

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BENYAHIA JIJEL

Faculté des sciences et de la technologie

Département d'électronique

N° : ...../2023

## **MEMOIRE DE MASTER**

**DOMAINE : Sciences et Technologies**

**FILIERE : Electronique**

**SPECIALITE : MicroElectronique**

### **Thème**

*Contribution des traitements thermiques à réduire  
le nombre de sites de ségrégation aux joints de grains*

Présenté par : KAHLESSENANE NourElhouda  
MAKHLOUF Roukia

Encadré par : Dr. S. MERABET

Date de soutenance : 14 / 06 / 2023

#### **Jury de Soutenance**

Président : Mr. Riad REMMOUCHE

Grade : M. C. A

Univ MSB Jijel

Encadreur : Mme. Souad MERABET

Grade : M. C. A

Univ MSB Jijel

Examineur1 : Mr. Hakim HAOUES

Grade : M. C. B

Univ MSB Jijel

Promotion : 2022 /2023

# REMERCIEMENTS

*Louange à ALLAH qui lui seul nous a guidé dans le bon sens durant notre vie et qui nous a donné la force, la volonté, la patience et le courage pour accomplir ce modeste travail ; Merci de nous avoir éclairé le chemin de la réussite.*

*La première personne que nous tenons à remercier est notre encadreur Dr. MERABET Souad, pour l'orientation, la confiance, la patience qui ont constitué un apport considérable sans lequel ce travail n'aurait pas pu être mené au bon port. Qu'elle trouve dans ce travail un hommage vivant à sa haute personnalité.*

*Nous remercions également nos familles pour les sacrifices Qu'elles ont faits pour que nous terminions nos études.*

*Nous remercions, les membres de jury qui ont accepté d'examiner et de juger notre travail.*

*Nous tenons à remercier tous les enseignants du département d'électronique.*

*Enfin nous exprimons notre profonde reconnaissance à toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.*

*A tous, un grand merci.*

# DEDICACES

*Je dédie ce modeste travail :*

*A mes très chers parents (Mohamad et Djohar),  
que dieu les garde et les Protège pour leurs soutien  
moral et financier, pour Leurs encouragements et  
les sacrifices qu'ils ont endurés.*

*A mes frères Amir, Imad\_Eddine, Chouib*

*Et à ma sœur Amira.*

*Puisse Dieu vous donner santé, bonheur, courage et  
surtout réussite.*

*À toutes mes amies, et tous ce que j'aime et qui  
m'aiment.*



*Nour elhouda*

# DEDICACES

*Je dédie ce modeste travail :*

*A mes très chers parents (**ZIDEN et WAHIBA**), que dieu les garde et les Protège pour leurs soutien moral et financier, pour Leurs encouragements et les sacrifices qu'ils ont endurés.*

*A mon frère **Ismail***

*Et mes sœurs **choucha, hadjer et marieme.***

*Puisse Dieu vous donner santé, bonheur, courage et surtout réussite.*

*À toutes mes amies, et tous ce que j'aime et qui m'aiment.*



***Roukia***

# Sommaire

<b>LISTE DES FIGURES.....</b>	<b>I</b>
<b>LISTE DES TABLEAUX.....</b>	<b>III</b>
<b>LISTE DES ACRONYMES .....</b>	<b>IV</b>

## Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE I: ETAT DE L'ART SUR LE SILICIUM.....</b>	<b>3</b>
I.1 Introduction.....	4
I.2 La structure du silicium .....	4
I.3 Reseau cristallin et maille cristalline .....	4
I.3.1 Reseau cristallin .....	4
I.3.2 Maille cristalline .....	5
I.3.3 Systeme cristallin cubique .....	6
I.4 Structure des bandes d'energie .....	7
I.4.1 Gap direct et gap indirect.....	8
I.4.1.1 Les semi-conducteurs a gap direct.....	8
I.4.1.2 Les semi-conducteurs a gap indirect.....	8
I.5 Differentes formes du silicium.....	9
I.5.1 Le silicium monocristallin .....	9
I.5.2 Le silicium amorphe .....	11
I.6 Differentes gammes du silicium .....	12
I.6.1 Silicium poly-cristallin.....	12
I.6.2 Silicium multi-cristallin .....	13

I.6.3	Le silicium microcristallin .....	14
I.7	Types des défauts dans le silicium.....	15
I.7.1	Défauts sans dimension (0d) : défauts ponctuels.....	15
I.7.2	Défauts linéaires (1d) : dislocations.....	16
I.7.3	Défauts surfaciques (2d) : joints de grains.....	16
I.7.4	Défaut volumique (3d).....	17
I.8	conclusion .....	17
	<b>CHAPITRE II: MODELE THEORIQUE.....</b>	<b>18</b>
II.1	Introduction .....	19
II.2	Transport des porteurs dans le silicium polycristallin.....	19
II.2.1	Modèle des joints de grains.....	20
II.2.1.1	Modèle de ségrégation des dopants .....	20
II.2.1.2	Modèle de piégeage .....	21
II.2.2	Phénomène de transport .....	23
II.2.2.1	Modèle des joints de grains .....	23
II.3	Concentration des porteurs.....	25
II.4	Conclusion.....	26
	<b>CHAPITRE III: RESULTATS ET DISCUSSIONS .....</b>	<b>27</b>
III.1	Introduction .....	28
III.2	Le modèle.....	28
III.3	Résultats et discussions .....	29
III.3.1	Evaluation de la barrière de potentiel.....	30
III.3.2	Concentration des porteurs libres .....	32
III.3.3	Concentration des porteurs aux joints de grains.....	33
III.3.4	Concentration des porteurs dans les grains .....	34

III.4	Validation des résultats obtenus .....	34
III.5	Conclusion.....	35
	<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>37</b>

## Listes des Figures

<i>Figure I.1 Représentation d'une structure de silicium [10].</i>	4
<i>Figure I.2 Exemple de structure cristalline à deux démentions [12].</i>	5
<i>Figure I.3 Maille dans un réseau cristallin [12].</i>	5
<i>Figure I.4 Maille élémentaire [12].</i>	6
<i>Figure I.5 Les structures cristallines cubiques [12].</i>	7
<i>Figure I.6 Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semi-conducteur et un conducteur [13].</i>	8
<i>Figure I.7 Semi-conducteur à gap direct et à gap indirect [13].</i>	9
<i>Figure I.8 Structure cristallographique du silicium monocristallin [14].</i>	10
<i>Figure I.9 Lingots de silicium monocristallin [16].</i>	11
<i>Figure I.10 Le silicium amorphe [17].</i>	12
<i>Figure I.11 Structure du silicium poly cristallin [18].</i>	13
<i>Figure I.12 Structure de grains dans une plaquette de silicium multi-cristallin [14].</i>	14
<i>Figure I.13 Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin [14].</i>	14
<i>Figure I.14 Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle [14].</i>	15
<i>Figure I.15 Schématisation du vecteur de Burger pour : (a) dislocation coin et (b) dislocation vis [14].</i>	16
<i>Figure I.16 Image MEB des Joints de grains [4].</i>	17
<i>Figure II.1 : Diagramme de bande d'énergie dans le silicium poly-cristallin [19]</i>	19
<i>Figure II.2: Modèle de Seto [20].</i>	21
<i>Figure II.3: Hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la concentration de dopage [24].</i>	23

<i>Figure II.4: Mécanisme de transport des porteurs à travers une barrière de potentiel [1,3].</i>	<i>24</i>
<i>Figure III.1 : La barrière de potentiel dépendante du dopage aux joints de grains [33].</i>	<i>28</i>
<i>Figure III.2 : La hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation du taux de dopage</i>	<i>31</i>
<i>Figure III.3 : Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.</i>	<i>31</i>
<i>Figure III.4: Concentration des porteurs libres en fonction de la variation de la température du traitement thermique.</i>	<i>32</i>
<i>Figure III.5: Concentration des porteurs aux joints de grains en fonction de la variation de la température du traitement thermique</i>	<i>33</i>
<i>Figure III.6 : Concentration des porteurs dans les grains en fonction de la variation de la température du traitement thermique.</i>	<i>34</i>

## **Liste des tableaux**

<i>Tableau III.1 : Résultats de calculs.....</i>	<i>30</i>
<i>Tableau III.2 : Données de littérature. ....</i>	<i>35</i>

## Liste des acronymes

### **B**

$B_C$ : Bande de conduction.

$B_V$ : Bande de Valence.

### **E**

$E_g$ : Energie de gap.

$E_b$ : Barrière de potentiel énergétique.

$E_C$ : L'énergie de la bande de conduction

$E_V$ : L'énergie de la bande valence

$E_f$ : Niveau de Fermi.

$E_i$ : Le niveau d'énergie intrinsèque.

### **J**

$J_{th}$ : La densité de courant d'émission thermoïonique.

### **K**

$K$ : Constante de Boltzman.

### **L**

$L_G$ : La taille de grain.

### **M**

$m^*$ : La masse effective du porteur.

MEB : (Scanning Electron Microscopy) Microscope électronique à balayage.

### **N**

$n$ : Concentration des porteurs libres.

$N$ : Concentration de dopants.

$N^*$ : Concentration critique de dopants.

$N_t$ : Densité d'états pièges aux joints de grains.

$N_{GB}$  Concentration des porteurs aux joints de grains.

$N_{GI}$  Concentration des porteurs dans les grains.

## **P**

$P_a$  : La concentration moyenne des porteurs.

$P_b$  : La concentration assignée dans monocristal.

PLCVD : dépôt chimique en phase vapeur à basse pression (Low Pressure Chemical Vapor Deposition).

## **Q**

$q$  : Charge élémentaire.

$Q_t$  : Charge aux niveaux des pièges aux joints de grains.

## **T**

$T$  : Température.

## **U**

$\mu_{eff}$  : Mobilité effective des porteurs.

$U_a$  : Tension appliquée.

## **V**

$V$  : Potentiel électrostatique.

$V_b$  : Hauteur de la barrière de potentiel.

## **W**

$W$  : Largeur de la zone de déplétion.

$\epsilon_{si}$  : Permittivité du semi-conducteur (silicium).

$\epsilon_0$  : Permittivité du vide.

$\sigma$  : Conductivité du polysilicium.

## **Introduction générale**

L'avènement de la technologie silicium est sans doute l'une des avancées les plus importantes à la fois dans les domaines de la microélectronique et de l'optoélectronique [1]. La motivation des recherches à étudier les potentialités des films de silicium vise à leurs applications dans divers secteurs industriels, comme matériau de base, par exemple, pour la fabrication de circuits intégrés, des cellules photovoltaïques, etc [2].

Les films de silicium polycristallin sont obtenus à partir de diverses méthodes de dépôts chimiques tels que la méthode LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) qui permet d'aboutir à des films de bonne qualité à basse pression. Ce matériau présente une structure caractérisée par une juxtaposition de grains, séparés les uns des autres par les joints de grains [2-3].

La structure cristalline des grains est généralement similaire à celle d'un monocristal de silicium, avec un arrangement périodique d'atomes supposé exempt de défauts. Cependant, un grain peut présenter des sous-joints dus à des réseaux de dislocations ou de macles formés pendant la croissance du matériau [2]. En pratique, on observe que la taille des grains suit une distribution autour d'une taille caractéristique, qui permet d'une façon globale de différencier les différents types de silicium polycristallin [4]. En effet l'appellation silicium polycristallin (ou Poly-Si), est utilisé dans le cas général, tandis que « nc-Si », «  $\mu$ -Si » et « pc-Si » correspondent à des gammes de tailles de grains. Notons que, les propriétés recherchées dans les matériaux dépendent de l'application à laquelle ils sont destinés [2].

La taille des grains des structures de silicium polycristallins déposé par LPCVD est fortement influencée par les conditions de recuits. Ainsi, un matériau amorphe peut se transformer en matériau polycristallin lors des recuits à plus de 900°C [5] ; La taille moyenne des grains augmente avec la température de recuit [6] ; Cette augmentation est proportionnelle à la racine carrée de la durée de recuit, attribuée à la diffusion des atomes de silicium à travers les joints de grains [7].

En fonction de la concentration de dopants et de l'espèce dopante, la taille des grains augmente aussi [8]. Suivant ces deux facteurs, le coefficient de diffusion du silicium varie différemment, en relation avec la création des lacunes et la ségrégation du dopant. D'après

des études précédentes [6], il a été observé que la taille moyenne des grains dans une couche polycristalline dopée Arsenic ou Bore, avec une concentration inférieure à  $2 \times 10^{19}$  ( $/\text{cm}^{-3}$ ), est approximativement la même que celle des grains d'un film non dopé, recuit à la même température. Par contre, pour des concentrations de dopants supérieures à  $2 \times 10^{19}$  ( $/\text{cm}^{-3}$ ), la taille moyenne des grains augmente. Cependant, la croissance des grains dans une couche dopée au bore est inférieure à des couches dopées à l'Arsenic ou au Phosphore [6].

Dans le cadre de ce qui a été présenté précédemment, nous nous sommes intéressés à l'influence du traitement thermique pendant diverses durées et températures sur la variation de la taille des grains dans une série de films de silicium polycristallin ; Ainsi, le travail a été développé en trois chapitres.

Dans le premier chapitre, nous effectuons une revue de l'état de l'art sur les différentes formes de silicium, notamment le monocristallin, l'amorphe, le polycristallin, le microcristallin et le nanocristallin. Nous abordons également les différents défauts de structure présents dans les matériaux de silicium ainsi que les pièges associés.

