

تئوری و تکنولوژی ساخت ادوات نیمه‌هادی
(فصل دوم)

**Semiconductor Devices Fabrication
Technology (Chapter II)**

مدرس : سعید عتابخش

Saeed_atabakhsh@yahoo.com

فصل دوم : فهرست

- ✓ خواص و مزایای سیلیسیوم
- ✓ ساختار مواد جامد
- ✓ ساختار بلوری
 - سلول واحد
 - جهت بلوری (شاخص میلر)
 - ساختار بلوری سیلیسیوم
- ✓ روش‌های رشد بلور (Crystal Growth)
 - روش چوکراسکی (Czochralski)
 - روش منطقه شناور (Floating Zone)
- ✓ مدل‌سازی رشد بلور
- ✓ توزیع تراکم ناخالصی‌ها در نواحی مختلف رشد بلور
- ✓ انواع نقص‌ها در بلور
- ✓ تهیه قرص سیلیسیوم (Wafer)

فصل دوم : مزایای سیلیسیوم

- ✓ فراوانی در طبیعت (۲۷ درصد پوسته زمین)
- ✓ امکان خالص سازی بالا (درجه خلوص الکتریکی ۹۹/۹۹۹۹۹۹ درصد یعنی یک اتم ناخالصی از هر ۱۰^۹ اتم) خالص ترین ماده زمین
- ✓ اکسید خوب و مقاوم (غیر حلال در آب) (SiO_2)
- ✓ امکان تشکیل اکسید دمایی مطلوب در معرض اکسیژن
- ✓ فصل مشترک خوب با اکسید (Si/SiO_2 Interface)
- ✓ چسبندگی خوب با لایه های بالایی
- ✓ امکان حکاکی خوب در حلال های مناسب (Etching)

فصل دوم : خواص فیزیکی و الکتریکی سیلیسیوم

- ✓ عدد اتمی ۱۴ متعلق به گروه IV جدول تناوبی (نیمه هادی)
- ✓ انرژی شکاف باند $E_G=1.11 \text{ eV}$
- ✓ مقاومت ویژه $25 \text{ M}\Omega\cdot\text{m}$
- ✓ نقطه ذوب بالا 1417°C
- ✓ چگالی $2.328 \text{ gm}\cdot\text{cm}^{-3}$
- ✓ چگالی اتمی $5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
- ✓ ثابت شبکه 0.357 nm
- ✓ موبیلیته حرکت الکترون $1500 \text{ cm}^2\cdot\text{volt}^{-1}\cdot\text{sec}^{-1}$
- ✓ موبیلیته حرکت حفره $450 \text{ cm}^2\cdot\text{volt}^{-1}\cdot\text{sec}^{-1}$
- ✓ سرعت اشباع الکترون و حفره $1 \times 10^7 \text{ cm}\cdot\text{sec}^{-1}$
- ✓ ضریب نفوذ پذیری نسبی $11.9 (\epsilon_r)$

فصل دوم : ساختار مواد جامد

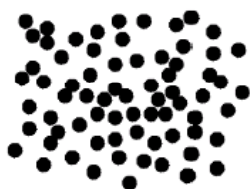
سه دسته ماده جامد از نظر قرار گرفتن اتم‌ها کنار هم

۱- بلوری Crystalline

۲- چند بلوری Polycrystalline

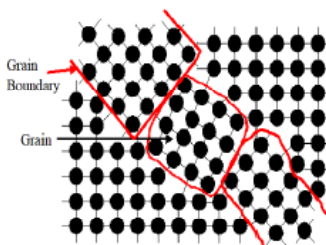
۳- بی نظم Amorphous

Amorphous Structure



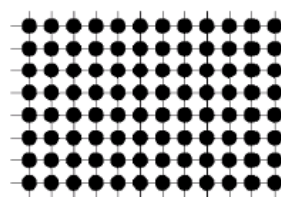
بدون هرگونه ساختار
تکرار پذیر

Polycrystalline Structure



دارای برخی ساختار های
تکرار پذیر

Single Crystal Structure



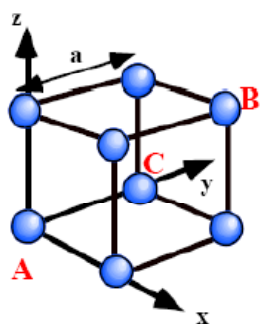
دارای ساختار تکرار پذیر

S. Atabakhsh

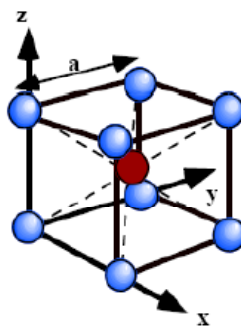
5

فصل دوم : ساختار بلوری

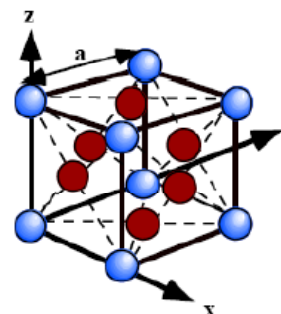
سه ساختار تکرار پذیر از اتم‌ها



Cubic



BCC



FCC

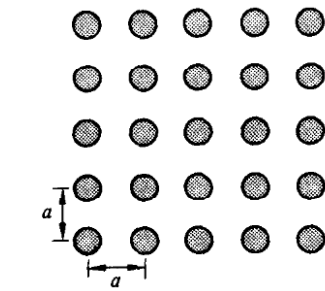
سلول واحد شبکه : کوچکترین ساختاری که از تکرار آن در سه جهت X, Y و Z کل شبکه تشکیل می‌شود.

ثابت شبکه (a): تناوب مکانی تکرار سلول واحد

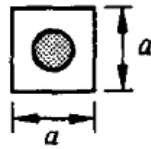
S. Atabakhsh

6

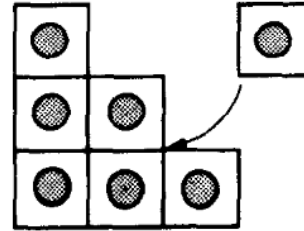
فصل دوم : ساختار بلوری



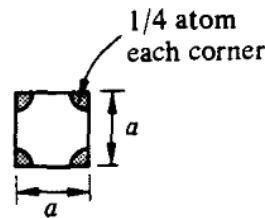
نمایش دوبعدی شبکه کریستال مکعبی



سلول واحد دوبعدی



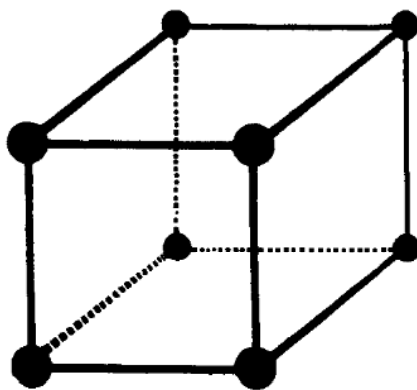
تشکیل شبکه از تکرار سلول واحد



سلول واحد دوبعدی (سلول واحد یک شبکه بلوری منحصر به فرد نیست).

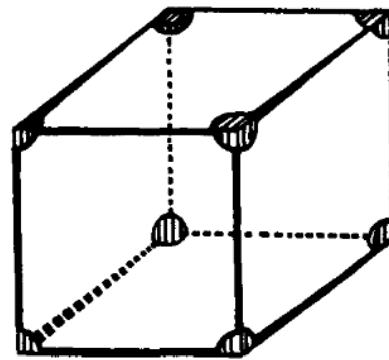
فصل دوم : ساختار بلوری مکعبی ساده

✓ ساده ترین سلول واحد سه بعدی، سلول واحد مکعبی ساده است. در هر گوشه مکعب یک اتم قرار گرفته است.



(a) Simple cubic

1/8 از هر اتم در هر گوشه درون سلول قرار دارد.

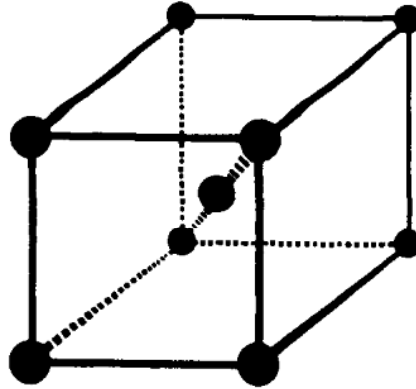


(b)

یک اتم داخل سلول واحد

فصل دوم : ساختار بلوری با بدنه مرکزدار (BCC)

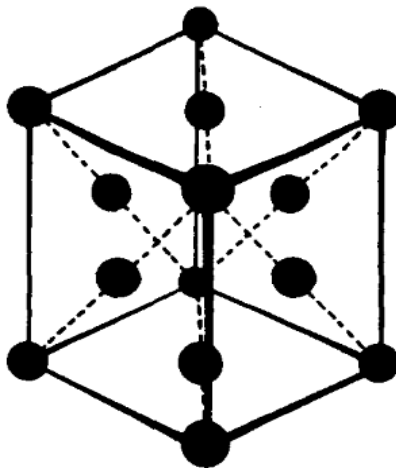
✓ **Body Centered Cubic**: علاوه بر اتم های هر گوشه، یک اتم در مرکز سلول نیز وجود دارد.



دو اتم داخل سلول واحد

فصل دوم : ساختار بلوری با وجوه مرکزدار (FCC)

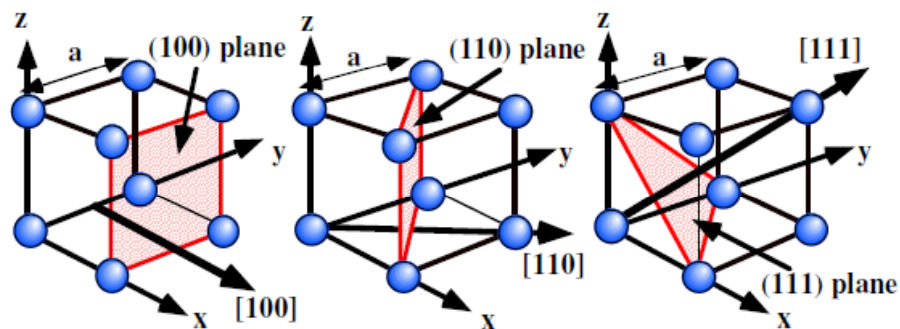
✓ **Face Centered Cubic**: علاوه بر اتم های هر گوشه ، یک اتم در مرکز هر وجه سلول نیز وجود دارد.



