

M/ELE.MIC
2013/03

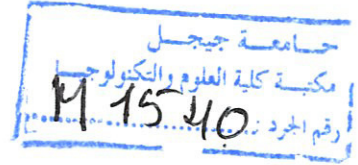
02102

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de Jijel

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'électronique



Présenté en vue de l'obtention du diplôme de Master en électronique

Option Micro-électronique

THEME

***Etude et modélisation de la diffusion
bidimensionnelle des dopants usuels dans le
silicium à affinité microélectronique***

Réalisé par :

Djawida FERKHA

Proposé par :

Dr. Hachemi BOURIDAH

Année universitaire 2012 / 2013

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de Jijel

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'électronique



Présenté en vue de l'obtention du diplôme de Master en électronique

Option Micro-électronique

THEME

*Etude et modélisation de la diffusion
bidimensionnelle des dopants usuels dans le
silicium à affinité microélectronique*

Réalisé par :

Djawida FERKHA

Proposé par :

Dr. Hachemi BOURIDAH

Année universitaire 2012 / 2013

REMERCIEMENT

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé dans le cadre du projet de fin d'études en vue de l'obtention du diplôme de master en électronique pour le thème

« Étude et modélisation de la diffusion bidimensionnelle des dopants usuels dans le silicium à affinité microélectronique ».

*Je remercie **Dieu** tout puissant de m'avoir donné la volonté et la patience Pour terminer ce travail.*

Je suis infiniment redevable à mon directeur de ce travail :

*Monsieur **BOURIDAH**, lui mon honoré en acceptant de diriger ce travail malgré vos multiples préoccupations. Je vous remercie pour son aide précieuse, pour sa disponibilité, son écoute et sa grande compréhension. Je vous prion de trouver ici, l'expression de ma reconnaissance et ma profond respect.*

*Mes sincères remerciements à Monsieur **REMMOUCHE**, pour son aide, son soutien, sa compétence, ses encouragements et sa compréhension.*

Je tiens à lui exprimer ma profond gratitude et reconnaissance.

Je tiens à remercier mes membres de jury pour l'honneur qu'ils m'ont accordé en jugeant le présent travail.

Mes remerciements vont également à tous ceux qui ont contribué de près ou de lion pour le bon déroulement de ce travail.

DEDICACE

DEDICACE

A ma mère

Les mots me manquent pour vous qualifier, tout ce que j'aurais à dire ne saurait, exprimer à fond tout le sacrifice et l'endurance que vous avez dû subir pour nous élever.

Je vous demande pardon et vos bénédictions nuits et jours. Je ne saurais jamais vous remercier assez. Seul Dieu peut vous gratifier de tout ce que vous avez fait pour nous

A mon père

Vous avez fait d'énormes sacrifices pour vos enfants et vous n'avez jamais cessé de nous prodiguer des conseils pour le droit chemin, votre disponibilité, et votre respect pour les autres me servent d'exemples.

A mes chères grands-mères et mon cher grand-père.

*A mes sœurs **Miada, Safia et Soad.***

*A mes frères **Salahelldinne et Bilal.***

A toutes ma famille.

A toutes mes amies surtout :

***Amani** qui est toujours présente avec ses aides.*

A tous mes enseignants

A tous mes collègues de promotion d'Electronique 2013.

Merci pour tout.

Djawida

Résumé

Résumé

Ce travail, concerne l'analyse d'une étape particulière des procédés de fabrication mis en œuvre en micro-électronique : la diffusion des dopants.

Notre étude s'intéresse à la modélisation bidimensionnelle de la diffusion dans le polysilicium, basée sur la résolution numérique de l'équation générale de la diffusion par la méthode des différences finies. Nous avons étudié la diffusion du bore et de l'arsenic dans une couche mince de polysilicium fortement dopé par implantation ionique, et plus précisément nous avons montré l'importance de la diffusion en profondeur par rapport à la diffusion latérale. Les simulations ont été réalisées en fonction de la dose implantée, de l'énergie d'implantation, et des paramètres du recuit thermique (température et durée).

Sommaire

Sommaire

Introduction général..... 1

Chapitre I : Etat de l'art sur le silicium

I-Introduction.....4

II- Structure cristalline.....4

 II.1.1- Etat monocristallin4

 II.1.2- Etat polycristallin5

 II.1.3- Etat amorphe5

III- Propriétés du matériau.....5

 III.1- Silicium monocristallin.....5

 III. 2- Silicium amorphe6

 III.3-Silicium polycristallin.....7

IV-Structure de bandes :8

V-Les procédés de fabrication de couche minces de silicium9

 V.1- Dépôt chimique en phase vapeur (CVD) :9

 V.2- Dépôt physique en phase vapeur (PVD) :11

VI- Techniques de dopage.....11

 VI.1- La diffusion thermique11

 VI.2- le dopage in situ12

 VI.3- Le dopage par implantation ionique12

 V. 3.1-L'implanteur13

 VI.3.2- Dose implantée.....13

 VI.3.3- Profil de concentration13

V- Procédés de diffusion.....16

VI-Conclusion.....17

Chapitre II : Etude théorique de la diffusion dans le silicium

I-Introduction 19
II-Equation de diffusion19
 II.1-Equations de Fick 19
 II.2-Force de transport..... 21
III-Coefficient de diffusion dans un cristal 22
IV-Défauts ponctuels dans le silicium 27
V- Les mécanismes de diffusion..... 29
 V-1.Mécanisme lacunaire..... 29
 V-2 Mécanisme interstitiel 30
 V-2-1 Mécanisme de « Kick-out » 31
VI-Conclusion..... 33

Chapitre III : Modélisation bidimensionnelle de la diffusion

I-Introduction.....34
II-Modélisation bidimensionnelle de la diffusion..... 34
III-Résolution de l'équation générale de la diffusion 36
 III.1-La méthode des différences finies 36
 III.1.1-Discretisation du domaine Ω et construction du maillage 37
 III.1.2-Transformation de l'équation aux dérivées partielles 38
 III.1.3- Ecriture de l'équation de différences finies aux points du maillage : 39
IV-Algorithmes de résolution : 41
V- Conclusion 43

Chapitre IV : Résultats et interprétation

I-Introduction	44
II-Résultats de simulation	44
II-1-Condition initiale	45
II-1-1-Cas du Bore.....	45
II.1.2- Cas de l'Arsenic.....	46
II.2- Etude de l'influence des paramètres technologiques sur les profils de diffusion	48
II.2.1- Effet du temps de recuit.....	48
II.2.2-Effet de la température	51
II.2.3-Effet de l'énergie d'implantation.....	54
II.2.4-Effet de la dose implantée	59
II.3-Variation des coefficients de diffusion en fonction de la température.....	62
II.3.1-Cas du Bore	63
II.3.2-Cas de l'arsenic.....	64
II.4-Etude de la diffusion latérale et verticale	65
II.4.1-Profils de concentration	65
II.4.2- Coefficient de diffusion	67
III-Conclusion	69
Conclusion générale.....	70

Introduction

général

Introduction générale

L'un des enjeux les plus importants que doit relever l'industrie de la micro-électronique actuellement est sans doute la diminution ininterrompue de la taille des dispositifs. Cette course à la miniaturisation ne consiste pas uniquement à réduire les dimensions géométriques des composants électroniques, il faut dans le même temps diminuer l'épaisseur des couches minces en silicium, la profondeur des extensions source / drain dans un transistor et faire évoluer de façon optimale les autres paramètres tels que le profil de dopage, la tension de seuil..., à des échelles aussi petites [1].

Le dopage des semi-conducteurs constitue une étape clef dans la fabrication des composants de la microélectronique. Ce procédé va permettre de conférer à un substrat (le plus souvent du silicium) pur dit intrinsèque des propriétés électriques. Il consiste à intégrer dans le réseau cristallin du silicium une concentration d'atomes de la colonne III (pour les donneurs) ou de la colonne V (pour les accepteurs) du tableau périodique. Parmi le dopage l'introduction du dopant et le recuit d'activation. La première technique consiste à accélérer des impuretés dopantes pour les incorporer dans le silicium à une dose et une profondeur précises. Le recuit d'activation permet de réparer les dommages engendrés par l'implantation ionique et ainsi de restaurer le caractère cristallin du substrat. De plus, le recuit a pour objectif d'activer le dopant en le positionnant sur des sites cristallins du silicium. Ces phases mettent en jeu principalement un phénomène physique appelé la diffusion.

La diffusion des dopants dans le silicium est un sujet de mieux en mieux compris et il existe actuellement de nombreux modèles décrivant plus ou moins bien la physique de ce problème. Cependant, à chaque nouvelle génération de composant, les plus anciens et plus simples de ces modèles ne peuvent plus décrire parfaitement l'ensemble des interactions régissant la diffusion.

On trouve parmi les dopants les plus utilisés en micro-électronique, le bore et l'arsenic puis le phosphore et l'indium, qui sont stables lorsqu'ils se trouvent en position substitutionnelle. Leurs mécanismes de diffusion lorsqu'ils sont présents conjointement sont peu connus. En ce qui concerne l'étude de la diffusion, en général, les informations connues

sont obtenues à partir de données unidimensionnelles en profondeur. Or la diffusion latérale a de plus en plus d'importance car elle s'effectue différemment du fait de l'existence des contraintes et des interfaces. Le manque de données concernant la répartition des dopants en deux dimensions limite la compréhension de certains phénomènes de diffusion [1].

En effet le silicium polycristallin est un matériau dans l'industrie des circuits intégrés, il est habituellement déposé comme couches minces et présente une structure caractérisée par une juxtaposition de grains, séparés les uns des autres par les joints de grains. Ces derniers étant le siège de nombreux défauts et constituent des "canaux" pour la diffusion.

L'objectif de ce travail est la modélisation de la diffusion bidimensionnelle des dopants dans le silicium par la méthode des différences finies.

L'organisation du mémoire comprendra quatre parties :

Le premier chapitre est consacré à l'état de l'art sur le silicium. Nous présentons une description générale de différentes propriétés structurales et morphologique de silicium, et les différents procédés de fabrication des couches de silicium polycristallin. Les différentes techniques de dopage à font aussi l'objet de ce chapitre.

Le deuxième chapitre s'intéresse à la théorie classique de la diffusion dans le silicium au travers des équations de la diffusion. Nous montrons que cette diffusion est liée à la présence de défauts ponctuels dans le silicium. Nous présenterons donc les propriétés nécessaires et essentielles concernant ce type de défauts.

Le troisième chapitre est consacré à la modélisation bidimensionnelle des profils de diffusion en deux dimensions par la méthode des différences finies. Nous présenterons les différentes équations que supporte le modèle de diffusion.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les différents résultats de la simulation de la diffusion bidimensionnelle du bore et de l'arsenic dans une couche mince de silicium polycristallin. Les résultats sont discutés en fonction d'une variété de paramètre physiques et expérimentaux.

Nous terminerons cette étude par une conclusion générale présentant l'ensemble des résultats importants obtenus.

Chapitre I

Etat de l'art sur le silicium

I-Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter les trois différentes formes du silicium : monocristallin, polycristallin et amorphe. Nous présentons, les méthodes de formation des couches minces et les différentes techniques de dopage.

II- Structure cristalline

Un solide cristallin est constitué par la répétition périodique dans les trois dimensions de l'espace d'un motif atomique ou moléculaire, appelé maille. Un cristal est donc constitué d'un ensemble de points régulièrement disposés. Cet ensemble est appelé réseau cristallin et les points le constituant sont appelés nœuds du réseau.

A cause de la périodicité du réseau, toute paire de nœuds (O, M) définit un vecteur :

$$\overrightarrow{OM} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$$

m_1, m_2, m_3 : étant des entiers relatifs.

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$: Sont trois vecteurs de translation fondamentaux qui lient deux bases proches voisines dans les trois directions, on distingue :

II.1.1- Etat monocristallin

Dans l'état monocristallin l'arrangement atomique se répète d'une manière régulière dans les trois directions de l'espace à travers tout le solide. Cette répétition est identique en termes de composition, orientation et position des atomes, les solides cristallisés peuvent former des monocristaux, si la périodicité est ininterrompue dans tout le volume [2,3]. Un monocristal à seule orientation.

II.1.2- Etat polycristallin

On parle d'un état polycristallin s'il existe une périodicité locale et que le solide est composé d'un ensemble de grains périodicité cristallins de taille à peu près uniforme [2]. Dans le polycristallin l'arrangement comporte plusieurs orientations se juxtaposent les unes aux autres.

II.1.3- Etat amorphe

Toute structure de la matière qui n'est pas cristalline est dite "amorphe". Dans cet état on perd la périodicité, l'état amorphe se caractérise par un certain degré d'ordre uniquement au voisinage immédiat d'un point donné (généralement les premiers atomes voisins). Il y a peu ou pas d'ordre sur une longueur comparable à la distance entre deux points identiques de l'état cristallin.

III- Propriétés du matériau

Le silicium est le semi-conducteur le plus utilisé en microélectronique, il étant de la famille des cristaux covalents comme tout l'élément de la colonne (VI) de la classification périodique des matériaux leur énergie de liaison est : fort dans le cas de carbone diamant, nulle pour un métal et intermédiaire dans le silicium [3,4]. Il est donc un sujet très vaste c'est pourquoi nous nous limitons exclusivement à donner un aperçu d'une famille donnée de matériau sous le nom de silicium en couche mince et qui inclut spécifiquement le silicium amorphe et le silicium polycristallin .Ce dernier joue un rôle de plus en plus important dans la technologie avancée des circuits intégrés.

III.1- Silicium monocristallin

Dans un cristal idéal de silicium les atomes sont arrangés selon la structure diamant avec une distance inter-atomique de $d = 2.35 \text{ \AA}$. La liaison entre les atomes les plus proches est de caractère covalent [5]. A ce type de liaison correspondent des états électroniques, qui sont couplés entre eux dans le potentiel périodique dans le cristal, conduisant à des bandes d'énergie permise et interdite pour les électrons. La bande interdite appelée « gap » séparant la bande permise supérieure appelée bande de valence (BV) (pleine au zéro absolu), de la bande permise au-dessus, appelée bande de conduction (BC) (vide au zéro absolu) est égale à $E_g = 1.12 \text{ eV}$ à température ambiante. L'importance du gap, E_g , détermine l'échange des porteurs de charge entre les différentes bandes d'énergie et ainsi les propriétés électroniques du semi-conducteur.

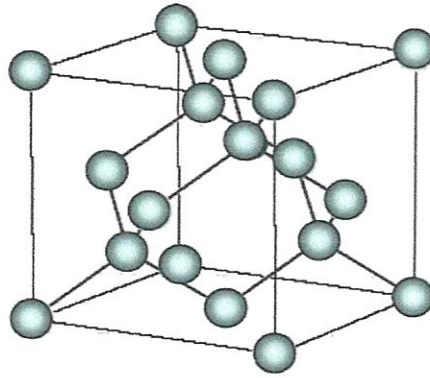


Figure I.1 Maille cubique conventionnelle de la structure diamant [5]

III. 2- Silicium amorphe

Dans le silicium amorphe les liaisons chimiques satisfont la plupart du temps la configuration tétraédrique où un atome de silicium est lié à quatre atomes voisins, la distance entre cet atome et ses voisins est caractéristique de la liaison covalente Si-Si et vaut 0.23nm. Cette organisation locale est très semblable à celle rencontrée dans le silicium cristallin. On dit pour cette raison que dans le silicium amorphe, l'ordre local est préservé si l'organisation tétraédrique précédente était parfaitement respectée par tous les atomes on retrouverait nécessairement l'ordre cristallin pour l'ensemble du matériau. En réalité, les angles sont légèrement différents de ceux rencontrés dans un tétraèdre régulier, on dit que l'on a affaire à des tétraèdres distordus, cette distorsion présente un caractère aléatoire, fonction de l'atome choisi pour centre. La conséquence est que la distance entre un atome et son deuxième proche voisin présente une dispersion appréciable. Cette dispersion augmente avec la distance de sorte que lorsque la distance à un atome donné dépasse quatre ou cinq distances interatomiques, les positions inter-atomiques relatives à cet atome sont aléatoirement distribuées. On peut caractériser ce désordre en décrivant l'organisation de manière statistique. Une conséquence du désordre est qu'il y a nécessairement des atomes de silicium qui ne sont pas tétracoordonnés, on dit d'un tel atome qu'il a une liaison non satisfaite ou encore une liaison pendante (figure I.3). Cette liaison pendante a une très grande influence sur les propriétés électroniques du silicium amorphe. Elle est caractérisée par la présence d'un électron célibataire de l'atome concerné. Un second électron peut aisément s'y fixer, pour former une paire d'électrons, le centre est alors chargé négativement. Les liaisons pendantes constituent de ce fait des pièges à électrons très efficaces. L'électron célibataire peut aussi éventuellement quitter l'atome, laissant un centre chargé positivement.

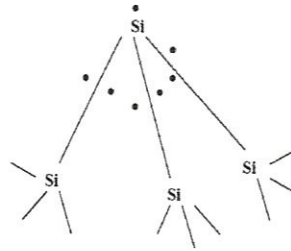


Figure I.2 Le silicium amorphe [5]

III.3-Silicium polycristallin

On peut imaginer les structures intermédiaires entre ces deux états extrêmes. En particulier, il peut exister des phases constituées de l'état cristallin et de l'état amorphe, c'est ainsi que l'on définit le silicium polycristallin, ce matériau est constitué de grains monocristallins séparés entre eux par des zones désordonnées et riches en défauts cristallins, que l'on peut assimiler à du silicium amorphe et que l'on nomme joints de grains. Chacun de ces deux composants de silicium polycristallin, grains et joints de grains, possède des caractéristiques propres que nous rappelons brièvement :

- Le grain peut être défini par sa taille et par sa qualité cristalline.
- Les caractéristiques essentielles du joint de grain sont ses dimensions c'est-à-dire son épaisseur, et également sa densité de défauts.

Parler d'un type unique du silicium polycristallin serait donc une erreur et c'est pourquoi il est toujours nécessaire de définir le silicium polycristallin selon certains critères que l'on peut résumer comme ceci :

- Texture et taille de grains.
- Densité de défauts intragranulaires et intergranulaires.
- Rapport du volume cristallin sur le volume amorphe.
- Porosité.

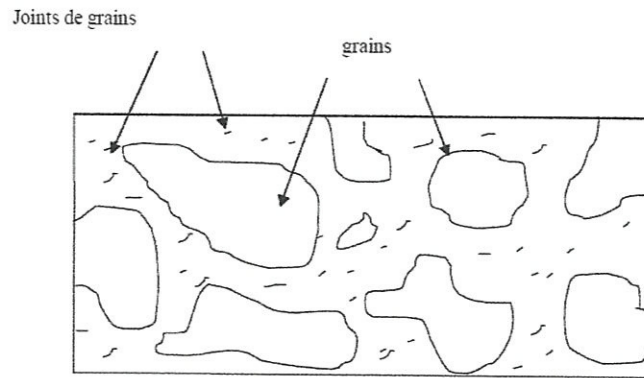


Figure I.3 Structure du silicium polycristallin [6].

IV-Structure de bandes :

On utilise des relations analytiques de dispersion en énergie $E(k)$ pour décrire les extrema (Vallées) de la structure de bandes du Semi-conducteur susceptibles d'être occupés par des porteurs[7]. Pour le silicium, la structure de bandes $E(k)$ est représentée sur la figure (I-4), en fonction de k dans les deux directions choisies $\{\langle 111 \rangle, \langle 100 \rangle\}$.

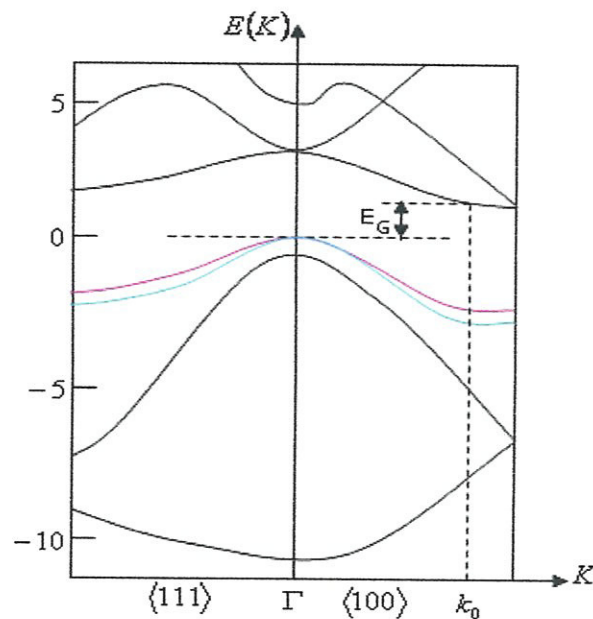


Figure I-4 : Diagramme de bandes d'énergie du silicium. Dans la direction $\langle 111 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ [8].

V-Les procédés de fabrication de couche minces de silicium

Il existe un grand nombre de méthodes de dépôt de silicium en couche mince, telles que la pulvérisation cathodique, l'évaporation sous vide ainsi que les techniques du type CVD (Chemical Vapor Deposition : décomposition chimique en phase vapeur) qui sont certainement les plus utilisées.

Le terme CVD signifie toute technique de dépôt de film à partir de précurseurs en phase gazeuse, où le film résulte de la décomposition des substances en phase gazeuse, via des réactions chimiques.

La CVD offre donc une large gamme de possibilités. Non seulement le type des gaz initiaux peut être très différent, mais également les paramètres comme la pression ou la température dans le réacteur peuvent changer. En outre, plusieurs géométries de réacteur sont utilisées : des fours tubulaires, qui peuvent contenir beaucoup de substrats ou des petits réacteurs sphériques à substrat unique. Les gaz les plus couramment utilisés sont le silane (SiH_4), le disilane (Si_2H_6) ou le dichlorosilane (SiH_2Cl_2) pour ne mentionner que les plus importants. La décomposition chimique du gaz réactif peut être obtenue soit par voie thermique, soit par formation d'un plasma.

Les techniques CVD comprennent : l'APCVD (Atmospheric Pressure CVD : CVD à pression atmosphérique), la PECVD (Plasma Enhanced CVD : CVD assistée par plasma) et la LPCVD (Low Pressure CVD : CVD à basse pression).

Les couches de silicium, obtenues par APCVD, sont généralement inhomogènes d'une plaquette à une autre ou sur une même plaquette, ainsi le nombre de plaquettes pouvant être traitées simultanément est restreint, ce qui augmente le coût du procédé.

La technique PECVD quant à elle, a été développée pour le dépôt des films de silicium polycristallin avec des grandes vitesses de dépôts, mais présente le même problème de limitation du nombre de plaquettes utilisables pendant le même cycle de dépôts [5].

V.1- Dépôt chimique en phase vapeur (CVD) :

Le procédé de dépôt chimique en phase vapeur consiste à mettre un composé volatil du matériau à déposer en contact soit avec un autre gaz au voisinage de la surface à recouvrir, soit avec la surface elle-même. On provoque alors une ou plusieurs réactions chimiques,

chimiques, donnant au moins un produit solide. Les autres produits de réaction doivent être gazeux afin d'être éliminés hors du réacteur. Les dépôts se font à pression variable, mais il faut systématiquement un apport énergétique pour favoriser ces réactions. La réaction est activée par la température du substrat qui doit être chauffé à une température en rapport avec le matériau déposé [8,9].