Le deuxième chapitre présente le modèle utilisé pour décrire le mécanisme de transport des porteurs à travers les joints de grains dans un matériau polycristallin ou multicristallin. Ce modèle suppose que tous les grains ont une taille moyenne identique.

Le troisième chapitre regroupe les résultats obtenus et leur analyse, et enfin, nous terminerons par une conclusion générale.

*Chapitre I :*  
*Etat de l'art sur le silicium*

## I.1 Introduction

Le silicium est un élément chimique, de symbole Si et de numéro atomique 14 dans le tableau périodique des éléments (le tableau de Mendeleïev). C'est l'élément le plus abondant sur la Terre après l'oxygène (27,6%). Il n'existe pas à l'état libre mais sous forme de composés : de silice (dans le sable, le quartz, etc.) ou de silicates (dans les feldspaths, la kaolinite, etc.). Il appartient à la famille des semi-conducteurs, on le trouve sous plusieurs formes tel que : amorphe, monocristalline et poly-cristalline.

## I.2 La structure du silicium

Le silicium cristallin se cristallise dans une structure de type diamant, où chaque atome du réseau est entouré par quatre proches voisins équidistants. Cette structure en réseau forme un tétraèdre, et chaque atome de silicium échange ses quatre électrons de valence avec ces atomes voisins. Cette information est soutenue par des études structurales et des recherches sur les propriétés du silicium cristallin [9].

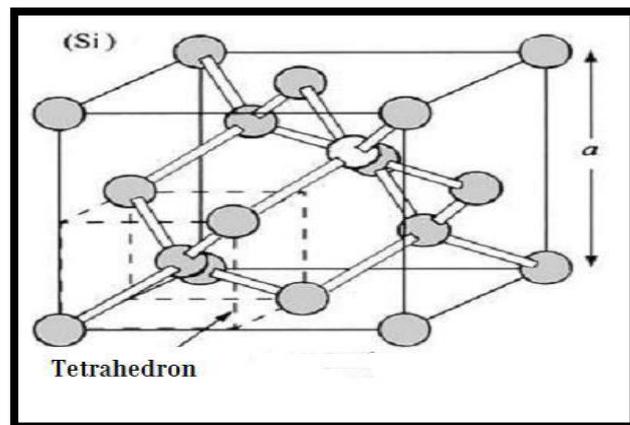


Figure I.1: Représentation d'une structure de silicium [10].

## I.3 Réseau cristallin et Maille cristalline

### I.3.1 Réseau cristallin

Un solide cristallin est formé par la répétition périodique, dans les trois dimensions de l'espace, d'un motif atomique ou moléculaire spécifique contenu dans une unité de répétition périodique appelée maille. Cette organisation rappelle la répétition d'un motif sur du papier peint. L'organisation périodique de la structure d'un cristal est représentée par un ensemble de points régulièrement

disposés. Ces points, constituant l'ensemble, sont appelés nœuds du réseau cristallin. Ainsi, un réseau cristallin est défini comme un ensemble de points, ou "nœuds", disposés en trois dimensions [11].

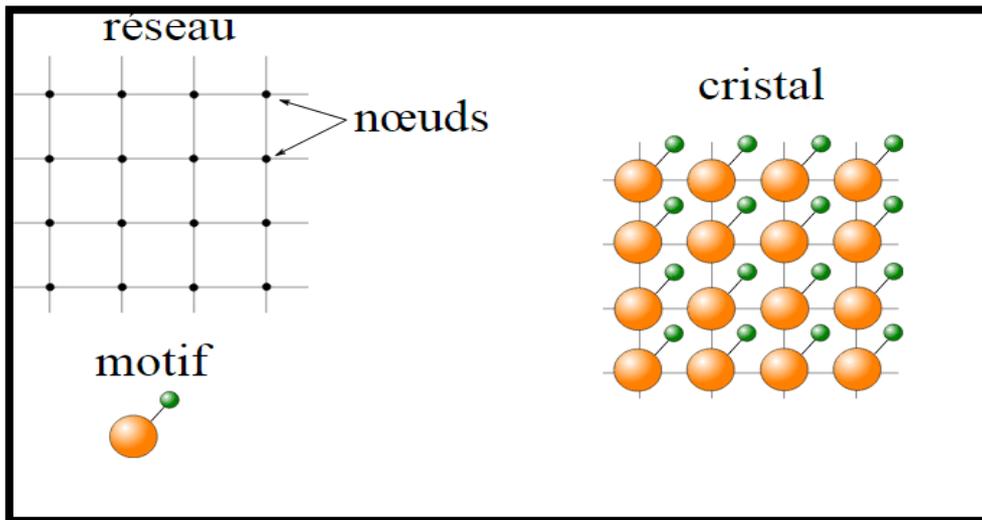


Figure I.2: Exemple de structure cristalline à deux démentions [12].

### I.3.2 Maille cristalline

On appelle maille tout parallélogramme dont les quatre sommets sont des nœuds du réseau. C'est le plus petit élément qui se répète par translation selon un réseau régulier pour former le cristal. Il peut s'agir d'atome, de molécule ou d'ion.

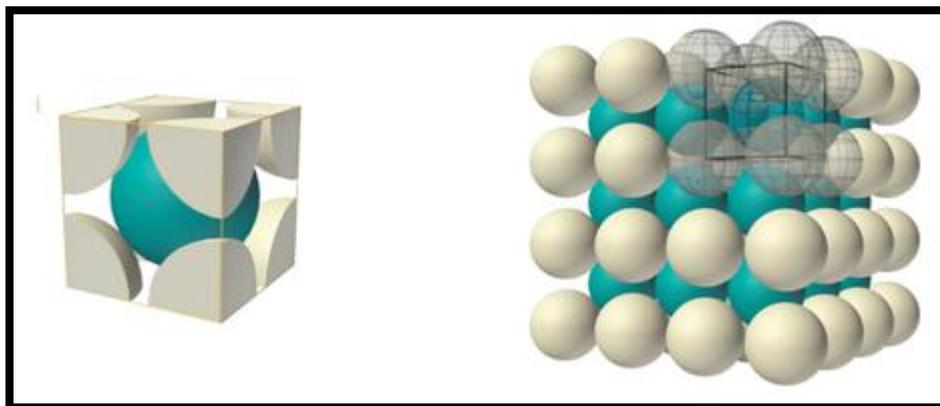


Figure I.3: Maille dans un réseau cristallin [12].

Soit un trièdre de référence (OXYZ) définit par ses trois vecteurs de base  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$  non coplanaires. Le parallélépipède construit sur ces trois vecteurs unitaires constitue la maille élémentaire. Une maille élémentaire est définie par :

- La longueur des arêtes (a, b et c) ;
- Les angles qui font les vecteurs les uns par rapport aux autres ( $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ) :

$\alpha$  : l'angle entre le vecteur unitaire  $b^{\rightarrow}$  et le vecteur unitaire  $c^{\rightarrow}$  ;

$\beta$  : l'angle entre le vecteur unitaire  $a^{\rightarrow}$  et le vecteur unitaire  $c^{\rightarrow}$  ;

$\gamma$  : l'angle entre le vecteur unitaire  $a^{\rightarrow}$  et le vecteur unitaire  $b^{\rightarrow}$  [4] ;

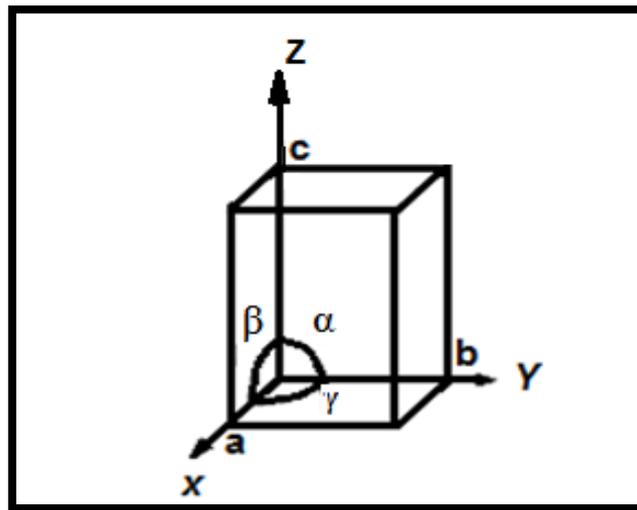


Figure I.4: Maille élémentaire [12].

### I.3.3 Système cristallin cubique

En cristallographie, le système cristallin cubique est un système cristallin qui contient les cristaux dont la maille élémentaire est cubique, c'est-à-dire possédant quatre axes ternaires de symétrie.

Il existe trois types de telles structures : cubique simple, cubique centrée et cubique à faces centrées.

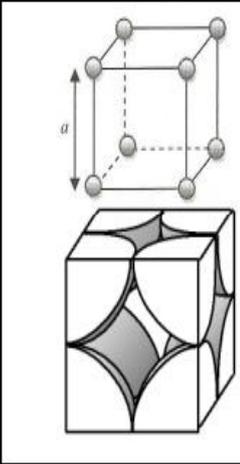
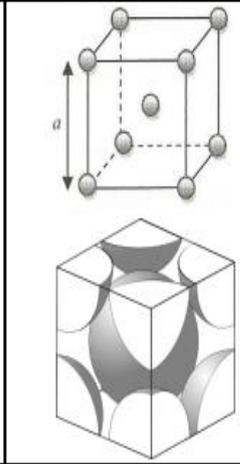
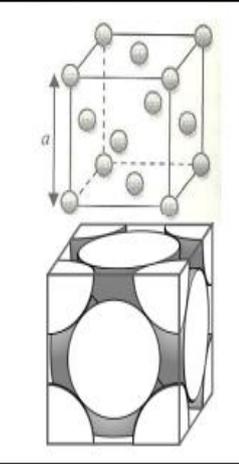
	Cubique	Cubique centrée	Cubique faces centrées
Maille			
Multiplicité	1	2	4
Condition de tangence	Atomes tangents sur chaque arête : $2R = a$	Atome central tangent aux atomes des sommets : $4R = a\sqrt{3}$	Atome au centre d'une face tangent aux atomes des sommets de la même face : $4R = a\sqrt{2}$

Figure I.5: Les structures cristallines cubiques [12].

#### I.4 Structure des bandes d'énergie

Un matériau semi-conducteur se caractérise par sa structure de bande :

- La bande de valence : c'est la bande qui correspond à la bande d'énergie la plus élevée entièrement remplie d'électrons.
- La bande de conduction : est définie comme le premier niveau énergétique au-dessus de la bande de valence où accèdent les électrons excités.
- La bande interdite : cette bande représente l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour qu'il passe de la bande de valence à la bande de conduction.

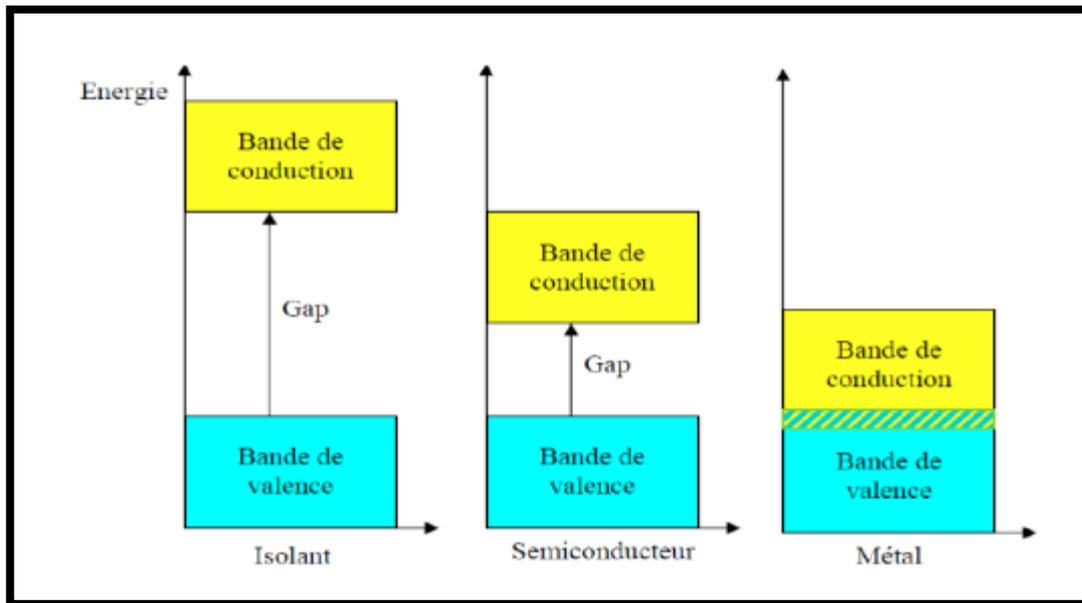


Figure I.6: Structure des bandes d'énergie dans un isolant, un semi-conducteur et un conducteur [13].

#### I.4.1 Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie  $E$  et un vecteur d'onde  $k$ .

Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence.

##### I.4.1. a. Les semi-conducteurs à gap direct

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde  $k$  le semi-conducteur est dit à gap direct.

##### I.4.1. b. Les semi-conducteurs à gap indirect

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  le semi-conducteur est dit à gap indirect. La distinction entre les semi-conducteurs à gap direct et indirect est très importante, notamment, dans les processus radiatifs, les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect [13].

