

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Larbi Tebessi - Tébessa
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département: Sciences de la Matière



MEMOIRE DE MASTER

Domaine: Sciences de la Matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux

Thème:

Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium

Présenté par:

Zerroukî soumaya & Bouhous nardjes

Devant le jury :

Boumali Abdelmalek	Pr	Université de Tébessa	Président
Saouane Izzeddine	M.A.A	Université de Tébessa	Rapporteur
Chaouche Yassine	M.C.B	Université de Tébessa	Examineur

Date de soutenance : 26/06/2019



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat
 (À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom: **Bouhous Nardjex Zerrouki Soumaya**

N° de carte d'étudiant: (1) **34017006/14** (2) **340329614/14**

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2018/2019**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: **Physique des matériaux**

Intitulé du mémoire: **Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium.**



Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.



Fait à Tébessa, le: **07/17/2019**

Signature des étudiants (es):

(1): (2):

2019 / 07 /

يوحوس نرجس

زروقي سمية

الموضوع : تعهد بتصحيح أخطاء المذكورة

نحن الطالبتان الموقعتان أنفسنا ، نتعهد ونقر إلى لجنة المناقشة أنه تم تصحيح الأخطاء الملاحظة من طرفكم لمذكورة
تخرج ماستر في فيزياء المواد يقنوا:

Modelisation de la diffusion des dopants
dans le silicium.

✍

يوحوس نرجس

زروقي سمية

الأستاذ الدكتور
سلو تساي

الأستاذ الرئيسي
يوحوس نرجس

الخبيرة الوطنية
بنوات عن القابلية


République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Larbi Tebessi - Tébessa
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département: Sciences de la Matière



MEMOIRE DE MASTER

Domaine: Sciences de la Matière

Filière: Physique

Option: Physique des matériaux

Thème:

*Modélisation de la diffusion des dopants
dans le silicium*

Présenté par:

Zerrouki soumaya & Bouhous nardjes

Devant le jury :

Boumali Abdelmalek	Pr	Université de Tébessa	Président
Saouane Izzeddine	M.A.A	Université de Tébessa	Rapporteur
Chaouche Yassine	M.C.B	Université de Tébessa	Examineur

Date de soutenance : 26/06/2019

Résumé

Le travail de ce mémoire est consacré à la modélisation d'une étape particulière des procédés de fabrication mis en œuvre en microélectronique : la diffusion des dopants.

Ce travail a consisté à étudier les phénomènes physiques responsables de la diffusion, la compréhension physique des phénomènes est nettement améliorée grâce aux outils de la modélisation.

Nous avons étudié un procédé technologique de la fabrication de dispositif en silicium, voir comment se fait la distribution des atomes implantés sur la profondeur en variant les paramètres de la dose, de l'énergie d'implantation, là où et la durée de recuit thermique.

Nous avons étudié un modèle des diffusions le bore et l'arsenic dans le silicium ce modèle tient compte du mécanisme lacune des diffusions, qui permet d'expliquer les paramètres influant sur la diffusion.

Mots-clés : silicium, dopants diffusion

Abstract

The work of this memoir is dedicated to the manufacturing processes implemented in microelectronics: the diffusion of the dopants.

This work consists in studying the physical phenomena responsible for the diffusion, the physical comprehension is clearly improved thanks to the modeling tools.

We studied a technological process of devices fabrication of implanted atoms on the depth is done by varying the parameters of the dose, the energy of implantation, the order and duration of thermal annealing.

We studied a model of diffusion Boron and Arsenic in Silicon.

This model takes into account lacunary mechanism of diffusion, which makes it possible to explain the parameters influencing the diffusion

Key-words : Silicon, doping, diffusion

المُلخَص

يعتمد عمل هذه المذكرة على نمذجة مرحلة معينة من عمليات التصنيع في الالكترونيات الدقيقة انتشار ذرات التطعيم .

هذا العمل يعتمد على دراسة الظواهر الفيزيائية المسؤولة عن الانتشار ، الفهم الفيزيائي لهذه الظواهر تم تحسينه بصراحة بفضل أدوات النمذجة .

درسنا عملية تكنولوجية لتصنيع الأجهزة في السليسيوم ، لنرى كيف يتم توزيع الذرات المزروعة على العمق من خلال تغيير معايير الجرعة ، طاقة الزرع ، أو مدة التلدين الحراري

درسنا نموذج انتشار البور و زرنيخ في السليسيوم

يأخذ هذا النموذج بعين الاعتبار آلية الانتشار التي تسمح بشرح و تفسير العوامل المؤثرة في الانتشار.

الكلمات- المفتاحية : السليسيوم ، التطعيم ، الانتشار .

Remerciement

En tout premier lieu, nous remercions le bon dieu ; tout puissant de m'avoir donné la force et le courage de mener

Bien ce modeste travail.

Nous remercions énormément notre encadreur

***Dr Saouane Izzeddine** malgré Aucune remercié, aucun mot ne pourrait exprimer à vous la gratitude, le respect, l'estime et le remercié pour la confiance qu'elle nos accordées.*

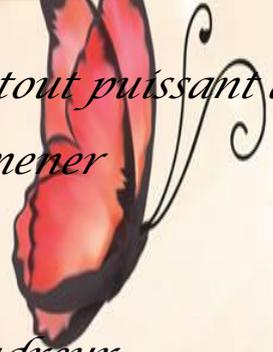
Nous tenons remercier votre compétence professionnelle incontestable ainsi que vos qualités humaines.

Vous êtes et vous serez pour nous l'exemple dans l'exercice de la profession.

*Nous tenons remercier aussi a **Pr Boumali Abdelmalek** d'avoir accepté d'être président de jury.*

*Nous remercions aussi **Dr Chaouche Yassine** de nos honoré en acceptant d'examiner notre travail.*

Nous remercions aussi tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.



Dédicace

A tous ceux qui ont semé l'optimisme et l'espoir dans toutes les étapes de mes études et m'ont donné des idées.

➤ *Je suis heureuse de dédier ce travail.*

Spécialement à mes chers parents : (Mohammed el chérif & Sabah)

Loue de vous, votre soutien et encouragement m'ont toujours donne la force pour prospérer dans ma vie, je vous remercie pour les offerts fournis jours et nuits, pour mon éducation.

- *Mon Père : quand je porte avec fierté votre nom, je demande à dieu de Prolonger votre âge et votre santé et de garder vos mots étoiles guides par la longévité*
- *Ma mère : c'est ma raison existentielle dans la vie, je demande à dieu de prolonger votre âge et votre santé, et pour garder l'ange de ma vie et le symbole de l'amour et de tendresse*
- *en plus je félicité*

A Mes frères : (Issam, Hichem)

A Mes Adorables sœurs : (Sameh, Nadia, Radhia)

Sont toujours à mes côté, pour m'ont courage.

A Mes Amies : (nardjes, hassna, nour, hanen, Farida, safa, mariem)

Merci pour votre grand cœur et votre soutien et les bons souvenirs

Salutation

SOUJAVA

Dédicace

Du profond de mon cœur je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chérés :

➤ *A mes chérés parents :*

➤ *Père : Mohammed*

➤ *Mère : Layla*

Aucune dédicace ne serait exprimer mon respect,

Mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices

que vous avez pour mon instruction et mon bien être.

Je vous remercie pour le soutien et l'amour que vous me portez.

Je mets entre vous mains le fruit de vos innombrables sacrifices,

Merci d'être mes parents.

➤ *Je dédie aussi ce travail*

➤ *à mes chérés et adorés frères (Hocine, Khaled, Rachid, Rabeh) et mes sœurs (Nawel, Yasmine, Asma, Izdihar, howayda)*

Qui par leur présence et encouragement on a pu surmonter tous les obstacles.

A mes amies de toujours (Soumaya, Safa, Hanen, Nour,

Farida, Mariem, Amira)

Pour les bons souvenirs et le temps qui nous avons

passé ensemble

Salutation

Nardjes

Table des matières

Liste des figures

List des symboles

List des tableaux

Introduction Générale1

Chapitre I : Diffusion des dopants dans le silicium

I.1. Introduction	3
I.2. Equations de diffusion	3
I.2.1. Equation de Fick	3
I.2.2. Effet du niveau de Fermi.....	6
I.2.3. Solutions de l'équation de diffusion.....	7
I.2.3.1. Couche mince superficielle ou en sandwich.....	7
I.2.3.2. Concentration superficielle constant).....	7
I.2.3.3. La distribution initiale est dite infinie (Placage).....	8
I.3. Défauts ponctuels dans le silicium.....	8
I.3.1. Cas de la lacune	8
I.3.2. Cas de l'interstitiel.....	9
I.3.3. Cas de la substitution	9
I.3.4. Défauts non chargés.....	10
I.3.5. Défauts chargés.....	10
I.4. Réaction entre défauts ponctuels.....	11
I.5. Les mécanismes de diffusion	13
I.5.1. Le mécanisme lacunaire.....	13
I.5.2. Mécanismes interstitiels.....	14
I.6. Conclusion.....	16
I.7. Références.....	17

Chapitre II : Modélisation de la diffusion des dopants (Arsenic, Bore)

II.1. Introduction.....	20
II.2. Le calcul du flux.....	20
II.2.1. Coefficient de diffusion.....	24
II.3. Résolution numérique de l'équation de diffusion en régime instationnaire.....	27
II.3.1. Méthode des différences finis.....	27
II.3.1.1. Discrétisation spatiale.....	27
II.3.1.2. Discrétisation temporelle.....	28
II.3.1.3. Schémas numériques pour la résolution de l'équation de la diffusion....	29
II.3.2. Résolution approchée de l'équation de diffusion.....	30
II.4. Conclusion.....	31
II.5. Référencés.....	32

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1.Introduction.....	35
III.2. Coefficient de diffusion.....	35
III.3. Etude de l'influence des paramètres technologique sur la diffusion.....	36
III.3.1 Diffusion à partir de sources solides ou de dose en surface.....	36
III.3.1.1.Diffusion du bore.....	36
a)- Influence de la température.....	37
b)- Influence de la durée de recuit.....	38
c)- Influence de la dose.....	39
III.3.1.2.Diffusion de l'Arsenic (As).....	40
a)- L'influence de température	40
b)- Influence de la durée de recuit	41
c)- Influence de la dose.....	42

III.3.2. Diffusion à partir de sources gazeuses.....	42
III.3.2.1. Diffusion de Bore.....	43
a)- Influence de température.....	43
b)- Influence de la durée de recuit.....	44
c)- Influence de la dose.....	45
III.3.2.2. Diffusion de l'Arsenic.....	46
a)- Influence de temperature.....	46
b)- Influence de la durée de recuit.....	47
c)- Influence de la dose.....	48
III.4. Conclusion.....	49
III.5. Référencés.....	50
Conclusion générale.....	51

Liste des figures

<i>Figure N°</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
------------------	--------------	-------------

Chapitre: I

I.1.	: Diffusion unidirectionnelle en régime transitoire	5
I.2.	: Défaut ponctuel: cas de lacune	8
I.3.	: Défaut ponctuel: cas de l'interstitiel	9
I.4.	: Défaut ponctuel: Cas de la substitution	10
I.5.	: La migration du dopant selon le mécanisme lacunaire	14
I.6.	: La migration d'un dopant via le mécanisme interstitiel par paire	15
I.7.	: La migration d'un dopant via le mécanisme de kick-out	15

Chapitre: II & III

II.1.	: Discrétisation de l'espace et du temps	29
III.1.	: Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés dans micro-électronique	35
III.2.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom .cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes températures	37
III.3.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom.cm ⁻³) après recuit à 800°C pour (5.15.20 et 30 min)	38
III.4.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom.cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes doses	39
III.5.	: Profils de diffusion de l'arsenic (10^{15} atom .cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes températures	40
III.6.	: Profils de diffusion de l'arsenic (10^{15} atom.cm ⁻³) après recuit à 800°C pour (5.15.20 et 30 min)	41
III.7.	: Profils de diffusion de l'arsenic (10^{15} atom .cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes doses	42
III.8.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom .cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes températures	43
III.9.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom.cm ⁻³) après recuit à 800°C pour (5.15.20 et 30 min)	44
III.10.	: Profils de diffusion de bore (10^{14} atom.cm ⁻³) après recuit 5 min pour différentes doses	45

III.11.	:	<i>Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom) après recuit 5min pour différentes températures.</i>	46
III.12.	:	<i>Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuits à 800°C pour (5, 15,20 et 30min).</i>	47
III.13.	:	<i>Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuit à 5min pour les différentes doses.</i>	48

Liste des symboles

<i>Symboles</i>	<i>Sens physique</i>	<i>Unité</i>
J	: Le flux	$(\text{cm}^2 \text{s}^{-1}) / (\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
A	: Espèce diffusante	cm
C	: La concentration	atm/ cm^3
K_B	: constante de Boltzmann	eV/K
P	: Le plan	m^2
V	: Différence de potentiel	Volt
N	: la concentration d'électrons libres	
X^γ	: γ l'état de charge de l'espace X	
t	: temps	
C_s	: Concentration superficiel	
erf	: fonction d'erreur	
X	: Epaisseur	cm
Q	: La charge	Colomb
T	: La Température	K°
$\langle v \rangle$: La Vitesse moyenne	m/s
E_F^i	: énergie de fermi intrinsèque	eV
E^X	: est l'énergie du défaut ponctuel	
θ_{X^0}	: un coefficient du défaut dans le réseau	
$\Delta G_{X^0}^f$: L'enthalpie libre de formation du défaut neutre X^0	J
C_s	: la concentration volumique de sites disponibles	

ϵ	: Constante diélectrique du silicium	
H	: le facteur d'exaltation	
p, n	: sont les concentrations en porteurs libres, électrons et trous	
H	: Le facteur d'exaltation	
eff	: effectif	
E_a	: L'énergie d'activation	
D_0	: Le terme pré-exponentiel	cm^2/s
Z	: Nombre de porteur de charge	N/cm^2
E	: Champ électrique	N/C
Ψ	: Le potentiel électrique	
a_i	: Distance la minimale entre la lacune et l'impureté ionisée la plus proche	
N_X / N_T	: le nombre de nœuds	
S	: dose totale constante	

Liste des tableaux

N° de tableau	Titre	Page
III.1.	<i>Résultats de simulations de diffusion de Bore pour différentes températures.</i>	37
III.2.	<i>Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de diffusion du Bore.</i>	38
III.3.	<i>Effet de la dose sur la concentration et la profondeur du Bore.</i>	39
III.4.	<i>Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de l'Arsenic.</i>	41
III.5.	<i>Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de l'Arsenic.</i>	41
III.6.	<i>Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de l'Arsenic</i>	42
III.7.	<i>Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de Bore.</i>	44
III.8.	<i>Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de Bore</i>	44
III.9.	<i>Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de Bore.</i>	45
III.10.	<i>Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de l'Arsenic.</i>	46
III.11.	<i>Effet de la durée de recuits sur la concentration et la profondeur de l'Arsenic.</i>	47
III.12.	<i>Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de l'Arsenic.</i>	48

Introduction générale

La fabrication des dispositifs électroniques est l'ensemble des procédés mécaniques, physiques et chimiques de traitement des différents matériaux semi-conducteurs, isolants et métaux, mais la plus part des dispositifs fonctionnent grâce à des semi-conducteurs dopé de types p et n.

La diffusion et l'implantation ionique sont les procédés de dopage les plus importants en technologie des microstructures.

Les structures réalisées par ces techniques ont des caractéristiques bien définies : la diffusion produit des jonctions profondes alors que l'implantation ionique produit des jonctions peu profondes, les deux procédés sont complémentaires.