چهار اتم داخل سلول واحد

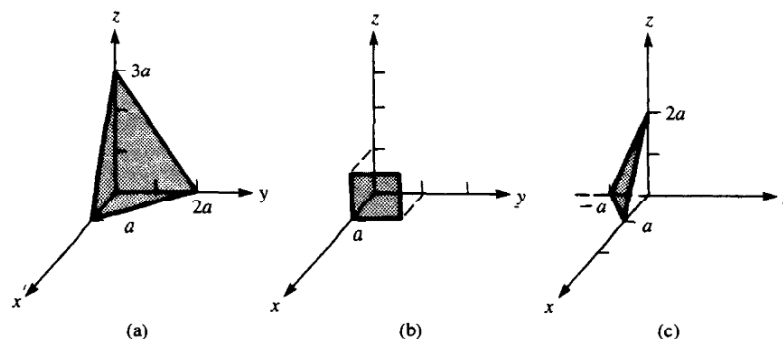
فصل دوم : جهتهای بلوری

- ✓ جهات و صفحات توسط سیستم مختصات سه بعدی X, Y, Z مشخص می شوند.
- ✓ جهتهای (بردارها) داخل $[...]$ و صفحات داخل $(...)$ نشان داده می شوند.
- ✓ صفحات توسط شاخصهای میلر تعریف می شوند.

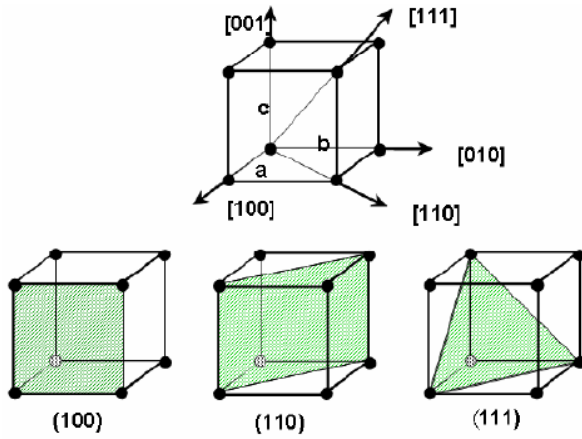


فصل دوم : روش تعیین شاخصهای میلر

- ✓ صفحات بلوری توسط سه عدد صحیح به نام شاخصهای میلر مشخص می شوند.
- ✓ محل تقاطع صفحه با محورهای مختصات را می یابیم. (مثلاً 2, 4, 3)
- ✓ این سه عدد را عکس می کنیم. $(1/2, 1/4, 1/3)$
- ✓ کوچکترین مجموعه اعداد صحیح متناظر با آنرا به عنوان اندیس میلر در نظر می گیریم. $(6 \ 3 \ 4)$
- ✓ اگر اندیسی منفی به دست آمد آنرا با بار نشان می دهیم. مثلاً $(2 \ \bar{3} \ 1)$
- ✓ جهت کریستالی $[hkl]$ بر صفحه (hkl) عمود است.



فصل دوم : صفحات و جهتهای معادل



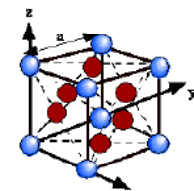
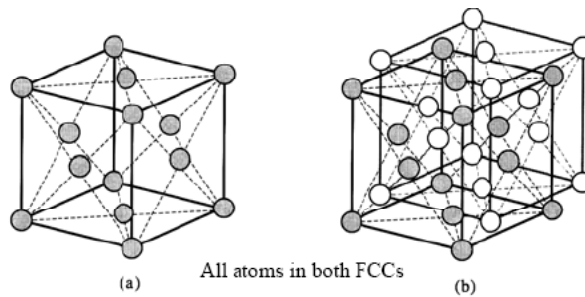
✓ از دید ناظر، صفحه هایی که آرایش اتمی مشابهی دارند صفحه های معادل هستند.

✓ صفحات معادل را به صورت $\{hkl\}$ و جهتهای معادل را به صورت $\langle hkl \rangle$ نشان می دهند.

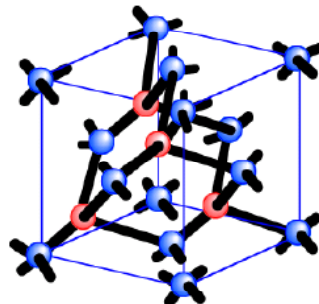
✓ دو صفحه (100) و (111) در بلورهای مدار مجتمع اهمیت ویژه ای دارند.

فصل دوم : ساختار بلوری سیلیسیوم

✓ ساختار بلوری سیلیسیوم به صورت دو شبکه FCC است که یکی نسبت به دیگری در امتداد قطر اصلی به اندازه یک چهارم طول قطر فرو رفته است. (شبکه بلوری الماسی)

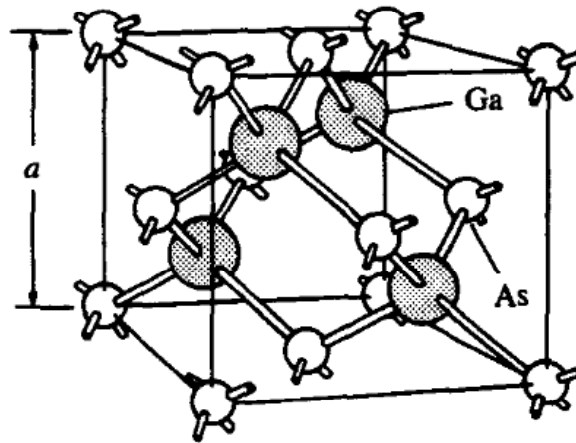


FCC \triangle
Two Merged FCC Cells Representing Si Crystal \triangleright



فصل دوم : ساختار بلوری GaAs

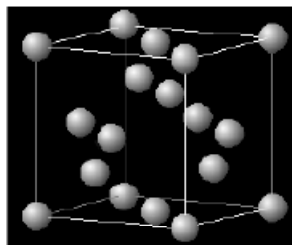
ساختار بلوری GaAs مشابه ساختار بلوری سیلیسیوم است. (شبه بلوری الماسی)



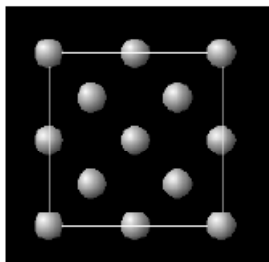
(b)

فصل دوم : نمایش دوبعدی ساختار بلوری سیلیسیوم

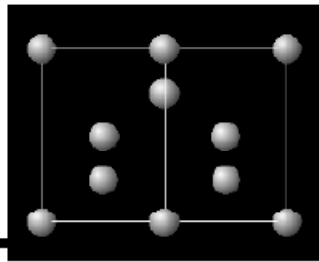
Unit cell:



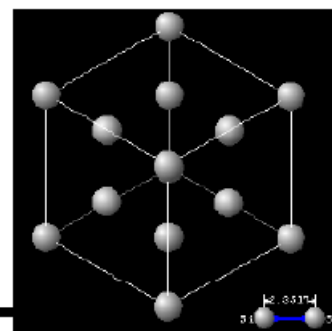
View in $\langle 100 \rangle$ direction



View in $\langle 110 \rangle$ direction

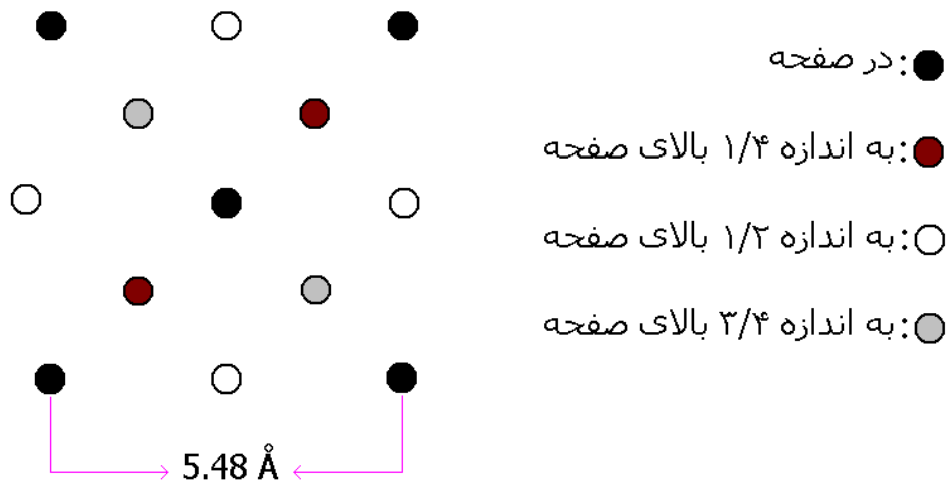


View in $\langle 111 \rangle$ direction



فصل دوم : نمایش دوبعدی ساختار بلوری سیلیسیوم

✓ ساختار بلوری سیلیسیوم از دید ناظر صفحه (1 0 0)



فصل دوم : چگالی اتمی سیلیسیوم

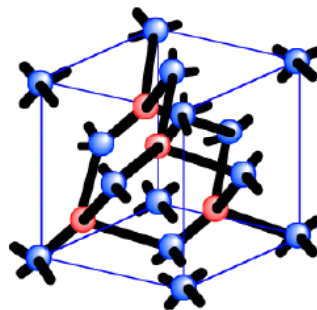
✓ سوال: تعداد اتم‌های سیلیسیوم در واحد حجم (cm^{-3})؟