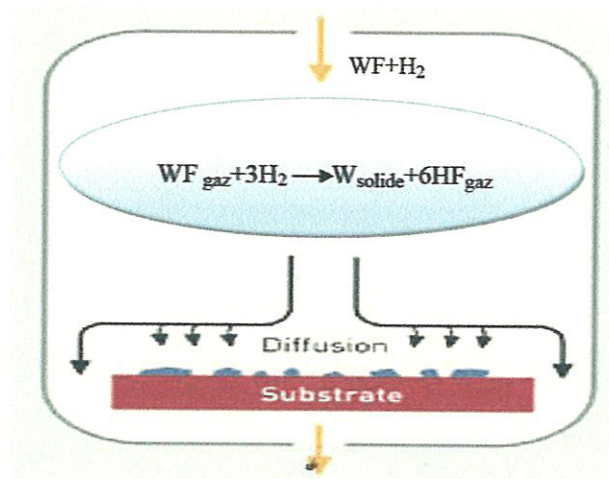


Figure I.5: Schéma de principe de dépôt chimique en phase vapeur (CVD) [10].

La réaction chimique peut être également activée à l'aide d'un plasma. Cette méthode s'appelle "CVD plasma" ou PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition). Dans ce cas, il y a création en plus des particules énergétiques [10].

La fabrication des couches minces métalliques grâce à ces méthodes s'est particulièrement développée ces dernières années. Les avantages de ce procédé sont les suivants : il est facile d'obtenir un assez grand nombre d'éléments ou de composés chimiques.

On obtient une bonne qualité des couches, un excellent recouvrement des marches, et une bonne adaptabilité dans une chaîne de production. En plus, elle offre la possibilité de réaliser des dépôts sélectifs [5], ce qui permet d'éliminer une étape de gravure et de planarisation de la surface. Les inconvénients sont les suivants : les films sont peu denses, ils sont souvent contaminés par des gaz très réactifs issus de la réaction chimique (hydrogène, fluor, chlore...), tous les matériaux ne peuvent être déposés par CVD, et le système de dépôt est une mise en oeuvre relativement lourde.

V.2- Dépôt physique en phase vapeur (PVD) :

Le développement de la technologie sous vide a progressé considérablement pendant les trois dernières décennies et cela a permis le développement des techniques de dépôt sous vide telles que les techniques de base de la PVD sont : l'évaporation et la pulvérisation sous toutes ses formes. Ces techniques de dépôt permettent l'obtention d'une large variété de matériaux à température de dépôt relativement basse ($< 500\text{ °C}$), par exemple [11].

- Films métalliques (Al, Cu, Ti...etc.) et leurs alliages.
- Films des métaux réfractaires (Mo, Ta, W,...etc.).
- Films d'oxydes (ZrO_2 , SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_3 ,...etc.).
- Films de nitrures, de siliciures, de carbures, de borures et de fluorures.

Ces techniques ont été largement utilisées pour l'obtention des revêtements réfractaires résistants à l'érosion et à l'usure, comme par exemple WC [12-13].

Le dépôt physique en phase vapeur (PVD) présente beaucoup d'avantages par rapport au dépôt chimique en phase vapeur, par exemple les films sont denses, le processus est facile à contrôler et il n'y a pas de pollution [14].

VI- Techniques de dopage

Les propriétés électriques d'une région peuvent être modifiées par rapport à celle du substrat par l'introduction de dopant en concentration supérieure à celle du substrat. Pour ce faire, trois méthodes sont possibles :

VI.1- La diffusion thermique

Utilisée uniquement pour les matériaux qui présentent une bonne stabilité thermique comme le silicium, par exemple : le procédé consiste à placer le substrat dans un four porté à haute température de l'ordre de 1000 °C pendant un temps de l'ordre de l'heure. Dans le four circule un gaz contenant l'élément dopant. Le dopant en contact avec le substrat diffuse de la surface vers le volume du substrat sur une profondeur de quelques microns. Un deuxième recuit thermique dans une atmosphère exempte des éléments de dopage est effectué pour faire pénétrer plus profondément les dopants et les redistribuer de façon uniforme. Au cours de ce deuxième recuit thermique, une couche d'oxyde se forme à la surface du substrat. Comme les

particules de dopants peuvent se déplacer dans toutes les directions, une diffusion latérale se produit en même temps que la diffusion verticale. La diffusion latérale se produit sur une distance égale à 70 à 80 % de la diffusion verticale, X_j , comme le montre la figure (I-6). Lors de la conception du recuit il faut de cette diffusion latérale et prévoir un espacement suffisant entre deux régions dopées voisines afin d'éviter qu'elles soient en contact direct.

VI.2- le dopage in situ

Le dopage « in situ » s'effectue pendant la phase de formation de la couche de silicium elle-même. Le procédé qui permet de réaliser cela, consiste à faire introduire dans le four de dépôt deux gaz vecteur, l'un véhiculant l'atome dopant. Ce mode de dopage permet d'obtenir une distribution homogène des impuretés en ne nécessitant qu'une seule étape technologique. Par cette technique, on réalise les dépôts de silicium fortement dopés bore en ajoutant au silane (SiH_4) ou au disilane (Si_2H_6) du trichlorure de bore (BCl_3) ou du diborane (B_2H_6) [15,16].

VI.3- Le dopage par implantation ionique

Cette technique consiste à introduire des atomes ionisés projectiles avec suffisamment d'énergie pour pénétrer dans l'échantillon cible, cette pénétration ne s'effectue que dans des régions de surface. Les énergies des atomes ionisés peuvent être dans la gamme 3 à 500 keV. En fonction de la nature du matériau implanté, de la nature de l'ion accéléré et de l'énergie d'accélération la profondeur moyenne de pénétration peut aller de 100 Å à 1 µm. En effet, un calcul approximatif montre qu'une centaine d'électrons-volts est perdue par couche atomique (Environ 2,5 eV). L'implantation ionique a pour avantages de permettre un contrôle précis de la quantité totale d'atomes implantés (dose d'implantation) et du profil de concentration du dopant. Cette précision permet en particulier l'ajustement de la valeur du gain en courant d'un transistor bipolaire ou l'ajustement de la tension de seuil d'un transistor. Notons que ce procédé s'effectue sous vide et donc en atmosphère sèche. Le profil de l'impureté implantée et sa concentration peuvent être réglés séparément : le profil par variation de l'énergie des ions et la concentration, par variation de la dose de bombardement ionique. Ce mode de dopage offre la possibilité de pouvoir balayer une gamme très étendue de niveaux de dopage, pouvant aller de 10^{15} à 10^{21} cm⁻³. Le bombardement d'un matériau par des atomes crée des dommages dans la structure cristalline implantée. Il y a donc nécessité de restituer la

cristallinité du matériau, ceci est réalisé par un recuit thermique. Ce recuit thermique permet aussi une redistribution des atomes dopants et donc une modification du profil de dopage par phénomène de diffusion. Notons que ce recuit permet l'activation du dopant implanté (passage en site substitutionnel) [17].

V. 3.1-L'implanteur

L'implanteur est en pratique un accélérateur d'ions. Il est composé des parties suivantes :

génération des ions à partir d'une source solide, liquide ou gazeuse dans un plasma excité à 25kV, sélection des ions par champ magnétique effectuant le tri par le rapport masse sur charge, accélération des ions à l'énergie d'implantation souhaitée.

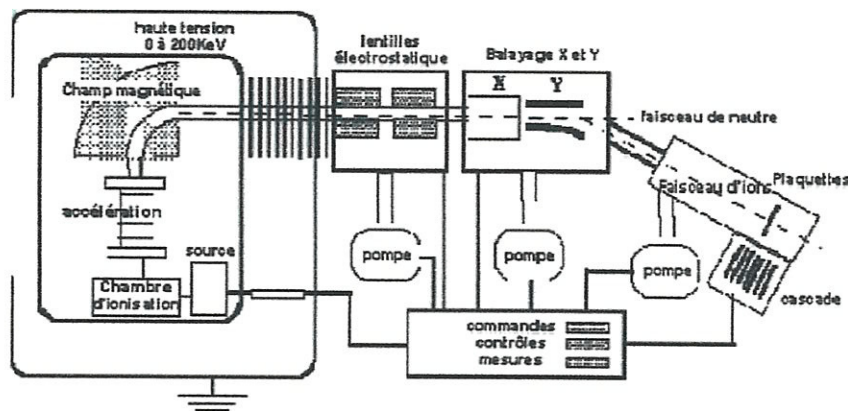


Figure I.6 Schéma simplifié d'un implanteur ionique d'énergie d'accélération maximale de 200keV [17].

VI.3.2- Dose implantée

Celle-ci se mesure en nombre d'atomes par unité de surface. Cette mesure est possible car le flux d'ions atteignant la surface de l'échantillon correspond à un courant. L'intégration du courant pour une surface bien définie sur la durée de l'implantation permet de mesurer la dose. On l'appelle en général la dose implantée.

VI.3.3- Profil de concentration

Les ions incidents vont perdre leur énergie par chocs successifs avec les atomes du réseau cristallin. Ceci explique d'une part, la dispersion des trajectoires et d'autre part, que l'on définisse statistiquement une profondeur moyenne de pénétration. La statistique qui convient assez bien est gaussienne.

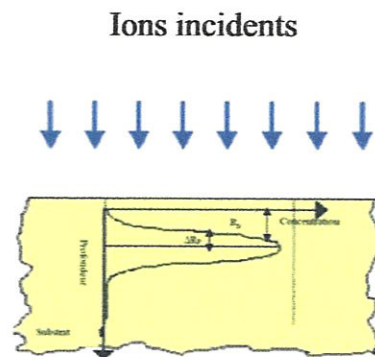


Figure I.7 : Profil de concentration en fonction de la profondeur [1]

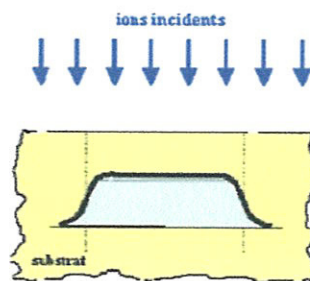


Figure I.8 : Illustration de profils latéraux après implantation

Nous définissons ainsi paramètres suivants :

- R_p : valeur moyenne de la projection du parcours de l'ion sur la direction du faisceau (projected range).
- ΔR_p : l'écart type de R_p qui décrit la largeur de la distribution.
- ΔR : l'écart moyen latéral (perpendiculaire à la direction d'implantation).

Notons que si la direction d'incidence est parallèle à un plan réticulaire du réseau, les atomes peuvent effectuer un parcours de pénétration plus important sans choc. Cet effet s'appelle la canalisation. Pour éviter ce phénomène qui est en général mal contrôlé, on crée un angle d'incidence de l'ordre de 7° pour le Silicium.

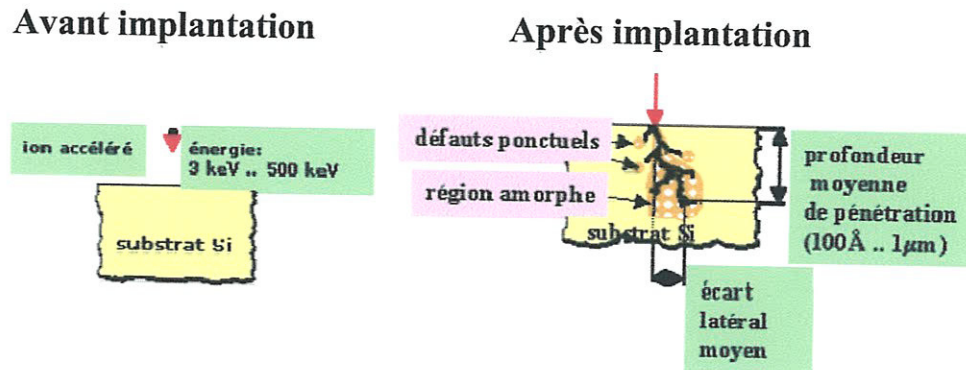


Figure I.9 : Évolution d'un ion à travers le cristal [3].

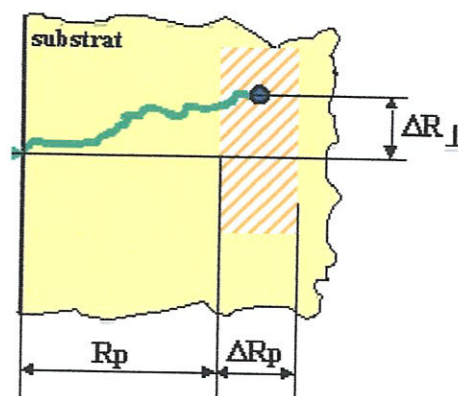


Figure I.10 : Statistiquement la profondeur moyenne de pénétration est R_p [17].

Statistiquement le profil obtenu est gaussien en première approximation.

$$N(x) = N(R_p) \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right)$$

$$\text{Avec} \quad N(R_p) = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi R_p^2}} \approx \frac{0.4\phi}{\Delta R_p}$$

Φ Étant la dose implantée. $\Phi = \int_0^{\infty} N(X)dX$.

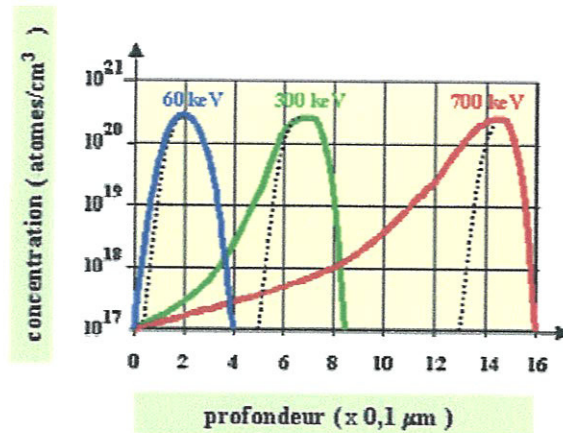


Figure I.11 Distribution des atomes de Bore implantés dans du Silicium [17]

V- Procédés de diffusion

Les Procédés de diffusion vont dépendre de la nature des sources de dopants. Il existe trois grands types de sources qui permettent de fournir les éléments que l'on doit faire pénétrer dans les substrats. Ces sources qui permettent de fournir les éléments dopants que l'on doit faire pénétrer dans les substrats. Ces sources sont gazeuses, liquides et solides.

type	élément	Non du composant	formule	Etat	Réactions de diffusion
N	Antimoine	Trioxyle d'Antimoine	Sb_2O_3	Solide	
	Arsenic	Trioxyle d'Arsenic	As_2O_3	Solide	$2AsH_3 + 3O_2 \rightarrow As_2O_3 + 3H_2O$
		Arsine	AsH_3	Gaz	
	Phosphore	Oxychlorur de phosphore	$POCl_3$	Liquide	$4POCl_3 + 3O_2 \rightarrow 2P_2O_3 + 6Cl_2$
		Pentoxyle de phosphore	P_2O_5	Liquide	$2PH_3 + 4O_2 \rightarrow P_2O_5 + 3H_2O$
Phosphine		PH_3	Gaz		
P	Bore	Tribromide do Bore	Bb_3	Liquide	$4BBr_3 + 3O_2 \rightarrow 2Br_2O_3 + 6Br_2$
		Trioxyle du Bore	B_2O_3	Solide	$2AsH_3 + 3O_2 \rightarrow B_2O_3 + 3H_2O$
		Diborane	B_2H_6	Gaz	
		Tribromide du Bore	BCl_3	Gaz	$BCl_3 + 3H_2 \rightarrow 2B + 6HCl$
		Bore nitride	Bn	Solide	

Tableau I-1 : principale source de dopant [18]

VI-Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté, des généralités concernant le silicium et ses structures, les procédés de fabrication des films minces, ainsi que les différentes techniques de dopage. Une description détaillée a été consacrée pour le dopage par la technique de l'implantation ionique. Il s'est avéré que cette technique de dopage est gouvernée par une variété de paramètres physiques et technologiques.

Chapitre II

Etude théorique de la diffusion dans le silicium

I-Introduction

Les mécanismes, par lesquels diffusent les dopants dans le silicium, sont aujourd'hui bien compris. En raison des fortes énergies d'interactions entre les défauts ponctuels du silicium (auto-interstitiel et lacune) et les dopants en site substitutionnel, la diffusion de ce dopant s'effectue principalement par l'intermédiaire de la migration du complexe dopant-auto interstitiel [19] et / ou dopant-lacune [20, 21].

Ce chapitre est consacré à l'étude théorique de la diffusion des dopants dans le silicium. Nous allons, dans un premier temps, rappeler les équations générales de la diffusion à partir des équations de Fick pour les adapter à notre problème. En effet la compréhension des phénomènes de diffusion des dopants passe obligatoirement par une bonne connaissance des défauts ponctuels du silicium. On rappellera donc les structures stables de ces défauts intrinsèques présents dans le réseau cristallin du silicium et leurs caractéristiques physiques et thermodynamiques. Nous nous intéresserons ensuite aux caractéristiques particulières de chacun des principaux dopants de la micro-électronique.

II-Equation de diffusion

Considérons un élément A en solution dans une matrice cristalline (Concentration $< 1\%$). A basse température (température ambiante) l'impureté peut être considérée comme immobile. En revanche, si la température est suffisamment élevée, sous l'effet de l'agitation thermique, les atomes A sont mobiles et peuvent se déplacer à l'intérieur de la matrice. Ils obéissent alors au phénomène de diffusion : un gradient de potentiel chimique des éléments au sein de la phase entraîne un transport de matière (un déplacement des atomes A) à l'intérieur du solide dans le sens inverse du gradient.

II.1-Equations de Fick

Les équations de la diffusion sont avant tout basées sur les équations classiques établies par Fick. Même si le modèle comporte une multitude d'équations plus complexes

que ces simples équations, il faut garder à l'esprit qu'elles constituent les fondements de la description du phénomène de diffusion. L'origine de ces fondements vient de la formule de Nernst-Einstein (II-1) :

$$\vec{F}_e = -D\vec{\nabla}(C) \quad \text{II-1}$$

Le coefficient de diffusion D est la constante de proportionnalité entre le flux J d'une particule et le gradient de sa concentration C . Le flux étant généralement exprimé en atomes par centimètre carré et par seconde ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) et les concentrations en nombre d'atomes par centimètre cube (cm^{-3}), D s'exprime alors en $\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$. On pourra facilement faire l'analogie avec l'équation de la chaleur $\vec{J}_Q = -K\vec{\nabla}(T)$ ou la loi d'ohm pour le courant électrique

$\vec{J} = \sigma\vec{E} = -\sigma\vec{\nabla}(V)$. Le signe négatif traduit simplement le fait que l'impureté migre des zones de forte Concentration vers celles de plus faible concentration pour atteindre l'homogénéité des Concentrations. Il est important de remarquer que le flux est une grandeur vectorielle et donc que, dans le cas le plus général (milieu anisotrope), D est un tenseur. Néanmoins, pour les mécanismes de diffusion dans le silicium qui est un matériau à structure diamant, isotrope en l'absence de déformation, dans ce cas, le coefficient de diffusion D devient un scalaire. Nous pourrions par la suite, tout en restant dans un cas général, considérer le cas unidirectionnel pour lequel la loi de Fick se réduit à :

$$F = D \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) \quad \text{II-2}$$

Dans l'hypothèse où aucune particule n'est créée ou détruite, l'évolution temporelle de la concentration C de la particule dans le volume est égale à la divergence du flux de la particule. C'est la loi de conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} F(x, t) \quad \text{II-3}$$

En substituant l'équation II-2 dans l'équation II-3, on obtient l'équation générale de la diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) \right) \quad \text{II-4}$$

Cette équation II-4 est la seconde équation de Fick. Elle est dite parabolique dans le langage des mathématiques. Elle contient une dérivée du premier ordre en t et une dérivée réelle du deuxième ordre en x . Une conséquence de tout cela est que la solution n'est pas réversible dans le temps et n'est donc pas valable pour $t < 0$.

II.2-Force de transport

Nous venons de considérer que la force motrice de la diffusion était uniquement le gradient de concentration. En considérant le cas plus général où l'impureté est soumise à des forces motrices d'origines diverses (gradient de concentration, champ de contrainte, champ électrique, ...) et que sous l'effet de ces forces F (et de leurs interactions avec le réseau cristallin) l'impureté acquiert une vitesse stationnaire moyenne M , le flux de transport peut s'écrire :

$$F_T = C \cdot v = C.M.F \quad \text{II-5}$$

Où v est la vitesse, M est la mobilité de l'impureté. Le problème général revient donc à identifier la nature des différentes forces et à établir la relation entre force et mobilité. Le flux de concentration en dopants dans une solution non idéale (II-8) est la somme du flux d'atomes dans une solution idéale et du flux de transport :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} + C.M.F \quad \text{II-6}$$

Le premier terme traduit la contribution du gradient de concentration, alors que le deuxième, renferme la contribution de toutes les autres forces motrices.

Le cas qui nous intéresse particulièrement, est la diffusion d'une espèce chargée dans le cristal d'un semi-conducteur en présence d'un champ électrique. Dans ces conditions, la force motrice est le champ électrique E exprimé en $V.cm^{-1}$, donné par la formule classique (Équation II-9) [23] :

$$E = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{E_F^i - E_F}{q} \right) = - \frac{KT}{q} \frac{\partial}{\partial X} \left(\ln \frac{n}{n_i} \right) \quad \text{II-7}$$

Avec n représentant la concentration locale d'électrons libres, n_i la concentration locale d'électrons intrinsèques, E_{Fi} l'énergie de Fermi intrinsèque, E_F l'énergie de Fermi et q la charge électrique.

De surcroît, la vitesse des ions s'exprime en fonction de leur coefficient de diffusion dans le cristal en utilisant la relation d'Einstein défini par (II-10) :

$$M = \frac{qD}{kT} \quad \text{II-8}$$

Le flux peut donc s'écrire sous la forme (II-11) :

$$F = - \frac{\partial C}{\partial x} - DC \frac{\partial}{\partial X} \left(\ln \frac{n}{n_i} \right) = -DC \frac{\partial}{\partial X} \ln \left(C \frac{n}{n_i} \right) \quad \text{II-9}$$

Cette équation correspond à l'équation générale du flux d'un ion soumis à un gradient de concentration et à un champ électrique induit dans le cristal d'un semi-conducteur.

III-Coefficients de diffusion dans un cristal

Les coefficients de diffusion des différents dopants varient en fonction de la température. Leurs valeurs expérimentales dans le silicium intrinsèque sont présentées dans la figure II-1. On constate que suivant le dopant, les valeurs expérimentales présentent des différences de plusieurs ordres de grandeurs. Ces valeurs sont obtenues pour du silicium intrinsèque avec des défauts ponctuel neutres, recuit en atmosphère neutre et avec une légère couche d'oxyde. Dans ces conditions, on peut considérer que l'on est à l'équilibre. Cette diversité des ordres de grandeur du coefficient de diffusion reflète simplement les différents mécanismes microscopiques par lesquels un atome peut se déplacer dans le silicium. Ces mécanismes sont intimement liés à la structure atomique (réseau) du silicium et à la position d'équilibre de l'impureté dans le réseau cristallin.