Parmi les dopants les plus utilisés en microélectronique le bore et l'arsenic puis le phosphore et l'indium.

L'élaboration de modèles physiques dans le domaine de la fabrication de composants micro électroniques est devenue la clé du développement et de l'amélioration de ces composants.

L'objectif de ce travail est de construire un modèle basé entièrement sur la physique de la diffusion des dopants dans le silicium au cours de recuit peu la réalisation des jonctions.

Ce travail 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. Dans ce travail nous étudions trois chapitres comme suit :

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

Le deuxième chapitre est réservé à l'étude de la diffusion de l'arsenic et du bore dans le silicium, nous proposons un modèle mathématique qui permet déterminer les concentrations de dopants, et les coefficients de diffusion.

Dans le troisième chapitre nous nous consacrons aux résultats et discussion à l'aide du simulateur élaboré. En fin, nous terminerons ce mémoire par une conclusion générale, en suite, nous évoquerons les perspectives relatives à de possible future axes de recherche sur ce sujet.

Chapitre I :

Diffusion des dopants dans le silicium

I.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. 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.

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.... [1].

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

I.2. Equations de diffusion

Les équations de la diffusion sont avant tout basées sur les équations classiques établies par Fick. Même si le modèle comporte une multitude d'équations plus complexes que ces simples équations, il faut garder à l'esprit qu'elles constituent les fondements du modèle.

Adolphe Fick établi vers 1856 [2].

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

I.2.1. Equation de Fick

Le silicium étant de structure cristalline, en l'absence de déformation, le coefficient de diffusion D_A d'une espèce diffusante A peut être considéré comme un scalaire ne dépendant que de la température. La première loi de Fick traduit la dépendance entre le flux J d'espèces

diffusantes A et sa concentration C , cette loi s'écrit :

$$\vec{J} = -D_A \cdot \vec{\nabla}(C) \quad (\text{I.1})$$

Le flux étant généralement exprimé en atomes par centimètre carré et par seconde ($cm^{-2}.s^{-1}$) et les concentrations en nombre d'atomes par centimètre cube, D_A s'exprime alors en $cm^2.s^{-1}$. Le signe moins de l'équation précédente traduit simplement le fait que la diffusion a lieu des zones à fortes concentrations vers les zones à faibles concentrations.

Le coefficient D_A suit généralement une loi d'Arrhenius [3]:

$$D_A = D_0 \exp\left(\frac{-E_a}{KT}\right) \quad (\text{I.2})$$

Où: E_a est l'énergie d'activation et D_0 le terme pré-exponentiel.

En fait l'écoulement de particules dans une direction donnée peut avoir deux origines, l'une est bien le gradient de concentration, mais l'autre est l'action d'une force extérieure, ou force de transport, sous l'effet de laquelle les particules se déplacent avec une certaine vitesse moyenne $\langle v \rangle$ donnant ainsi naissance à un flux $\langle v \rangle \cdot C$. D'où l'expression générale [4]:

$$J = -D_A \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + \langle v \rangle \cdot C \quad (\text{I.3})$$

Plaçons-nous dans un système unidirectionnel et considérons le flux de particules d'une certaine espèce. Les particules peuvent être des molécules, des atomes ou des ions, des défauts ponctuels, des électrons libres ou des trous électroniques, etc...

$$J = -D_A \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{I.4})$$

Le flux en chaque point varie avec le temps, il faut compléter l'équation de Fick par une équation de bilan. Pour des espèces conservatives, c'est l'équation de continuité:

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

Considérons (Fig. I.1) un cylindre parallèle à la direction de diffusion et de section unité, soit un petit volume limité par les plans P et P' d'abscisses x , $x + dx$ à travers lesquels les flux de particules dirigés de gauche à droite valent respectivement $J(x)$ et $J(x + dx)$.

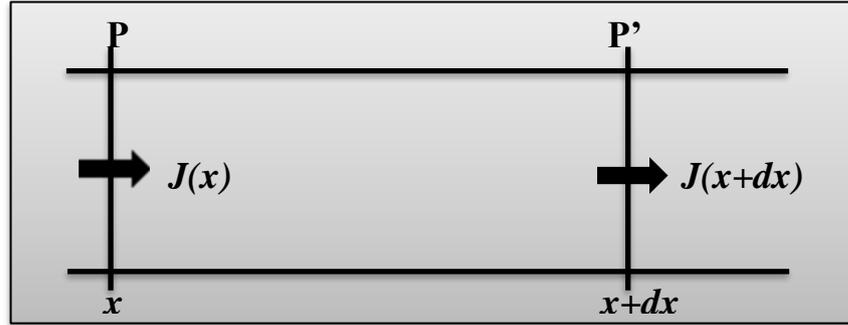


Fig. I.1. Diffusion unidirectionnelle en régime transitoire.

La quantité de matière accumulée pendant le temps dt dans le cylindre limité par P et P' vaut :

$$[J(x) - J(x + dx)]. dt = -\frac{\partial J}{\partial x} dx. dt \quad (\text{I.6})$$

Par application de la formule des accroissements finis. Cette quantité est égale à la variation du nombre de particules dans le volume $l dx$, soit:

$$[C(t + dt) - C(t)]. dx = \frac{\partial C}{\partial t} dt. dx \quad (\text{I.7})$$

En égalant les deux expressions :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad (\text{I.8})$$

Donc :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\langle v \rangle C) \quad (\text{I.9})$$

L'équation générale de la diffusion est une équation aux dérivées partielles du second ordre. Elle ne peut être résolue analytiquement tant que D et v dépendent de la concentration, et donc de x et t . Mais elle se simplifie notablement si D et v sont indépendants de la concentration. L'équation (I.9) s'écrit alors [5]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \langle v \rangle \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{I.10})$$

En l'absence de terme de transport, elle se réduit à:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (\text{I.11})$$

Cette équation est souvent qualifiée improprement de seconde loi de Fick. Il existe des expressions analytiques pour les solutions des équations (I.10) et (I.11) différentes, suivant les conditions initiales et aux limites du problème.

Ces solutions expriment la forme du profil de diffusion $C(x, t)$ et permettent de calculer le coefficient de diffusion D_A à partir des profils expérimentaux.

I.2.2. Effet du niveau de Fermi

Un cas important qui nous intéresse particulièrement, est celui d'une espèce chargée en présence d'un champ électrique. Dans ces conditions, la vitesse d'entraînement est donnée par [6]:

$$v = \pm \mu E \quad (\text{I.12})$$

Ainsi, lorsque la concentration de cette espèce chargée est variable, le gradient de concentration va impliquer nécessairement l'existence d'un gradient de charges libres. Afin de maintenir l'équilibre (absence de courant électrique), le flux d'électrons induit par ce gradient de charges est équilibré par l'établissement d'un champ électrique donné par la formule classique :

$$E = \frac{-KT}{q} \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{I.13})$$

Avec: n représentant la concentration d'électrons libres.

On obtient alors :

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \pm \mu \frac{-KT}{q} \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \cdot C \quad (\text{I.14})$$

La mobilité peut s'exprimer en fonction de la diffusivité en utilisant la relation d'Einstein :

$$\mu = \frac{qD}{KT} \quad (\text{I.15})$$

On obtient ainsi:

$$J_{X^\gamma} = -D_{X^\gamma} \frac{\partial [X^\gamma]}{\partial x} + \gamma D_{X^\gamma} \frac{[X^\gamma]}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{I.16})$$

Avec: γ l'état de charge de l'espace X .

Finalement, la relation (I.16) nous donne l'équation générale du flux d'une particule soumise à un gradient de concentration et à un champ électrique induit.

I.2.3. Solutions de l'équation de diffusion

I.2.3.1. Couche mince superficielle ou en sandwich

L'espèce diffusante est déposée sous forme d'une couche mince à la surface de l'échantillon, ou en sandwich entre deux échantillons identiques [7].

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

Où: δ désigne la distribution de Dirac, $\forall t, \int_0^{\infty} C dx = Q$ ou $\int_{-\infty}^{\infty} C dx = Q$

Q : est égal à la quantité d'atomes déposés par unité d'aire.

Les limites d'intégration sont $0, +\infty$ pour la couche superficielle, $-\infty, +\infty$ pour le sandwich. La solution analytique s'écrit pour le sandwich :

$$C(x, t) = \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}}\right) \exp\left(-x^2/4Dt\right) \quad (I.17)$$

Il est intéressant de voir comment ce profil est modifié par l'action d'une force de transport. La solution de l'équation correspondante s'écrit :

$$C(x, t) = \left(\frac{Q}{2\sqrt{\pi Dt}}\right) \exp\left(-(x - \langle v \rangle t)^2/4Dt\right) \quad (I.18)$$

I.2.3.2. Concentration superficielle constante (diffusion dans un solide semi-infini)

- Conditions initiales : $t = 0, x > 0, C(x, 0) = C_0$

- Conditions aux limites : $\forall t > 0, x = 0, C(0, t) = C_s$

La solution s'écrit :

$$\frac{(C-C_s)}{(C_0-C_s)} = \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (I.19)$$

- **Désorption:** $C_s = 0$

$$\frac{(C)}{(C_0)} = \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (I.20)$$

- **Absorption:** $C_0 = 0$

$$\frac{(C-C_s)}{(-C_s)} = \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (I.21)$$

I.2.3.3. La distribution initiale est dite infinie (Placage)

$t = 0: x < 0 C = C_2$

$x > 0 C = C_1$

Le placage on colle deux matériaux semi-infinis l'un contre l'autre.

Par des raisons de symétrie la concentration dans le plan de l'interface initiale ($x = 0$) reste constante et égale à $\frac{1}{2}(C_1 + C_2)$ [8].

La solution (I.9) permet d'écrire avec $C_S = \frac{1}{2}(C_1 + C_2)$:

$$\frac{c-c_1}{c_2-c_1} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (\text{I.22})$$

Ou : $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$

I.3. Défauts ponctuels dans le silicium

D'un point de vue cristallographique, le silicium monocristallin orientée {100}, actuellement le matériau semi-conducteur le plus souvent utilisée en micro-électronique, possède une structure cubique diamant avec un paramètre de maille égale à 5.43°A . Sa densité atomique est de $5.1022 \text{ at.cm}^{-3}$ et la distance intra-atomique est de 2.35°A [9].

Les structures réelles comportent de nombreux défauts, c'est d'autant plus important que certaines propriétés dépendent de ces défauts : le dopage des semi-conducteurs et la création des composants à base de jonctions p-n. Ces défauts peuvent être classés comme suit [10]:

I.3.1. Cas de la lacune

Les lacunes correspondent à un vide laissé dans la structure sur un site normalement occupé par un atome (Figure I.2).

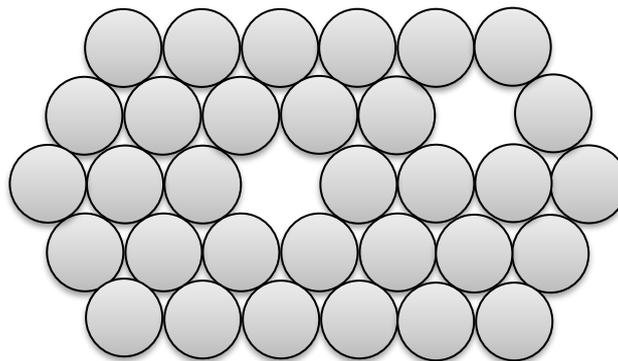


Fig.I.2. Défaut ponctuel : cas de lacune

La lacune dans le silicium constitue le défaut le plus simple et peut-être le mieux connu grâce aux nombreux travaux réalisés. Pour former une lacune, quatre liaisons doivent être brisées

avec les atomes voisins immédiats de l'atome déplacé. Ces liaisons pendantes peuvent former de nouvelles liaisons entre elles, entraînant des déplacements atomiques des proches voisins. Les liaisons nouvellement formées et les déplacements atomiques qui y sont associés, dépendent de l'état de charge de la lacune, c'est à dire du nombre d'électrons participant aux liaisons. Dans le cas du silicium, la lacune possède différents états de charge (la lacune doublement ionisée positivement V^{++} , la lacune simplement ionisée positivement V^+ ...) [11,12].

I.3.2. Cas de l'interstitiel

Les atomes interstitiels sont des atomes en surnombre dans une structure ou bien des impuretés placés sur des sites normalement vides (Figure I.3).

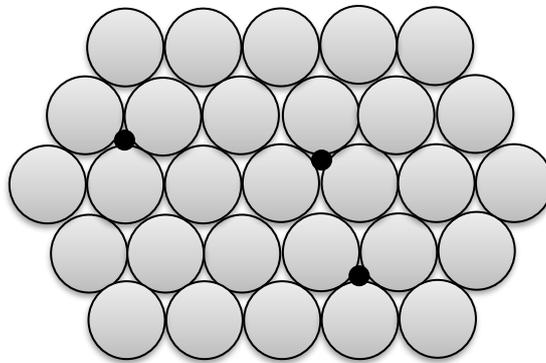


Fig.I.3. défaut ponctuel: cas de l'interstitiel

L'interstitiel ou l'auto-interstitiel est le deuxième défaut ponctuel dans le silicium. Les auto-interstitiels peuvent migrer avec une forte mobilité même à très basse température [13]. Donc ils peuvent se déplacer sur une longue distance avant de se recombinaison avec une lacune, ou d'être capturés par une impureté.

I.3.3. Cas de la substitution

Dans le cas où un atome occupe un site normalement occupé par un atome de nature chimique différente, on parle d'impureté substitutionnelle (Figure.I.4).

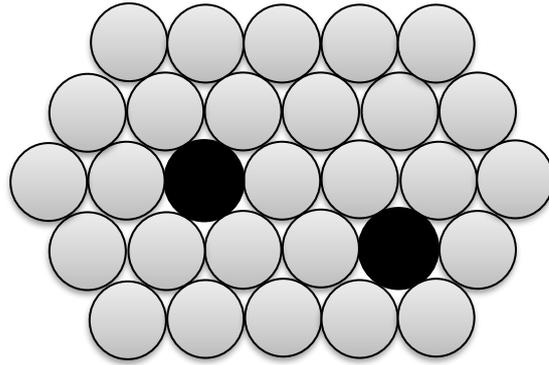


Fig.I.4. Défaut ponctuel: Cas de la substitution.

Lorsqu'on introduit dans le réseau des atomes étrangers, de plus gros diamètre, ne pouvant pas se mettre en position interstitielle, ils doivent nécessairement prendre la place d'atomes du réseau. Ces nouveaux atomes sont en substitution [11].

I.3.4. Défauts non chargés

La concentration C_{X^0} de défauts non chargés (neutres), à l'équilibre (tous les flux sont nuls car ils s'équilibrent), est donnée par l'équation I-16. Cette concentration est indépendante du niveau de Fermi dans le silicium [11].

$$C_{X^0} = \theta_{X^0} \cdot C_S \cdot \exp\left(\frac{-\Delta G_{X^0}^f}{KT}\right) \quad (\text{I.23})$$

Avec:

θ_{X^0} : est un coefficient du défaut dans le réseau.

$\Delta G_{X^0}^f$: L'enthalpie libre de formation du défaut neutre X^0 .

C_S : est la concentration volumique de sites disponibles dans le réseau cristallin du silicium.

