République Algérienne Démocratique et Populaire MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE UNIVERSITE DE CONSTANTINE INSTITUT D'ELECTRONIQUE

THESE DE MAGISTER

Bou/2942

Option : Composants électroniques

CONTRIBUTION A LA CARACTERISATION ELECTRIQUE DES MATERIAUX SEMICONDUCTEURS - MODELES THEORIQUES -

Présentée par: M^{elle} Fella BOULGAMH

1996.

Soutenue le

Devant le jury:

AIDA M ^{ed} Salah M.C	U. de	Constantine Prési	ident.
REMRAM Mohamed	M.C	U. de Constantine	Directeur de Thése.
BENOUAKTA Meriem	M.C	U. de Constantine	Examinatrice.
MAHDJOUB Abdelhakim	M.C	ENS Oum El Bouaghi	Examinateur.

Dédicaces

A mes parents qui me sont, et qui seront à jamais, les deux êtres les plus chèrs au monde; A mon frère Abdelhamid qui s'est tant sacrifié pour nous;

A mes frères et soeurs: Salim, Adel, Messaouda et Nadia; auprès desquels j'ai toujours trouvé aide, compréhension et amour;

A ma belle-soeur Khatima;

.

Aux deux personnes qui ont toujours été à mes cotés aux moments pénibles:

'A toi Ouarda et à toi Chahrazed";

A Hayet ANOUCHE et Fatiha MOKHBI;

A toutes mes amies à qui j'avoue sincèrement être gâtée à leurs côtés, et à tous mes collègues.

. B.Fella

Dédicaces

A mes parents qui me sont, et qui seront à jamais, les deux êtres les plus chèrs au monde; A mon frère Abdelhamid qui s'est tant sacrifié pour nous;

A mes frères et soeurs: Salim, Adel, Messaouda et Nadia; auprès desquels j'ai toujours trouvé aide, compréhension et amour;

A ma belle-soeur Khatima;

Aux deux personnes qui ont toujours été à mes cotés aux moments pénibles:

"A toi Ouarda et à toi Chahrazed"; A Hayet ANOUCHE et Fatiha MOKHBI;

A toutes mes amies à qui j'avoue sincèrement être gâtée à leurs côtés, et à tous mes collègues.

B.Fella

Remerciements

Je tiens à remercier sincèrement Mr. Mohamed REMRAM de m'avoir proposé ce thème et de m'avoir encadré en étant toujours présent. Je le remercie également pour ses encouragements, ses conseils précieux et surtout pour sa grande confiance en moi. J'espère qu'il trouvera ici le témoignage de mon grand respect et ma profonde reconnaissance.

Avec ma très sincère gratitude, je remercie les membres de jury:

Mr AIDA Mohammed Salah,

Mme BENOUAKTA Meriem,

Mr MAHDJOUB Abdelhakim,

pour l'honneur qu'ils m'ont accordé en acceptant de juger ce présent travail.

Pour leur gentillesse et disponibilité, je remercie Mr SAHLI Salah, Mr BENNIA Abdelhak, Mr BENSLAMA Malek et Mr FARROUKI Atef; sans oublier mes collègues Djamel BENATIA et Fayçal AYAD.

A mes collègues de Labo, Lemia SEMRA et Mahmoud Riad BEGHOUL, je ne pourrai dire que MERCI pour votre gentillesse, votre aide et surtout pour l'ambiance amicale de travail que vous avez toujours créés.

Je ne saurai remercier mes amies Samira DIB, Souad BENABDELKADER et Zoubeida HAFDI pour leur dévouement à l'écriture de ce manuscrit. Sans leur aide et encouragements, il ne serait pas prêt au moment voulu. Pour l'amitié et la grande affection par laquelle elles m'ont toujours entourées, je ne pourrai exprimer mes sincères sentiments à mes amies; Amel BOUCHEMHA, Asma BENCHIHEB, Assia EUTAMENE, Chafika AISSAOUI, Houda TOUIDGINE, Ilhem MAARAD, Karima ALIOUCHE Lemia SEMRA, Linda BENDJAMA, Salama MEGHRICHE, Samia HADJAR, Samira DIB, Souad BENABDELKADER et Zoubeida HAFDI.

•

-

Résumé

Dans la technologie de fabrication des circuits à très haute intégration, un compromis entre miniaturisation et performances électriques est une nécessité indispensable. La simulation technologique de ces performances repose principalement sur la qualité de la couche diffusée et celle de la zone active du composant.

C'est ainsi que nous avons choisi pour objectif, d'élaborer deux modèles de calcul théorique basés sur les différentes équations mathématiques qui régissent les phénomènes physiques déterminant le bon fonctionnement des dispositifs

Le premier modèle permet le calcul des différents paramètres électriques du silicium dopé Il traite le cas de cinq états dopants deux donneurs et trois accepteurs. Les caractéristiques du silicium intrinsèque, peuvent être également données par ce programme

Le second modèle traite les profils de distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace des jonctions *pn* à profil de diffusion Gaussien.

Pour tester leur validité, nous avons exploité ces deux programmes dans:

- la simulation d'une couche diffusée en fonction des caractéristiques $\sigma = f(T)$, $\sigma = f(N_D)$, $\sigma = f(N_A)$ où T est la température N_A la concentration des accepteurs, N_D celle des donneurs et σ la conductivité électrique;

- l'étude des profils de dopage des jonctions N^*P implantées As^{*} à différentes doses et recuites à différentes températures.

Les résultats obtenus, étant conformes à ceux rencontrés lors de notre recherche bibliographique, ceci nous permet de juger la validité des modèles dans le domaine de l'étude effectuée.

Sommaire

INTROL	DUCT	ION GENERALE	I
<u>Chapitre</u>	<u>e 1:</u>	DIFFUSION ET TRANSPORT	
1.1	INTR	ODUCTION	3
1.2	DIFF	USION ATOMIQUE	.1
	1.2.1	Théorie Atomique de l'Hétérodiffusion	-1
	12.2	Mécanismes de Diffusion	ب ج
1.3	DIFFU	JSION DE CHARGES	ر د
	1.3.1	Structure de Bande du Silicium	0 0
	1.3.2	Mécanismes de Diffusion	10
	1.3.3	Mécanismes de Diffusion et Paramètres Electriques	10
		des Semi-Conducteurs	11
1.4	DIFFU	JSION ET TRANSPORT	1.1
	1.4.1	Equation de Fick	14
	1.4.2	Relation entre Transport et Diffusion	15
1.5	CARA	CTERISATION DES IONS ELECTRIQUEMENT ACTIES	c
	DANS	LES COUCHES DIFFUSEES PAR)
	C-V N	IETRIE	17
	1.5.1	Théorie de la Technique	18
	1.5.2	Mesures et Exploitation des Données	19
1.6	CONC	LUSION	22

Chapitre 2: MODELES MATHEMATIQUES ET SIMULATION DU COMPORTEMENT ELECTRIQUE DU DOPAGE

2.1 INTRODUCTION	2.4
2.2 CALCUL DES PARAMETRES ELECTRIQUES DU SIICIUM EXTRINSFOLIE	2.
2 2.1 Procédure théorique	25 25
2 2 2 Présentation du Programme	
2.3 CALCUL DES PROFILS DE DOPAGE A PARTIR DES	
MESURES CAPACITE-TENSION	2.5
2 3.1 Théorie de calcul	
2 3 2 Présentation du Programme	45
2.4 CONCLUSION	42
Chanitro 3. DESULTATS ET INTEDDDETATION	
<u>Chapter 5.</u> RESULTATS ET INTERPRETATION	
INTRODUCTION	48
PARTIE A: SIMULATION DES PARAMETRES ELECTRIQU	JES
D'UNE COUCHE DIFFUSEE	
A.1 INTRODUCTION	50
A.2 EFFET DE LA CONCENTRATION	50
A 2 1 Choix de la Concentration Optimale du Dopage	
Principal	51
A 2 2 Choix de la Concentration Optimale du Dopage	
Auxiliaire	52
A.J EFFET DE LA TEMPERATURE STOR	57
OPTIMALE DES MAJORITAIRES	ATION
A 5 INTERPRETATION DES DESULTATS	. 60
A 6 CONCLUSION	61
PARTIE B: ETUDE DES PROFILS DE DOPAGE	_
B.1 INTRODUCTION	67
B.2 PRESENTATION DES ECHANTILLONS	
B.3 RESULTATS OBTENUS	
B.4 DISCUSSION ET INTERPRETATION	
B.5 CONCLUSION	······

CONCLUSION GENERALE	 8
ANNEXE A	 84
REFERENCES	 80

.