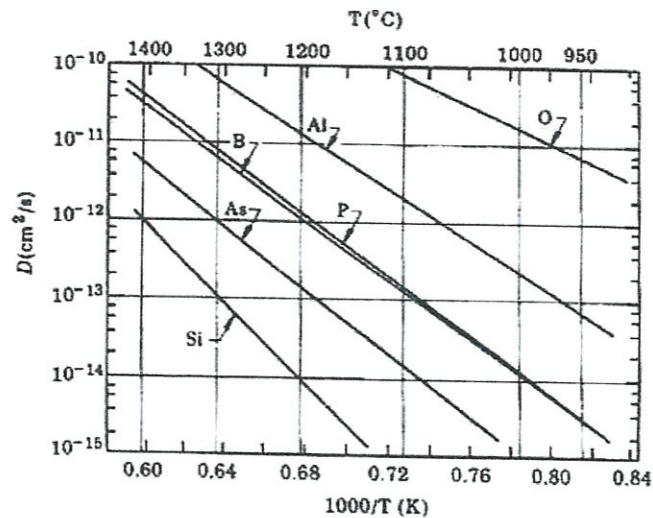


Figure II.1 : Coefficient de diffusion de plusieurs impuretés dans le silicium intrinsèque.

Comme on peut le constater sur la figure II-1, la diffusion est un phénomène active thermiquement. Les variations expérimentales (échelle macroscopique) des coefficients de diffusion avec la température peuvent en général être décrites par une loi d'Arrhenius de type (II-12) :

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right) \quad \text{II-10}$$

T est la température absolue (en Kelvin) et k est la constante de Boltzmann. Le paramètre ΔG s'appelle la différence d'énergie d'activation de la diffusion. Elle correspond à l'enthalpie libre de Gibbs. Le transport des atomes dans un cristal se fait grâce à la présence de défauts ponctuels dans le réseau atomique de ce cristal. Le défaut ponctuel est une perturbation du réseau cristallin de taille proche de celle d'un atome. Lorsqu'un tel défaut est introduit dans un cristal supposé parfait, l'énergie interne H du système est augmentée en raison de l'énergie de formation du défaut. De plus, l'introduction de ce défaut induit une augmentation de l'entropie de configuration S du système, car cette perturbation peut être placée en divers lieux et de diverses façons dans le cristal [24].

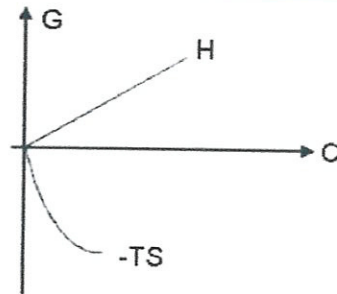


Figure II.2 : Représentation schématique de la variation d'enthalpie libre (G) du système en fonction de la concentration de défauts (C) introduit dans le cristal.

La variation d'enthalpie libre est donnée par la formule suivante (II-13) :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad \text{II-11}$$

Avec H l'enthalpie, T la température et S l'entropie. La présence de défauts ponctuels dans le réseau permet de minimiser l'énergie du cristal jusqu'à une concentration critique pour laquelle l'augmentation de l'énergie interne n'est plus compensée par celle de l'entropie. La concentration de défauts joue un rôle essentiel dans la diffusion des dopants. Les défauts servent de « véhicule » au dopant pour la diffusion. Dans un cristal parfait les atomes ne peuvent pas bouger. On s'attend donc à ce que le coefficient de diffusion dépende du nombre de ces défauts. La figure I-3 montre les deux principaux mécanismes de diffusion. Ils seront le mécanisme lacunaire, figure II-3a, l'atome se déplace en sautant sur les sites vacants tandis que pour le mécanisme interstitiel, figure II-3b, l'atome se déplace de site interstitiel en site interstitiel.

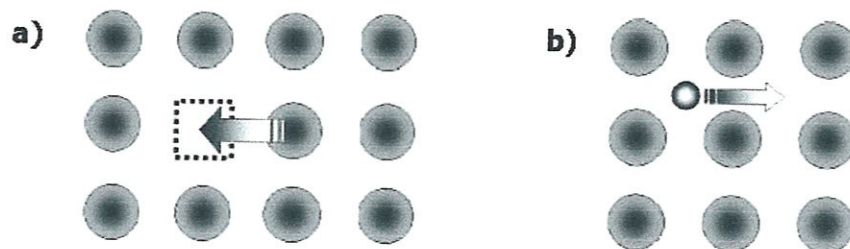


Figure II-3 : Mécanismes de diffusion a) lacunaire et b) interstitiel.

A l'échelle microscopique ou atomique, lorsqu'un défaut migre d'un site d'énergie minimum s_1 vers un autre site s_2 équivalent, il doit franchir la barrière énergétique notée ΔG_m sur la figure II-14. Sachant que l'enthalpie libre est la somme de l'enthalpie de migration ΔG_m et de l'enthalpie de formation ΔG_f , l'enthalpie libre de Gibbs (G) du cristal est minimale lorsque l'on se situe sur un site stable (d'énergie minimum), s_1 ou s_2 (situation d'équilibre thermodynamique). A cause de l'agitation thermique, l'atome vibre avec une fréquence ν_0 , proche de la fréquence de Debye du cristal. Ce déplacement s'accompagne obligatoirement d'une déformation du réseau cristallin, et donc d'une augmentation de G . A cause de l'agitation thermique, la particule peut franchir la barrière de potentiel ΔG_m qui représente la différence d'enthalpie libre de Gibbs (de migration) du cristal entre sa valeur au point col et celle à l'équilibre. La figure II-4 illustre, en une dimension, ce passage en représentant la variation de l'enthalpie libre de Gibbs G en fonction de la position du défaut dans le réseau :

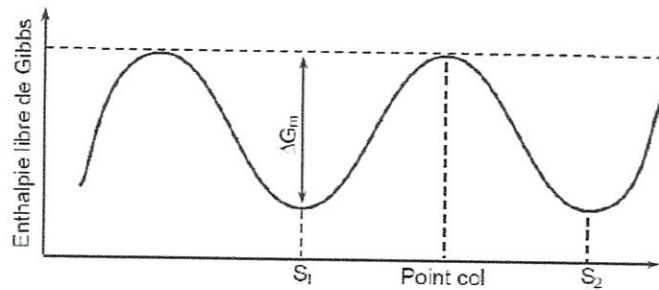


Figure II-4 : Schéma illustrant la variation de l'énergie du cristal en fonction de la position d'une particule [1].

Pour un mécanisme atomique donné, l'énergie d'activation, ainsi que le terme pré exponentiel D_0 , peuvent être reliés aux paramètres physiques décrivant le saut élémentaire. Il faut tout d'abord, indépendamment du mécanisme mis en jeu, établir la relation existant entre le coefficient de diffusion (à l'échelle macroscopique) et la fréquence de saut (à l'échelle microscopique). Il est évident que, quel que soit le mécanisme élémentaire, un atome ne peut se déplacer dans un cristal que par une succession de sauts élémentaires. Si ces sauts ont lieu d'une façon aléatoire (chaque saut étant indépendant du saut précédent), on peut montrer que,

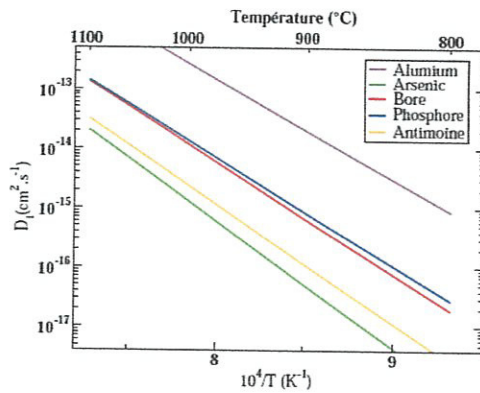
dans un cristal, le coefficient de diffusion peut s'exprimer de façon générale par l'équation II-15 :

$$D = g a^2 \nu C \tag{II-12}$$

Les variations expérimentales des coefficients de diffusion avec la température comme on peut le constater sur la figure II-5 peuvent mettre sous la forme d'une relation d'Arrhenius:

$$D_i = D_{i0} \exp\left(\frac{Q_a}{kT}\right) \tag{II-13}$$

T est la température absolue (en Kelvin) et k est la constante de Boltzmann. Le paramètre Q_a s'appelle l'énergie d'activation de la diffusion.



Dopant	$D_i(\text{Cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$	Ref
B	$7.87 \exp\left(-\frac{3.75\text{eV}}{kT}\right)$	[25]
As	$68.6 \exp\left(-\frac{4.23\text{eV}}{kT}\right)$	[1]
P	$2.53 \exp\left(-\frac{3.61\text{eV}}{kT}\right)$	[25]
Sb	$12.9 \exp\left(-\frac{3.98\text{eV}}{kT}\right)$	[26]
Al	$4.73 \exp\left(-\frac{3.35\text{eV}}{kT}\right)$	[27]

Figure II-5 Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés en microélectronique [1].

L'espèce diffusante saute d'un site atomique stable à un autre avec une fréquence ν . Cette fréquence ν peut s'écrire sous la forme (II-14) quand la place est libre [28]:

$$\nu = \nu_0 \exp\left(-\frac{Q_a}{kT}\right) \tag{II-14}$$

IV-Défauts ponctuels dans le silicium

Le silicium est le semi-conducteur le plus utilisé en microélectronique. Les substrats de silicium sont monocristallins et principalement orientés {100}. Le silicium possède une structure cubique diamant avec un paramètre de maille égal à environ 357 pm. Sa densité atomique est de 5.10^{22} at.cm⁻³ et la distance interatomique est de 235 pm. La caractéristique de ce réseau est qu'il est « ouvert », c'est-à-dire avec une faible densité atomique. Les liaisons silicium-silicium sont covalentes entraînant une faible solubilité des impuretés métalliques (de l'ordre de la ppm) sauf pour les impuretés qui font des liaisons covalentes donneurs et accepteurs.

On distingue quatre types de défauts ponctuels dans les semi-conducteurs [30] :

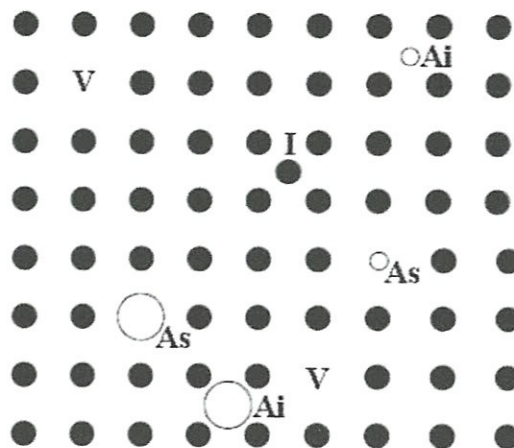


Figure II-6 : Représentation schématique des défauts ponctuels dans un réseau carré à deux dimensions (V : lacune, I : auto-interstitiel, Ai : impureté interstitielle, As : impureté substitutionnelle).

- La lacune notée V (Vacancy en anglais) correspond à un site du réseau vide, sans atome. La formation d'une lacune engendre quatre liaisons pendantes. Ces liaisons pendantes peuvent former de nouvelles liaisons avec les atomes voisins, entraînant des

déplacements atomiques des proches voisins aussi appelés relaxation du cristal. Les lacunes peuvent se déplacer sur une longue distance avant de se recombinaison avec un auto-interstitiel, ou d'être capturés par une impureté.

- L'auto-interstitiel noté I (self-interstitial en anglais) est un atome de silicium sur un site interstitiel du réseau cristallin du silicium. Les auto-interstitiels peuvent se déplacer sur une longue distance avant de se recombinaison avec une lacune, ou d'être capturés par une impureté.
- Le défaut ponctuel, noté A_i , est une impureté en site interstitiel. Il s'agit d'un atome étranger (différent du silicium), qui occupe un site interstitiel du réseau du silicium.
- Le défaut ponctuel, noté A_s , est une impureté en site substitutionnel. Il s'agit d'un atome étranger, prenant la place d'un atome de silicium sur un site du réseau du silicium.

Ces quatre défauts constituent les briques élémentaires à partir desquelles se construisent d'autres défauts ponctuels comme la bilacune, ainsi que des défauts étendus comme l'agrégat ou la boucle de dislocation. Ces défauts ont toujours revêtu une importance capitale d'un point de vue technologique et scientifique car leur concentration varie au cours des nombreux procédés de fabrication. La diffusion des dopants est intimement liée à la concentration de ces défauts ponctuels et à la formation de défauts étendus.

Les dopants usuels du silicium tels que le bore, le phosphore ou l'arsenic qui sont stables lorsqu'ils se trouvent en position substitutionnelle, ne diffusent pas seuls. Pour se déplacer, ils requièrent souvent l'assistance des défauts ponctuels, aussi bien les lacunes que les auto-interstitiels avec lesquels ils forment des paires dopants-défauts. En conséquence, le coefficient de diffusion effectif du dopant sera fonction de la concentration locale de défauts ponctuels.

V- Les mécanismes de diffusion

Les dopants sont des impuretés dont la configuration stable se situe sur des sites substitutionnels du réseau. Lorsque ces impuretés se positionnent sur un site dédié au silicium, elles deviennent actives et peuvent alors jouer leur rôle de dopant. Cependant

la diffusion de ces impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels et intrinsèques du silicium. Ces défauts sont soit les lacunes, soit des auto-interstitiels, ce qui donne lieu à deux types de mécanismes élémentaires de diffusion que nous allons maintenant présenter.

La diffusion lacunaire pure (sans couplage) n'est possible que si l'impureté se présente en position de premier voisin d'une lacune. La diffusion s'effectue par échange de sites entre l'impureté et la lacune. Dans ce cas, cette lacune peut ensuite s'éloigner de l'atome d'impureté par échange avec les atomes de silicium voisins. Le processus doit alors se renouveler pour que l'impureté dopante effectue un saut supplémentaire. La diffusion des lacunes est dans le sens opposé à la diffusion des atomes. Ce mécanisme lacunaire pur est décrit par la figure II-6 (schémas 1 et 2). Il est par exemple responsable de la diffusion des espèces substitutionnelles dans les métaux. [31].

V-1.Mécanisme lacunaire

Le mécanisme lacunaire est illustré sur la figure II-7 L'impureté ne peut diffuser que si une lacune se présente en position de premier voisin. La diffusion s'effectue par échange de sites entre l'impureté et la lacune. Dans le cas le plus général, cette lacune peut ensuite s'éloigner de l'atome d'impureté par échange avec les atomes de silicium voisins. Le processus doit alors se renouveler pour que l'impureté dopante effectue un saut supplémentaire.

Ce mécanisme lacunaire simple est par exemple responsable de la diffusion des espèces substitutionnelles dans les métaux.

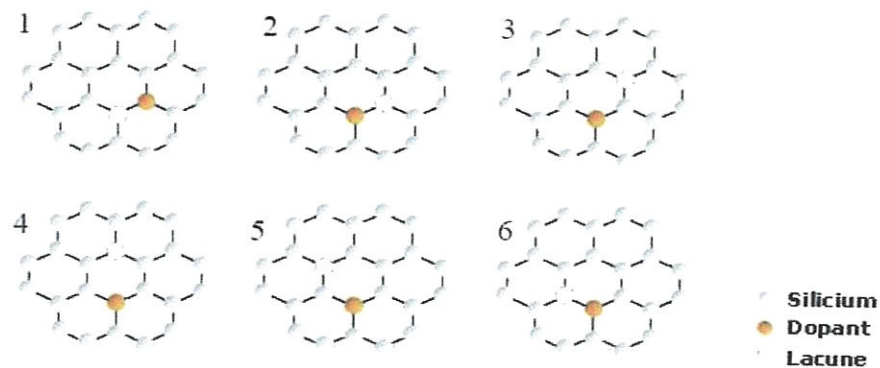


Figure II-6 : Schéma illustrant en deux dimensions la migration d'un dopant selon le mécanisme lacunaire dans le silicium [31].

Le cas du silicium est en revanche différent. La lacune va rester liée à l'impureté et c'est le complexe dopant-lacune qui va diffuser en tant que tel dans le réseau cristallin du silicium. Ce fut Masayuki Yoshida [6] puis plus tard Fair et Tsai [32] qui décrivent les premiers le mécanisme de diffusion par paire dopant-lacune.

V-2 Mécanisme interstitiel

Le second mécanisme intervenant dans la diffusion des impuretés dopantes utilise les auto-interstitiels de silicium. Nous allons décrire les deux principaux mécanismes interstitiels. Le premier est analogue à la diffusion via les lacunes présenté précédemment, c'est à dire que la paire dopant-auto-interstitiel va migrer en tant qu'entité propre pour finalement se dissocier. Le second mécanisme est un mécanisme dissociatif. Ces mécanismes se produisent pour des impuretés dont le site stable est un site substitutionnel où elles sont relativement immobiles mais avec une probabilité non négligeable d'existence en site interstitiel avec un coefficient de diffusion élevée. Un second mécanisme intervenant dans la diffusion des impuretés dopantes utilise les autointerstitiels de silicium. La diffusion peut s'effectuer au travers de la paire dopant-autointerstitiel.

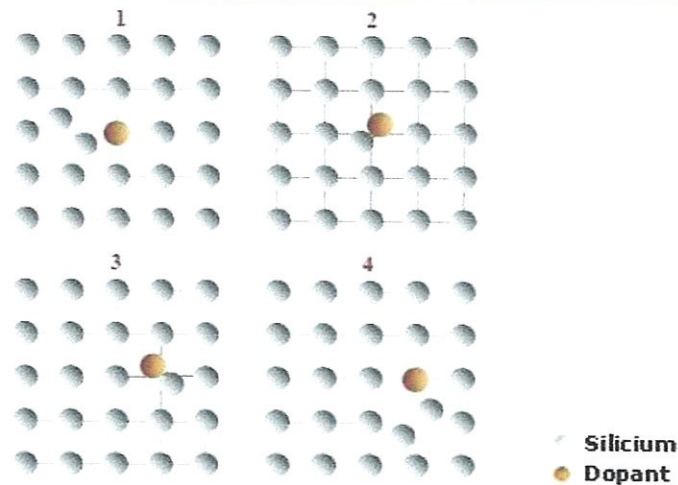


Figure II-7 : Schéma représentant la migration d'un dopant via le mécanisme interstitiel par paire [1].

La figure II-7 illustre le mécanisme de diffusion par paire assistée par les auto-interstitiels. Quand un auto-interstitiel arrive au voisinage d'une impureté substitutionnelle, il peut interagir avec elle pour former une paire dopant-auto-interstitiel. L'auto-interstitiel et l'atome de dopant se partagent alors un site du réseau. Cette paire peut ensuite diffuser par exemple en suivant la séquence de sauts décrite sur la figure I-7. La formation des paires dopant-autointerstitiel AI est gérée par la réaction IM (Interstitial Mechanism en anglais), II-19, et la dissociation de ces paires dépend de la réaction FT, II-21.

V-2-1 Mécanisme de « Kick-out »

Un autre mécanisme de diffusion qui utilise des auto-interstitiels a été proposé. Ce mécanisme est illustré sur la figure I-8. Il a été proposé par Gösele *et al.* [33,34] sous le nom de « kick-out ».

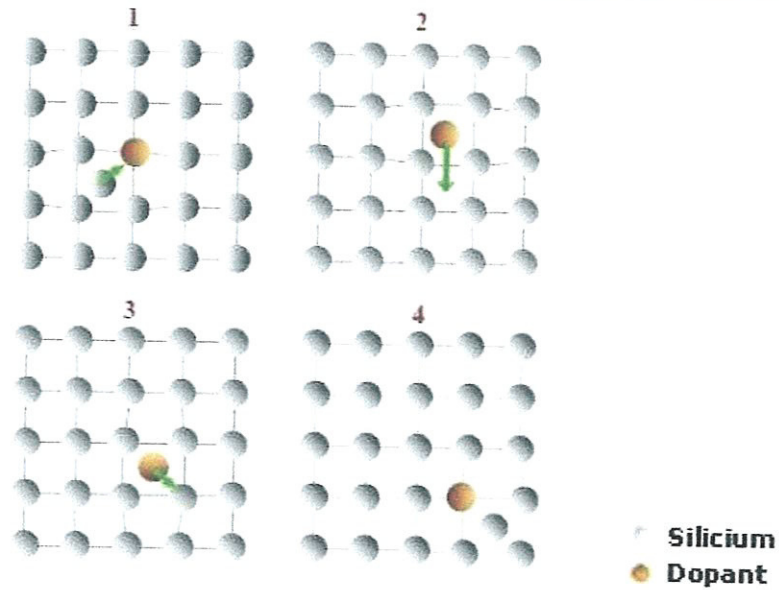


Figure I-8 : Schéma représentant la migration d'un dopant via le mécanisme de kick-out [11].

Par ce mécanisme, un auto-interstitiel éjecte une impureté substitutionnelle de son site, conduisant à la formation d'une impureté interstitielle. Cette impureté migre rapidement pour, à son tour, repasser en site substitutionnel en délogeant un atome de silicium de son site substitutionnel. Ce mécanisme dépend de la réaction KO, équation I-24. Il est par ailleurs intéressant de remarquer que le mécanisme de diffusion des paires AI se modélise en utilisant une équation de réaction équivalente à celle du Kick Out (IM et KO), en faisant l'hypothèse que l'impureté reste liée au réseau. De fait, ces deux mécanismes introduits et décrits dans des contextes différents conduisent aux mêmes équations de continuité et il n'est en général pas aisé, ni souvent pertinent, de les distinguer. Les dopants usuels du silicium qui sont stables lorsqu'ils se trouvent en position substitutionnelle, ne diffusent pas seuls [35].

Pour se déplacer, ils requièrent souvent l'assistance des défauts ponctuels, aussi bien les lacunes que les auto-interstitiels avec lesquels ils forment des paires dopants-défauts. En conséquence, le coefficient de diffusion effectif du dopant sera fonction de la concentration locale de défauts ponctuels. L'implantation ionique crée une très forte concentration de défauts dans le cristal qui apparaissent initialement sous la forme de paires lacune- interstitielle. Aussi appelées paires de Frenkel. Lorsque il de dopant actif après implantation et recuit.

VI-Conclusion

Nous avons traité au cours de ce chapitre les éléments nécessaires à la compréhension de la théorie classique de la diffusion des dopants dans le silicium. A partir des équations de Fick, nous avons défini le coefficient de diffusion dans un cristal pour bien comprendre le principe de la diffusion. Nous avons ensuite présenté les défauts ponctuels dans le silicium qui assurent la diffusion des dopants, ainsi que les mécanismes de diffusion associés à ces défauts ponctuels. Finalement, nous avons abordé le cas, où la concentration de dopants est suffisante pour engendrer de nouveaux phénomènes qui bouleversent complètement le comportement du dopant et amènent à ajouter des équations supplémentaires dans la diffusion. Tous ces mécanismes, effets et équations définis dans ce chapitre, seront utilisés dans le chapitre III et IV pour la modélisation de l'équation générale de la diffusion de l'Arsenic et du Bore.

Chapitre III

Modélisation bidimensionnelle de la diffusion

I-Introduction

La modélisation du profil de dopant consiste à prédire les effets de la phase d'implantation ionique et à simuler la distribution du dopant par recuit thermique. Ce chapitre est consacré à la résolution d'équation générale de diffusion par la méthode implicite des différences finies, dans le but de contrôler les profils de concentration. Nous évoquons le cas des forts dopages où le coefficient de diffusion varie en fonction de la concentration des dopants.

II-Modélisation bidimensionnelle de la diffusion

Les équations de Fick classiques, qui restent valables pour les cas des faibles concentrations, ne conviennent pas dans le cas des fortes concentrations. Des termes correctifs sont donc ajoutés à ces équations afin de décrire rigoureusement le phénomène de diffusion.

- L'influence du champ électrique interne créé par le gradient de la distribution des dopants ionisés à haute température.