Les structures de bandes représentées sur la figure I.7, font apparaître deux types fondamentaux de semi-conducteurs :

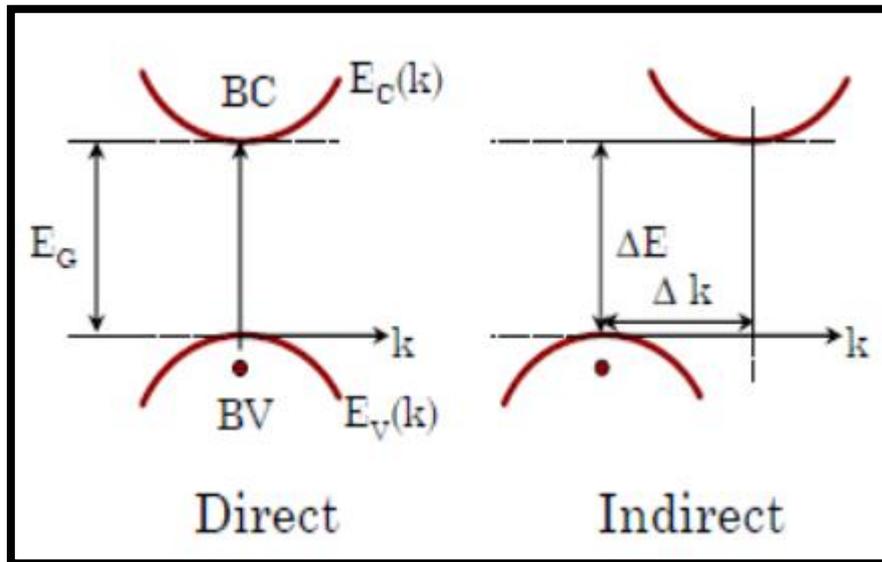


Figure I.7: Semi-conducteur à gap direct et à gap indirect [13].

## I.5 Différentes formes du silicium

En fonction de sa structure cristalline, le silicium peut se présenter sous deux différentes formes : le silicium monocristallin et le silicium amorphe.

### I.5.1 Le silicium monocristallin

Le silicium monocristallin, est le matériau qui présente les meilleures propriétés électroniques grâce à sa grande pureté et à sa structure composée d'un seul grain. Il est élaboré à partir du procédé Czochralski ou par la purification par fusion de zone. Ces procédés sont réalisés à très haute température en phase liquide.

Le silicium monocristallin (ou cristallin-Si) possède un ordre à grande distance. Dans un cristal idéal de silicium, les atomes occupent les nœuds d'un réseau cubique à faces centrées dont la moitié des sites tétraédriques est occupée, la distance interatomique est de  $d = 2,35 \text{ \AA}$  ;

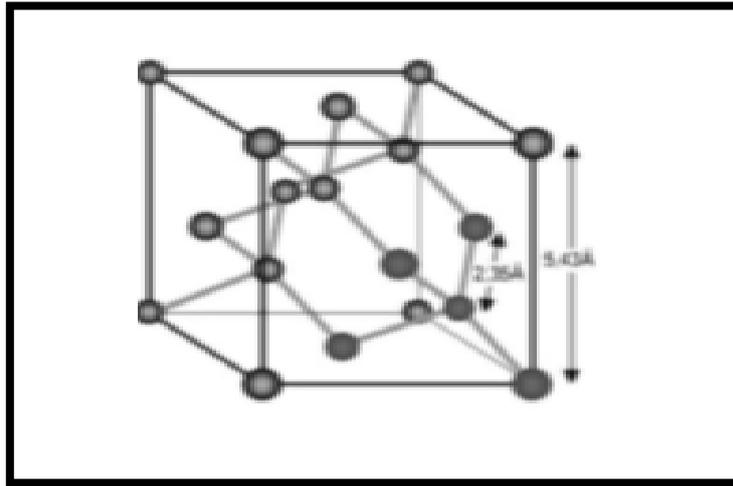


Figure I.8: Structure cristallographique du silicium monocristallin [14].

La liaison entre les atomes les plus proches est de caractère de type  $3sp$  (angle de liaison  $109^{\circ} 28'$ ). A ce type de liaison correspond des états électroniques qui sont couplés entre eux, dont le potentiel périodique dans le cristal conduit à des bandes d'énergie permises et interdites pour les électrons. La structure de bande de c-Si est marquée par la présence de plusieurs transitions interbandes indirectes. Cette énergie de gap est de 1.12 V à température ambiante, elle est assistée par phonon, entre le plus haut niveau de la bande de valence et le plus bas état de la bande de conduction. Le silicium ne présente donc aucun intérêt pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques telles que les diodes électroluminescentes ou laser puisqu'il est quasiment non luminescent à température ambiante et n'émet que très faiblement à très basse température dans le domaine de l'infrarouge. Cependant, la réalisation de nombreux dispositifs commence par la production d'une matière monocristalline de grande pureté. En particulier la fabrication de puces microélectroniques nécessite des substrats monocristallins semi-conducteurs, par exemple : du silicium, du germanium ou de l'arséniure de gallium. Dans le cas du silicium, la fusion de zone et le tirage en creuset (méthode de Czochralski) ; sont les deux méthodes utilisées couramment pour obtenir des lingots monocristallins de grande pureté, longs de un mètre et d'un diamètre allant de 300 mm jusqu'à 450 mm (Figure I.9). On a des rendements photovoltaïques élevés, supérieurs à 15% [15].



Figure I.9: Lingots de silicium monocristallin [16].

### I.5.2 Le silicium amorphe

Le silicium amorphe est une forme non cristalline du silicium. Sa structure atomique est désordonnée, non cristallisée, mais il possède un coefficient d'absorption supérieur à celui du silicium cristallin. Cependant, ce qu'il gagne en pouvoir d'absorption, il le perd en mobilité des charges électriques. A cause d'une certaine distribution de la distance interatomique et de l'angle de liaison, des distorsions apparaissent dans le réseau, induisant une distribution des états électroniques, ce qui se traduit par l'apparition d'états localisés dans la bande interdite en haut de la bande de valence et en bas de la bande de conduction. Ils forment ce que l'on appelle les queues de bande. D'autre part, ces distorsions peuvent devenir suffisamment importantes pour empêcher une liaison de se former et ainsi de donner lieu à des liaisons insatisfaites, que l'on appelle également liaisons pendantes tel que représenté sur la figure I.10. Ces dernières ont une très grande influence sur les propriétés électroniques du silicium amorphe. Elles sont caractérisées par la présence d'un électron célibataire de l'atome concerné. Un second électron peut aisément s'y fixer, pour former une paire d'électron, 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 [17].

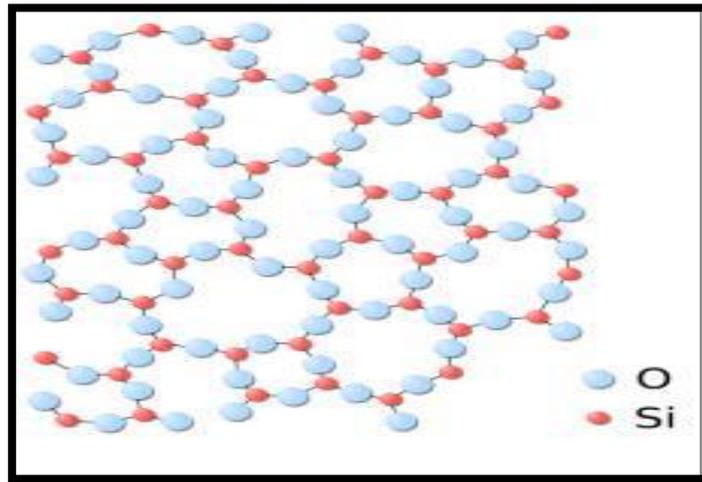


Figure I.10: Le silicium amorphe [17].

## I.6 Différentes gammes du silicium

En fonction de la taille des grains, le silicium peut se présenter sous différentes formes : silicium multi-cristallin, silicium microcristallin et silicium poly-cristallin.

### I.6.1 Silicium poly-cristallin

C'est une structure intermédiaire entre les deux états extrêmes amorphe et monocristallin. 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 poly-cristallin ou le poly silicium. Ce matériau est un assemblage de petits cristaux dits grains, séparés les uns aux autres par des zones inter-grains ou joints de grains. A l'intérieur de chaque grain, les atomes sont arrangés d'une manière périodique de façon qu'on puisse considérer chaque grain comme un mono cristal, qui a une orientation cristallographique propre à lui. D'autre part, le joint de grain est une structure complexe, qui se compose de quelques couches d'atomes désordonnées (zone fortement désordonnée riches en défauts cristallins que l'on peut assimiler au silicium amorphe). Ces atomes constituent une région de transition entre grains adjacents. Il est couramment admis que l'influence de joint de grain reste prépondérante sur les propriétés électriques et structurales des poly-cristaux de silicium. On peut dire que 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 de poly silicium serait donc une erreur et c'est

pourquoi il est toujours nécessaire de définir le silicium poly-cristallin selon certains critères que l'on peut résumer comme suit : la texture et taille du grain, la densité de défauts intra granulaires et intergranulaires, le rapport du volume cristallin sur le volume amorphe et la porosité. Ces paramètres dépendent totalement des conditions de dépôt et du post-traitement (recuit, hydrogénation, etc..) du silicium. La figure I.11, illustre la structure d'un film de poly silicium constitué de joints de grains et de grains dont la taille devrait dépendre des conditions de recuit pour l'obtention d'une couche de silicium poly-cristallin quasiment cristallisée [17].

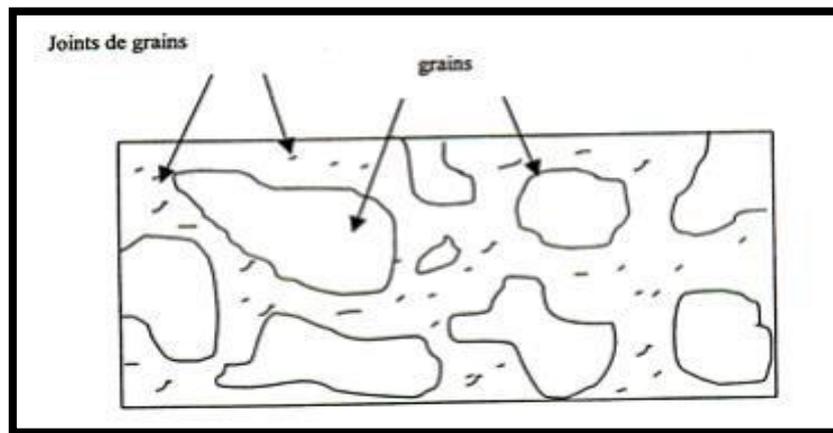


Figure I.11: Structure du silicium polycristallin [18].

### I.6.2 Silicium multi-cristallin

Cette structure est constituée de monocristaux séparés les uns des autres par des régions désordonnées et riches en défauts que l'on appelle joints de grain. Le silicium multicristallin est fabriqué à partir des résidus provenant de la fabrication du silicium monocristallin. Le procédé de cristallisation consiste en la refonte de ces résidus suivie d'une solidification unidirectionnelle sous forme de structure colonnaire multicristalline à gros grains, dont la taille est comprise entre 1nm et 10 cm. Un exemple d'une structure multicristalline de silicium est illustré sur la figure I.12.

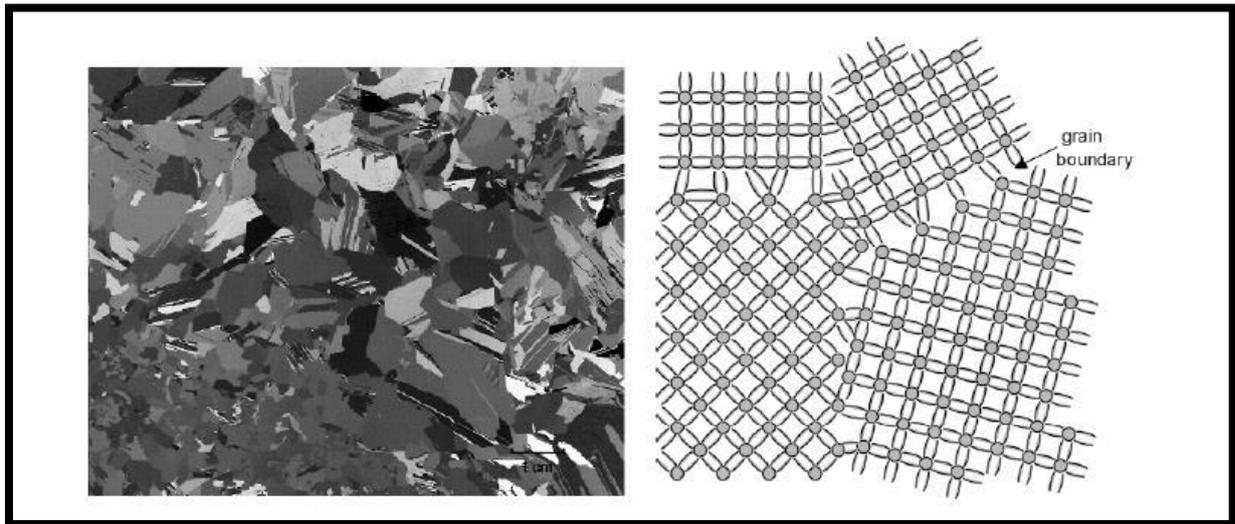


Figure I.12: Structure de grains dans une plaquette de silicium multi-cristallin [14].