.

.

LISTE DES ILLUSTRATIONS

CHAPITRE 1

Fig. 1.1: Schéma représentatif des principaux mécanismes de diffusion	7
Fig.1.2: Structure de bande énergétique du silicium	/
Fig.1.3: Shéma représentatif de la structure de bande d'un modèle	9
cubique des semiconducteurs	0
Fig.1.4: Mobilité des électrons dans le silicium en fonction de la température	9
Fig.1.5: Mobilité des électrons dans le Si en fonction de la température pour différentes	12
concentrations d'impuretés	12
Fig.1.6: Mobilité des trous dans le Si en fonction de la température	13
Fig.1.7: Caractéristiques $1/C^2 = f(V)d'$ une jonction pn	1.5
(a) dépourvue de niveaux pièges;	14
(b) contenant des niveaux pièges	

CHAPITRE 2

Fig.2.1: Capacité périphérique d'une jonction <i>pn</i> diffusée	37
Fig.2.2: Schéma représentatif de la zone de dépletion d'une jonction pn diffusée dans	
un semiconducteur épitaxial	20
Fig.2.3: Représentation logarithmique de la fonction $x = erfc(y)$ montrant	
le changement de variable z	12
Fig.2.4: Calcul de la fonction $y = erfc (x)$ par fittage parabolique en considérant la	. 4.9
variable z	.44

LISTE DES ILLUSTRATIONS

CHAPITRE 1

Fig. 1.1: Schéma représentatif des principaux mécanismes de diffusion	7
Fig. 1.2: Structure de bande énergétique du silicium	9
Fig.1.3: Shéma représentatif de la structure de bande d'un modèle	
cubique des semiconducteurs	9
Fig.1.4: Mobilité des électrons dans le silicium en fonction de la température	12
Fig.1.5: Mobilité des électrons dans le Si en fonction de la température pour différ	entes
concentrations d'impuretés	13
Fig. 1.6: Mobilité des trous dans le Si en fonction de la température	13
Fig.1.7: Caractéristiques $1/C^2 = f(V)d$ une jonction <i>pn</i>	14
(a) dépourvue de niveaux pièges;	
(b) contenant des niveaux pièges	

CHAPITRE 2

Fig.2.1: Capacité périphérique d'une jonction pn diffusée	37
Fig.2.2: Schéma représentatif de la zone de dépletion d'une jonction pn diffusée dans	
un semiconducteur épitaxial	39
Fig.2.3: Représentation logarithmique de la fonction $x = erfc(y)$ montrant	
le changement de variable z	43
Fig.2.4: Calcul de la fonction y = erfc (x) par fittage parabolique en considérant la	
variable z	44

CHAPITRE 3

Partie A

Fig.A.1: Caracteristiques d'une couche diffusée N/P en fonction de la
concentration N_D (T= 300K et $N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) 5
Fig.A.2: Caracteristiques électriques d'une couche diffusée N / P en fonction de
la concentration N_A des minoritaires (T = 300K et N_D = 10 ¹⁹ cm ⁻³)
Fig.A.3: Caracteristiques électriques de la couche diffusée simulée en fonction
de la température ($N_D = 10^{14} \text{ cm}^3$ et $N_D = 10^{19} \text{ cm}^3$)
Fig.A.4: Caracteristique $\sigma = f(T)$ d'une couche diffusée N / P avec
$N_{A} = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 58
Fig.A.5: Caracteristique $\sigma = f(T)$ d'une couche diffusée P / N avec
$N_D = 10^{14} \text{ cm}^3 \text{ et } N_A = 10^{17} \text{ cm}^3$
Fig.A.6: Variation de la concentration optimale des majoritaires avec la température
(Couche diffusée N/P avec $N_A = 10^{14} \text{ cm}^3$). 60
Fig.A.7: Evolution de la densité ionisée des donneurs (P, As) avec la température
(Couche diffusée N/P avec $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$)
Fig.A.8: Variation de l'énergie d'activation de l'espèce dopante principale avec la
concentration (Couche diffusée N/P avec $N_A = 10^{14}$ cm ⁻³ pour T= 300K)64
Fig.A.9: Evolution de la conductivité électrique avec la température à différentes
concentrations de dopage ($N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) 65

Partie B

_

Fig.B.1:	Profil de distribution des ions électriquement actifs dans la région la plus
	dopée de la jonction
	(a) $T_{recust} = 1050^{\circ}C$, (b) $T_{recust} = 1000^{\circ}C$; (c) $T_{recust} = 950^{\circ}C$, (d) $T_{recust} = 900^{\circ}C$;
Fig.B.2:	Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la région la moins
	dopée de la jonction
	(a) $T_{\text{recuit}} = 1050^{\circ}\text{C}$; (b) $T_{\text{recuit}} = 1000^{\circ}\text{C}$; (c) $T_{\text{recuit}} = 950^{\circ}\text{C}$, (d) $T_{\text{recuit}} = 900^{\circ}\text{C}$;
Fig.B.3:	Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge
	d'espace des jonctions dopées à 4.10 ¹⁵ cm ⁻² et traitées à différentes

Fig.B.4: Schéma représentatif du profil de dopage dans

les deux régions de la jonction

Fig.B.5: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la région la plus dopéedes jonctions pn recuites à 1010°C et dopées à différentes doses75

73

- Fig.B.8: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans les différentes régions

 d'une jonction pn fabriquée par l'ENIE
 78

C'est dans cette optique que nous avons élaboré deux modèles mathématiques

Le premier s'intéresse à la caractérisation électrique de la couche diffusée en fonction des paramètres température et concentration de dopage

Le second traite la redistribution des ions diffusés électriquement actifs dans la zone de charge d'espace, en utilisant des mesures expérimentales de la capacité sous polarisation inverse

Dans cette étude, nous présentons notre travail en trois chapitres

Le premier chapitre est réservé à l'explication des différents phénomènes de diffusion et leur relation avec les mécanismes de transport dans les semi-conducteurs. En plus, la technique de C-V mètrie utilisée pour la caractérisation des ions électriquement actifs est présentée vu son exploitation dans notre étude.

Dans le second chapitre, nous présentons les formules mathématiques utilisées dans l'élaboration des deux programmes de calcul faisant l'objet de ce travail

Dans le troisième chapitre, nous regroupons les résultats de simulation obtenus par l'exploitation des deux modèles. La partie A traite la simulation des caractéristiques électriques d'une couche diffusée, alors que dans la partie B nous présentons les résultats du modèle de diffusion appliqué à des jonctions NP traitées thermiquement par recuit rapide isotherme(RRI) à différentes doses et températures de recuit. Afin de donner à notre travail un aspect industriel direct, nous traitons également le cas d'une diode réalisée par l'Entreprise Nationale des Industries Electroniques (ENIE).

Chapitre 1

ì

DIFFUSION ET TRANSPORT

1.1 INTRODUCTION

La diffusion est le phénomène de base qui gère les mécanismes de transport, dans les semiconducteurs. Elle se répartie en deux processus principaux :

- une diffusion de matière liée à une migration atomique;

- une diffusion de charges liée à une migration de porteurs libres

D'une manière assez formelle, ces processus peuvent être expliqués par les lois d'écoulement en physique lois de Fick et équation de Boltzmann respectivement [1].

