

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**  
**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**



**Université Hadj Lakhdar Batna**  
**Faculté de Technologie**  
**Département d'Electronique**



**Mémoire**  
Présenté en vue de l'obtention du diplôme de  
**MAGISTER en Electronique**

**OPTION**  
Instrumentation

**PAR**  
**RAHMANI Ibrahim**

**Thème**

---

---

**Etude et simulation de l'implantation ionique des dopants**  
**dans des structures MOS**

---

---

**Soutenu devant le jury composé de :**

Dr. A. BENHAYA	Prof.	U. Hadj Lakhdar Batna	Président
Dr. R. MAHAMDI	Prof.	U. Hadj Lakhdar Batna	Rapporteur
Dr. M. F.DJEFFAL	Prof.	U. Hadj Lakhdar Batna	Examineur
Dr. M. S. NEMOUCHI	M. C. A	U. Mentouri Constantine	Examineur
Dr. N. GUENIFI	M. C. B	U. Hadj Lakhdar Batna	Invitée

# Remerciements

Au nom d'ALLAH, le tout-Miséricordieux, le Très- Miséricordieux

Mes plus vifs remerciements vont à Monsieur **Ramdane. MAHAMDI** Professeur au Département d'Electronique, Université Hadj Lakhdar Batna pour avoir proposé et dirigé ce travail.

Je remercie Dr. **Naima. GUENIFI**, Maître de conférences à l'université de Batna, pour son aide, ses conseils et ses encouragements pour mener ce travail. Je lui exprime toute ma gratitude et mon estime pour ses remarques, ses conseils fructueux, son soutien constant, et ses encouragements.

Mes sincères remerciements s'adressent à Monsieur **Abdelhamid. BENHAYA** Professeur au Département d'Electronique, Faculté de Technologie, Université de Batna qu'il m'a fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Je suis très reconnaissant envers les membres examinateurs : qui ont fait l'honneur de bien vouloir contribuer à ce jury:

- Monsieur **Fayçal. DJEFFAL** Professeur au Département d'Electronique Université de Batna pour avoir participé à mon jury de mémoire.
- Monsieur **Salah. NEMOUCHI** Maître de Conférences à l'université frères Mentouri- Constantine, pour avoir accepté de juger ce modeste travail et consacrer son temps et ses efforts pour lire ce mémoire.

Mes remerciements vont également à mes amis.

## Sommaire

Introduction générale .....	1
-----------------------------	---

### Chapitre 1: Etat de l'Art

1-1-Introduction .....	5
1-2-Données physiques de silicium .....	5
1-3-Aspects physiques de la diffusion .....	9
1-4-Défauts ponctuels et mécanismes de diffusion .....	18
1-5-Diffusion des dopants .....	24
1-6-Implantation ionique .....	31
1-7-Conclusion .....	44

### Chapitre2: Simulation de l'implantation ionique des dopants par SILVACO

2-1-Introduction .....	46
2-2-Présentation du logiciel SILVACO .....	46
2-3-Représentation des profils d'implantation par modèle Pearson IV .....	49
2-4-Simulation avec Silvaco le profil de distribution des dopants .....	52
2-5-Etude de l'influence des Paramètre technologique sur la la redistribution des ions .....	57
2-6-Conclusion .....	78

### Chapitre 3 : Modélisation de la diffusion du bore implanté

3-1-Introduction .....	80
3-2-Modélisation de la diffusion du bore dans le polysilicium .....	80
3-3-Résolution numérique du système d'équation de diffusion unidimensionnelle .....	84
3-4-Resultats et comparaison des profils (Silvaco/Modèle) .....	94
2-5-Conclusion .....	102

### Conclusion générale

Conclusion générale .....	105
---------------------------	-----

Références Bibliographiques .....	106
-----------------------------------	-----



# **INTRODUCTION GENERALE**

## INTRODUCTION GENERALE

On entend par la technologie de fabrication des dispositifs micro-électroniques l'ensemble des procédés mécaniques, physiques et chimiques de traitement des différents matériaux (semi-conducteurs, isolants, métaux), servant à la fabrication des dispositifs électroniques. La plus part des dispositifs fonctionnent grâce à des semi-conducteurs dopés de types p et n. La diffusion et l'implantation ionique sont les procédés de dopage les plus importants en technologie des microstructures. Les structures réalisées par ces techniques ont des caractéristiques bien définies: la diffusion produit des jonctions profondes alors que l'implantation ionique produit des jonctions peu profondes, les deux procédés sont complémentaires, mais l'implantation ionique joue un rôle privilégié dans la miniaturisation des composants électroniques [1,2].

Toutefois, au cours de cette course effrénée vers la miniaturisation des composants électroniques, les problèmes technologiques ne se limitent plus aux seules difficultés de réalisation.

Au cours de ces dernières années, l'élaboration de modèles physiques dans le domaine de la fabrication de composants micro-électroniques est devenue la clé du développement et de l'amélioration des outils de simulations technologiques. Ces modèles doivent décrire l'ensemble des étapes de fabrication des composants électroniques.

L'étape de dopage consiste à intégrer dans l'arrangement périodique du silicium, une infime concentration d'atomes issus de la colonne III (pour les accepteurs) ou de la colonne V (pour les donneurs) du tableau périodique. On cite parmi les dopants les plus utilisés en micro-électronique, le bore et l'arsenic puis le phosphore et l'indium. Le dopant est incorporé essentiellement à la source et au drain du transistor MOS qui constituent avec la grille et le canal, les parties actives du dispositif électronique [3,4].

Cependant, 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 en tant qu'espèces isolées. Pour se déplacer, ils requièrent l'assistance des défauts ponctuels, aussi bien les lacunes que les auto-interstitiels, avec lesquels ils forment des paires dopants-défauts [5]. En conséquence, nous pouvons représenter ce phénomène par un paramètre physique appelé : coefficient de diffusion effectif du dopant. Ce coefficient de diffusion effectif sera formulé en fonction de la concentration locale de défauts ponctuels à partir des lois de Fick [6].

L'implantation ionique crée une très forte concentration de défauts ponctuels dans le cristal [7] et lorsqu'on réalise le recuit pour réparer les dommages générés, des défauts étendus se forment et c'est leur évolution qui contrôle celle des défauts ponctuels, la diffusion du dopant s'en trouve donc fortement accélérée [8]. Cette accélération brusque de la diffusion des dopants lors des premières secondes de recuit est connue sous le nom de TED (Transient Enhanced Diffusion) [9] et constitue l'un des problèmes majeurs dans le contrôle du profil et de l'activation des dopants. Afin de diminuer l'effet de cette diffusion accélérée, la tendance actuelle est à la diminution du bilan thermique lors du recuit [10]. On utilise pour cela des méthodes de recuit rapide permettant d'atteindre en quelques millisecondes des températures avoisinant 1300°C [11]. Par contre, les recuits classiques peuvent être réalisés à des températures inférieures à 1300°C et des durées très longues jusqu'à quelques heures. Ces recuits doivent être suffisants pour rendre l'impureté électriquement active sans lui permettre d'atteindre l'interface polysilicium/SiO<sub>2</sub> [12].

L'objet de ce mémoire porte sur la modélisation et la simulation de la distribution de l'implantation ionique des dopants dans des structures MOS en fonction des procédés technologiques utilisés. Ces simulations permettent par la suite d'établir les propriétés électriques, structurales, morphologiques et physicochimiques avant de déterminer les caractéristiques de fonctionnement du dispositif. Il consiste d'une part, à la modélisation du phénomène de diffusion en tenant compte de plusieurs phénomènes et de l'implantations par un modèle développé sous Matlab basé sur la méthode numérique dite: méthode des différences finis. De ce fait, cette étape particulière est simulée sous le simulateur technologique SILVACO, et les résultats obtenus seront comparés à ceux du modèle proposé.

L'étude théorique et le traitement technique de ce sujet, nous ont amené à structurer ce mémoire en trois chapitres. Dans le premier chapitre, nous commencerons par un bref rappel sur les phénomènes et les mécanismes de dopage régissant les deux techniques de dopage, la diffusion et l'implantation ionique, puis on passera à la modélisation des profils de dopants en se basant sur les lois de Fick. Nous terminerons ce chapitre par l'analyse des profils de diffusion de l'implantation ionique.

L'outil de simulation, nous permet de reproduire en un peu de temps des étapes technologiques longues et nécessitant des équipements souvent lourds et chers (Salle blanche, fours de dépôt, implantateur ionique et une spectrométrie de masse des ions secondaires ou SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry). De ce fait, une description détaillée sur le paquet des programmes du simulateur SILVACO-TCAD (Abréviation de Silicon Valley Corporation

Technology Computer Aided Design), ainsi que les résultats de simulation des profils SIMS seront exposés dans le deuxième chapitre. Une fiche détaillée de notre programme sera donnée.

Dans le troisième chapitre, nous proposons un modèle mathématique conforme aux résultats de simulation obtenus dans le chapitre deux, permettant de déterminer les profils en profondeur. Nous mettrons en évidence les profils SIMS des dopants en analysant l'effet de la dose implantée, de l'énergie d'implantation, de la température et de la durée de recuit. Et de prévoir le comportement physique du composant à travers les paramètres technologiques étudiés. L'objectif de cette étude vise à améliorer les performances du composant électronique.

Nos résultats seront analysés et commentés afin d'en tirer des conclusions pratiques pouvant intéresser ceux qui sont appelés à réaliser des circuits en technologie VLSI.

Enfin, nous terminerons ce mémoire par une conclusion générale où nous rappellerons les différents résultats obtenus au cours de chaque étape, en suite, nous évoquerons les perspectives relatives à de possible futurs axes de recherche sur ce sujet.

## **CHAPITRE 1**

# **Etat de l'Art**

## 1-1 INTRODUCTION

Le dopage des semi-conducteurs est un élément clé pour la fabrication des composants électroniques. En effet, un semiconducteur pur est quasiment un isolant à la température ambiante.

Le comportement électrique d'un composant semiconducteur dépend d'une manière très forte de la répartition des dopants à l'intérieur de la structure, tous les éléments contrôlant le fonctionnement du dispositif (résistances d'accès, conductance, capacités,...) sont directement associés à la présence des dopants.

Le contrôle des propriétés électriques d'un composant électronique à semi-conducteur nécessite une parfaite maîtrise des profils des dopants dans la structure, et donc un contrôle aussi précis que possible des étapes de diffusion et de l'implantation.

De ce fait, dans ce premier chapitre, nous présenterons une compréhension globale sur la théorie de la diffusion et les équations générales de Fick, aussi, nous donnerons une description du mécanisme des défauts ponctuels du silicium. Enfin, nous allons discuter de l'implantation ionique et des différents types de recuit thermique. Nous donnerons un aperçu général sur l'extraction des profils en profondeur pour les deux techniques de dopage des semi-conducteurs.

Ce premier chapitre aura également pour objectif d'apporter l'argumentation de base nécessaire à l'interprétation des résultats de simulation dans les chapitres 2 et 3.

## 1-2 DONNEES PHYSIQUES DU SILICIUM

Il existe trois semi-conducteurs élémentaires appartenant à la colonne IV du tableau périodique de Mendéléiev. Ce sont le silicium(Si), le germanium (Ge) et l'étain gris ( $\alpha$ -Sn) qui cristallisent dans la structure diamant. Par analogie, on inclut parfois le carbone(C) sous la forme polymorphique du diamant qui est un isolant.

En outre, il apparaît normal de classer dans le même groupe le composé isoélectronique carbure silicium (SiC) qui est un semi-conducteur.

De nombreuses raisons ont fait que le silicium (Si) est devenu le matériau semi-conducteur prédominant. Par exemple, il permet la fabrication des dispositifs électriquement plus stables, il supporte mieux les températures supérieures à celle de ambiante, il est susceptible de former un oxyde,  $SiO_2$ , isolant et se caractérise par une grande stabilité chimique [2].

### 1.2.1 Propriétés du matériau

Comme beaucoup d'autres éléments, le silicium peut exister à température ambiante sous différentes structures, dont les deux extrêmes sont respectivement l'état amorphe et l'état cristallin. Il est habituel de considérer que le silicium polycristallin, nommé dans la suite « Si-poly », est composé d'une manière hétérogène de ces deux formes, c'est-à-dire de grains cristallins séparés par des zones amorphes [13].

### 1.2.2 Le silicium monocristallin

Dans un cristal idéal de silicium les atomes sont arrangés selon la structure diamant avec une distance inter-atomique égale à  $2,35 \text{ \AA}$ . La liaison entre les atomes les plus proches est de caractère covalent de type  $3sp^3$ . 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 permises et interdites pour les électrons. La bande interdite appelée gap, et séparant la bande permise supérieure, appelée bande de valence (BV) est pleine [13].

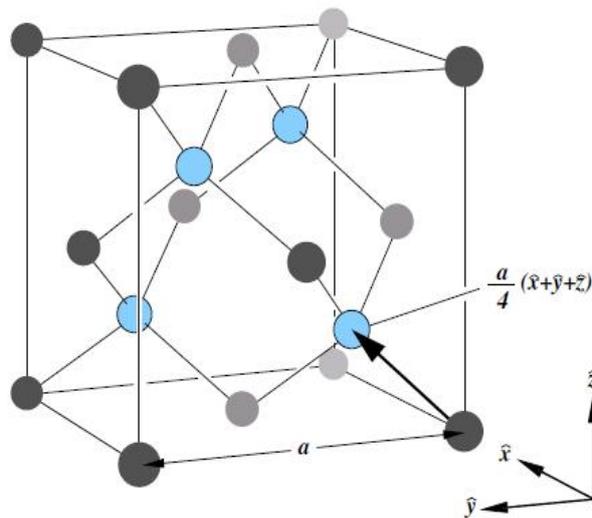


Fig. 1.1 - Maille cubique conventionnelle de la structure diamant d'après [13].

Le zone de Brillouin est illustrée sur la figure (1.2) avec les points à symétrie importants correspondant à des directions dans lesquelles la structure de bandes est représentée sur la figure(1,3). Le point  $\Gamma$ , l'origine du réseau réciproque, est situé au centre de la zone les directions  $\Gamma X([100])$  et  $\Gamma L([111])$  qui relie l'origine aux centres des faces de la zone sont les plus caractéristiques pour la structure de band au voisinage de la bande interdite.

La structure de bande  $E(k)$  est représentée à la figure (1.3) en fonction de  $k$  dans les deux directions choisies. L'origine de l'échelle des énergies est fixée au sommet de la bande de valence à  $k=0$ . Le minimum de la bande de conduction se trouve dans la direction  $[100]$  à 85% de la distance  $\Gamma X$ . La largeur de la bande interdite à température ambiante vaut  $E_g = 1.1 \text{ eV}$  et augment faiblement quand la température diminue. Le sommet de la bande de valence est dégénère [2].

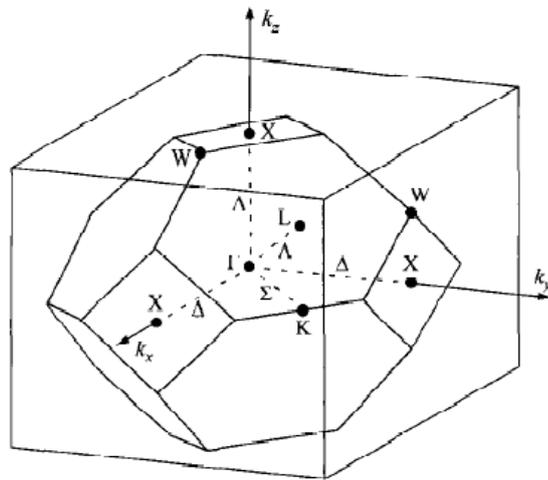


Fig. 1.2 - la première zone de Brillouin pour le réseau fcc les caractéristique importantes de la structure de bandes apparaissent dans les directions de haute symétrie  $[100]$  ( $\Gamma X$ ) et  $[111]$  ( $\Gamma L$ ) [14].

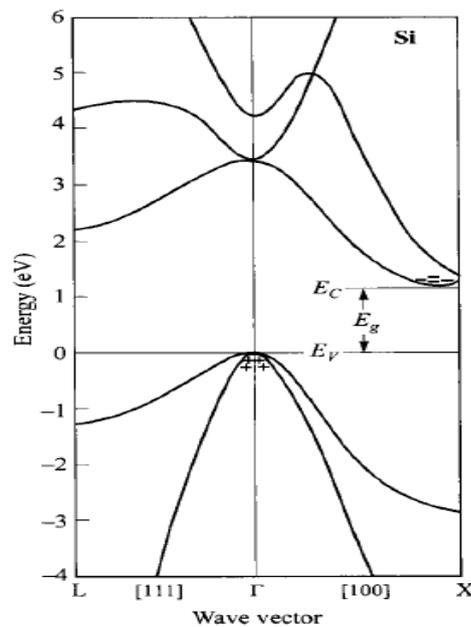


Fig. 1.3 - silicium: structure de bandes d'énergie dans les directions  $[100]$  et  $[111]$  [14].

### 1.2.3 Le silicium amorphe

Au-delà du deuxième proche voisin, l'arrangement des atomes dans le silicium amorphe (a-Si) n'est plus régulier. On observe, par l'analyse de diffraction électronique, qu'un certain ordre à courte distance persiste, c'est-à-dire que le nombre des plus proches voisins reste quatre et la distance inter atomique environ de  $2,35\text{\AA}$ , confirmé par diffraction X. Au de là des plus proches voisins, le semi-conducteur présente une distribution aléatoire des atomes engendrant des distorsions du réseau cristallin. La formation de ces défauts conduisent à l'apparition d'états localisés dans la bande interdite. Ils se forment ce qu'on appelle les queues de bande. D'autre part, ces distorsions peuvent devenir suffisamment importantes pour empêcher une liaison de se former et ainsi donner lieu à des liaisons insatisfaites que l'on appelle également liaisons pendantes. Ce défaut introduit deux états électroniques au milieu de la bande interdite : l'un avec un électron, et l'autre avec deux électrons. On suppose des formes Gaussiennes pour la distribution énergétique des états de liaisons pendantes. La figure (1.4) illustre qualitativement la densité d'états  $g(\epsilon)$  en échelle logarithmique. Les propriétés de l'a-Si dépendent fortement de l'importance du désordre, qui peut être très variable. Ce phénomène se traduit par des propriétés électroniques très différentes selon la méthode et les conditions de fabrication. L'intérêt pour le silicium amorphe est apparu surtout depuis que la possibilité de dopage du matériau a été démontrée. Ceci est devenu possible grâce à l'incorporation d'atomes d'hydrogène dans le réseau, qui permet entre autres de saturer un grand nombre de liaisons pendantes et par conséquent de diminuer fortement la densité d'états localisés dans le gap. On appelle ce matériau silicium amorphe hydrogéné ou a-Si:H [13].

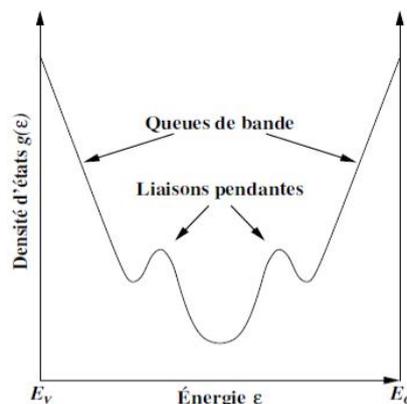


Fig. 1.4 - Densité d'états en échelle logarithmique dans la bande interdite du silicium amorphe ( $E_V$  : bande de valence,  $E_C$  : bande de conduction) [13].

### 1.2.4 Le silicium polycristallin

On peut imaginer des 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 du Si-poly, grains et joints de grains, possède des caractéristiques propres que nous rappelons brièvement :

- ❶ Le grain peut être défini par sa taille et par sa qualité cristalline. En effet, parler de grain monocristallin constitue un abus de langage, car nous verrons que les procédés d'obtention du silicium par CVD ne permettent pas de déposer du silicium de grande qualité cristalline, c'est-à-dire exempt de défauts. Ces défauts peuvent être en pratique des dislocations et des maclés. Les dislocations induisent l'apparition de liaisons pendantes, qui sont électriquement actives. Quant aux macles, si elles se terminent à la surface du grain, elles n'induisent pas de défauts électriquement actifs dans le grain mais peuvent diviser le grain en plusieurs cristallites, par contre si elles se finissent dans le grain, elles provoquent l'apparition de dislocations et donc de liaisons pendantes. La densité de ces défauts va donc déterminer la qualité du grain. En ce qui concerne les cristallites, ce sont leur taille mais surtout leur orientation cristallographique qui les caractérisent. Suivant que l'on observe ou non une orientation cristallographique prépondérante, le Si-poly sera texturé ou pas.
- ❷ 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 silicium polycristallin serait donc une erreur et c'est pourquoi il est toujours nécessaire de définir le silicium polycristallin [14].

## 1.3 ASPECTS PHYSIQUES DE LA DIFFUSION

C'est en 1855 que les bases théoriques des phénomènes de diffusion ont été établies par Fick: elles expriment, au même titre qu'un flux de chaleur ou qu'une densité de courant électrique, un flux d'atomes dans une direction donnée du cristal. On est amené ainsi à définir une grandeur physique importante, appelée le coefficient de diffusion. Ce coefficient intervient dans deux lois fondamentales, appelées lois de Fick. Les progrès réels dans ce domaine, c'est-à-dire dans la détermination des coefficients de diffusion, ne remontent toutefois qu'à une époque

assez proche (1950 environ), après la mise au point de techniques nouvelles d'analyses, telles que les radioéléments artificiels ou la microanalyse électronique, et plus récemment ESCA, Auger, SIMS, SDL, etc [15]. Dans les solides la diffusion est un déplacement aléatoire d'atomes, d'ions de molécules ou de lacune dans la matrice cristallin, provoque en générale par agitation thermique,

La diffusion du dopant dans le silicium est une technologie important en tant qu'étape de processus élémentaire dans la fabrication de circuits intégrés (ICs) à base de silicium, le profil de dopage dépend essentiellement de la température et de la durée de diffusion, la température de diffusion dans le silicium se situe entre 800 à 1500 °C. On peut admettre que les mécanismes fondamentaux, par lesquels diffusent les dopants, sont assez bien compris et pris en compte dans les simulateurs de procédés de fabrication.

Nous proposons de rappeler les notions nécessaires et indispensables à la compréhension de la théorie générale de la diffusion des dopants dans le silicium dans le but de prédire et contrôler les profils de dopage [1].

### 1-3-1 Lois de la diffusion

#### 1-3-1-a Première loi de Fick

Le transfert de chaleur par conduction s'explique également par des mouvements moléculaires aléatoires, et il ya une analogie évidente entre les deux processus. Considérons le flux  $F$  de particules diffusantes unidimensionnel ( $x$ -direction) d'une certaine espèce. Les particules peuvent être des atomes, des molécules, ou ions. La première loi de Fick est exprimée dans un milieu isotrope par le flux.

Le flux est défini par le nombre d'atomes d'impuretés qui traversent l'unité d'aire par unité de temps ( $cm^{-2}s^{-1}$ ). Dans la première approche,  $F$  est proportionnel au gradient de la concentration  $C(x,t)$  d'atomes de dopage par unité de volume ( $cm^{-3}$ ) [16]:

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1.1)$$

Où  $D$  est le coefficient de diffusion, ou diffusivité. S'exprime alors en  $cm^2/s$ .

Le signe moins indique que, physiquement, le flux d'atomes va en sens inverse du gradient  $\partial c/\partial x$ .

### 1-3-1-a La première loi de Fick en trois dimensions

La première loi de Fick se généralise facilement à trois dimensions en utilisant la notation suivante [16]:

$$F = -D\nabla C \quad (1.2)$$

$\nabla$ : est l'opérateur Laplacien.

Où  $(\nabla C)$  exprime l'application de l'opérateur nabla ( $\nabla$ ) sur le champ de concentration  $C(x,y, z,t)$  et le produit de champ à gradient de concentration  $\nabla C$

On peut écrire l'équation (1.2) de façon suivante:

$$F = -\left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} + D_y \frac{\partial c}{\partial y} + D_z \frac{\partial c}{\partial z}\right) \quad (1.3)$$

Si  $D$  est une constante quelque soit la direction dans l'espace (milieu isotrope), on peut écrire [16]:

$$F = -D\left(\frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial z}\right) \quad (1.4)$$

### 1-3-1-b Deuxième loi de Fick

Aussi appelée équation de la diffusion, la seconde équation de Fick exprime en tout point  $x$  la variation temporelle de la concentration  $C(x,t)$  en fonction de sa variation spatiale au voisinage de ce point.

La première équation de Fick est utilisée en régime permanent seulement, c'est-à-dire lorsque le flux de particules ne dépend pas du temps.

La deuxième loi de Fick exprime non plus un régime permanent de diffusion, mais un régime transitoire ou l'on suppose  $\frac{\partial c}{\partial t} \neq 0$ . La variation de la concentration en fonction du temps peut être définie par la relation:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (1.5)$$

La deuxième équation de Fick décrit comment le changement dans la concentration dans un élément de volume est déterminé par le changement dans le flux entrant et le flux sortant dans le volume figure (1.5) [16]

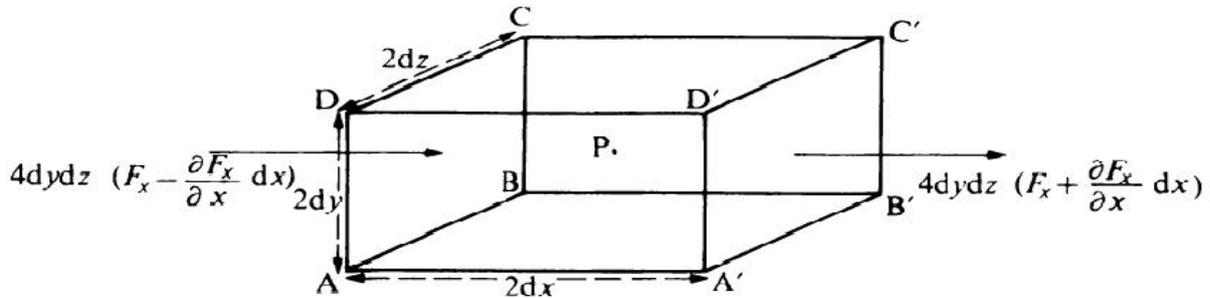


Fig. 1.5 - Principe de diffusion-système conservatif [16].

En combinant les équations (1.1) et (1.5), on obtient:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1.6)$$

L'équation générale de la diffusion (ou deuxième loi de Fick), la relation (1.6), est une équation aux dérivées partielles du second ordre de type parabolique, qui caractérise un processus irréversible. Elle intervient ainsi dès que l'on s'intéresse à la diffusion en tant que processus spatio-temporel. Elle est pratiquement impossible à résoudre analytiquement. Par contre si  $D$  est indépendant de la concentration, elle se simplifie notablement. L'équation (1.6) s'écrit alors:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (1.7)$$

C'est la seule forme de la deuxième loi de Fick qui peut être analytiquement résolue. On pourra considérer un nombre fini de solutions. L'équation (1.7) permet de déterminer le coefficient de diffusion  $D$  à partir de profils expérimentaux [16].

### 1-3-1-c Effet du niveau de Fermi

Dans la partie précédente, nous avons considéré que l'impureté diffusante n'était soumise qu'à son 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 (et de leurs interactions avec le réseau cristallin) l'impureté acquiert une vitesse stationnaire moyenne  $u$ , on peut montrer que le flux d'impuretés est donné par l'équation :

$$F = u C \quad (1.8)$$

Le problème général revient donc à identifier la nature des différentes forces et à établir la relation entre force et vitesse. Dans la section précédente, où la force motrice était uniquement due au gradient de concentration, la thermodynamique des processus irréversibles nous permet de montrer que la force motrice est le gradient de l'entropie partielle de mélange et les calculs conduisent alors à l'équation (1.1). Dans le cas le plus général d'un ensemble de forces motrices, et en admettant intuitivement que la vitesse moyenne de l'impureté est la somme des vitesses élémentaires qui seraient induites par chacune des forces motrices prises séparément, il est commode d'écrire le flux d'impureté sous la forme:

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} + u c \quad (1.9)$$

Le premier terme, appelé terme Fickien, traduit la contribution du gradient de concentration, alors que le deuxième, appelé terme d'Einstein ou d'entraînement, renferme la contribution de toutes les autres forces motrices. Un cas important qui nous intéresse particulièrement, est celui d'une espèce chargée en présence d'un champ électrique. Dans ces conditions, la vitesse d'entraînement est donnée par :

$$u = \pm \mu E \quad (1.10)$$

Où  $\mu$  représente la mobilité exprimée généralement en  $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$  et  $E$  le champ électrique en  $Vcm^{-1}$ .

Ainsi, lorsque la concentration de cette espèce chargée est variable, le gradient de concentration va impliquer nécessairement l'existence d'un gradient de charges libres.

Afin de maintenir l'équilibre (absence de courant électrique), le flux d'électrons induit par ce gradient de charges est équilibré par l'établissement d'un champ électrique donné par la formule classique:

$$E = - \frac{kT}{q} \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (1.11)$$

Avec  $n$  représentant la concentration d'électrons libres.

On obtient alors:

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} \pm u \frac{kT}{q} \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \cdot c \quad (1.12)$$

De sur croît, la mobilité peut s'exprimer en fonction de la diffusivité en utilisant la relation d'Einstein:

$$\mu = \frac{qD}{kT} \quad (1.13)$$

On obtient ainsi:

$$F_{X^{\gamma}} = -D_{X^{\gamma}} \frac{\partial [X^{\gamma}]}{\partial x} + \gamma \cdot D_{X^{\gamma}} \frac{[X^{\gamma}]}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (1.14)$$

Avec  $\gamma$  l'état de charge de l'espèce X.

Finalement, la relation (1.14) nous donne l'équation générale du flux d'une particule soumise à un gradient de concentration et à un champ électrique induit [3.16].

### 1-3-1-d Solution de l'équation de diffusion (seconde loi de Fick)

Nous nous limitons ici à quelques cas très simples, pour illustrer la cinétique de la diffusion, sans donner de démonstrations mathématiques.

#### ➤ Couche mince superficielle ou en sandwich

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche mince à la surface de l'échantillon, ou en sandwich entre deux échantillons identiques.

Conditions initiales et aux limites :  $t = 0$  et  $c(x,0) = Q \cdot \delta(x)$

Où  $\delta$  désigne la distribution de Dirac,

$$\forall t, \int_0^{\infty} c dx = Q \quad \text{ou} \quad \int_{-\infty}^{\infty} c dx = Q$$

$Q$  est égal à la quantité d'atomes déposés par unité d'aire. Les limites d'intégration sont 0,  $+\infty$  pour la couche superficielle,  $-\infty, +\infty$  pour le sandwich. La solution analytique s'écrit:

$$c(x, t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (1.15)$$

Pour la couche superficielle, supprimer le facteur  $\frac{1}{2}$ . C'est l'expression d'une gaussienne (courbe en cloche) qui s'amortit en racine carrée du temps, tout en s'élargissant en fonction de  $x/2\sqrt{2Dt}$  figure (1.6).

La gaussienne peut s'écrire:  $\exp\left(-\frac{x^2}{2x^{-2}}\right)$ ; sa largeur vaut donc  $x = \sqrt{2Dt}$  est une mesure de la profondeur de pénétration. La solution choisie n'est valable que si la couche déposée est mince c'est-à-dire d'épaisseur négligeable devant  $\sqrt{2Dt}$ . [19]

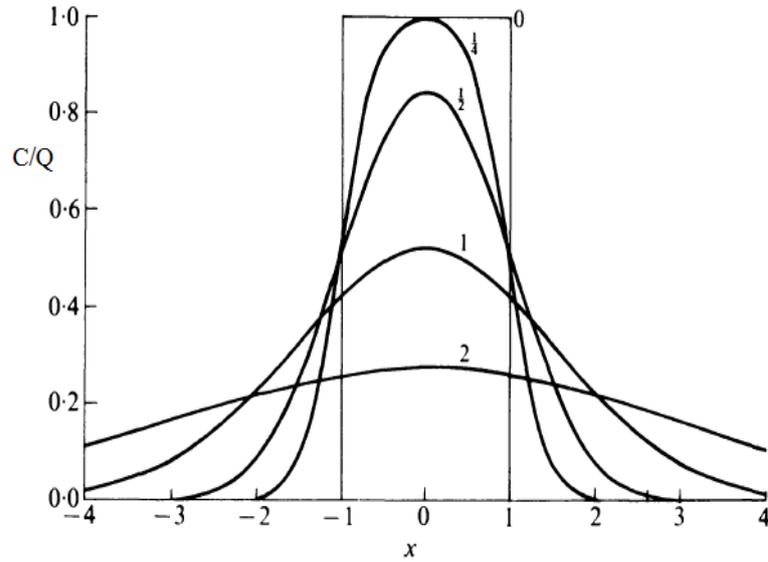


Fig. 1.6- Evolution des profils de concentration avec la durée de diffusion (dépôt mince) pour trois valeurs de  $Dt$  [20].

➤ **diffusion pour un corps semi –limité**

La répartition initiale de l'impureté, à l'instant  $t=0$ , est déterminée par la fonction  $c(x, 0)$ . La solution de l'équation de diffusion pour un corps semi-limité dépend des conditions sur le plan  $x=0$  qui peut représenter soit une frontière réfléchissante, soit une frontière de fixation. Le plan  $x=0$  est dit réfléchissant (ou opaque à la substance) si le courant de particules diffusant est nul:

$$F = \left(-D \frac{dc}{dx} \Big|_{x=0}\right) = 0 \quad (1.16)$$

On dit que le plan  $x=0$  est un plan de fixation si, à tout instant différent de zéro la concentration de l'impureté dans ce plan est nulle (cas de l'évaporation de l'impureté depuis le semi-conducteur)

$$c(0, t) \Big|_{t=0} = 0 \quad (1.17)$$

La solution de l'équation différentielle de diffusion pour un corps semi-limité est de la forme:

Avec frontière réfléchissante [1]:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty c(\xi, 0) \left[ \exp\left(-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right) \right] d\xi \quad (1.28)$$

Avec frontière de fixation

$$c(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_0^\infty c(\xi, 0) \left[ \exp\left(-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right) - \exp\left(-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right) \right] d\xi \quad (1.19)$$

➤ **Diffusion à partir d'une source d'impureté limitée**

Un exemple de diffusion partir d'une source d'impureté limitée est fourni par la diffusion à partir d'une couche finie. La répartition initiale de la concentration est donnée sous la forme:

$$c(x, 0) = \begin{cases} c_s & \text{pour } 0 \leq x \leq h; \\ 0 & \text{pour } h \leq x \leq \infty; \end{cases} \quad (1.20)$$

C'est à dire que dans une couche d'épaisseur  $h$  la concentration en impureté est partout constant et égale  $c_s$ , alors qu'en de hors de cette couche elle est nulle (figure(1.6)). La solution de diffusion est de la forme:

$$c(x, t) = \frac{c_s}{2} \left( \operatorname{erf} \frac{x-h}{2\sqrt{Dt}} + \operatorname{erf} \frac{x+h}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (1.21)$$

La concentration de l'impureté en surface décroît avec le temps suivant la loi:

$$c(0, t) = c_s \operatorname{erf} \left( \frac{h}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (1.22)$$

Pour  $x < \frac{Dt}{h}$  et  $t > \frac{h^2}{D}$  l'équation (1.17) peut être représentée d'une façon approchée sous forme de la fonction de Gauss.

➤ **Diffusion à partir d'une source d'impureté illimitée**

Dans ce cas, on maintient à la frontière d'un corps semi-limité, dans le plan  $x=0$ , une concentration d'impureté constante et indépendante du temps. Les conditions initiale et à la limite sont données sous la forme [1]:

$$c_s = c(0, t) | t \neq 0 ; c(x, 0) = 0 \quad (1.23)$$

La résolution de ce problème se ramène à celle du problème de la diffusion dans un corps à frontière de fixation: on introduit une nouvelle fonction,  $c(x, t) = c_s - c(x, 0)$ , ou  $c(x, t)$  est la solution recherchée. Cette fonction satisfait la condition à la limite  $c(0, t) = 0$  pour  $t > 0$ , qui caractérise la frontière de fixation, et la condition initiale  $c(x, t) = c_s$ . Ceci signifie que pour la fonction  $c(x, t)$  la relation (1.19) est vérifiée. Cette relation peut être mise dans le cas de la répartition uniforme de l'impureté lorsque,  $c(x, 0) = c_s$ , sous la forme [1]:

$$c(x, 0) = c_s \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (1.24)$$

D'où

$$c(x, t) = c_s - c(x, 0) = c_s \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)\right) \quad (1.25)$$

La répartition de la concentration en impureté pour un illimité est représentée sur la figure (1.7)

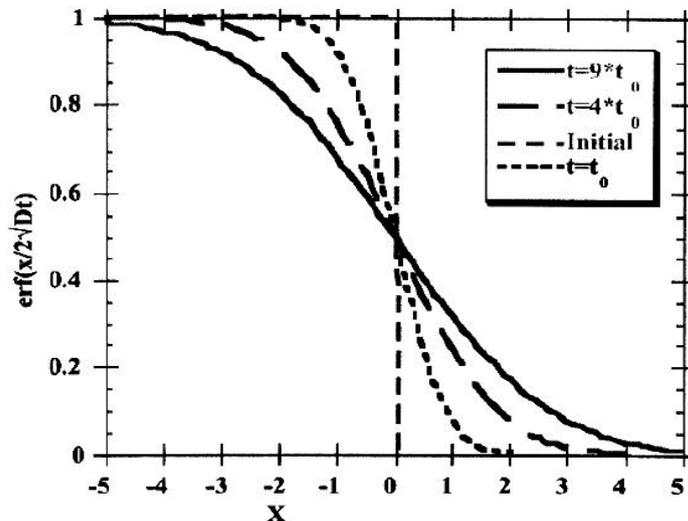


Fig. 1.7- Répartition de l'impureté lors de la diffusion à partir d'une source illimitée [21]

## 1-4 DEFANTS PONCTUELS ET MECANISMES DE DIFFUSION

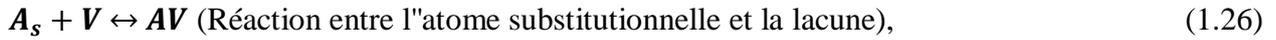
On distingue deux types de défauts fondamentaux dans les semi-conducteurs élémentaires comme le silicium ou le germanium. Le premier est la lacune notée  $V$  (Vacancy) qui correspond à un atome manquant dans un réseau cristallin parfait. Le second est l'auto-interstitiel  $I$  de silicium, que nous appellerons simplement par la suite "interstitiel" et qui représente un atome de silicium intercalé dans le réseau périodique du silicium. Ces défauts ponctuels sont caractérisés par deux principales propriétés qui nous intéressent particulièrement dans l'étude de la diffusion : leurs concentrations à l'équilibre ( $CI^*$  pour les interstitiels et  $CV^*$  pour les lacunes) et leurs vitesses de migration dans le silicium ( $DI$  pour les interstitiels et  $DV$  pour les lacunes) [4].

