0}}{\partial x} = \frac{C_{A^+X^0}}{C_{A^+}} \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} J_{A^+X^0} &= -D_{A^+X^0} \frac{C_{A^+X^0}}{C_{A^+}} \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} \left[ 1 + \frac{C_{A^+}}{2n_i} \left[ \left( \frac{C_{A^+}}{2n_i} \right)^2 + 1 \right]^{-1/2} \right] \\ &= -hD_{A^+X^0}^i \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.55)$$

$i$  simgesi düşük katkı yoğunluğunu temsil etmektedir. Eşitlik 2.55 deki  $h$ , fermi seviyesindeki değişmeden dolayı bir düzeltme faktörüdür. Oluşan iç elektriksel alan difüzyon akısını  $h$  oranında artırmıştır. Katkı yoğunluğu  $n_i$  den çok fazla olduğu zaman

$$\begin{aligned} n &\gg n_i ; h \approx 2 \\ n &\ll n_i ; h \approx 1 \end{aligned} \quad (2.56)$$

## b) $A^+X^-$ için akı

$A^+X^-$  çifti için  $Z_{A^+X^-} = 0$  dır. Dolayısı ile eşitlik 2.48 deki genel akı denklemini aşağıdaki gibi olur.

$$J_{A^+X^-} = -D_{A^+X^-} \frac{\partial C_{A^+X^-}}{\partial x} \quad (2.57)$$

$C_{X^0}$  in yoğunluğunun sadece sıcaklıkla değiştiğini ve  $\frac{\partial C_{X^0}}{\partial x} = 0$  olduğunu biliyoruz.  $C_{X^-}$  için aynı şeyler geçerli değildir.  $C_{X^-}$  in yoğunluğu yerel yük taşıyıcıların yoğunluğu ile eşitlik 2.44 deki gibi değişir. Eşitlik 2.52 kullanılarak

$$\frac{\partial C_{A^+X^-}}{\partial x} = \frac{C_{A^+X^-}}{C_{A^+}} \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} + \frac{C_{A^+X^-}}{C_{X^-}} \frac{\partial C_{X^-}}{\partial x} \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial C_{A^+X^-}}{\partial x} = \frac{C_{A^+X^-}}{C_{A^+}} \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} + (C_{A^+X^-}^i - \frac{n}{n_i}) \frac{\partial}{\partial x} \ln(\frac{n}{n_i}) \quad (2.59)$$

Eşitlik 2.59 eşitlik 2.57 de yerine konulursa  $A^+X^-$  kusuru için akı denklemi,

$$J_{A^+X^-} = -hD_{A^+X^-}^i \left(\frac{n}{n_i}\right) \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} \quad (2.60)$$

### c) $A^+X^=$ için akı

$A^+X^=$  için  $Z_{A^+X^=} = -1$  dir. Eşitlik 2.48 deki difüzyon akısı aşağıdaki gibi yazılır

$$J_{A^+X^=} = -hD_{A^+X^=}^i \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x} \quad (2.61)$$

n-tipi katkılandırılmış yarıiletken için yüksek yoğunluk şartı altında genel difüzyon akısı katkı atomlarının, değişik yük durumlarında bulunan noktasal kusurlarla etkileşimi göz önüne alınarak eşitlik 2.60, 2.61 ve 2.55 birleştirilerek aşağıdaki gibi yazılır.

$$J_A = J_{A^+X^0} + J_{A^+X^-} + J_{A^+X^=} \quad (2.62)$$



$$J_A = -h \left[ D_{A^+X^0}^i + D_{A^+X^-}^i \frac{n}{n_i} + D_{A^+X^=}^i \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \right] \frac{\partial C_{A^+}}{\partial x}$$

Yüksek yoğunluk mertebelerinde yüklü noktasal kusurlardan biri diğerlerine göre çok daha fazla baskındır. Bor için etkin difüzyon sabiti aşağıdaki gibi yazılabilir [10].

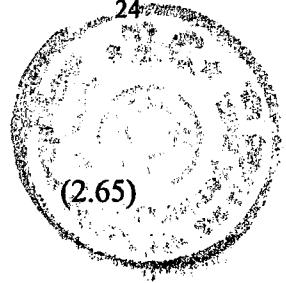
$$D = hD_0 \left( \frac{C}{n_i} \right)^\gamma \quad (2.64)$$

$\gamma$  katkı maddesinin baskın yük durumudur. Bor için  $\gamma=1$  ve fosfor için  $\gamma=2$  dir.  $D_0$  düşük yoğunluk mertebelerindeki difüzyon sabitidir ve yalnızca sıcaklığa bağlıdır.

## 2.4. Doğrusal Olmayan Difüzyon Denkleminin Çözümü

Yüksek yoğunluk mertebelerinde, sabit yüzey yoğunluğu veya sabit katkı yoğunluğu şartı altında ölçülen katkı profilleri, ters hata fonksiyonu ile belirtilen yoğunluk profilinden farklılık gösterir. Bu farklılık difüzyon sabitinin katkı yoğunluğuna bağlı olmasından kaynaklanır. Anderson ve Lisak [10], doğrusal olmayan difüzyon denklemi için yaklaşık bir çözüm elde etmişlerdir. Bu çözüm yöntemi yüzey yoğunluğunun zamanla değişmediği durumlarda geçerlidir ve aslında Boltzman dönüşümünün tipik bir uygulamasıdır.

Sabit yüzey yoğunluğu, silikon yüzeye  $Q_T$  kadar katkı atomu biriktirilmesi ile sağlanabilir. Problemin çözümü için sınır ve başlangıç şartlarını aşağıdaki gibi tayin edebiliriz.



$$Q_T = \int_0^{\infty} C(x, t) dx$$

$$C(x, t) \begin{cases} = 0; x > 0 & \text{ve } t = 0 \\ \neq 0; x < 0 & \text{ve } t = 0 \end{cases}$$

Bölüm 2.3.1. de yoğunluğa bağlı difüzyon sabiti türetilmişti. Bu sonuç eşitlik 2.8 deki genel difüzyon denkleminde yerine konulursa

$$\frac{\partial C}{\partial t} = hD_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{C}{n_i} \right)^\gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (2.66)$$

yukarıdaki eşitlik  $C=C/n_i$  ve  $T=hD_0t$  şeklinde normalize edilirse aşağıdaki formu alır.

$$\frac{\partial C}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial x} \left( C^\gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (2.67)$$

eşitlik 2.67 değişkenlere ayırma metodu ile çözülebilir. Fakat bu metodun uygulanabilir olması için diferansiyel denklemin homojen olması gerekir. Eşitliği homojen yapmak için boltzmann dönüşümü uygulanır.

$$C(x, T) = T^\alpha \Phi(\xi) \quad (2.68)$$

$$\xi = x/T^\beta \quad (2.69)$$

Bu sonuç eşitlik 2.67 de yerine yazılarak

$$\alpha \Phi - \beta \xi \frac{d\Phi}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left( \Phi^\gamma \frac{d\Phi}{d\xi} \right) \quad (2.70)$$

bulunur. Başlangıç ve sınır şartlarının sağlanması için  $\alpha=0$  ve  $\beta=1/2$  olması gerekir.

Eşitlik 2.70 integre edilerek

$$\Phi(\xi) = \Phi_0 \left(1 - \frac{\xi^2}{\xi_0^2}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (2.71)$$

bulunur.  $\xi_0$  karakteristik nüfuz etme (penetrasyon) sabiti olarak bilinir ve integral sabiti  $\Phi_0$  ile aralarındaki ilişki aşağıda verilmiştir.

$$\xi_0^2 = \frac{2(\gamma+2)}{\gamma} \Phi_0^\gamma \quad (2.72)$$

$\Phi_0$  ise eşitlik 2.65 de verilen sınır şartı kullanılarak bulunur.

$$\Phi_0 = \left( \frac{\gamma}{2(\gamma+2)I_\gamma^2} Q_T^2 \right)^{\frac{1}{\gamma+2}} \quad (2.73)$$

$$I_\gamma = \int_0^1 (1-x^2)^{1/\gamma} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(1+1/\gamma)}{\Gamma(3/2+1/\gamma)} \quad (2.74)$$

$\Gamma(x)$  tam eliptik integraldir ve  $I_1=2/3$   $I_2=\pi/4$ . Dolayısı ile eşitlik 2.73 eşitlik 2.72 de yerine yazılırsa

$$\xi_0 = \left( \frac{2(\gamma+2)}{\gamma I_\gamma^\gamma} Q_T^\gamma \right)^{\frac{1}{\gamma+2}} \quad (2.75)$$

sonuç olarak yüksek katkı yoğunluk mertebelerinde yoğunluk profili

$$C(x, T) = C_s(T) \left( 1 - \frac{x^2}{X_F^2(T)} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (2.76)$$

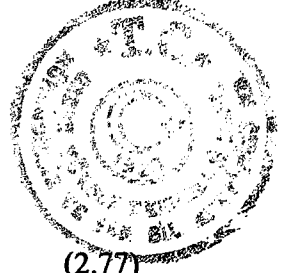
$C_s$  ve  $X_F$  aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$C_s(\bar{T}) = \left( \frac{\gamma}{2(\gamma+2)I_\gamma^2} \frac{Q_T^2}{T} \right)^{\frac{1}{\gamma+2}}$$

$$X_F(T) = \left( \frac{2(\gamma+2)}{\gamma I_\gamma^\gamma} Q_T^\gamma(T) \right)^{\frac{1}{\gamma+2}}$$

(2.77)

(2.78)



### 3. ATOMİK DİFÜZYON MEKANİZMASI

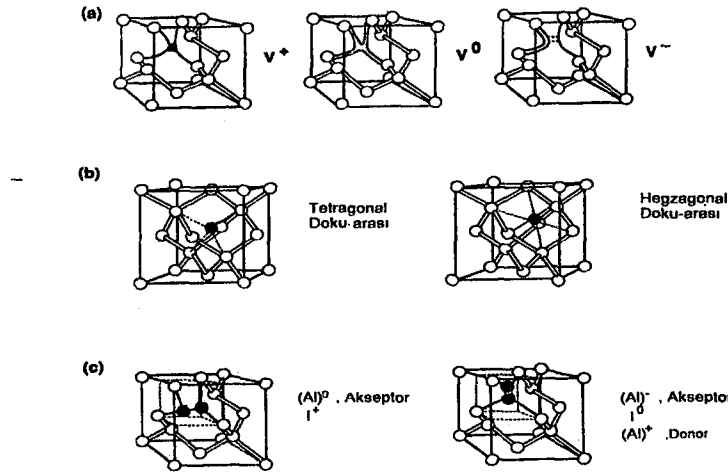
Bir önceki bölümde kristal içerisindeki katkı atomlarının hareket mekanizmaları incelenmeden Fick' in difüzyon denklemleri ve çözümleri analiz edildi. Fakat bir katkı atomu noktasal kusurla etkileşmeden kristal içerisinde ilerleyemez. Dolayısı ile bu bölümde noktasal kusurların difüzyon sürecinde oynadığı önemli rol nedeniyle noktasal kusurların üretilmesi, hareketleri ve katkı atomları ile aralarındaki etkileşim incelenecektir.

#### 3.1. Silikonda Noktasal Kusurlar

Noktasal kusurlar iki kategoride toplanabilir: fitri kusurlar ve katkı içerikli kusurlar. Fitri kusurlar saf kristalin örgü yapısında var olan kusurdur. Katkı içerikli kusurlar ise kristalin örgü yapısı içerisinde yabancı atomların varlığından kaynaklanır. Bu yabancı atomlar periyodik tablonun III-A grup elementlerinden B, Al, Ga, In ve V-A grup elementlerinden P, As, Sb gibi elementlerden seçilen katkı atomlarıdır. Katkı olarak bu elementlerin seçilmesinin en temel nedenlerinden biri çözünürlüklerinin diğer elementlere oranla daha yüksek olmasıdır.

##### 3.1.1. Fitri Kusurlar

Silikon içerisinde ilgilenilen üç tip fitri kusur vardır: Boşluk-tipi noktasal kusurlar, Dokular arası noktasal kusurlar ve Genişletilmiş dokular arası noktasal kusurlar. Boşluk-tipi noktasal kusurlar bilinen en basit kusurdur ve örgü üzerindeki bir silikon atomunun herhangi bir nedenle yerinden ayrılması sonucu geride bıraktığı deşiğe denir, V ile sembolize edilir. Şekil 3.1(a) da değişik yük durumlarında bulunan boşluk tipi noktasal kusurlar görülmektedir. Dokular arası kusur ise herhangi bir şekilde örgü yapısından ayrılmış bir silikon atomunun diğer atomların arasındaki boşluklara yerleşmesi şeklinde tanımlanır. Şekil 3.1(b) de mümkün olan iki boşluk siyah küreler şeklinde görülmektedir. Dokular arası genişletilmiş noktasal kusur ise bir örgü noktası civarındaki boşluklara yerleşmiş iki atomdan oluşmuştur. Bu terim ilk defa 1950 yılında Seitz [11] tarafından kullanılmıştır. Mümkün olan iki durum

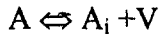
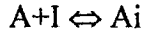
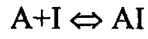
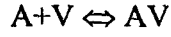
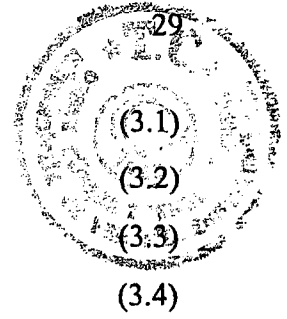


Şekil 3.1. Boşluk-tipi, Doku-arası ve Genişletilmiş doku-arası noktasal kusurların basit gösterimi. (a) Değişik yük durumlarındaki (+, 0, -) boşluklar. Koyu siyah renkle gösterilen bağlar, ESR (Elektron Spin Resonans) de gözlenebilen  $V^+$  ve  $V^-$  un oluşmasına neden olan çiftlenmemiş spinlerin bağlarını temsil etmektedir. (b) koyu renkle gösterilen küreler değişik yerlerdeki doku-arası boşluklara yerleşmiş katkı atomlarını temsil etmektedir. (c) genişletilmiş doku arası noktasal kusuru temsil edilmektedir.

Şekil 3.1(c) de gösterilmiştir. Bu tür noktasal kusuru oluşturan iki atomunda silikon atomu olması durumunda literatürde dokular arası noktasal kusur olarak adlandırılmıştır.

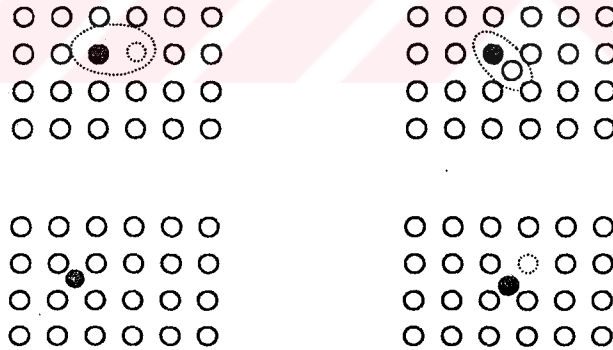
### 3.1.2. Katkı içerikli Noktasal Kusurlar

Yabancı bir atomun kristalin örgü yapısı üzerinde yer kaplaması **yerleşik** kusur olarak adlandırılır. Katkı atomlarının örgü yapısı üzerindeki çözünmeleri ancak katkı atomlarının örgü noktaları üzerine yerleşmesi ile olur. Aksi durumda elektriksel olarak aktif sayılmazlar. Silikon atomları ile çevrelenmiş örgü noktası üzerindeki katkı atomu A ile sembolize edilir. Bu katkı atomunun hemen yanında bir boşluk-tipi noktasal kusur olduğunda bu durum **katkı-boşluk çifti** olarak adlandırılır ve AV ile sembolize edilir. Eğer boşluğun yerinde doku arasına yerleşmiş bir katkı atomu varsa bu durum **katkı-doku çifti** olarak adlandırılır ve AI ile sembolize edilir. Dokular arasına yerleşmiş bir katkı atomuda  $A_i$  ile sembolize edilir. Katkı içerikli noktasal kusurlar AV, AI veya  $A_i$  durumlarında ilerleyebilirler. Bu kusurlar aşağıdaki reaksiyonlar sonucu oluşur.



Birinci reaksiyon katkı difüzyonu için **boşluk mekanizmasını** gösterir. Diğer üç reaksiyon yerleşme ve **dokular arası difüzyon mekanizmasını** tarif eder. İkinci ve üçüncü reaksiyonlar **yerinden kovma reaksiyonları** olarak adlandırılır. Son reaksiyon **dağılma veya Frank-Turnbull mekanizması** olarak bilinir.

