

Diffusione di Difetti in Semiconduttori mediante Metodo Monte Carlo

Università degli studi di Padova

14 Dicembre 2006

Motivazione Fisica

Ricerca sulla possibilità di ridurre sempre più le dimensioni dei semiconduttori per:

- La diminuzione delle dimensioni dei dispositivi elettronici;
- L'integrazione della microelettronica in altri campi (medicina, aereospaziale);

Motivazione Fisica

Ricerca sulla possibilità di ridurre sempre più le dimensioni dei semiconduttori per:

- La diminuzione delle dimensioni dei dispositivi elettronici;
- L'integrazione della microelettronica in altri campi (medicina, aereospaziale);

Motivazione Fisica

Ricerca sulla possibilità di ridurre sempre più le dimensioni dei semiconduttori per:

- La diminuzione delle dimensioni dei dispositivi elettronici;
- L'integrazione della microelettronica in altri campi (medicina, aereospaziale);

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

Problema

Difficoltà legate alla miniaturizzazione

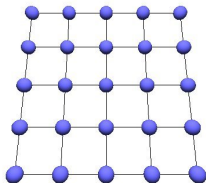
- Conservazione della mobilità dei portatori e regolarità della struttura
- Importanza del ruolo dei difetti generati nell'operazione di drogaggio per le piccole dimensioni
- Riassorbimento dei difetti a seguito dell'impianto

Metodo sviluppato

- Utilizzo del programma SRIM www.srim.org per il calcolo dei profili d'impianto degli ioni e difetti generati
- Utilizzo di un programma scritto "ad hoc" del tipo Monte Carlo Cinetico per la descrizione del moto dei difetti

SRIM

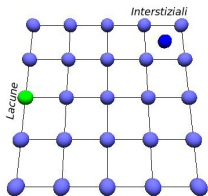
Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



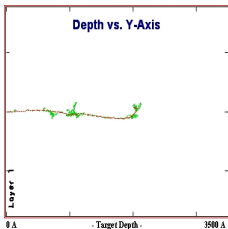
Atomi e difetti
nel reticolo

SRIM

Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



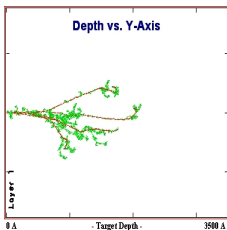
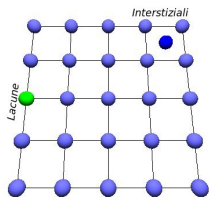
Atomi e difetti
nel reticolo



Sezione del
materiale d'im-
pianto

SRIM

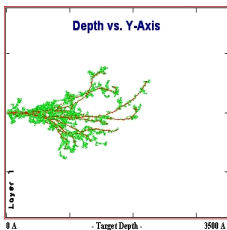
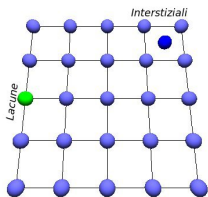
Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



Sezione del
materiale d'im-
pianto

SRIM

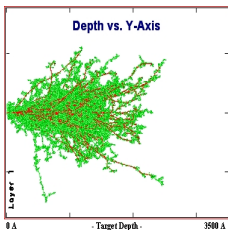
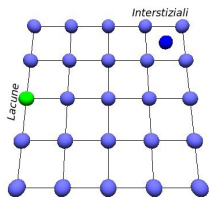
Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



Sezione del
materiale d'im-
pianto

SRIM

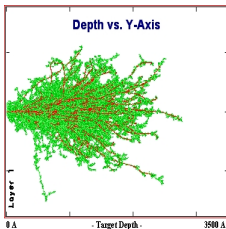
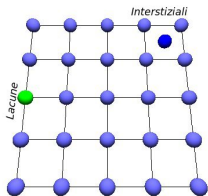
Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



Sezione del
materiale d'im-
pianto

SRIM

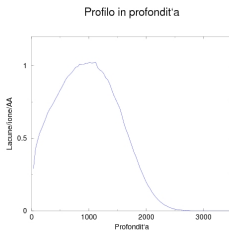
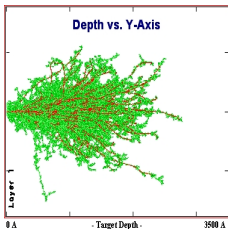
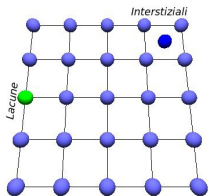
Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