✓ ثابت شبکه سیلیسیوم (5.3 \AA)

$$\text{تعداد اتم‌های داخل سلول واحد} = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 + 4 = 8$$

$$\text{حجم سلول واحد} = a^3 = (5.3 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

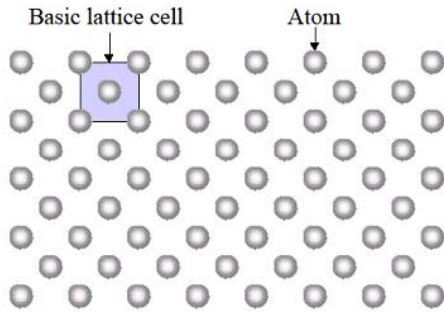
$$\text{تعداد اتم‌های سیلیسیوم در واحد حجم} = 8 / (5.3 \times 10^{-8})^3 = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$



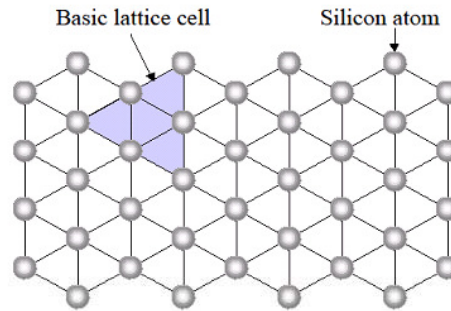
فصل دوم : مقایسه جهتهای بلوری [100] و [111]

جهت بلوری [111] در مقایسه با [100] تراکم سطحی و آهنگ اکسایش بیشتری دارد.

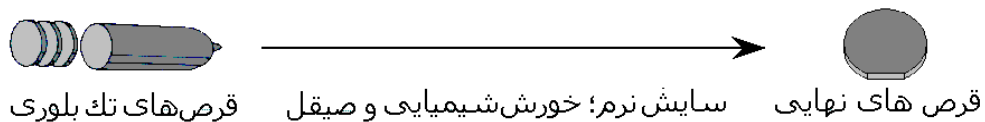
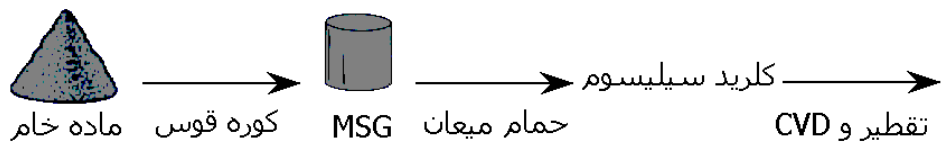
<100> Orientation Plane



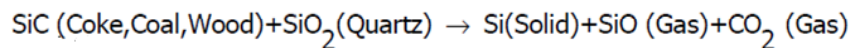
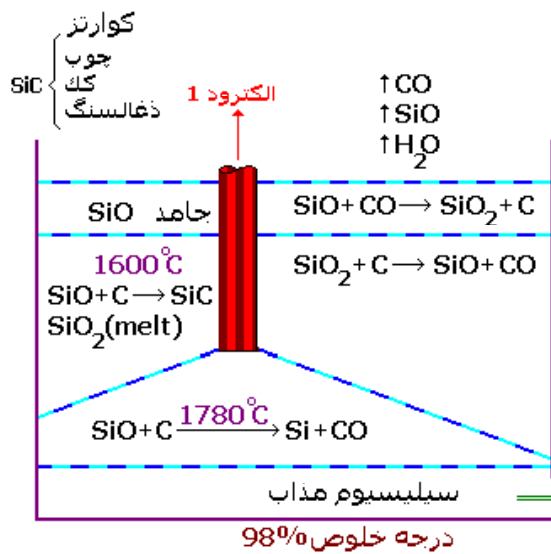
<111> Orientation Plane



فصل دوم : تهیه سیلیسیوم از ماده خام



فصل دوم : تهیه سیلیسیوم با درجه خلوص متالورژیکی (MGS)



S. Atabakhsh

21

✓ کوره قوس الکتریکی

✓ SiO₂ در طبیعت به صورت سنگ معدن و یا شن

✓ SiO₂ به همراه کک (SiC) به عنوان ماده احیا کننده داخل کوره قوس الکتریکی با دمای ۲۰۰۰ درجه سلسیوس

✓ واکنش زیر رخ می دهد.

✓ سیلیسیوم با درصد خلوص 98% حاصل می شود. (MGS)

✓ کاربرد فراوانی در صنعت دارد.

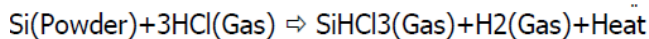
✓ می توان ناخالصی دلخواه وارد کرد.

✓ SiO تولید شده بر اثر قوس الکتریکی داخل کوره ناپایدار است.

✓ شمش تولید شده ناهموار است و باید یکنواخت شود.

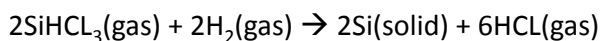
فصل دوم : سیلیسیوم با درجه خلوص الکتریکی (EGS)

✓ MGS را پودر کرده و در حمام میعان با اسید کلریدریک (HCl) قرار می دهند.

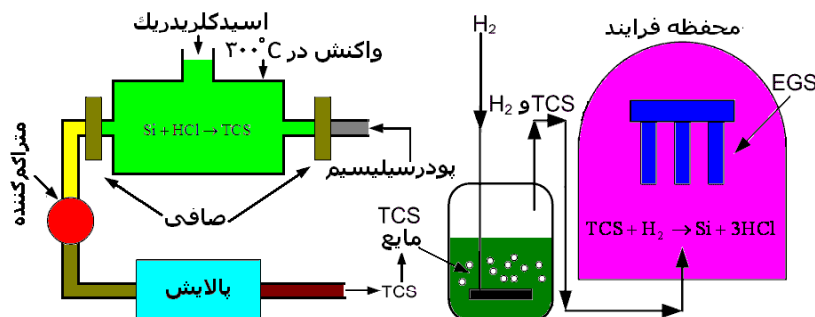


✓ SiHCl₃ در دمای 32°C تبخیر می شود تا از طریق تقطیر از ناخالصی ها جدا شود. (همان Tri Coloro Silen)

✓ SiHCl₃ با هیدروژن وارد محفظه فرآیند شده و روی میله پلی سیلیسیمی رسوب می کند.



✓ EGS حاصل کریستالی نبوده و به صورت چند بلوری است.



S. Atabakhsh

22

فصل دوم : روش چوکراسکی برای رشد بلور سیلیسیوم (CZ)

✓ روش غالب در تهیه سیلیسیوم بلوری

✓ قطعات پلی سیلیسیوم حاصل (EGS) به همراه مقدار مورد نیاز سیلیسیوم ناخالص درون کوره با حرارت 1417°C ذوب می شوند.

✓ قطعه سیلیسیوم اولیه (Seed) درون مذاب قرار گرفته و به همراه دوران بالا کشیده می شود.

✓ جهت دوران هسته عکس جهت دوران مذاب است.

✓ دما باید داخل محفظه یکسان نگه داشته شود.

✓ قطر شمش تشکیل شده با گذشت زمان افزایش می یابد.

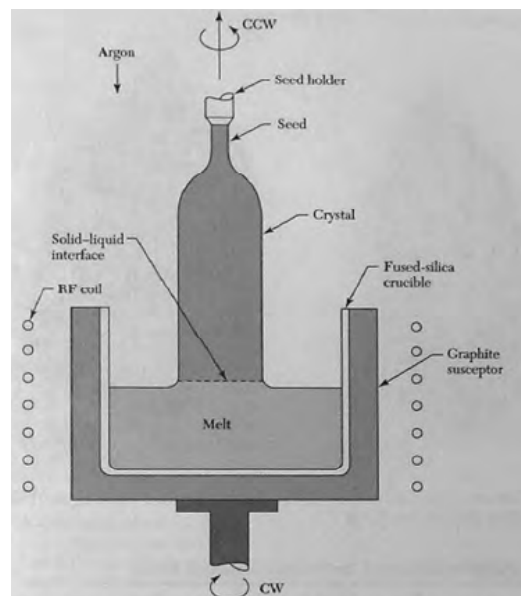
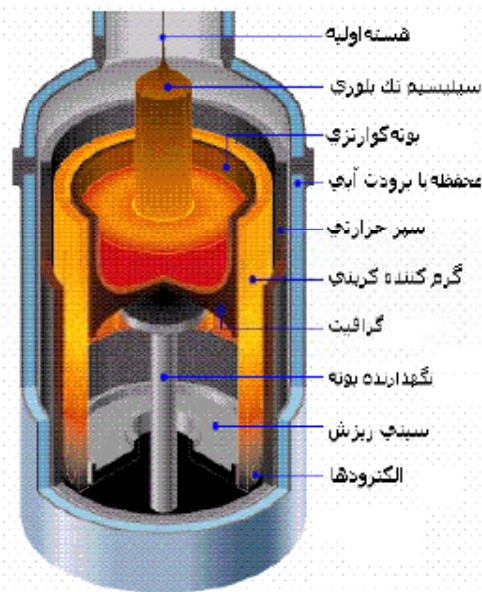
✓ سرعت بالا کشیدن بلور، سرعت دوران و تنظیم دمای مذاب مهمترین عوامل کنترل فرآیند رشد بلور هستند.

✓ جهت نهایی بلور همان جهت هسته بلوری اولیه خواهد بود.

✓ ناخالصی های کربن و اکسیژن از طریق ظرف کوارتز وارد شمش می شوند.

