

THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du
Doctorat en Sciences

Spécialité : Optique et Mécanique de Précision

Par

OKBA Fouad

Contribution à l'étude de la croissance des cavités
d'hydrogène dans les semi conducteurs

Soutenue le : 12 / 05 / 2011

Devant la commission d'examen :

Louahdi Rachid	Professeur	Université de Sétif	Président
Merabet Abdelali	Professeur	Université de Sétif	Rapporteur
Roumili Abdelkrim	Professeur	Université de Sétif	Examineur
Benarioua Younes	Professeur	Université de M'sila	Examineur
Boubetra Djamel	Maître de conférences	Université de B. B. A.	Examineur
Bouزيد Abderezak	Maître de conférences	Université de B. B. A.	Examineur

TABLE DES MATIERES

Introduction générale.....	1
Chapitre I Aspect physique de la diffusion	
I-1 Introduction.....	3
I-2 Equation de diffusion.....	4
I-2-1 Première équation de Fick.....	4
I-2-2 Deuxième équation de Fick.....	5
I-3 Solution de l'équation de diffusion.....	7
I-3-1 Diffusion à partir d'une source d'impureté limitée.....	7
I-3-1-2 Couche mince sandwich.....	7
I-3-1-2 Couche mince superficielle.....	8
I-3-2 Diffusion à partir d'une source d'impureté illimitée.....	9
I-4 Effet de la température sur le coefficient de diffusion.....	11
I-5 Mécanisme de diffusion.....	12
Chapitre II Diffusion et codiffusion de l'arsenic et du bore dans le monosilicium	
II-1 Introduction.....	14
II-2 Le recuit thermique rapide (RTA).....	14
II-3 Diffusion et codiffusion de l'arsenic et du bore dans le monosilicium.....	18
II-3-1 Procédures expérimentales.....	18
II-3-2 Diffusion simple de l'arsenic et du bore.....	19
II-3-2-1 Diffusion de l'arsenic.....	19
II-3-2-2 Diffusion du bore.....	20
II-3-3 Codiffusion de l'arsenic et du bore.....	22
II-3-4 Comparaisons entre diffusion simple et codiffusion.....	24

Chapitre III Modélisation de la diffusion et de la codiffusion

III-1 Introduction.....	29
III-2 Calcul du flux et d'effet du champ électrique interne.....	30
III-3 Influence des lacunes sur le coefficient de diffusion.....	36
III-4 La codiffusion de l'arsenic et du bore.....	41
III-5 Méthodes numériques de résolution des systèmes d'équation de diffusion.....	42
III-6 Modélisation.....	46
III-6-1 Modélisation de la diffusion simple.....	47
III-6-2 Modélisation de la codiffusion.....	51
III-7 Algorithme et structure du programme.....	58
III-7-1 Détermination du pas de temps.....	58
III-7-2 Détermination du pas d'espace.....	58
III-7-3 Structure générale du programme.....	58
1- Procédure diffusion.....	59
2- Procédure diffusivité.....	59
3- Procédure importation des profils SIMS.....	59
4- Procédure importation températures.....	59
5- Procédure d'exportation des résultats.....	60
III-7-4 Les variables du programme.....	60
III-7-5 Un exemple d'exécution du simulateur.....	60

Chapitre IV Simulation et résultats

IV-1 Introduction.....	66
IV-2 Simulation des profils.....	66
IV-3 Simulation de la diffusion simple de l'arsenic.....	71
IV-4 Simulation de la diffusion simple du bore.....	75
IV-5 Comparaison arsenic-bore.....	77
IV-6 Simulation de la codiffusion.....	81

Conclusion générale.....	89
---------------------------------	-----------

Références bibliographiques.....	90
---	-----------

INTRODUCTION GENERALE

La course à la miniaturisation des composants microélectroniques rend indispensable la disponibilité d'outils fiables de simulation prédictive. Dans ce contexte, comprendre et modéliser le phénomène de diffusion des dopants au cours d'une étape de recuit est indispensable. Ce processus est dû aux interactions entre les atomes de dopant et les défauts ponctuels qui sont générés au cours des étapes d'implantations ioniques. En effet, la diffusivité d'un dopant tel que le bore est directement proportionnelle à la concentration de Si interstitiel. Ce phénomène constitue le principal obstacle à la modélisation et à la réalisation de jonctions ultra-minces (<50nm) pour les futures générations de transistors MOS. L'objectif de cette thèse consiste à comprendre les phénomènes physiques responsables de la diffusion de dopants puis de les modéliser afin de prévoir et d'optimiser cette diffusion.

Il s'agit d'un sujet que l'on peut qualifier de " porteur " depuis une dizaine d'années car la diffusion de dopants est une des préoccupations centrales de l'industrie microélectronique. Le phénomène de diffusion accélérée des dopants est en effet le principal obstacle à la densification des circuits intégrés. L'étude de la diffusion de dopants fait donc l'objet de nombreuses études dans le monde entier, de centaines de publications, de nombreux symposiums lors de conférences internationales (ex : Material Research Society) et bon nombre de programmes, en particulier européens, lui sont consacrés.

Ce thème de recherche implique à la fois un travail théorique et simulation. Il consiste d'une part à la modélisation du phénomène de diffusion et l'écriture d'un programme de simulation. D'autre part, il comporte également une partie purement informatique pour prévoir les profils de dopants (utilisation d'un programme de simulation).

Enfin, ce sujet de mémoire est en fait la continuation de la thèse de doctorat de monsieur abdelali MERABET déjà soutenue au sein de l'université de constantine depuis 1995. Et ce, afin de comprendre le problème physique posé.

Le premier chapitre résume l'aspect physique de la diffusion en général.

Le deuxième chapitre est réservé à l'étude de la diffusion et codiffusion de l'arsenic et du bore dans le monosilicium.

Dans le troisième chapitre, tenant compte des résultats expérimentaux, nous proposons un modèle mathématique qui permet de déterminer les concentrations des dopants en diffusion et codiffusion .

Enfin, dans le quatrième chapitre nous nous consacrons aux ajustements des profils SIMS (expérimentaux) à l'aide du simulateur élaboré.

CHAPITRE I

*ASPECTS PHYSIQUES
DE LA DIFFUSION*

1-1 Introduction

Des phénomènes de diffusion sont présents dans de très nombreux domaines de la Physique. La diffusion peut toujours être considérée selon deux approches : du point de vue ondulatoire, et du point de vue particulaire. Dans le premier cas, la diffusion de la chaleur constitue le meilleur exemple. L'approche particulaire concerne davantage la diffusion d'un gaz ou d'un corps en solution. Dans ce deuxième cas, la diffusion se caractérise par un transfert de matière, qui est la réponse d'un milieu à toute modification de la répartition des concentrations. Même à l'équilibre, les échanges de matière se poursuivent continuellement à l'échelle moléculaire : on parle alors d'auto-diffusion.

De manière encore plus générale, et en dehors du domaine de la physique, la diffusion d'une information caractérise le temps nécessaire à sa transmission globale à travers l'espace, que ce soit sur un réseau de communication (tel qu'Internet) ou encore dans un modèle purement virtuel. Imaginons par exemple un modèle fondé sur des messagers aux déplacements aléatoires, capables de s'échanger leurs informations lorsqu'ils se rencontrent. La diffusion d'une information portée par un messager initial unique peut alors être étudiée en tant que phénomène spatio-temporel. En biologie, ce type de modèle "par contamination" est propre à décrire la propagation d'une épidémie dans une population animale (par exemple, le virus de la Rage) ou végétale.

Par la suite, nous restreindrons notre champ d'étude à la diffusion en termes physico-chimiques de concentrations, sans perdre de vue qu'il s'agit d'un concept bien plus général. Les deux principales lois de la diffusion seront rappelées.

Dans les solides, la diffusion est un déplacement aléatoire d'atomes, d'ions, de molécules ou de lacunes, dans le réseau cristallin provoqué en général par agitation thermique. Les phénomènes de diffusion sont extrêmement lents aux températures ordinaires ; ils peuvent cependant être considérablement activés par la température ou la présence de certaines anomalies structurelles. La diffusion joue un rôle fondamental dans plusieurs processus déterminant les structures et les propriétés des matériaux. Parmi eux, on peut citer la cristallisation, les transformations de phases, et plusieurs autres processus spécifiques dans les semi-conducteurs (jonction p-n) etc....

Dans ce chapitre nous présenterons brièvement les notions fondamentales de la diffusion.

I-2 Equations de diffusion

1-2-1: Première équation de Fick

La première loi de Fick constitue l'équation fondamentale de diffusion de molécules. Elle s'applique aussi bien au gaz, qu'aux liquides ou aux solides.

Considérons le flux de particules d'une certaine espèce, les particules peuvent être des molécules, des atomes, des défauts ponctuels, des électrons libres ou des trous électroniques, etc.... Soit $C(x, t)$ leur concentration, exprimée en nombre de particules ou d'atomes par unité de volume.

On définit le **flux de diffusion F** comme la quantité de matière (particules) qui traverse par seconde l'unité d'aire d'une surface normale au mouvement de transfert étudié. F est aussi appelé la densité de courant de particules.

En présence d'un gradient de concentration, on admet qu'il s'établit un flux de particules (un écoulement de particules) dans le sens descendant le gradient, et que ce flux est proportionnel au gradient correspondant :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} = -D \text{grad}C \quad (\text{I.1})$$

Où D est appelé coefficient de diffusion ou diffusivité. Il est généralement exprimé en cm^2/s ou m^2/s .

C est la concentration de particules exprimée en atomes/ m^3 ou atomes/ cm^3 .

Le signe négatif indique que le flux diffuse de la région ayant une forte concentration de particules à la moins forte (figure I.1).

La relation (I.1) est connue sous le nom de **première équation de Fick**. Elle se généralise à trois dimensions :

$$F = -\left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} + D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (\text{I.2})$$

Si D est une constante quelle que soit la direction dans l'espace (milieu isotrope), on peut écrire:

$$F = -D \left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (\text{I.3})$$

$$F = -D \cdot \nabla C \quad (I.4)$$

∇ : est l'opérateur LAPLACIEN.

La loi de Fick affirme alors qu'il y a proportionnalité entre le gradient de concentration et le flux de diffusion.

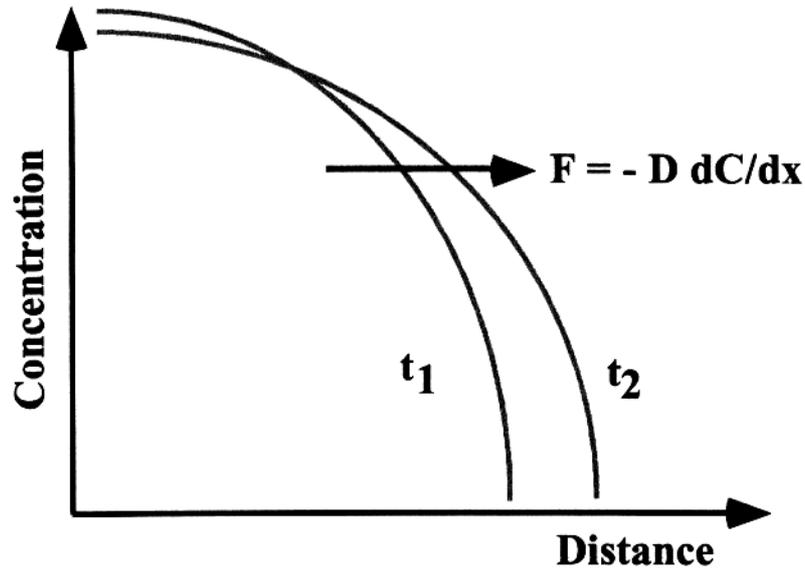


Figure I.1 : Sens de diffusion du flux de particules

I -2-2 Deuxième équation 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 (I.1) 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** où l'on suppose $\partial C / \partial t \neq 0$. La variation de la concentration en fonction du temps est alors définie par la relation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (I.5)$$

La deuxième équation de Fick décrit comment le changement dans la concentration dans un élément de volume est déterminé par le changement (variation) dans le flux entrant et le flux sortant dans le volume (figure I.2).

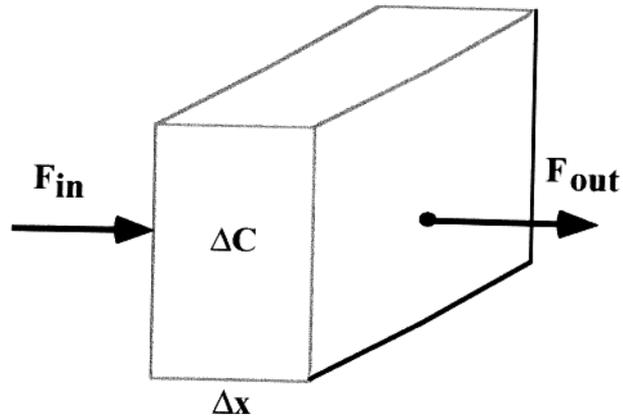


Figure I.2 :

En combinant les équations (I.1) et (I.5), on obtient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (I.6)$$

L'équation générale de la diffusion (ou deuxième équation de Fick), la relation (I.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 (I.6) s'écrit alors :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (I.7)$$

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 (I.7) admet des solutions analytiques qui expriment la forme du profil de diffusion $C(x, t)$ et permet de calculer le coefficient de diffusion D à partir de profils expérimentaux.

I-3 : Solution de l'équation de diffusion (ou Seconde équation de Fick).

Dans ce paragraphe, on se limite à quelques cas très simples sans donner de démonstration mathématique. De plus amples détails sont donnés dans les références suivantes [1-4].

I-3-1 : Diffusion à partir d'une source d'impureté limitée

Un exemple de diffusion à partir d'une source d'impureté limitée est fourni par la diffusion à partir d'une couche finie.

1-3-1-1 : Couche mince en sandwich.

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche en sandwich entre deux échantillons identiques (figure I.3) [5,6].

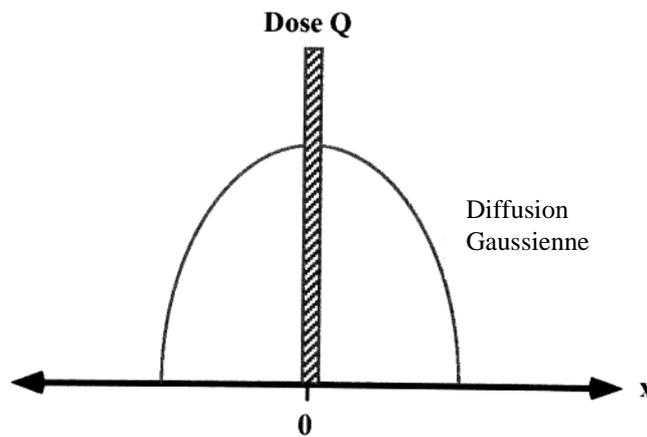


Figure I.3 : couche mince en sandwich

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} C dx \tag{I.8}$$

Q : représente la quantité d'atomes déposés par unité d'aire.

La solution analytique qui satisfait la seconde loi de Fick est[6-9]

$$C(x,t) = \left[\frac{Q}{2\sqrt{\pi \cdot Dt}} \right] \cdot \exp(-x^2/4Dt) \tag{I.9}$$

Cette équation représente une distribution Gaussienne centrée en x=0 et dont la concentration de l'impureté en surface C(0,t) d'écroit avec le temps comme 1/√t [6].

La distance (profondeur) de diffusion augmente de l'origine comme $2/\sqrt{Dt}$ [6].

L'amplitude du maximum est donnée par : $C(x,t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}}$

La distribution des impuretés (profils de concentrations) à différents instants est représentée sur la figure (I.4)

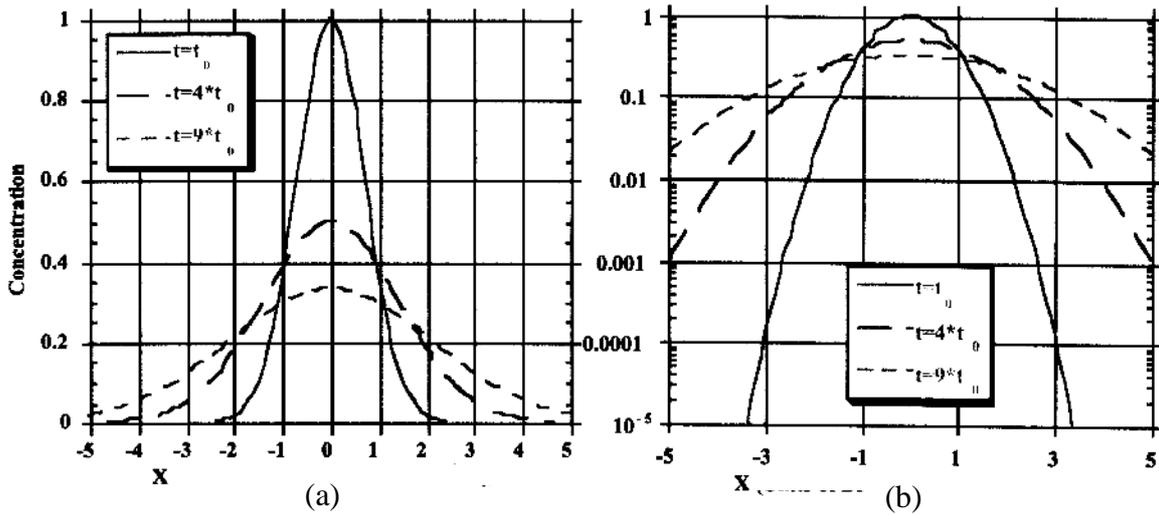


Figure I.4 : répartition de l'impureté (profils de concentration) lors de la diffusion à divers instant
 (a) échelle numérique, (b) échelle logarithmique

1-3-1-2 : Couche mince superficielle.

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche à la surface de l'échantillon (figure I.5) [5,6]

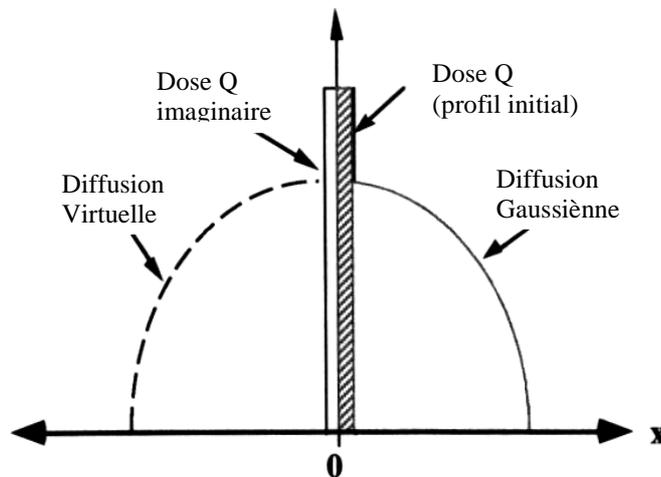


Figure I.5 : couche mince superficielle

$$Q = \int_0^{+\infty} C dx \quad (I.10)$$

La solution analytique satisfaisant la seconde équation de Fick est [6-9] :

$$C(x, t) = \left[\frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot Dt}} \right] \cdot \exp(-x^2/4Dt) = C(0, t) \cdot \exp(-x^2/4Dt) \quad (I.11)$$

En pratique, on représente graphiquement le logarithme de la concentration en fonction de x^2 . La pente de la droite obtenue permet de calculer D.

I-3-2 : Diffusion à partir d'une source d'impureté illimitée

Dans ce cas, on maintient à la frontière d'un corps semi-infini, dans le plan $x=0$, une concentration d'impureté constante et indépendante du temps (Figure I.6).

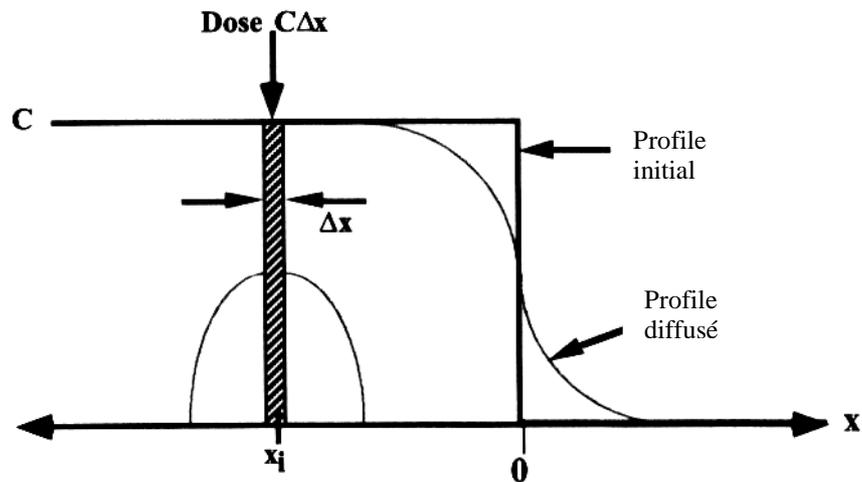


Figure I.6 : concentration superficielle constante(diffusion dans un corps semi-infini)

La solution analytique satisfaisant la deuxième loi de Fick est[6, 8-10] :

$$C(x, t) = C_s \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] = C_s \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (I.12)$$

où $C_s = C(0, t)$ ($x=0$ et $t>0$)

erf désigne la fonction erreur ou intégrale de Gauss
 et erfc est la fonction erreur complémentaire : $\text{erfc} = 1 - \text{erf}$.

$$\text{erf}z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du$$

Cette fonction est donnée dans de nombreux ouvrages.

la quantité totale de la matière diffusée par unité de volume pendant un temps t (la dose Q, c'est le nombre d'atome d'impuretés pénétrées dans le corps) est donné par[6,9] :

$$Q = \int_0^{\infty} C_s \left[1 - \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] dx = \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \sqrt{Dt} \quad (\text{I.13})$$

La répartition de la concentration en impureté pour une source illimitée est représentée sur la figure (I.7).

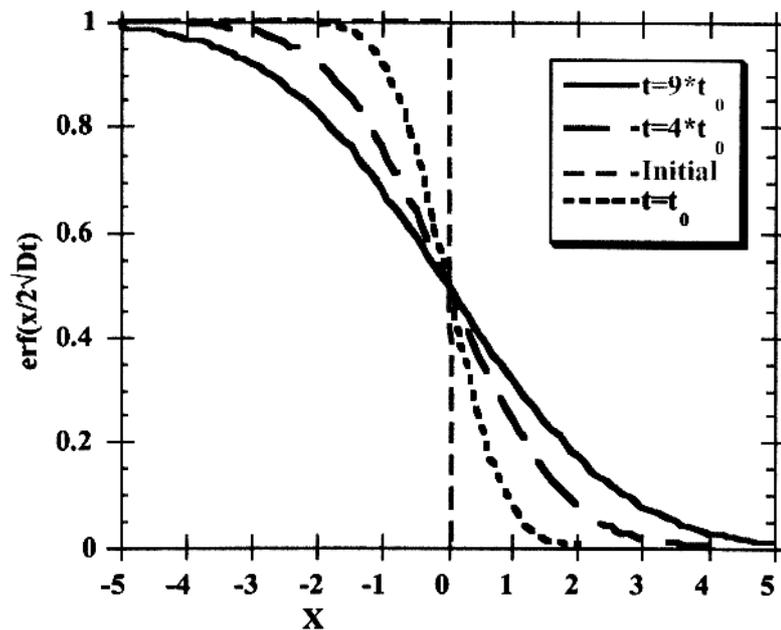


Figure I.7 : répartition de l'impureté lors de la diffusion à partir d'une source illimitée en fonction du temps de diffusion

La solution consiste en deux branches symétriques de part et d'autre du plan d'origine

1-4 : Effet de la température sur le coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion est une grandeur thermiquement activée. En effet, tous les calculs menés sur la base de la théorie atomique de diffusion [2,11,12] et les nombreux résultats expérimentaux [13-15] ont montré une variation exponentielle du coefficient de diffusion avec la température. c'est la loi d'Arrhenius:

$$D = D_0 \cdot \exp(-E_0 / kT) \tag{1.19}$$

D_0 : facteur préexponentiel, représente le coefficient de diffusion a une température infiniment grande ($D_0=D$ lorsque $1/T=0$, c'est-à-dire pour une température infinie).

k : constante de Boltzman. T : température de diffusion.

E_0 : est l'énergie d'activation, c'est à dire l'énergie nécessaire pour qu'un atome (ou ion) passe d'un état d'équilibre à un état activé. L'énergie d'activation E est également déterminée par le mécanisme de diffusion [2,4].

En pratique, on rapporte les valeurs de D à un diagramme d'Arrhenius, puisque le graphe $\ln D$ en fonction de $1/T$ est une droite dont la pente est égale à $- E / k$ et l'ordonnée à l'origine à $\ln D_0$ figure(I.8). Donc la mesure de D à différentes températures permet de calculer D_0 et E . On exprime généralement D en cm^2/s et E en eV.

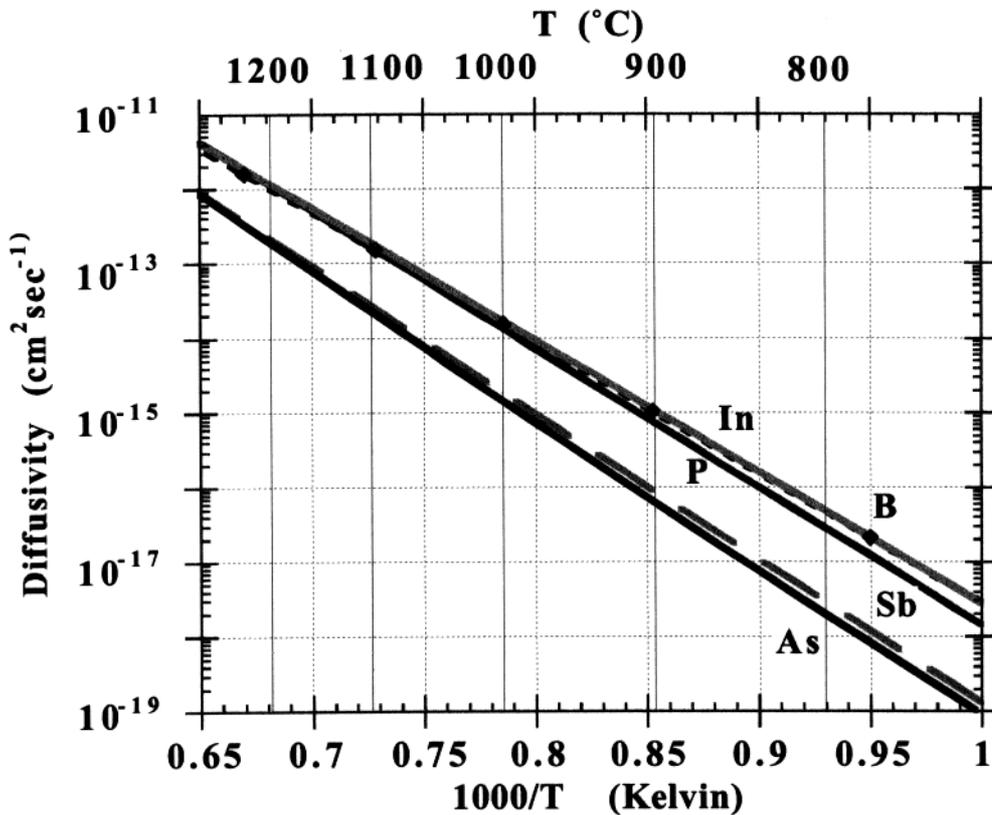


Figure I.8 : variation des coefficients de diffusion en fonction de la température

I-5 : Mécanismes de diffusion

La diffusion d'un atome par exemple, c'est à dire son déplacement dans le cristal, n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels présents dans le cristal. ces défauts sont soit des lacunes (sites vacants dans le réseau) soit des interstitiels (atomes en surnombre dans le réseau) ce qui conduit à deux types de mécanismes élémentaires [5] :

Le mécanisme lacunaire.

Le mécanisme interstitiel.

I-5-1: Mécanismes faisant appel à des défauts ponctuels.

La plupart des mécanismes de diffusion exigent la présence de défauts ponctuels.

1- Mécanisme lacunaire :

Si un site n'est pas occupé, un atome proche voisin peut sauter sur ce site, faisant apparaître une lacune au site qu'il vient de quitter. Il y a conservation du nombre de lacunes : on parle de migration de la lacune et/ou de migration de l'atome.

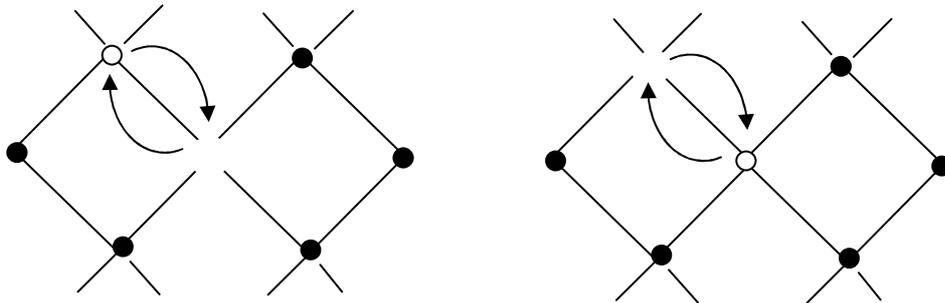


Figure. I.9 : Représentation Schématique de la diffusion par mécanisme lacunaire.

2- Mécanisme interstitiel (kick out) :

Un atome interstitiel sautant de site interstitiel en site interstitiel avant de se déplacer en position substitutionnelle dans le réseau.

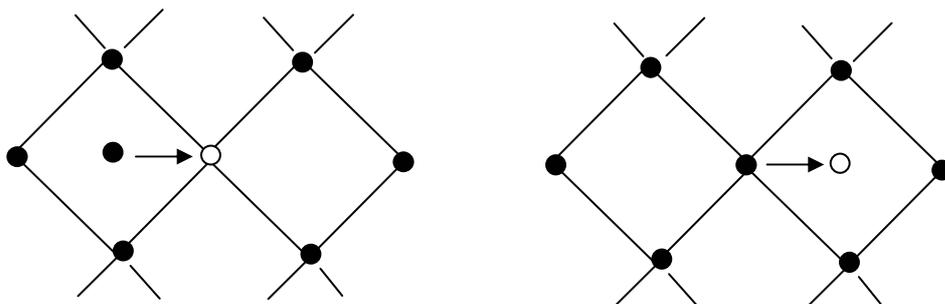


Figure. I.10 : Représentation Schématique de la diffusion par mécanisme interstitiel (kick out) .

CHAPITRE II

*DIFFUSION ET CODIFFUSION
DE L'ARSENIC ET DU BORE
DANS LE MONOSILICIUM*

II.1 : INTRODUCTION :

Après une implantation ionique, le matériau est généralement inutilisable. La première raison est liée au fait que les impuretés implantées, malgré leur distribution précise en profondeur, sont placées dans la maille en site quelconque et plus probablement en site interstitiel.

La seconde a pour cause la destruction de la qualité du réseau, les défauts créés modifiant considérablement les propriétés électriques de la région implantée.

Un recuit du matériau 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 (ici : arsenic et bore) sur des sites où elles sont électriquement actives (position substitutionnelle), sans toutefois provoquer une diffusion d'impuretés importante puisque nous travaillons dans le cadre de la ULSI (Ultra Large Scale Intégration) [16,17].

Pour restaurer simultanément le désordre cristallin et l'activité électrique, des températures élevées sont nécessaires ($> 1000^{\circ}\text{C}$). Pour limiter la diffusion des impuretés implantées et conserver ainsi des jonctions peu profondes, des durées brèves de recuit deviennent par conséquent indispensables, d'où l'intérêt des recuits thermiques rapides [16,17].

II.2 : LE RECUI THERMIQUE RAPIDE : RTA (Rapid Thermal Annealing)

a) Intérêt du RTA

Appliquer un RTA à un substrat consiste à faire monter sa température très rapidement environ 200°C/s jusqu'aux alentours de $1000\text{-}1100^{\circ}\text{C}$, de rester à cette température quelques secondes, puis de redescendre à l'ambiante presque aussi rapidement. Il a été montré que grâce à de tels cycles thermiques, on se place dans un domaine [temps - température] optimal pour la guérison des défauts et la diffusion des dopants est minimale [18]. Le choix d'un tel domaine est impossible en recuit classique.

b) Phénomènes intervenant durant le RTA

La surface recristallise à partir du substrat. C'est un processus très rapide, d'autant plus rapide que la température du RTA est élevée. Le temps de recristallisation est négligeable par rapport au temps nécessaire pour une diffusion ou une absorption significative des défauts

d'après Williams et Elliman [19]. Naravan et Holland [20] évaluent ce temps de recristallisation à 1 ms pour un RTA à 1000° C.

* Influence des défauts induits sur la diffusion :

- effet de paire impureté -Si interstitiel :

Une telle paire peut se former [21] de façon à ce qu'un As et un Si "partagent" un site : aucun des deux atomes n'est réellement en position substitutionnelle, l'As peut alors laisser la position substitutionnelle au Si et aller constituer une paire de même type avec un atome de Si adjacent, puis se mettre en substitutionnel et forcer le Si à constituer une paire (Si- interstitiel/Si-substitutionnel) avec un troisième atome de Si. Cet effet est particulièrement important si le RTA se fait sous atmosphère oxydante. L'interface entre la couche d'oxyde qui se crée dans ces conditions et le substrat joue le rôle de réservoir d'auto-interstitiels [21]. Ceci accélère la diffusion et il est souhaitable de travailler sous atmosphère inerte.

- contribution des lacunes :

Cependant le phénomène de diffusion de As et du Si est, comme dans la plupart des cas, fondé essentiellement sur un mécanisme lacunaire. Ce dernier prend une autre dimension dans ce cas. En effet, les lacunes ont tendance à se charger électriquement (lacunes V^- , V^+ ou V° si neutres) en se constituant en paires avec les atomes d'impuretés. La diffusivité des atomes d'Arsenic (ou de Bore) ainsi liés est évidemment augmentée et la variation de D classiquement admise est [21] :

$$D = D^\circ + D^-(N/N_i) + D^-(N/N_i)^2 + D^+(N_i/N) + \dots$$

c) Appareillage

Le chauffage de l'échantillon est réalisé par radiation à l'aide d'un rayonnement infrarouge provenant soit d'une source de graphite portée à incandescence résistivement soit de lampes à arc refroidies par eau soit enfin de lampes halogènes à filament de tungstène. C'est ce dernier type de source de chaleur qui équipe la plupart des machines actuelles de RTA. Dans notre cas, le recuit thermique rapide a été réalisé dans un four ADDAX R1000 sous atmosphère neutre (Argon) (figure II.1). Ce four produit un flux lumineux homogène à 1% près sur une surface de 100 cm². Il permet d'atteindre des températures de l'ordre de 1400 °C, avec des vitesses de chauffe allant jusqu'à 250 °C/s

La plaque à recuire est posée sur une platine de chargement, elle-même solidaire d'un dispositif de translation qui obture la chambre pendant le recuit.

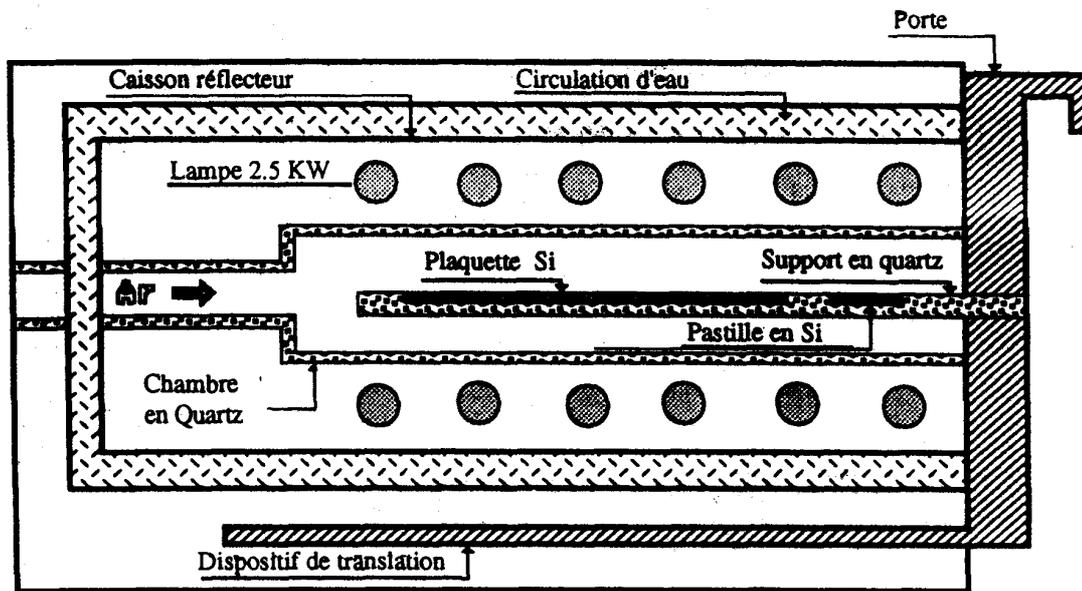


Figure II.1 : Schéma du four de recuit rapide

Un automate commande le cycle de Chauffage et de refroidissement de la plaquette en contrôlant la puissance électrique des lampes et le débit de gaz. La température est mesurée grâce à un thermocouple enrobé de ciment réfractaire et placé au centre de la platine de chargement, au milieu de la plaquette de silicium qui sert de support aux échantillons. C'est cette mesure qui permet d'étalonner le programmateur qui n'agit que sur la puissance des lampes

d) Le cycle de recuit thermique rapide

Lors d'un recuit rapide isotherme on doit maîtriser quatre paramètres fondamentaux :

- la vitesse de chauffage (la montée),
- la température du plateau,
- la durée du plateau
- la vitesse de refroidissement (la descente).

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 du 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, caractérisée par la vitesse de refroidissement. Le retour jusqu'à l'ambiante s'effectue toujours sous Argon. La figure (II.2) montre l'allure d'un cycle RTA.

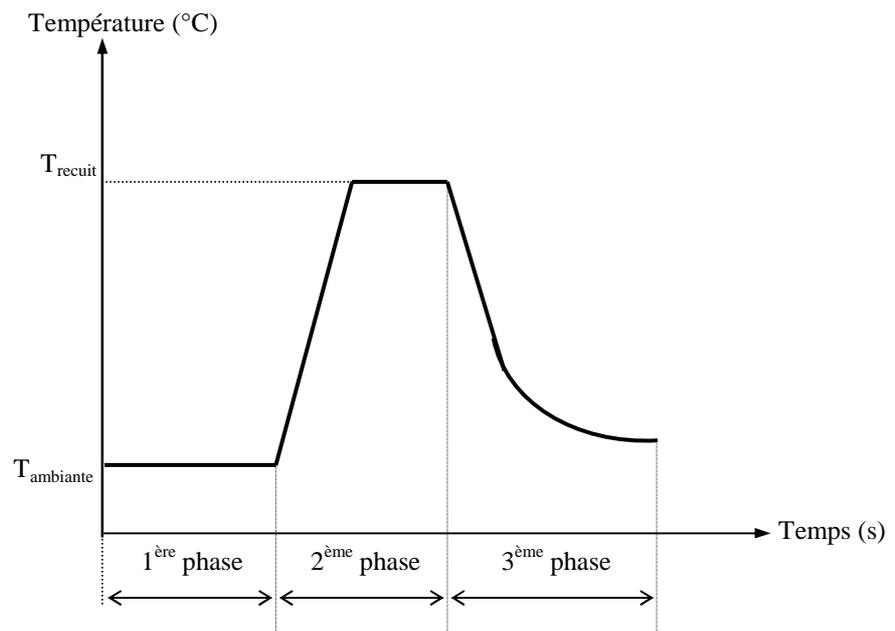


Figure II.2 : L'allure d'un cycle RTA

Pour plus de détails sur les recuits thermiques rapides et les fours commercialisés, nous conseillons les références suivantes[18,22,23].

II.3 : Diffusion et Codiffusion de l'Arsenic et du Bore dans le Monosilicium

II.3.1 : Procédures expérimentales

Le matériau utilisé comme substrat est du silicium monocristallin orientée (100) et d'une résistivité de 8 à 15 Ω .cm. Trois types d'implantations ont été réalisés : les échantillons, dits de types A sont implantés par de l'arsenic à une dose de 10^{16} at/cm² avec une énergie de 100 keV, ceux de type B par du bore à une dose de 2×10^{15} at/cm² et avec une énergie de 30 keV, tandis que les échantillons de types C prévus pour la codiffusion, ont subi une implantation d'arsenic puis de bore avec les mêmes doses et énergies citées précédemment. Après implantation, les traitements thermiques (recuit rapide RTA) ont été effectués à température variable, pendant une durée de 20 secondes, dans une gamme variant de 1000 à 1150 °C par pas de 25 °C [17,24].

Durant les traitements thermiques (recuit rapide R.T.A), l'impureté dopante, à savoir l'arsenic ou le bore, se distribue par diffusion thermique, le long de l'épaisseur de la structure. Des profils expérimentaux de concentration d'arsenic ou de bore en fonction de la profondeur sont obtenus par SIMS (analyse par un spectromètre de masse en ions secondaires).

Pour une bonne compréhension de ces profils SIMS, nous avons proposés un modèle théorique qui tient compte de la variation du coefficient de diffusion avec la concentration du dopant.

L'ajustement des courbes simulées et des profils expérimentaux nous a permis d'extraire le coefficient de diffusion.

II.3.2 : DIFFUSION SIMPLE DE L'ARSENIC ET DU BORE

II.3.2.1 : Diffusion de l'arsenic

L'arsenic est implanté à une dose de 10^{16} at.cm⁻², avec une énergie de 100 keV ; Il peut former l'émetteur d'un transistor bipolaire dans la mesure où l'on obtient une forte concentration chimique et une bonne activité électrique des dopants lors des recuits. Le profil d'implantation ne peut être assimilé à une gaussienne ; l'ordre de la distribution est au moins de 3 [17-19]. Nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de températures de 1000 à 1150 °C. La superposition des profils de diffusion pour les différentes températures de recuit, et pour une durée du plateau de recuit de 20 secondes (Figure II.3.a et b) montrent une diffusion remarquable du dopant dans le monosilicium, produisant donc une : région N⁺ fortement dopée, en moyenne 4×10^{20} at.cm⁻³. On remarque en particulier qu'à partir d'une température de l'ordre de 1075 °C le profil présente un plateau quasiment plat à partir d'une profondeur de 140 nm et allant jusqu'à 210 nm à 1150 °C. Au-delà de ces plateaux la queue du profil garde la même allure, quelle que soit la température ; le recuit thermique conduit à des profils de diffusion d'allure rectangulaire. La pénétration de l'arsenic dans le monosilicium pour une concentration de 10^{18} at.cm⁻³ atteint de 190 nm à 1000 °C jusqu'à presque doubler, 330 nm, à 1150 °C.

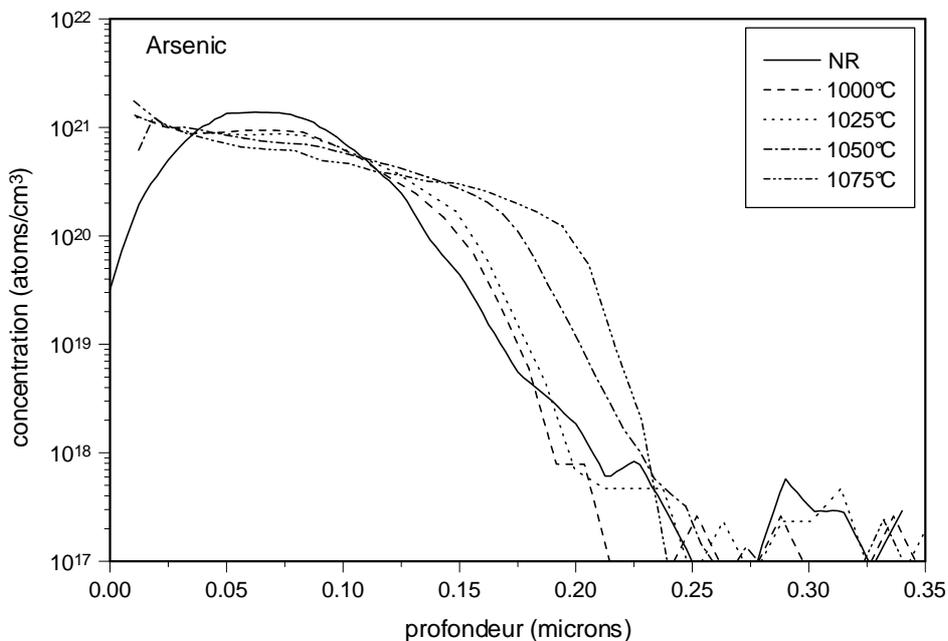


Figure II.3.a : Profils de diffusion d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

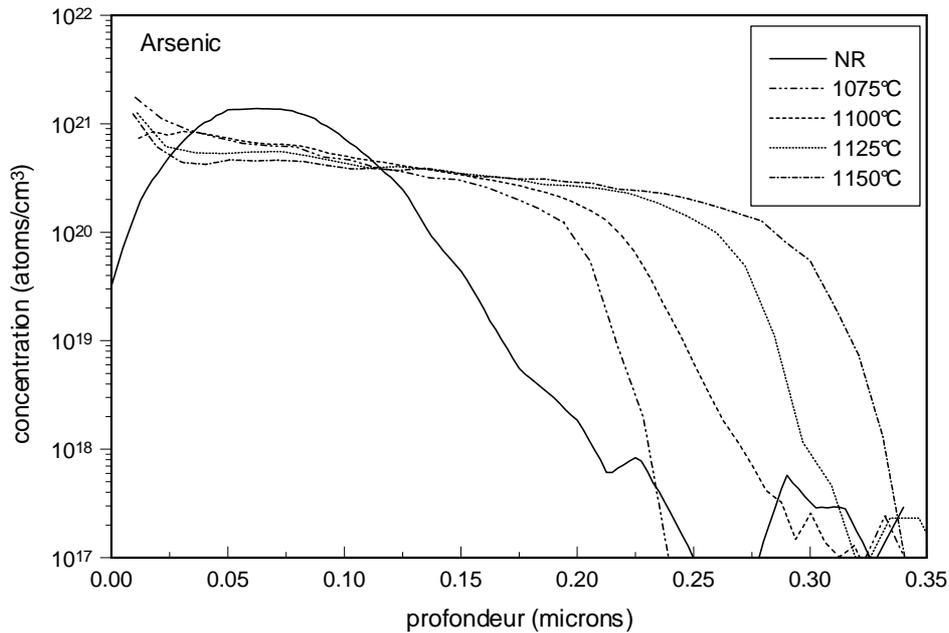


Figure II.3.b : Profils de diffusion d'As (10^{16} at.cm $^{-2}$; 100 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

II.3.2.2 : Diffusion du bore

Le bore est quant à lui implanté à 2×10^{15} at.cm $^{-2}$ avec une énergie de 30 keV. Les figures (II.4.a et b) illustrent la variation de la concentration de ce dopant en fonction de la profondeur pour différentes températures dans l'intervalle considéré de 1000 à 1150 °C, comme pour l'arsenic. On observe une forte queue d'implantation due au phénomène de canalisation. On remarque la légère pénétration d'une température à une autre, et les profils de diffusion présentent des queues très étendues, la concentration décroissant exponentiellement. Les profils commencent à s'aplatir à une température de 1050 °C avec un étalement de 110 nm et atteint 240 nm à 1150 °C. Pour une concentration de 10^{17} at.cm $^{-3}$, le bore atteint une profondeur de 380 nm et 480 nm pour les deux températures extrêmes respectives de 1000 et 1150 °C.

Comme cela était prévisible (Figure II.4), le bore diffuse plus vite que l'arsenic. Il a en effet un rayon plus petit que celui de l'arsenic, et proche de celui du silicium [25].

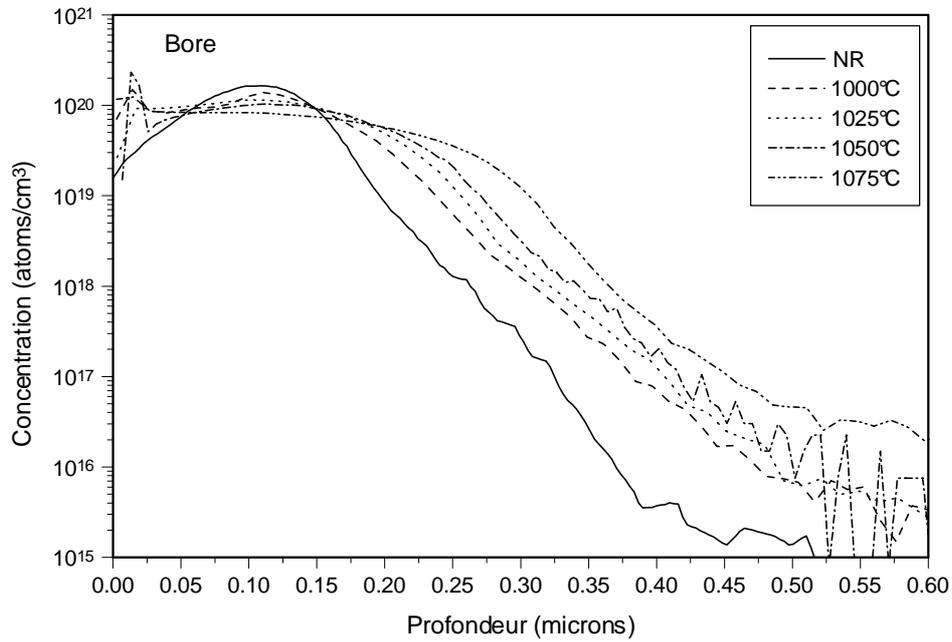


Figure II.4.a : Profils de diffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

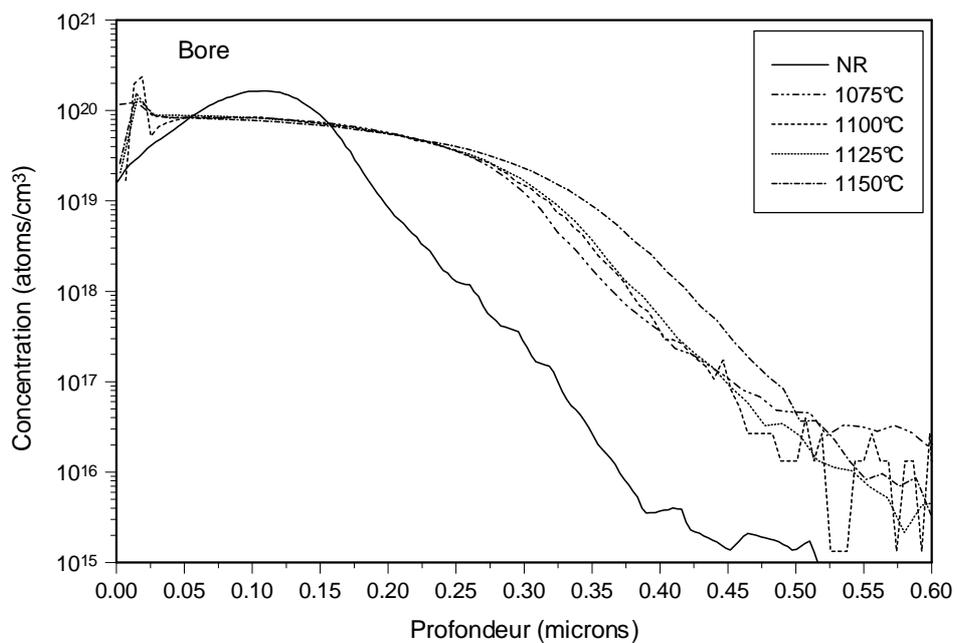


Figure II.4.b : Profils de diffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

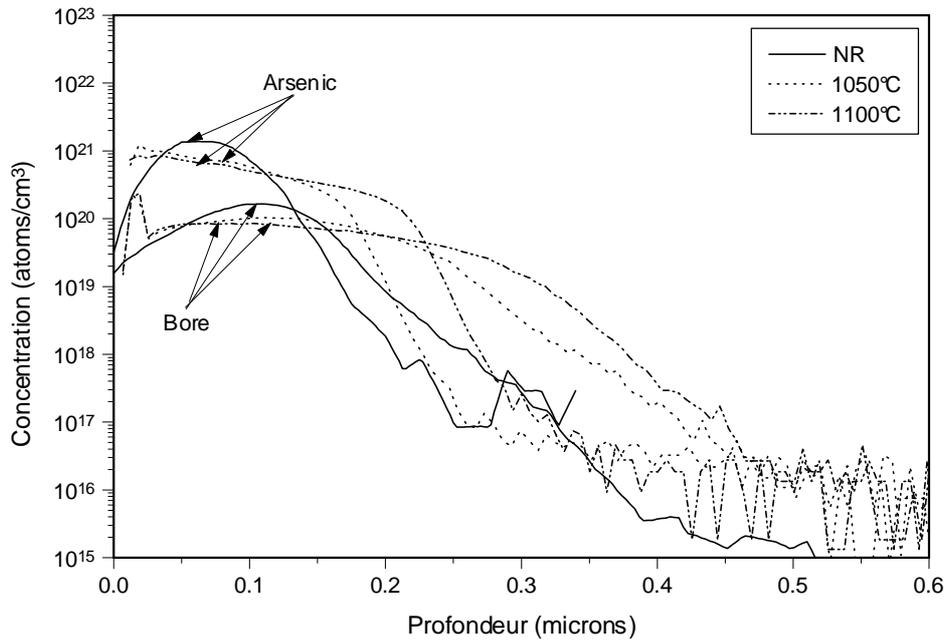


Figure II.4 : Profils de diffusion simple d'As (10^{16} at.cm $^{-2}$; 100 keV) et du B (2×10^{15} at.cm $^{-2}$; 30 keV) recuits à 20 secondes pour 1050°C et 1100°C.

II.3.3 : CODIFFUSION DE L'ARSENIC ET DU BORE

L'étude de la codiffusion (Figure II.5.a, b et c), est menée dans une configuration de jonction émetteur-base de transistor bipolaire. A l'intersection des deux profils de l'arsenic et du bore, qui correspond à la profondeur de la jonction X_j , on remarque la formation d'un épaulement sur le profil de bore ; en fait apparaît à cet endroit une zone de déplétion qui implique l'existence d'un champ électrique important [26]. D'après Hu et Schmidt [27], les atomes de bore sont plus sensibles à l'effet de champ car ils diffusent plus vite que ceux de l'arsenic. Les atomes vont avoir tendance à migrer de part et d'autre du point d'intersection des profils, y produisant un minimum de concentration. On constate que la mobilité est moins importante à gauche qu'à droite de la jonction ; ce fait peut être expliqué par la présence d'arsenic ionisé positivement à gauche de la jonction et présentant un fort gradient de concentration qui retient le bore ionisé négativement et ralentit sa diffusion au-delà de la jonction [24]. Les profils à droite de la jonction présentent des queues de courbes fortement accélérées. Ces queues sont dues à l'absence de l'arsenic dans cette région. On peut assimiler l'allure des profils du bore en codiffusion par une bigaussienne, l'une caractérisant la partie de la courbe à gauche de la jonction et l'autre celle de droite [24].

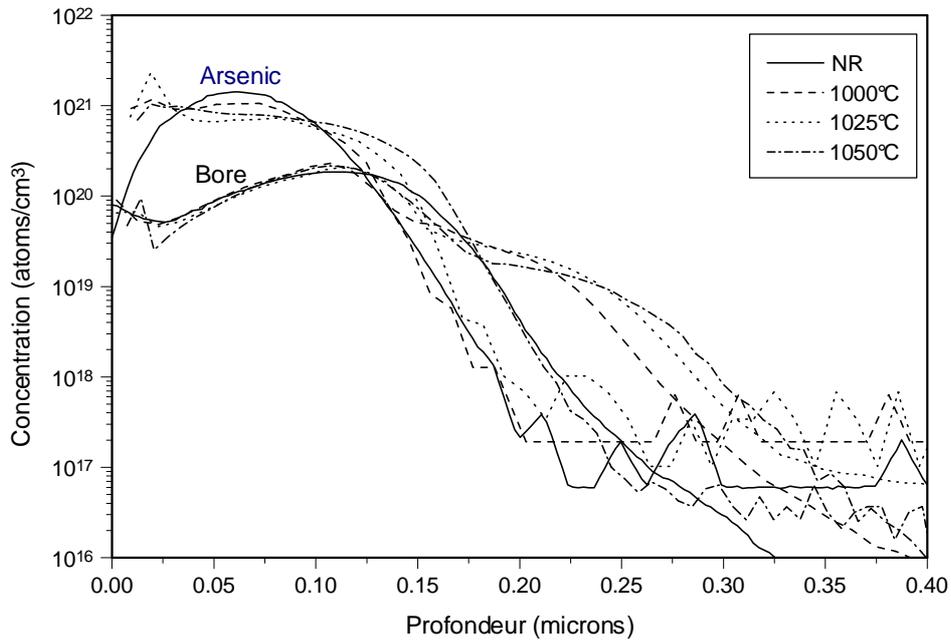


Figure II.5.a : Profils d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) et B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

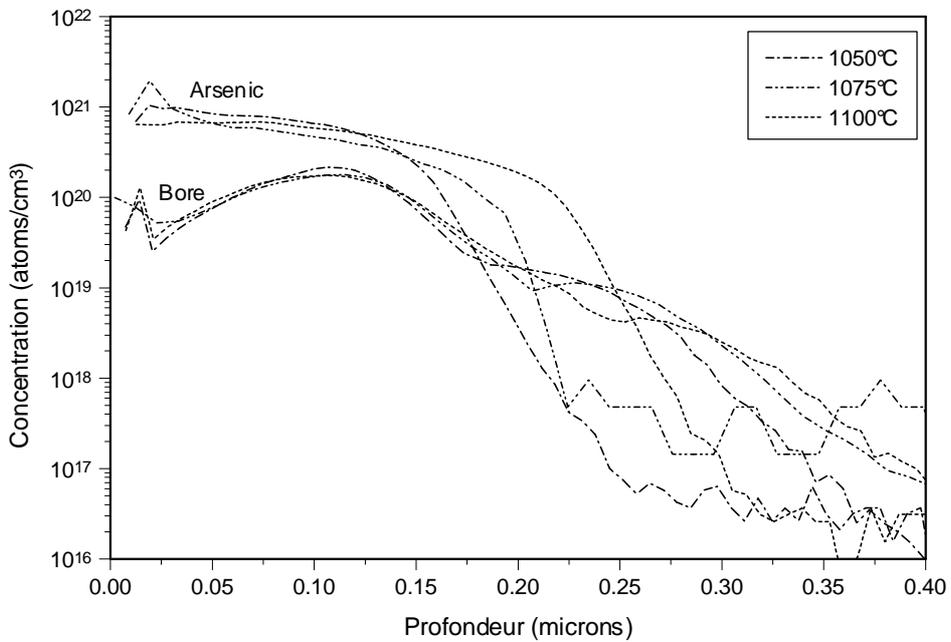


Figure II.5.b : Profils d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) et B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

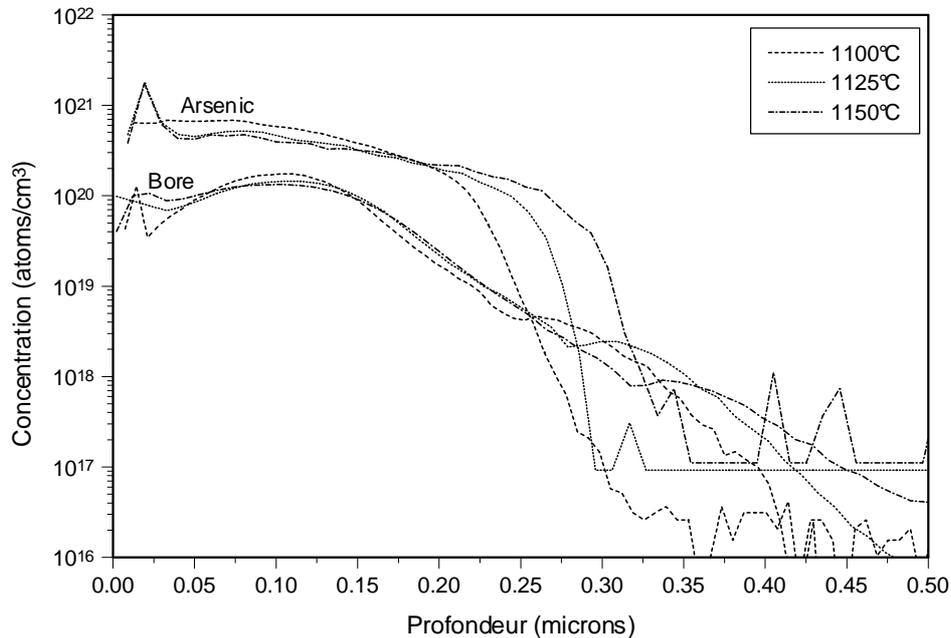


Figure II.5.c : Profils d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) et B (2×10^{15} at. cm^{-2} ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

Comparaison entre diffusion et codiffusion

La comparaison des profondeurs de diffusion et codiffusion (Figure II.8.a et b), déterminées à partir des figures (II.7.a et b) pour l'arsenic et à partir des figures (II.6.a et b) pour le bore , ne montre aucune différence significative sur la diffusion de l'arsenic, tandis que la diffusion du bore en présence d'arsenic est retardée de 70 nm à 1000 °C et de 40 nm à 1150 °C à une concentration de 10^{17} at./ cm^3 .