Sezione del
materiale d'im-
pianto

SRIM

Derivazione dei profili in profondità dei difetti generati dall'impianto di ioni ad alta energia utilizzando il programma SRIM www.srim.org



Profilo in profondità dei difetti generati

Monte Carlo Cinetico

Metodo Monte Carlo Cinetico

- Definizione dei possibili eventi del sistema $A_i \xrightarrow{e_i} B_i$
- Ricerca della probabilità associata ad ogni evento $p_i(A_i \rightarrow B_i)$

$$df(t) = -w(T)f(t)dt \Rightarrow \frac{d}{dt}f = -w(T)f \Rightarrow f(t) = w_0 e^{-w(T)t}$$

- Somma di tutte le probabilità $\sum p_i = N$ e scelta dell'evento tramite un numero casuale $c \in [0, 1]$
- Aggiornamento del tempo del sistema proporzionalmente alla probabilità totale degli eventi $t_i = t_{i-1} - \log(c)/N$

Monte Carlo Cinetico

Metodo Monte Carlo Cinetico

- Definizione dei possibili eventi del sistema $A_i \xrightarrow{e_i} B_i$
- Ricerca della probabilità associata ad ogni evento $p_i(A_i \rightarrow B_i)$

$$df(t) = -w(T)f(t)dt \Rightarrow \frac{d}{dt}f = -w(T)f \Rightarrow f(t) = w_0 e^{-w(T)t}$$

- Somma di tutte le probabilità $\sum p_i = N$ e scelta dell'evento tramite un numero casuale $c \in [0, 1]$
- Aggiornamento del tempo del sistema proporzionalmente alla probabilità totale degli eventi $t_i = t_{i-1} - \log(c)/N$

Monte Carlo Cinetico

Metodo Monte Carlo Cinetico

- Definizione dei possibili eventi del sistema $A_i \xrightarrow{e_i} B_i$
- Ricerca della probabilità associata ad ogni evento $p_i(A_i \rightarrow B_i)$

$$df(t) = -w(T)f(t)dt \Rightarrow \frac{d}{dt}f = -w(T)f \Rightarrow f(t) = w_0 e^{-w(T)t}$$

- Somma di tutte le probabilità $\sum p_i = N$ e scelta dell'evento tramite un numero casuale $c \in [0, 1]$
- Aggiornamento del tempo del sistema proporzionalmente alla probabilità totale degli eventi $t_i = t_{i-1} - \log(c)/N$

Monte Carlo Cinetico

Metodo Monte Carlo Cinetico

- Definizione dei possibili eventi del sistema $A_i \xrightarrow{e_i} B_i$
- Ricerca della probabilità associata ad ogni evento $p_i(A_i \rightarrow B_i)$

$$df(t) = -w(T)f(t)dt \Rightarrow \frac{d}{dt}f = -w(T)f \Rightarrow f(t) = w_0 e^{-w(T)t}$$

- Somma di tutte le probabilità $\sum p_i = N$ e scelta dell'evento tramite un numero casuale $c \in [0, 1]$
- Aggiornamento del tempo del sistema proporzionalmente alla probabilità totale degli eventi $t_i = t_{i-1} - \log(c)/N$

Monte Carlo Cinetico

Metodo Monte Carlo Cinetico

- Definizione dei possibili eventi del sistema $A_i \xrightarrow{e_i} B_i$
- Ricerca della probabilità associata ad ogni evento $p_i(A_i \rightarrow B_i)$

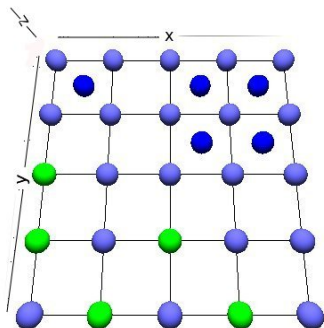
$$df(t) = -w(T)f(t)dt \Rightarrow \frac{d}{dt}f = -w(T)f \Rightarrow f(t) = w_0 e^{-w(T)t}$$

- Somma di tutte le probabilità $\sum p_i = N$ e scelta dell'evento tramite un numero casuale $c \in [0, 1]$
- Aggiornamento del tempo del sistema proporzionalmente alla probabilità totale degli eventi $t_i = t_{i-1} - \log(c)/N$