Dans la technologie de fabrication des composants électroniques à base de jonction, la diffusion atomique est une étape primordiale. Elle permet le dopage sélectif des substrats semi-conducteurs pour la réalisation des zones diffusées N et P.

Dans un second lieu, la diffusion des porteurs de charge gouverne les caractéristiques électriques des composants en fonctionnement. La mobilité, la conductivité ainsi que d'autres paramètres, sont conditionnés par cette diffusion.

Dans ce chapitre, nous étudierons d'une manière phénoménologique les processus physiques et technologique des deux types de diffusion, en donnant un aperçu sur les caractéristiques

électriques influencées par les mécanismes de diffusion des porteurs de charge. Ces derniers étant très sensibles aux paramètres: température et concentration des impuretés de dopage. Ensuite, nous finirons par présenter l'une des méthodes les plus utilisées dans la détermination des ions électriquement actifs présents dans les couches diffusées. Cette technique est basée sur l'exploitation des mesures Capacité-Tension.

1.2 DIFFUSION ATOMIQUE

Dans la théorie atomique de la diffusion, deux cas principaux sont à distinguer:

- L'autodiffusion qui traduit la migration des atomes A dans le réseau A (ou dans le sousréseau A pour un composé).
- L'hétérodiffusion qui traduit la diffusion d'un atome d'une impureté B dans le corps pur A

Vu l'intérêt que nous portons à la fabrication des composants électroniques dont la technologie fait appel à la diffusion d'atomes étrangers au réseau (dopage), le second phénomène occupe une place majeure dans le domaine de la micro-électronique.

D'après l'étude détaillée de J PHILIBERT [1], nous résumons la théorie atomique de l'hétérodiffusion comme suit

1.2.1 Théorie Atomique de l'Hétérodiffusion

L'atome diffusant dans le cas d'une hétérodiffusion peut être situé soit en site substitutionnel, ou en site interstitiel

Solutés substitutionnels

Du fait de leur rôle de dopant, les éléments des colonnes III et V ont été largement étudiés. Dans un substrat intrinsèque, la diffusion des atomes dopants est accompagnée de celle des porteurs de charge créés. Ceci engendre un champ électrique interne qui a pour effet de doubler la diffusivité du dopant. Pour une concentration de dopage en surface assez élevée, les profils de diffusion présentent une cassure caractéristique Cette dernière les fait décomposer en deux profils indépendants avec deux coefficients de diffusion et des énergies d'activation différentes Ces deux régimes sont attribués aux deux états de charge des lacunes En effet, le soluté se comporte comme un dopant qui déplace le niveau de Fermi La position de ce dernier, dans la bande interdite, par rapport aux niveaux associés aux états de charge possibles de la lacune varie avec la profondeur de pénétration. Suivant cette dernière la charge des lacunes diffère; d'où des énergies d'interaction lacune-impureté différentes et par suite des diffusivités différentes.

Impuretés interstitielles

Il s'agit là de nombreux éléments chimiques qui diffusent dans le matériau semi-conducteur avec des diffusivités très élevées, et des énergies d'activation très faibles (0.4 à 1 2 eV). Tel est le cas, par exemple, de la diffusion de l'hydrogène, du fer et des métaux nobles dans le silicium et le Germanium Des diffusions aussi rapides mettent en jeu nécessairement des interstitiels. Pour les atomes de faibles dimensions, la diffusion s'opère par le mécanisme interstitiel direct Par contre pour les métaux nobles ou les métaux de transition, le mécanisme est différent selon le défaut prédominant du solvant et la position initiale du soluté dans ce dernier.

1.2.2 Mécanismes de Diffusion

Du point de vue atomique, la diffusion résulte de sauts individuels des atomes dans le solide

La figure 1 1 rappelle les mécanismes les plus simples qui permettent la migration de ces atomes dans le réseau

La plupart des mécanismes de diffusion exigent la présence de défauts ponctuels En effet, dans un cristal parfait, on ne peut concevoir qu'un mécanisme d'échange interatomique simple ou cyclique. Le premier est très improbable vu la forte répulsion des atomes à courte distance; alors que le second est rendu peu probable par le fait qu'il exige le jeu de plusieurs sauts atomiques coordonnés. En ce qui est pour les mécanismes faisant appel à des défauts ponctuels, nous citons les trois principaux

• Mécanisme lacunaire

Le passage d'un atome proche voisin à un site vacant du réseau fait apparaître une lacune au site qu'il vient de quitter. Dans ce mécanisme, il y aura donc conservation du nombre de lacunes, d'où l'on peut parler d'une migration de lacune comme d'une migration d'atome.

• Mécanisme interstitiel

Le mécanisme traduisant le saut d'un atome en position interstitielle en un second site de même nature est dit "mécanisme interstitiel direct".

Une variante de ce mécanisme est possible, si l'atome considéré est capable de se positionner en substitution: c'est le mécanisme interstitiel indirect. Si cet atome est en site substitutionnel, il ne pourra migrer que si un atome interstitiel voisin le chasse de sa position, le mettant ainsi lui même en position interstitielle.

Une autre complication est l'interstitiel dissocié, qui apparaît sous forme d'une paire d'atomes centrée sur un site.

• Mécanisme bilacunaire

Dans ce mécanisme, l'atome échange le site avec une des lacunes de la paire. Selon la structure cristalline du réseau, cet échange peut être avec ou sans dissociation de la paire de lacunes.

Dans tous ces mécanismes, la migration d'atomes est conditionnée par la probabilité de saut. Cette dernière est exprimée par le produit de la probabilité " P_f " que l'environnement permette ce saut par la probabilité " P_m " pour que l'atome atteigne l'énergie cinétique nécessaire pour l'effectuer:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P_f} \cdot \mathbf{P_m}$$



Fig. 1.1: Schéma représentatif des principaux mécanismes de diffusion [2]

- 1) Echange simple;
- 2) Echange cyclique;
- 3) Lacunaire;
- 5) Interstitiel indirect;
- 4) Interstitiel direct;
- 6) "Crowdien"

1.3 DIFFUSION DE CHARGES

Les propriétés électriques des semiconducteurs sont en relation avec la concentration des porteurs de charge. En effet, ces derniers diffusent dans le cristal semiconducteur selon plusieurs mécanismes et contribuent à la détermination de la mobilité, la conductivité ainsi que d'autres paramètres.

Les processus de diffusion de ces porteurs libres sont, principalement, liés aux phonons acoustiques et optiques ainsi qu'aux impuretés ionisées [3].

Deux catégories de mécanismes sont à distinguer:

- une diffusion par le biais du réseau,
- une diffusion par le biais des atomes impuretés.

Pour comprendre ces processus, il est nécessaire d'avoir une connaissance sur la structure de bande du cristal considéré.

1.3.1 Structure de Bande du Silicium

La bande de conduction (BC) du silicium contient 6 vallées équivalentes à travers les directions cristallographiques<100>. D'autres vallées relatives sont plus hautes en énergie et ne sont pas impliquées dans les processus de transport Ces six vallées sont de forme ellipsoidale Elles sont centrées à $0.85k_{max}$ (k_{max} étant la limite de la zone de Brillouin) et sont étalées le long des directions<100>. De ce fait, dans chaque vallée, les électrons possèdent une masse effective longitudinale "m₁" supérieure à la transversale "m₄"

La bande de valence (BV) est constituée de deux sous-bandes dégénérées à k=0 et d'une troisième écartée de 0.44 eV. En raison de l'énergie de séparation et des faibles densités d'états, cette troisième bande ne présente qu'une faible contribution au transport des trous.

Les deux premières sous-bandes sont de forme non-parabolique et sont "warped". De ce fait, la masse effective des trous est fonction de leurs énergies ainsi que de la direction de leur vecteur d'onde k.

La structure de bande du silicium est donnée par la figure 1.2, alors qu'un schéma représentatif est donné sur la figure 1.3.