I.3.5. Défauts chargés

Les défauts ponctuels peuvent exister sous plusieurs états de charge électrique. Nous considérons en général que les auto-interstitiels peuvent avoir trois états de charge stables (I^0 , I^+ et I^-) et que les lacunes existent sous la forme de quatre états de charge (V^0 , V^- , V^{2-} , V^{2+}).

Chaque espèce chargée résulte d'une réaction du type équation (I.24) :



Où: X représente un défaut ponctuel (I , V) dans son état de charge j , e est soit un électron ($i = -1$) ou un trou ($i = +1$). On considère généralement, que les réactions mettant en jeux des

électrons (ou trous) sont plus rapides que les réactions chimiques (ions). Par conséquent, l'équilibre de ces réactions est atteint beaucoup plus rapidement que pour l'ensemble des autres réactions des différents mécanismes de diffusion. La concentration d'un défaut ponctuel chargé s'exprime à l'équilibre (équations I.25), en fonction de C_{X^0} , du niveau de Fermi et des concentrations locales des porteurs [11]:

$$\begin{aligned}
 C_{I^-} &= C_{I^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{I^-} - E_F^i}{KT}\right) \left(\frac{n}{n_i}\right) \\
 C_{I^+} &= C_{I^0} \cdot \exp\left(\frac{E^{I^+} - E_F^i}{KT}\right) \left(\frac{p}{n_i}\right) \\
 C_{V^+} &= C_{V^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{V^+} - E_F^i}{KT}\right) \left(\frac{n}{n_i}\right) \\
 C_{V^{2-}} &= C_{V^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{V^{2-}} + E^{V^-} - 2E_F^i}{KT}\right) \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \\
 C_{V^{2+}} &= C_{V^0} \cdot \exp\left(\frac{E^{V^{2+}} + E^{V^+} - 2E_F^i}{KT}\right) \left(\frac{p}{n_i}\right)^2
 \end{aligned} \tag{I.25}$$

Et sachant que:

$$\frac{n_i}{p} = \frac{n}{n_i} = \exp\left(\frac{\Delta E_F}{KT}\right) \tag{I.26}$$

Où E_F^i est l'énergie de Fermi intrinsèque, E^X est l'énergie du défaut ponctuel X dans le cristal, ΔE_F est la différence d'énergie de Fermi, n_i est la densité de porteurs intrinsèques, n et p sont les concentrations en porteurs libres, électrons et trous respectivement.

I.4. Réaction entre défauts ponctuels et les impuretés :

Les réactions entre défauts ponctuels peuvent être classées en quatre catégories, les réactions de formation de pair, les réactions de dissociation, les réactions de changement de site et la réaction de recombinaison. Les réactions suivantes dépendent de la charge du défaut et de celle du dopant. [12].

Pour les réactions de formation de pair, un dopant en site substitutionnel (As) peut réagir avec les défauts ponctuels pour former les défauts associés : paires dopants-auto-interstitiels (AI , équation I.27), et paires dopants-lacunes (AV , équation I.28).



Pour les réactions dissociatives, la paire dopant-défaut se dissocie pour donner un dopant en site substitutionnel (équations I.29 et I.30).



La réaction de Frank-Turnbull (FT), (équation I.29), permet la dissociation d'une paire dopant-auto-interstitiel avec une lacune pour donner un dopant en site substitutionnel. Une autre réaction que nous appellerons réaction de dissociation (DM, Dissociative Mechanism en anglais), (équation I.30), permet la dissociation d'une paire dopant-lacune avec une auto interstitielle [13].

Pour les réactions de changement de site, le dopant s'associe avec un défaut ponctuel pour changer de site (équations I.31 noté arbitrairement *KI* et l'équation I.32 noté *KO*, Kick-Out en anglais).



La dernière réaction que nous considèrerons, est la « réaction de recombinaison » (équation I.33 noté arbitrairement *BR*) entre une lacune et un interstitiel qui entraîne la « réparation » du réseau cristallin. Où $\langle 0 \rangle$ dénote un atome de silicium sur un site du réseau cristallin [13].



Si nous ne sommes pas à l'équilibre, nous avons besoin de prédire l'évolution de la concentration de défauts avec le temps. Les réactions nous permettent de calculer les concentrations de défauts en fonction du temps si on connaît les concentrations initiales. On définit des taux de réaction. Ce sont, de façon générale, des termes cinétiques de génération recombinaison, (*G-R*), de chacune des réactions hors équilibre écrites précédemment (équations I.34). K_f et K_r sont les coefficients des réactions dans les sens direct et inverse des équations de réaction considérée précédemment [13].

$$\begin{aligned}
(G - R)_{IM} &= K_{IM}^f C_I C_{A_s} - K_{IM}^r C_{AI} \\
(G - R)_{VM} &= K_{VM}^f C_V C_{A_s} - K_{VM}^r C_{AV} \\
(G - R)_{FT} &= K_{FT}^f C_V C_{AI} - K_{FT}^r C_{A_s} \\
(G - R)_{DM} &= K_{DM}^f C_I C_{AV} - K_{DM}^r C_{A_s} \\
(G - R)_{KI} &= K_{KI}^f V A_i - K_{KI}^r C A_s \\
(G - R)_{KO} &= K_{KO}^f I A_s - K_{KO}^r A_i \\
(G - R)_{BR} &= K_{BR} (C_I C_V - C_I^* C_V^*)
\end{aligned} \tag{I.34}$$

Où C est la concentration de l'espèce en indice, C^* est la concentration de l'espèce en indice à l'équilibre thermodynamique, K_f et K_r sont les coefficients des réactions définis en indice dans les sens direct et inverse respectivement, K_{GR} est le coefficient de génération recombinaison de la recombinaison des défauts ponctuels I et V [17].

À l'équilibre $(G - R) = 0$ et le rapport $\frac{K_r}{K_f}$ est égal à une constante. On retrouve donc les équations d'équilibre I.25.

I.5. Les mécanismes de diffusion

Les dopants sont des impuretés dont la configuration stable se situe sur des sites substitutionnels du réseau. Lorsque ces impuretés se positionnent sur un site dédié au silicium, elles deviennent actives et peuvent alors jouer leur rôle de dopant. Cependant la diffusion de ces impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels et intrinsèques du silicium. Ces défauts sont soit les lacunes, soit des auto-interstitiels ce qui donne lieu à deux types de mécanismes élémentaires de diffusion que nous allons maintenant présenter.

I.5.1. Le mécanisme lacunaire

La diffusion lacunaire pure (sans couplage) n'est possible que si l'impureté se présente en position de premier voisin d'une lacune. La diffusion s'effectue par échange de sites entre l'impureté et la lacune. Dans ce cas, cette lacune peut ensuite s'éloigner de l'atome d'impureté par échange avec les atomes de silicium voisins. Le processus doit alors se renouveler pour que l'impureté dopante effectue un saut supplémentaire. La diffusion des lacunes est dans le sens opposé à la diffusion des atomes. Ce mécanisme lacunaire pur est décrit par la figure I-5. Il est par exemple responsable de la diffusion des espèces substitutionnelles dans les métaux [14]

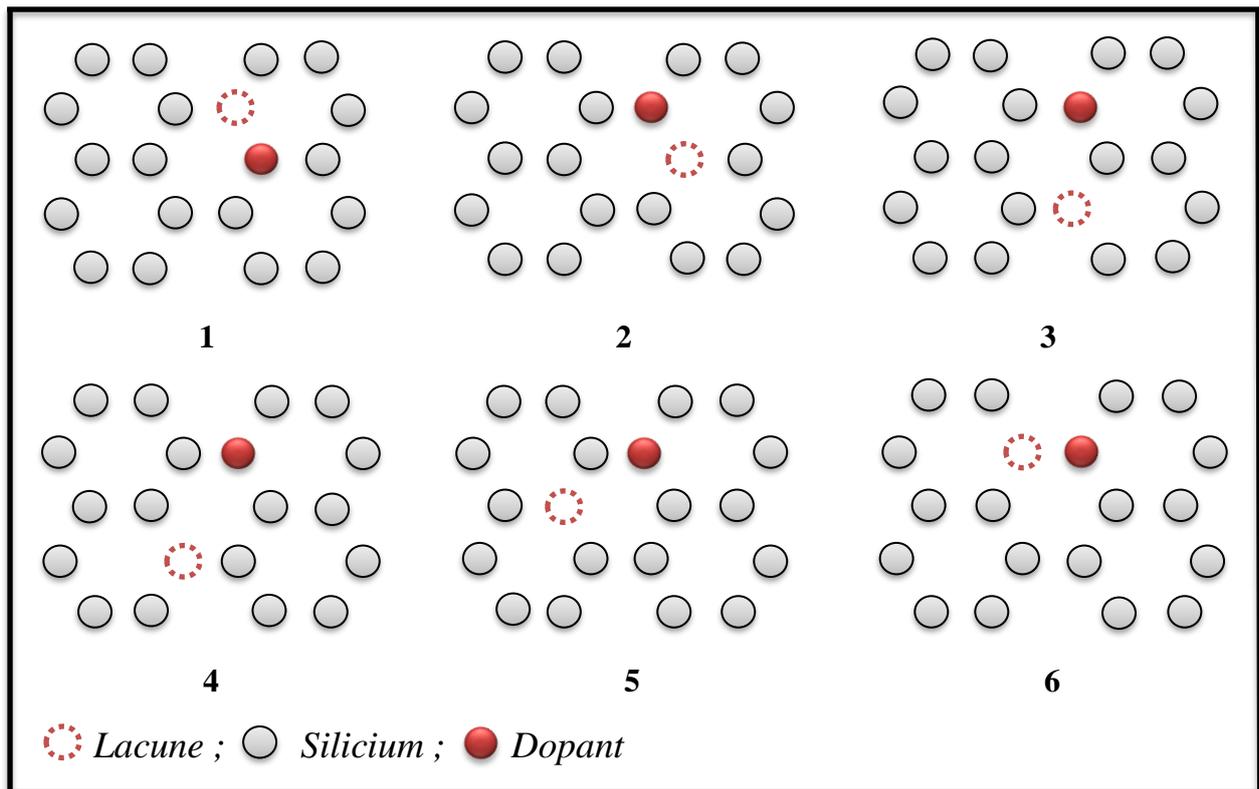


Fig.I.5. La migration du dopant selon le mécanisme lacunaire.

Le mécanisme est légèrement différent dans le silicium. La lacune reste liée à l'impureté (avec couplage) et c'est le complexe dopant-lacune qui diffuse en tant que tel dans le réseau cristallin du silicium [14]. La lacune diffuse dans la même direction que l'atome. En effet, après un premier échange de position, en raison de la forte énergie d'interaction existante entre la lacune et le dopant, la lacune peut se déplacer le long de l'hexagone pour revenir de l'autre côté du dopant et ainsi permettre un nouveau saut. Le flux de dopants, qui en résulte, se dirige dans la même direction que le flux de lacunes. Ce mécanisme nécessite la formation de paires dopant-lacune AV à travers la réaction notée VM (équation I-20).

I.5.2. Mécanismes interstitiels

Un second mécanisme intervenant dans la diffusion des impuretés dopantes utilise l'auto interstitielle de silicium. La diffusion peut s'effectuer au travers de la paire dopant-auto interstitiel (Figure I.6) [14].

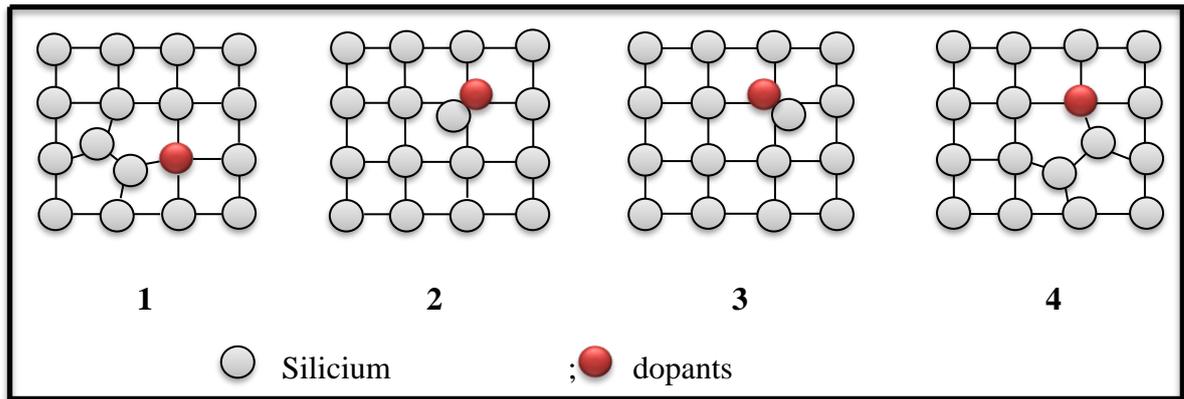


Fig. I.6. La migration d'un dopant via le mécanisme interstitiel par paire.

La figure I-6 illustre le mécanisme de diffusion par paire assistée par les auto-interstitiels. Quand un auto-interstitiel arrive au voisinage d'une impureté substitutionnelle, il peut interagir avec elle pour former une paire dopant-auto-interstitiel.

La formation des paires dopant-auto interstitiel AI est gérée par la réaction IM (Interstitial Mechanism en anglais), équation I-19, et la dissociation de ces paires dépend de la réaction FT, équation I-21.

Un autre mécanisme de diffusion qui utilise des auto-interstitiels a été proposé. Ce mécanisme est illustré sur la figure I-7. Il a été proposé par Gösele *et al.* sous le nom de « kick-out ».

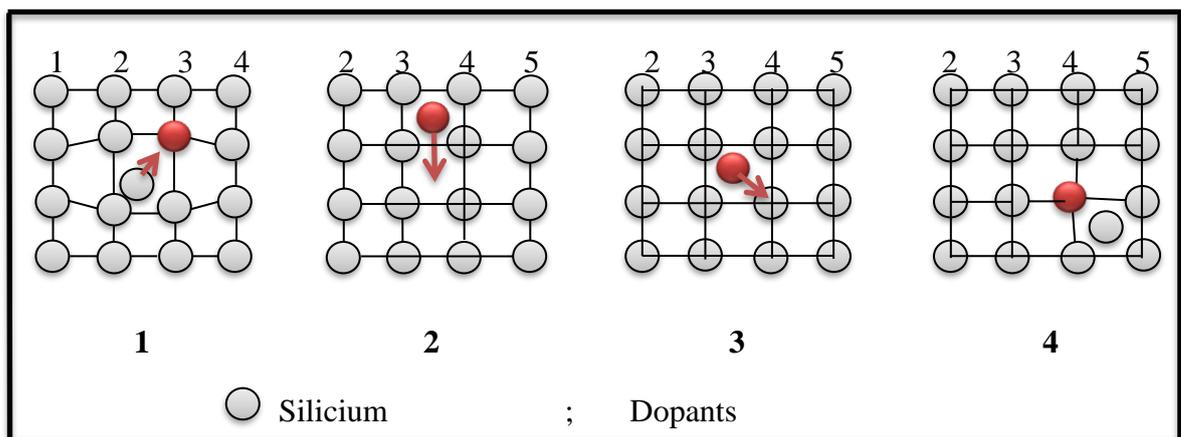


Fig. I.7. La migration d'un dopant via le mécanisme de kick-out.