### I.6.3 Le silicium microcristallin

Le silicium microcristallin a une structure colonnaire. Il est composé de cristallites de diamètre de 10 à 20 nm qui peuvent également s'agglomérer en structure allongée conique [18]. Ce matériau hétérogène est constitué de trois composantes : en plus des deux phases amorphe et cristallin ; la présence des joints de grains riches en porosité. Sur la figure I.13, est représentée une schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin.

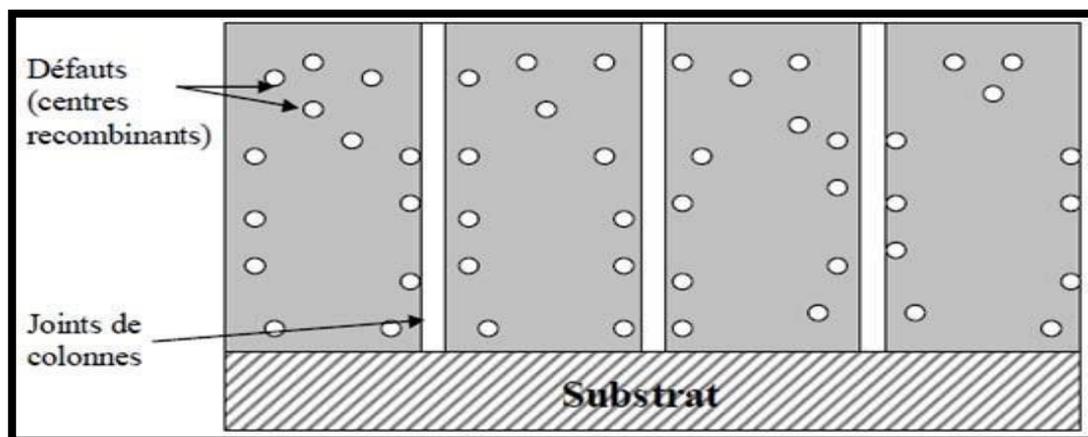


Figure I.13: Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin

[14].

## I.7 Types des défauts dans le silicium

Les défauts correspondent aux régions microscopiques d'un cristal dans lesquelles un atome est entouré de proches voisins situés en des positions différentes de celles observées dans un cristal parfait. Traditionnellement, les défauts sont répartis en quatre catégories suivant leur dimensionnalité comme suit :

- Défauts sans dimension (0D) : comme les défauts ponctuels (atomes interstitiels ou auto-interstitiels, lacunes...).
- Défauts à une dimension (1D : linéaires) : les dislocations.
- Défauts à deux dimensions (2D : surfaciques) : les joints de grains.
- Défauts à trois dimensions (3D : volumiques) : les précipités ou inclusions [14].

### I.7.1 Défauts sans dimension (0D) : défauts ponctuels

Les défauts ponctuels se traduisent par une perturbation de l'ordre cristallin sur des dimensions limitées à une maille cristallographique typiquement :

- Les lacunes correspondent à un vide laissé dans la structure sur un site normalement occupé par un atome (Figure I.14.a) ;
- Les atomes interstitiels sont des atomes en surnombre dans une structure ou bien des impuretés placés sur des sites normalement vides (Figure I.14.b);
- Dans le cas où un atome occupe un site normalement occupé par un atome de nature chimique différente, on parle d'impureté substitutionnelle (Figure I.14.c) [14].

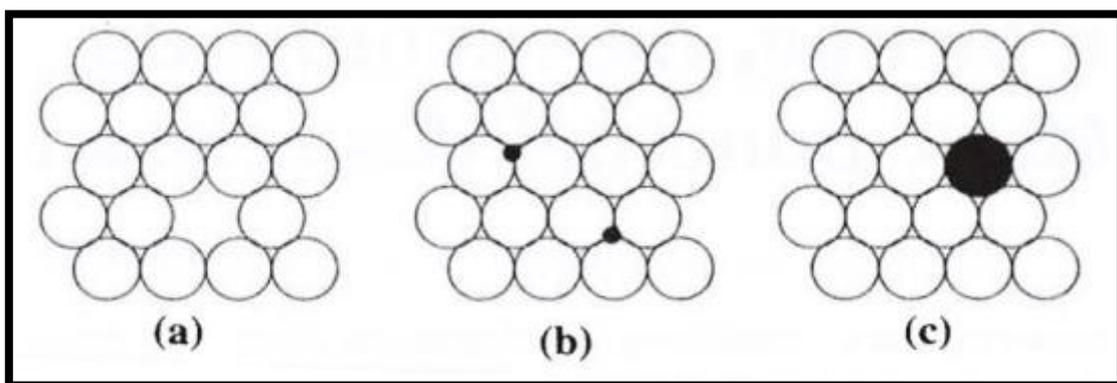


Figure I.14: Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle [14].

### I.7.2 Défauts linéaires (1D) : Dislocations

Lorsque le cristal se déforme au-delà de la plage élastique, des lignes apparaissent à la surface. Il s'agit en fait d'une trace des plans cristallins glissant les uns contre les autres. Sous l'action d'une contrainte mécanique, ces traces prouvent l'existence de défauts cristallins linéaires appelés dislocations. Il existe deux types de luxations : les luxations en spirale et les luxations en lame. Chaque dislocation est définie par son vecteur de Burgers ( $b$ ). Celle-ci est perpendiculaire à la ligne de dislocation pour les dislocations angulaires et parallèle à la ligne de dislocation pour les dislocations spiralées. Les deux types de luxation sont illustrés à la figure I.15. Pour les dislocations mixtes, le vecteur de Burgers fait un angle aléatoire avec la ligne de dislocation [14].

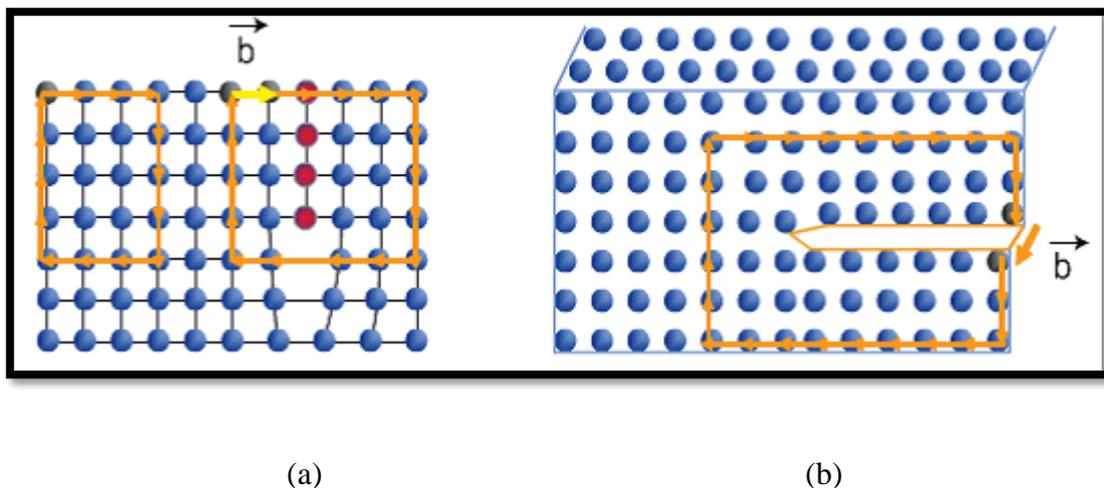


Figure I.15: Schématisation du vecteur de Burger pour : (a) dislocation coin et (b) dislocation vis [14].

### I.7.3 Défauts surfaciques (2D) : Joints de grains

Les joints de grains représentent des régions chaotiques qui combinent des particules dans différentes directions. Ils représentent des zones chaotiques souvent comparées au silicium amorphe. Dans ce dernier cas, les joints de grains contiennent des liaisons pendantes à haute densité. Ces défauts introduisent des niveaux locaux dans la bande interdite qui ont pour effet de piéger les porteurs minoritaires. Ces lieux forment un centre de recombinaison car il agit comme un puits de potentiel par rapport aux porteurs minoritaires. Cela affaiblit la densité de porteurs minoritaires et réduit les propriétés électriques de l'ensemble du semi-conducteur poly cristallin. Les joints de grains sont aussi le lieu de ségrégation de l'élément

dopant qui devient inerte. Cet effet est plus important d'une part lorsque le rayon atomique du dopant est grand devant le rayon atomique du silicium, ou d'autre part lorsque la densité de l'élément dopant est élevée. La Figure I.16 montre les joints de grains du silicium [14].

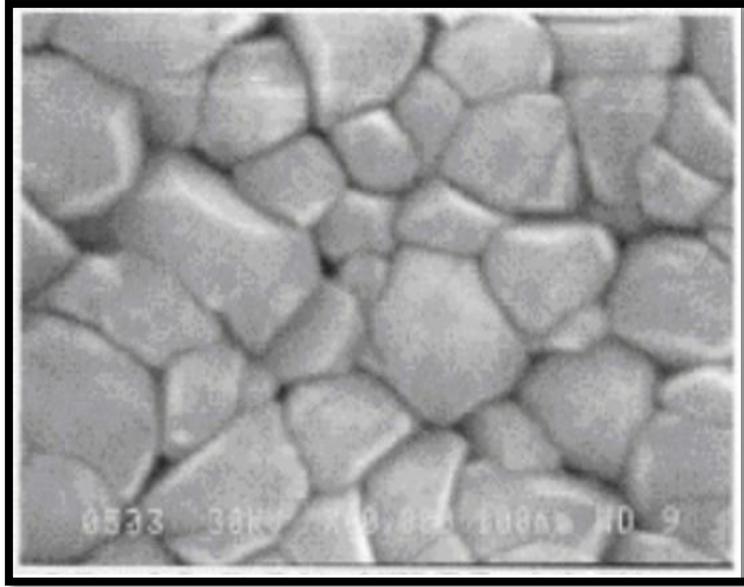


Figure I.16: Image MEB des Joints de grains [4].

#### I.7.4 Défaut volumique (3D)

Les défauts volumiques sont des défauts tridimensionnels. Si une partie du cristal est remplacée par un volume d'un autre composé, la différence est de nature chimique et peut être ou non cristallographiquement différente [14].

#### I.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé la structure du silicium de manière détaillée. En récapitulant, nous pouvons conclure que le silicium présente deux classifications basées sur sa structure cristalline : monocristallin et amorphe. D'un autre côté, le silicium peut être classé en différentes catégories selon la taille des grains : multi-cristallin, poly-cristallin, etc

*Chapitre II :*  
*Modèle théorique*

## II.1 Introduction

Le silicium polycristallin est composé de grains monocristallins, séparés par des zones déficientes en termes de structure, appelées joints de grains. Ces joints de grains ont un impact électrique en formant des états pièges d'interface. Les porteurs libres se trouvent piégés à des positions d'énergie faible au niveau des joints de grains, ce qui provoque une courbure des bandes d'énergie (Figure II.1) [19]. Cette courbure entrave le déplacement des autres porteurs majoritaires d'un grain à l'autre, créant ainsi une barrière de potentiel [19].

Ce chapitre présente un modèle [20], largement cité dans la littérature servant à décrire l'impact des joints de grains sur le comportement électrique et les phénomènes de transport dans ce matériau.

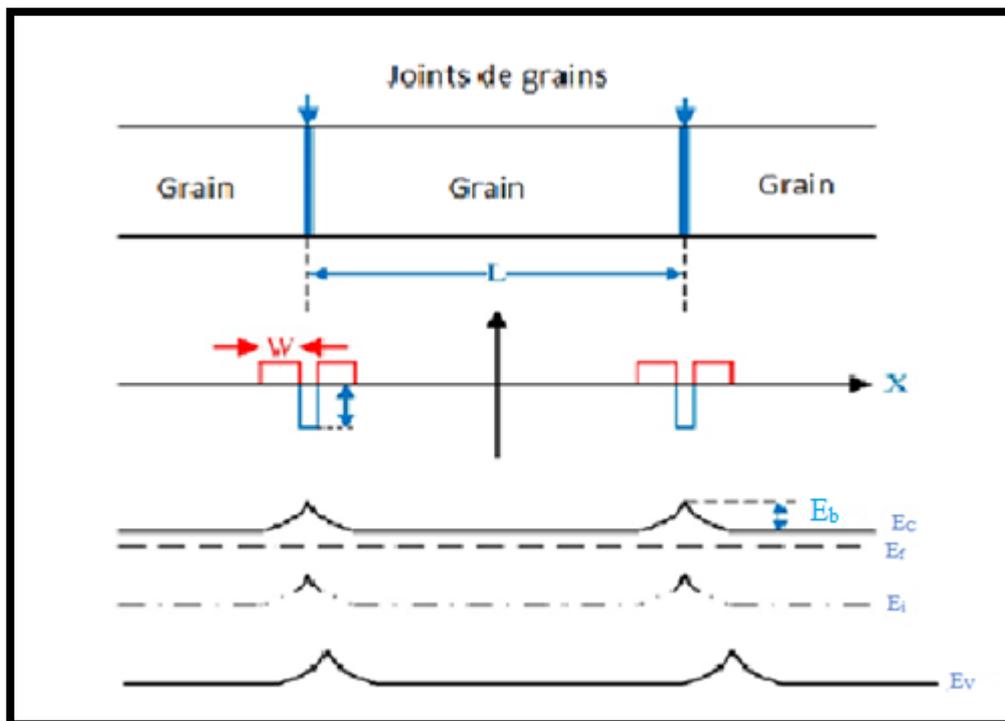


Figure II.1: Diagramme de bande d'énergie dans le silicium poly-cristallin [19].