### 1-4-1 Définitions

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 peuvent s'ioniser et devenir électriquement actives, c'est-à-dire jouent leur rôle de dopants. 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 présentés dans cette section.

Les principales réactions relatives aux mécanismes de diffusion impliquant des défauts ponctuels sont :



Où  $A_s$  représente l'impureté en site substitutionnel,  $AI$  l'impureté en site interstitiel,  $V$  la lacune et  $I$  l'auto-interstitiel de Si [22].

Les réactions nous permettent de calculer les concentrations de défauts en fonction du temps si on connaît les concentrations initiales. On définit des taux de réaction. Ce sont, de façon générale, des termes cinétiques de génération-recombinaison, (G-R), de chacune des réactions hors équilibre écrites précédemment équations (1.30).  $K_f$  et  $K_r$  sont les coefficients des réactions dans les sens direct et inverse des équations de réaction considérée précédemment. Avec **FT** (réaction Franck-Turnbull)

$$\begin{cases} (G - R)_V = K_V^f \cdot C_V \cdot C_{As} - K_V^r \cdot C_{AV} \\ (G - R)_{FT} = K_{FT}^f \cdot C_V \cdot C_{AI} - K_{FT}^r \cdot C_{As} \\ (G - R)_I = K_I^f \cdot C_I \cdot C_{As} - K_I^r \cdot C_{AI} \end{cases} \quad (1.30)$$

Où  $C$  est la concentration de l'espèce en indice,  $K^f$  et  $K^r$  sont les coefficients des réactions définis en indice dans les sens direct et inverse respectivement.

A l'équilibre  $(G - R) = 0$  et le rapport  $\frac{K^r}{K^f}$  est égal à une constante. On retrouve donc les équations d'équilibre (1.31)

$$I + V \leftrightarrow \langle 0 \rangle \quad (1.31)$$

Où  $\langle 0 \rangle$  dénote un atome de silicium sur un site du réseau cristallin. [18]

### ➤ Mécanismes lacunaires

La diffusion assistée par lacunes peut s'effectuer suivant deux mécanismes prépondérants schématisés sur les Figure (1.9.a) et Figure (1.9.b).

Dans le premier cas, correspondant au mécanisme lacunaire simple (Figure (1.9.a)), l'impureté en position substitutionnelle diffuse en échangeant son site avec une lacune située en premier voisin (passage de a à b) selon l'Équation (1.26). La lacune peut ensuite évoluer en échangeant elle même son site avec des atomes voisins de la matrice et ainsi faciliter la diffusion de l'impureté de son nouveau site d'équilibre vers une nouvelle position (passage de b à d), la lacune réoccupant son site de départ (b). La diffusion des impuretés suivant ce mécanisme est donc proportionnel à la concentration de lacunes.

Le second mécanisme lacunaire, dit de Franck-Turnbull (Figure (1.9.b)), est lié à la dissociation d'une impureté en position substitutionnelle devenant un défaut interstitiel extrinsèque en laissant place à une lacune suivant la relation d'équilibre donnée par l'Équation (1.27). L'impureté interstitielle peut alors diffuser à travers le réseau cristallin pour se recombinaison avec une autre lacune (passage en e) et ainsi réoccuper une position substitutionnelle. La diffusion d'impuretés suivant ce mécanisme (par exemple l'Antimoine) est donc encore une fois proportionnel à la concentration de défauts lacunaires [4].

### ➤ Mécanismes interstitiels

Comme dans le cas des mécanismes lacunaires, la diffusion atomique assistée par des défauts interstitiels peut être régie suivant deux mécanismes principaux schématisés sur les Figure (1.8.c) et Figure (1.8.d).

Le mécanisme interstitiel simple (Figure (1.8.c)) correspond à la déformation locale des liaisons atomiques obtenue par le couplage entre un atome interstitiel intrinsèque et l'impureté. La formation de cette paire, selon l'Équation (1.28), permet d'abaisser la barrière d'énergie que doit franchir l'impureté pour diffuser. Ainsi, avant de se dissocier et de laisser l'impureté dans une nouvelle position substitutionnelle (passage de b à c), la paire pourra parcourir une certaine distance avant de se dissocier.

Le second mécanisme, le plus souvent appelé "kick-out" (Figure (1.8.d)), est d'une importance particulière puisqu'il est notamment le mécanisme prépondérant de la diffusion du bore dans le silicium. Il correspond à la dissociation assistée par un auto-interstitiel d'une impureté substitutionnelle en une impureté interstitielle mobile suivant la relation d'équilibre donnée par l'Équation (1.29). L'impureté peut alors diffuser dans le cristal de site interstitiel en site interstitiel sur une longue distance jusqu'à se repositionner dans un site substitutionnel du cristal en libérant un nouvel interstitiel. Pour les deux mécanismes décrits, le coefficient de

diffusion des impuretés considérées est proportionnel à la concentration de ce type de défauts ponctuels [4].

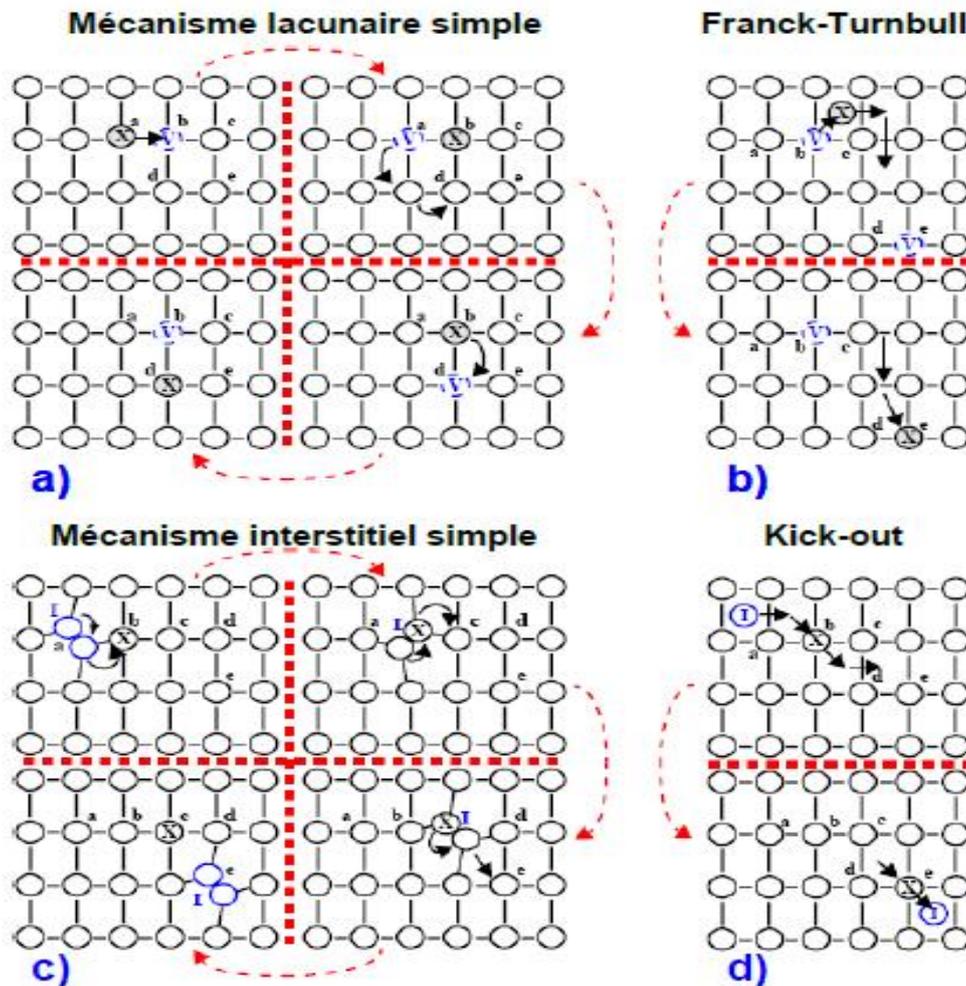


Fig. 1.8- Représentations schématiques des principaux mécanismes de diffusion assistés, par lacunes : Mécanismes simples (a) et dit de Franck-Turnbull (b) et par interstitiel : Mécanismes simple (c) et dit de kick-out ou indirect (d) [23].

### 1-4-2 Concentration à l'équilibre

Selon la thermodynamique statistique, pour une température donnée différente de 0°K, il existe une concentration non nulle de défauts ponctuels en équilibre thermodynamique. Cette configuration reflète le fait que le cristal est dans un état qui minimise son énergie libre de Gibbs. Toujours d'après les résultats issus de la thermodynamique, la concentration à l'équilibre d'un défaut ponctuel  $X$  peut s'exprimer par [22] :

$$\frac{c_X}{c_s} = \theta_X \exp\left(\frac{S_X^f}{k}\right) \exp\left(\frac{-H_X^f}{kT}\right) \quad (1.32)$$

où  $c_s$  est le nombre de sites disponibles dans le réseau cristallin du silicium,  $H_X^f$  est l'enthalpie de formation d'un défaut ponctuel  $X$ ,  $\theta_X$  le nombre de degrés de liberté du défaut dans le site cristallin,  $S_X^f$  est un terme de désordre entropie que généralement attribué aux vibrations cristallines [22].

La formation de défauts entraîne une augmentation de l'entropie du cristal. Une partie de cette entropie est liée au désordre de configuration ( $S_d$ ) et exprime le nombre de configurations possibles pour distribuer  $n$  défauts dans  $N$  sites cristallins [22]

$$S_d = k \ln\left(\frac{N!}{(N-n)!n!}\right) \quad (1.33)$$

La seconde contribution de l'entropie provient de l'introduction de modes locaux de vibration dans le spectre des phonons du cristal. Le traitement de ce sujet est complexe, mais de façon qualitative, on peut dire que la création d'un défaut augmente l'entropie de vibration d'un ordre de grandeur égale à la constante de Boltzmann. L'augmentation d'entropie peut cependant être plus grande lorsque les déplacements atomiques autour du défaut deviennent importants comme pour le silicium [3,22].

De nombreuses études expérimentales ont été menées afin d'évaluer la concentration de défauts ponctuels et leur diffusion dans le Silicium à l'équilibre thermodynamique, et un consensus reste difficile à trouver. Pour illustrer cette difficulté, nous présentons dans les figures (1.9.a) et figure (1.9.b) une compilation des résultats obtenus par différents auteurs concernant les valeurs de concentration et du coefficient de diffusion des interstitiels à l'équilibre. Comme le montrent ces deux figures, il existe une grande dispersion des résultats expérimentaux. Il en est de même pour la concentration et la diffusivité des lacunes dans le silicium. Cette importante dispersion est due pour une part aux différentes méthodes expérimentales utilisées, mais surtout à la complexité du phénomène à mesurer

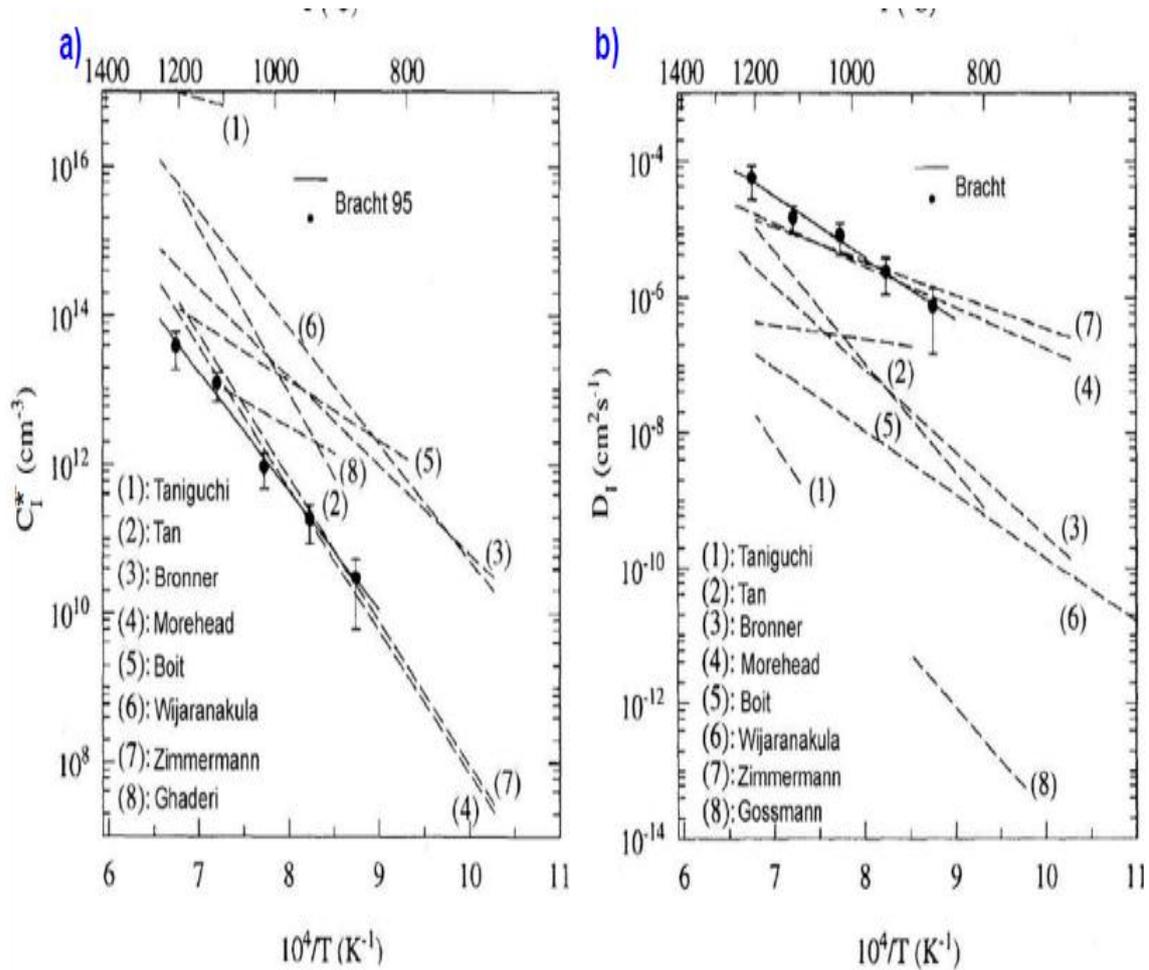


Fig. 1.9- (a) Estimation de la concentration à l'équilibre des interstitiels dans le silicium. (b) Coefficients de diffusion des auto-interstitiels de silicium issus de la littérature [4]

### 1-4-3 Migration des défauts

La structure et les énergies de formation des auto-interstitiels et des lacunes vont nous permettre de mieux comprendre les mécanismes et les chemins de migration des défauts dans le silicium.

D'un point de vu général, lorsqu'un défaut migre d'un site stable S1 vers un autre site stable S2 équivalent, il doit franchir une barrière énergétique notée  $\Delta G^m$ . La figure suivante illustre ce passage en représentant la variation de son enthalpie libre de Gibbs G en fonction de la position dans l'espace du défaut au cours du saut élémentaire. La figure (1.10) suivante illustre ce passage en représentant la variation de son enthalpie libre de Gibbs G en fonction de la position dans l'espace du défaut au cours du saut élémentaire [3,22]

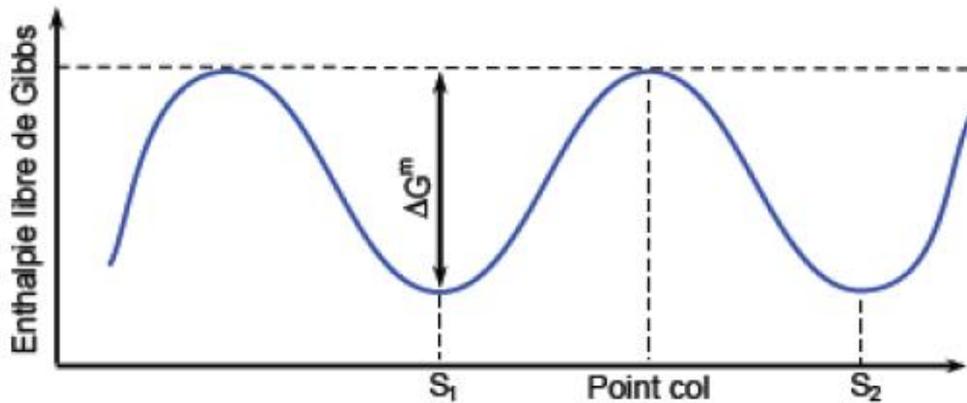


Fig. 1.10- Diagramme d'énergie d'activation de la migration d'un défaut entre deux sites du réseau équivalent [22]

Si on considère qu'au cours de son déplacement l'espèce diffusante ou le défaut saute d'un site stable à un autre avec une fréquence  $\gamma$ , cette barrière énergétique que doit franchir le défaut est également l'énergie d'activation de  $\gamma$ , notée  $Q$ , on obtient alors [22]:

$$\gamma = \gamma_0 \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (1.34)$$

De même:

$$\gamma = \gamma_0 \exp\left(\frac{-\Delta G^m}{kT}\right) \quad (1.35)$$

$$\Delta G^m = \Delta H^m - T\Delta S^m \quad (1.36)$$

L'enthalpie libre de Gibbs ( $G$ ) du cristal est minimale lorsque l'on se situe sur un site stable (situation d'équilibre thermodynamique). A cause de l'agitation thermique, l'atome vibre avec une fréquence  $\gamma_0$  proche de la fréquence de Debye du cristal (qui de l'ordre de  $10^{13} \text{s}^{-1}$  pour le silicium) [3]. 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 appelée énergie de migration  $\Delta G^m$  et qui représente la différence d'enthalpie libre de Gibbs du cristal entre sa valeur au point col et celle à l'équilibre. La relation liant la fréquence de saut avec le coefficient de diffusion est donnée par [22]:

$$D = ga^2\gamma \quad (1.37)$$

Où:

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-\Delta G^m}{kT}\right) \quad (1.37)$$

Avec:

$$D_0 = g a^2 \gamma_0 \quad (1.38)$$

Où  $a$  est la longueur du saut élémentaire ( $a=2.35 \text{ \AA}$  pour le silicium) et  $g$  est un facteur géométrique pour le type de cristal considéré [3,22].

## 1-5 DIFFUSION DES DOPANTS

Il existe, un nombre restreint de variables physiques caractérisant la diffusion d'un dopant. En premier lieu vient le coefficient de diffusion intrinsèque. Ce paramètre détermine la diffusion du dopant lorsque la concentration totale de dopant est située en dessous de la concentration intrinsèque de porteurs libres  $n_i$ . Si la concentration du dopant est située au-dessous de  $2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Au-delà de cette limite, de nouveaux phénomènes sont à prendre en considération comme la formation de précipité ou l'apparition d'une très forte accélération de la diffusion s'expliquant par la théorie de la percolation [3].

### 1-5-1 Diffusion des dopants dans la silicium

En réalité, les impuretés qui diffusent dans le Silicium utilisent en proportions variables les deux mécanismes de diffusion « par paires » utilisant les lacunes et/ou les interstitiels. De façon générale, la diffusivité du dopant X,  $D_X$  peut alors s'exprimer comme la somme de deux contributions :

$$D_X = D_{XI} + D_{XV} \quad (1.39)$$

Où  $D_{XI}$  est la diffusivité du dopant selon le mécanisme interstitiel et  $D_{XV}$  la diffusivité du dopant selon le mécanisme lacunaire.

En remarquant que  $D_{XI}$  est proportionnel à la concentration d'atomes de Silicium interstitiels [I], et que  $D_{XV}$  est proportionnel à la concentration de lacunes [V], on peut alors écrire que :

$$D_{XI} \propto f_I \times [I] + f_V \times [V] \quad (1.40)$$

Où  $f_I$  et  $f_V$  représentent la part prise par chacun de ces deux mécanismes dans la diffusion du globale du dopant (par définition  $f_I + f_V = 1$ ).

### 1-5-2 Coefficient de diffusion intrinsèque

Le prédépôt de dopants, était une technique de dopage souvent utilisée avant la mise au point des implanteurs. Les figures (1.11) présentent pour le phosphore et pour le bore, des profils de concentration issus d'un dopage par prédépôt obtenus soit en faisant varier la concentration de surface pour le phosphore figure (1.11.a) soit en faisant varier la concentration de surface et la température pour le bore figure (1.11.a)

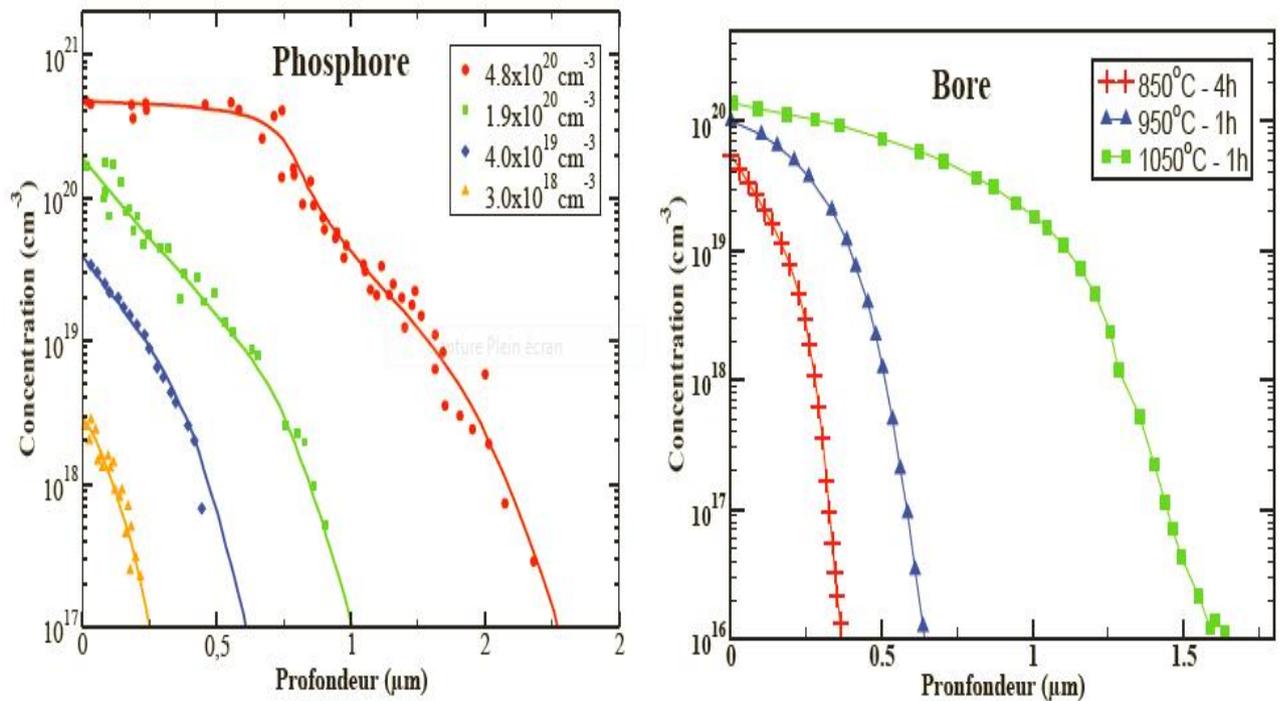


Fig. 1.11- a) Profils de prédépôt de phosphore à 900°C pour plusieurs concentrations de surface et b) profils de prédépôt de bore obtenus en faisant varier la température de recuit et la concentration de surface [24].

A partir des espèces diffusantes dans le silicium,  $D_i$  peut se mettre sous la forme d'une relation d'Arrhenius. Le profil de concentration du dopant résultant d'un prédépôt est alors directement donné par une distribution analytique calculée à partir de l'équation de Fick et en utilisant un coefficient de diffusion constant. Cette distribution est donnée par [22]:  $c(x, t) = c^{sur} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_i t}}\right)$ .

Pour chacune

$$D_i = D_{i0} \exp\left(\frac{Q_A}{kT}\right) \quad (1.41)$$

Où  $D_{i0}$  est appelé le facteur de fréquence ou le facteur d'entropie car il est relié à la fréquence de saut atomique du dopant, ainsi qu'à l'entropie générée par un atome qui franchit une barrière de potentiel pour passer d'un site stable à l'autre. On appelle  $Q_A$  l'énergie d'activation [3].

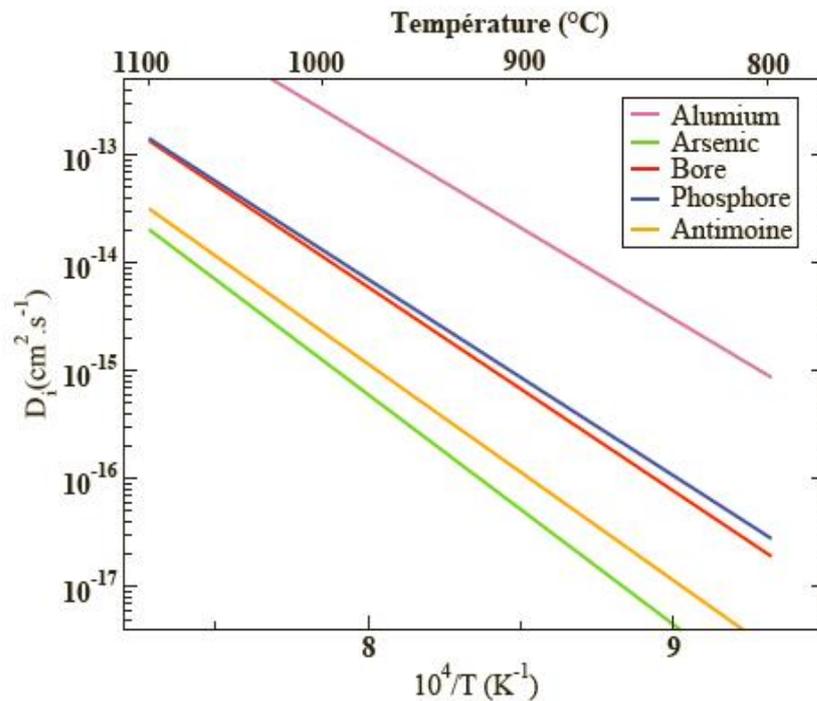


Fig. 1.12- Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés en micro-électronique [14].

### 1-5-3 Diffusion à très forte concentration de dopant

A des concentrations de dopage plus élevées, les coefficients de diffusion dépendent de la concentration. Pour fixer les idées, cette complication du mécanisme de diffusion intervient à des concentrations supérieures au nombre volumique de porteurs intrinsèques à la température de diffusion considérée, La concentration du dopant est située au-dessous de  $2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , L'un des objectifs pour augmenter les performances des transistors, est d'accélérer la vitesse de commutation de l'état passant à l'état bloqué. Pour cela, il faut réduire verticalement et horizontalement la taille des dispositifs, pour autant, il ne faut pas réduire la quantité de charges  $ni$  dans la source, drain et le canal. Le problème se situe dans l'augmentation de la concentration en atomes dopants Au-dessus d'une certaine concentration appelée solubilité limite. La solubilité limite est à la fois fonction du dopant et de la température [25].

Comme pour le coefficient de diffusion, la solubilité dépend fortement de la température. Elle est très élevée à haute température et réduite à température ambiante [26]. On utilise le plus souvent une loi d'Arrhenius pour quantifier cette concentration limite [3,26]

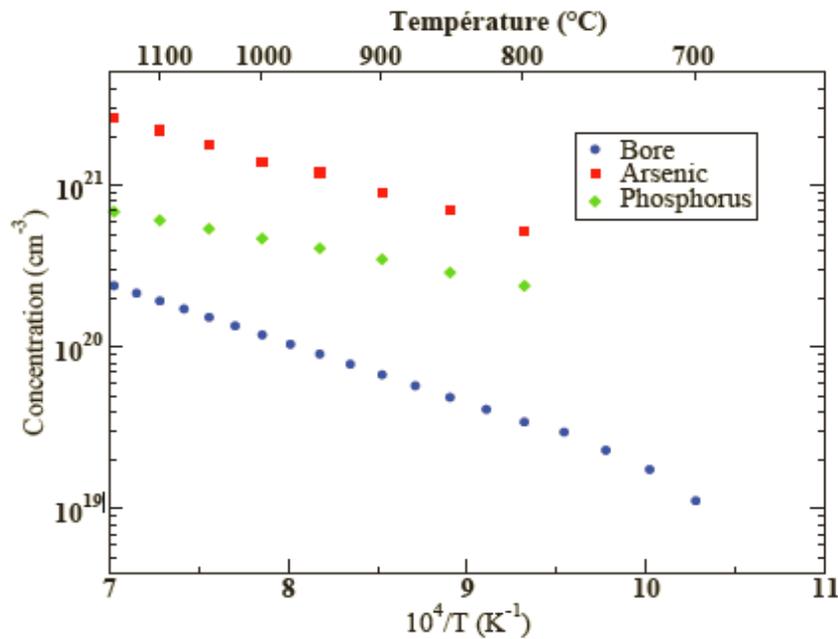


Fig. 1.13- Solubilité limite des principaux dopants entre 700 et 1100 $^{\circ}\text{C}$ [3].

#### 1-5-4 Procédés de réalisation pratique de la diffusion

Dès sa première application pour la réalisation des jonctions  $p_n$  et jusqu'à nos jours, la méthode d'introduction par la diffusion des impuretés dans un semi-conducteur a été l'objet d'un perfectionnement constant visant à améliorer la reproductibilité des paramètres essentiels des couches diffuses, c'est à dire de la concentration des impuretés en surface et de l'épaisseur de ces couches, à élargir la plage de leur réglage et à réduire de cout des opérations que comporte le processus de diffusion. Actuellement, différents procédés de diffusion ont été mis au point. Dans la suite de l'énoncé, nous nous limiterons à la description du processus de diffusion à travers le silicium des impuretés donneuses et acceptrices qui est le plus employé dans la technologie planar, à savoir la diffusion dans un courant de gaz neutre qui entraîne les impuretés choisies (diffusion par la méthode de tube ouvert). Les sources de diffusants utilisées peuvent se présenter sous trois formes: solides, liquides ou gazeuses [1].

type	élément	Nom de composant	formule	état	Réaction de diffusion
n	Antimoine	trioxyde d'Antimoine	$Sb_2O_3$	Solide	
	Arsenic	trioxyde d'Arsenic Arsine	$As_2O_3$ $AsH_3$	Solide Gaz	$2AsH_3 + 3O_2 \rightarrow As_2O_3 + 3H_2O$
	phosphore	Oxychlorure de phosphore	$POCl_3$	Liquide	$4POCl_3 + 3O_2 \rightarrow 2P_2O_3 + 6Cl_2$
		pentoxyde de phosphore	$P_2O_5$	Solide	$2PH_3 + 4O_2 \rightarrow P_2O_5 + 3H_2O$
		Phosphine	$PH_3$	Gaz	
p	bore	Tribromide du bore	$BBr_3$	Liquide	$4BBr_3 + 3O_2 \rightarrow 2B_2O_3 + 6Br_2$
		Trioxyde du bore	$B_2O_3$	Solide	$B_2H_6 + 3O_2 \rightarrow 2B_2O_3 + 3H_2O$
		Diborane	$B_2H_6$	Gaz	
		Tribromide du bore	$BCl_3$	Gaz	$BCl_3 + 3H_2 \rightarrow 2B + 6HCl$
		bore nitride	$BN$	solide	

Tableau 1-1:Principale source de dopant [27]

### a-Source d'impuretés solides

L'installation de diffusion comporte un tube de quartz ouvert passant par deux fours tubulaires à réglage de la température indépendant, qui assurent deux zones de température constant et une variation monotone de la température de la première zone à la seconde. Dans l'une des zones (zone de diffusion), on place les plaquettes de silicium, et dans l'autre (zone de la source), la source d'impuretés. La gamme de température de fonctionnement est de ((700 à 1300) $\pm$ 0.5°C ) dans la zone de la source, longue de 300 mm, et de (400 à 1100) $\pm$ 2°C dans la zone de la source, longue de 60 mm, comme sources solides d'impuretés acceptrices et donneuses, on utilise se généralement les oxydes de bore et de phosphore.

On fait passer par le tube un courant de gaz dont la fonction principale consiste à transporter vers la zone de diffusion les molécules évaporées da la source. Le plus souvent, on utilise l'argon et l'azote,

Lors de la diffusion dans des fourrées à deux zones la concentration de l'impureté en surface dépend de la température de la source. Les anhydrides borique et phosphorique commencent à s'évaporer d'une manière intense à des températures supérieures à 700 et 200°C respectivement. Le débit du gaz d'entraînement est généralement d'environ  $1500\text{cm}^3/\text{mn}$ . Tous les facteurs qui influent sur la concentration en surface ne sont pas faciles à contrôler. Il s'agit tout d'abord de la quantité de vapeur d'eau dans des substances telle que les anhydrides borique et, surtout, phosphorique, qui sont très bons des hydrateurs.

Il est pratiquement impossible d'introduire  $B_2O_3$  et  $P_2O_5$  dans une installation de diffusion sans que se produise leur hydrations. La présence humidité dans les sources d'impureté augmente la dispersion de la concentration d'impureté en surface, ce qui constitue le principal défaut de l'impureté en surface, ce qui constitue le principal défaut de la diffusion à partir de sources solides. On élimine cet inconvénient en utilisant des sources liquides [1].

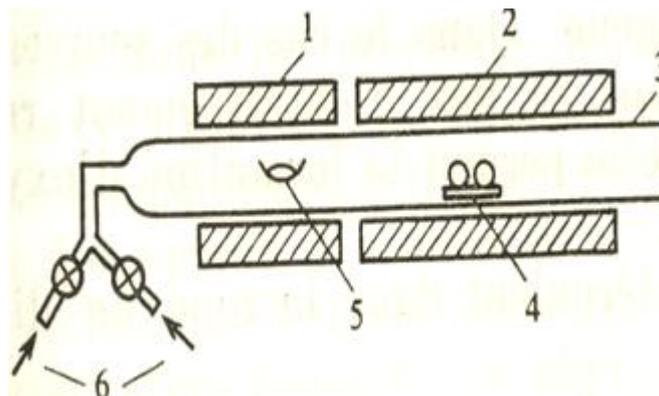


Fig. 1.14- Schéma de l'installation pour la diffusion, dans le courant d'un gaz d'entraînement, des impuretés Solide. 1,2 fours tubulaires; 3, tube en quartz; 4, plaquette de silicium; 5, source d'impureté solide; 6, courants de gaz [1].

### b- Source d'impuretés liquides

Dans ce cas, l'installation de diffusion comporte une zone de haute température. Pour l'évaporation à partir d'une source d'impureté liquide, il suffit de maintenir la température de cette dernière dans l'intervalle de 20 à 40°C. Les sources liquides le plus couramment employées sont les halogénures de bore et de phosphore, en particulier, le trichlore de phosphore  $PCl_3$  et Tribromure de bore  $BBr_3$ . On fait circuler à travers le tube de quartz trois courants de gaz: un courant principal d'azote (ou argon), au débit de  $1000\text{cm}^3/\text{mn}$ , un courant faible ( $\sim 10\text{cm}^3/\text{mn}$ ) du même gaz ayant traversé au préalable la source liquide et un courant faible ( $\sim 15\text{cm}^3/\text{mn}$ )

d'oxygène. Dans le cas des sources liquides, la présence d'oxygène dans le gaz entrainement revêt une importance fondamentale, car elle permet la formation d'oxydes d'impureté.

L'inconvénient sérieux des sources liquides des diffusions produites au cours des réactions, des substances toxiques [1].

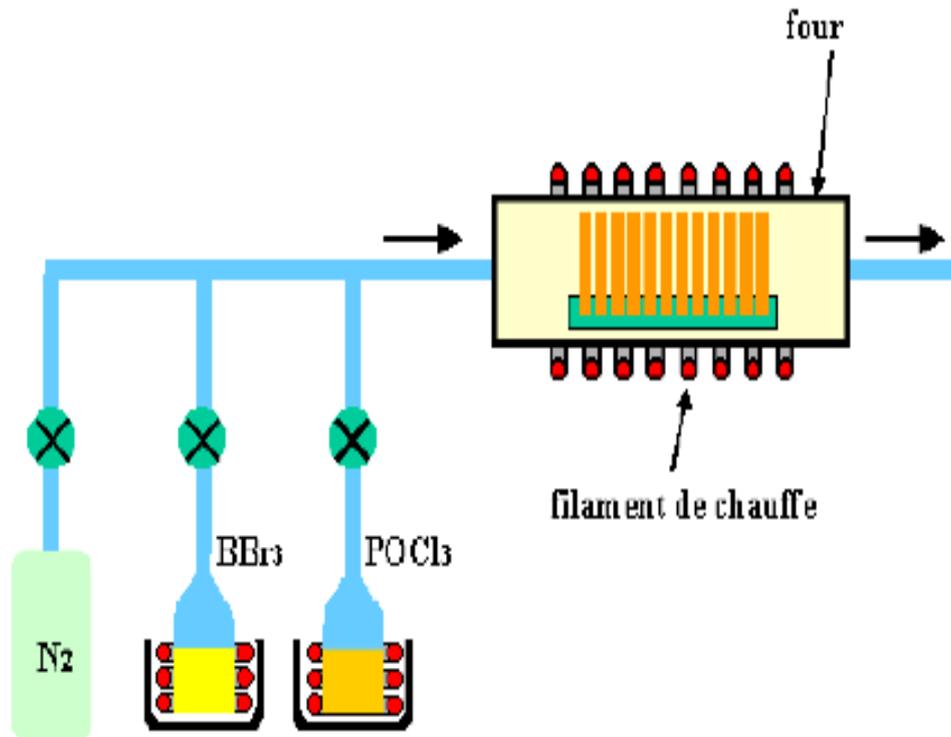


Fig. 1.15- Schéma de l'installation pour la diffusion, dans le courant d'un gaz d'entrainement, des impuretés liquides[28].