Fig.1.2: Structure de bande énergétique du Si [4]



Fig.1.3: Schéma représentatif de la structure de bande d'un modèle cubique des semi-conducteurs [4]

1.3.2 Mécanismes de Diffusion

Les transitions électroniques liées au transport de charges dans les semi-conducteurs sont de deux types

- intra-vallées, quand les états initial et final sont situés dans la même vallée;
- inter-vallées, s'ils sont situés dans des vallées différentes.

Par analogie, les transitions des trous peuvent être intra-bandes ou inter-bandes.

Dans la diffusion inter-vallées, les transitions sont interdites ou permises selon la position des vallées dans la zone de Brillouin et la symétrie des phonons impliqués[4].

Dans les cristaux homogènes, ces transitions sont dues essentiellement aux phonons, aux impuretés et aux autres porteurs

• Diffusion par Phonons

L'interaction des phonons avec les porteurs de charge est causée par la déformation du cristal parfait. Cette déformation est produite par les phonons à travers le mécanisme du potentiel de déformation ou à travers les forces électrostatiques crées par les ondes de polarisation qui accompagnent ces phonons.

Le premier type d'interaction caractérise les semi-conducteurs covalants, alors que le second règne dans les matériaux polaires.

Dans la diffusion par phonons, les transitions optiques et inter-vallées sont contrôlées par une énergie caractéristique, typiquement équivalente à quelques centaines de degré K. Par conséquent, ces transitions deviennent importantes à haute température; alors que les modes acoustiques sont plus importants aux basses températures et faibles champs électriques surtout dans le cas des matériaux à haute pureté[3].

Diffusion par impuretés

Les interactions porteur-impureté constituent une deuxième source de diffusion. La présence des impuretés dans le cristal peut être sous deux formes: neutre ou ionisée.

Dans le second cas, l'interaction est de type coulombien, et la diffusion correspondante est considérable, uniquement, dans les transitions intra-vallées [4]

La diffusion par impuretés ionisées dépend essentiellement de la concentration native de ces derniers dans le cristal

En raison de la nature électrostatique ou coulombienne de cette diffusion, elle est en général dominante aux faibles énergies électroniques condition satisfaite aux basses températures et aux faibles champs électriques appliqués[3]

Cependant, l'effet total des impuretés neutres est en général très faible.

1.3.3 Mécanismes de Diffusion et Paramètres électriques des semi-conducteurs

Le paramètre le plus influencé par les différents mécanismes de diffusion des porteurs de charge est la mobilité. La résistivité et la conductivité électrique étant définies à partir de cette dernière, ils sont également gouvernés par ces mécanismes

La dépendance en température de la mobilité des électrons dans le silicium est schématisée sur les figures 1.4 et 1.5 pour différentes densités de dopage Aux basses températures, il y a dominance du mécanisme de diffusion par le biais des impuretés La mobilité subit ainsi une forte réduction quand la concentration des impuretés augmente A des températures supérieures, les phonons deviennent plus importants, et l'effet du dopage sur la mobilité disparaît Dans la gamme d'énergie où l'interaction des phonons est dominante, une déviation du comportement en $T^{-3/2}$ (typique pour les phonons acoustiques) est constatée Ceci est causé par l'apparition des modes optiques et inter-vallées qui donnent une variation en $T^{-5/2}$ à la mobilité

La mobilité des trous est en général influencée par les mêmes mécanismes de diffusion que ceux des électrons. Leur masse effective étant supérieure, la mobilité des trous est généralement plus faible que celle des électrons. La figure 1.6 illustre la variation de la mobilité des trous avec la température.



Fig. 1.4: Mobilité des électrons dans le Si en fonction de la température [4]



Fig.1.5: Mobilité des électrons dans le Si en fonction de la température pour différentes concentrations d'impuretés [4]



Fig. 1.6: Mobilité des trous dans le Si en fonction de la température différents points: résultats expérimentaux; ligne continue: modèle théorique.

.

1.4 DIFFUSION ET TRANSPORT

Nous avons vu précédemment que la présence des impuretés étrangères au réseau est à l'origine d'un transport de matière d'une part et d'un transport de charge d'autre part. En effet, les différentes études effectuées sur les phénomènes de transport montrent qu'une diffusion de porteurs ou d'atomes ne peut avoir lieu sans l'existence préalable d'un gradient de concentration Ceci est confirmé théoriquement par les équations de Fick qui sont à la base des lois générales régissant les phénomènes de transport dans les différents matériaux

1.4.1 Equations de Fick

Plaçons-nous dans le cas d'un système unidirectionnel et considérons qu'il n'est soumis à aucune force extérieure. La première loi de Fick traduit le mouvement naturel de soluté ou de particules sous l'effet d'un gradient de concentration. Elle est donnée par l'expression suivante:

$$\mathbf{J} = -\mathbf{D}\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}} \tag{1-1}$$

où "J" est la densité de flux de soluté, "c" sa concentration et "D" le coefficient de diffusion ou diffusivité.

Cependant, l'équation (1-1) n'est guère utilisable qu'en régime permanent, c'est à dire lorsque le flux ne dépend pas du temps. En régime non-permanent, il faut compléter l'équation de Fick par l'équation de continuité

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{t}} \tag{1-2}$$

Une combinaison simple entre (1-1) et (1-2), avec "D" indépendant de x, mène à la deuxième loi de Fick exprimée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}^2} \tag{1-3}$$

Les expressions analytiques, solutions de l'équation (1-3), diffèrent 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" à partir des profils expérimentaux[1].

Un paramètre très important dans les équations de Fick est le coefficient de diffusion. Ce dernier, caractéristique du type de soluté, varie avec la température selon une loi d'Arrhenius :

$$D = D_0 \exp(-\frac{E_0}{KT})$$
(1-4)

où E_0 est l'énergie critique que doit posséder l'atome pour effectuer un saut entre deux positions stables. L'attribution d'une signification physique à E_0 nécessite la connaissance du mécanisme atomique particulier de la diffusion.

1.4.2 Relation Entre Transport et Diffusion

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 extérieur, ou force de transport. Sous l'effet de cette force, les particules se déplacent avec une certaine vitesse moyenne <v>, donnant ainsi naissance à un flux "<v>c". Ceci mène à l'expression générale de la première loi de Fick:

$$\mathbf{J} = -\mathbf{D}\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}} + \langle \mathbf{v} \rangle \mathbf{c}$$
(1-5)

De même, la deuxième loi de Fick sera donnée par l'expression suivante:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{t}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}} \right) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\langle \mathbf{v} \rangle \mathbf{c} \right)$$
(1-6)

L'effet combiné d'un gradient de concentration et d'une force de transport peut conduire à un état stationnaire si les flux correspondants sont égaux et de signes contraires:

$$\mathbf{J} = \mathbf{0} \Longrightarrow \mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}} = \langle \mathbf{v} \rangle \mathbf{c}$$
(1-7)

Supposons que la force appliquée dérive d'un potentiel $F = -\frac{d\Phi}{dx}$. A l'équilibre thermodynamique, la distribution de l'espèce considérée doit suivre la loi de distribution de Boltzmann:

$$C(x) = C^{ste} \cdot exp\left[-\frac{\Phi(x)}{KT}\right]$$
(1-8)

D'où

$$\frac{dc}{dx} = -\frac{c}{KT}\frac{d\Phi}{dx} = c\frac{F}{KT}$$
(1-9)

En portant ces deux expressions dans (1-7), on aura:

$$\frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{\mathbf{D}} = \frac{\mathbf{F}}{\mathbf{KT}} \tag{1-10}$$

C'est l'équation de Nernest - Einstein.

Lorsque la force extérieure est due à un champ électrique: F = qE, la vitesse moyenne sera donnée par: $\langle v \rangle = \mu E$ où μ est la mobilité.