Par ce mécanisme, un auto-interstitiel éjecte une impureté substitutionnelle de son site, conduisant à la formation d'une impureté interstitielle. Cette impureté migre rapidement pour, à son tour, repasser en site substitutionnel en délogeant un atome de silicium de son site

substitutionnel. Ce mécanisme dépend de la réaction KO, équation I-24. Il est par ailleurs intéressant de remarquer que le mécanisme de diffusion des paires AI se modélise en utilisant une équation de réaction équivalente à celle du Kick Out (IM et KO), en faisant l'hypothèse que l'impureté reste liée au réseau. De fait, ces deux mécanismes introduits et décrits dans des contextes différents conduisent aux mêmes équations de continuité et il n'est en général pas aisé, ni souvent pertinent, de les distinguer [15,16].

I.6. Conclusion

Nous avons traité au cours de ce chapitre des éléments nécessaires à la compréhension de la théorie. Il est important de garder à l'esprit que ces mécanismes de diffusion mettent en jeu les interactions du dopant avec les défauts ponctuels présents dans le silicium. A partir des équations de Fick qui sont la base de la diffusion. Nous avons ensuite présenté les défauts ponctuels dans le silicium qui assurent la diffusion des dopants, et avons fait l'état de l'art des réactions et des mécanismes de diffusion associés à ces défauts ponctuels.

Tous ces mécanismes, effets et équations définis dans ce chapitre, seront utilisés dans le chapitre II pour étudier la diffusion de l'arsenic et du phosphore, dopants implantés industriellement dans les sources et drains des transistors actuels.

I.7. Reference

- [1] F. Okba, "Contribution à l'étude de la croissance des cavités d'hydrogène dans les semi-conducteur", Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif, Algérie, 2011.
- [2] C. Pailler-Mattei, "Transport de particules neutres dans un milieu infini", Cours, Université Lyon Sud, France, 2017.
- [3] J. Marie Brébec, "Thermodynamique", Paris, France, 2004.
- [4] N. Rodriguez, "Diffusion des dans les dispositifs de la microélectronique : Co-diffusion de l'arsenic et du phosphore dans le silicium, étude unidimensionnelle et bidimensionnelle bidimensionnelle, Thèse de Doctorat, Université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, France, 2008.
- [5] F. Boucard, "Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonctions fines", Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur-Strasbourg I, France, 2003.
- [6] B. Tinturier, "Influence de la diffusion sur la cinétiques d'extraction dans un corps poreux cas des oxydes de l'uranium", Centre d'Etudes Nucléaires de Fontenay-aux-Roses, France, 1968.
- [7] J. Philibert, "Diffusion et transport de matière", Edition de Physique, France, 1985.
- [8] M. Lonsi Fomena, " Etude théorique de la diffusion de l'oxygène dans des oxydes diélectriques", Thèse de Doctorat, Université bordeaux 1, France, 2008.
- [9] Y. Adda, J. Philipert, "La diffusion dans les solides", P.U.E, vol. 1-2, Paris, 1976.
- [10] D. Mathiot, " Dopage et diffusion dans le silicium" Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers de Paris, 2000.
- [11] G. Allaire, F. Golse, "Transport et diffusion (MAT/ MAP 567)", Ecole Polytechnique, Paris, 2012.
- [12] J. Marcon, "Simulation numérique de la diffusion de dopants dans les matériaux III-V ", Thèse de doctorat, Université Rouen, 1996.
- [13] M. Bazizi El, "*Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, Soi et SiGe pour les MOS avancés*", Université Paul Sabatier - Toulouse III Français, (2010).
- [14] R.O. Simmons and R.W. Ballafi, "*Measurements of equilibrium vacancy Concentrations in aluminum*", Physics Review, 117(1), 52, (1960).

- [15] R. Huang, R. Dutton, "Experimental investigation and modeling of the role of extended defects during thermal oxidation", J. Appl. Phys. 74, p. 5821, (1993).
- [16] A.Pakfar *"modélisation de la diffusion des dopants dans les alliages SiGe et SiGeC"*, thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2003

Chapitre II :

Modélisation de la diffusion des dopants (Arsenic, Bore)

II.1. Introduction

Le recuit thermique est utilisé dans la fabrication des semi-conducteurs 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 a 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 maitre au point un programme relativement simple d'utilisation, dédié essentiellement à la diffusion de dopants (arsenic et bore) dans le silicium. Les procédés de diffusion vont être simulés à partir d'algorithme utilisant une méthode numérique implicite des différences finis à une dimension, pour cela on est amené à résoudre l'équation de Fick qui est le point de départ de tout assai de modélisation de diffusion [1].

II.2. Le calcul du flux

Le flux d'une impureté "e" dans un milieu isotopique contenant "j" impuretés, peut être exprimé par [1]-[3] :

$$J_e = -D_e \nabla C_e + Z_e \mu_e C_e E \quad (\text{II.1})$$

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.

E : Champ électrique interne.

Si ψ est le potentiel électrique dans la structure, on a alors [4] :

$$E = -\nabla \psi \quad (\text{II.2})$$

Donc:

$$J_e = -D_e(\nabla C_e + Z_e \frac{\mu_e}{D_e} C_e \nabla \psi) \quad (\text{II.3})$$

La relation d'Einstein donné par:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{KT}{q} \quad (\text{II.4})$$

Donc le flux devient:

$$J_e = -D_e(\nabla C_e + Z_e \frac{q}{KT} C_e \nabla \psi) \quad (\text{II.5})$$

L'équation de Fick devient:

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

Pour le bore:

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \nabla \left[D_B \nabla C_B - D_B \frac{q}{KT} C_B \nabla \psi \right] \quad (\text{II.7})$$

Pour l'arsenic:

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = \nabla \left[D_{As} \nabla C_{As} + D_B \frac{q}{KT} C_{As} \nabla \psi \right] \quad (\text{II.8})$$

Sachant que dans un semi-conducteur dopé [5] :

$$n = n_i \exp\left(\frac{q\psi}{KT}\right) \quad (\text{II.9})$$

$$p = p_i \exp\left(\frac{-q\psi}{KT}\right) \quad (\text{II.10})$$

Dans un (SC) type n:

$$q\psi = KT \cdot \text{Ln} \left(\frac{C_d - C_a}{n_i} \right) \quad (\text{II.11})$$

Dans un (SC) type p:

$$q\psi = KT \cdot \text{Ln} \left(\frac{C_a - C_d}{n_i} \right) \quad (\text{II.12})$$

C_a et C_d Sont les densités (concentrations) de dopants accepteurs (Bore) et de donneurs (Arsenic).

Dans un semi-conducteur intrinsèque: $n = p = n_i$

Le champ électrique interne des charges d'espaces induit par le gradient de concentration peut être exprimé par [6] :

$$E = -\nabla\psi = -\frac{KT}{q}\nabla \cdot \text{Ln} \frac{n}{n_i} = \frac{KT}{q}\nabla \cdot \text{Ln} \frac{p}{n_i} \quad (\text{II.13})$$

Le flux devient:

$$J_e = -D_e(\nabla C_e + Z_e C_e \nabla \cdot \text{Ln} \frac{n}{n_i}) \quad (\text{II.14})$$

L'équation de neutralité électrique du matériau s'écrit [7] :

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (\text{II.15})$$

Avec: n et p représentent les densités de porteur libres.

N_a^- Et N_d^+ : les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés.

On peut écrire l'équation de neutralité sous la forme:

$$N_d - N_a + p - n = 0 \quad (\text{II.16})$$

Pour plusieurs dopants l'équation s'écrit sous la forme:

$$\sum_j Z_j N_j + p - n = 0 \quad (\text{II.17})$$

Ou bien:

$$\sum_j Z_j C_j + p - n = 0 \quad (\text{II.18})$$

$Z_j = -1$: Pour les donneurs (As).

$Z_j = +1$: Pour les accepteurs (B).

La concentration intrinsèque d'électrons à une température donnée donne [8] :

Ou bien:

Pour deux dopants:

$$n^2 - (N_d - N_a)n - n_i^2 = 0 \quad (\text{II.19})$$

Pour plusieurs dopants:

$$n^2 - (\sum_j Z_j C_j)n - n_i^2 = 0 \quad (\text{II.20})$$

La solution de cette équation (II.19) est donnée par:

$$n = \frac{1}{2} [N_d - N_a + ((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2)^{1/2}] \quad (\text{II.21})$$

Ou bien:

$$n = \frac{1}{2} \left[\sum_j Z_j C_j + \left((\sum_j Z_j C_j)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{II.22})$$

Et de la même façon on peut écrire la valeur de p (nombre de trou):

$$p = \frac{1}{2} \left[-\sum_j Z_j C_j + \left((\sum_j Z_j C_j)^2 + 4n_i^2 \right)^{1/2} \right] \quad (\text{II.23})$$

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

Enfin on détermine l'expression générale du flux:

$$J_e = -D_e \left[\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\sqrt{(\sum_j Z_j C_j)^2 + 4n_i^2}} \right] \quad (\text{II.24})$$

Pour le cas de l'Arsenic seul:

$$J_{As} = -D_{As} \left[1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As})^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_{As} \quad (\text{II.25})$$

$$J_{As} = -D_{As}^* \nabla C_{As} \quad (\text{II.26})$$

Avec: $D_{As}^* = D_{As} \cdot h$, avec: $h = 1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{(C_{As})^2 + 4n_i^2}}$.

h : Le facteur d'exaltation de la diffusion.

Pour forte concentrations $h = 2$, alors [9] :

$$J_{As} = -2D_{As} \nabla C_{As} \quad (\text{II.27})$$

Pour le cas de bore seul: $Z = -1$

$$J_B = -D_B \left[1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_B)^2 + 4n_i^2}} \right] \nabla C_B \quad (\text{II.28})$$

II.2.1. Coefficient de diffusion

Au dopage à forte concentration, la diffusivité augmente, l'équation de Fick doit être résolue numériquement du fait que D n'est pas constant:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (\text{II.29})$$

Le phénomène d'interaction impureté/ défauts ponctuels paraît être d'une importance dans le mécanisme de diffusion.

Le coefficient de diffusion D_e est la somme de divers coefficients de diffusion:

$$D = D^{\circ} + D^{-} \left(\frac{n}{n_i} \right) + D^{--} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 + D^{+} \left(\frac{n_i}{n} \right) + \dots \quad (\text{II.30})$$

Avec: $D^{\circ}, D^{-}, D^{--}, D^{+}$ représentant les diffusivités intrinsèques de l'impureté en présence de défauts ponctuels.

Pour les donneurs:

$$D_d = D_d^{\circ} + D_d^{-} \left(\frac{n}{n_i} \right) \quad (\text{II.31})$$

Pour les accepteurs:

$$D_a = D_a^{\circ} + D_a^{+} \left(\frac{n}{n_i} \right)^{-1} \quad (\text{II.32})$$

Dans le cas où tous les dopants sont électriquement actifs nous considérons le modèle de Fair et Tsai [10]:

$$D = D_i (1 + \beta f) / (1 + \beta) \quad (\text{II.33})$$

Avec:

$$\beta_d = \frac{D^{-}}{D^{\circ}} \quad \text{Et} \quad \beta_a = \frac{D^{+}}{D^{\circ}}, \quad f = \frac{n}{n_i} \quad (\text{pour l'Arsenic}), \quad f = \frac{n_i}{n} = \frac{p}{n_i} \quad (\text{pour le bore}).$$

L'équation II.21 devient:

$$\frac{n}{n_i} = \frac{c}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{c}{2n_i} \right)^2 + 1} \quad (\text{II.34})$$

Le coefficient de diffusion effectif prend alors la forme [10] :

$$D^{eff} = D \cdot h = D_e \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta} \right) \left(1 + \frac{c_e}{(c_e^2 + 4n_i^2)^{1/2}} \right) \quad (\text{II.35})$$

Finalement l'expression du flux devient [11] :

$$J = -D_{ie} \frac{1+\beta f}{1+\beta} \left(\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{(\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2)^{1/2}} \right) \quad (\text{II.36})$$

Finalement:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} = D_{ie} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta} \left(\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{(\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2)^{1/2}} \right) \right) \quad (\text{II.37})$$

Avec:

$$D_i = D_0 \exp\left(\frac{-E_0}{KT}\right) \quad (\text{II.38})$$

$$n_i = 7.6354 \cdot 10^5 T^{3/2} \exp\left(\frac{-\text{Gap}}{2KT}\right) \quad (\text{II.39})$$

Avec:

$$\text{Gap} = 1.17 - 4.73 \cdot 10^{-4} T^2 / (636K_B + T) \quad (\text{II.40})$$

et : $K_B = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$

$$\beta = 2 \cdot \exp\left[\left(\frac{1}{KT}\right) \left(-\frac{\text{Gap}}{2} - E_V + \frac{Z_i \cdot a^2}{4\pi\epsilon a_i}\right)\right] \quad (\text{II.41})$$

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

E_V : Le niveau de la lacune.

ϵ : Constante diélectrique du silicium.

Pour le bore et l'arsenic les paramètres utilisés lors de recuits classiques sont [12] :

- Pour le bore:

$$D_0 = 0.5554 \text{ Cm}^2/\text{S}$$

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

$$\beta = 19$$

- Pour l'arsenic:

$$D_0 = 22.83 \text{ Cm}^2/\text{S}$$

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

$$\beta = 100$$

Pour le recuit rapide [12]:

- Pour le bore:

$$D_0 = 3 \text{ Cm}^2/\text{S}$$

$$E_0 = 3.42 \text{ ev}$$

$$\beta = 19$$

- Pour l'arsenic:

$$D_0 = 35 \text{ Cm}^2/\text{S}$$

$$E_0 = 4 \text{ ev}$$

$$\beta = 100$$

L'équation finale de diffusion pour le cas d'arsenic seul [13] :

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{i,As} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1+\beta_{As}f}{1+\beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2+4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_{As}}{\partial x} \right] \quad (\text{II.42})$$

Avec:

$$D_{i,As} = D_{0,As} \exp\left(\frac{-E_{0,As}}{KT}\right) \quad (\text{II.43})$$

Et:

$$f = \frac{n}{n_i} = \frac{C_{As}}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_{As}}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad (\text{II.44})$$

Donc:

$$D_{As} = D_{0,As} \exp\left(\frac{-E_{0,As}}{KT}\right) \frac{1+\beta_{As}f}{1+\beta_{As}} \left(1 + \frac{C_{As}}{\sqrt{C_{As}^2+4n_i^2}} \right) \quad (\text{II.45})$$

L'équation finale de diffusion pour le cas de bore seul [14] :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_{i,B} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1+\beta_B f}{1+\beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2+4n_i^2}} \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] \quad (\text{II.46})$$

Avec:

$$D_{i,B} = D_{0,B} \exp\left(\frac{-E_{0,B}}{KT}\right) \quad (\text{II.47})$$

Et:

$$f = \frac{p}{n_i} = \frac{C_B}{2n_i} + \sqrt{\left(\frac{C_B}{2n_i}\right)^2 + 1} \quad (\text{II.48})$$

L'expression de la diffusion du bore:

$$D_B = D_{0,B} \exp\left(\frac{-E_{0,B}}{KT}\right) \frac{1+\beta_B f}{1+\beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{C_B^2 + 4n_i^2}}\right) \quad (\text{II.49})$$

II.3. Résolution numérique de l'équation de diffusion en régime instationnaire

Les solutions analytiques étant établies pour des conditions aux limites de type Dirichlet et pour un milieu semi infini, nous devons recourir aux méthodes numériques pour considérer des cas plus complexes. Parmi les nombreuses méthodes connues, la méthode numérique que nous avons retenue dans le cadre de notre étude est la méthode des différences finies.

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage [15].

Nous donnerons les discrétisations spatiale et temporelle de l'équation de diffusion en régime instationnaire à résoudre.