La diffusion du bore en diffusion simple à une concentration de 10^{17} at. cm^{-3} peut atteindre 380 nm à 1000 °C et 480 nm à 1150 °C. Tandis que en codiffusion, il atteint 310 nm à 1000 °C et 440 nm à 1150 °C

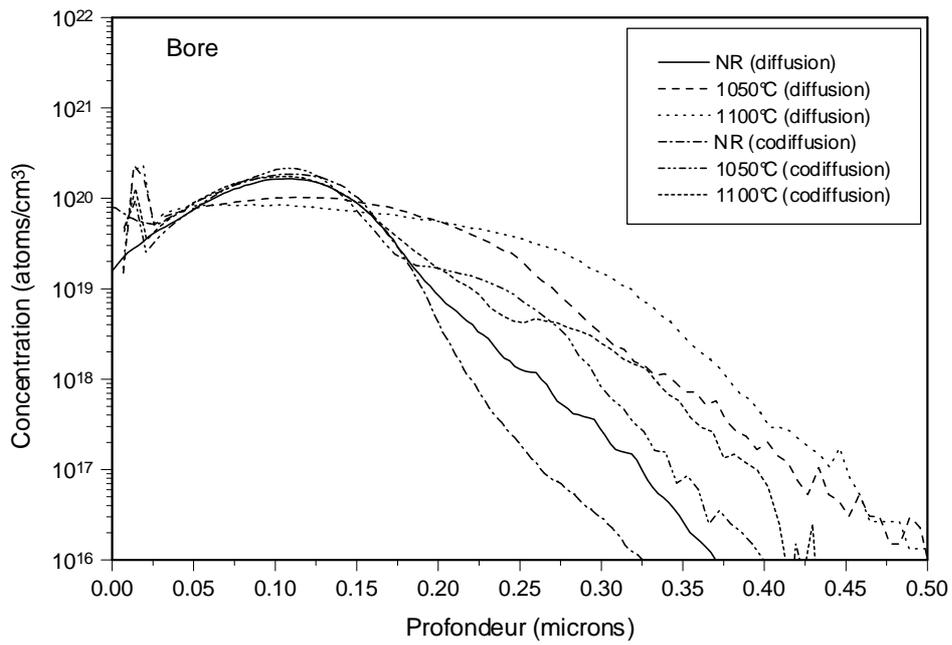


Figure II.6.a : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

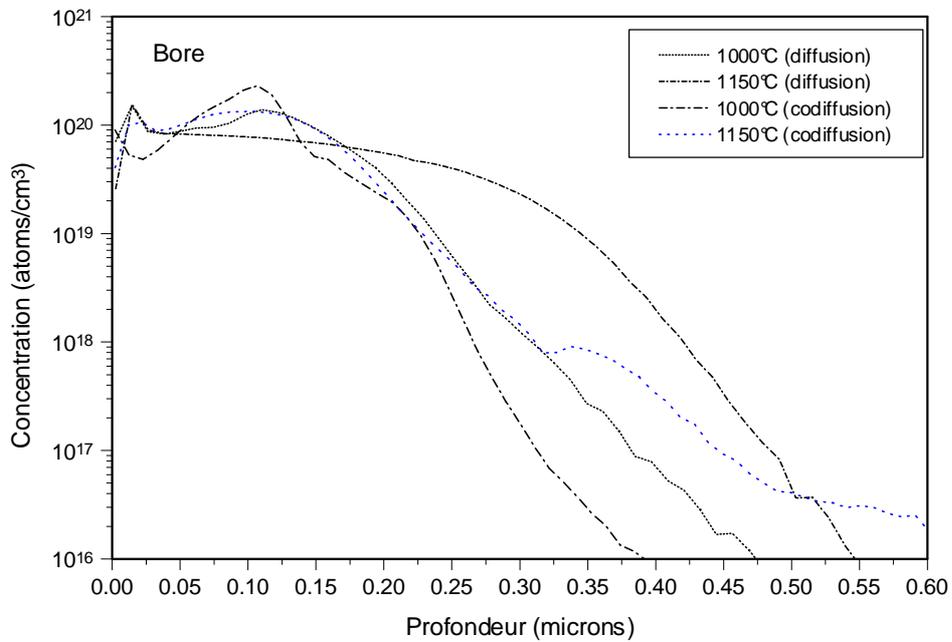


Figure II.6.b : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

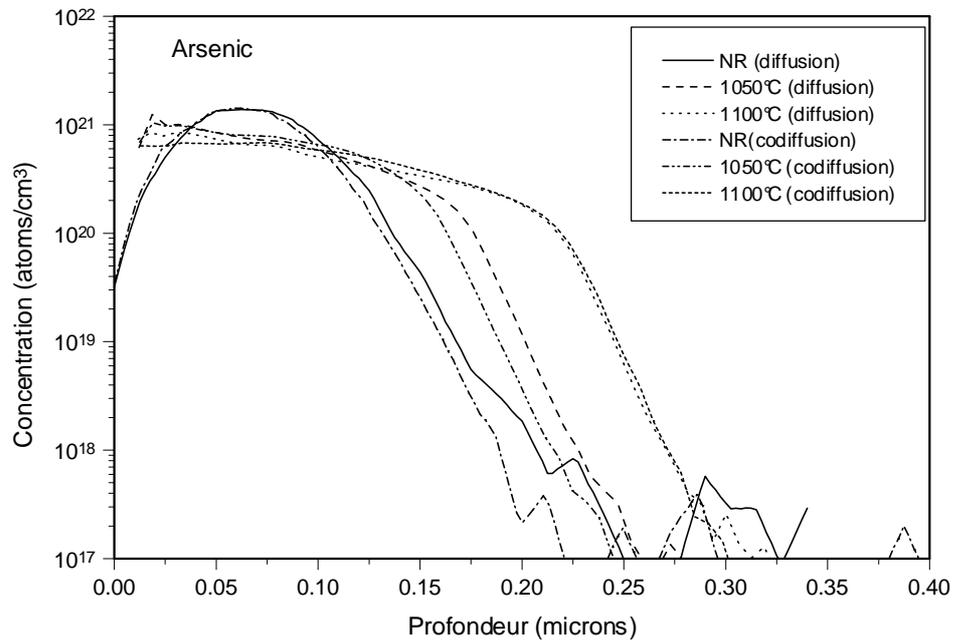


Figure II.7.a : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

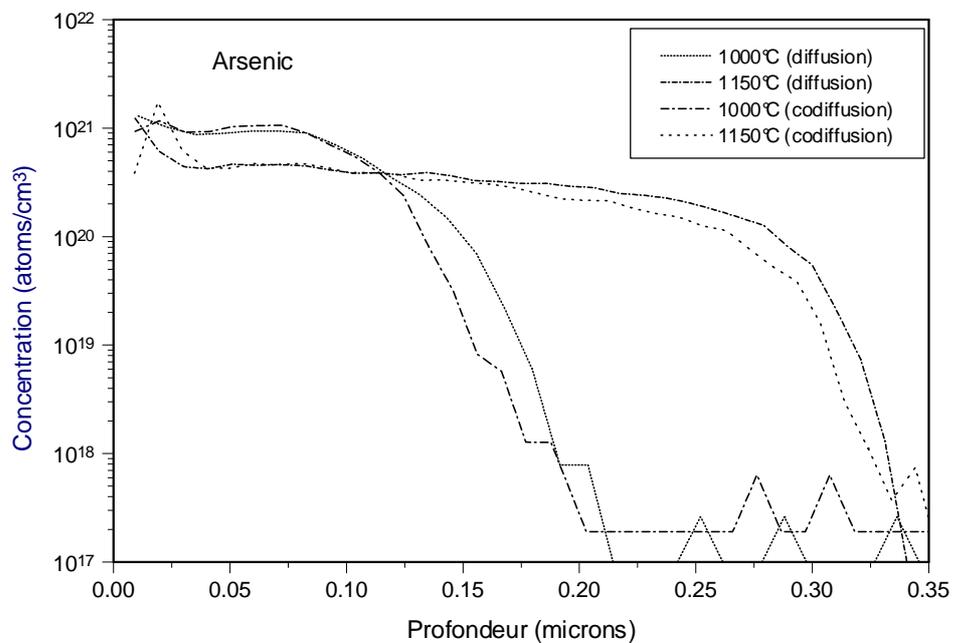


Figure II.7.b : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

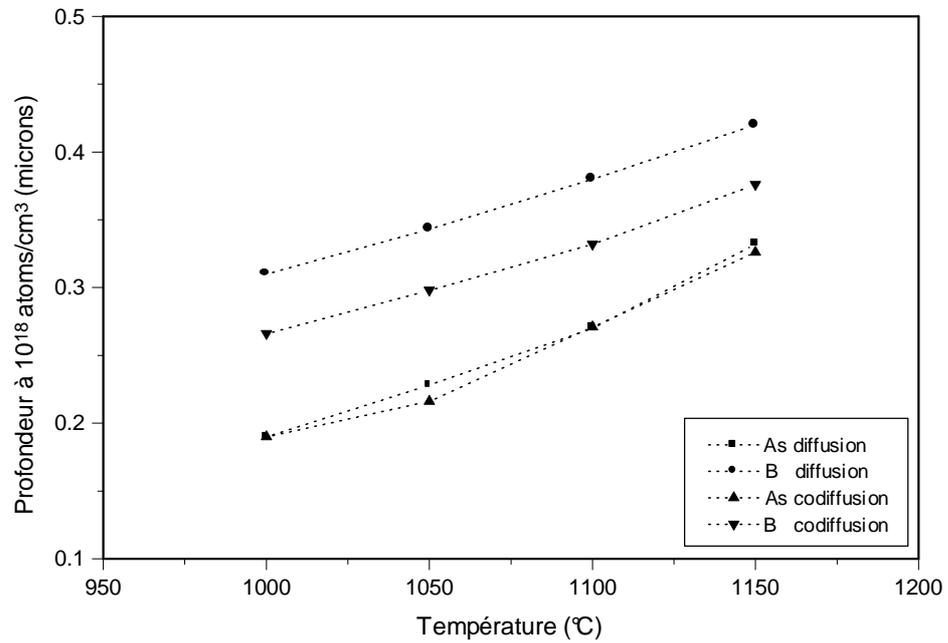


Figure II.8.a : Comparaison de la profondeur de diffusion en diffusion et codiffusion en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes à 10^{18} at.cm⁻³.

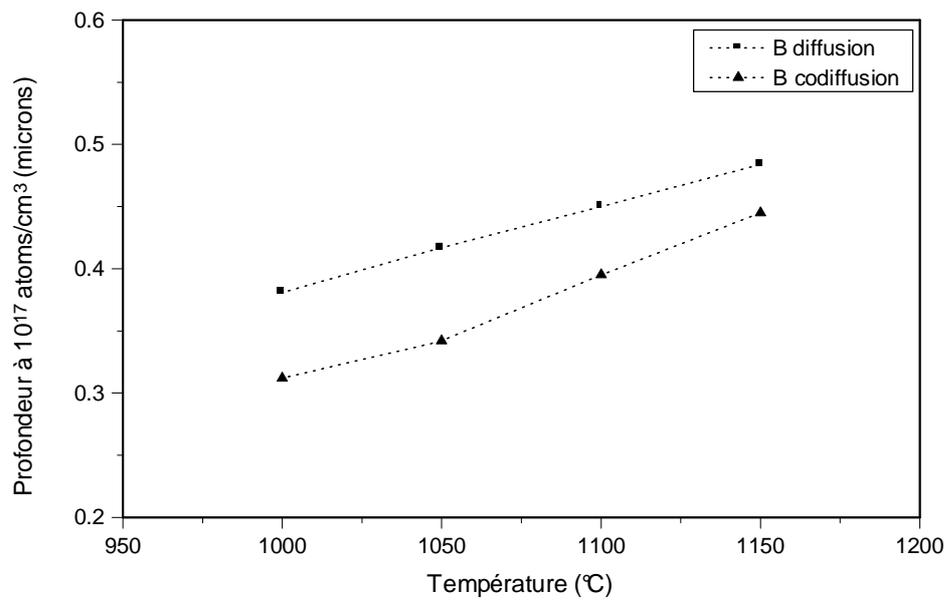


Figure II.8.b : Comparaison de la profondeur de diffusion en diffusion et codiffusion en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes à 10^{17} at.cm⁻³.

CHAPITRE III

*MODELISATION DE LA DIFFUSION
ET DE LA CODIFFUSION*

III MODELISATION DU PHENOMENE DE DIFFUSION

III.1 INTRODUCTION

Les dispositifs actuels de l'électronique à haute densité d'intégration nécessite une très bonne connaissance des phénomènes physiques rencontrés lors des procédés technologiques utilisés pendant la fabrication.

Le recuit thermique rapide est l'un de ces procédés, utilisé pour recuire des substrats de silicium implantés par des dopants. Les phénomènes de diffusion qui se produisent doivent être parfaitement maîtrisés afin de pouvoir réaliser des jonctions abruptes avec des concentrations bien connues.

Le recuit thermique est utilisé dans la fabrication des semiconducteurs pour guérir les défauts cristallins causés par l'implantation et activer électriquement les impuretés introduites pour former le dispositif. Par conséquent pour une bonne compréhension de ces phénomènes physiques, des modèles théoriques traduisant le même phénomène physique sont devenus nécessaires, par but d'économiser du temps et de l'argent.

La modélisation à pour but d'abord de prévoir les résultats de diffusion et dans un deuxième temps elle aurait comme finalité de pouvoir calculer les caractéristiques électriques du substrat recuit en ayant comme seules données les paramètres initiaux.

Notre but est de maître au point un programme relativement simple d'utilisation, dédié essentiellement au diffusion de dopants (arsenic et bore) dans le monosilicium.

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.

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right]}{\partial x} \quad (\text{III.1})$$

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

D : diffusivité (coefficient de diffusion).

Les modèles simples (loi de Fick), correct pour les faibles concentrations, ne conviennent plus et l'on a dû rajouter de nombreux termes correctifs pour obtenir un modèle susceptible de donner de résultats quantitatifs valables dans le domaine des concentrations

employées. Ainsi, plusieurs phénomènes interviennent dans la diffusion thermique des impuretés dans un semi-conducteur [17,24,30,43] :

- * Le champ électrique : Comme les impuretés sont chargées électriquement, la diffusion est accélérée, à haute concentration, par le champ électrique interne créé par le gradient de la distribution des dopants.

- * Les défauts existant dans le semi-conducteur (lacunaire et interstitiel) [26].

- * la température.

- * le gradient de concentration impuretés.

Dans ce qui suit, nous explicitons d'abord les équations que supporte notre logiciel.

III.2 LE CALCUL DU FLUX ET L'EFFET DU CHAMP ELECTRIQUE INTERNE.

Le flux d'une impureté "e" dans un milieu isotropique contenant " j " impuretés, peut être exprimé par [27-30] :

$$F_e = -D_e \nabla C_e + Z_e \mu_e C_e E \quad (\text{III.2})$$

avec :

D_e : Coefficient de diffusion de l'impureté.

C_e : Concentration de l'impureté.

μ_e : Mobilité de l'impureté.

Z_e : Charge de l'impureté, positive pour les donneurs (As) et négative pour les accepteurs (B).

E : Champ électrique interne.

Si ψ est le potentiel électrostatique dans la structure, on a alors : [24,29,30]

$$E = -\nabla \psi$$

donc

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e \frac{\mu_e}{D_e} C_e \nabla \psi \right) \quad (\text{III.3})$$

La relation d'Einstein entre la mobilité et la diffusivité est donnée par [7,31]

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{q} \quad (\text{III.4})$$

avec :

q : charge électronique

k : constante de Boltzman

T : température absolue (k) du processus

Et l'expression du flux devient

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e \frac{q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \quad (\text{III.5})$$

L'équation de diffusion (III.1) devient donc :

$$\frac{\partial C_e}{\partial t} = -\frac{\partial F_e}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-D_e \left(\nabla C_e + \frac{Z_e q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_e \left(\nabla C_e + \frac{Z_e q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \right] \quad (\text{III.6})$$

L'équation de diffusion pour l'arsenic sera donc [29,32] :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{As} \left(\nabla C_{As} + \frac{q C_{As}}{kT} \nabla \psi \right) \right] \quad Z_e = +1 \text{ pour l'arsenic} \quad (\text{III.7})$$

ou bien

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \nabla \left[D_{As} \nabla C_{As} + D_{As} \frac{q C_{As}}{kT} \nabla \psi \right] \quad (\text{III.7'})$$

Pour le bore, l'équation de diffusion sera [29,32] :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \nabla \left[D_B \nabla C_B - D_B \frac{q C_B}{kT} \nabla \psi \right] \quad Z_c = -1 \text{ pour le bore} \quad (\text{III.8})$$

Où C_{As} et C_B sont les concentrations de l'arsenic et du bore, respectivement ; D_{As} et D_B sont les diffusivités effectives pour chaque impureté.

Sachant que dans un semiconducteur dopé [7] :

$$n = n_i e^{q\psi/kT} \quad (\text{III.9.a})$$

$$p = n_i e^{-q\psi/kT} \quad (\text{III.9.b})$$

avec :

n : concentration (ou densité) d'électrons.

n_i : concentration intrinsèque d'électrons à la température considérée.

p : concentration (ou densité) des trous.

$q\psi > 0$ entraîne $n > n_i$ et $p < n_i$ le semiconducteur est de type n

$q\psi < 0$ entraîne $p > n_i$ et $n < n_i$ le semiconducteur est de type p

$q\psi$ désigne le niveau de Fermi [7]

les expressions (III.9.a,b) donnent

$$q\psi = kT \cdot \ln(n/n_i) = -kT \cdot \ln(p/n_i) \quad (\text{III.9.c})$$

dans un semiconducteur de type n, $n = C_d - C_a$, dans un semiconducteur de type p,

$p = C_a - C_d$; soit :

$$\text{semiconducteur(sc) type n} \quad q\psi = kT \cdot \ln[(C_d - C_a)/n_i] \quad (\text{III.9.d})$$

$$\text{semiconducteur(sc) type p} \quad q\psi = -kT \cdot \ln[(C_a - C_d)/n_i] \quad (\text{III.9.e})$$

où C_a et C_d sont les densités(concentrations) de dopants accepteurs (Bore) et de donneurs (Arsenic)

Dans un semiconducteur intrinsèque : $n = p = n_i$.

Le champ électrique interne des charges d'espaces induit par le gradient de concentration peut être exprimé par [29,30,33] :

$$E = -\nabla\psi = -\frac{kT}{q}\nabla\ln\frac{n}{n_i} = \frac{kT}{q}\nabla\ln\frac{p}{n_i} \text{ sachant que } n = n_i e^{q\psi/kT} \text{ et } p = n_i e^{-q\psi/kT} \quad (\text{III.10})$$

En remplaçant ψ par sa valeur, l'expression du flux (III.5) devient :

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e C_e \nabla \ln \frac{n}{n_i} \right) \quad (\text{III.11})$$

Densité de porteurs :

Considérons un semiconducteur contenant une densité (concentration) N_d de donneurs et une densité N_a d'accepteurs. Soit N_d^+ le nombre de donneurs ionisés, c'est-à-dire ayant libéré leur électron supplémentaire. Soit N_a^- le nombre d'accepteurs ionisés, c'est-à-dire ayant accepté un électron supplémentaire. Le matériau étant neutre, l'ensemble des charges positives est égal à l'ensemble des charges négatives. L'équation de neutralité électrique du matériau s'écrit [7] :

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (\text{III.12.a})$$

où n et p représentent les densités de porteurs libres, N_a^- et N_d^+ les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés

En raison du fait que l'énergie thermique kT est du même ordre de grandeur que les énergies de liaison de l'électron sur le donneur et du trou sur l'accepteur, tous les donneurs et accepteurs sont ionisés. L'équation de neutralité électrique se réduit donc à [7,24] :

$$n + N_a = p + N_d \quad (\text{III.12.b})$$

où N_a et N_d sont les densités accepteurs et donneurs
on peut écrire l'équation de neutralité sous la forme

$$N_d - N_a + p - n = 0 \quad (\text{III.12.c})$$

Pour plusieurs dopant l'équation s'écrit sous la forme

$$\sum_j Z_j N_j + p - n = 0 \quad \text{ou bien} \quad \sum_j Z_j C_j + p - n = 0 \quad (\text{III.12.d})$$

On désigne la concentration par C ou par N c'est la même.

Z_j : Charge de l'impureté, positive (+1) pour les donneurs (As) et négative (-1) pour les accepteurs (B).

La somme sur " j " étant faite sur toutes les impuretés de la structure.

Si la population d'électrons et de trous sont à l'équilibre thermodynamique et obéissent à une statistique de Boltzman, la concentration intrinsèque d'électrons à une température donnée donne [7,24] :

$$np = n_i^2 \quad (\text{III.13})$$

l'équation (III.12.c) associée à la relation $np = n_i^2$ permet d'écrire l'équation :

$$n^2 - (N_d - N_a)n - n_i^2 = 0 \quad \text{pour deux dopants}$$

ou bien

$$n^2 - \left(\sum_j Z_j C_j \right) n - n_i^2 = 0 \quad \text{pour plusieurs dopants}$$

c'est une équation du second degré dont la solution est donnée par :

$$n = \frac{1}{2} \left[N_d - N_a + \left((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.a})$$

ou bien

$$n = \frac{1}{2} \left[\sum_j Z_j C_j + \left(\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.a'})$$

et de la même façon on détermine la valeur de p (nombre de trous)

$$p = \frac{1}{2} \left[- (N_d - N_a) + \left((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.b})$$

ou bien

$$p = \frac{1}{2} \left[- \sum_j Z_j C_j + \left(\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.b'})$$

Notons : $N = (n/n_i)$ donc $\nabla \ln N = \frac{\nabla N}{N}$

puis enfin à partir de (III.11) et (III.14.a ou a'), on détermine l'expression générale du flux.

$$F = -D_e \left[\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.15})$$

Application dans le cas de l'Arsenic seul : $Z_e = Z_j = Z_{As} = +1$

$$F_{As} = -D_{As} \left[1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_{As} \quad (\text{III.16})$$

que l'on peut mettre sous la forme :

$$F_{As} = -D_{As}^* \nabla C_{As}$$

avec : $D_{As}^* = D_{As} \cdot h$

et $h = \left[1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right]$

h : étant le facteur d'exaltation de la diffusion [34] :

Pour des fortes concentrations ($C_{As} \gg n_i$) alors $h = 2$, et on obtient : $\mathbf{D}_{As}^* = 2\mathbf{x}\mathbf{D}_{As}$

Le champ électrique apporte la même contribution à la diffusion que le gradient de concentration, pour les dopants :

$$F_{As} = -2.D_{As} \nabla C_{As}$$

Application dans le cas du Bore seul : $Z_c = Z_j = Z_B = -1$

$$F_B = -D_B \left[1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_B \quad (\text{III.17})$$

III. 3 L'INFLUENCE DES DIFFERENTES LACUNES SUR LE COEFFICIENT DE DIFFUSION

Au dopage à fortes concentrations, la diffusivité augmente, l'équation de Fick doit être résolue numériquement du fait que D n'est pas constant [6].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D^{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right] \quad (\text{III.18})$$

Le phénomène d'interaction impuretés/défauts ponctuels paraît être d'une grande importance dans le mécanisme de diffusion. Les diffusivités dans le silicium sont dépendent du niveau d'énergie de Fermi [25,29] :

Les lacunes peuvent se présenter sous différents états électriques : lacunes neutres, chargées positivement, négativement... etc. Le coefficient de diffusion D_e est alors la Somme de divers **coefficients de diffusion**, compte tenu de la diffusion de l'impureté avec chacune de ces lacunes [6,24,35,36] :

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^0 + \mathbf{D}^- (n/n_i) + \mathbf{D}^= (n/n_i)^2 + \mathbf{D}^+ (n_i/n) + \dots \quad (\text{III.19})$$

Avec D^0 , D^- , $D^=$, D^+ représentant les diffusivités intrinsèques de l'impureté en présence de défauts ponctuels.

Les suscriptions 0, -, +, et = signifient neutre, chargé négativement, chargé positivement et chargé négativement deux fois respectivement.

Ainsi, on supposant que la diffusion ne s'effectue que par l'intermédiaire des lacunes neutres et chargées une fois [6,17,24,29,37,38], il devient:

$$D_d = D_d^0 + D_d^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad \text{pour les donneurs (par ex, Arsenic)} \quad (\text{III.19. a})$$

$$D_a = D_a^0 + D_a^+ \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-1} \quad \text{pour les accepteurs (par ex, Bore)} \quad (\text{III.19. b})$$

dans le cas où tous les dopants sont électriquement actifs nous considérons le model de Fair et Tsai [6,17,24,39] :

$$D_d = D_{id} \left(\frac{1 + \beta_d (n/n_i)}{1 + \beta_d} \right) \quad \text{pour des impuretés donatrices} \quad (\text{III.20.a})$$

$$D_a = D_{ia} \left(\frac{1 + \beta_a (p/n_i)}{1 + \beta_a} \right) \quad \text{pour des impuretés accéptrices} \quad (\text{III.20.b})$$

que l'on peut les récrire sous la forme [17] :

$$D = D_i (1 + \beta f) / (1 + \beta) \quad (\text{III.20.c})$$

Avec :

β : facteur représentant le rapport de diffusivité induite par les lacunes chargées une fois sur la diffusivité due aux lacunes neutres [17] :

$$\beta_d = D^- / D^0 \quad \text{et} \quad \beta_a = D^+ / D^0$$

$f = n/n_i$: pour une impureté donatrice (arsenic)

$f = n_i/n = p/n_i$: pour une impureté acceptrice (bore).

de l'équation (III.14.a ou a') on aura :

$$\frac{n}{n_i} = \frac{C}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C}{2n_i} \right)^2 + 1} \quad (\text{III.21})$$

Le coefficient de diffusion effectif intervenant dans l'équation de la diffusion prend alors la forme [17,38] :

$$D^{\text{eff}} = D.h = D_e \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta} \right) \left[1 + \frac{C_e}{\sqrt{C_e^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.22})$$

Finalement l'expression du flux devient [24] :

$$F = -D_{ie} \frac{1+\beta f}{1+\beta} \left[\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.23})$$

Avec D_{ie} : coefficient de diffusion intrinsèque de l'impureté "e".

Finalement :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} = D_{ie} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1+\beta f}{1+\beta} \left(\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2}} \right) \right] \quad (\text{III.24})$$

C est équivalent à la concentration en électron (n) pour l'arsenic ou à la concentration en trous (p) pour le bore, dans la mesure où toutes les impuretés sont ionisées.

On voit que dans le cas de fortes concentrations, i.e. $C \gg n_i, h$, le facteur d'exaltation dû au champ électrique tend vers 2 et f, paramètre intervenant dans l'expression du champ électrostatique dû à l'ionisation des impuretés [17,24,39,40], vers C/n_i . D_i suit une loi de type Arrhénius.

$$D_i = D_0 \cdot \exp(-E_0/KT) \quad (\text{III.25})$$

n_i dépend essentiellement du gap et de la température [30,17].

$$n_i = 7.6354 \times 10^{15} \times T^{3/2} \exp(-\text{Gap}/2KT)$$

avec

$$\text{Gap} = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} T^2 / (636.K + T)$$

k étant la constante de BOLTZMANN = $8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/k

$$\beta = 2 \exp[(1/KT)(-\text{Gap}/2 - E_v + Z_i \cdot q^2 / 4\pi\epsilon a_i)]$$

a_i : étant distance la minimale entre la lacune et l'impureté ionisée la plus proche.

E_v : le niveau de la lacune

ϵ : La constante diélectrique du silicium.

Cependant, aux températures de diffusion employées ici, β peut être considérée constant[17,30].

Pour le bore et l'arsenic les paramètres usuels utilisés lors de **recuits classiques** sont [17,41,42] :

Pour le bore

$$D_0 = 0.5554 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 3.426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

pour l'arsenic

$$D_0 = 22.83 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

remarque:

pour le recuit rapide[17]

Pour le bore

$$D_0 = 3 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 3.426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

pour l'arsenic

$$D_0 = 35 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 4.0 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

Application de l'équation finale pour le cas de l'arsenic seul [17,43] :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right] \quad (\text{III.26})$$

avec $D_{i,As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/KT)$

$$\text{et } f = \frac{n}{n_i} = \frac{C_{As}}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As}}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad Z_j = Z_e = +1 \text{ dans l'équation (III.14.a')}$$

dans ce cas l'expression de la diffusivité de l'Arsenic est la suivante :

$$D_{As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/kT) \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right) \quad (\text{III.27})$$

Application de l'équation finale pour le cas du bore seul [17,43]:

sachant que pour le bore $f = p/n_i$, on aura :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] \quad (\text{III.28})$$

avec $D_{i,B} = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/KT)$

$$\text{et } f = \frac{p}{n_i} = \frac{C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_B}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad Z_e = Z_j = -1 \text{ dans l'équation (III.14.b')}$$

l'expression de la diffusivité du bore sera :

$$D_B = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/kT) \frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right) \quad (\text{III.29})$$

III. 4 LA CODIFFUSION DE L'ARSENIC ET DU BORE

La codiffusion de l'arsenic et du bore est en particulier très importante à étudier dans les technologies de fabrication des transistors NPN, où la diffusion de l'émetteur (arsenic), fortement dopé, modifie la diffusion du bore en phase finale du procédé de fabrication.

Le modèle physique utilisé pour l'étude de la diffusion couplée de deux impuretés (arsenic et bore) doit inclure, comme dans le cas d'une seule impureté, l'effet du champ électrique interne et l'influence des lacunes sur la diffusion.

Nous avons alors affaire à deux équations couplées [17,24,25,31,43,44]

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(h_{As} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - (h_{As} - 1) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (III.30)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(h_B \frac{\partial C_B}{\partial x} - (h_B - 1) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (III.31)$$

avec

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_i} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right) \quad (III.32)$$

C désignant la concentration relative soit à l'arsenic soit au bore, selon que l'on considère l'équation (III.30) ou (III.31), et

$$f = \frac{C_{As} - C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \quad (III.33)$$

remarque:

pour la codiffusion on écrit $C_{As} - C_B$ lorsque $C_{As} > C_B$ et $C_B - C_{As}$ lorsque $C_B > C_{As}$

III. 5 METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DES SYSTEMES D'EQUATIONS DE DIFFUSION

Les phénomènes de diffusion peuvent se modéliser par deux approches

- une approche microscopique : la méthode utilisée est la méthode de Monte Carlo qui permet de simuler des distributions de grandeurs aléatoires. La méthode de Monte Carlo consiste en des simulations dans lesquelles des nombres aléatoires sont utilisés pour simuler la migration aléatoire des espèces diffusantes. Des publications récentes ont démontré l'application de cette méthode pour le cas de la diffusion de dopants dans un semiconducteur [45-48]. Néanmoins, cette méthode, à cause des temps de calcul excessivement élevés, ne peut être utilisée dans le cadre d'un logiciel de simulation de procédés technologiques.

- une approche macroscopique : cette méthode aboutit toujours à la résolution d'équations différentielles aux dérivées partielles. Dans les cas simples, les modèles se ramènent à une seule équation différentielle aux dérivées partielles et la solution analytique peut être connue. Dans les modèles plus compliqués, des systèmes non-linéaires d'équations différentielles aux dérivées partielles sont obtenus et une résolution numérique est requise.

Deux types de méthodes existent pour résoudre des équations différentielles aux dérivées partielles : La méthode aux différences finies [49] et celle aux éléments finis [50]. La méthode aux différences finies repose sur l'écriture sous forme de développements limités (développement en série de Taylor) des dérivées partielles. Cette méthode, que nous détaillerons dans la suite, sera bien adaptée à la résolution des équations différentielles obtenues à partir de nos modèles de diffusion.

La méthode des éléments finis est la méthode la plus utilisée pour la résolution numérique des équations différentielles aux dérivées partielles. Le fondement de cette méthode est la méthode des résidus pondérés.

Un premier avantage de la méthode des éléments finis est la facilité de prise en compte des conditions aux limites portant sur les gradients de la fonction ce qui est nettement plus malaisée par la méthode des différences finies.

Le second avantage, qui pour certains problèmes lui assure une suprématie incontestable sur la méthode aux différences finies, est la souplesse dans le choix du maillage : on peut choisir, de façon arbitraire, la position, le nombre et la répartition des nœuds dans la structure de calcul. Alors qu'un maillage à pas non uniforme pose des problèmes dans les méthodes aux différences finies, la réalisation d'éléments de dimensions variables se fait sans difficulté dans la

méthode aux éléments finis. Ceci est particulièrement appréciable pour l'étude de structures pour lesquelles on a besoin d'un maillage serré dans certaines régions et dans le cas d'une résolution multidimensionnelle.

L'inconvénient principal des méthodes aux éléments finis est la difficulté de programmation. Par rapport à celle des méthodes aux différences finies, la programmation est nettement plus longue car plus complexe. En particulier, afin de pouvoir profiter pleinement de la souplesse dans le choix du maillage que donnent les méthodes aux éléments finis, il est nécessaire de disposer d'un programme très complet et général, adaptable à des conditions diverses : un bon programme réalisant ces conditions nécessiterait plusieurs mois de travail (il y a même des thèses complètes sur ce sujet en mathématique).

En résumé, il n'est pas rentable d'écrire un programme d'éléments finis pour résoudre un problème spécifique ce qui est notre cas.

Pour toutes ces raisons, c'est la méthode des différences finies qui sera utilisée. Il faut noter également qu'il existe des méthodes des différences finies optimisées ce qui est le fruit de recherches poussées en mathématique [51,52]. Des méthodes de simulation de la diffusion en deux dimensions sont aussi réalisables [53].

Depuis une quinzaine d'année sont apparus des logiciels de simulation de fabrication de composants microoptoélectroniques. Pour la technologie silicium, il s'agit, notamment, de SUPREM III [54,55] et, pour la technologie III/V, de SUPREM 3.5 [56a,56b]. Récemment, ces deux logiciels ont été regroupés au sein de SUPREM IV [57-59].

Ces logiciels sont très performants car ils permettent, notamment, des simulations en deux voire trois dimensions [60].

Ces logiciels utilisent une résolution numérique par éléments finis en deux dimensions ce qui occasionne, notamment, des temps de calculs très élevés et une complexité mathématique importante. C'est pourquoi nous avons opté pour le développement de nos propres algorithmes de résolution basés sur les différences finies.

Rappel de la 1^{ère} méthode numérique basé sur les différences finies [61] :

Les différences finies :

Soit $u(x,y)$, une fonction de deux variables indépendantes que nous supposons suffisamment différentiable. Ecrivons son développement de Taylor en un point $(x+h,y+k)$:

$$\begin{aligned} u(x+h, y+k) &= u(x, y) + h \cdot \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \\ &+ \frac{h^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{k^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + h \cdot k \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} \\ &+ \dots + \frac{1}{(n-1)!} \left(h \cdot \frac{\partial}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n-1} u(x, y) + R_n \end{aligned}$$

$$\text{avec } R_n = \frac{1}{n!} \left(h \cdot \frac{\partial}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right)^n u(x+ih, y+jk)$$

où $0 < i < 1$ et $0 < j < 1$

ce qui s'écrit encore

$$R_n = o(|h| + |k|)^n$$

Notons :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{i,j} = u(x, y) \\ u_x = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \\ u_{xx} = \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} \\ u_y = \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \end{array} \right.$$

une dérivée par rapport à la variable x peut se définir de trois façons différentes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h, y) - u(x-h, y)}{2 \cdot h} \\ \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h} \\ \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x, y) - u(x-h, y)}{h} \end{array} \right.$$

Considérons maintenant les développements limités des expressions suivantes que l'on note

$$\begin{cases} u(x, y) = u_{i,j} = u_i^j \\ u(x+h, y) = u_{i+1,j} = u_{i+1}^j \\ u(x-h, y) = u_{i-1,j} = u_{i-1}^j \end{cases}$$

Nous obtenons en notant u_{xxx} la dérivée troisième et u_{xxxx} la dérivée quatrième de la fonction u par rapport à la variable x

$$\begin{cases} u_{i-1,j} = u_{i,j} - h \cdot u_x + \frac{h^2}{2!} \cdot u_{xx} - \frac{h^3}{3!} \cdot u_{xxx} + \frac{h^4}{4!} \cdot u_{xxxx} + R_5 \\ u_{i+1,j} = u_{i,j} + h \cdot u_x + \frac{h^2}{2!} \cdot u_{xx} + \frac{h^3}{3!} \cdot u_{xxx} + \frac{h^4}{4!} \cdot u_{xxxx} + R_5 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} u_x = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2 \cdot h} + o(h^2) \\ u_x = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} + o(h) \\ u_x = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} + o(h) \end{cases}$$

La dérivée u_x est approchée par des différences finies d'ordre 1 symétrique, progressive et régressive respectivement.

De même, on obtient la dérivée seconde qui s'écrit

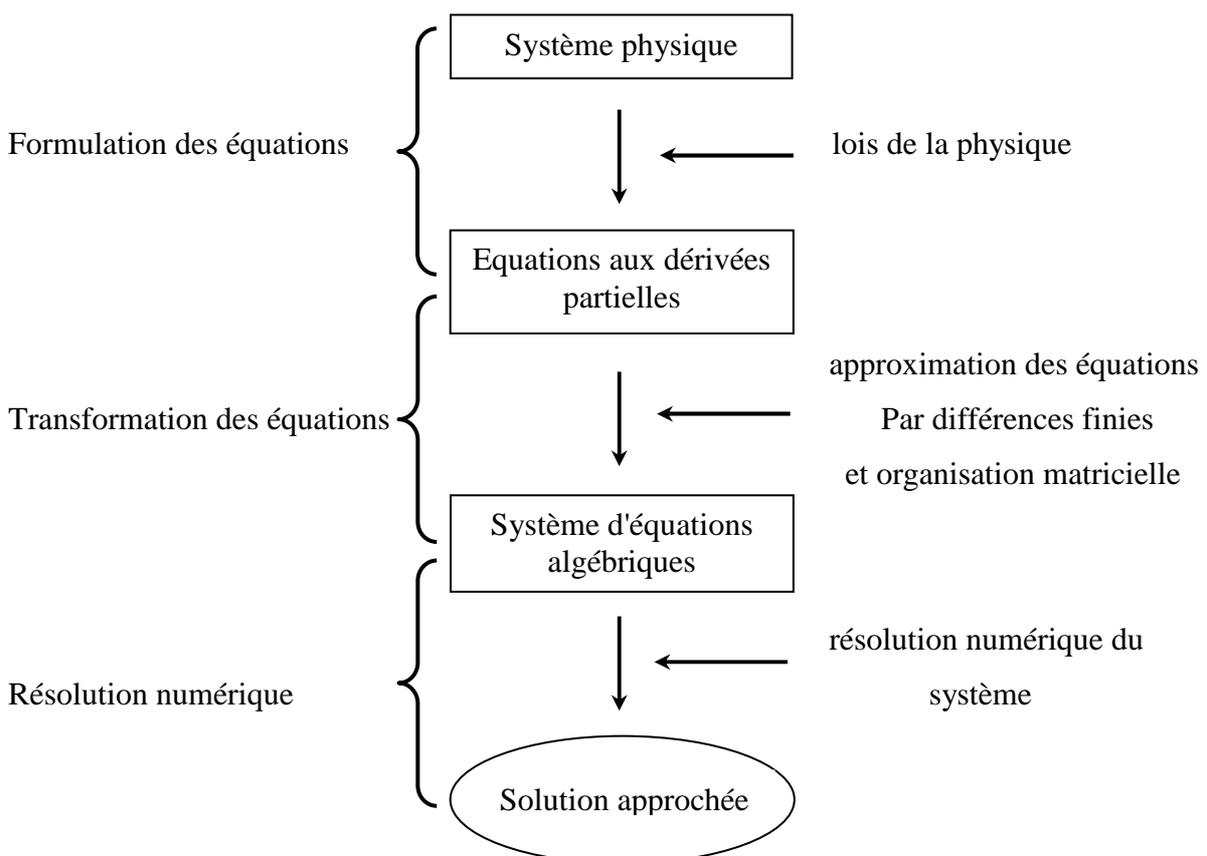
$$u_{xx} = \frac{u_{i+1,j} - 2 \cdot u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + o(h^2)$$

Les mêmes formules s'appliquent pour les dérivées par rapport à la variable y .

III. 6 MODELISATION

Le comportement d'un système physique continu est généralement représenté par un système d'équations aux dérivées partielles associé à des conditions aux limites sur le domaine considéré. Dans la plupart des cas, il n'est pas toujours possible de trouver des solutions analytiques à ces systèmes d'équations différentielles. Pour cela, il faudrait remplacer le système continu par un système discret équivalent dont le comportement est décrit par des équations algébriques qu'on peut résoudre facilement par des méthodes numériques (Méthodes directes : élimination de Gauss, Schmidt,... Méthodes indirectes ou itératives : itération de Gauss et Seidel, itération de Jacobi, ...) [62 - 64].

La méthode des différences finies (approximation par différences finies) que nous allons appliquer va nous permettre de discrétiser les équations aux dérivées partielles ; c'est -à-dire, les remplacer par des équations algébriques équivalentes :



III. 6. 1 : Modélisation de la diffusion simple

Le procédé de diffusion va être simulé à partir d'un algorithme utilisant une méthode numérique implicite des différences finies à une dimension (cas unidimensionnel) ; pour cela on est amené à discrétiser le profil de concentration de dopant (répartition de dopant) en k tranches d'épaisseur Δx et on effectue la diffusion sur de petits intervalles de temps Δt .

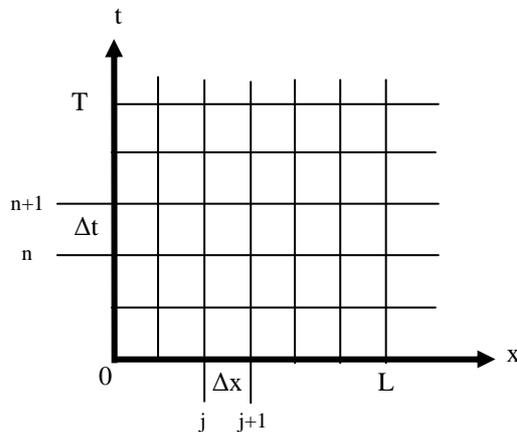


Figure III.1 : Discrétisation de l'espace et du temps

On se fixe deux nombres N_x et N_T qui vont déterminer le nombre de nœuds de calcul ; nous obtenons alors :

$$\Delta x = L/N_x \quad \text{et} \quad \Delta t = T/N_T$$

Le flux de dopants qui passe d'une tranche à une autre ; est exprimé par la première loi de Fick :

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

En discrétisant cette loi, le flux devient :

$$F(n, j) = -D(n, j) \frac{C(n, j) - C(n, j-1)}{\Delta x}$$

Il représente le flux passant de la couche $(j-1)$ à la couche (j) pendant l'intervalle de temps compris entre l'instant $(n-1)\Delta t$ et $n\Delta t$.

La deuxième loi de Fick :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} = -\frac{\partial \left[-D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]}{\partial x} = \frac{\partial \left[D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]}{\partial x}$$

"c'est une équation différentielle aux dérivés partielles non linéaire "

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

Après la discrétisation, la deuxième loi de Fick se traduit de la manière suivante :

$$\frac{C(n,j) - C(n-1,j)}{\Delta t} = -\frac{F(n,j+1) - F(n,j)}{\Delta x} = \frac{F(n,j) - F(n,j+1)}{\Delta x}$$

On remplace le flux dans la deuxième loi par l'expression du flux de la première loi pour arriver à la relation exprimant les concentrations au temps (n) en fonction des concentrations au temps (n-1)

$$\frac{C(n,j) - C(n-1,j)}{\Delta t} = \left[-D(n,j) \frac{C(n,j) - C(n,j-1)}{\Delta x} + D(n,j+1) \frac{C(n,j+1) - C(n,j)}{\Delta x} \right] / \Delta x$$

on pose $\Delta t / (\Delta x)^2 = A_0$ et $A_0 D(n,j) = A(n,j)$

d'où :

$$C(n-1,j) = -A(n,j)C(n,j-1) + [1 + A(n,j) + A(n,j+1)]C(n,j) - A(n,j+1)C(n,j+1) \quad (\text{III.32})$$

Conditions aux limites

a) En surface (Tranche superficielle)

On considère que le flux entre la couche moins un (à l'extérieur du substrat) et la 1^{ère} couche (couche zéro), est nul ($F(n,0) = 0$), autrement dit : $C(n,0) = C(n,-1)$.

D'où, en remplaçant dans l'équation (III.32)

$$C(n-1,0) = [1 + A(n,1)]C(n,0) - A(n,1)C(n,1) \quad (\text{III.33})$$

b)Tranche profonde :

On limite pratiquement la diffusion à une profondeur telle que le flux passant de la k^{ième} couche à la (k+1)^{ième} couche soit nul ($F(n, k+1) = 0$), c'est-à-dire ; $C(n, k) = C(n, k+1)$.

D'où, en remplaçant dans l'équation (III.32)

$$C(n-1, k) = [1 + A(n, k)]C(n, k) - A(n, k)C(n, k-1) \quad (III.34)$$

L'algorithme formé par les équations (III.32),(III.33) et (III.34) permet de déterminer ainsi de proche en proche des approximations de la solution du problème aux divers points du profil de concentrations discrétisé.

Si au temps $t = n.x$, on connaît toutes les valeurs $C(n-1, j)$, l'équation (III.32) permet de calculer les valeurs $C(n, j)$ directement ; mais cette opération nécessite la résolution d'un système d'équation linéaire. La méthode est dite implicite.

On part des trois équations (III.32), (III.33) et (III.34) et on va les écrire d'une façon matricielle (système d'équations) en reliant les concentrations au temps $(n-1)\Delta t$ à celles au temps $n\Delta t$.

$$\begin{bmatrix} C(n-1,0) \\ C(n-1,1) \\ \vdots \\ C(n-1,j) \\ \vdots \\ C(n-1,k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + A(n,1) & - A(n,1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - A(n,1) & 1 + A(n,1) + A(n,2) & - A(n,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & - A(n,j) & 1 + A(n,j) + A(n,j+1) & - A(n,j+1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & - A(n,k) & 1 + A(n,k) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} C(n,0) \\ C(n,1) \\ \vdots \\ C(n,j) \\ \vdots \\ C(n,k) \end{bmatrix}$$

Pour résoudre ce système d'équations, on utilise la méthode d'élimination de Gauss [62-64] à cause de sa simplicité et son efficacité. Elle consiste à la triangularisation de la matrice (annuler tous les éléments placés sous la diagonale principale).

Une fois le système d'équations est devenu triangulaire, il est très facile à résoudre. Pour cela nous utilisons la méthode de "BackSubstitution", ou retours en arrière.

On triangularise la matrice tridiagonale en procédant ligne par ligne, en multipliant la première ligne par $A(n,1)/[1+A(n,1)]$ que l'on ajoute à la deuxième ligne. Pour le terme général "j", on multiplie par $A(n,j)/U_{j-1}$ la " (j-1)^{ème} " ligne, que l'on rajoute à la j^{ème} ligne. Le facteur U_j est judicieusement choisi dans le but d'annuler le terme placé sous la diagonale principale (on conserve la première ligne inchangée).

Pour conserver l'égalité, on effectue la même série d'opérations sur le premier terme, c'est à dire le vecteur $C(n-1, j)$ qui devient $K(n-1,j)$, on obtient alors :

$$\begin{bmatrix} K(n-1,0) \\ K(n-1,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ K(n-1,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ K(n-1,k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_0 & -A(n,1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_1 & -A(n,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_j & -A(n,j+1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C(n,0) \\ C(n,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,k) \end{bmatrix} *$$

Avec :

$$\begin{aligned} U_0 &= 1+A(n, 1) \\ U_1 &= [1+A(n, 1)+ A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2/U_0 \\ &\dots \\ U_j &= [1+A(n, j)+ A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2/U_{j-1} \\ &\dots \\ U_k &= [1+A(n, k)] - [A(n, k)]^2/U_{k-1} \end{aligned} \tag{III.35}$$

Et avec :

$$\begin{aligned} K(n-1, 0) &= C(n-1, 0) \\ K(n-1, 1) &= C(n-1, 1) + [K(n-1, 0).A(n, 1)]/U_0 \\ &\dots \\ K(n-1, j) &= C(n-1, j) + [K(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1} \\ &\dots \\ &\dots \\ K(n-1, k) &= C(n-1, k) + [K(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1} \end{aligned} \tag{III.36}$$

L'équation générale qui traduit la deuxième expression matricielle écrite ci-dessus peut être écrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} K(n-1, j) &= U_j.C(n, j) - A(n, j+1).C(n, j+1) \\ \text{Avec } K(n-1, k) &= U_k.C(n, k) \end{aligned}$$

Il n'y a plus qu'à "remonter" la matrice. On initialise à $j = k$, puis on décrémente j par pas de 1. On obtient enfin l'expression des $C(n, j)$ que l'on utilise dans l'algorithme

$$\begin{aligned} C(n, j) &= [K(n-1, j) + A(n, j+1).C(n, j+1)]/U_j \\ C(n, k) &= K(n-1, k)/U_k \end{aligned} \tag{III.37}$$

On pourra donc calculer les concentrations pendant le pas de temps n à partir des concentrations au pas de temps $n-1$. Mais pour cela, il faudra utiliser les diffusivités au temps $n-1$ et non au temps n , que nous ne connaissons pas encore. Ceci constitue un élément d'imprécision dans le calcul. Il s'avère négligeable en pratique[17,24,25].

D'autre part pour que le calcul soit valable, et après avoir calculé la première fois les $C(n, j)$, on recalcule les coefficients de diffusion, donc la matrice, tout en restant au point initial $n-1$, et ainsi de suite, jusqu'à satisfaire un critère de convergence de type[17,24,25].

$$\sum_{i=1}^k \left| \frac{C(n, j)^p - C(n, j)^{p-1}}{C(n, j)^{p-1}} \right| < \varepsilon \quad (\text{III.38})$$

ε est de l'ordre de 10^{-4} à 10^{-3}

telque:

$C(n, j)^p$: désigne la concentration à l'itération p

$C(n, j)^{p-1}$: désigne la concentration à l'itération $p-1$

II.6.2: Modélisation de la codiffusion

Lors de la diffusion simultanée de deux dopants, le dopant B (le bore par exemple) agit sur le dopant A (arsenic) par l'intermédiaire de l'effet du champ électrique interne et l'influence des lacunes. Comme dans notre cas les deux dopants sont de types opposés (l'un est donneur, l'autre est accepteur), le deuxième dopant va réduire la diffusivité du premier par l'effet du champ (et réciproquement).

Reprenons les équations coupées de la codiffusion (III.30) et (III.31)

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(h_{As} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - (h_{As} - 1) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.30})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(h_B \frac{\partial C_B}{\partial x} - (h_B - 1) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.31})$$

avec :

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_I} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right) \quad (\text{III.32})$$

C désignant la concentration relative soit à l'arsenic soit au bore, selon que l'on considère l'équation (III.30) ou (III.31).

$$\text{et} \quad f = \frac{C_{As} - C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad \mathbf{f = n / n_i} \quad (\text{III.33})$$

Les équations (III.30) et (III.31) peuvent être écrites sous la forme :

Pour l'arsenic :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(\left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.39})$$

de même, on a pour le bore :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(\left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} - \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.40})$$

Ainsi, si "m" est le nombre d'impuretés diffusantes, on obtient un système de m équations non linéaires couplées, le couplage se faisant par la valeur des concentrations, ainsi que par leur gradient.

On va s'intéresser à l'écriture des équations de Fick pour le cas, par exemple, de l'arsenic.

La première loi de Fick s'écrit :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} = -D(n, j) \frac{C(n, j) - C(n, j-1)}{\Delta x} \quad (\text{Flux d'arsenic, s'il était considéré seul})$$

$$G = -L \frac{\partial E}{\partial x} = -L(n, j) \frac{E(n, j) - E(n, j-1)}{\Delta x} \quad (\text{Flux traduisant l'influence du bore sur l'arsenic})$$

C(n, j) : Concentration d'arsenic au temps n.

D(n, j) : Diffusivité de l'arsenic considéré seul.

E(n, j) : Concentration du bore au temps n.

L(n, j) : Diffusivité traduisant l'influence du bore sur l'arsenic.

La deuxième loi de Fick s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} + L \frac{\partial E}{\partial x} \right) \quad (\text{III.41})$$

Avec :

$$D = D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

et

$$L = -D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(\frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

La discrétisation de l'équation (III.41) est similaire à celle de la diffusion simple :

$$\frac{C(n, j) - C(n-1, j)}{\Delta t} = \frac{F(n, j) - F(n, j+1)}{\Delta x} + \frac{G(n, j) - G(n, j+1)}{\Delta x}$$

On remplace les deux expressions du flux et on pose :

$$\Delta t / \Delta x^2 = A_0 \quad , \quad A_0 \cdot D(n, j) = A(n, j) \quad \text{et} \quad A_0 \cdot L(n, j) = H(n, j)$$

On obtient après mixage des équations écrites ci-dessus, l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \mathbf{C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1)} \\ & = -\mathbf{A(n, j)C(n, j-1) + [1 + A(n, j) + A(n, j+1)]C(n, j) - A(n, j+1)C(n, j+1)} \end{aligned} \quad (\text{III.42})$$

Conditions aux limites :

+ En surface :

$$F(n, -1) = 0 \quad C(n, -1) = C(n, 0) \quad \text{et} \quad G(n, -1) = 0 \quad E1(n, -1) = E(n, 0), \text{ donc :}$$

$$C(n-1, 0) + H(n, 1)[E(n, 1) - E(n, 0)] = [1 + A(n, 1)]C(n, 0) - A(n, 1)C(n, 1) \quad (\text{III.43})$$

+ En profondeur :

$$F(n, k+1) = 0, \quad C(n, k+1) = C(n, k), \quad \text{et} \quad G(n, k+1) = 0, \quad E(n, k+1) = E(n, k), \text{ donc :}$$

$$C(n-1, k) + H(n, k)[E(n, k-1) - E(n, k)] = [1 + A(n, k)]C(n, k) - A(n, k)C(n, k-1) \quad \text{III.44}$$

On peut remarquer que l'équation (III.42) ressemble à l'équation (III.32) de la diffusion simple : le deuxième terme de l'égalité est le même et il a rajouté au premier terme, l'expression qui traduit l'influence du bore sur l'arsenic.

On peut réécrire l'équation (III.42), en remplaçant son premier terme par $C'(n-1, j)$ d'où :

$$C'(n-1, j) = -A(n, j)C(n, j-1) + [1 + A(n, j) + A(n, j+1)]C(n, j) - A(n, j+1)C(n, j+1) \quad \text{III.45}$$

Avec :

$$C'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + L(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) \quad \text{III.46}$$

Nous n'allons donc pas refaire la totalité du calcul effectué dans la partie diffusion, mais simplement réécrire les équations : (III.35), (III.36) et (III.37) en remplaçant les $C(n, j)$ par $C'(n, j)$.

Le calcul de U reste inchangé. On exprime les U_j en fonction des $D(n, j)$ en sachant que :

$$A_0.D(n, j) = A(n, j)$$

$$\begin{aligned} U_0 &= 1 + A(n, 1) \\ U_1 &= [1 + A(n, 1) + A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2 / U_0 \\ &\vdots \\ U_j &= [1 + A(n, j) + A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2 / U_{j-1} \\ &\vdots \\ U_k &= [1 + A(n, k)] - [A(n, k)]^2 / U_{k-1} \end{aligned} \quad \text{III.35'}$$

Les équations de la diffusion simple (III.36) deviennent dans le cas de la codiffusion :

$$\begin{aligned} K'(n-1, 0) &= C'(n-1, 0) \\ K'(n-1, 1) &= C'(n-1, 1) + [K'(n-1, 0).A(n, 1)] / U_0 \\ &\dots \\ K'(n-1, j) &= C'(n-1, j) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)] / U_{j-1} \\ &\dots \\ &\dots \\ K'(n-1, k) &= C'(n-1, k) + [K'(n-1, k-1).A(n, k)] / U_{k-1} \end{aligned}$$

On remplace les $C'(n, j)$ par l'expression écrite plus haut (III.46), on obtient :

$$K'(n-1, 0) = C(n-1, 0) + H(n, 0)E(n, -1) - [H(n, 0) + H(n, 1)]E(n, 0) + H(n, 1)E(n, 1)$$

...

$$K'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1}$$

...

$$K'(n-1, k) = C(n-1, k) + H(n, k)E(n, k-1) - [H(n, k) + H(n, k+1)]E(n, k) + H(n, k+1)E(n, k+1) + [K'(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1}$$

Les conditions aux limites données dans le cas de la diffusion simple ont leurs équivalents dans le cas de la codiffusion

$$+ \text{ En surface : } \quad C(n, -1) = C(n, 0) \quad \text{et} \quad E(n, -1) = E(n, 0)$$

$$+ \text{ En profondeur : } \quad C(n, k+1) = C(n, k) \quad \text{et} \quad E(n, k+1) = E(n, k)$$

On remplace ces conditions dans le dernier système d'équations, on obtient :

$$K'(n-1, 0) = C(n-1, 0) + H(n, 1)[E(n, 1) - E(n, 0)]$$

...

$$K'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1} \quad (\text{III.36'})$$

...

$$K'(n-1, k) = C(n-1, k) + H(n, k)[E(n, k-1) - E(n, k)] + [K'(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1}$$

Et les équations (III.37) dans le cas de la simple diffusion deviennent en codiffusion :

$$C(n, j) = [K'(n-1, j) + A(n, j+1).C(n, j+1)]/U_j \quad (\text{III.37'})$$

$$C(n, k) = K'(n-1, k)/U_k$$

Ainsi, les équations (III.35'), (III.36') et (III.37') vont nous permettre de calculer les nouvelles concentrations d'arsenic à partir des concentrations initiales d'arsenic et du bore.

On peut réécrire un système d'équations : (III.35"), (III.36") et (III.37"), qui nous permet de calculer les concentrations du bore d'une façon similaire. Il suffit de remplacer dans le système d'équations précédent toutes les concentrations C par E, tous les E par C, tous les D par B (diffusivité du bore seul) et enfin les H par M (diffusivité traduisant l'influence de l'arsenic sur le bore).