L'équation (1-10) se réduira donc à l'expression (1-11) qui contient un terme de transport " μ " et un terme de diffusion "D":

$$\frac{\mu}{D} = \frac{q}{KT}$$
(1-11)

A partir de cette équation, on retombe sur la loi d'Ohm avec la conductivité électrique exprimée par:

$$\sigma = \frac{cq^2 D}{KT}$$
(1-12)

1.5 CARACTERISATION DES IONS ELECTRIQUEMENT ACTIFS DANS LES COUCHES DIFFUSEES PAR C-V METRIE

La diffusion des impuretés est une étape fondamentale dans le processus de fabrication des composants électroniques Cependant, seuls les ions électriquement actifs sont capable de contribuer à la conduction et par suite à la détermination des performances électriques de ces derniers. Or, nous savons qu'après diffusion, les ions peuvent occuper trois types de sites:

- substitutionnels,
- interstitiels normaux;

• ou interstitiels anormaux (défauts préexistants ou induits par le processus technologique de fabrication)

Seuls les sites substitutionnels sont en mesure de conserver la conductivité électrique des ions diffusés. Ainsi, ces ions peuvent être détectés par les techniques usuelles de caractérisation électrique telles que les mesures Courant-Tension (I-V) ou Capacité-Tension (C-V)

La technique C-V est l'une des techniques les plus répandues dans ce domaine. Elle permet non seulement de déterminer la concentration des centres ionisés, mais également d'accéder au profil de distribution de ces derniers dans la région active du composant considéré.

1.5.1 Théorie de la Technique

Sous polarisation inverse, la zone de transition d'une diode s'élargit, et fait apparaître une capacité de transition C_t . Pour une jonction abrupte, cette dernière varie avec la tension appliquée comme suit:

$$C_{t} = \frac{C_{0}}{\left(1 + \frac{v}{v_{D}}\right)^{1/2}}$$
(1.13)

- C₀ est la valeur de la capacité sous polarisation nulle;
- V_D la tension de diffusion de la jonction.

Parallèlement, la largeur de la zone de charge d'espace est donnée par l'expression suivante:

$$W = \left[\frac{2\varepsilon}{q} \frac{N_{A} + N_{D}}{N_{A}N_{D}} (V_{D} + V)\right]^{1/2}$$
(1.14)

• N_A et N_D représentent la concentration de dopage des zones P et N respectivement. Pour une jonction dissymétrique N^*P , cette expression se réduira à:

$$W = \left[\frac{2\varepsilon}{qN_{A}}(V_{D} + V)\right]^{1/2}$$
(1.15)

La capacité étant généralement donnée par l'expression :

$$\mathbf{C} = \mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{s}} / \mathbf{W} \tag{1.16}$$

.

ceci nous permet d'aboutir aux valeurs de C_t et C_0 données respectivement par les relations suivantes:

$$C_0 = \left[\frac{2\varepsilon N_A}{2V_D}\right]^{1_2}$$
(117)

$$C_{t} = \left[\frac{q\epsilon_{0}N_{A}}{2}\right]^{1/2} \frac{1}{\left(V_{D} + V\right)^{1/2}}$$
(1.18)

1.5.2 Mesure et Exploitation des Données

Vu qu'elle est non destructive, la technique de mesure Capacité-Tension (C-V) est largement utilisée dans la caractérisation électrique des composants.

• C-V mètrie et Paramètres de Dopage

La mesure de la capacité en fonction de la tension inverse appliquée permet le tracé de la courbe $1/C^2 = f(V)$.

Cette dernière, ayant une allure linéaire (Fig. 1.5), est donnée par l'expression suivante:

$$\frac{1}{C_t^2} = \frac{2}{q\epsilon N_A} (V_D + V)$$
(1 19)

L'exploitation de cette caractéristique permet la détermination de:

• La concentration de centres ionisés N_A fournie par la pente de la courbe suivant la formule:

$$N_{A} = \frac{2}{q\varepsilon_{s}} \left[\frac{d(1/C^{2})}{dV} \right]^{-1}$$
(120)

• La tension de diffusion V_D par extrapolation de la droite caractéristique à l'origine des tensions. Cette extrapolation permet d'aboutir à la valeur de C_0 et par suite à V_D d'après l'expression:

$$V_{\rm D} = \frac{1}{C_0^2} \frac{q \varepsilon N_{\rm A}}{2} \tag{1.21}$$

• C-V mètrie et Niveaux Profonds

Le traitement de la caractéristique $1/C^2 = f(V)$ à différentes températures renseigne sur la présence de niveaux profonds

Un comportement non-linéaire de cette caractéristique au voisinage de la polarisation nulle peut être expliqué par la présence de niveaux pièges dans la zone de charge d'espace[5]. Ces derniers changent d'états sous polarisation inverse et affectent la concentration des centres dopants ce qui influe sur la caractéristique Capacité-Tension.

La température d'apparition de cette dégradation permet d'estimer la nature du niveau profond existant. Un exemple d'une caractéristique $1/C^2 = f(V)$ d'un échantillon contenant des niveaux pièges est illustré sur la figure 1 7.

• C-V mètrie et Profil de Dopage:

Le comportement électrique des systèmes semi-conducteurs peut être précisément expliqué si la distribution des impuretés profondes et peu profondes est connue. Cette distribution est également considérée comme un test du processus de fabrication.

En effet, il existe plusieurs programmes (tel que le simulateur SUPREM III [2]) qui modélisent avec précision toutes les étapes du processus technologique de fabrication en fournissant la distribution des impuretés dopantes. En outre, la méthode de C-Vmètrie, initialement décrite par Schottky (Chapitre 3), est l'une des techniques les plus utilisées dans ce domaine.



Fig. 1.7: Caractéristique 1/C² = f(V) d'une jonction [6]
(a) dépourvue de niveaux pièges;
(b) contenent des niveaux pièges;

(b) contenant des niveaux pièges

Dés lors, plusieurs recherches de simulation basées sur cette méthode ont été élaborées [7,8] Pour construire numériquement le profil de dopage N(W) en fonction de la largeur W de la zone de charge d'espace à partir des mesures Capacité-Tension, la procédure usuelle de base doit comprendre les étapes suivantes [7]

1. Supposer un profil initial de dopage $N^{\circ}(W)$,

2. Résoudre les équations standards du semi-conducteur (équation de Poisson, équations de la densité de courant et équations de continuité) et calculer les capacités correspondantes aux tensions de polarisation appliquées,

3. Comparer les paires capacité-tension calculées avec celles mesurées. Si les capacités calculées sont suffisamment proches des capacités mesurées en tout point de polarisation, le profil de dopage utilisé dans l'itération précédente est la meilleure approximation du profil idéal. Si non aller à l'étape 4

4. Modifier le profil de dopage utilisé dans l'itération précédente selon les différences entre les capacités calculées(ou simulées) et celle mesurées

5. Revenir à l'étape 2 avec le nouveau profil de dopage construit

Bien que cette technique de simulation a été développée par plusieurs auteurs, la plupart des publications évite la simulation numérique, car la convergence est considérée incertaine particulièrement pour quelques cas de distribution de dopage telles que les profils implantés En plus, le bon choix du profil initial de dopage est d'une importance majeure dans la validité de la simulation numérique. Ainsi loin des problèmes de simulation, nous proposons un programme de calcul (chapitre 2) pouvant être exploité en prenant ses résultats comme profils initiaux de dopage

1.6 CONCLUSION

La diffusion est un phénomène indispensable dans tout matériau dopé. Une migration atomique est généralement couplée à une diffusion de porteurs de charge qui est à la base des phénomènes de conduction dans les semi-conducteurs. La température et la concentration d'atomes diffusés sont deux parametres agissant continuellement sur les mécanismes de diffusion (de matière ou de charges) Ceci rend délicat la détermination d'une loi générale définissant la relation entre la diffusion et le transport. De ce fait, plusieurs techniques expérimentales (SIMS, RBS, C-Vmétrie,) ont été élaborées dans le but de mieux définir le comportement atomique et électrique réel des atomes diffusés dans le matériau de base. Cependant, la simulation reste la meilleure façon de prédire à priori ce comportement Les modèles mathématiques, que nous avons établis pour atteindre ce but, feront l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 2

MODELES MATHEMATIQUES ET SIMULATION DU COMPORTEMENT ELECTRIQUE DU DOPAGE

2.1 INTRODUCTION

La présence d'impuretés actives dans un semi-conducteur affecte largement ses proprietés électriques. La position du niveau de Fermi, la résistivité, la mobilité ainsi que d'autres paramètres électriques dépendent principalement de la température aussi bien que de la densité et le type des impuretés présentes.