Dans un milieu isotrope, le flux des impuretés est la somme de deux termes, l'un représente la force motrice du potentiel chimique et l'autre représente l'effet du champ électrique interne. Dans le cas des forts dopages et sous l'influence du champ électrique interne, le flux est exprimé par :

$$\vec{F}_e = -D_e [\vec{\nabla} C_e + Z_e \mu_e C_e \vec{E}] \quad \text{III-1}$$

Où μ_e est la mobilité des impuretés, Z_e est la charge de l'impureté (+1 pour les donneur, -1 pour les accepteur, 0 pour les neutres), et \vec{E} est le champ électrique interne [36].

Soient $C_j^* = \alpha C_j$.

Où, le facteur « α » représente le pourcentage d'activation de l'impureté j , avec $0 < \alpha < 1$.

L'expression du flux sous l'effet du champ électrique interne est donnée par:

$$\vec{F}_e = -D_e \left[\vec{\nabla} C_e \frac{\sum_j Z_e \vec{\nabla} C_j^*}{\sqrt{(\sum_j Z_j C_j^*)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad \text{III-2}$$

- L'augmentation de la diffusion, basée sur un mécanisme lacunaire, due au fait que la concentration des lacunes varie avec la concentration des impuretés ionisées.

$$D_e = D_a = D_{ia} \frac{[1 + \beta_a (\frac{n_i}{n})]}{(1 + \beta_a)} = D_{ia} \frac{[1 + \beta_a f_a]}{(1 + \beta_a)} \quad \text{III-3}$$

Avec :

$$D_{ia} = D_i^0 + D_i^+ \quad \text{et} \quad \beta_a = \frac{D_i^+}{D_i^0} \quad \text{III-4}$$

a représente l'indice relatif à l'impureté acceptrice, D_i^0 la diffusivité globale intrinsèque induite par les lacunes des états neutre, D_i^+ la diffusivité intrinsèque induite par les lacunes des états chargés d'une seule charge positive, n_i la concentration intrinsèque dans la structure, et n la densité extrinsèque des électrons.

Le facteur β présente le rapport de la diffusivité induite par les lacunes chargées une fois et la diffusivité globale induite par les lacunes neutres. Il contrôle la dépendance de la diffusivité globale en fonction de la concentration ionisée et de l'interaction Coulombienne entre le porteur et l'impureté ionisée.

$$f_a = p/n_i = n_i/n \quad \text{III.5}$$

f_a représente le rapport de la concentration des porteurs à la concentration intrinsèque. Afin d'obtenir un modèle bien adapté au cas des fortes concentrations de dopant, des termes correctifs ont ajoutés tels que le pourcentage d'activation du dopant.

En décrivant l'équation générale du flux (\vec{F}_e), et nous avons obtenu, pour le cas d'une seule impureté dopante dans le silicium polycristallin, l'expression suivante :

$$\frac{\delta C_e}{\delta t} = \nabla \left\{ D_{ie} \frac{(1 + \beta_{ef})}{(1 + \beta_e)} \left[\left(\mathbf{g}_e + \frac{\sum_j Z_e \vec{\nabla} C_j^*}{\sqrt{(\sum_j Z_e C_j^*)^2 + 4n_i^2}} \right) \nabla C_e \right] \right\} \quad \text{III-6}$$

L'équation III-6 est réduite dans le cas bidimensionnel à :

$$\frac{\partial}{\partial t} C = - \frac{\partial}{\partial x} \left(D(C) \frac{\partial}{\partial x} C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(C) \frac{\partial}{\partial y} C \right) \quad \text{III-7}$$

Où le coefficient effectif D_{eff} est représenté dans cette équation par :

$$D_{eff} = d(C_e) = D_{ie} \frac{(1+\beta_{ef})}{(1+\beta_e)} \left(g_e + \frac{\sum_j Z_e \bar{\nabla} C_j^*}{\sqrt{(\sum_j Z_e C_j^*)^2 + 4n_i^2}} \right) \quad \text{III-8}$$

Le coefficient de diffusion intrinsèque, D_{ie} , suit une loi d'Arrhénius, de la forme :

$$D_{iB} = D_{poly} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad \text{III-9}$$

Où D_{poly} est le coefficient de diffusion dans le polysilicium, il est toujours proportionnel au coefficient de diffusion dans le monosilicium D_{mono} [37]. Le coefficient de diffusion dans le silicium monocristallin représente l'accroissement de la diffusivité dans le polysilicium. En effet, il est bien connu que le coefficient de diffusion dans le polysilicium est beaucoup plus grand que dans le cas du monosilicium, d'un facteur de 100 à 1000, ceci étant dû à la présence des joints de grains qui constituent des « canaux » favorables à la diffusion. En remplaçant l'expression de n dans la relation (III- 5), on obtient donc :

$$f_B = \frac{2n_i}{(\sum_j Z_e C_j^*) + \sqrt{(\sum_j Z_e C_j^*)^2 + 4n_i^2}} \quad \text{III-10}$$

On obtient l'expression du flux :

$$\vec{F}_e = -D_{ie} \frac{(1+\beta_{ef})}{(1+\beta_e)} \left[g_e \bar{\nabla} C_e + \frac{\sum_j Z_e \bar{\nabla} C_j^*}{\sqrt{(\sum_j Z_e C_j^*)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad \text{III-11}$$

III-Résolution de l'équation générale de la diffusion

Il existe plusieurs méthodes numériques de résolution des problèmes mathématiques. Parmi ces méthodes, on peut citer la méthode des différences finies [37].

III.1-La méthode des différences finies

La méthode des différences finies est utilisée pour la résolution des équations différentielles ordinaires ou des équations aux dérivées partielles. Sa formulation est basée sur l'approximation locale au voisinage d'un point donné, des fonctions dérivées apparaissant dans les équations différentielles. Ces fonctions dérivées sont approchées en utilisant le développement limité de Taylor par plusieurs types de schémas aux différences finies : différences finies en avant, en arrière et centrées. La précision du résultat varie d'un schéma à un autre selon la troncature utilisée. La résolution d'un problème aux limites par la méthode des différences finies se fait selon les principales étapes suivantes [38] :

- discrétisation du domaine Ω et construction du maillage ou du grille ;
- transformer l'équation aux dérivées partielles et l'exprimer sous forme d'un schéma numérique de différences finies ;
- écrire l'équation de différences finies aux points du maillage ;
- obtenir le système d'équations algébriques discrètes suivant :
-

$$[\mathbf{K}] = \{\Phi\}\{\Phi_c\} \quad \text{III-12}$$

$\{\Phi_c\}$ est le vecteur connu donné par les conditions aux limites non homogènes.

$[\mathbf{K}]$ est la matrice des coefficients et $\{\Phi\}$ est le vecteur solution recherché en tout point du maillage.

- trouver la solution $\{\Phi\}$ en résolvant le système d'équation $[\mathbf{K}] = \{\Phi\} \{\Phi_c\}$.

III.1.1-Discrétisation du domaine Ω et construction du maillage

Le profil de diffusion des dopants dans le polysilicium est déterminé par la résolution de l'équation III-7. L'espace est subdivisé en k_1 tranches d'épaisseur Δx , et k_2 tranches d'épaisseur Δy . La diffusion s'effectue sur des petits intervalles de temps Δt [39, 40, 41].

Pour déterminer les valeurs approchées de la solution recherchée aux nœuds du grille de la figure III-4, on adopte au point (i, j) la concentration $C(i, j)$:

- $x_i = i\Delta x \quad i = 1, 2, \dots, I$
- $y_j = j\Delta y \quad j = 1, 2, \dots, J$

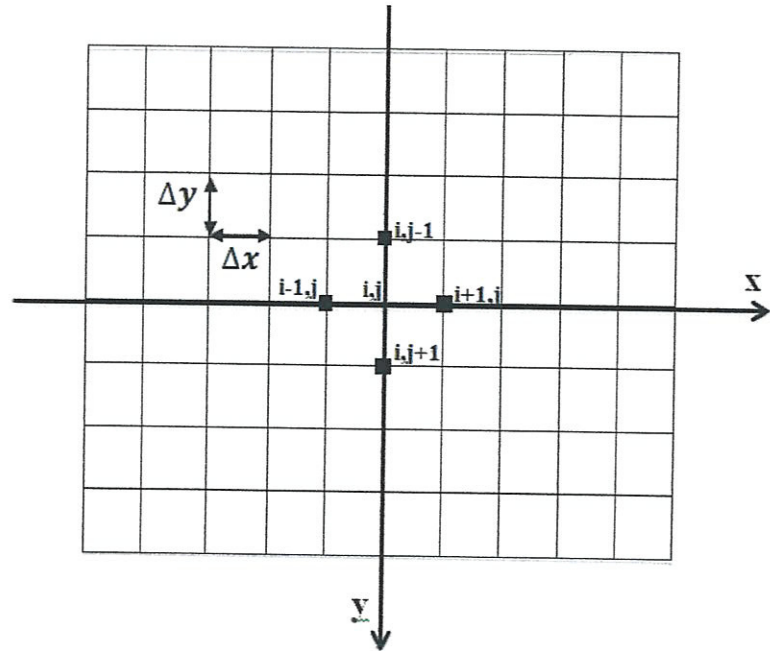


Figure III-4 : Grille de maillage

III.1.2-Transformation de l'équation aux dérivées partielles

III.2.1-Conditions initiales et conditions aux limites :

Conditions initiales :

$$C(x, y, 0) = \frac{C_0}{(\sqrt{2\pi}\Delta R_p)} \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x-L}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p}\right)}{2} \exp\left(\frac{-(y-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right)$$

III-13

Conditions aux limites : condition de Newman $\left(\frac{\partial c}{\partial} = 0\right)$ [42] :

Par l'utilisation de la méthode des différences finies :

- $C(i,j)$ à l'instant « n » correspond à $\leftrightarrow C_{i,j \rightarrow \text{la position}}^{n \rightarrow \text{temps}}$
- $D(c) \leftrightarrow D_{i,j}$

- $\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} \quad \frac{\partial c}{\partial X} \approx \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta X} ; \quad \frac{\partial c}{\partial Y} \approx \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta Y}$
- $d(c) \frac{\partial c}{\partial X} \approx D_{i+1,j} \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta X} ; \quad d(c) \frac{\partial c}{\partial Y} \approx D_{i,j+1} \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta Y}$
- $\frac{\partial}{\partial X} \left(d(c) \frac{\partial c}{\partial X} \right) \approx \frac{1}{\Delta X} \left[D_{i+1,j} \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1}}{\Delta X} - D_{i,j} \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta X} \right]$

$$\approx \frac{1}{\Delta X^2} \left[D_{i,j} C_{i-1,j}^{n+1} - (D_{i+1,j} + D_{i,j}) C_{i,j}^{n+1} + D_{i+1,j} C_{i+1,j}^{n+1} \right]$$

$$\bullet \quad \frac{\partial}{\partial Y} \left(d(c) \frac{\partial c}{\partial Y} \right) \approx \frac{1}{\Delta Y^2} [D_{i,j} C_{i,j-1}^{n+1} - (D_{i,j+1} + D_{i,j}) C_{i,j}^{n+1} + D_{i,j+1} C_{i,j+1}^{n+1}]$$

Par substitution de différentes approximations, l'équation ci-dessus devient :

$$\begin{aligned} \bullet \quad & \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j} C_{i,j-1}^{n+1} + \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j} C_{i-1,j}^{n+1} \\ & - \left[\frac{1}{\Delta Y^2} (D_{i,j} + D_{i,j}) + \frac{1}{\Delta X^2} (D_{i,j} + D_{i,j}) \right] C_{i,j}^{n+1} \\ & + \frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j} C_{i,j+1}^{n+1} + \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j} C_{i+1,j}^{n+1} \\ \bullet \quad & \frac{C_{i,j}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j} C_{i,j-1}^{n+1} - \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j} C_{i-1,j}^{n+1} \\ & - \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta Y^2} (D_{i,j} + D_{i,j}) - \frac{1}{\Delta X^2} (D_{i,j} + D_{i,j}) \right] C_{i,j}^{n+1} \\ & - \frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j} C_{i,j+1}^{n+1} - \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j} C_{i+1,j}^{n+1} \end{aligned}$$

Posant :

$$\begin{aligned} \bullet \quad & \mathbf{B}_{i,j} = \frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j}; \quad \mathbf{A}_{i,j} = \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j}; \\ \bullet \quad & \mathbf{F}_{i,j} = \frac{1}{\Delta X^2} D_{i,j}; \quad \mathbf{H}_{i,j} = \frac{1}{\Delta Y^2} D_{i,j}; \\ \bullet \quad & \mathbf{E}_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta Y^2} (D_{i,j} + D_{i,j}) + \frac{1}{\Delta X^2} (D_{i,j} + D_{i,j}); \end{aligned}$$

L'équation (III-27) devient :

$$\mathbf{B}_{i,j} C_{i,j-1}^{n+1} + \mathbf{A}_{i,j} C_{i-1,j}^{n+1} + \mathbf{E}_{i,j} C_{i,j}^{n+1} + \mathbf{F}_{i,j} C_{i+1,j}^{n+1} + \mathbf{H}_{i,j} C_{i,j+1}^{n+1} = \frac{C_{i,j}^n}{\Delta t} \quad \text{III-14}$$

III.1.3- Ecriture de l'équation de différences finies aux points du maillage :

Conditions initiales:

$$\bullet \quad \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 \quad [43]$$

$$C_{i,-1} = C_{i,+1} \quad \text{Et} \quad B_{i,0} = H_{i,0}$$

L'équation devient :

$$A_{i,0} C_{i-1,0}^{n+1} + E_{i,0} C_{i,0}^{n+1} + F_{i,0} C_{i+1,0}^{n+1} + 2H_{i,0} C_{i,0}^{n+1} = \frac{C_{i,0}^n}{\Delta t}$$

$$\bullet \quad \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$$

$$C_{-1,j} = C_{+1,j} \quad \text{et} \quad A_{0,j} = F_{0,j}$$

L'équation devient :

$$B_{0,j}C_{0,j-1}^{n+1} + E_{0,j}C_{0,j}^{n+1} + 2F_{0,j}C_{0,j+1}^{n+1} + H_{0,j}C_{0,j+1}^{n+1} = \frac{C_{0,j}^n}{\Delta t}$$

Conditions aux limites :

- $\frac{\partial C}{\partial y}|_{y=J} = 0$

$$C_{i,J-1} = C_{i,J+1} \quad \text{et} \quad B_{i,J} = H_{i,J}$$

L'équation devient :

$$A_{i,j}C_{i-1,j}^{n+1} + E_{i,j}C_{i,j}^{n+1} + F_{i,j}C_{i+1,j}^{n+1} + 2B_{i,j}C_{i,j-1}^{n+1} = \frac{C_{i,j}^n}{\Delta t}$$

- $\frac{\partial C}{\partial x}|_{x=X} = 0$

$$C_{I-1,j} = C_{I+1,j} \quad \text{et} \quad A_{I,j} = F_{I,j}$$

L'équation devient : $2A_{I,j}C_{I-1,j}^{n+1} + B_{I,j}C_{I,j-1}^{n+1} + E_{I,j}C_{I,j}^{n+1} + H_{I,j}C_{I,j+1}^{n+1} = \frac{C_{I,j}^n}{\Delta t}$

Alors l'équation III-7 peut être représentée sous la forme matricielle suivante :

$$[M][C_{i,j}]^{n+1} = \frac{1}{\Delta t}[C_{i,j}]^n \tag{III-15}$$

$$\begin{bmatrix}
 E_{0,0} & 2F_{0,0} & 0 & 2H_{0,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_{1,0} & E_{1,0} & F_{1,0} & 0 & H_{1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 B_{0,1} & 0 & A_{0,1} & E_{0,1} & F_{0,1} & 0 & H_{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \ddots & 0 & 0 & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & 0 & \vdots & 0 \\
 0 & 0 & B_{i,j} & 0 & A_{i,j} & E_{i,j} & F_{i,j} & 0 & H_{i,j} & 0 & 0 \\
 & & & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \ddots & 0 \\
 & & & 0 & \ddots & 0 & \ddots & \ddots & 0 & H_{I-3,J} & \\
 (0) & & & 0 & 0 & \ddots & 0 & \ddots & \ddots & 0 & \\
 & & & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & F_{I-1,J} & \\
 & & & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & \\
 & & & & & & 2B_{I,J} & 0 & 2A_{I,J} & E_{I,J} &
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 C_{0,0}^{n+1} \\
 C_{1,0}^{n+1} \\
 \vdots \\
 C_{0,1}^{n+1} \\
 \vdots \\
 C_{i,j}^{n+1} \\
 \vdots \\
 C_{n,m}^{n+1}
 \end{bmatrix}
 = \frac{1}{\Delta t}
 \begin{bmatrix}
 C_{0,0}^n \\
 C_{1,0}^n \\
 \vdots \\
 C_{0,1}^n \\
 \vdots \\
 C_{i,j}^n \\
 \vdots \\
 C_{n,m}^n
 \end{bmatrix}$$

M : C'est une matrice pentadiagonale.

III-Algorithmme de résolution :

Nous décrivons ci-après l'algorithmme de résolution de l'équation III-7

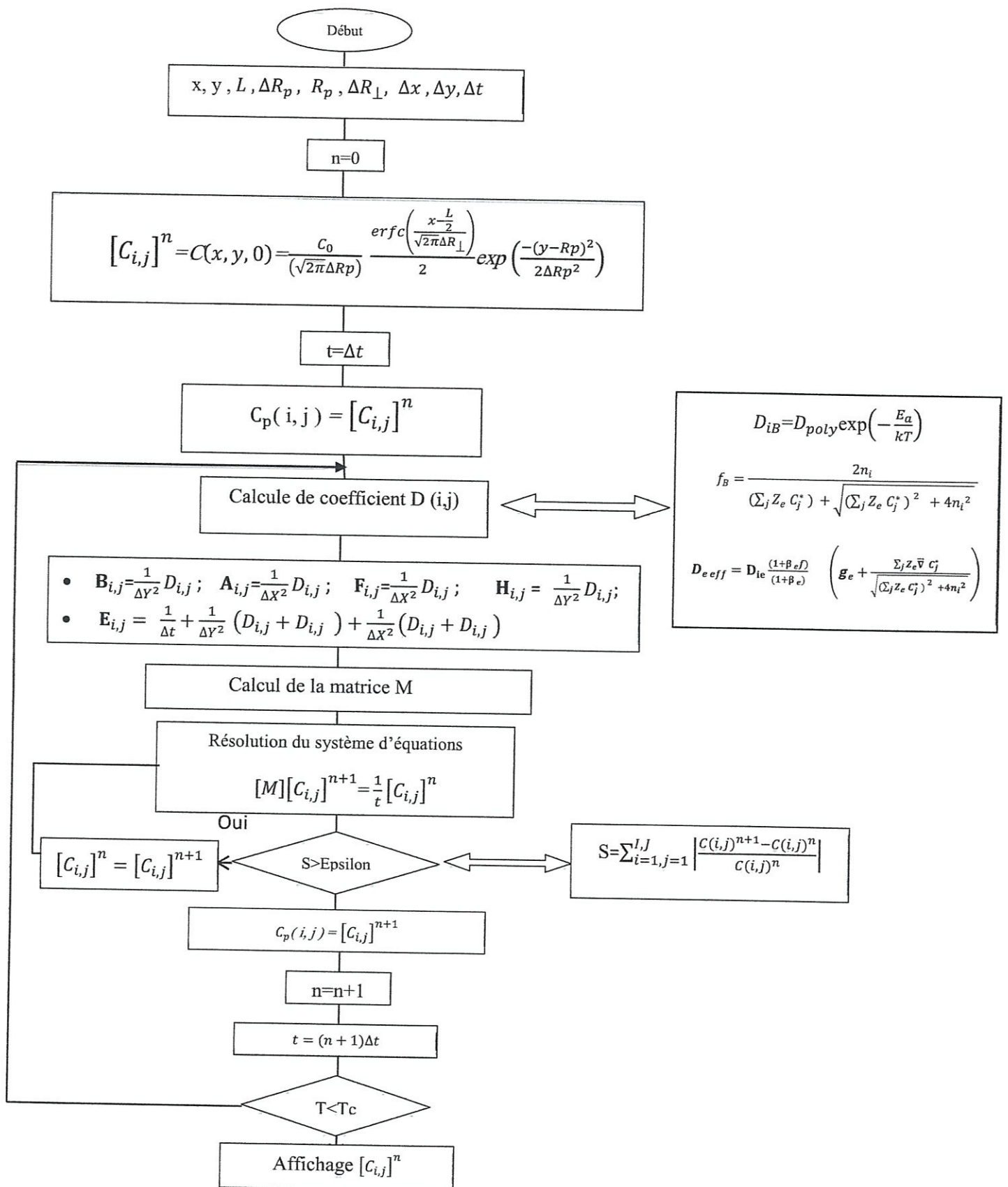


Figure III-5 : Algorithme de résolution de l'équation générale de la diffusion

IV- Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les équations que supporte le modèle décrivant la diffusion bidimensionnelle, basé sur la résolution numérique par la méthode des différences finies de l'équation générale de la diffusion en deux dimensions. L'algorithme de résolution de l'équation générale de la diffusion en deux dimensions, nous permet de d'abord la modélisation des dopants dans le silicium polycristallin.

Chapitre IV

Résultats et interprétation

I-Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les différents résultats de la modélisation et leurs interprétations. Dans un premier temps, nous présentons les profils d'implantation en 2D Pour le bore et l'arsenic. Puis nous traitons l'influence des paramètres technologiques sur les profils à travers des exemples de simulation.

II-Résultats de simulation

Nous considérons la diffusion des dopants dans une couche mince de silicium polycristallin d'épaisseur égale à 200 nm.

II-1-Condition initiale

Les figures IV.1 et IV.2 représentent les profils de la concentration en deux dimensions du bore et de l'arsenic respectivement pour le cas de dopage par implantation ionique.

II-1-1-Cas du Bore

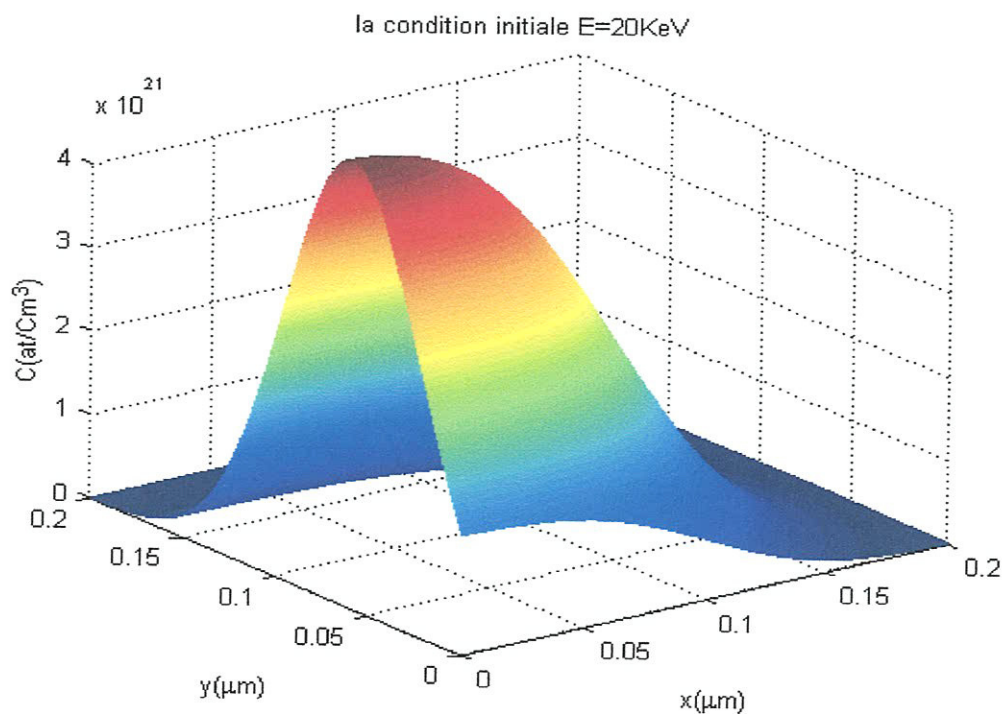


Figure IV.1 :Condition initiale pour le Bore E =20 KeV, Dose = $5.10^{14} / \text{Cm}^2$.