On pose :

$$A_0 \cdot B(n, j) = A(n, j)$$

Donc :

$$U_0 = 1 + A(n, 1)$$

$$U_1 = [1 + A(n, 1) + A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2 / U_0$$

...

$$U_j = [1 + A(n, j) + A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2 / U_{j-1} \quad \text{III.35"}$$

...

$$U_k = [1 + A(n, k)] - [A(n, k)]^2 / U_{k-1}$$

et

$$K''(n-1, 0) = E(n-1, 0) + M(n, 1)[C(n, 1) - C(n, 0)]$$

...

$$K''(n-1, j) = E(n-1, j) + M(n, j)C(n, j-1) - [M(n, j) + M(n, j+1)]C(n, j) + M(n, j+1)C(n, j+1) + [K''(n-1, j-1) \cdot A(n, j)] / U_{j-1} \quad \text{(III.36"}$$

...

$$K''(n-1, k) = E(n-1, k) + M(n, k)[C(n, k-1) - C(n, k)] + [K''(n-1, k-1) \cdot A(n, k)] / U_{k-1}$$

On obtient enfin :

$$E(n, j) = [K''(n-1, j) + A(n, j+1) \cdot E(n, j+1)] / U_j \quad \text{(III.37"}$$

$$E(n, k) = K''(n-1, k) / U_k$$

Avec :

$$B = D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

$$M = -D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(\frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

:

$$f = \frac{(C_{As} - C_B)}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1}$$

La structure de l'algorithme est donc la suivante : à chaque pas sur le temps, on résout (III.37'), c'est à dire la diffusion de l'arsenic, le profil de bore restant inchangé. Puis on calcule (III.37''), cette fois-ci le bore variant, l'arsenic restant fixe. Autrement dit, qu'on va considérer la diffusion d'un dopant en supposant l'autre fixe, et vice versa, à chaque pas sur le temps.

Si alors le critère de convergence (III.38) sur les deux dopants est vérifié, on passe au nouveau pas sur le temps. Sinon on revient à l'équation (III.37'). On a aussi, lors d'essais, fait converger l'arsenic puis ensuite le bore, ou l'inverse, à chaque pas de temps.

L'algorithme de la codiffusion de l'arsenic et du bore est détaillé dans l'annexe.

III.7 :ALGORITHME ET STRUCTURE DU PROGRAMME

III.7.1 :Détermination du pas de temps dt :

dt est déterminé du cycle thermique. On considère la durée comprise entre le moment où la température est à 600°C (partie ascendante de la courbe) et le moment où la température est à nouveau à 600°C (partie descendante de la courbe). Cette durée est alors divisée par 900.

$$dt = (t_{600\downarrow} - t_{600\uparrow})/900$$

On considère donc 900 pas de temps.

III.7.2:Determination du pas d'espace dx :

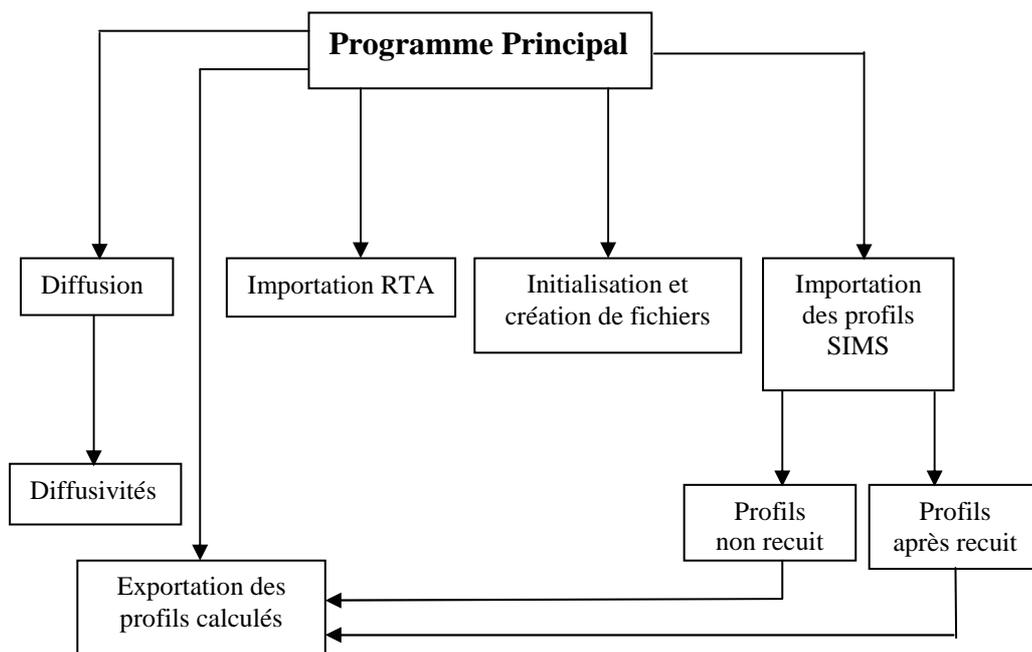
dx est déterminée du profil initial". On considère la profondeur à partir de laquelle les concentrations de dopant sont négligeables (inférieure à 10^{17} ats/cm³), et on prend :

$$dx = \text{prof}(C > 10^{17}) / 100.$$

On considère initialement 100 pas d'espace, mais ce nombre de pas pourra évoluer avec le temps. En effet au bout d'un certain temps de calcul, la concentration au centième pas d'espace (en profondeur) n'est plus négligeable. On introduit alors dans l'algorithme une condition qui augmente le nombre de pas d'espace sur lequel on travaille si la concentration en "bout du profil" atteint 10^{17} (cette augmentation progressive du nombre du pas d'espace permet de minimiser le temps de calcul).

III.7.3 :Structure (organisation) générale du simulateur (programme) :

Le simulateur est écrit en langage PASCAL et se présente sous forme de plusieurs procédures (sous programmes) ce qui permet d'optimiser la résolution numérique. Il est segmenté en un programme principal qui appelle des procédures, elles-même susceptible d'appeler des sous procédures ou de s'appeler entre elles.



III.7.3.1: Procédure diffusion

Elle constitue le cœur du programme, c'est là que le calcul des concentrations du profil de diffusion est fait.

III.7.3.2: Procédure diffusivités :

Elle calcule les diffusivités à chaque pas de temps.

III.7.3.3: Procédure importation des profils SIMS :

Elle sert à importer les profils SIMS (les valeurs des concentrations en fonction de la profondeur avant recuit) de façon à les traiter au moyen de la procédure de diffusion.

Elle fait appel à "import initial" pour les profils avant recuit et à "import final" pour les profils après recuit.

III.7.3.4: Procédure importation RTA :

Elle sert à importer les profils des cycles thermiques de façon à les traiter au moyen de la procédure de diffusivités.

III.7.3.5: Procédure d'exportation des résultats :

Elle sert à exporter les résultats calculés après recuit de façon à visualiser les profils de concentrations et de les comparer aux profils réels.

Le logiciel utilisé pour le traçage et la visualisation des profils est "ORIGIN."

L'importation et l'exportation des données ont été faites entre le logiciel "origin" et le langage de programmation "pascal".

Les différentes variables du simulateur :

La variable choisie pour stocker les données relatives aux concentrations est une variable de type fichier. Elle est constituée d'enregistrements, chaque enregistrement contient quatre profils de concentration sous la forme de tableaux de 200 réels, ainsi que la valeur de la dose implantée, de l'énergie d'implantation et de quelques autres données à caractère purement informatique.

Les enregistrements sont numérotés dans l'ordre de création, le premier ayant le numéro zéro.

La variable choisie, pour stocker les données relatives aux températures est aussi une variable de type fichier. Chaque enregistrement contient un profil de cycle thermique sous la forme de tableau de 900 réels, ainsi que la température et la durée de recuit et le pas de temps.

Les fichiers choisis pour l'importation et l'exportation des données, entrées (SIMS) et sorties (calculées) sont des variables de type TXT (fichiers texte).

Un exemple d'exécution du simulateur :

Le nom du fichier exécutable est : MONODIF-B

Pour lancer l'exécutable, il suffit de taper le nom du fichier puis valider avec entrez.

L'exécution du simulateur commence par l'affichage du titre de la diffusion choisi :

SIMULATION DE LA DIFFUSION DU BORE

Ensuite un menu contenant des choix est proposé. Il suffit de taper le numéro de l'opération désirée et de valider avec entrez (OK).

Désirez-vous :

- 1- Modéliser la diffusion à partir du profil initial réel ? taper 1*
- 2- Importer les concentrations d'un profil SIMS ? taper 2*
- 3- Importer les températures d'un cycle thermique ? taper 3*
- 4- Créer ou ouvrir un fichier en écriture ? taper 4*
- 5- Sortir du programme ? taper 5*

Dans notre cas les opérations 2, 3 et 4 sont déjà faites. Donc on passe au premier choix. Pour cela on tape 1 puis en valide, la modélisation de la diffusion commence.

Les données des profils SIMS sont stockées dans des fichiers qu'on va travailler avec.

Donnez le nom du fichier contenant les concentrations initiales et finales réelles

On écrit le nom du fichier contenant les concentrations puis on valide.

Dans notre simulateur il y a deux possibilités permettant de trouver l'emplacement (le chemin) du fichier.

1- Le chemin du fichier est prédéfini, donc on n'aura pas besoin de le taper. dans notre cas c'est d:\bp\bin\diffus1\imexport\dif-bore\

Il faut que le fichier contenant les concentrations soit dans le répertoire et le chemin mentionné. Si le chemin n'existe pas il faut le créer et stocké le fichier des concentrations dans le répertoire dif-bore.

2- le chemin du fichier n'est pas défini, dans ce cas vous avez la possibilité de stocker votre fichier contenant les concentrations ou vous voulez, mais, au lieu de donner uniquement le nom du fichier, vous devez taper tout le chemin y compris le nom du fichier

Par mesure de simplification on a opté pour la première possibilité.

N.B: le fichier des concentrations contient les concentrations du profil initial réel (avant recuit) et aussi celles du profil final réel (après recuit).

Nous avons opté pour cette méthode pour avoir après la modélisation un fichier contenant les concentrations initiales réelles, finales réelles et finales théoriques (calculées) ce qui nous permet de tracer leurs profils dans un même repère afin de les comparer.

On choisit par exemple le nom BORE1 pour le fichier des concentrations. Tapez le nom puis validez.

*Il y a N double implantations ioniques, choisissez celle qui vous convient :
de 1..N
N =*

Le fichier BORE1 contient N enregistrements, où chacun contient des données pour une implantation bien déterminée, tel que : les concentrations initiales et finales réelles, la dose d'implantation, l'énergie d'implantation, ...etc.

Tapez par exemple 1 puis validez.

*Sachant que l'implantation choisie a pour caractéristiques :
Dose d'implantation = $2 \cdot 10^{15}$ a/cm²
Energie d'implantation = 30 keV
Température de recuit = 1000°C
Durée de recuit = 20 s*

Confirmation du choix

L'étape suivante est le choix du cycle thermique :

Donner le nom du fichier contenant les températures

Les mêmes options de choix du chemin du fichier contenant les concentrations sont utilisées pour les cycles thermiques.

On tape par exemple le nom CYCLE1 puis on valide

*Il y a N cycles thermiques, choisissez celui qui vous convient de 1..N
N=*

Tapez par exemple 1 puis validez.

*Sachant que le cycle thermique choisi a pour caractéristiques :
Température de recuit = 1000°C
Durée de recuit = 20 s*

Confirmation du choix

Remarque: pour chaque implantation choisie correspond un cycle thermique précis. C'est-à-dire que si l'implantation n°1 avait subi un recuit à 1000°C pendant 20s, on doit choisir le cycle thermique correspondant à une température de recuit de 1000°C pendant 20s.

Début de la modélisation

*L'équation du coefficient de diffusion est de la forme
 $D = D_B \exp(-E_B/KT) * ((1+\beta f/1+\beta)) * h$*

*La valeur de la diffusivité du bore est $D_B = 0.5554 \text{ cm}^2/\text{s}$
et la valeur de l'énergie d'activation est $E_B = 3.426 \text{ eV}$
et la valeur de Beta B est $\beta = 19$*

*voulez vous modifier D_B ? si oui tapez 1 si non tapez 2
voulez vous modifier E_B ? si oui tapez 1 si non tapez 2
voulez vous modifier Beta B ? si oui tapez 1 si non tapez 2*

évolution du profil de la diffusion

exportation des résultats

Donner le nom du fichier recevant les résultats (concentrations) finaux

Donner le nom du fichier recevant les résultats (diffusivités) finaux

Taper un nom au **choix** pour le fichier recevant les résultats puis valider.

Les mêmes options de choix du chemin du fichier contenant les concentrations initiales et/ou celles des cycles thermiques sont utilisées pour le fichier recevant les résultats simulés.

Fin de la modélisation

Maintenant, il vous reste d'importer le fichier résultat de la modélisation (c'est un fichier de type txt) par le logiciel "ORIGIN" ou un autre logiciel trace graphes et de tracer les courbes.

CHAPITRE IV

SIMULATIONS ET RESULTATS

IV : SIMULATION ET RESULTATS

IV.1 : Introduction

Un simulateur de procédés de fabrication de composants à semi-conducteurs permet d'étudier la faisabilité d'une technologie et de l'optimiser en ajustant, par exemple, des paramètres tels que la dose et l'énergie d'implantation des dopants, les coefficients de diffusion, les températures et durées de recuit. On peut ainsi réduire le coût expérimental.

IV.2 : Simulation des profils

On a simulé via, le simulateur réalisé, les profils de diffusion simple et de codiffusion de l'arsenic et du bore, après un RTA, en utilisant les paramètres par défaut du simulateur. Il nous est donc facile de comparer ces profils calculés, aux profils SIMS expérimentaux. Nous avons remarqué une nette différence entre les profils SIMS et ceux calculés (FiguresVI.1.a, b, c, d) (FiguresIV.2.a, b, c, d) (FigureIV.3.a, b, c, d, e, f, g). Ceci nous a amenés à ajuster de nouveau les profils, en jouant sur le paramètre prépondérant, en l'occurrence dans notre cas, **le coefficient de diffusion** des dopants arsenic et bore dans le monosilicium.

Les paramètres par défaut couramment utilisés pour le bore [17, 38, 42, 43], pour un Recuit Thermique Classique (RTC) dans du monosilicium sont (modèle de Fair et Tsai) :

$$D_{oB} = 0.5554 \text{ cm/s}$$

$$E_{oB} = 3.42 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

Pour l'arsenic ils deviennent [17, 38, 42, 43] :

$$D_{oAs} = 22.83 \text{ cm/s}$$

$$E_{oAs} = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100.$$

D_0 et E_0 sont respectivement le facteur de diffusivité et l'énergie d'activation.

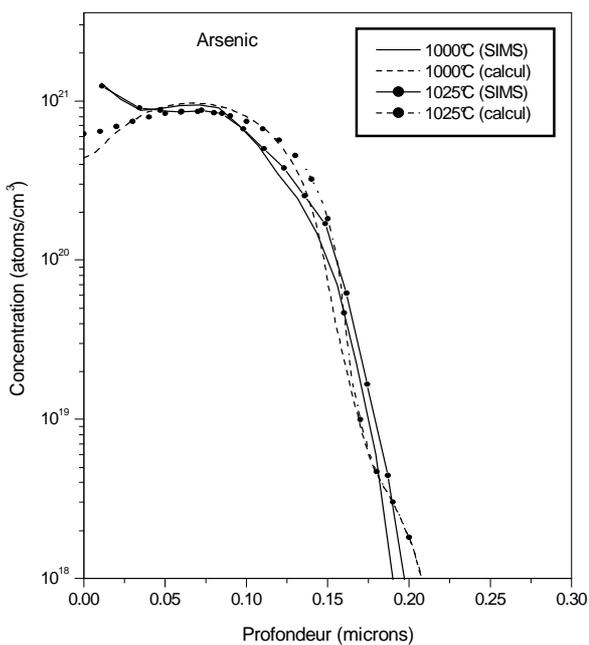


Figure IV.1.a

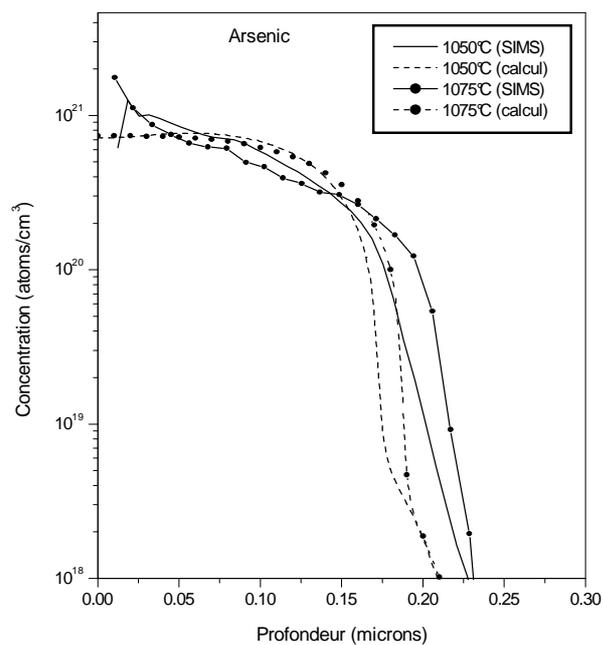


Figure IV.1.b

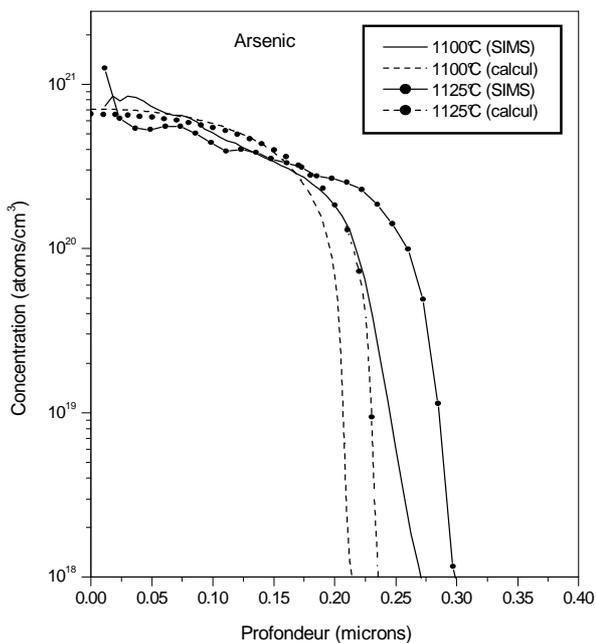


Figure IV.1.c

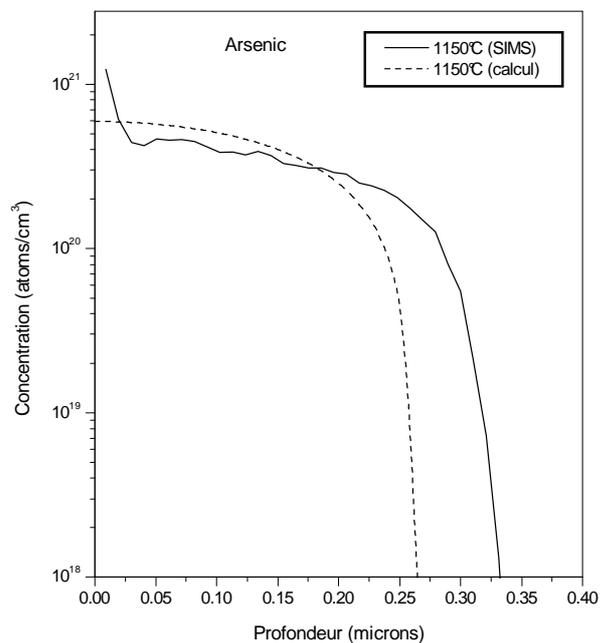


Figure IV.1.d

Figures IV.1.a, b, c, d : Comparaison des profils de diffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic recuit à 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de 20 secondes

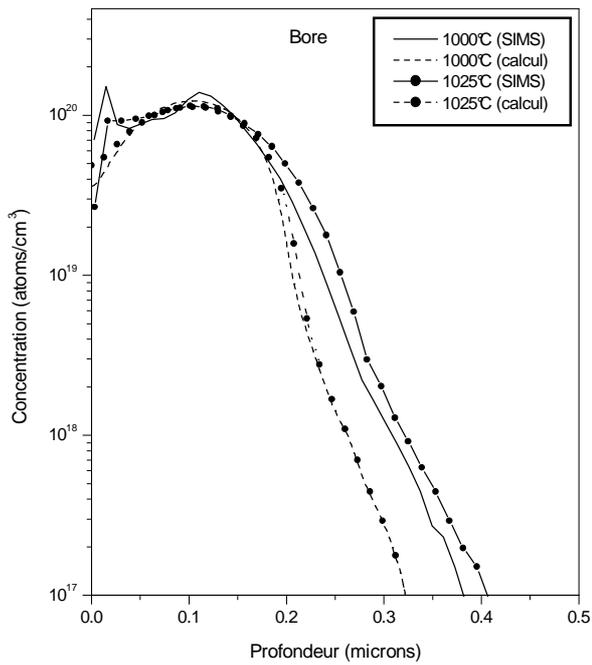


Figure IV.2.a

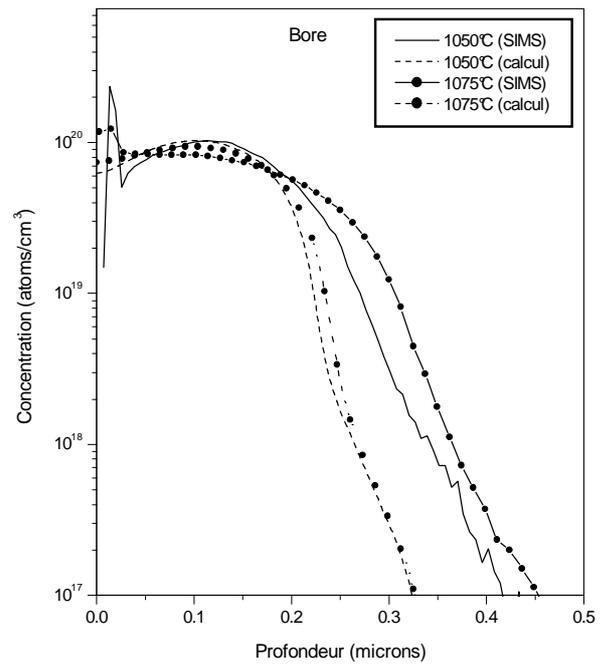


Figure IV.2.b

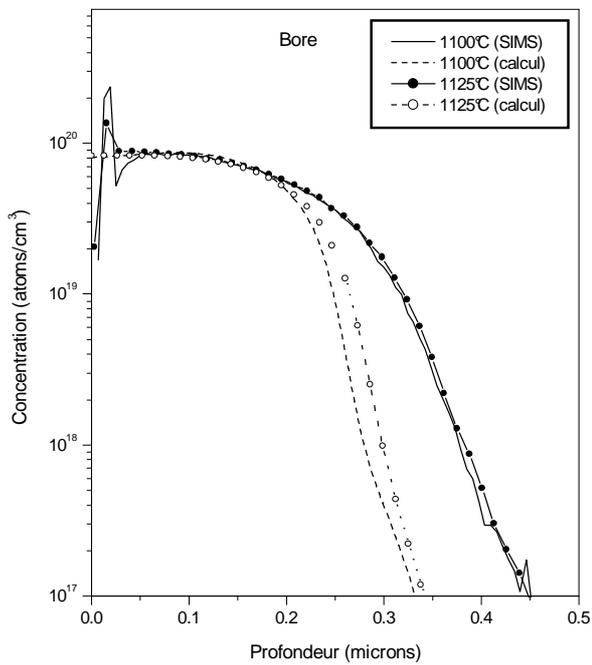


Figure IV.2.c

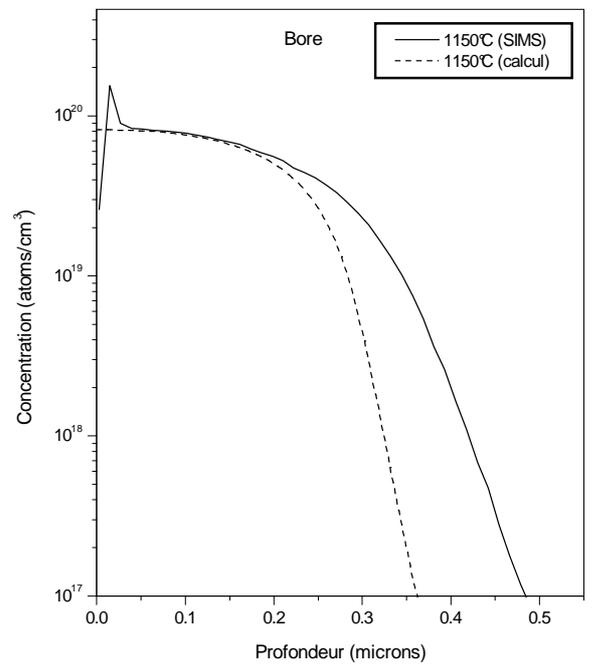


Figure IV.2.d

Figures IV.2.a, b, c, d : Comparaison des profils de diffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) du Bore recuit à 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de 20 secondes

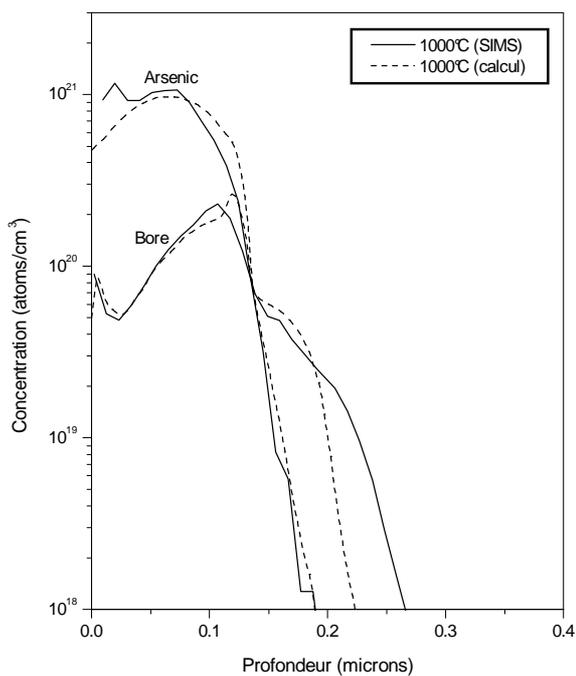


Figure IV.3.a

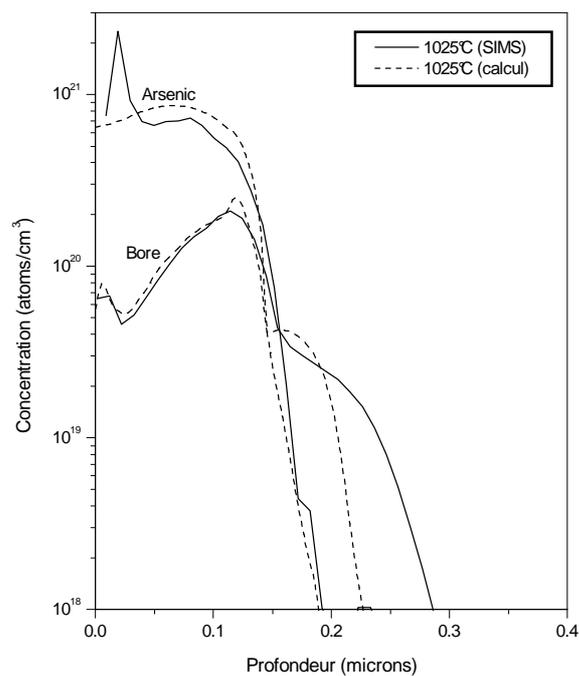


Figure IV.3.b

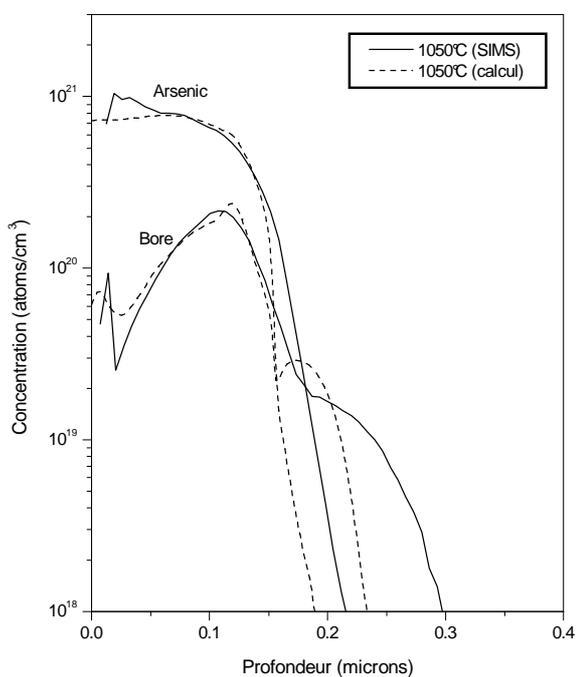


Figure IV.3.c

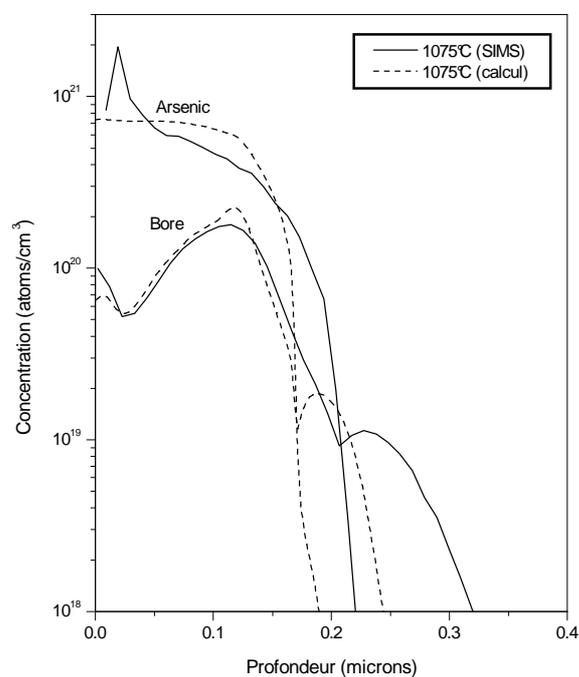


Figure IV.3.d

Figure IV.3.a, b, c, d : Comparaison des profils de codiffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic et du Bore à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

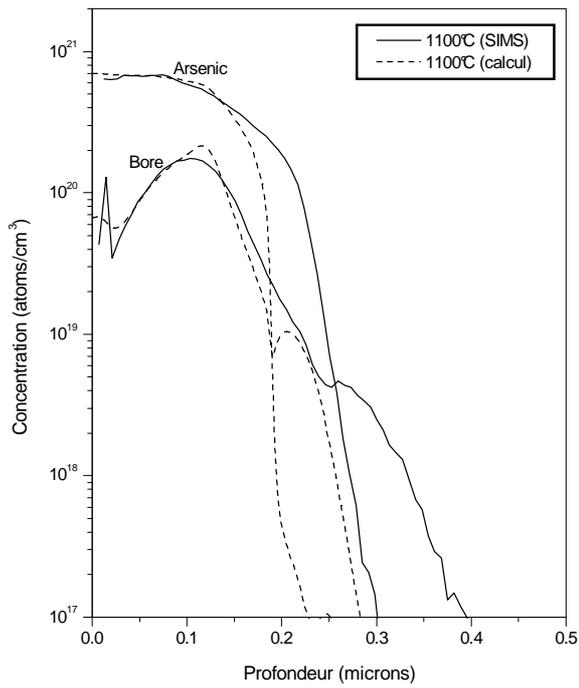


Figure IV.3.e

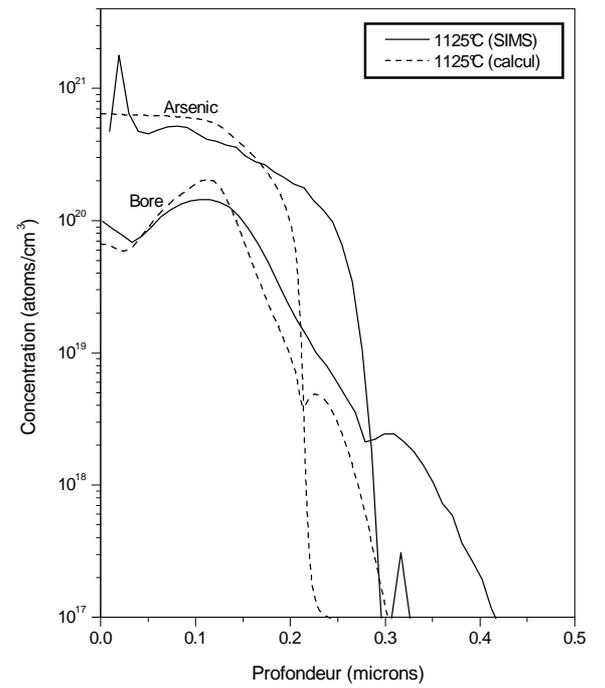


Figure IV.3.f

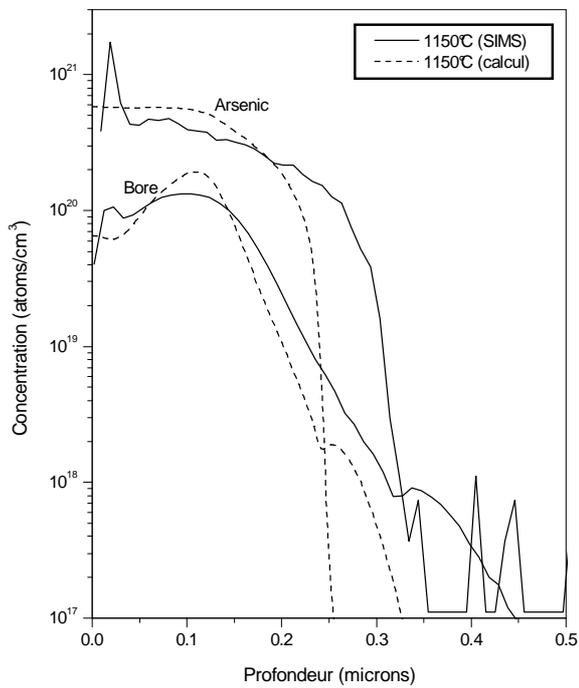


Figure IV.3.g

Figure IV.3.e, f, g : Comparaison des profils de codiffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic et du Bore à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

IV.3 : Simulation des profils d'Arsenic

Les meilleurs paramètres obtenus pour ajuster les profils expérimentaux (SIMS) et calculés sont :

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D ₀ (cm ² /s)	25	30	35	35	40	50	50

Nos valeurs conduisent à une diffusion plus importante que dans le cas d'écrit par Fair et Tsai [17,38,42,43]. En effet, même si ces derniers font des recuits à des températures allant jusqu'à 1200°C, ils ne se placent pas du tout dans le cadre du recuit thermique rapide, mais dans celui des recuits conventionnels (durée de l'ordre de 30 minutes). Or la durée de vie moyenne des défauts induits par l'implantation est typiquement de l'ordre de quelques secondes [25]. En conséquence, ces défauts ont peu d'influence sur la diffusivité dans les expériences de Fair et Tsai. Par contre, durant les RTA, ces défauts jouent un rôle primordial et accélèrent la diffusion. Il est donc logique que nous obtenions des valeurs de D supérieures à celles de Fair et Tsai.

On peut constater que l'accord est globalement bon entre la théorie et l'expérience (Fig. IV.4.a, b, c, d, e, f, g). Cependant on note une différence de pente en surface notable surtout à 1000, 1025, 1050 et 1075°C, et en queue de distribution, cette fois-ci plus nette à 1100 °C.

En surface, la forte concentration, de l'ordre de 10^{21} at/cm³, peut entraîner la formation d'agglomérats qui peuvent ralentir la diffusion. Qui plus est, dans ce cas-là, l'activité électrique ne serait pas totale, ce qui peut être dommageable pour le gain en courant des transistors [24]. La diffusion limitée de l'arsenic, induisant des profils de forme rectangulaire, peut être expliqué par le faible coefficient de diffusion intrinsèque de ce dopant ne permettant pas d'obtenir des taux de sursaturation de lacunes suffisants pour créer une accélération significative de la queue de courbe [26]. Néanmoins nous avons été amenés à porter D₀ à une valeur plus grande que pour les recuits classiques qui peuvent durer plusieurs dizaines de minutes, voire plusieurs heures ; l'arsenic, à une telle dose, a amorphisé le silicium sur une certaine épaisseur en surface. Lors du recuit cette zone se recristallise rapidement, en quelques millisecondes [65], et l'interface silicium amorphe-silicium monocristallin injecte des défauts en profondeur qui

peuvent être la cause de cette diffusion légèrement accélérée, puis elle devient lente en queue de distribution.

Finalement nous portons sur les mêmes figures (IV.4.a, b, c, d, e, f, g) et figure (IV.6.a) le coefficient de diffusion du modèle utilisé, ceci pour les différentes températures de recuit.

Il y est représenté la diffusivité en régime stationnaire, c'est-à-dire à la fin des recuits, en pratique à 600°C. Ce coefficient suit de façon linéaire la concentration.

Les coefficients de diffusion trouvés suivent le modèle donné par la relation III.27 :

$$D_{As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/kT) \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right)$$

On remarque que le coefficient de diffusion diminue avec la profondeur pour toutes les températures de recuit considérées dans notre travail (figure IV.6.a). De même, D_0 augmente lorsque la température augmente. Ceci montre que la diffusion est rapide au-delà de la surface et elle devient lente en profondeur (à la queue de distribution) ce qui est confirmé par les profils expérimentaux.

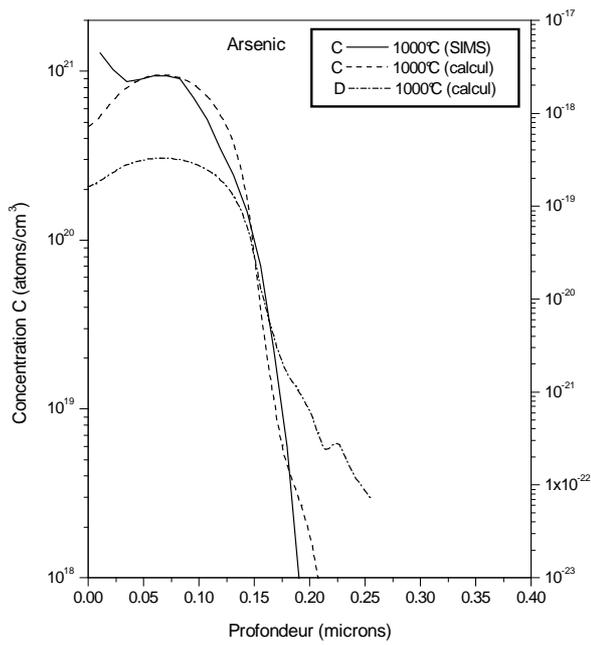


Figure IV.4.a

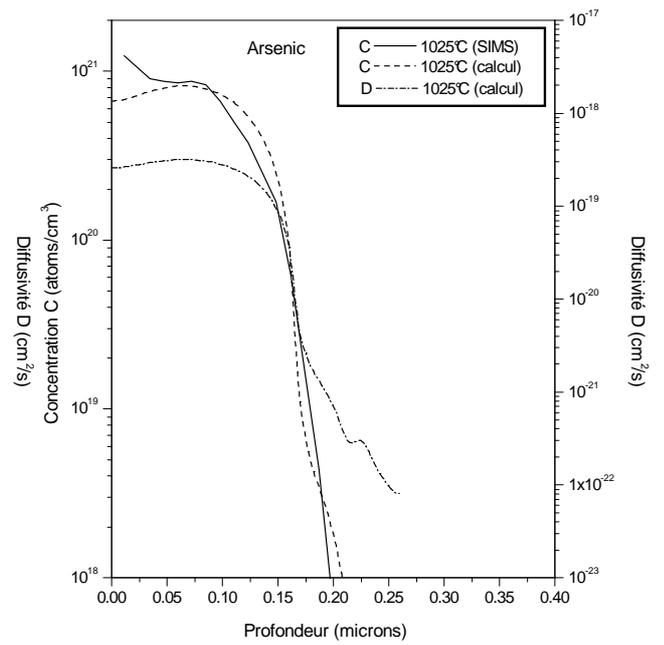


Figure IV.4.b

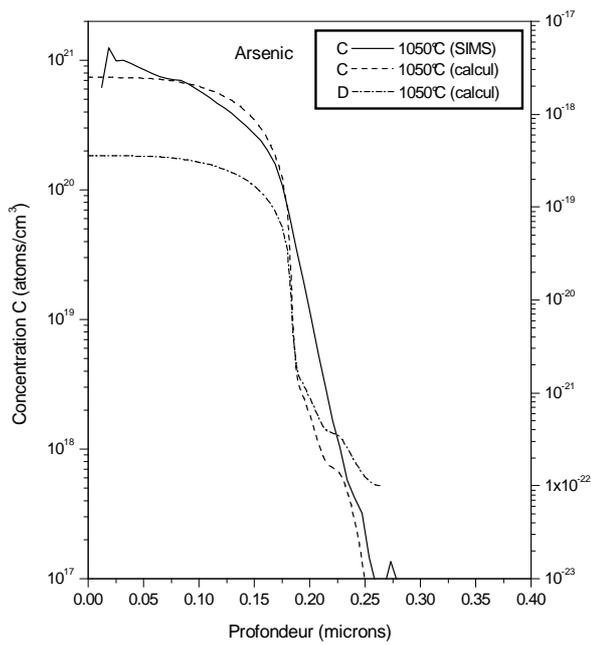


Figure IV.4.c

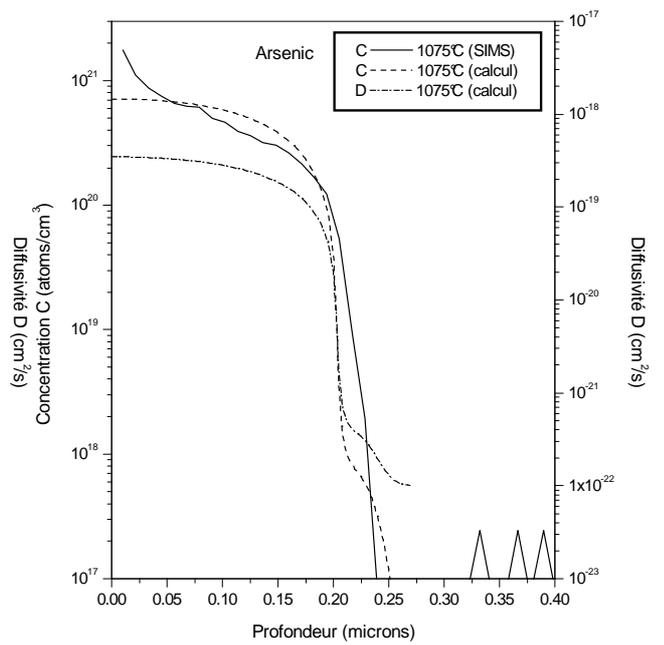


Figure IV.4.d

Figure IV.4.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

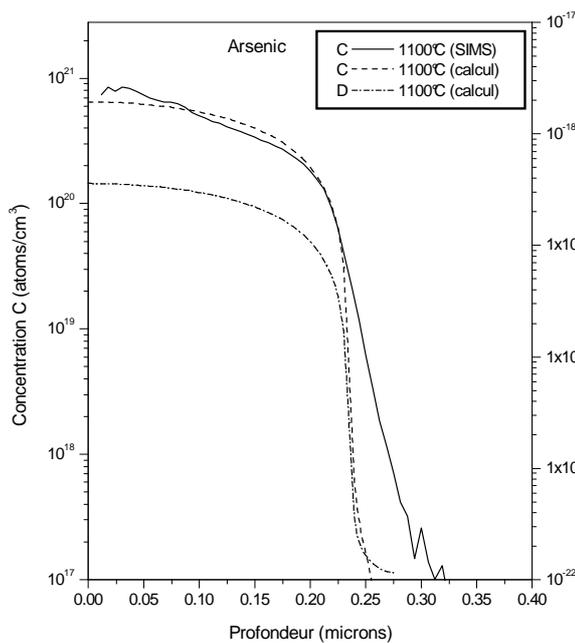


Figure IV.4.e

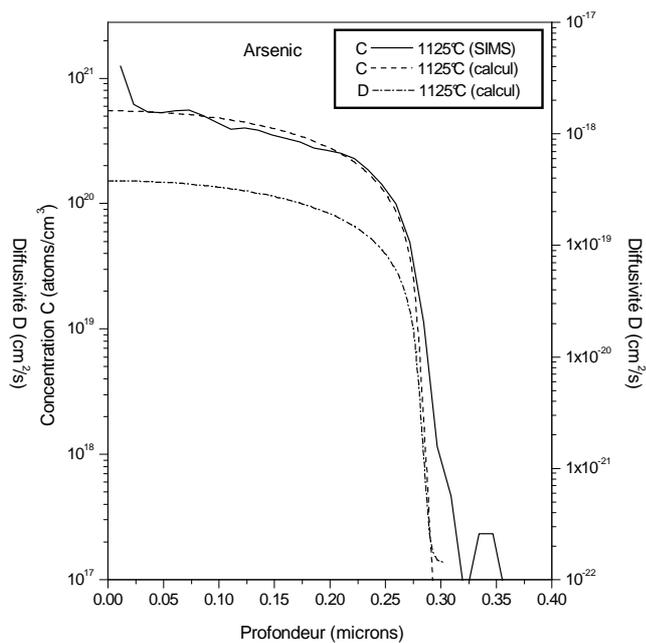


Figure IV.4.f

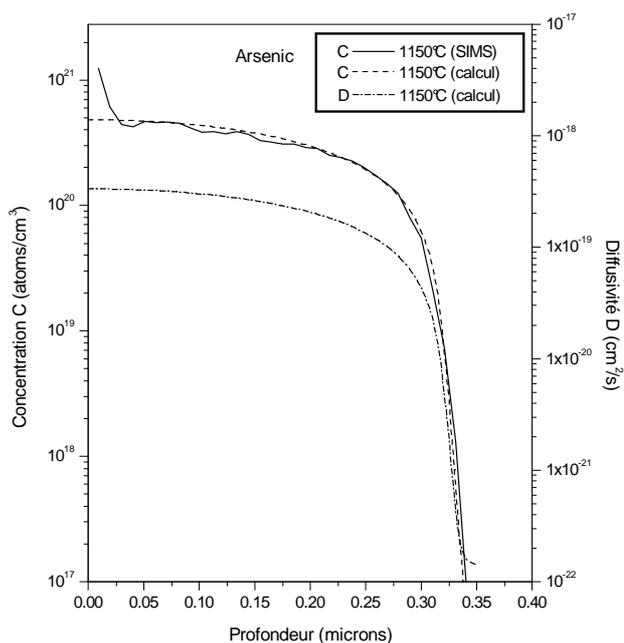


Figure IV.4.g

Figure IV.4.e, f, g : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

IV.4 : Simulation des profils de Bore

Nous avons obtenu pour le bore les paramètres suivants :

$$E_0 = 3,426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D ₀ (cm ² /s)	1.2	1.4	1.4	1.5	1.5	1.6	1.6

Là encore, on obtient un facteur de diffusion supérieur à celui de Fair et Tsai.

Nous avons en fait surtout modifié le facteur D₀, les diffusivités étant très sensibles aux énergies d'activation, celles-ci devant donc être considérées avec prudence.

Les figures IV.5.a, b, c, d (1000, 1025, 1050, 1075 °C), montre cependant un écart entre théorie et expérience au niveau de la surface et surtout en queue de distribution.

En réalité, le bore diffuse de façon un peu particulière en profondeur, ce phénomène est remarquable surtout à 1000, 1025, 1050 et 1075°C. Il semblerait donc que le coefficient β est légèrement surévalué à ces températures [25].

La diffusion du bore présente un comportement anormal lors de recuits rapides comparés aux recuits classiques ; Fair [66] a observé une diffusion accélérée du bore dans les deux régions hors de la zone $\{R_p - 0.4.\Delta R_p \text{ et } R_p + 1.5.\Delta R_p\}$ (Figure a) correspondant à une région de dislocations, pour des températures comprises entre 1000 et 1100 °C et des durées de plateaux de recuit variant de 10 à 30 secondes, il explique ce phénomène par l'occupation des atomes de bore en position interstitielle dans le silicium et qui sont très mobiles à basse température jusqu'à ce qu'ils soient capturés par les lacunes pour devenir substitutionnels. En outre les défauts ponctuels induits par l'implantation augmentent la diffusion en général, mais non au pic du profil où la durée de vie de tels défauts est très courte [67]. Cependant, durant un recuit de 10 à 30 secondes, une proportion significative de ces défauts diffuse en dehors vers le cristal non disloqué. Ces défauts ponctuels contribuent à l'augmentation de la diffusion à l'extérieur de cette région et sont responsables de cette diffusion anormale. Si le bore semble être figé au sommet du profil, il est par contre très mobile dans la queue de la distribution, caractérisant ainsi une anomalie de la diffusion.

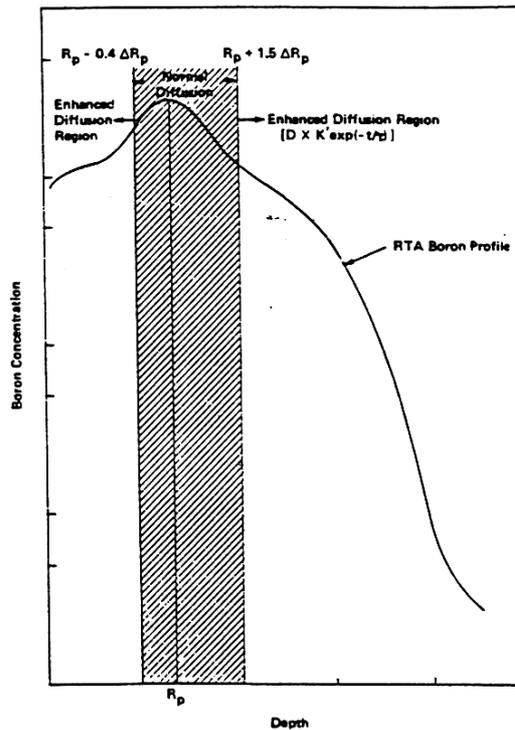


Figure a : représentation schématique du model de diffusion du bore durant un RTA dans du silicium (ref. 63)

R_p : Parcours moyen projeté, c'est la profondeur pour laquelle la concentration d'atomes implantés est maximale.

ΔR_p : Ecart type de la distribution des atomes autour du parcours moyen projeté. en [cm]

En superposant trois types de profils (défauts, concentrations et coefficient de diffusion) en profondeur, Marou [40] a quant à lui pu confirmer le lien étroit qui existe entre la faible mobilité du bore dans le sommet du profil, et la formation lors du recuit de cette zone de dislocations. Lorsque la température est suffisamment élevée, les dislocations commencent à se résorber. A l'intérieur de cette zone, la concentration des défauts est aussi importante que les atomes, Par contre aux extrémités de cette zone endommagée, les interstitiels de silicium qui sont injectés vers la surface ou en profondeur peuvent diffuser sur des distances importantes, avant de se stabiliser en position substitutionnelle, ce qui explique la diffusion accélérée du bore dans la queue du profil de concentration. Par contre selon Marou c'est l'aplatissement du sommet qui est prépondérant après quelques secondes, la zone de dislocations se résorbant. A la fin la diffusion du bore redevient homogène sur la totalité du profil, ce qui concorde avec nos résultats à forte température : 1100, 1125 et 1150°C (Fig.IV.5.e, f, g).

Même chose comme pour l'arsenic, nous portons sur les figures (IV.5.a, b, c, d, e, f, g) et figure (IV.6.b) le coefficient de diffusion du bore calculé par notre programme pour les recuits correspondant aux températures employées.

Ce coefficient suit aussi de façon linéaire la concentration du bore.

Le coefficient de diffusion, dans le cas de la diffusion du bore, suit le modèle donné par la relation III.29 :

$$D_B = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/kT) \frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right)$$

on remarque aussi, comme pour le cas de l'arsenic, que le coefficient de diffusion diminue avec la profondeur pour toutes les températures de recuit employées (figure IV.6.b), tandis que, D_0 augmente lorsque la température augmente.

La pente de la queue de distribution des profils de diffusivité du bore est moins importante à celle de la diffusivité d'arsenic, ce qui montre et confirme la diffusion un peu accéléré dans la queue de distribution du bore montrés par les profils de concentration réels (SIMS).

IV.5 : Comparaison Arsenic - Bore

1) Comme cela était prévisible, le bore diffuse plus vite que l'arsenic. Le bore a en effet un rayon plus petit que celui de l'As, et proche de celui du silicium.

2) D'autre part, l'ajustement en surface est meilleur à 1100, 1125 et 1150°C qu'à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour l'arsenic, et meilleur à 1075, 1100, 1125 et 1150°C qu'à 1000, 1025 et 1050°C pour le bore.

3) De même, l'ajustement en profondeur est meilleur à 1000, 1025, 1125 et 1150°C qu'à 1050, 1075 et 1100°C pour l'arsenic, et meilleur à 1100, 1125 et 1150 qu'à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour le bore.

On peut tenter d'expliquer ce phénomène de la façon suivante :

Nous avons vu que, en théorie, le coefficient β s'exprime par (voir Chp.III, p39) :

$$\beta = 2 \exp[(1/KT)(-Gap/2 - Ev + Zi \cdot q^2 / (4\pi\epsilon ai))]$$

La dépendance en température de β est donc importante. Il se peut donc que nous fassions une certaine erreur en prenant β constant.

Il semblerait ainsi, que nous ayons légèrement surévalué ou sous-évalué le coefficient β .

Un modèle plus élaboré pourrait peut être remplacer β par $\beta_0 \exp(-E/kT)$ pour palier à cet inconvénient.

La valeur de β choisie serait la bonne à 1125 et 1150°C pour l'arsenic, et à 1100, 1125 et 1150°C pour le bore.