#### d-source d'impuretés gazeuses

Les sources gazeuses sont les gaz tels que l'Arsine  $2AsH_3$  la phosphine  $PH_3$  ou le diborane  $B_2H_6$  Il circule en permanence un gaz neutre (azote) afin d'éviter toute pollution par des éléments venant de l'atmosphère ambiante. A priori ces gaz soient simples à mettre en œuvre, ils sont par contre très dangereux puisque létaux (dose mortelle) pour l'homme est à quelques ppm de concentration On leur préfère des sources liquides telles que  $POCl_3$  ou  $BBr_3$  qui sont liquides à température ambiante mais facilement vaporisées pour être introduites dans des fours de diffusion.

L'avantage des sources gazeuses est la facilité du réglage dans de larges limites de la concentration en surface. L'inconvénient qu'elle présentent est leur toxicité [1].

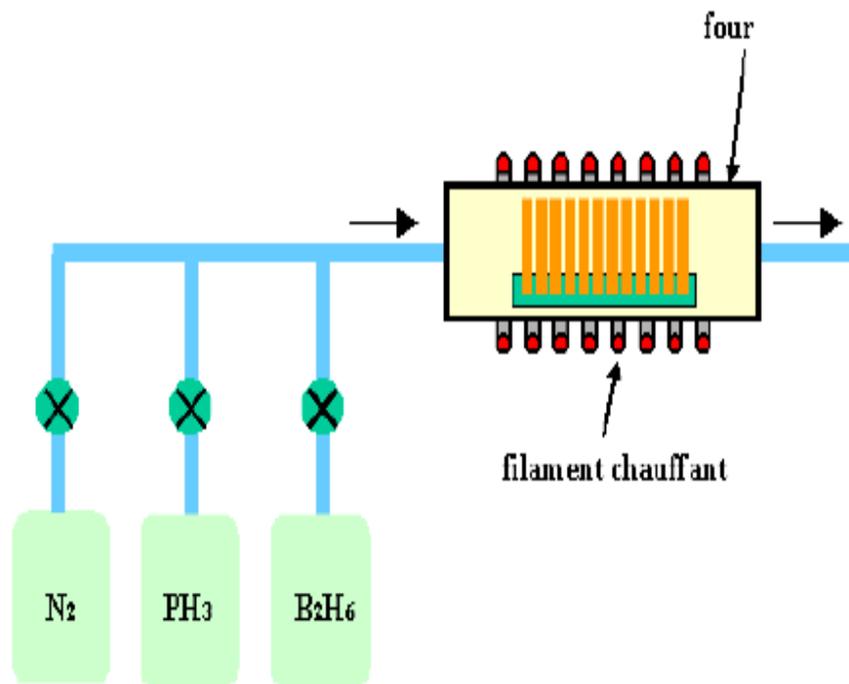


Fig. 1.16- Schéma de l'installation pour la diffusion, dans le courant d'un gaz d'entraînement, des impuretés gazeuses [28].

## 1-6 IMPLANTATION IONIQUE

L'implantation ionique est l'étape pendant laquelle les dopants (type N ou P) sont introduits sous forme d'ions dans le silicium pour la fabrication de la jonction [29]. L'implantation ionique est une méthode très contrôlable de l'introduction de dopants dans les semi-conducteurs, donc cette technique a été adoptée comme méthode de dopage des semi-conducteurs pour VLSI au cours des 15 dernières années, en remplacement des techniques de dopage source solide, en phase gazeuse ou spin-on. Toutefois, il existe certains inconvénients de cette technique par rapport à la technique plus ancienne comme le dopage par source d'impuretés solide. Le principal inconvénient est que l'introduction d'endommagement du réseau à semiconducteur. Les dommages dus à l'implantation ionique dépendent de la masse et d'énergie, ainsi que la température [30].

### 1-6-1 Principe des implanteurs ioniques

Le principe de fonctionnement d'un implanteur est schématisé sur la figure (1.17). Les ions sont créés dans la source à partir de composés gazeux ou d'éléments métalliques vaporisés ou pulvérisés. La figure (1.18) schématisé le principe d'une source d'ions de type Freeman. Les éléments à planter sont introduits dans la chambre d'ionisation sous forme de composés

gazeux. Dans le cas des espèces métalliques les composés peuvent être obtenus par chloruration: le passage du gaz réactif ( $\text{Cl}_2$ ) sur le métal placé dans un creuset produit, du fait des températures élevées atteintes dans la chambre, des composés volatils, qui sont ensuite dissociés et ionisés au niveau du filament. Le faisceau d'ions est extrait de la source, focalisés puis accélère à une énergie intermédiaire ( $1.6 \times 10^{-15}$  à  $6.4 \times 10^{-15} \text{ J}$  soit 10 à 40 KeV). Il passe ensuite dans un aimant qui assure un tri des ions suivant leur masse et permet de sélectionner l'espèce désirée qui subit l'accélération finale. L'accélération totale se situe entre  $1.6 \times 10^{-15}$  à  $6.4 \times 10^{-15} \text{ J}$  (soit entre 10 et 400 keV) pour les équipements d'implantation classiques, le faisceau est balayée sur la surface du matériau soit électrostatiquement ou mécaniquement (par déplacement du porte échantillon) de manière à assurer un traitement uniforme. Les pièces à traiter sont généralement fixées sur des montages refroidis pour évacuer l'énergie thermique apportée par le faisceau d'ions. L'implantation est effectuée sous des vides de l'ordre de  $10^{-4} \text{ Pa}$ . Les courants de faisceau délivrés varient de quelques microampères à quelques milliampères [31].

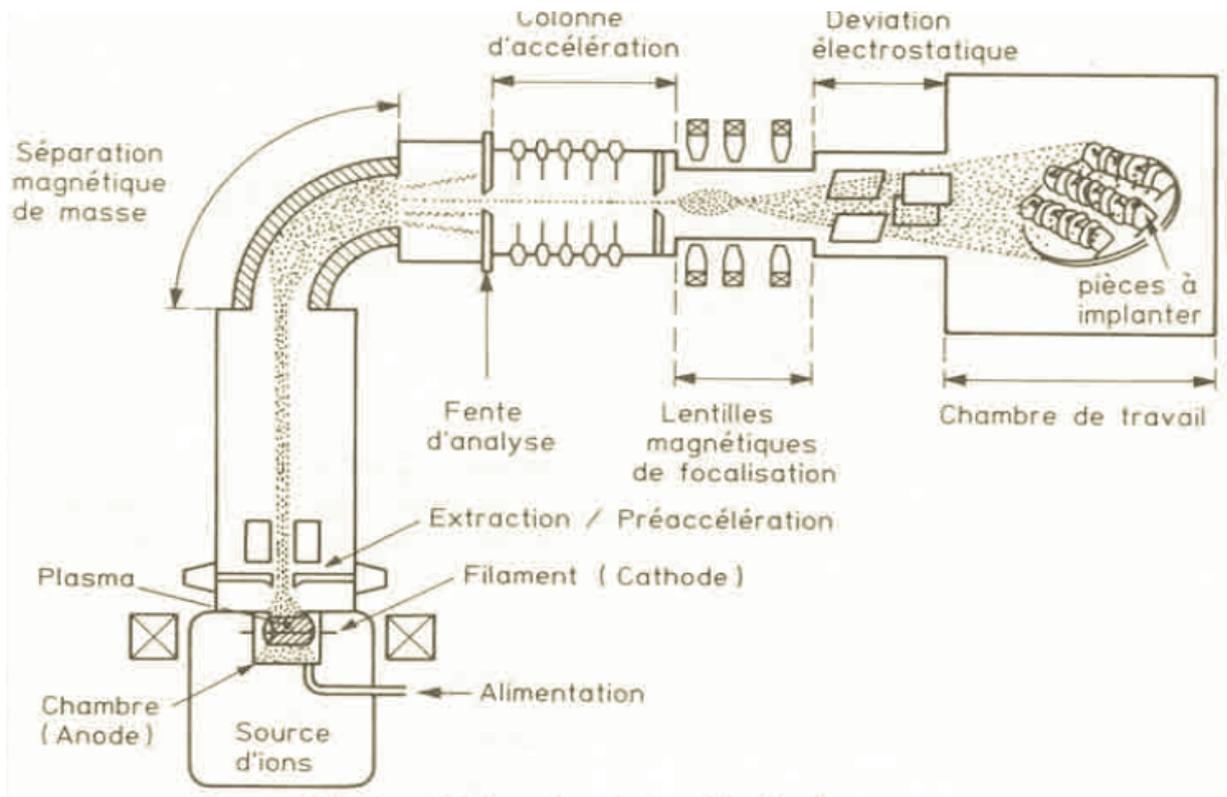


Fig. 1.17- Schéma de Principe d'un implantateur [31].

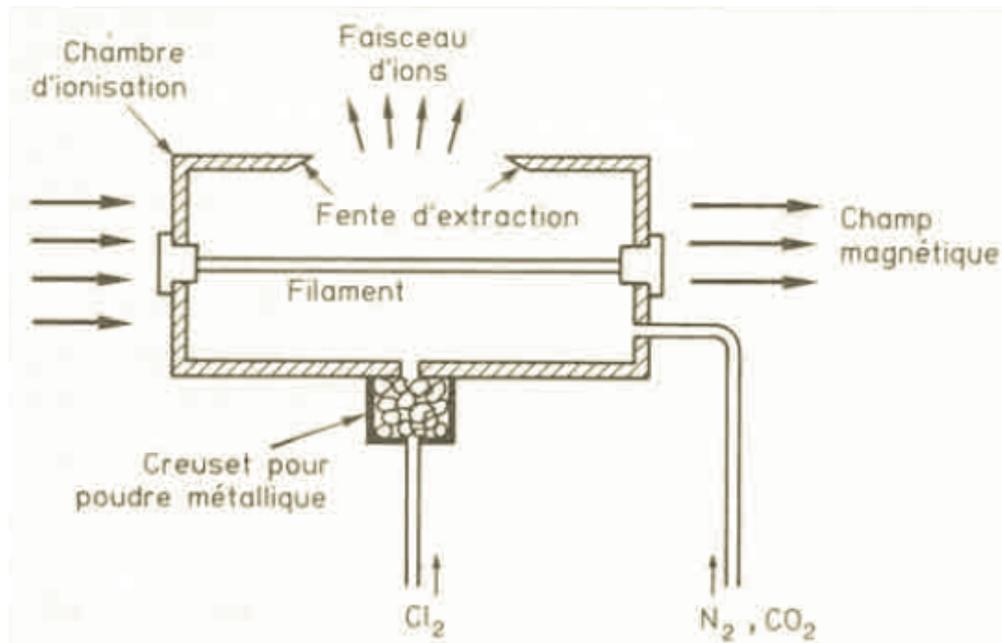


Fig. 1.18- Schéma de Principe d'une source d'ions de type Freeman [31].

### 1-6-2 Interactions ion-matière

La figure (1.19) illustre les principaux phénomènes physiques consécutifs à l'implantation d'ions. Les ions pénétrant dans un matériau perdent leur énergie par différents types d'interactions. La théorie de LSS (Lindhard, Scharff, Schiott) décrit ces processus de perte d'énergie, qui mettent en jeu deux phénomènes principaux:

- les collisions directes entre les ions et les atomes de la cible, qui conduisent à la perte d'énergie dite nucléaire:  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$ , il en résulte une distribution de dommages créés par les nombreux déplacements d'atomes le long de la trajectoire de la particule incidente, Ces collisions sont élastiques et ressortent de la théorie classique. La quantité  $T(p)$  d'énergie transférée à l'atome cible de masse  $M_2$  par un atome ayant une énergie  $E$  et une masse  $M_1$  est calculée selon la formule classique :

$$T(p) = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E \sin^2 \left( \frac{\theta(p)}{2} \right) \quad (1.42)$$

Où  $\theta$  est l'angle de diffusion et  $p$  est le paramètre d'impact ou la distance minimale entre les centres des noyaux.

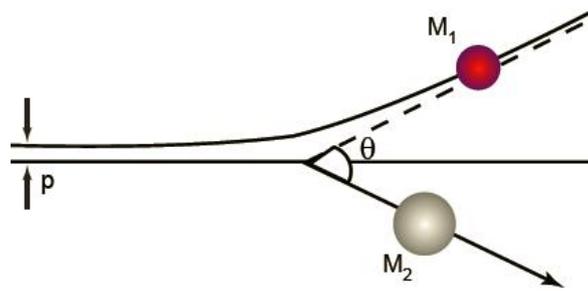


Fig. 1.19- *Illustration schématique d'une collision entre un projectile de masse  $M_1$  et un atome cible de masse  $M_2$ [3].*

En utilisant les variables réduites  $\epsilon$  et  $\rho$  introduites par Linhard et al. Et respectivement proportionnelles à l'énergie et au parcours R de l'ion, le pouvoir d'arrêt nucléaire prend la forme analytique universelle suivante:

$$\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{N_{Si} \ln(1+1.21\epsilon)}{2(\epsilon+0.0062+\epsilon^{0.154}+0.242.\epsilon^{1/2})} \quad (1.43)$$

Avec  $N_{Si}$  la densité atomique du silicium.

Les excitation et ionisations électroniques conduisant à la perte d'énergie électronique,  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ , il en résulte une distribution des atomes ionisés. L'ion qui traverse le cristal subit les forces répulsives issues de multiples sources de champ électrique. Les champs électrique des ions va alors entrainer des déplacements d'électrons impliqués dans les liaisons du cristal. Ces électrons vont percuter l'ion et de ces interactions va résulter le moment d'un dipôle qui crée un champ électrique polarisé selon une direction opposé au vecteur vitesse de l'ion. La force résultante de ce champs électriques appliquant sur l'ion est appelée le pouvoir non local d'arrêt électronique. Le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit d'une façon générale sous la forme:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = k_L \cdot \sqrt{E} \quad (1.44)$$

Ou  $k_L$  est fonction de  $Z_1, Z_2, M_1$  et  $M_2$ :

$$k_L = \frac{1.216007.Z_1^{7/6}Z_2}{(Z_1^3+Z_2^3)^{2/3}.M_1^{1/2}} \quad (1.45)$$

Macroscopiquement la perte d'énergie totale globalise le freinage électronique et nucléaire [31,32] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (1.46)$$

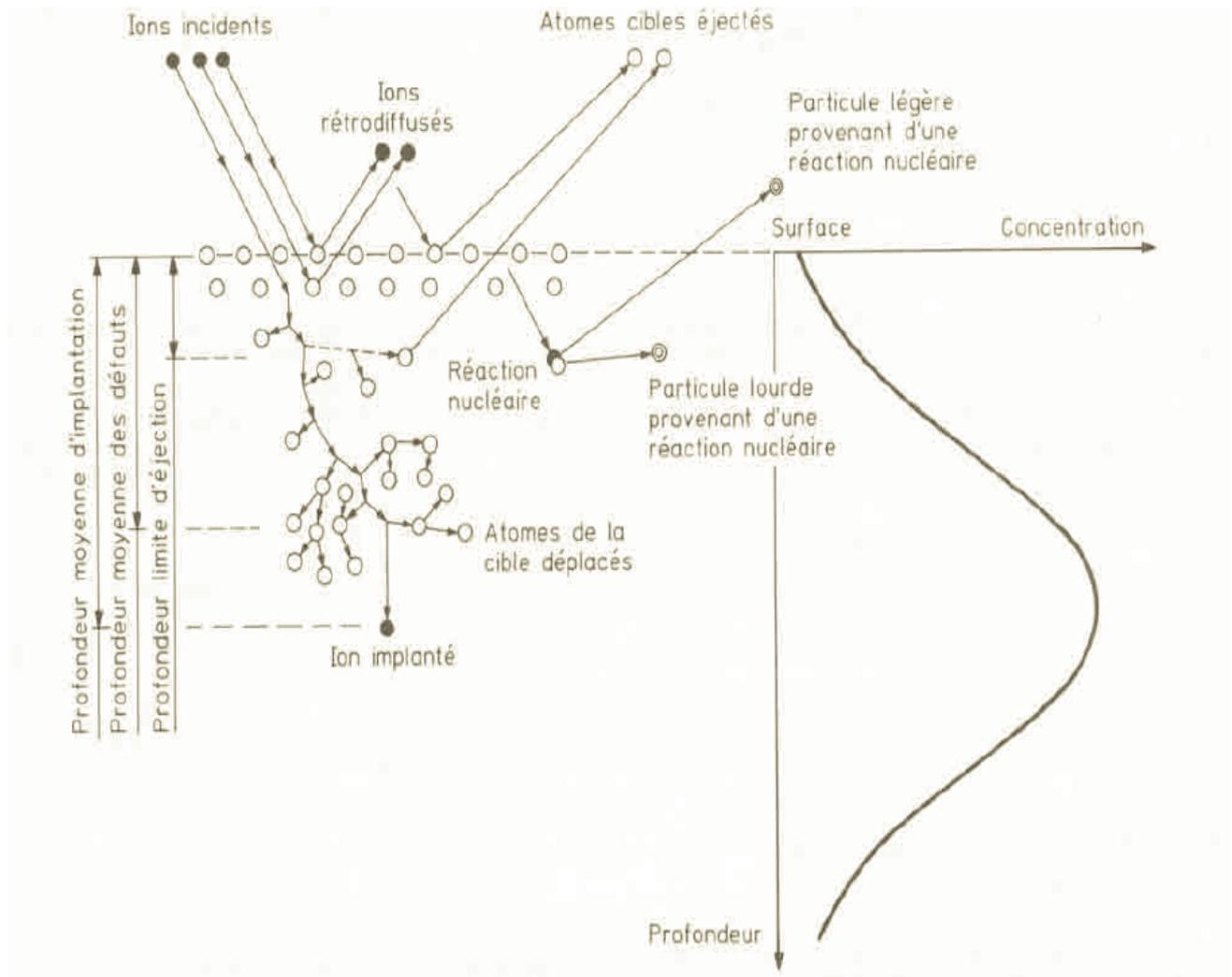


Fig. 1.20- Schéma montrant les différents phénomènes pouvant se produire dans une cible soumise à l'implantation ionique [31]

### 1-6-3 Distribution des ions après implantation

En dépit de la précision avec laquelle la dose peut être contrôlée, l'implantation ionique est un processus aléatoire, car chaque ion suit une trajectoire aléatoire. Les ions incidents vont perdre leur énergie par chocs successifs avec les atomes de la cible. 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. Nous définissons ainsi deux paramètres:

- **Le parcours moyen projeté  $R_p$** : c'est la profondeur où les ions implantés s'arrêtent avec un maximum de concentration avec un écart type  $\Delta R_p$  (la déviation standard) qui caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de  $R$  (figure (1.21)).
- **La déviation latérale (l'écart moyen latéral)  $\Delta R_L$** : est le parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence (perpendiculaire à la direction d'implantation), il caractérise la dispersion latérale des ions. C'est un paramètre très important sur tout dans le cas de l'utilisation des masques pour la conception (architecture) des composants (figure (1.20)).

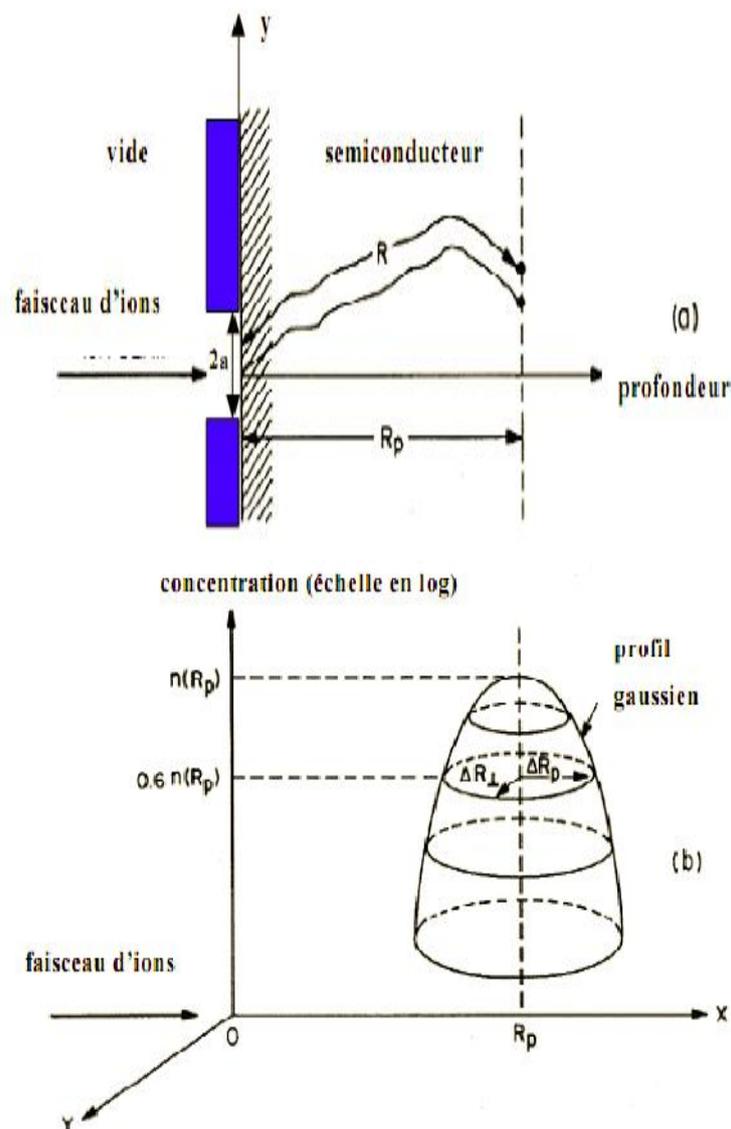


Fig. 1.21- Distribution des ions implantés dans une cible. On note que : (a) le chemin parcouru ( $R$ ) est plus important que le parcours moyen projeté ( $R_p$ ) ; (b) la distribution à deux dimensions des ions stoppés est gaussienne [33].

Les valeurs de  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et  $\Delta R$  dépendent toutes des caractéristiques du couple (ion incident/atome cible). La distance parcourue par un ion le long de sa trajectoire est déterminée à partir de l'énergie perdue, par collisions nucléaire et électronique, comme suit:

$$R = \int_0^R dr = \frac{1}{c} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (1.47)$$

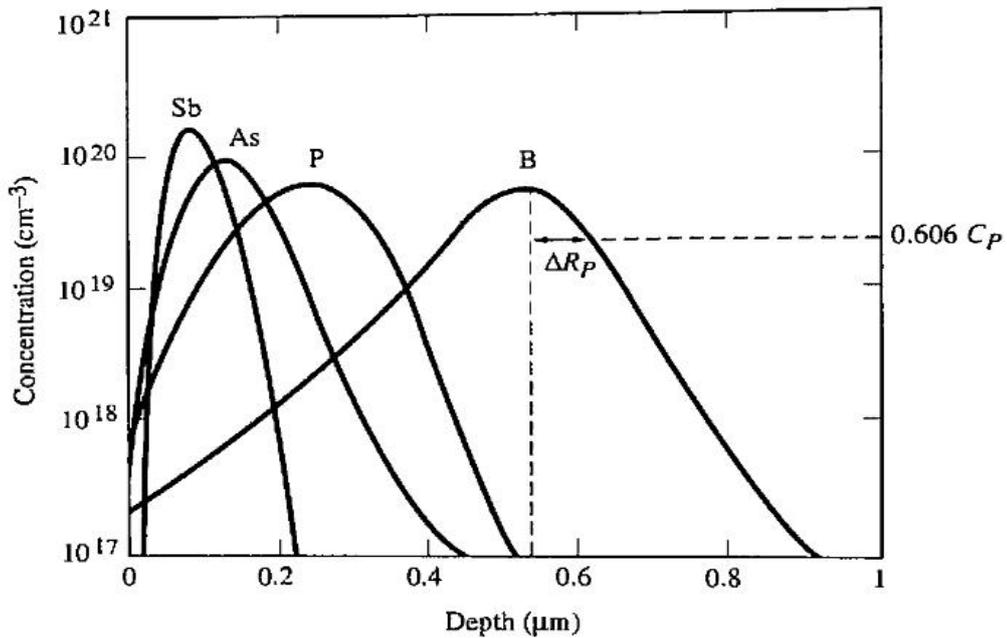


Fig. 1.22- Distribution d'ions dans le silicium implantés à 200 KeV[34].

Le Paramètre  $R_p$  est désigné par le parcours moyen projeté (voir Figure (1.22)). Il correspond à la moyenne de tous les parcours projetés et s'exprime comme suit :

$$R_p = \frac{1}{\Phi} \int x \cdot n(x) \cdot dx \quad (1.48)$$

Où:

$\Phi$ : La dose totale implanté (*ions/cm²*).

$n(x)$ : La distribution en profondeur de tous les ions implantés.

La fonction de distribution  $n(x)$  est caractérisée par les quatre premiers moments physiques qui sont:

- ✓  $R_p$  et  $\Delta R_p$
- ✓ L'obliquité  $\gamma$  (ou skewness) qui détermine l'asymétrie de la distribution ou le positionnement du sommet de la courbe par rapport à  $R_p$ ;
- ✓ Le Kurtosis  $\beta$  qui détermine l'écrasement du pic (ou bien l'extension de la queue de distribution en volume).  $\beta \approx 2.91 + 1.56\gamma^2 + 0.59\gamma^4$

avec  $\gamma$  et  $\beta$  approximativement égaux à 0 et à 3 respectivement (courbe de Gauss).

La fonction de distribution  $n(x)$  est souvent de type gaussien ou de Pearson.

Dans le cas de distribution de Gauss,  $n(x)$  est exprimé par la relation suivante:

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{-(x-R_p)^2}{2(\Delta R_p)^2}\right) \quad (1.49)$$

Où

$$n_0 = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta R_p} = \frac{0.4\Phi}{\Delta R_p} \quad (1.50)$$

$$\Phi = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x) \cdot dx \quad (1.51)$$

#### 1-6-4 Génération des défauts

Chaque ion incident possède une énergie cinétique qui diminue lors des interactions ion-matière qui freinent l'ion implanté jusqu'à son arrêt total.

Si l'énergie transmise  $E$  supérieure à  $E_L$  (énergie seuil prise égale à 15eV pour du silicium monocristallin), les atomes du matériau cible seront déplacés de leurs sites, et à leur tour, pourront par collisions successives produire des délocalisations d'atomes en cascades (Fig.1.23). Ainsi une région perturbée est produite par génération de défauts structuraux de type lacune – interstitiel (paire de Frenkel). Cette couche perturbée peut être considérée comme une région amorphe.

L'estimation des profils d'interstitiels et de lacunes générés au cours de l'implantation est indispensable pour calculer correctement un profil de dopage après un recuit thermique. Le nombre d'interstitiels et de lacunes restant après une implantation ionique est fonction des conditions d'implantation telles que: la masse de l'ion implanté, l'énergie d'implantation, la dose, la température de la cible ou le courant d'implantation.

Selon le degré d'endommagement du cristal, on distinguera deux types d'implantations ioniques.

La première endommage le cristal en occasionnant de nombreux déplacements des atomes de la cible mais en gardant son caractère cristallin

La seconde va endommager le cristal au-delà d'un seuil critique et ainsi créer une zone amorphe partant de la surface et allant jusqu'à une profondeur déterminée par les conditions d'implantation.

L'épaisseur de cette couche amorphe est parfois plus grande que le libre parcours moyen  $R_p$  et dépend de la masse de l'ion implanté et de son énergie. L'introduction de concentrations élevées de bore par implantation ionique s'accompagne de la formation de grandes concentrations de défauts ponctuels (interstitiels et lacunaires), qui au cours d'un recuit post-implantation nécessaire pour l'activation du bore, diffusent et se recombinent en formant des défauts étendus de plusieurs types (clusters, défauts  $\{311\}$ , boucles de dislocations) [3].

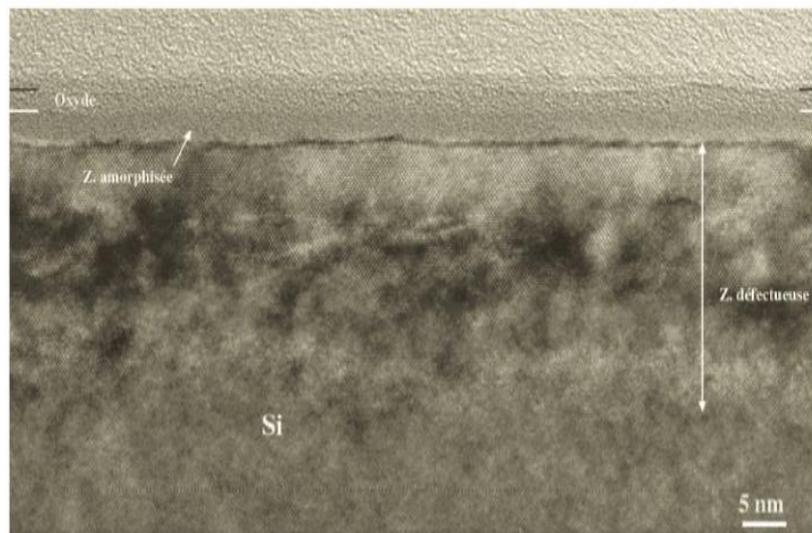


Fig. 1.23- On observe sur cette photographie TEM que l'implantation ionique de bore implanté à 3keV avec une dose de  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  a amorphisé le substrat sur une profondeur de 3nm. Une large zone défectueuse d'une épaisseur de 25 nm apparaît sous la zone amorphe, l'a où la concentration de bore est la plus forte (Image TEM) [3].

### Angles d'implantation et effet de canalisation

On peut définir les deux angles d'implantation nécessaires pour paramétrer le faisceau ionique par rapport au réseau cristallin. Ces angles sont le tilt  $T$  et la rotation  $R$ . Le tilt  $T$  est l'angle entre le faisceau d'ions et la normale à la surface du matériau cible. La rotation  $R$  est l'angle entre le faisceau incident et l'axe du méplat. Ces angles sont généralement choisis pour

minimiser l'effet de canalisation, ce qui est le cas avec un tilt de  $7^\circ$  et une rotation de  $30^\circ$  pour une plaquette de silicium orienté (100) (figures (1.24 et 1.25)) [35].

La distribution des ions canalisés dépend de l'orientation du faisceau d'ions par rapport à la structure cristalline de la matière cible mais également de la température de la cible (vibrations thermiques du réseau), de l'état de surface de la (amorphaisation). L'ion incident pénétrant sous un petit angle par rapport aux rangées atomiques du réseau cristallin, sera guidé par ces atomes par des collisions successives sous faibles angles.

Dans le cas contraire on assiste à une diffusion sous un grand angle. La perte d'énergie des ions canalisés, essentiellement électronique, est plus faible, comparée à celle des particules non canalisées, ce qui est dû à une moindre densité électronique dans le canal.

En fait, le phénomène de canalisation est souvent limité au maximum. L'implantation est alors effectuée avec des angles permettant d'éviter la présence d'axes ou de plans à forte densité en surface. Le matériau est désorienté par rapport au faisceau, de telle manière que le faisceau voit le cristal comme s'il était amorphe [32,36]

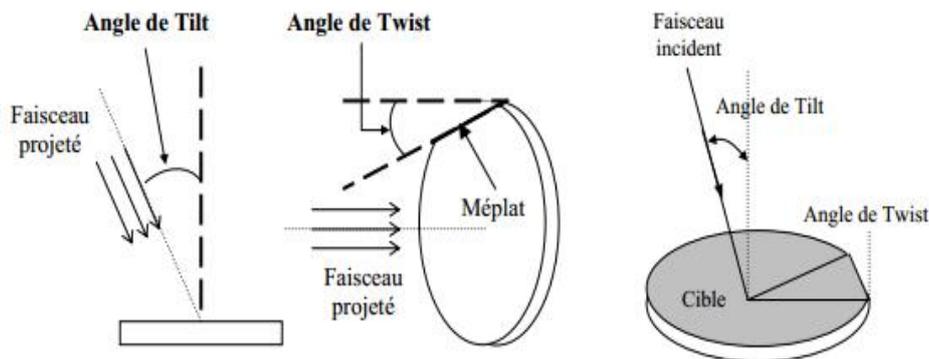


Fig. 1.24- Illustration des deux angles de l'implantation: angle de tilt et twist [35].

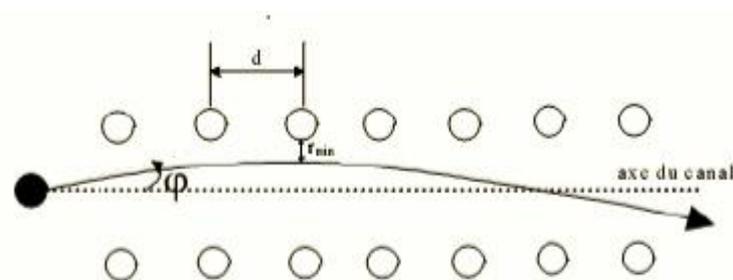


Fig. 1.25- La trajectoire de l'ion incident dans un canal [35].

### 1-6-5 Recuit thermique

Le recuit thermique est une étape primordiale dans le procédé de dopage par implantation ionique. Les deux buts principaux sont :

- ✚ la recristallisation du matériau c'est-à-dire la recombinaison des défauts (on dit que l'on guérit les défauts).
- ✚ L'activation électrique des dopants (localisation des ions en sites substitutionnels).

Différents procédés de recuits thermiques peuvent être effectués. On peut citer [37]:

#### i) *Le recuit conventionnel*

Ce type de recuit thermique est effectué dans un four classique où le temps de maintien de l'échantillon est au minimum de quelques minutes. Les caractéristiques du recuit dépendent du type du dopant et des paramètres de l'implantation. Si le matériau est amorphe, la décroissance se fait par épitaxie en phase solide (EPS), où l'interface amorphe/cristal avance vers la surface, à une vitesse qui dépend de la température, du dopage, et de l'orientation de cristal. A 600°C, la vitesse vaut environ 100 Å /min dans Si.

Si les conditions de l'implantation ne sont pas suffisantes pour créer une zone amorphe, la recristallisation s'opère par la génération et la diffusion des défauts ponctuels. En général, une température de 900°C permet une bonne réorganisation du silicium. Le principal inconvénient lié à l'augmentation du temps de recuit est que le profil de l'implantation s'élargit à cause de la diffusion des dopants dans le volume [17].

#### ii) *Le recuit rapide standard (RTP)*

Les équipements RTP (Rapid Thermal Processing) permettent à la fois d'effectuer des recuits dits "Soak" avec plateau en température (de l'ordre de quelques dizaines de secondes) utilisés pour les procédés de croissance (oxydes et oxynitrides) et aussi les recuits d'activation "Spike" (jusqu'à 250°C/s en montée pour des températures de l'ordre de 1000-1100°C) figure (1.26). Un recuit présente trois phases

- La première phase: la phase de purge pendant laquelle on remplace l'air de la chambre par une atmosphère neutre (ex: Argon). Cette phase limite les risques d'oxydation pendant le recuit.

- La deuxième phase: la phase de recuit. Elle comprend la montée en température et le plateau, cette phase est caractérisée par la vitesse de chauffe, la température du plateau et la durée de recuit.
- La troisième phase: la phase de refroidissement s'effectue toujours sous Argon. La figure (1.27) montre l'allure d'un cycle RTA [16].

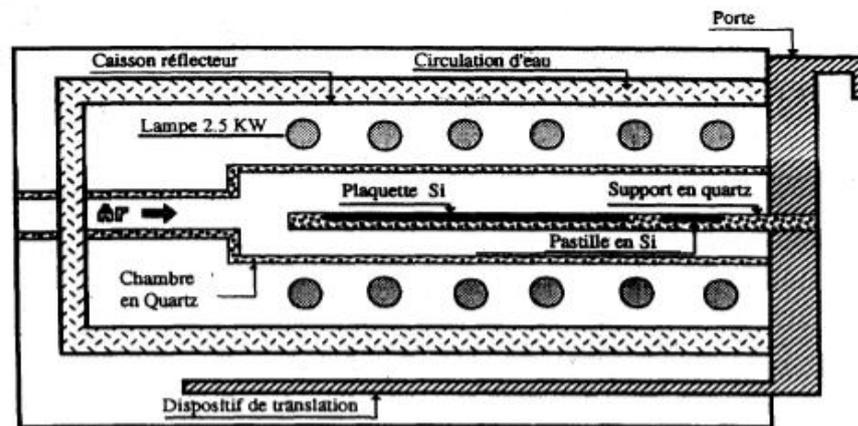


Fig. 1.26- Schéma du four de recuit rapide [17].

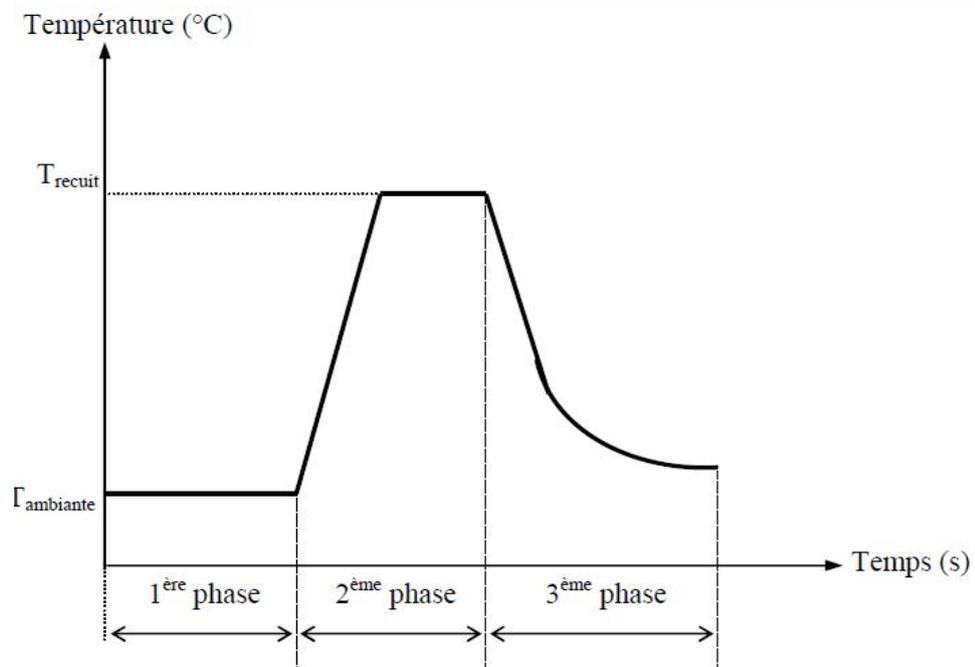


Fig. 1.27- l'allure d'un cycle RTA [17]

Notons que cette allure de cycle de recuit RTA est la même pour un recuit conventionnel ou classique.