Şekil 3.2.(b) de doku arasına yerleşmiş katkı atomu ile örgü üzerindeki bir kristal atomu yerinden kovma mekanizması ile yer değiştirmektedir. Şekil 3.1.c de doku arasına yerleşmiş bir silikon atomu örgü üzerindeki bir katkı atomunun yerine geçerek, katkı atomunun doku arasına yerleşmesine neden olur. Her iki mekanizma içinde dokular arasına yerleşmiş noktasal kusur yoğunluğuna gereksinim vardır. I- tipi noktasal kusurların yoğunluğu çok fazla olduğu zaman hareketli katkı yoğunluğuda artar. Dolayısı ile bu iki mekanizmayı deneysel olarak birbirinden ayırmak oldukça zordur.



Şekil 3.2: Katkı içerikli noktasal kusurların silikon yüzeyin 001 düzleminde temsili gösterimidir. ○ İşareti örgü noktası üzerindeki silikon atomunu temsil etmektedir.

● İşareti örgü noktası üzerindeki katkı atomunu temsil etmektedir. (a):Herhangi bir şekilde oluşmuş AV çifti.(b):Dokular arasına yerleşmiş katkı atomunun silikon atomunun yerine geçmesi.(c):Doku arasına yerleşmiş bir silikon atomunun örgü üzerindeki bir katkı atomuna çarparak onun yerine geçmesi ve katkı atomunun doku arasına yerleşmesi (d):Örgü üzerine yerleşmiş bir katkı atomunun yerinden ayrılması ile bir boşluk oluşması

## 3.2. Silikondaki Noktasal Kusurların Kaynağı



### 3.2.1. Yüzey ve Külçe Etkisi

Termodinamiksel olarak denge durumunda kristal içersinde noktasal kusurlar mevcuttur. Bu noktasal kusurların oluşmasında iki muhtemel yöntem vardır. Bunlardan birincisi, örgü üzerindeki bir silikon atomunun yerini terkederek bir boşluk ve dokular arası noktasal kusur oluşturmaktadır.

$$I+V \Leftrightarrow 0 \quad (3.5)$$

Denge durumunda boşluk sayısı ile doku arası noktasal kusurların sayısı eşit olmayabilir. Çünkü bu kusurlardan herhangi biri yüzeyle birleşebilir. Bu durum sistemin serbest enerjisinin azalmasına sebep olur. Külçe sürecinde, Frenkel süreci olarakta bilinir, aynı anda doku arası ve boşluk-tipi noktasal kusur oluşturmak için aktivasyon enerjisine ihtiyaç vardır.

Noktasal kusur oluşturmak için bir diğer yöntemde yüzeydeki silikon atomlarının külçe içlerine doğru hareket etmesi ile külçe içlerinde dokular arası noktasal kusurların oluşmasıdır. Yine örgü üzerindeki bir silikon atomunun yüzeyle birleşerek külçe içersinde boşluk oluşturulabilir. Silikon atomu ısıtıldığı zaman noktasal kusurlar yüzeyden külçe içlerine doğru ilerlerler. Tam tersi durumlarda olabilir. Fakat külçe içlerine doğru net bir akı vardır.

$$J_x = \sigma_x (C_x - C_x^*) \quad (3.6)$$

\* işareti denge durumunu göstermektedir. Ve  $\sigma_x$  hız boyutundadır.

Yüzey sürecini Chantre, Kechouane ve Bais 1983 teki çalışmalarında [12] detaylı olarak göstermişlerdir. Bu çalışmada silikon dilimi CW laser ile ani ısıtılarak yüzeyde oluşturulan noktasal kusurların külçe içlerine ilerlemesi sağlanmıştır.

Yüzey reaksiyonlarının detayları, Frenkel veya Schottky süreçleri için o kadarda önemli değildir. Külçe içindeki bir atomun yüzeye birleşmesi kusurun oluşma entalpisini etkilemez. Çünkü entalpi istatistiksel olarak, mümkün olan bütün konfigürasyonlar cinsinden ifade edilir. Yüzeydeki atomların sayısı doğrusal boyutun karesi ile külçe içindeki atomların sayısı ise doğrusal boyutun kübü ile değişir. Dolayısı ile oluşma entalpisinin belirlenmesinde yüzeydeki atomistik süreç önemli değildir.

### 3.2.1. Silikon Yüzeydeki Kimyasal Reaksiyonlar

Silikon yüzeydeki kimyasal reaksiyonlar, noktasal kusurların net üretimini ve yok olma oranlarını değiştirebilir. Bu tür reaksiyonların en iyi bilineni silikon yüzeyin oksitlenmesidir. Bu süreç kristal içindeki I-tipi noktasal kusurların yoğunluğunun artmasında etkin rol oynadığı kabul edilmiştir. Silikon yüzeyin oksitlenmesi ile birlikte I-tipi noktasal kusurlardaki artışındaki mekanizma tam olarak bilinmemektedir. 1150 C° nin üzerinde oksitlenme reaksiyonları <111> yönelimli silikon alttabanında boşluk-tipi noktasal kusurların artmasına neden olur [13].

### 3.2.2. Katkı Difüzyonu

Bazı katkılandırma tekniklerinde katkı atomları silikon dilime yüzeyden girerek külçe içlerine doğru ilerler. Difüzyon süreci sonuçlandırıldığında hemen hemen bütün katkı atomları silikon kristalinin örgü yapısı üzerine yerleşir. Katkı atomu silikon kristale girdikten sonra yüzeye yakın bölgelerde dokular arasındaki boşluklara yerleşebilir ve yukarıdaki reaksiyonlardan herhangi biri ile kristal atomunu doku arası boşluğa yerleştirerek örgü üzerinde yer kaplayabilir. Bu durum I-tipi noktasal kusurların yoğunluğunda bir patlamaya neden olur. Katkı atomu yüzeye yakın bölgelerdeki boşluklara yerleşerek boşluk yoğunluğunda azalmayada neden olabilir.



### 3.2.3. Radyasyon Zararları

Denge durumundaki noktasal kusurların yoğunluğu, analitik tekniklerle (Elektron Paramagnetik Resonans, Derin-Seviye Geçiş Spektroskopisi) ölçmek için oldukça ufaktır. Noktasal kusurlar düşük sıcaklıkta, elektron bombardımanı veya yüksek enerjili potonlarla aydınlatılması ile üretilir. Bu işlemler yeterince düşük sıcaklıkta yapılarak noktasal kusurların silikon kristali içinde donması sağlanır ve bazı özellikleri bu şekilde ölçülebilir.

Modern entegre devrelerin fabrikasyonu sürecinde katkılandırma tekniklerinden biri de iyon aşılama yöntemidir. Katkı atomları birkaç yüzbin eV lik enerjiye kadar hızlandırılarak silikon yüzeye doğru gönderilir. Bu şekilde katkı atomları ile çarpışan silikon atomlarının bir kısmı doku arası boşluğa yerleşir.

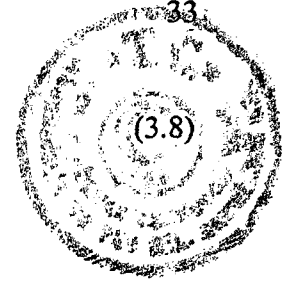
### 3.3. Fıtri Noktasal Kusurların Termodinamağı

İstatiksel termodinamik gereğince termal dengede, 0K hariç her sıcaklık için kristal içerisinde sonlu sayıda noktasal kusur mevcuttur. Bu durum kristal serbest enerjisinin minimum olduğu haldir. Denge durumunda X ile gösterilen bir noktasal kusurun yoğunluğu aşağıdaki formül ile verilir.

$$\frac{C_X}{C_S} = \Theta_X \exp\left[-\frac{H_X^f}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{S_X^f}{k_B}\right] \quad (3.7)$$

$C_S$ , kristal örgüsü üzerindeki yerleşik noktaların sayısı,  $\Theta_X$ , kusurun serbestlik derecesi,  $H_X^f$ , kusurun oluşma entalpisi ve  $S_X^f$  de oluşma entropisidir. Kristalin entropisi noktasal kusurların oluşmaya başlaması ile birlikte artar ve dengeye ulaşıldığında maksimum olur. Bu durum sistemin serbest enerjisinin minimum olduğu haldir. Kristalin termal denge durumunda olduğu kabul edilsin.  $C_S$  kadar yerleşik kristal örgü noktası üzerinde,  $C_X$  kadar kusur oluşturmak için mümkün olan yolların sayısı

$$P = \frac{C_S!}{(C_S - C_X)! C_X!}$$



Kusurun oluşmaya başlaması ile birlikte entropideki değişim

$$S = k_B \ln P = k_B \ln \left[ \frac{C_S!}{(C_S - C_X)! C_X!} \right] \quad (3.9)$$

Bir kusur oluşturmak için gerekli olan enerjiye  $E$  ( $E = H_X^f - TS_X^f$ ) dersek,  $C_X$  kadar kusur oluşturmak için gerekli enerji

$$U = C_X E \quad (3.10)$$

olur.  $U$ , kristalin iç enerjisindeki değişmeye eşittir. Dolayısı ile kristalin serbest enerjisindeki artış

$$F = U - TS \quad (3.11)$$

ile verilir.  $U$  ve  $S$  eşitlik 3.5 te yerine yazılıp, stirling yaklaşımı yapılırsa eşitlik 3.5 aşağıdaki formu alır.

$$F = C_X E - k_B T [C_S \ln(C_S) - (C_S - C_X) \ln(C_S - C_X) - C_X \ln(C_X)] \quad (3.12)$$

Bu kristalin sonlu bir sıcaklıkta termal dengede kalabilmesi için serbest enerjisinin minimum olması gerekir. Bu durumda eşitlik 3.12 nin  $C_X$  e göre türevinin sıfır olması gerekir. Bu sonuç  $C_S$  nin  $C_X$  ten çok büyük olması şartı ile geçerlidir. Serbestlik derecesinin etkisinde katılarak kusur yoğunluğunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\frac{C_X}{C_S} = \Theta_X \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \quad (3.13)$$

Boşluk-tipi noktasal kusurlar düşük sıcaklıkta EPR (Elektron Paramanyetik Resonans) tekniği ile tespit edilmektedir. Dokular arası noktasal kusur ise EPR tekniği ile direk olarak tespit edilemez. Elektron bombardımanı sırasında karşılaşılan yerinden-kovma reaksiyonları ile varlığı anlaşılır.

Kusur çifti oluşturmak için eşik enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

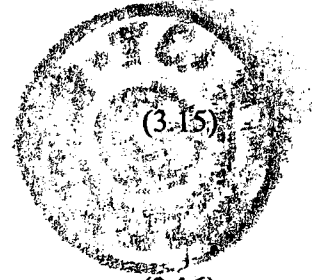
$$E_d = \Delta H_f^I + \Delta H_f^V + E_L \quad (3.14)$$

$E_d$  yer değiştirme enerjisi ve  $E_L$  de örgüdeki bozulmaya karşılık gelen enerjidir (kimyasal bağların eğilmesinide içerir).  $E_L$  silikon için 3.2 eV olarak hesaplanmıştır [14].  $E_d$  ise 12-15 eV arasında ölçülmüştür. I ve V için oluşma entalpileri 0.5 eV belirsizlikle 4-5 eV olarak ölçülmüştür [14].

Yüksek sıcaklıklarda, kristal içinde hangi tipteki noktasal kusur baskın olduğu düşünülebilir. Katkı difüzyonundaki deney verileri, yalnızca I-tipi veya yalnızca V-tipi noktasal kusur ile açıklanamamıştır. Geçerli olan difüzyon modelleri, boşluk-tipi noktasal kusurlar ile dokular-arası noktasal kusurların eşit ağırlıkta difüzyondan sorumlu olduklarını kabul eder. [8]

### 3.3.1. Yüklü Noktasal Kusurlar

Şekil 3.1 de görülebileceği üzere noktasal kusurlar değişik yük durumlarında bulunabilirler. Değişik yük durumlarında bulunan noktasal kusurların yoğunluğunun bilinmesi gerekir. Çünkü yüklü noktasal kusurların birbirleri ile etkileşimi yerel elektriksel alanın oluşmasına neden olur ki bu alan difüzyon sürecinde karşılaşılan fermi seviyesindeki değişmeye neden olur. Katkı atomlarının yoğunluğu  $n_i$  seviyesini aştığı zaman serbest yük taşıyıcılarının yoğunluğu katkı atomlarının yoğunluğu ile belirlenir. Bu yüklü noktasal kusurların yoğunluğunun yasak bölgedeki enerji seviyeleri cinsinden ifadeleri aşağıda verilmiştir [8].



$$\frac{C_{X^-}}{C_{X^0}} = \frac{\Theta_{X^-}}{\Theta_{X^0}} \exp \left[ -\frac{E_{X^-} - E_f}{k_B T} \right] \quad (3.15)$$

$$\frac{C_{X^-}}{C_{X^0}} = \frac{\Theta_{X^-}}{\Theta_{X^0}} \exp \left[ -\frac{E_{X^-} + E_{X^-} - 2E_f}{k_B T} \right] \quad (3.16)$$

$$\frac{C_{X^+}}{C_{X^0}} = \frac{\Theta_{X^+}}{\Theta_{X^0}} \exp \left[ -\frac{E_f - E_{X^+}}{k_B T} \right] \quad (3.17)$$

$$\frac{C_{X^{++}}}{C_{X^0}} = \frac{\Theta_{X^{++}}}{\Theta_{X^0}} \exp \left[ -\frac{2E_f - E_{X^{++}} - E_{X^+}}{k_B T} \right] \quad (3.18)$$

Verilen eşitlikler (eşitlik 3.15-3.18) katkı yoğunluğunun çok fazla olmadığı zamanlarda geçerlidir. Çünkü çok saydaki katkı atomu, silikon içine çok sayıda yük taşıyıcısı süreceğinden fermi seviyesi değişecektir. Eşitlik 3.15-3.18 eşitlik 3.1 ile karşılaştırıldığında, kusurun oluşma enerjisinin kendi yüküne bağlı olduğu görülecektir. Örneğin  $X^-$  in oluşma enerjisi

$$G_{X^-}^f = G_{X^0}^f + E_{X^-} - E_f \quad (3.19)$$

$G_{X^0}^f = H_{X^0}^f - TS_{X^0}^f$ . Eşitlik 3.19 daki  $(E_{X^-} - E_f)$  entalpi ve entropi faktörlerini içermektedir. Noktasal kusurun oluşma enerjisinin yük durumuna bağlı olduğu şekil 3.1 de görülmektedir. Değişik yük durumlarında bulunan noktasal kusurlar kristal içerisinde değişik noktalara yerleşir. Noktasal kusurlar için yazılan bu termodinamiksel tanımların fiziksel manalarını hakkında daha detaylı bilgi için George Watkins'ın [15] makalelerine bakılabilir.



## 4. ÖLÇÜM TEKNİKLERİ

Difüzyon sabiti, difüzyon çalışmalarının en önemli parametrelerinden biridir ve deneysel olarak belirlenebilir. Bu bölümde Difüzyon sabitinin deneysel olarak belirlenmesinde kullanılan bir kaç deneysel teknik detayları ile birlikte analiz edilecektir.