✓ شمش هایی به قطر حدود 25 cm و طول حدود 2 m

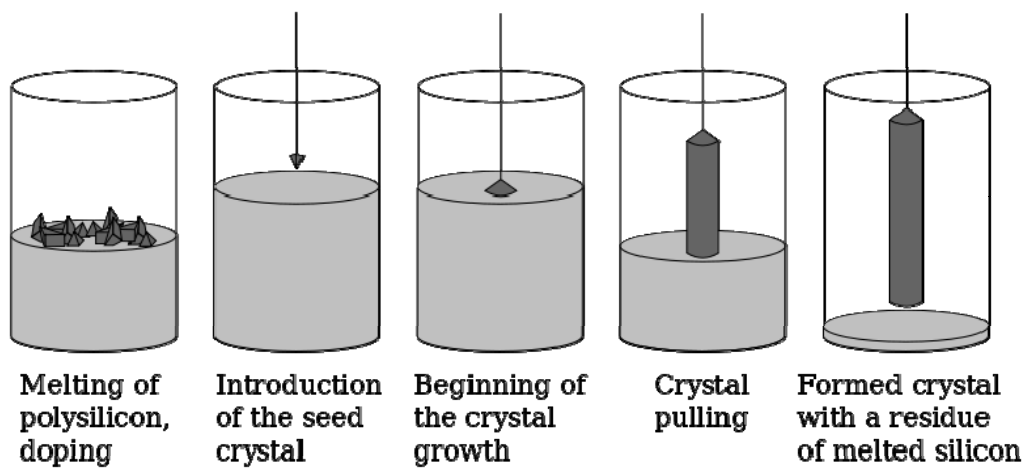
فصل دوم : روش چوکراسکی برای رشد بلور سیلیسیوم (CZ)



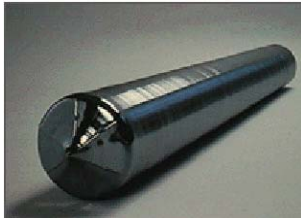
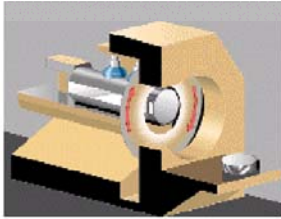
فصل دوم : روش چوکراسکی برای رشد بلور سیلیسیوم (CZ)



فصل دوم : روش چوکراسکی برای رشد بلور سیلیسیوم (CZ)



فصل دوم : تهیه قرص (Wafer)

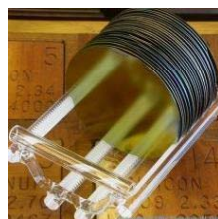
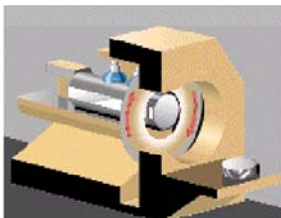


✓ شمش حاصل را زیر دستگاه تراش الماس صیقل می دهند تا یکنواخت شود.

✓ شمش حاصل را در جهت معینی که مناسب جهت بلور است برش می دهند تا ویفر حاصل شود.

✓ روش متداول و غالب برای تکنولوژی قطعه قطعه کردن قرص، برش با چندین سیم MSW (Multi-Wire Sawing) است. در این روش یک سیم باریک به دور یک قرقره نازک استوانه‌ای قرار گرفته به طوری که صدها سیم موازی بطور همزمان سراسر شمش را قطعه قطعه می کنند. ✓ دو انتهای شمش که ناهموار است دور انداخته می شود.

فصل دوم : تهیه قرص (Wafer)



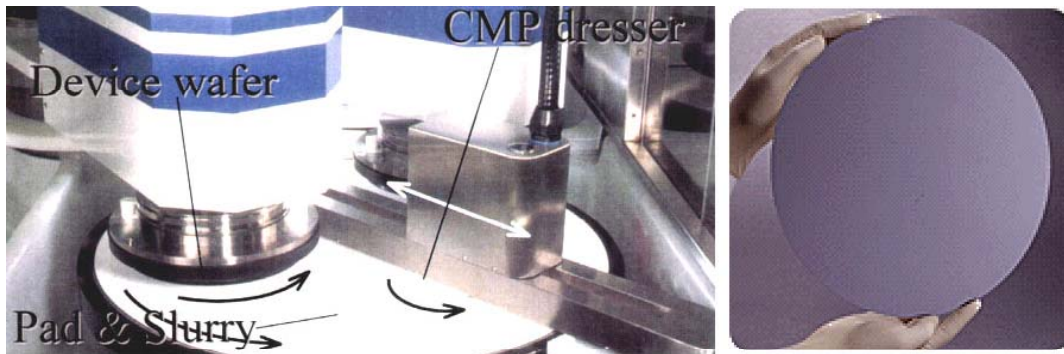
✓ شمش حاصل را زیر دستگاه تراش الماس صیقل می دهند تا یکنواخت شود.

✓ شمش حاصل را در جهت معینی که مناسب جهت بلور است برش می دهند تا ویفر حاصل شود.

✓ روش متداول و غالب برای تکنولوژی قطعه قطعه کردن قرص، برش با چندین سیم MSW (Multi-Wire Sawing) است. در این روش یک سیم باریک به دور یک قرقره نازک استوانه‌ای قرار گرفته به طوری که صدها سیم موازی بطور همزمان سراسر شمش را قطعه قطعه می کنند. ✓ دو انتهای شمش که ناهموار است دور انداخته می شود.

فصل دوم : صیقل دادن سطح قرص

✓ CMP (Chemi-Mechanical Polishing): صیقل دادن و هموار کردن سطح به روش شیمیایی و مکانیکی
 ✓ صیقل مکانیکی تحت فشار و مخلوطی از گلیسرین، اکسید آلومینیوم و آب (Pad)
 ✓ صیقل شیمیایی توسط محلولی از هیدروکسید سدیم (Slurry)

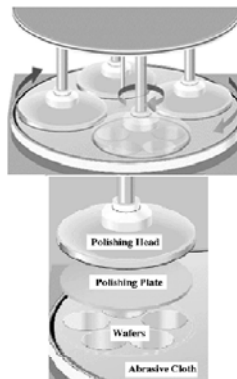


S. Atabakhsh

29

فصل دوم : صیقل دادن سطح قرص

✓ قبل از CMP قرص‌ها درون محلولی از اسید نیتریک، اسید هیدروفلوئوریدریک و اسید استیک قرار می‌گیرند.
 ✓ قرص‌ها را برای CMP روی یک بالشتک قرار می‌دهند.



S. Atabakhsh

30

فصل دوم : انواع سیلیکن بعد از هر مرحله



Quartzite



MGS



EGS Poly Si



Si ingot



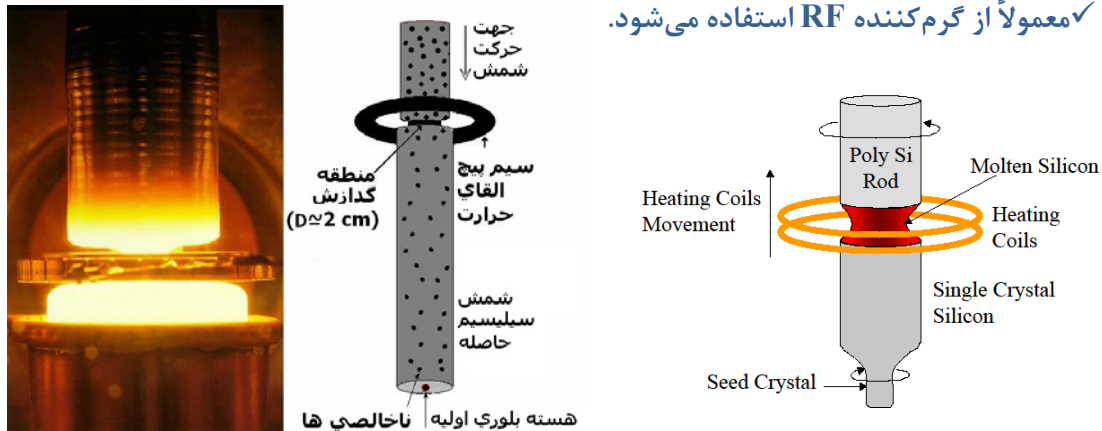
Si Wafer

فصل دوم : اکسیژن به عنوان ناخالصی در روش CZ

- ✓ منشأ اکسیژن در روش چوکراسکی حل شدن بوته کوارتز (SiO_2) در مذاب است.
- ✓ تراکم اکسیژن در مذاب به زمان و ارتفاع مذاب بستگی دارد.
- ✓ در دمای $400-500^\circ\text{C}$ ترکیب SiO_4 تشکیل می شود که در دمای بالاتر ناپایدار است.
- ✓ قرص را بعد از برش و صیقل دادن، ترمیم حرارتی می کنند. (Thermal Annealing)
- ✓ حضور اکسیژن در بلور سیلیسیوم:
 - از نظر الکتریکی تا حدود زیادی غیرفعال است.
 - به عنوان ناخالصی دهنده (donor) عمل می کند.
 - در فرآیند جذب ناخالصی به عنوان تله عمل می کند.
 - باعث افزایش استحکام مکانیکی بلور به میزان 25% می شود.

فصل دوم : رشد بلور به روش ناحیه معلق (Floating Zone) FZ

- ✓ برای رشد بلور و یا خالص سازی بلور حاصل از روش چوکراسکی
- ✓ با تکرار گذرها، ناخالصی ها از فاز جامد به مذاب وارد شده و به انتهای شمش رانده می شوند.
- ✓ قسمت انتهایی شمش بریده و دور انداخته می شود.
- ✓ معمولاً تراکم ناخالصی در مذاب از جامد بیشتر است. (مفهوم ضریب تفکیک)
- ✓ معمولاً از گرم کننده RF استفاده می شود.