## II.2 Transport des porteurs dans le silicium polycristallin

Rappelons qu'un matériau polycristallin se situe à "mi-chemin" entre un monocristal et une substance amorphe. Il est constitué d'un nombre plus au moins élevé de grains qui sont de véritables petits réseaux monocristallins possédant globalement une orientation préférentielle qui s'intensifie ou se réduit en fonction des conditions d'élaboration du matériau et des

traitements thermiques subis ultérieurement [21]. Ces petites cristallites sont liées entre eux par des joints de grains qui ont une structure essentiellement amorphe. C'est l'effet de ces joints inter-granulaires sur la conductivité des couches polycristallines qui fait toute la différence avec celle des semi-conducteurs classiques. L'action de ces zones sur la conductivité électrique du polycristal est représentée par leur capacité à piéger les impuretés et les porteurs libres et les rendre ainsi électriquement inactifs.

Les propriétés électriques du silicium polycristallin, sont généralement expliqués par deux modèles à savoir :

- Modèle des joints de grains,
- Phénomènes de transport.

### **II.2.1 Modèle des joints de grains**

Deux modèles sont à distinguer : le modèle de ségrégation et le modèle de piégeage des porteurs [2].

#### **II.2.1.1 Modèle de ségrégation des dopants**

Ce modèle a été proposé par Cocher et Sidgwick [22], et décrit la variation de la résistivité en fonction de la densité de dopant : l'hypothèse de départ est que les joints de grains constituent des sites préférentiels pour la ségrégation des atomes de dopants. Pour les faibles concentrations de dopants, la majorité des atomes sont localisés au niveau des joints de grain, supposés neutres et électriquement inactifs. En conséquence, la quantité de dopants à l'intérieur des grains est réduite, et ainsi la concentration des porteurs libres participant à la conduction est beaucoup plus faible que celle correspondant à la concentration chimique totale de dopants supposée uniformément distribuée. Lorsqu'on augmente le dopage, les joints de grains deviennent saturés en dopants, et les atomes se retrouvent uniformément distribués à l'intérieur des grains. Par conséquent, la concentration en porteurs libres rejoint celle en dopants, et la résistivité du film de silicium polycristallin qui a d'abord augmentée, diminue linéairement avec la concentration de dopants dans le cas des forts dopages [2].

#### **II.2.1.2 Modèle de piégeage**

Le modèle de piégeage des porteurs proposé par Seto [20] illustré sur la figure II.2, a permis d'expliquer l'allure des caractéristiques électriques du silicium polycristallin. Ce modèle est basé sur les hypothèses suivantes :

- Les grains sont de taille identique notée généralement :  $L_G$ .
- Les joints de grains ont une épaisseur négligeable par rapport à la taille des grains, et contiennent une densité d'états pièges  $N_t$ .
- Les pièges sont initialement neutres et se chargent en piégeant des porteurs.
- Présence d'un seul type d'atomes de dopants, uniformément distribués et totalement ionisés avec une concentration  $N$  dans la couche de silicium poly -cristallin.

Le modèle de piégeage des porteurs permet une meilleure explication des propriétés de conduction électrique. Cependant, il ne peut pas expliquer leurs variations en fonction des traitements thermiques et des différentes espèces dopantes. Afin de permettre une explication plus plausible des propriétés de conduction électrique dans des couches de silicium polycristallin, les deux modèles ont été combinés. En d'autres termes, utiliser le modèle de piégeage en tenant compte de la ségrégation des dopants [23] ;

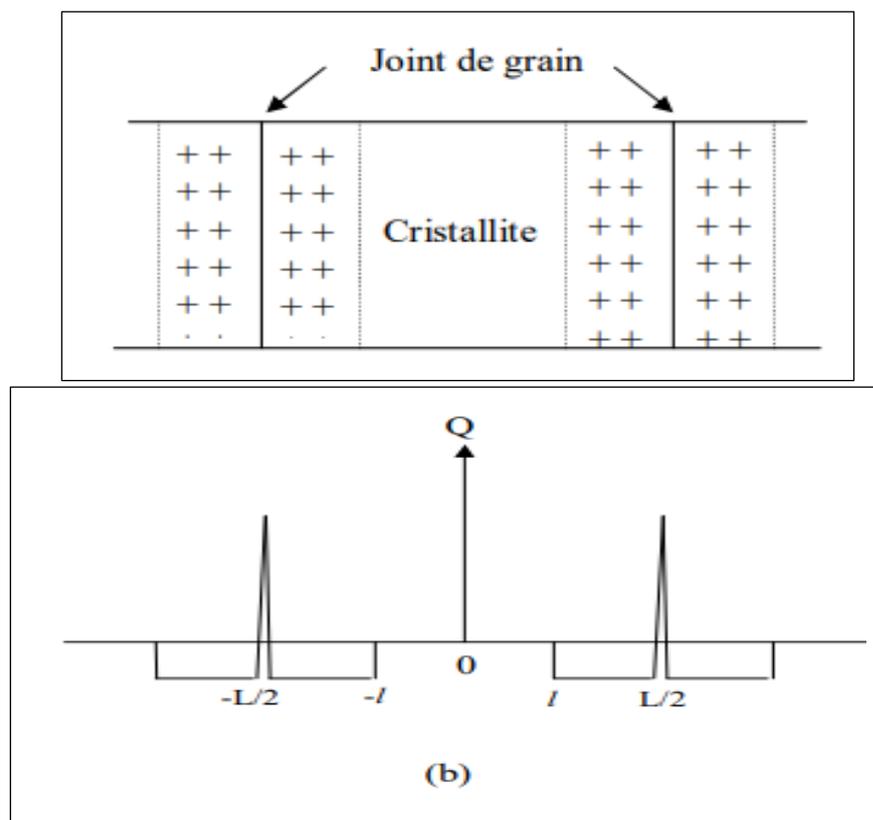


Figure II.2: Modèle de Seto [20].

Dans ce modèle, le silicium polycristallin est supposé être composé d'une chaîne linéaire de cristallites identiques ayant une taille de grain  $L_G$  et une densité de piège aux joints de grain  $N_t$ . La charge piégée aux joints de grains est compensée par des régions d'appauvrissement de charges opposées entourant les joints de grains. Ce modèle est basé sur le calcul de la barrière d'énergie aux joints de grains, qui affecte le transport des porteurs dans la couche. Pour calculer la barrière d'énergie, le moyen le plus simple consiste à résoudre l'équation de Poisson dans le grain [20] :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{qN}{\epsilon_0 \epsilon_{si}} \quad (\text{II.1})$$

Pour une taille de grain donnée  $L_G$ , deux cas peuvent se présenter suivant les valeurs relatives des concentrations en atomes de dopants  $N$  et de pièges  $N_t$ . Le modèle de Seto définit une concentration critique ' $N^*$ ', pour laquelle la cristallite est à la limite de la désertion totale [24] ; Ainsi, pour un dopage représenté par ' $N$ ' inférieur à  $N^*$  ( $N < N^*$ ), le grain (désertion complète de la cristallite) est totalement déserté, la hauteur de la barrière énergétique  $E_b$  est indépendante de la concentration de pièges  $N_t$  :

$$E_b = \frac{q^2 N}{8\epsilon_0 \epsilon_{si}} L_G^2 \quad (\text{II.2})$$

Pour une concentration de dopage supérieur à  $N^*$  ( $N > N^*$ ) : désertion partielle de la cristallite, C'est-à-dire, les grains sont partiellement désertés de porteurs et les états pièges sont entièrement remplis ; Seto suppose alors que, la hauteur de la barrière énergétique devient indépendante de la taille du grain. Et, elle tend vers zéro lorsque la concentration en dopants devient suffisamment importante ; dans ce cas, les propriétés du matériau sont équivalentes à celles d'un matériau monocristallin :

$$E_b = \frac{q^2 N_t^2}{8\epsilon_0 \epsilon_{si} N} \quad (\text{II.3})$$

Il est à noter que lorsque la concentration du dopage augmente, la barrière de potentiel augmente linéairement dans un premier temps atteignant un maximum qui correspond à ( $N=N^*$ ), puis diminue rapidement. Seto suppose que dans ce cas-là, la cristallite est à la limite de la désertion totale :

$$N^* = \frac{N_t}{L_G} \tag{II.4}$$

Par conséquent,  $V_{bmax}$  (V) ou  $E_{bmax}$  (eV) est fonction de ces deux paramètres, la taille des grains  $L_G$  et la densité d'états de piégeage  $N_t$ , tel que représenté sur la figure II.3 [24].

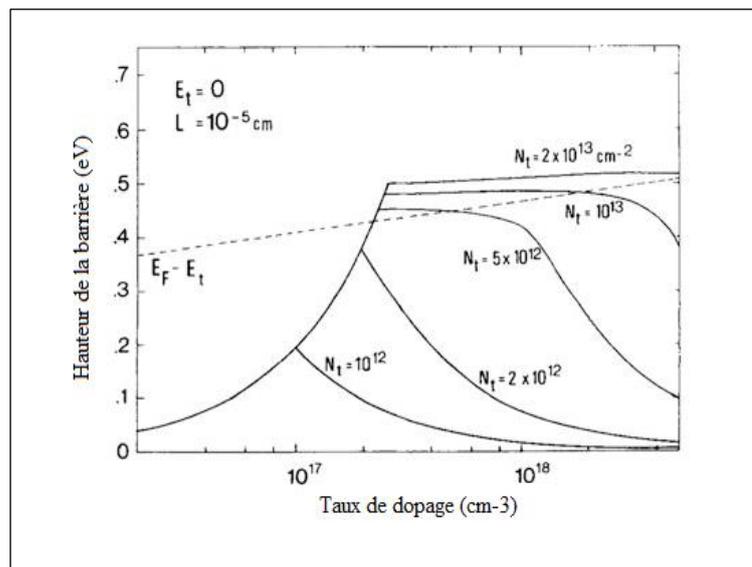


Figure II.3: Hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la concentration de dopage [24].

## II.2.2 Phénomène de transport

### II.2.2.1 Modèle des joints de grains

Le transport des porteurs à travers le joint de grain s'effectue de façon analogue à celui observé dans une structure métal/semiconducteur (diode Schottky) [1,25]. Par conséquent il existe deux façons d'effectuer le transport de porteurs à travers le joint de grain : émission thermoïonique ou effet tunnel (voir figure II.4) ;

L'émission thermoïonique, elle permet aux porteurs ayant une énergie cinétique supérieur à la barrière énergétique  $E_b$  de passer d'un grain à un autre. La conduction par effet tunnel, est

décrite par une probabilité non nulle de transit des porteurs d'un grain vers un autre à travers une barrière de potentiel suffisamment fine [1,3].

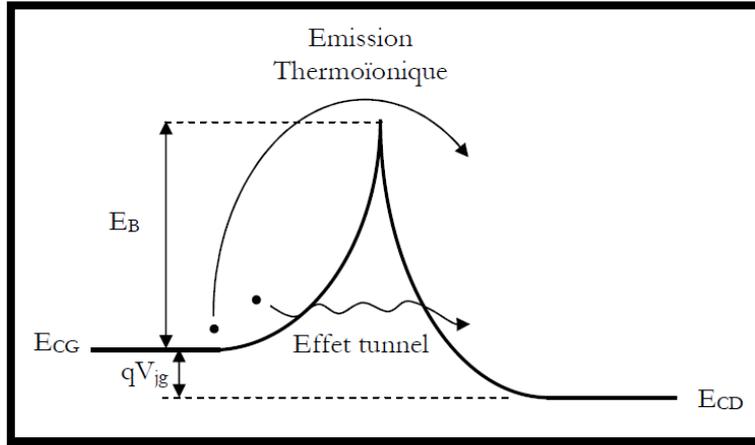


Figure II.4: Mécanisme de transport des porteurs à travers une barrière de potentiel [1,3].

La barrière de potentiel est la plus haute quand la largeur de la barrière est la plus large. Elle diminue rapidement et prend une petite valeur pour un film poly-Silicium fortement dopé, on s'attend donc à ce que le courant par effet tunnel soit toujours plus petit que le courant d'émission thermoionique. Pour cette raison, le courant par effet tunnel est généralement négligé dans les calculs. La densité de courant d'émission thermoionique ( $J_{th}$ ) pour une tension appliquée ( $U_a$ ) à travers un joint de grain est :

$$J_{th} = q \cdot P_a \cdot \left(\frac{K.T}{2\pi m^*}\right)^{0.5} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \left[ \exp\left(-\frac{qU_a}{K.T}\right) - 1 \right] \quad (II.5)$$

Cette équation est applicable seulement si le nombre de porteurs participant au transport du courant est petit devant le nombre de porteurs dans la cristallite. Cette condition impose à la hauteur de la barrière d'être plus grande ou comparable à  $kT$ . Si  $V_b$  est petite,  $qV_b \ll kT$ , et l'équation (II-5) devient :

$$J_{th} = q \cdot P_a \cdot \left(\frac{K.T}{2\pi m^*}\right)^{0.5} \cdot \frac{qU_a}{K.T} \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (II.6)$$

Ainsi,  $V_a$  est la polarisation à travers un joint de grains (c'est-à-dire la polarisation à travers l'échantillon divisée par le nombre de grains, en supposant que tous les joints de grains sont identiques). Généralement, une tension de polarisation appliquée se divise d'une façon non uniforme entre les deux côtés du joint de grains ; cependant, pour les faibles tensions, approximativement la moitié de cette tension apparaît de chaque côté [26].