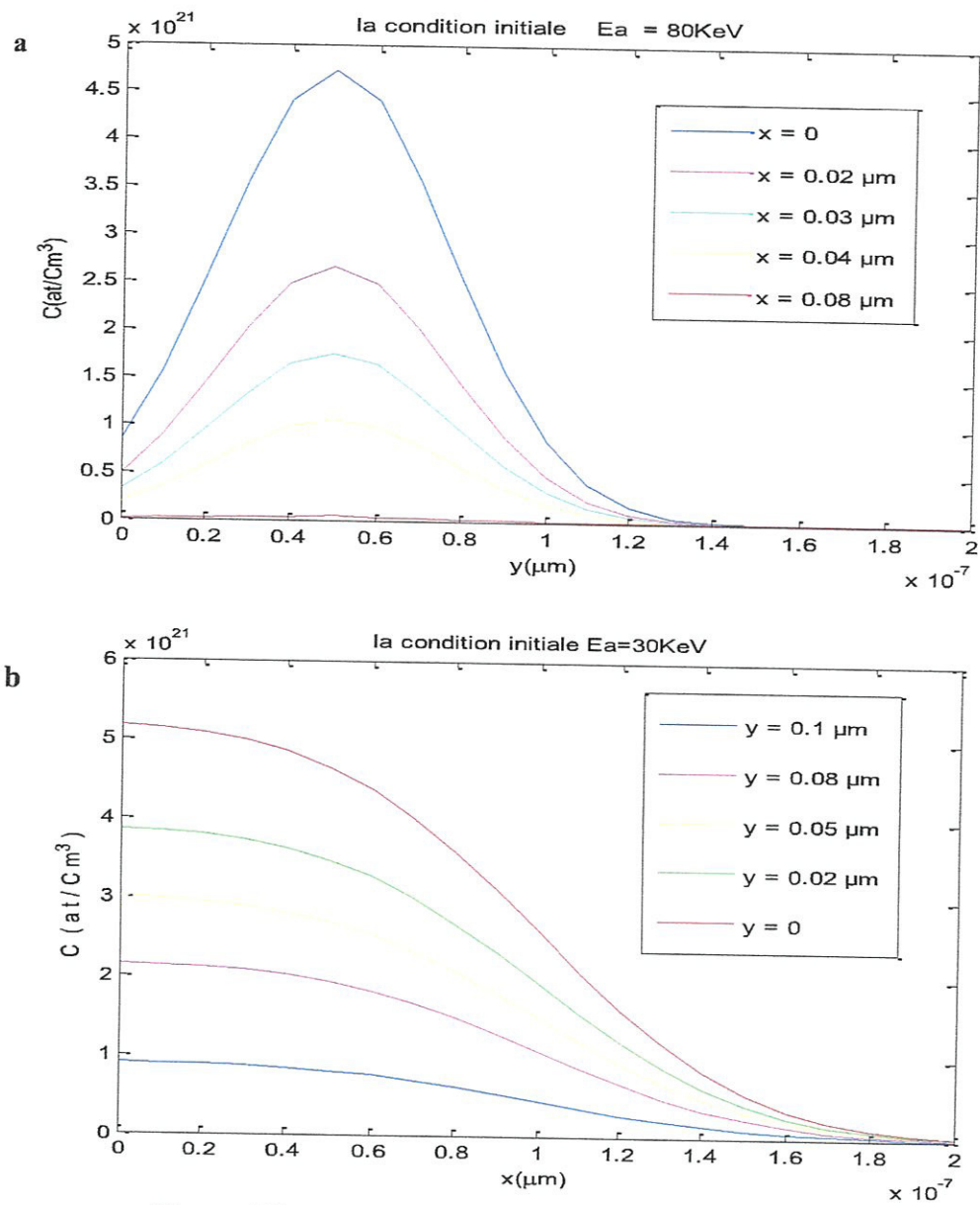


Figure IV.2.1 Condition initiale, a) verticale, b) latérale.



II.1.2- Cas de l'Arsenic

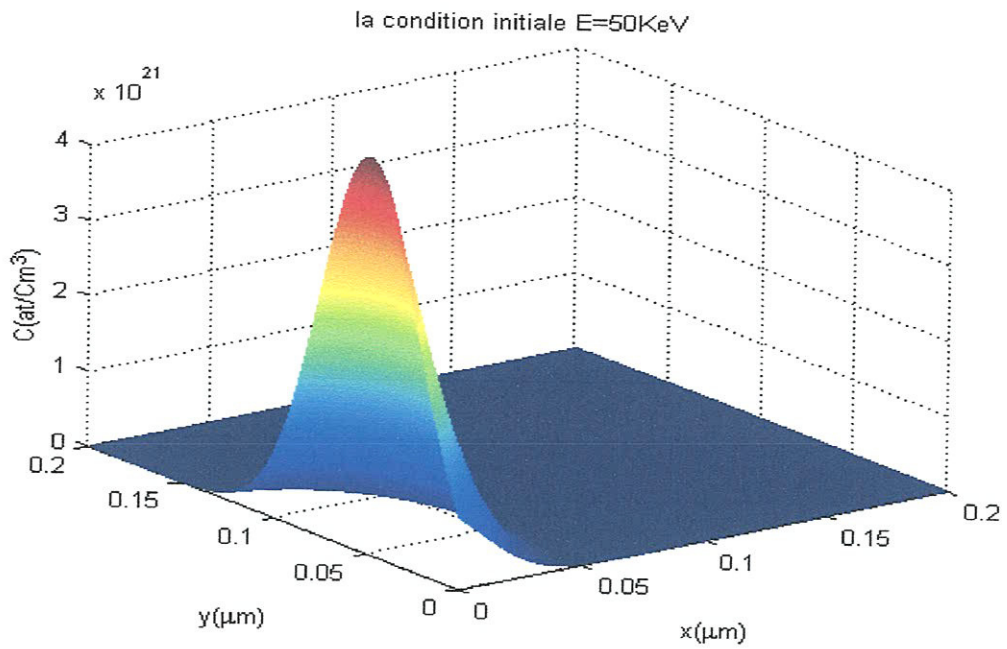


Figure IV.2 : Condition initiale pour l'Arsenic E = 50 KeV, Dose = $5.10^{14} / \text{Cm}^2$.

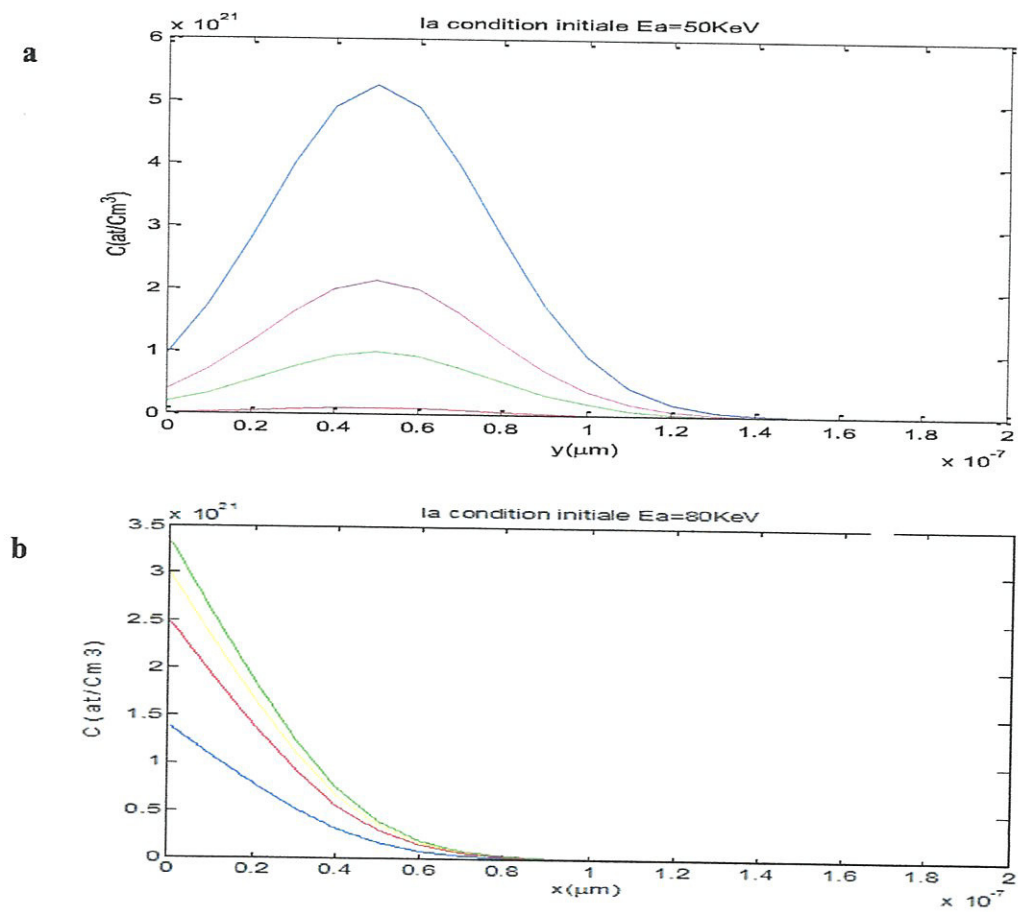


Figure IV.2.1 : Condition initiale, a) vertical, b) latérale.

II.2- Etude de l'influence des paramètres technologiques sur les profils de diffusion

Les profils de la concentration sont influencés par les paramètres technologiques suivants :

- L'énergie d'implantation « E ».
- la dose d'implantation.
- le temps de recuit « t ».
- la température de recuit « T ».
- le coefficient de diffusion intrinsèque « D_i ».

$$\text{Avec} \quad D_i = D_{poly} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad \text{IV-1}$$

D_{poly} : Le précoefficient de diffusion dans le polysilicium.

D_{mono} : Le précoefficient de diffusion dans le monosilicium.

E_a : L'énergie d'activation.

k : Constante de Boltzman $k = 8.6 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$.

Pour le bore: $E_a = 3.75 \text{ eV}$, $D_{poly} = 1000 D_{mono}$, $D_{mono} = 7.87 \text{ Cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

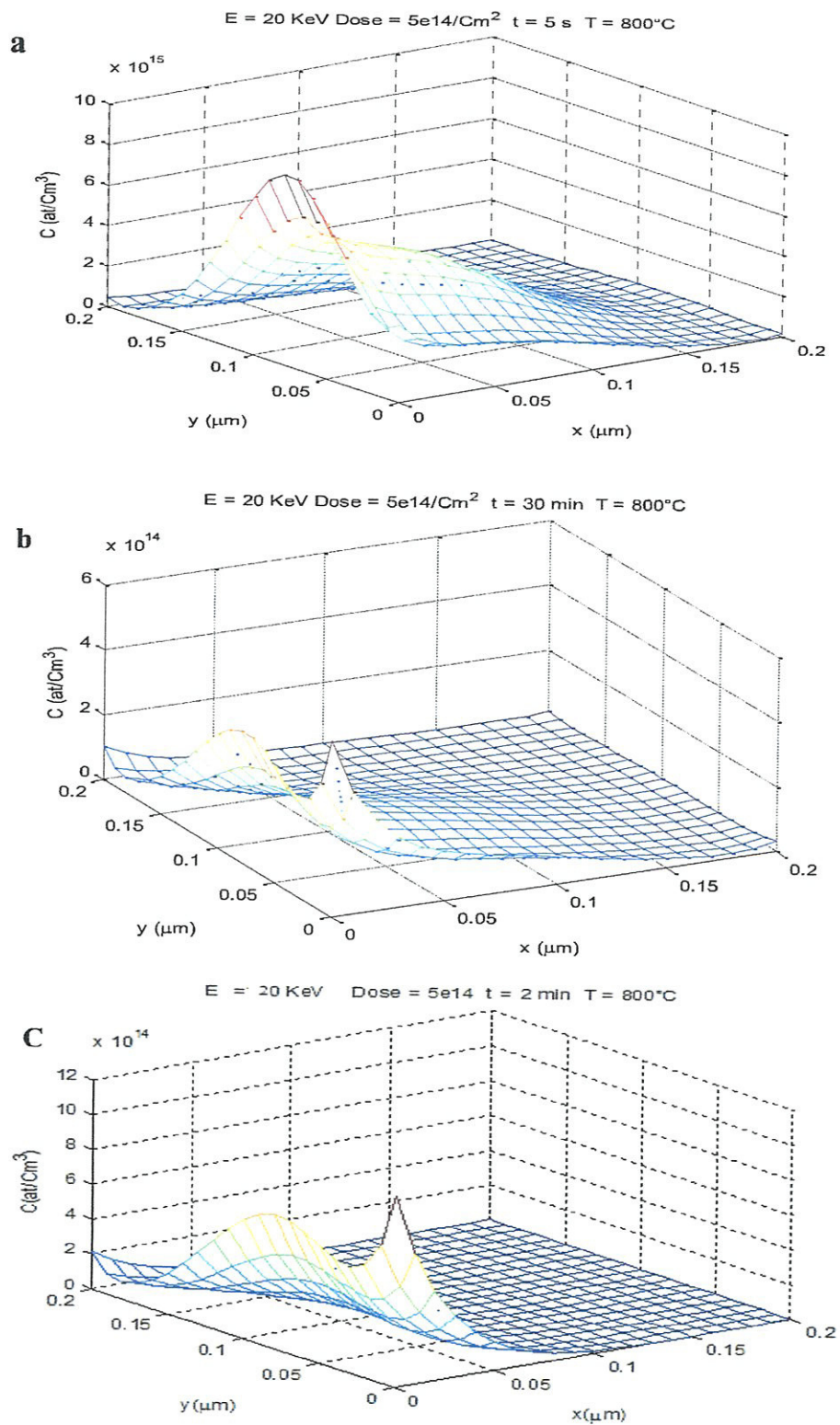
Pour l'arsenic: $E_a = 4.23 \text{ eV}$, $D_{poly} = 1000 D_{mono}$, $D_{mono} = 68.6 \text{ Cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

II.2.1- Effet du temps de recuit

Afin de montrer l'influence du temps de recuit thermique sur les profils de diffusion, nous présentons les profils de la diffusion pour les temps de recuit suivants : $t = 5\text{s}$,

$t = 2 \text{ min}$ et $t = 30 \text{ min}$. Les résultats obtenus à $T = 800 \text{ }^\circ\text{C}$, $n_i = 1.45 \cdot 10^{10} \text{ Cm}^{-3}$, ont été calculés pour les deux cas suivants :

II.2.1.1- Cas du Bore



FigureIV.3 :Variation de la concentration après recuit pour : T = 800 °C, E = 20 KeV

a) t = 5 s

b) t = 2 min

c) t = 30 min.

II.2.1.2- Cas de l'Arsenic

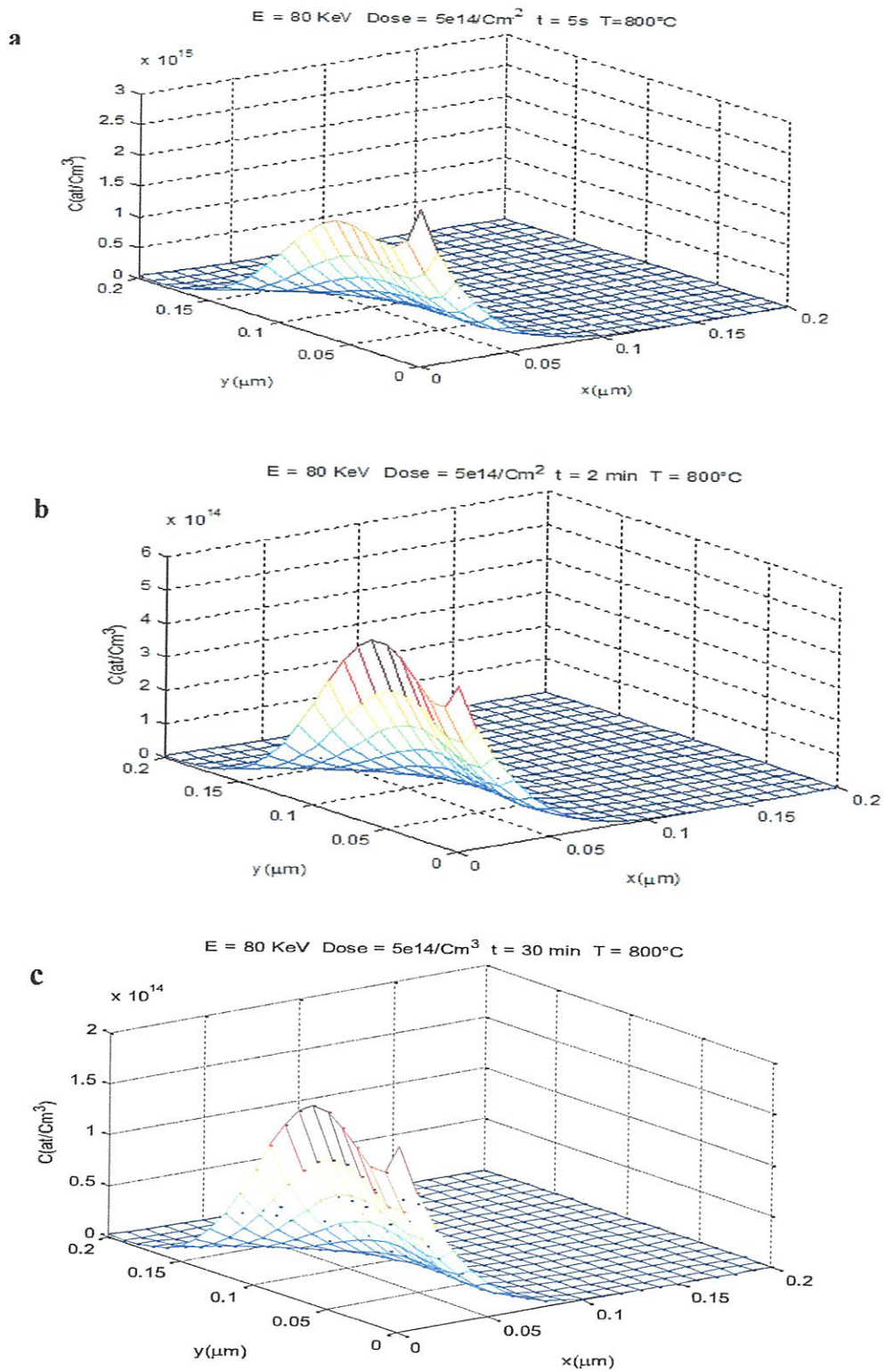


Figure IV.4 : Profils de concentration en fonction du temps après recuit pour $T = 800^\circ\text{C}$

a) $t = 5\text{s}$

b) $t = 2\text{min}$

c) $t = 30 \text{ min.}$

A partir des figures IV-3 et IV-4, qui représentent les distributions de la diffusion bidimensionnelle du Bore et de l'Arsenic respectivement, pour plusieurs valeurs du temps, on remarque une évolution de la concentration en profondeur et latéralement durant le recuit thermique

II.2.2-Effet de la température

Pour observer l'évolution de la diffusion en fonction de la température, le même échantillon décrit précédemment est implanté au bore puis à l'arsenic avec une énergie de 20 KeV pour le bore et 80 KeV pour l'arsenic et une dose de $10^{14}/\text{cm}^2$ pour les deux dopants, avec les températures de recuit suivantes : 800 °C, 1000 °C et 1200 °C pendant un temps $t = 10$ min.

II.2.2.1-Cas du Bore

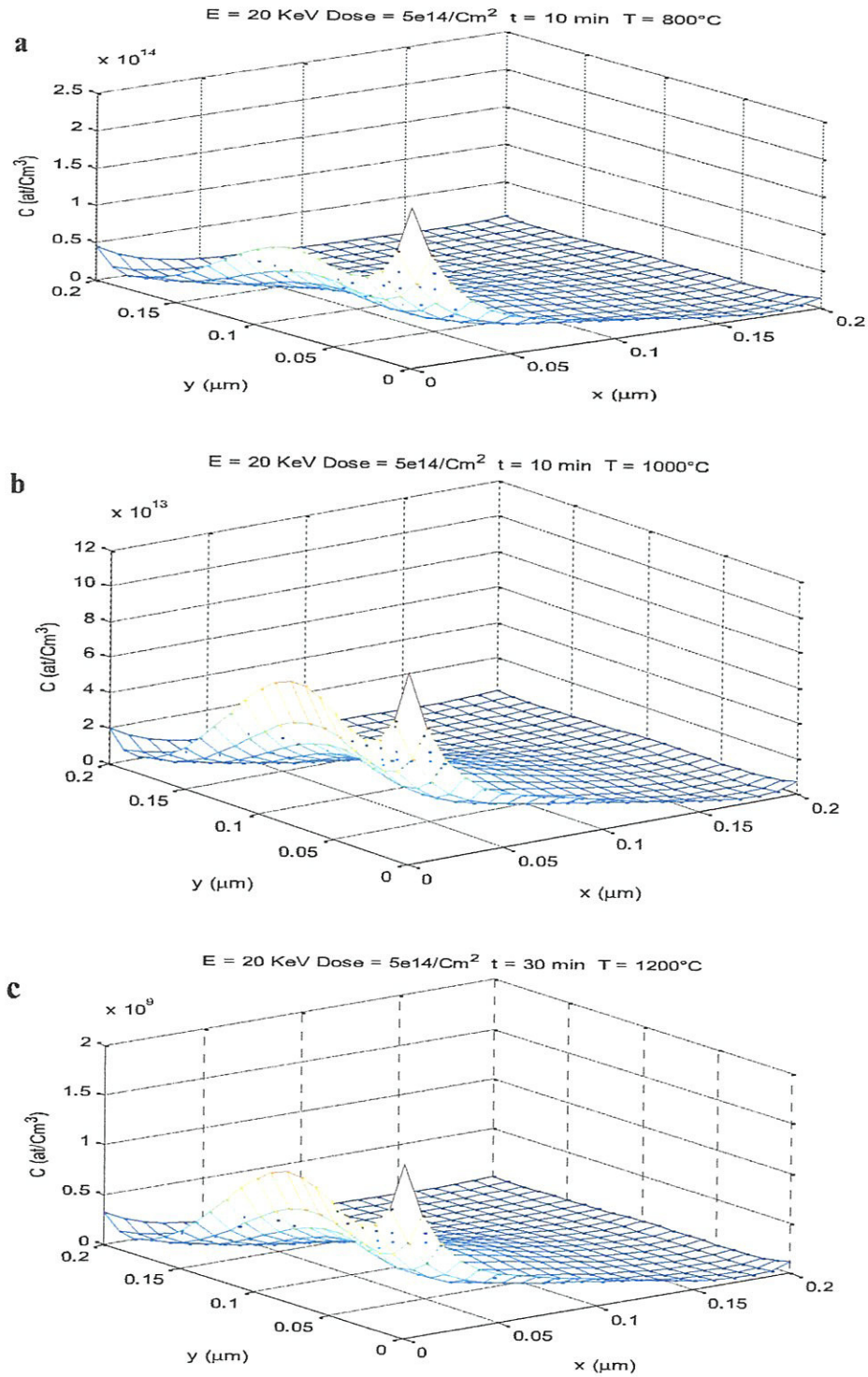


Figure IV.5 :Variation de la concentration en fonction de la température de recuit

a) $T = 800^\circ\text{C}$ b) $T = 1000^\circ\text{C}$ c) $T = 1200^\circ\text{C}$.