La détermination de toutes ces propriétés n'est pas suffisante pour comprendre le comportement électrique des systèmes semi-conducteurs. Ce comportement ne peut être expliqué que si les concentrations d'impuretés présentes sont connues. Il est également primordial de connaître la distribution de ces dernières afin de déterminer la qualité du processus de fabrication

Dans le cas du silicium, deux programmes sont réalisés dans le but de fournir toutes ces informations. Le premier programme s'intéresse au calcul des différents paramètres électriques du silicium dopé en fonction de la température et de la concentration d'impuretés. Le second permet
de déterminer le profil de dopage dans la zone de charge d'espace en utilisant les paires de données capacité-tension (C-V)

2.2 CALCUL DES PARAMETRES ELECTRIQUES DU SILICIUM EXTRINSEQUE

2.2.1 Procédure théorique

La présence des impuretés dans un semi-conducteur contribue à la modification des porteurs de charges mobiles et affecte les propriétés électriques du matériau Ces propriétés sont généralement fonction de la température, de la densité et du type d'impuretés présentes Celles ci agissent sur la structure énergétique du matériau aussi bien que sur les paramètres électriques liés aux porteurs libres La position du niveau de Fermi et la mobilité des porteurs sont les deux paramètres les plus influencés par la présence des impuretés dopantes. Leurs calculs constituent la base de ce programme

Dans ce qui suit, nous présenterons les différentes équations utilisées dans cette procédure

Position du Niveau de Fermi

La position exacte du niveau de Fermi est déterminée par une procédure cherchant la valeur de E_F qui satisfait la condition de neutralité électrique. Cette procédure cherche le zéro du paramètre TEST défini par la différence entre la somme des charges négatives et celle des charges positives (équation 2.1).

$$TEST = \left(n + N_A^{-}\right) - \left(p + N_D^{+}\right)$$
(21)

La méthode utilisée est basée sur le rétrécissement de l'intervalle $[E_F, E_{FG}]$ possédant initialement les valeurs 0 eV, et 1.2 eV respectivement, jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit atteint. Ce dernier est donné par:

$$\left|\frac{\mathbf{E}_{\mathrm{F}} - \mathbf{E}_{\mathrm{FG}}}{2}\right| \le \mathbf{E}_{\mathrm{F}} \mathbf{E}_{\mathrm{R}} + \mathbf{E}_{\mathrm{A}}$$
(2.2)

où E_R et E_A sont les erreurs maximales autorisées relative et absolue respectivement. Ces deux valeurs sont toutes deux assignées à 10⁻⁶ pour avoir le poids approprié dans le critère d'arrêt quand E_F est égale à 1.0eV.

La détermination de la position du niveau de Fermi nécessite le calcul de deux paramètres essentielles

- la densité des porteurs libres n et p;
- et la densité des centres ionisés N_D^+ et N_A^- .

Densités des Electrons et des Trous dans les Bandes Permises

Les densités des électrons et des trous dans les bandes permises sont calculées en utilisant les approximations de Blackmore [9] appliquées à l'intégrale de Fermi-Dirac. Ces approximations sont:

$$n = \begin{cases} N[exp(-\eta) + 0.27]^{-1} & \text{pour } \eta \in [-80,1] \\ 0.752253 \cdot N[\eta^2 + 1.7]^{3_4} & \text{pour } \eta \succ 1 \\ 0 & \text{pour } \eta \prec -80 \end{cases}$$
(2.3)

- n est la densité des électrons ou des trous
- N est la densité d'état dans la bande appropriée

$$\eta = \begin{cases} \frac{q(E_F - E_g)}{KT} & \text{pour les é lectrons} \\ \frac{-qE_F}{KT} & \text{pour les trous} \end{cases}$$
(2.4)

- E_F est l'énergie de Fermi en eV
- E_g est la largeur de la bande interdite
- **K**T/q est la tension équivalente de température

La densité d'états N est donnée par l'équation suivante

$$N = 2\left(\frac{2\pi km_0}{h^2}\right)^{3/2} m^{*3/2} T^{3/2}$$

$$= 4.829.10^{15} .m^{*3/2} T^{3/2}$$
(2.5)

où m^{*} est la masse effective du porteur approprié. Cette dernière est donnée, pour les électrons et les trous respectivement, par[10]:

$$m_{e}^{*} = 1.0627 - 1.61708.10^{-4} T + 6.83008.10^{-6} T^{2} - 3.32013.10^{-8} T^{3} + 8.04032.10^{-11} T^{4} - 9.66067.10^{-14} T^{5} + 4.54649.10^{-17} T^{6}$$
(2.6)

$$m_{h}^{*} = 0.590525 - 5.23548.10^{-4} T + 1.85678.10^{-5} T^{2} - 9.67212.10^{-8} T^{3} + 2.30049.10^{-10} T^{4} - 2.59673.10^{-13} T^{5} + 1.11997.10^{-16} T^{6}$$
(2.7)

La dépendance en température de la bande interdite du silicium est prise en considération. Elle est adaptée aux données de Macfarlane et al [11]. Elle est donnée par l'équation suivante:

$$E_{g} = 1.15556 + 3.23741.10^{-5..}T - 8.7011.10^{-7}T^{2} + 9.95401.10^{-10}T^{3}$$

- 3.80977.10⁻¹³T⁴ (2.8)

Densité des Impuretés Ionisées

La Densité des impuretés ionisées est calculée à partir de l'équation suivante[35]:

$$N_i = N_i \left[1 + gexp(\Delta) \right]^{-1}$$
 (2.9)

- N_t est la densité totale de dopage
- g est le facteur de dégénérescence

La densité d'états N est donnée par l'équation suivante

$$N = 2\left(\frac{2\pi km_0}{h^2}\right)^{3/2} m^{*3/2} T^{3/2}$$

$$= 4.829.10^{15} . m^{*3/2} T^{3/2}$$
(2.5)

où m^{*} est la masse effective du porteur approprié. Cette dernière est donnée, pour les électrons et les trous respectivement, par[10]:

$$m_{e}^{*} = 1.0627 - 1.61708.10^{-4} T + 6.83008.10^{-6} T^{2} - 3.32013.10^{-8} T^{3} + 8.04032.10^{-11} T^{4} - 9.66067.10^{-14} T^{5} + 4.54649.10^{-17} T^{6}$$
(2.6)

$$m_{h}^{*} = 0.590525 - 5.23548.10^{-4} T + 1.85678.10^{-5} T^{2} - 9.67212.10^{-8} T^{3} + 2.30049.10^{-10} T^{4} - 2.59673.10^{-13} T^{5} + 1.11997.10^{-16} T^{6}$$
(2.7)

La dépendance en température de la bande interdite du silicium est prise en considération. Elle est adaptée aux données de Macfarlane et al.[11]. Elle est donnée par l'équation suivante:

$$E_{g} = 1.15556 + 3.23741.10^{-5.} T - 8.7011.10^{-7} T^{2} + 9.95401.10^{-10} T^{3}$$

$$- 3.80977.10^{-13} T^{4}$$
(2.8)

Densité des Impuretés Ionisées

La Densité des impuretés ionisées est calculée à partir de l'équation suivante[35]:

$$N_i = N_t \left[1 + g \exp(\Delta) \right]^{-1}$$
(2.9)