La concentration moyenne,  $P_a$  est donnée par l'expression suivante, dans le cas de régions complètement déplétée et non déplétée [16,27] :

$$P_a = P_b \left\{ \left( 1 - \frac{Q_t}{L_G N} \right) + \frac{1}{q L_G} \left( \frac{2\pi\epsilon_0\epsilon_{Si} K.T}{N} \right)^{1/2} .erf \left[ \frac{q Q_t}{2} \left( \frac{1}{2\pi\epsilon_0\epsilon_{Si} K.T.N} \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (\text{II.7})$$

La conductivité du polysilicium en fonction de la taille des grains est donnée par :

$$\sigma = L_G . q^2 . P_a . \left( \frac{1}{2\pi m^* . K.T} \right)^{0.5} . \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (\text{II.8})$$

Et, à partir de la relation :  $\sigma = qp\mu$ , la mobilité effective des porteurs aux joints de grains est :

$$\mu_{eff} = L_G . q . \left( \frac{1}{2\pi m^* . K.T} \right)^{0.5} . \exp\left(-\frac{qV_b}{K.T}\right) \quad (\text{II.9})$$

### II.3 Concentration des porteurs

La concentration des atomes dopants aux joints des grains après recuit est égal à la différence entre la concentration totale et celle des atomes se trouvant dans les grains, exprimé par la relation suivante [28] :

$$N_{GB} = N - N_{GI} \quad (\text{II.10})$$

Tel que la concentration des atomes dopants dans les grains peut être déterminé à partir de l'équation (II.11) [28] :

$$N_{GI} = n + \frac{4\epsilon E_d}{q^2 L_G^2} + \frac{2}{q L_G} \left[ 2n\epsilon L_G^2 E_d + \frac{4\epsilon^2 E_d^2}{q^2} \right]^{1/2} \quad (\text{II.11})$$

De même, pour la concentration des porteurs libres qui est estimée par l'équation (II.12) [28] :

$$n = \frac{1}{2L_G \varepsilon_0 \varepsilon_{si} q V_b} \left[ \frac{N^* - 4\varepsilon_0 \varepsilon_{si} V_b}{qL_G^2} \times \left( \frac{qL_G^2}{2} \right)^2 \right] - 4\varepsilon_0^2 \varepsilon_{si}^2 V_b^2 \quad (\text{II.12})$$

## II.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé les modèles de transport fréquemment utilisés pour décrire le déplacement des charges à l'intérieur du poly-silicium.

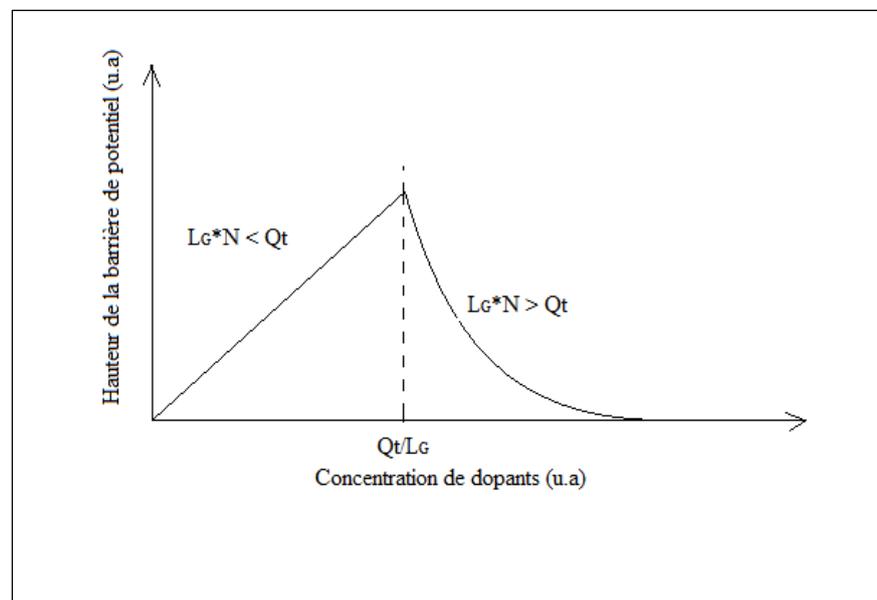
*Chapitre III :*  
*Résultats et discussions*

### III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la modélisation du phénomène de transport de charge à travers les joints de grains dans des échantillons de silicium polycristallin élaborés à une température de 520 °C, ayant subis des traitements thermiques sous atmosphère oxydante durant différentes températures et variantes durées. Cette série d'échantillons ont été dopés In-situ au bore avec une concentration de  $2 \times 10^{20}$  (cm<sup>-3</sup>). La modélisation sera effectuée en fonction des paramètres physiques après recuit tels que, la taille des grains et la résistivité. Les programmes de simulation sont conçus et exécutés à l'aide du logiciel MATLAB.

### III.2 Le modèle

Le modèle utilisé est basé sur le principe élaboré par Seto et d'autres chercheurs lui succédant [19-20,29-32], se résumant selon la figure III.1 [33] ;



**Figure III.1** : La barrière de potentiel dépendante du dopage aux joints de grains [33].

L'existence d'un grand nombre de défauts au niveau des joints de grains, dus aux liaisons atomiques inachevées, a pour conséquence la formation des états pièges ( $N_t \approx Q_t$ ), capables de piéger les porteurs de charge et de les immobiliser. Ceci réduit le nombre de porteurs libres disponibles pour la conduction électrique. Après avoir figé les porteurs mobiles, les pièges deviennent électriquement chargés, et **forment une barrière de potentiel**

qui empêche le mouvement des porteurs d'une cristallite à l'autre, réduisant de ce fait leur mobilité [2].

Ce modèle établi par les chercheurs prévoit [19-20,29-33], une forte résistivité au-dessous de la concentration de dopage critique  $N^*$  et qui diminue rapidement pour  $N > N^*$ . Le principe peut être résumé comme suit :

\*Pour  $N < N^*$ , la concentration des porteurs libres est faible et la résistivité est alors élevée ;

$$L_G \times N < Q_t \Rightarrow V_b = q \times \frac{L_G^2 \times N}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si}} \quad (\text{III.1})$$

\*Pour  $N \approx N^*$ , la barrière de potentiel aux joints de grains (créée par les défauts présents) augmente, ce qui rend plus difficile le mouvement des porteurs d'un grain à l'autre. La mobilité effective diminue alors et la résistivité demeure élevée. La barrière de potentiel est alors à sa valeur maximale ;

$$\begin{aligned} L_G \times N = Q_t \Rightarrow N = N^* \rightarrow V_b &= q \times \frac{L_G^2 \times N^*}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si}} = q \times \frac{Q_t^2}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si} \times N^*} \\ \Rightarrow N = N^* &= \frac{Q_t}{L_G} \quad (Q_t \approx N_t) \end{aligned}$$

\*Pour  $N > N^*$ , la concentration des porteurs libres augmente et la hauteur de la barrière de potentiel diminue. La résistivité diminue rapidement quand la concentration de dopage augmente jusqu'à ce qu'elle atteigne celle du silicium monocristallin.

$$L_G \times N > Q_t \Rightarrow V_b = q \times \frac{Q_t^2}{8 \times \epsilon_0 \times \epsilon_{Si} \times N} \quad (\text{III.2})$$

Ainsi, en fonction de ces concepts nous allons étudier l'effet du traitement thermique sur la variation de la taille des grains, à partir de l'évaluation de la hauteur de la barrière de potentiel après recuit ; Et par suite, le nombre de porteurs libres, le nombre de porteurs aux joints de grains (sites de ségrégation aux joints de grains) et le nombre de porteurs à l'intérieur des grains ou cristallites.

### III. 3 Résultats et discussions

Plusieurs modèles ont été proposés pour décrire la densité d'états pièges, dans notre travail nous avons utilisé l'équation empirique établie dans des travaux antérieurs [31, 33] :

$$N_t = (35 + 2.55 \times L_G^{-\alpha}) \times 10^{10} \text{ (cm}^{-2}\text{)} \quad (\text{III.3})$$

$$\alpha = 0.3868 [31,33]$$

$$\text{Avec, } \varepsilon_0 = \frac{1}{36\pi} 10^{-9} \text{ F/m} = 8.8464261 \times 10^{-12} \text{ F/m} = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m} [34]$$

$$\varepsilon_{Si} = 11.68 \approx 12 [35]$$

Notons que pour réaliser ce travail, nous avons utilisé des données reportées dans un travail antérieur publié dans la littérature [36].

### III.3.1. Evaluation de la barrière de potentiel

La représentation graphique de la hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la concentration de dopage est présentée sur la figure III.2, calculée à partir des équations (III.1) et (III.2) données ci-dessus. L'ensemble des résultats calculés sont reportés sur le tableau III.1 ;

Température d'élaboration des échantillons 520 °C			
Temperature de recuit (°C)	840	945	1050
Durée de recuit (Heures)	16	13	1 <sup>H</sup> 30
Taille des grains (nm) [36]	60	100	200
Résistivité $\rho$ ( $\times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ ) [36]	6.3	6.0	5.0
$N_t$ ( $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ )	2.6826	2.5405	2.2732
$N^*$ ( $\times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ )	3.156	2.5405	1.6237
$V_{b\max}$ (V)	0.4292	0.4782	0.5990
$V_b$ (V)	0.0006894	0.0005993	0.0004923

Tableau III.1: Résultats de calculs.

A partir du tracé d'une droite passant par l'axe de dopage correspondant au dopage de la couche polycristalline à travers la courbe ; le point d'intersection désigne la valeur de la hauteur de la barrière de potentiel correspondante (voir figure III.3). Sur le tableau III.1, sont reportés les résultats obtenus.

D'après les valeurs obtenues, la concentration critique  $N^*$ , la densité des états de piégeage  $N_t$ , la hauteur de la barrière de potentiel aux joints de grains de l'échantillon diminuent avec l'augmentation de la taille des grains induite par le traitement thermique, facilitant ainsi le passage des porteurs libres d'un grain à un autre, expliqué par un faible taux de désordre dans les grains larges [27,33,37- 41]. Ces résultats sont en très bon accord avec ceux publiés dans la littérature [33, 42].

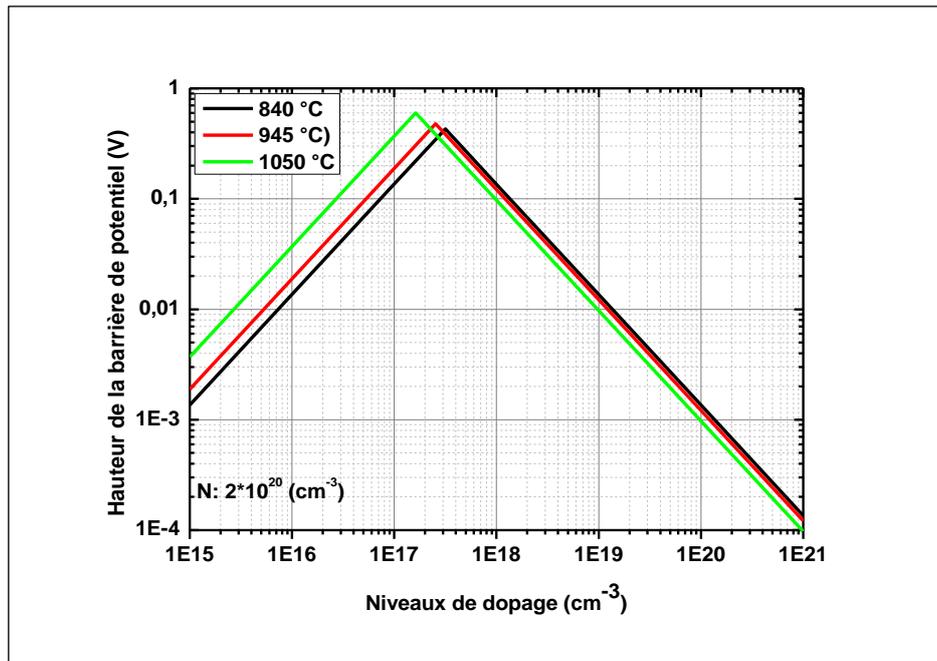


Figure III.2: La hauteur de la barrière de potentiel en fonction de la variation du taux de dopage.