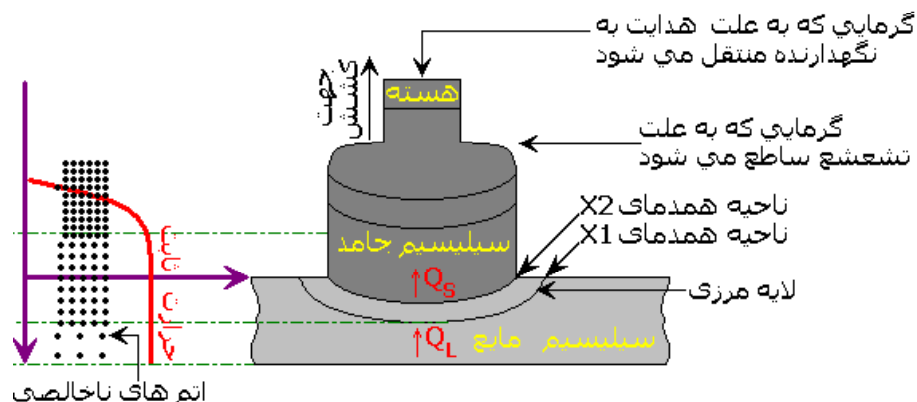


S. Atabakhsh

33

فصل دوم : مدل سازی رشد بلور

- ✓ نواحی X_1 و X_2 همدمما هستند. X_1 در فاز مایع و X_2 در فاز جامد است.
- ✓ فصل مشترک دو ناحیه مکان مناسبی برای رشد بلور و قبول اتم هستند.
- ✓ کنترل دمای فصل مشترک بسیار مهم است.
- ✓ اگر دما در فصل مشترک ثابت نباشد، قطر شمش تولیدی ناهموار می شود.



S. Atabakhsh

34

فصل دوم : مدل سازی رشد بلور

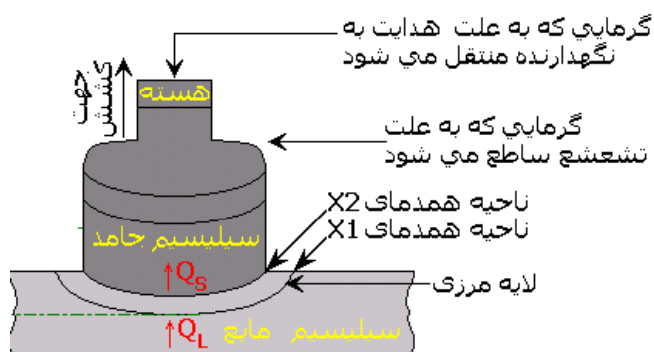
در شرایط تعادل گرمایی

گرمای نهان انجماد (گرمایی که واحد حجم مذاب از دست میدهد تا بدون تغییر دما به جامد تبدیل شود.)

مقدار انرژی گرمایی که از طریق فاز مذاب به بلور داده می شود (Q_L)

انرژی که از فاز مذاب به بلور (فاز جامد) منتقل می شود (Q_s)

$$L \frac{dm}{dt} + K_L \frac{dT}{dx_1} (A_1) = K_S \frac{dT}{dx_2} (A_2)$$



- L ضریب گرمای نهان انجماد،
- K_S ضریب هدایت حرارتی جامد
- K_L - ضریب هدایت حرارتی مذاب
- dm/dt آهنگ انجماد،
- dT/dx گرادیان دمایی.
- A_1, A_2 مساحت های نواحی همدمای مذاب و بلور نزدیک فصل مشترك

S. Atabakhsh

35

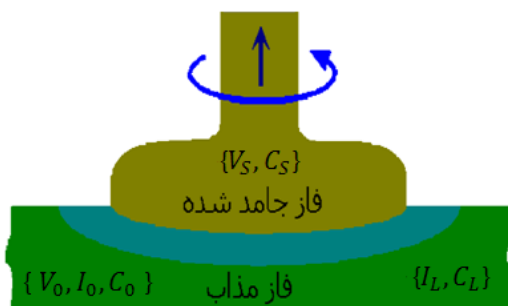
فصل دوم : ضریب تفکیک

✓ ضریب حلالیت ناخالصی معمولاً در فاز مذاب از فاز جامد بیشتر است.

✓ ضریب تفکیک (K_0): نسبت تراکم ناخالصی در فاز جامد به تراکم ناخالصی در فاز مذاب

ضریب جداسازی (Segregation Coefficient) k_0 :

$$k_0 = \frac{C_S}{C_L} = \frac{\text{غلظت ناخالصی در فاز جامد}}{\text{غلظت ناخالصی در فاز مذاب}}$$



✓ ضریب تفکیک کمتر از یک یعنی ناخالصی تمایل دارد بیشتر در فاز مایع باشد در نتیجه اتمهای شمش ناخالصی بیشتری دارد.

✓ هرچه ضریب تفکیک کوچکتر باشد، غیریکنواختی بیشتر است.

S. Atabakhsh

36

فصل دوم : ضریب تفکیک

✓ بور از نظر یکنواختی تراکم در طول شمش شرایط بهتری دارد.

مقادیر k_0 برای ناخالصی های مختلف در Si

ناخالصی	k_0	نوع
B	0.8	p
Al	2×10^{-3}	p
Ga	8×10^{-3}	p
In	4×10^{-4}	p
O	1.25	n
C	7×10^{-2}	n
P	0.35	n
As	0.3	n
Sb	2.3×10^{-2}	n
Te	2×10^{-4}	n
Li	1×10^{-2}	n

فصل دوم : مدل سازی تراکم ناخالصی در روش CZ

$$C_0 = \frac{I_0}{V_0}$$

$$C_L = \frac{I_L}{V_L}$$

$$-C_S = \frac{\Delta I}{\Delta V}$$

$$K_0 = \frac{C_S}{C_L}$$

$$f = \frac{V_S}{V_0}$$

I_0 : تعداد ناخالصی اولیه در فاز مذاب

C_0 : تراکم ناخالصی اولیه در فاز مذاب (cm-3)

I_L : تعداد ناخالصی فاز مذاب

C_L : تراکم ناخالصی فاز مذاب

V_S : حجم فاز جامد شده

V_0 : حجم اولیه مذاب

C_S : تراکم ناخالصی در فاز جامد

ΔI : تعداد ناخالصی که از فاز مذاب به جامد تبدیل می شوند.

ΔV : حجمی از مذاب که به جامد تبدیل می شود.

f : کسری از حجم مذاب که جامد می شود.

فصل دوم : مدل سازی تراکم ناخالصی در روش CZ

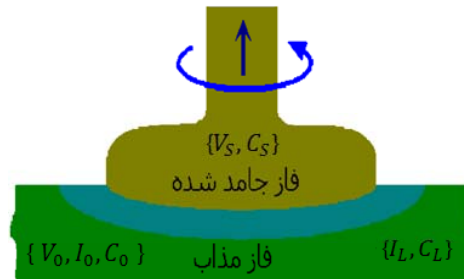
✓ اگر حجم dV از فاز مذاب به جامد تبدیل شود، تعداد ناخالصی موجود در dV همان dI است و برابر خواهد بود با :

$$dI = -C_S \cdot dV = -K_0 \cdot C_L \cdot dV = -K_0 \cdot \frac{I_L}{V_L} \cdot dV = -K_0 \cdot \frac{I_L}{V_0 - V_S} \cdot dV$$

✓ علامت منفی نشان می دهد که تعداد ناخالصی در فاز مذاب کاهش می یابد.

✓ حجم مذاب باقیمانده : $V_L = V_0 - V_S$

✓ بعد از گذشت زمان t ، تعداد ناخالصی در مذاب از I_0 به I_L و حجم جامد از صفر به V_S می رسد.



S. Atabakhsh

39

فصل دوم : مدل سازی تراکم ناخالصی در روش CZ

$$dI = -C_S \cdot dV = -K_0 \cdot C_L \cdot dV = -K_0 \cdot \frac{I_L}{V_L} \cdot dV = -K_0 \cdot \frac{I_L}{V_0 - V_S} \cdot dV$$

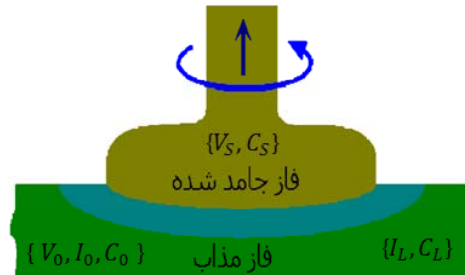
$$\int_{I_0}^{I_L} \frac{dI}{I_L} = -K_0 \cdot \int_0^{V_S} \frac{dV}{V_0 - V_S}$$

$$\ln\left(\frac{I_L}{I_0}\right) = \ln\left(\frac{V_0 - V_S}{V_0}\right)^{K_0}$$

$$I_L = I_0 \cdot \left(1 - \frac{V_S}{V_0}\right)^{K_0}$$

$$C_S = -\frac{dI_L}{dV_S}$$

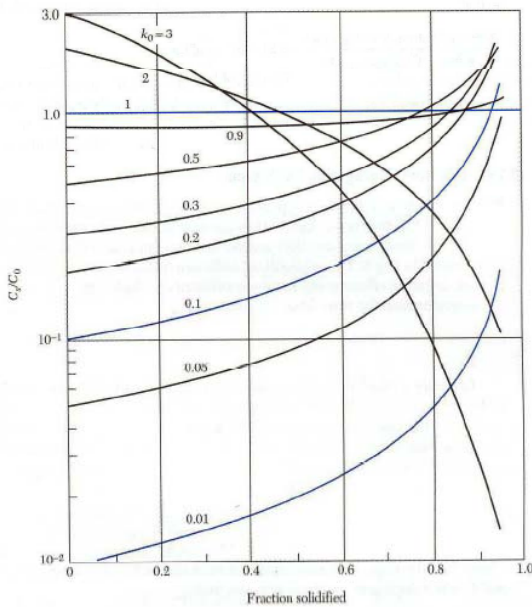
$$C_S = C_0 \cdot K_0 \cdot \left(1 - \frac{V_S}{V_0}\right)^{(K_0-1)}$$



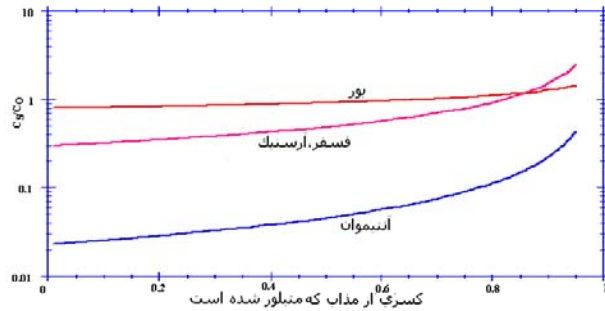
S. Atabakhsh

40

فصل دوم : مدل سازی تراکم ناخالصی در روش CZ



✓ منحنی‌های رشد از فاز مذاب که میزان غلظت ناخالصی در جامد بر حسب درصد جرم ماده تبدیل شده را به ازای ضرایب به جامد جداسازی مختلف نشان می‌دهد.
 ✓ هرچه به انتهای فرآیند رشد نزدیک شویم، تراکم ناخالصی در فاز جامد افزایش می‌یابد.