II.2.2.2- Cas de l'Arsenic

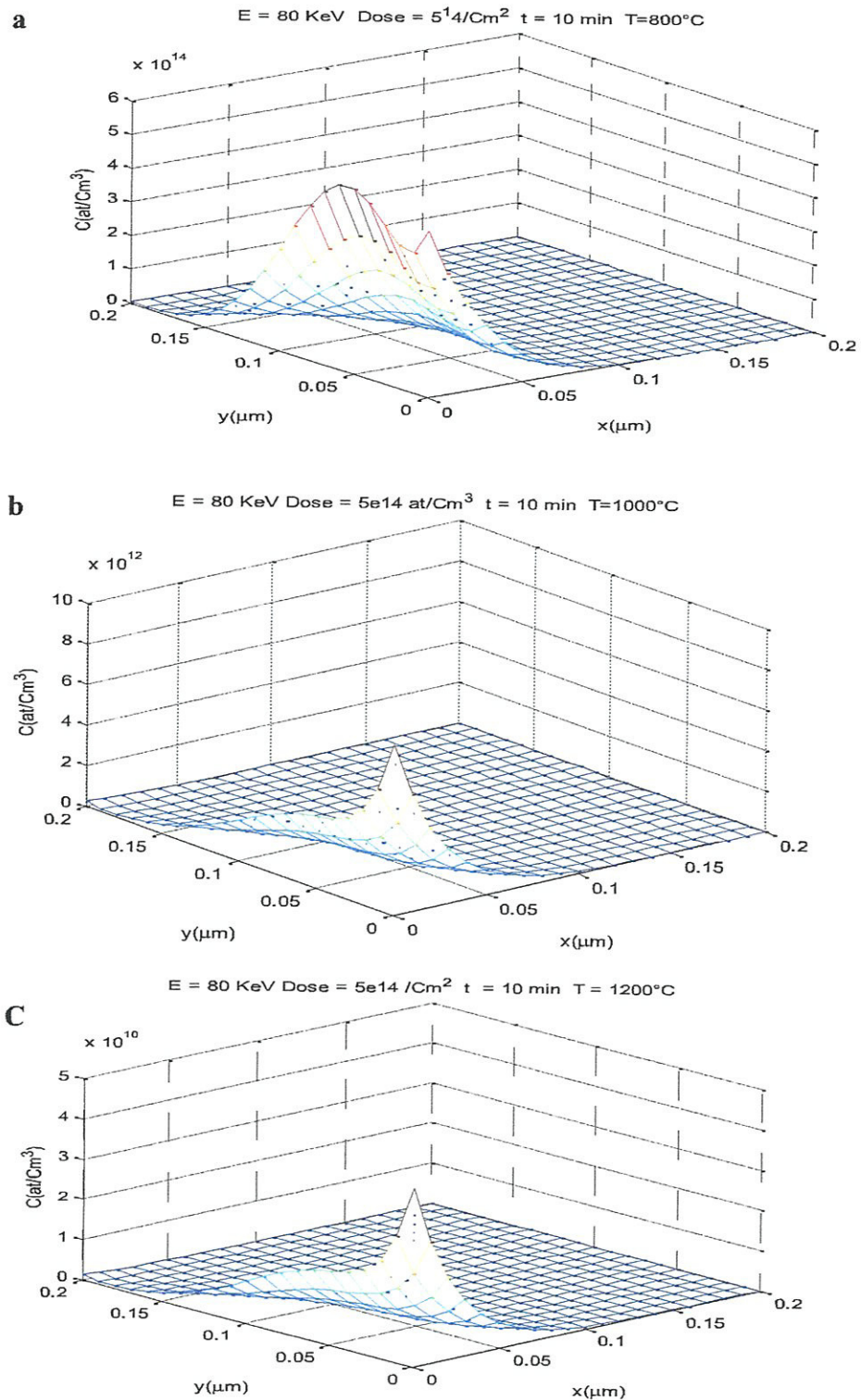


Figure IV.6 :Variation de la concentration en fonction de la température de recuit

a) $T = 800^\circ\text{C}$ b) $T = 1000^\circ\text{C}$ c) $T = 1200^\circ\text{C}$

Les figures VI.5 et VI.6, représentent les distributions de la diffusion du Bore et de l'Arsenic respectivement, en fonction de la température. Nous remarquons une augmentation de la diffusion en profondeur et latéralement avec l'accroissement des valeurs de la température.

II.2.3-Effet de l'énergie d'implantation

II.2.3.1-Cas du bore

Afin d'établir l'influence de l'énergie d'implantation, le même échantillon est implanté au bore avec une dose de $10^{14} / \text{Cm}^2$ et recuit à une température de 1000°C pendant un temps de recuit $t = 2$ min. On utilise les différentes énergies suivantes :

10 KeV, 20 KeV et 50 KeV.

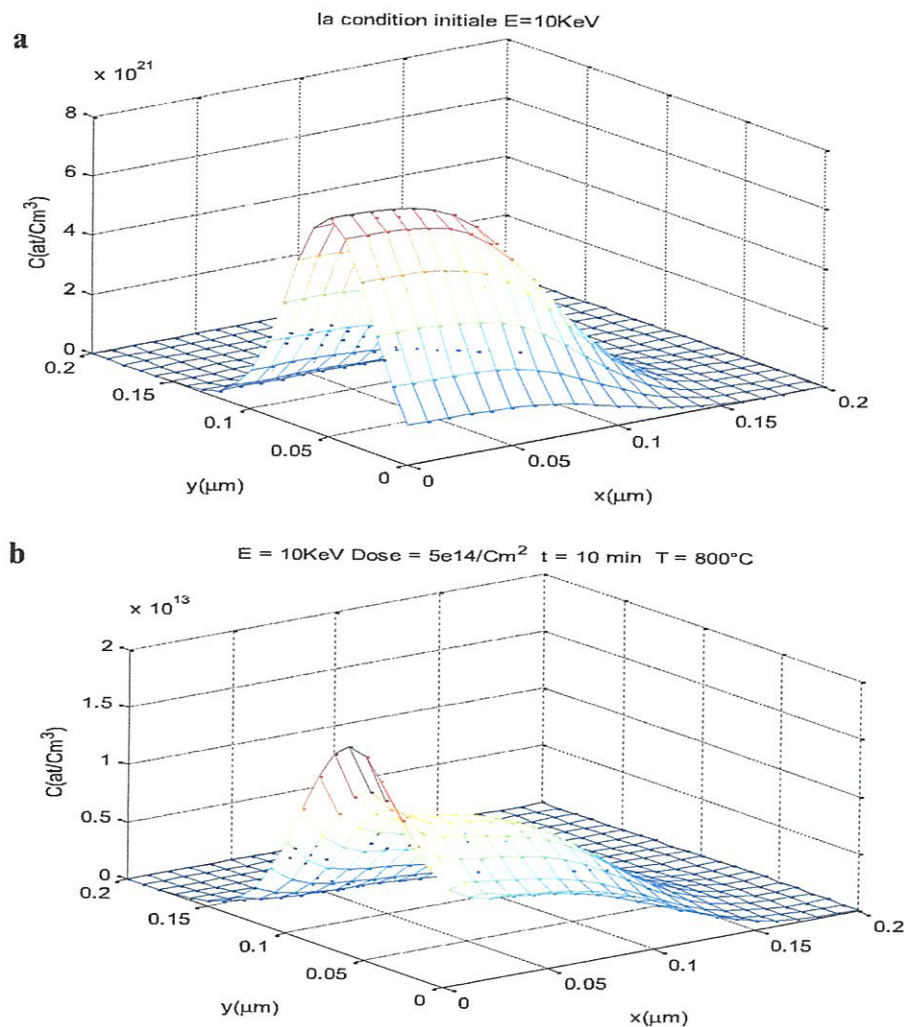
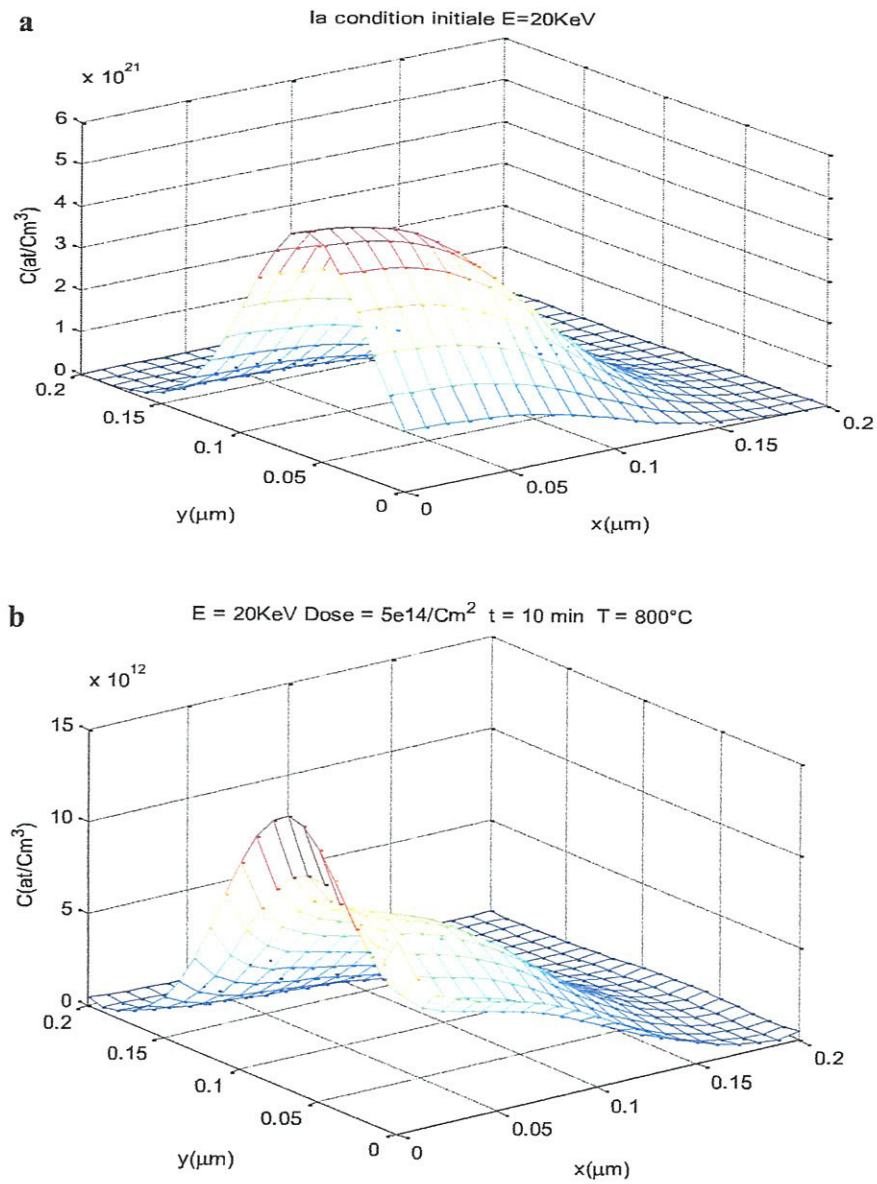


Figure IV.7 : Profil de concentration E = 10KeV a) avant recuit, b) après recuit.



FigureIV.8 :Profil de concentration E = 20 KeV a) avant recuit, b) après recuit.

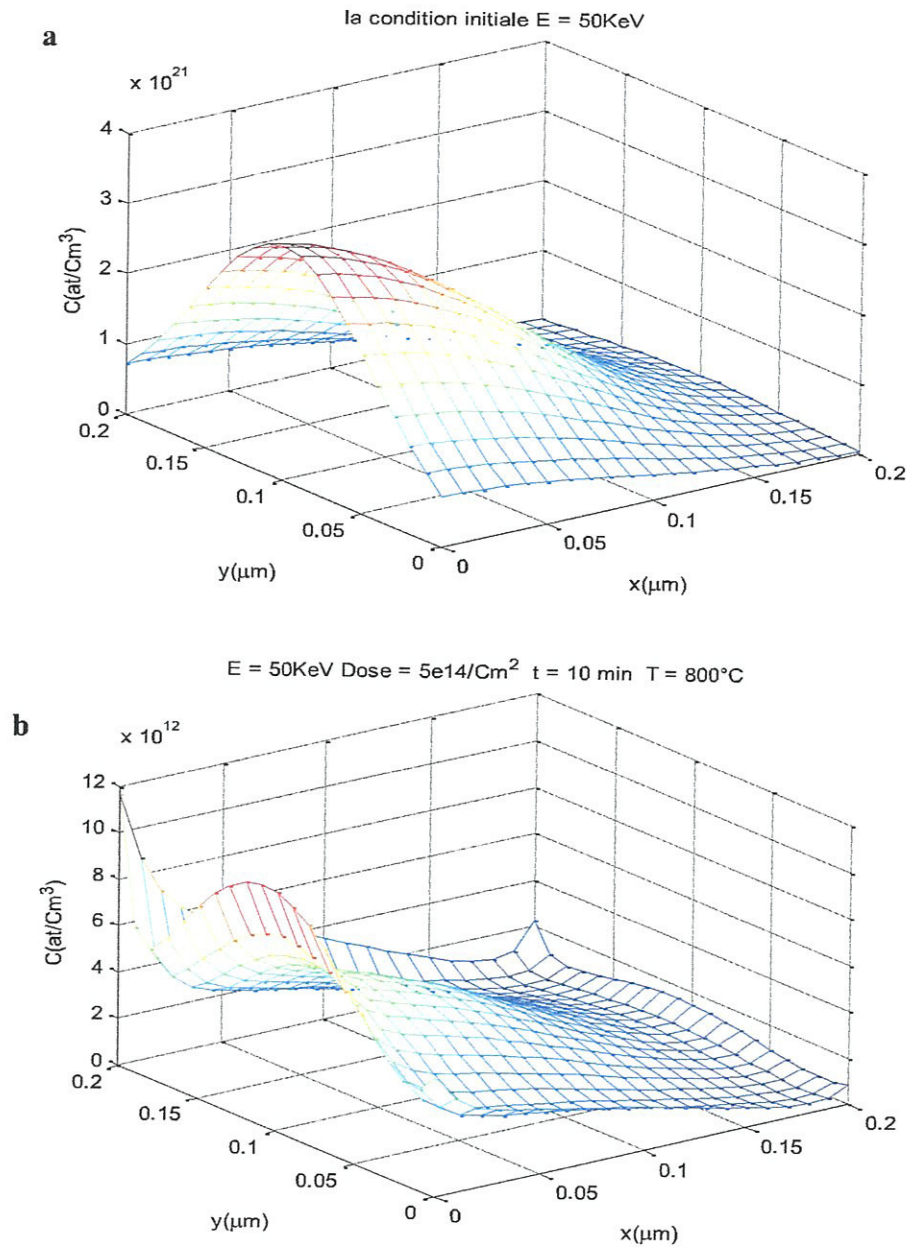


Figure IV.9 : Profil de concentration E = 50 KeV a) avant recuit, b) après recuit.

II.2.3.2- Cas de l'arsenic

Le même échantillon est implanté à l'arsenic avec une dose de $10^{14}/\text{cm}^2$ et recuit à une température de $1000\text{ }^\circ\text{C}$ pendant un temps $t = 2\text{ min}$. Nous utilisons les différentes énergies suivantes : **30 KeV, 50 KeV et 80 KeV**.

Les résultats de simulations sont présentés sur la figure VI-8

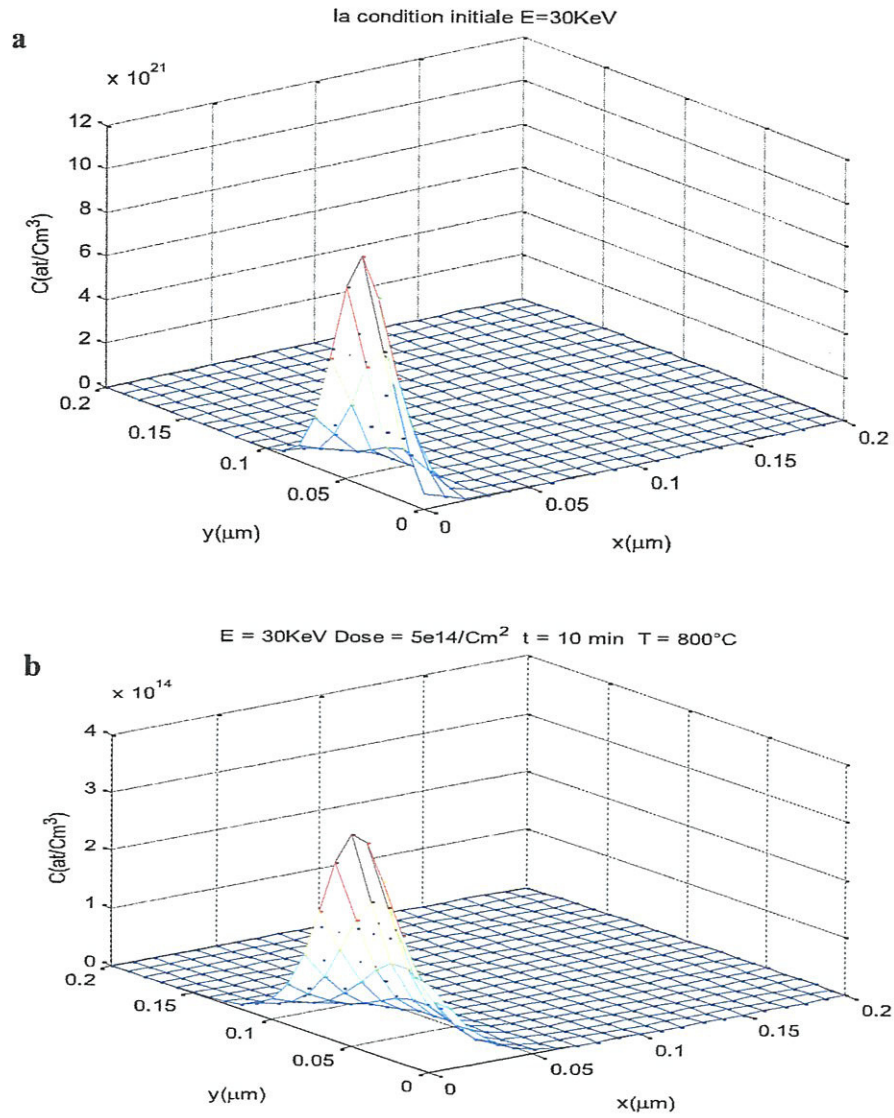


Figure IV.10 : Profil d'implantation E = 30KeV a) avant recuit, b) après recuit.

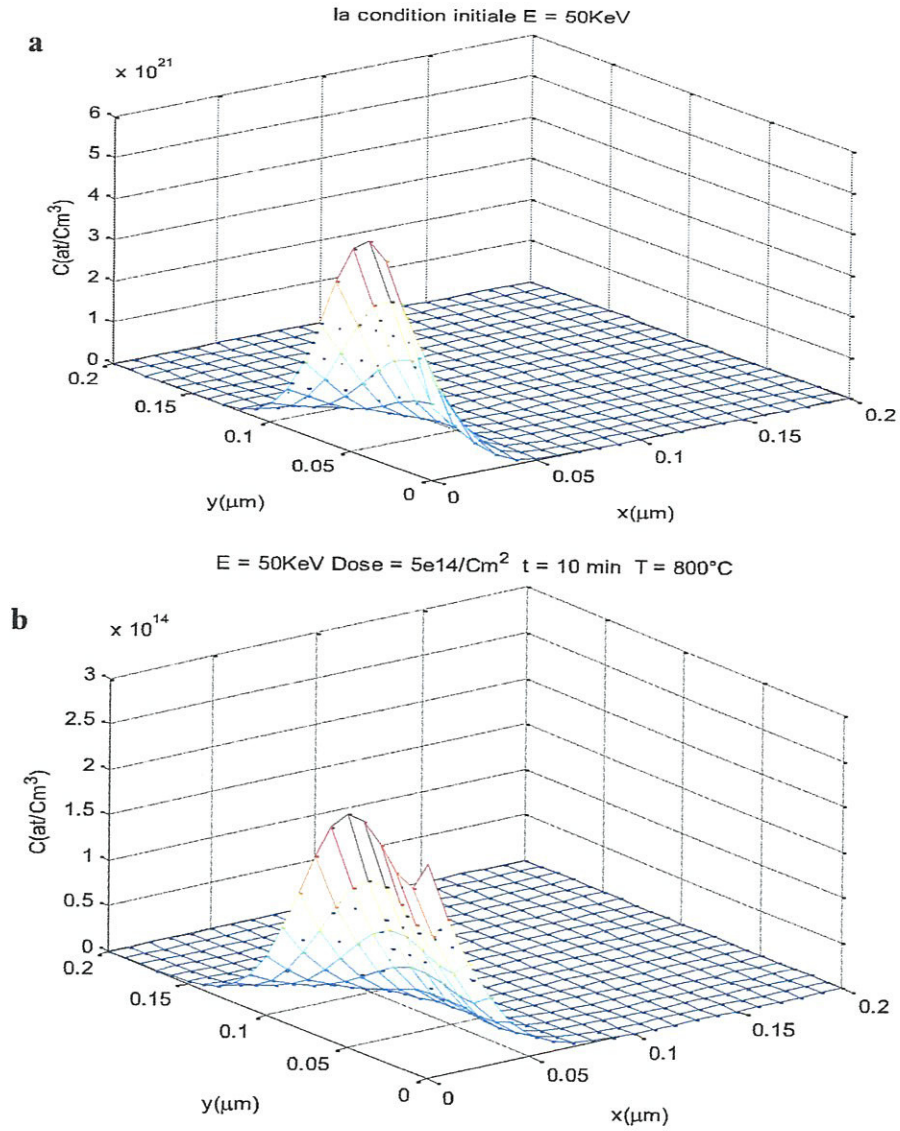


Figure IV.11 : Profil d'implantation $E = 50\text{KeV}$ a) avant recuit, b) après recuit.