## 1.7 CONCLUSION

La technologie microélectronique met en œuvre un grand nombre d'étapes élémentaires nécessaires à la fabrication d'un circuit électronique. Ces étapes permettent de faire évoluer la matière depuis son état naturel et désordonné (le sable) vers une structure de grande complexité et la mieux ordonnée possible.

Nous avons rappelé tout d'abord quelques généralités sur le silicium, les équations de la diffusion, données par les deux lois de Fick. Nous nous pencherons plus sur les mécanismes élémentaires et la théorie atomique du coefficient de diffusion et la création des défauts ponctuels, comme les lacunes et les auto-interstitiels de silicium. Nous avons présenté dans ce chapitre les techniques d'extraction de profils en profondeur pour les deux techniques de dopages (diffusion et implantation ionique).

## **CHAPITRE 2**

# **Simulation de l'implantation ionique des dopants par SILVACO**

### 2-1 INTRODUCTION

L'utilisation des technologies de la microélectronique pour la réalisation des jonctions ou de dopage de semi-conducteur ou des TMOS donne une possibilité d'intégration et une production à faible coût. Les simulateurs TCAD permettent la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique, dans le but d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Les simulateurs existants sur le marché (ISE, SYNOPSIS, SILVACO,...) ont le même principe de fonctionnement.

Dans un premier temps on va donner une fiche technique du logiciel de simulation TCAD-SILVACO, son principe de fonctionnement, et ces modules de simulation. Dans notre travail, nous allons utiliser le module ATHENA pour la simulation des profils de dopage en utilisant le model Pearson IV.

Ensuite nous étudions l'influence de certains paramètres, à savoir la concentration des espèces, la température, le temps, la dose et l'énergie sur les profils de l'implantation.

### 2-2 Présentation du logiciel SILVACO

L'environnement SILVACO est largement exploité, tant dans l'industrie que dans les laboratoires de recherche.

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est une société Américaine, « Silvaco International » ayant son siège à Santa Clara en Californie. Elle est un des principaux fournisseurs de chaînes professionnelles de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design) [38]. Ces outils sont employés par les compagnies de microélectronique dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception de dispositifs. Le développement de SILVACO, les ventes et les équipements de soutien sont stratégiquement localisés dans le monde entier pour soutenir la clientèle. Une majeure partie du modèle des affaires de SILVACO se fonde sur la capacité de la compagnie à fournir des ingénieurs technico-commerciaux bien formés et expérimentés pour le support à la clientèle sur place dans toutes les régions principales de fabrication de semi-conducteurs [39].

Historiquement la compagnie a été fondée en 1984 par Dr. Ivan Pesic pour répondre aux besoins des designers de circuits intégrés (IC, integrated circuits) analogiques pour des modèles SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis) de plus en plus précises et linéaires.

Le produit initial a été le système d'extraction des paramètres UTMOST (Universal Transistor Modeling Software) qui est devenu un standard industriel pour l'extraction des paramètres, la caractérisation des dispositifs et la modélisation. L'entrée de SILVACO dans la technologie TCAD a eu lieu en 1989, et elle a été basée sur une recherche du Département des Dispositifs Physiques de l'Université de Stanford, ainsi apparaissent dans SILVACO « Athena » comme simulateur des processus et « Atlas » comme simulateur des dispositifs (2D et 3D). A l'aide d'un projet de recherche de l'Université de California, Berkeley, en 1992 SILVACO a conçu son propre logiciel de simulation comportementale SPICE. Ainsi « Smart Spice » devient partie de la chaîne TCAD de SILVACO, il permet des simulations des circuits électroniques avec les modèles physiques des composants créés à l'aide d'Atlas tout en utilisant une logique SPICE. « Smart Spice » écrit en C++ permet facilement l'introduction des modèles nouveaux de simulation et permet une amélioration des algorithmes numériques pour une meilleure convergence. En 1997 SILVACO introduit IC CAD (Integrated Circuit Computer Aided Design) analogue qui est un outil pour capture schématique (schematic capture), disposition sur circuits imprimés (layout) et vérification physique. L'ensemble de ces outils avec le simulateur des circuits « Smart Spice » fournit une structure complète, à faible coût et d'une très grande productivité pour la conception des circuits intégrés analogiques. En 2004 enfin, SILVACO propose un outil d'extraction de signaux parasites qui permet la conversion directe des données des masques et des informations intéressantes aux processus des schémas électriques.

Virtual Wafer Fab (VWF) de Silvaco est un ensemble d'outils de simulation et d'outils interactifs permettant la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semi-conducteurs. Les modules de VWF qui seront employés sont [40]:

### **a) Les outils de simulation (VWF core tools)**

Ces outils permettent de simuler les processus de fabrication ou les comportements électriques des dispositifs. Les outils de simulation sont :

- SSUPREM3 : simulateur de procédé 1D avec prolongements simples de simulations des dispositifs

- ATHENA : simulateur 2D de procédés technologiques qui permet de simuler les différentes étapes effectuées en Salles Blanches et ainsi d'obtenir la structure du dispositif (couches constitutives, dimensions, géométrie) avec les profils de dopage
- ATLAS : simulateur 2D ou 3D de dispositifs semi-conducteurs qui permet d'obtenir leurs caractéristiques électriques (statiques ou dynamiques)

### b) Les outils interactifs (*VWF interactive tools*)

Ces outils sont conçus pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une interface utilisateur qui est graphique (*Graphical User Interface, GUI*), le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficace. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnement « *VWF automation tools* ». Les outils interactifs sont :

- TonyPlot: outil de visualisation et d'analyse graphique 1D et 2D des résultats de simulations.
- Manager: outil de gestion des fichiers utilisés et créés par VWF.
- MaskViews: outil de dessin des masques (*layouts*).
- DeckBuild: le DECKBUILD est l'environnement où est défini le programme de simulation à travers des commandes spécifiques. De multiples simulateurs considérés comme des entrées peuvent être utilisés avec le DECKBUILD: ATHENA, ATLAS, SSUPREM3, sachant que chaque outil de simulation possède son propre langage de programmation

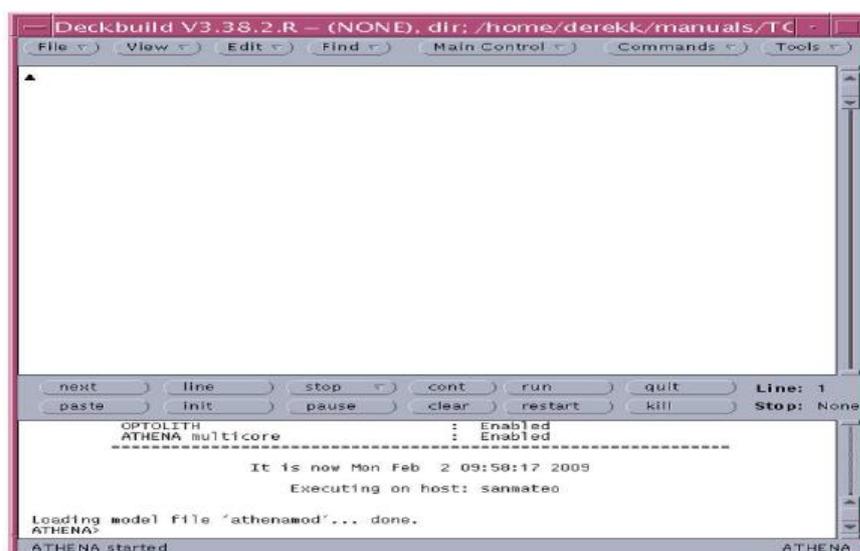


Fig. 2.1- l'environnement DECKBUILD [39].

- DevEdit: outil d'édition de structure qui permet de créer des nouvelles structures ou même de modifier des structures existantes. Cet outil permet de raffiner les maillages existants ou de définir de nouveaux maillages.
- Optimiseur: outil d'optimisation automatique
- SPDB (Semiconductor Process Data Base) est un produit séparé qui peut être utilisé avec DeckBuild. Il a été conçu pour stocker un grand nombre de profils de dopage mesurés expérimentalement avec les données décrivant les conditions expérimentales.

**c) Les outils d'automatisation (VWF automation tools)**

Ces outils permettent à l'utilisateur d'exécuter sur une grande échelle des études expérimentales pour créer des résultats pour une analyse statistique ultérieure. Ces outils automatiques utilisent la technologie des bases de données et les méthodes des logiciels de transmissions entre processus [40,41]

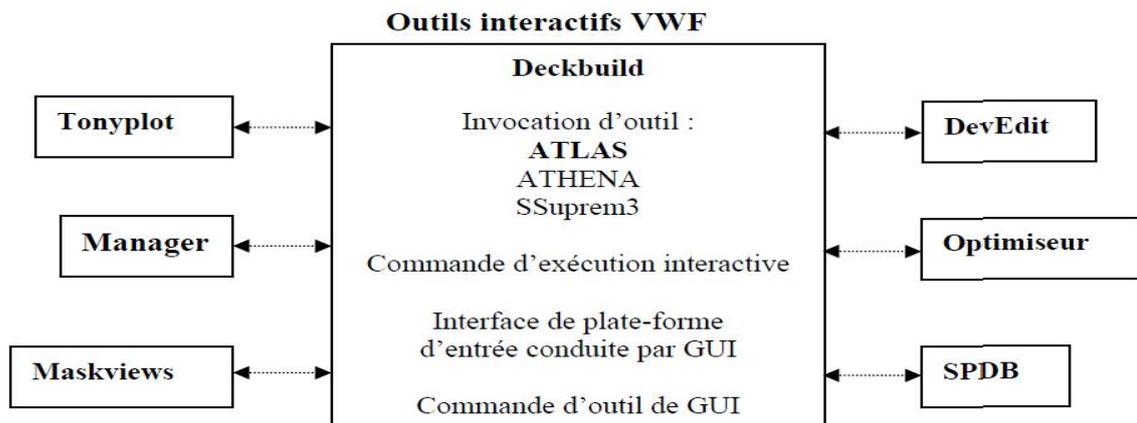


Fig. 2.2- Organigramme de la structure VWF [40].

**2-3 Représentation des profils d'implantation ionique par modèle analytique Pearson IV**

La méthode la plus simple de décrire des profils d'implantation ionique se fait au moyen de fonctions analytiques. Les paramètres de ces fonctions sont généralement calculés à partir des moments spatiaux des données expérimentales, théoriques ou simulées. Les fonctions de distribution les plus couramment utilisés sont la distribution gaussienne et la famille Pearson. Hofker (1975) a suggéré que cela pourrait être mieux réalisé à l'aide de la distribution de Pearson

IV qui est couramment utilisé à ce jour[42].En général, la distribution gaussienne est inadéquate car les profils réels sont asymétriques dans la plupart des cas.

La méthode la plus simple et la plus largement approuvée pour le calcul des profils d'implantation ionique asymétriques est la distribution de Pearson [43].

- **la distribution de Pearson IV**

La recherche d'une équation différentielle dont les solutions particulières sont des fonctions de densité des distributions se base sur l'interprétation mathématique des formes de courbes correspondant à ces dernières (Elderton, 1906). Karl Pearson a montré que de nombreuses fonctions de densité de probabilité est satisfaire une équation différentielle sous la forme [42]:

$$\frac{df(y)}{dy} = \frac{(y-a)f(y)}{(b_0+b_1y+b_2y^2)} \quad (2.1)$$

Dans laquelle f (y) est une densité de distribution et  $y = x - R_p$  ou  $R_p$  est désigné par le parcours moyen projeté(moment de première ordre)

$$R_p = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx(\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx)^{-1} \quad (2.2)$$

Quatre paramètres à  $b_0$ ,  $b_1$  et  $b_2$  sont liés à des moments de la fonction de distribution à travers les relations suivant [33]:

$$a = b_1 = -\gamma\sigma_p(\beta + 3)C \quad (2.3)$$

$$b_0 = -\sigma_p^2(4\beta - 3\gamma^2)C \quad (2.4)$$

$$b_2 = -(2\beta - 3\gamma^2 - 6)C \quad (2.5)$$

Ou  $C = [2(5\beta - 6\gamma^2 - 9)]^{-1}$

On supposé que la moyenne de f (y) est à l'origine,  $y = 0$ , les moments d'ordre: deux, trois et quatre sont trouvés en utilisant les équations [31]:

$$\sigma_p = [\int_{-\infty}^{\infty}(x - R_p)^2 f(x)dx(\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx)^{-1}]^{1/2} \quad (2.6)$$

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty}(x - R_p)^3 f(x)dx(\sigma_p^3 \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx)^{-1} \quad (2.7)$$

Et

$$\beta = \int_{-\infty}^{\infty}(x - R_p)^4 f(x)dx(\sigma_p^4 \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx)^{-1} \quad (2.8)$$

La solution de l'équation (2.1) dépend de la nature des racines de l'équation  $b_0 + b_1y + b_2y^2$ .Les types Pearson peuvent être classés comme suit [42,44]:

Gaussian:

$$\gamma = 0, \beta = 3.$$

Type I

$$\gamma \neq 0, (\gamma^2 + 1) \leq \beta < \left(3 + \frac{3}{2}\gamma^2\right), \lambda \neq 0, C \neq \infty.$$

Type II

$$\gamma \neq 0, 1 \leq \beta < 3.$$

Type III

$$\gamma \neq 0, \beta = \left(3 + \frac{3}{2}\gamma^2\right).$$

Type IV

$$0 < \gamma < 32, \beta > [39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{\frac{3}{2}}] / (32 - \gamma^2).$$

Type V

$$0 < \gamma < 32, \beta = [39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{\frac{3}{2}}] / (32 - \gamma^2).$$

Type VI

$$\gamma \neq 0, \left(3 + \frac{3}{2}\gamma^2\right) < \beta < [39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{\frac{3}{2}}] / (32 - \gamma^2), \lambda \neq 0.$$

Type VII

$$\gamma = 0, \beta > 3.$$

Type VIII

$$\gamma \neq 0, \beta < \left(\frac{6}{5}\gamma^2 + \frac{9}{5}\right), \lambda = 0 \quad \left(\beta \approx \left(\frac{10}{9}\gamma^2 + \frac{9}{5}\right)\right).$$

Type IX

$$\gamma \neq 0, \left(\frac{6}{5}\gamma^2 + \frac{9}{5}\right) < \beta < \left(3 + \frac{3}{2}\gamma^2\right), \lambda = 0$$

Type X

$$\gamma^2 = 4, \beta = 9$$

Type XI

$$\gamma \neq 0, \beta > \left(3 + \frac{3}{2}\gamma^2\right), \lambda = 0$$

Type XII

$$\beta = \frac{6}{5}\gamma^2 + \frac{9}{5} \quad (C = \infty)$$

La figure (2.3) montre, sur le plan  $\beta - \gamma^2$ , les régions sur lesquelles les différents types de Pearson. De ces fonctions, Pearson IV est le plus couramment utilisé, est donné par [42]:

$$f(x) = K \left[ 1 + \left( \frac{(x-R_p)}{A} - \frac{n}{r} \right)^2 \right]^{-m} \exp \left[ -n \arctan \left( \frac{(x-R_p)}{A} - \frac{n}{r} \right) \right] \quad (2.9)$$

K est une constante de normalisation.

Avec  $r=2(m-1)$  et  $r=-(2+1/b_2)$ ,  $n=-rb_1x(4b_0b_2 - b_1^2)^{-1/2}$ ,  $m = -1/2b_2$  et  $A = mrb_1/n$ .

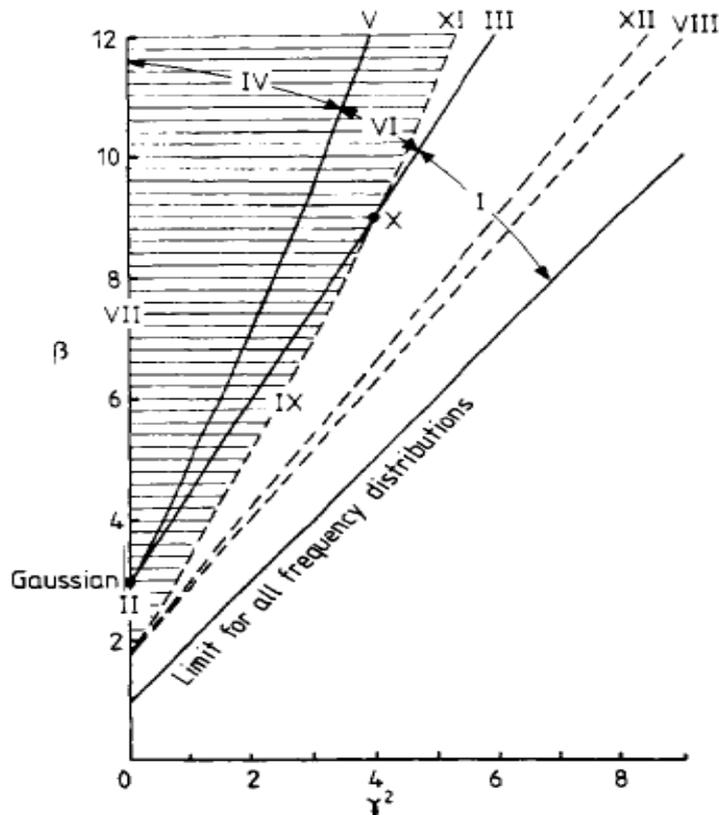


Fig. 2.3- Domaines de validité des types de Pearson sur le plan  $\beta - \gamma^2$ [42]

## 2-4 Simulation avec SILVACO le profil de distribution des dopants

Nous avons pris comme exemples des profils de diffusion des dopants (Phosphore Arsenic et Bore), dans une couche en polysilicium où l'on manipule les profils d'impuretés sous simulateur Silvaco (Athena) basé sur des modèles de type Pearson IV.

### 2-4-1 exemple d'implantation de Bore

Le Bore est implanté à une dose de  $10^{14}$  at.cm<sup>-2</sup>, avec une énergie de 35 KeV, nous avons étudié les profils de diffusion avant et après recuit dans une large gamme de température de 800 à 1000°C.

- **Guide méthodique**

- i. **Definition du substrate**

Avant réaliser les dispositifs microélectronique, il faut définir le substrat. Dans cet exemple c'est un substrat de silicium de type n (dope phosphore) $10^{14}$  at.cm<sup>-3</sup>, l'orientation cristallographique <100>. Cette orientation assure une meilleure qualité d'oxyde de grille.

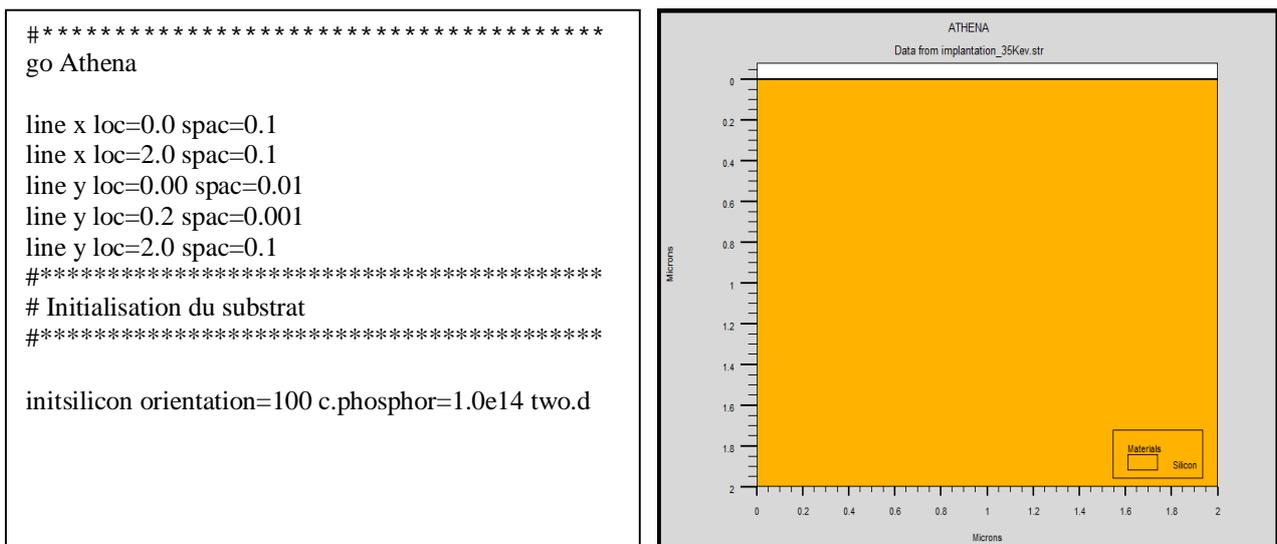


Fig. 2.4- *initialisation du substrat*

- ii. **Le maillage**

Pour simuler le fonctionnement d'une structure donnée, il est indispensable d'appliquer un maillage adapté à celle-ci. Un maillage le plus fin possible appliquée sur toute la structure assure une bonne précision des calculs mais demande un temps de calcul plus important pour simuler le fonctionnement de cette structure. Il est donc nécessaire de trouver un compromis entre temps de calcul et précision du calcul. Pour arriver à ce compromis, nous avons appliqué un maillage fin uniquement dans les zones où les variations des grandeurs physiques sont

importantes et un maillage grossier dans les zones où ces grandeurs varient peu. La figure (2.5) représente le maillage utilisé pour simuler les profils d'implantation des ions [41].

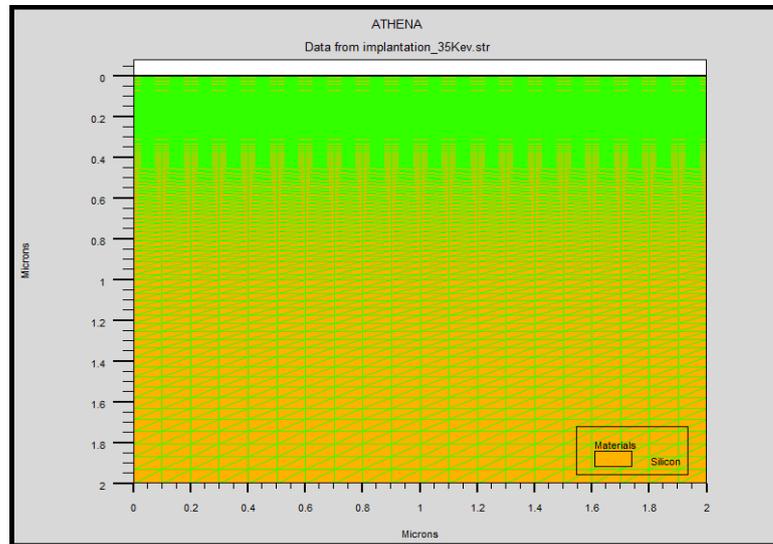


Fig. 2.5- Le maillage de la structure

iii. Définition la distribution et les résultats

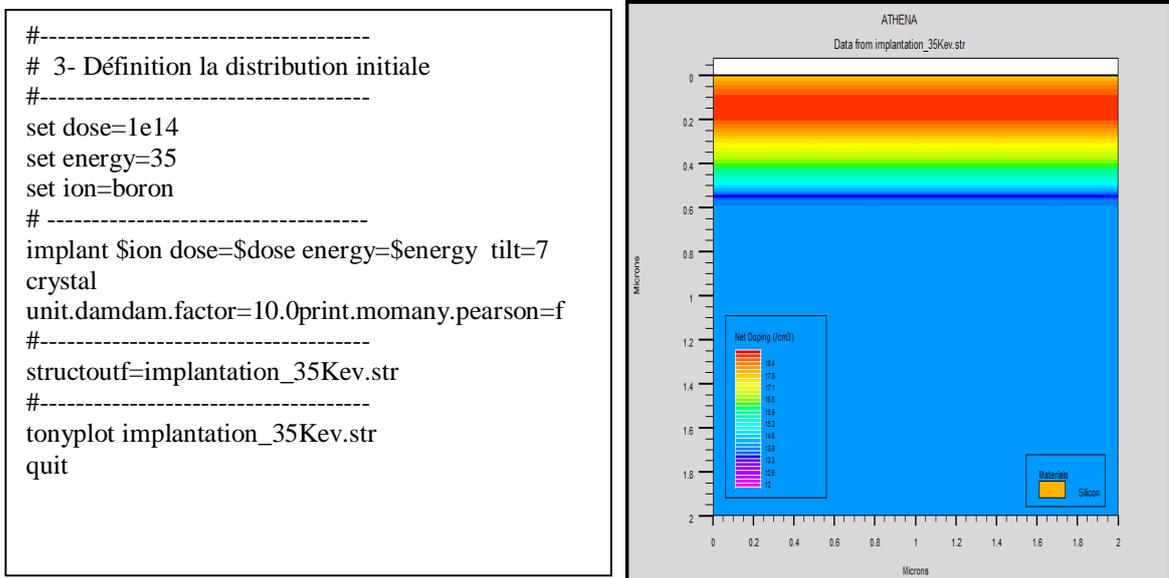


Fig. 2.6-définition la distribution 2D

Le résultat de la simulation et représente à la figure (2.7),

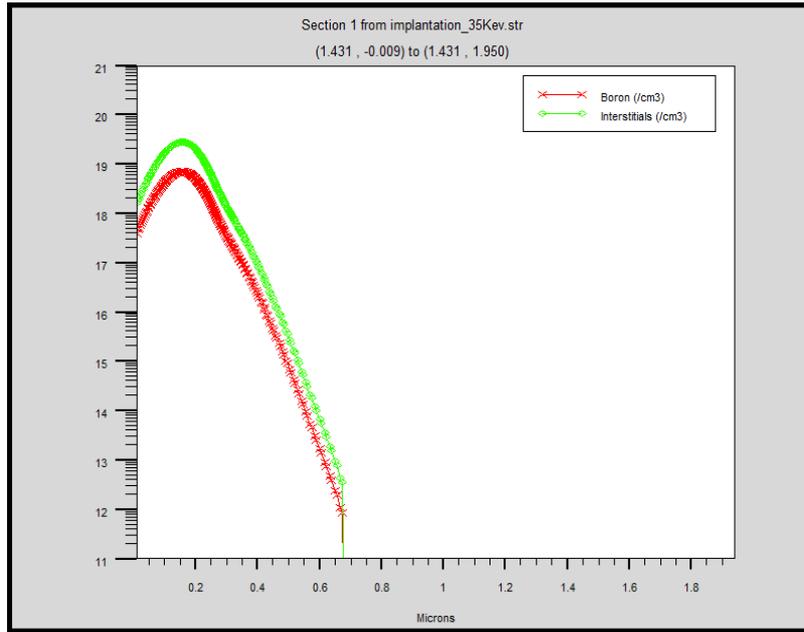


Fig. 2.7- profil de distribution du bore  $E=35 \text{ KeV}$  et une dose=  $10^{14} \text{ at.cm}^{-2}$

Les résultats de simulation obtenus paramètre sont été résumés dans du tableau (2.1),

Les paramètres	valeur
le parcours projeté $R_p$	$0.138(\mu m)$
L'écart type $\Delta R_p$	$0.055(\mu m)$
Skew	$3.450$
Kurt	$3.295$
Concentration maximale	$7.035 \times 10^{18} \text{ atoms/cm}^3$
Profondeur maximale $X_j$	$0.544(\mu m)$

Tableau. 2.1- résultats de simulations avant recuit.

#### iv Le profil de dopage après le processus de recuit

Après une implantation ionique, le substrat est généralement inutilisable. a cause la destruction de la qualité du réseau, les défauts créés modifiant considérablement les propriétés électriques de la région implantée.

Un recuit du substrat sera donc indispensable pour faire disparaître les défauts induits par l'implantation (ramener la concentration de défauts à une concentration aussi faible que possible) et pour placer les atomes d'impureté sur des sites où elles sont électriquement actives [17].

Les atomes de Bore (B) se diffusent à travers le réseau de Si pour former le profil de la diffusion finale. Les températures recuits (LTA) de 800-1000 ° C.

```
goathena
line x loc=0.0 spac=0.1
line x loc=2.0 spac=0.1
line y loc=0.00 spac=0.01
line y loc=0.2 spac=0.001
line y loc=2.0 spac=0.1
init silicon orientation=100 c.phosphor=1.0e14 two.d
# implant
#initialize the mesh
set dose=1e14
set energy=35
set ion=boron
set mat=si
# *****
implant $ion dose=$dose energy=$energy tilt=7 crystal
unit.damdam.factor=4.0 any.pearson=f print.mom
structoutfile=implantation_35Kev.str
# *****
# un recuit présente trois phases:
# *****
# 1 phase augmentation de température pendant 30min
diff time=30 temp=800 t.final=1000 nitro press=1.0
# *****
# 2 la phase de recuit de 90min
diff time=90 temp=1000 nitro press=1.0
# *****
# 3 phase de refroidissement pendant 30min
diff time=30 temp=1000 t.final=800 nitro press=1.0
# *****
structoutfile= après_recuit.str
extract name="Peak" max.conc impurity="boron" material="silicon" x.val=0.0
tonyplot -overlay-st implantation_35Kev.str après_recuit.str
quit
```

La figure (2.8) ci-dessous montre le tracé du profil de la répartition du bore juste après son implantation. Nous pouvons constater que la profondeur maximale de pénétration du bore après recuit thermique (LTA) est de l'ordre de 0,85µm

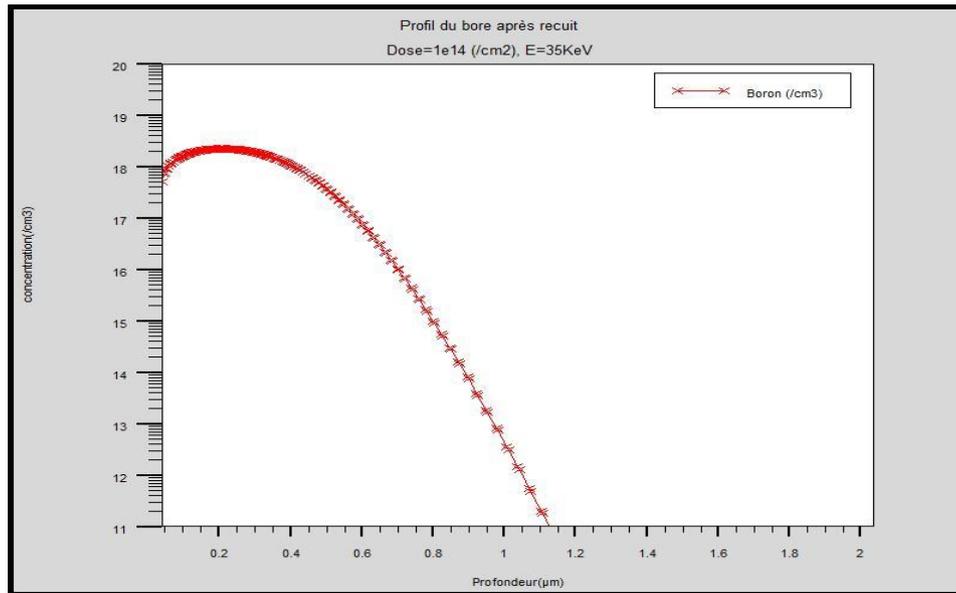


Fig. 2.8- profil de dopage après le processus de recuit. Dose= $10^{14}$  atom/cm<sup>2</sup>, E=35KeV

Paramètre	valeur
Concentration maximale (atm.cm <sup>-3</sup> )	2.22.10 <sup>18</sup>
Profondeur maximale $X_j$ (µm)	0.853

Tableau. 2.2- Résultats de simulations après recuit.

## 2-5 Etude de l'influence des paramètres technologique sur la distribution des atomes implantés

Le profil de dopage dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces paramètres liés au couche utilisé et les procédés technologiques (Energie d'implantation, masse de l'ion, Température et le temps de recuits....) interdépendants ce qui rend indispensable l'étude de l'influence de tous ces paramètres sur la prédiction du comportement des profils de l'implantation. Pour étudier l'influence d'un paramètre, nous allons le faire varier sur un intervalle donné tout en fixant tous les autres paramètres.

### 2-5-a Cas de l'ion phosphore (P)

Etude, après recuit, de l'influence des différents paramètres technologique sur les profils d'implantation du phosphore ( $10^{14}$  atom/cm<sup>3</sup>) implante dans une couche polysilicium d'orientation <111> et d'épaisseur 2µm.

### 2-5-a-1 Influence de la température

La figure (2.9) présente les profils d'implantation du phosphore implanté avec une énergie de 25KeV, dans une large gamme de températures allant de 700°C à 850°C pour la durée de recuit égale à 5mn

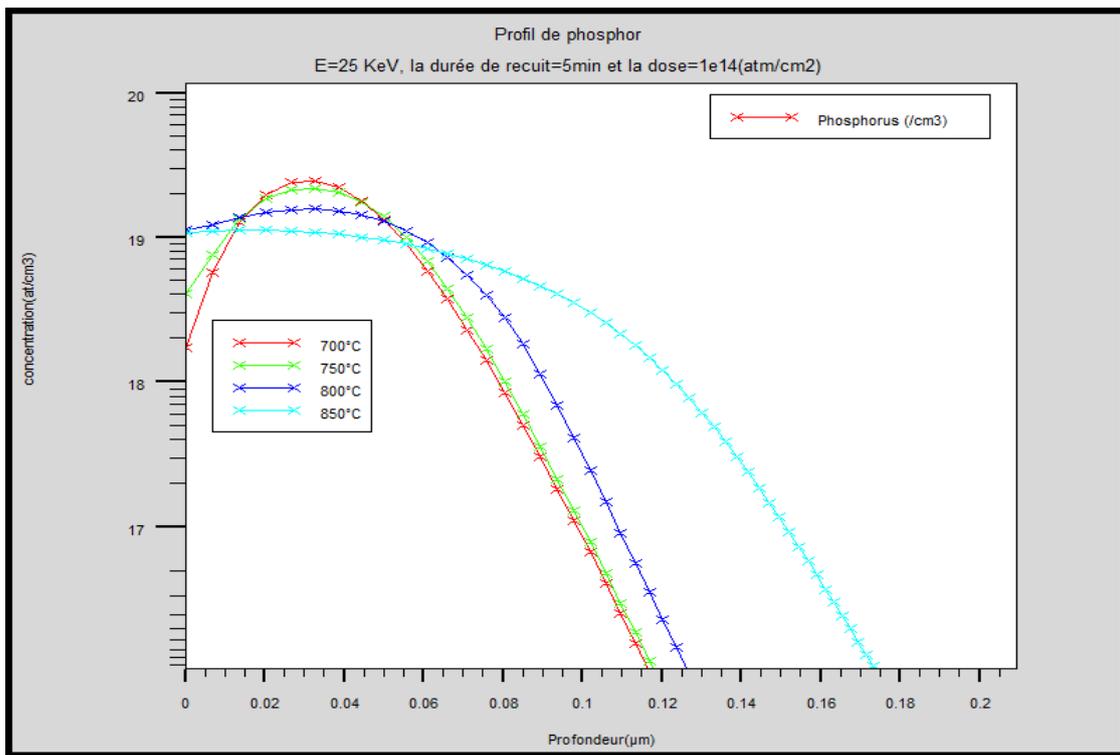


Fig. 2.9-Profils de diffusion de Phosphore ( $10^{14} \text{ atom.cm}^{-2}$ , 25KeV) après recuit 5min pour différentes températures.

Les résultats de simulations de la variation du température de recuit ont été présentés dans le tableau (2.3):

Température de recuit (°C)	700	750	800	850
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	2.48x10 <sup>19</sup>	2.19x10 <sup>19</sup>	1.58x10 <sup>19</sup>	1.13x10 <sup>19</sup>
Max. diffusion en profondeurX <sub>j</sub> (µm)	0.11	0.12	0.13	0.17

Tableau. 2.3- Résultats de simulations pour différentes températures (700, 750,800 et 850°C)

On observe :

❶ Une très légère variation au niveau de la profondeur de diffusion pour les températures situées entre 700 et 800°C, cette pénétration de phosphore dans le silicium polycristallin atteint 0,17  $\mu\text{m}$ . à la température de 850°C les profils sont plus profondes.

❷ La diminution de la concentration maximale.

### 2-5-a-2 Influence de la durée de recuit

La figure (2.10) montre l'effet de la durée de recuit sur les profils de phosphore pour la température de 800°C. La profondeur de diffusion du phosphore augmente sensiblement avec la durée de recuit thermique. Par ailleurs, La décroissance des profils de concentration du Phosphore (P) en fonction de la profondeur est clairement mise en évidence et devient plus prononcée lorsque la durée de recuit thermique augmente.