II.3.1. Méthode des différences finis

Au XV^{III}ème siècle, les mathématiciens tels qu'Euler, Taylor, Leibniz et bien d'autres ont contribué à la méthode des différences finis. Elle a pour but d'approximer les dérivées d'équations de la physique en utilisant des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée.

II.3.1.1. Discrétisation spatiale

Soit $C(x, y, z, t)$ le champ de concentration, une fonction de l'espace et du temps. Les hypothèses permettent d'écrire :

$$C(x, y, z, t) = C(x, t) \quad (\text{II.50})$$

Afin de simplifier les écritures, on considérera dans un premier temps que nous sommes en régime permanent. Le membre de gauche de l'équation II.1 étant supposé nul, on peut écrire: $C(x, y, z, t) \equiv C(x)$. Soit C_i la valeur discrète de $C(x)$ au point x_i , tel que $C_i = C(x_i)$.

La détermination de la grandeur $C(x)$ est faite sur un intervalle donné $[0, L_x]$, où L_x désigne la longueur de l'intervalle. La recherche d'une solution discrète de la grandeur C mène à considérer un maillage sur l'intervalle de définition. Le maillage pris en compte est composé de $N_x + 1$ points x_i

pour i allant de 0 à N_x , avec N_x le nombre de points maximal souhaité pour subdiviser l'intervalle de définition.

Les points du maillage sont espacés régulièrement avec un pas d'espace Δx . Ainsi, les points $x_i = i \cdot \Delta x$ sont appelés nœuds du maillage.

Un développement de Taylor à l'ordre 4, au voisinage de x_i , permet de construire le schéma d'approximation de la dérivée seconde de C (équation II.1) [16] :

$$C_{i+1} = C_i + \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \right)_i + 0(\Delta x^4) \quad (\text{II.51})$$

$$C_{i-1} = C_i - \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_i - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \right)_i + 0(\Delta x^4) \quad (\text{II.52})$$

La somme de ces deux égalités aboutit à :

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_i = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.53})$$

Le schéma obtenu en II. (53) est une approximation dite « centrée » de la dérivée seconde de C , d'ordre 2 en espace.

II.3.1.2. Discrétisation temporelle

On ne considère plus le régime permanent et le membre de gauche de l'équation de diffusion doit être discrétisé. Le domaine temporel est discrétisé avec un pas constant Δt et on posera [17] :

$$t_k = k \cdot \Delta t, \forall k \in \{1, \dots, N_t\} \quad (\text{II.54})$$

La dérivée d'une fonction par définition est donnée par :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{C(x,t+\Delta t) - C(x,t)}{\Delta t} \quad (\text{II.55})$$

Si Δt est infiniment petit, un développement de Taylor de $C(x, t + \Delta t)$ au voisinage de t conduit à :

$$C(x, t + \Delta t) = C(x, t) + \Delta t \left(\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial t^2} \right) + 0(\Delta t^3) \quad (\text{II.56})$$

$$\frac{C(x,t+\Delta t) - C(x,t)}{\Delta t} = \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} + 0(\Delta t) \quad (\text{II.57})$$

L'approximation de $\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}$ est d'ordre 1 en temps.

Par la suite, on notera C_i^k la concentration au nœud $x_i = i \cdot \Delta x$ et au temps $t = k \cdot \Delta t$.

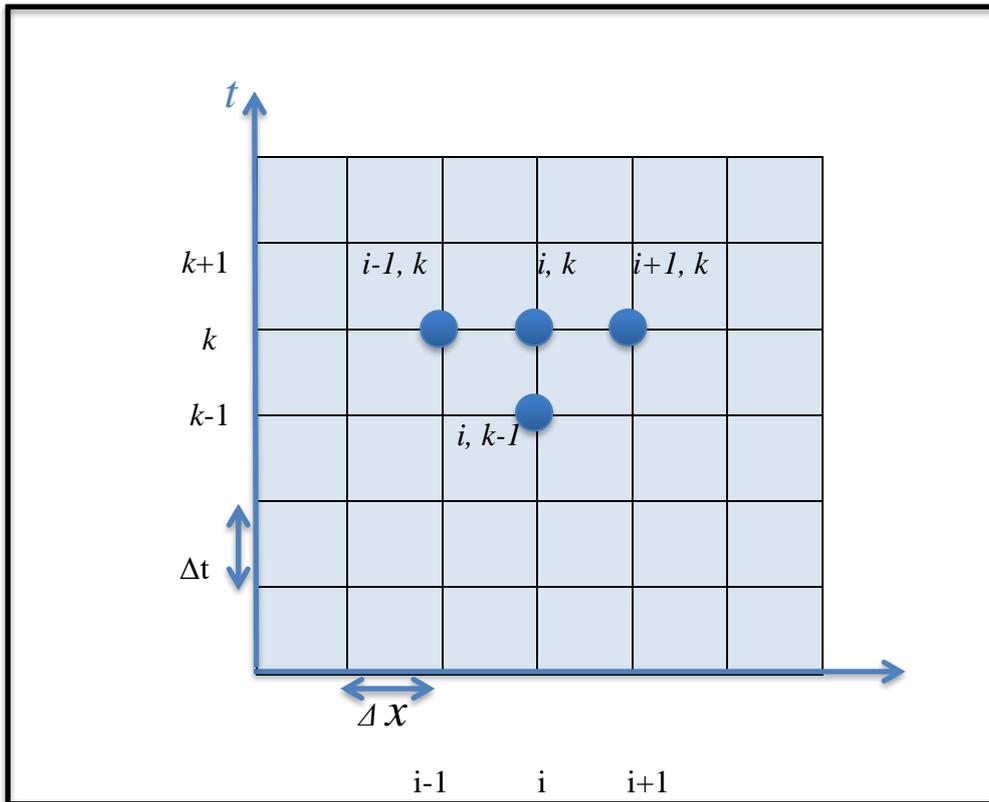


Fig.II.1. : Discrétisation de l'espace et du temps

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

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

II.3.1.3. Schémas numériques pour la résolution de l'équation de la diffusion

La résolution du schéma numérique se fera par la méthode aux différences finies et selon un schéma Euler implicite qui utilise une discrétisation au nœud x_i et à l'itération $k+1$. Ce schéma, en se référant à la notation précédente, permet d'écrire sous la forme discrète les dérivées de la concentration C par rapport au temps et à l'espace (II.1) [18] :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_i^{k+1} = \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} \quad (\text{II.58})$$

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_i^{k+1} = \frac{C_{i+1}^{k+1} - 2C_i^{k+1} + C_{i-1}^{k+1}}{\Delta x^2} \quad (\text{II.59})$$

En remplaçant dans II.1, on obtient :

$$C_i^{k+1} = \alpha C_{i+1}^k + (1 - 2\alpha)C_i^k + \alpha C_{i-1}^k \quad (\text{II.60})$$

Par la méthode de Crank - Nicholson :

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{C_{i+1}^{k+1} - 2C_i^{k+1} + C_{i-1}^{k+1} + C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{\Delta x^2} \right) \quad (\text{II.61})$$

$$\alpha C_{i-1}^k + (2 - 2\alpha)C_i^k + \alpha C_{i+1}^k = -\alpha C_{i-1}^{k+1} + (2 - 2\alpha)C_i^{k+1} - \alpha C_{i+1}^{k+1} \quad (\text{II.62})$$

A chaque itération, le vecteur des inconnues discrètes est déterminé en résolvant un système linéaire. La matrice du système étant tri diagonale, l'algorithme de *Thomas* basé sur la méthode du pivot de Gauss est utilisé pour résoudre le système matriciel.

II.3.2. Résolution approchée de l'équation de diffusion

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

$$J = -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \quad (\text{II.50})$$

On discrétisent cette loi:

$$J_i^k = -D_i^k \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{\Delta x} \quad (\text{II.51})$$

La 2^{ème} loi de Fick:

$$\frac{C_i^k - C_i^{k-1}}{\Delta t} = \frac{J_i^k - J_{i+1}^k}{\Delta x} \quad (\text{II.52})$$

$$\frac{C_i^k - C_i^{k-1}}{\Delta t} = \left(-D_i^k \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{\Delta x} + D_{i+1}^k \frac{C_{i+1}^k - C_i^k}{\Delta x} \right) / \Delta x \quad (\text{II.53})$$

On pose:

$$A_0 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$A_{i+1}^k = A_0 D_{i+1}^k$$

D'où :

$$C_i^{k-1} = -C_i^k C_{i-1}^k + (1 + A_i^k + A_{i+1}^k)C_i^k - A_{i+1}^k C_{i+1}^k \quad (\text{II.54})$$

Condition aux limites:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \text{À } x=0 \quad \text{c'est-à-dire : } C_0^k = C_1^k$$

$$C_1^{k-1} = (1 + A_2^k)C_1^k - A_i C_2^k \quad (\text{II.55})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ à } x=L \text{ c'est-à-dire: } C_i^k = C_{i+1}^k$$

$$C_i^{k-1} = (1 + A_i^k)C_i^k - A_i^k C_{i-1}^k \quad (\text{II.56})$$

II.4. Conclusion

Au cours de ce deuxième chapitre, nous avons exposé l'équation de Fick qui est le point de départ de tout essai de modélisation de diffusion, on a développé un modèle théorique de la diffusion du bore et l'arsenic dans les films de silicium. Le modèle tient compte du mécanisme lacunaire de diffusion.

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

II.5. Reference

- [1] **M .Covas and H.Gay**, "Recuit thermique rapide de semi-conducteur par énergie micro-onde", *Journal de Physique III*, 3(5), 973-983, (1993).
- [2] **Durier, A.Lise**, "*Contribution à l'étude de l'interaction contraintes-diffusion dans les polymères*. Diss", Arts et Métiers ParisTech, (2008).
- [3] **M. Henry, H. Fanet**, "*Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*" Vol. 189. Paris Dunod, (2001).
- [4] **D. Jean-Marc, et al.** "*Croissance de semi-conducteurs à grand gap.*" *Congrès français de mécanique*. AFM, Maison de la Mécanique, 39/41 rue Louis Blanc-92400 Courbevoie, (2007).
- [5] **C. Zechner, N. Zographos, D. Matveev, A. Erlebach**, "Accurate and efficient TCAD model for the formation and dissolution of small interstitial clusters and {311} defects in silicon", *Materials Science and Engineering B* 124-125, p. 401-403, (2005).
- [6] **C. Bounafos**, "*Rôle de défauts End-Of-Range dans la diffusion anormal du Bore dans le silicium*", Thèse de doctorat, Institut National des sciences Appliquées de Toulouse France, (1996).
- [7] **B. Colombo**, "*Interaction entre les défauts étendus et anomalies de diffusion des dopants dans le silicium : modèle physique et simulation prédictives*", **Thèse de doctorat** Université Paul-Sabatier Toulouse France, (2001).
- [8] **A. 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 , Alger, (1995).
- [9] **D. Mathieu**, "Diffusion des dopants dans le silicium : aspects expérimentaux et simulation", *L4 Echo des recherches*, N°117.p.57-66, (1984).
- [10] **C. BERGAUD**, "*Implantation ionique de bore dans du silicium paramorphine : réalisation, modélisation et caractérisation de jonction p+/n ultra-minces* ", Thèse de doctorat, laboratoire d'analyse et d'Architecture des Système du CNRS, (1994).
- [11] **F .Marou**, "*procède thermique rapide : étude de l'oxydation du silicium et de l'activation de l'imputé bore implante*", Thèse de Doctorat. Laboratoire D'automatique et d'analyse des systèmes (L.A.A.S.) du CNRS, (1990).

- [12] **C.Bergaud**, "Etude de la diffusion et de la codiffusion de bore et d'arsenic dans une structure polysilicium sur silicium lors de recuit thermique rapide ", Rapport de stage D.E.A. Institut National des sciences Appliquées : Université de Claude Bernard Lyon 1, (1991).
- [13] **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.1556162, (1993).
- [14] **E. M. Bazizi, F.Cristiano and A. Pakfar**, " *Etude physique et modélisation de la diffusion accélérée et transitoire des dopants dans les matériaux*", Journées Nationales du Réseau Doctoral en Microélectronique, JNRDM LYON, du 18 au 20 Mai, (2009).
- [15] **J .FRIEDEL**, "*Physique des basses températures*", École d'été des Houches, Presses Universitaires, Paris et Gordon and Breach, New York, (1962).
- [16] **F. Roger**, " *méthodologie de calibrage de simulateurs utilisés en micro-électronique - application à l'implantation ionique et à la mobilité des porteurs*", Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, (2002).
- [17] **O. Marcelot**, "*Ingenierie de défauts ponctuels pour le contrôle de la diffusion et de l'activation du Bore dans le silicium*", Thèse de doctorat, université Paul-Sabatier Toulouse France, (2007).
- [18] **H. Mathieu**, "*Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*", Dunod Editor, (2001).

Chapitre III :

*Résultats et
discussions*

III.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 réduire le cout expérimental.

On a simulé via, le simulateur réalisé, les profils de diffusion simple en utilisant les paramètres par défaut du simulateur. Les paramètres par défaut couramment utilisé pour le bore et l'arsenic, pour un recuit thermique classique (RTC) dans du monosilicium sont:

$$D_{0,B} = 0.5554 \text{ Cm/s}$$

$$E_{0,B} = 3.42 \text{ ev}$$

$$\beta = 19$$

Pour l'arsenic ils deviennent [1]:

$$D_{0,As} = 22.83 \text{ Cm/s}$$

$$E_{0,As} = 4.1 \text{ ev}$$

$$\beta = 100$$

III.2. Coefficient de diffusion

On retrouve sur (la figure III.1), les résultats obtenus par ces différentes méthodes de caractérisation. Ces résultats, issus de différentes méthodes de caractérisation, semblent donner pour le coefficient de diffusion du silicium à une énergie d'activation comprise entre 4.5 et 5.0 ev [2].

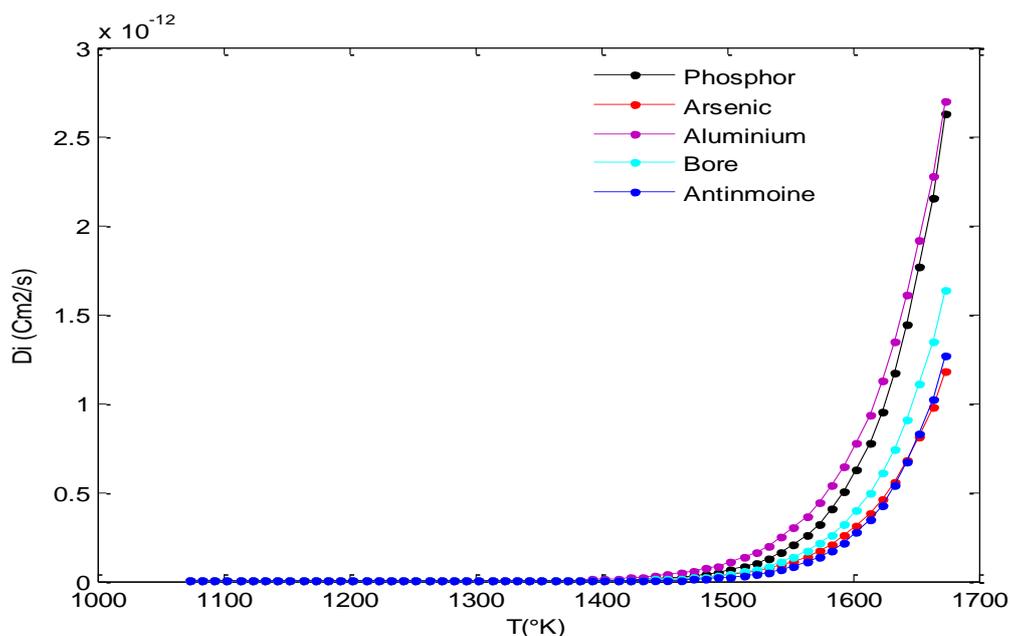


Fig.III.1. Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants Utilisés en micro-électronique.