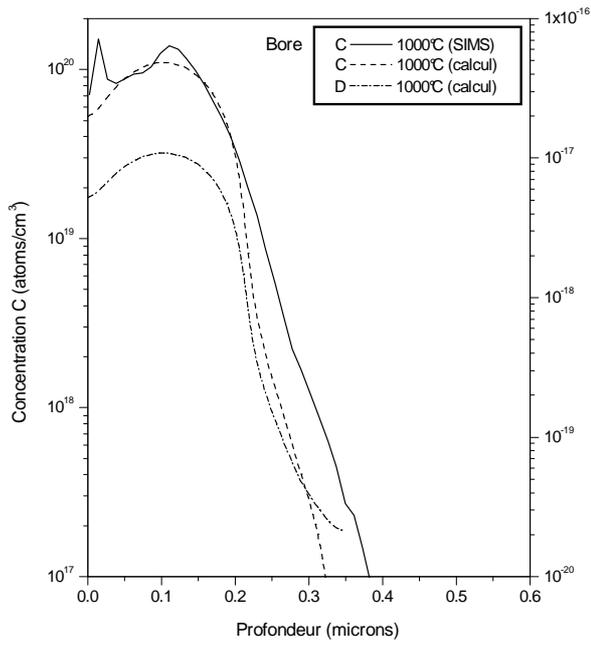


Figure IV.5.a

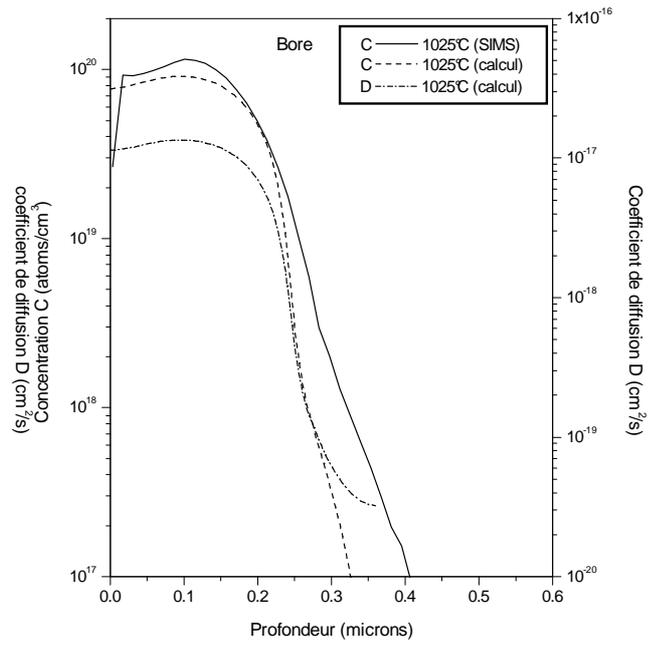


Figure IV.5.b

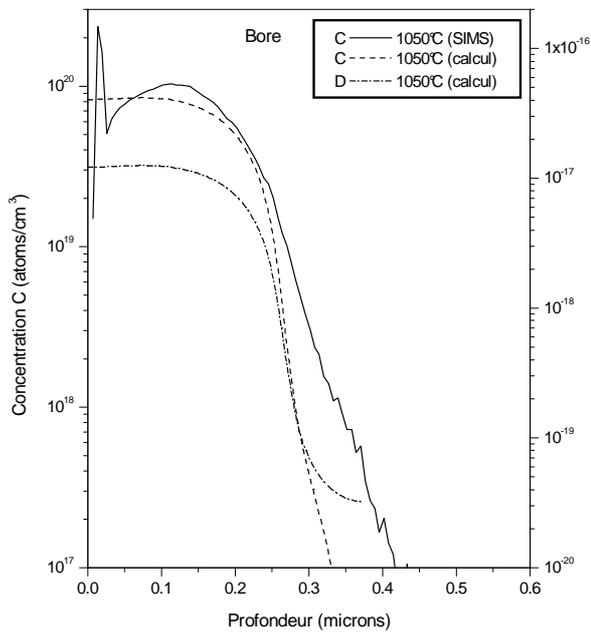


Figure IV.5.c

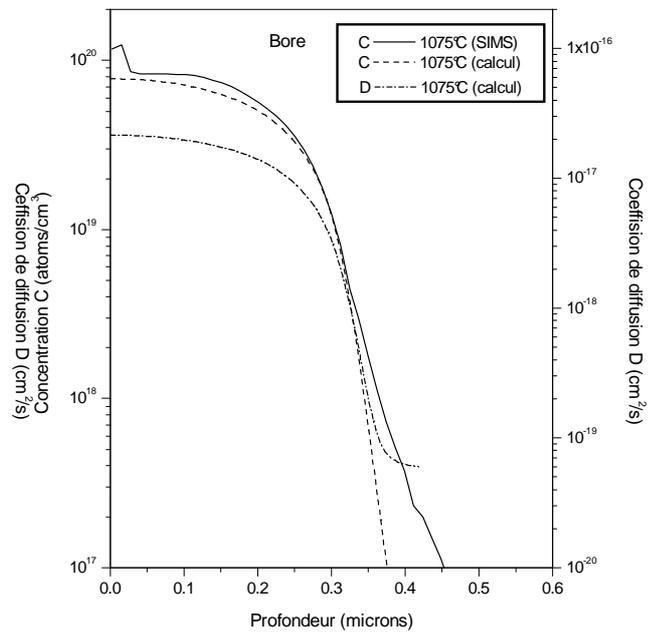


Figure IV.5.d

Figure IV.5.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion du Bore en fonction de la profondeur à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

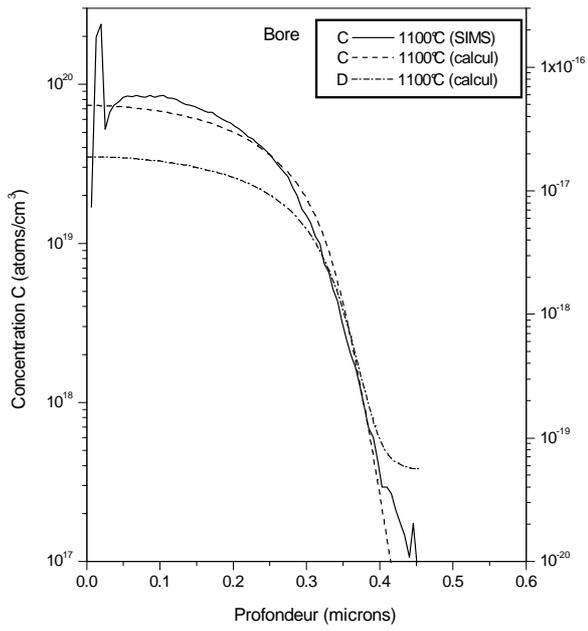


Figure IV.5.e

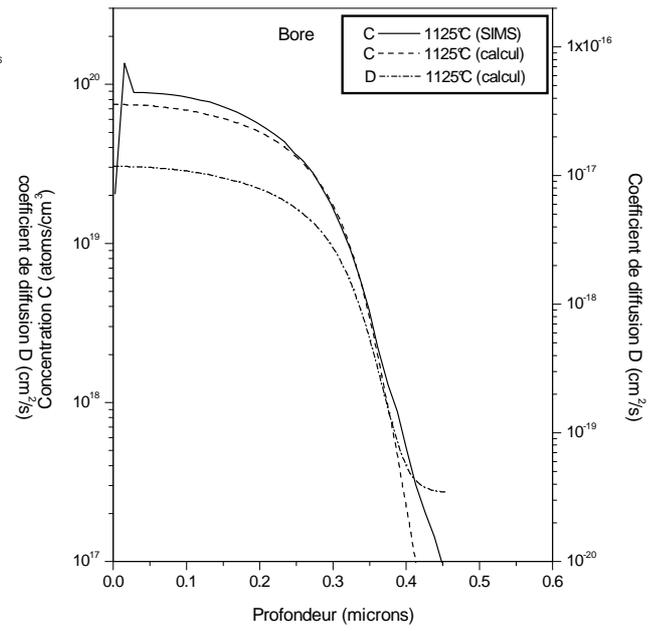


Figure IV.5.f

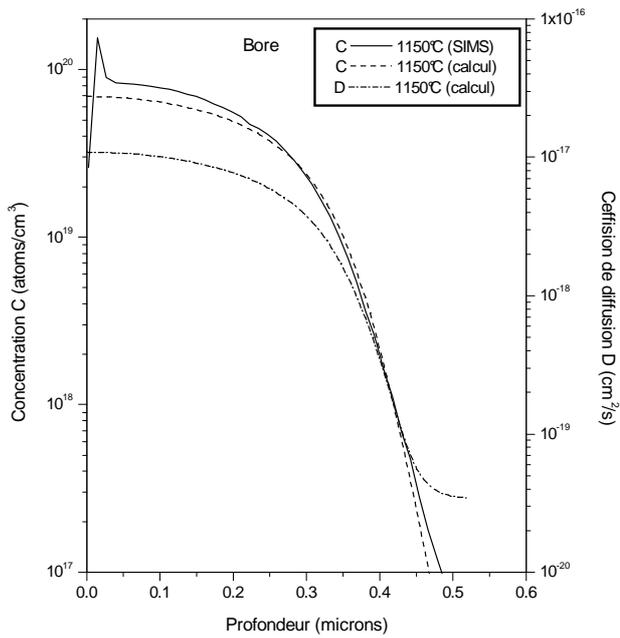


Figure IV.5.g

Figure IV.5.e, f, g : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion du Bore en fonction de la profondeur à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

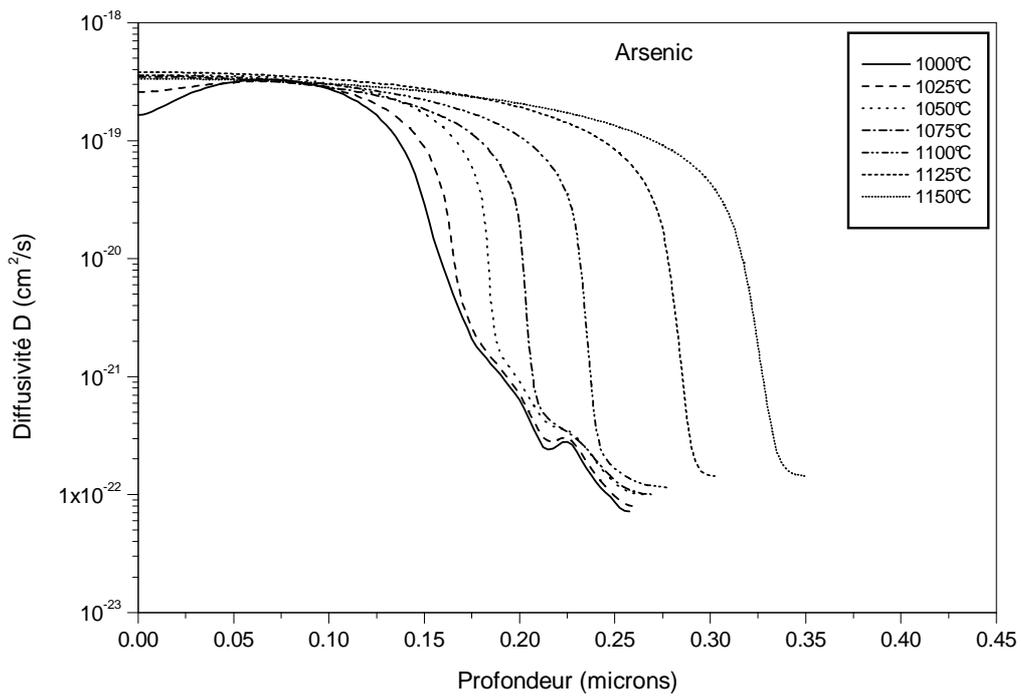


Figure IV.6.a : Profils de diffusivité de l'Arsenic recuit à différentes températures pour une durée de 20 secondes

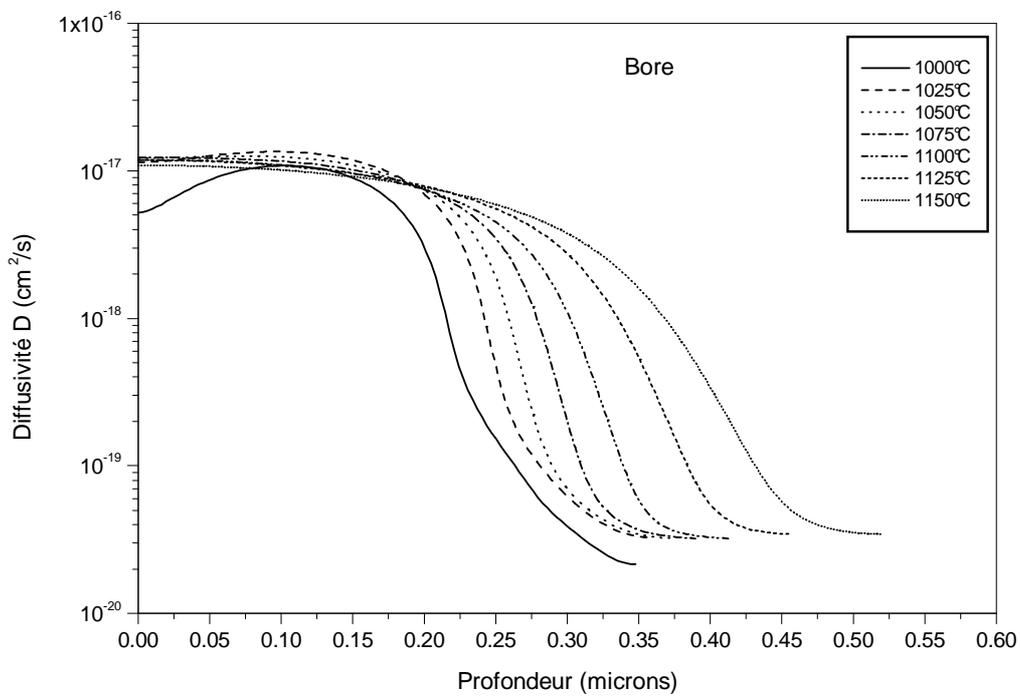


Figure IV.6.b : Profils de diffusivité du Bore recuit à différentes températures pour une durée de 20 secondes

IV.6 : Codiffusion de l'Arsenic et du Bore

Nous sommes arrivés à la conclusion que le meilleur ajustement entre les profils calculés et les profils réels est obtenu pour les valeurs suivantes des paramètres de diffusivités :

Arsenic :

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

Bore :

$$E_0 = 3,426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D_{0As} (cm ² /s)	25	30	35	45	50	60	60
D_{0B} (cm ² /s)	3	3	3	3	3	3	3

Les valeurs ci-dessus, essentiellement les facteurs de diffusivité, sont différentes de celles établies lorsqu'il y a diffusion, d'un seul dopant. Les diffusivités en diffusion sont plus proches de celles en codiffusion pour l'arsenic qu'à celles du bore.

Les figures (IV.7.a, b, c, d, e, f, g) représentent la codiffusion de l'Arsenic et du Bore simulé pour les températures respectives 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C.

Parmi les principales particularités prévisibles des profils, on peut remarquer le ralentissement de la diffusion du bore en profondeur, et la zone de déplétion (creux) à la jonction (intersection des profils d'arsenic et du bore).

L'arsenic, positif quand ionisé, attire le bore, qui est négatif. En conséquence, et ceci est d'ailleurs prévisible en analysant simplement les équations, le bore ne diffusera pas assez loin dans le cas de la codiffusion que dans le cas de la diffusion simple.

A l'intersection des profils de l'arsenic et du bore, on a création d'un creux (zone de déplétion) puisque ces deux dopants sont de types opposés. Cette zone de déplétion implique l'existence d'un champ électrique important, et donc d'un effet de champ remarquable [17,25].

Les atomes de bore (se sont eux qui sont les plus sensibles à l'effet du champ électrique car ils diffusent plus vite que l'arsenic) [17,30], vont avoir tendance à migrer de part et d'autre du point d'intersection des profils, produisant un minimum de concentration en ce point [17,30].

Le creux des profils de bore paraît toutefois plus marqué dans le cas de la modélisation que dans la réalité. Il est clair par contre que, comme prévu théoriquement, cette discontinuité s'atténue lorsque la température augmente. En effet, le terme de champ, qui est de la forme :

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_i} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right)$$

diminue quand la température augmente car n_i , concentration intrinsèque, augmente.

$$n_i = 7.6354 \times 10^{15} \times T^{3/2} \exp(-Gap/2KT)$$

avec

$$Gap = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} T^2 / (636.K + T)$$

De même que dans le cas de la diffusion simple nous présentons sur les mêmes figures (IV.7.a, b, c, d, e, f, g) et figures (IV.8.a, b) les coefficients de diffusion pour les différentes températures employées. Ils présentent une brusque variation au niveau de la jonction, c'est-à-dire lorsque $C_{As} \approx C_B$. En fait dans le cas de la codiffusion la diffusivité dépend essentiellement de la différence de concentrations des deux dopants, quasiment linéairement pour l'arsenic et de façon inversement proportionnelle pour le bore (cf. équations (III.30), (III.31) et (III.33)) ; celle-ci peut varier d'au moins trois et quatre décades respectivement pour le bore et l'arsenic. On peut aussi par exemple remarquer la forte diffusivité du bore juste au-delà de la jonction, celle-ci s'opposant à l'effet de champ électrique dû au fort gradient d'arsenic dans cette zone [17].

Les figures (IV.9.a, b, c, d) pour l'arsenic et figures (IV.10.a, b, c, d) pour le bore représentent les diffusivités en diffusion et en codiffusion de ces deux dopants où est montré clairement l'effet de l'arsenic sur le bore et réciproquement. On constate que l'arsenic agit fortement sur la diffusion du bore en réduisant sa diffusivité par l'intermédiaire de l'effet du champ électrique due à son gradient de concentration [17]. D'autre part, on constate aussi l'effet du bore sur l'arsenic qui est beaucoup moindre.

Notons que les coefficients de diffusion du modèle de codiffusion de l'arsenic et du bore sont déterminés par les relations suivantes (cf. chap. III) :

Pour l'Arsenic :

$$D = D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

Pour le Bore :

$$B = D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

Avec :

$$f = \frac{(C_{As} - C_B)}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1}$$

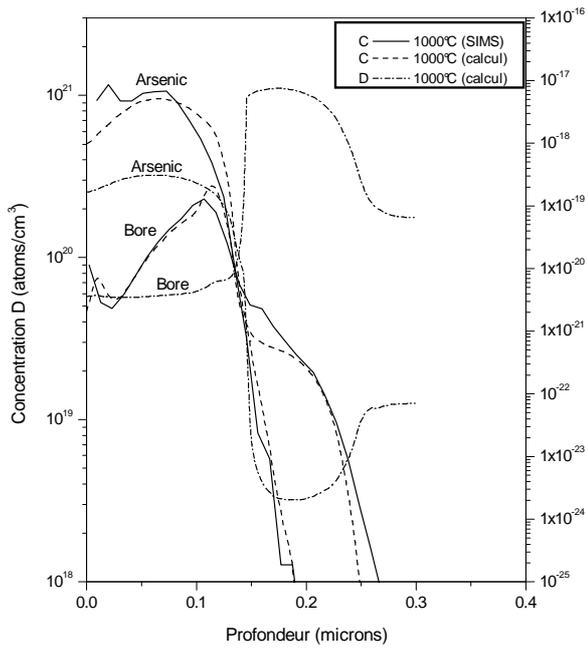


Figure IV.7.a

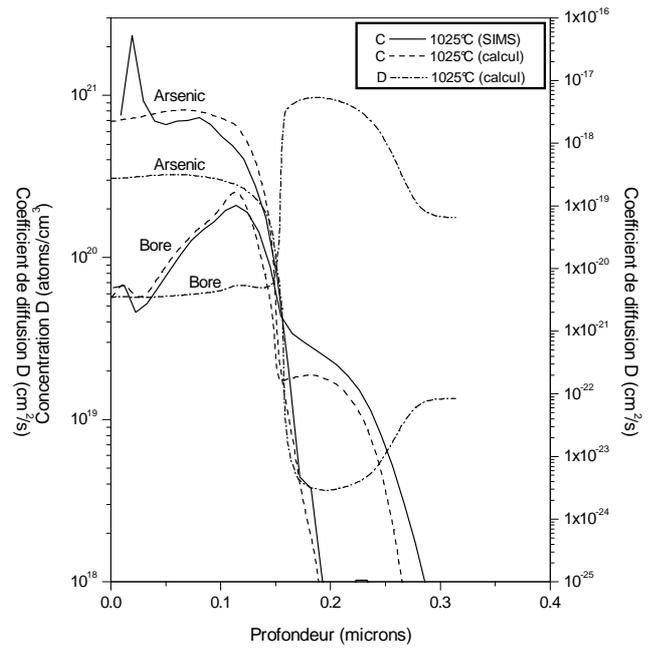


Figure IV.7.b

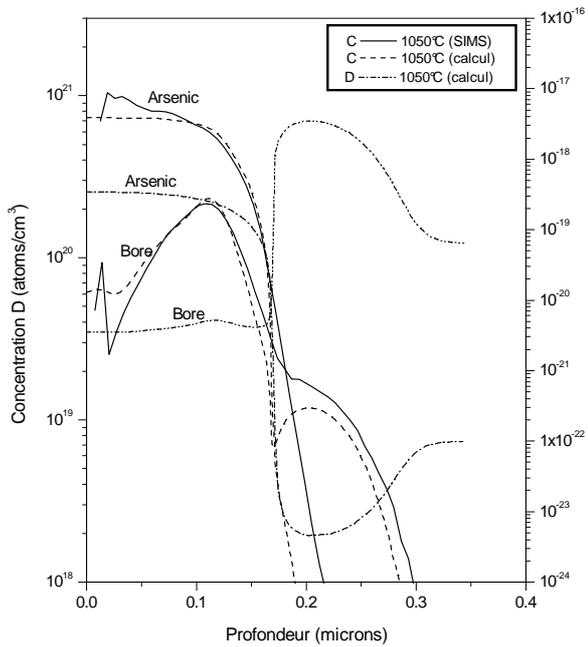


Figure IV.7.c

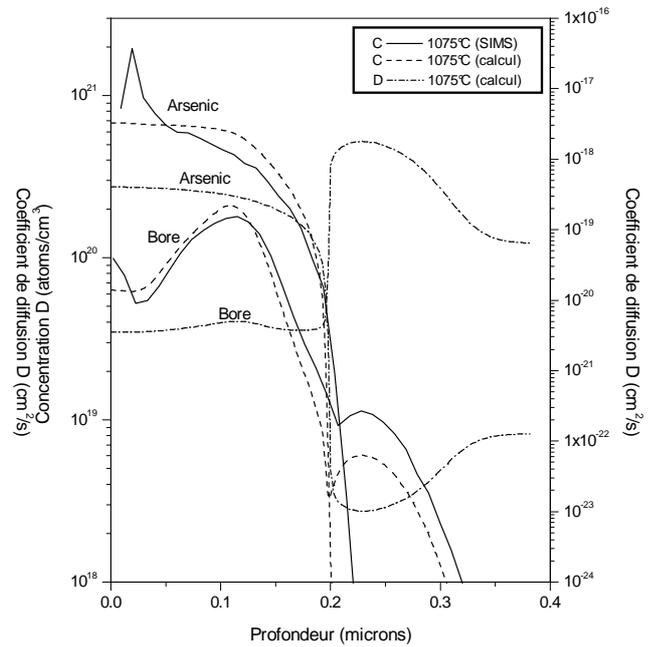


Figure IV.7.d

Figure IV.7.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en codiffusion de l'Arsenic et du Bore à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

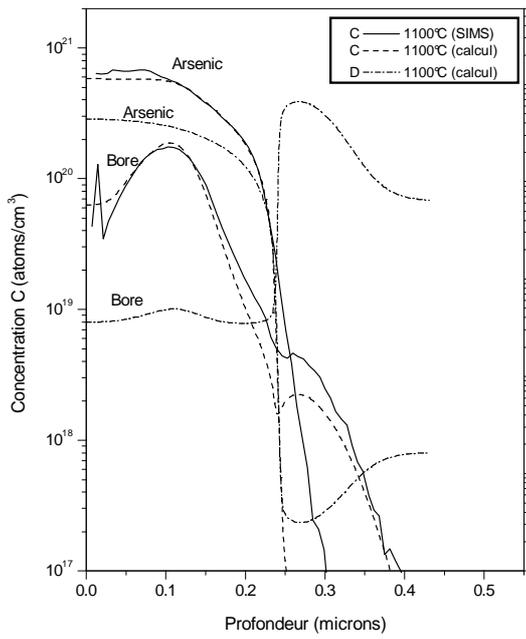


Figure IV.7.e

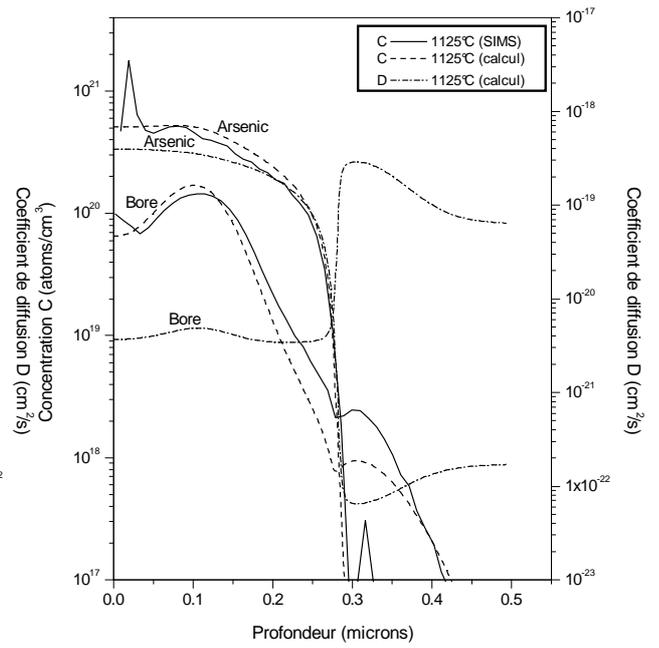


Figure IV.7.f

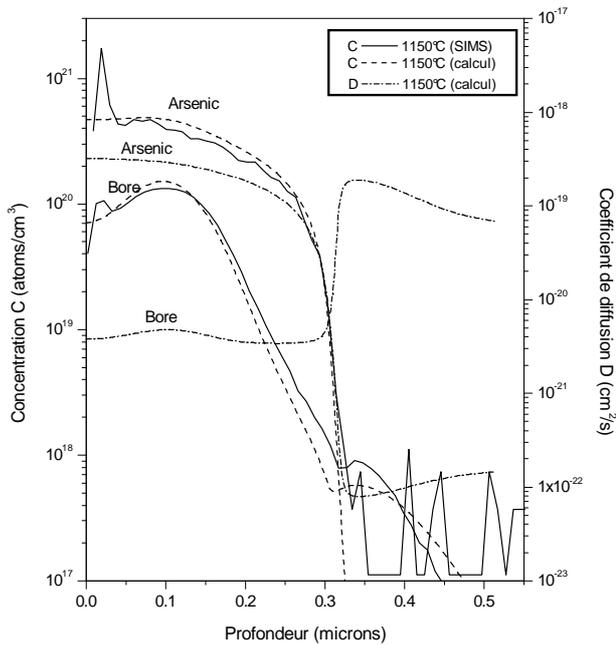


Figure IV.7.g

Figure IV.7.e, f, g : Profils des concentrations et des diffusivités en codiffusion de l'Arsenic et du Bore à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

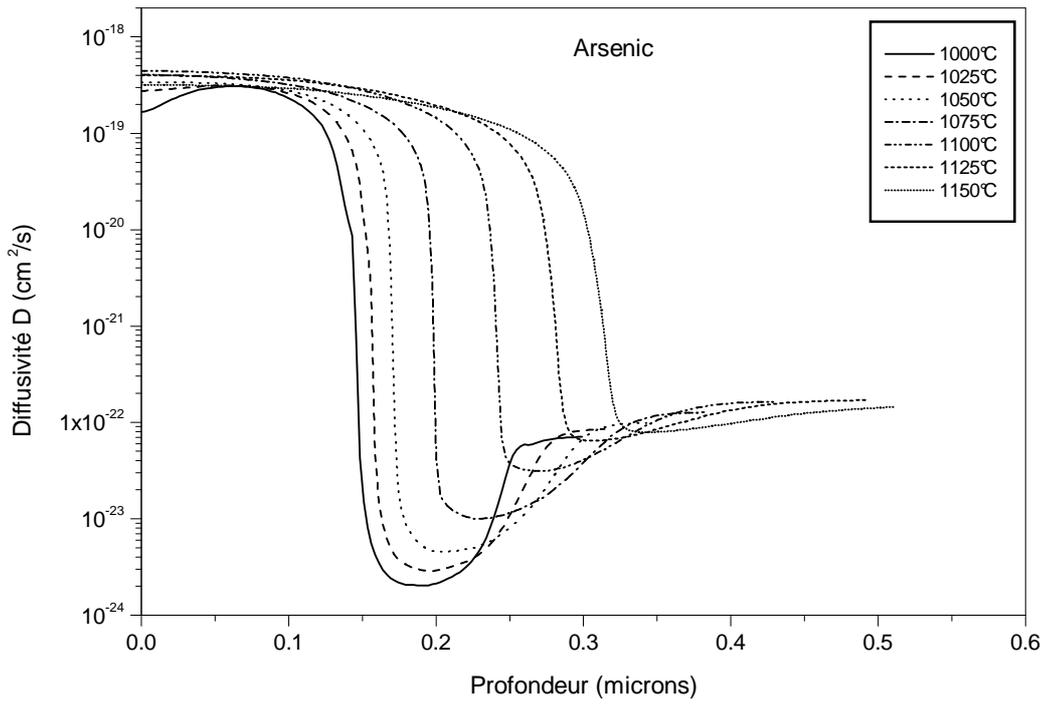


Figure IV.8.a : Profils de diffusivité de l'Arsenic en codiffusion à différentes températures pour une durée de recuit de 20 secondes

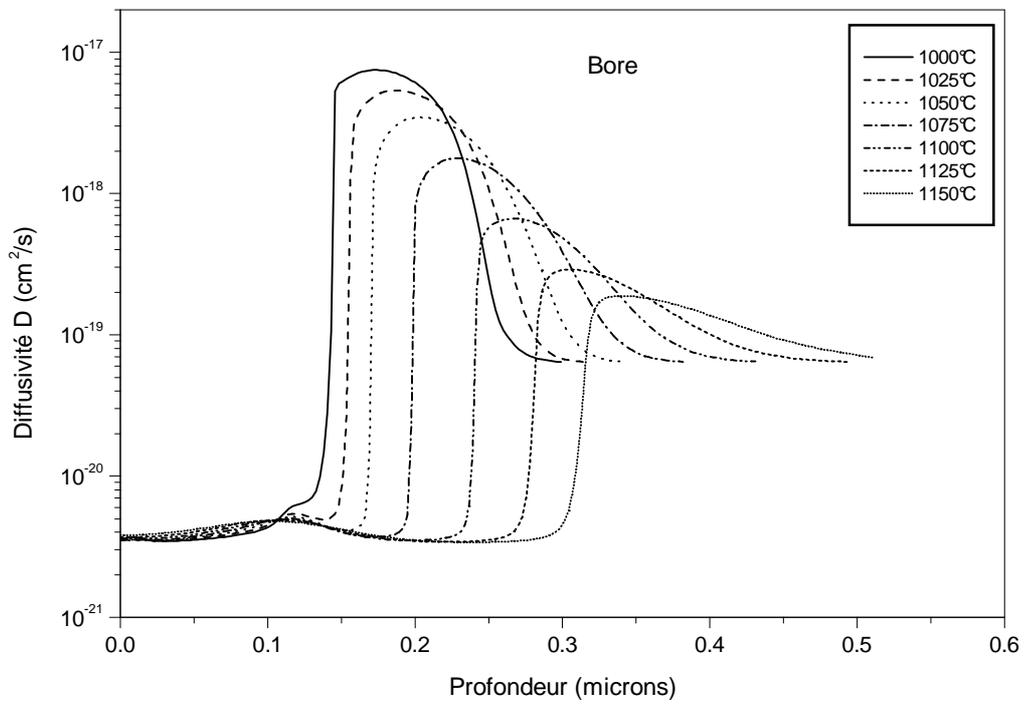


Figure IV.8.b : Profils de diffusivité du Bore en codiffusion à différentes températures pour une durée de recuit de 20 secondes

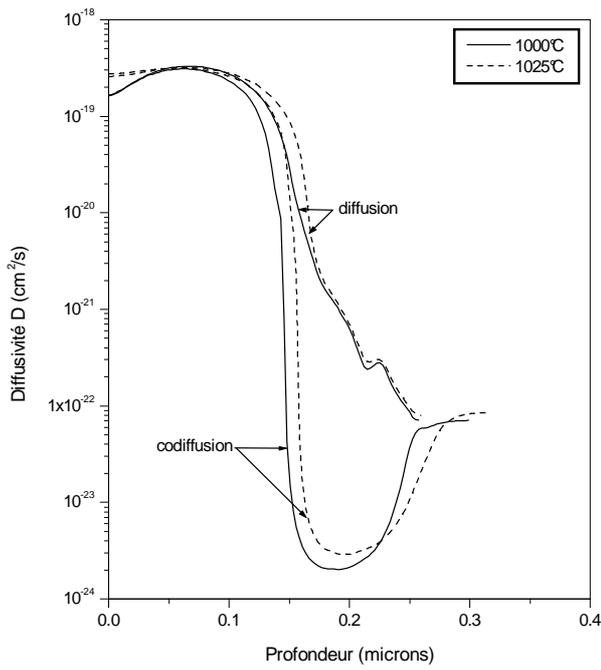


Figure IV.9.a

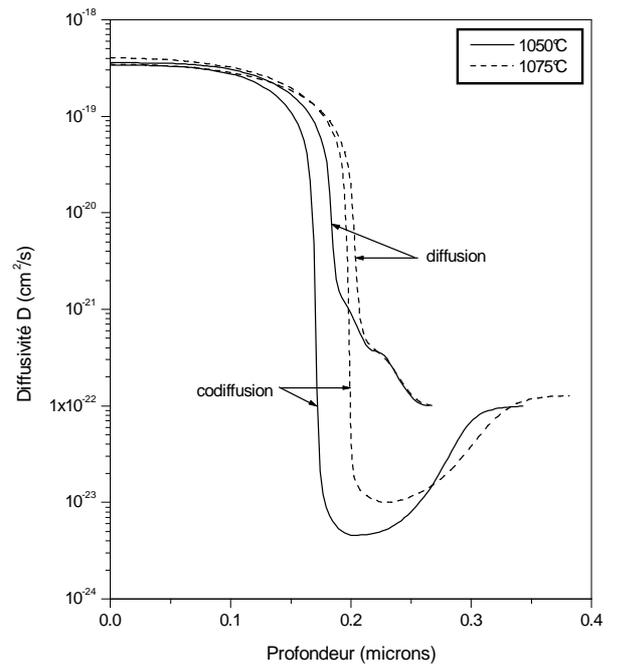


Figure IV.9.b

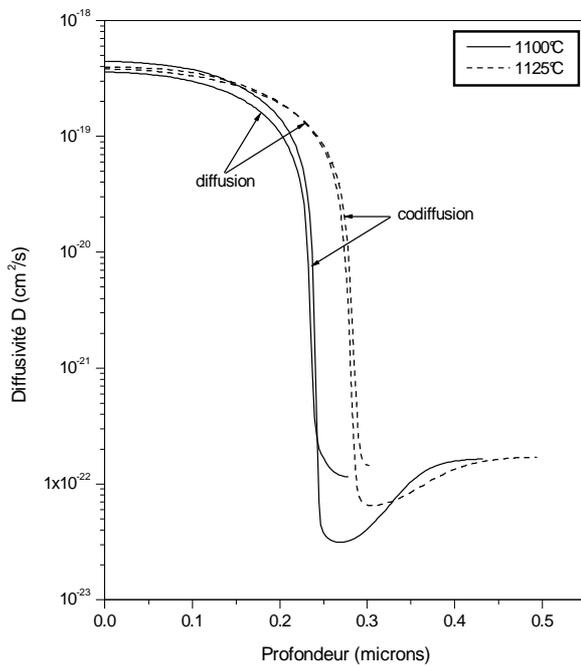


Figure IV.9.c

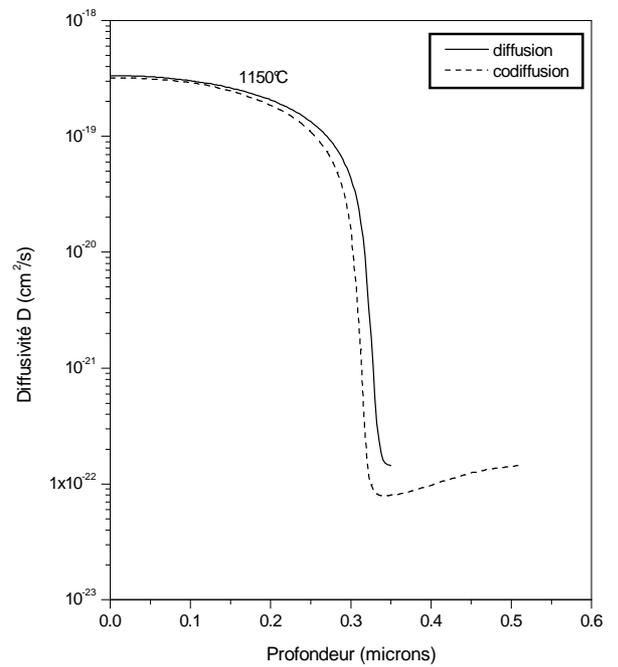


Figure IV.9.d

Figure IV.9.a, b, c, d : comparaison des profils de diffusivité en diffusion et en codiffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur pour différentes températures

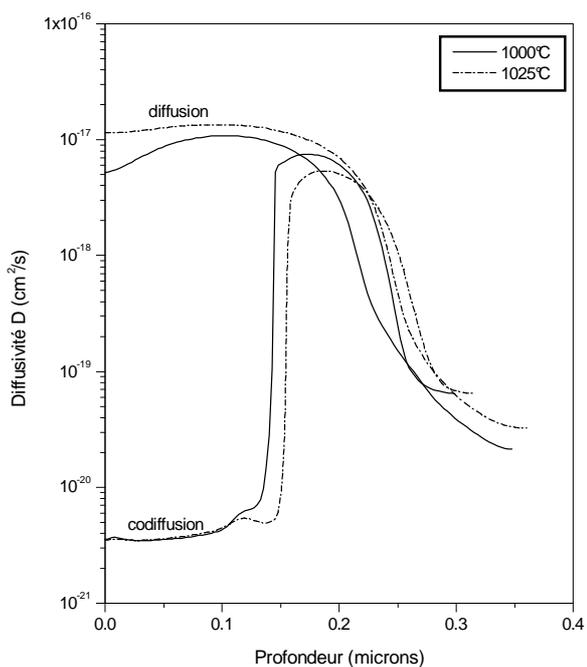


Figure IV.10.a

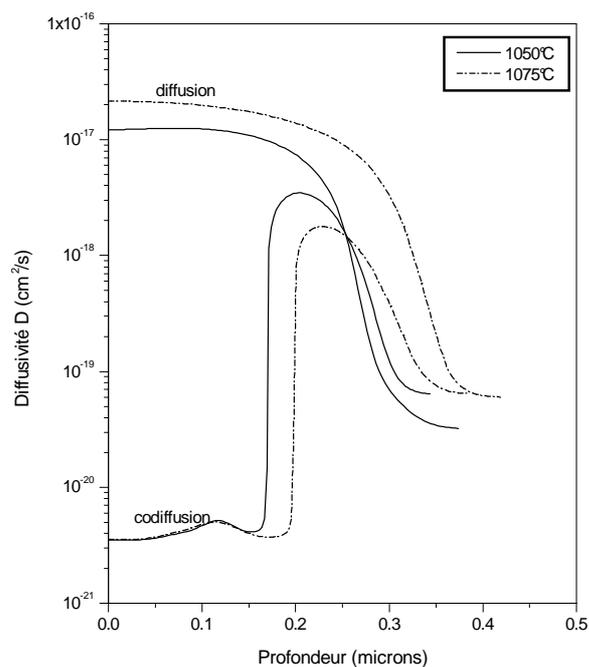


Figure IV.10.b

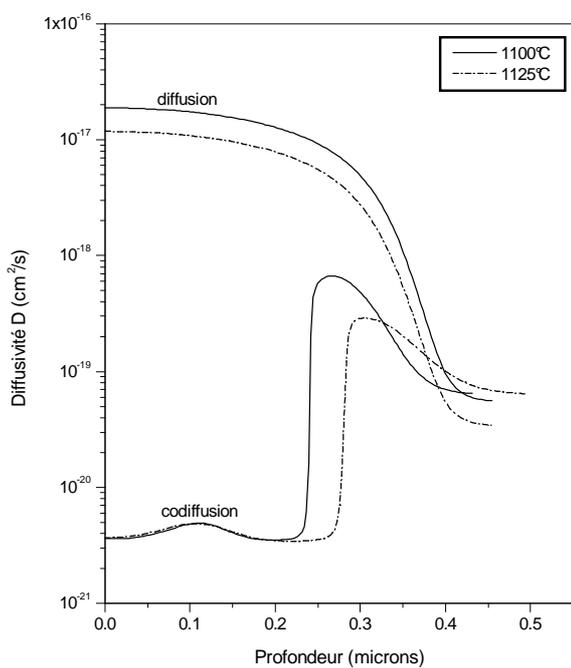


Figure IV.10.c

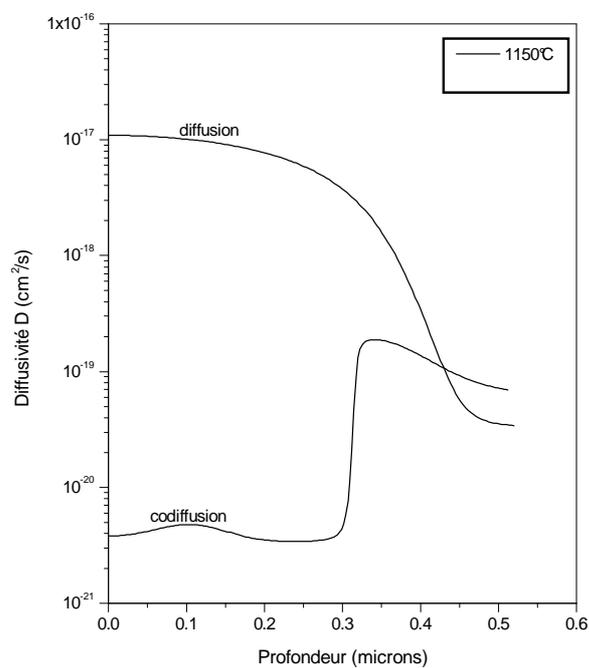


Figure IV.10.d

Figure IV.10.a, b, c, d : comparaison des profils de diffusivité en diffusion et en codiffusion du Bore en fonction de la profondeur pour différentes températures

CONCLUSION GENERALE

Dans le cadre de l'étude de la diffusion et de la codiffusion d'Arsenic et de Bore dans une structure monosilicium lors de recuits thermiques rapides, dans une perspective de réalisation de transistors, nous avons été amenés à nous appuyer sur les résultats obtenus simultanément par SIMS et simulation.

Généralement, en ce qui concerne les profils SIMS, l'étude se fait pour deux températures de recuit typiques de la VLSI (1050°C et 1100°C). Nous avons étendu cette étude à d'autres températures : 1000, 1025, 1075, 1125, 1150°C. Ceci nous a permis de mettre en évidence la diffusion rapide de l'Arsenic dans le monosilicium (profil plat). Quant au Bore, nous avons pu observer sa diffusion moindre en présence d'Arsenic que lorsqu'il est seul.

La diffusion et la codiffusion de l'arsenic et du bore ont donc pu être modélisés avec beaucoup de précision. Le choix d'un algorithme de calcul simple et efficace et d'un langage de programmation structuré a joué un rôle déterminant dans l'obtention de ces résultats. Nous avons dégagé des valeurs des paramètres de diffusivité très acceptables et nous avons essayé d'expliquer les différences observées entre la réalité expérimentale et notre modèle.

Dans le cas du Bore, les profils calculés sont en accord avec les profils SIMS. La valeur moyenne retenue pour le facteur de diffusivité du Bore est environ 3 fois plus grande que celle correspondant aux recuits classiques.

Pour l'Arsenic, les profils simulés sont en bon accord avec les profils SIMS, la diffusivité pouvant varier d'un facteur de 25 à 60 par rapport aux recuits classiques.

En outre, les simulations en codiffusion d'As et de B nous ont amené à prendre des coefficients de diffusion pour le Bore différents de celles de la diffusion simple. Tandis-que pour l'arsenic, les coefficients de diffusion sont proches à celles trouvés par la diffusion simple.

Nous avons mis en outre au point un programme de simulation numérique de diffusion et de codiffusion de ces impuretés. Nous avons donc été à même d'étudier un modèle de diffusion et d'en ajuster les paramètres, essentiellement les diffusivités, la possibilité de modification des énergies d'activation devant être considéré avec plus de prudence, pour obtenir un bon accord entre théorie et expérience.

On souligne en particulier le phénomène de diffusion accélérée du bore lors du recuit thermique rapide (R.T.A), ce qui peut être un inconvénient pour l'obtention de jonctions fines. Une extension de ce travail consistera en une poursuite de l'étude par simulation des profils de concentration à des recuits de durées progressivement croissantes.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Y. Adda, J. P. Dupony, J. Philipert, Y. Quéré, "Elément de métallurgie physique", La Documentation Française, Paris, 1983.
- [2] P. G. Shewmon, "Diffusion in solids", Mc Graw-Hill, New York, 1973.
- [3] J. P. Stark, "Solid State Diffusion", Wiley, New York, 1976.
- [4] B. S. Bokstein, "Diffusion dans les métaux métallurgie", Moscou, 1978.
- [5] Jean Philipert, "*Diffusion et transport de matière*", Edition de Physique-France, 1985.
- [6] James D. Plummer, Péter B. Griffin, "*Silicon VLSI Technologie : Fundamentals, Practice and Modeling*", 1999.
- [7] Henry Mathieu, "*Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques*", 4^{ème} Edition, 1998.
- [8] Abdelali Merabet, "Interdiffusion et réaction dans les couches minces cuivre-antimoine", Thèse de Magistère, Université de Setif, 1988.
- [9] Amar Gherriche, "*Contribution à l'étude des effets de la barrière de diffusion Cuivre/Silicium*", Thèse de Magistère, 1998.
- [10] A. Berezine, O. Motchalkina, "*Technologie et Construction des circuits intégrés*", Edition Mir, 1983.
- [11] B.I. Boltaks, "Diffusion et défauts ponctuels dans les semi-conducteurs", Mir, Moscou, 1977.
- [12] J.R. Manning, "Diffusion kinetics for atoms in crystals", Van Nostrand, Princeton, 1978.
- [13] Y. Adda, J. Philipert, "La diffusion dans les solides", P.U.F., Vol.1-2, Paris, 1976.
- [14] "Diffusion Data", Trans. Tech. Publications, Vol.1-7, 1973.
- [15] "Diffusion and Defect Data", Trans. Tech. Pub., Vol.8, Aedermannsdorf, Suisse, 1973.
- [16] J. Narayon and O.W. Holland, J. Appl. Phys., Vol. 56, p 2913, 1984.
- [17] C. Gotrand, P. Ancey, H. Haddad et G. Chaussemy, "*Diffusion and codiffusion of boron and arsenic in monocrystalline silicon during rapid thermal annealing*", Semicond. Sci. Technol., Vol. 7, p. 181-187, 1992.
- [18] F. Marrouf, "*Procédés Thermiques Rapides : Etude de l'oxydation du silicium et de l'activation de l'impureté*" Thèse de Doctorat, Université de Paul Sabatier de Toulouse, p.135, 1990.
- [19] J.S. Williams and R.G. Elliman, "*Limits to solid solubility in ion implanted into Si(100) and Si(111)*", Thin. Solid. Film, Vol. 149, 1987.

- [20] O.W.J.Holland and J.Narayan, "*Rapid thermal annealing of ion-implanted semiconductors*", J. Appl. Phys., S6(10), 1984
- [21] R.B.Fair, "*Modeling of dopant diffusion and associated effects in silicon*", Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 14, 1983
- [22] J.F. Joly, "*Recuit rapide isotherme des semiconducteurs*", Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, p.211, 1988
- [23] C. Le Roux, "*Caractérisation physicochimique de substrats de silicium implantés par de l'arsenic et du bore en fortes concentrations et recuit par des procédés rapides(RTA)*", Thèse de Doctorat, Université de Paris VII, p.161, 1991
- [24] Abdelali Merabet, "*Etude théorique et expérimentale des diffusions d'arsenic et du bore dans une structure polycilicium sur silicium et dans le silicium lors de traitements thermiques rapides*", Thèse de Doctorat D'état, Université de Constantine, 1995
- [25] P.Ancey, Y.Haddab, "*Modélisation de la diffusion et de la codiffusion de l'arsenic et du bore dans le silicium lors des traitements thermiques rapides*", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, Rapport de D.E.A, 1990
- [26] D. Mathieu, "*Diffusion des dopants dans le silicium : aspects expérimentaux et simulation*", L'Echo des Recherches, N°117, p. 57-66, 1984
- [27] C. BERGAUD, "*Implantation ionique de bore dans du silicium préamorphisé : réalisation, modélisation et caractérisation de jonctions p+/n ultra-minces.*", Thèse de Doctorat, Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes du CNRS, 1994.
- [28] R.W.Dutton, "*Modeling of the silicon integrated-circuit design and manufacturing process*", IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-30, N°9, p. 968-985, 1983
- [29] Daniel W. Yergeau, "*A Dial-An-Operator Approach To Simulation Of Impurity Diffusion In Semiconductors*", P.H.D., Stanford University, 1999
- [30] S.M. Hu and S. Schmitt, "*Interactions in sequential diffusion processes in semiconductors*", J. Appl. Phys, Vol.39, N°9, p.4272-4283,1968
- [31] S.M.Sze, "*Physics of semiconductors devices*", 2nd Edition, New York : John Wiley et Sons, p.868, 1981
- [32] Werner Jüngling, Peter Pichler, Sigfried Selbeherr, Edgar Guerrero, and Hans W. Pötzl, "*Simulation of critical IC fabrication processes using advanced physical And numerical method*", IEEE Transactions on Electron Devices, ED-32(2), p.156-167, February 1985

- [33] M. Y. Tsai, F.F. Morehead, J.E.E. Baglin and A.E. Michel, "*Shallow junction by high dose As implants in Si : experiments and modeling*", J. Appl. Phys. Vol. 51, N°6, p. 3230-3235, 1980
- [34] Richard B. Fair and Joseph C.C. Tsai, "*The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon*", J. Electrochemical Society : Solid-State Science and Technology, Vol. 122, N°12, p. 1689-1696, 1975
- [35] S.M. Hu, "*General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism*", Phys. Rev. , Vol.180, p.773-784, 1969
- [36] R.B.Fair, "*Impurity doping process in silicon*", F.F.Y. WANG, Ed. Amsterdam : North Holland Publishing, p.315, 1981
- [37] R.B.Fair, "*Recent advances in implantation and diffusion modeling for the design and process control of bipolar ics*". In H.R. Huff and T. Abe, Editors, Proceedings of the 3rd International Symposium on Silicon Materials Science and Thechnology, p.968, May 1977
- [38] G. Giroult , A. Nouailhat and M. Gauneau, "*Study of a Wsi₂/polycrystalline silicon/monocrystalline silicone structure for a complementaty metal-oxyde-semiconductors for a compatible self-aligned bipolar transistor emitter* ", J.Appl.Phys., vol.67, N°1,p.515-523,1990
- [39] R.B. Fair and J.C.C. Tsai, "*The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon*", J. Electrochemical Society.Vol.122, p.1689-1696, 1975
- [40] F. Marou, "*Procédés thermiques rapides : Etude de l'oxydation du silicium et de l'activation de l'impureté bore implanté*", Thèse de Doctorat, Laboratoire D'Automatique et d'Analyse des Systèmes (L.A.A.S.) du CNRS, 1990.
- [41] S. Horiuchi and R. Blanchard, "*Boron diffusion in polycrystalline silicon layers* ", Solid-State Electronics, Vol.18, p.529-532, 1975
- [42] TITAN 4, "*Simulation bidimensionnelle des procédés de fabrication des circuits intégrés note technique*", CNET-CNS MEYLAN, 1985
- [43] C. Gontrand, A. Merabet, B. Semmache, S. Krieger, C. Bergaud, M. Lemiti, D. Barbier and A. Laugier, "*Codiffusion of As and B in and from polysilicon during rapid thermal annealing*", Semicond. Sci.Technol. , vol.8, p.155-162, 1993
- [44] Christian Bergaud, "*Etude de la diffusion et de la codiffusion de bore et d'arsenic dans une structure polysilicium sur silicium lors de recuits thermiques rapides*", Rapport de Stage D.E.A, Institut National des Sciences Appliquées : Université de Claude Bernard Lyon 1, 1991

- [45] S.T. Dunham et C.D. Wu, "*Atomistic models of vacancy-mediated diffusion in silicon*", J. Appl. Phys., Vol. 78 N°4, p. 2362-2366, 1995
- [46] S.A. Fedotov, "*Diffusion of electrically active Sb atoms in heavily doped silicon*", phys. stat. Soc. (b), Vol. 186, p.375-382, 1994
- [47] U. Schmid, N.C. Myers et J. Avan Vechten, "*VIDSIM-A Monte Carlo program for the simulation of atomic diffusion in diamond and zinc-blende structures*", Comp. Phys. Com., Vol.58, p329-341, 1990
- [48] M.M. De Souza et G.A.J. Amaratunga, "*A Monte Carlo study of the knockout mechanism of boron diffusion in silicon*", J. Appl. Phys., Vol. 79 N°5, p 2418-2425, 1996
- [49] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling et B. P. Flannery, "*Numerical Recipes in C*", Cambridge University Press, Second Edition, 1992
- [50] J. P. Nougier, "*Méthodes de calcul numérique*", Masson, 1991
- [51] W.F. Ames, F.V. Postell et E. Adams, "*Optimal numerical algorithms*", Appl. Num. Math. , Vol. 10, p 235-259, 1992
- [52] J. Carroll, "*A composite integration scheme for the numerical solution of systems of parabolic PDEs in one space dimension*", J. Comp. Appl. Math. , Vol. 46, p 327- 343, 1993
- [53] M. Paffrath, W. Jacobs, W. Klein, E. Rank, K. Steger, U. Weinert et U. Wever, "*Concepts and algorithms in process simulation*", Surv. Math. Ind. , Vol 3, p 149-183, 1993
- [54] R.W. Dutton et S.E. Hansen, "*Process modeling of integrated circuit device technology*", Proc. IEEE, Vol. 69 N°10, p 1305-1320, 1981
- [55] C.P. Ho, J.D. Plummer, S.E. Hansen et R.W. Dutton, "*VLSI Process Modeling-SUPREM III*", IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-30 N°11, p 1438-1453, 1983
- [56a] M.D. Deal et H.G. Robinson, "*Diffusion of implanted beryllium in n- and p-type GaAs*". Appl. Phys. Lett., Vol. 55 N°19, p 1990-1992, 1989
- [56b] M.D. Deal, S.E. Hansen et T. W. Sigmon, "*SUPREM 3.5-Process modeling of GaAs integrated circuit technology*". IEEE Trans. Comp. Aided Design, Vol. 8 N° 9, p 939-951, 1989
- [57] J.C. Hu, M.D. Deal et J.D. Plummer, "*Modeling the diffusion of grown-in Be in molecular beam epitaxy GaAs*", J. Appl. Phys., Vol. 78 N°3, p 1595-1605, 1995

- [58] M.E. Law et R. W. Dutton, "*Verification of analytic point defect models using SUPREM-IV*", IEEE Trans. Comp. Aided Design, Vol. 7 N°2, p 181-190, 1988
- [59] H.G. Robinson, M. Deal, G. Amaratunga, P.B. Griffin, D.A. Stevenson et J.D. Plummer, "*Modeling uphill diffusion of Mg implants in GaAs using SUPREM-IV*", J. Appl. Phys., Vol. 71 N°6, p 2615-2623, 1992
- [60] W. Jungling, P. Pichler, S. Selberherr, E. Guerrero et H.W. Potzl, "*Simulation of critical IC fabrication processes using advanced physical and numerical methods*". IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-32 N°2, p 156-167, 1985
- [61] J. Marcon, "*Simulation numérique de la diffusion de dopants dans les matériaux III-V*", Thèse de Doctorat, Université de Rouen, 1996
- [62] P. Forent, G. Lauton, M. Lautan, "*Outils et modèles mathématiques : Algèbre linéaire*", Tome III, P.123-154, Vuibert, 1977.
- [63] John W. Harris, Horest Stocker "*Handbook of mathematics and computational science*", P.409-465, 1998.
- [64] Rainer Kress, "*Numerical analysis*", P.5-23, 1998.
- [65] A.G. O'Neill, C. Hill, J. King and C. Please, "A New model for the diffusion of arsenic in polycrystalline silicon.", J. Appl. Phys. Vol.64, N°1, P.167-174, 1988.
- [66] R.B.Fair, "*Modeling of dopant diffusion during rapid thermal annealing*", J. Vac. Sci. Technol., Vol. A4, N°3, p.926-932, 1986.
- [67] R.B. Fair, J. J. Worman and J. Liu, J.Electrochem.Soc.Vol.131, p.2387, 1984.

ANNEXE

Procédure de codiffusion :

Le principe de l'algorithme est de calculer, pour chaque pas de temps, les concentrations d'arsenic et de bore en passant successivement du système d'équations (III.35'), (III.36') et (III.37') au système d'équations (III.35''), (III.36'') et (III.37'') (cf. Chapitre III).

Il existe un problème car pour calculer les profils de concentration d'un des dopants au pas de temps $n+1$, on utilise les profils de concentrations calculées au pas de temps n , mais aussi les diffusivités calculées à partir de ces dernières concentrations. Il y a donc un décalage au niveau des diffusivités et, en général les valeurs calculées des concentrations ne traduisent pas la réalité après un premier calcul.

On a donc, comme pour le cas de la diffusion simple, "boucler" ces deux systèmes d'équations sur un pas de temps jusqu'au moment où l'on va satisfaire à un critère de convergence sur les concentrations (III.38).

Soient :

$C(n, j)$: concentrations d'arsenic au temps n .

$E(n, j)$: concentrations de bore au temps n .

$D(n, j)$: diffusivités de l'arsenic considéré seul.

$L(n, j)$: diffusivités traduisant l'influence du bore sur l'arsenic.

$B(n, j)$: diffusivités du bore considéré seul.

$M(n, j)$: diffusivités traduisant l'influence de l'arsenic sur le bore.

La méthode de calcul utilisé dans l'algorithme est basée sur le schéma suivant :

DEBUT

Pour i = 1 jusqu'à 900 faire

Si $C_1(k2+1) > 10^{17}$ ou $E_1(k2+1) > 10^{17}$ alors { augmentation du nombre de pas d'espace }

$K2 := k2 + 1$

Sinon $K2 := k2$

FinSi

Repeter

$Conv1 := 0$; $Conv2 := 0$

Procédure diffusivité

$A_0 = \Delta t / (\Delta x)^2$; $A_0.D(j) = A(j)$; $A_0.L(j) = H(j)$

$U_0 = 1 + A(1)$

Pour j=1 jusqu'à k2-1 faire { calcul des valeurs de la fonction U de l'arsenic }

$U_j = [1 + A(j) + A(j+1)] - [A(j)]^2 / U_{j-1}$

FinPour

$U_{k2} = [1 + A(k2)] - [A(k2)]^2 / U_{k2-1}$

$K'(0) = C_1(0) + H(1)[E_1(1) - E_1(0)]$

Pour j=1 jusqu'à k2 faire { calcul des valeurs de la fonction K' de l'arsenic }

$K'(j) = C_1(j) + H(j)E_1(j-1) - [H(j) + H(j+1)]E_1(j) + H(j+1)E_1(j+1) + [K'(j-1).A(j)] / U_{j-1}$

FinPour

$K'(k2) = C(k2) + H(k2)[E(k2-1) - E(k2)] + [K'(k2-1).A(k2)] / U_{k2-1}$

$C_2(k2) = K'(k2) / U_{k2}$

Pour j=k2-1 jusqu'à 0 faire { calcul des nouvelles valeurs de concentration de l'arsenic }

$C_2(j) = [K'(j) + A(j+1).C_2(j+1)] / U_j$

FinPour (d'Arsenic)

Pour i1=0 jusqu'à k2 faire

{ calcul de conv1 pour le critère de convergence

$conv1 := conv1 + |C_2(i1) - C_1(i1)| / C_1(i1)$

et transfert de concentration dans C_1 }

$C_1(i1) := C_2(i1)$

FinPour

Procédure diffusivité

$$A_0.B(j) = A(j)$$

$$U_0 = 1 + A(1)$$

Pour j=1 jusqu'à k2-1 faire

{ calcul des valeurs de la fonction U du bore }

$$U_j = [1 + A(j) + A(j+1)] - [A(j)]^2 / U_{j-1}$$

FinPour

$$U_{k2} = [1 + A(k2)] - [A(k2)]^2 / U_{k2-1}$$

$$K''(0) = E_1(0) + M(1)[C_1(1) - C_1(0)]$$

Pour j = 1 jusqu'à k2 faire

{ calcul des valeurs de la fonction K'' du bore }

$$K''(j) = E_1(j) + M(j)C_1(j-1) - [M(j) + M(j+1)]C_1(j) + M(j+1)C_1(j+1) + [K''(j-1).A(j)] / U_{j-1}$$

FinPour

$$K''(k2) = E_1(k2) + M(k2)[C_1(k2-1) - C_1(k2)] + [K''(k2-1).A(k2)] / U_{k2-1}$$

$$E_2(k2) = K''(k2) / U_{k2}$$

Pour j = k2-1 jusqu'à 0 faire

{ calcul des nouvelles valeurs de concentration du bore }

$$E_2(j) = [K''(j) + A(j+1).E_2(j+1)] / U_j$$

FinPour (du Bore)

Pour i2=0 jusqu'à k2 faire

{ calcul de conv1 pour le critère de convergence

$$\text{Conv2} := \text{conv2} + |E_2(i2) - E_1(i2)| / E_1(i2)$$

et transfert de concentration dans E1 }

$$E_1(i2) := E_2(i2)$$

FinPour

Si (conv1 < 10⁻⁴) et (conv2 < 10⁻⁴) faire

{ critère de convergence }

conv := vrai

FinSi

Jusqu'à conv := vrai

FinPour

FIN (d'Arsenic et Bore)

Résumé**Contribution à l'Étude de la Croissance des Cavités d'Hydrogène dans les Semi-conducteurs**

Parmi les matériaux de base utilisés en microélectronique pour la fabrication de substrats innovants, le silicium sur isolant (SOI « Silicon On Insulator »), fabriqué par la technologie Smart Cut™, a réussi à tirer son épingle du jeu. Le SOI permet d'améliorer les performances des composants (transistors plus rapides, consommation d'énergie réduite). Cette technologie enchaîne plusieurs étapes clés, dont l'une est l'implantation ionique d'hydrogène. L'étape d'implantation est un procédé cher et, pour des raisons économiques, il est important d'en réduire le coût. Une solution est récemment apparue qui permet de diminuer la dose totale implantée en remplaçant l'implantation dans le but de réduire encore plus le d'hydrogène à forte dose par une Co-implantation d'hélium et d'hydrogène. celle-ci se base sur coût de production, une autre technique de fabrication est récemment développée, l'introduction de l'hydrogène dans le silicium par plasma hydrogénation en présence d'une couche sous contrainte. L'objectif de cette thèse consiste à étudier et à décrire la croissance des platelets de SiGe enfouit dans la matrice. d'hydrogène générées par l'implantation de l'hydrogène seul, générées par la Co-implantation de hydrogène/hélium et enfin générées par le plasma hydrogénation

Mots clé : précipitation de l'hydrogène, croissance des platelets, hydrogène, hélium, silicium, SiGe, semi-conducteurs, silicium sur isolant (SOI), Smart Cut™, implantation ionique, recuit thermique, plasma hydrogénation

Abstract**Contribution to the Study of Hydrogen platelets Growth in Semiconductors**

Among the materials used in microelectronics for manufacturing advanced substrates, silicon on insulator (SOI improves performance component (transistors faster, lower Silicon On Insulator), manufactured by Smart Cut™ power consumption). This technology connects several key steps, which one is the hydrogen ion implantation. The implantation step is an expensive process and, for economic reasons, it is important to reduce the cost. A solution has recently emerged which reduces the total dose implanted by replacing the hydrogen high dose implantation. In order to further reduce the cost of production, another with co-implantation of helium and hydrogen. manufacturing technique is developed recently. This technique is based on the introduction of hydrogen in silicon. The objective of this thesis by plasma hydrogenation in the presence of a SiGe layer strained buried in the matrix. is to examine and describe the growth of hydrogen platelets generated by the implantation of hydrogen alone, generated by co-implantation of hydrogen to helium, and finally generated by the plasma hydrogenation

words: precipitation of hydrogen, growth of platelets, hydrogen, helium, silicon, SiGe Semiconductor, silicon **Key** on insulator (SOI), Smart Cut™, ion implantation, thermal annealing, plasma hydrogenation

ملخص**مساهمة في دراسة نمو تجاوييف الهيدروجين في المواد النصف موصلة**

من بين المواد المستخدمة في مجال الإلكترونيات الدقيقة لتصنيع رقائق حديثة، "السليكون على عازل"، المصنعة بتقنية "سمارت كات" تمكنت من أن تستحوذ على مكانتها في المنافسة. "السليكون على عازل" يحسن الأداء للعناصر (الترانزستورات أسرع واستهلاك أقل للطاقة). هذه التكنولوجيا تتعلق بعدة خطوات رئيسية، زرع أيون الهيدروجين هو واحد من هذه الخطوات. الغرس هي عملية مكلفة و، لأسباب اقتصادية، ومن أجل الحد من التكاليف، برزت في الأونة الأخيرة الحل الذي يقلل من الجرعة الكلية المزروعة من خلال استبدال غرس الهيدروجين، مع ارتفاع جرعة، بغرس المشترك من الهليوم والهيدروجين. و من أجل زيادة خفض تكلفة الإنتاج أكثر، تم تطوير تقنية تصنيع أخرى في الأونة الأخيرة. وتستند هذه التقنية على إدخال الهيدروجين في سيليكون بواسطة "الهدرجة البلازما" مع وجود طبقة من "سي جي او" مضغوطة داخل المصفوفة. الهدف من هذه الأطروحة هو دراسة ووصف نمو صفائح الهيدروجين التي تم إنشاؤها بواسطة غرس الهيدروجين وحدها، التي تم إنشاؤها بواسطة غرس المشترك من الهيدروجين و هليوم، وأخيرا إنشاؤها من الهدرجة البلازما.