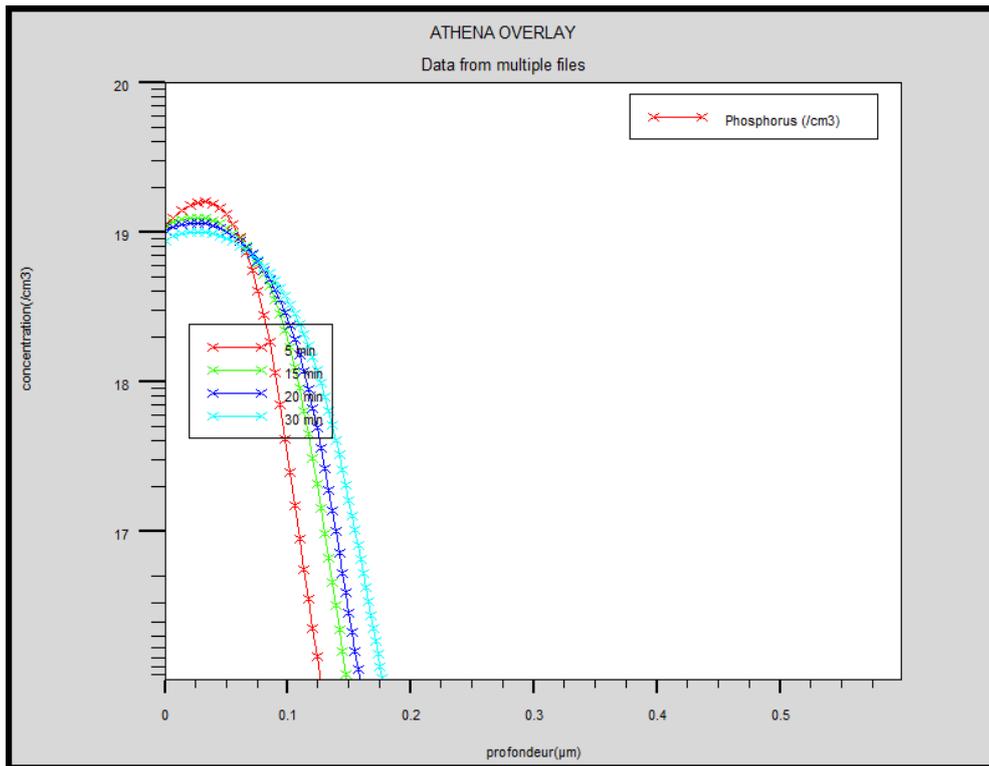


Fig. 2.10 -Profils de diffusion de Phosphore ( $10^{14}$  atom.cm<sup>-2</sup>, 25KeV) après recuits à 800°C pour (5,15,20 et 30min).

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été résumés dans le tableau (2.4):

Temps de recuit (min)	5	15	20	30
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	1.60x10 <sup>19</sup>	1.24x10 <sup>19</sup>	1.14x10 <sup>19</sup>	9.97x10 <sup>18</sup>
diffusion en profondeur X <sub>j</sub> (μm)	0.13	0.14	0.16	0.18

Tableau. 2.4-*Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur.*

**2-5-a-3 Influence de l'énergie**

Le phosphore est implanté à une dose de 10<sup>14</sup>at. cm<sup>-2</sup>, nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de l'énergie de 10 à 55KeV, avec la température de recuit 800°C/5min. Les figures (2.11), (2,12) montrent l'effet de l'énergie sur les profils de phosphore après recuits thermique.

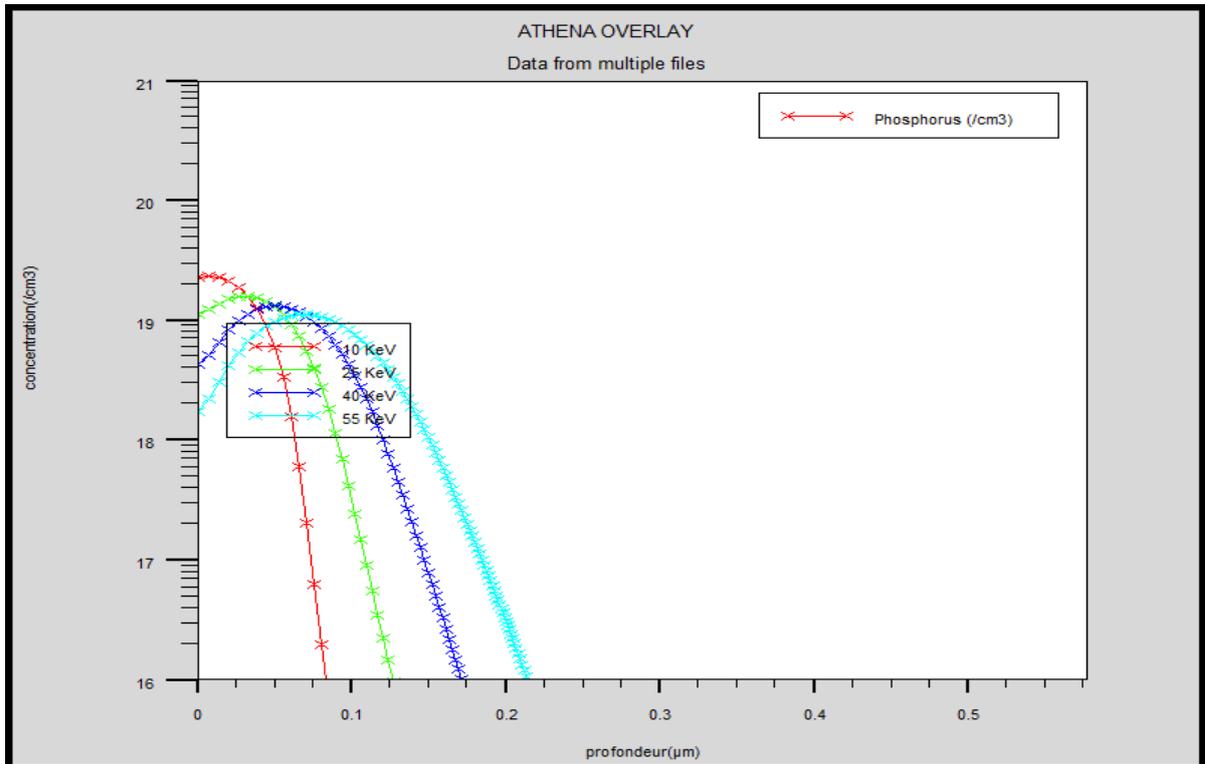


Fig. 2.11- *Profils de diffusion de Phosphore (10<sup>14</sup> atom.cm<sup>-3</sup>) après recuits à 5 min pour différentes énergies (10, 20, 40 et 55KeV).*

Nous observons que La profondeur de diffusion du phosphore (P) augmente remarquablement avec l'énergie d'implantation. Les résultats de simulation de l'effet de l'énergie d'implantation ont été résumés dans le tableau (2.5):

Energie d'implantation (keV)	10	20	40	55
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	2.34x10 <sup>19</sup>	1.58x10 <sup>19</sup>	1.31x10 <sup>19</sup>	1.11x10 <sup>19</sup>
diffusion en profondeur X <sub>j</sub> (μm)	0.08	0.12	0.17	0.21

Tableau. 2.5-Effet de l'énergie d'implantation sur la concentration et la profondeur.

Pour illustrée l'effet de l'énergie en fonction de profondeur et épaisseur nous présent des profils à 3D sur figures (2.12) et (2.13). Les profils en 3 D, se conforment aux profils en 2 D, on note une augmentation en profondeur.

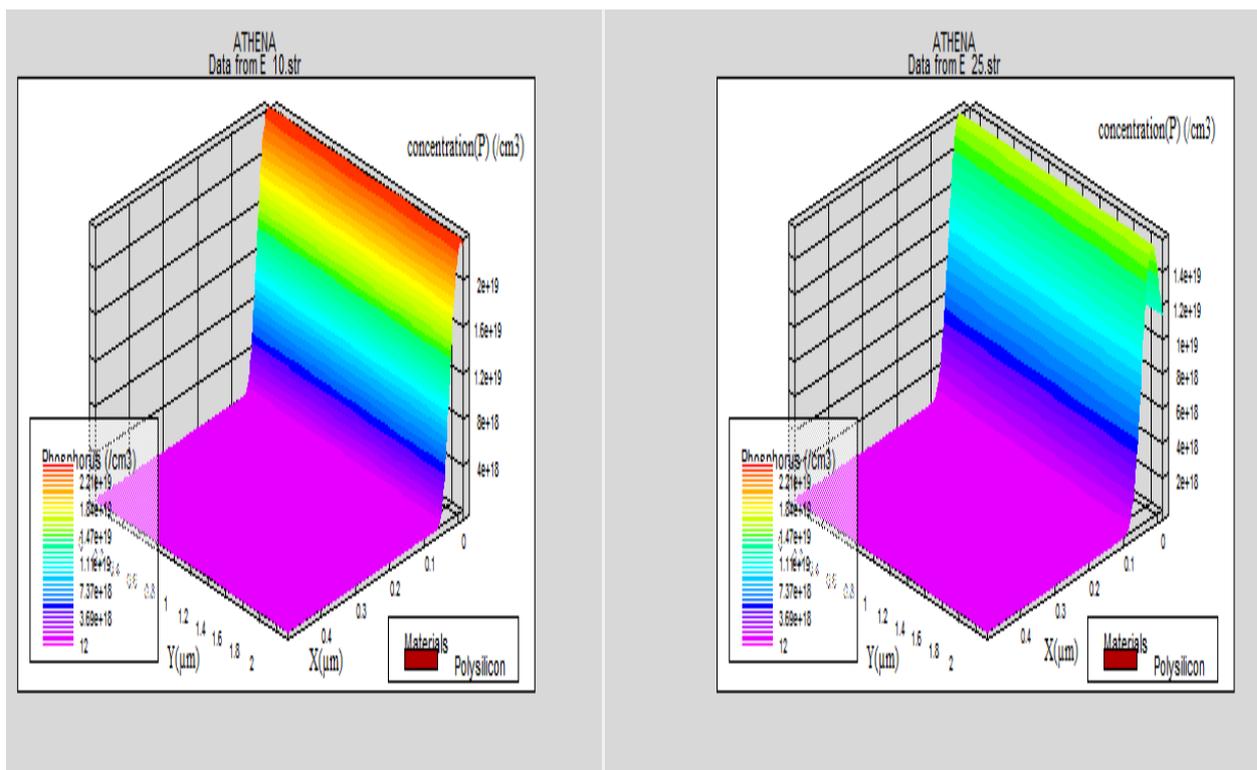


Fig. 2.12- Profils de diffusion de Phosphore en fonction de profondeur et l'épaisseur pour: T=800°C, t= 5 min et différentes énergie: A) E=10KeV, B) E= 25KeV

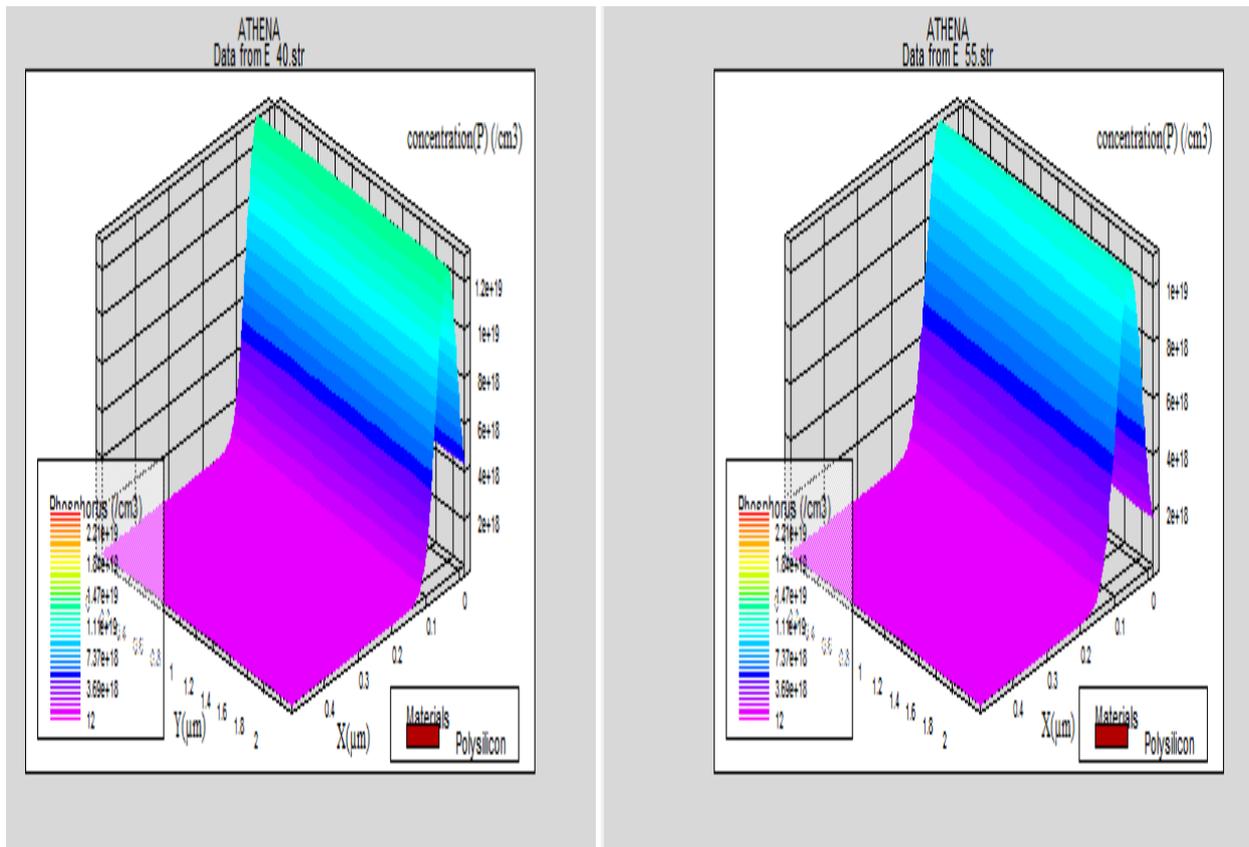


Fig. 2.13 -Profils de diffusion de Phosphore en fonction de profondeur et l'épaisseur pour:  $T=800^{\circ}\text{C}$ ,  $t=5$  min et différentes énergie :  
C)  $E=40\text{KeV}$ , D)  $E=55\text{KeV}$ .

#### 2-5-a-4 Influence de la dose

Les figures (2.14), (2.15) et (2.16) montrent l'effet de la dose sur les profils de phosphore recuit à  $800^{\circ}\text{C}/5\text{min}$  avec une énergie d'implantation  $E=25\text{KeV}$ . Nous observons que la profondeur de diffusion du phosphore (P) augmente sensiblement avec l'augmentation de la dose d'implantation. Nous remarquons également un accroissement de la concentration maximale et de la profondeur de diffusion en fonction de la dose implantée.

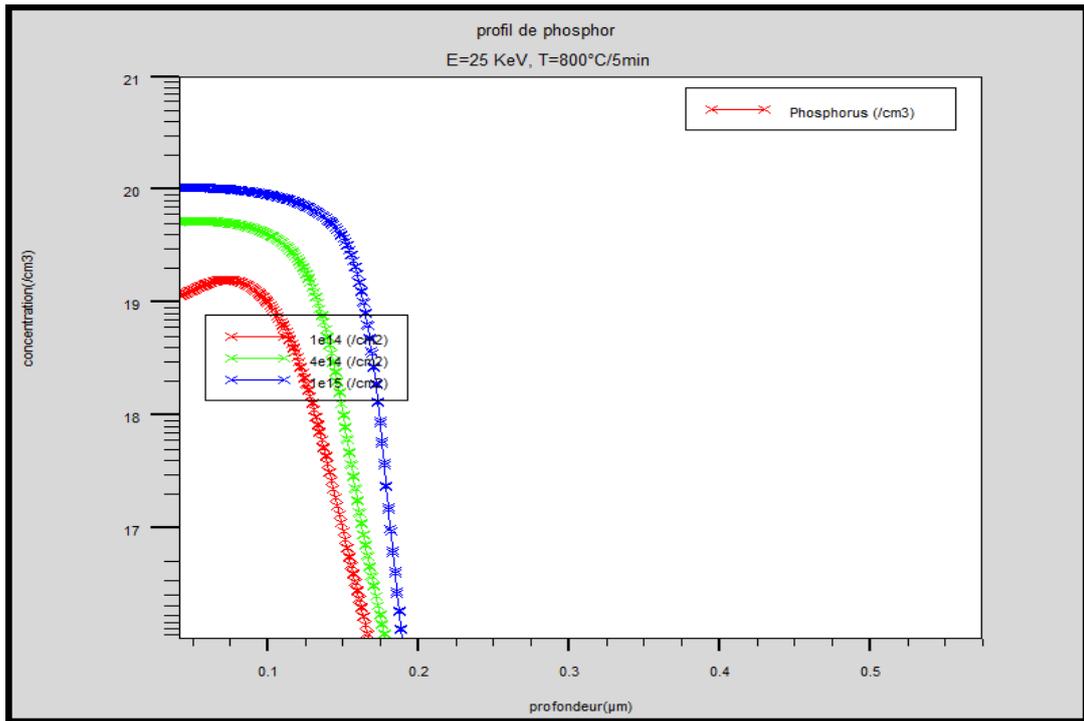


Fig. 2.14 - Profils de diffusion de Phosphore ( $10^{14}$  atom. $cm^{-3}$ ) après recuit à 5min pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (2.6):

La dose (at. $cm^{-2}$ )	$1.0 \times 10^{14}$	$4.0 \times 10^{14}$	$1.0 \times 10^{15}$
Concentration. max (at. $cm^{-3}$ )	$1.58 \times 10^{19}$	$5.24 \times 10^{19}$	$1.03 \times 10^{20}$
diffusion en profondeur $X_j$ ( $\mu m$ )	0.14	0.15	0.16

Tableau. 2.6-Effet de la dose sur la concentration et la profondeur.

Pour illustrer l'effet de la dose en fonction de profondeur et de l'épaisseur nous présentons des profils à 3D sur la figure (2.16). Les profils en 3D, sont en bonne concordance avec les profils en 2D. de plus l'épaisseur ne présente aucune variation avec la dose.

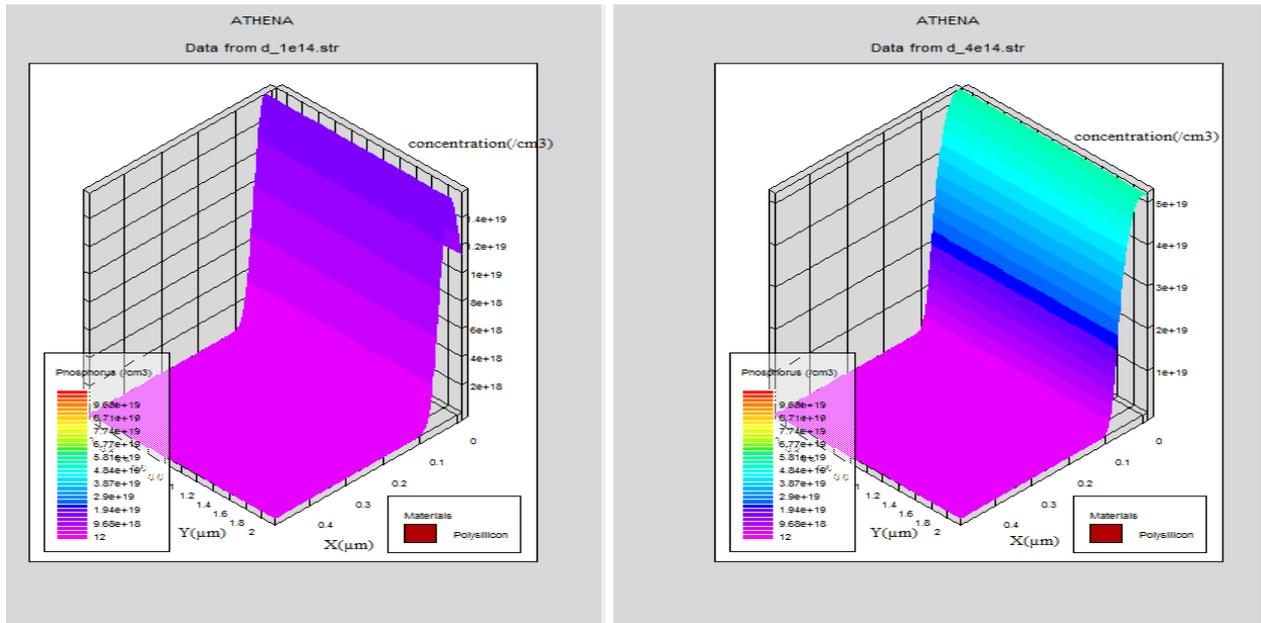


Fig. 2.15 - Profils de diffusion de Phosphore en fonction de profondeur et l'épaisseur pour:  $E=10\text{KeV}$ ,  $T=800/5\text{min}$  et différentes la dose: A)  $Q=1.0 \times 10^{14}$  (at.  $\text{cm}^{-2}$ ), B)  $Q=4.0 \times 10^{14}$  (at.  $\text{cm}^{-2}$ ).

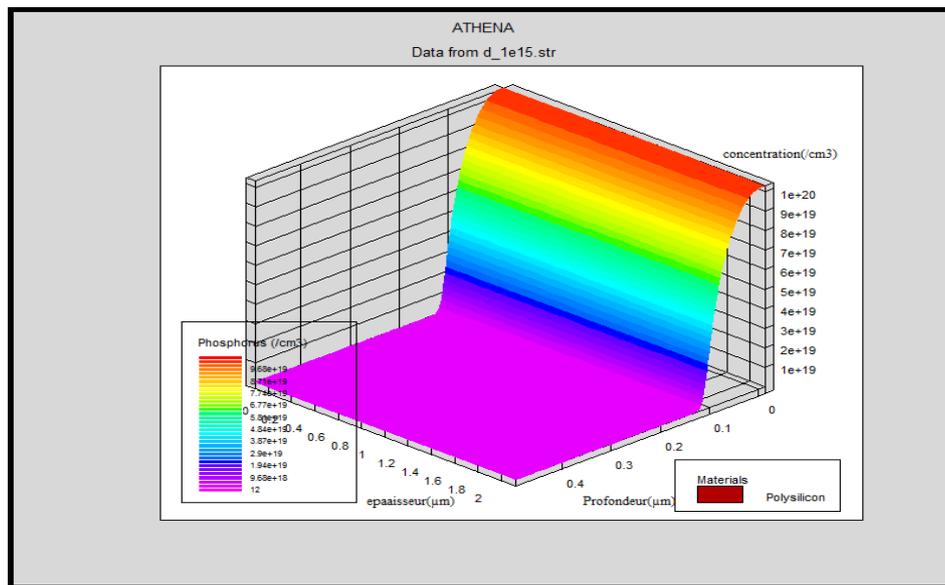


Fig. 2.16 - Profils de diffusion de Phosphore en fonction de profondeur et l'épaisseur pour:  $E=10\text{KeV}$ ,  $T=800/5\text{min}$  et la dose: C)  $Q=1.0 \times 10^{15}$  (at.  $\text{cm}^{-2}$ ),

### 2-5-b Cas de l'ion Arsenic (As)

Etude de l'influence des différents paramètres technologiques sur les profils d'implantation, avant et après recuit thermique de l'Arsecnic (As) ( $10^{15} \text{at. cm}^{-2}$ ) implante dans une couche de polysilicium d'orientation  $\langle 111 \rangle$  et d'épaisseur  $1 \mu\text{m}$

#### 2-5-b-1 Influence de la température

L'Arsecnic est implanté à une dose de  $10^{15} \text{at. cm}^{-2}$  avec une énergie de 30KeV, nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de températures de 700 à 850°C avec la durée de recuit  $t=10 \text{ min}$ . la superposition des profils pour les différentes températures de recuit présenté dans les figures (2.17), (2.18), (2.19).

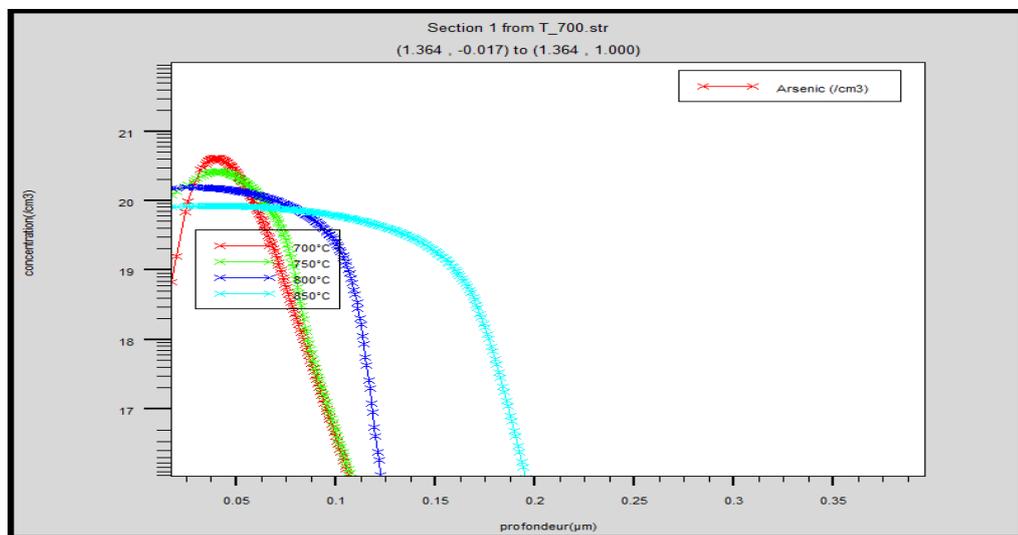


Fig. 2.17 - Profils de diffusion de L'Arsecnic ( $10^{15} \text{atom.cm}^{-2}$ ) après recuits à 10min pour les différentes températures du recuit.

Les profils de diffusion se superposent pour différents températures, aussi à partir de  $T=800^\circ\text{C}$  les profils présentent une allure plate, donc le profil de concentration dans polysilicium est abrupte et on remarque une augmentation remarquable en profondeur.

Les résultats de simulations de l'effet de température sont résumés dans le tableau (2.7):

Température de recuit ( $^\circ\text{C}$ )	700	750	800	850
Concentration. max ( $\text{at.cm}^{-3}$ )	$4.14 \times 10^{20}$	$2.61 \times 10^{20}$	$1.55 \times 10^{20}$	$8.45 \times 10^{19}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ ( $\mu\text{m}$ )	0.10	0.11	0.12	0.19

Tableau. 2.7-Effet de température sur la concentration et la profondeur.

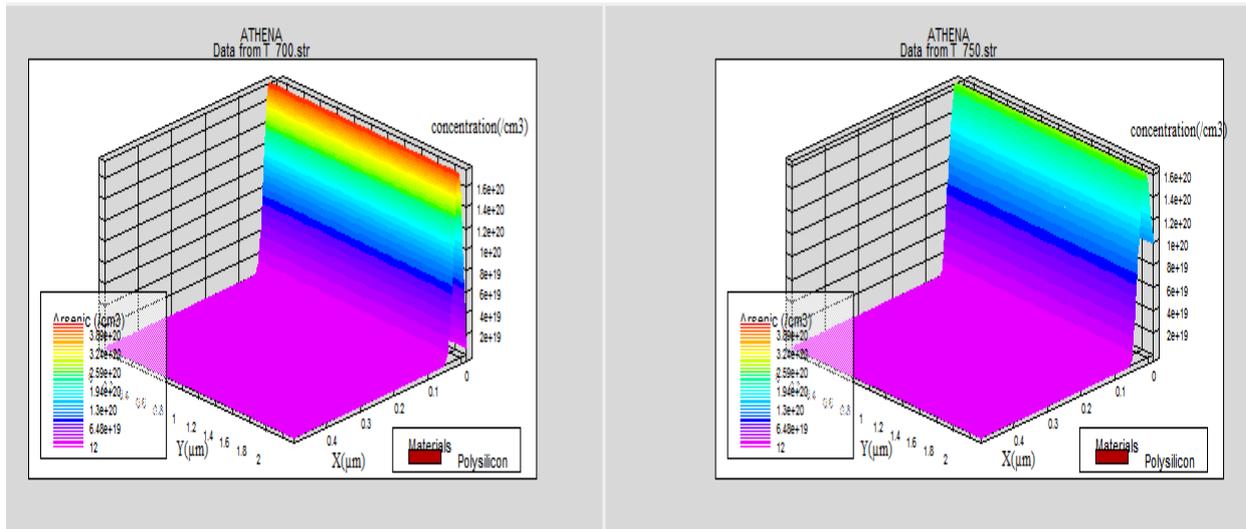


Fig. 2.18 - Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $E=30\text{KeV}$ ,  $t=10\text{ min}$ , pour différents Température de recuit:

A)  $T=700^{\circ}\text{C}$  B) pour  $T=750^{\circ}\text{C}$

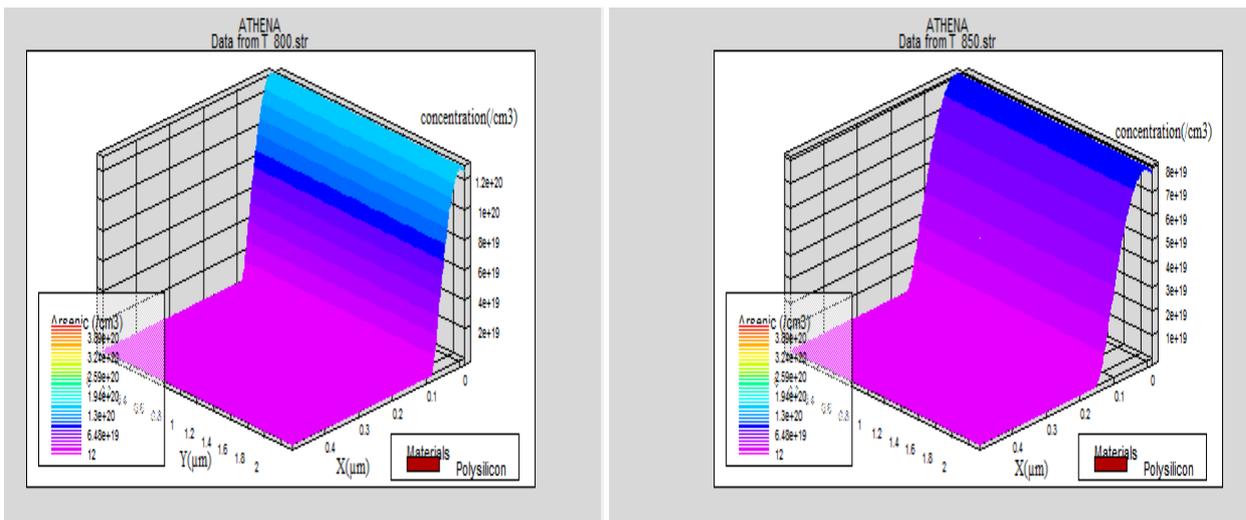


Fig. 2.19 - Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $E=30\text{KeV}$ ,  $t=10\text{ min}$ , pour différents Température de recuit:

C) pour  $t=800^{\circ}\text{C}$  D) pour  $T=850^{\circ}\text{C}$ .

La présentation en 3D, nous confirme que le profil de concentration dans polysilicium est abrupt. Avec une augmentation remarquable en profondeur.

### 2-5-b-2 Influence de la durée de recuit

Les résultats de simulations sont présentés sur les figures (2.20), (2.21) et (2.22), la couche en polysilicium a été implanté en l'Arsenic (As) avec une énergie de 30KeV et une dose

de  $10^{15} \text{ at. cm}^{-2}$  à température  $T=800^\circ\text{C}$  pour les durées de recuit :  $t=5 \text{ min}$ ,  $t=10 \text{ min}$ ,  $t=20 \text{ min}$  et  $t=30 \text{ min}$ .

Pour différent durée de recuit on remarque aussi les profils de concentration est présente une allure plate.

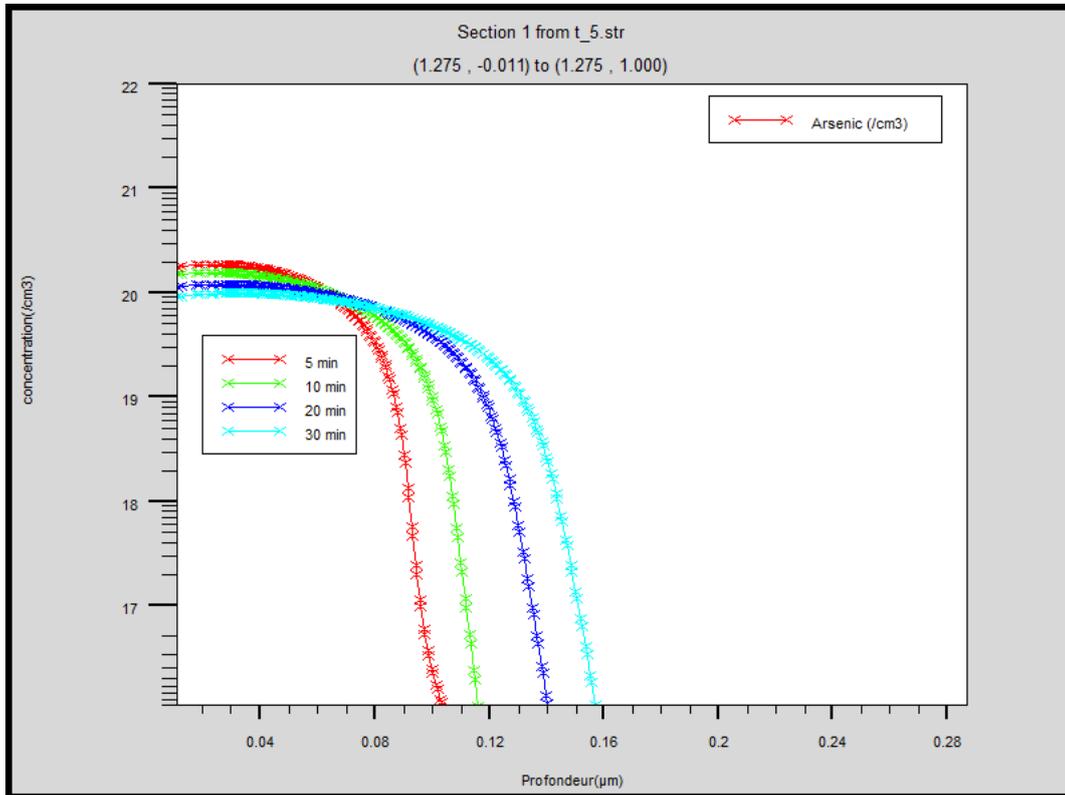


Fig. 2.20 - Profils de diffusion de L'Arsenic ( $10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$ ) après recuits à  $800^\circ\text{C}$  au cours de la durée de recuit.

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été résumés dans le tableau (2.8):

temps de recuit (min)	5	10	20	30
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	$1.83 \times 10^{20}$	$1.55 \times 10^{20}$	$1.18 \times 10^{20}$	$9.83 \times 10^{19}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ (μm)	0.10	0.11	0.14	0.15

Tableau. 2.8-Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur.

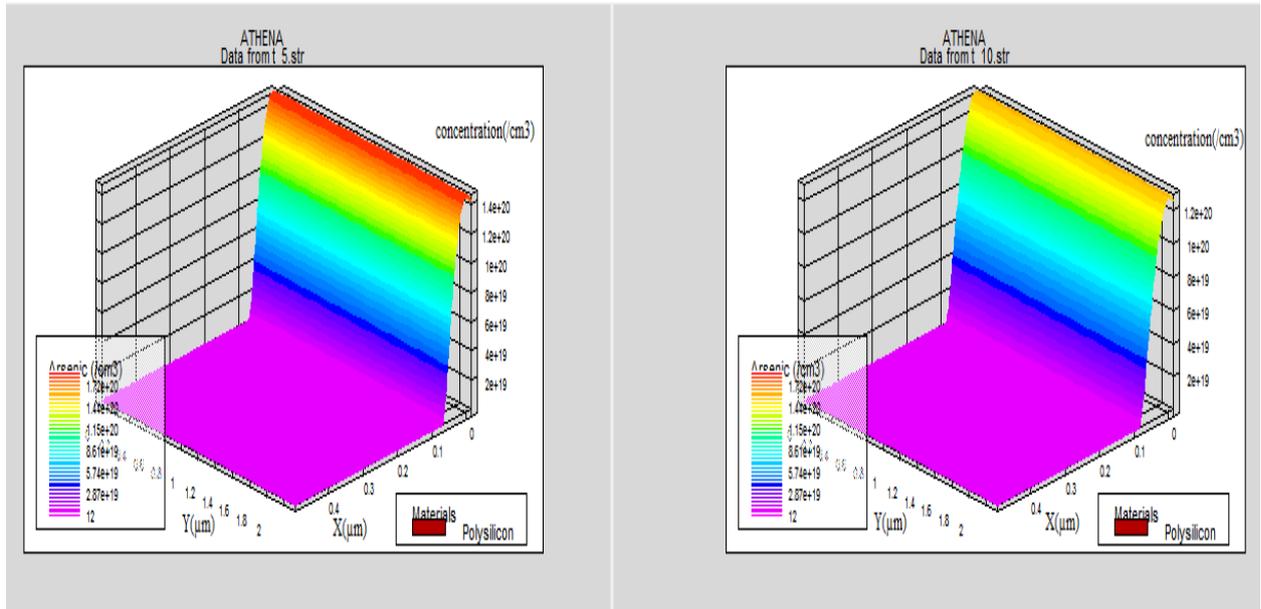


Fig. 2.21 - Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $Q = 10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$ ,  $E=30\text{KeV}$ ,  $T=800^{\circ}\text{C}$  et différents temps de recuit :  
A) pour  $t=5$ , B) pour  $t=10\text{min}$ .

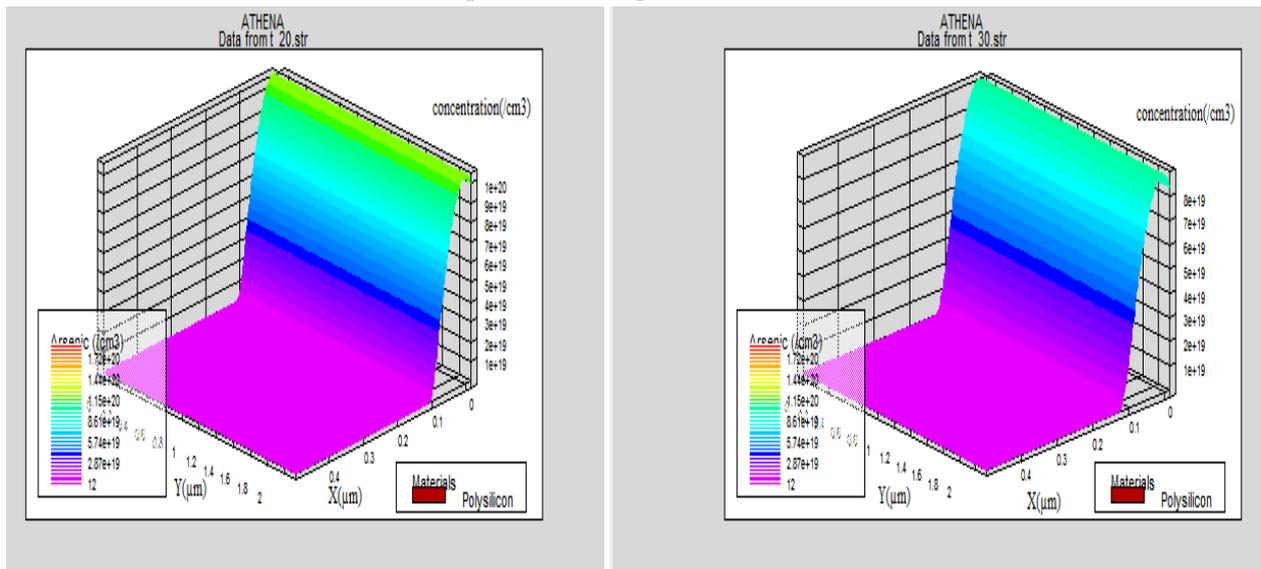


Fig. 2.22 - Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $Q = 10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$ ,  $E=30\text{KeV}$ ,  $T=800^{\circ}\text{C}$  et différents temps de recuit:  
C) pour  $t=30\text{min}$  D) pour  $t=40\text{min}$ .