Situazione Fisica

Il moto di difetti nel reticolo è descritto dai seguenti parametri:

	$w_0[1/fs]$	$E_0[eV]$	$E_0[eV]$	$\tau[fs]$
Interstiziali	1.7	0.1	1.7	0.588
Lacune	0.001282	0.3	0.17	80.0
Fonte:	[1]	[2]	[1]	[1]



$$w(T) = w_0 e^{-\frac{E_0}{kT}}$$

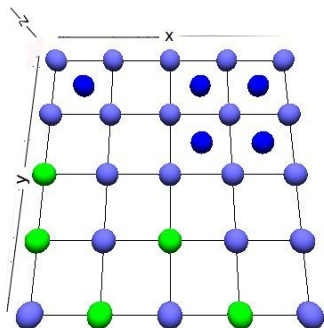
E_0 energia di attivazione, w probabilità associata all'evento, τ intervallo temporale associato all'evento, [1] Kai Nordlund, [2]

- Condizione periodica sull'asse x e y
- Superficie per $z = 0$
- Profondità indefinita $z > 0$

Situazione Fisica

Il moto di difetti nel reticolo è descritto dai seguenti parametri:

	$w_0[1/fs]$	$E_0[eV]$	$E_0[eV]$	$\tau[fs]$
Interstiziali	1.7	0.1	1.7	0.588
Lacune	0.001282	0.3	0.17	80.0
Fonte:	[1]	[2]	[1]	[1]



$$w(T) = w_0 e^{-\frac{E_0}{kT}}$$

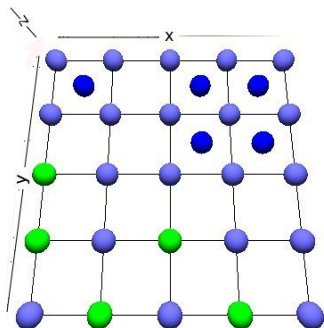
E_0 energia di attivazione, w probabilità associata all'evento, τ intervallo temporale associato all'evento, [1] Kai Nordlund, [2]

- Condizione periodica sull'asse x e y
- Superficie per $z = 0$
- Profondità indefinita $z > 0$

Situazione Fisica

Il moto di difetti nel reticolo è descritto dai seguenti parametri:

	$w_0[1/fs]$	$E_0[eV]$	$E_0[eV]$	$\tau[fs]$
Interstiziali	1.7	0.1	1.7	0.588
Lacune	0.001282	0.3	0.17	80.0
Fonte:	[1]	[2]	[1]	[1]



$$w(T) = w_0 e^{-\frac{E_0}{kT}}$$

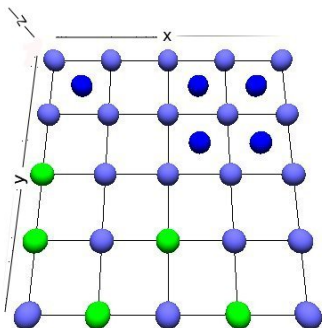
E_0 energia di attivazione, w probabilità associata all'evento, τ intervallo temporale associato all'evento, [1] Kai Nordlund, [2]

- Condizione periodica sull'asse x e y
- Superficie per $z = 0$
- Profondità indefinita $z > 0$

Situazione Fisica

Il moto di difetti nel reticolo è descritto dai seguenti parametri:

	$w_0[1/fs]$	$E_0[eV]$	$E_0[eV]$	$\tau[fs]$
Interstiziali	1.7	0.1	1.7	0.588
Lacune	0.001282	0.3	0.17	80.0
Fonte:	[1]	[2]	[1]	[1]



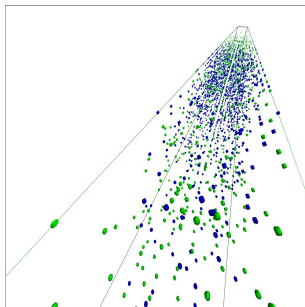
$$w(T) = w_0 e^{-\frac{E_0}{kT}}$$

E_0 energia di attivazione, w probabilità associata all'evento, τ intervallo temporale associato all'evento, [1] Kai Nordlund, [2]

- Condizione periodica sull'asse x e y
- Superficie per $z = 0$
- Profondità indefinita $z > 0$

Simulazione

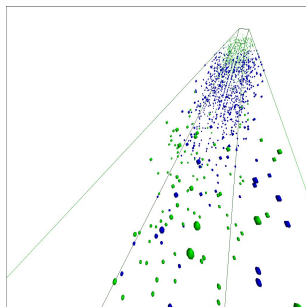
- Vengono sommate le probabilità di tutte le particelle e viene scelta una particella da muovere
- Si sceglie una direzione per la particella da muovere ($\pm\Delta x, \pm\Delta y, \pm\Delta z$)
- Quando la particella raggiunge la superficie può rimbalzare o uscire dal sistema.