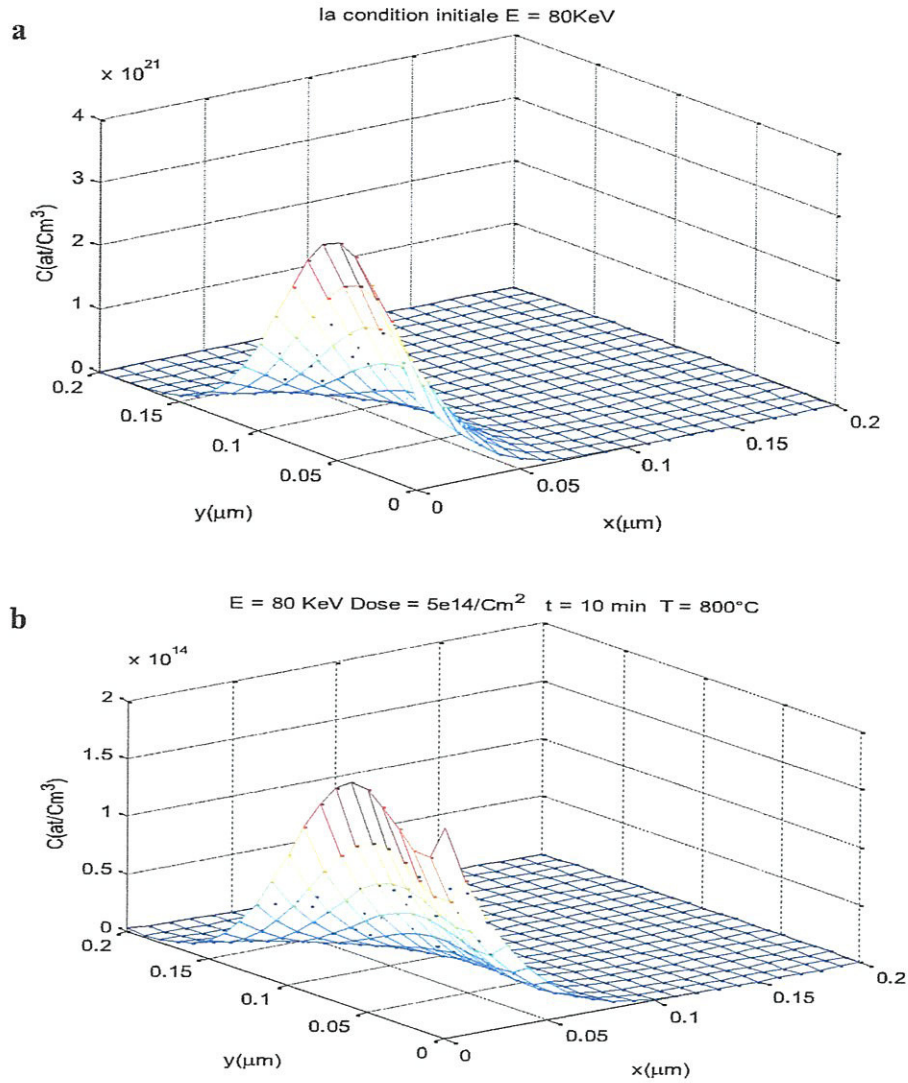


Figure IV.12 : Profil d'implantation E = 80KeV a) avant recuit, b) après recuit.

Les résultats de simulation montre l'influence de l'énergie d'implantation sur les conditions initiales et les profils de concentration, pendant le recuit pour le cas de l'arsenic et du bore. On remarque une pénétration plus importante des dopants dans la couche polycristalline.

II.2.4-Effet de la dose implantée

Afin de montrer l'influence de la dose d'implantation sur les profils de la diffusion, le même échantillon est implanté au bore puis à l'arsenic à une température de 800 °C et un temps de recuit $t = 2$ min, avec les doses suivantes :

$$5.10^{10}/\text{cm}^2, 5.10^{14}/\text{cm}^2, 5.10^{18}/\text{cm}^2.$$

II.2.4.1- Cas du bore

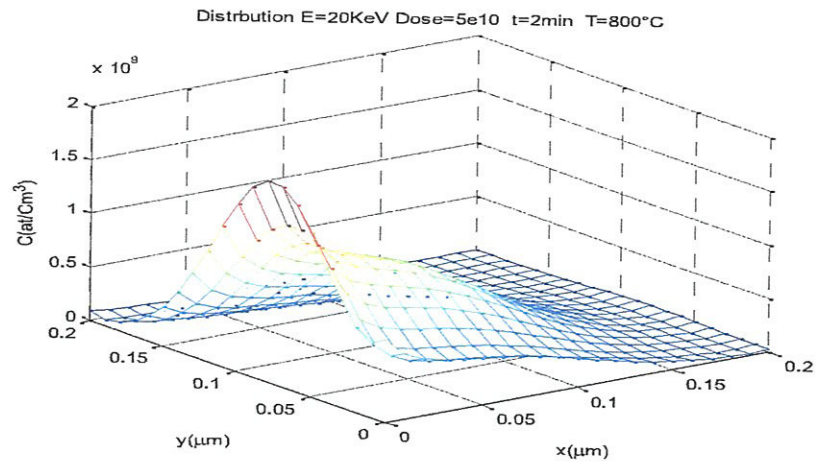


Figure VI.13 : Profil de la concentration, dose = $5 \cdot 10^{18} / \text{cm}^2$

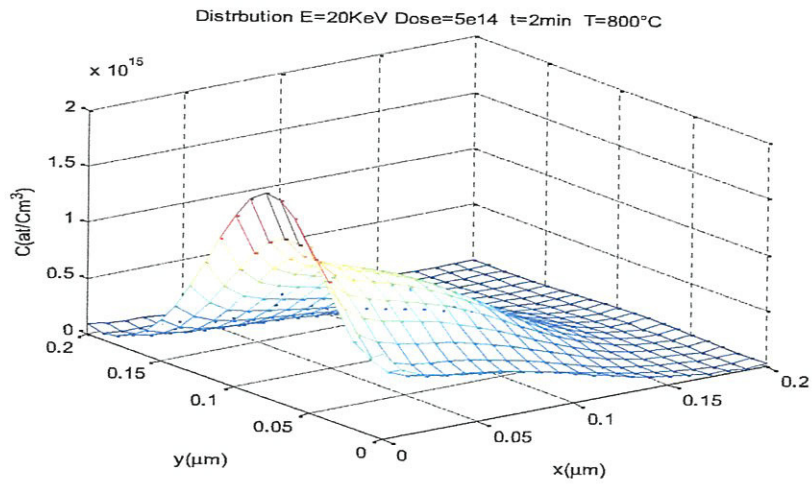


Figure VI.14 : Profil de la concentration, dose = $5 \cdot 10^{14} / \text{cm}^2$

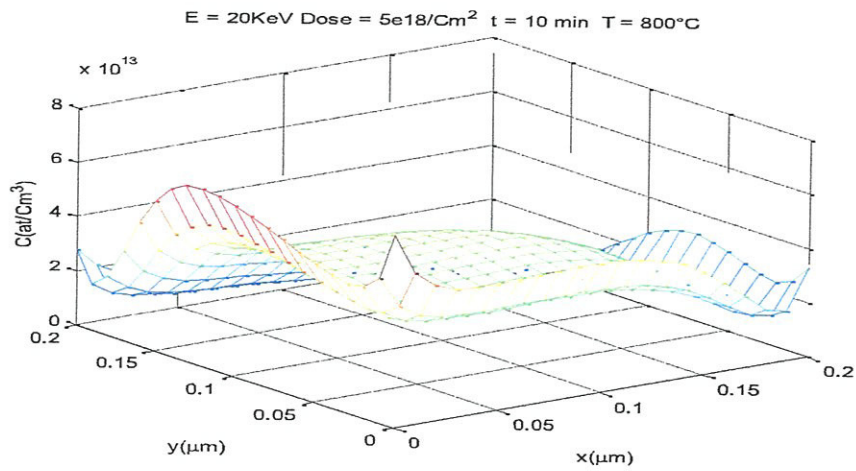


Figure VI.15 : Profil de la concentration, dose = $5 \cdot 10^{18} / \text{cm}^2$

II.2.4.2-Cas de l'arsenic

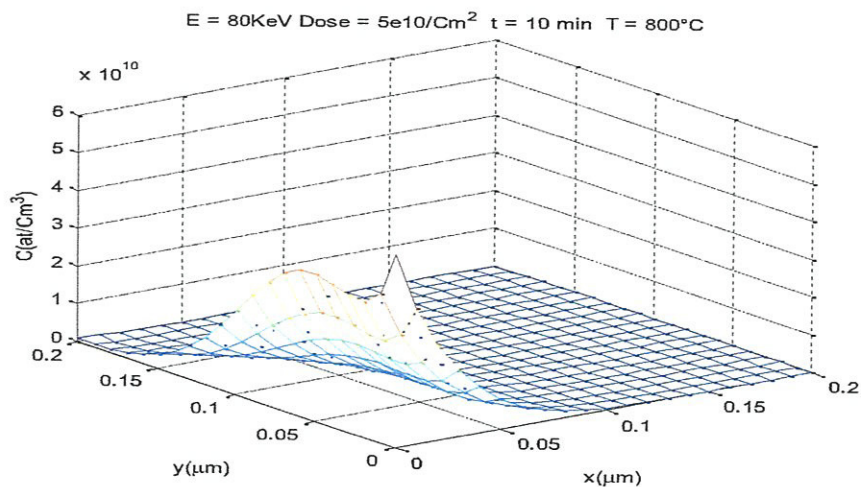


Figure VI.16 : Profil de la concentration, dose = $5. 10^{10} /cm^2$

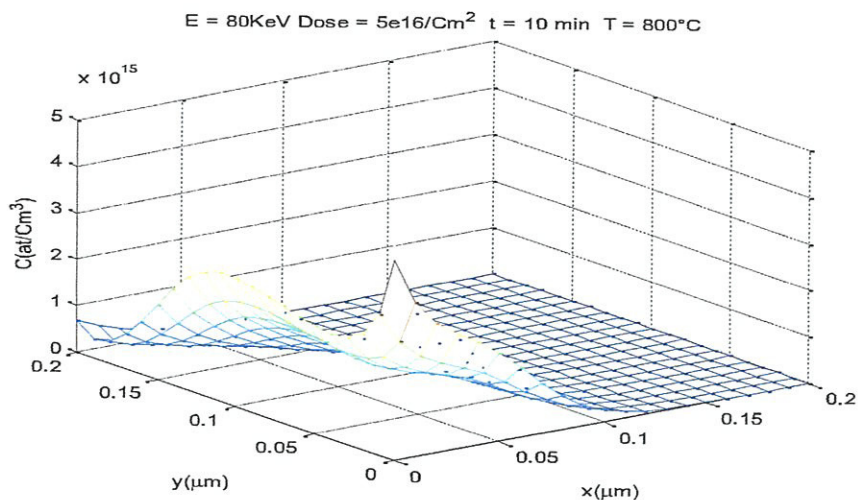


Figure IV.17 : Profil de la concentration, dose= $5. 10^{16} /cm^2$

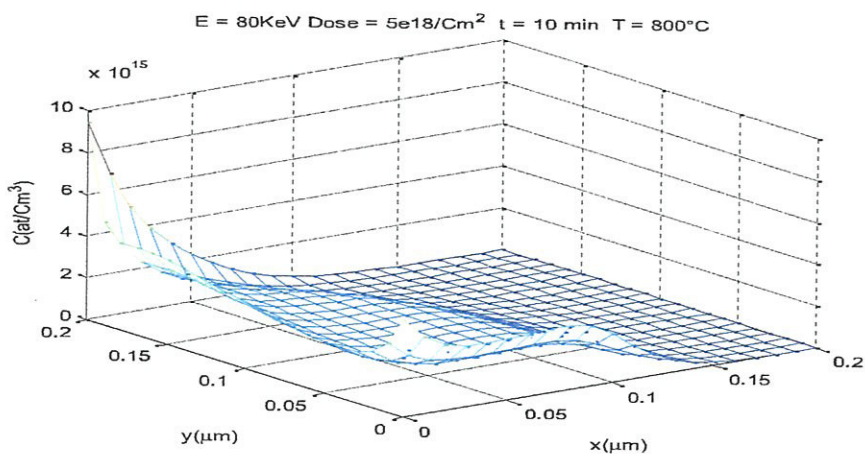


Figure IV.18 : Profil de la concentration, dose= $5. 10^{18} /cm^2$.

Les figures IV.13, IV.14, IV.15, IV.16, IV.17 et IV.18 représentent la variation des profils de la concentration en fonction de la dose implantée, pour l'arsenic et le bore au cours du recuit. En effet, une plus importante dose introduite dans la couche induit une plus grande distribution du dopant.

II.3-Variation des coefficients de diffusion en fonction de la température

Pour observer la variation du coefficient de diffusion avec la température, le même échantillon décrit précédemment est implanté au bore puis à l'arsenic avec une énergie de 20 KeV pour le bore et 80 KeV pour l'arsenic et une dose de $10^{14}/\text{cm}^2$, avec les températures de recuit suivantes : 800 °C, 1000 °C et 1200 °C pendant un temps $t = 10$ min.

II.3.1-Cas du Bore

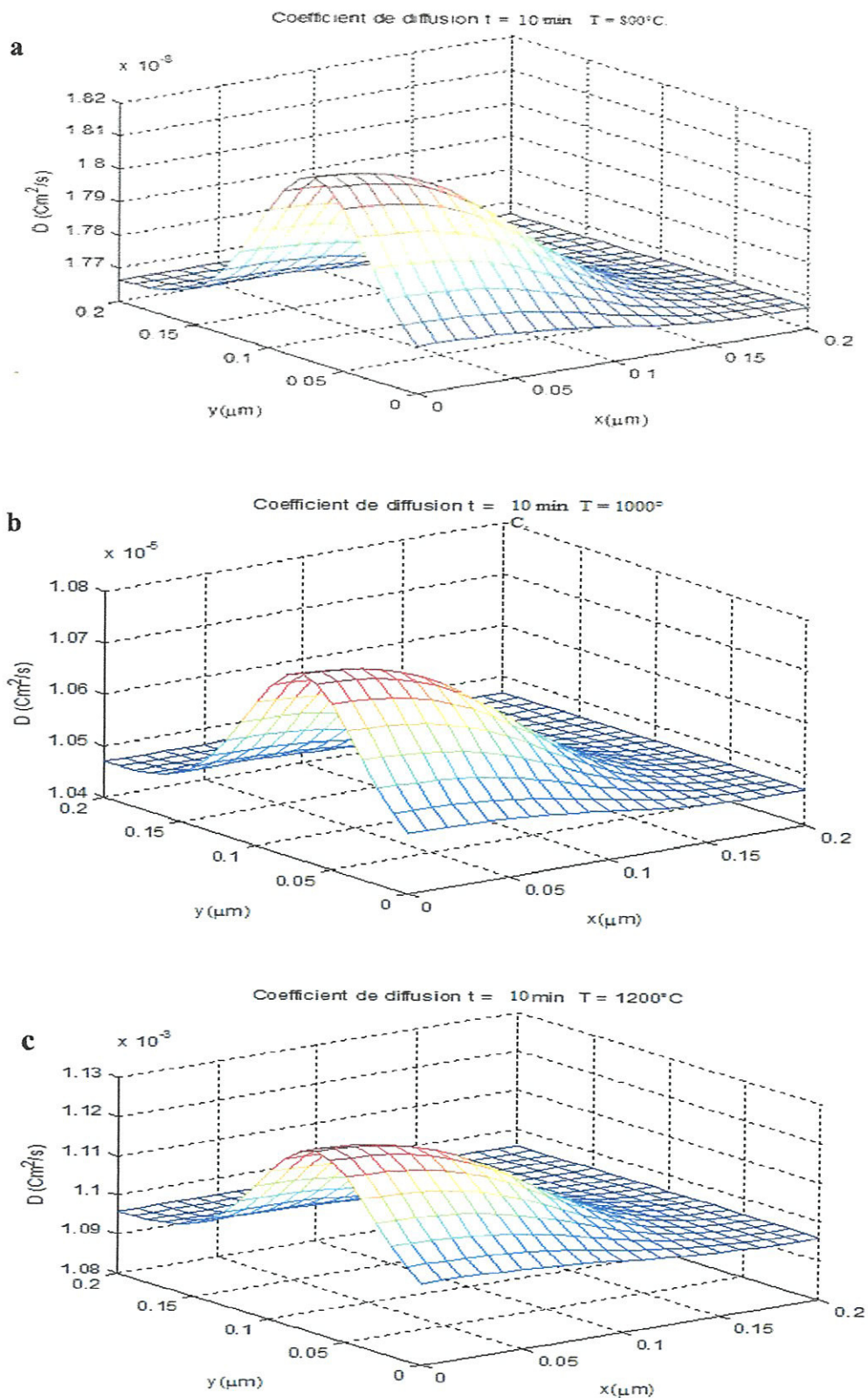


Figure VI. 19 : Variation du coefficient de diffusion en fonction de la température

a) $T = 800^\circ\text{C}$ b) $T = 1000^\circ\text{C}$ c) $T = 1200^\circ\text{C}$.

II.3.2-Cas de l'arsenic

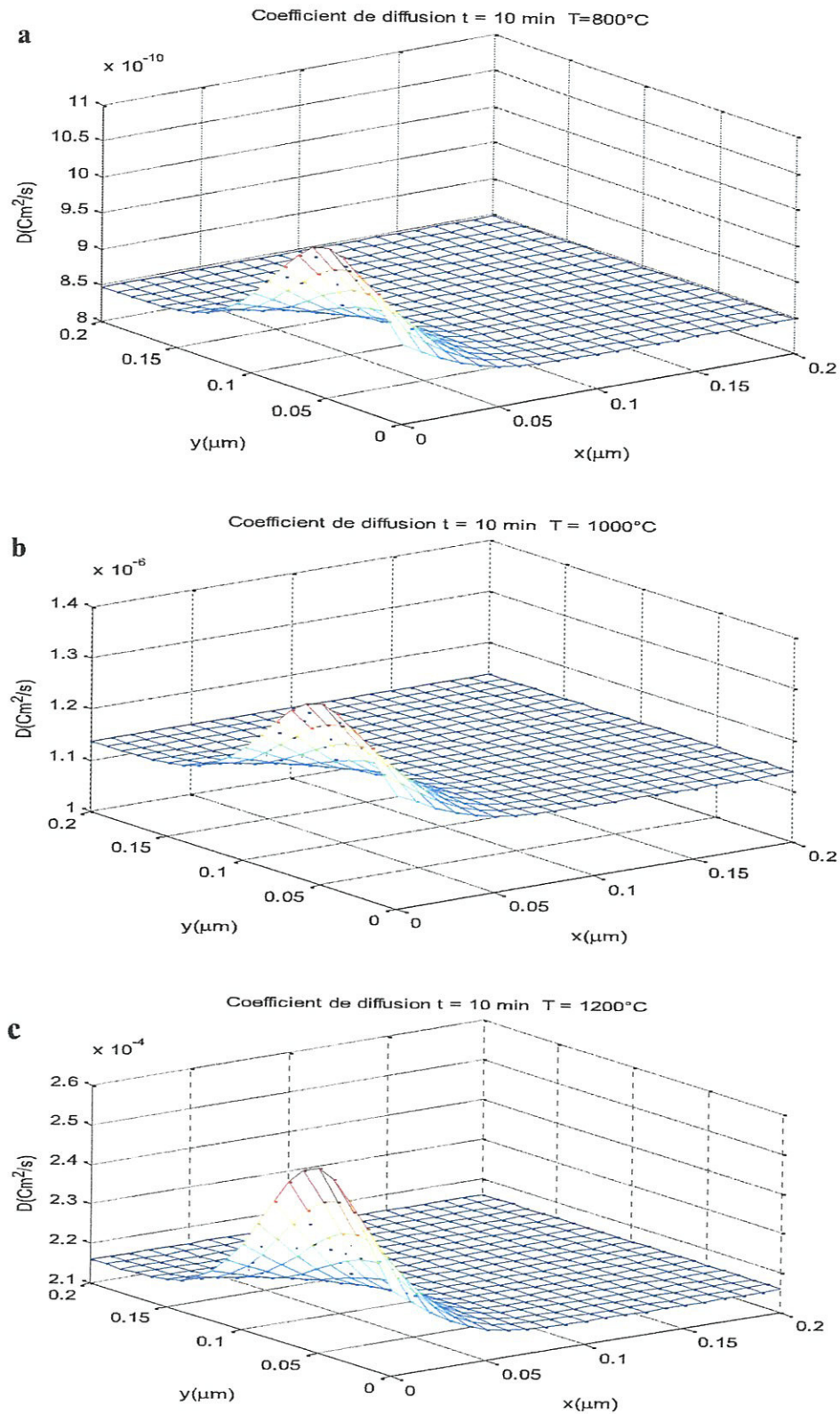


Figure VI.20 : Variation de coefficient de diffusion en fonction de la température

a) $T = 800^\circ\text{C}$

b) $T = 1000^\circ\text{C}$

c) $T = 1200^\circ\text{C}$.

Les figures IV.19 et IV.20 montrent l'évolution du coefficient de diffusion avec l'augmentation de la température pour le bore et l'arsenic. On observe une évolution plus rapide du coefficient de diffusion du bore par rapport à celle de l'arsenic.

II.4-Etude de la diffusion latérale et verticale

Pour mieux illustrer les profils de la diffusion des dopants en profondeur et latéralement, nous avons tracé sur les figures IV.21, IV.22, IV.23 et IV.24 la variation de la concentration à une seule dimension pour le bore et l'arsenic avec la variation du temps de recuit.

II.4.1-Profiles de concentration

II.4.1.1-Cas du bore

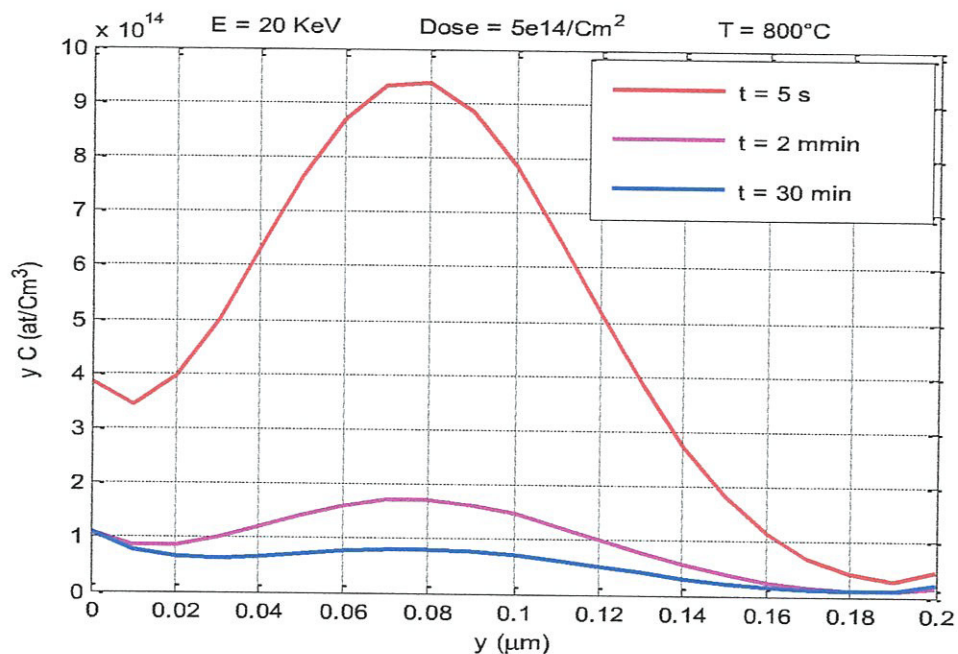


Figure IV.22 : Variation de la concentration en profondeur.