III.3. Etude de l'influence des paramètres technologique sur la diffusion

Nous avons pris comme exemples des profils de diffusion des dopants (Bore et Arsenic), dans une couche en monosilicium où l'on manipule les profils d'impuretés sous simulateur.

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

Un recuit du substrat sera donc indispensable pour faire disparaître les défauts induits par l'implantation et pour placer les atomes d'impureté sur des sites ou elles sont électriquement actives [3].

Les atomes de Bore (B) et l'Arsenic (As) se diffusent à travers le réseau de Si pour former le profil de la diffusion finale. Les températures recuites de 700-850 °C.

Le profil de dopage dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces paramètres liés au couche utilisé et les procédés technologiques (Energie d'implantation, masse de l'ion, Température et le temps de recuits...) interdépendants ce qui rend indispensable l'étude de l'influence de tous ces paramètres sur la prédiction du comportement des profils de l'implantation. Pour étudier l'influence d'un paramètre, nous allons le faire varier sur un intervalle donné tout en fixant tous les autres paramètres [4].

III.3.1 Diffusion à partir de sources solides ou de dose en surface

C'est aussi le cas lorsque le dopant a été introduit en surface par implantation ionique. La quantité totale (ou dose) est constante.

$$C(x, 0) = 0 \text{ condition initiale}$$

$$\int_0^{\infty} C(x, t) dx = S \quad S : \text{dose totale constante}$$

Rappelons que la quantité totale de dopant par unité de surface (ou dose) est constante. De plus : $C(x, \infty) = 0$ [4].

III.3.1.1. Diffusion du bore

Etude, après recuit, de l'influence des différents paramètres technologique sur les profils d'implantation du bore (10^{14}atm/Cm^3) implante dans une couche mono silicium.

a)- Influence de la température

La figure (III.2) présente les profils de diffusion du bore, dans une gamme de températures allant de 700°C à 850°C pour une durée de recuit est égale à 5min.

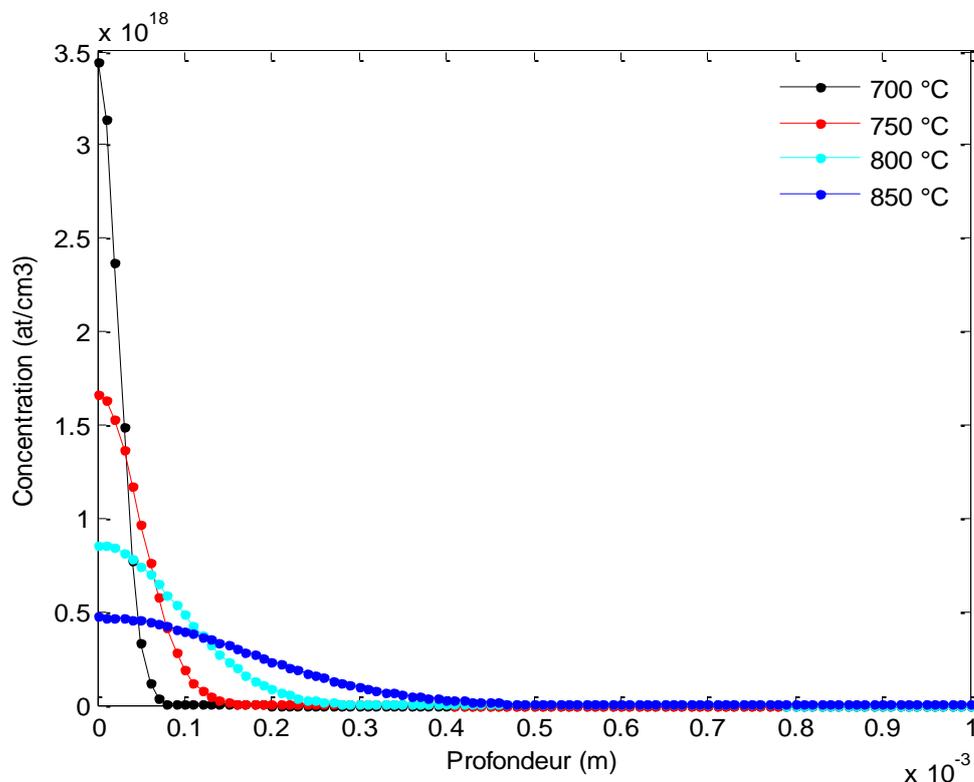


Fig.III.2. Profils de diffusion de Bore (10^{14} atom) après recuit 5min pour différentes températures.

On observe une légère variation au niveau de la profondeur de diffusion pour les températures situées entre 700 et 850°C, et la diminution de la concentration maximale.

Les résultats de simulations de la variation de la température de recuit ont été présentés dans le tableau (III.1):

Tableau. III.1. Résultats de simulations de diffusion de Bore pour différentes températures.

Température de recuit (°C)	700	750	800	850
Concentration. Max (at/Cm ³)	$3.4476 \cdot 10^{18}$	$1.6641 \cdot 10^{18}$	$8.5961 \cdot 10^{17}$	$4.7095 \cdot 10^{17}$
Max. diffusion en profondeur x(m)	$8 \cdot 10^{-5}$	$16 \cdot 10^{-5}$	$28 \cdot 10^{-5}$	$48 \cdot 10^{-5}$

b)- Influence de la durée de recuit

La figure (III.3) montre l'effet de la durée de recuit sur les profils de Bore pour la température de 800°C. La profondeur de diffusion du Bore augmente sensiblement avec la durée de recuit thermique.

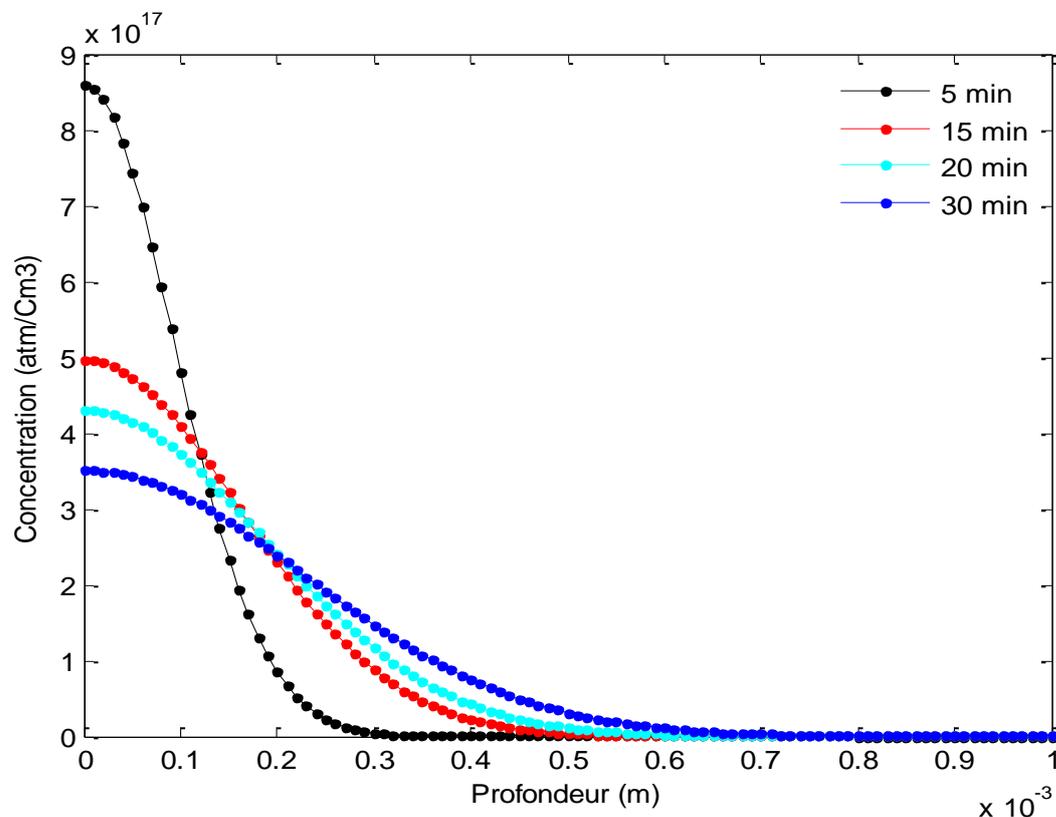


Fig.III.3. Profils de diffusion de Bore (10^{14} atom. Cm^{-3}) après recuits à 800°C pour (5,15,20 et 30min).

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit du Bore ont été résumés dans le tableau (III.2):

Tableau. III.2. Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de diffusion du Bore.

Temps de recuit (min)	5	15	20	30
Concentration. Max (at/ Cm^3)	$8.5961 \cdot 10^{17}$	$4.963 \cdot 10^{17}$	$4.298 \cdot 10^{17}$	$3.5093 \cdot 10^{17}$
Max. diffusion en profondeur $x(m)$	$33 \cdot 10^{-5}$	$51 \cdot 10^{-5}$	$60 \cdot 10^{-5}$	$72 \cdot 10^{-5}$

c)- Influence de la dose

La figure (III.4) montrent l'effet de la dose sur les profils de diffusion du Bore recuit à 800°C/5min. Nous observons que la profondeur de diffusion du Bore augmente sensiblement avec l'augmentation de la dose d'implantation. Nous remarquons également un accroissement de la concentration maximale et de la profondeur de diffusion en fonction de la dose.

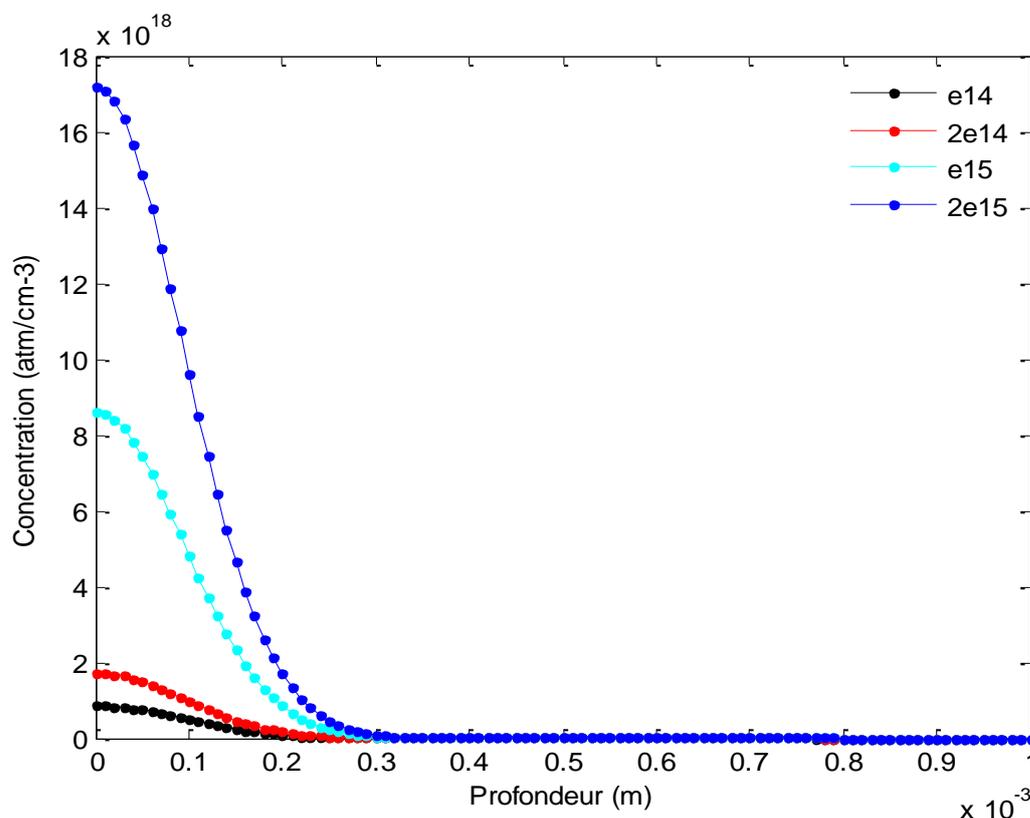


Fig.III.4. Profils de diffusion de bore (10^{14} atom. Cm^{-3}) après recuit à 5min pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (III.3)

Tableau. III.3. Effet de la dose sur la concentration et la profondeur du Bore.

La dose (at/cm ³)	10^{14}	2.10^{14}	10^{15}	2.10^{15}
Concentration. Max (at/Cm ³)	$8.5961.10^{17}$	$1.7192.10^{18}$	$8.5961.10^{18}$	$4.7095.10^{17}$
Max. diffusion en profondeur x(m)	31.10^{-5}	32.10^{-5}	34.10^{-5}	35.10^{-5}

III.3.1.2. Diffusion de l'Arsenic (As)

L'étude de l'influence des différents paramètres technologiques sur les profils de concentration, après recuit thermique de l'Arsenic (As), (10^{15} atm/Cm³), implanté dans une couche de monosilicium.

a)- L'influence de température

L'Arsenic est implanté à une dose de 10^{15} atm/Cm³, nous avons étudié les profils de diffusion dans une large gamme de températures de 700 à 850°C avec la durée de recuit $t=5$ min. la superposition des profils pour les différentes températures de recuit présenté dans la figure (III.5).

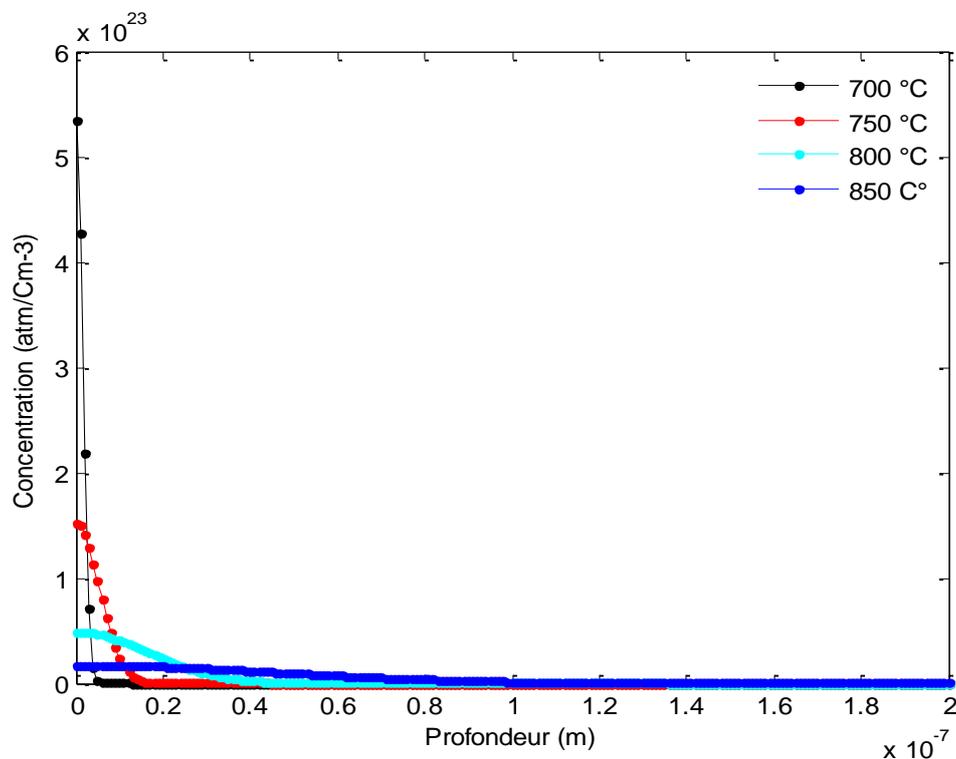


Fig.III.5. Profils de diffusion de l'arsenic (10^{15} atom. Cm⁻³) après recuit 5min

Pour différentes températures.