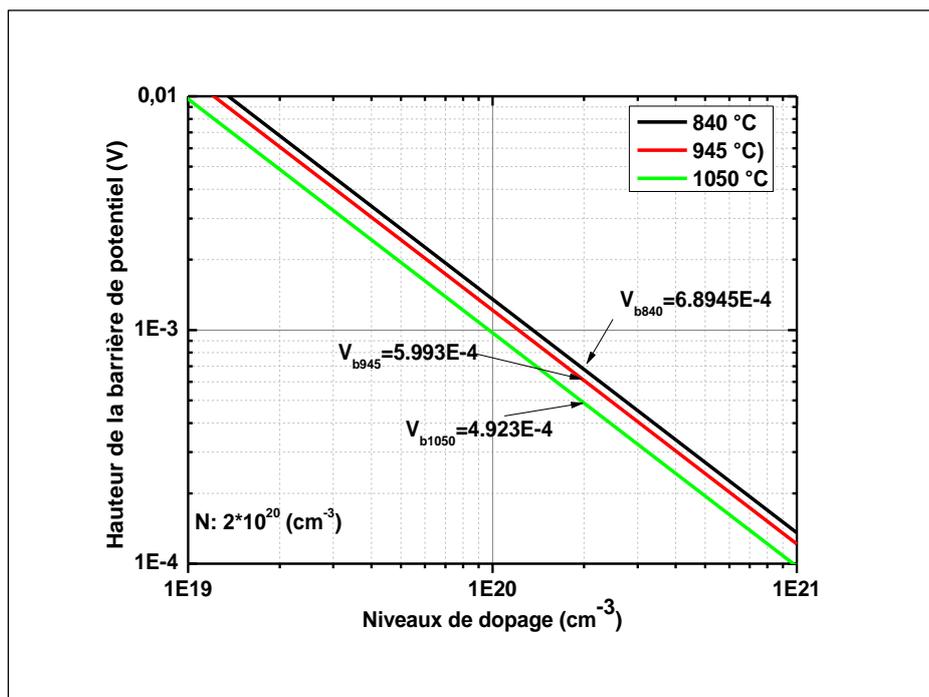


Figure III.3: Valeurs de la hauteur de la barrière de potentiel repérées.

### III.3.2. Concentration des porteurs libres

Sur la figure III.4, est représentée la variation des porteurs libres en fonction de la température de recuit subi, rappelons que l'équation utilisée a été présentée par le modèle cité dans le chapitre précédent. On observe un décalage apparent entre les valeurs, en raison de l'augmentation du traitement thermique qui a induit la diminution de la hauteur de la barrière de potentiel. Cette dernière décrit la difficulté de déplacement des porteurs d'un grain à un autre et également la restriction du flux de courant de porteurs par la barrière de potentiel aux joints de grains ( $V_b$ ). De ce fait, elle dépend considérablement de la croissance de la taille des grains (voir valeurs obtenues sur le tableau III.1). Ceci est en bon accord avec les prévisions théoriques.

On remarque d'après la figure III.4, que la concentration des porteurs libres augmente avec l'augmentation de la taille moyenne des grains dû à l'élévation de la température thermique.

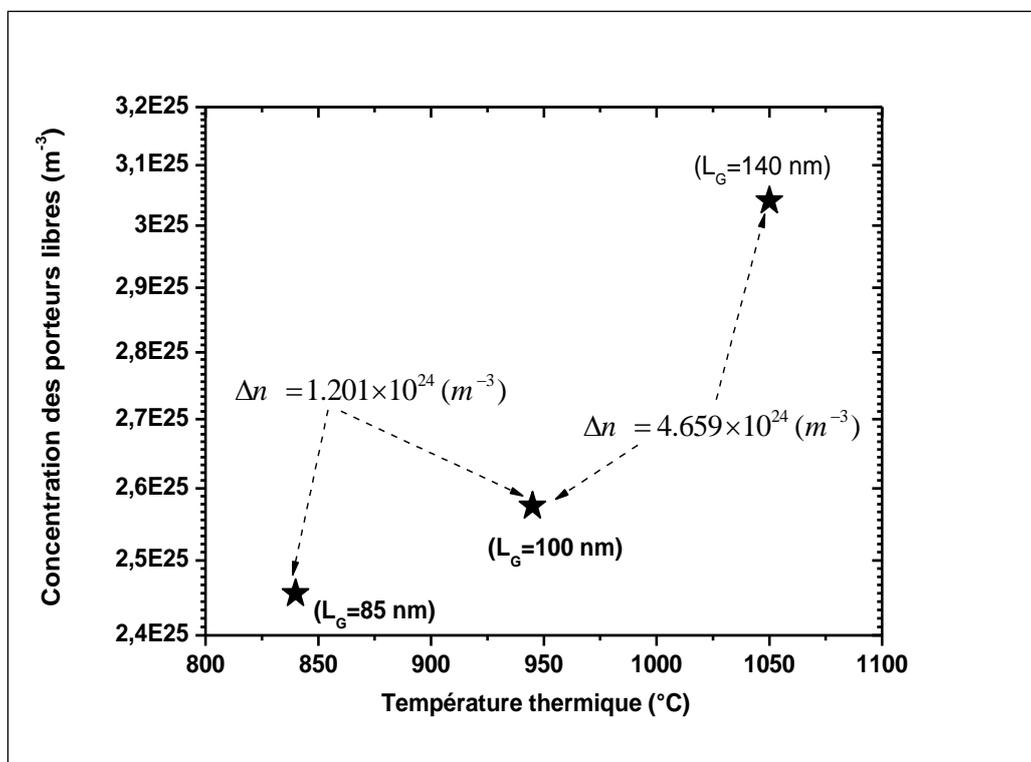


Figure III.4: Concentration des porteurs libres en fonction de la variation de la température du traitement thermique.

### III.3.3. Concentration des porteurs aux joints de grains

La figure III.5, représente la variation de la concentration des porteurs aux niveaux des joints de grains en fonction de la variation de la température du traitement thermique ; l'équation utilisée a été donnée dans le chapitre précédent.

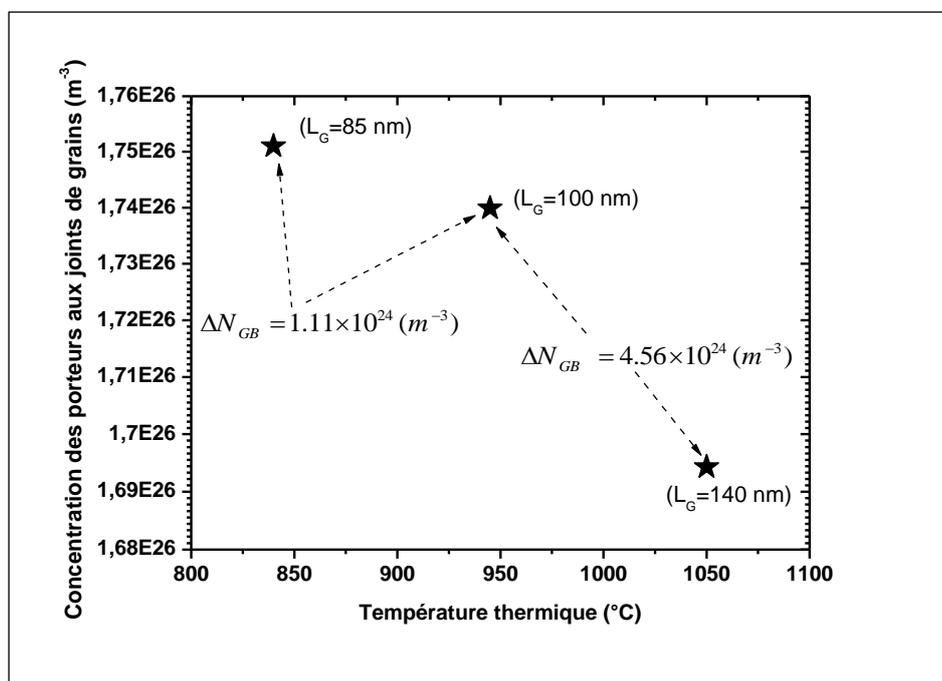


Figure III.5: Concentration des porteurs aux joints de grains en fonction de la variation de la température du traitement thermique.

On remarque sur la figure III.5, que la concentration des porteurs diminue avec l'augmentation de la taille moyenne des grains dû à la diminution de la hauteur de la barrière de potentiel.

Il à noter aussi que, la concentration en dopants est plus élevée (de l'ordre de  $10^{26}$  (m<sup>-3</sup>)) aux joints de grains qu'à l'intérieur des grains (de l'ordre de  $10^{25}$  (m<sup>-3</sup>)), obtenu sur la figure III.6. En effet, les dopants ont tendance à s'étaler aux joints de grains en raison des différences d'orientation cristallographique, de déformation et d'énergie de surface entre les grains, de tel sorte que, les joints de grains peuvent agir comme un puits pour les dopants, entraînant une concentration plus élevée de dopants dans les joints de grains que dans les grains.

### III.3.4. Concentration des porteurs dans les grains

De même sur la figure III.6, la variation de la concentration des porteurs dans les grains est représentée en fonction de la variation de la température du traitement thermique ; Le résultat obtenu, confirme les valeurs obtenues sur la figure III.5.

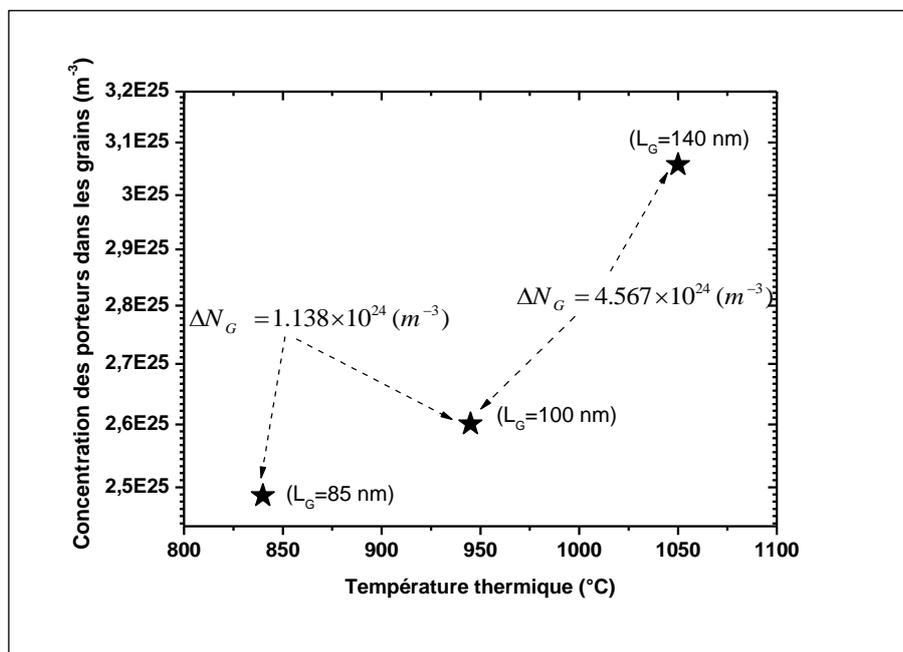


Figure III.6: Concentration des porteurs dans les grains en fonction de la variation de la température du traitement thermique.

### III.4. Validation des résultats obtenus

Pour valider les observations constatées sur les résultats obtenus, dans cette dernière partie de notre travail, on a calculé les concentrations des porteurs libres et ceux dans les grains et aux joints de grains à partir des données publiées récemment dans la littérature [33], basé sur la variation de la taille moyenne des grains selon le tableau III. 2, ci-dessous. On remarque que plus la taille des grains augmente, les concentrations des porteurs libres et dans les grains augmentent, alors que celle de ceux aux niveaux des joints de grains diminue ce qui confirme l'exactitude des résultats ci-dessus.

Concentration de dopage de l'échantillon $1 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$				
Taille des grains (nm)	20	100	160	240
$N_t \text{ (} \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{)}$	3.4126	2.0523	1.7840	1.5868
$N^* \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$1.7063 \times 10^{17}$	$2.0523 \times 10^{17}$	$1.115 \times 10^{17}$	$6.6117 \times 10^{16}$
$V_b \text{ (V)}$	0.022	0.008	0.006	0.0048
$n \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	<b><math>5.7164 \times 10^{17}</math></b>	<b><math>1.2309 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>1.3599 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>1.4811 \times 10^{18}</math></b>
$N_G \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	<b><math>7.6719 \times 10^{17}</math></b>	<b><math>1.4531 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>1.4760 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>1.5487 \times 10^{18}</math></b>
$N_{GB} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	<b><math>9.2328 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>8.5469 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>8.5240 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>8.4513 \times 10^{18}</math></b>

Tableau III.2: Données de littérature [33].

### III. 4 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, nous avons présenté un bref aperçu sur le modèle utilisé comportant les équations nécessaires pour la simulation. Les résultats montrent l'influence du traitement thermique que les échantillons ont subis, sur l'estimation de la valeur maximale que peut atteindre la hauteur de la barrière de potentiel et la valeur de la barrière de potentiel de l'échantillon correspondante à la concentration de dopants avec laquelle il a été dopé. Lorsque la température de recuit croît, la barrière de potentiel tend à diminuer.

Nous avons également trouvé que le nombre de porteurs libres, la concentration des porteurs dans les grains évoluent proportionnellement avec la croissance de la température de recuit et par suite la croissance de la taille moyenne des grains ; alors que la concentration des porteurs aux niveaux des joints de grains est inversement proportionnel avec la croissance des grains.

# *Conclusion générale*

## Conclusion générale

Ce travail de recherche portait sur l'étude de l'influence des recuits thermiques sur le phénomène de ségrégation des porteurs aux joints de grains, dans les semi-conducteurs polycristallins ou multicristallins; En effet, ces matériaux, très utilisés dans divers domaines, présente beaucoup de limitations liées aux joints de grains. Ces derniers forment un chemin privilégié pour une ségrégation rapide des porteurs où ils risquent d'être piégés. Par ailleurs, ces pièges peuvent être chargés électriquement et introduisent non seulement une barrière de potentiel qui s'oppose au passage des porteurs libres mais aussi une zone de déplétion située de part et d'autre du joint de grain.