- N_t est la densité totale de dopage
- g est le facteur de dégénérescence

$$\Delta = \begin{cases} \frac{q(E_F - E_g + E_a)}{KT} & \text{pour les donneurs} \\ \frac{q(E_a - E_F)}{KT} & \text{pour les accepteurs} \end{cases}$$
(2.1(1)

• E_a est l'énergie d'activation

L'effet de l'élévation de la densité de dopage sur l'énergie d'activation est également pris en considération. En effet d'après Penin et al. [12], la réduction de l'énergie d'activation est donnee par l'expression suivante:

$$E_{a} = E_{a0} - 0.36(\frac{1}{2} + \frac{a}{r_{d}}) \exp(-\frac{r_{d}}{a}) - \alpha N_{2}^{1/3}$$
(2.11)

- E_{a0} est l'énergie d'activation caractéristique de l'espèce dopante considérée.
- $a^* = 21.10^{-8}$ cm, le rayon effectif de Bohr
- $\alpha = 3.6 \ 10^{-8} \ eVcm$
- N₂ est la densité totale des impuretés de compensation
- $r_d = \left[\frac{3}{4\pi N_1}\right]^{l_3}$ est la distance moyenne entre les atomes de l'espèce dominante du dopage
 - Mobilité des Porteurs

Les mécanismes de diffusion introduits dans le calcul de la mobilité des porteurs sont

- La diffusion par le biais du réseau,
- La diffusion par le biais des impuretés ionisées,
- La diffusion par le biais des impuretés neutres,
- La diffusion par interactions électron-électron ou trou-trou.

La mobilité totale de chaque type de porteurs est donnée suivant la règle de Matthiessen [4] exprimée par:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} + \dots$$
(2.12)

Cette règle est très utile puisqu'elle donne une estimation de la mobilité de charge pour un matériau donné quand les mobilités singulières (μ_1 , μ_2 , μ_3 ,...) dues aux différents processus de diffusion sont connus.

Les formules mathématiques utilisées pour le calcul de la mobilité des électrons et des trous sont illustrées sur les tableaux A 1 et A 2 (Annexe A) respectivement.

Une fois les mobilités totales des électrons et des trous déterminées, une conductivité-mobilité effective est calculée comme étant la somme des deux mobilités divisée par la densité totale de chaque type de porteurs. Elle est donnée par l'expression suivante:

$$\mu_{d} = (n\mu_{n} + p\mu_{p})/(n+p)$$
(2.13)

La conductivité-mobilité, ainsi calculée, est identique à celle des porteurs majoritaires dans les échantillons extrinsèques [13].

Les expressions utilisées pour le calcul des mobilités des porteurs contiennent la constante diélectrique du silicium comme paramètre. A 300°K, elle est de 11.7 [14]. Sa variation avec la température est donnée par l'expression [13]:

$$K = \frac{1}{4\pi} - 1.2711.10^{-9} \exp(7.8.10^{-5} T) \quad (Farad/m) \tag{2.14}$$

Le calcul de la mobilité des porteurs de charge permet d'accéder à la conductivité, à la résistivite, et au coefficient de Hall. Les expressions de calcul de ces trois paramètres introduisent des poids appropriés des contributions des deux porteurs de charge. Elles sont données respectivement par

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p)$$
(2.15a)

$$\rho = \frac{1}{\sigma}$$
(2.15b)

$$R_{\rm H} = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{q(p\mu_p + n\mu_n)} / (p\mu_p + n\mu_n)$$
(2.15c)

Comme nous pouvons le remarquer, d'après toutes les formules de calculs présentées, les paramètres électriques s'interpénètrent, évoluant chacune suivant une loi différente. Ceci crée la difficulté de déterminer avec précision l'évolution, avec la température ou la concentration de dopage, des caractéristiques électriques du matériau dopé.

2.2.2 Présentation du programme

Description du Programme

Les entrées du programme se limitent aux caractéristiques des espèces dopantes:

- Leurs densités,
- Leurs énergies d'activation,
- Leur dégénérescence

Ces données sont utilisées par le programme pour calculer la position du niveau de Fermi et les propriétés électriques du silicium dépendant de la densité, et de la diffusion des porteurs de charge (résistivité, mobilité, coefficient de Hall.). Les algorithmes clefs de ce programme sont:

• La routine "FERMI" de calcul de la position du niveau de Fermi [13],

• La routine MOB de calcul des mobilités des porteurs (suivant les étapes des tableaux A 1 et A.2).

Ces algorithmes trouvent leur plus grande précision dans la gamme de température s'étalant entre 100 et 500K, et pour une densité totale de dopage inférieure à 10¹⁹cm⁻³. Les sorties du programme sont regroupées dans le tableau 3.1. Ces paramètres peuvent être donnés soit en fonction de la température, ou de la concentration de l'une ou l'autre des impuretés dopantes. Les organigrammes des programmes principaux sont présentés ci-après, en considérant les notations suivantes

- N est le nombre d'espèces d'impuretés présentes,
- DEN est le pas d'incrémentation de la densité de dopage;
- NDIT est le nombre d'itération;
- NRUN est un compteur des itérations effectuées,
- DN(I) est la densité de l'espèce dopante I;
- DG(I) est la dégénérescence de l'espèce I.
- EN(I) est l'énergie d'activation de l'espèce I,
- J est un indice déterminant l'espèce dopante dont la densité est à incrémenter;
- T est la température.

Données de sortie	Unité
Position du niveau de Fermi	eV
Energie de Gap du silicium	eV
Densité des porteurs dans les bandes permises	cm ⁻³
Densité d'états dans les bandes permises	cm [.] '
Densités ionisées des espèces dopantes	cm ⁻³
Masses effectives relatives des électrons et des trous dans la bande de conduction et celle de valence respectivement	
Mobilités des deux types de porteurs	cm ² /V.sec
Conductivité - mobilité effective	cm ² /V.sec
Conductivité électrique	mho/cm
Coefficient de Hall	cm ⁻³ /c
Résistivité électrique	Ω/cm

Tableau 3.1 : Paramètres de sortie du programme de modélisationdes propriétés électriques du silicium extrinsèque

Organigrammes





2.3 CALCUL DES PROFILS DE DOPAGE A PARTIR DES MESURES CAPACITE-TENSION

2.3.1 Théorie de calcul

La méthode Capacité-Tension (C-V) est largement utilisée dans l'étude de la variation de la densité de dopage avec la profondeur de jonction [7,8,15] Les équations de base utilisées dans le calcul de la densité de dopage N(w) en fonction de la largeur de la zone de déplétion ont été établies par Schottky. Elles sont applicables dans le cas d'une diode à jonction abrupte, dissymétrique, à grande surface et soumise à une polarisation inverse

Cependant, dans plusieurs cas, les dimensions d'une diode sont comparables à la largeur de la zone de déplétion. Ceci provoque des erreurs significatives dans le calcul de la densité de dopage en créant une capacité périphérique [16] De même, quand la densité de dopage de la couche diffusée est comparable à celle de la zone de déplétion, une " back-depletion" qui apparaît dans la couche diffusée peut introduire d'énormes erreurs dans le calcul du profil de dopage. Afin de minimiser l'influence de ces deux paramètres, des corrections effectuées sur les équations de Schottky se sont avérées nécessaires.

Correction sur la Capacité Périphérique

Les équations de Schottky établies pour le calcul du profil de dopage à partir des données (capacité-tension) sont données par les expressions suivantes:

$$N(w) = \frac{2}{qK\epsilon_0 A_j^2} (\frac{d}{dV} (\frac{1}{C_m^2}))^{-1}$$
(2.16)

$$\mathbf{w} = \frac{\mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}_{0}\mathbf{A}_{j}}{\mathbf{C}_{m}}$$
(2.17)

- q est la charge électrique
- K est la constante diélectrique relative de l'espèce étudiée
- ε_0 est la permittivité du vide
- Aj est la surface de la diode
- C_m est la capacité mesurée
- V est la tension de polarisation appliquée

Cependant, la diffusion latérale des atomes dopants lors de la fabrication d'une jonction pn influe sur la valeur de la capacité mesurée. Cette dernière est la somme de la capacité périphérique' $C_{\Gamma^{+}}$ et la capacité plan 'C' (Fig.2.1).