### 4.1. Eklem Mesafesi ve Yüzey Direnci

#### 4.1.1. Eklem mesafesi

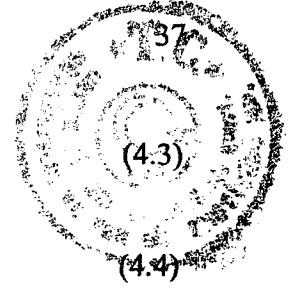
Sonsuz kaynaktan yarı sonsuz ortama doğru difüzyon için katkı atomlarının kristal içerisindeki yoğunluğunu eşitlik 2.17 de verilmişti. Bu çözüm yapılırken başlangıçta kristal içerisinde katkı atomu olmadığı,  $C(x,0)=0$ , varsayılmıştı. Başlangıçta silikon kristali içerisindeki aynı katkı yoğunluğu ihmal edilemeyecek bir değere sahip ise Fick'in difüzyon denkleminin başlangıç şartına uygun olarak çözümü aşağıdaki gibi olur.

$$C(x,t) = C_1 + (C_0 - C_1) \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] = C_1 + (C_0 - C_1) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (4.1)$$

$C_1$  başlangıçta silikon kristalin içerisindeki katkı yoğunluğudur. Silikon kristali içerisinde katkı maddesinden farklı başka bir madde var ise eşitlik 2.17 aşağıdaki gibi düzenlenir.

$$C(x,t) = C_1 + C_0 \operatorname{erfc}\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (4.2)$$

Eğer  $C'$  yoğunlukta p-tipi katkılandırılmış silikon kristalini n-tipi katkılandırmak istediğimizde öyle bir bölgede katkı yoğunluğu, silikon kristalin içerisinde var olan katkı yoğunluğuna eşit olur. Bu bölgeye **eklem bölgesi**, genişliğine de **birleşme mesafesi** denir. Birleşme mesafesinde  $C(x,t)=C'$  sınır şartı gerçekleşir.  $C'$  silikonda difüzyondan önce var olan katkı yoğunluğudur.



$$C_0(1 - \operatorname{erf} \frac{x_j}{2\sqrt{Dt}}) = C'$$

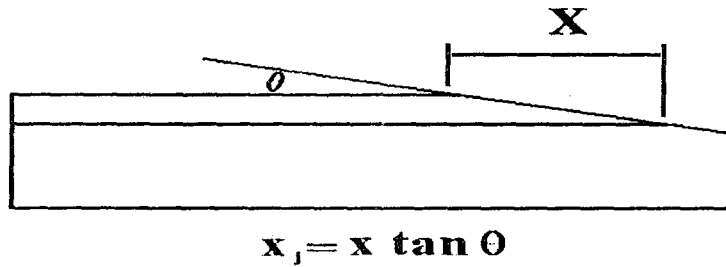
$$x_j = 2\sqrt{Dt} \operatorname{erf}^{-1} \left(1 - \frac{C'}{C_0}\right)$$

$$x_j = A\sqrt{Dt} \quad (4.5)$$

A sabit olup aşağıdaki gibi verilir.

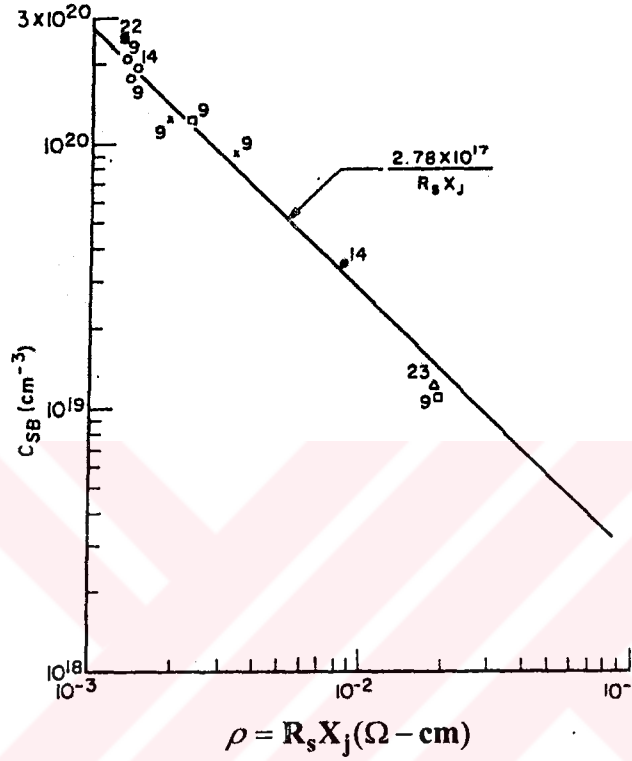
$$A = 2 \left[ \operatorname{erf}^{-1} \left(1 - \frac{C'}{C_0}\right) \right] \quad (4.6)$$

Birleşme mesafesi,  $x_j$ , difüzyon süresinin karekökü ile orantılıdır. Difüzyon süresi uzatılarak birleşme mesafesi artırılabilir. Birleşme mesafesinin ölçümü için hazırlanan silikon diliminden küçük bir parça yeterlidir. Ölçülecek numune şekil 4.1 deki gibi eğimli ( $4^\circ$ - $5^\circ$ ) kesilir. Bu şekilde birleşme mesafesinin ölçüleceği yüzey büyütülmüş olur. Bu yüzey hazırlanan kimyasal bir çözelti ile boyanır. Bu çözelti yüzeydeki n-tipi ve p- tipi katkılandırılmış kısımları birbirinden keskin sınırlarla ayırd eder. Silikon için kullanılan en yaygın solüsyon 1ml HF, 3ml HNO<sub>3</sub> ve 10ml asetik asitten ibaret olan 1-3-10 oranındaki karışımdır [16]. Boyanmış malzeme güçlü bir ışığın altında 1-2 dakika kadar bekletildiğinde p-tipi kısım n-tipi kısımdan daha fazla siyaha boyanır. Tolansky' nin girişim saçakları yardımıyla birleşme mesafesi 0.5 mikrondan 100 mikrona kadar doğru bir şekilde ölçülebilir.



Şekil. 4.1: Eklem bölgesinin ölçülebilmesi için yüzeyin eğimli kesilmesi.

P-tipi yarı iletken içindeki baskın deşik taşıyıcılarından dolayı, silikon yüzey, oksitlenerek yüzeyde  $\text{SiO}_x$  ( $x < 2$ ) tabakası oluşur. Oksitlenmiş tabaka yüzeyin yansıtma özelliklerini değiştirir ve bu yarı oksitlenmiş tabaka yüzeyin siyaha boyanmış ince filim görüntüsü verir. Birleşme mesafesinin yarı, p-tipi katkı malzemesinin yoğunluk seviyesine bağlıdır.



Şekil 4.2. Yüzey yoğunluğunun yüzey öz direnci ile değişimi [17]

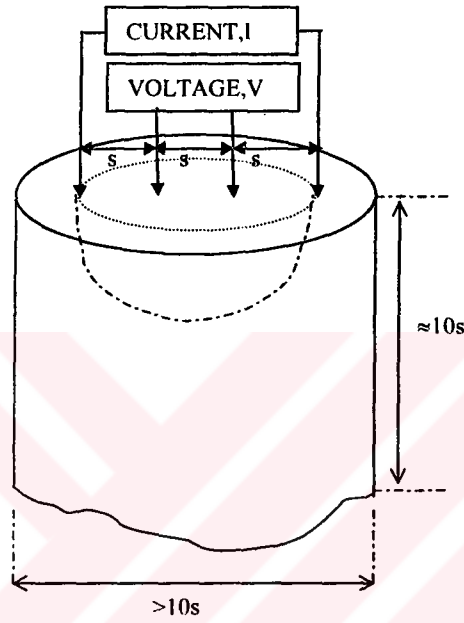
#### 4.1.2. Dört Noktalı Uç Tekniği

Difüzyona maruz kalmış katmanın yüzey direnci Dört nokta uç tekniği ile belirlenir.

Yüzey direnci  $R_s$  ( $\Omega/\square$ ) aşağıdaki gibi verilir.

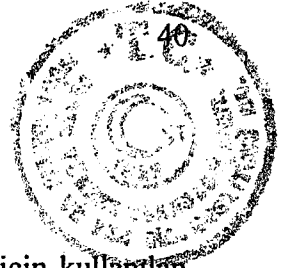
$$R = \frac{V}{I} C.F \quad (4.7)$$

Şekil 4.3 de görüleceği gibi en dıştaki iki uca akım,  $I$  (mA), uygulanır ve içteki iki uçtan gerilim,  $V$  (mV), okunur. C.F yüzey geometrisine bağlı düzeltme faktörüdür [18]. Hassas ölçüm cihazları, iyi ayarlanmış uç basıncı ve doğru ayarlanmış akım seviyesi ile  $\pm\%2$  oranında doğru ölçüm alınabilir [19,20]. Yüzeyin öz direnci yük taşıyıcılarının mobilitelerinden dolayı katkı seviyesine bağlıdır [21].



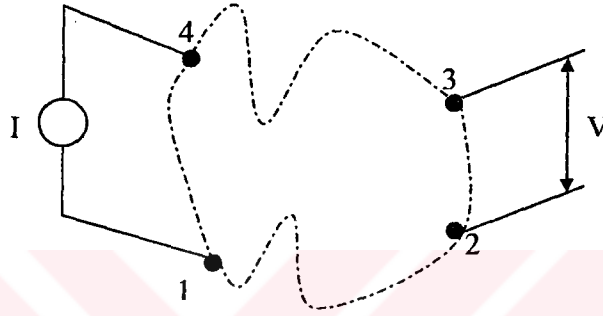
Şekil 4.3. Dört nokta uç tekniği ile bir kristalin yüzey direnci ölçümü

Yüzey katmanının ortalama öz direnci  $R_s x_j$  ile belirlenir. Çapı  $d$  olan dairesel yüzölçüm katmanlar ve dikdörtgen şeklindeki (uçların diziliş sırasına paralel olan kenar  $a$ , dik olan kenar  $d$  olmak üzere) katmanlar için düzeltme faktörleri tablo 4.1. de verilmiştir.  $s$  uçlar arasındaki mesafedir. Eşitlik 4.7 ve tablo 4.1 de verilen düzeltme faktörleri yalnızca tek yüzeyden difüzyona maruz kalmış katmanlar için geçerlidir. Kimyasal kaynaktan (CVD) yapılan difüzyonda örneği her iki yüzeyden difüzyon olacağı için alt kısmın kesilmesi veya farklı düzeltme faktörleri kullanılmalıdır.



#### 4.1.3. Van der Pauw Tekniği

Yukarıda bahsedilen dört nokta uç tekniği basit geometrili yüzeyler için kullanılan bir tekniktir. Düzensiz yüzeye sahip örneklerin yüzey direnci Van der Pauw tekniği ile belirlenir [22]. Örneğin yüzeyinde seçilen dört temas noktası şekilde gösterilmektedir.



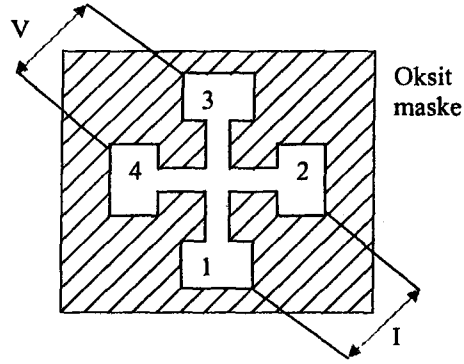
Şekil 4. 4. Van der Pauw tekniği için düzensiz yüzey üzerinde rastgele alınmış dört nokta.

Komşu iki nokta arasına bir akım uygulayarak, diğer iki nokta üzerinden yüksek impedans girişli bir voltmetre ile voltaj ölçülür. Yüksek impedans girişli voltmetre kullanarak, voltaj propları üzerinden bir akım geçmemesi sağlanır. Dolayısı ile kontak direnci bir sorun oluşturmaz. Yüzey öz direnci eşitlik 4.8. deki gibi verilir.

$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \left( \frac{R_{12,34} + R_{23,41}}{2} \right) F_{(Q)} \quad 4.8$$

$$R_{12,34} = \frac{V_{12}}{I_{34}} \text{ ve } R_{23,41} = \frac{V_{23}}{I_{41}} \quad 4.9$$

$F_{(Q)}$  düzeltme faktörü,  $d$  ise ölçülen yüzeyin kalınlığıdır. Silikon dilimin üzerinde difüzyona kalmış yüzeyin değişik konfigürasyonlar alınarakta yüzey öz direnci ölçülebilir. Şekilde görüldüğü üzere silikon dilimi üzerinde, pencereler kalacak şekilde, oksitle kaplanır.



Şekil 4.5. Oksitle kaplanmamış yüzeylerden Kelvin direnci kullanılarak yüzey direnci ölçümü

Oksitle kaplanmamış pencerelerden katkı atomları silikon dilimin içine difüz ederler. Difüzyondan sonra dört temas noktası alınır. Komşu olan ikisinden akım uygulayıp, diğer ikisinden voltaj okunur. Akım ve voltaj propları döndürülerek ortalama yüzey direnci aşağıda verilen eşitlik kullanarak hesap edilir.

$$R = \frac{1}{4} \left( \frac{V_{12}}{I_{34}} + \frac{V_{23}}{I_{41}} + \frac{V_{34}}{I_{12}} + \frac{V_{41}}{I_{23}} \right) \Omega / \square \quad (4.10)$$

Şekildeki yapı simetrik olduğundan düzeltme faktörü 1 alınmıştır. Dolayısı ile yüzey direnci

$$R_s = \frac{\pi}{\ln 2} R = 4.53R \quad (4.11)$$

## 4.2. Profil Ölçümleri

Bir difüzyon modelinin doğruluğu ölçülen difüzyon profilinin doğruluğuna bağlıdır. Dolayısı ile yoğunluk profilinin ölçümü difüzyon çalışmalarının vaz geçilmez bir parçasıdır. Aşağıda en yaygın olarak kullanılan bir kaç difüzyon profil ölçümü ve geçerlilik sınırları tartışılacaktır.

### 4.2.1. Kapasitans-Voltaj (C-V) Profil Tekniđi

Geri beslemeli keskin bir p-n eklemının veya schottky engelinin boşaltım bölgesi kapasitansının, uygulanan voltaj ile deđişiminin analizi, yarı iletken içerisindeki net katkı yoğunluđu ve mesafeyle deđişimi hakkında bilgi verir.

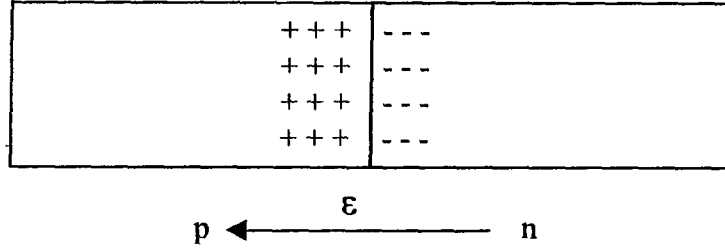


#### 4.2.1.1. Boşaltım Kapasitansı

Net katkı yoğunluđu, bir metal schottky kontađı veya bir p-n eklemının band eğilme bölgesiyle ilgili kapasitansının ölçümünden elde edilir, bu kapasitans boşaltım kapasitansı olarak bilinir. C-V profili için, fazla ve az katkılı iki yarı iletken arasındaki keskin bir p-n eklemi ile Shottky engeli eşdeđerdir. Boşaltım yaklaşımı olarak bilinen birkaç yaklaşımın yapılması şartı ile, boşaltım bölgesi basit bir paralel plaka kapasitör gibi davranır. Basit olması düzgün katkılı malzeme kullanılması ile sağlanır. Bu yaklaşımlar kullanılarak düzgün olmayan keyfi katkılanırılmış bir eklem için boşaltım kapasitansı türetilir ve boşaltım bölgesi civarındaki yerel katkı yoğunluđunun kapasitansın voltaja göre türevi ile deđiştirdini gösterebiliriz. Bu profil tekniđi görüldüđu üzere boşaltım yaklaşımları ile sınırlıdır.

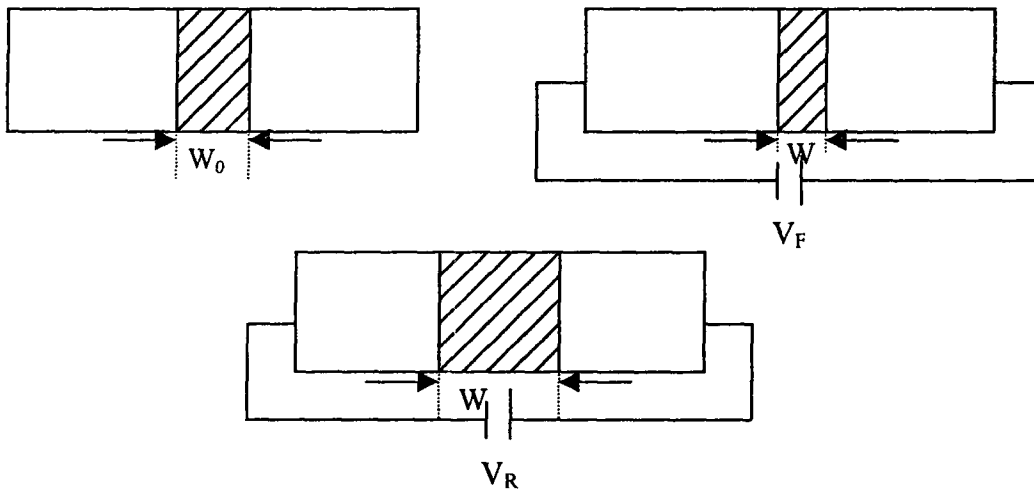
#### 4.2.1.2. Schottky Engelleri ve p-n Eklemleri

Şekil 4.6 da p-n birleşimi sembolize edilmiştir. Deşik yoğunluđu p-tipi yarı iletkeninde n-tipi yarıiletkenine nazaran çok daha fazladır. Dolayısı ile deşikler çok yoğun oldukları p kısımdan daha az yoğun oldukları n kısma doğru difüz ederek oradaki elektronlarla birleşirler. Deşiklerin p kısmı terk etmesi ile birlikte geride negatif yüklü alıcı iyonları kalır. Benzer şekilde n kısımda bulunan elektronlar, geride pozitif yüklü verici iyonları bırakarak çok yoğun oldukları kısımdan daha az yoğun oldukları p kısma difüzyon ederler. Farklı tipteki iki yarı iletkenin birleştikleri yer civarında karşılıklı olarak pozitif ve negatif yüklü iyonlar oluşur. Oluşan bu yeni bölge her iki farklı yarıiletkenindeki yük taşıyıcılarının azalmasına neden olduğundan boşalma bölgesi (depletion region) olarak adlandırılır. Boşalma bölgesinin her iki yanındaki p ve n-tipi kısımların net yükleri sıfırdır.