Les profils de diffusion se superposent pour différentes températures, aussi à partir de $T=700^{\circ}\text{C}$, le profil de concentration dans monosilicium est abrupte et on remarque une augmentation remarquable en profondeur.

Les résultats de simulations de l'effet de température sur la diffusion de l'Arsenic sont résumés dans le tableau (III.4):

Tableau. III.4. Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de l'Arsenic.

Température de recuit (°C)	700	750	800	850
Concentration. Max (at/Cm ³)	$5,3403.10^{23}$	$1,5256.10^{23}$	$4,8982.10^{22}$	$1,74.10^{22}$
Max. diffusion en profondeur x(m)	6.10^{-9}	$1,6.10^{-8}$	$4,3.10^{-8}$	$0,1.10^{-6}$

b)- Influence de la durée de recuit

Les résultats de simulations sont présentés sur les figures (III.6), la couche en monosilicium a été implantée en l'Arsenic (As) avec une dose de 10^{15} atm/Cm³ à température de 800°C pour les durées de recuit : t=5 min, t=10min, t=20 min et t=30min.

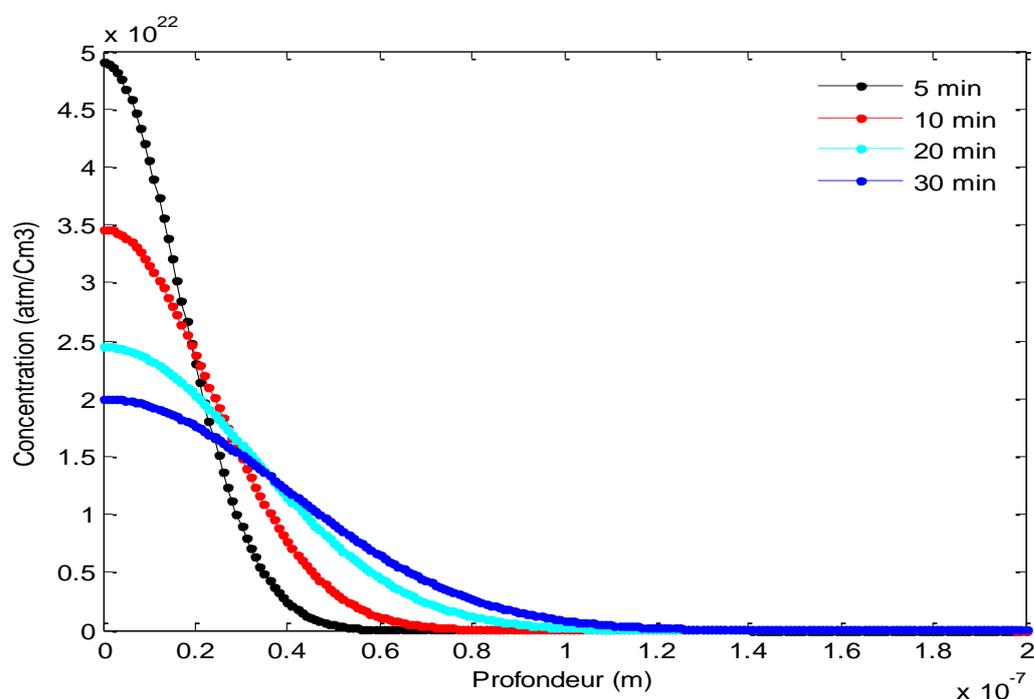


Fig.III.6. Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{15} atom.Cm⁻³) après recuits à 800°C pour (5,10 ,20 et 30min).

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été résumés dans le tableau (III.5):

Tableau. III.5. Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de l'Arsenic.

Temps de recuit (min)	5	15	20	30
Concentration. Max (at/Cm ³)	$4,8982.10^{22}$	$3,4635.10^{22}$	$2,4491.10^{22}$	$1,9997.10^{22}$
Max. diffusion en profondeur x(m)	$5.5.10^{-8}$	$7.7.10^{-8}$	$1.03.10^{-7}$	$1.22.10^{-7}$

c)- Influence de la dose

La figures (III.7) montrent l'effet de la dose sur les profils de diffusion de l'Arsenic recuit à 800°C/5min. Nous observons que la profondeur de diffusion et la concentration de l'Arsenic (As) en fonction de la profondeur augmentent avec la dose d'implantation.

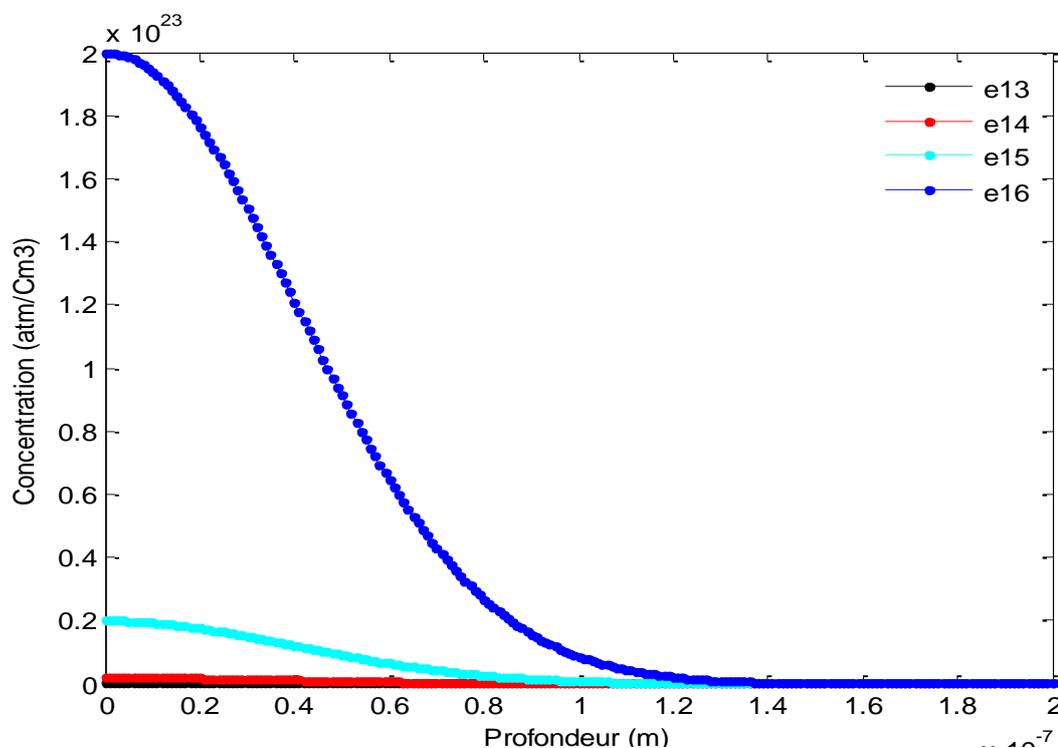


Fig.III.7.Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{15} atom. Cm^{-3}) après recuit à 5min pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (III.6):

Tableau. III.6. Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de l'Arsenic.

La dose (at/cm^{-3})	10^{13}	10^{14}	10^{15}	10^{16}
Concentration. Max (at/Cm^3)	$8.5961.10^{17}$	$1.7192.10^{18}$	$8.5961.10^{18}$	$4.7095.10^{17}$
Max. diffusion en profondeur $x(\text{m})$	$0,137.10^{-6}$	$0,138.10^{-6}$	$0,139.10^{-6}$	$0,14.10^{-6}$

III.3.2. Diffusion à partir de sources gazeuses

Dans le cas des sources gazeuses, la concentration en surface dans le milieu ambiant est constante ce qui signifie qu'en phase solide, en surface la concentration, C_s , est aussi constante.

La condition limite s'écrira donc : $C(0, t) = C_s$ (quel que soit le temps en $x=0$).

La deuxième condition est une condition initiale, qui suppose que la concentration de l'espèce à diffuser est initialement nulle (ou négligeable) dans le substrat. Cette condition s'écrit donc : $C(x, 0) = 0$ (quel que soit x à $t=0$).

La dernière condition est plus intuitive. Elle postule qu'à une distance infinie, la concentration est nulle quel que soit le temps. Cela se conçoit bien si l'on se rappelle que pour que la diffusion se produise, il faut un gradient non nul de concentration. $C(\infty, t) = 0$ (quel que soit le temps) [5].

III.3.2.1. Diffusion de Bore

a)- Influence de température

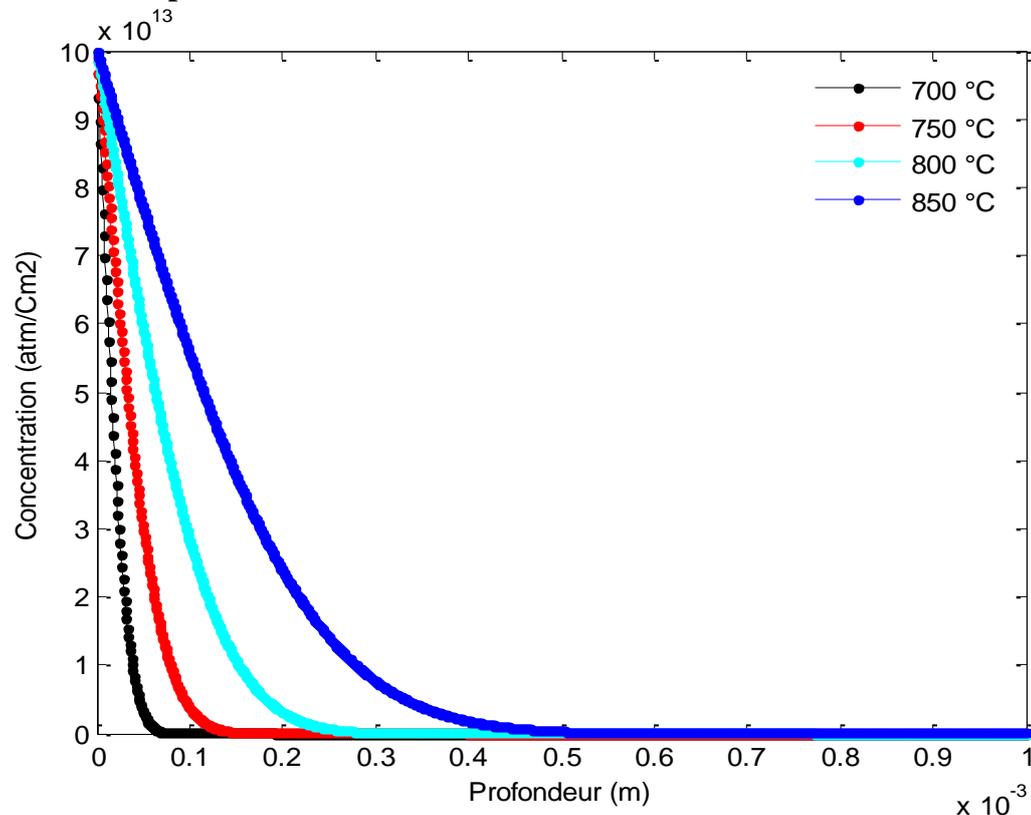


Fig.III.8. Profils de diffusion de Bore (10^{14} atom) après recuit 5min

Pour différentes températures.

Les résultats de simulations de la variation du température de recuit avec le profondeur de diffusion ont été présentés dans le tableau (III.7):

Tableau. III.7. Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de Bore.

Température de recuit (°C)	700	750	800	850
Max. diffusion en profondeur $x(m)$	7.10^{-5}	$0,129.10^{-3}$	$0.257.10^{-3}$	$0,5.10^{-3}$

b)- Influence de la durée de recuit

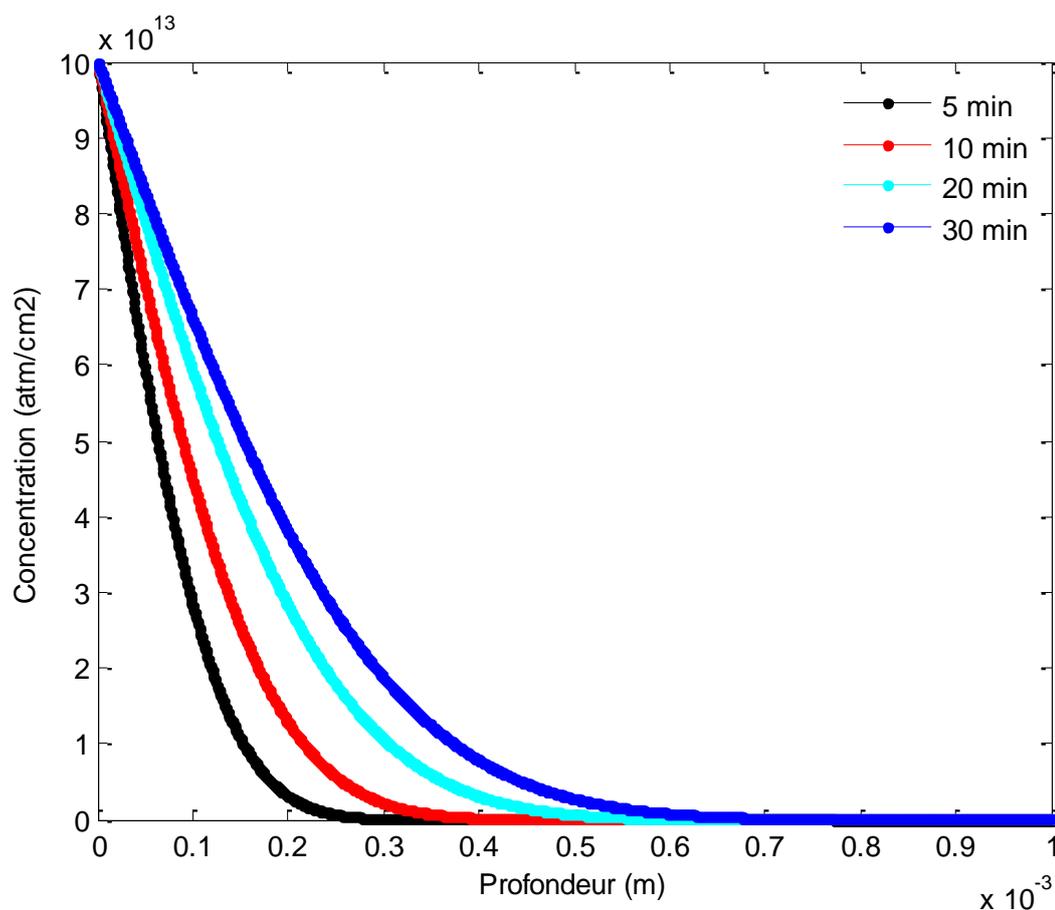


Fig.III.9. Profils de diffusion de Bore (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuits à 800°C pour (5,15,20 et 30min).