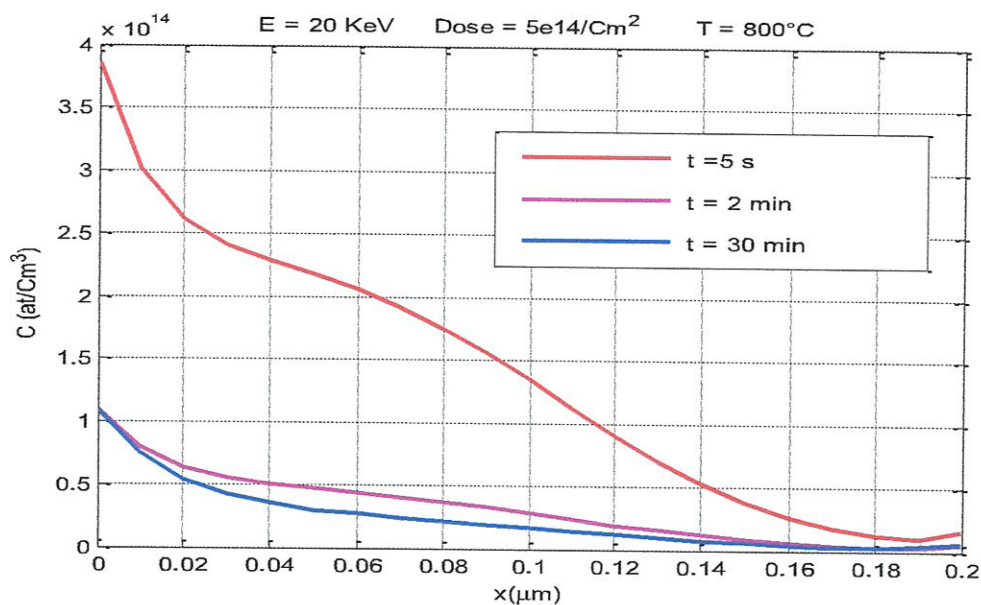


Figure IV.22 : Variation de la concentration latéralement.

II.4.1.2- Cas d'arsenic

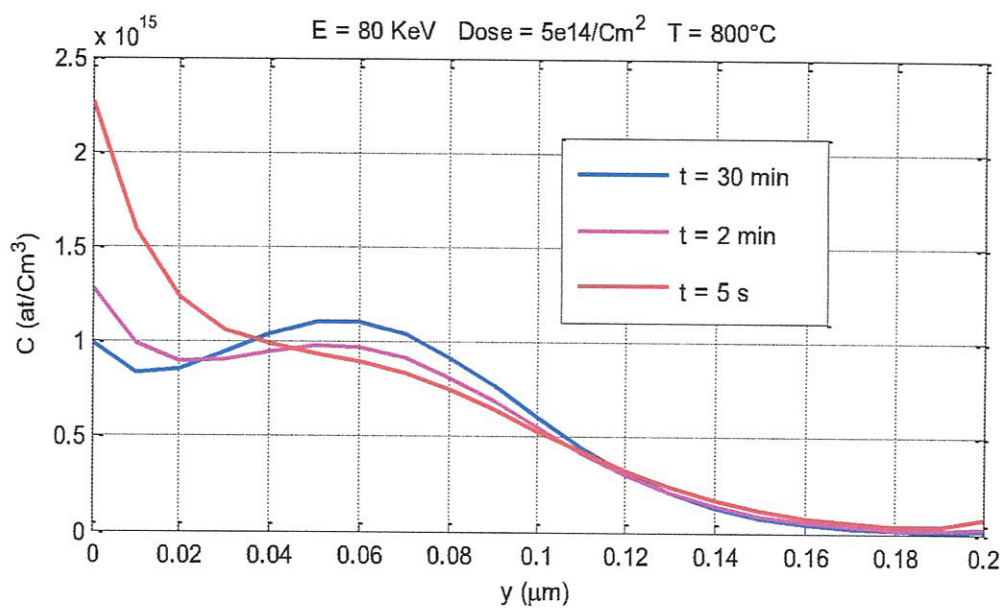


Figure IV.23 : variation de la concentration en profondeur.

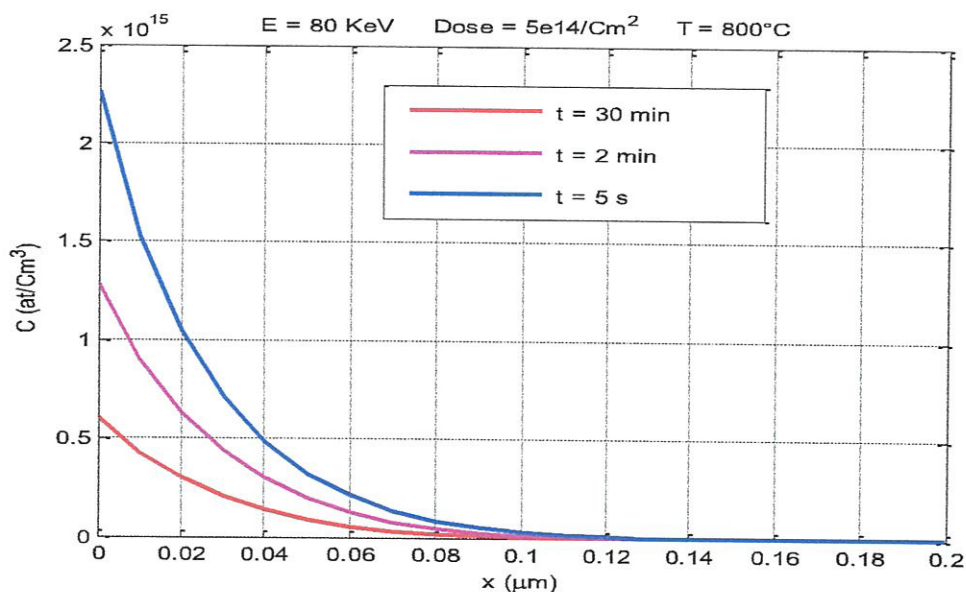


Figure IV.24 : Variation de la concentration latéralement.

Les figures IV.21, IV.22, IV.23 et IV.24 représentent la distribution de la concentration des dopants en profondeur pour un point latéral $x = 0.5 \mu\text{m}$ et la distribution latérale pour un point vertical $y = 0.5 \mu\text{m}$ en fonction du temps de recuit pour le bore et l'arsenic respectivement. A une température de 800°C , les figures montrent une variation de la concentration latérale et verticale avec l'accroissement du temps de recuit.

A partir de ces résultats il apparait clair que la diffusion des dopants est accélérée en profondeur.

II.4.2- Coefficient de diffusion

Les figures IV.25, IV.26, IV.27 et IV.28 représentent la variation des coefficients de diffusion en profondeur et latéralement pour différentes valeurs de la température pour le bore et l'arsenic.

II.4.2.1- Cas du bore

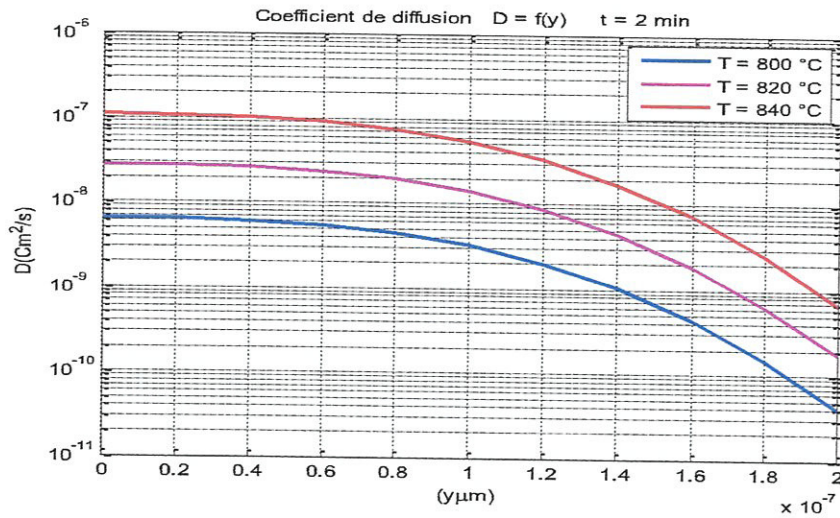


Figure IV.25 : Variation de coefficient de diffusion en profondeur.

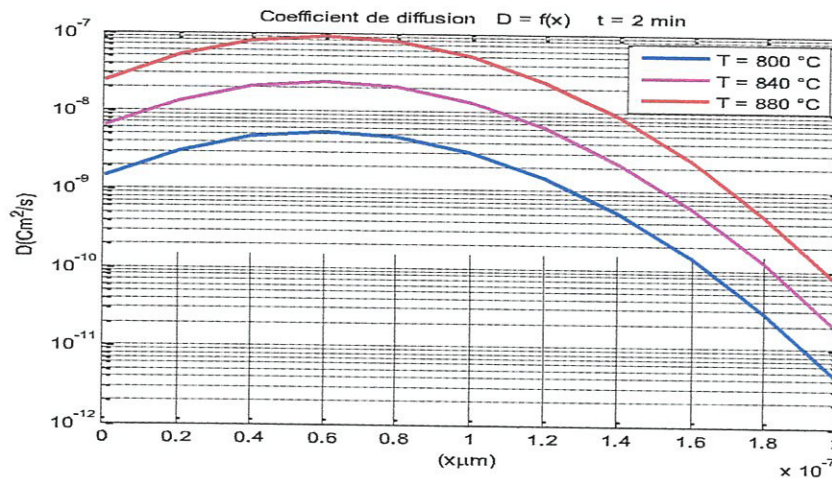


Figure IV.26 : Variation de coefficient de diffusion latéralement.

Nous remarquons que les coefficients de diffusion du bore n'ont pas la même allure en profondeur et latéralement. En effet, pour le cas de la diffusion en profondeur, les coefficients de diffusion diminuent quand on s'éloigne de la surface.

Dans le cas de la diffusion latérale, les coefficients de diffusion augmentent et atteignent un maximum pour $x = 0.06 \mu\text{m}$. A partir de ce point, les coefficients de diffusion tendent à diminuer rapidement. Ceci peut être expliqué pour le fait que les coefficients de diffusion extrinsèques sont fortement liés à la concentration.

Il est à noter que les coefficients de diffusion augmentent avec la température, latéralement et en profondeur.

II.4.2.2-Cas de l'arsenic

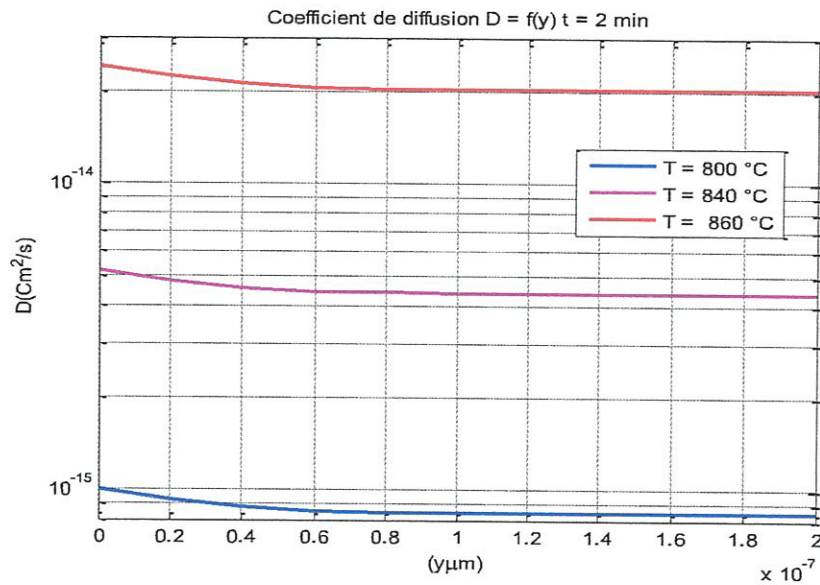
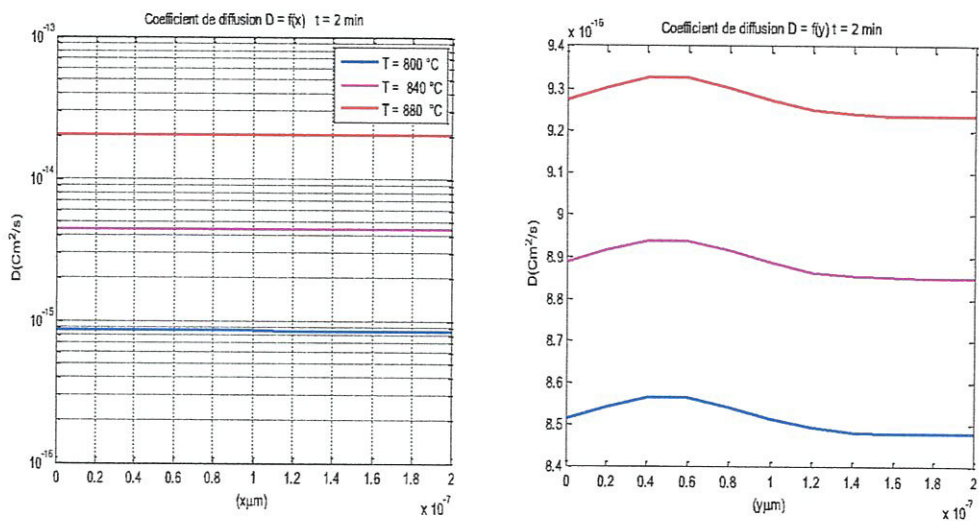


Figure IV.27 : Variation de coefficient de diffusion en profondeur



a) L'échelle logarithmique.

b) L'échelle linéaire.

Figure IV.28 : Variation de coefficient de diffusion latéralement

Nous remarquons, une faible diminution des valeurs de coefficient de diffusion en profondeur entre 0 et 0.03 μm . puis elles tendent à se stabiliser à partir de cette profondeur.

Dans le cas de la diffusion latérale la variation des coefficients de diffusion est plus faible latéralement.

Les valeurs des coefficients de diffusion augmentent avec l'augmentation de la température.

D'après les résultats de simulation, on peut conclure que :

- Le phénomène de la diffusion est active temporellement et thermiquement. Cependant la diffusion en fonction de la température est plus accélérée que celle en fonction du temps.
- La dose et l'énergie d'implantation influent sur la condition initiale, donc sur la diffusion au cours du temps. En effet, la profondeur moyenne et les déviations standards (vertical et latérale) varient en fonction de l'énergie d'implantation.
- La diffusion du Bore est plus active que celle de l'Arsenic, cela peut être expliqué par la faible taille des particules du Bore par rapport à celle de l'Arsenic.
- Les simulations effectuées en 2D montrent que la diffusion verticale est plus rapide que la diffusion latérale.

III-Conclusion

Nous avons abordé dans ce chapitre, des exemples de la simulation des profils de la diffusion bidimensionnelle du bore et de l'arsenic. Ces simulations nous ont permis de mettre en évidence l'effet de la dose, de l'énergie, de la température et le temps de recuit dans le cas de dopage par implantation. Nous avons remarqué que fondamentalement la diffusion du bore et de l'arsenic est fortement influencée par ces paramètres.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail concerne l'étude et la modélisation de la diffusion à deux dimensions des dopants dans le silicium à affinité microélectronique. Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à la résolution numérique de l'équation générale de la diffusion bidimensionnelle par l'utilisation de la méthode des différences finies. Nous avons traité particulièrement le cas de dopage par l'implantation ionique du bore et de l'arsenic dans une couche mince de polysilicium. Nous avons évoqué le cas des forts concentrations « model non linéaire » où le coefficient de diffusion varie en fonction de la concentration des dopants.

Les résultats ont montrés que la diffusion aussi bien latérale qu'en profondeur est fortement influencée par les paramètres technologiques à savoir l'énergie d'implantation, la dose et les paramètres de recuit thermique (température et durée).

En effet, la température joue un rôle prédominant sur la redistribution des dopants dans le silicium polycristallin. La variation des profils de concentration des dopants et les coefficients de diffusion ont mis en évidence que le phénomène de diffusion peut être contrôlé selon l'application visée, d'une part par les paramètres physiques de l'implantation ionique en l'occurrence l'énergie de l'implantation et la dose implantée et d'autre part par les traitements post implantation.

Les résultats de simulation ont montré en outre que la diffusion est accélérée en profondeur et ralentie latéralement.

Références Bibliographiques

Références Bibliographiques

[1] Frédéric Boucard

“Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonctions ”.
Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur – Strasbourg I, (2003).

[2] H.Mathieu

“Physique des semi-conducteurs et des composants électriques ”.
5^{ème} édition, Masson, paris,(1996).

[3] M.Shur, and M.Hack

“Physics of amorphous silicon based alloy field effect transistors”.
J.Appl.Phys., Vol.55, N°.10, p.3831 (1984).

[4] Aziz Fouad

“Caractérisation électrique et extraction, par la méthode de la température, de la densité d'états pièges dans les transistors en couches minces de silicium polycristallin”.
Mémoire de magister, université de Sidi-Bel-Abbès, (1995).

[5] Hachemi Bouridah

“Etude des propriétés de couches minces de silicium dope azote obtenues par LPCVD et implantées au bore pour grille polysilicium de transistors MOS”.
Thèse de Doctorat, Université Mentouri, Constantine (2005).

[6] M.H.Brodsky,R.S.Title,K.Weiser et G.D.Pettit

“Structural, optical, and electrical properties of amorphous silicon films”.
Physical review, p.2632-2641, (1970).

[7] Francis Levy

“physique et technologie des semiconducteurs”.
Traité des matériaux, second edition, p 18, 63 (1995).

[8] S. Ezhilvalavan, T. Y. Tseng

“Preparation and properties of tantalum pentoxide thin films for ultra-scale integrated circuits (ULSIs) application”.
A review. J. Mater. Sci: Mater. Electronics, Vol.10, p.9-31, (1999).

[9] W.G.Breiland et M.E.Coltrin

“Comparaisons between a gas-phase model of silane chemical vapor Deposition and laser-diagnostic measurements”. Journal of applied physics, no.9,p.3267-3273, 59(1984).

[10] J-A.M. Deoca-Valero

“Elaboration du carbure et nitrure de titane par des procédés chimiques et physiques en phase vapeur : caractérisation de la microstructure”. Thèse de doctorat, E.D.S.C –Université Bordeaux-France (2002).

[11] K.A. Taylor

“Thin Solid Films”. p.189, (1999).

[12] Mourad Khechba

“Caractérisation de la réaction interfaciale entre une couche mince de tungstène et un substrat d’acier”. Mémoire de Magister, Université Mentouri-Constantine(2008).

[13] Yan-Mei Jiang

“Pulvérisation cathodique assistée par ordinateur”. Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud Centre d'Orsay (1992).

[14] F.C.Everteryn and B.H.Pui

“Influence of AsH_3 , PH_3 , and B_2H_6 on the growth rate resistivity of polycrystalline silicon films a SiH_4-H_2 mixture”. J. Electrochem.Soc, Vol.120, p.106, (1973).

[15] P.TEMPLE-BOYER

“Nouveaux procédé d’obtention d’oxynitrure de silicium”. Thèse de Doctorat, INSA de Toulouse, France, 1995.

[16] S.M.ZSE

“ VLSI Technology ”. 2nd Edition, Murray Hill, New Jersey, (1988).

[17] S.M.ZSE

“ VLSI Technology ”. 2nd Edition, McGraw-Hill International Editions (1988).

[18] <http://www.eudil.fr/eudil/tec35/techno/technoiii-vcl.html>.

[19] U. Gösele and H. Strunk

“High-Temperature diffusion of phosphorus and boron phosphorus in silicon”.
Appl. Phys. Lett., 77(13), 1976 (2000).

[20] M. Yoshida, E. Arai, H. Nakamura and Y. Terunuma

“Excess vacancy generation mechanism at phosphorus diffusion into silicon”.
J. Appl. Phys, 45(4), 1498 (1974).

[21] D. Mathiot and J.C. Pfister

“Dopant Diffusion In Silicon : A Consistent View Involving Nonequilibrium Defects”.
J. Appl. Phys., 55(10), 3518 (1984).

[22] J. D. Plummer, M. D. Deal and P. B. Griffin

“Silicon VLSI Technology”.
Prentice Hall, Inc. (2000).

[23] P. M. Fahey, P. B. Griffin and J. D. Plummer

“Point defects and dopant diffusion in silicon”.
Rev. Mod. Phys, 61(2), 289 (1989).

[24] Nicolas Rodriguez

“Diffusion des dopants dans les dispositifs de la microélectronique : Co-diffusion de l'arsenic et du phosphore dans le silicium monocristallin, études unidimensionnelle et bidimensionnelle”.
Thèse de doctorat, Université Paul Cézanne (Aix – Marseille Iii) (2008).

[25] Yaser M. Haddara, Brennan T. Folmer, Mark E. Law and Temel Buyuklimanli

“Accurate measurements of the intrinsic diffusivities of boron and phosphorus in silicon”.
Appl. Phys. Lett, 77(13), 1976 (2000).

[26] C. S. Fuller and J. A Ditzenberger

“Diffusion of donor and acceptor element in silicon”.
J. Appl. Phys, 27, 544 (1956).

[27] O. Kraus, H. Ryssel and P. Pichler

“Determination of aluminum diffusion parameters in silicon”.
J. Appl. Phys., 91(9), 5645 (2002).

[28] D. Mathiot and J.C. Pfister

“Influence of the nonequilibrium vacancies on the diffusion of phosphorus into silicon”.

J. Appl. Phys, 53(4), 3053 (1982).

[29] U. Gösele and H.Strunk,High

“Temprerature diffusion of phosphorus and boron in silicon via vacancies or via self-interstitials”.

App.Phys,20,265 (1979).

[30] P. Pichler

“Intrinsic point defects, impurities, and their diffusion in silicon”.

ISBN 3-211-20687-6 Springer-Verlag Wien New York, (2004).

[31] R. O. Simmons and R. W. Ballafi

“Measurements of equilibrium vacancy concentrations in aluminum”.

J.Phys. Rev, 117(1), 52 (1960).

[32] R.B. Fair and J.C.C. Tsai

“A quantitative model for the diffusion of phosphorus in silicon and the emitter dip effect”.

J. Electrochem. Soc., 124(7), 1107 (1977).

[33] U. Gösele and H. Strunk

“High-Temperature diffusion of phosphorus and boron in silicon via vacancies or via self-interstitials”.

Appl. Phys, 20, 265 (1979).

[34] U. Gösele, W. Frank and A. Seeger

“Mechanism and kinetics of diffusion of gold in silicon”.

Appl. Phys, 23, 361 (1980).

[35] R. O. Simmons and R. W. Ballafi

“Measurements of equilibrium vacancy concentrations in aluminum”.

Phys. Rev, 117(1), 52 (1960).

[36] Noureddine Boubakour

“Analyse bidimensionnelle de la diffusion du bore implanté dans des films de silicium”.

Mémoire de magister, Université hadj lakhdar, Batna (2011).

[37] K.W.Morton

“Numerical solution of partial differential equations”.

Cambridge University press (2005).

8] Tahar Abbes Miloud

“Méthode des différences finies méthodes intégrales et variationnelles”.

3^{ème} édition, p.43.Alger (2006).

[39] Kenji Aniguchi, Masahiro Kashiwagi, and Hiroshi Iwai

“Two-Dimensional computer Simulation Models for MOSLSI Fabrication Processes”.

IEEE Trans.Electron Devises,vol.Ed-28,no.5, (1981).

[40] Yaiche Salim et Azzouz Hanane

“Etude de la diffusion de l’arsenic dans le polysilicium à affinité microélectronique”

Université de Jijel, (2003).

[41] H.Schaber, R.V.Criegern and I.Weitzel

Appl.Phys.Vol 58, 11, p.4036, (1985).

[42] Antonio Buonomo, and Carlo Di Bello

“Nonlinear Two-dimensional impurty diffusion in semiconductors: A Quasi-linear Numerical analysis”

IEEE (1984).

[43] Herbert L.Stones

“Iterativ solution of atomic displacement cascades in solids in the binary-collision approximation”.

Siam j. Numer. Anal. Vol. 5, No. 3, September (1968).