S. Atabakhsh

41

فصل دوم : مدل سازی تراکم ناخالصی در روش CZ

✓ مثال: شمش سلیکونی که باید دارای ناخالصی بور با غلظت $C_S = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ به روش CZ رشد داده می‌شود.

✓ غلظت اتم‌های بور در مذاب چقدر باید باشد؟

✓ جرم بور مورد نیاز چقدر باید باشد؟

✓ جرم اولیه مذاب = 60 gr - جرم اتمی بور = 10.8 gr/mol - چگالی سیلیسیوم مذاب = 2.53 gr/cm³

$$C_0 = \frac{C_S}{K_0} = \frac{10^{16}}{0.8} = 1.25 \times 10^{16} \text{ atoms / cm}^3 \quad \text{تراکم اولیه بور در فاز مذاب}$$

$$V_0 = \frac{60 \times 10^3}{2.53} = 2.37 \times 10^4 \text{ cm}^3 \quad \text{حجم اولیه مذاب}$$

$$I_0 = V_0 \times C_0 = (2.37 \times 10^4) \times (1.25 \times 10^{16}) = 2.96 \times 10^{20} \text{ atoms} \quad \text{تعداد اتم بور مورد نیاز}$$

$$\frac{2.96 \times 10^{20} \times 10.8 (\text{gr / mol})}{6.02 \times 10^{22} (\text{atoms / mol})} = 5.31 \text{ mgr} \quad \text{جرم بور مورد نیاز}$$

S. Atabakhsh

42

فصل دوم : نقص در بلور (Defect)

- ✓ در بلور انواع نقص‌ها می‌تواند وجود داشته باشد.
- ✓ نقص‌ها در حین فرآیند رشد بلور، مرحله پردازش ویفر، نفوذ ناخالصی و ... رخ می‌دهند.
- ✓ مهمترین عوامل افزایش و کاهش نقص در بلور سنتیک و تغییرات حرارتی است.
- ✓ در کل وجود نقص سبب افزایش انرژی داخلی بلور شده و شبکه را ناپایدار می‌کند.
- ✓ تراکم نقص‌ها با تغییر دما، تغییر خواهد کرد.
- ✓ اتم‌های سطحی چون از بالا پیوند ندارند، بیشتر در معرض نقص قرار دارند.
- ✓ سه نوع نقص در شبکه بلوری :

۱. نقص نقطه‌ای

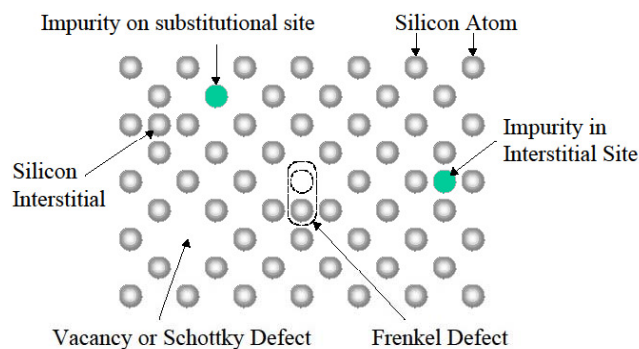
۲. نقص خطی

۳. نقص حجمی

فصل دوم : نقص نقطه‌ای (Point Defect)

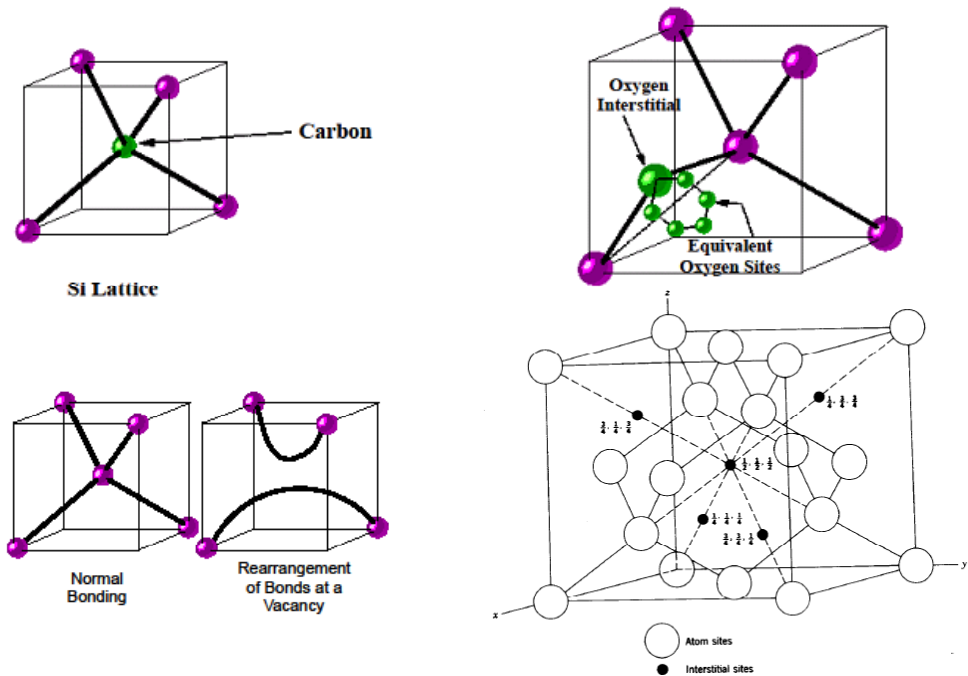
- ✓ جاهای خالی (Vacancy) : اتم سیلیسیوم به دلیل وجود تنش از جای اصلی خود خارج شود.
- ✓ مکان میانی (Interstitial) : اتم سیلیسیوم یا اتم ناخالصی در مکان میانی شبکه بلوری قرار گیرد.
- ✓ نقص نقطه‌ای (V,I) در ابعاد اتمی خواهد بود.

Illustration of the Defects



- ✓ نقص شاتکی: جای خالی اتم سیلیسیوم
- ✓ نقص فرنکل: مجموعه اتم جابجا شده و جای خالی آن
- ✓ ناخالصی به جای اتم سیلیسیوم هم نقص محسوب می‌شود.

فصل دوم : نقص نقطه‌ای (Point Defect)



مکان‌های میانی در ساختار شبکه الماسی (Diamond lattice)

S. Atabakhsh

45

فصل دوم : نقص خطی یا جابجا شدگی (Dislocation)

✓ نقص خطی آرایه‌ای تک بعدی از نقص‌های نقطه‌ای در شبکه است که نتیجه آن ایجاد نقص هندسی در ساختار شبکه است.

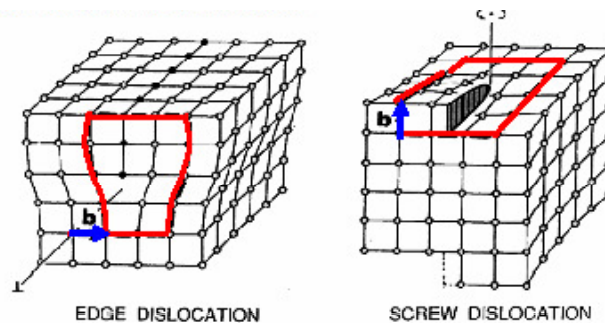
✓ در واقع برخی صفحات در بلور کامل نبوده و مرز بین آنها خطوط لبه‌دار (Edge) و یا چرخشی (Skrew) تشکیل می‌دهند.

✓ این نقص‌ها به دلیل تنش (فشار و کشش) یا گرا دیان دمایی به وجود می‌آیند.

✓ دو نوع نابجایی

۱. نابجایی لبه‌ای (Edge Dislocation)

۲. نابجایی پیچشی (Skrew Dislocation)



S. Atabakhsh

46

فصل دوم : نقص خطی یا جابجا شدگی (Dislocation)

✓ دو نوع نابجایی

۱. نابجایی لبه‌ای (Edge Dislocation)

۲. نابجایی پیچشی (Screw Dislocation)

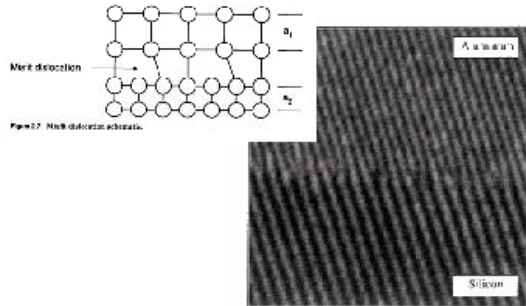
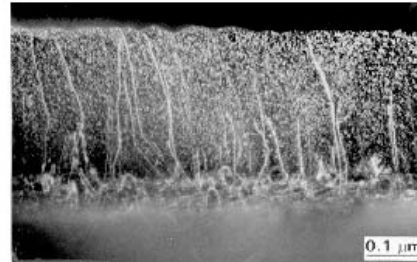


Figure 28: A TEM comparable to the schematic of Figure 27 that shows the (111) planes of aluminum metal-facially overgrown on silicon and the (111) planes of the silicon substrate.

Georgia Tech



The term, "threading", describes specific cases in which the dislocation "threads" through a grown layer (i.e. starts at or near the substrate and ends on the surface).