كلمات مفتاحية: ترسبات الهيدروجين، نمو الصفائح، الهيدروجين، الهليوم، السليكون، أشباه الموصلات، زرع الأيونات، الصلب الحرارية السليكون على عازل، الهدرجة البلازما

INTRODUCTION GENERALE

La course à la miniaturisation des composants microélectroniques rend indispensable la disponibilité d'outils fiables de simulation prédictive. Dans ce contexte, comprendre et modéliser le phénomène de diffusion des dopants au cours d'une étape de recuit est indispensable. Ce processus est dû aux interactions entre les atomes de dopant et les défauts ponctuels qui sont générés au cours des étapes d'implantations ioniques. En effet, la diffusivité d'un dopant tel que le bore est directement proportionnelle à la concentration de Si interstitiel. Ce phénomène constitue le principal obstacle à la modélisation et à la réalisation de jonctions ultra-minces (<50nm) pour les futures générations de transistors MOS. L'objectif de cette thèse consiste à comprendre les phénomènes physiques responsables de la diffusion de dopants puis de les modéliser afin de prévoir et d'optimiser cette diffusion.

Il s'agit d'un sujet que l'on peut qualifier de " porteur " depuis une dizaine d'années car la diffusion de dopants est une des préoccupations centrales de l'industrie microélectronique. Le phénomène de diffusion accélérée des dopants est en effet le principal obstacle à la densification des circuits intégrés. L'étude de la diffusion de dopants fait donc l'objet de nombreuses études dans le monde entier, de centaines de publications, de nombreux symposiums lors de conférences internationales (ex : Material Research Society) et bon nombre de programmes, en particulier européens, lui sont consacrés.

Ce thème de recherche implique à la fois un travail théorique et simulation. Il consiste d'une part à la modélisation du phénomène de diffusion et l'écriture d'un programme de simulation. D'autre part, il comporte également une partie purement informatique pour prévoir les profils de dopants (utilisation d'un programme de simulation).

Enfin, ce sujet de mémoire est en fait la continuation de la thèse de doctorat de monsieur abdelali MERABET déjà soutenue au sein de l'université de constantine depuis 1995. Et ce, afin de comprendre le problème physique posé.

Le premier chapitre résume l'aspect physique de la diffusion en général.

Le deuxième chapitre est réservé à l'étude de la diffusion et codiffusion de l'arsenic et du bore dans le monosilicium.

Dans le troisième chapitre, tenant compte des résultats expérimentaux, nous proposons un modèle mathématique qui permet de déterminer les concentrations des dopants en diffusion et codiffusion .

Enfin, dans le quatrième chapitre nous nous consacrons aux ajustements des profils SIMS (expérimentaux) à l'aide du simulateur élaboré.

CHAPITRE I

*ASPECTS PHYSIQUES
DE LA DIFFUSION*

1-1 Introduction

Des phénomènes de diffusion sont présents dans de très nombreux domaines de la Physique. La diffusion peut toujours être considérée selon deux approches : du point de vue ondulatoire, et du point de vue particulaire. Dans le premier cas, la diffusion de la chaleur constitue le meilleur exemple. L'approche particulaire concerne davantage la diffusion d'un gaz ou d'un corps en solution. Dans ce deuxième cas, la diffusion se caractérise par un transfert de matière, qui est la réponse d'un milieu à toute modification de la répartition des concentrations. Même à l'équilibre, les échanges de matière se poursuivent continuellement à l'échelle moléculaire : on parle alors d'auto-diffusion.

De manière encore plus générale, et en dehors du domaine de la physique, la diffusion d'une information caractérise le temps nécessaire à sa transmission globale à travers l'espace, que ce soit sur un réseau de communication (tel qu'Internet) ou encore dans un modèle purement virtuel. Imaginons par exemple un modèle fondé sur des messagers aux déplacements aléatoires, capables de s'échanger leurs informations lorsqu'ils se rencontrent. La diffusion d'une information portée par un messager initial unique peut alors être étudiée en tant que phénomène spatio-temporel. En biologie, ce type de modèle "par contamination" est propre à décrire la propagation d'une épidémie dans une population animale (par exemple, le virus de la Rage) ou végétale.

Par la suite, nous restreindrons notre champ d'étude à la diffusion en termes physico-chimiques de concentrations, sans perdre de vue qu'il s'agit d'un concept bien plus général. Les deux principales lois de la diffusion seront rappelées.

Dans les solides, la diffusion est un déplacement aléatoire d'atomes, d'ions, de molécules ou de lacunes, dans le réseau cristallin provoqué en général par agitation thermique. Les phénomènes de diffusion sont extrêmement lents aux températures ordinaires ; ils peuvent cependant être considérablement activés par la température ou la présence de certaines anomalies structurelles. La diffusion joue un rôle fondamental dans plusieurs processus déterminant les structures et les propriétés des matériaux. Parmi eux, on peut citer la cristallisation, les transformations de phases, et plusieurs autres processus spécifiques dans les semi-conducteurs (jonction p-n) etc....

Dans ce chapitre nous présenterons brièvement les notions fondamentales de la diffusion.

I-2 Equations de diffusion

1-2-1: Première équation de Fick

La première loi de Fick constitue l'équation fondamentale de diffusion de molécules. Elle s'applique aussi bien au gaz, qu'aux liquides ou aux solides.

Considérons le flux de particules d'une certaine espèce, les particules peuvent être des molécules, des atomes, des défauts ponctuels, des électrons libres ou des trous électroniques, etc.... Soit $C(x, t)$ leur concentration, exprimée en nombre de particules ou d'atomes par unité de volume.

On définit le **flux de diffusion F** comme la quantité de matière (particules) qui traverse par seconde l'unité d'aire d'une surface normale au mouvement de transfert étudié. F est aussi appelé la densité de courant de particules.

En présence d'un gradient de concentration, on admet qu'il s'établit un flux de particules (un écoulement de particules) dans le sens descendant le gradient, et que ce flux est proportionnel au gradient correspondant :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} = -D \text{grad}C \quad (\text{I.1})$$

Où D est appelé coefficient de diffusion ou diffusivité. Il est généralement exprimé en cm^2/s ou m^2/s .

C est la concentration de particules exprimée en atomes/ m^3 ou atomes/ cm^3 .

Le signe négatif indique que le flux diffuse de la région ayant une forte concentration de particules à la moins forte (figure I.1).

La relation (I.1) est connue sous le nom de **première équation de Fick**. Elle se généralise à trois dimensions :

$$F = -\left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} + D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (\text{I.2})$$

Si D est une constante quelle que soit la direction dans l'espace (milieu isotrope), on peut écrire:

$$F = -D \left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (\text{I.3})$$

$$F = -D \cdot \nabla C \quad (I.4)$$

∇ : est l'opérateur LAPLACIEN.

La loi de Fick affirme alors qu'il y a proportionnalité entre le gradient de concentration et le flux de diffusion.

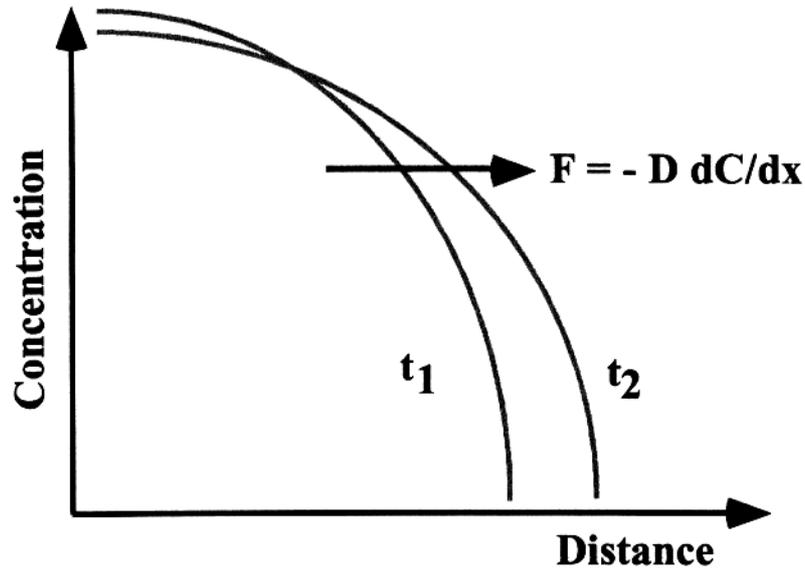


Figure I.1 : Sens de diffusion du flux de particules

I -2-2 Deuxième équation 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 (I.1) 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** où l'on suppose $\partial C / \partial t \neq 0$. La variation de la concentration en fonction du temps est alors définie par la relation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial F}{\partial x} \quad (I.5)$$

La deuxième équation de Fick décrit comment le changement dans la concentration dans un élément de volume est déterminé par le changement (variation) dans le flux entrant et le flux sortant dans le volume (figure I.2).

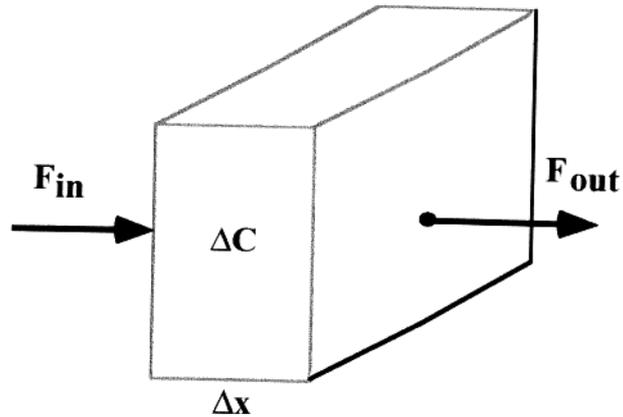


Figure I.2 :

En combinant les équations (I.1) et (I.5), on obtient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (I.6)$$

L'équation générale de la diffusion (ou deuxième équation de Fick), la relation (I.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 (I.6) s'écrit alors :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (I.7)$$

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 (I.7) admet des solutions analytiques qui expriment la forme du profil de diffusion $C(x, t)$ et permet de calculer le coefficient de diffusion D à partir de profils expérimentaux.

I-3 : Solution de l'équation de diffusion (ou Seconde équation de Fick).

Dans ce paragraphe, on se limite à quelques cas très simples sans donner de démonstration mathématique. De plus amples détails sont donnés dans les références suivantes [1-4].

I-3-1 : Diffusion à partir d'une source d'impureté limitée

Un exemple de diffusion à partir d'une source d'impureté limitée est fourni par la diffusion à partir d'une couche finie.

1-3-1-1 : Couche mince en sandwich.

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche en sandwich entre deux échantillons identiques (figure I.3) [5,6].

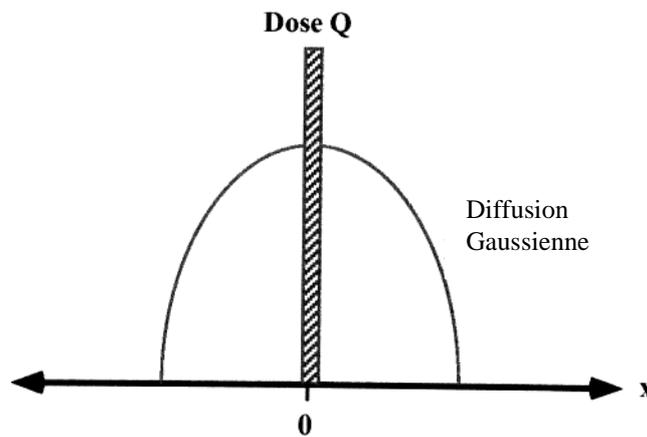


Figure I.3 : couche mince en sandwich

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} C dx \tag{I.8}$$

Q : représente la quantité d'atomes déposés par unité d'aire.

La solution analytique qui satisfait la seconde loi de Fick est[6-9]

$$C(x,t) = \left[\frac{Q}{2\sqrt{\pi \cdot Dt}} \right] \cdot \exp(-x^2/4Dt) \tag{I.9}$$

Cette équation représente une distribution Gaussienne centrée en x=0 et dont la concentration de l'impureté en surface C(0,t) d'écroit avec le temps comme $1/\sqrt{t}$ [6].

La distance (profondeur) de diffusion augmente de l'origine comme $2/\sqrt{Dt}$ [6].

L'amplitude du maximum est donnée par : $C(x,t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}}$

La distribution des impuretés (profils de concentrations) à différents instants est représentée sur la figure (I.4)

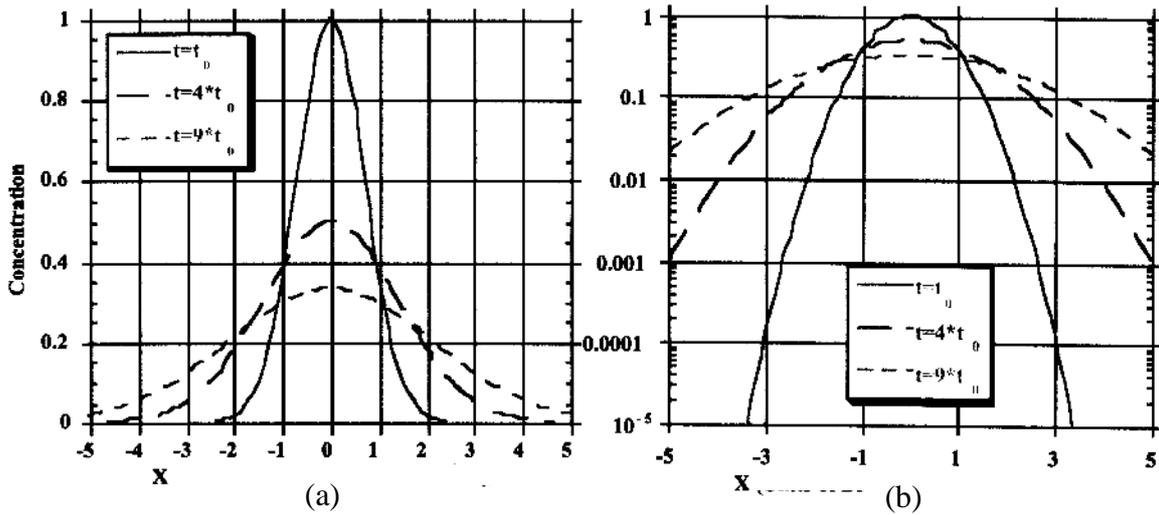


Figure I.4 : répartition de l'impureté (profils de concentration) lors de la diffusion à divers instant
(a) échelle numérique, (b) échelle logarithmique

1-3-1-2 : Couche mince superficielle.

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche à la surface de l'échantillon (figure I.5) [5,6]

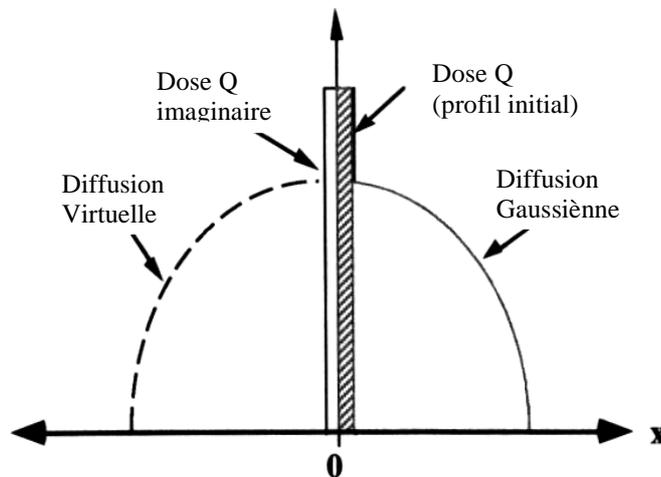


Figure I.5 : couche mince superficielle

$$Q = \int_0^{+\infty} C dx \quad (I.10)$$

La solution analytique satisfaisant la seconde équation de Fick est [6-9] :

$$C(x, t) = \left[\frac{Q}{\sqrt{\pi \cdot Dt}} \right] \cdot \exp(-x^2/4Dt) = C(0, t) \cdot \exp(-x^2/4Dt) \quad (I.11)$$

En pratique, on représente graphiquement le logarithme de la concentration en fonction de x^2 . La pente de la droite obtenue permet de calculer D.

I-3-2 : Diffusion à partir d'une source d'impureté illimitée

Dans ce cas, on maintient à la frontière d'un corps semi-infini, dans le plan $x=0$, une concentration d'impureté constante et indépendante du temps (Figure I.6).

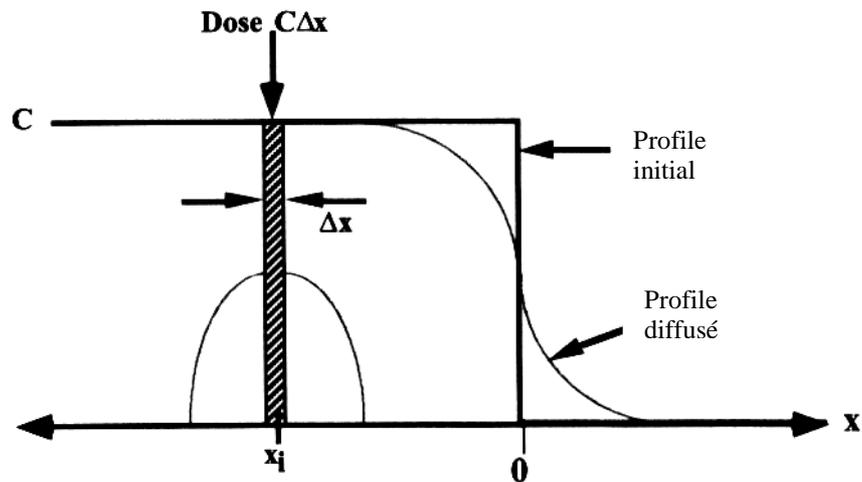


Figure I.6 : concentration superficielle constante(diffusion dans un corps semi-infini)

La solution analytique satisfaisant la deuxième loi de Fick est[6, 8-10] :

$$C(x, t) = C_s \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] = C_s \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (I.12)$$

où $C_s = C(0, t)$ ($x=0$ et $t>0$)

erf désigne la fonction erreur ou intégrale de Gauss
 et erfc est la fonction erreur complémentaire : $\text{erfc} = 1 - \text{erf}$.

$$\text{erf}z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du$$

Cette fonction est donnée dans de nombreux ouvrages.

la quantité totale de la matière diffusée par unité de volume pendant un temps t (la dose Q, c'est le nombre d'atome d'impuretés pénétrées dans le corps) est donné par[6,9] :

$$Q = \int_0^{\infty} C_s \left[1 - \text{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] dx = \frac{2C_s}{\sqrt{\pi}} \sqrt{Dt} \quad (\text{I.13})$$

La répartition de la concentration en impureté pour une source illimitée est représentée sur la figure (I.7).

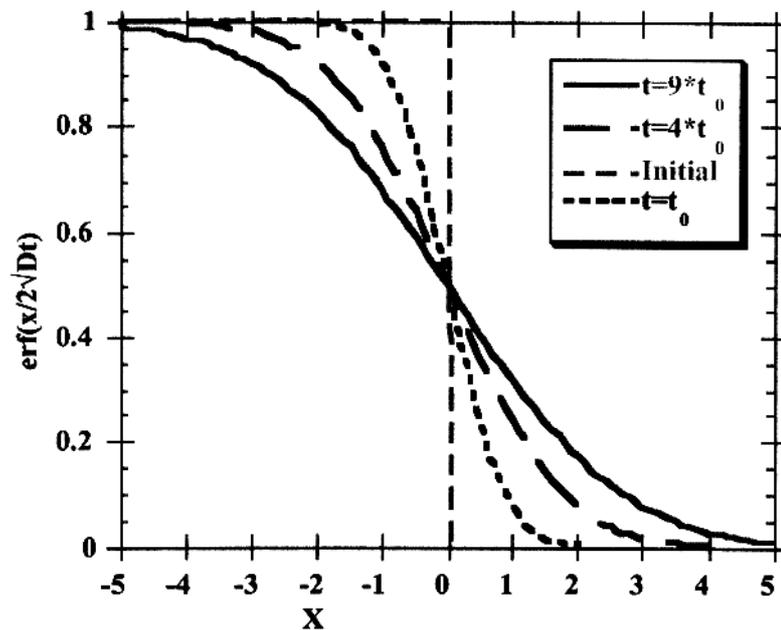


Figure I.7 : répartition de l'impureté lors de la diffusion à partir d'une source illimitée en fonction du temps de diffusion

La solution consiste en deux branches symétriques de part et d'autre du plan d'origine

1-4 : Effet de la température sur le coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion est une grandeur thermiquement activée. En effet, tous les calculs menés sur la base de la théorie atomique de diffusion [2,11,12] et les nombreux résultats expérimentaux [13-15] ont montré une variation exponentielle du coefficient de diffusion avec la température. c'est la loi d'Arrhenius:

$$D = D_0 \cdot \exp(-E_0 / kT) \tag{1.19}$$

D_0 : facteur préexponentiel, représente le coefficient de diffusion a une température infiniment grande ($D_0=D$ lorsque $1/T=0$, c'est-à-dire pour une température infinie).

k : constante de Boltzman. T : température de diffusion.

E_0 : est l'énergie d'activation, c'est à dire l'énergie nécessaire pour qu'un atome (ou ion) passe d'un état d'équilibre à un état activé. L'énergie d'activation E est également déterminée par le mécanisme de diffusion [2,4].

En pratique, on rapporte les valeurs de D à un diagramme d'Arrhenius, puisque le graphe $\ln D$ en fonction de $1/T$ est une droite dont la pente est égale à $- E / k$ et l'ordonnée à l'origine à $\ln D_0$ figure(I.8). Donc la mesure de D à différentes températures permet de calculer D_0 et E . On exprime généralement D en cm^2/s et E en eV.

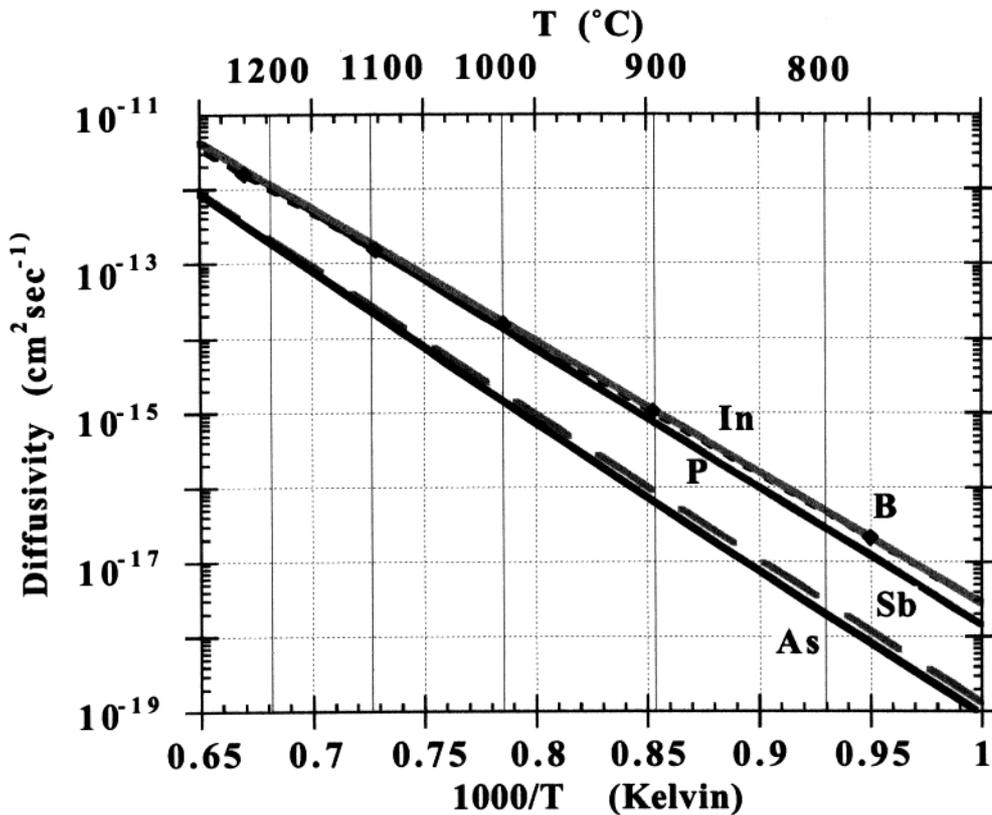


Figure I.8 : variation des coefficients de diffusion en fonction de la température

I-5 : Mécanismes de diffusion

La diffusion d'un atome par exemple, c'est à dire son déplacement dans le cristal, n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels présents dans le cristal. ces défauts sont soit des lacunes (sites vacants dans le réseau) soit des interstitiels (atomes en surnombre dans le réseau) ce qui conduit à deux types de mécanismes élémentaires [5] :

Le mécanisme lacunaire.

Le mécanisme interstitiel.

I-5-1: Mécanismes faisant appel à des défauts ponctuels.

La plupart des mécanismes de diffusion exigent la présence de défauts ponctuels.

1- Mécanisme lacunaire :

Si un site n'est pas occupé, un atome proche voisin peut sauter sur ce site, faisant apparaître une lacune au site qu'il vient de quitter. Il y a conservation du nombre de lacunes : on parle de migration de la lacune et/ou de migration de l'atome.

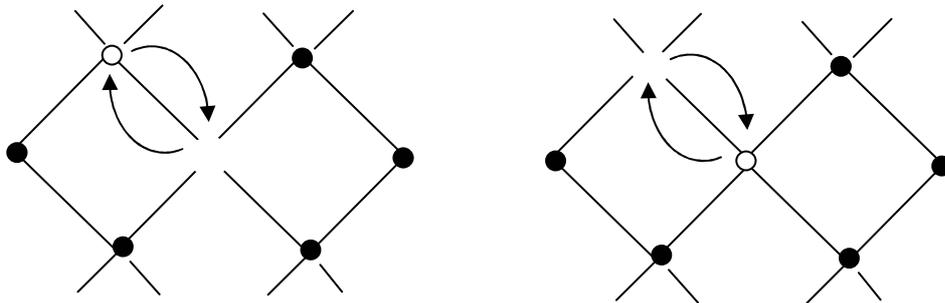


Figure. I.9 : Représentation Schématique de la diffusion par mécanisme lacunaire.

2- Mécanisme interstitiel (kick out) :

Un atome interstitiel sautant de site interstitiel en site interstitiel avant de se déplacer en position substitutionnelle dans le réseau.

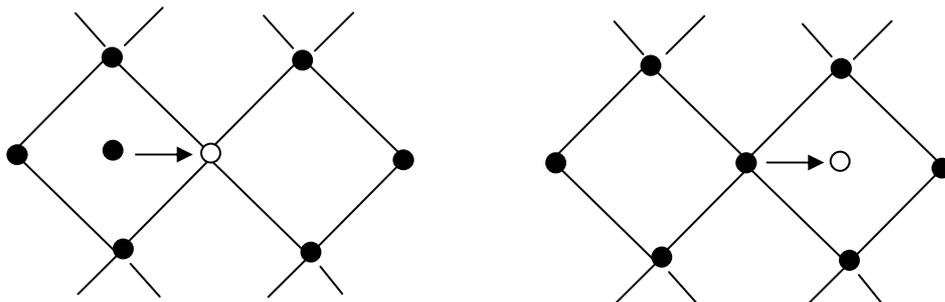


Figure. I.10 : Représentation Schématique de la diffusion par mécanisme interstitiel (kick out) .

CHAPITRE II

*DIFFUSION ET CODIFFUSION
DE L'ARSENIC ET DU BORE
DANS LE MONOSILICIUM*

II.1 : INTRODUCTION :

Après une implantation ionique, le matériau est généralement inutilisable. La première raison est liée au fait que les impuretés implantées, malgré leur distribution précise en profondeur, sont placées dans la maille en site quelconque et plus probablement en site interstitiel.

La seconde a pour cause la destruction de la qualité du réseau, les défauts créés modifiant considérablement les propriétés électriques de la région implantée.

Un recuit du matériau 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 (ici : arsenic et bore) sur des sites où elles sont électriquement actives (position substitutionnelle), sans toutefois provoquer une diffusion d'impuretés importante puisque nous travaillons dans le cadre de la ULSI (Ultra Large Scale Intégration) [16,17].

Pour restaurer simultanément le désordre cristallin et l'activité électrique, des températures élevées sont nécessaires ($> 1000^{\circ}\text{C}$). Pour limiter la diffusion des impuretés implantées et conserver ainsi des jonctions peu profondes, des durées brèves de recuit deviennent par conséquent indispensables, d'où l'intérêt des recuits thermiques rapides [16,17].

II.2 : LE RECUIT THERMIQUE RAPIDE : RTA (Rapid Thermal Annealing)

a) Intérêt du RTA

Appliquer un RTA à un substrat consiste à faire monter sa température très rapidement environ 200°C/s jusqu'aux alentours de $1000\text{-}1100^{\circ}\text{C}$, de rester à cette température quelques secondes, puis de redescendre à l'ambiante presque aussi rapidement. Il a été montré que grâce à de tels cycles thermiques, on se place dans un domaine [temps - température] optimal pour la guérison des défauts et la diffusion des dopants est minimale [18]. Le choix d'un tel domaine est impossible en recuit classique.

b) Phénomènes intervenant durant le RTA

La surface recristallise à partir du substrat. C'est un processus très rapide, d'autant plus rapide que la température du RTA est élevée. Le temps de recristallisation est négligeable par rapport au temps nécessaire pour une diffusion ou une absorption significative des défauts

d'après Williams et Elliman [19]. Naravan et Holland [20] évaluent ce temps de recristallisation à 1 ms pour un RTA à 1000° C.

* Influence des défauts induits sur la diffusion :

- effet de paire impureté -Si interstitiel :

Une telle paire peut se former [21] de façon à ce qu'un As et un Si "partagent" un site : aucun des deux atomes n'est réellement en position substitutionnelle, l'As peut alors laisser la position substitutionnelle au Si et aller constituer une paire de même type avec un atome de Si adjacent, puis se mettre en substitutionnel et forcer le Si à constituer une paire (Si- interstitiel/Si-substitutionnel) avec un troisième atome de Si. Cet effet est particulièrement important si le RTA se fait sous atmosphère oxydante. L'interface entre la couche d'oxyde qui se crée dans ces conditions et le substrat joue le rôle de réservoir d'auto-interstitiels [21]. Ceci accélère la diffusion et il est souhaitable de travailler sous atmosphère inerte.

- contribution des lacunes :

Cependant le phénomène de diffusion de As et du Si est, comme dans la plupart des cas, fondé essentiellement sur un mécanisme lacunaire. Ce dernier prend une autre dimension dans ce cas. En effet, les lacunes ont tendance à se charger électriquement (lacunes V^- , V^+ ou V° si neutres) en se constituant en paires avec les atomes d'impuretés. La diffusivité des atomes d'Arsenic (ou de Bore) ainsi liés est évidemment augmentée et la variation de D classiquement admise est [21] :

$$D = D^\circ + D^-(N/N_i) + D^-(N/N_i)^2 + D^+(N_i/N) + \dots$$

c) Appareillage

Le chauffage de l'échantillon est réalisé par radiation à l'aide d'un rayonnement infrarouge provenant soit d'une source de graphite portée à incandescence résistivement soit de lampes à arc refroidies par eau soit enfin de lampes halogènes à filament de tungstène. C'est ce dernier type de source de chaleur qui équipe la plupart des machines actuelles de RTA. Dans notre cas, le recuit thermique rapide a été réalisé dans un four ADDAX R1000 sous atmosphère neutre (Argon) (figure II.1). Ce four produit un flux lumineux homogène à 1% près sur une surface de 100 cm². Il permet d'atteindre des températures de l'ordre de 1400 °C, avec des vitesses de chauffe allant jusqu'à 250 °C/s

La plaque à recuire est posée sur une platine de chargement, elle-même solidaire d'un dispositif de translation qui obture la chambre pendant le recuit.

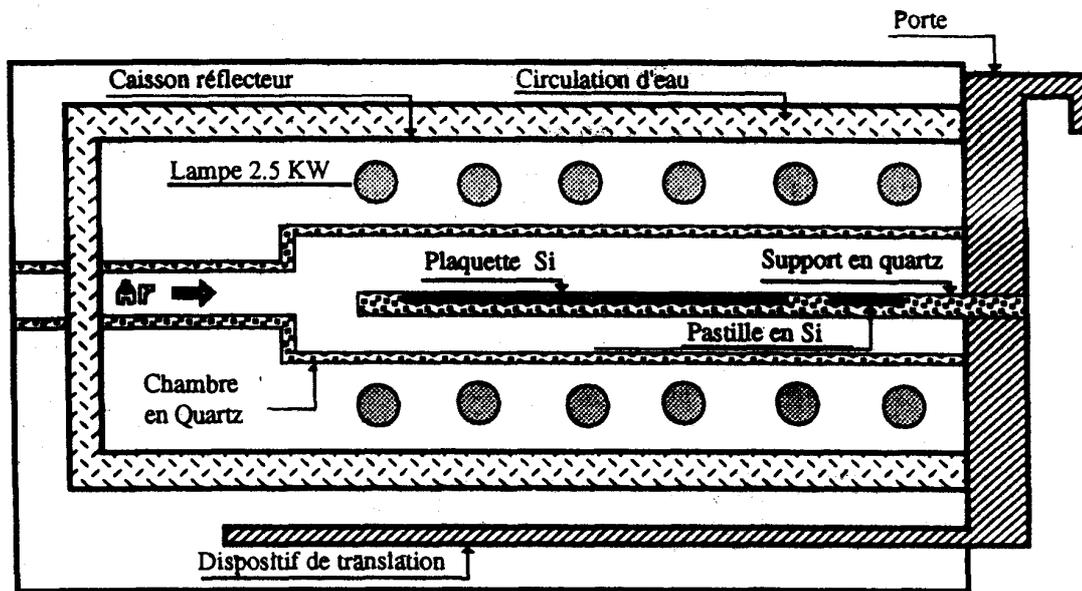


Figure II.1 : Schéma du four de recuit rapide

Un automate commande le cycle de Chauffage et de refroidissement de la plaquette en contrôlant la puissance électrique des lampes et le débit de gaz. La température est mesurée grâce à un thermocouple enrobé de ciment réfractaire et placé au centre de la platine de chargement, au milieu de la plaquette de silicium qui sert de support aux échantillons. C'est cette mesure qui permet d'étalonner le programmeur qui n'agit que sur la puissance des lampes

d) Le cycle de recuit thermique rapide

Lors d'un recuit rapide isotherme on doit maîtriser quatre paramètres fondamentaux :

- la vitesse de chauffage (la montée),
- la température du plateau,
- la durée du plateau
- la vitesse de refroidissement (la descente).

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 du 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, caractérisée par la vitesse de refroidissement. Le retour jusqu'à l'ambiante s'effectue toujours sous Argon. La figure (II.2) montre l'allure d'un cycle RTA.

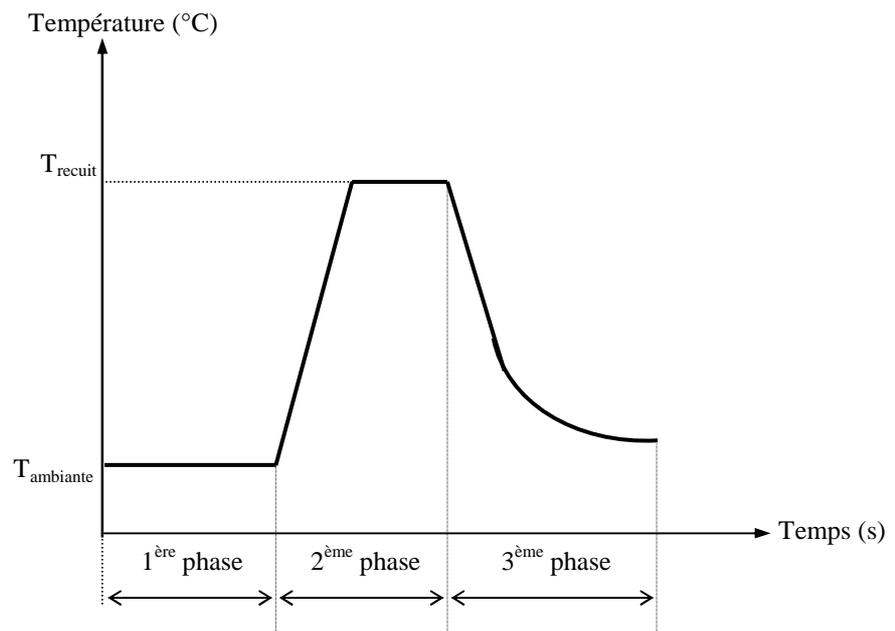


Figure II.2 : L'allure d'un cycle RTA

Pour plus de détails sur les recuits thermiques rapides et les fours commercialisés, nous conseillons les références suivantes[18,22,23].

II.3 : Diffusion et Codiffusion de l'Arsenic et du Bore dans le Monosilicium

II.3.1 : Procédures expérimentales

Le matériau utilisé comme substrat est du silicium monocristallin orientée (100) et d'une résistivité de 8 à 15 Ω .cm. Trois types d'implantations ont été réalisés : les échantillons, dits de types A sont implantés par de l'arsenic à une dose de 10^{16} at/cm² avec une énergie de 100 keV, ceux de type B par du bore à une dose de 2×10^{15} at/cm² et avec une énergie de 30 keV, tandis que les échantillons de types C prévus pour la codiffusion, ont subi une implantation d'arsenic puis de bore avec les mêmes doses et énergies citées précédemment. Après implantation, les traitements thermiques (recuit rapide RTA) ont été effectués à température variable, pendant une durée de 20 secondes, dans une gamme variant de 1000 à 1150 °C par pas de 25 °C [17,24].

Durant les traitements thermiques (recuit rapide R.T.A), l'impureté dopante, à savoir l'arsenic ou le bore, se distribue par diffusion thermique, le long de l'épaisseur de la structure. Des profils expérimentaux de concentration d'arsenic ou de bore en fonction de la profondeur sont obtenus par SIMS (analyse par un spectromètre de masse en ions secondaires).

Pour une bonne compréhension de ces profils SIMS, nous avons proposés un modèle théorique qui tient compte de la variation du coefficient de diffusion avec la concentration du dopant.

L'ajustement des courbes simulées et des profils expérimentaux nous a permis d'extraire le coefficient de diffusion.

II.3.2 : DIFFUSION SIMPLE DE L'ARSENIC ET DU BORE

II.3.2.1 : Diffusion de l'arsenic

L'arsenic est implanté à une dose de 10^{16} at.cm⁻², avec une énergie de 100 keV ; Il peut former l'émetteur d'un transistor bipolaire dans la mesure où l'on obtient une forte concentration chimique et une bonne activité électrique des dopants lors des recuits. Le profil d'implantation ne peut être assimilé à une gaussienne ; l'ordre de la distribution est au moins de 3 [17-19]. Nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de températures de 1000 à 1150 °C. La superposition des profils de diffusion pour les différentes températures de recuit, et pour une durée du plateau de recuit de 20 secondes (Figure II.3.a et b) montrent une diffusion remarquable du dopant dans le monosilicium, produisant donc une : région N⁺ fortement dopée, en moyenne 4×10^{20} at.cm⁻³. On remarque en particulier qu'à partir d'une température de l'ordre de 1075 °C le profil présente un plateau quasiment plat à partir d'une profondeur de 140 nm et allant jusqu'à 210 nm à 1150 °C. Au-delà de ces plateaux la queue du profil garde la même allure, quelle que soit la température ; le recuit thermique conduit à des profils de diffusion d'allure rectangulaire. La pénétration de l'arsenic dans le monosilicium pour une concentration de 10^{18} at.cm⁻³ atteint de 190 nm à 1000 °C jusqu'à presque doubler, 330 nm, à 1150 °C.

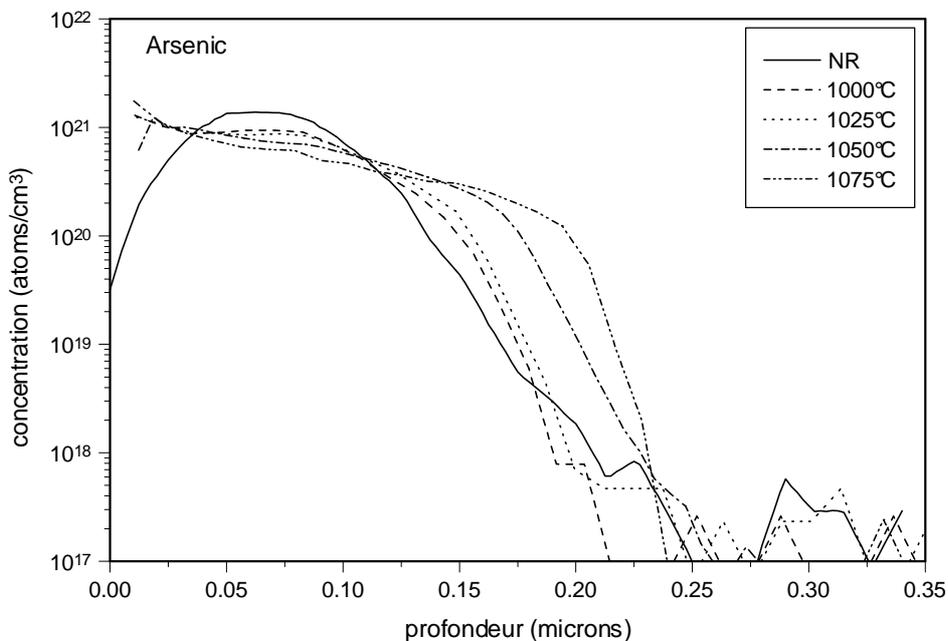


Figure II.3.a : Profils de diffusion d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

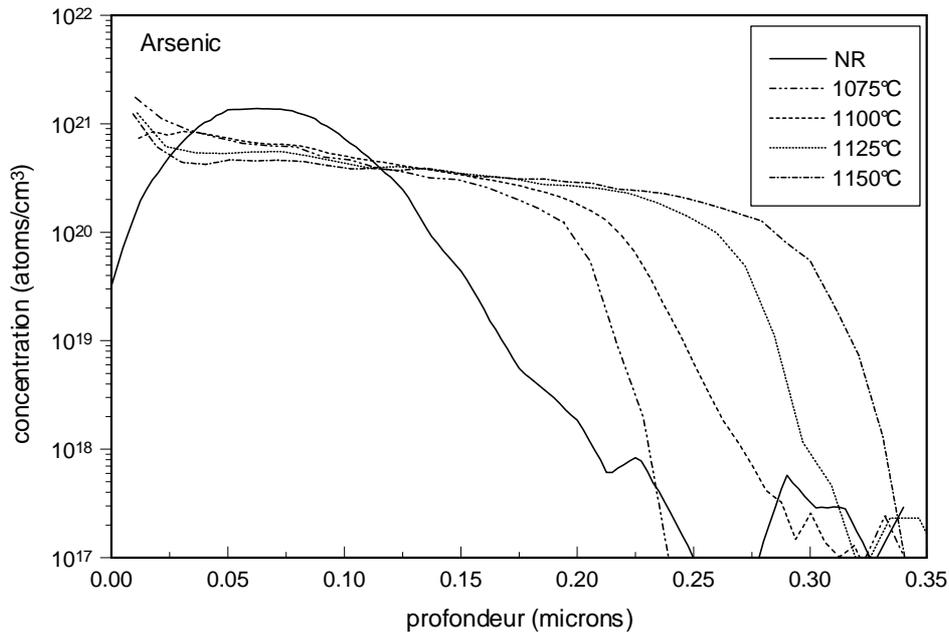


Figure II.3.b : Profils de diffusion d'As (10^{16} at.cm $^{-2}$; 100 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

II.3.2.2 : Diffusion du bore

Le bore est quant à lui implanté à 2×10^{15} at.cm $^{-2}$ avec une énergie de 30 keV. Les figures (II.4.a et b) illustrent la variation de la concentration de ce dopant en fonction de la profondeur pour différentes températures dans l'intervalle considéré de 1000 à 1150 °C, comme pour l'arsenic. On observe une forte queue d'implantation due au phénomène de canalisation. On remarque la légère pénétration d'une température à une autre, et les profils de diffusion présentent des queues très étendues, la concentration décroissant exponentiellement. Les profils commencent à s'aplatir à une température de 1050 °C avec un étalement de 110 nm et atteint 240 nm à 1150 °C. Pour une concentration de 10^{17} at.cm $^{-3}$, le bore atteint une profondeur de 380 nm et 480 nm pour les deux températures extrêmes respectives de 1000 et 1150 °C.

Comme cela était prévisible (Figure II.4), le bore diffuse plus vite que l'arsenic. Il a en effet un rayon plus petit que celui de l'arsenic, et proche de celui du silicium [25].

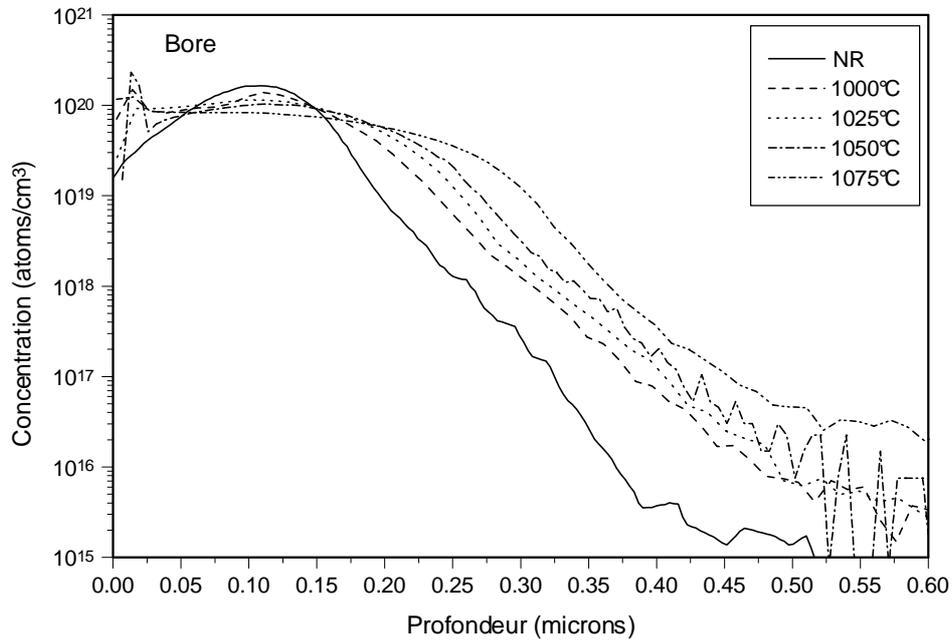


Figure II.4.a : Profils de diffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

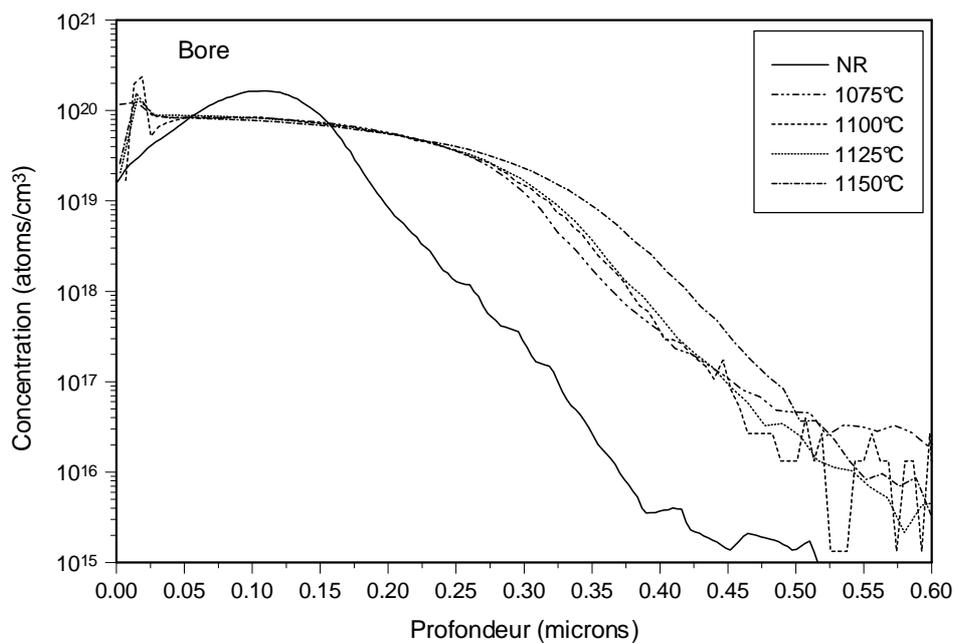


Figure II.4.b : Profils de diffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) recuits à 20 secondes pour différentes températures.

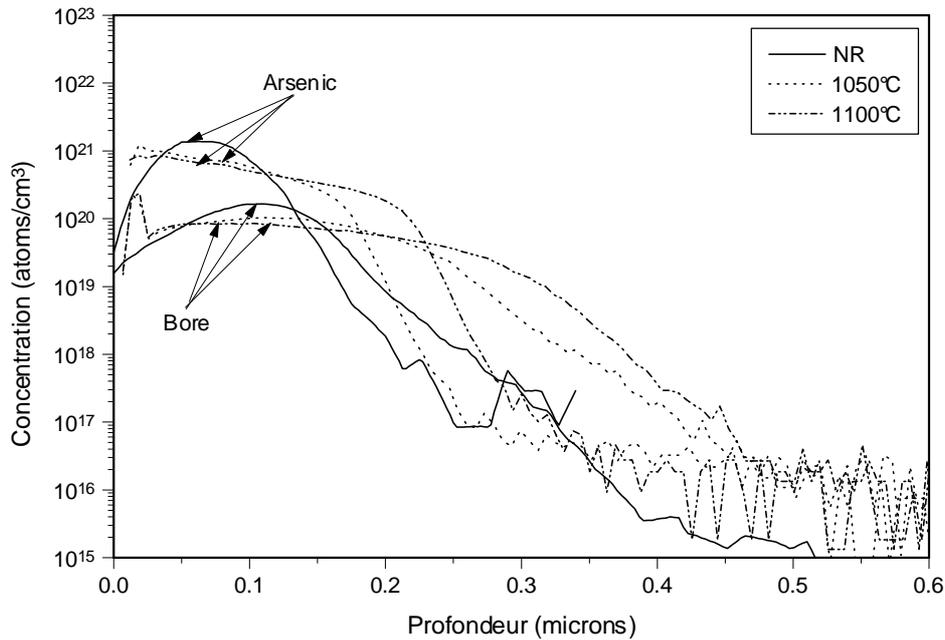


Figure II.4 : Profils de diffusion simple d'As (10^{16} at.cm $^{-2}$; 100 keV) et du B (2×10^{15} at.cm $^{-2}$; 30 keV) recuits à 20 secondes pour 1050°C et 1100°C.

II.3.3 : CODIFFUSION DE L'ARSENIC ET DU BORE

L'étude de la codiffusion (Figure II.5.a, b et c), est menée dans une configuration de jonction émetteur-base de transistor bipolaire. A l'intersection des deux profils de l'arsenic et du bore, qui correspond à la profondeur de la jonction X_j , on remarque la formation d'un épaulement sur le profil de bore ; en fait apparaît à cet endroit une zone de déplétion qui implique l'existence d'un champ électrique important [26]. D'après Hu et Schmidt [27], les atomes de bore sont plus sensibles à l'effet de champ car ils diffusent plus vite que ceux de l'arsenic. Les atomes vont avoir tendance à migrer de part et d'autre du point d'intersection des profils, y produisant un minimum de concentration. On constate que la mobilité est moins importante à gauche qu'à droite de la jonction ; ce fait peut être expliqué par la présence d'arsenic ionisé positivement à gauche de la jonction et présentant un fort gradient de concentration qui retient le bore ionisé négativement et ralentit sa diffusion au-delà de la jonction [24]. Les profils à droite de la jonction présentent des queues de courbes fortement accélérées. Ces queues sont dues à l'absence de l'arsenic dans cette région. On peut assimiler l'allure des profils du bore en codiffusion par une bigaussienne, l'une caractérisant la partie de la courbe à gauche de la jonction et l'autre celle de droite [24].

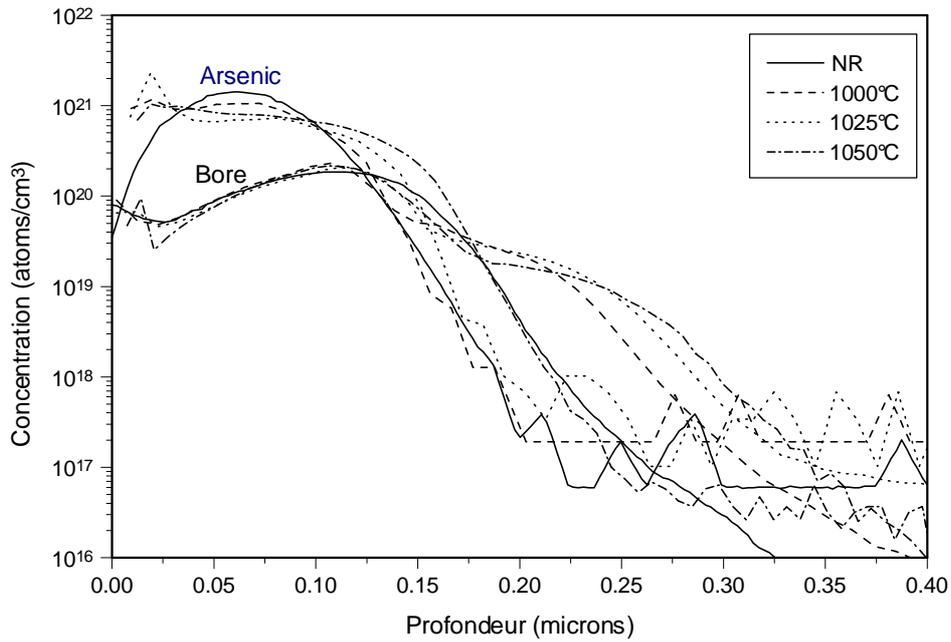


Figure II.5.a : Profils d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) et B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

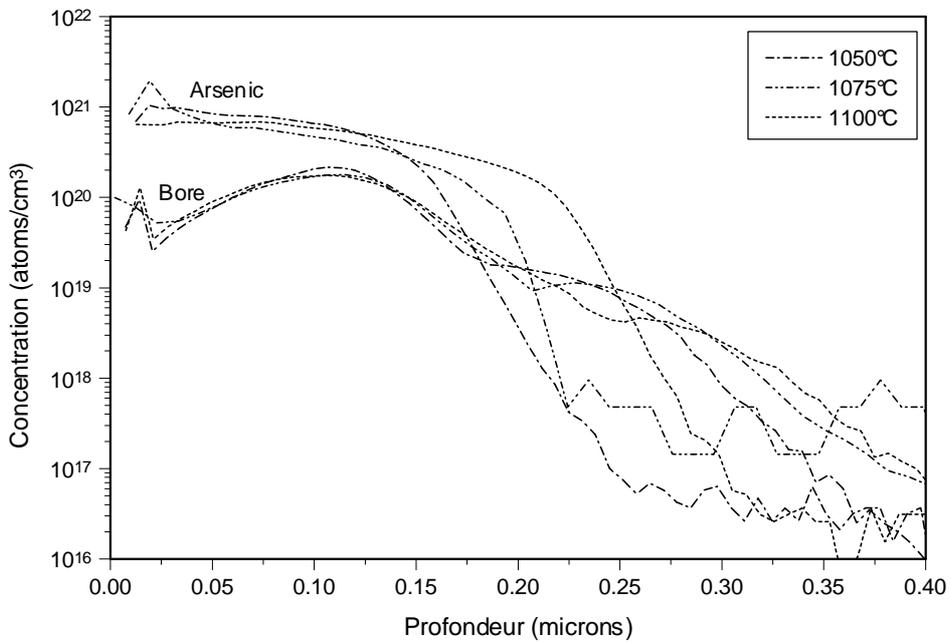


Figure II.5.b : Profils d'As (10^{16} at.cm⁻² ; 100 keV) et B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

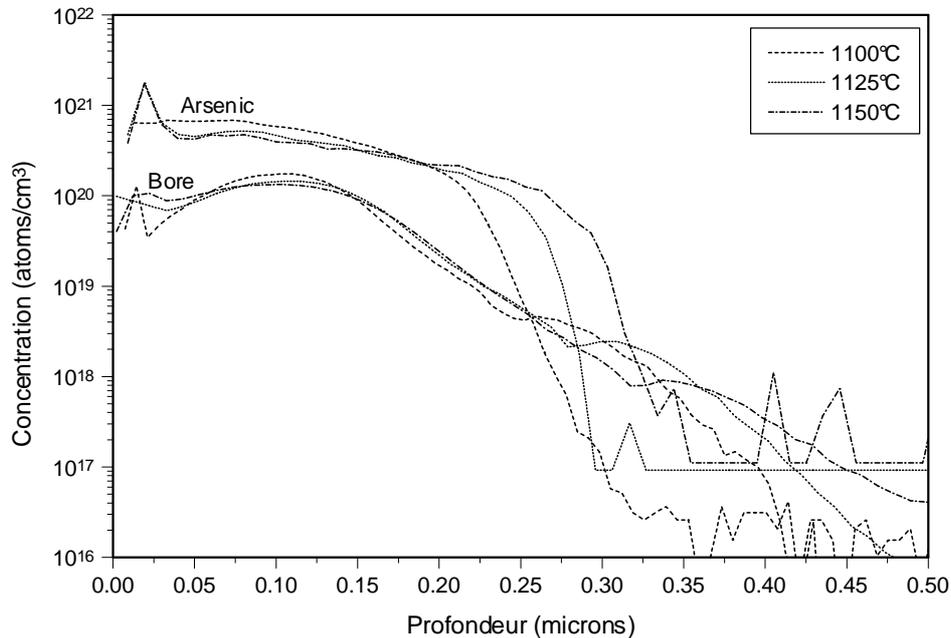


Figure II.5.c : Profils d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) et B (2×10^{15} at. cm^{-2} ; 30 keV) en codiffusion recuits à différentes températures pour une durée de 20 secondes.

Comparaison entre diffusion et codiffusion

La comparaison des profondeurs de diffusion et codiffusion (Figure II.8.a et b), déterminées à partir des figures (II.7.a et b) pour l'arsenic et à partir des figures (II.6.a et b) pour le bore , ne montre aucune différence significative sur la diffusion de l'arsenic, tandis que la diffusion du bore en présence d'arsenic est retardée de 70 nm à 1000 °C et de 40 nm à 1150 °C à une concentration de 10^{17} at./ cm^3 .