Şekil 4.6 Düzenli katkılandırılmış yarıiletkenlerin oluşturduğu p-n eklemineki yerel elektiksel alan

Boşalma bölgesinde, pozitif yüklü akseptör ve negatif yüklü donör iyonlarından dolayı net bir elektrik alan oluşur. Oluşan bu yerel elektiksel alan, her iki kısımdaki baskın taşıyıcıların akışına karşı bir bariyer gibi davranırken, baskın olmayan yük taşıyıcıların akışına yardımcı olur. p-kısımda bulunandeşikler bariyer üzerinden n-kısıma difüzyon olmaları, difüzyon akımı oluşturur. n-kısımda boşalma bölgesi civarında bulunandeşikler oluşan elektiksel alanın yardımıyla p-kısıma doğru sürüklenir. Benzer şekilde elektronlar içinde difüzyon ve sürüklenme akımlarından bahsedilebilir. Termal denge sağlandıktan sonra boşalma bölgesi üzerinden net bir akım geçmez. p-n eklemine bir voltaj uygulayarak termal dengede bulunan boşalma bölgesi üzerinden net bir akımın geçmesi sağlanabilir. Şekil 4.7 de p-n eklemineki boşalma bölgesi, yüksüz bölgeler ve yerel elektiksel alan ile aynı yönde ve zıt yönde uygulanan elektiksel alan sembolik olarak gösterilmektedir.

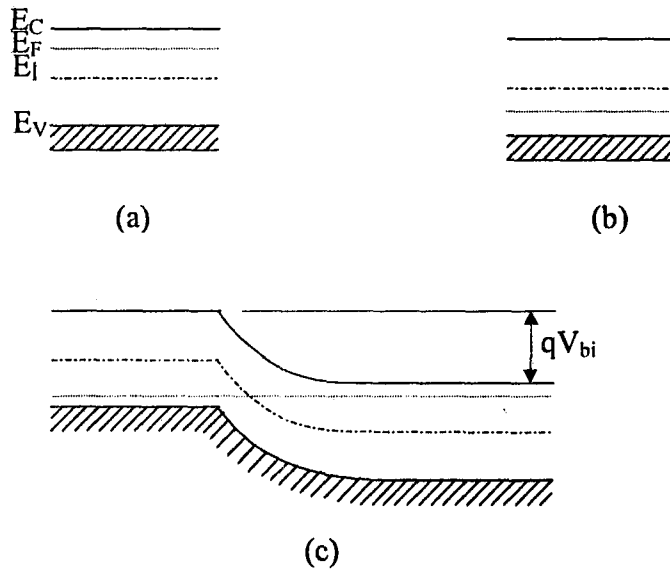


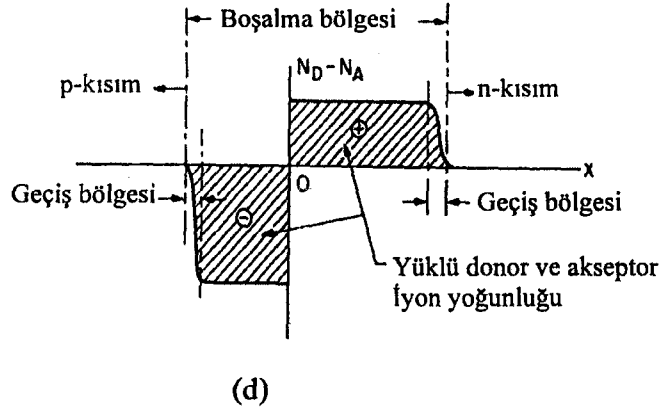
Şekil 4.7 Boşalma bölgesi genişliğinin, değişik besleme voltajları altında değişmesi



p-kısma pozitif bir voltaj uygulanması **ileri besleme** olarak bilinir (şekil 4.7.b). p-kısımdaki pozitif voltaj, deşikleri iterek boşalma bölgesindeki negatif yüklü iyonları nötralize eder. Benzer şekilde n-kısımdaki negatif voltaj elektronları iterek boşalma bölgesi civarındaki pozitif yüklü iyonları nötralize eder. Bunun sonucu olarak boşalma bölgesinin genişliğinde ve yerel elektriksel alandan kaynaklanan potansiyel farkında bir azalma olur. Potansiyel bariyerinin değeri düştüğünden bu bariyer üzerinden çok sayıda elektron ve deşik difüzyon olur. Düşük değerdeki ileri beslemeyle net bir akım elde edilir. p-kısım yarıiletken n-kısma göre negatif voltaj uygulanması **geri besleme** olarak bilinir (şekil 4.2.2.c). p-kısımda ve n-kısımdaki baskın olmayan yük taşıyıcıları boşalma bölgesi civarından yarıiletkenin içlerine doğru çekilerek, boşalma bölgesinin genişlemesi ve potansiyel farkının artması sağlanır. Potansiyel bariyerinin artması ile birlikte baskın yük taşıyıcılarının difüzyon akımında ve baskın olmayan yük taşıyıcıların sürüklenme akımında azalma olur.

Enerji-band diyagramı p-n eklemının detayları hakkında bilgi verir. Enerji diyagramı şekil 4.8 de verilmiştir. Şekil 4.8(a) da valans ve iletkenlik bandı civarında bulunan elektronların n-tipi, p-tipi ve n-p eklemi için ayrı ayrı gösterilmiştir. Deşiklerin p-kısımdan n-kısıma, elektronların n-kısımdan p-kısıma difüz etmeleri boşalma bölgesi civarında potansiyel farkının,  $V_{bi}$ , oluşmasına neden olur (n-tipi yarıiletken p-tipi yarıiletkenine göre pozitif yüklenir). Bu denge durumunda fermi seviyesi eklem boyunca sabit olur. Bu durum  $V_{bi}$  nin değerini belirler.





Şekil 4.8.(a) n-tipi yarı iletken için enerji-band diyagramının basit gösterimi. (b) p-tipi yarı iletken için enerji-band diyagramının basit gösterimi. (c) Bir p-n eklemi için enerji-band diyagramının basit gösterimi. (d) Termal denge durumunda keskin bir p-n ekleminin yük dağılımının basit gösterimi

Oluşan potansiyel farkı eşitlik 4.12 deki gibi verilir.

$$V_{bi} = - \int_{-x_p}^{x_n} \epsilon(x) dx \quad (4.12)$$

eşitlik 4.12 deki  $\epsilon(x)$ , Einstein'ın sürüklenme akımıyla difüzyon akımını birleştiren meşhur denklemini kullanarak tesbit edilebilir.

$$J_p = J_p(\text{sürüklenme}) + J_p(\text{difüzyon}) = 0 \quad (4.13)$$

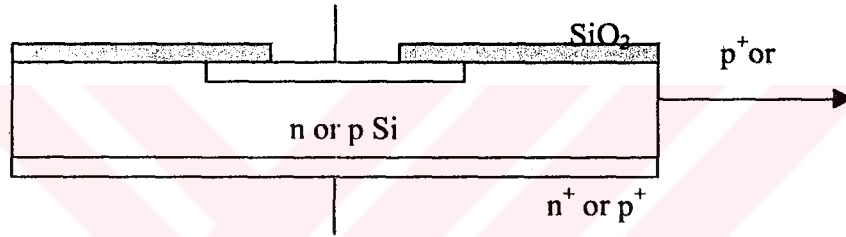
$$= q\mu_p p(x) \epsilon(x) - qD_p \frac{dp}{dx} = 0 \quad (4.14)$$

$$\epsilon(x) = \frac{k_B T}{q} \frac{1}{P(x)} \frac{dP}{dx} \quad (4.15)$$

$k_B$  boltzmann sabiti,  $T$  sıcaklık,  $p$  deşik yoğunluğu,  $\mu_p$  deşik mobilitesi ve  $q$  da deşğin yüküdür.  $P_{p0}=N_A$  ve  $P_{n0}=n_i^2/N_d$  eşitlikleri kullanılarak,

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_d N_a}{n_i^2}\right) \quad (4.16)$$

Boşalma bölgesinde yüklü alıcı ve verici iyonlardan dolayı oluşan dipol katmalar paralel plaka kapasitör gibi davranır. Ölçülebilen bu kapasitans boşalma bölgesi kapasitansı olarak bilinir ve uygulanan voltaj ile deşışimi net katkı yoğunluğunun mesafe ile deşışimi hakkında bilgi verir. Şekil 4.9 için C-V ilişkisi aşağıdaki gibi elde edilir [27].



Şekil 4.9 yüzeyel p+n veya n+p diyot için C-V yapısı

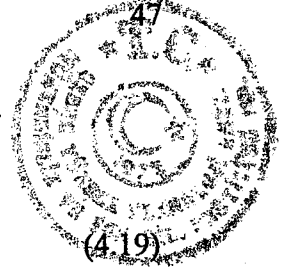
Boşalma bölgesindeki hareketli yük taşıyıcılarının sayısı yüklü katkı iyonlarına oranla yok denecek kadar az olduğundan, yoğunlukları sıfır kabul edilir (Boşalma yaklaşımı). Boşalma bölgesindeki uzay-yük yoğunluğu

$$Q_d = qN_a |x_p| \quad A = qN_p |x_n| \quad A = qN_d x_d A \quad (4.17)$$

olarak verilir.  $N_d$ , boşalma bölgesindeki yüklü katkı iyonlarının yoğunluğu,  $x_d$ , boşalma bölgesinin genişliği,  $A$  boşalma bölgesinin kesit alanıdır. Boşalma bölgesinin nötürlüğünün sağlanabilmesi için p-kısımdaki birim alana düşen yük miktarı ile n-kısımdaki yük miktarı eşit olmalıdır.

$$x_p N_A = x_n N_D \quad \text{ve} \quad x_p + x_n = x_p \quad (4.18)$$

Boşalma bölgesi genişliğini,  $x_d$ , bulmak için eşitlik 4.12. den yararlanılır.



$$V_{bi} = - \int_{-x_p}^{x_n} \epsilon(x) dx = - \int_{-x_p}^0 \epsilon(x) dx - \int_0^{x_n} \epsilon(x) dx$$

$$V_{bi} = \frac{qN_A x_p^2}{2\epsilon_s} + \frac{qN_A x_n^2}{2\epsilon_s} \quad (4.20)$$

$$V_{bi} = \frac{q}{2\epsilon_s} \frac{x_d^2}{\left( \frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)} \quad (4.21)$$

$$x_d = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{q} \left( \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right) V_{bi}} \quad (4.22)$$

genel kapasitans denklemi

$$C = \frac{dQ}{dV} = \epsilon \frac{A}{x_d} \quad (4.23)$$

$$\frac{dC}{dx_d} = -\epsilon A \frac{1}{x_d^2} = -\frac{C^2}{\epsilon A} \quad (4.24)$$

$$\frac{dV}{dx_d} = \frac{dV}{dC} \frac{dC}{dx_d} = \frac{-C^2}{\epsilon A} \frac{dV}{dC} \quad (4.25)$$

Eşitlik 4.17, eşitlik 4.23 de yerine yazılarak

$$C = \frac{d(qN_d A x_d)}{dV} = qN_d A \frac{dx_d}{dV} \quad (4.26)$$

Eşitlik 4.25 te bulunan sonuç ters çevrilerek eşitlik 4.26 da yerine yazılır ve yeniden düzenlenirse, yoğunluk kapasitans eşitliği bulunabilir.

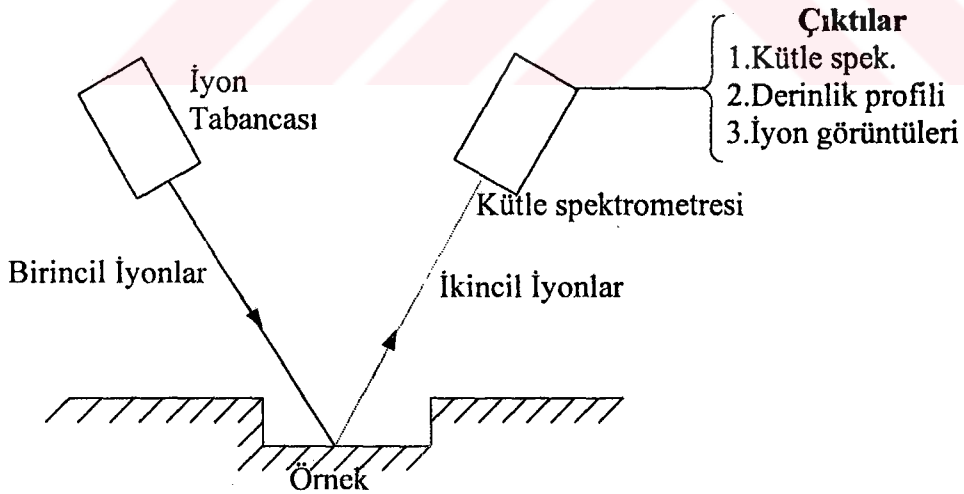
$$C = -qN_d A^2 \frac{\epsilon}{C^2} \frac{dC}{dV} \quad (4.27)$$

$$N_d = \frac{-C^3}{q\epsilon\epsilon^2} \frac{1}{\frac{dC}{dV}} \quad (4.28)$$



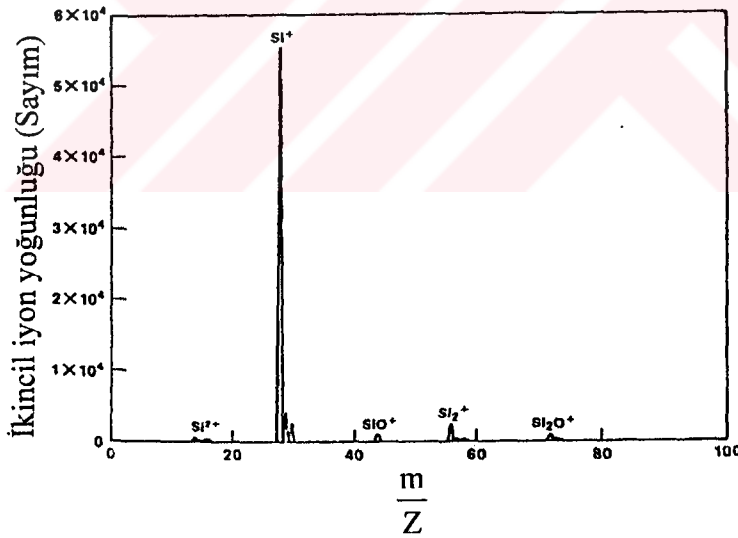
#### 4.2.2. İkincil İyon Kütle Spektrometresi (SIMS)

SIMS (ikincil iyon kütle spektrometre) tekniği, vakum ortamında 1-20 keV mertebesine kadar hızlandırılmış birincil iyonların, hedef malzemenin yüzeyine çarptırılması sonucu, yüzeyden saçılan ikincil iyonları inceleyerek analitik profil analizi yapan yüksek hassasiyete sahip bir tekniktir. SIMS'in tarihsel gelişimi, 1910 da J.J. Thomson'un yaptığı saçılma deneylerine kadar dayanır. Thompson'un deneylerinde enerjetik bir elektron demeti metal yüzeyine çarparak, her yönde yayılan, büyük bir kısmı yüksüz, az bir kısmı pozitif yüklü ikincil bir demetin oluşmasına neden oluyordu. Az bir zaman sonra ilk ticari SIMS GCA firması tarafından 1967 yılında ay toprağının analizi için üretildi. 1970 li yılların sonunda SIMS yarıiletken malzeme için kullanılmaya başladı. İkincil iyonları oluşturan, pozitif veya negatif yüklü hedef yüzeyden saçılmış parçacıklar, kütle spektrometresinde kütle yük ( $m/e$ ) oranına göre ayrılırlar. Bu durum şekil 4.11'de gösterilmektedir. SIMS yönteminde birincil iyon olarak  $O_2^+$ ,  $O^+$ ,  $Cs^+$ ,  $Xe^+$ ,  $Ge^+$  kullanılır. Çok yaygın olarak  $O_2^+$  ve  $Cs^+$  kullanılır.