Fotogrammi di diversi istanti
dell'evoluzione del sistema

Simulazione

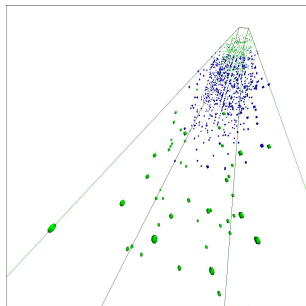
- Vengono sommate le probabilità di tutte le particelle e viene scelta una particella da muovere
- Si sceglie una direzione per la particella da muovere ($\pm\Delta x, \pm\Delta y, \pm\Delta z$)
- Quando la particella raggiunge la superficie può rimbalzare o uscire dal sistema.



Fotogrammi di diversi istanti
dell'evoluzione del sistema

Simulazione

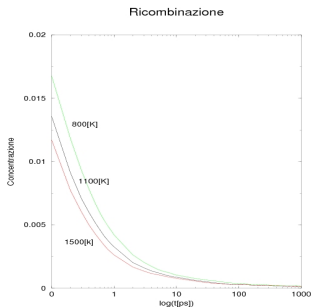
- Vengono sommate le probabilità di tutte le particelle e viene scelta una particella da muovere
- Si sceglie una direzione per la particella da muovere ($\pm\Delta x, \pm\Delta y, \pm\Delta z$)
- Quando la particella raggiunge la superficie può rimbalzare o uscire dal sistema.



Fotogrammi di diversi istanti
dell'evoluzione del sistema

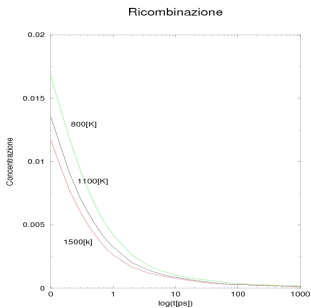
Ricombinazione

Andamento temporale delle ricombinazioni dei difetti (lacune e interstiziali) in funzione della temperatura

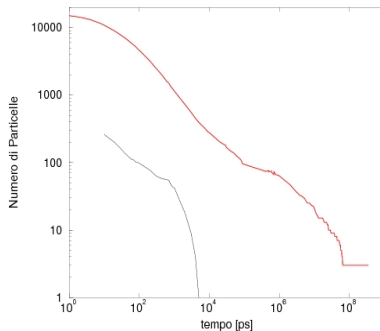


Ricombinazione

Andamento temporale delle ricombinazioni dei difetti (lacune e interstiziali) in funzione della temperatura



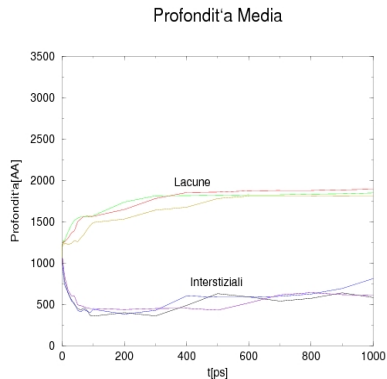
Ricombinazioni



Andamento su lunga scala dei due set di parametri sperimentali

Profondità media

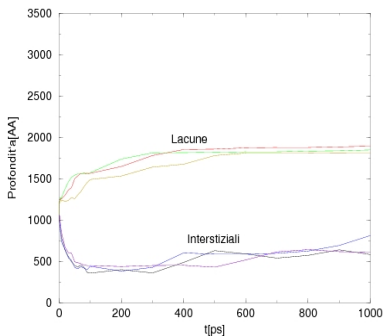
Profondità media lungo z per le lacune e gli interstiziali a diverse temperature.