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été présentés dans le tableau (III.8):

Tableau. III.8.Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de Bore.

Temps de recuit (min)	5	10	20	30
Max. diffusion en profondeur $x(m)$	$0,267.10^{-3}$	$0,367.10^{-3}$	$0,536.10^{-3}$	$0,68.10^{-3}$

c)- Influence de la dose

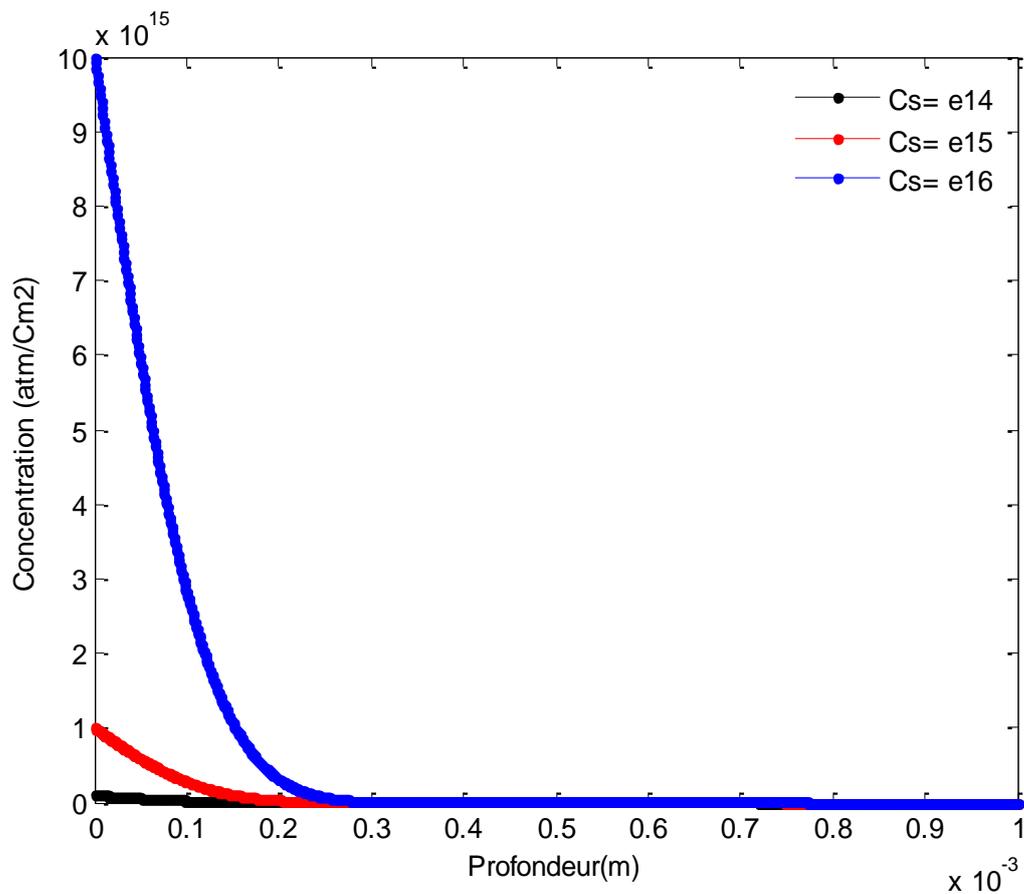


Fig.III.10. Profils de diffusion de bore (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuit à 5min pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de la dose ont été résumés dans le tableau (III.9):

Tableau. III.9. Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de Bore.

La dose (at/cm ²)	10^{14}	10^{15}	10^{16}
Max. diffusion en profondeur $x(m)$	$0,267.10^{-3}$	$0,274.10^{-3}$	$0,285.10^{-3}$

III.3.2.2. Diffusion de l'Arsenic

a)- Influence de température

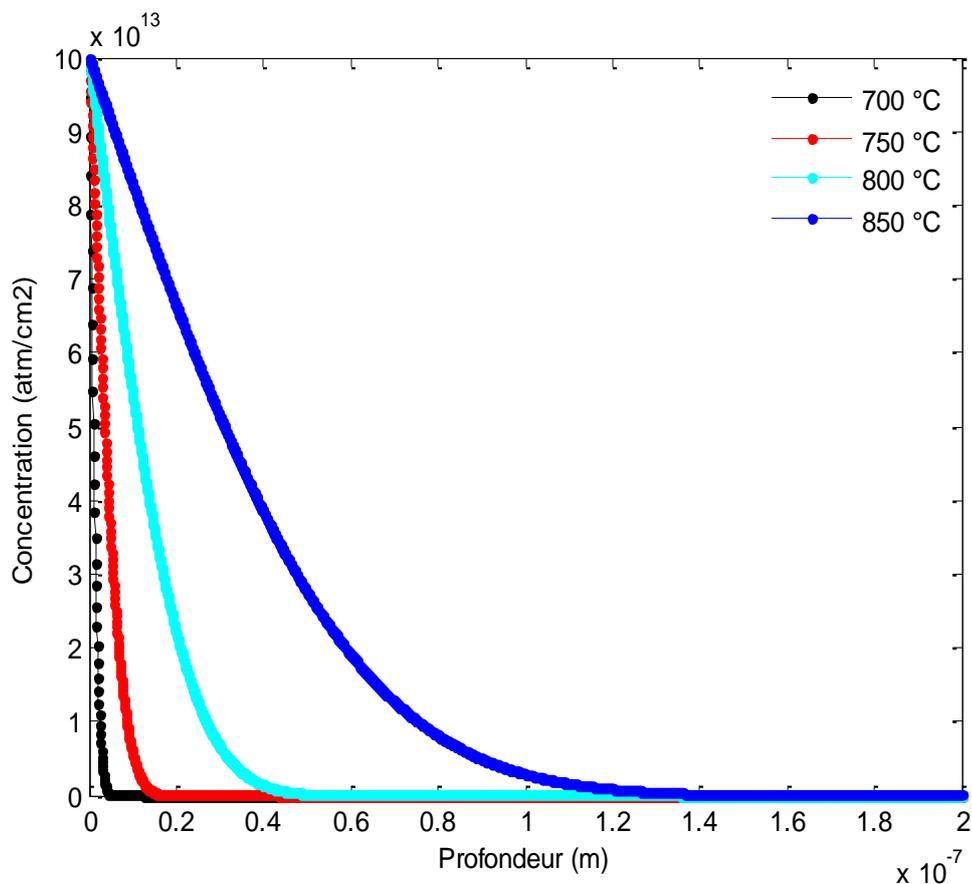


Fig.III.11. Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom) après recuit 5min pour différentes températures.

Les résultats de simulations de la variation du température de recuit avec le profondeur de diffusion ont été présentés dans le tableau (III.10):

Tableau. III.10. Résultats de simulations pour différentes températures de diffusion de l'Arsenic.

Température de recuit (°C)	700	750	800	850
Max. diffusion en profondeur x(m)	$6.5 \cdot 10^{-9}$	$1,8 \cdot 10^{-8}$	$5,28 \cdot 10^{-8}$	$1.29 \cdot 10^{-7}$

b)- Influence de la durée de recuit

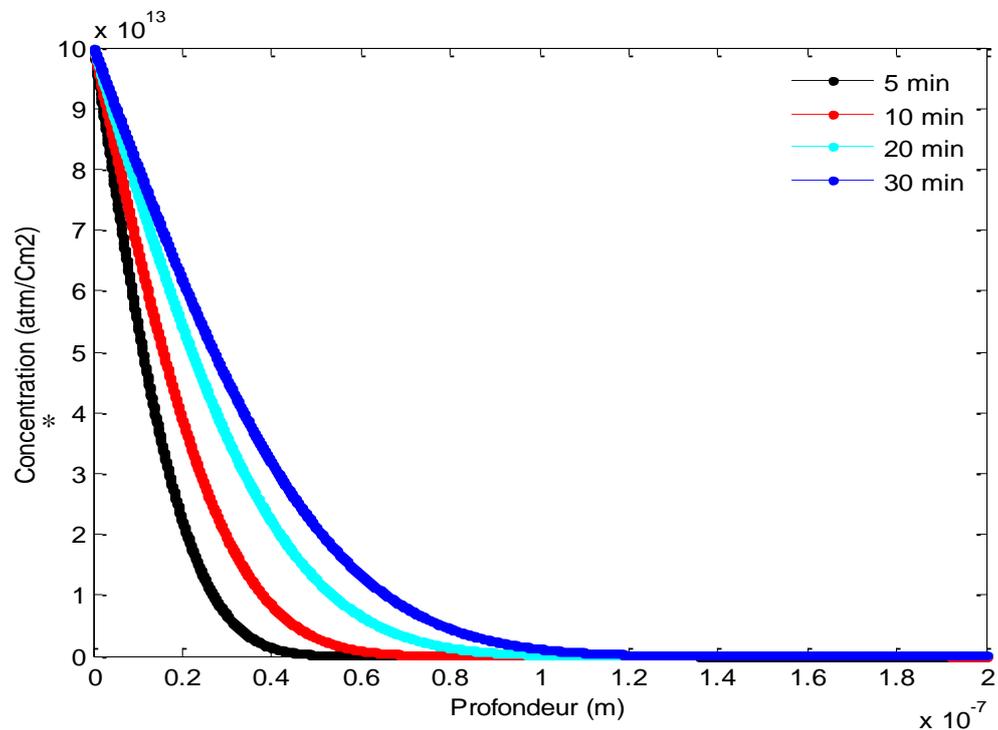


Fig.III.12. Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuits à 800°C pour (5,15,20 et 30min).

Les résultats de simulations de l'effet de la durée de recuit ont été présentés dans le tableau (III.11):

Tableau. III.11. Effet de la durée de recuit sur la concentration et la profondeur de l'Arsenic.

Temps de recuit (min)	5	10	20	30
Max. diffusion en profondeur x(m)	$4,8.10^{-8}$	$6,93.10^{-8}$	$9,38.10^{-8}$	$1,2.10^{-7}$

c)- Influence de la dose

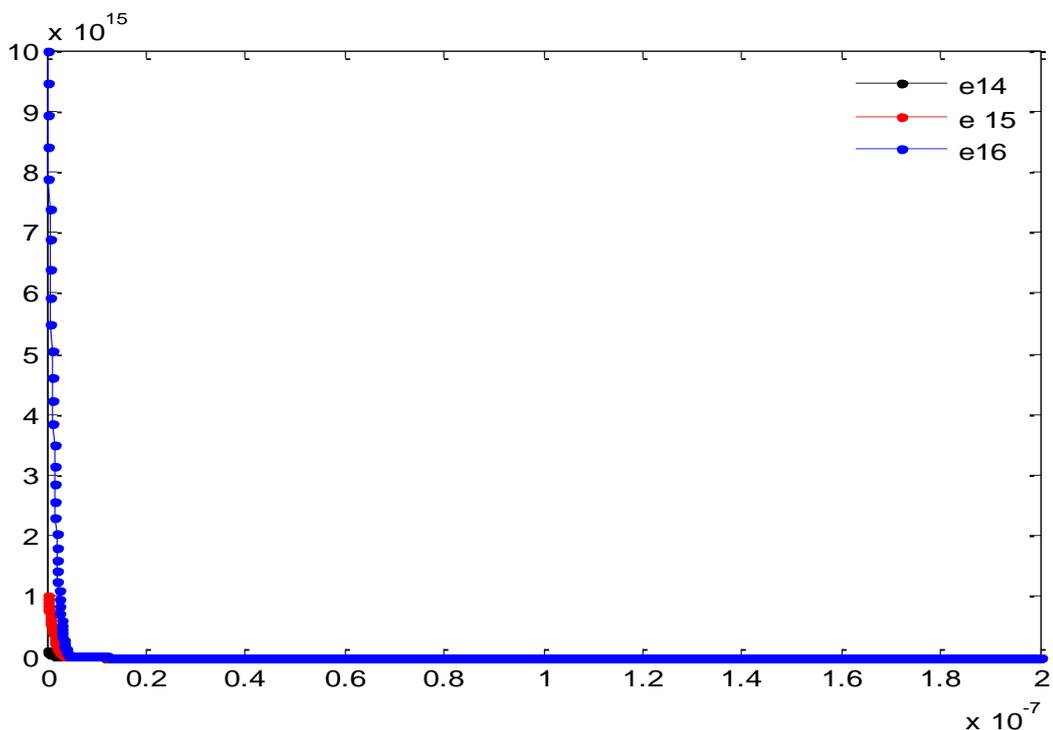


Fig.III.13.Profils de diffusion de l'Arsenic (10^{14} atom.Cm⁻³) après recuit à 5min pour les différentes doses.

Les résultats de simulations de l'effet de l'Arsenic ont été résumés dans le tableau (III.12):

Tableau. III.12. Effet de la dose sur la concentration et la profondeur de diffusion de l'Arsenic.

La dose (at/cm ²)	10^{14}	10^{15}	10^{16}
Max. diffusion en profondeur $x(m)$	5.10^{-9}	6.10^{-9}	7.10^{-9}

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre on a essayé de mettre en évidence l'effet de la dose, de la température et le temps de recuit, et de prévoir le comportement de profil de diffusion après recuit à l'aide de simulateur en Matlab qui permettent et grâce à de modèle physique de reproduire et prédire des profils de dopage. Aussi les profils ont été présentés et discutés. L'effet d'épaulement a été observé lorsqu'on varie la température et le temps de recuit. Aussi, un plateau remarquable a été observé sur les profils de concentration en profondeur.

III.4.Référence

- [1] **F. Okba**, "Contribution à l'étude de la croissance des cavités d'hydrogène dans les semi-conducteur", Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif, Algérie, 2011.
- [2] **F. Boucard**, "Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonctions fines", Université Louis Pasteur -Strasbourg I, Français, 2003.
- [3] **R. Ibrahim**, " Etude et simulation de l'implantation ionique des dopants dans des structures MOS", mémoire magister en électronique, Université Hadj Lakhdar Batna, Algérie, 2011.

Conclusion générale

La diffusion de dopants dans le silicium est un sujet de mieux en mieux compris et il existe actuellement de nombreux modèles décrivant plus ou moins bien la physique de ce problème. Ces modèles doivent décrire l'ensemble des étapes de fabrication des composantes électriques. Les structures réalisées par les techniques de diffusion et d'implantation ionique ont des caractéristiques bien définies. Les deux procédés sont complémentaires.

L'objectif de ce mémoire est l'étude de la diffusion d'arsenic et de bore dans une structure de silicium lors de recuits thermiques classiques, dans une perspective de réalisation de transistors et des structures Mos.

L'étude se fait pour deux températures de recuit typiques (700°C et 850°C). Après avoir rappelé la théorie de la diffusion par l'équation de Fick et les défauts ponctuels intrinsèques présents dans le recuit thermique sur l'implantation ionique, nous avons procédé à la simulation :

L'outil de simulation utilisé dans ce travail, le logiciel Matlab. Pour l'élaboration d'un modèle classique de diffusion, nous sommes basés sur un modèle élaboré quelques années auparavant par Mathiot et al... l'outil de simulation utilisé dans ce travail, le logiciel Matlab, avec la méthode numérique des différences finies implicites.

Les résultats obtenus sont, les profils des dopages du bore et de l'arsenic en étudiant l'effet de la dose implantée ainsi que la durée et la température du traitement thermique de la structure sur la profondeur des pénétrations. Parmi les perspectives envisagées, l'ensemble des résultats, obtenus pourrait être enrichi et complété.