### 2-5-b-3 Influence de l'énergie

L'Arsenic (As) est implanté à une dose de  $10^{15} \text{ at. cm}^{-2}$ , nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de l'énergie de 5 à 45 KeV avec recuit de  $800^{\circ}\text{C}/10\text{min}$ . Les figures (2.23) et (2.24) montrent l'effet de l'énergie sur les profils de l'Arsenic (As).

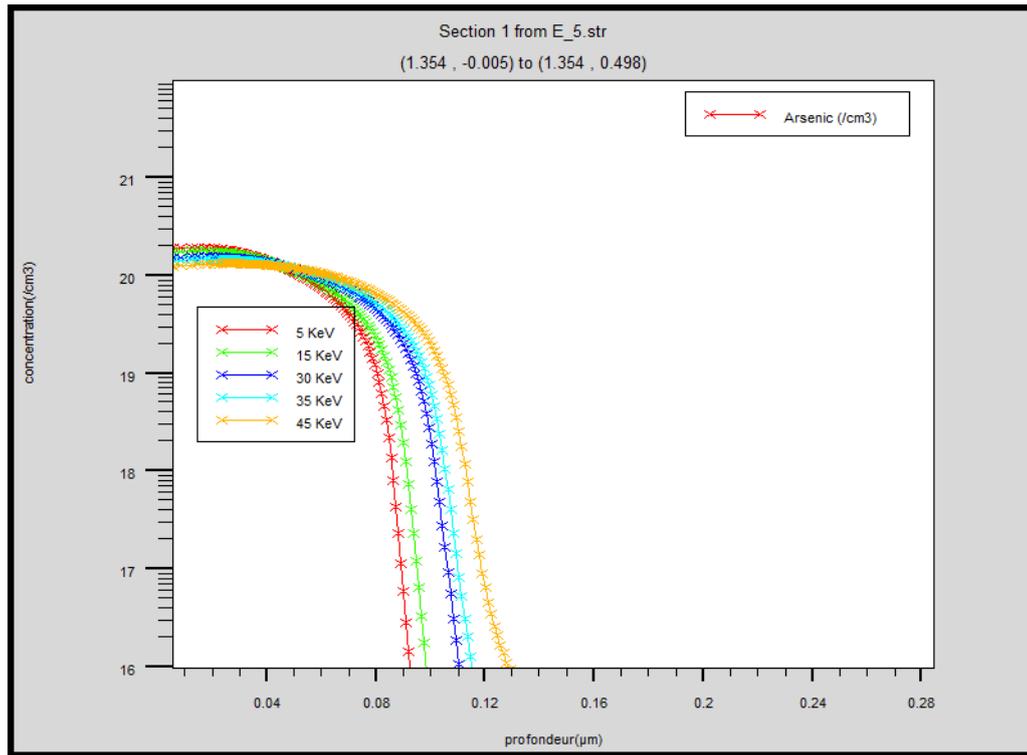


Fig. 2.23 - Profils de diffusion de L'Arsenic ( $10^{16} \text{ atom.cm}^{-2}$ ) après recuits à 60min pour les différentes de l'énergie d'implantation

On remarque en particulier qu'à partir d'une l'énergie  $E > 30 \text{ KeV}$  les profils présentent un plateau, pour une profondeur de l'ordre  $0,12 \mu\text{m}$ , cela peut être dû à l'apparition des défauts électriquement actifs au niveau de cette région.

Les résultats de simulations de l'effet de l'énergie ont été résumés dans le tableau (2.9):

Energie d'implantation (KeV)	5	15	30	35	45
Concentration. max ( $\text{at.cm}^{-3}$ )	$1.94 \times 10^{20}$	$1.79 \times 10^{20}$	$1.55 \times 10^{20}$	$1.47 \times 10^{20}$	$1.32 \times 10^{20}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ ( $\mu\text{m}$ )	0.09	0.10	0.11	~0.12	0.13

Tableau. 2.9- Effet de l'énergie sur la concentration et la profondeur

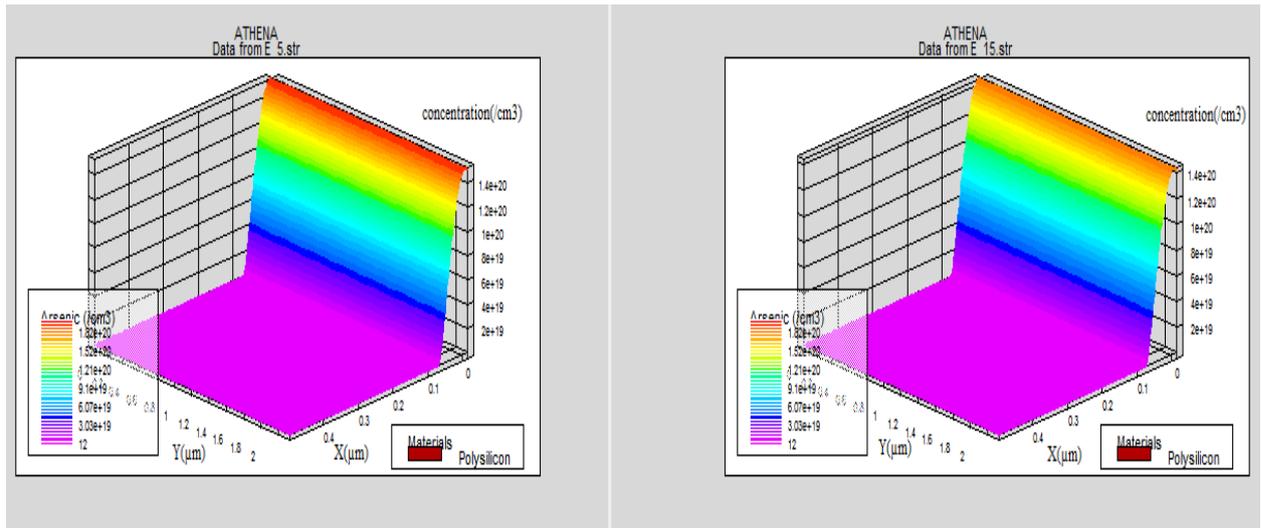


Fig. 2.24- Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $Q = 10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$ ,  $T=800^{\circ}\text{C}/10\text{min}$  pour l'énergie d'implantation:

A)  $E=5\text{KeV}$ , B)  $E=15\text{KeV}$

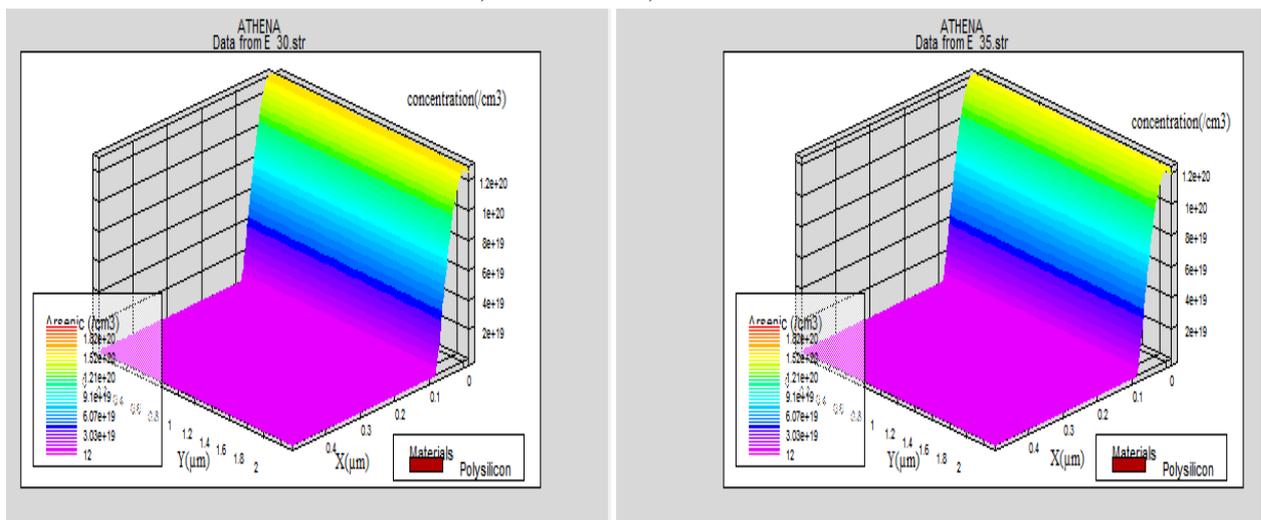


Fig. 2.25- Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $Q = 10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$ ,  $T=800^{\circ}\text{C}/10\text{min}$  pour l'énergie d'implantation:

C)  $E=30\text{KeV}$ , D)  $E=35\text{KeV}$ .

#### 2-5-b-4 Influence de la dose

Les figures (2.26) et(2,27) montrent l'effet de la dose sur les profils de phosphore recuit à  $800^{\circ}\text{C}/10\text{min}$  et énergie d'implantation  $E=30\text{KeV}$ . Nous observons que la profondeur de diffusion et la concentration de l'Arsenic (As) en fonction de la profondeur augmentent avec la dose d'implantation.

Les figures montre qu'a partir de la dose  $Q = 1 \times 10^{15} \text{ atom.cm}^{-2}$  le profil present une allure plate et ça commence de  $0.11 \mu\text{m}$ , produisant donc une région  $N^+$  fortement dopée en moyenne de  $1.63 \times 10^{20} \text{ atom.cm}^{-3}$ .

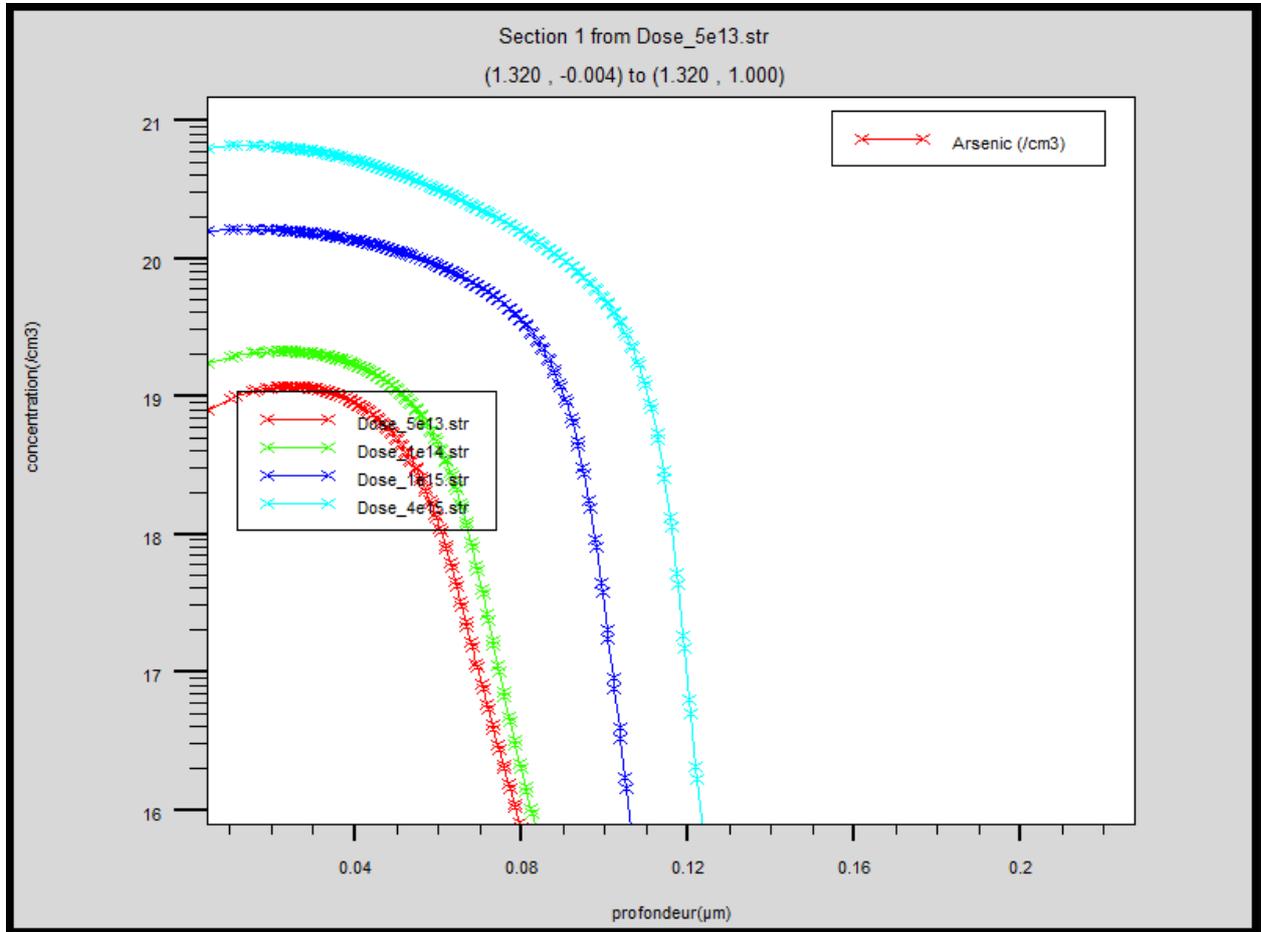


Fig. 2.26 - Profils de diffusion de L'Arsenic (As) ( $E = 30 \text{ KeV}$ ) après recuit à  $800/10 \text{ min}$  pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (2.10):

<b>La dose (<math>\text{at.cm}^{-2}</math>)</b>	$5.0 \times 10^{13}$	$1.0 \times 10^{14}$	$1.0 \times 10^{15}$	$4.0 \times 10^{15}$
<b>Concentration. max (<math>\text{at.cm}^{-3}</math>)</b>	$1.18 \times 10^{19}$	$1.12 \times 10^{19}$	$1.63 \times 10^{20}$	$6.61 \times 10^{20}$
<b>Diffusion en profondeur <math>X_j</math> (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	0.080	0.082	0.11	0.12

Tableau. 2.10-*Effet de la dose sur la concentration et la profondeur.*

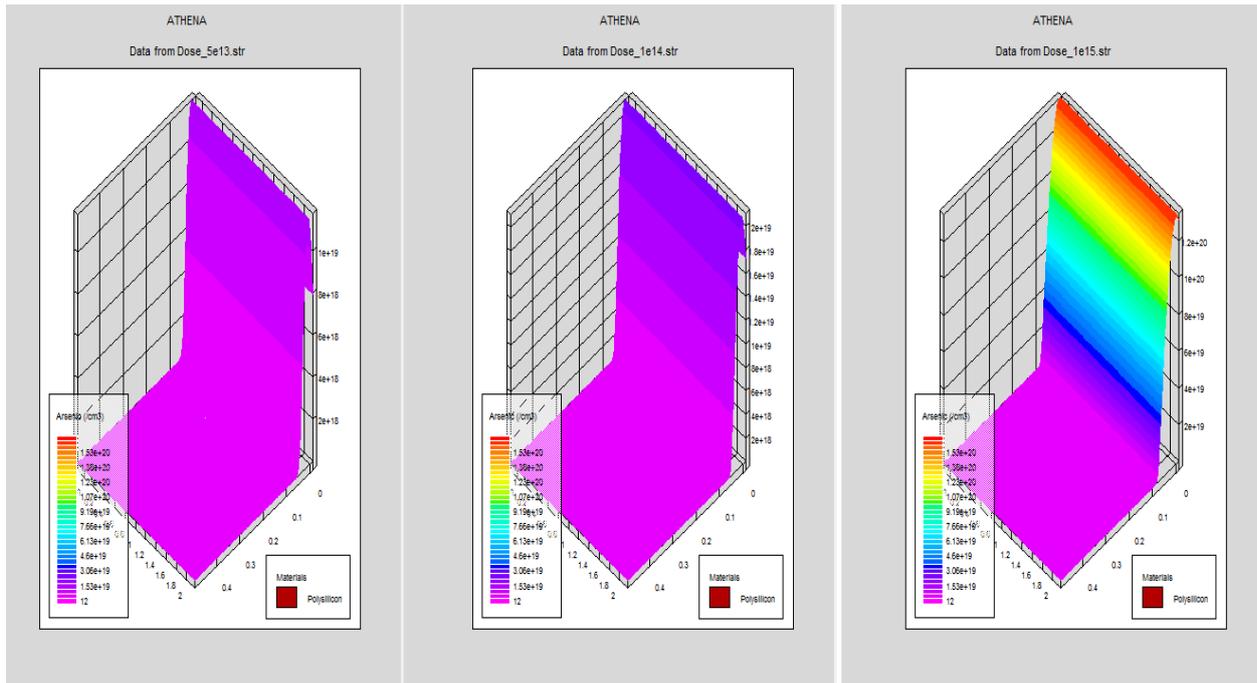


Fig. 2.27- Profils de diffusion de L'Arsenic en fonction de profondeur et l'épaisseur  $E=5KeV, T=1000^{\circ}C, t=60min$  pour la dose :  
 A)  $Q=1.0 \times 10^{14} \text{at. cm}^{-2}$ , B)  $Q=1.0 \times 10^{15} \text{at. cm}^{-2}$ . C)  $Q=1.0 \times 10^{16} \text{at. cm}^{-2}$ .

Les profils en 3 D sont présentés sur la figure (2.24), en augmentant la température, le Pic de la courbe s'élargie au niveau de l'interface, cela est analogue à celui trouvé en 2 D

### 2-5-c Cas de l'ion Bore(B) implante dans polysilicium

Rappelons que le bore est l'impureté couramment utilisée pour le dopage de type *P* quelle que soit la technique de dopage et en particulier pour l'implantation ionique.

Parmi les solutions proposées pour résoudre le problème de la forte diffusivité du bore, une des plus prometteuses consiste à co-implanter le bore, lorsqu'il est à très fort dopage, avec des impuretés tels que l'azote ou le fluor. Il a été récemment montré que dans ces conditions, il est possible de limiter la diffusion du bore tout en gardant une désactivation importante du bore après recuit thermique post-implantation. Il arrive que moins de 50% du bore implanté soit actif car le bilan thermique est relativement faible. Les mécanismes responsables de cette diffusion anormale restent encore assez méconnus [45].

La couche en polysilicium consiste en 335nm d'épaisseur (P-type,  $10^{15} \text{atom/cm}^3$ ), l'orientation cristallographique  $\langle 111 \rangle$  et implantés au bore avec une énergie de 15keV, nous avons étudié l'influence des différents paramètres technologique sur les profils d'implantation avant et après recuit thermique.

### 2-5-c-1 Profil avant recuit thermique

La figure (2.28) ci-dessous montre le tracé du profil de la répartition du bore implante avec énergie de 15keV et la dose  $4.10^{15} \text{atom/cm}^2$  juste après son implantation dans la couche en polysilicium (type P). Ce profil, montre l'allure de la concentration du bore en fonction de la profondeur du film. Nous pouvons constater que la profondeur maximale de pénétration du bore avant recuit thermique est de l'ordre de  $0,16\mu\text{m}$  représentant environ 50% de l'épaisseur du film (environ 335nm).

Comme prévu, la répartition du bore dans le film n'est pas vraiment une Gaussienne parfaite. Ceci est dû à l'effet de canalisation du bore dans les différents défauts structuraux.

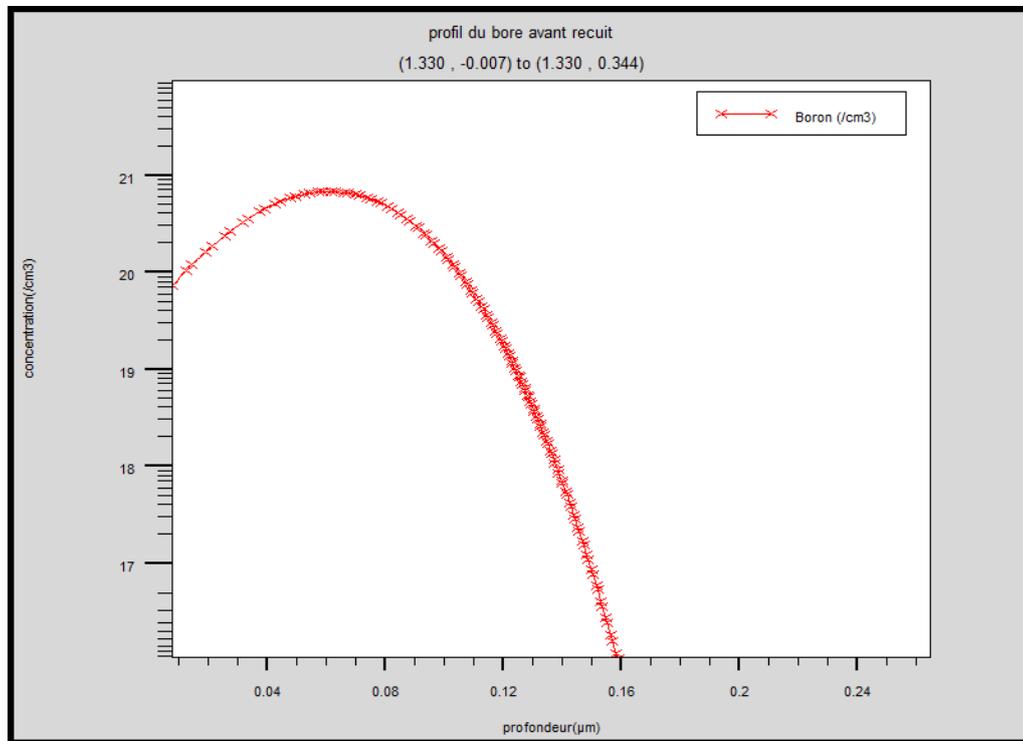


Fig. 2.28 - Allure du profil de distribution du bore juste après implantation ionique avant recuit. Dose= $4.10^{15} \text{atom/cm}^2$ ,  $E=15\text{KeV}$

### 2-5-c-2 Influence de la durée de recuit

La figure (2.29) montre des profils donnant la variation de la concentration du bore en fonction de la profondeur, pour différentes durées de recuit à  $700^\circ\text{C}$ . Nous remarquons que le recuit thermique accélère la redistribution du bore dans une couche Si-poly, malgré la structure amorphe de ce dernier.

La profondeur de diffusion du bore augmente sensiblement avec la durée de recuit thermique. Par ailleurs, les profils restent identiques au sommet des profils de concentration

durant ce recuit thermique. D'autre part, un épaulement des profils, situé au dessous de la concentration  $1.2 \times 10^{19} \text{at. cm}^{-3}$

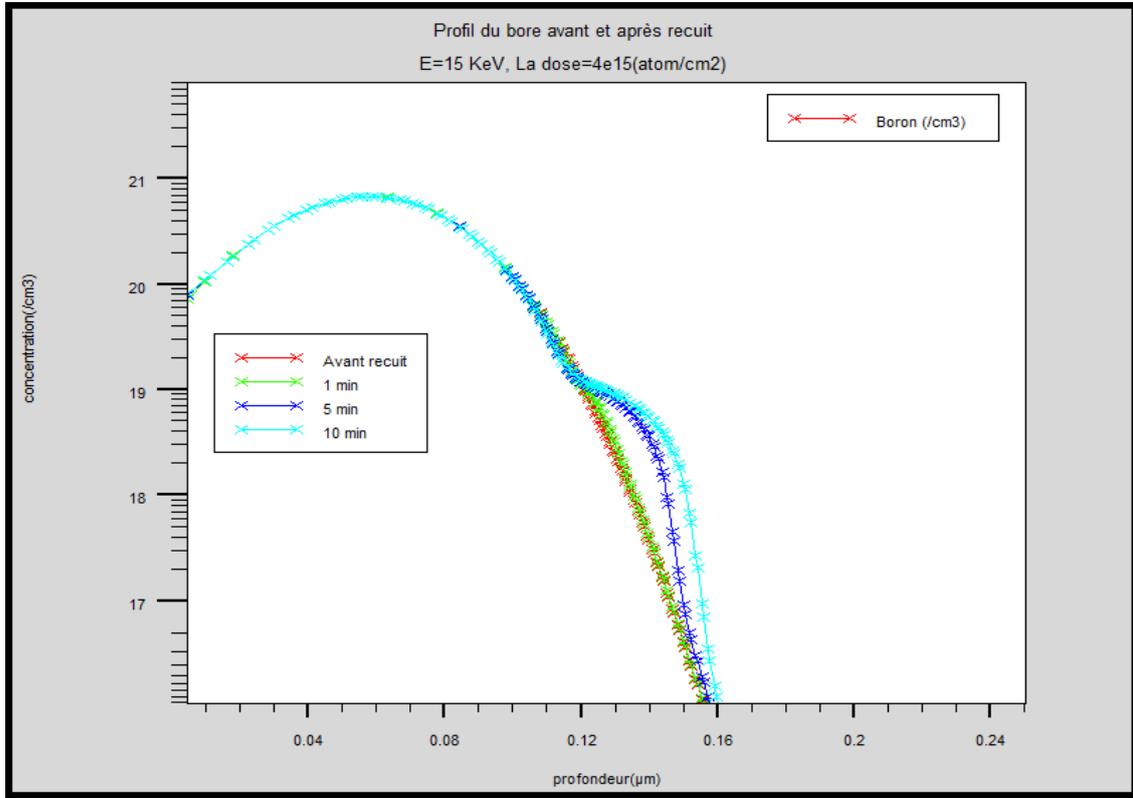


Fig. 2.29 - profils du bore avant et après recuit pour 1, 5 et 10 min à 700°C.

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été résumés dans le tableau (2.11): à partir de  $t = 5$  min les courbes pressentent l'effet d'épaulement, comme a été trouvé dans la littérature [46]. Cet épaulement est du à la forte dose de concentration

Le temps (min)	1	5	10
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	$6.78 \times 10^{20}$	$6.78 \times 10^{20}$	$6.78 \times 10^{20}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ (µm)	0.157	0.157	0.160

Tableau. 2.11-Effet de la durée de recuit sur concentration et la profondeur.

### 2-5-c-3 Influence du temperature

La figure (2.30) illustre des profils de concentration du bore en fonction de la profondeur de la couche polysilicium pour une durée de recuit de 1 minute à différentes températures (700, 750 et 800°C). Cette figure montre l'effet de la température de recuit sur la redistribution du bore. La profondeur de diffusion du bore augmente sensiblement avec différentes températures de recuit puisque le processus de diffusion est activé thermiquement. L'épaule des profils apparaît au dessous de la concentration  $3 \cdot 10^{19} \text{at.cm}^{-3}$ . On retrouve encore le caractère transitoire de l'accélération mais la fin de cette dernière et le retour à l'équilibre semblent être obtenues rapidement en augmentant la température de recuit. Aussi on remarque l'effet d'épaule apparaît sur les courbes pour les trois températures.

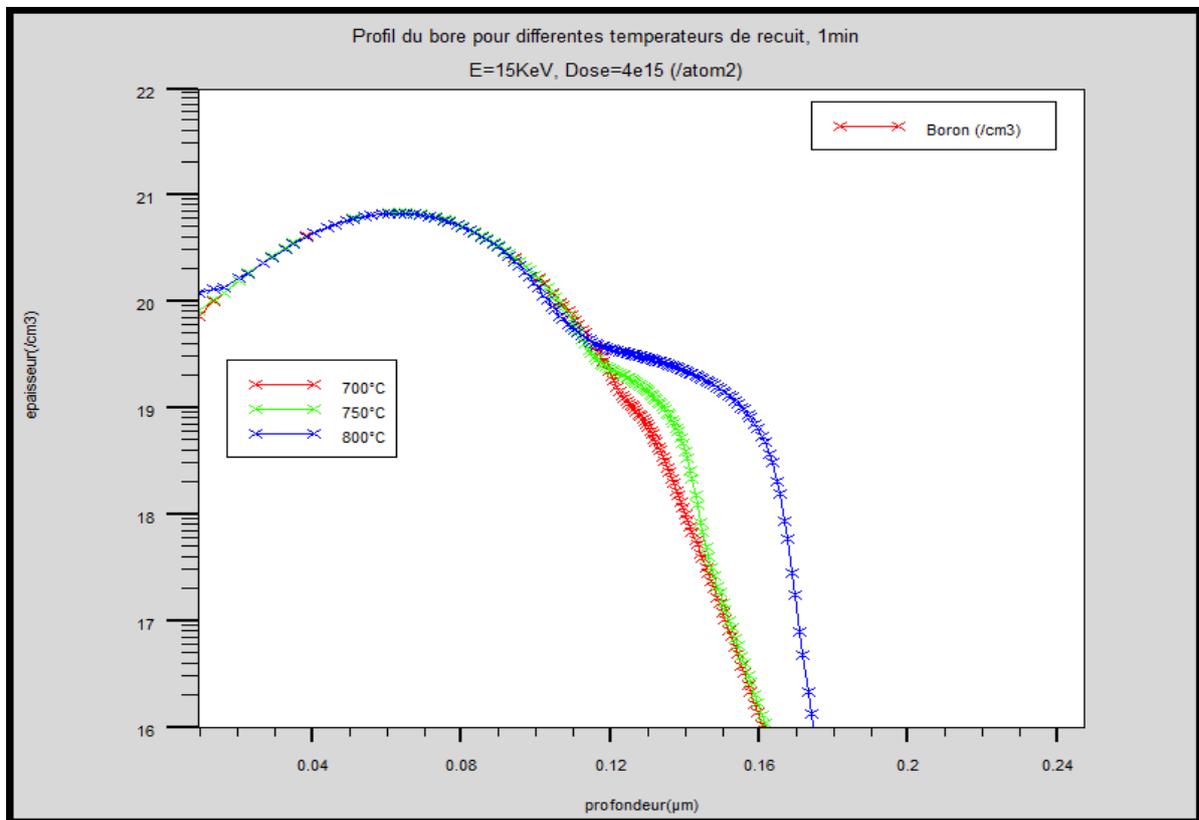


Fig. 2.30 - profils du bore après recuit pour 1min à 700,750 et 800°C

Les résultats de simulations de l'effet de la température ont été résumés dans le tableau (2.12):

température de recuit (min)	700°C	750°C	800°C
Concentration. max ( $\text{at.cm}^{-3}$ )	$6.78 \times 10^{20}$	$6.78 \times 10^{20}$	$6.78 \times 10^{20}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ ( $\mu\text{m}$ )	0.16	0.16	0.17

Tableau. 2.12-*Effet de la température Effet sur concentration et la profondeur.*

Pour illustrer l'effet de l'énergie d'implantation et L'épaulement de profil en fonction de profondeur et en fonction de l'épaisseur nous présentons le profil à 3D sur les figures (2.31)

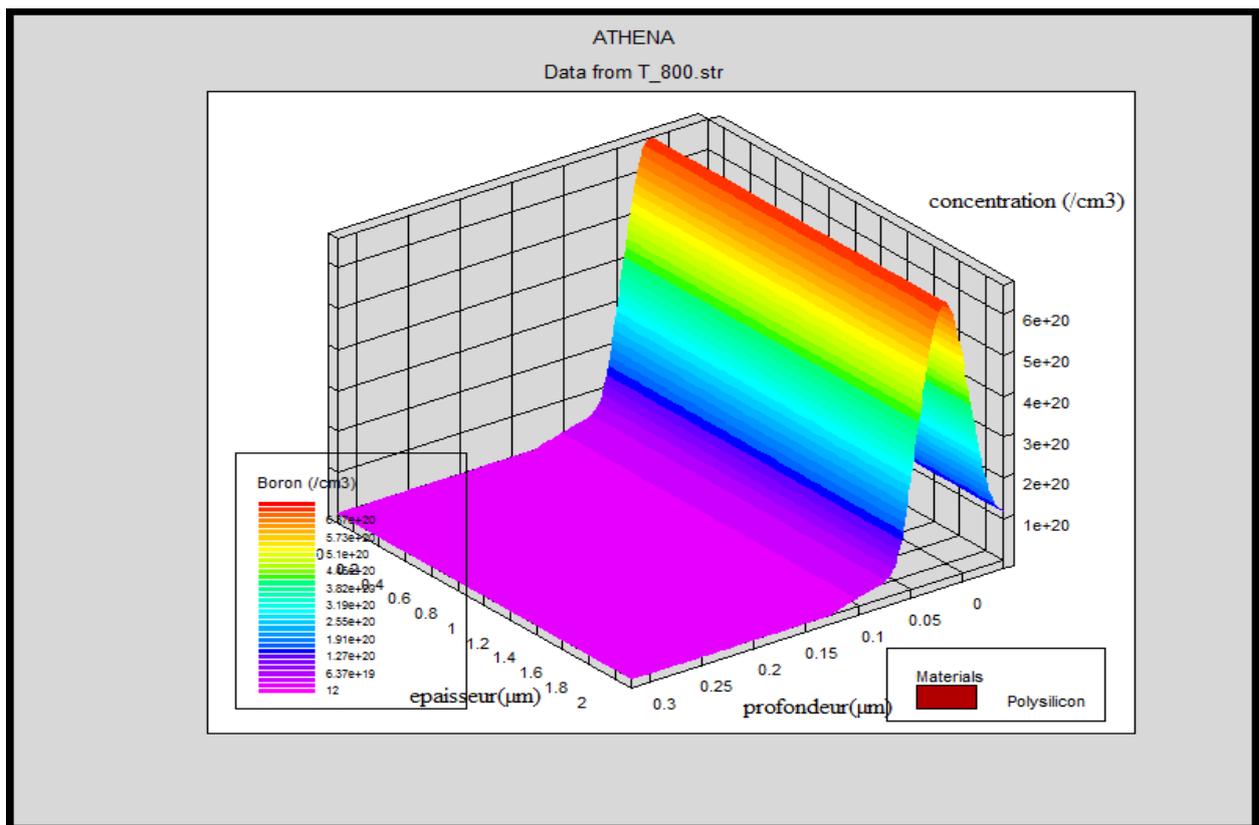


Fig. 2.31 - *profils du bore après recuit pour 800°C/1min à E=15 KeV,  
La dose d'implantation =  $4.10^{15}$  atom/cm<sup>2</sup>.*

2-5-b-4 Influence de la dose

La figure (2.32) montre la superposition des profils donnant la variation de la concentration du bore en fonction de la profondeur de substrat poly-Si, avant recuit et après recuit à la température de 700°C/5minutes, pour une différentes doses de dopant ( $1 \times 10^{14}$ ,  $4 \times 10^{14}$  et  $1 \times 10^{15} \text{ atom. cm}^{-2}$ ). recuit thermique post-implantation accélère la redistribution du bore dans la couche poly-Si

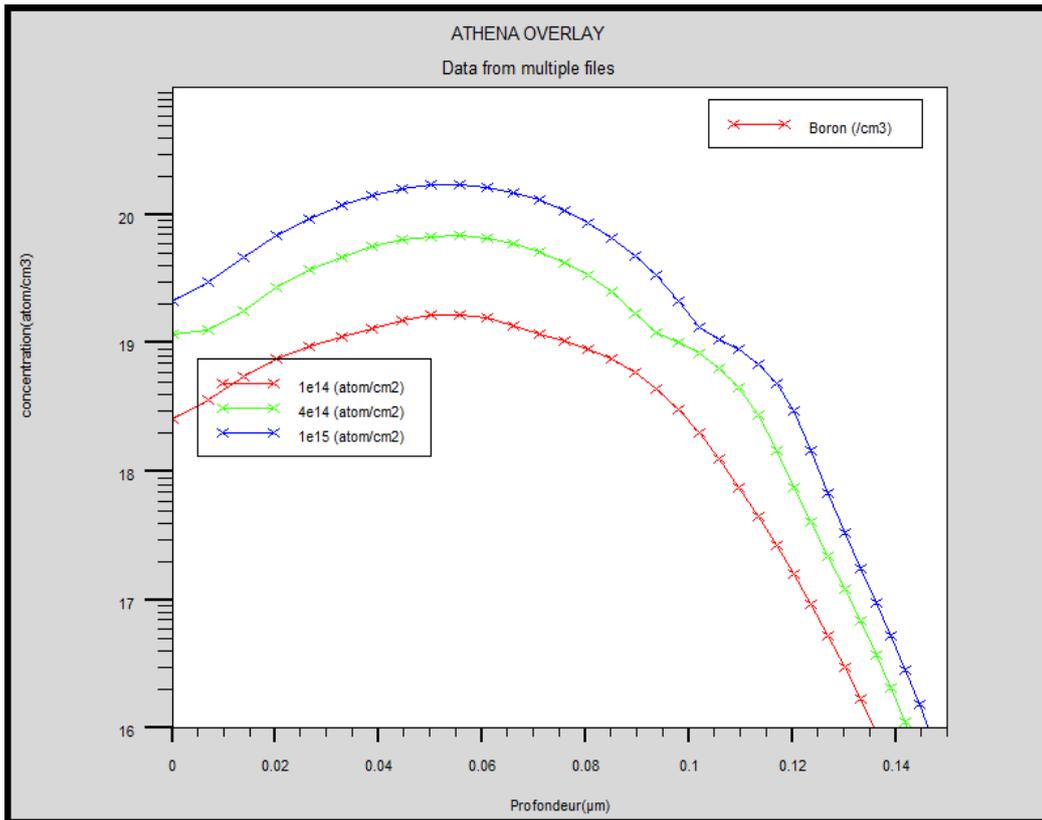


Fig. 2.32 - *profils du bore après recuit à 700°C/5min pour  $1 \times 10^{14}$ ,  $4 \times 10^{14}$  et  $1 \times 10^{15} \text{ atom. cm}^{-2}$*

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (2.13):

La dose (at.cm <sup>-2</sup> )	$1 \times 10^{14}$	$4 \times 10^{14}$	$1 \times 10^{15}$
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	$1.65 \times 10^{19}$	$6.77 \times 10^{19}$	$1.70 \times 10^{20}$
Max. diffusion en profondeur $X_j$ (µm)	0.134	0.142	0.147

Tableau. 2.13-*Effet de la dose sur concentration et la profondeur.*

## 2.6 CONCLUSION

L'implantation ionique consiste à l'introduction d'impuretés. Cette introduction d'éléments engendre des modifications structurales, qui dépendent des conditions d'implantation.