La diffusion du bore en diffusion simple à une concentration de 10^{17} at. cm^{-3} peut atteindre 380 nm à 1000 °C et 480 nm à 1150 °C. Tandis que en codiffusion, il atteint 310 nm à 1000 °C et 440 nm à 1150 °C

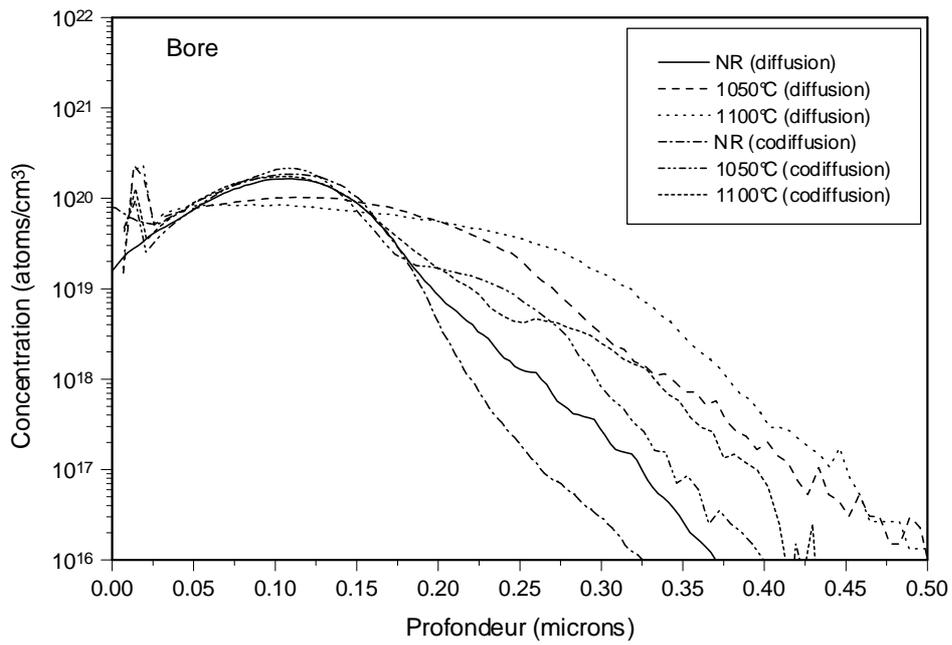


Figure II.6.a : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

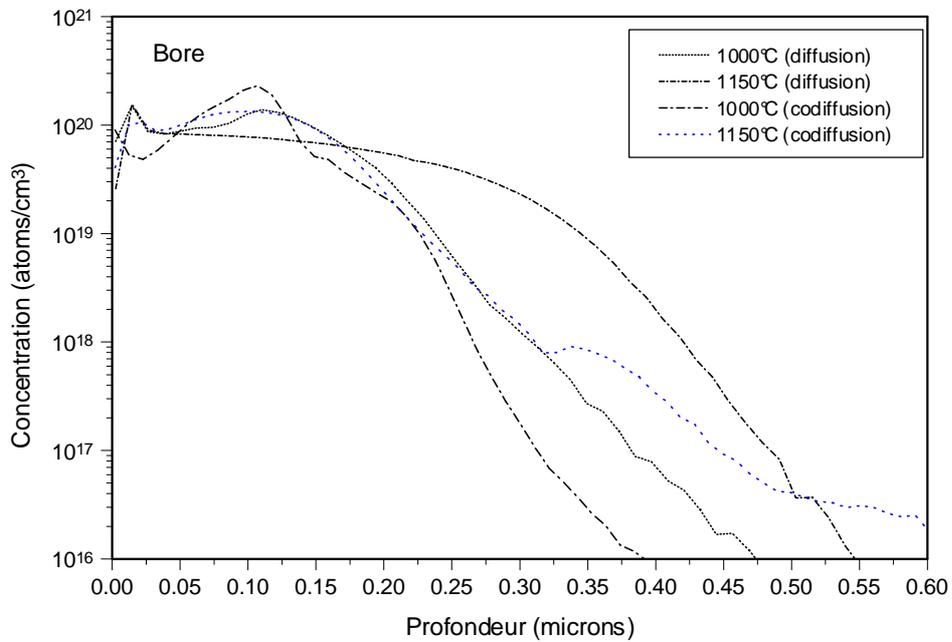


Figure II.6.b : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion du B (2×10^{15} at.cm⁻² ; 30 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

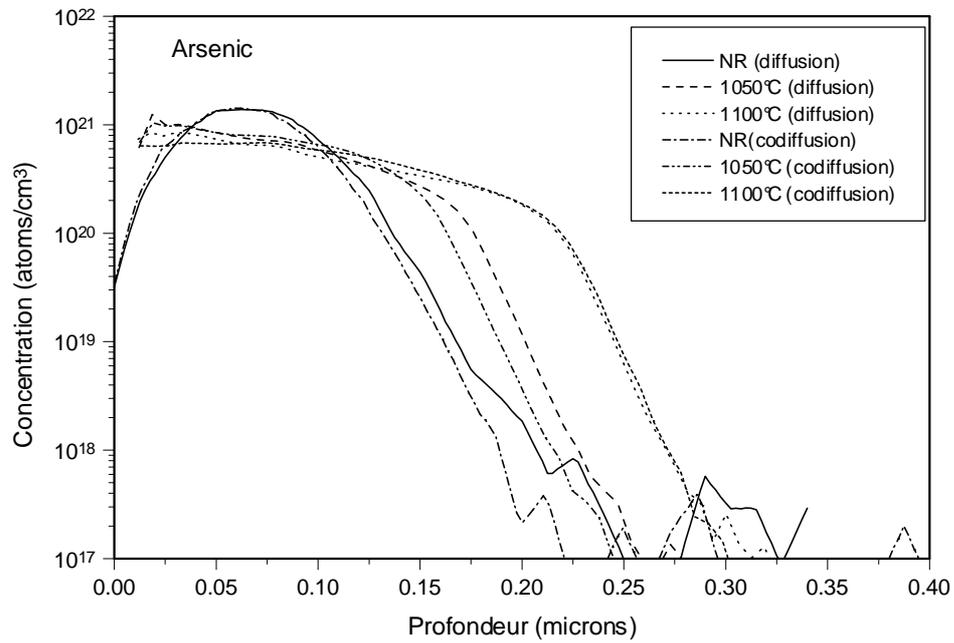


Figure II.7.a : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

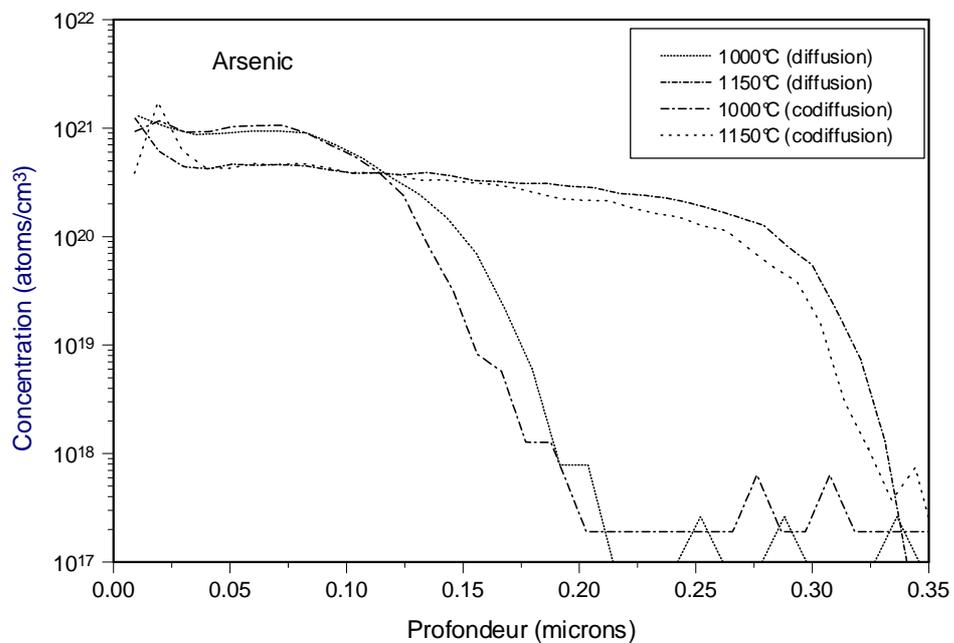


Figure II.7.b : Comparaison des profils de concentration de diffusion en diffusion et codiffusion d'As (10^{16} at. cm^{-2} ; 100 keV) en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes.

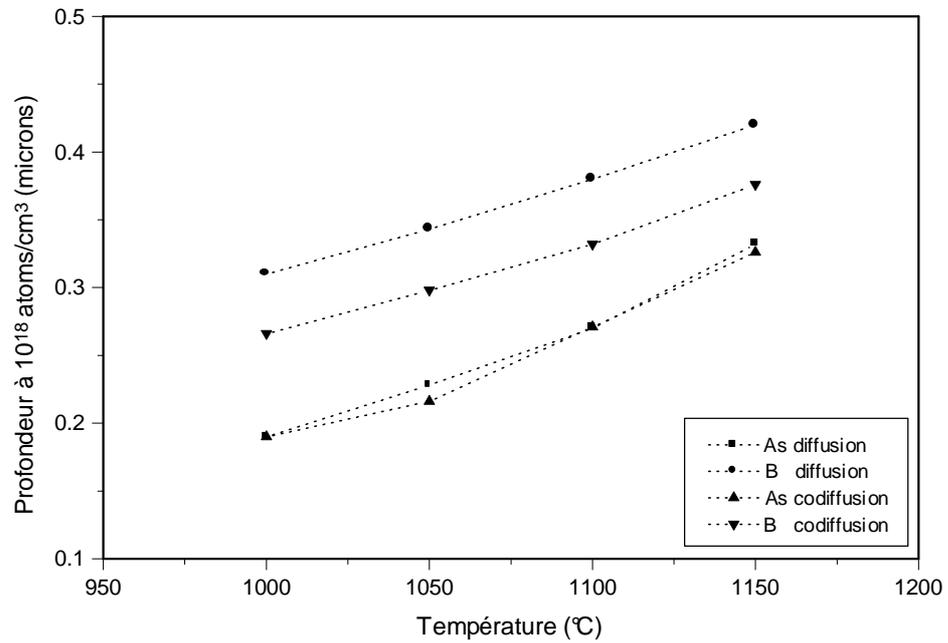


Figure II.8.a : Comparaison de la profondeur de diffusion en diffusion et codiffusion en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes à 10^{18} at.cm⁻³.

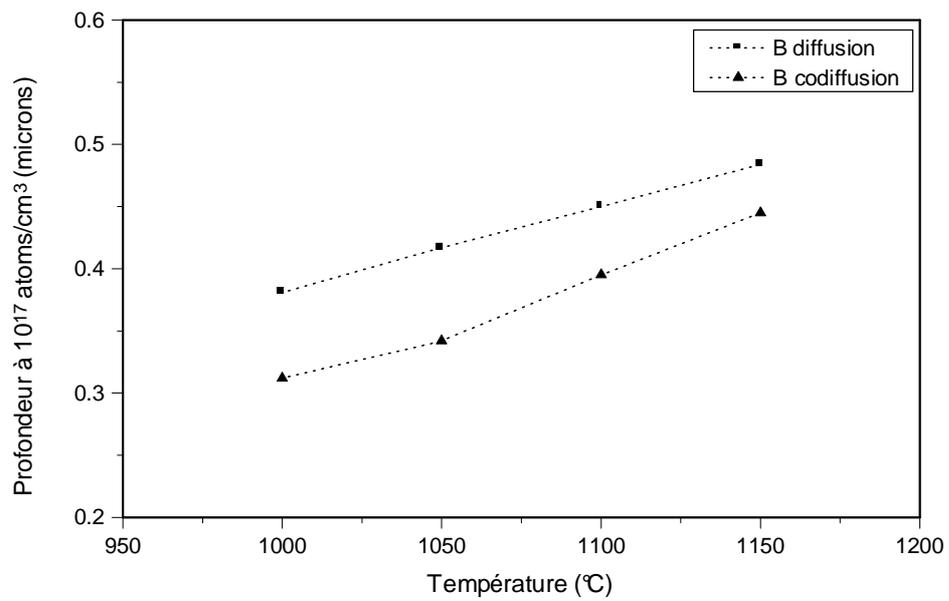


Figure II.8.b : Comparaison de la profondeur de diffusion en diffusion et codiffusion en fonction de la température de recuit pour une durée de 20 secondes à 10^{17} at.cm⁻³.

CHAPITRE III

*MODELISATION DE LA DIFFUSION
ET DE LA CODIFFUSION*

III MODELISATION DU PHENOMENE DE DIFFUSION

III.1 INTRODUCTION

Les dispositifs actuels de l'électronique à haute densité d'intégration nécessite une très bonne connaissance des phénomènes physiques rencontrés lors des procédés technologiques utilisés pendant la fabrication.

Le recuit thermique rapide est l'un de ces procédés, utilisé pour recuire des substrats de silicium implantés par des dopants. Les phénomènes de diffusion qui se produisent doivent être parfaitement maîtrisés afin de pouvoir réaliser des jonctions abruptes avec des concentrations bien connues.

Le recuit thermique est utilisé dans la fabrication des semiconducteurs pour guérir les défauts cristallins causés par l'implantation et activer électriquement les impuretés introduites pour former le dispositif. Par conséquent pour une bonne compréhension de ces phénomènes physiques, des modèles théoriques traduisant le même phénomène physique sont devenus nécessaires, par but d'économiser du temps et de l'argent.

La modélisation à pour but d'abord de prévoir les résultats de diffusion et dans un deuxième temps elle aurait comme finalité de pouvoir calculer les caractéristiques électriques du substrat recuit en ayant comme seules données les paramètres initiaux.

Notre but est de maître au point un programme relativement simple d'utilisation, dédié essentiellement au diffusion de dopants (arsenic et bore) dans le monosilicium.

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.

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right]}{\partial x} \quad (\text{III.1})$$

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

D : diffusivité (coefficient de diffusion).

Les modèles simples (loi de Fick), correct pour les faibles concentrations, ne conviennent plus et l'on a dû rajouter de nombreux termes correctifs pour obtenir un modèle susceptible de donner de résultats quantitatifs valables dans le domaine des concentrations

employées. Ainsi, plusieurs phénomènes interviennent dans la diffusion thermique des impuretés dans un semi-conducteur [17,24,30,43] :

* Le champ électrique : Comme les impuretés sont chargées électriquement, la diffusion est accélérée, à haute concentration, par le champ électrique interne créé par le gradient de la distribution des dopants.

* Les défauts existant dans le semi-conducteur (lacunaire et interstitiel) [26].

* la température.

* le gradient de concentration impuretés.

Dans ce qui suit, nous explicitons d'abord les équations que supporte notre logiciel.

III.2 LE CALCUL DU FLUX ET L'EFFET DU CHAMP ELECTRIQUE INTERNE.

Le flux d'une impureté "e" dans un milieu isotropique contenant " j " impuretés, peut être exprimé par [27-30] :

$$F_e = -D_e \nabla C_e + Z_e \mu_e C_e E \quad (\text{III.2})$$

avec :

D_e : Coefficient de diffusion de l'impureté.

C_e : Concentration de l'impureté.

μ_e : Mobilité de l'impureté.

Z_e : Charge de l'impureté, positive pour les donneurs (As) et négative pour les accepteurs (B).

E : Champ électrique interne.

Si ψ est le potentiel électrostatique dans la structure, on a alors : [24,29,30]

$$E = -\nabla \psi$$

donc

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e \frac{\mu_e}{D_e} C_e \nabla \psi \right) \quad (\text{III.3})$$

La relation d'Einstein entre la mobilité et la diffusivité est donnée par [7,31]

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{q} \quad (\text{III.4})$$

avec :

q : charge électronique

k : constante de Boltzman

T : température absolue (k) du processus

Et l'expression du flux devient

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e \frac{q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \quad (\text{III.5})$$

L'équation de diffusion (III.1) devient donc :

$$\frac{\partial C_e}{\partial t} = -\frac{\partial F_e}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-D_e \left(\nabla C_e + \frac{Z_e q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_e \left(\nabla C_e + \frac{Z_e q}{kT} C_e \nabla \psi \right) \right] \quad (\text{III.6})$$

L'équation de diffusion pour l'arsenic sera donc [29,32] :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{As} \left(\nabla C_{As} + \frac{q C_{As}}{kT} \nabla \psi \right) \right] \quad Z_e = +1 \text{ pour l'arsenic} \quad (\text{III.7})$$

ou bien

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \nabla \left[D_{As} \nabla C_{As} + D_{As} \frac{q C_{As}}{kT} \nabla \psi \right] \quad (\text{III.7'})$$

Pour le bore, l'équation de diffusion sera [29,32] :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \nabla \left[D_B \nabla C_B - D_B \frac{q C_B}{kT} \nabla \psi \right] \quad Z_c = -1 \text{ pour le bore} \quad (\text{III.8})$$

Où C_{As} et C_B sont les concentrations de l'arsenic et du bore, respectivement ; D_{As} et D_B sont les diffusivités effectives pour chaque impureté.

Sachant que dans un semiconducteur dopé [7] :

$$n = n_i e^{q\psi/kT} \quad (\text{III.9.a})$$

$$p = n_i e^{-q\psi/kT} \quad (\text{III.9.b})$$

avec :

n : concentration (ou densité) d'électrons.

n_i : concentration intrinsèque d'électrons à la température considérée.

p : concentration (ou densité) des trous.

$q\psi > 0$ entraîne $n > n_i$ et $p < n_i$ le semiconducteur est de type n

$q\psi < 0$ entraîne $p > n_i$ et $n < n_i$ le semiconducteur est de type p

$q\psi$ désigne le niveau de Fermi [7]

les expressions (III.9.a,b) donnent

$$q\psi = kT \cdot \ln(n/n_i) = -kT \cdot \ln(p/n_i) \quad (\text{III.9.c})$$

dans un semiconducteur de type n, $n = C_d - C_a$, dans un semiconducteur de type p,

$p = C_a - C_d$; soit :

$$\text{semiconducteur(sc) type n} \quad q\psi = kT \cdot \ln[(C_d - C_a)/n_i] \quad (\text{III.9.d})$$

$$\text{semiconducteur(sc) type p} \quad q\psi = -kT \cdot \ln[(C_a - C_d)/n_i] \quad (\text{III.9.e})$$

où C_a et C_d sont les densités (concentrations) de dopants accepteurs (Bore) et de donneurs (Arsenic)

Dans un semiconducteur intrinsèque : $n = p = n_i$.

Le champ électrique interne des charges d'espaces induit par le gradient de concentration peut être exprimé par [29,30,33] :

$$E = -\nabla\psi = -\frac{kT}{q}\nabla\ln\frac{n}{n_i} = \frac{kT}{q}\nabla\ln\frac{p}{n_i} \text{ sachant que } n = n_i e^{q\psi/kT} \text{ et } p = n_i e^{-q\psi/kT} \quad (\text{III.10})$$

En remplaçant ψ par sa valeur, l'expression du flux (III.5) devient :

$$F_e = -D_e \left(\nabla C_e + Z_e C_e \nabla \ln \frac{n}{n_i} \right) \quad (\text{III.11})$$

Densité de porteurs :

Considérons un semiconducteur contenant une densité (concentration) N_d de donneurs et une densité N_a d'accepteurs. Soit N_d^+ le nombre de donneurs ionisés, c'est-à-dire ayant libéré leur électron supplémentaire. Soit N_a^- le nombre d'accepteurs ionisés, c'est-à-dire ayant accepté un électron supplémentaire. Le matériau étant neutre, l'ensemble des charges positives est égal à l'ensemble des charges négatives. L'équation de neutralité électrique du matériau s'écrit [7] :

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (\text{III.12.a})$$

où n et p représentent les densités de porteurs libres, N_a^- et N_d^+ les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés

En raison du fait que l'énergie thermique kT est du même ordre de grandeur que les énergies de liaison de l'électron sur le donneur et du trou sur l'accepteur, tous les donneurs et accepteurs sont ionisés. L'équation de neutralité électrique se réduit donc à [7,24] :

$$n + N_a = p + N_d \quad (\text{III.12.b})$$

où N_a et N_d sont les densités accepteurs et donneurs
on peut écrire l'équation de neutralité sous la forme

$$N_d - N_a + p - n = 0 \quad (\text{III.12.c})$$

Pour plusieurs dopant l'équation s'écrit sous la forme

$$\sum_j Z_j N_j + p - n = 0 \quad \text{ou bien} \quad \sum_j Z_j C_j + p - n = 0 \quad (\text{III.12.d})$$

On désigne la concentration par C ou par N c'est la même.

Z_j : Charge de l'impureté, positive (+1) pour les donneurs (As) et négative (-1) pour les accepteurs (B).

La somme sur " j " étant faite sur toutes les impuretés de la structure.

Si la population d'électrons et de trous sont à l'équilibre thermodynamique et obéissent à une statistique de Boltzman, la concentration intrinsèque d'électrons à une température donnée donne [7,24] :

$$np = n_i^2 \quad (\text{III.13})$$

l'équation (III.12.c) associée à la relation $np = n_i^2$ permet d'écrire l'équation :

$$n^2 - (N_d - N_a)n - n_i^2 = 0 \quad \text{pour deux dopants}$$

ou bien

$$n^2 - \left(\sum_j Z_j C_j \right) n - n_i^2 = 0 \quad \text{pour plusieurs dopants}$$

c'est une équation du second degré dont la solution est donnée par :

$$n = \frac{1}{2} \left[N_d - N_a + \left((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.a})$$

ou bien

$$n = \frac{1}{2} \left[\sum_j Z_j C_j + \left(\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.a'})$$

et de la même façon on détermine la valeur de p (nombre de trous)

$$p = \frac{1}{2} \left[- (N_d - N_a) + \left((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.b})$$

ou bien

$$p = \frac{1}{2} \left[- \sum_j Z_j C_j + \left(\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{III.14.b'})$$

Notons : $N = (n/n_i)$ donc $\nabla \ln N = \frac{\nabla N}{N}$

puis enfin à partir de (III.11) et (III.14.a ou a'), on détermine l'expression générale du flux.

$$F = -D_e \left[\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\left(\sum_j Z_j C_j \right)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.15})$$

Application dans le cas de l'Arsenic seul : $Z_e = Z_j = Z_{As} = +1$

$$F_{As} = -D_{As} \left[1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_{As} \quad (\text{III.16})$$

que l'on peut mettre sous la forme :

$$F_{As} = -D_{As}^* \nabla C_{As}$$

avec : $D_{As}^* = D_{As} \cdot h$

et $h = \left[1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right]$

h : étant le facteur d'exaltation de la diffusion [34] :

Pour des fortes concentrations ($C_{As} \gg n_i$) alors $h = 2$, et on obtient : $\mathbf{D}_{As}^* = 2\mathbf{x}\mathbf{D}_{As}$

Le champ électrique apporte la même contribution à la diffusion que le gradient de concentration, pour les dopants :

$$F_{As} = -2.D_{As} \nabla C_{As}$$

Application dans le cas du Bore seul : $Z_c = Z_j = Z_B = -1$

$$F_B = -D_B \left[1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_B \quad (\text{III.17})$$

III. 3 L'INFLUENCE DES DIFFERENTES LACUNES SUR LE COEFFICIENT DE DIFFUSION

Au dopage à fortes concentrations, la diffusivité augmente, l'équation de Fick doit être résolue numériquement du fait que D n'est pas constant [6].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D^{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right] \quad (\text{III.18})$$

Le phénomène d'interaction impuretés/défauts ponctuels paraît être d'une grande importance dans le mécanisme de diffusion. Les diffusivités dans le silicium sont dépendent du niveau d'énergie de Fermi [25,29] :

Les lacunes peuvent se présenter sous différents états électriques : lacunes neutres, chargées positivement, négativement... etc. Le coefficient de diffusion D_e est alors la Somme de divers **coefficients de diffusion**, compte tenu de la diffusion de l'impureté avec chacune de ces lacunes [6,24,35,36] :

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^0 + \mathbf{D}^- (n/n_i) + \mathbf{D}^= (n/n_i)^2 + \mathbf{D}^+ (n_i/n) + \dots \quad (\text{III.19})$$

Avec D^0 , D^- , $D^=$, D^+ représentant les diffusivités intrinsèques de l'impureté en présence de défauts ponctuels.

Les suscriptions 0, -, +, et = signifient neutre, chargé négativement, chargé positivement et chargé négativement deux fois respectivement.

Ainsi, on supposant que la diffusion ne s'effectue que par l'intermédiaire des lacunes neutres et chargées une fois [6,17,24,29,37,38], il devient:

$$D_d = D_d^0 + D_d^- \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad \text{pour les donneurs (par ex, Arsenic)} \quad (\text{III.19. a})$$

$$D_a = D_a^0 + D_a^+ \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-1} \quad \text{pour les accepteurs (par ex, Bore)} \quad (\text{III.19. b})$$

dans le cas où tous les dopants sont électriquement actifs nous considérons le model de Fair et Tsai [6,17,24,39] :

$$D_d = D_{id} \left(\frac{1 + \beta_d (n/n_i)}{1 + \beta_d} \right) \quad \text{pour des impuretés donatrices} \quad (\text{III.20.a})$$

$$D_a = D_{ia} \left(\frac{1 + \beta_a (p/n_i)}{1 + \beta_a} \right) \quad \text{pour des impuretés accéptrices} \quad (\text{III.20.b})$$

que l'on peut les récrire sous la forme [17] :

$$D = D_i (1 + \beta f) / (1 + \beta) \quad (\text{III.20.c})$$

Avec :

β : facteur représentant le rapport de diffusivité induite par les lacunes chargées une fois sur la diffusivité due aux lacunes neutres [17] :

$$\beta_d = D^- / D^0 \quad \text{et} \quad \beta_a = D^+ / D^0$$

$f = n/n_i$: pour une impureté donatrice (arsenic)

$f = n_i/n = p/n_i$: pour une impureté acceptrice (bore).

de l'équation (III.14.a ou a') on aura :

$$\frac{n}{n_i} = \frac{C}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C}{2n_i} \right)^2 + 1} \quad (\text{III.21})$$

Le coefficient de diffusion effectif intervenant dans l'équation de la diffusion prend alors la forme [17,38] :

$$D^{\text{eff}} = D.h = D_e \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta} \right) \left[1 + \frac{C_e}{\sqrt{C_e^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.22})$$

Finalement l'expression du flux devient [24] :

$$F = -D_{ie} \frac{1+\beta f}{1+\beta} \left[\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{III.23})$$

Avec D_{ie} : coefficient de diffusion intrinsèque de l'impureté "e".

Finalement :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} = D_{ie} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1+\beta f}{1+\beta} \left(\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2}} \right) \right] \quad (\text{III.24})$$

C est équivalent à la concentration en électron (n) pour l'arsenic ou à la concentration en trous (p) pour le bore, dans la mesure où toutes les impuretés sont ionisées.

On voit que dans le cas de fortes concentrations, i.e. $C \gg n_i, h$, le facteur d'exaltation dû au champ électrique tend vers 2 et f , paramètre intervenant dans l'expression du champ électrostatique dû à l'ionisation des impuretés [17,24,39,40], vers C/n_i . D_i suit une loi de type Arrhénius.

$$D_i = D_0 \cdot \exp(-E_0/KT) \quad (\text{III.25})$$

n_i dépend essentiellement du gap et de la température [30,17].

$$n_i = 7.6354 \times 10^{15} \times T^{3/2} \exp(-\text{Gap}/2KT)$$

avec

$$\text{Gap} = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} T^2 / (636.K + T)$$

k étant la constante de BOLTZMANN = $8.62 \cdot 10^{-5}$ eV/k

$$\beta = 2 \exp[(1/KT)(-\text{Gap}/2 - E_v + Z_i \cdot q^2 / 4\pi\epsilon a_i)]$$

a_i : étant distance la minimale entre la lacune et l'impureté ionisée la plus proche.

E_v : le niveau de la lacune

ϵ : La constante diélectrique du silicium.

Cependant, aux températures de diffusion employées ici, β peut être considérée constant[17,30].

Pour le bore et l'arsenic les paramètres usuels utilisés lors de **recuits classiques** sont [17,41,42] :

Pour le bore

$$D_0 = 0.5554 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 3.426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

pour l'arsenic

$$D_0 = 22.83 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

remarque:

pour le recuit rapide[17]

Pour le bore

$$D_0 = 3 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 3.426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

pour l'arsenic

$$D_0 = 35 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$$

$$E_0 = 4.0 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

Application de l'équation finale pour le cas de l'arsenic seul [17,43] :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right] \quad (\text{III.26})$$

avec $D_{i,As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/KT)$

$$\text{et } f = \frac{n}{n_i} = \frac{C_{As}}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As}}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad Z_j = Z_e = +1 \text{ dans l'équation (III.14.a')}$$

dans ce cas l'expression de la diffusivité de l'Arsenic est la suivante :

$$D_{As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/kT) \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right) \quad (\text{III.27})$$

Application de l'équation finale pour le cas du bore seul [17,43]:

sachant que pour le bore $f = p/n_i$, on aura :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] \quad (\text{III.28})$$

avec $D_{i,B} = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/KT)$

$$\text{et } f = \frac{p}{n_i} = \frac{C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_B}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad Z_e = Z_j = -1 \text{ dans l'équation (III.14.b')}$$

l'expression de la diffusivité du bore sera :

$$D_B = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/kT) \frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right) \quad (\text{III.29})$$

III. 4 LA CODIFFUSION DE L'ARSENIC ET DU BORE

La codiffusion de l'arsenic et du bore est en particulier très importante à étudier dans les technologies de fabrication des transistors NPN, où la diffusion de l'émetteur (arsenic), fortement dopé, modifie la diffusion du bore en phase finale du procédé de fabrication.

Le modèle physique utilisé pour l'étude de la diffusion couplée de deux impuretés (arsenic et bore) doit inclure, comme dans le cas d'une seule impureté, l'effet du champ électrique interne et l'influence des lacunes sur la diffusion.

Nous avons alors affaire à deux équations couplées [17,24,25,31,43,44]

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(h_{As} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - (h_{As} - 1) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (III.30)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(h_B \frac{\partial C_B}{\partial x} - (h_B - 1) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (III.31)$$

avec

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_i} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right) \quad (III.32)$$

C désignant la concentration relative soit à l'arsenic soit au bore, selon que l'on considère l'équation (III.30) ou (III.31), et

$$f = \frac{C_{As} - C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \quad (III.33)$$

remarque:

pour la codiffusion on écrit $C_{As} - C_B$ lorsque $C_{As} > C_B$ et $C_B - C_{As}$ lorsque $C_B > C_{As}$

III. 5 METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DES SYSTEMES D'EQUATIONS DE DIFFUSION

Les phénomènes de diffusion peuvent se modéliser par deux approches

- une approche microscopique : la méthode utilisée est la méthode de Monte Carlo qui permet de simuler des distributions de grandeurs aléatoires. La méthode de Monte Carlo consiste en des simulations dans lesquelles des nombres aléatoires sont utilisés pour simuler la migration aléatoire des espèces diffusantes. Des publications récentes ont démontré l'application de cette méthode pour le cas de la diffusion de dopants dans un semiconducteur [45-48]. Néanmoins, cette méthode, à cause des temps de calcul excessivement élevés, ne peut être utilisée dans le cadre d'un logiciel de simulation de procédés technologiques.

- une approche macroscopique : cette méthode aboutit toujours à la résolution d'équations différentielles aux dérivées partielles. Dans les cas simples, les modèles se ramènent à une seule équation différentielle aux dérivées partielles et la solution analytique peut être connue. Dans les modèles plus compliqués, des systèmes non-linéaires d'équations différentielles aux dérivées partielles sont obtenus et une résolution numérique est requise.

Deux types de méthodes existent pour résoudre des équations différentielles aux dérivées partielles : La méthode aux différences finies [49] et celle aux éléments finis [50]. La méthode aux différences finies repose sur l'écriture sous forme de développements limités (développement en série de Taylor) des dérivées partielles. Cette méthode, que nous détaillerons dans la suite, sera bien adaptée à la résolution des équations différentielles obtenues à partir de nos modèles de diffusion.

La méthode des éléments finis est la méthode la plus utilisée pour la résolution numérique des équations différentielles aux dérivées partielles. Le fondement de cette méthode est la méthode des résidus pondérés.

Un premier avantage de la méthode des éléments finis est la facilité de prise en compte des conditions aux limites portant sur les gradients de la fonction ce qui est nettement plus malaisée par la méthode des différences finies.

Le second avantage, qui pour certains problèmes lui assure une suprématie incontestable sur la méthode aux différences finies, est la souplesse dans le choix du maillage : on peut choisir, de façon arbitraire, la position, le nombre et la répartition des nœuds dans la structure de calcul. Alors qu'un maillage à pas non uniforme pose des problèmes dans les méthodes aux différences finies, la réalisation d'éléments de dimensions variables se fait sans difficulté dans la

méthode aux éléments finis. Ceci est particulièrement appréciable pour l'étude de structures pour lesquelles on a besoin d'un maillage serré dans certaines régions et dans le cas d'une résolution multidimensionnelle.

L'inconvénient principal des méthodes aux éléments finis est la difficulté de programmation. Par rapport à celle des méthodes aux différences finies, la programmation est nettement plus longue car plus complexe. En particulier, afin de pouvoir profiter pleinement de la souplesse dans le choix du maillage que donnent les méthodes aux éléments finis, il est nécessaire de disposer d'un programme très complet et général, adaptable à des conditions diverses : un bon programme réalisant ces conditions nécessiterait plusieurs mois de travail (il y a même des thèses complètes sur ce sujet en mathématique).

En résumé, il n'est pas rentable d'écrire un programme d'éléments finis pour résoudre un problème spécifique ce qui est notre cas.

Pour toutes ces raisons, c'est la méthode des différences finies qui sera utilisée. Il faut noter également qu'il existe des méthodes des différences finies optimisées ce qui est le fruit de recherches poussées en mathématique [51,52]. Des méthodes de simulation de la diffusion en deux dimensions sont aussi réalisables [53].

Depuis une quinzaine d'année sont apparus des logiciels de simulation de fabrication de composants microoptoélectroniques. Pour la technologie silicium, il s'agit, notamment, de SUPREM III [54,55] et, pour la technologie III/V, de SUPREM 3.5 [56a,56b]. Récemment, ces deux logiciels ont été regroupés au sein de SUPREM IV [57-59].

Ces logiciels sont très performants car ils permettent, notamment, des simulations en deux voire trois dimensions [60].

Ces logiciels utilisent une résolution numérique par éléments finis en deux dimensions ce qui occasionne, notamment, des temps de calculs très élevés et une complexité mathématique importante. C'est pourquoi nous avons opté pour le développement de nos propres algorithmes de résolution basés sur les différences finies.

Rappel de la 1^{ère} méthode numérique basé sur les différences finies [61] :

Les différences finies :

Soit $u(x,y)$, une fonction de deux variables indépendantes que nous supposons suffisamment différentiable. Ecrivons son développement de Taylor en un point $(x+h,y+k)$:

$$\begin{aligned} u(x+h, y+k) = & u(x, y) + h \cdot \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \\ & + \frac{h^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{k^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + h \cdot k \cdot \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x \partial y} \\ & + \dots + \frac{1}{(n-1)!} \left(h \cdot \frac{\partial}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n-1} u(x, y) + R_n \end{aligned}$$

$$\text{avec } R_n = \frac{1}{n!} \left(h \cdot \frac{\partial}{\partial x} + k \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right)^n u(x+ih, y+jk)$$

où $0 < i < 1$ et $0 < j < 1$

ce qui s'écrit encore

$$R_n = o(|h| + |k|)^n$$

Notons :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{i,j} = u(x, y) \\ u_x = \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \\ u_{xx} = \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} \\ u_y = \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \end{array} \right.$$

une dérivée par rapport à la variable x peut se définir de trois façons différentes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h, y) - u(x-h, y)}{2 \cdot h} \\ \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h, y) - u(x, y)}{h} \\ \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x, y) - u(x-h, y)}{h} \end{array} \right.$$

Considérons maintenant les développements limités des expressions suivantes que l'on note

$$\begin{cases} u(x, y) = u_{i,j} = u_i^j \\ u(x + h, y) = u_{i+1,j} = u_{i+1}^j \\ u(x - h, y) = u_{i-1,j} = u_{i-1}^j \end{cases}$$

Nous obtenons en notant u_{xxx} la dérivée troisième et u_{xxxx} la dérivée quatrième de la fonction u par rapport à la variable x

$$\begin{cases} u_{i-1,j} = u_{i,j} - h.u_x + \frac{h^2}{2!}.u_{xx} - \frac{h^3}{3!}.u_{xxx} + \frac{h^4}{4!}.u_{xxxx} + R_5 \\ u_{i+1,j} = u_{i,j} + h.u_x + \frac{h^2}{2!}.u_{xx} + \frac{h^3}{3!}.u_{xxx} + \frac{h^4}{4!}.u_{xxxx} + R_5 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} u_x = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2.h} + o(h^2) \\ u_x = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} + o(h) \\ u_x = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} + o(h) \end{cases}$$

La dérivée u_x est approchée par des différences finies d'ordre 1 symétrique, progressive et régressive respectivement.

De même, on obtient la dérivée seconde qui s'écrit

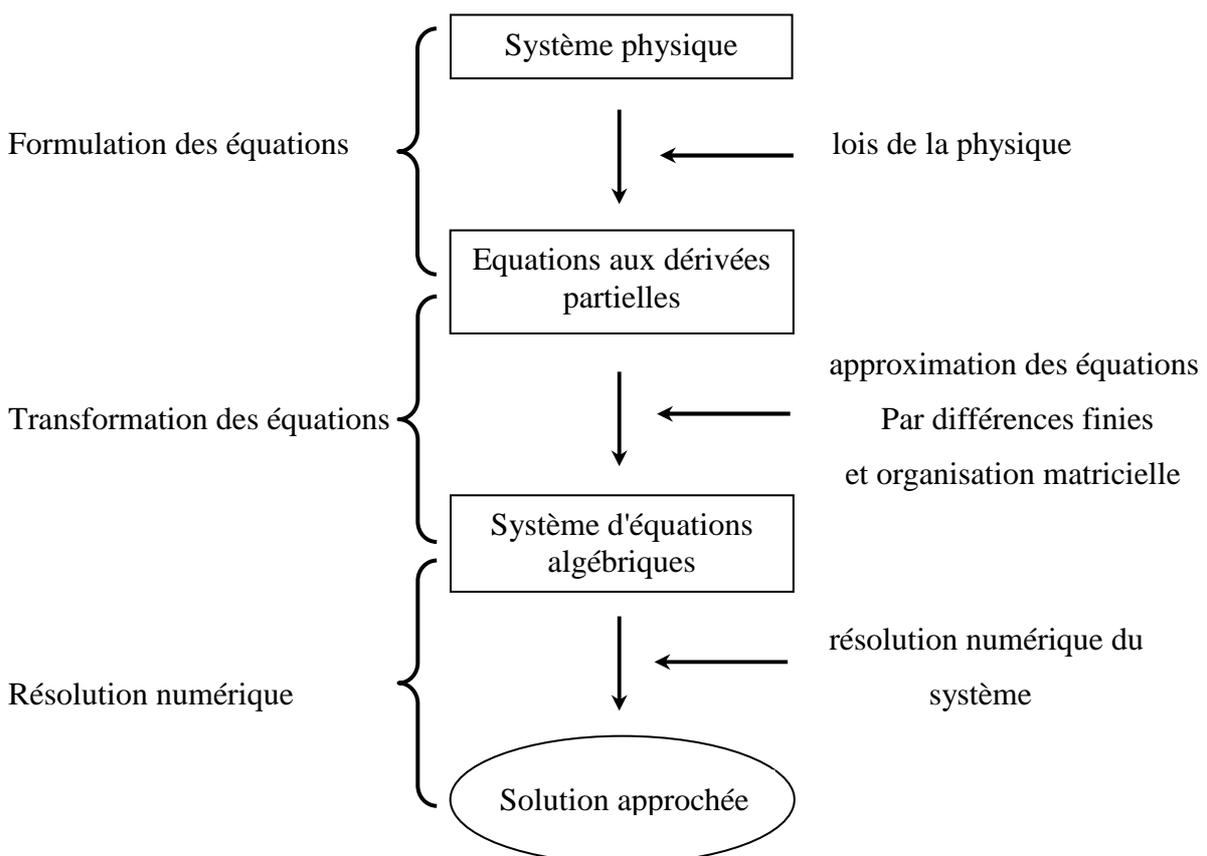
$$u_{xx} = \frac{u_{i+1,j} - 2.u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + o(h^2)$$

Les mêmes formules s'appliquent pour les dérivées par rapport à la variable y .

III. 6 MODELISATION

Le comportement d'un système physique continu est généralement représenté par un système d'équations aux dérivées partielles associé à des conditions aux limites sur le domaine considéré. Dans la plupart des cas, il n'est pas toujours possible de trouver des solutions analytiques à ces systèmes d'équations différentielles. Pour cela, il faudrait remplacer le système continu par un système discret équivalent dont le comportement est décrit par des équations algébriques qu'on peut résoudre facilement par des méthodes numériques (Méthodes directes : élimination de Gauss, Schmidt,... Méthodes indirectes ou itératives : itération de Gauss et Seidel, itération de Jacobi, ...) [62 - 64].

La méthode des différences finies (approximation par différences finies) que nous allons appliquer va nous permettre de discrétiser les équations aux dérivées partielles ; c'est -à-dire, les remplacer par des équations algébriques équivalentes :



III. 6. 1 : Modélisation de la diffusion simple

Le procédé de diffusion va être simulé à partir d'un algorithme utilisant une méthode numérique implicite des différences finies à une dimension (cas unidimensionnel) ; pour cela on est amené à discrétiser le profil de concentration de dopant (répartition de dopant) en k tranches d'épaisseur Δx et on effectue la diffusion sur de petits intervalles de temps Δt .

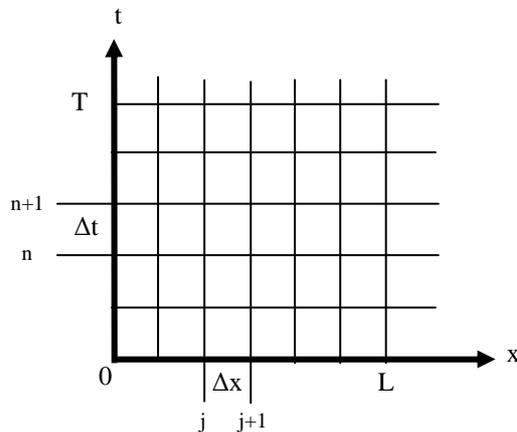


Figure III.1 : Discrétisation de l'espace et du temps

On se fixe deux nombres N_x et N_T qui vont déterminer le nombre de nœuds de calcul ; nous obtenons alors :

$$\Delta x = L/N_x \quad \text{et} \quad \Delta t = T/N_T$$

Le flux de dopants qui passe d'une tranche à une autre ; est exprimé par la première loi de Fick :

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

En discrétisant cette loi, le flux devient :

$$F(n, j) = -D(n, j) \frac{C(n, j) - C(n, j-1)}{\Delta x}$$

Il représente le flux passant de la couche $(j-1)$ à la couche (j) pendant l'intervalle de temps compris entre l'instant $(n-1)\Delta t$ et $n\Delta t$.

La deuxième loi de Fick :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t)}{\partial x} = -\frac{\partial \left[-D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]}{\partial x} = \frac{\partial \left[D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]}{\partial x}$$

"c'est une équation différentielle aux dérivés partielles non linéaire "

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

Après la discrétisation, la deuxième loi de Fick se traduit de la manière suivante :

$$\frac{C(n,j) - C(n-1,j)}{\Delta t} = -\frac{F(n,j+1) - F(n,j)}{\Delta x} = \frac{F(n,j) - F(n,j+1)}{\Delta x}$$

On remplace le flux dans la deuxième loi par l'expression du flux de la première loi pour arriver à la relation exprimant les concentrations au temps (n) en fonction des concentrations au temps (n-1)

$$\frac{C(n,j) - C(n-1,j)}{\Delta t} = \left[-D(n,j) \frac{C(n,j) - C(n,j-1)}{\Delta x} + D(n,j+1) \frac{C(n,j+1) - C(n,j)}{\Delta x} \right] / \Delta x$$

on pose $\Delta t / (\Delta x)^2 = A_0$ et $A_0 D(n,j) = A(n,j)$

d'où :

$$C(n-1,j) = -A(n,j)C(n,j-1) + [1 + A(n,j) + A(n,j+1)]C(n,j) - A(n,j+1)C(n,j+1) \quad (\text{III.32})$$

Conditions aux limites

a) En surface (Tranche superficielle)

On considère que le flux entre la couche moins un (à l'extérieur du substrat) et la 1^{ère} couche (couche zéro), est nul ($F(n, 0) = 0$), autrement dit : $C(n, 0) = C(n, -1)$.

D'où, en remplaçant dans l'équation (III.32)

$$C(n-1,0) = [1 + A(n,1)]C(n,0) - A(n,1)C(n,1) \quad (\text{III.33})$$

b)Tranche profonde :

On limite pratiquement la diffusion à une profondeur telle que le flux passant de la k^{ième} couche à la (k+1)^{ième} couche soit nul ($F(n, k+1) = 0$), c'est-à-dire ; $C(n, k) = C(n, k+1)$.

D'où, en remplaçant dans l'équation (III.32)

$$C(n-1, k) = [1 + A(n, k)]C(n, k) - A(n, k)C(n, k-1) \quad (III.34)$$

L'algorithme formé par les équations (III.32),(III.33) et (III.34) permet de déterminer ainsi de proche en proche des approximations de la solution du problème aux divers points du profil de concentrations discrétisé.

Si au temps $t = n.x$, on connaît toutes les valeurs $C(n-1, j)$, l'équation (III.32) permet de calculer les valeurs $C(n, j)$ directement ; mais cette opération nécessite la résolution d'un système d'équation linéaire. La méthode est dite implicite.

On part des trois équations (III.32), (III.33) et (III.34) et on va les écrire d'une façon matricielle (système d'équations) en reliant les concentrations au temps $(n-1)\Delta t$ à celles au temps $n\Delta t$.

$$\begin{bmatrix} C(n-1,0) \\ C(n-1,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n-1,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n-1,k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + A(n,1) & -A(n,1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -A(n,1) & 1 + A(n,1) + A(n,2) & -A(n,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A(n,j) & 1 + A(n,j) + A(n,j+1) & -A(n,j+1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A(n,k) & 1 + A(n,k) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} C(n,0) \\ C(n,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,k) \end{bmatrix}$$

Pour résoudre ce système d'équations, on utilise la méthode d'élimination de Gauss [62-64] à cause de sa simplicité et son efficacité. Elle consiste à la triangularisation de la matrice (annuler tous les éléments placés sous la diagonale principale).

Une fois le système d'équations est devenu triangulaire, il est très facile à résoudre. Pour cela nous utilisons la méthode de "BackSubstitution", ou retours en arrière.

On triangularise la matrice tridiagonale en procédant ligne par ligne, en multipliant la première ligne par $A(n,1)/[1+A(n,1)]$ que l'on ajoute à la deuxième ligne. Pour le terme général "j", on multiplie par $A(n,j)/U_{j-1}$ la " (j-1)^{ème} " ligne, que l'on rajoute à la j^{ème} ligne. Le facteur U_j est judicieusement choisi dans le but d'annuler le terme placé sous la diagonale principale (on conserve la première ligne inchangée).

Pour conserver l'égalité, on effectue la même série d'opérations sur le premier terme, c'est à dire le vecteur $C(n-1, j)$ qui devient $K(n-1,j)$, on obtient alors :

$$\begin{bmatrix} K(n-1,0) \\ K(n-1,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ K(n-1,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ K(n-1,k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_0 & -A(n,1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_1 & -A(n,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_j & -A(n,j+1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C(n,0) \\ C(n,1) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,j) \\ \cdot \\ \cdot \\ C(n,k) \end{bmatrix} \quad *$$

Avec :

$$\begin{aligned} U_0 &= 1+A(n, 1) \\ U_1 &= [1+A(n, 1)+ A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2/U_0 \\ &\dots \\ U_j &= [1+A(n, j)+ A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2/U_{j-1} \\ &\dots \\ U_k &= [1+A(n, k)] - [A(n, k)]^2/U_{k-1} \end{aligned} \quad (\text{III.35})$$

Et avec :

$$\begin{aligned} K(n-1, 0) &= C(n-1, 0) \\ K(n-1, 1) &= C(n-1, 1) + [K(n-1, 0).A(n, 1)]/U_0 \\ &\dots \\ K(n-1, j) &= C(n-1, j) + [K(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1} \\ &\dots \\ &\dots \\ K(n-1, k) &= C(n-1, k) + [K(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1} \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

L'équation générale qui traduit la deuxième expression matricielle écrite ci-dessus peut être écrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} K(n-1, j) &= U_j.C(n, j) - A(n, j+1).C(n, j+1) \\ \text{Avec } K(n-1, k) &= U_k.C(n, k) \end{aligned}$$

Il n'y a plus qu'à "remonter" la matrice. On initialise à $j = k$, puis on décrémente j par pas de 1. On obtient enfin l'expression des $C(n, j)$ que l'on utilise dans l'algorithme

$$\begin{aligned} C(n, j) &= [K(n-1, j) + A(n, j+1).C(n, j+1)]/U_j \\ C(n, k) &= K(n-1, k)/U_k \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

On pourra donc calculer les concentrations pendant le pas de temps n à partir des concentrations au pas de temps $n-1$. Mais pour cela, il faudra utiliser les diffusivités au temps $n-1$ et non au temps n , que nous ne connaissons pas encore. Ceci constitue un élément d'imprécision dans le calcul. Il s'avère négligeable en pratique[17,24,25].

D'autre part pour que le calcul soit valable, et après avoir calculé la première fois les $C(n, j)$, on recalcule les coefficients de diffusion, donc la matrice, tout en restant au point initial $n-1$, et ainsi de suite, jusqu'à satisfaire un critère de convergence de type[17,24,25].

$$\sum_{i=1}^k \left| \frac{C(n, j)^p - C(n, j)^{p-1}}{C(n, j)^{p-1}} \right| < \varepsilon \quad (\text{III.38})$$

ε est de l'ordre de 10^{-4} à 10^{-3}

telque:

$C(n, j)^p$: désigne la concentration à l'itération p

$C(n, j)^{p-1}$: désigne la concentration à l'itération $p-1$

II.6.2: Modélisation de la codiffusion

Lors de la diffusion simultanée de deux dopants, le dopant B (le bore par exemple) agit sur le dopant A (arsenic) par l'intermédiaire de l'effet du champ électrique interne et l'influence des lacunes. Comme dans notre cas les deux dopants sont de types opposés (l'un est donneur, l'autre est accepteur), le deuxième dopant va réduire la diffusivité du premier par l'effet du champ (et réciproquement).

Reprenons les équations coupées de la codiffusion (III.30) et (III.31)

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(h_{As} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - (h_{As} - 1) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.30})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(h_B \frac{\partial C_B}{\partial x} - (h_B - 1) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.31})$$

avec :

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_i} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right) \quad (\text{III.32})$$

C désignant la concentration relative soit à l'arsenic soit au bore, selon que l'on considère l'équation (III.30) ou (III.31).

$$\text{et} \quad f = \frac{C_{As} - C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad \mathbf{f = n / n_i} \quad (\text{III.33})$$

Les équations (III.30) et (III.31) peuvent être écrites sous la forme :

Pour l'arsenic :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(\left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} - \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.39})$$

de même, on a pour le bore :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(\left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} - \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{III.40})$$

Ainsi, si "m" est le nombre d'impuretés diffusantes, on obtient un système de m équations non linéaires couplées, le couplage se faisant par la valeur des concentrations, ainsi que par leur gradient.

On va s'intéresser à l'écriture des équations de Fick pour le cas, par exemple, de l'arsenic.

La première loi de Fick s'écrit :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} = -D(n, j) \frac{C(n, j) - C(n, j-1)}{\Delta x} \quad (\text{Flux d'arsenic, s'il était considéré seul})$$

$$G = -L \frac{\partial E}{\partial x} = -L(n, j) \frac{E(n, j) - E(n, j-1)}{\Delta x} \quad (\text{Flux traduisant l'influence du bore sur l'arsenic})$$

C(n, j) : Concentration d'arsenic au temps n.

D(n, j) : Diffusivité de l'arsenic considéré seul.

E(n, j) : Concentration du bore au temps n.

L(n, j) : Diffusivité traduisant l'influence du bore sur l'arsenic.

La deuxième loi de Fick s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} + L \frac{\partial E}{\partial x} \right) \quad (\text{III.41})$$

Avec :

$$D = D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

et

$$L = -D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(\frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

La discrétisation de l'équation (III.41) est similaire à celle de la diffusion simple :

$$\frac{C(n, j) - C(n-1, j)}{\Delta t} = \frac{F(n, j) - F(n, j+1)}{\Delta x} + \frac{G(n, j) - G(n, j+1)}{\Delta x}$$

On remplace les deux expressions du flux et on pose :

$$\Delta t / \Delta x^2 = A_0 \quad , \quad A_0 \cdot D(n, j) = A(n, j) \quad \text{et} \quad A_0 \cdot L(n, j) = H(n, j)$$

On obtient après mixage des équations écrites ci-dessus, l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & \mathbf{C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1)} \\ & = -\mathbf{A(n, j)C(n, j-1) + [1 + A(n, j) + A(n, j+1)]C(n, j) - A(n, j+1)C(n, j+1)} \end{aligned} \quad (\text{III.42})$$

Conditions aux limites :

+ En surface :

$$F(n, -1) = 0 \quad C(n, -1) = C(n, 0) \quad \text{et} \quad G(n, -1) = 0 \quad E1(n, -1) = E(n, 0), \text{ donc :}$$

$$C(n-1, 0) + H(n, 1)[E(n, 1) - E(n, 0)] = [1 + A(n, 1)]C(n, 0) - A(n, 1)C(n, 1) \quad (\text{III.43})$$

+ En profondeur :

$$F(n, k+1) = 0, \quad C(n, k+1) = C(n, k), \quad \text{et} \quad G(n, k+1) = 0, \quad E(n, k+1) = E(n, k), \text{ donc :}$$

$$C(n-1, k) + H(n, k)[E(n, k-1) - E(n, k)] = [1 + A(n, k)]C(n, k) - A(n, k)C(n, k-1) \quad \text{III.44}$$

On peut remarquer que l'équation (III.42) ressemble à l'équation (III.32) de la diffusion simple : le deuxième terme de l'égalité est le même et il a rajouté au premier terme, l'expression qui traduit l'influence du bore sur l'arsenic.

On peut réécrire l'équation (III.42), en remplaçant son premier terme par $C'(n-1, j)$ d'où :

$$C'(n-1, j) = -A(n, j)C(n, j-1) + [1 + A(n, j) + A(n, j+1)]C(n, j) - A(n, j+1)C(n, j+1) \quad \text{III.45}$$

Avec :

$$C'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + L(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) \quad \text{III.46}$$

Nous n'allons donc pas refaire la totalité du calcul effectué dans la partie diffusion, mais simplement réécrire les équations : (III.35), (III.36) et (III.37) en remplaçant les $C(n, j)$ par $C'(n, j)$.

Le calcul de U reste inchangé. On exprime les U_j en fonction des $D(n, j)$ en sachant que :

$$A_0.D(n, j) = A(n, j)$$

$$\begin{aligned} U_0 &= 1 + A(n, 1) \\ U_1 &= [1 + A(n, 1) + A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2 / U_0 \\ &\vdots \\ U_j &= [1 + A(n, j) + A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2 / U_{j-1} \\ &\vdots \\ U_k &= [1 + A(n, k)] - [A(n, k)]^2 / U_{k-1} \end{aligned} \quad \text{III.35'}$$

Les équations de la diffusion simple (III.36) deviennent dans le cas de la codiffusion :

$$\begin{aligned} K'(n-1, 0) &= C'(n-1, 0) \\ K'(n-1, 1) &= C'(n-1, 1) + [K'(n-1, 0).A(n, 1)] / U_0 \\ &\dots \\ K'(n-1, j) &= C'(n-1, j) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)] / U_{j-1} \\ &\dots \\ &\dots \\ K'(n-1, k) &= C'(n-1, k) + [K'(n-1, k-1).A(n, k)] / U_{k-1} \end{aligned}$$

On remplace les $C'(n, j)$ par l'expression écrite plus haut (III.46), on obtient :

$$K'(n-1, 0) = C(n-1, 0) + H(n, 0)E(n, -1) - [H(n, 0) + H(n, 1)]E(n, 0) + H(n, 1)E(n, 1)$$

...

$$K'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1}$$

...

$$K'(n-1, k) = C(n-1, k) + H(n, k)E(n, k-1) - [H(n, k) + H(n, k+1)]E(n, k) + H(n, k+1)E(n, k+1) + [K'(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1}$$

Les conditions aux limites données dans le cas de la diffusion simple ont leurs équivalents dans le cas de la codiffusion

$$+ \text{ En surface : } \quad C(n, -1) = C(n, 0) \quad \text{et} \quad E(n, -1) = E(n, 0)$$

$$+ \text{ En profondeur : } \quad C(n, k+1) = C(n, k) \quad \text{et} \quad E(n, k+1) = E(n, k)$$

On remplace ces conditions dans le dernier système d'équations, on obtient :

$$K'(n-1, 0) = C(n-1, 0) + H(n, 1)[E(n, 1) - E(n, 0)]$$

...

$$K'(n-1, j) = C(n-1, j) + H(n, j)E(n, j-1) - [H(n, j) + H(n, j+1)]E(n, j) + H(n, j+1)E(n, j+1) + [K'(n-1, j-1).A(n, j)]/U_{j-1} \quad (\text{III.36'})$$

...

$$K'(n-1, k) = C(n-1, k) + H(n, k)[E(n, k-1) - E(n, k)] + [K'(n-1, k-1).A(n, k)]/U_{k-1}$$

Et les équations (III.37) dans le cas de la simple diffusion deviennent en codiffusion :

$$C(n, j) = [K'(n-1, j) + A(n, j+1).C(n, j+1)]/U_j \quad (\text{III.37'})$$

$$C(n, k) = K'(n-1, k)/U_k$$

Ainsi, les équations (III.35'), (III.36') et (III.37') vont nous permettre de calculer les nouvelles concentrations d'arsenic à partir des concentrations initiales d'arsenic et du bore.

On peut réécrire un système d'équations : (III.35"), (III.36") et (III.37"), qui nous permet de calculer les concentrations du bore d'une façon similaire. Il suffit de remplacer dans le système d'équations précédent toutes les concentrations C par E, tous les E par C, tous les D par B (diffusivité du bore seul) et enfin les H par M (diffusivité traduisant l'influence de l'arsenic sur le bore).

On pose :

$$A_0 \cdot B(n, j) = A(n, j)$$

Donc :

$$\begin{aligned} U_0 &= 1 + A(n, 1) \\ U_1 &= [1 + A(n, 1) + A(n, 2)] - [A(n, 1)]^2 / U_0 \\ &\dots \\ U_j &= [1 + A(n, j) + A(n, j+1)] - [A(n, j)]^2 / U_{j-1} \\ &\dots \\ U_k &= [1 + A(n, k)] - [A(n, k)]^2 / U_{k-1} \end{aligned} \quad \text{III.35"}$$

et

$$\begin{aligned} K''(n-1, 0) &= E(n-1, 0) + M(n, 1)[C(n, 1) - C(n, 0)] \\ &\dots \\ K''(n-1, j) &= E(n-1, j) + M(n, j)C(n, j-1) - [M(n, j) + M(n, j+1)]C(n, j) + \\ &\quad M(n, j+1)C(n, j+1) + [K''(n-1, j-1) \cdot A(n, j)] / U_{j-1} \\ &\dots \\ K''(n-1, k) &= E(n-1, k) + M(n, k)[C(n, k-1) - C(n, k)] + [K''(n-1, k-1) \cdot A(n, k)] / U_{k-1} \end{aligned} \quad \text{(III.36"}$$

On obtient enfin :

$$\begin{aligned} E(n, j) &= [K''(n-1, j) + A(n, j+1) \cdot E(n, j+1)] / U_j \\ E(n, k) &= K''(n-1, k) / U_k \end{aligned} \quad \text{(III.37"}$$

Avec :

$$B = D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

$$M = -D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(\frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

:

$$f = \frac{(C_{As} - C_B)}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1}$$

La structure de l'algorithme est donc la suivante : à chaque pas sur le temps, on résout (III.37'), c'est à dire la diffusion de l'arsenic, le profil de bore restant inchangé. Puis on calcule (III.37''), cette fois-ci le bore variant, l'arsenic restant fixe. Autrement dit, qu'on va considérer la diffusion d'un dopant en supposant l'autre fixe, et vice versa, à chaque pas sur le temps.

Si alors le critère de convergence (III.38) sur les deux dopants est vérifié, on passe au nouveau pas sur le temps. Sinon on revient à l'équation (III.37'). On a aussi, lors d'essais, fait converger l'arsenic puis ensuite le bore, ou l'inverse, à chaque pas de temps.