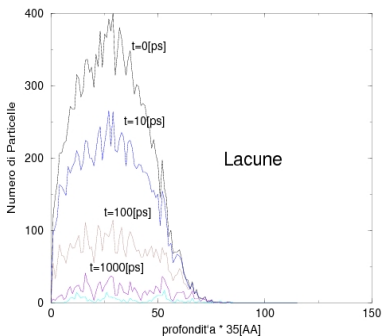
Profondità media

Profondità media lungo z per le lacune e gli interstiziali a diverse temperature.

Profondità Media



Distribuzione in Profondità

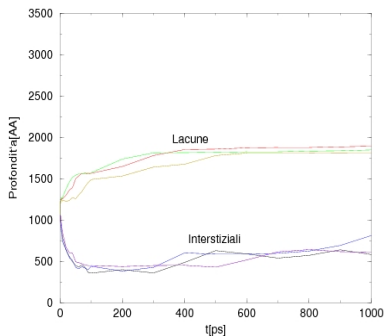


Posizione delle lacune all'avanzare del tempo

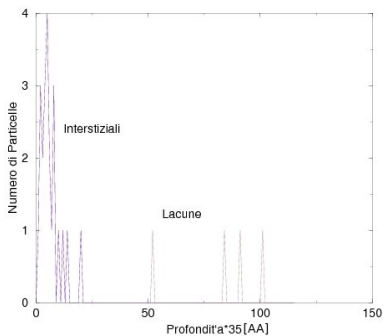
Profondità media

Profondità media lungo z per le lacune e gli interstiziali a diverse temperature.

Profondità Media



Profilo di Profondità



Posizione dei
due tipi di particelle al tempo

Diffusività

Viene eseguito il calcolo della diffusività che è definita come:

$$d = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=0}^n (r_i(t) - r_i(0))^2}{n \cdot t}$$

n numero di particelle, $r(t)$ posizione al tempo t

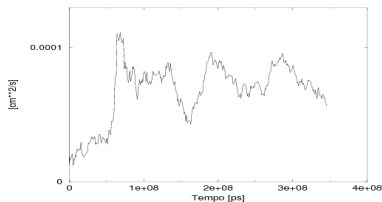
Diffusività

Viene eseguito il calcolo della diffusività che è definita come:

$$d = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=0}^n (r_i(t) - r_i(0))^2}{n \cdot t}$$

n numero di particelle, $r(t)$ posizione al tempo t

Stabilizzazione della diffusività delle
lacune dopo un certo tempo



Diffusività

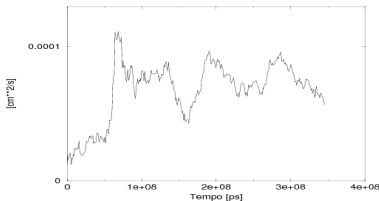
Viene eseguito il calcolo della diffusività che è definita come:

$$d = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=0}^n (r_i(t) - r_i(0))^2}{n \cdot t}$$

n numero di particelle, $r(t)$ posizione al tempo t

Stabilizzazione della diffusività delle
lacune dopo un certo tempo

Diffusivita'



Risultati della diffusività secondo i
calcoli eseguiti e letteratura

	d	d
L	$10^{-5} \cdot 10^{-6}$	$10^{-7} \cdot 10^{-8}$
I	$10^{-7} \cdot 10^{-8}$	$10^{-7} \cdot 10^{-8}$
	$[cm^2/s]$	$[cm^2/s]$
	[1]	[3]
	L=Lacune	I=Interstiziali

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi

Conclusioni

L'algoritmo sviluppato ha permesso di studiare:

- L'evoluzione del sistema su diversi ordini di scale temporali $\simeq 10^{12}$
- L'evoluzione al variare delle condizioni esterne al sistema (temperatura)
- L'equilibrio verso cui il sistema tende a seguito dell'impianto

Il metodo sviluppato è facilmente estendibile e può considerare anche

- Diffusione di impurità di diversa specie chimica da quella del materiale ospite (attinenza con l'attività di drogaggio)
- Inclusione di ulteriori eventi



Basics of Monte Carlo simulations *Kai Nordlund (2006)*



I calcoli da principi primi sono stati effettuati dal Prof. F.Ancilotto usando il codice “Espresso”



P.B.Griffin, P.M.Fahey, J.D.Plummer, R.W.Dutton, Appl. Phys. Letter **47**, 319 (1985)