Pour ce qui est de la hauteur de la barrière de potentiel, les résultats obtenus ont montré que la densité d'états pièges aux niveaux des joints de grains est un paramètre déterminant pour l'estimation de la valeur maximale de cette dernière ( $V_{bmax}$ ). D'autre part, la densité d'états pièges ( $N_t$ ) est étroitement liée à la dimension des grains. Et, la dimension des grains dépend de l'augmentation de la température du recuit thermique réalisé à différentes durées.

D'autre part, les échantillons que nous avons traité dans le présent travail sont très fortement dopés, autrement dit les zones de déplétions dans les grains sont largement réduites et le handicap de la barrière de potentiel énergétique au joint de grains est alors largement abaissé, le niveau de dopage produit ainsi un effet semblable à la température de recuit, agissant sur l'épaisseur de la zone de charge d'espace, et par conséquent sur la hauteur de la barrière de potentiel qui peut devenir très faible voire disparaître complètement, par exemple on a obtenu pour un dopage de  $1 \times 10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$   $V_b = 0.008 \text{ V}$ , ( $L_G = 100 \text{ nm}$ )(voir le Tableau III.2), et pour un dopage de  $2 \times 10^{20} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ , La barrière est de  $0.0005993 \text{ V}$  ( voir le Tableau III.1) avec  $L_G$  toujours  $100 \text{ nm}$ . Ceci peut être expliqué par le fait que, les dopants introduisent des niveaux d'impuretés dans la bande interdite du matériau, qui peuvent agir comme porteurs de charge et réduire la barrière de potentiel. Ce qui est, en très bon accord avec les prévisions théoriques trouvés dans la littérature.

En conclusion, il s'avère intéressant de diminuer l'activité électrique des défauts aux joints de grains par un traitement thermique afin de renforcer le potentiel qu'offre le polysilicium ou le multisilicium en couche mince à l'industrie photovoltaïque ou circuits intégrés.

*Références*

*Biblio-webographie*

## Références Biblio-webographie

- [1] N. Doukhane, Etude des structures mos à grille de polysilicium, thèse de doctorat en sciences, université de Jijel (2018).
- [2] A. Chellouche, A. Abada, Propriétés de conduction dans des films multicristallins, mémoire de master en électronique, université de Jijel (2022).
- [3] S. D. Brotherton, Introduction to thin film transistors, chapter 8: poly-si tft performance, doi: 10.1007/978-3-319-00002-2\_8, springer international publishing switzerland, 2013.
- [4] B. Rida, N. Cheniti, modélisation compacte du transistor à effet de champs en couche minces, mémoire de master en électronique, université de Jijel (2021).
- [5] F. Mansour-bahoul, Propriétés électriques et technologiques des films de silicium lpcvd fortement dopés bore, thèse de doctorat d'état, université de constantine (1996).
- [6] F. Betaoui, Simulation de la croissance de l'oxyde thermique sur des substrats de silicium, master en physique des matériaux et nanomatériaux, université de bouira (2014).
- [7] B. Birouk, Etude et modélisation de l'effet des traitements thermiques d'oxydation sèche des films minces si-lpcvd fortement dopés in-situ au bore, thèse de doctorat d'état, université de Constantine (1999).
- [8] F. Trad, Influence de l'insertion de bore et de phosphore sur les propriétés optiques et structurales des nanocristaux de silicium dans une matrice de silice, thèse de doctorat, université de lorraine (2021).
- [9] E. Kaxiras, Atomic and Electronic Structure of Solids. cambridge université press (2003).
- [10] B. kaghouché, Etude et caractérisation de matériaux à base d'oxyde de silicium pour applications en micro technologies, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique, université de constantine(2014).
- [11] Charles Kittel Introduction to Solid State Physics, 8th Edition, 2005
- [12] Charles Kittel, 'Physique de l'état solide, Dunod, 2007.
- [13] W, Baghdadi, Structure de bandes électroniques et propriétés dérivées des quasi-binaires  $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ , master en Physique Appliquée ; universite de m'sila (2019).
- [14] H. Milat, M. Mender, Modélisation de la distribution de la densité d'état des pièges dans le silicium poly cristallin, mémoire de Master en Electronique, université de jijel (2019).
- [15] D. Béchir, Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de Silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules Photovoltaïques à haut rendement, Thèse de Doctorat, Ecole Doctorale Matériaux de Lyon (2010).

- [16] F. Boulgamh, Etude du comportement électrique des semiconducteurs multicristallins à base de silicium – Effet des joints de grains, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique université mentouri constantine 1( 2018).
- [17] L. Saci, Etude de la diffusion et de la redistribution du bore dans des films bicouches PolySi/NIDOS destinés à des structures MOS, Thèse de Doctorat en Sciences en Electronique université mentouri constantine (2009).
- [18] S. Amtablian, Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un procédé cellule à faible budget thermique, Thèse de Doctorat, INSA Lyon, France (2008).
- [19] Lei Wang, Haiyun Liu, Xing Liu, Electron Radiation Effects of Grain-Boundary Evolution on Polycrystalline Silicon in MEMS, *Micromachines* 2022, 13, 743. <https://doi.org/10.3390/mi13050743>
- [20] J. Y. W. Seto, The electrical properties of polycrystalline silicon films, *Journal of Applied Physics*, vol. 46, n°. 12, 1975.
- [21] T. Mokino, H. Nakamura, Resistivity changes of heavily-boron-doped cvd-prepared polycrystalline silicon caused by thermal annealing, *Soild State Electronics V.24*, pp:49-55.
- [22] A. L. FRIPP, L.H. SLACK "resistivité of doped polycrystalline silicon films" *J. electrochem. soc.*, vol. 119, pp. 1565-1570, NOV 1972.
- [23] M. Bouaziz et F. Amrouni, Modélisation d'un transistor TFT à canal à base de silicium polycristallin, Mémoire de Master en Electronique, université de jijel (2020).
- [24] I. Rouage, Etude de comportement de la capacité d'une diode polycristalline latérale, université de mohamed boudiaf de msila (2016).
- [25] E. Canessa, V. L. Nguyen, Non-linear I–V characteristics of double Schottky barriers and polycrystalline semiconductors, *Physica B: Condensed Matter*, 179, 4, pp:335–341, 1992. doi:10.1016/0921-4526(92)90634-5
- [26] A. Zerage, Caractérisation, Modélisation et Simulation numérique des cellules photovoltaïques à base de silicium polycristallin en couche mince déposée par RT-CVD, Thèse de doctorat en physique, université de tlemcen (2005).
- [27] G. Baccarani, B. Riccò, Transport properties of polycrystalline silicon films, *J. Appl. Phys*, 49, p. 5565–5571, 1978.
- [28] S. Silini, O. Benhalima, B. Hadjoudja, B. Chouial, A. Chibani, Investigation of the dopes segregation at the grains boundaries of polycrystalline silicon films for photovoltaic application, *Physics Procedia* 2, 781-786, 2009.
- [29] J. P. Colinge, al., Grain size and resistivity of LPCVD polycrystalline silicon films, *J. Electrochem. Soc.* 128, Sep 1981, 2009-2014.
- [30] T. Kamins, *Polycrystalline silicon for integrated circuits applications*, Stanford university, 1988 by Kluwer Academic Publishers.

- [31] N. Gupta, B. P. Tyagi, An analytical model of the influence of grain size on the mobility and transfer characteristics of polysilicon thin film transistors (TFTs), *Physica Scripta*. Vol. 71, 225-228, 2005.
- [32] Bing-Hui Yan, Bin Li, Ruo-He Yao, et Wei-Jing Wu, A physics-based effective mobility model for polycrystalline silicon thin film transistor considering discontinuous energy band at grain boundaries, *Japanese Journal of applied physics* 50, 094302, 2011.
- [33] S. Merabet, B. Djellil, “Potential barrier estimation with a graphical method”, *International Journal of Materiali in tehnologije / Materials and technology MTAEC9*, 57 1, 3-9, (2023) UDK 544.228. <https://doi.org/10.17222/mit.2022.628>
- [34] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Permittivit%C3%A9\\_du\\_vide](https://fr.wikipedia.org/wiki/Permittivit%C3%A9_du_vide)
- [35] <https://perso.telecom-paristech.fr/urien/CE2011.pdf>
- [36] M. Boukezzata, D. Bielle-Daspét, G. Sarrabayrouse, F. Mansour, Characteristics of the thermal oxidation of heavily boron-doped polycrystalline silicon thin films, *Thin Solid Films*, V. 279, I. 1–2, 1996, 145-154, [https://doi.org/10.1016/0040-6090\(95\)08172-0](https://doi.org/10.1016/0040-6090(95)08172-0).
- [37] B-H. Yan, B. Li, R-H. Yao, W-J. Wu, A physics-based effective mobility model for polycrystalline silicon thin film transistor considering discontinuous energy band at grain boundaries, *Jpn. J. Appl. Phys.* 50 (2011) 094302, <https://doi.org/10.1143/jjap.50.094302>
- [38] J. G. Lee, T.W. Kim, Effects of the grain boundary and interface traps on the electrical characteristics of 3d nand flash memory devices. *J. Nanosci Nanotechnol* 18 (3) (2018) 1944-1947, <https://doi.org/10.1166/jnn.2018.15000>
- [39] T. Takagi, F. Koyama, K. Iga, Potential barrier height analysis of AlGaInP multi-quantum barrier (MQB), *Jpn. J. Appl. Phys.* 29 1990 L1977, <https://doi.org/10.1143/JJAP.29.L1977>
- [40] H. Dong, J. Sun, S. Ma, J. Liang, T. Lu, Z. Jia, X. Liu **and** B. Xu, Effect of potential barrier height on the carrier transport in InGaAs/GaAsP multi-quantum wells and photoelectric properties of laser diode, *J. Phys. Chem. Chem. Phys.* 18 (9) 2016, 6901-6912, <https://doi.org/10.1039/C5CP07805A>
- [41] A. Shamir, I. Amit, D. Englander, D. Horvitz, Y. Rosenwaks, Potential barrier height at the grain boundaries of a poly-silicon nanowire, *Nanotechnology*. 26(35) 2015 355201, <https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/35/355201>
- [42] B. Djellil, S. Merabet, H. Bouridah, “Comparative study of the recombinant activity effect at the grain boundaries in silicon solar cells”, *International Journal of Materiali in tehnologije / Materials and technology MTAEC9*, 56 (2022) 6, 607–612, UDK 621.383.51. <https://doi.org/10.17222/mit.2022.597>

## Contribution des traitements thermiques à réduire le nombre de sites de ségrégation aux joints de grains

Présenté par :

KAHLESSENANE Nourelhouda  
MAKHLOUF Roukia

Rapporteur : Mme. S. MERABET

### Résumé

Ce travail de recherche portait sur l'étude de l'influence des recuits thermiques sur le phénomène de ségrégation des porteurs aux joints de grains, dans les semi-conducteurs polycristallins ou multicristallins ; Ces derniers forment un chemin privilégié pour une ségrégation rapide des porteurs où ils risquent d'être piégés. Les résultats obtenus ont montré que la densité d'états pièges ( $N_t$ ) aux niveaux des joints de grains est un paramètre déterminant pour l'estimation de la valeur de la barrière de potentiel ( $V_b$ ). La dimension des grains dépend de l'augmentation de la température du recuit thermique réalisé à différentes durées. Ainsi, le traitement thermique joue un rôle important pour diminuer l'activité électrique des défauts aux joints de grains, par suite renforcer le potentiel qu'offre le polysilicium ou le multisilicium en couche mince à l'industrie photovoltaïque ou circuits intégrés.

**Mots clé :** Traitements thermiques, Barrière de potentiel, Sites de ségrégation.

### ملخص

ركز هذا البحث على تأثير التلدين الحراري على فصل المواد الحاملة عند حدود الحبوب في أشباه الموصلات متعددة البلورات. هذا الأخير يشكل مساراً متميزاً للفصل السريع للناقلات، حيث يمكن أن يصبحوا محاصرين. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن كثافة حالات المصيدة ( $N_t$ ) عند حدود الحبوب هي عامل حاسم لتقدير قيمة الحاجز المحتمل ( $V_b$ ). يعتمد حجم الحبوب على زيادة درجة حرارة التلدين الحراري الذي يتم على فترات مختلفة. بهذه الطريقة، تلعب المعالجة الحرارية دوراً مهماً في تقليل النشاط الكهربائي للعيوب عند حدود الحبوب، وبالتالي تعزيز إمكانات السيلكون البلوري ذي الأغشية الرقيقة والسيليكون المتعدد للصناعات الكهروضوئية والدوائر المتكاملة. الكلمات المفتاحية: المعالجة الحرارية، الحاجز المحتمل، مواقع الفصل.

### Abstract

This research focused on the influence of thermal annealing on the segregation of carriers at grain boundaries in polycrystalline and multicrystalline semiconductors. The latter form a privileged path for the rapid segregation of carriers, where they can become trapped. The results obtained show that the density of trap states ( $N_t$ ) at grain boundaries is a decisive parameter for estimating the value of the potential barrier ( $V_b$ ). Grain size depends on the temperature increase of the thermal annealing carried out at different durations. In this way, heat treatment plays an important role in reducing the electrical activity of defects at grain boundaries, thereby enhancing the potential of thin-film polysilicon and multisilicon for the photovoltaic and integrated circuit industries.

**Keywords:** Thermal treatment, Potential barrier, segregations sites.