L'algorithme de la codiffusion de l'arsenic et du bore est détaillé dans l'annexe.

III.7 :ALGORITHME ET STRUCTURE DU PROGRAMME

III.7.1 :Détermination du pas de temps dt :

dt est déterminé du cycle thermique. On considère la durée comprise entre le moment où la température est à 600°C (partie ascendante de la courbe) et le moment où la température est à nouveau à 600°C (partie descendente de la courbe). Cette durée est alors divisée par 900.

$$dt = (t_{600\downarrow} - t_{600\uparrow}) / 900$$

On considère donc 900 pas de temps.

III.7.2:Determination du pas d'espace dx :

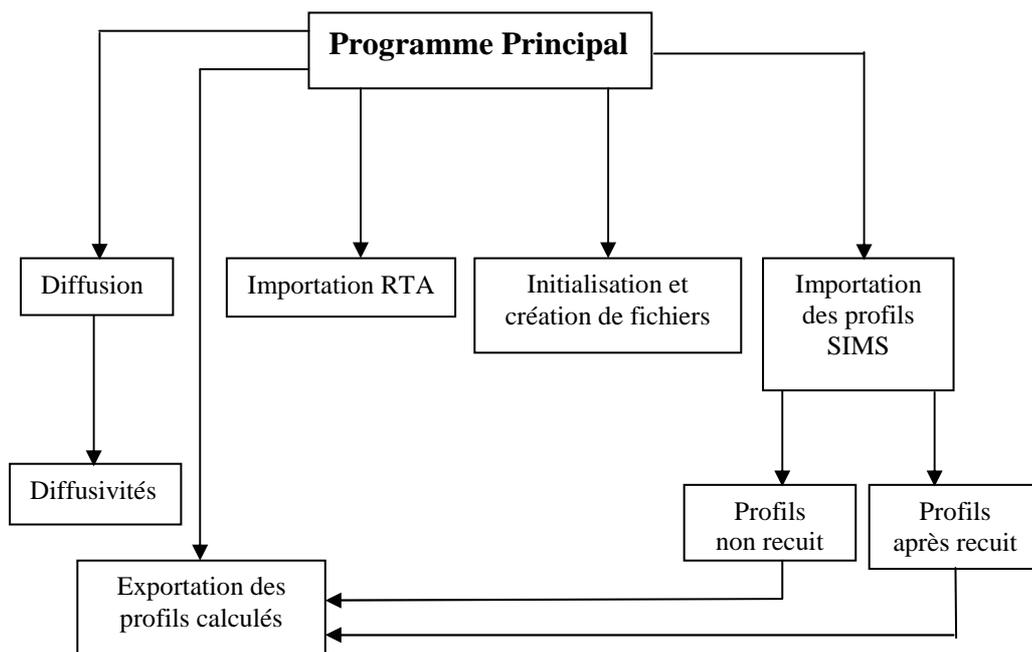
dx est déterminée du profil initial". On considère la profondeur à partir de laquelle les concentrations de dopant sont négligeables (inférieure à 10^{17} ats/cm³), et on prend :

$$dx = \text{prof}(C > 10^{17}) / 100.$$

On considère initialement 100 pas d'espace, mais ce nombre de pas pourra évoluer avec le temps. En effet au bout d'un certain temps de calcul, la concentration au centième pas d'espace (en profondeur) n'est plus négligeable. On introduit alors dans l'algorithme une condition qui augmente le nombre de pas d'espace sur lequel on travaille si la concentration en "bout du profil" atteint 10^{17} (cette augmentation progressive du nombre du pas d'espace permet de minimiser le temps de calcul).

III.7.3 :Structure (organisation) générale du simulateur (programme) :

Le simulateur est écrit en langage PASCAL et se présente sous forme de plusieurs procédures (sous programmes) ce qui permet d'optimiser la résolution numérique. Il est segmenté en un programme principal qui appelle des procédures, elles-même susceptible d'appeler des sous procédures ou de s'appeler entre elles.



III.7.3.1: Procédure diffusion

Elle constitue le cœur du programme, c'est là que le calcul des concentrations du profil de diffusion est fait.

III.7.3.2: Procédure diffusivités :

Elle calcule les diffusivités à chaque pas de temps.

III.7.3.3: Procédure importation des profils SIMS :

Elle sert à importer les profils SIMS (les valeurs des concentrations en fonction de la profondeur avant recuit) de façon à les traiter au moyen de la procédure de diffusion.

Elle fait appel à "import initial" pour les profils avant recuit et à "import final" pour les profils après recuit.

III.7.3.4: Procédure importation RTA :

Elle sert à importer les profils des cycles thermiques de façon à les traiter au moyen de la procédure de diffusivités.

III.7.3.5: Procédure d'exportation des résultats :

Elle sert à exporter les résultats calculés après recuit de façon à visualiser les profils de concentrations et de les comparer aux profils réels.

Le logiciel utilisé pour le traçage et la visualisation des profils est "ORIGIN."

L'importation et l'exportation des données ont été faites entre le logiciel "origin" et le langage de programmation "pascal".

Les différentes variables du simulateur :

La variable choisi pour stocker les données relatives aux concentrations est une variable de type fichier. Elle est constituée d'enregistrements, chaque enregistrement contient quatre profils de concentration sous la forme de tableaux de 200 réels, ainsi que la valeur de la dose implantée, de l'énergie d'implantation et de quelques autres données à caractère purement informatique.

Les enregistrements sont numérotés dans l'ordre de création, le premier ayant le numéro zéro.

La variable choisi, pour stocker les données relatives aux températures est aussi une variable de type fichier. Chaque enregistrement contient un profil de cycle thermique sous la forme de tableau de 900 réels, ainsi que la température et la durée de recuit et le pas de temps.

Les fichiers choisis pour l'importation et l'exportation des données, entrées (SIMS) et sorties (calculées) sont des variables de type TXT (fichiers texte).

Un exemple d'exécution du simulateur :

Le nom du fichier exécutable est : MONODIF-B

Pour lancer l'exécutable, il suffit de taper le nom du fichier puis valider avec entrez.

L'exécution du simulateur commence par l'affichage du titre de la diffusion choisi :

SIMULATION DE LA DIFFUSION DU BORE

Ensuite un menu contenant des choix est proposé. Il suffit de taper le numéro de l'opération désirée et de valider avec entrez (OK).

Désirez-vous :

- 1- Modéliser la diffusion à partir du profil initial réel ? taper 1*
- 2- Importer les concentrations d'un profil SIMS ? taper 2*
- 3- Importer les températures d'un cycle thermique ? taper 3*
- 4- Créer ou ouvrir un fichier en écriture ? taper 4*
- 5- Sortir du programme ? taper 5*

Dans notre cas les opérations 2, 3 et 4 sont déjà faites. Donc on passe au premier choix. Pour cela on tape 1 puis en valide, la modélisation de la diffusion commence.

Les données des profils SIMS sont stockées dans des fichiers qu'on va travailler avec.

Donnez le nom du fichier contenant les concentrations initiales et finales réelles

On écrit le nom du fichier contenant les concentrations puis on valide.

Dans notre simulateur il y a deux possibilités permettant de trouver l'emplacement (le chemin) du fichier.

2- Le chemin du fichier est prédéfini, donc on n'aura pas besoin de le taper. dans notre cas c'est d:\bp\bin\diffus1\imexport\dif-bore\

Il faut que le fichier contenant les concentrations soit dans le répertoire et le chemin mentionné. Si le chemin n'existe pas il faut le créer et stocké le fichier des concentrations dans le répertoire dif-bore.

2- le chemin du fichier n'est pas défini, dans ce cas vous avez la possibilité de stocker votre fichier contenant les concentrations ou vous voulez, mais, au lieu de donner uniquement le nom du fichier, vous devez taper tout le chemin y compris le nom du fichier

Par mesure de simplification on a opté pour la première possibilité.

N.B: le fichier des concentrations contient les concentrations du profil initial réel (avant recuit) et aussi celles du profil final réel (après recuit).

Nous avons opté pour cette méthode pour avoir après la modélisation un fichier contenant les concentrations initiales réelles, finales réelles et finales théoriques (calculées) ce qui nous permet de tracer leurs profils dans un même repère afin de les comparer.

On choisit par exemple le nom BORE1 pour le fichier des concentrations. Tapez le nom puis validez.

*Il y a N double implantations ioniques, choisissez celle qui vous convient :
de 1..N
N =*

Le fichier BORE1 contient N enregistrements, où chacun contient des données pour une implantation bien déterminée, tel que : les concentrations initiales et finales réelles, la dose d'implantation, l'énergie d'implantation, ...etc.

Tapez par exemple 1 puis validez.

*Sachant que l'implantation choisie a pour caractéristiques :
Dose d'implantation = $2 \cdot 10^{15}$ a/cm²
Energie d'implantation = 30 keV
Température de recuit = 1000°C
Durée de recuit = 20 s*

Confirmation du choix

L'étape suivante est le choix du cycle thermique :

Donner le nom du fichier contenant les températures

Les mêmes options de choix du chemin du fichier contenant les concentrations sont utilisées pour les cycles thermiques.

On tape par exemple le nom CYCLE1 puis on valide

*Il y a N cycles thermiques, choisissez celui qui vous convient de 1..N
N=*

Tapez par exemple 1 puis validez.

*Sachant que le cycle thermique choisi a pour caractéristiques :
Température de recuit = 1000°C
Durée de recuit = 20 s*

Confirmation du choix

Remarque: pour chaque implantation choisie correspond un cycle thermique précis. C'est-à-dire que si l'implantation n°1 avait subi un recuit à 1000°C pendant 20s, on doit choisir le cycle thermique correspondant à une température de recuit de 1000°C pendant 20s.

Début de la modélisation

*L'équation du coefficient de diffusion est de la forme
 $D = D_B \exp(-E_B/KT) * ((1+\beta f/1+\beta)) * h$*

*La valeur de la diffusivité du bore est $D_B = 0.5554 \text{ cm}^2/\text{s}$
et la valeur de l'énergie d'activation est $E_B = 3.426 \text{ eV}$
et la valeur de Beta B est $\beta = 19$*

*voulez vous modifier D_B ? si oui tapez 1 si non tapez 2
voulez vous modifier E_B ? si oui tapez 1 si non tapez 2
voulez vous modifier Beta B ? si oui tapez 1 si non tapez 2*

évolution du profil de la diffusion

exportation des résultats

Donner le nom du fichier recevant les résultats (concentrations) finaux

Donner le nom du fichier recevant les résultats (diffusivités) finaux

Taper un nom au **choix** pour le fichier recevant les résultats puis valider.

Les mêmes options de choix du chemin du fichier contenant les concentrations initiales et/ou celles des cycles thermiques sont utilisées pour le fichier recevant les résultats simulés.

Fin de la modélisation

Maintenant, il vous reste d'importer le fichier résultat de la modélisation (c'est un fichier de type txt) par le logiciel "ORIGIN" ou un autre logiciel trace graphes et de tracer les courbes.

CHAPITRE IV

SIMULATIONS ET RESULTATS

IV : SIMULATION ET RESULTATS

IV.1 : Introduction

Un simulateur de procédés de fabrication de composants à semi-conducteurs permet d'étudier la faisabilité d'une technologie et de l'optimiser en ajustant, par exemple, des paramètres tels que la dose et l'énergie d'implantation des dopants, les coefficients de diffusion, les températures et durées de recuit. On peut ainsi réduire le coût expérimental.

IV.2 : Simulation des profils

On a simulé via, le simulateur réalisé, les profils de diffusion simple et de codiffusion de l'arsenic et du bore, après un RTA, en utilisant les paramètres par défaut du simulateur. Il nous est donc facile de comparer ces profils calculés, aux profils SIMS expérimentaux. Nous avons remarqué une nette différence entre les profils SIMS et ceux calculés (FiguresVI.1.a, b, c, d) (FiguresIV.2.a, b, c, d) (FigureIV.3.a, b, c, d, e, f, g). Ceci nous a amenés à ajuster de nouveau les profils, en jouant sur le paramètre prépondérant, en l'occurrence dans notre cas, **le coefficient de diffusion** des dopants arsenic et bore dans le monosilicium.

Les paramètres par défaut couramment utilisés pour le bore [17, 38, 42, 43], pour un Recuit Thermique Classique (RTC) dans du monosilicium sont (modèle de Fair et Tsai) :

$$D_{oB} = 0.5554 \text{ cm/s}$$

$$E_{oB} = 3.42 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

Pour l'arsenic ils deviennent [17, 38, 42, 43] :

$$D_{oAs} = 22.83 \text{ cm/s}$$

$$E_{oAs} = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100.$$

D_0 et E_0 sont respectivement le facteur de diffusivité et l'énergie d'activation.

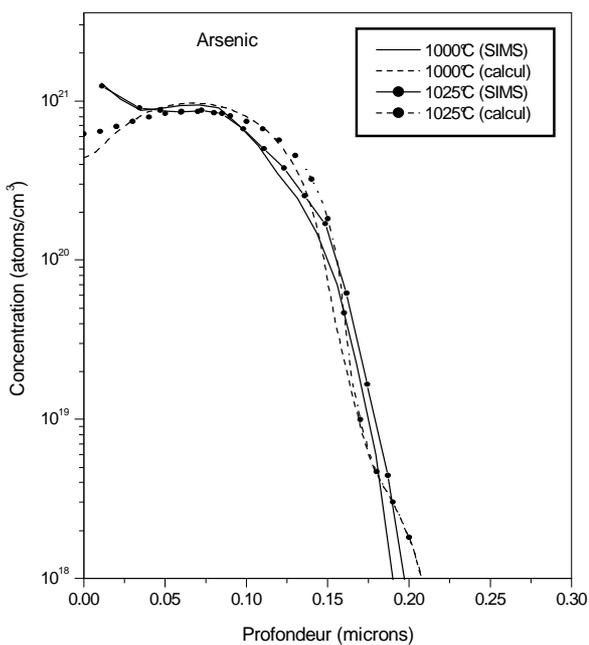


Figure IV.1.a

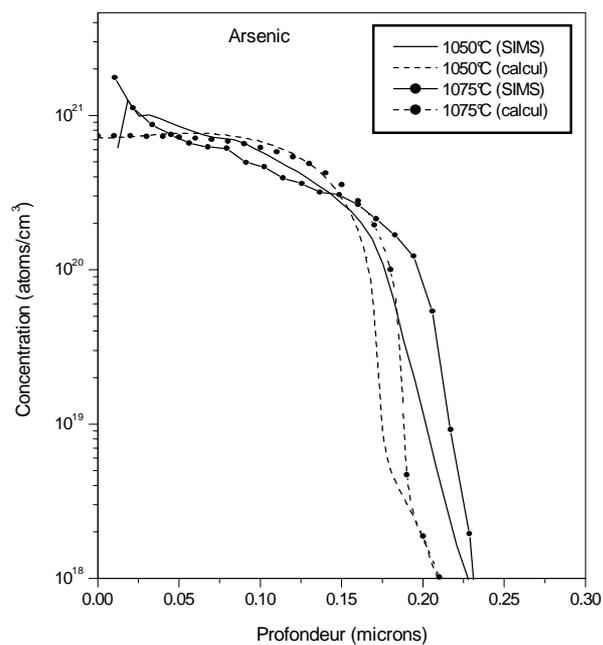


Figure IV.1.b

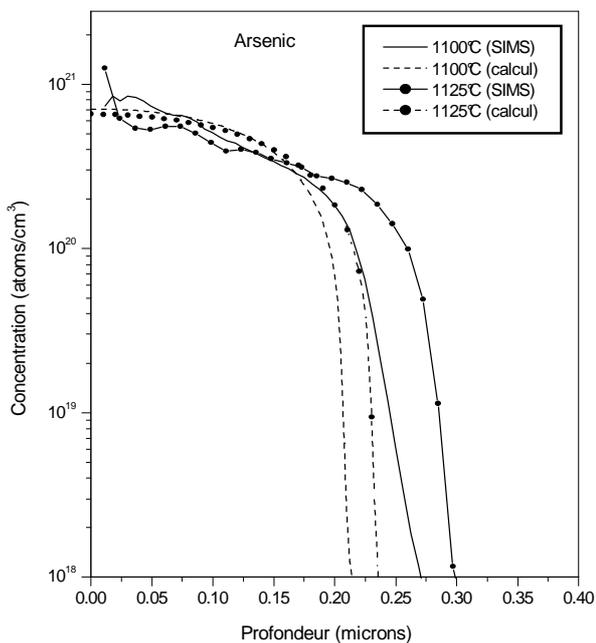


Figure IV.1.c

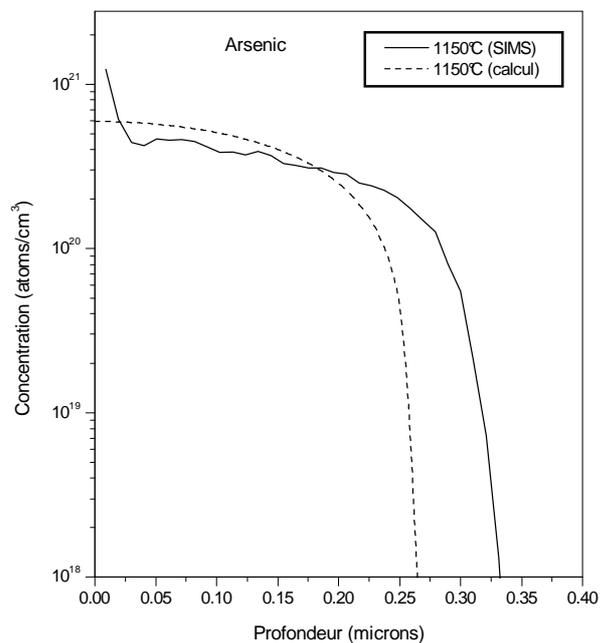


Figure IV.1.d

Figures IV.1.a, b, c, d : Comparaison des profils de diffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic recuit à 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de 20 secondes

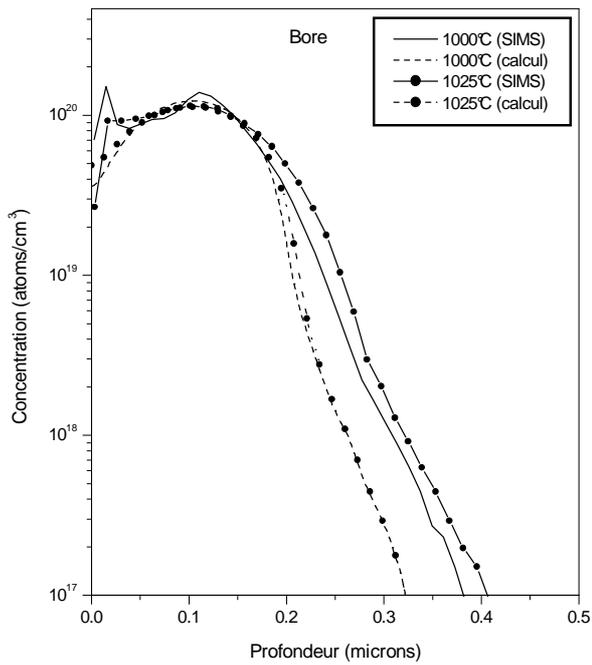


Figure IV.2.a

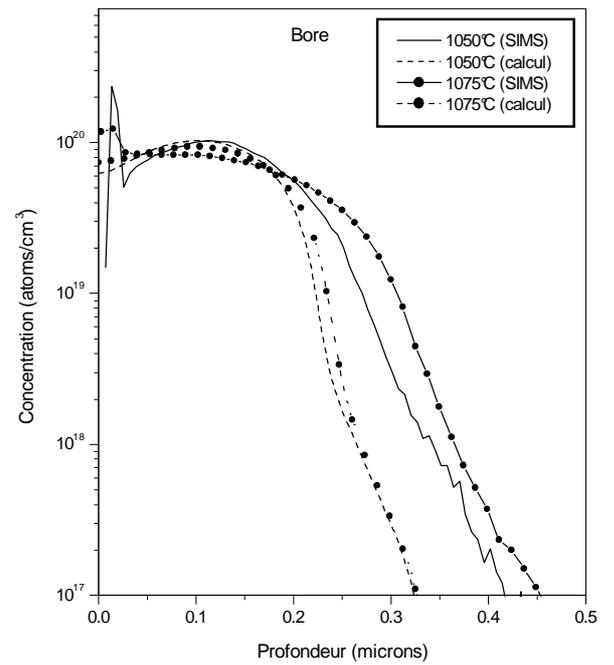


Figure IV.2.b

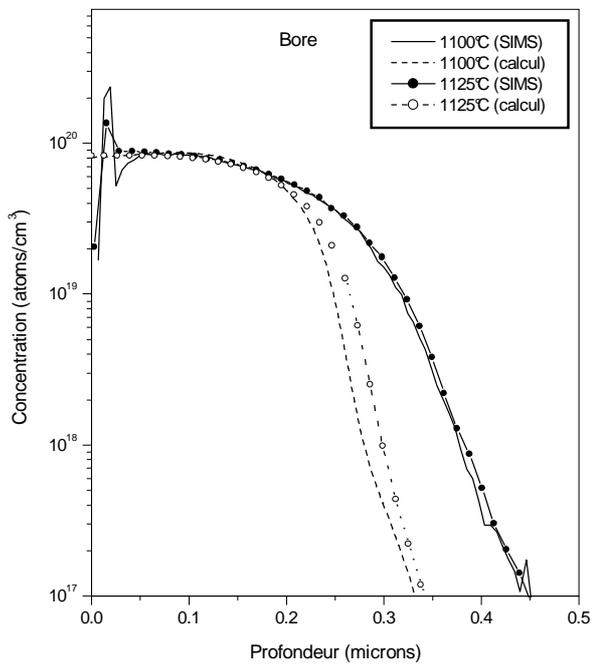


Figure IV.2.c

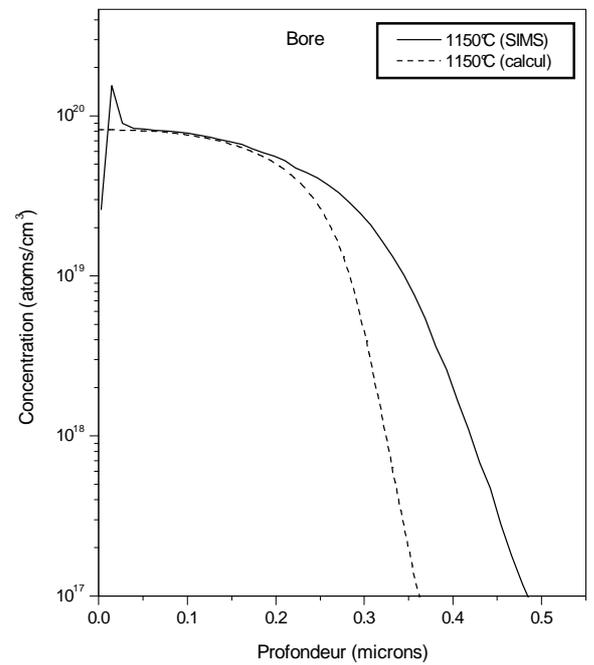


Figure IV.2.d

Figures IV.2.a, b, c, d : Comparaison des profils de diffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) du Bore recuit à 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de 20 secondes

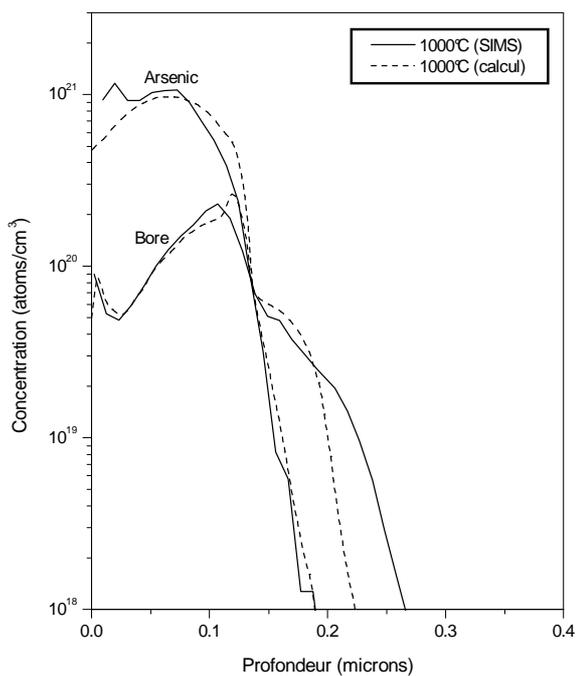


Figure IV.3.a

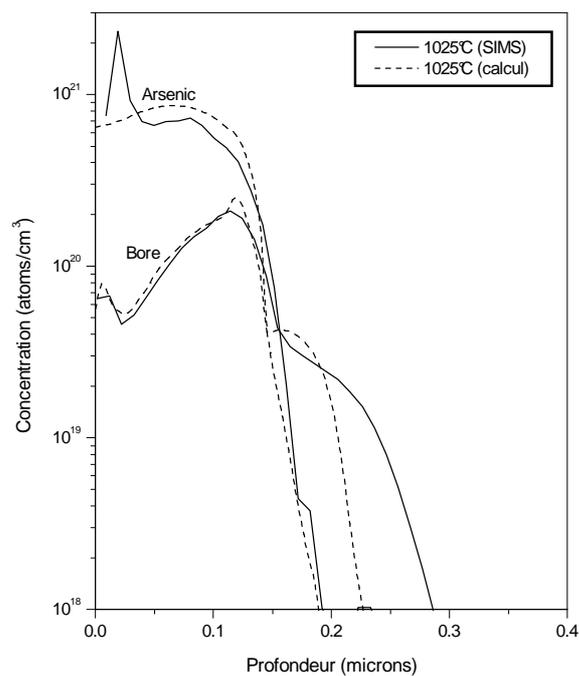


Figure IV.3.b

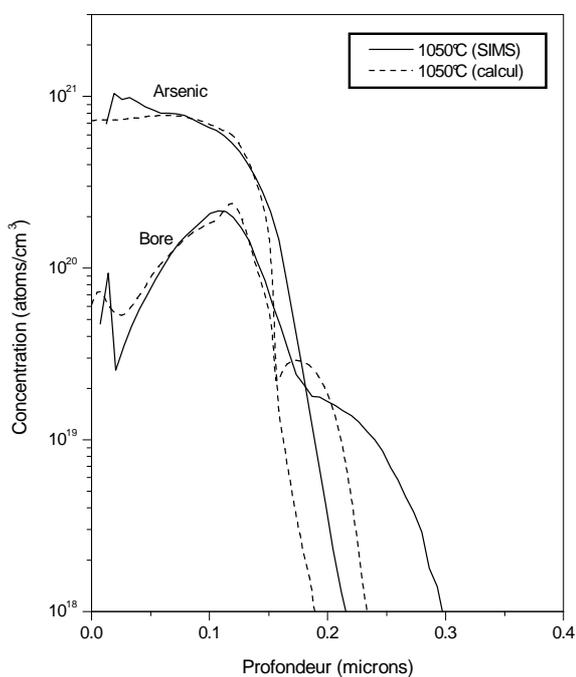


Figure IV.3.c

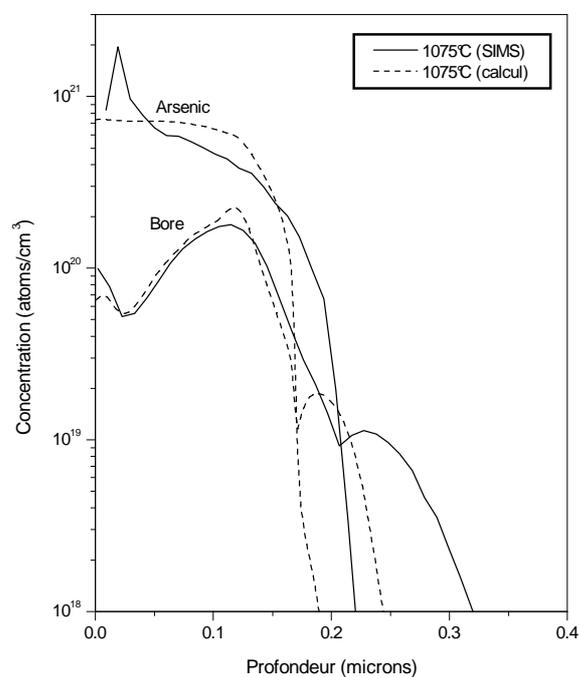


Figure IV.3.d

Figure IV.3.a, b, c, d : Comparaison des profils de codiffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic et du Bore à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

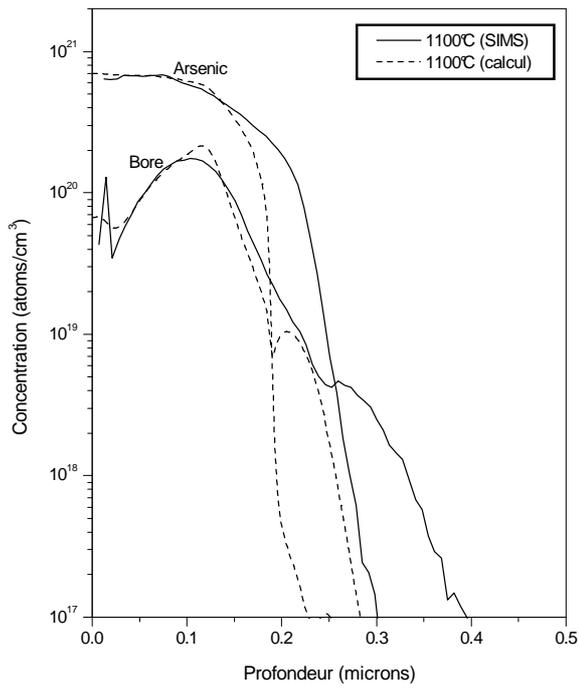


Figure IV.3.e

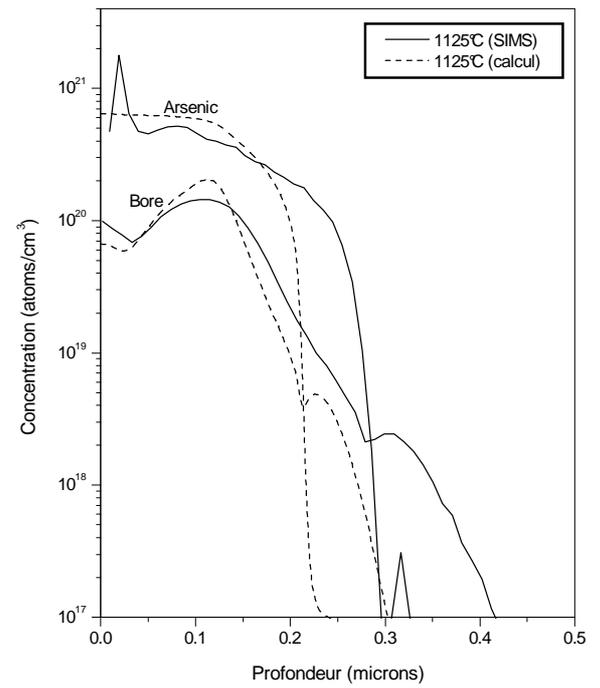


Figure IV.3.f

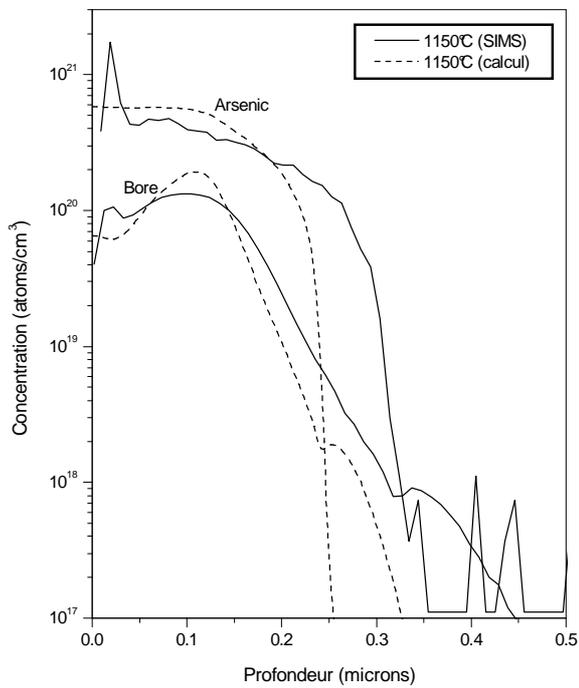


Figure IV.3.g

Figure IV.3.e, f, g : Comparaison des profils de codiffusion SIMS et calculés (paramètres par défaut) de l'Arsenic et du Bore à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

IV.3 : Simulation des profils d'Arsenic

Les meilleurs paramètres obtenus pour ajuster les profils expérimentaux (SIMS) et calculés sont :

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D ₀ (cm ² /s)	25	30	35	35	40	50	50

Nos valeurs conduisent à une diffusion plus importante que dans le cas d'écrit par Fair et Tsai [17,38,42,43]. En effet, même si ces derniers font des recuits à des températures allant jusqu'à 1200°C, ils ne se placent pas du tout dans le cadre du recuit thermique rapide, mais dans celui des recuits conventionnels (durée de l'ordre de 30 minutes). Or la durée de vie moyenne des défauts induits par l'implantation est typiquement de l'ordre de quelques secondes [25]. En conséquence, ces défauts ont peu d'influence sur la diffusivité dans les expériences de Fair et Tsai. Par contre, durant les RTA, ces défauts jouent un rôle primordial et accélèrent la diffusion. Il est donc logique que nous obtenions des valeurs de D supérieures à celles de Fair et Tsai.

On peut constater que l'accord est globalement bon entre la théorie et l'expérience (Fig. IV.4.a, b, c, d, e, f, g). Cependant on note une différence de pente en surface notable surtout à 1000, 1025, 1050 et 1075°C, et en queue de distribution, cette fois-ci plus nette à 1100 °C.

En surface, la forte concentration, de l'ordre de 10^{21} at/cm³, peut entraîner la formation d'agglomérats qui peuvent ralentir la diffusion. Qui plus est, dans ce cas-là, l'activité électrique ne serait pas totale, ce qui peut être dommageable pour le gain en courant des transistors [24]. La diffusion limitée de l'arsenic, induisant des profils de forme rectangulaire, peut être expliqué par le faible coefficient de diffusion intrinsèque de ce dopant ne permettant pas d'obtenir des taux de sursaturation de lacunes suffisants pour créer une accélération significative de la queue de courbe [26]. Néanmoins nous avons été amenés à porter D₀ à une valeur plus grande que pour les recuits classiques qui peuvent durer plusieurs dizaines de minutes, voire plusieurs heures ; l'arsenic, à une telle dose, a amorphisé le silicium sur une certaine épaisseur en surface. Lors du recuit cette zone se recristallise rapidement, en quelques millisecondes [65], et l'interface silicium amorphe-silicium monocristallin injecte des défauts en profondeur qui

peuvent être la cause de cette diffusion légèrement accélérée, puis elle devient lente en queue de distribution.

Finalement nous portons sur les mêmes figures (IV.4.a, b, c, d, e, f, g) et figure (IV.6.a) le coefficient de diffusion du modèle utilisé, ceci pour les différentes températures de recuit.

Il y est représenté la diffusivité en régime stationnaire, c'est-à-dire à la fin des recuits, en pratique à 600°C. Ce coefficient suit de façon linéaire la concentration.

Les coefficients de diffusion trouvés suivent le modèle donné par la relation III.27 :

$$D_{As} = D_{0,As} \exp(-E_{0,As}/kT) \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2 + 4n_i^2}} \right)$$

On remarque que le coefficient de diffusion diminue avec la profondeur pour toutes les températures de recuit considérées dans notre travail (figure IV.6.a). De même, D_0 augmente lorsque la température augmente. Ceci montre que la diffusion est rapide au-delà de la surface et elle devient lente en profondeur (à la queue de distribution) ce qui est confirmé par les profils expérimentaux.

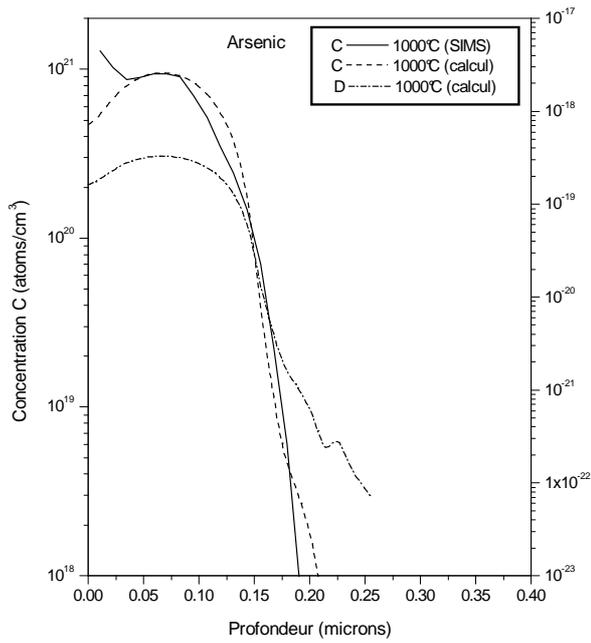


Figure IV.4.a

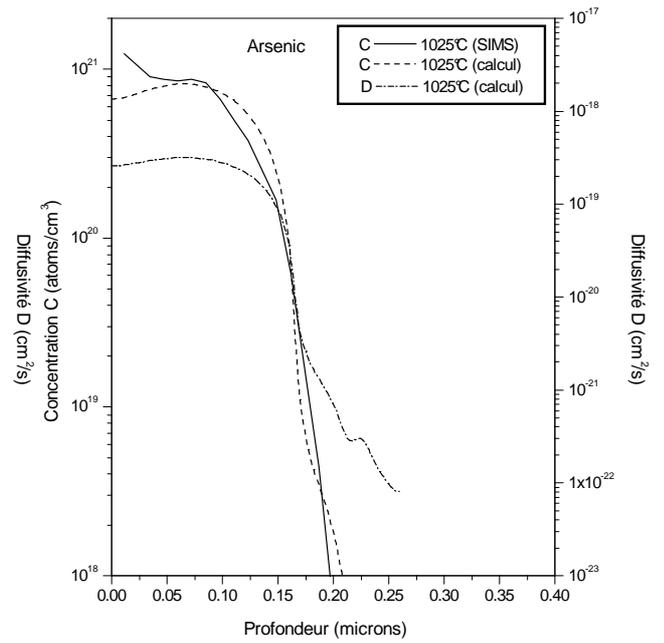


Figure IV.4.b

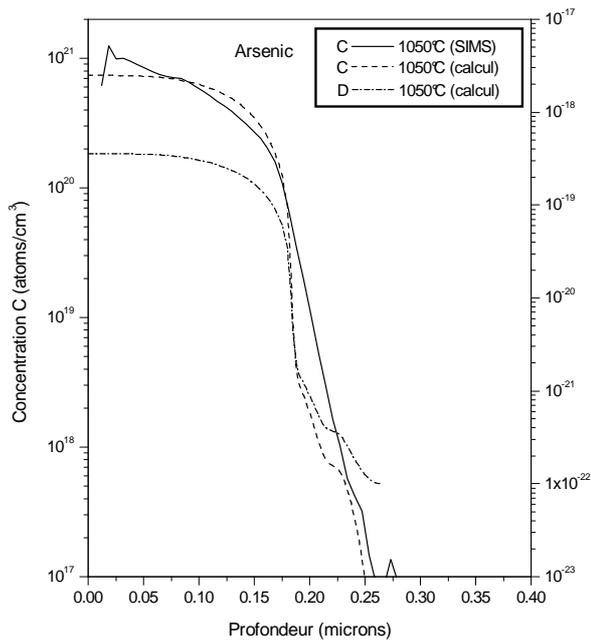


Figure IV.4.c

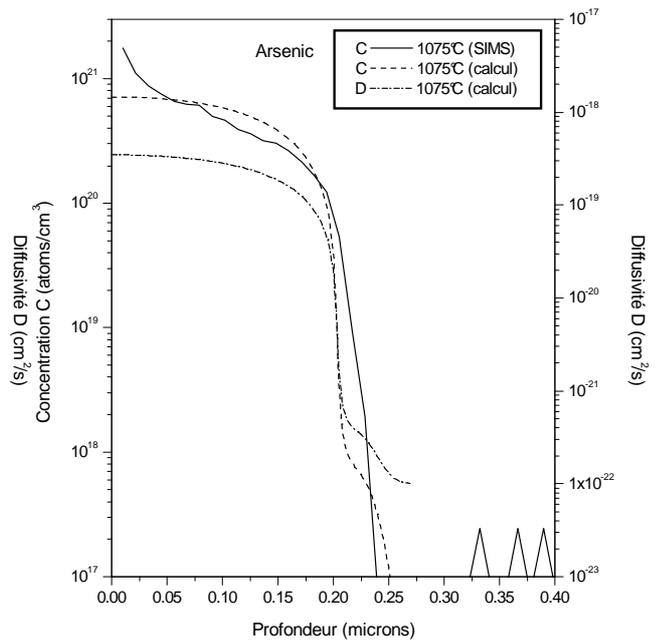


Figure IV.4.d

Figure IV.4.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

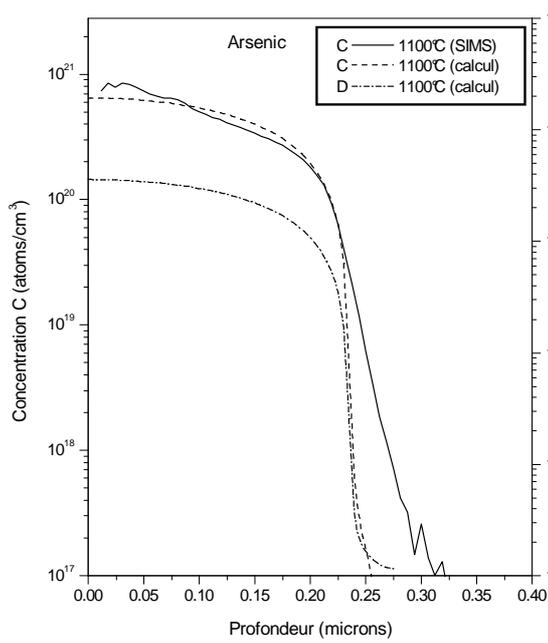


Figure IV.4.e

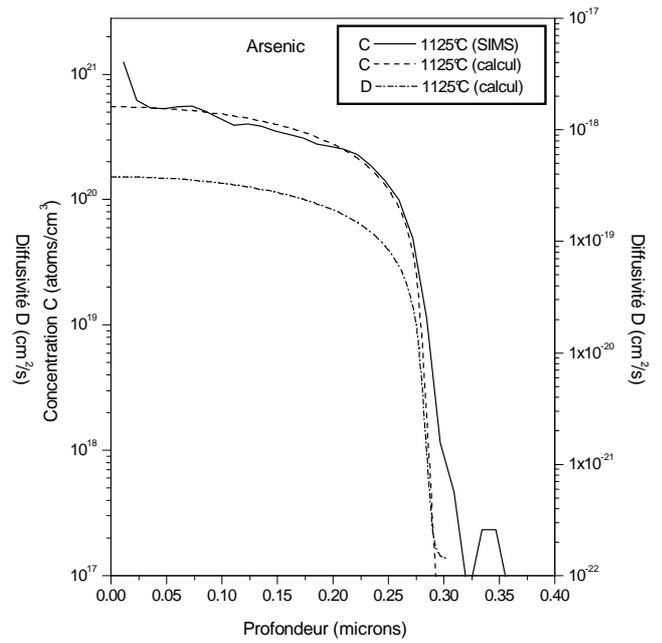


Figure IV.4.f

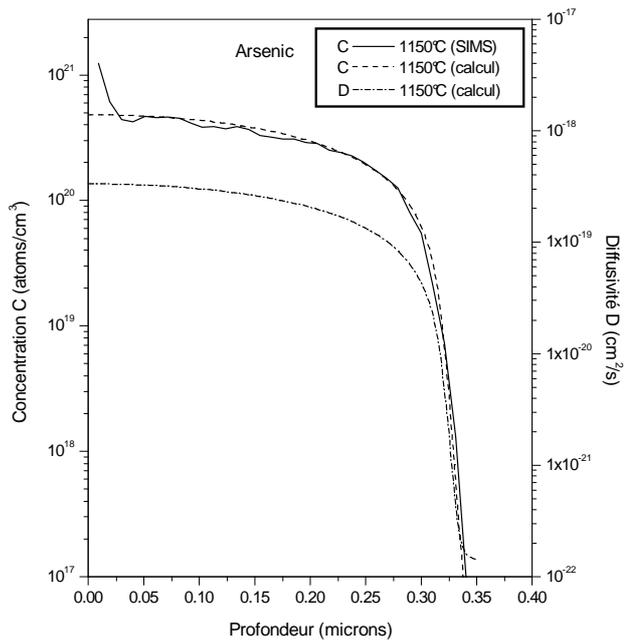


Figure IV.4.g

Figure IV.4.e, f, g : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

IV.4 : Simulation des profils de Bore

Nous avons obtenu pour le bore les paramètres suivants :

$$E_0 = 3,426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D ₀ (cm ² /s)	1.2	1.4	1.4	1.5	1.5	1.6	1.6

Là encore, on obtient un facteur de diffusion supérieur à celui de Fair et Tsai.

Nous avons en fait surtout modifié le facteur D₀, les diffusivités étant très sensibles aux énergies d'activation, celles-ci devant donc être considérées avec prudence.

Les figures IV.5.a, b, c, d (1000, 1025, 1050, 1075 °C), montre cependant un écart entre théorie et expérience au niveau de la surface et surtout en queue de distribution.

En réalité, le bore diffuse de façon un peu particulière en profondeur, ce phénomène est remarquable surtout à 1000, 1025, 1050 et 1075°C. Il semblerait donc que le coefficient β est légèrement surévalué à ces températures [25].

La diffusion du bore présente un comportement anormal lors de recuits rapides comparés aux recuits classiques ; Fair [66] a observé une diffusion accélérée du bore dans les deux régions hors de la zone $\{R_p - 0.4.\Delta R_p \text{ et } R_p + 1.5.\Delta R_p\}$ (Figure a) correspondant à une région de dislocations, pour des températures comprises entre 1000 et 1100 °C et des durées de plateaux de recuit variant de 10 à 30 secondes, il explique ce phénomène par l'occupation des atomes de bore en position interstitielle dans le silicium et qui sont très mobiles à basse température jusqu'à ce qu'ils soient capturés par les lacunes pour devenir substitutionnels. En outre les défauts ponctuels induits par l'implantation augmentent la diffusion en général, mais non au pic du profil où la durée de vie de tels défauts est très courte [67]. Cependant, durant un recuit de 10 à 30 secondes, une proportion significative de ces défauts diffuse en dehors vers le cristal non disloqué. Ces défauts ponctuels contribuent à l'augmentation de la diffusion à l'extérieur de cette région et sont responsables de cette diffusion anormale. Si le bore semble être figé au sommet du profil, il est par contre très mobile dans la queue de la distribution, caractérisant ainsi une anomalie de la diffusion.

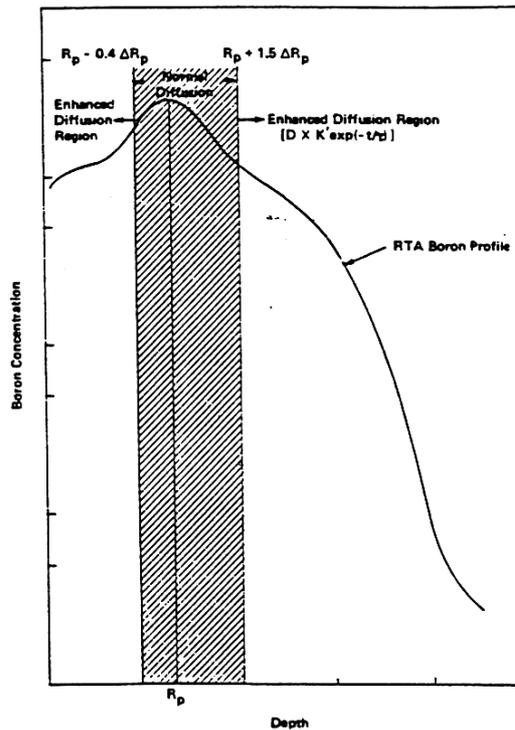


Figure a : représentation schématique du modèle de diffusion du bore durant un RTA dans du silicium (ref. 63)

R_p : Parcours moyen projeté, c'est la profondeur pour laquelle la concentration d'atomes implantés est maximale.

ΔR_p : Ecart type de la distribution des atomes autour du parcours moyen projeté. en [cm]

En superposant trois types de profils (défauts, concentrations et coefficient de diffusion) en profondeur, Marou [40] a quant à lui pu confirmer le lien étroit qui existe entre la faible mobilité du bore dans le sommet du profil, et la formation lors du recuit de cette zone de dislocations. Lorsque la température est suffisamment élevée, les dislocations commencent à se résorber. A l'intérieur de cette zone, la concentration des défauts est aussi importante que les atomes, Par contre aux extrémités de cette zone endommagée, les interstitiels de silicium qui sont injectés vers la surface ou en profondeur peuvent diffuser sur des distances importantes, avant de se stabiliser en position substitutionnelle, ce qui explique la diffusion accélérée du bore dans la queue du profil de concentration. Par contre selon Marou c'est l'aplatissement du sommet qui est prépondérant après quelques secondes, la zone de dislocations se résorbant. A la fin la diffusion du bore redevient homogène sur la totalité du profil, ce qui concorde avec nos résultats à forte température : 1100, 1125 et 1150°C (Fig.IV.5.e, f, g).

Même chose comme pour l'arsenic, nous portons sur les figures (IV.5.a, b, c, d, e, f, g) et figure (IV.6.b) le coefficient de diffusion du bore calculé par notre programme pour les recuits correspondant aux températures employées.

Ce coefficient suit aussi de façon linéaire la concentration du bore.

Le coefficient de diffusion, dans le cas de la diffusion du bore, suit le modèle donné par la relation III.29 :

$$D_B = D_{0,B} \exp(-E_{0,B}/kT) \frac{1 + \beta_B \cdot f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}} \right)$$

on remarque aussi, comme pour le cas de l'arsenic, que le coefficient de diffusion diminue avec la profondeur pour toutes les températures de recuit employées (figure IV.6.b), tandis que, D_0 augmente lorsque la température augmente.

La pente de la queue de distribution des profils de diffusivité du bore est moins importante à celle de la diffusivité d'arsenic, ce qui montre et confirme la diffusion un peu accéléré dans la queue de distribution du bore montrés par les profils de concentration réels (SIMS).

IV.5 : Comparaison Arsenic - Bore

4) Comme cela était prévisible, le bore diffuse plus vite que l'arsenic. Le bore a en effet un rayon plus petit que celui de l'As, et proche de celui du silicium.

5) D'autre part, l'ajustement en surface est meilleur à 1100, 1125 et 1150°C qu'à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour l'arsenic, et meilleur à 1075, 1100, 1125 et 1150°C qu'à 1000, 1025 et 1050°C pour le bore.

6) De même, l'ajustement en profondeur est meilleur à 1000, 1025, 1125 et 1150°C qu'à 1050, 1075 et 1100°C pour l'arsenic, et meilleur à 1100, 1125 et 1150 qu'à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour le bore.

On peut tenter d'expliquer ce phénomène de la façon suivante :

Nous avons vu que, en théorie, le coefficient β s'exprime par (voir Chp.III, p39) :

$$\beta = 2 \exp[(1/KT)(-Gap/2 - Ev + Zi \cdot q^2 / (4\pi\epsilon ai))]$$

La dépendance en température de β est donc importante. Il se peut donc que nous fassions une certaine erreur en prenant β constant.

Il semblerait ainsi, que nous ayons légèrement surévalué ou sous-évalué le coefficient β .

Un modèle plus élaboré pourrait peut être remplacer β par $\beta_0 \exp(-E/kT)$ pour palier à cet inconvénient.

La valeur de β choisie serait la bonne à 1125 et 1150°C pour l'arsenic, et à 1100, 1125 et 1150°C pour le bore.

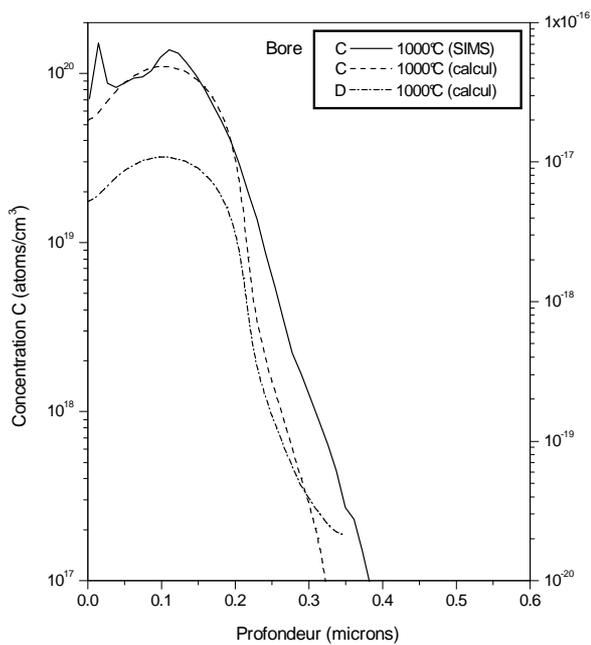


Figure IV.5.a

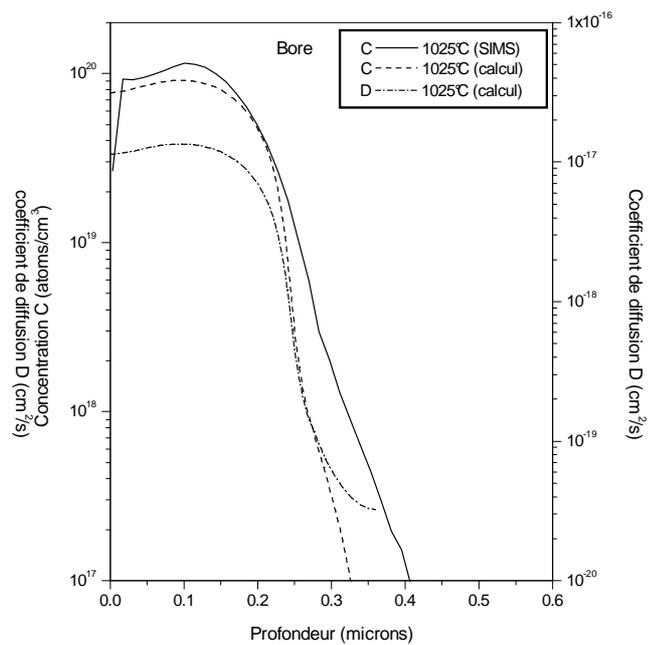


Figure IV.5.b

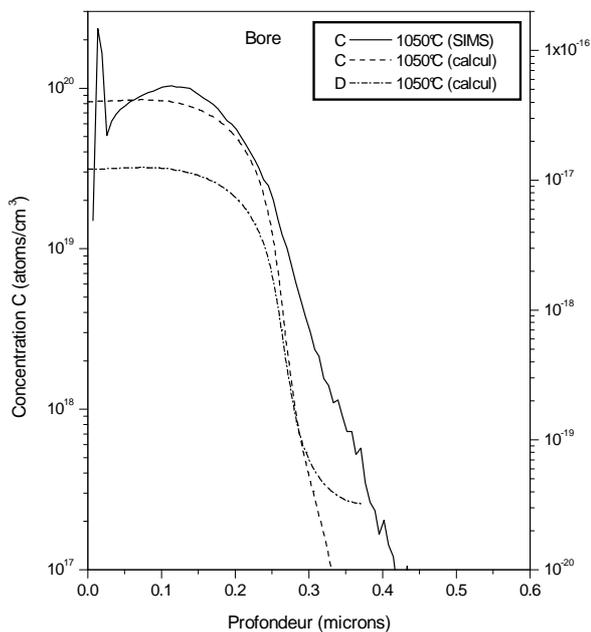


Figure IV.5.c

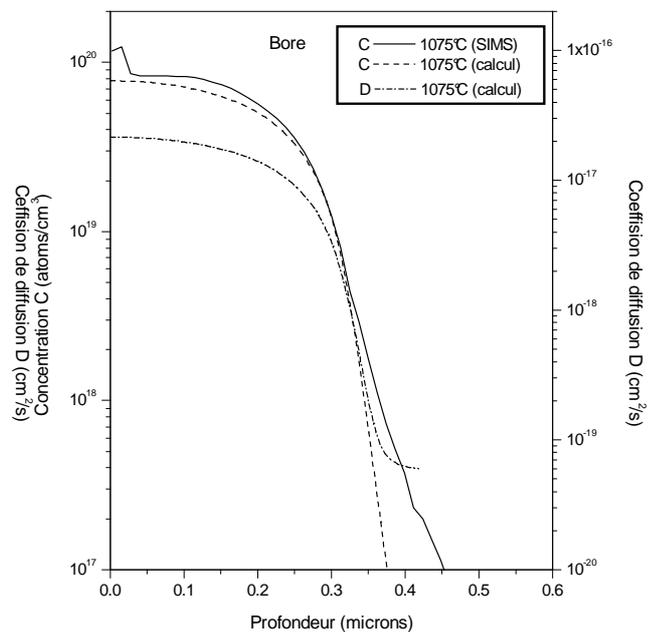


Figure IV.5.d

Figure IV.5.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion du Bore en fonction de la profondeur à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

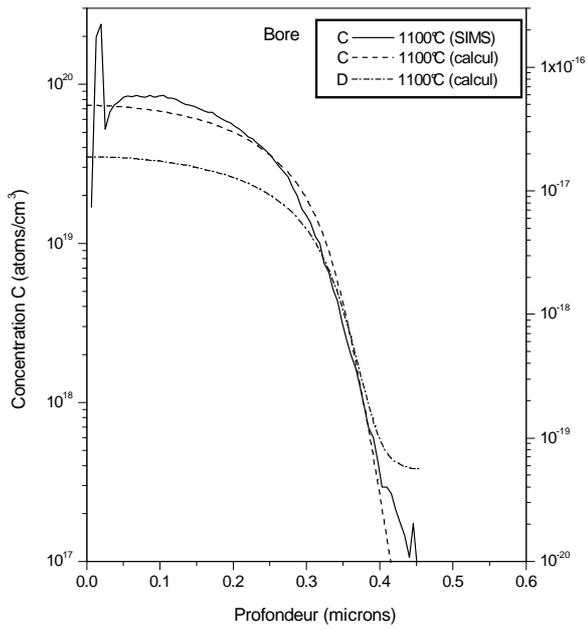


Figure IV.5.e

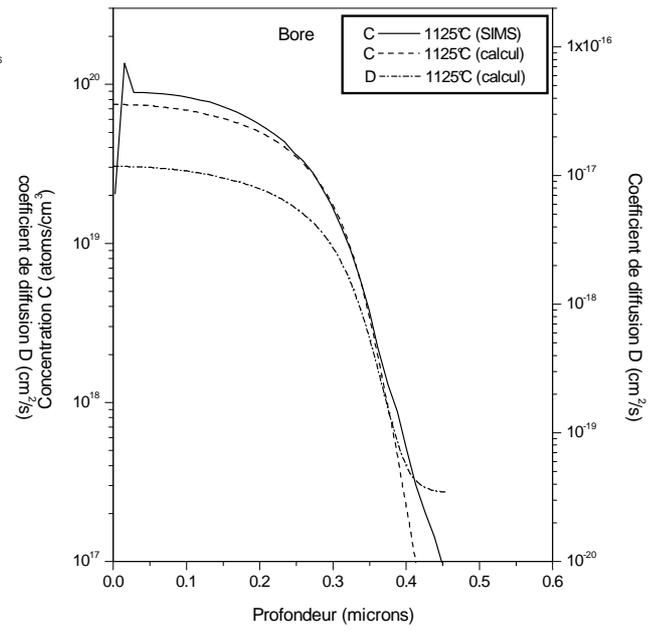


Figure IV.5.f

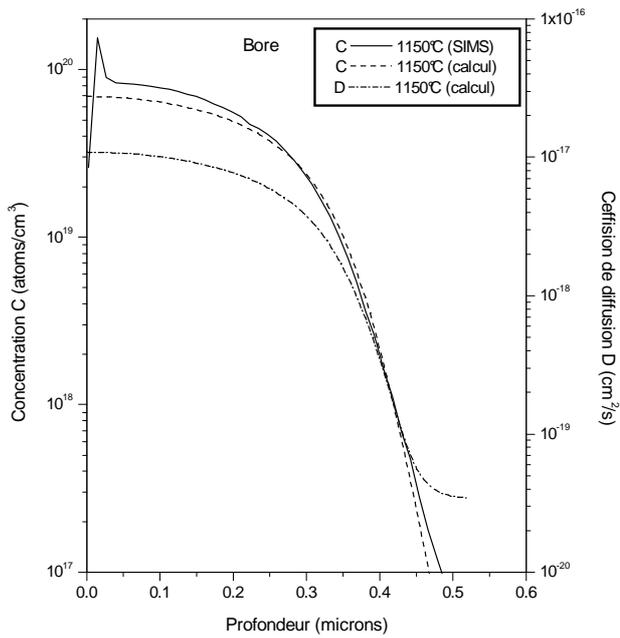


Figure IV.5.g

Figure IV.5.e, f, g : Profils de concentration et de diffusivité en diffusion du Bore en fonction de la profondeur à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

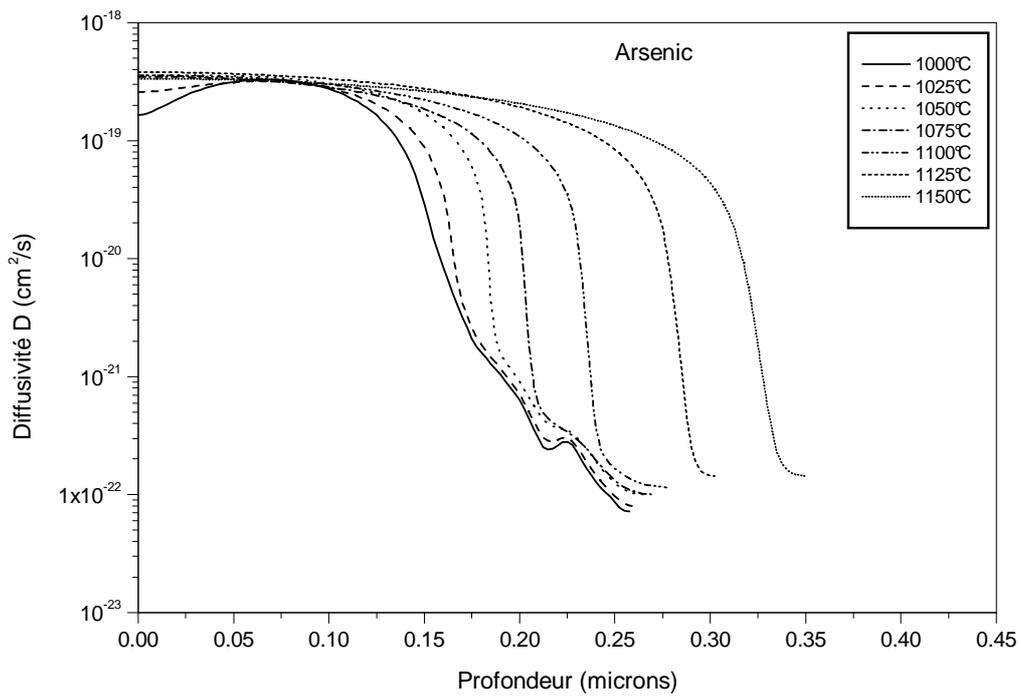


Figure IV.6.a : Profils de diffusivité de l'Arsenic recuit à différentes températures pour une durée de 20 secondes

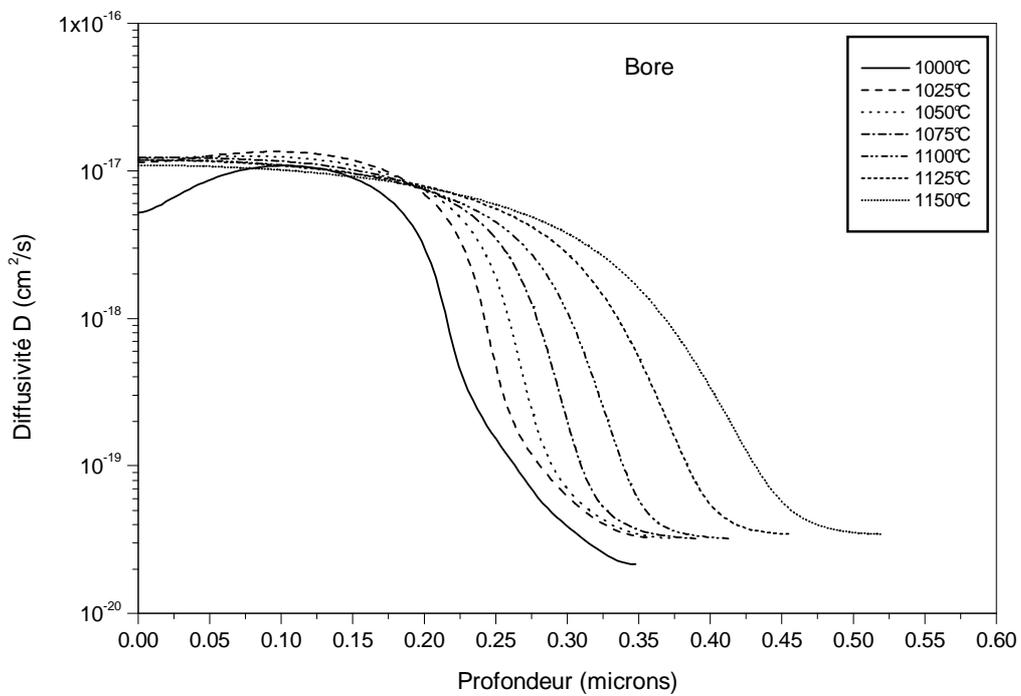


Figure IV.6.b : Profils de diffusivité du Bore recuit à différentes températures pour une durée de 20 secondes

IV.6 : Codiffusion de l'Arsenic et du Bore

Nous sommes arrivés à la conclusion que le meilleur ajustement entre les profils calculés et les profils réels est obtenu pour les valeurs suivantes des paramètres de diffusivités :

Arsenic :

$$E_0 = 4.1 \text{ eV}$$

$$\beta = 100$$

Bore :

$$E_0 = 3,426 \text{ eV}$$

$$\beta = 19$$

T (°C)	1000	1025	1050	1075	1100	1125	1150
D_{0As} (cm ² /s)	25	30	35	45	50	60	60
D_{0B} (cm ² /s)	3	3	3	3	3	3	3

Les valeurs ci-dessus, essentiellement les facteurs de diffusivité, sont différentes de celles établies lorsqu'il y a diffusion, d'un seul dopant. Les diffusivités en diffusion sont plus proches de celles en codiffusion pour l'arsenic qu'à celles du bore.