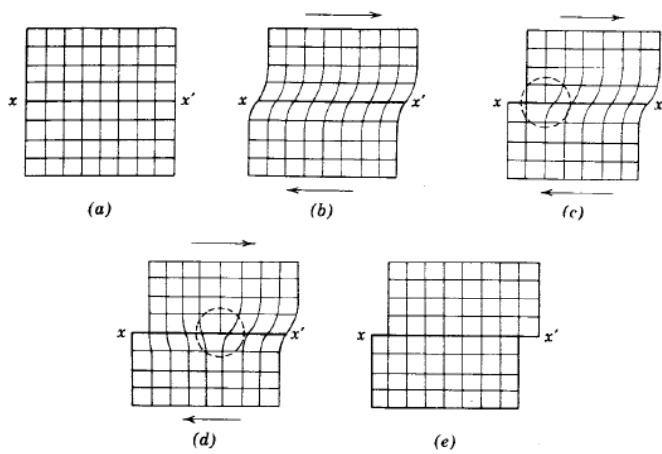
ECE 6450 - Dr. Alan Doolittle

S. Atabakhsh

47

فصل دوم : نقص خطی یا جابجا شدگی (Dislocation)

نابجایی لبه‌ای (Edge Dislocation)



✓ هنگامی که یک نیم صفحه اضافی از اتم‌ها در شبکه قرار داده شده باشد، نابجایی لبه‌ای رخ داده است.

✓ این نوع نابجایی با اعمال یک نیروی شکافنده در امتداد یک وجه کریستال موازی با یک صفحه کریستالی اصلی، ایجاد می‌شود.

✓ وقتی که این نیرو از حد کشسانی بیشتر شود، نیمه بالایی کریستال سرخورده و حرکت می‌کند.

✓ سطحی که در امتداد آن این لغزش رخ می‌دهد، سطح لغزان (Slip Plane) نامیده می‌شود.

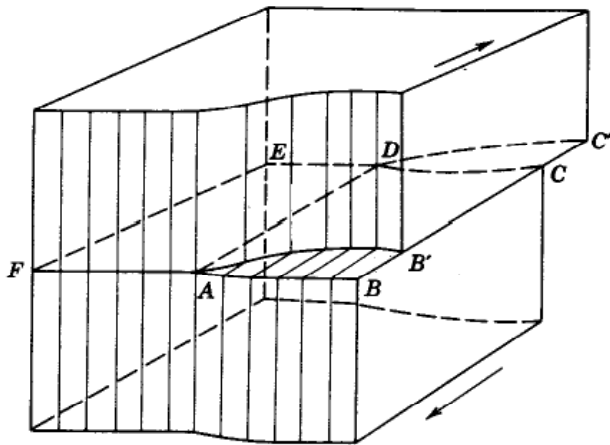
حرکت کریستال در امتداد یک سطح لغزان

S. Atabakhsh

48

فصل دوم : نقص خطی یا جابجا شدگی (Dislocation)

نابجایی پیچشی (Screw Dislocation)



✓ هنگامی که کریستال تحت تاثیر یک تنش برشی قرار می‌گیرد، نابجایی پیچشی رخ می‌دهد.

✓ برای درک بهتر این نوع نابجایی، صفحه ABCD در دو طرف ساختار کریستال را در نظر بگیرید، اگر دو نیمه کریستال این صفحه را تحت تاثیر نیروهای برش دهنده‌ای که به قدر کافی بزرگ هستند تا بتوانند این دو قسمت را با اندازه یک فاصله اتمی از هم جدا کنند، قرار دهیم، نابجایی پیچشی رخ داده است.

S. Atabakhsh

49

فصل دوم : نقص حجمی (Volume Defect)

✓ حد حلالیت : بیشترین مقداری از یک ماده است که می‌توان در ماده دیگر حل کرد.

✓ اگر تراکم ناخالصی از حد حلالیت بیشتر شود، ماده اشباع شده و ناخالصی رسوب (ته نشین) می‌شود.

✓ حد حلالیت با افزایش دما افزایش می‌یابد.

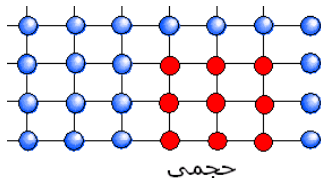
✓ در روش CZ ناخالصی در دمای بالا وارد ماده می‌شود، و سپس دمای ماده کاهش می‌یابد، در نتیجه ناخالصی داخل ماده به صورت نواحی مجزا، رسوب می‌کند.

✓ چون فاصله اتمی ناخالصی از سیلیسیوم متفاوت است، در شبکه، تنش (Stress) فشاری یا کششی ایجاد می‌کند.

✓ در ماده برای رسیدن به پایداری (دفع تنش) نابجایی پیچشی یا لبه‌ای تولید می‌شود.

✓ حجم ماده رسوب شده به درجه فوق اشباع (Super Saturation) ماده بستگی دارد.

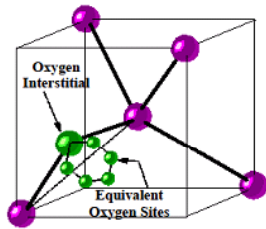
$$\frac{\text{حلالیت در دمای } T_2}{\text{حلالیت در دمای } T_1} = \text{درجه فوق اشباع}$$



S. Atabakhsh

50

فصل دوم : نقص حجمی اکسیژن در سیلیسیوم



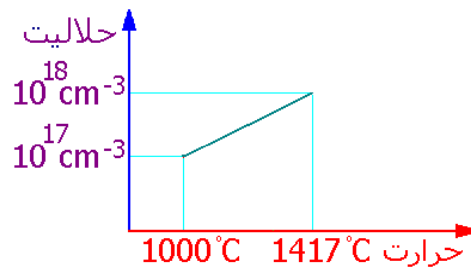
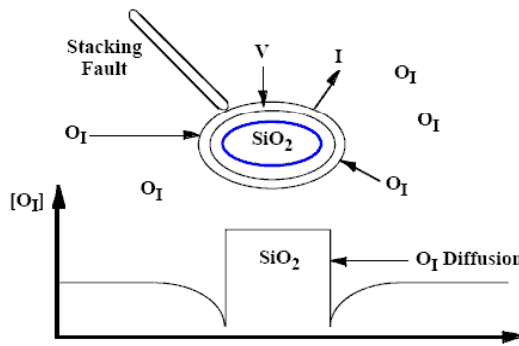
✓ اکسیژن در مکان میانی قرار می‌گیرد.

✓ با سیلیسیوم واکنش داده و به صورت SiO_2 رسوب می‌کند.

✓ SiO_2 شروع به جوانه‌زنی می‌کند و جوانه‌ها رشد می‌کنند.

✓ اتم‌های اکسیژن تمایل دارند به این نواحی بپیوندند. (Stacking Fault)

✓ SiO_2 چگالی کمتری داشته و ایجاد تنش در ساختار می‌کند.



S. Atabakhsh

51

فصل دوم : مدل سازی نقص‌های نقطه‌ای (V,I)

✓ نقص‌های نقطه‌ای درون ماده حرکت می‌کنند.

✓ علم ترمودینامیک بیان می‌کند، انرژی آزاد یک سیستم

$F=U-S.T$ باید به حداقل برسد.

✓ U : انرژی درونی کل سیستم (شبکه بلوری از اتم‌ها)

✓ S : آنترپی که بیانگر تمایل ماده به بی‌نظمی (تولید نقص) است.

✓ انرژی بلورهای واقعی چون به مرزهایی محدود هستند، حداقل نیست و تولید نقص خواهند کرد تا تفاوت انرژی را جبران کنند.

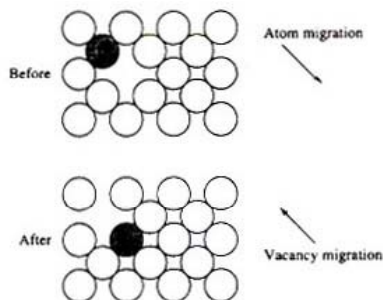
✓ نام‌گذاری:

✓ Si_I : اتم سیلیکن در غیر مکان جانشینی (در مکان میانی)

✓ Si_V : غیاب اتم سیلیکن در مکان جانشینی (جای خالی)

✓ C_{10}^* : تراکم در حال تعادل نقص‌های میانی

✓ C_{V0}^* : تراکم در حال تعادل جاهای خالی



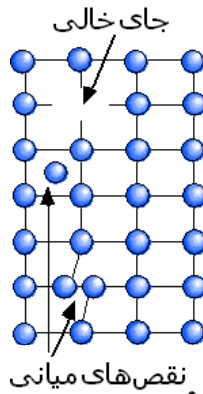
S. Atabakhsh

52

فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

این تراکمها از رابطه زیر به دست می آیند:

$$C_{I_0}^*, C_{V_0}^* = N_S \cdot \exp\left(\frac{S^f}{K}\right) \cdot \exp\left(-\frac{H^f}{KT}\right)$$



✓*: بیانگر حالت تعادل

✓0: بیانگر حالت خنثی

✓I: بیانگر مکان میانی

✓V: بیانگر جای خالی

✓ N_S : تعداد اتمها در مکانهای شبکه

✓ H^f : آنتالپی شبکه

✓ S^f : آنتروپی شبکه

✓نقص های نقطه ای دارای تراز انرژی گسسته هستند.

✓تراکم نقص های نقطه ای به دما بستگی دارد.

فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

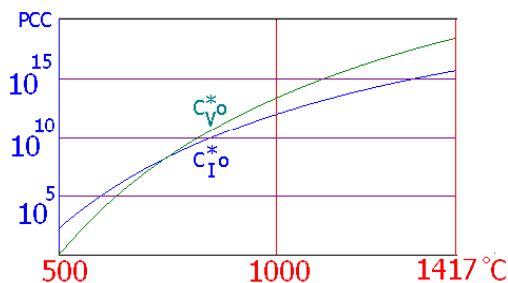
✓در حالت تعادل برای این نقصها می توان نوشت:

$$C_{I_0}^* = 10^{27} \cdot \exp\left(-\frac{3.8\text{ev}}{KT}\right)$$

$$C_{V_0}^* = 9 \times 10^{23} \cdot \exp\left(-\frac{2.6\text{ev}}{KT}\right)$$

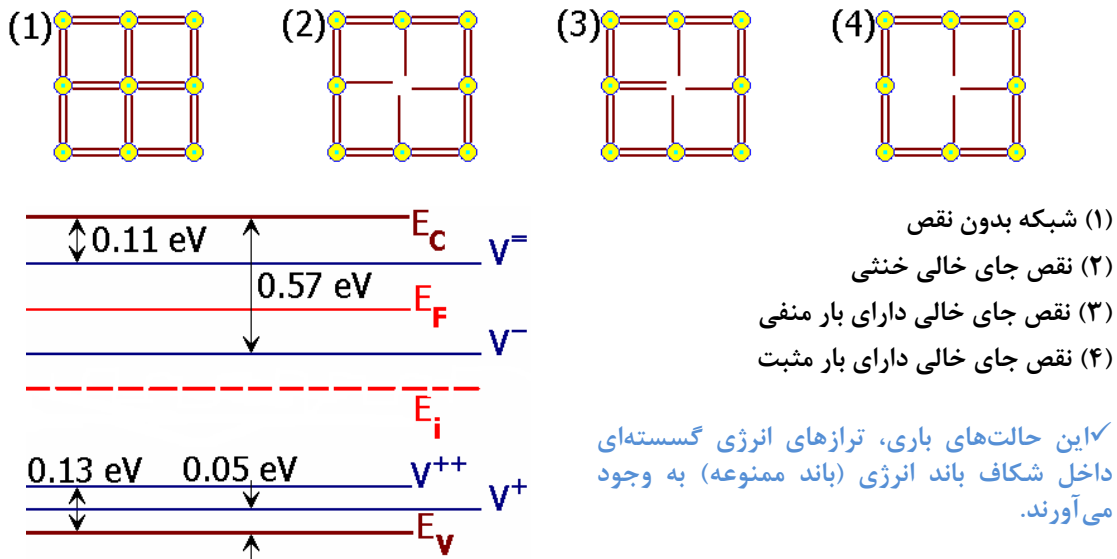
✓در دمای اتاق $C_{V_0}^*$ و $C_{I_0}^*$ تقریباً باهم برابر می شوند و با افزایش دما افزایش می یابند.

✓نقص های خنثی می توانند بار مثبت و یا منفی به دست آورده و باردار شوند.



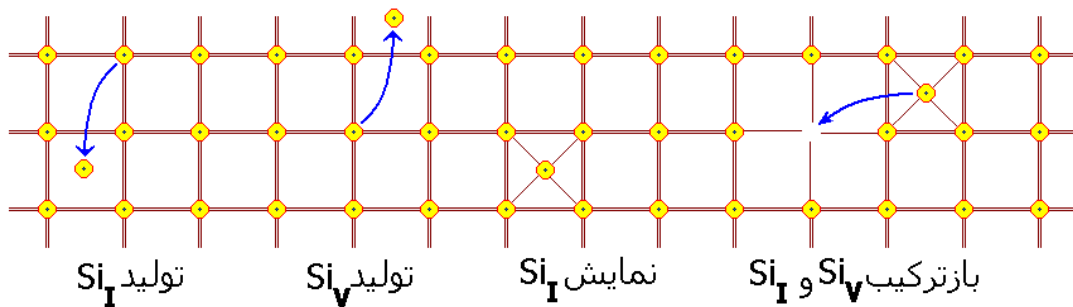
فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

✓ سه نوع حالت باری برای نقص های جای خالی می تواند به وجود آید:



فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

✓ نحوه تولید نقص نقطه ای:



فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

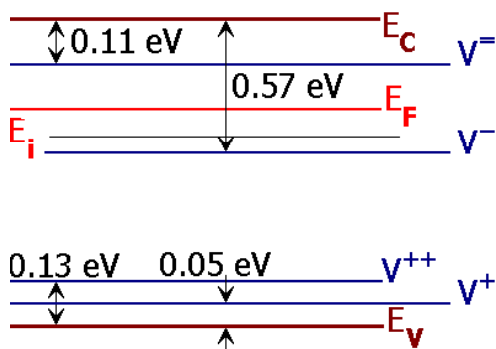
- ✓ مکان تراز انرژی مربوط به نقص به دما بستگی ندارد.
- ✓ مکان تراز فرمی به دما و تراکم ناخالصی بستگی دارد.
- ✓ روابط مشابهی برای نقص های باردار میانی وجود دارد.

$$C_{V^+}^* = C_{V_0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{V^+} - E_f}{KT}\right)$$

$$C_{V^{++}}^* = C_{V_0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{V^+} + E_{V^{++}} - 2E_f}{KT}\right)$$

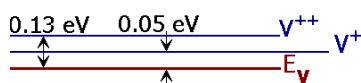
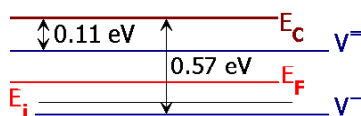
$$C_{V^-}^* = C_{V_0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{V^-} - E_f}{KT}\right)$$

$$C_{V^{--}}^* = C_{V_0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{V^-} + E_{V^{--}} - 2E_f}{KT}\right)$$



فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

- ✓ تراز انرژی مربوط به نقص می تواند پر یا خالی باشد.
- ✓ تقریب صفر مطلق: ترازهای انرژی بالای Ef خالی و ترازهای انرژی پایین Ef پر هستند.
- ✓ تراز شبه دهنده: تراز است که اگر پر باشد (توسط الکترون اشغال شده باشد) خنثی بوده و اگر خالی باشد، دارای بار مثبت است.
- ✓ تراز شبه پذیرنده: تراز است که اگر پر باشد (توسط الکترون اشغال شده باشد) دارای بار منفی بوده و اگر خالی باشد، خنثی است.



✓ در نیمه هادی نوع N، ترازهای انرژی دهنده V^+ و V^{++} (مربوط به نقص های جای خالی دهنده) در دمای اتاق زیر E_f قرار داشته و همیشه پر هستند در نتیجه بدون بار خواهند بود.

✓ تراز پذیرنده V^- بالای E_f بوده و خالی و بدون بار است.

✓ تراز پذیرنده V^- زیر E_f بوده و دارای بار منفی است. بنابراین در نیمه هادی نوع N، تراز انرژی V^- اهمیت دارد.

فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

✓مثال: پیوند شکل زیر در دمای 1000°C قرار دارد. تراکم در حالت تعادل نقص ها را محاسبه کنید.

n	$5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
p	$1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

$$E_G(T) = 1.16 - \frac{7.02 \times T^2}{1108 + T} = 0.778 \text{ eV}$$

$$n_i(T) = N_C \cdot N_V \cdot \exp\left(\frac{-E_g}{2KT}\right) = 7.14 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$C_{i0}^* = 10^{27} \cdot \exp\left(-\frac{3.8 \text{ eV}}{KT}\right) = 9.13 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$$

$$C_{v0}^* = 9 \times 10^{23} \cdot \exp\left(-\frac{2.6 \text{ eV}}{KT}\right) = 4.16 \times 10^{13}$$

✓در دمای 1000°C نیمه هادی نوع p ذاتی خواهد شد و E_f برای آن در وسط باند انرژی قرار می گیرد.
($E_{fp} \approx E_C - E_i = 0.778/2 = 0.389 \text{ eV}$)

فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

✓در نیمه هادی نوع n داریم:

$$n = n_i + N_D \approx N_D$$

$$E_{fn} - E_i = (KT) \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) = 0.21 \text{ eV}$$

$$E_{fn} = 0.21 + 0.389 = 0.599 \text{ eV}$$

$$C_{v^+}^* = C_{v0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{v^+} - E_f}{KT}\right)$$

$$C_{v^{++}}^* = C_{v0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{v^+} + E_{v^{++}} - 2E_f}{KT}\right)$$

$$C_{v^-}^* = C_{v0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{v^-} - E_f}{KT}\right)$$

$$C_{v^{--}}^* = C_{v0}^* \cdot \exp\left(\frac{E_{v^-} + E_{v^{--}} - 2E_f}{KT}\right)$$

	تراکم در ناحیه P	تراکم در ناحیه N
ناخالصی	$1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
n_i	$7.14 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$7.14 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
V^0	$4.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	$4.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
V^-	$2.37 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$1.61 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
V^+	$1.85 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	$8.50 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
V^{++}	$2.08 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$	$3.06 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$
V^{+-}	$1.94 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	$4.23 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$
I^0	$9.13 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	$9.13 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$
I^-	$4.02 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	$2.73 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
I^+	$8.32 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$	$1.48 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$

فصل دوم : مدل سازی نقص های نقطه ای (V,I)

✓ در ناحیه P هم V^+ و هم V^{++} زیر تراز فرمی بوده و خنثی هستند. (مشابه تراز دهنده ای هستند که الکترون نداده و به عنوان دهنده عمل نکرده اند.)

✓ تراز V^- هم شبیه تراز پذیرنده ای است که الکترونی نپذیرفته و به عنوان پذیرنده عمل نکرده است.

✓ ترازهای انرژی V^- و V^0 حائز اهمیت هستند.



مراجع

[1] J. D. Plummer, M. D. Deal, P. D. Griffin, "Silicon VLSI Technology, fundamentals, practice and modeling", Prentice Hall, 2000.

[2] G. S. May, S. M. Sze, "Fundamentals of Semiconductor Fabrication", Wiley, 2003.

[3] D. K. SCHRODER, "SEMICONDUCTOR MATERIAL AND DEVICE CHARACTERIZATION", Wiley, 3rd edition, 2006.

[3] N. H. E. Weste, D. M. Harris, "CMOS VLSI Design, A Circuits and Systems Perspective", Pearson, 4th edition, 2011.