**Şekil 4.10.** SIMS in çalışma prensibi gösterilmiştir. Yüzey üzerinde açılan oyukun boyutları  $5 \times 5 \mu m^2$  ile  $500 \times 500 \mu m^2$  arasında değişmektedir. Modern cihazlarda şekilde gösterile çıktıların üçü birden alınabilmektedir.

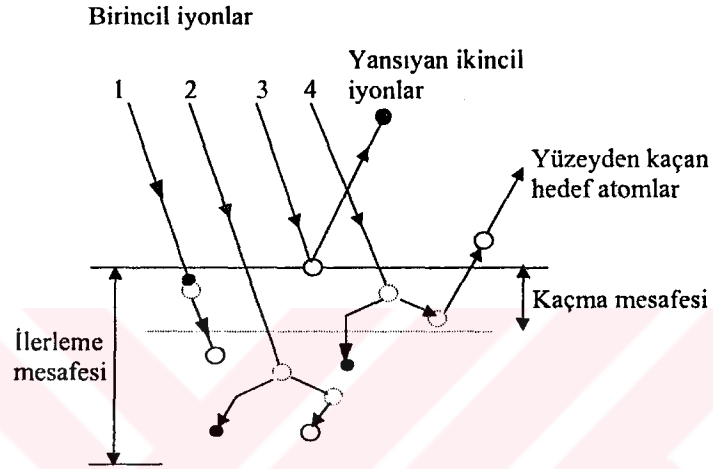
Kütle spektrumunda hedef malzeme içerisinde bulunan izotop atomları, birincil iyonlar ve malzeme içerisinde bulunan katkı atomları ayırılır. Şekil 4.11 de  $O_2^+$  birincil iyon demeti ile bombardıman edilen silikonun kütle spektrumu görülmektedir. SIMS deneylerinde birincil iyonların büyük bir kısmı, hedef malzemenin yüzeyine yakın bölgelere kadar ilerleyebilir. Bu iyonlar enerjilerini başlangıçta durgun durumda bulunan hedef atomlarla, çarpışma zinciri neticesinde paylaşırlar. Bu ardaşık çarpışmalar hedef atomlarının bağlarını kopararak diğer hedef atomlarla çarpışmalarını sağlar. Bu çarpışmalar izotropiktir ve enerjilerini kaybedene kadar devam eder. Bütün bu ardaşık çarpışmalara neden olan birincil iyonlar, hedef malzemenin kristal yapısı içerisine yerleşir. (iyon aşılması) Bu ardaşık çarpışmaların hayat süresi  $10^{-12}$  s. ve etkili olduğu alan 10 nm kadardır. Bu ardaşık çarpışmalar yüzeyle kesiştiğinde, atomlar veya atom grupları yüzeye bağlanma enerjilerini aşarak yüzeyden saçılabilirler. Saçılan bu atomların enerjileri yaklaşık 10 eV civarındadır. Şekil 4.12 te birincil iyonlarla hedef atomlarının etkileşimi, temsil edilmektedir.



Şekil 4.11.  $O_2^+$  ile bombardıman edilen Si' un doğrusal y eksenli kütle spektrumu

Şekil 4.12 de birincil iyonlar ile hedef atomların etkileşmesi şematik olarak gösterilmektedir. ● ile gösterilenler birincil iyonları, ○ çarpışmaya maruz kalan hedef atomlarını ve ○ ile gösterilen de çarpışmadan sonraki hedef atomlarını

temsil etmektedir. Şekil 4.12 de gösterilen 1. Süreçte, birincil iyon hedef atomuyla çarpışarak kristal içinde kalmıştır. 2. Süreçte, birincil iyon, hedef atomla çarpışarak enerjisinin çok büyük bir kısmını kaybeder .Enerji kazanan hedef atom başka bir hedef atomuyla çarpışır ve ardışık çarpışmalar oluşur. 3. süreçte, birincil atom yüzeyden yansımaktadır. 4. süreçte birincil atom, yüzeye yakın bölgelerde ard arda çarpışmalardan sonra kendisi kristal içinde kalırken, hedef atomun yüzeyden kaçmasına sebep olur.



Şekil 4.12. SIMS sırasında hedef atomlar ile malzeme atomları arasındaki etkileşim

## 5.BOR'UN SİLİKONDA DİFÜZYONU



### 5.1.Giriş

Katılar içerisindeki difüzyonun matematiksel bir tabana oturtulmasından sonra [3] yarı iletken içerisindeki difüzyon çalışmaları baş döndürücü bir hızla ilerledi. Bor' un silikon kristali içerisindeki difüzyonu, silikon tabanlı yarıiletken cihazlarda, p-tipi bölgeler elde etmek için evrensel bir teknik olup bu çalışmalara Fuller ve Ditzenberger [24,25] öncülük etmişlerdir.

Difüzyon çalışmalarının ilk zamanlarında elde edilen deney verileri kullanılan deney tekniğine göre büyük farklılıklar göstermekle birlikte aynı tekniği kullanan araştırmacılar bile farklı sonuçlar elde etmiştir. Bunun en büyük nedeni bor'un silikon içerisindeki difüzyon mekanizmasının tam olarak anlaşılamamasıdır.

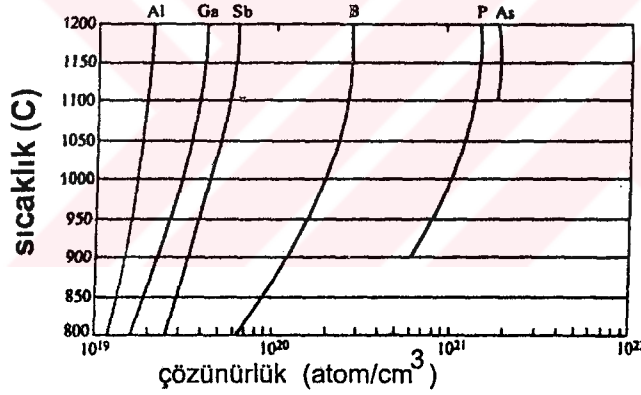
Bu difüzyon araştırmaları sırasında, bazı anormal difüzyon etkileri gözlenmiştir. Bu etkiler başlıca, difüzyon başkatsayısının katkı yoğunluğuna olan bağımlılığı, n-tipi katkı varlığından kaynaklanan etkiler (arka alan etkisi), oksitleme ortamında difüzyonun hızlanması veya yavaşlaması, bu hızlanmanın veya yavaşlamanın yönelime olan bağımlılığı ve aşırı noktasal kusur yoğunluğu olarak ana başlıklar altında toplanabilir. Bu bölümde bor'un difüzyonu tarihsel süreç içindeki gelişimiyle birlikte açıklanmaya çalışılmıştır. Ancak bu konu teknolojik öneminden dolayı 1950 lili yıllardan beri çok yoğun olarak çalışılmış ve bu konu ile dolaylı yada dolaysız ilişkili binlerce makale yayınlanmıştır.

Fuller ve Ditzenberger [25] bor'un silikon içindeki difüzyonunu, kapalı tüp içinde  $950^{\circ}\text{C}$  -  $1275^{\circ}\text{C}$  sıcaklık aralığında, difüzyon kaynağı olarak  $\text{B}_2\text{O}_3$  kullanarak çalışmışlardır. Difüzyondan sonra oluşan p-n eklem mesafesi Bölüm 4.1.1. de tarif edilen metotla ölçülmüştür. Eğimli kesilen yüzey kimyasal bir solüsyonla boyanarak n-tipi ve p-tipi bölgelerin yüksek ışık altında keskin bir sınırla birbirinden ayrılması sağlanmıştır. Fuller ve Ditzenberger yoğunluk profili elde etmek için, silikon yüzeyi mekaniksel olarak incelterek her  $2\mu$  da bir yüzeyin iletkenliğini dört-nokta uç tekniği

ile ölçüp bu verileri yoğunluk profiline dönüştürmüşlerdir. Difüzyon başkatsayısı ve yüzey yoğunluğu bu deneysel grafikten hesaplanmıştır. Yüzey iletkenliği ölçerek yoğunluk profili elde etme işlemi her sıcaklık için tekrarlanarak, difüzyon başkatsayısının sıcaklığa olan bağımlılığı,

$$D = 10.5 \exp\left(\frac{-85000}{RT}\right) \quad (5.1)$$

olarak bulunmuştur. R gaz sabiti, T sıcaklıktır. Bu araştırmacıların bulduğu bor'un difüzyon aktivasyon enerjisi, Dunlap ve arkadaşlarının [26] bulduğu 81000 kal. lik enerjiye yakın bir değerdir. Fuller ve Ditzenberger yüzey yoğunluğunu  $6 \times 10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup> olarak ölçmüşler ve deneysel şartları değiştirerek bor'un silikon içindeki çözünülebilirlik sınırının ilk ip uçlarını vermeye başlamışlardır. Boronun silikon içindeki çözünülebilirlik sınırının  $10^{21}$ - $10^{22}$  atom/cm<sup>3</sup> sınırlarında olduğunu söylemişler ve bu değer Vick ve Whittle [27] tarafından çalışılmış ve sonuç gerek bor için gerekse diğer katkı elementleri için grafik 5.1 de gösterilmektedir.



Şekil 5. 1. Silikonda değişik katkı maddelerinin çözünürlük sınırları [27,28]

Kurtz ve Yee [29], Fuller ve Ditzenberger'e göre daha düşük katkı yoğunluğunda ve açık tüp içerisinde, 1050C°-1350C° sıcaklık aralığında, difüzyon kaynağı olarak B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> kullanarak bor'un silikon içerisindeki difüzyonunu çalışmışlar. Bunlar yüzeyin katman öz direncini ölçerek, Backenstoss tarafından hazırlanan  $C_s - \frac{1}{\rho_s x_0}$  fonksiyonel ilişkisinin gösterildiği grafik [30] yardımıyla yüzey yoğunluğunu  $5 \times 10^{18}$  atom/cm<sup>3</sup> olarak hesaplamışlardır. Düşük katkı yoğunluğundan dolayı ( $C_B \ll n_i$ ), difüzyon

denkleminin çözümü eşitlik 2.17 ile izah edilmiştir. Kurtz ve Yee [29], difüzyon başkatsayısının sıcaklığa olan bağımlılığını gösteren Arrhenius-tipi denklemi aşağıdaki gibi bulmuştur.

$$D = 5 \exp\left(\frac{-81000}{RT}\right) \quad (5.2)$$

Bulunan aktivasyon enerjisi diğer araştırmacıların [25,26] bulduğu değerden farklı olmamak üzere difüzyon sabiti,  $D_0$ , Fuller ve Ditzenberger'in bulduğu sonucun hemen hemen yarısı kadardır. Bunun sebebi olarak, Kurtz ve Yee, Fuller ve Ditzenberger'in kullandığı bor katkı yoğunluğunun, özük (intrinsic) yük taşıyıcılarının yoğunluğundan fazla olması sebebiyle aşırı yük taşıyıcısı oluşmasına bağlamıştır. Difüzyon sıcaklığında deşikler, iyonlaşmış bor atomlarından daha hızlı difüzyon olurlar. Bu durum yerel bir elektriksel alanın oluşmasına neden olur ki, bu alan bor'un difüzyonunu hızlandıran bir etkidir. Yerel elektriksel alan içerisinde deşiklerin ve iyonlaşmış bor atomlarının difüzyon akıları aşağıdaki gibidir.

$$J_p = -qD_p \left(\frac{\partial P}{\partial x}\right) + q\mu_p PE \quad (5.3)$$

$$J_B = -qD_B \left(\frac{\partial C_B}{\partial x}\right) - q\mu_B C_B E \quad (5.4)$$

$q$  elektronik yük,  $D_p$  ve  $D_B$  sırasıyla deşiklerin ve bor atomlarının difüzyon başkatsayıları,  $\mu_p$  ve  $\mu_B$  sırasıyla deşiklerin ve bor atomlarının iyonik mobiliteleri,  $P$  deşik yoğunluğu,  $E$  yerel elektriksel alan. Bu iki akım eşitlenerek  $E$  için çözüldüğünde

$$E = \frac{kT}{qC_B} \frac{\partial C_B}{\partial x} \quad (5.5)$$

bulunur. Bu sonuç yukarıdaki eşitlik 5.4 te yerine yazılıp çözülürse difüzyonun iki kat hızlandığı görülür.

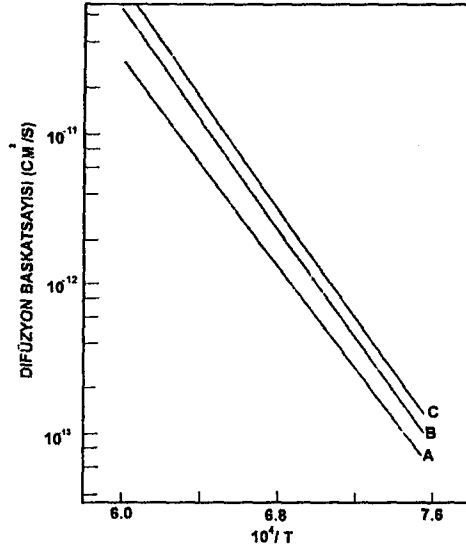
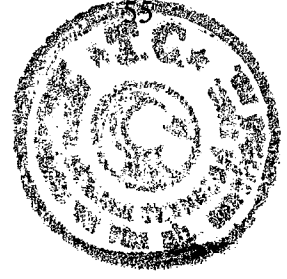
Yüksek yüzey yoğunluğunun yanısıra külçe yoğunluğu (arka alan yoğunluğu) difüzyon sonuçlarını etkileyenler listesindedir. Millea [31] fosforun, antimon'un ve indiyum'un düşük katkı yoğunluğu şartı altında, yüksek seviyede katılandırılmış n-tipi ve p-tipi silikonda difüzyonu çalıştı ve külçe yoğunluğunun difüzyona etkilediğini buldu. Williams [32] bor'un silikon içerisinde  $1050\text{C}^0$ - $1350\text{C}^0$  sıcaklık aralığında, külçe yoğunluğunu  $10^{13}$  atom/cm<sup>3</sup> den  $10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup> e kadar değiştirerek külçe katkı yoğunluğunun bor'un difüzyonu üzerine etkilerini incelemiştir. Williams'ın deneyi, sabit yüzey yoğunluğu şartı altında yapıldığından difüzyon denkleminin çözümü eşitlik 2.17 ile izah edilmiş ve sıcaklığa olan bağımlılık diğer araştırmacılarda olduğu gibi aşağıdaki Arrhenius denklemi ile izah edilmiştir.

$$D = 16 \exp\left(\frac{-85000}{RT}\right) \quad (5.6)$$

Williams [32] silikon içerisindeki safsızlık yoğunluğunu dört-nokta uç tekniği kullanarak ve yüzey yoğunluğunu Backenstoss'un eğrisi [30] kullanarak yaklaşık  $2 \times 10^{21}$  atom/cm<sup>3</sup> olarak hesaplamıştır. Bu değer Fuller ve Ditzenberger'in bulunduğu değerden biraz düşüktür. Bunun nedeni Williams'ın o ana kadar difüzyon kaynağı olarak kullanılan metodlardan farklı olarak B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> u silikon yüzeyde biriktirerek kullanmasından kaynaklanır. Williams silikon içerisindeki külçe yoğunluğunu değiştirerek bunun difüzyon başkatsayısı ve eklem mesafesi üzerindeki etkisini gözlemledi. Bulduğu sonuçlar tablo 5.1 de gösterilmektedir. Williams'ın değerlerinde difüzyon başkatsayısı külçe yoğunluğu ile doğrusal olarak artmaktadır. Bu sonuç Williams'ın bulunduğu difüzyon sabitinin, neden Fuller ve Ditzenberger'in bulunduğu değerden fazla olduğunu açıklar. Çünkü Fuller ve Ditzenberger in kullandığı silikon 10 Ωcm, Williams'ın kullandığı silikon 0.1 Ωcm dir [32]. Eşitlik 5.4, eşitlik 5.3 te yerine yazılıp çözülürse [8] aşağıdaki genel ifade türetilir

$$J = -Dh \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.7)$$

h elektriksel alandan dolayı difüzyondaki hızlanma faktörü olarak bilinir. Kurtz ve Yee, kendi buldukları difüzyon başkatsayısının Fuller ve Ditzenberger'in bulunduğu



Şekil 5. 2. Difüzyon başkatsayısının sıcaklığa olan bağımlılığı. (A) Kurtz ve Yee [29], (B) Fuller ve Ditzenger [25], (C) Williams [32].

sonuçtan düşük çıkmasının nedenini, oluşan elektriksel alandan dolayı difüzyondaki hızlanmaya bağlamıştır.  $h$ 'ın maximum değeri yaklaşık olarak 2 dir. Bu sonuç Williams'ın bulduğu sonucu açıklamaya yetmez. Williams bu sonucu kendi değimi ile *şüpheli verici* bulmuş ve Kurtz ve Yee'nin bulduğu düşük difüzyon başkatsayısının nedeni olarak kullanılan silikondaki düşük katkı yoğunluğuna bağlamıştır [32].