Les figures (IV.7.a, b, c, d, e, f, g) représentent la codiffusion de l'Arsenic et du Bore simulé pour les températures respectives 1000, 1025, 1050, 1075, 1100, 1125 et 1150°C.

Parmi les principales particularités prévisibles des profils, on peut remarquer le ralentissement de la diffusion du bore en profondeur, et la zone de déplétion (creux) à la jonction (intersection des profils d'arsenic et du bore).

L'arsenic, positif quand ionisé, attire le bore, qui est négatif. En conséquence, et ceci est d'ailleurs prévisible en analysant simplement les équations, le bore ne diffusera pas assez loin dans le cas de la codiffusion que dans le cas de la diffusion simple.

A l'intersection des profils de l'arsenic et du bore, on a création d'un creux (zone de déplétion) puisque ces deux dopants sont de types opposés. Cette zone de déplétion implique l'existence d'un champ électrique important, et donc d'un effet de champ remarquable [17,25].

Les atomes de bore (se sont eux qui sont les plus sensibles à l'effet du champ électrique car ils diffusent plus vite que l'arsenic) [17,30], vont avoir tendance à migrer de part et d'autre du point d'intersection des profils, produisant un minimum de concentration en ce point [17,30].

Le creux des profils de bore paraît toutefois plus marqué dans le cas de la modélisation que dans la réalité. Il est clair par contre que, comme prévu théoriquement, cette discontinuité s'atténue lorsque la température augmente. En effet, le terme de champ, qui est de la forme :

$$h = 1 + \left(\frac{C}{2n_i} / \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1} \right)$$

diminue quand la température augmente car n_i , concentration intrinsèque, augmente.

$$n_i = 7.6354 \times 10^{15} \times T^{3/2} \exp(-Gap/2KT)$$

avec

$$Gap = 1.17 - 4.73 \times 10^{-4} T^2 / (636.K + T)$$

De même que dans le cas de la diffusion simple nous présentons sur les mêmes figures (IV.7.a, b, c, d, e, f, g) et figures (IV.8.a, b) les coefficients de diffusion pour les différentes températures employées. Ils présentent une brusque variation au niveau de la jonction, c'est-à-dire lorsque $C_{As} \approx C_B$. En fait dans le cas de la codiffusion la diffusivité dépend essentiellement de la différence de concentrations des deux dopants, quasiment linéairement pour l'arsenic et de façon inversement proportionnelle pour le bore (cf. équations (III.30), (III.31) et (III.33)) ; celle-ci peut varier d'au moins trois et quatre décades respectivement pour le bore et l'arsenic. On peut aussi par exemple remarquer la forte diffusivité du bore juste au-delà de la jonction, celle-ci s'opposant à l'effet de champ électrique dû au fort gradient d'arsenic dans cette zone [17].

Les figures (IV.9.a, b, c, d) pour l'arsenic et figures (IV.10.a, b, c, d) pour le bore représentent les diffusivités en diffusion et en codiffusion de ces deux dopants où est montré clairement l'effet de l'arsenic sur le bore et réciproquement. On constate que l'arsenic agit fortement sur la diffusion du bore en réduisant sa diffusivité par l'intermédiaire de l'effet du champ électrique due à son gradient de concentration [17]. D'autre part, on constate aussi l'effet du bore sur l'arsenic qui est beaucoup moindre.

Notons que les coefficients de diffusion du modèle de codiffusion de l'arsenic et du bore sont déterminés par les relations suivantes (cf. chap. III) :

Pour l'Arsenic :

$$D = D_{i,As} \frac{1 + \beta_{As} f}{1 + \beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

Pour le Bore :

$$B = D_{i,B} \frac{1 + \beta_B / f}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_{As} - C_B)^2 + 4n_i^2}} \right)$$

Avec :

$$f = \frac{(C_{As} - C_B)}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As} - C_B}{2n_i} \right)^2 + 1}$$

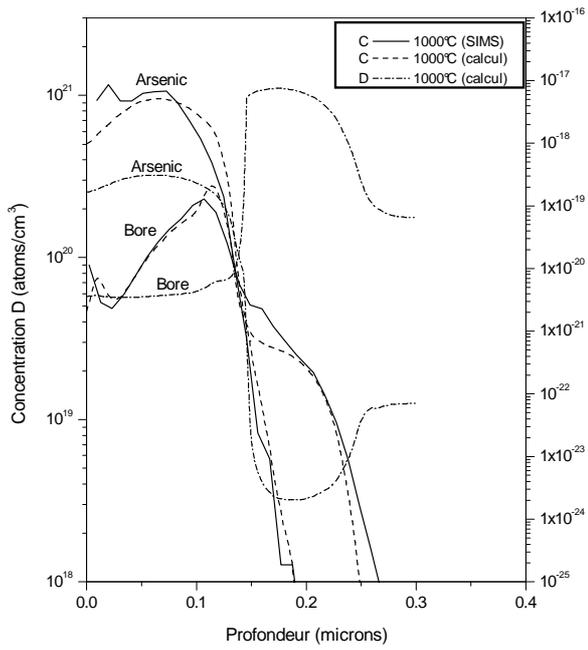


Figure IV.7.a

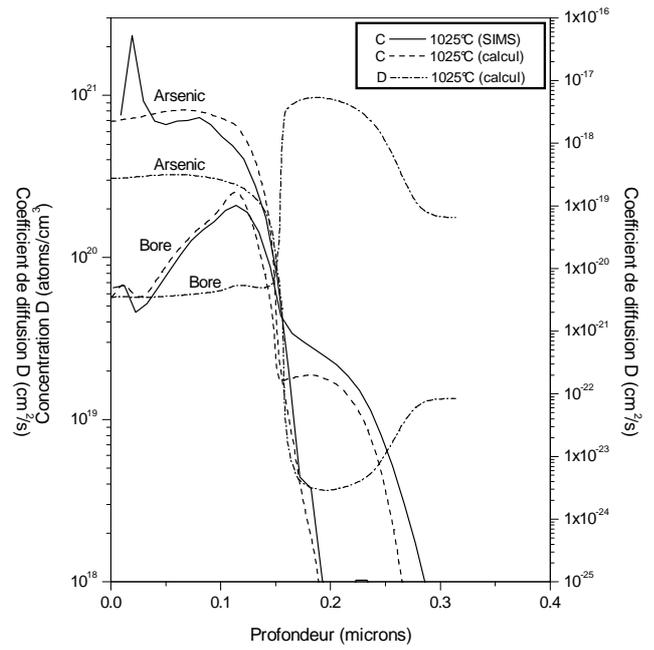


Figure IV.7.b

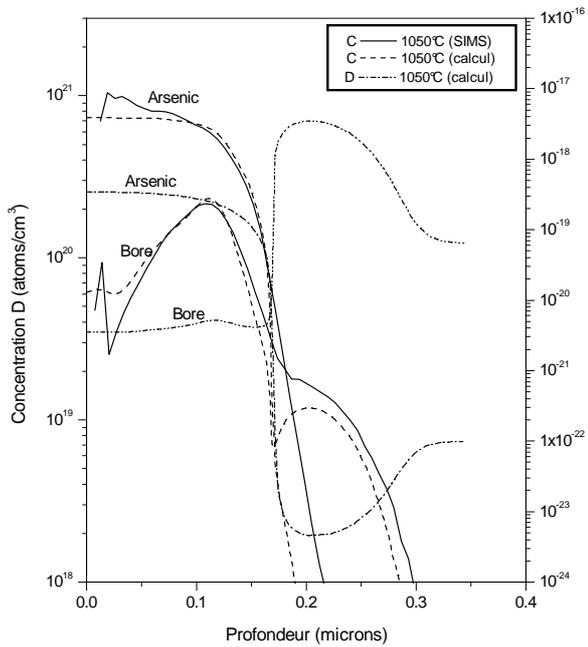


Figure IV.7.c

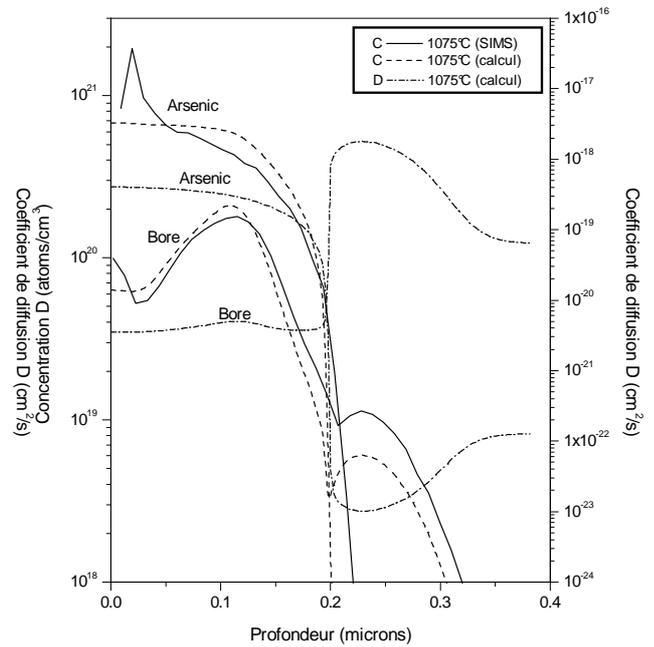


Figure IV.7.d

Figure IV.7.a, b, c, d : Profils de concentration et de diffusivité en codiffusion de l'Arsenic et du Bore à 1000, 1025, 1050 et 1075°C pour une durée de recuit de 20 secondes

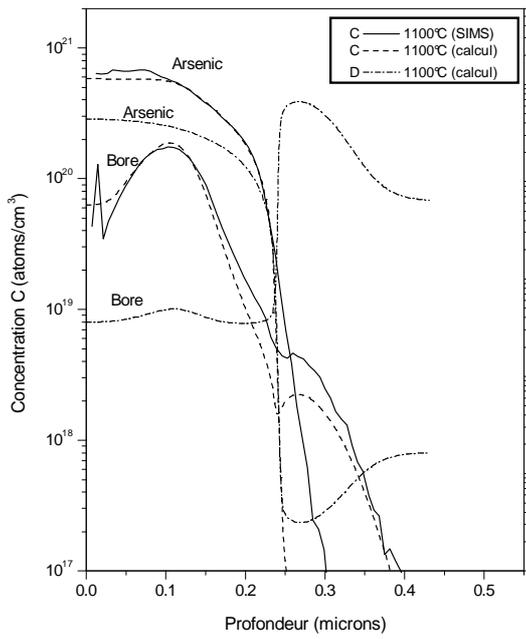


Figure IV.7.e

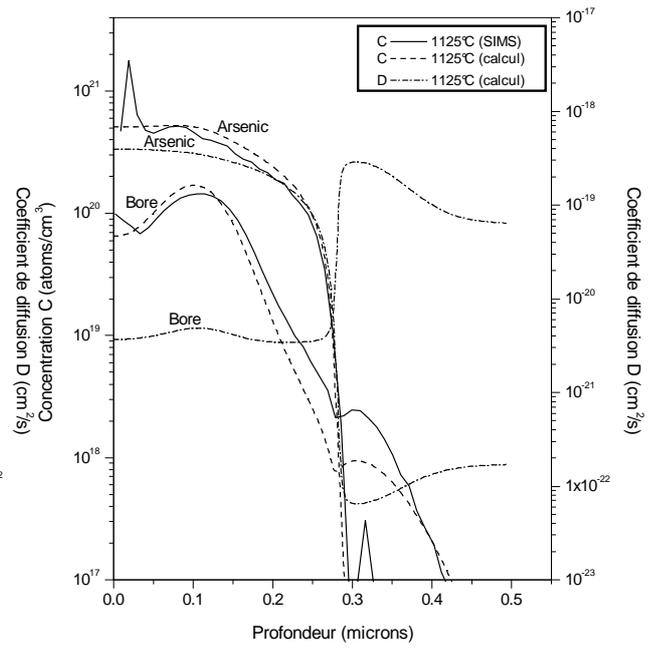


Figure IV.7.f

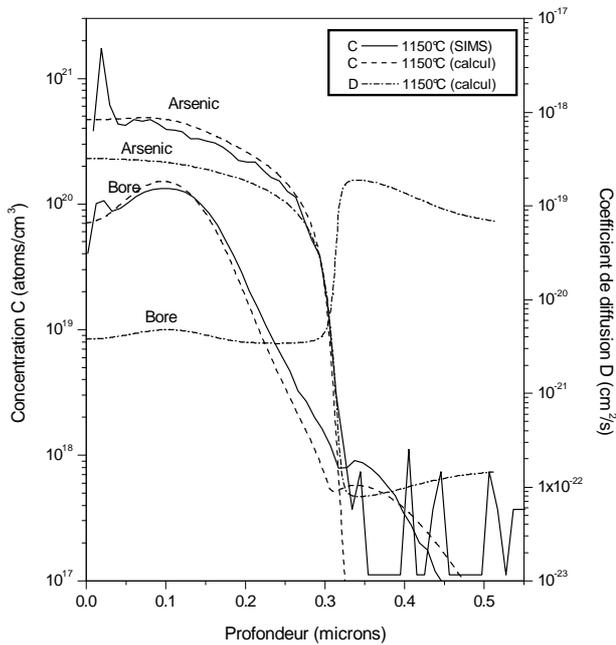


Figure IV.7.g

Figure IV.7.e, f, g : Profils des concentrations et des diffusivités en codiffusion de l'Arsenic et du Bore à 1100, 1125 et 1150°C pour une durée de recuit de 20 secondes

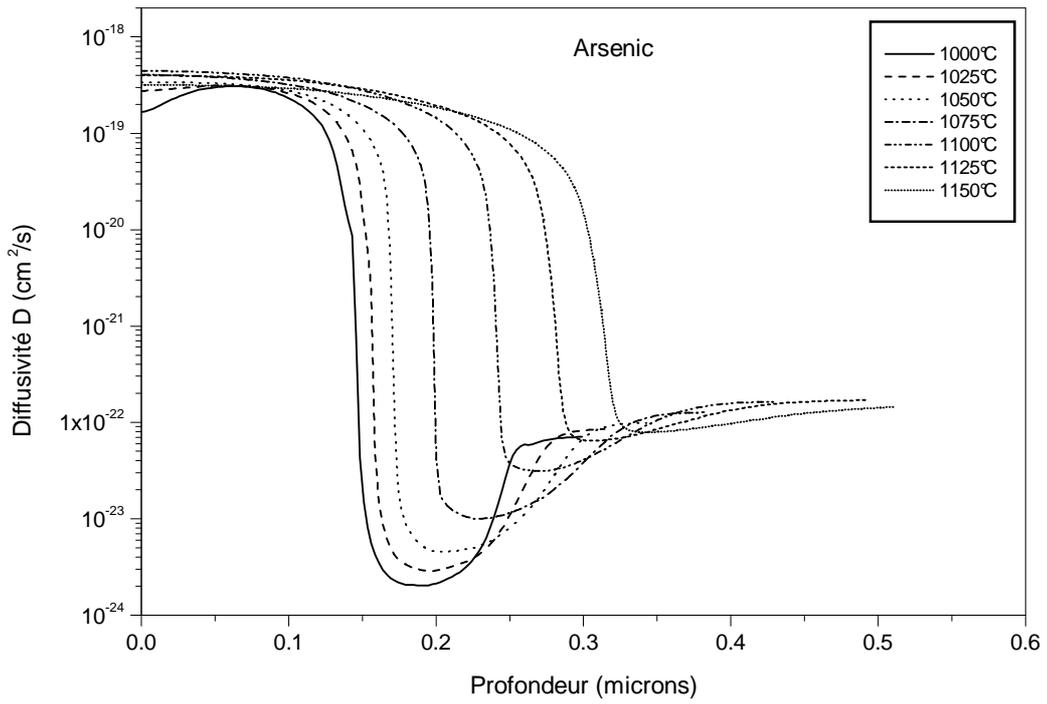


Figure IV.8.a : Profils de diffusivité de l'Arsenic en codiffusion à différentes températures pour une durée de recuit de 20 secondes

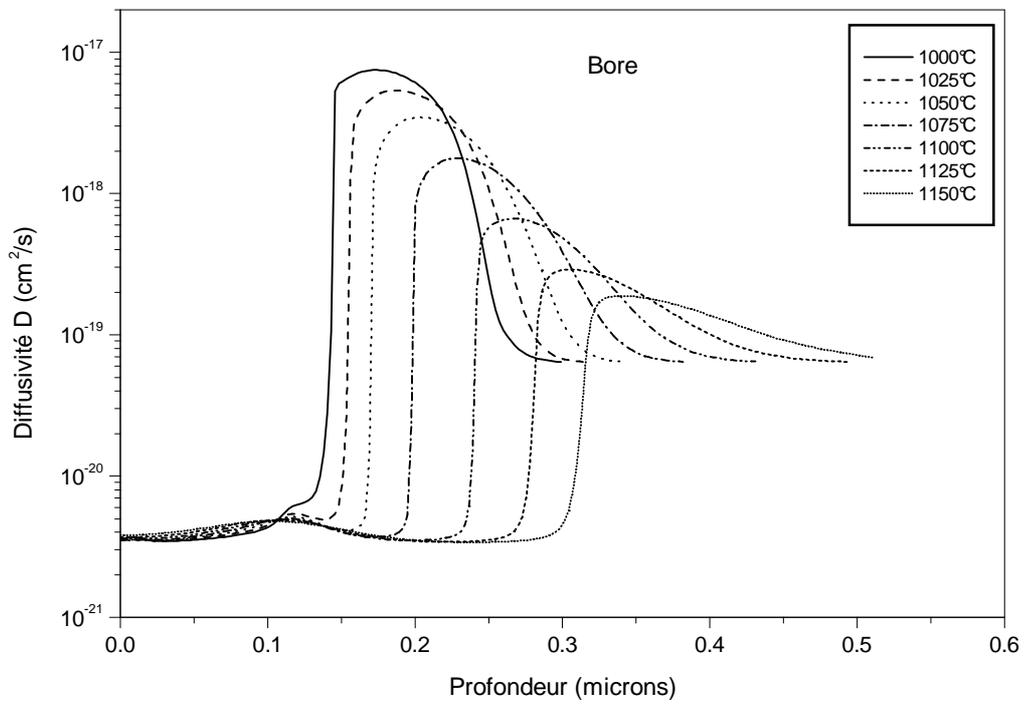


Figure IV.8.b : Profils de diffusivité du Bore en codiffusion à différentes températures pour une durée de recuit de 20 secondes

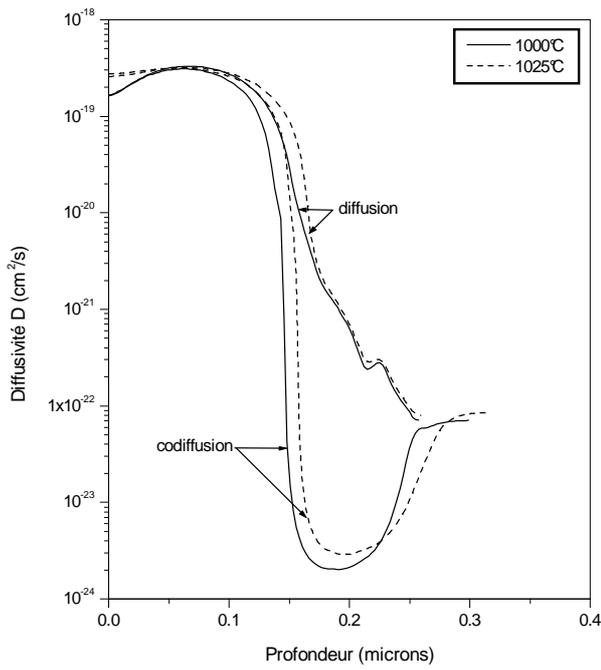


Figure IV.9.a

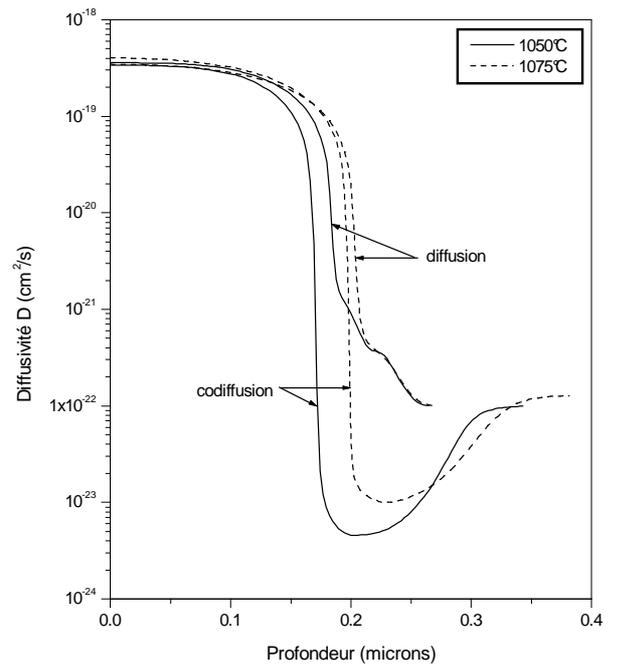


Figure IV.9.b

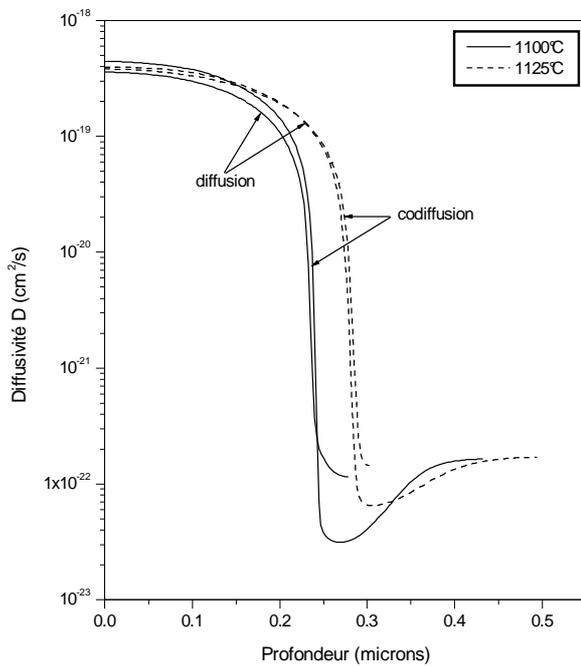


Figure IV.9.c

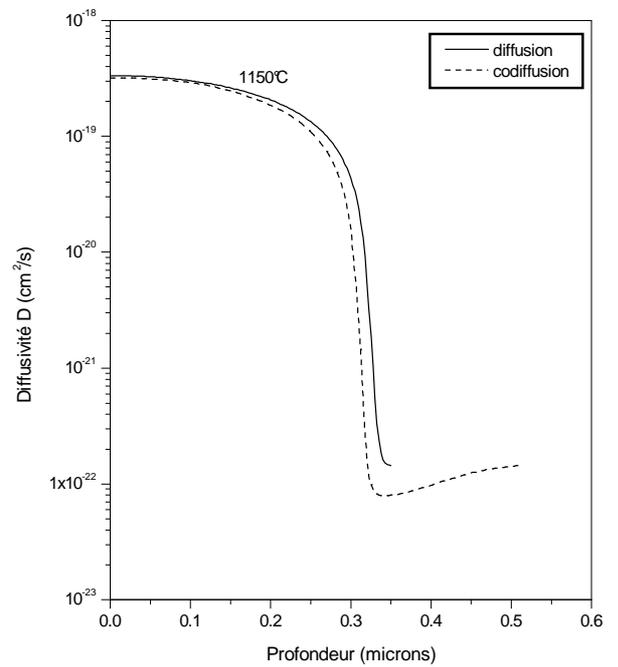


Figure IV.9.d

Figure IV.9.a, b, c, d : comparaison des profils de diffusivité en diffusion et en codiffusion de l'Arsenic en fonction de la profondeur pour différentes températures

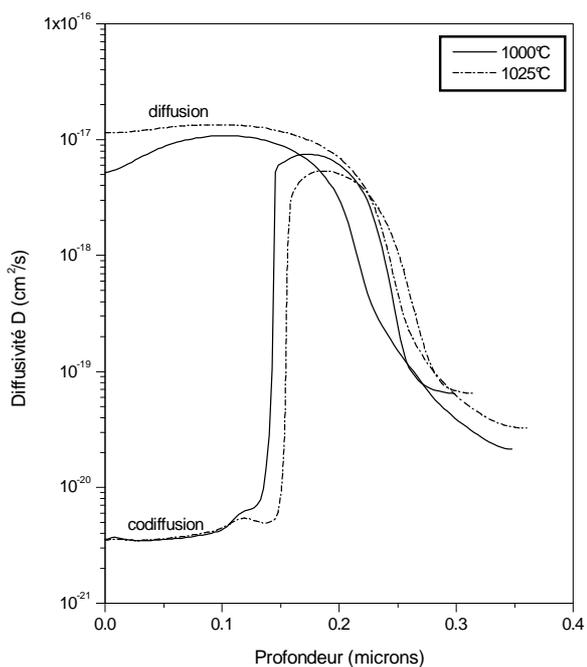


Figure IV.10.a

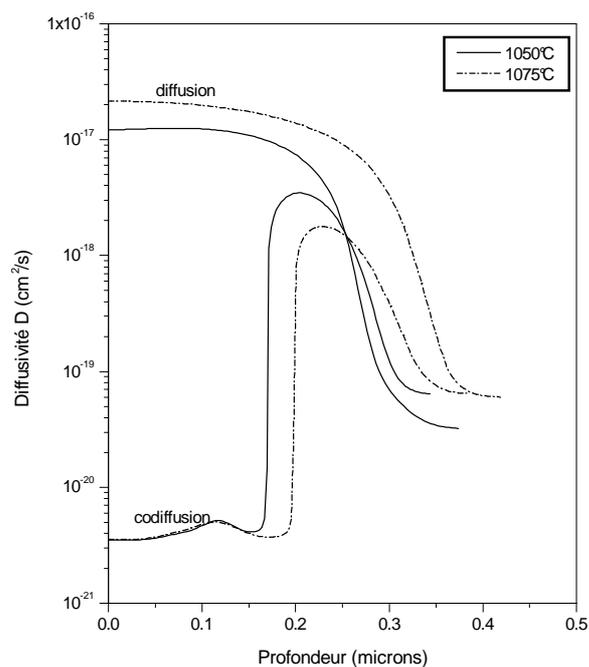


Figure IV.10.b

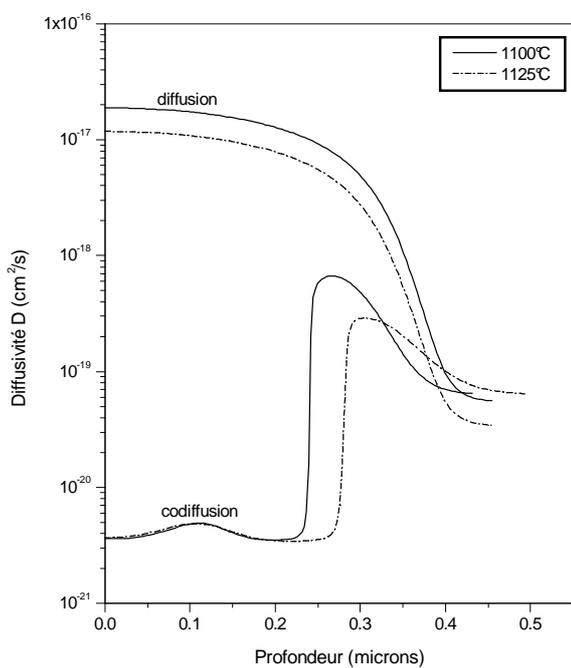


Figure IV.10.c

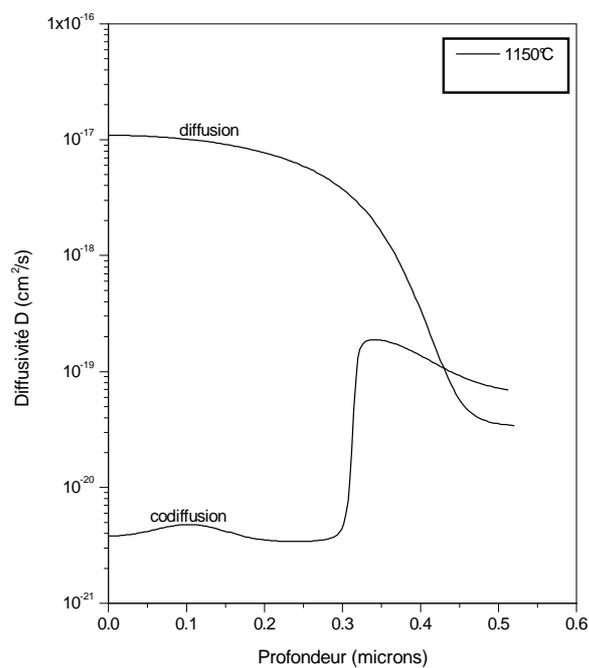


Figure IV.10.d

Figure IV.10.a, b, c, d : comparaison des profils de diffusivité en diffusion et en codiffusion du Bore en fonction de la profondeur pour différentes températures

CONCLUSION GENERALE

Dans le cadre de l'étude de la diffusion et de la codiffusion d'Arsenic et de Bore dans une structure monosilicium lors de recuits thermiques rapides, dans une perspective de réalisation de transistors, nous avons été amenés à nous appuyer sur les résultats obtenus simultanément par SIMS et simulation.

Généralement, en ce qui concerne les profils SIMS, l'étude se fait pour deux températures de recuit typiques de la VLSI (1050°C et 1100°C). Nous avons étendu cette étude à d'autres températures : 1000, 1025, 1075, 1125, 1150°C. Ceci nous a permis de mettre en évidence la diffusion rapide de l'Arsenic dans le monosilicium (profil plat). Quant au Bore, nous avons pu observer sa diffusion moindre en présence d'Arsenic que lorsqu'il est seul.

La diffusion et la codiffusion de l'arsenic et du bore ont donc pu être modélisés avec beaucoup de précision. Le choix d'un algorithme de calcul simple et efficace et d'un langage de programmation structuré a joué un rôle déterminant dans l'obtention de ces résultats. Nous avons dégagé des valeurs des paramètres de diffusivité très acceptables et nous avons essayé d'expliquer les différences observées entre la réalité expérimentale et notre modèle.

Dans le cas du Bore, les profils calculés sont en accord avec les profils SIMS. La valeur moyenne retenue pour le facteur de diffusivité du Bore est environ 3 fois plus grande que celle correspondant aux recuits classiques.

Pour l'Arsenic, les profils simulés sont en bon accord avec les profils SIMS, la diffusivité pouvant varier d'un facteur de 25 à 60 par rapport aux recuits classiques.

En outre, les simulations en codiffusion d'As et de B nous ont amené à prendre des coefficients de diffusion pour le Bore différents de celles de la diffusion simple. Tandis-que pour l'arsenic, les coefficients de diffusion sont proches à celles trouvés par la diffusion simple.

Nous avons mis en outre au point un programme de simulation numérique de diffusion et de codiffusion de ces impuretés. Nous avons donc été à même d'étudier un modèle de diffusion et d'en ajuster les paramètres, essentiellement les diffusivités, la possibilité de modification des énergies d'activation devant être considéré avec plus de prudence, pour obtenir un bon accord entre théorie et expérience.

On souligne en particulier le phénomène de diffusion accélérée du bore lors du recuit thermique rapide (R.T.A), ce qui peut être un inconvénient pour l'obtention de jonctions fines. Une extension de ce travail consistera en une poursuite de l'étude par simulation des profils de concentration à des recuits de durées progressivement croissantes.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Y. Adda, J. P. Dupony, J. Philipert, Y. Quéré, "Elément de métallurgie physique", La Documentation Française, Paris, 1983.
- [2] P. G. Shewmon, "Diffusion in solids", Mc Graw-Hill, New York, 1973.
- [3] J. P. Stark, "Solid State Diffusion", Wiley, New York, 1976.
- [4] B. S. Bokstein, "Diffusion dans les métaux métallurgie", Moscou, 1978.
- [5] Jean Philipert, "*Diffusion et transport de matière*", Edition de Physique-France, 1985.
- [6] James D. Plummer, Péter B. Griffin, "*Silicon VLSI Technologie : Fundamentals, Practice and Modeling*", 1999.
- [7] Henry Mathieu, "*Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques*", 4^{ème} Edition, 1998.
- [8] Abdelali Merabet, "Interdiffusion et réaction dans les couches minces cuivre-antimoine", Thèse de Magistère, Université de Setif, 1988.
- [9] Amar Gherriche, "*Contribution à l'étude des effets de la barrière de diffusion Cuivre/Silicium*", Thèse de Magistère, 1998.
- [10] A. Berezine, O. Motchalkina, "*Technologie et Construction des circuits intégrés*", Edition Mir, 1983.
- [11] B.I. Boltaks, "Diffusion et défauts ponctuels dans les semi-conducteurs", Mir, Moscou, 1977.
- [12] J.R. Manning, "Diffusion kinetics for atoms in crystals", Van Nostrand, Princeton, 1978.
- [13] Y. Adda, J. Philipert, "La diffusion dans les solides", P.U.F., Vol.1-2, Paris, 1976.
- [14] "Diffusion Data", Trans. Tech. Publications, Vol.1-7, 1973.
- [15] "Diffusion and Defect Data", Trans. Tech. Pub., Vol.8, Aedermannsdorf, Suisse, 1973.
- [16] J. Narayon and O.W. Holland, J. Appl. Phys., Vol. 56, p 2913, 1984.
- [17] C. Gotrand, P. Ancey, H. Haddad et G. Chaussemy, "*Diffusion and codiffusion of boron and arsenic in monocrystalline silicon during rapid thermal annealing*", Semicond. Sci. Technol., Vol. 7, p. 181-187, 1992.
- [18] F. Marrouf, "*Procédés Thermiques Rapides : Etude de l'oxydation du silicium et de l'activation de l'impureté*" Thèse de Doctorat, Université de Paul Sabatier de Toulouse, p.135, 1990.
- [19] J.S. Williams and R.G. Elliman, "*Limits to solid solubility in ion implanted into Si(100) and Si(111)*", Thin. Solid. Film, Vol. 149, 1987.

- [20] O.W.J.Holland and J.Narayan, "*Rapid thermal annealing of ion-implanted semiconductors*", J. Appl. Phys., S6(10), 1984
- [21] R.B.Fair, "*Modeling of dopant diffusion and associated effects in silicon*", Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 14, 1983
- [22] J.F. Joly, "*Recuit rapide isotherme des semiconducteurs*", Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, p.211, 1988
- [23] C. Le Roux, "*Caractérisation physicochimique de substrats de silicium implantés par de l'arsenic et du bore en fortes concentrations et recuit par des procédés rapides(RTA)*", Thèse de Doctorat, Université de Paris VII, p.161, 1991
- [24] Abdelali Merabet, "*Etude théorique et expérimentale des diffusions d'arsenic et du bore dans une structure polycilicium sur silicium et dans le silicium lors de traitements thermiques rapides*", Thèse de Doctorat D'état, Université de Constantine, 1995
- [25] P.Ancey, Y.Haddab, "*Modélisation de la diffusion et de la codiffusion de l'arsenic et du bore dans le silicium lors des traitements thermiques rapides*", Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, Rapport de D.E.A, 1990
- [26] D. Mathieu, "*Diffusion des dopants dans le silicium : aspects expérimentaux et simulation*", L'Echo des Recherches, N°117, p. 57-66, 1984
- [27] C. BERGAUD, "*Implantation ionique de bore dans du silicium préamorphisé : réalisation, modélisation et caractérisation de jonctions p+/n ultra-minces.*", Thèse de Doctorat, Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes du CNRS, 1994.
- [28] R.W.Dutton, "*Modeling of the silicon integrated-circuit design and manufacturing process*", IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-30, N°9, p. 968-985, 1983
- [29] Daniel W. Yergeau, "*A Dial-An-Operator Approach To Simulation Of Impurity Diffusion In Semiconductors*", P.H.D., Stanford University, 1999
- [30] S.M. Hu and S. Schmitt, "*Interactions in sequential diffusion processes in semiconductors*", J. Appl. Phys, Vol.39, N°9, p.4272-4283,1968
- [31] S.M.Sze, "*Physics of semiconductors devices*", 2nd Edition, New York : John Wiley et Sons, p.868, 1981
- [32] Werner Jüngling, Peter Pichler, Sigfried Selbeherr, Edgar Guerrero, and Hans W. Pötzl, "*Simulation of critical IC fabrication processes using advanced physical And numerical method*", IEEE Transactions on Electron Devices, ED-32(2), p.156-167, February 1985

- [33] M. Y. Tsai, F.F. Morehead, J.E.E. Baglin and A.E. Michel, "*Shallow junction by high dose As implants in Si : experiments and modeling*", J. Appl. Phys. Vol. 51, N°6, p. 3230-3235, 1980
- [34] Richard B. Fair and Joseph C.C. Tsai, "*The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon*", J. Electrochemical Society : Solid-State Science and Technology, Vol. 122, N°12, p. 1689-1696, 1975
- [35] S.M. Hu, "*General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism*", Phys. Rev. , Vol.180, p.773-784, 1969
- [36] R.B.Fair, "*Impurity doping process in silicon*", F.F.Y. WANG, Ed. Amsterdam : North Holland Publishing, p.315, 1981
- [37] R.B.Fair, "*Recent advances in implantation and diffusion modeling for the design and process control of bipolar ics*". In H.R. Huff and T. Abe, Editors, Proceedings of the 3rd International Symposium on Silicon Materials Science and Thechnology, p.968, May 1977
- [38] G. Giroult , A. Nouailhat and M. Gauneau, "*Study of a Wsi₂/polycrystalline silicon/monocrystalline silicone structure for a complementaty metal-oxyde-semiconductors for a compatible self-aligned bipolar transistor emitter* ", J.Appl.Phys., vol.67, N°1,p.515-523,1990
- [39] R.B. Fair and J.C.C. Tsai, "*The diffusion of ion-implanted arsenic in silicon*", J. Electrochemical Society.Vol.122, p.1689-1696, 1975
- [40] F. Marou, "*Procédés thermiques rapides : Etude de l'oxydation du silicium et de l'activation de l'impureté bore implanté*", Thèse de Doctorat, Laboratoire D'Automatique et d'Analyse des Systèmes (L.A.A.S.) du CNRS, 1990.
- [41] S. Horiuchi and R. Blanchard, "*Boron diffusion in polycrystalline silicon layers* ", Solid-State Electronics, Vol.18, p.529-532, 1975
- [42] TITAN 4, "*Simulation bidimensionnelle des procédés de fabrication des circuits intégrés note technique*", CNET-CNS MEYLAN, 1985
- [43] C. Gontrand, A. Merabet, B. Semmache, S. Krieger, C. Bergaud, M. Lemiti, D. Barbier and A. Laugier, "*Codiffusion of As and B in and from polysilicon during rapid thermal annealing*", Semicond. Sci.Technol. , vol.8, p.155-162, 1993
- [44] Christian Bergaud, "*Etude de la diffusion et de la codiffusion de bore et d'arsenic dans une structure polysilicium sur silicium lors de recuits thermiques rapides*", Rapport de Stage D.E.A, Institut National des Sciences Appliquées : Université de Claude Bernard Lyon 1, 1991

- [45] S.T. Dunham et C.D. Wu, "*Atomistic models of vacancy-mediated diffusion in silicon*", J. Appl. Phys., Vol. 78 N°4, p. 2362-2366, 1995
- [46] S.A. Fedotov, "*Diffusion of electrically active Sb atoms in heavily doped silicon*", phys. stat. Soc. (b), Vol. 186, p.375-382, 1994
- [47] U. Schmid, N.C. Myers et J. Avan Vechten, "*VIDSIM-A Monte Carlo program for the simulation of atomic diffusion in diamond and zinc-blende structures*", Comp. Phys. Com., Vol.58, p329-341, 1990
- [48] M.M. De Souza et G.A.J. Amaratunga, "*A Monte Carlo study of the knockout mechanism of boron diffusion in silicon*", J. Appl. Phys., Vol. 79 N°5, p 2418-2425, 1996
- [49] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling et B. P. Flannery, "*Numerical Recipes in C*", Cambridge University Press, Second Edition, 1992
- [50] J. P. Nougier, "*Méthodes de calcul numérique*", Masson, 1991
- [51] W.F. Ames, F.V. Postell et E. Adams, "*Optimal numerical algorithms*", Appl. Num. Math. , Vol. 10, p 235-259, 1992
- [52] J. Carroll, "*A composite integration scheme for the numerical solution of systems of parabolic PDEs in one space dimension*", J. Comp. Appl. Math. , Vol. 46, p 327- 343, 1993
- [53] M. Paffrath, W. Jacobs, W. Klein, E. Rank, K. Steger, U. Weinert et U. Wever, "*Concepts and algorithms in process simulation*", Surv. Math. Ind. , Vol 3, p 149-183, 1993
- [54] R.W. Dutton et S.E. Hansen, "*Process modeling of integrated circuit device technology*", Proc. IEEE, Vol. 69 N°10, p 1305-1320, 1981
- [55] C.P. Ho, J.D. Plummer, S.E. Hansen et R.W. Dutton, "*VLSI Process Modeling-SUPREM III*", IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-30 N°11, p 1438-1453, 1983
- [56a] M.D. Deal et H.G. Robinson, "*Diffusion of implanted beryllium in n- and p-type GaAs*". Appl. Phys. Lett., Vol. 55 N°19, p 1990-1992, 1989
- [56b] M.D. Deal, S.E. Hansen et T. W. Sigmon, "*SUPREM 3.5-Process modeling of GaAs integrated circuit technology*". IEEE Trans. Comp. Aided Design, Vol. 8 N° 9, p 939-951, 1989
- [57] J.C. Hu, M.D. Deal et J.D. Plummer, "*Modeling the diffusion of grown-in Be in molecular beam epitaxy GaAs*", J. Appl. Phys., Vol. 78 N°3, p 1595-1605, 1995

- [58] M.E. Law et R. W. Dutton, "*Verification of analytic point defect models using SUPREM-IV*", IEEE Trans. Comp. Aided Design, Vol. 7 N°2, p 181-190, 1988
- [59] H.G. Robinson, M. Deal, G. Amaratunga, P.B. Griffin, D.A. Stevenson et J.D. Plummer, "*Modeling uphill diffusion of Mg implants in GaAs using SUPREM-IV*", J. Appl. Phys., Vol. 71 N°6, p 2615-2623, 1992
- [60] W. Jungling, P. Pichler, S. Selberherr, E. Guerrero et H.W. Potzl, "*Simulation of critical IC fabrication processes using advanced physical and numerical methods*". IEEE Trans. Elect. Dev., Vol. ED-32 N°2, p 156-167, 1985
- [61] J. Marcon, "*Simulation numérique de la diffusion de dopants dans les matériaux III-V*", Thèse de Doctorat, Université de Rouen, 1996
- [62] P. Forent, G. Lauton, M. Lautan, "*Outils et modèles mathématiques : Algèbre linéaire*", Tome III, P.123-154, Vuibert, 1977.
- [63] John W. Harris, Horest Stocker "*Handbook of mathematics and computational science*", P.409-465, 1998.
- [64] Rainer Kress, "*Numerical analysis*", P.5-23, 1998.
- [65] A.G. O'Neill, C. Hill, J. King and C. Please, "A New model for the diffusion of arsenic in polycrystalline silicon.", J. Appl. Phys. Vol.64, N°1, P.167-174, 1988.
- [66] R.B.Fair, "*Modeling of dopant diffusion during rapid thermal annealing*", J. Vac. Sci. Technol., Vol. A4, N°3, p.926-932, 1986.
- [67] R.B. Fair, J. J. Worman and J. Liu, J.Electrochem.Soc.Vol.131, p.2387, 1984.

ANNEXE

Procédure de codiffusion :

Le principe de l'algorithme est de calculer, pour chaque pas de temps, les concentrations d'arsenic et de bore en passant successivement du système d'équations (III.35'), (III.36') et (III.37') au système d'équations (III.35''), (III.36'') et (III.37'') (cf. Chapitre III).

Il existe un problème car pour calculer les profils de concentration d'un des dopants au pas de temps $n+1$, on utilise les profils de concentrations calculées au pas de temps n , mais aussi les diffusivités calculées à partir de ces dernières concentrations. Il y a donc un décalage au niveau des diffusivités et, en général les valeurs calculées des concentrations ne traduisent pas la réalité après un premier calcul.

On a donc, comme pour le cas de la diffusion simple, "boucler" ces deux systèmes d'équations sur un pas de temps jusqu'au moment où l'on va satisfaire à un critère de convergence sur les concentrations (III.38).

Soient :

$C(n, j)$: concentrations d'arsenic au temps n .

$E(n, j)$: concentrations de bore au temps n .

$D(n, j)$: diffusivités de l'arsenic considéré seul.

$L(n, j)$: diffusivités traduisant l'influence du bore sur L'arsenic.

$B(n, j)$: diffusivités du bore considéré seul.

$M(n, j)$: diffusivités traduisant l'influence de l'arsenic sur le bore.

La méthode de calcul utilisé dans l'algorithme est basée sur le schéma suivant :

DEBUT

Pour i = 1 jusqu'à 900 faire

Si $C_1(k2+1) > 10^{17}$ ou $E_1(k2+1) > 10^{17}$ alors { augmentation du nombre de pas d'espace }

K2:=k2+1

Sinon K2:=k2

FinSi

Repeter

Conv1 := 0; Conv2 := 0

Procédure diffusivité

$A_0 = \Delta t / (\Delta x)^2$; $A_0.D(j) = A(j)$; $A_0.L(j) = H(j)$

$U_0 = 1 + A(1)$

Pour j=1 jusqu'à k2-1 faire { calcul des valeurs de la fonction U de l'arsenic }

$U_j = [1 + A(j) + A(j+1)] - [A(j)]^2 / U_{j-1}$

FinPour

$U_{k2} = [1 + A(k2)] - [A(k2)]^2 / U_{k2-1}$

$K'(0) = C_1(0) + H(1)[E_1(1) - E_1(0)]$

Pour j=1 jusqu'à k2 faire { calcul des valeurs de la fonction K' de l'arsenic }

$K'(j) = C_1(j) + H(j)E_1(j-1) - [H(j) + H(j+1)]E_1(j) + H(j+1)E_1(j+1) + [K'(j-1).A(j)] / U_{j-1}$

FinPour

$K'(k2) = C(k2) + H(k2)[E(k2-1) - E(k2)] + [K'(k2-1).A(k2)] / U_{k2-1}$

$C_2(k2) = K'(k2) / U_{k2}$

Pour j=k2-1 jusqu'à 0 faire { calcul des nouvelles valeurs de concentration de l'arsenic }

$C_2(j) = [K'(j) + A(j+1).C_2(j+1)] / U_j$

FinPour (d'Arsenic)

Pour i1=0 jusqu'à k2 faire

{ calcul de conv1 pour le critère de convergence

$conv1 := conv1 + |C_2(i1) - C_1(i1)| / C_1(i1)$

et transfert de concentration dans C_1 }

$C_1(i1) := C_2(i1)$

FinPour

Procédure diffusivité

$$A_0.B(j) = A(j)$$

$$U_0 = 1+A(1)$$

Pour j=1 jusqu'à k2-1 faire

{ calcul des valeurs de la fonction U du bore }

$$U_j = [1+A(j) + A(j+1)] - [A(j)]^2/U_{j-1}$$

FinPour

$$U_{k2} = [1+A(k2)] - [A(k2)]^2/U_{k2-1}$$

$$K''(0) = E_1(0) + M(1)[C_1(1) - C_1(0)]$$

Pour j =1 jusqu'à k2 faire

{ calcul des valeurs de la fonction K'' du bore }

$$K''(j) = E_1(j) + M(j)C_1(j-1) - [M(j) + M(j+1)]C_1(j) + M(j+1)C_1(j+1) + [K''(j-1).A(j)]/U_{j-1}$$

FinPour

$$K''(k2) = E_1(k2) + M(k2)[C_1(k2-1) - C_1(k2)] + [K''(k2-1).A(k2)]/U_{k2-1}$$

$$E_2(k2) = K''(k2)/U_{k2}$$

Pour j = k2-1 jusqu'à 0 faire

{ calcul des nouvelles valeurs de concentration du bore }

$$E_2(j) = [K''(j) + A(j+1).E_2(j+1)]/U_j$$

FinPour (du Bore)

Pour i2=0 jusqu'à k2 faire

{ calcul de conv1 pour le critère de convergence

$$\text{Conv2} := \text{conv2} + |E_2(i2) - E_1(i2)|/E_1(i2)$$

et transfert de concentration dans E1 }

$$E_1(i2) := E_2(i2)$$

FinPour

Si (conv1 < 10⁻⁴) et (conv2 < 10⁻⁴) faire

{ critère de convergence }

conv := vrai

FinSi

Jusqu'à conv := vrai

FinPour

FIN (d'Arsenic et Bore)

Résumé

Contribution à l'Étude de la Croissance des Cavités d'Hydrogène dans les Semi-conducteurs

Parmi les matériaux de base utilisés en microélectronique pour la fabrication de substrats innovants, le silicium sur isolant (SOI « Silicon On Insulator »), fabriqué par la technologie Smart Cut™, a réussi à tirer son épingle du jeu. Le SOI permet d'améliorer les performances des composants (transistors plus rapides, consommation d'énergie réduite). Cette technologie enchaîne plusieurs étapes clés, dont l'une est l'implantation ionique d'hydrogène. L'étape d'implantation est un procédé cher et, pour des raisons économiques, il est important d'en réduire le coût. Une solution est récemment apparue qui permet de diminuer la dose totale implantée en remplaçant l'implantation dans le but de réduire encore plus le d'hydrogène à forte dose par une Co-implantation d'hélium et d'hydrogène. celle-ci se base sur coût de production, une autre technique de fabrication est récemment développée, l'introduction de l'hydrogène dans le silicium par plasma hydrogénation en présence d'une couche sous contrainte. L'objectif de cette thèse consiste à étudier et à décrire la croissance des platelets de SiGe enfouit dans la matrice. d'hydrogène générées par l'implantation de l'hydrogène seul, générées par la Co-implantation de hydrogène/hélium et enfin générées par le plasma hydrogénation

Mots clé : précipitation de l'hydrogène, croissance des platelets, hydrogène, hélium, silicium, SiGe, semi-conducteurs, silicium sur isolant (SOI), Smart Cut™, implantation ionique, recuit thermique, plasma hydrogénation

Abstract

Contribution to the Study of Hydrogen platelets Growth in Semiconductors

Among the materials used in microelectronics for manufacturing advanced substrates, silicon on insulator (SOI improves performance component (transistors faster, lower Silicon On Insulator), manufactured by Smart Cut™ power consumption). This technology connects several key steps, which one is the hydrogen ion implantation. The implantation step is an expensive process and, for economic reasons, it is important to reduce the cost. A solution has recently emerged which reduces the total dose implanted by replacing the hydrogen high dose implantation. In order to further reduce the cost of production, another with co-implantation of helium and hydrogen. manufacturing technique is developed recently. This technique is based on the introduction of hydrogen in silicon. The objective of this thesis by plasma hydrogenation in the presence of a SiGe layer strained buried in the matrix. is to examine and describe the growth of hydrogen platelets generated by the implantation of hydrogen alone, generated by co-implantation of hydrogen to helium, and finally generated by the plasma hydrogenation

words: precipitation of hydrogen, growth of platelets, hydrogen, helium, silicon, SiGe Semiconductor, silicon **Key** on insulator (SOI), Smart Cut™, ion implantation, thermal annealing, plasma hydrogenation

ملخص

مساهمة في دراسة نمو تجاوييف الهيدروجين في المواد النصف موصلة

من بين المواد المستخدمة في مجال الإلكترونيات الدقيقة لتصنيع رقائق حديثة، "السليكون على عازل"، المصنعة بتقنية "سمارت كات" تمكنت من أن تستحوذ على مكانتها في المنافسة. "السليكون على عازل" يحسن الأداء للعناصر (الترانزستورات أسرع واستهلاك أقل للطاقة). هذه التكنولوجيا تتعلق بعدة خطوات رئيسية، زرع أيون الهيدروجين هو واحد من هذه الخطوات. الغرس هي عملية مكلفة و، لأسباب اقتصادية، ومن أجل الحد من التكاليف، برزت في الأونة الأخيرة الحل الذي يقلل من الجرعة الكلية المزروعة من خلال استبدال غرس الهيدروجين، مع ارتفاع جرعة، بغرس المشترك من الهليوم والهيدروجين. و من أجل زيادة خفض تكلفة الإنتاج أكثر، تم تطوير تقنية تصنيع أخرى في الأونة الأخيرة. وتستند هذه التقنية على إدخال الهيدروجين في سيليكون بواسطة "الهدرجة البلازما" مع وجود طبقة من "سي جي او" مضغوطة داخل المصفوفة. الهدف من هذه الأطروحة هو دراسة ووصف نمو صفائح الهيدروجين التي تم إنشاؤها بواسطة غرس الهيدروجين وحدها، التي تم إنشاؤها بواسطة غرس المشترك من الهيدروجين و هليوم، وأخيرا إنشاؤها من الهدرجة البلازما.

كلمات مفتاحية: ترسبات الهيدروجين، نمو الصفائح، الهيدروجين، الهليوم، السليكون، أشباه الموصلات، زرع الأيونات، الصلب الحرارية السليكون على عازل، الهدرجة البلازما