Dans ce chapitre on a essayé de mettre en évidence l'effet de la dose, de l'énergie d'implantation, de la température et le temps de recuit, et de prévoir le comportement de profil de l'implantation avant et après recuit à l'aide de simulateur TCAD SILVACO (ATHENA) qui permettent et grâce à des modèles physiques de plus en plus sophistiqués de reproduire et prédire des profils de dopage. Aussi les profils en 3 Dimension ont été présentés et discutés. L'effet d'épaule a été observé lorsqu'on varie la température et le temps de recuit. Aussi, un plateau remarquable a été observé sur les profils de concentration en profondeur, en augmentant l'énergie d'implantation, cela est dû à la présence de défauts actifs au niveau de la région.

En tenant compte des résultats trouvés dans ce chapitre, un modèle théorique décrit l'implantation ionique sera présenté dans le chapitre 3.

## **CHAPITRE 3**

# **Modélisation de la diffusion**

## **Du dopant implanté**

### 3.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter, d'une part, l'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu dans le mécanisme de diffusion du bore dans polysilicium, et d'autre part le modèle, numérique associé. Dans une première partie, nous présentons un résumé des principaux mécanismes de la diffusion du bore dans une structure Métal Oxyde Semi-conducteur (MOS).

### 3.2 Modélisation de la diffusion du bore dans le polysilicium

La diffusion du bore dans poly silicium est un phénomène fondamental en microélectronique, cet espèce chimique étant largement utilisée dans le dopage des transistors PMOS et NMOS, ces mécanismes ont été énormément discutés [45].

Les procédés de diffusion vont être simulés à partir d'algorithme utilisant une méthode numérique implicite des différences finies à une dimension, pour cela on est amené à résoudre l'équation de Fick qui est le point de départ de tout essai de modélisation de diffusion.

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial [D \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}]}{\partial x} \quad (3.1)$$

$c(x, t)$ : La concentration du dopant à la profondeur  $x$  et au temps  $t$ .

$D$ : diffusivité (coefficient de diffusion).

Les modèle simples (loi de Fick), correct pour les faibles concentrations, ne conviennent plus pour le silicium polycristallin. Dans ce cas il faut rajouter de nombreux termes pour obtenir un modèle susceptible de donner de résultats quantitatifs valables dans le domaine des concentrations employées.

#### 3.2. a Effet du champ électrique interne

La diffusion de dopant, pendant la phase de recuit est décrite en termes de flux. Le flux d'une impureté ( $e$ ) dans un milieu isotropique contenant(e) les impuretés, est donné par l'expression suivante:

$$F_e = -D_e \nabla c_e + Z_e \mu_e c_e E \quad (3.2)$$

Avec:

$D_e$ : Coefficient de diffusion de l'impureté ( $e$ ).

$F_e$ : Flux d'une impureté (e).

$c_e$ : Concentration de l'impureté(e)en atomes/cm<sup>3</sup>.

$Z_e$ : C'est de charge de l'impureté (+1 pour les donneurs (As) et -1 pour les accepteurs (B), 0 pour les neuters).

$E$ : Le champ électrique interne en V.cm<sup>-1</sup>.

$\mu_e$ : Mobilité de l'impureté, exprimée généralement en cm<sup>2</sup>.V<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>

En sachant que les seuls paramètres sont: la force motrice du gradient de potentiel chimique et le champ électrique et en utilisant la relation d'Einstein entre la mobilité et la diffusivité est donnée par

$$D_e/\mu_e = \frac{kT}{q} \quad (3.3)$$

Avec :

$q$ : La charge électronique.

$k$ : Constante de Boltzmann.

$T$ : Température absolue (k) du processus.

L'expression du champ en fonction du potentiel électrostatique:

$$E = -\nabla\Phi \quad (3.4)$$

Avec :

$$\Phi = \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{n}{n_i} \right) \quad (3.5)$$

$n$ : Concentration d'électrons libres,  $n_i$ est la concentration intrinsèque d'electrons.

En remplaçant (3.5) et (3.4) dans l'expression (3.2) on obtient ainsi:

$$F_e = -D_e \nabla c_e + Z_e D_e \nabla \ln \left( \frac{n}{n_i} \right) \quad (3.6)$$

Si nous nous intéressons seulement au cas de dopage en bore (cas de notre étude), la neutralité électrique en tout point de la structure conduit à écrire:

$$c^* + p - n = 0 \quad (3.7)$$

Où  $c^*$  représente la concentration de l'impureté acceptrice (bore) ionisée pendant le recuit thermique,  $n$  la concentration des électrons et  $p$  la concentration des trous.

A l'équilibre thermodynamique:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (3.8)$$

En utilisant les expressions (3.7) et (3.8):

$$p^2 + c^* - n_i^2 = 0 \quad (3.9)$$

La résolution de l'équation (3.9) donne l'expression de la densité de trous dans la structure:

$$p = 1/2(-c^* + \sqrt{c^{*2} + 4n_i^2}) \quad (3.10)$$

Sachant que:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \ln \left( \frac{n}{n_i} \right) \right) = \frac{\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{n}{n_i} \right)}{\frac{n}{n_i}} \quad (3.11)$$

A partir des équations (3.11), (3.10), (3.8) et (3.6) on détermine l'expression générale du flux pour les impuretés acceptrices

$$F = -D \left( \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{c}{\sqrt{c^{*2} + 4n_i^2}} \frac{\partial c^*}{\partial x} \right) \quad (3.12)$$

Soient  $c^*$  concentration ionisée de l'impureté et  $c$  la concentration totale de l'impureté. On peut alors écrire:  $c^* = \alpha c$  où le facteur  $\alpha$  représente le taux d'activation électrique du dopant ( $0 < \alpha < 1$ ).

$$F = -D \left( \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{c}{\sqrt{(\alpha c)^2 + 4n_i^2}} \frac{\partial c^*}{\partial x} \right) \quad (3.13)$$

### 3.2. b Effet des différentes lacunes

La lacune dans le silicium constitue sans doute le défaut le plus simple et peut être le mieux connu grâce aux nombreux travaux réalisés. La lacune correspond à l'absence d'un atome en site normalement occupée. C'est un défaut généré par l'élévation de la température. Dans le cas du silicium, la lacune possède cinq différents états de charge, lacune chargée positivement deux fois ( $V^{2+}$ ), lacune chargée positivement ( $V^+$ ), lacune neutre ( $V^0$ ), lacune chargée négativement ( $V^-$ ), lacune chargée négativement deux fois ( $V^{=}$ ) [3,46].

Le coefficient de diffusion s'écrit alors:

$$D = D^0 + D^- \left( \frac{n}{n_i} \right) + D^= \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 + D^+ \left( \frac{n}{n_i} \right) \quad (3.14)$$

Avec :

$D^0, D^-, D^=$  et  $D^+$  sont les diffusivités intrinsèque via les différentes lacunes. La diffusion s'effectue pour le bore que par intermédiaire des lacunes neutres et chargées positivement il vient:

$$D_a = D_a^0 + D_a^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} \text{ pour les accepteurs (Bore)} \quad (3.15)$$

$$D_a = D_a^0 + D_a^- \left(\frac{n}{n_i}\right) \text{ pour les donneur (Arsenic)} \quad (3.16)$$

$$\text{Pour le Bore: } D_B = D_i^0 + D_i^+ \left(\frac{n}{n_i}\right)^{-1} = D_i^0 + D_i^+ \left(\frac{1+\beta \left(\frac{n_i}{n}\right)}{1+\beta}\right) \quad (3.17)$$

$$\text{Avec } \beta = \frac{D_i^+}{D_i^0}$$

$\beta$ : est un facteur correctif qui dépend de la concentration des lacunes.

$$f = \frac{n_i}{n} = \frac{p}{n_i} : \text{ pour une impurete acceptrice(bore) avec } f = \frac{2n_i}{(-\alpha C_B) + \sqrt{(-\alpha C_B)^2 + 4n_i^2}} \quad (3.18)$$

### 3.2. c L'effet des amas ou "clusters"

Quand les impuretés sont présentes en forte concentration, un dépassement de la solubilité limite de l'impureté se produit, causant la formation partielle d'amas ou clusters électriquement inactifs et immobiles. La formation de ces agrégats tend à réduire la fraction active de l'impureté dopante à cause de la formation de composés associant Bore et Silicium de type SiB<sub>x</sub>. Ce phénomène est pris en compte sous forme d'un nouveau terme correctif " g" [46,47]

Le coefficient de diffusion effectif intervenant dans l'équation de diffusion prend alors la forme:

$$D^{eff} = D_i \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta}\right) \left[ g + \frac{c^*}{\sqrt{(c^*)^2 + 4n_i^2}} \right] = D \cdot h \quad (3.19)$$

L'expression générale du flux prend la forme suivante:

$$F = -D_i \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta}\right) \left[ g + \frac{c^*}{\sqrt{(c^*)^2 + 4n_i^2}} \right] \frac{\partial c}{\partial x} \quad (3.20)$$

$D_i$  Suit une loi de type Arrhenius  $D_i = D_{poly} \exp(-E_0/KT)$

Où  $D_{poly}$  est le coefficient de diffusion dans le polysilicium, il est toujours proportionnel à  $D_{mono}$ , le coefficient de diffusion dans le silicium monocristallin, et 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 monosilicium, d'un facteur 100 à 1000, ceci étant dû à la présence des joints de grains qui constituent des "canaux" favorables à la diffusion [45]

L'équation finale pour le cas du bore sachant que pour le bore  $f = \frac{n_i}{n} = \frac{p}{n_i}$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1+\beta f}{1+\beta} \left[ g + \frac{\alpha c_B}{\sqrt{(c_B)^2 + 4n_i^2}} \right] \frac{\partial c_B}{\partial x} \right] \quad (3.21)$$

### 3.3 Résolution numérique unidimensionnelles de système d'équation de diffusion

Nous avons établi les équations aux dérivées partielles décrivant le système de diffusion simple. La résolution de cette équation par les méthodes analytiques est impossible dans le cas général et le phénomène de diffusion est un phénomène non linéaire. Seules des méthodes numériques sont possible. Parmi ces méthodes on peut citer : La méthode des différences finies

#### 3.3.a Méthode des Différences Finis

Soit  $c(x)$ , une fonction à une variable  $x$ . Pour dériver l'équation de différence finie consiste en prend le développement en série de Taylor. Considérons les points de grille de la figure (3.1), pour le point 2 de la grille, situé milieu entre les points de grille 1 et 3 tels que:  $\Delta x = x_2 - x_1 = x_3 - x_2$  écrivons son développement de Taylor en un point 2 [48]:

$$c_1 = c_2 - \Delta x \left( \frac{dc}{dx} \right)_2 + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left( \frac{d^2c}{dx^2} \right)_2 - \dots \quad (3.22)$$

Et

$$c_3 = c_2 + \Delta x \left( \frac{dc}{dx} \right)_2 + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left( \frac{d^2c}{dx^2} \right)_2 + \dots \quad (3.23)$$

En tronquant la série juste après le troisième terme, et additionner et soustraire deux équations, nous obtenons:

$$\left(\frac{dc}{dx}\right)_2 = \frac{c_3 - c_1}{2\Delta x} \quad (3.24)$$

Et

$$\left(\frac{d^2c}{dx^2}\right)_2 = \frac{c_1 + c_3 - 2c_2}{(\Delta x)^2} \quad (3.25)$$

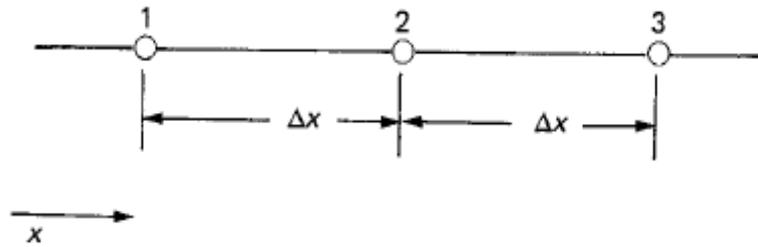


Fig. 3.1-les trois points de la grille successive utilisée pour développement de Taylor [47]

A partir des définitions de la dérivée par rapport à la variable x, nous en déduisons [47,48]:

$$\begin{cases} \frac{dc}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{c(x+h) - c(x-h)}{2h} = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h} + O(h^2) \\ \frac{dc}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{c(x+h) - c(x)}{h} = \frac{c_{i+1} - c_i}{h} + O(h) \\ \frac{dc}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{c(x) - c(x-h)}{h} = \frac{c_i - c_{i-1}}{h} + O(h) \end{cases} \quad (3.26)$$

La dérivée  $\frac{dc}{dx}$  est approchée par des différences finies d'ordre 1 symétrique, progressive et régressive respectivement.

De même, on obtient la dérivée seconde qui s'écrit [48]:

$$\frac{d^2c}{dx^2} = \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (3.27)$$

### 3.3.b Discrétisation de l'équation de la diffusion

La méthode des différences finies que nous allons appliquer va nous permettre de discrétiser les équations aux dérivées partielles (pde), c'est-à-dire, les remplacer par des équations algébriques équivalentes qu'on peut résoudre facilement par des méthodes numériques (méthodes directes: élimination de Gauss, Schmidt,... Méthodes indirectes ou itératives: itératives de Gauss et Seidel, itération de Jacobi...) [17].

L'espace de résolution numérique, domaine de diffusion, est déterminé par les épaisseurs réelles des films étudiés. Ce domaine est subdivisé en  $k$  tranches d'épaisseur  $\Delta x$ , et la diffusion s'effectue sur des petits intervalles de temps  $\Delta t$ .

Puisque les films étudiés ont été uniformément dopés en surface, la diffusion latérale suivant  $x$  et  $y$  est nulle parce qu'il n'y a pas de gradient de concentration dans ces directions. Dans ce cas, la diffusion ne s'effectue qu'en profondeur (suivant  $x$ ). En tenant compte de l'évolution de la diffusion en fonction du temps on obtiendra le maillage, formé par les droites  $x_i$  et  $t_n$ , comme indiqué sur la figure (3.2).

Le domaine d'étude ( $\Omega$ ), est défini dans  $[0, L] \times [0, T]$ , en découpant l'intervalle  $[0, L]$  à l'aide de  $n$  points et l'intervalle  $[0, T]$  à l'aide de  $m$  points intermédiaires tels que:

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_m = L \quad (3.28)$$

$$0 = t_1 < t_2 < \dots < t_m = T \quad (3.29)$$

Nous obtenons alors:  $\Delta x = L/n$  et  $\Delta t = T/m$

Avec :

$$x_i = i \cdot \Delta x \quad \text{pour } 1 < i < m \quad (3.30)$$

$$t_j = j \cdot \Delta t \quad \text{pour } 1 < j < n \quad (3.31)$$

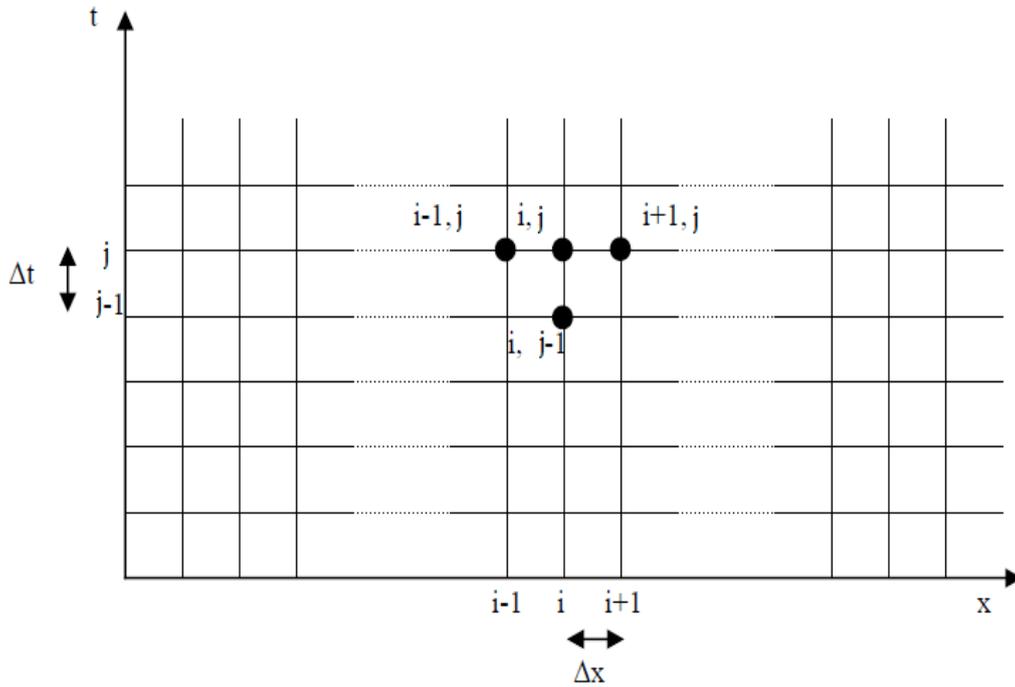


Fig. 3.2- Discrétisation du domaine de diffusion

### 3.3.c Résolution approchée de l'équation différentielle de diffusion

- la première loi de Fick s'écrit sous la forme générale suivant:

$$F = -D \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \quad (3.32)$$

En discrétisant cette loi, le flux devient:

$$F_j^i = -D_j^i \frac{c_j^i - c_{j-1}^{i-1}}{\Delta x} \quad (3.33)$$

La deuxième loi de Fick:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} = -\frac{\partial [-D \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}]}{\partial x} = \frac{\partial [D \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}]}{\partial x} \quad (3.34)$$

"C'est une équation différentielle aux dérivés partielles non linéaire".

D dépend en particulier de c, donc de x et du temps t.

La discrétisation la deuxième loi de Fick:

$$\frac{c_j^i - c_{j-1}^{i-1}}{\Delta t} = -\frac{F_j^{i+1} - F_j^i}{\Delta x} = \frac{F_j^{i+1} - F_j^i}{\Delta x} \quad (3.35)$$

$$\frac{c_j^i - c_{j-1}^i}{\Delta t} = \left[ -D_j^i \frac{c_j^i - c_{j-1}^{i-1}}{\Delta x} + D_j^{i+1} \frac{c_j^{i+1} - c_j^i}{\Delta x} \right] / \Delta x \quad (3.36)$$

On pose  $A_0 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$  et  $A_0 D_j^i = A_j^i$

D'où:

$$c_{j-1}^i = -A_j^i c_j^{i-1} + [1 + A_j^i + A_j^{i+1}] c_j^i - A_j^{i+1} c_j^{i+1} \quad (3.37)$$

**Condition aux limites:**

La condition de Neuman:

$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$  C'est-à-dire,  $c_j^0 = c_j^1$ . D'où en remplaçant dan l'équation (3.37)

$$c_{j-1}^1 = [1 + A_j^2] c_j^1 - A_j^2 c_j^2 \quad (3.38)$$

La condition de Neuman:

$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$  C'est-à-dire,  $c_j^n = c_j^{n+1}$  D'où en remplaçant dan l'équation (3.37)

$$c_{j-1}^n = [1 + A_j^n] c_j^n - A_j^n c_j^{n-1} \quad (3.39)$$

Ce système d'équations peut s'écrire sous la forme matricielle :

$$A \begin{pmatrix} c_j^1 \\ \vdots \\ c_j^i \\ \vdots \\ c_j^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{j-1}^1 \\ \vdots \\ c_{j-1}^i \\ \vdots \\ c_{j-1}^n \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Système d'équations représenté par  $A \times C_j = C_{j-1}$  où A est donnée par la matrice suivante :

Si au temps  $t=j.\Delta t$ , on connaît toutes les valeurs  $C_{j-1}^i$ , l'équation (3.37) permet de calculer les valeurs  $C_j^i$

$$A = \begin{bmatrix} (1+A_j^2) & (-A_j^2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (-A_j^2) & (1+A_j^2+A_j^3) & (-A_j^3) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (-A_j^i) & (1+A_j^i+A_j^{i+1}) & (-A_j^{i+1}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (-A_j^n) & (1+A_j^n) \end{bmatrix}$$

La matrice A du système d'équations est une matrice tri-diagonale, et pour la résoudre, nous avons utilisé la méthode directe (méthode d'élimination de Gauss), elle consiste à la triangularisation de la matrice A (annuler tous les éléments places sous la diagonal principale), une fois le système d'équations est devenu triangulaire, il est très facile a résoudre. Pour cela nous utilisons la méthode de "Back Substitution".

en utilisant la matrice augmentée  $[A C_{j-1}]$  nous avons:

$$E_{n-1}E_{n-2} \dots E_2E_1[A C_{j-1}] = \begin{bmatrix} U_1 & -A_j^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & K_{j-1}^1 \\ 0 & U_2 & -A_j^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & K_{j-1}^2 \\ 0 & 0 & U_3 & -A_j^4 & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_{i-1} & -A_j^i & 0 & 0 & K_j^i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_n & K_j^n \end{bmatrix}$$

Avec :

$$E_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{\mathbf{A}_j^2}{\mathbf{U}_1} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \ddots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{bmatrix}, E_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{\mathbf{A}_j^3}{\mathbf{U}_2} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \dots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{bmatrix}$$

Et avec:

$$E_{n-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ddots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \dots & \frac{\mathbf{A}_j^n}{\mathbf{U}_{n-1}} & \mathbf{1} \end{bmatrix}$$

D'ou:

$$\begin{cases} U_1 = 1 + A_j^2 \\ U_2 = (1 + A_j^2 + A_j^3) - (A_j^2)^2/U_1 \\ \vdots \\ U_i = (1 + A_j^i + A_j^{i+1}) - (A_j^i)^2/U_{i-1} \\ \vdots \\ U_n = (1 + A_j^n) - (A_j^n)^2/U_{n-1} \end{cases} \quad (3.41)$$

Et avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} K_{j-1}^1 = c_{j-1}^1 \\ K_{j-1}^2 = c_{j-1}^2 + \frac{K_{j-1}^1 A_j^2}{U_1} \\ \vdots \\ K_{j-1}^i = c_{j-1}^i + \frac{K_{j-1}^{i-1} A_j^i}{U_{i-1}} \\ \vdots \\ K_{j-1}^n = c_{j-1}^n + \frac{K_{j-1}^{n-1} A_j^n}{U_{n-1}} \end{array} \right. \quad (3.42)$$

Donc le système d'équations peut être écrit sous la forme suivante:

$$K_j^n = U_j c_j^i - A_j^{i+1} c_j^{i+1} \quad (3.43)$$

$$\begin{bmatrix} K_{j-1}^1 \\ K_{j-1}^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ K_{j-1}^i \\ \cdot \\ K_{j-1}^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 & -A_j^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_2 & -A_j^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_i - A_j^{i+1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_n \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_j^1 \\ c_j^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_j^i \\ \cdot \\ c_j^n \end{bmatrix}$$

On initialise à  $i=n$ , puis on décrémente  $i$  par pas de 1.on peut obtenir l'expression de  $c_j^n$  qui l'on utilise dans l'algorithme [49]:

$$c_j^i = (K_{j-1}^i + A_j^{i+1} c_j^{i+1})/U_i \quad (3.44)$$

$$c_j^n = K_{j-1}^n/U_n \quad (3.45)$$

Nous avons utilisé un critère de convergence basé sur le calcul de l'erreur sur tous Les nœuds du maillage, et comparé sa valeur absolue avec le degré de précision voulu  $\varepsilon$  :

$$\sum_{i=1}^n \left| \frac{(c_j(i))^p - (c_j(i))^{p-1}}{(c_j(i))^{p-1}} \right| < \varepsilon \quad (3.46)$$

$\varepsilon$ : Degré voulu de précision, de l'ordre de  $10^{-3}$ .

$(c_j(i))^p$ : Concentration au nœud  $i$  à l'itération  $p$

$(c_j(i))^{p-1}$ : Concentration au nœud  $i$  à l'itération  $(p-1)$ .

Nous décrivons ci-après l'algorithme de résolution : de l'équation (3.32) « équation aux dérivées partielles non linéaire de type parabolique ».

En utilisant la méthode des différences finies, avec des conditions aux limites et initiales bien spécifiées

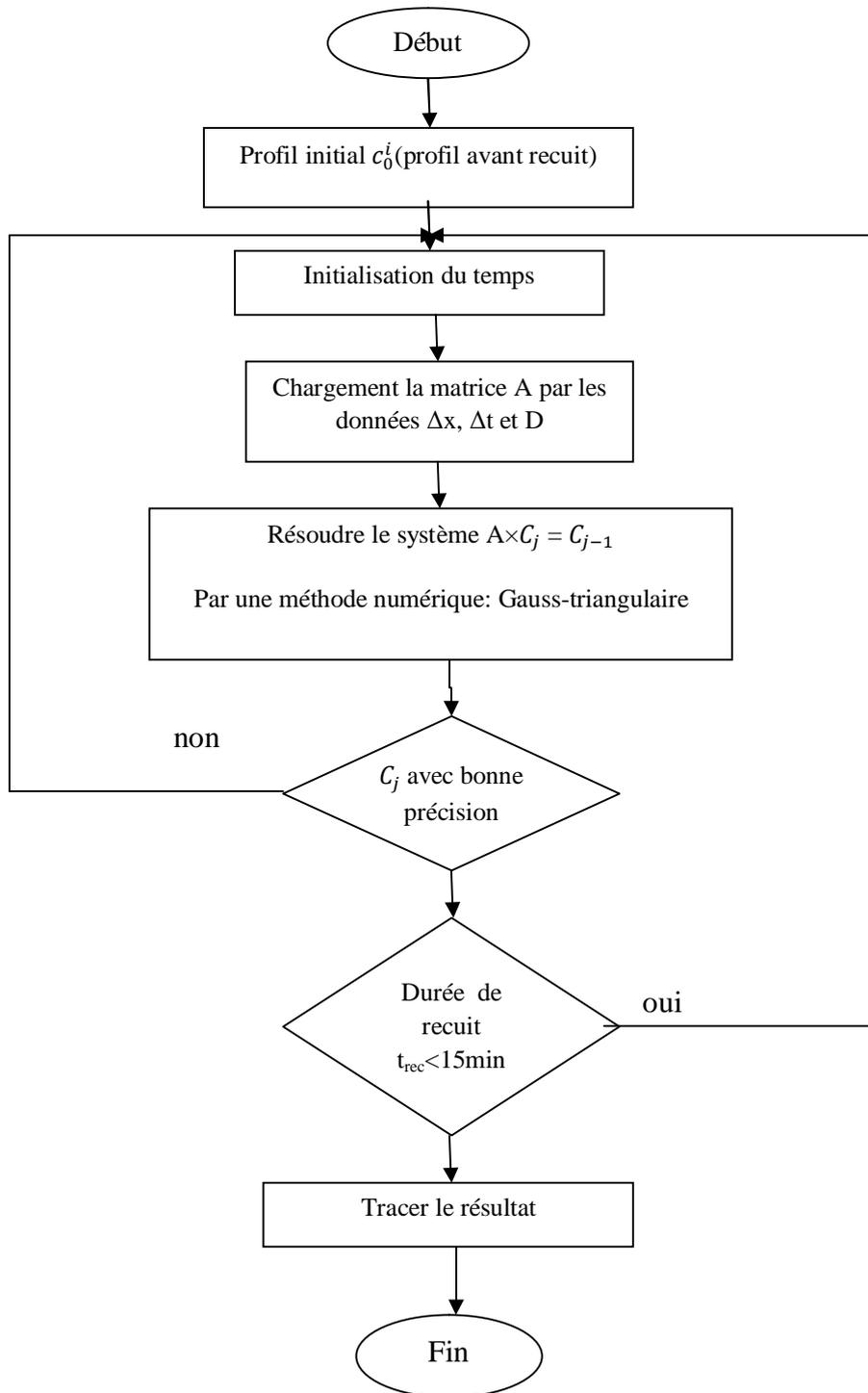


Fig. 3.3-Organigrammes concernant la diffusion de bore dans une structure poly-silicium.

### 3.4 Résultats et Comparaison des profils (Silvaco /Modèles)

#### 3.4.1 Résultat du facteur d'accélération

Le résultant représenté dans la figure (3.4) montré la variation du rapport  $D/D_i$  (facteur d'accélération) en fonction de la concentration du dopant, pour différentes températures de recuit thermique. Nous tenons compte, dans ce cas, de l'effet du champ électrique interne associé à celui des lacunes et cluster,

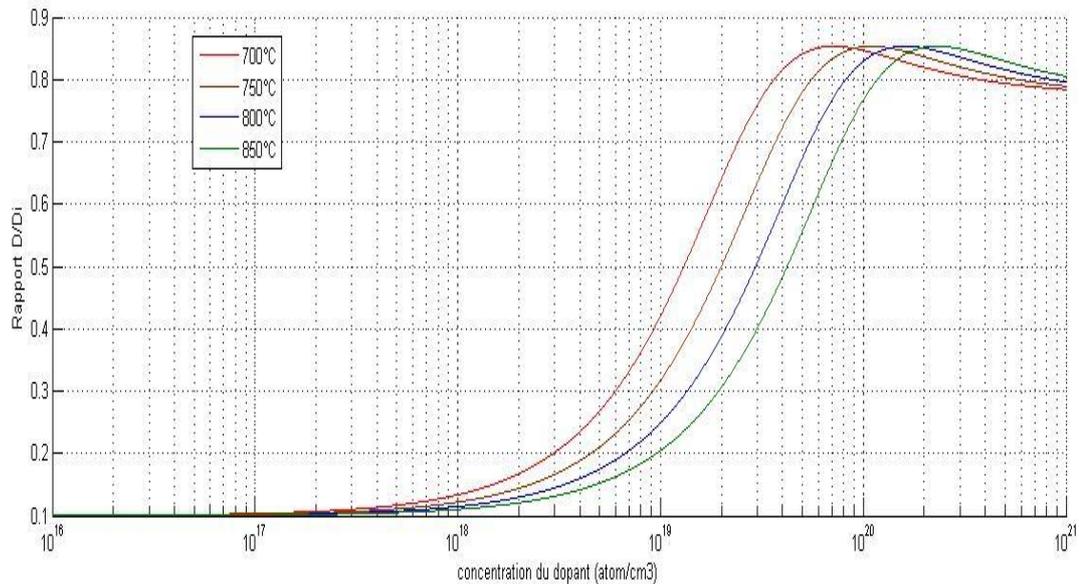


Fig. 3.4-Effet du champ électrique interne sur la diffusivité du bore dans le silicium.

Les résultats obtenus sont calculés pour les paramètres ci-dessous:

$$E_a = 3.75\text{eV}, D_{poly} = 150D_{mono}, D_{mono} = 7.87\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}, \beta=0.11, \alpha=0.65 \text{ et } g=0.1.$$

Sont des paramètres utilisés dans le cadre d'étude d'un polysilicium fortement dopé bore ajusté à un profil SIMS à une dimension [46,47].

#### 3.4.2 Comparaison des profils (Silvaco /Modèles)

Nous commençons notre analyse et la comparaison entre le modèle et la simulation (Silvaco) modèle Pearson IV.

De film mince de silicium polycristallin de l'épaisseur 335 nm (P-type,  $\langle 111 \rangle$ ,  $10^{15}$  atom/cm<sup>3</sup>) et implantés au bore avec une énergie de 15keV et une dose de  $4 \cdot 10^{15}$  atom/cm<sup>2</sup>

### 3.4.2.a Profil du bore avant recuit thermique

La figure (3.5) montre l'allure de la concentration du bore en fonction de la profondeur du film a calculé à partir de modèle proposer. Nous pouvons constater que la profondeur maximale de pénétration du bore avant recuit thermique est de l'ordre de 0,16µm représentant environ 51% de l'épaisseur du film (environ 335nm).La concentration initiale prise dans le modèle. Elle s'exprime sous la forme d'une gaussienne

La figure (3.6) représente la simulation sous Silvaco de la distribution du bore en fonction de la profondeur avant recuit thermique.

Le Tableau (3.1) résumé le résultat de comparaison (Silvaco /Modèles):

	SILVACO	Modèle
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	6.87. 10 <sup>20</sup>	7.27. 10 <sup>20</sup>
Max. diffusion en profondeur X <sub>j</sub> à (10 <sup>16</sup> at.cm <sup>-3</sup> ). (µm)	0.157	0.158

Le Tableau (3.1) résume le résultat de comparaison (Silvaco /Modèles)

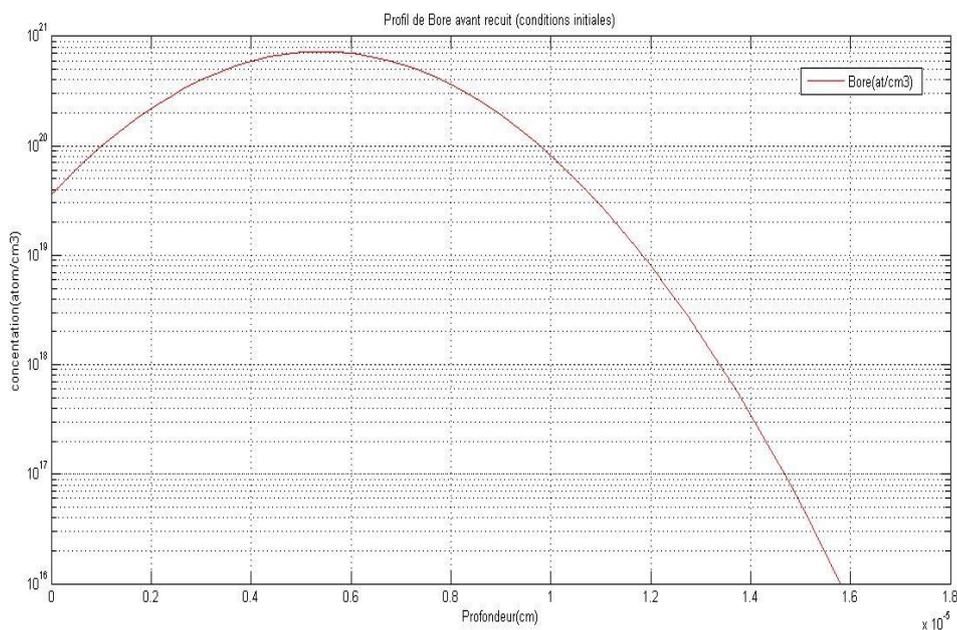


Fig. 3.5-profil calculé de la distribution du bore avant recuit (condition initiale) Dose4. 10<sup>15</sup> atom/cm<sup>2</sup> et E=15KeV

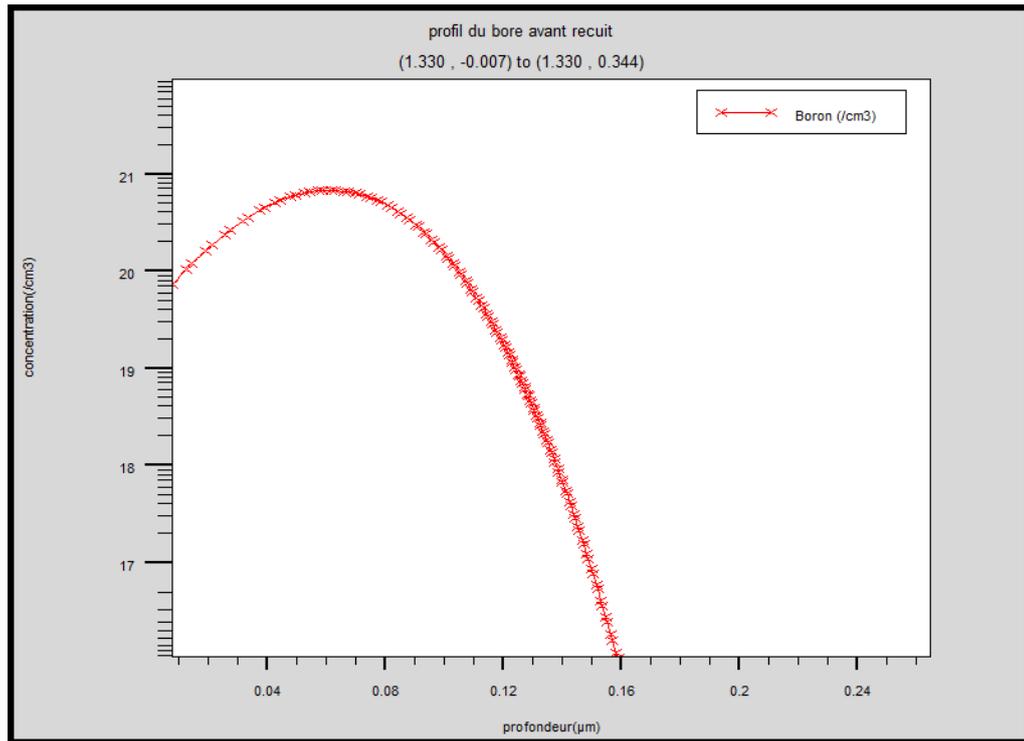


Fig. 3.6-profil de la distribution du bore avant recuit (condition initiale) Dose= $4. 10^{15} \text{ atom/cm}^2$  ,  $E=15\text{KeV}$ , (Simulation SILVACO)

### 3.4.2.b Effet de la durée de recuit

Le domaine d'étude ( $\Omega$ ), est défini dans  $[0, L] \times [0, t_{re}]$ , avec L représenté l'épaisseur de filme polysilicium  $L=0.335(\mu\text{m})$ ,  $t_{re}$ : temps de recuit.