Yüksek katkılama oranı difüzyon sonuçlarını beklenen değerden farklı çıkarır. Yapılan çalışmalarda bunun nedenini araştırmaktır. Millea [31], boşluk-tipi noktasal kusurun bir alıcı gibi davranması halinde, yerel yoğunluğunun iyonlaşmış alıcı ve verici atomların yoğunluğu ile değiştirilebilir olduğunu göstermiştir. Bu etki örgü üzerindeki katkı atomlarının difüzyon oranında bir artışa veya azalmaya neden olabilir. Shaw ve Welles'in [33] yaptığı çalışmalarda saf silikon içindeki difüzyon için, alandan dolayı çoğalma faktörü en fazla 2 olmaktadır. Çok yoğun olarak katkılanmış (tamamen dejenere olmuş) silikonda çoğalma faktörü 2 den fazladır. Thai [34] ye göre çoğalma faktöründe en fazla rolü dislokasyonların hareketi neticesinde yerel boşluk yoğunluğunun artışı oynamaktadır. Dislokasyonlar ise katkı oranının artması ile oluşturulabilir [35].

Tablo 5.1 Değişik Külçe Yoğunluklarında Difüzyon Başkatsayısı [32]

| Özdirenç | Ekleme Derinliği | Külçe Katkı                    | Difüzyon Başkatsayısı  |
|----------|------------------|--------------------------------|------------------------|
| Ohm-cm   | Mikron           | Yoğunluğu atom/cm <sup>3</sup> | cm <sup>2</sup> /s     |
| 391      | 46               | 2x10 <sup>13</sup>             | 5.6x10 <sup>-12</sup>  |
| 79       | 45               | 7x10 <sup>13</sup>             | 5.8x10 <sup>-12</sup>  |
| 7.7      | 44.5             | 6x10 <sup>14</sup>             | 6.6x10 <sup>-12</sup>  |
| 0.6      | 42.5             | 2x10 <sup>16</sup>             | 8.0x10 <sup>-12</sup>  |
| 0.12     | 40               | 1x10 <sup>17</sup>             | 8.5x10 <sup>-12</sup>  |
| 0.024    | 36               | 2x10 <sup>18</sup>             | 10.0x10 <sup>-12</sup> |
| 0.001    | 24               | 8x10 <sup>19</sup>             | 11.8x10 <sup>-12</sup> |

Thai difüzyon başkatsayısındaki hem alandan hemde plastik deformasyondan dolayı değişmeyi aşağıdaki gibi formüle etmiştir [34].

$$\frac{D^*}{D} = F_p F_f \quad (5.8)$$

$D^*$  yoğunluğa bağlı difüzyon başkatsayısı,  $D$   $D^*$  nin külçe katkı yoğunluğunun sıfıra yaklaştığı zamanki değeri,  $F_p$  plastik deformasyondan dolayı hızlanma faktörü,  $F_f$  alandan dolayı hızlanma faktörüdür.  $F_p$  ve  $F_f$  nin değeri için

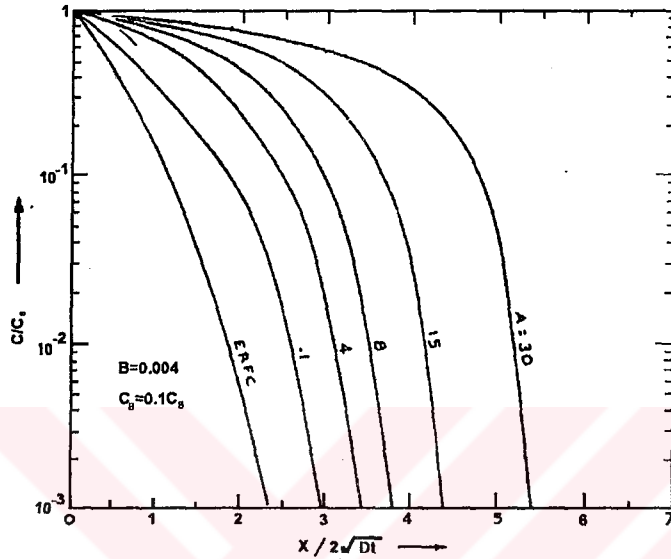
$$F_p = \left(\frac{C}{C_0}\right)^2 + 1 \quad (5.9)$$

$$F_f = 1 + C(C^2 + 4n_i^2)^{-1/2} \quad (5.10)$$

bulmuştur.  $C_0$  silikon içerisindeki safsızlığın tipine bağlı karakteristik yoğunluktur [34]. Eşitlik 5.10 dejenere olmamış silikon için geçerlidir. Eğer silikondaki iyonlaşmış bor atomlarının yoğunluğu valans banttaki durum yoğunluğundan fazla olduğu zaman (tam dejenere durum) alandan dolayı çoğalma faktörünü Shockley aşağıdaki gibi göstermiştir [36].

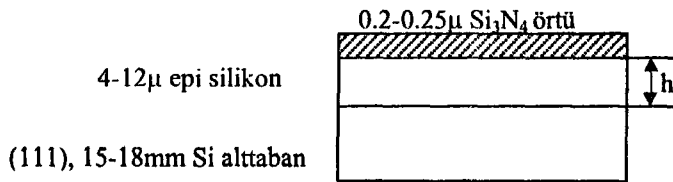
$$F_f \approx \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \left(\frac{C_d}{N_c}\right)^{2/3} + 1 \quad (5.11)$$

$C_d$  verici yoğunluğu,  $N_c$  iletkenlik bandındaki durum yoğunluğudur. Eşitlik 5.8 difüzyon başkatsayısının yoğunluğa bağlı olduğu genel difüzyon denkleminde yerine konularak çözülebilir. Thai, Philip'in [6] sayısal analiz yöntemini kullanarak bu denklemi çözdü. Sonuç grafik 5.3 te değişik  $C_0$  lar için gösterilmektedir.



Şekil 5. 3.  $\frac{D^*(C)}{D} = [Ac^2 + 1] \left[ 1 + \frac{c}{[(c - c_b)^2 + B]^{1/2}} \right]$ ,  $A = (C_s/C_0)^2$ ,  $B = (2n_i/C_s)^2$ ,  $c = C/C_s$  ve  $c_b = C_B/C_s$  için genel difüzyon denkleminin çözümü [34]

Gostagore [37], oksit kaynağı olarak  $B_2O_3$  kullanan diğer araştırmacılardan [25,26,29,32] farklı olarak, yüzey etkilerini en aza indirmek için değişik difüzyon tekniği kullanmıştır. n-tipi katkılı silikon alttaban üzerine epitaksiyal bor katkılı bir tabaka büyütüp, bu tabakayı difüzyon kaynağı olarak kullanmıştır. Şekil 5.4 te kullanılan difüzyon çifti gösterilmektedir.

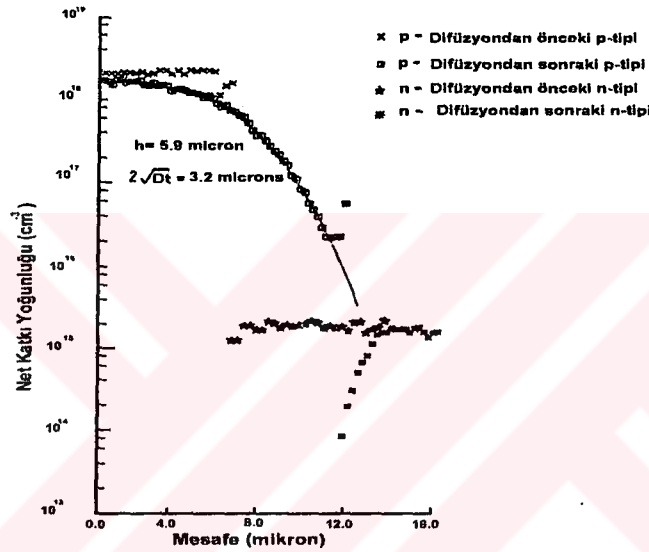


Şekil 5.4. Gastagore'nin kullandığı difüzyon çiftinin şematik gösterimi

Yansıtma sınırlı sonlu bir katmandan difüzyon için uygun sınır şartları altında difüzyon denkleminin çözümü aşağıdaki gibidir.

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{h-x}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{h+x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (5.12)$$

$C_0$ ,  $h$  kalınlığındaki epitaksiyal tabakadaki toplam katkı yoğunluğudur. Bu denklem bilinen Gaussian dağılım fonksiyonundan  $t < h^2/D$  ve  $x > Dt/h$  olduğu zaman farklılık gösterir.



Şekil 5. 5. Yayılmış öz direnç verilerinden elde edilmiş n-tipi katkı silikonda bor'un yoğunluk profili.  $T=1342\text{ C}^{\circ}$ ,  $t=10^4\text{ s}$  [37]

Gostagore [37], yüzey yoğunluğunu  $3 \times 10^{16}$  ile  $3 \times 10^{19}$  atom/cm<sup>3</sup> ve külçe katkı yoğunluğunu  $6 \times 10^{13}$  ile  $8 \times 10^{18}$  atom/cm<sup>3</sup> arasında değiştirerek bu yoğunlukların difüzyon başkatsayısına olan etkilerini gözlemiştir. Difüzyon başkatsayısının sıcaklığa olan bağımlılığını  $1130\text{ C}^{\circ}$ - $1405\text{ C}^{\circ}$  sıcaklık aralığında

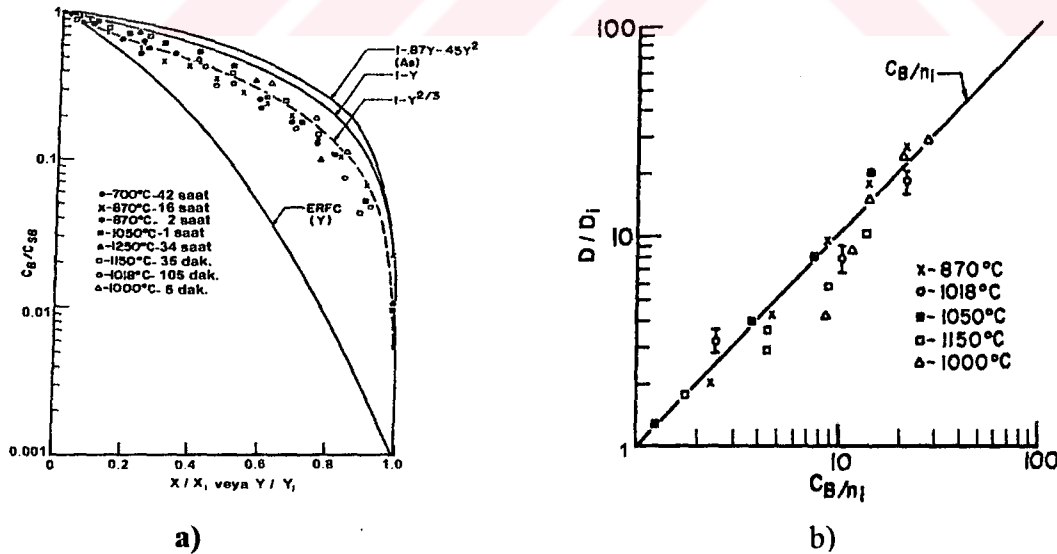
$$D_B = 2.1 \times 10^{-13} \exp \left[ \frac{(-2.85 \text{ eV})}{kT} \right] \text{ cm}^2/\text{s} \quad (5.13)$$

olarak bulunmuş. Gostagore' un [37] bulduğu değerlerde anormal difüzyon etkileri gözlenmemiştir. Çünkü kullanılan boron yoğunluğu düşük mertebelindedir ( $C_B < n_i$ ) ve uygulanan difüzyon tekniği ile yüzey etkilerinden (oksitlenme) kaçınılmıştır. Boşluk mekanizması için difüzyon sabitinin teorik değerini Swalin [38],

$$D_0 = 1/8 f a^2 V e^{\Delta S/k} \text{ cm}^2/\text{s} \quad (5.14)$$

şeklinde hesaplamıştır. V debye frekansı, f düzeltme faktörü, a örgü sabiti,  $\Delta S$  boşluğun oluşma entropisi ve k boltzmann sabitidir. Swalin [38] ve Hu [39]  $D_0$ 'ın yaklaşık değerini  $\approx 9 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$  bulmuşlardır. Gostagore'un [37] bulduğu sonuç bu teorik sonuçtan çok farklı olmamakla birlikte, bor-boşluk kompleksinin oluşma entalpisi üzerine herhangi bir yorum yapamamıştır.

Fair [17] silikondaki bor'un anormal difüzyon mekanizmasını açıklayabilmek için yüksek bor yoğunluğunda ( $>10^{19} \text{ atom/cm}^3$ ) difüzyon çalışmıştır. Difüzyon başkatsayısının yoğunluğa olan bağımlılığı, Tsai'nin diferansiyel iletkenlik metodu kullanılarak elde ettiği difüzyon profilleri üzerine, Bölüm 2.3.1 de tarif edilen Boltzmann-Matano analizi yapılarak incelenmiştir [17].



Şekil 5. 6.a) Yüzey yoğunluğu ve eklem mesafesine göre normalize edilmiş yoğunluk profili. Bütün veriler  $C_s > 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  ve  $C_B \approx 0.01 C_s$ , b) Normalize edilmiş difüzyon başkatsayısı ile Boron yoğunluğunun değişimi. [17]

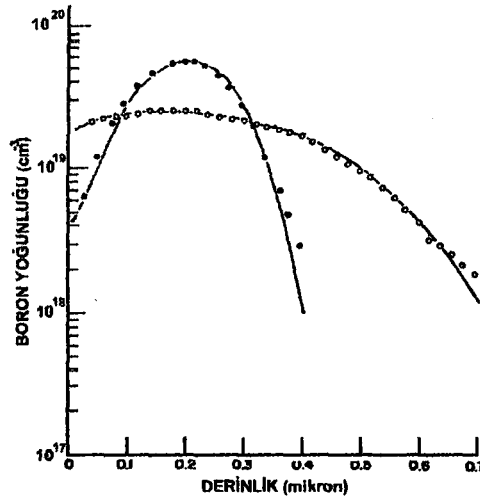
Fair difüzyon profilini evrensel bir eğriye benzeterek, bu eğrinin fonksiyonel formunu bulmuş ve bu form kullanılarak denklem çözülmüştür [17]. Grafik 5.6 da görüleceği üzere bu evrensel eğri deneysel verilerle son derece uyum içindedir. Fair bu difüzyon sonuçlarından yararlanarak bor iyonlarının pozitif yüklü boşluk-tipi noktasal kusurla etkileşerek difüzyon olduğunu öne sürdü. Bu mekanizmaya yüklü kusur modeli denir. Watkins [40], Crowder [41] ve Elstern'in [42] çalışmalarında soğutulmuş p-tipi silikonda, verici-tip komplekse uygun  $E_v+0.37$  eV lik bir enerji seviyesinin varolduğu gösterilmiştir. Bu kompleksin iyonlaşma spektrumundan [] yola çıkarak Van Vechten bu kompleksin verici-tipi boşluk olduğunu gösterdi [43]. Doğal boşluğun iyonlaşma reaksiyonu, aşağıdaki gibidir.



$V_{Si}^0$ , silikon kristali içerisinde örgü üzerine yerleşmiş bir silikon atomunun yerinden ayrılması sonucu yerinde bıraktığı boşluktur. Her silikon atomu en yakın dört komşusu ile kovalent bağ yaparak valans bandını doldurur. Boşluğun olduğu durumda, bu dört komşu Si atomunun bir kabuğu boştur. Eğer boşluk bir elektron yakalarsa bu elektron dört komşu atomdan birinin boş kabuğunu doldurarak onun negatif olmasını sağlar Bu  $V_{Si}^+$  ile gösterilir. Yukarıda verilen boşluğun iyonlaşma reaksiyonu için denge sabiti ve mass-action kuralı kullanılarak

$$\frac{[V^+]}{[V_i^+]} = \frac{p}{n_i} \quad (5.16)$$

bulunur.  $[V^+]$  verici-tipi boşluk yoğunluğu,  $[V_i^+]$  saf silikonda verici-tipi boşluk yoğunluğu,  $p$  deşik yoğunluğu,  $n_i$  özük silikondaki yük taşıyıcılarının yoğunluğudur. Saf silikonda difüzyon başkatsayısı ile  $[V^+]$  arasında, yüklü kusur modeline göre, doğrusal bir ilişki beklemek gayet mantıklı olur [17]. n-tipi silikonda, boşlukların baskın yük durumu negatif yüklü alıcı-tipteki boşluklar olduğundan aşırı As katkılı silikonda B'nin difüzyonu yavaşlamıştır. Bu çalışmada oksit ortam kullanılmamıştır. Oksit ortamın difüzyonu hızlandırdığı ve bu hızlanmanın yoneliime bağlı olduğuna dair deneysel veriler Hu'nun [44] çalışmalarında mevcuttur.



Şekil 5.7. Aşırı As Katkılı Silikonda Boronun Yoğunluk Profili [45]

## 5.2. Bor'un SiO<sub>2</sub> den difüzyonu

Yarı iletken cihazların fabrikasyonu sürecinin ilk zamanlarında SiO<sub>2</sub> yabancı atomların Si içine girmemesi için koruyucu bir maske gibi kullanılmaktaydı. Şu anki teknolojiye SiO<sub>2</sub> nin yalıtkanlık özelliğinden, özellikle MOSFET cihazlarda yararlanılmaktadır. VLSI (Çok geniş ölçekli tümdevre) cihazlarda, ince katman halindeki SiO<sub>2</sub> den Si içerisine difüzyon, özel katkı yoğunluğu profili üretmeyi oldukça kolaylaştırır. Bu teknik daha çok aynı tipte, farklı yoğunlukta katkılanmış bölgeler elde etmek için kullanılır. W. Von Muench ve C. Gesert yüzey yoğunluğunu  $5 \times 10^{15}$  den  $2 \times 10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup> ye kadar bu teknikle kontrol edebilmiştir [46].

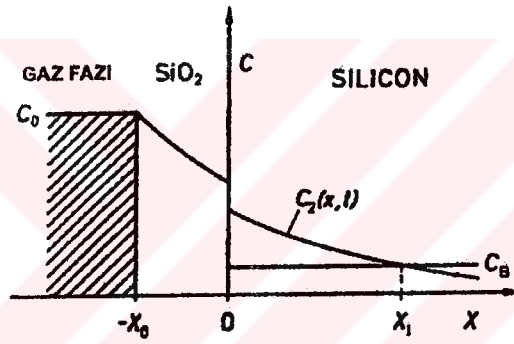
Bir boyutlu difüzyon teorisinde, katkı atomlarının gaz fazından (yarı sonsuz ve yüksek difüzyon kabiliyetine sahip kaynak) ince bir katmandan geçtikten sonra yarı iletken içine difüzyon olmaları ilk olarak S. Horiuchi ve J. Yamaguchi [47] tarafından geliştirilmiştir. Şekil 8'e uygun olarak gerek SiO<sub>2</sub> gerekse Si içindeki katkı yoğunluğu aşağıdaki gibi alınmıştır [48].

$$C_1(x, t) = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \frac{(2n+1)x_0 + x}{2\sqrt{D_1 t}} \right] - \alpha \operatorname{erfc} \left[ \frac{(2n+1)x_0 - x}{2\sqrt{D_1 t}} \right] \right\} \quad (5.17)$$

$$C_2 = m(1-\alpha)C_o \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n \operatorname{erfc} \left[ \frac{(2n+1)x_o + rx}{2\sqrt{D_1 t}} \right] \quad (5.18)$$

$$r = \left( \frac{D_1}{D_2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ve} \quad \alpha = \frac{m-r}{m+r} \quad (5.19)$$

$m$  dağılım başkatsayısı,  $D_1$  bor'un  $\text{SiO}_2$  içerisindeki difüzyon başkatsayısı,  $D_2$  bor'un Si içerisindeki difüzyon başkatsayısı ve  $t$  toplam difüzyon süresi,  $x_o$  oksit kalınlığıdır.  $C_1$  bor atomlarının  $\text{SiO}_2$  içerisindeki dağılım fonksiyonu,  $C_2$  bor atomlarının Si içerisindeki dağılım fonksiyonudur.

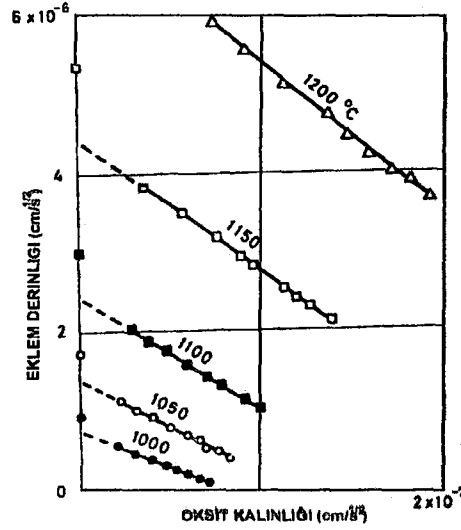


Şekil 5.8. Buhar Formundaki Borunun  $\text{SiO}_2$  Geçerek Si İçine Difüzyonu

Hemen hemen tam maskeleme şartı,  $\frac{x_o}{\sqrt{D_1 t}} > \frac{x_j}{\sqrt{D_2 t}}$  ve  $\frac{x_o}{2\sqrt{D_1 t}} > 0.7$  [46] için, serinin

ilk terimleri alınabilir. Bu sonuç bize oksit kalınlığı ile eklem mesafesi arasındaki aşağıdaki eşitliği verir.

$$x_j = -\frac{1}{r}x_o + 2\sqrt{D_2 t} \operatorname{erfc} \left( \frac{C_B}{m(1-\alpha)C_o} \right) \quad (5.20)$$



Şekil 5.9. Boronun, SiO<sub>2</sub> Den Si İçine Difüzyonundan Alınmış ve Normalize Olmuş Eklem Derinliği İle Normalize Olmuş Oksit Kalınlığını Gösteren Grafik. (C<sub>külçe</sub>=5x10<sup>14</sup>), [46]

Şekil 5.9 yardımıyla, bor'un SiO<sub>2</sub> içerisindeki difüzyon başkatsayısı ve difüzyon aktivasyon enerjisi hesaplanabilir. Muench ve Gessert, Fair'in [46] bulduğu D<sub>Si</sub> değerini kullanarak boronun SiO<sub>2</sub> deki difüzyon başkatsayısının sıcaklığa olan bağımlılığını aşağıdaki gibi bulmuştur.

$$D_{\text{SiO}_2} = 3.4 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{-2.6 \text{ eV}}{kT}\right) \text{ cm}^2/\text{s} \quad (5.21)$$

### 5.3. Silikonda Bor Difüzyonunun Kristaliyografik Yönelime Olan Bağımlılığı

1970 li yıllara kadar bir çok yarı iletken cihaz (111) yönelimli silikondan üretilmekteydi. O zaman kadar kübik örgünün izotropik doğasından (simetrik yapısından) dolayı farklı yönelimin difüzyon oranı üzerindeki etkisi ihmal ediliyordu. Silikondaki anisotropik difüzyonu ilk farkedenden Shepard ve arkadaşları olmuştur [49]. Geleneksel iki aşamalı difüzyon metodunun, ikinci aşamasında Si

içerisine depolanan bor atomlarının oksit ortamda difüzyonu sırasında, (100) yönelimli silikondaki eklem derinliğinin (110) ve (111) yönelimli silikona oranla çok daha fazla olduğu görüldü. Alean ve Annan [50], bu farkı aşağıdaki gibi ölçmüştür.

$$D_{111}^{\text{oksijen}} = D_{100}^{\text{argon}} = D_{111}^{\text{argon}} = 2.4 \times 10^{-13} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} < D_{111}^{\text{oksijen}} = 4.6 \times 10^{-13} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

Alean ve Annand'ın yaptığı deneylerin sonuçları tablo 5.2 de gösterilmektedir.

Tablo 5. 2. Difüzyonun Ortama, Depolama Süresine Ve Yönetime Olan

Bağımlılığı [50]

| Yönelim | Depolama süresi (dak.) | $\rho_{s1}$ ( $\Omega/\square$ ) | Ortam   | $\rho_{s2}$ ( $\Omega/\square$ ) | $X_{i2}$ ( $\mu\text{m}$ ) | $X_{i2}-X_{i1}$ ( $\mu\text{m}$ ) | $X_o$ ( $\mu\text{m}$ ) | D ( $\text{cm}^2/\text{s}$ ) |
|---------|------------------------|----------------------------------|---------|----------------------------------|----------------------------|-----------------------------------|-------------------------|------------------------------|
| 111     | 10                     | 101                              | Oksijen | 268                              | 1.36                       | 1.05                              | 0.4253                  | $2.62 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 10                     | 114                              | Oksijen | 235                              | 2.08                       | 1.67                              | 0.3945                  | $5.14 \times 10^{-13}$       |
| 111     | 10                     | 96.4                             | Argon   | 98.7                             | 1.27                       | -                                 | -                       | $1.46 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 10                     | 154                              | Argon   | 142                              | 1.30                       | -                                 | -                       | $1.39 \times 10^{-13}$       |
| 111     | 40                     | 25.5                             | Oksijen | 78.6                             | 1.79                       | 1.14                              | 0.4350                  | $2.64 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 40                     | 25.0                             | Oksijen | 68.7                             | 2.46                       | 1.93                              | 0.4113                  | $4.70 \times 10^{-13}$       |
| 111     | 40                     | 25.4                             | Argon   | 26.7                             | 1.81                       | -                                 | -                       | $2.37 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 40                     | 25.8                             | Argon   | 29.8                             | 1.81                       | -                                 | -                       | $2.14 \times 10^{-13}$       |
| 111     | 160                    | 15.8                             | Oksijen | 38.4                             | 2.13                       | 1.07                              | -                       | $2.09 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 160                    | 15.2                             | Oksijen | 38.2                             | 2.82                       | 1.61                              | -                       | $4.12 \times 10^{-13}$       |
| 111     | 160                    | 16.1                             | Argon   | 16.0                             | 2.19                       | -                                 | -                       | $3.28 \times 10^{-13}$       |
| 100     | 160                    | 15.6                             | Argon   | 15.4                             | 2.13                       | -                                 | -                       | $2.73 \times 10^{-13}$       |

Oksit ortamda (111) ve (100) yönelimli silikon yüzeylerde oksidasyon oranı farklı olmaktadır. Bu durumu bazı araştırmacılar oksidasyon kinetiği ile ilişkilendirmişlerdir. Kovalev [51], Katz [52] ve Allean [53] değişik yönelimli silikon yüzeydeki örgü yoğunluğunu tablo 5.3 deki gibi hesaplamışlardır.

Tablo 5. 3. Silikonun 111, 110 ve 100 Yüzeylerinin Karakteristiği [53]

| Yüzey         | Q (birim alandaki atom sayısı) | d (komşu yüzeye olan uzaklık) |
|---------------|--------------------------------|-------------------------------|
| (100)         | $2/a^2$                        | $a/4$                         |
| (110)         | $2\sqrt{2}/a^2$                | $a/2\sqrt{2}$                 |
| (111)         | $4/a^2\sqrt{3}$                | $a\sqrt{3}/4, a/4\sqrt{3}$    |
| Gamzeli (111) | $8/a^2\sqrt{3}$                | $a/\sqrt{3}$                  |

$a$ =örgü sabiti (silikon için  $a=5.43\text{\AA}$ )

Silikonda  $Q/d=8/a^3$  ( $5 \times 10^{22}$  atom/cm<sup>3</sup>). Çünkü örgü başına 8 Si atomu düşmektedir. Tablo 5.3 ten yararlanarak (111), (110) ve (100) yüzeyler için örgü yoğunluğu oranı sırasıyla 1/1.414/2.308 olmaktadır. Bu orana uygun örgü yoğunluğu sırasıyla  $6.782 \times 10^{14}$ ,  $9.590 \times 10^{14}$  ve  $7.834 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> olmaktadır. Bean ve Gleim [54] yüzeydeki bağ yoğunluğunun difüzyon için örgü yoğunluğundan daha önemli olduğunu ileri sürdü. Her üç yüzeydeki atom başına düşen boş bağ oranı 2,1,1 olduğundan yola çıkarak birim alandaki bağ yoğunluğunu  $13.56 \times 10^{14}$ ,  $9.590 \times 10^{14}$ ,  $7.834 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> olarak hesaplamışlardır. Öyleyse, yüzeydeki bir silikon atomu 3 bağı bulunan boron atomuyla yer değiştirirse;

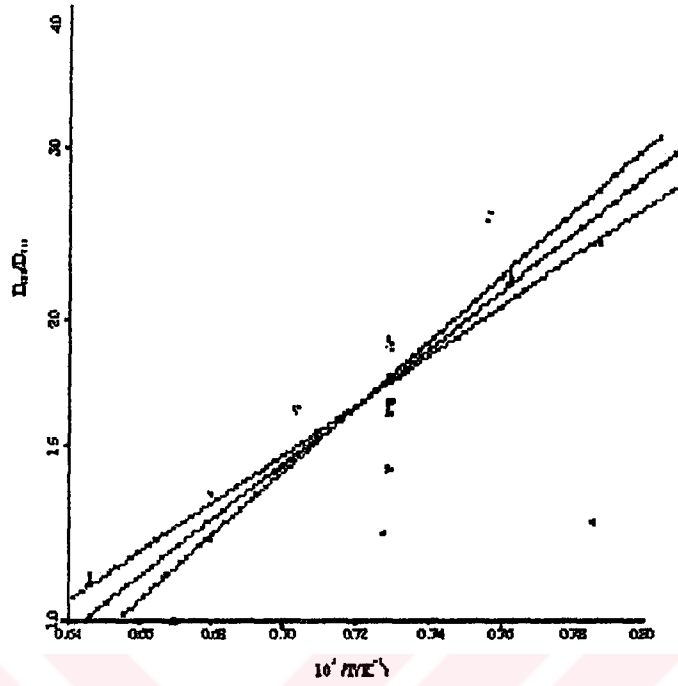
- a) 111 yüzey için bu boron atomunun 3 bağı kendisini bir alt yüzeye bağlar.
- b) 110 yüzey için boron atomunun 1 bağı kendini bir alt yüzeye bağlarken diğer iki bağı, kendini aynı yüzeydeki atomlara bağlar.
- c) 100 yüzey için boron atomunu 3 bağından 2 si bu atomu bir alt yüzeye bağlarken 1 bağ yüzeyde boş kalır.

Bu açıklamaya göre 100 yüzey diğer yüzeylere göre boşta kalan bağından dolayı, ortamın cinsine daha hassastır.

Silikondaki difüzyonun yönelime bağlılığı, bu bağımlılığın sıcaklıkla nasıl değiştiği, çalışıldıktan sonra anlaşıldı [53].

$$\frac{D_{100}}{D_{111}} = \frac{[x_{j2}^2 - x_{j1}^2]_{100}}{[x_{j2}^2 - x_{j1}^2]_{111}} = \left[ \frac{D_o^{100}}{D_o^{111}} \right] \exp \left[ \frac{Q_{111} - Q_{100}}{kT} \right] \quad (5.22)$$

Bu eşitliğin deneysel verileri (Şekil 5.10) da gösterilmektedir. Allen [53], aktivasyon enerjileri için  $Q_{111}-Q_{100}=0.58$  eV bulmuştur. Bu sonuç yukarıda oksidasyon kinetiğindeki farklılığı açıklayan modeli çok iyi destekler. Silikon kristalinde tek bir boşluk oluşturmak için gerekli enerji 2.13 eV [55]. Bu enerji bir silikon atomunun dört bağı kırarak için gerekli olan enerji demektir. O halde bağ başına 0.53 eV lik bir enerji düşer. Dolayısı ile  $Q_{111}-Q_{100}$  yaklaşık olarak bir bağı kırmak için gerekli olan enrijidir.