Les figures (3.7) et (3.8) montrent la superposition des profils donnant la variation de la concentration du bore en fonction de la profondeur des films, pour différentes durées de recuit à  $700^\circ\text{C}$ . La profondeur de diffusion du bore augmente sensiblement avec la durée de recuit thermique. D'autre part, un épaulement des profils, situé au-dessous de la concentration  $1.2 \times 10^{19}(\text{atom. cm}^{-3})$

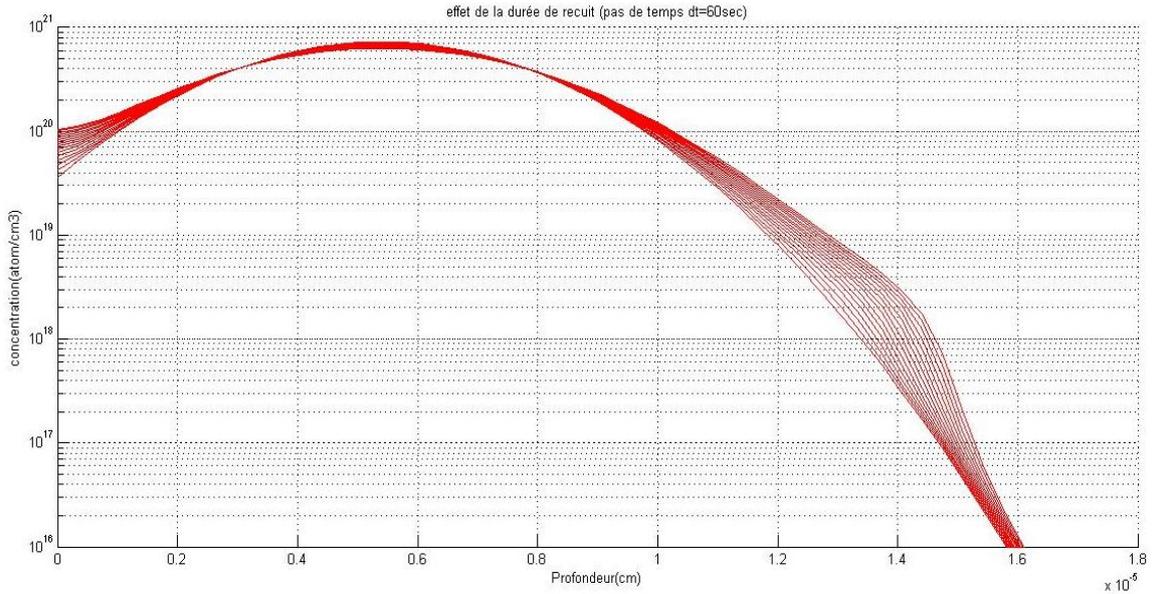


Fig. 3.7- Profils calcule du bore avant et après recuit pour différentes durée de recuit  $t = [0, 15\text{min}]$ , Température de recuit  $T=700^\circ\text{C}$  et Dose  $=4.10^{15}\text{at. cm}^{-2}$ ,  $E=15\text{KeV}$

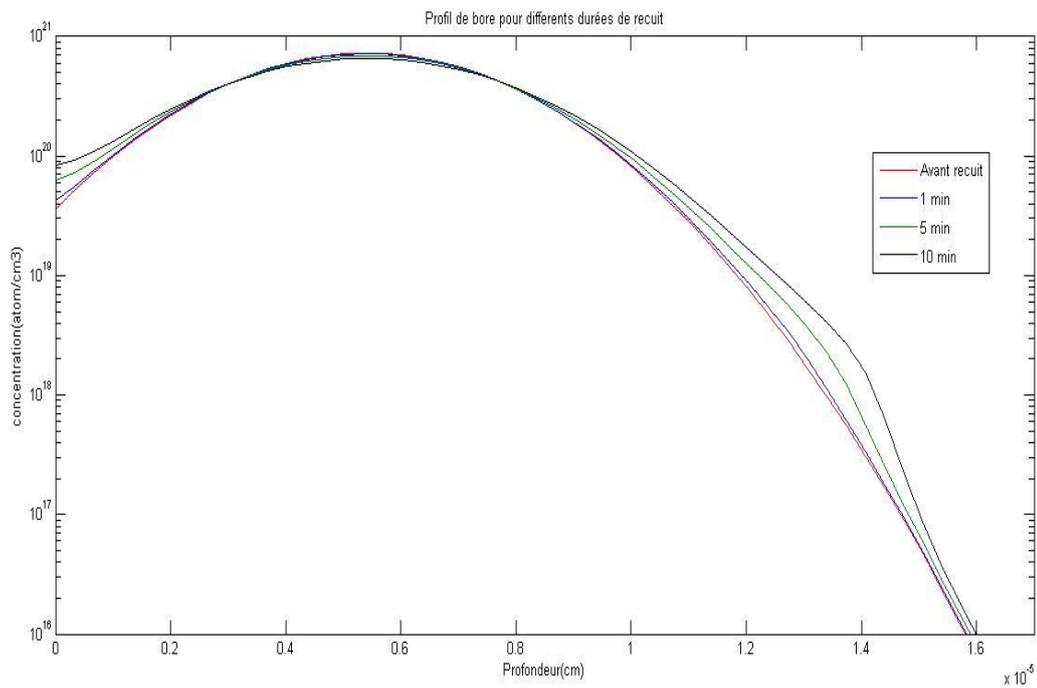


Fig. 3.8- Profils calcule du bore avant et après recuit pour différentes durée de recuit  $t=1\text{min}$ ,  $t=5\text{min}$  et  $t=10\text{min}$ , Température de recuit  $T=700^\circ\text{C}$  et Dose  $=4.10^{15}\text{at. cm}^{-2}$ ,  $E=15\text{KeV}$ (Modélisation par Matlab)

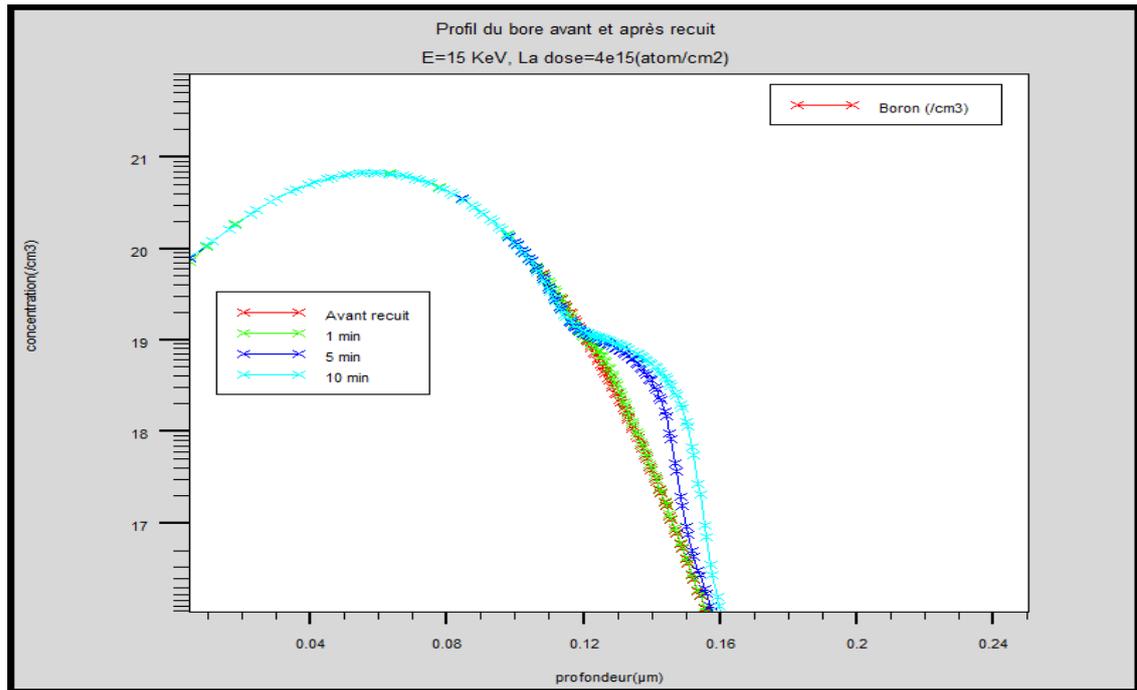


Fig. 3.9- Profils de diffusion de Bore (Dose= $4.10^{15}$  atom.cm<sup>-2</sup>, E=15KeV) après recuits pour les temps 1min , 5min et 10min (simulation par SILVACO)

Le Tableau (3.2) résumé le résultat de comparaison (Silvaco /Modèle):

	Le temps de recuit	0sec	1min	5min	10 min
Concentration. max (at.cm <sup>-3</sup> )	Modèle	$7.27. 10^{20}$	$7.19x10^{20}$	$6.90. 10^{20}$	$6.58. 10^{20}$
	SILVACO	$6.78x10^{20}$	$6.78x10^{20}$	$6.78x10^{20}$	$6.78x10^{20}$
Max. diffusion en profondeurX <sub>j</sub> à (10 <sup>16</sup> at.cm <sup>-3</sup> ). (μm)	Modèle	0.158	0.158	0.159	0.160
	SILVACO	0.157	0.157	0.158	0.160

Tableau. 3.2-le résultat de comparaison (Silvaco /Modèle)

La comparaison entre notre modèle proposé figure (3.8) et les profils de simulation sous le logiciel SILVACO figure (3.9) sont très proches.

### 3.4.2.c Effet de la température de recuit

Le bore est implanté à une dose de  $4 \times 10^{15} \text{at. cm}^{-2}$  avec une énergie d'implantation 15KeV, nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de températures de 700, 750 et 850°C à la durée de recuit de 7 min

Les figures (3.10), (3.12) et (3.14) montrent le tracé des courbes théoriques simulées via ce modèle, pour valider nos modèles utilisés, nous les avons comparés à ceux du logiciel SILVACO qui sont présentés respectivement dans les figures (3,11), (3.13) et (3.15).

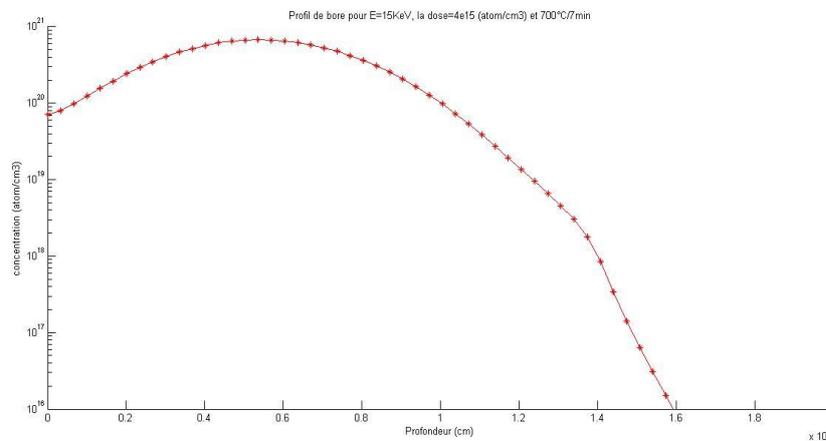


Fig. 3.10- *profils calcule du bore après recuit pour 700°C/7min et la dose  $4 \times 10^{15} \text{at. cm}^{-2}$*

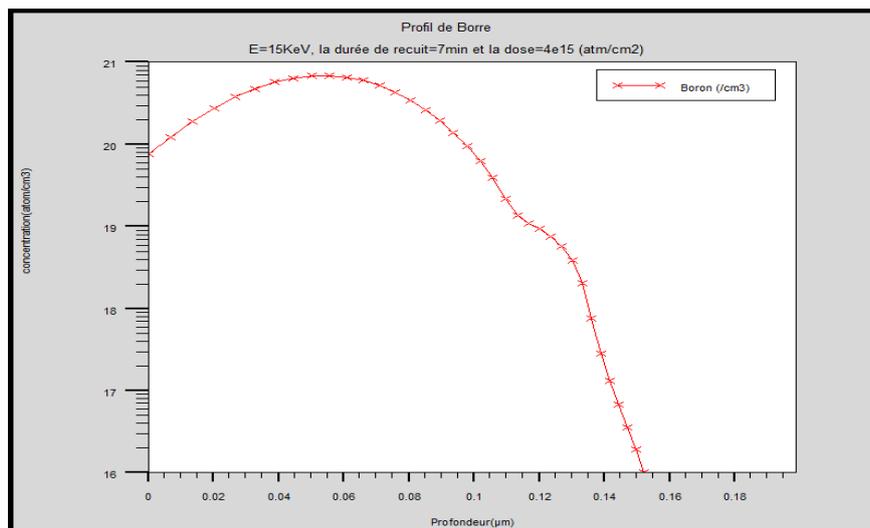


Fig. 3.11- *profils du bore après recuit pour 700°C/7min, la dose  $4 \times 10^{15} \text{at. cm}^{-2}$  et  $E=15\text{KeV}$  (simulation par SILVACO)*

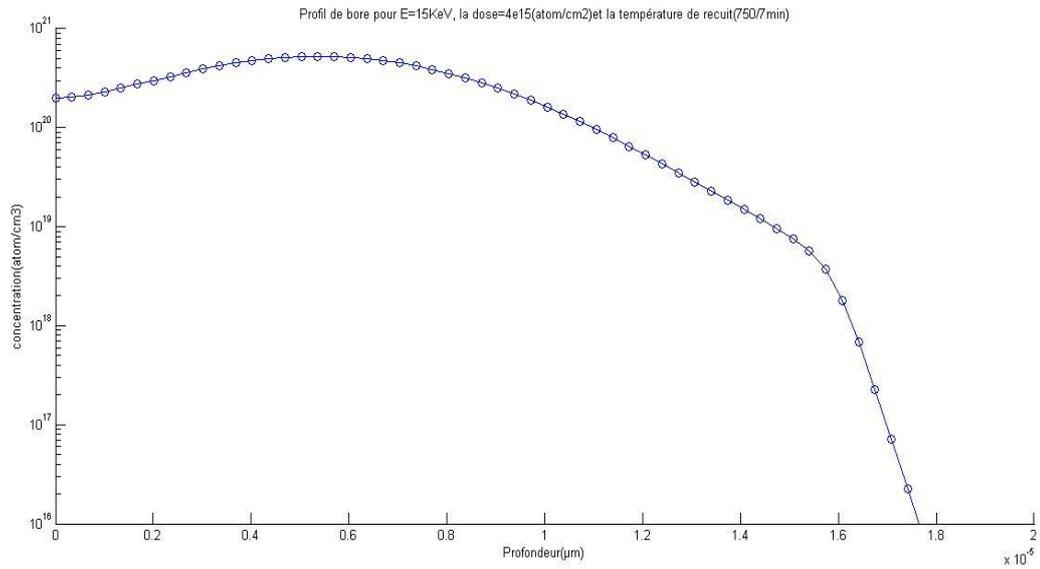


Fig. 3.12- *profils calcule du bore après recuit pour 750°C/7min et la dose  $4 \times 10^{15} \text{ at. cm}^{-2}$*

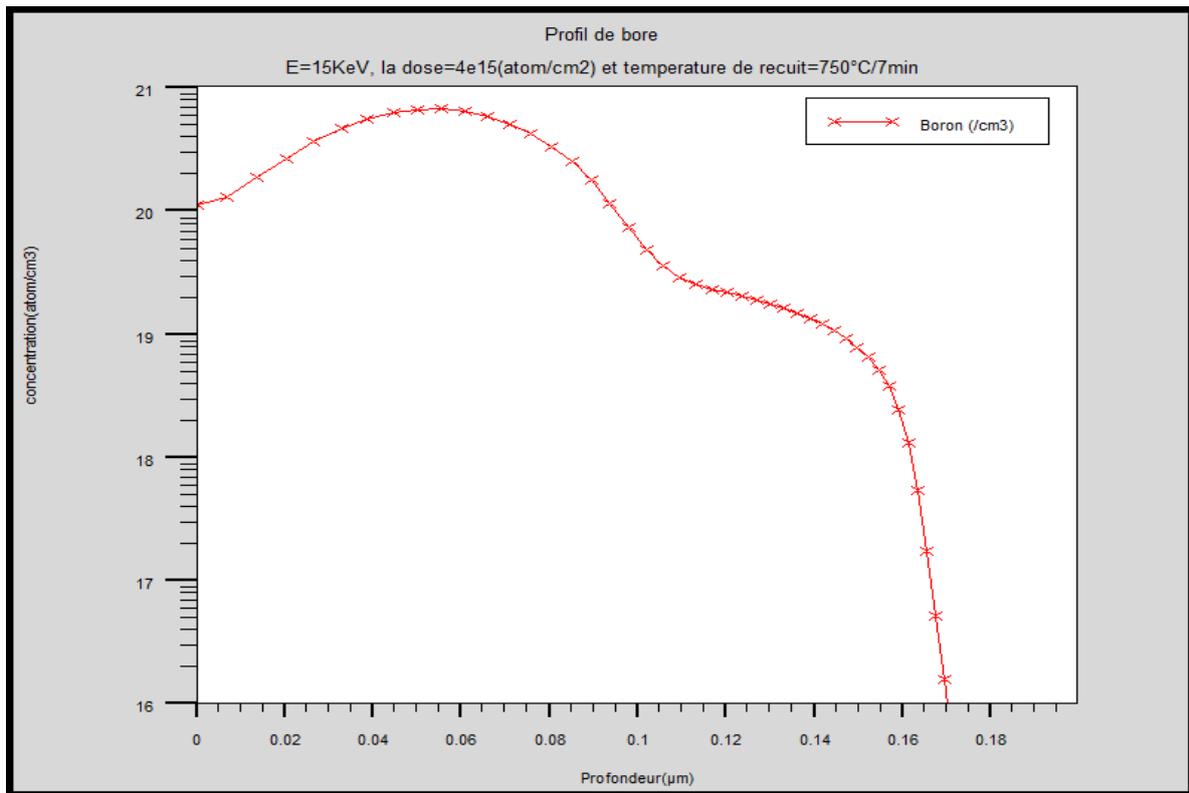


Fig. 3.13- *profils du bore après recuit pour 750°C/7min, la dose  $4 \times 10^{15} \text{ at. cm}^{-2}$  et  $E=15\text{KeV}$  (simulation par SILVACO)*

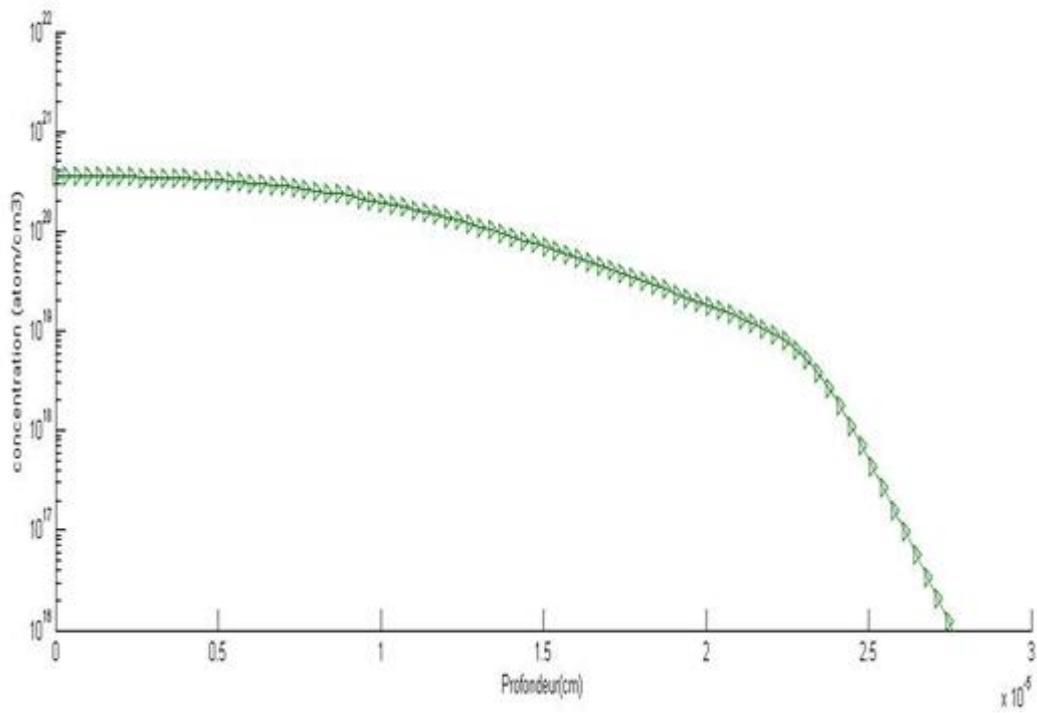


Fig. 3.14- *profils calcule du bore après recuit pour 800°C/7min et la dose 4x10<sup>15</sup> at. cm<sup>-2</sup>*

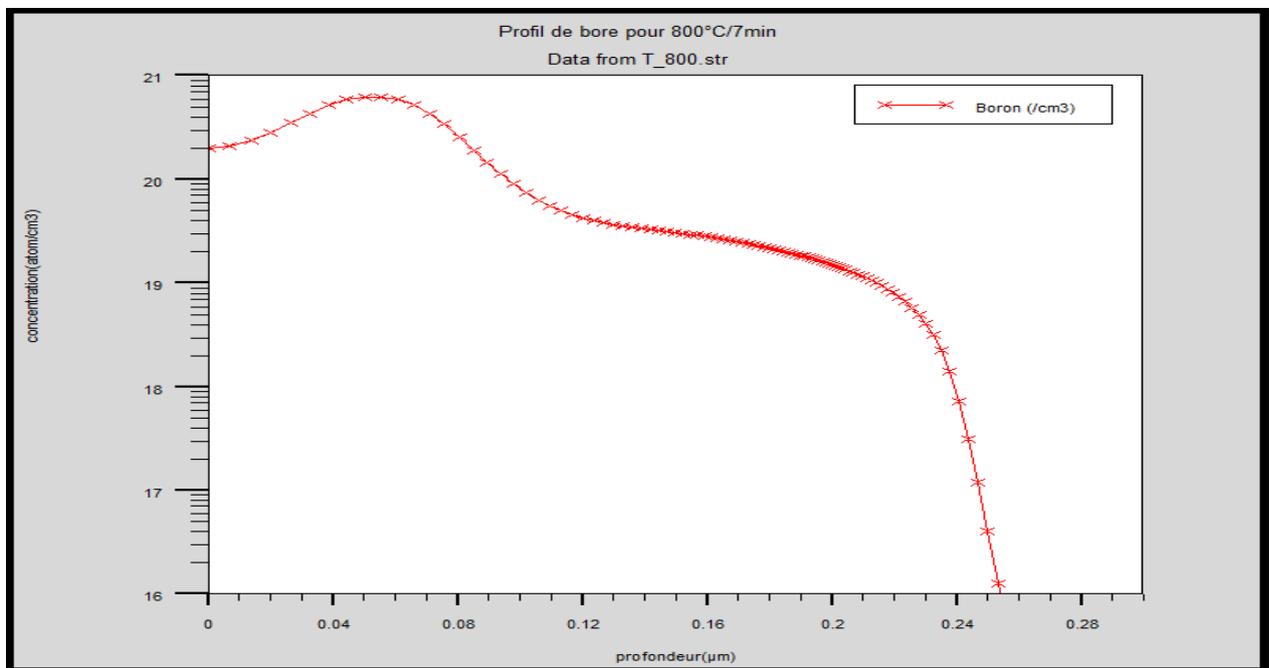


Fig. 3.15- *profils du bore après recuit pour 800°C/7min, la dose 4x10<sup>15</sup> at. cm<sup>-2</sup> et E=15KeV (simulation par SILVACO)*

Le Tableau (3.3) résumé le résultat de comparaison (Silvaco /Modèle):

	<b>Les températures de recuit (°C)</b>	<b>700</b>	<b>750</b>	<b>800</b>
<b>Concentration. max (at.cm<sup>-3</sup>)</b>	Modèle	6.77. 10 <sup>20</sup>	5.28x10 <sup>20</sup>	3.59. 10 <sup>20</sup>
	SILVACO	6.79x10 <sup>20</sup>	6.71x10 <sup>20</sup>	6.15x10 <sup>20</sup>
<b>Max. diffusion en profondeurX<sub>j</sub> à (10<sup>16</sup>at.cm<sup>-3</sup>). (µm)</b>	Modèle	0.159	0.175	0.276
	SILVACO	0.152	0.171	0.254

Tableau. 3.2-le résultat de comparaison (Silvaco /Modèle)

### 3.5 CONCLUSION

Au cours de ce troisième chapitre, nous avons exposé l'équation de Fick qui est le point de départ de tout essai de modélisation de diffusion, on a développé un modèle théorique de la diffusion du bore dans les films polysilicium fortement dopés. Le modèle tient compte du mécanisme lacunaire de diffusion en lui associant des paramètres liés aux effets des fortes concentrations, tels que la formation des clusters par le piégeage et le dépassement de la solubilité solide limite.

Nous avons présenté la résolution numérique unidimensionnelle du modèle proposé en utilisant la méthode des différences finies. Cette méthode est basée sur la discrétisation du domaine et en suivant un algorithme bien défini, on arrive à la transformation les équations différentielle par une forme analytique approchée conduisant à une résolution simultanée d'un système d'équations linéaires, rétablis sous forme de matrices tridiagonales, par la méthode choisie de Gauss,

Nous avons obtenu des profils de la redistribution du bore avant et après recuit, avec la variation de la durée de recuit, les modèles proposés pour la simulation de la diffusion du bore dans le polysilicium selon le cas de dopage de prédepot ou par implantation sont très proche des résultats obtenus sous SILVACO. L'effet d'épaulement n'a pas été observé dans les profils du modèle, cela est dû à certains phénomènes physiques ont été négligés.

# ***CONCLUSION GENERALE***

## CONCLUSION GENERALE

Au cours de ces dernières années, l'élaboration de modèles physiques dans le domaine de la fabrication de composants micro-électroniques est devenue la clé du développement et de l'amélioration des outils de simulations technologiques. Ces modèles doivent décrire l'ensemble des étapes de fabrication des composants électriques. Les structures réalisées par les techniques de diffusion et de l'implantation ionique ont des caractéristiques bien définies, les deux procédés sont complémentaires, mais l'implantation ionique des dopants joue un rôle privilégié considérant la tendance à la miniaturisation des circuits. L'objectif de ce mémoire est l'étude de l'implantation ionique des dopants de type p et de type n dans des structures MOS.

Après avoir rappelé la théorie de la diffusion par les équations de Fick et les défauts ponctuels intrinsèques présents dans le réseau cristallin du silicium ainsi que le recuit thermique sur l'implantation ionique, nous avons procédé à la simulation.

L'outil de simulation utilisé dans ce travail, le logiciel ATHENA, appartient à la famille de logiciels de la société SILVACO disponible au sein de notre salle blanche. L'originalité des outils de simulation, nous a permis la simulation du profil SIMS sous SILVACO en utilisant le modèle de Pearson IV

Les différents résultats obtenus par SILVACO à savoir les profils de dopage du bore et de l'arsenic en étudiant l'effet de la dose implantée ainsi que la durée et la température du traitement thermique de la structure sur la profondeur de pénétration. Ceci permet de prédire et reproduire la diffusion des dopants ou profils de dopage dans une structure bien déterminée afin d'optimiser et améliorer les composants électroniques fabriqués à base de ces structures.

En se basant sur les résultats de simulation trouvés dans le chapitre 2, nous avons proposé un modèle théorique de la diffusion des dopants dans le silicium polycristallin. Les résultats obtenus sont en bonne concordance avec ceux issus de la littérature.

Enfin, parmi les perspectives envisagées, l'ensemble des résultats obtenus pourrait être enrichi et complété

Une extension de ce travail consistera en une poursuite de l'étude par simulation des profils de concentration en abordant différents aspects, dont principalement la miniaturisation des composants CMOS qui conduit à la réduction de la largeur de grille en polysilicium (en 2009 étant en général de 32 nm). Cette réduction de la largeur de grille doit nécessairement s'accompagner d'une réduction de profondeurs des jonctions source/drain en (on parle alors de

jonctions "ultraminces"). A cause de cette miniaturisation, la conductivité électrique dans ces jonctions diminue. Pour améliorer cette propriété électrique, des forts dopages en bore de la jonction p+n sont nécessaires. La concentration en bore dans le silicium peut alors dépasser la limite de solubilité. Il est préférable d'étudier ce point critique en se basant sur le modèle proposé.

# **Bibliographie**

### Bibliographie:

- [1] A. BEREZINE, O. MOTCHALKINA, " *technologie et construction des circuits intégrés*", Edition MIR, Moscou, (1983).
- [2] Francis. LEVY, " *Physique et technologie des semi-conducteurs*" Traité des Matériaux(1995).
- [3] Frédéric. BOUCARD, " *Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonctions fines*". Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur – Strasbourg I, (2003).
- [4] El Mahdi BAZIZ, " *Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, SOI et SiGe pour les MOS avancées*", Thèse de doctorat, Université Toulouse, (2010).
- [5] A.D. BUONAQUISTI, W. CARTER AND P.H. HOLLOWAY, " *Diffusion characteristics of boron and phosphorus in polycrystalline silicon*" . Thin Solid Films, 100 (1983), p. 235.
- [6] R. B. FAIR, " *Impurity Doping Processes in Silicon*". Ed. F. F. Y. Wang, North-Holland, Amsterdam, (1981)
- [7] M. K. HATALIS AND D. W. GREVE, " *Large grain polycrystalline silicon by low-temperature annealing of low-pressure chemical vapor deposited amorphous silicon films*". J. Appl. Phys. 63, (7), (1991), p. 2260.
- [8] A. CHIANG, T. Y. HUANG, I. W. WU, M. H. ZARAYCHI AND M. FUSE, " *Effect of silicon implantation and processing temperature on performance of polycrystalline silicon thin-film transistors fabricated from low pressure chemical vapor deposited silicon films*". Mat. Res. Soc. Symp, (1988), p.106.
- [9] M. Miyake and S. Aoyama, " *Transient enhanced diffusion of ion-implanted boron in silicon during rapid thermal annealing*". J. Appl. Phys., 63 (5), p. 1754
- [10] H. DECHESNER. " *Thin Films Depth Profile Analysis*". J. Appl. Phys, Vol. 37, Springer Verlag, Berlin, (1984).
- [11] P. A. STLK, H.-J. GOSSMANN, D. J. EAGLESHAM, D. C. JACOBSON, C. S. RAFFERTY, G. H. GILMER, M. JARAIZ, J. M. POATE, H. S. LUFTMAN and T. E.HAYNES, " *Physical mechanisms of transient enhanced dopant diffusion in ion-implanted silicon*". J. Appl. Phys., 81 (9), p. 6031 (1997).

- [12] R. MAHAMDI, F. MANSOUR, E. SCHEID, P. TEMPLE-BOYER, AND L. JALABERT," *Boron diffusion and activation during heat treatment in heavily doped polysilicon thin films for P<sup>+</sup> metal-oxide-semiconductor transistors gates*". Jpn. J. off Appl. Phys, Vol. 40, (2001), p. 6723.
- [13] N. W. ASHCROFT et N. D. MERMIN." *Solid state physics, Saunders College Publishing*", 1976.
- [14] S.M. SZE, Kwok K .Ng " *Physics of Semiconductor Devices*". 3emes Edition, Wiley Interscience (2007).
- [15] Pierre GUIRALDENQ," *Diffusion dans les métaux*", Technique de l'ingénieur, m55, 10/04/1994.
- [16] J. CRANCK, "*The mathematics of diffusion*", 2nd edition, Clarendon Press, Oxford (1975).
- [17] Fouad Okba, "*contribution à l'étude de la croissance des cavités d'hydrogène dans les semi conducteurs*", Thèse Doctorat en sciences, université Sétif, (2011).
- [18] Nicolas RODRIGUEZ, "*Diffusion des dopants dans les dispositifs de la microelectronique:Co-diffusion de l'arsenic et du phosphore dans le silicium monocristallin, études unidimensionnelle et bidimensionnelle*". Thèse de doctorat, Université Paul Cézanne, 21 octobre 2008.
- [19] Jean PHILIBERT, "*Atom movements. Diffusion and mass transport in solids*", Ed. de physique, Les Ulis (1991).
- [20] Helmut MEHRER, "*Diffusion in Solids*", Ed. Springer. Series in solid state science 155, (2007).
- [21] Henry Mathieu, "*Physique des semiconducteurs et des Composants électroniques*", 4ème Edition, (1998)
- [22] P.M. FAHEY, P, B. GRIFFIN, and J. D. PLUMMER," *Point defects and dopant diffusion in silicon*". The American physical Society, 2 April 1989
- [23] A. Pakfar, "*Modélisation de la diffusion des dopants dans les alliages SiGe et SiGeC*", thèse de doctorat , présenté à Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (2003).
- [24] M. ORLOWSKI, "*Unified model for impurity diffusion in silicon*". Appl, Phys. Lett, 53 (14), 1323, (1988)
- [25] 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).
- [26] Fayçal. AYAD," *Etude de la neutralisation des impuretés métalliques par gettering extrinsèque dans le silicium*", Thèse de doctorat, Université de Constantine – Département d'électronique

- [27] S.M. SZE. "*Fundamental of semiconductor fabrication*", (2004)
- [28] **A.S. GROVE**, "*Physics and Technology of Semiconductor Devices*", p. 63, Wiley, New York
- [29] F. ROUGIEUX, D. MACDONALD, K. R. MCINOSH and A. CUEVAS, " *Oxidation-induced inversion layer in compensated P-type silicon*". 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Hamburg, Germany, 21-25 September 2009.
- [30] S. DUENAS, E. CASTANC, L. ENRIQUEZ, J. BARBOLLA, J. MONTSERRAT and E. LORA-TAMAYO, " *Characterization of the damage induced in boron-implanted and RTA annealed silicon by the capacitance-voltage transient technique*". IOPscience, 1637-1648, (1994).
- [31] Claude CHABROL, "Implantation ionique", Techniques de l'ingénieur, m1219, (1989).
- [32] Rachida NOURI, "*Etude par spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford de l'implantation ionique de Sb<sup>+</sup> dans Si. Effet de l'orientation du détecteur sur les spectres obtenus*", Thèse Magister en Physique, Université de Constantine, Algérie, (2010).
- [33] G J PHELPS," *Dopant ion implantation simulations in 4H-Silicon Carbide*", IOPscience, 1139–1146, (2004).
- [34] D. PLUMMER, D. DEAL, B. GRIFFIN,"*Silicon VLSI technology, Fundamentals, Practice and Modeling*", Prentice Hall, (2000).
- [35] Fouzia ABBAS, "*Synthèse de nanocristaux du composé semi-conducteur ZnTe dans SiO<sub>2</sub> par implantation ionique*", Mémoire Magister, Université de Constantine, Algérie, (2009)
- [36] <http://personal.cityu.edu.hk/~appkchu/AP4120/9.PDF>
- [37] 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 Doctorat, Université de Constantine, (2008).
- [38] <http://www.ies.univ-montp2.fr/~boch/doc/TP%20SILVACO6.pdf>
- [39] SILVACO International. (2010). *ATHENA User's Manual*. Vol. 1–2.
- [40] Manuel d'utilisation de Silvaco, VWF Interactive Tools, Volume 2, (1998).
- [41] Djicknoum DIOUF, " *Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structure interdigitée en face arrière*", Thèse de doctorat, Université Paris-Sud11, (15 Juin 2010).
- [42] D. ASHWORTH, R. OVEN and B. MUNDIN," *Representation of ion implantation profiles by Pearson frequency distribution curves*", IOPscience, 870-876, (1989).

- [43] F. JAHANSHAH, K.SOPIAN, H.ABDULLAH, I.AHMAD, M. Y. OTHMAN, S. H. ZAIDI, " *Investigation On Ion Implantation Models Impact On I-V Curve And Thin Film Solar Cell Efficiency*", Proceedings of the 7th WSEAS International Conference on Wavelet Analysis & Multirate Systems, Arcachon, France, October 13-15, (2007).
- [44] Kunihiro SUZUKI, " *Analysis of ion implantation profiles for accurate Process/Device simulation: ion implantation profile database based on tail function*", Fujitsu Sci. Tech. J., Vol 46, No 3, pp 307-317, (July 2010).
- [45] Bertrand PELLETIER, " *Modélisation et simulation numérique de l'exodiffusion du bore dans les oxydes encapsulés des technologies CMOS déca-nanométriques*", Thèse de Doctorat, Université de Provence Aix-Marseille1, (juin 2011).
- [46] R. MAHAMDI " *Etude de la redistribution et de l'activation - après traitement thermique - des dopants dans des films Si LPCVD dopés bore et Codopés bore-azote à de fortes concentrations*". Thèse de Doctorat d'Etat en électronique option Composants électroniques. Université Mentouri-Constantine, (juin 2003).
- [47] V. SUHAS. PATANKAR, " *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*" MCGRAW-HILL BOOK COMPANY, (1980).
- [48] K. W. MORTON. " *Numerical Solution of Partial Differential Equations*", Cambridge University Press 2005
- [49] ROBERT E. WHITE, " *Computational Mathematics*", Chapman and Hall/CRC, (2003).

# *Etude et simulation de l'implantation ionique des dopants dans des structures MOS*

## **Résumé**

Les performances des dispositifs sont étroitement liées à leurs méthodes de fabrication et sont fortement dépendantes des défauts qui sont associés aux processus technologiques (dépôt, implantation ionique, diffusion,...)

Ce travail consiste à étudier les phénomènes physiques responsables de la diffusion et de l'implantation de dopants, la compréhension physique des phénomènes est nettement améliorée grâce aux outils de modélisation. La simulation sous TCAD-SILVACO permettent aujourd'hui et grâce des modèles physiques de plus en plus sophistiqués de reproduire et prédire des profils de dopage. Cependant, la modélisation doit aussi faire face à la complexité croissante des mécanismes physiques liés à la miniaturisation.

Dans ce travail nous avons étudié un procédé technologique de la fabrication de dispositifs en silicium appelé implantation ionique voir comment se fait la distribution des atomes implantés sur la profondeur en variant les paramètres de la dose, de l'énergie d'implantation, la température et la durée de recuit thermique.

Nous avons élaboré un modèle de diffusion de bore dans polysilicium bien adapté aux effets des fortes concentrations en dopant, ce modèle tient compte du mécanisme lacunaire de diffusion, qui permet d'expliquer les paramètres influant sur la diffusion de bore dans polysilicium, le modèle a été comparé avec ceux issus par simulation sous SILVACO.

**Mots Clés:** polysilicium, dopants, diffusion, implantation, SILVACO.