Şekil 5. 10. Oksidasyon Süresince, Yönetime Bağlılığın Sıcaklıkla Değişimi

[53]

Bazı araştırmacılarca [51,52,55] yukarıda açıklanan model yüzeyde biriken oksit oranını açıklar. Yarı iletken içerisindeki katkı difüzyonu boşluk yoğunluğu ile orantılıdır. Silikon oksitlendiği zaman  $\text{SiO}_2$ -Si ara yüzeyde çok sayıda dokular-arası noktasal kusur oluşur. Oluşan bu kusurların derinlerde, deşiklerle birleştiğinden dolayı yoğunlukları azalır. Yüzeye yakın bölgelerde difüzyonun hızlanmasının nedeninin, oksitlenme nedeniyle silikon içerisine aşırı yoğunlukta dokular arası noktasal kusur sürülmesi olduğu açıktır. Bu nedenle bor, fosfor gibi katkı maddeleri genişletilmiş difüzyon mekanizması ile difüzyon olduğuna inanılmıştır. Oksitleme ortamında difüzyon başkatsayısı,

$$D = D_i + \Delta D \quad (5.23)$$

ve

$$\Delta D = \alpha \left( \frac{dt_{\text{oksit}}}{dt} \right)^n \quad (5.24)$$

## SONUÇ



Bu tez çalışmasında difüzyon ve bor'un difüzyon mekanizmaları hakkında literatür çalışması yapılmıştır.

1960 lı yılların sonuna kadar, kapalı kuartz tüp içinde, gaz fazdan 111 yönelimli silikon kristali içerisine difüzyon çalışılmıştır. Difüzyon başkatsayısının sıcaklıkla olan değişimi ve p-n eklem tekniği kullanılarak elde edilen yoğunluk profili difüzyon çalışmalarının karakteristiği olmuştur. Difüzyon başkatsayısı meşhur Arrhenius denklemi ile izah edilmiştir. Bor için [37]

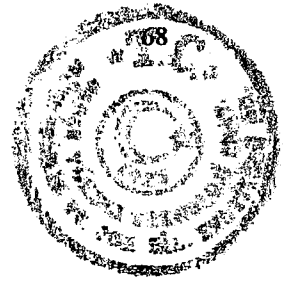
$$D_B = 2.1 \times 10^{-13} \exp\left[\frac{(-2.85 \text{ eV})}{kT}\right] \text{ cm}^2/\text{s} \quad (6.1)$$

bulunmuştur. Genelde aktivasyon enerjisi için bütün araştırmacılar hemen hemen aynı sonucu bulmuşlardır. Farklılıklar, o yıllarda difüzyon mekanizmalarının tam olarak anlaşılamadığından dolayı difüzyon sabiti üzerine yoğunlaşmıştır. 1971 yılında Gostagore, klasik difüzyon tekniği yerine Si üzerine biriktirdiği oksit kaynaktan difüzyonu gerçekleştirmiş ve kontrolü kolay p-tipi bölgeler elde etmiştir.

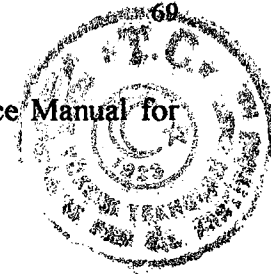
O yıllarda, ESR de boşluk tipi noktasal kusurun gözlenmesi ve bant aralığındaki enerji seviyesinin belirlenmesinden sonra, geliştirilen difüzyon modelleri kusur-katkı etkileşimine dayandırılmıştır.

1980 li yıllarda difüzyonun, difüzyonun gerçekleştiği ortama ve silikon kristalin yönelimine olan bağımlılığı keşfedildi. Difüzyon, oksit ortamda ve 100 yönelimli silikon kristalde hızlanmaktaydı. Bundan sonraki gayretler Bor'un difüzyon mekanizmasını, oksitleme neticesinde yüzeyde oluşturulan doku arası noktasal kusurlara dayandırmaktan ibarettir.

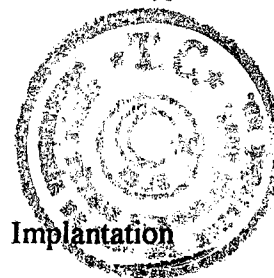
## KAYNAKLAR



- [1]-P. G. Shevmon, "Diffusion in Solids", New York (1972)
- [2]-<http://eemeteor.swan.ac.uk/suprem/Book.html>
- [3]-A. Fick, Ann. Phys. Lpz. 170 (1955), 59
- [4]-J. Crank, "The Mathematics of Diffusion", First Edition (1956)
- [5]-R. B. Fair, "Impurity Doping Process in Silicon", New York (1981), Chapter 7
- [6]-J. R. Philip, Trans. Faraday Soc., 51, 885 (1955)
- [7]-Matano, Japan Phys., 8:109 (1933)
- [8]-P. M. Fahey, P. B. Griffin ve J. D. Plummer, Reviews of Modern Physics, 60(2), 289-384, (1989)
- [9]-H. Huntington, G. Shirn ve Wajda, Physical Rev., 99:1085, (1955)
- [10]-D. Anderson ve M. Lisak, Physical Review A, 22(6), (1980)
- [11]- H. B. Huntington ve F. Seitz, Physical Review, 61:(315), (1942)
- [12]-A.Chantre, M.Kechouane ve D. Bais, Physica (utrecht), 116B, 547, (1983)
- [13]-T. Y. Tan ve B. J. Grinsberg, Appl. Phys. Lett., 46, 944, (1983)
- [14]-J. A. Van Vechten, in Handbook on Semiconductors, Vol. 3, Edited By P. S. Mass ve S. P. Keller, New York, p. 1, (1980)
- [15]-G. D. Watkins, Phys. Rev. B13, 2511, (1976)
- [16]-W. R. Runyan, "Semiconductor Measurements and Instrumentation", Mc Graw-Hill Book Co., New York, (1975), Chapter 7
- [17]-R. B. Fair, J. Electrochem. Soc.:SOLID-STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY, 122(6), (1975)



- [18]-W. E. Beadle, T. C. C. Tsai ve R. D. Plummer, Quick Reference Manual for Silicon Integrated Circuit Technology, Willey, New York, (1985)
- [19]-Am. Soc. Test Matter., ASTM Standart, F84, Part 43
- [20]- Am. Soc. Test Matter., ASTM Standart, F723, Part 43
- [21]-W. R. Thurber, R. L. Mattis ve Y. M. Liu, "Resistivity Dopant Density Relationship for Silicon", Semiconductor Characterisation Techniques, Electrochem. Soc., Pennigton, New Jersey, p. 81, (1978)
- [22]-L. J. Van der Pauw, Philips Res. Repts., 13, 1-9, (1958)
- [23]-C. P. Wu, E. C. Douglas ve C. W. Mueller, IEEE Trans. Electron Devices, ED-22, 319, (1975)
- [24]-C. S. Fuller ve J. A. Ditzenberger, Phys. Rev., 91, 193, (1953)
- [25]-C. S. Fuller ve J. A. Ditzenberger, Journal of Applied Physics, 27, 5, (1956)
- [26]-Dunlap, Bohm ve Mahon, Phys. Rev., 96, 822A, (1954)
- [27]-G. L. Vick ve K. M. Whittle, J. Electrochem. Soc., 116, p. 1142, (1969)
- [28]-F. A. Trumbore, Bell Syst. Tech. J., 39, p. 205, (1960)
- [29]-A. D. Kurtz ve R. Yee, Journal of Applied Physics, 31(2), (1960)
- [30]-Backenstoss, Bell System Tech. J., 37, 699, (1958)
- [31]-M. F. Millea, Bull. Am. Phys. Soc., II, 3, 102, (1958)
- [32]-E. L. Williams, Journal of the Electrochemical Society, 108 (8), (1961)
- [33]-D. Shaw ve A. L. J. Welles, Brit. J. Appl. Phys., 17, 999, (1966)
- [34]-N. D. Thai, Journal of Applied Physics, 41 (7), (1970)
- [35]-T. J. Parker, J. Appl. Phys., 38, 3471, (1967)
- [36]-W. Shockly, J. Appl. Phys., 32, 1402, (1961)
- [37]-R. N. Ghoshtagore, Physical Review B, 3 (2), (1971)
- [38]-R. A. Swalin, J. Phys. Chem. Solids, 18, 290, (1961)



- [39]-S. M. Hu, Phys. Rev., 177, 1334, (1969)
- [40]-G. D. Watkins, Phys. Rev., 155, 802, (1967)
- [41]-B. L. Crowder, J. F. Ziegler, F. F. Morehead ve G. W. Cole, "Ion Implantation in Semiconductor and other Materials", B. L. Crowder Editor, p. 267, Plenum, New York, (1973)
- [42]-L. Estern ve W. Kamparth, Phys. Satus. Solidi., 22, 541, (1976)
- [43]-J. A. Von Venchten, Phys. Rev. B, 10, 1482, (1974)
- [44]-S. M. Hu, J. Appl. Phys., 45, 1567, (1974)
- [45]-J. F. Ziegler, G. W. Cole ve J. E. E. Baglin, J. Appl. Phys., 43, 3809, (1972)
- [46]-W. Von Muench ve C. Gessert, J. Electrochem. Soc.: SOLID-STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY, 122, 12, 1685, (1975)
- [47]-S. Horiuchi ve J. Yamaguchi, Japan J. Appl. Phys., 1, 314, (1962)
- [48]-C. T. Sah, H. Sello ve D. A. Tremere, J. Phys. Chem. Solids, 11, 288, (1959)
- [49]-J. F. Shepard, R. J. Dendal ve P. Balk, Abstract No:196, Extended Abstract of Electronic Division Paper Presented at the Fall Meeting , The Electrochemical Soc., p. 87, (1971)
- [50]-W. G. Allean K. V. Annand, Solid-State Electronics, 14, 397-406, (1971)
- [51]-R. A. Kovalev, V. B. Bernikov, Yu I Pastintsev ve V. A. Marasanov, Soviet Phys. Solid-State, 11, 1571, (1970)
- [52]-L. E. Katz, Symposiumon Silicon Devices Procesing, National Bureau of Standarts, Gaithersburg Moryland, (1970)
- [53]-W. G. Allean, Solid-State Electronics, 16, 709-717, (1973)
- [54]-K. E. Bean ve P. S. Gleim, Proc. IEEE, 57, 1469, (1969)
- [55]-K. H. Bennemann, Phys. Rev., 137, A1497, (1965)

## ÖZGEÇMİŞ

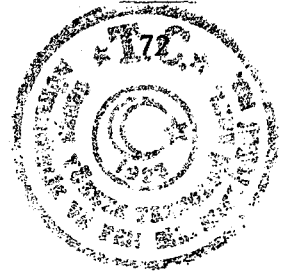


1972 yılında Erzurum'un İspir ilçesinde doğdu. İlk ve orta eğitimini Gölcükte tamamladıktan sonra 1989 yılında Gölcük Barbaros Hayrettin Lisesinden mezun oldu. 1990 da Gaziantep Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümünü kazandı ve buradan 1996 yılında bölüm üçüncüsü olarak mezun oldu. 1996 yılında GYTE'nin yüksek lisans sınavını kazandı. Halen GYTE de araştırma görevlisi olarak çalışmaktadır.



# EKLER

## EK-1



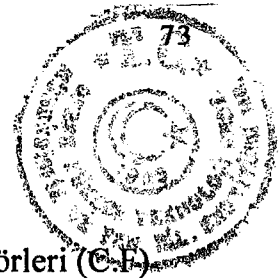
### Laplas Dönüşüm Tablosu

$$C(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} C(t) dt$$

$q = \sqrt{(p/D)}$  , D,x ve h her zaman pozitif

|     | C(p)                            | C(t)                                                                                                                  |
|-----|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1.  | $\frac{1}{p}$                   | 1                                                                                                                     |
| 2.  | $\frac{1}{p^{v+1}}, v > -1$     | $\frac{t^v}{\Gamma(v+1)}$                                                                                             |
| 3.  | $e^{-qx}$                       | $\frac{x}{2\sqrt{(\pi Dt^3)}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$                                                                   |
| 4.  | $\frac{e^{-qx}}{p}$             | $\text{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$                                                                                    |
| 5.  | $\frac{e^{-qx}}{q+h}$           | $\left(\frac{D}{\pi}\right)^{1/2} e^{-x^2/4Dt} - hDe^{hx+Dth^2}$                                                      |
| 6.  | $\frac{e^{-qx}}{q(q+h)}$        | $De^{hx+Dth^2} \text{erfc} \left\{ \frac{x}{2\sqrt{Dt}} + h\sqrt{Dt} \right\}$                                        |
| 7.  | $\frac{e^{-qx}}{pq}$            | $2\left(\frac{Dt}{\pi}\right)^{1/2} e^{-x^2/4Dt} - x \text{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$                                |
| 8.  | $\frac{e^{-qx}}{p^2}$           | $\left(t + \frac{x^2}{2D}\right) \text{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} - x\left(\frac{t}{\pi D}\right)^{1/2} e^{-x^2/4Dt}$ |
| 9.  | $\frac{1}{p+\alpha}$            | $e^{-\alpha t}$                                                                                                       |
| 10. | $\frac{p}{p^2 + \omega^2}$      | $\cos \omega t$                                                                                                       |
| 11. | $\frac{\omega}{p^2 + \omega^2}$ | $\sin \omega t$                                                                                                       |

## EK-2



Dört nokta uç tekniği ile katman difencinin ölçülmesi için düzeltme faktörleri (C.F.)

| d/s      | Daire  | Kare   | Dikdörtgen |        |        |
|----------|--------|--------|------------|--------|--------|
|          |        | a/d=1  | A/d=2      | a/d=3  | a/d>4  |
| 1.0      |        |        |            | 0.9988 | 0.9994 |
| 1.25     |        |        |            | 1.2467 | 1.2248 |
| 1.5      |        |        | 1.4788     | 1.4893 | 1.4893 |
| 1.75     |        |        | 1.7196     | 1.7238 | 1.7238 |
| 2.0      |        |        | 1.9475     | 1.9475 | 1.9475 |
| 2.5      |        |        | 2.3532     | 2.3541 | 2.3541 |
| 3.0      | 2.2662 | 2.4575 | 2.7000     | 2.7005 | 2.7005 |
| 4.0      | 2.9289 | 3.1127 | 3.2246     | 3.2248 | 3.2248 |
| 5.0      | 3.3625 | 3.5098 | 3.5749     | 3.5750 | 3.5750 |
| 7.5      | 3.9273 | 4.0095 | 4.0361     | 4.0362 | 4.0362 |
| 10.0     | 4.1716 | 4.2209 | 4.2357     | 4.2357 | 4.2357 |
| 15.0     | 4.3646 | 4.3882 | 4.3947     | 4.3947 | 4.3947 |
| 20.0     | 4.4364 | 4.4516 | 4.4553     | 4.4553 | 4.4553 |
| 40.0     | 4.5076 | 4.5120 | 4.5129     | 4.5129 | 4.5129 |
| $\infty$ | 4.5324 | 4.5324 | 4.5325     | 4.5325 | 4.5324 |

### EK-3



## HATA FONKSİYONU

Hata fonksiyonu aşağıdaki integrallerle verilir.

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du$$

aynı zamanda aşağıdaki seridende hesaplanabilir.

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[ z - \frac{z^3}{3 \cdot 1!} + \frac{z^5}{5 \cdot 2!} - \dots + \frac{(-1)^n z^{2n+1}}{(2n+1) \cdot n!} \right]$$

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-u^2} du = 1 - \operatorname{erf}(z)$$

$$\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z)$$

$$\operatorname{erf}(\infty) = 1$$

$$\operatorname{erf}(z) \cong \frac{2z}{\sqrt{\pi}} \quad \text{for } z \ll 1$$

$$\frac{d(\operatorname{erf}(z))}{dz} = \left( \frac{2}{\sqrt{\pi}} \right) e^{-z^2}$$

$$\int_0^\infty \operatorname{erfc}(z) dz = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$