La capacité périphérique, étant une erreur additive, elle sera donc retranchée de la capacite mesurée Pour une diode de forme circulaire, elle peut être donnée par l'expression suivante[16]

$$C_{pt} = \frac{K\epsilon_0 \pi^2 D/2}{\ln \left[(1 + \frac{W}{x_j}) / (1 + \frac{4W}{\pi D + 4x_j}) \right]}$$
(2.18)

- D est le diamètre de la diode
- xj est la profondeur de jonction

Cette équation a été obtenue en supposant que la région périphérique est une jonction unilatérale La capacité corrigée, ou capacité plan, sera donc donnée par:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_{\mathbf{m}} - \mathbf{C}_{\mathbf{pt}} \tag{2.19}$$

La capacité plan étant déterminée, un profil apparent de dopage N(W) en fonction de la largeur de la zone de charge d'espace W peut être calculé en utilisant les équations (2.16) et (2.17).



Fig. 2.1: Capacité périphérique d'une jonction pn diffusée.

Correction du "Back-Depletion"

La figure 2 2 illustre un profil de dopage typique, où

- A et B sont les largeurs de la zone de déplétion dans la région la plus et la moins dopée de la jonction respectivement
- N(A) et N(B) sont les densités de dopage aux distances A et B respectivement
- N_o est la densité de dopage en surface de la couche diffusée
- N_{b} est la valeur estimée de la densité de dopage en volume
- L est la longueur de diffusion
- I est la surface de chacune des deux régions de la jonction
- w et a sont des variables d'intégration dont les valeurs spécifiques sont W et A respectivement.

D'aprés cette figure, la région de la zone de charge d'espace ne s'étalle pas uniquement dans la région faiblement dopée de la jonction mais également dans la couche diffusée (fortement dopée) d'où la création d'une "back-depletion" La capacité est donc déterminée par la largeur totale de la zone de charge d'espace W=A+B. Ainsi, la forme fonctionnelle de la distribution des impuretes dans la région A (Fig 2 2) doit être spécifiée; Elle est prise, dans notre programme de calcul, pour une Gaussienne.

La correction du "Back-depletion" se déroule comme suit:

Calcul des Valeurs de A et N(A)

La grandeur A est définie numériquement à partir des équations suivantes [17]:

$$\int_{0}^{A} N(a) da = \frac{\sqrt{\pi} L N_0}{2} \left[erfc\left(\frac{x_j - A}{L}\right) - erfc\left(\frac{x_j}{L}\right) \right] - N_b \cdot A \qquad (2.20a)$$

où:

$$\mathbf{L} = \frac{\mathbf{x}_{j}}{\sqrt{\ln(\mathbf{N}_{0}/\mathbf{N}_{b})}}$$
(2.20b)



Fig.2.2: Schéma représentatif de la zone de déplétion d'une jonction pn diffusée dans un semi-conducteur épitaxial [15]

$$\int_{0}^{\Lambda} N(a) da = \int_{0}^{W} N(w) dw = I$$
(2.20c)

$$\operatorname{erfc}\left(\frac{x_{J}-A}{L}\right) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x_{J}-A+w}{L}\right) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{N_{b} \cdot w}{N_{0} \cdot L}$$
(2.20d)

Une fois A déterminée, sa valeur est utilisée dans le calcul de la densité de dopage N(A) donnee par l'expression:

$$N(A) = N_{o} \exp[-(x_{j} - A/L)^{2}] - N_{b}$$
(2.21)

Calcul des Valeurs de B et N(B)

Connaissant A et N(A), la densité de dopage N(B) et la largeur B de la région la moins dopée de la jonction sont déterminées à partir des équations suivantes:

$$\frac{1}{N(W)} = \frac{1}{N(A)} + \frac{1}{N(B)}$$
 (2.22)

$$\mathbf{W} = \mathbf{A} + \mathbf{B} \tag{2.23}$$

L'équation (2.24.) ci-dessous est utilisée pour calculer un profil Gaussien théorique permettant une comparaison avec le profil déterminé expérimentalement:

$$N(B) = N_{b} - N_{O} \exp[-(x_{j} + B/L)^{2}]$$
(2.24)

Ce profil Gaussien est également utile dans l'évaluation de la valeur estimée de la densité de dopage N_b en volume. Ceci apparaît en comparant ce profil théorique à celui obtenu à partir des mesures capacité-tension.

Solution des Equations en Fonction d'Erreur Complémentaire

La solution des équations (2.20 a) et (2.20 c) fait appel au calcul de la fonction d'erreur complémentaire (erfc) et de son inverse. Le calcul de la fonction d'erreur complémentaire utilise les équations suivantes:

$$\operatorname{erf}(\mathbf{x}) = \frac{2\mathbf{x}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\mathbf{x}^2) \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(2\mathbf{x}^2)^N}{1.3....(2N+1)}$$
(2.25)

$$\operatorname{erfc}(\mathbf{x}) = 1 - \operatorname{erf}(\mathbf{x})$$
 (2.26)

$$\operatorname{erfc}(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\mathbf{x}^{2}}}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[\frac{2\mathbf{x}}{2\mathbf{x}^{2} + 1 - \frac{12}{2\mathbf{x}^{2} + 5 - \frac{3.4}{2\mathbf{x}^{2} + 9 - \dots}}} \right] \quad (2.27)$$

Cependant, la fonction d'erreur complémentaire inverse est obtenue par interpolation sur une table de données. L'équation à résoudre , dans notre étude, est de la forme:

$$y = \operatorname{erfc}^{-1}(x)$$
ou
$$x = \operatorname{erfc}(y)$$
(2.28)

avec x donné et y à déterminer. Sa résolution s'effectue selon les étapes suivantes:

• Changement de la variable x par

.

$$z = -100 \frac{\ln(x)}{\ln(10^{-7})} + 100$$
 (2.29)

où z est un entier compris entre 0 et 100 correspondant aux valeurs de x s'étalant entre 10⁻⁷ et 1 Ce changement de variable est illustré sur la figure 2.3 La limite inférieure de x (10⁻⁷) a ete choisie de telle sorte que l'équation (2.20(a)) puisse être résolue pour tous les rapports pratiques de N_0/N_b .

• Choix de trois paires (z1,y1), (z2,y2) et (z3,y3) satisfaisant la condition suivante:

$$z_3 > z \ge z_2 > z_1$$

 $y_3 < y \le y_2 < y_1$
(2.30)

Ce choix est schématisé sur la figure 2.4.

• Fittage parabolique aux trois paires choisies précédemment en résolvant le système d'équations:

$$y_{1} = az_{1}^{2} + bz_{1} + c$$

$$y_{2} = az_{2}^{2} + bz_{2} + c$$

$$y_{3} = az_{3}^{2} + bz_{3} + c$$

(2.31)

afin d'obtenir les coefficients a, b et c.

•



Fig.2.3: Représentation logarithmique de la fonction x = erfc (y) montrant le changement de variable z [17]



Fig.2.4: Calcul de la fonction y = erfc (x) par fittage parabolique en considérant la variable z [17].

• Connaissant a, b et c, il suffit donc de calculer y en utilisant l'équation suivante

$$\mathbf{y} = \mathbf{a}z^2 + \mathbf{b}\mathbf{z} + \mathbf{c} \tag{2.32}$$

pour obtenir la solution de l'équation (2.28)

L'exploitation des mesures expérimentales Capacité-Tension, dans la simulation des profils de distribution des atomes électriquement actifs, est une méthode non destructive et facile a mettre en oeuvre. Cependant, et même après les corrections de la capacité périphérique et du ``back-depletion`` introduites sur les équations de base établies par Scottky, les techniques expérimentales directes (SIMS, RBS, résistance carré,...) restent la meilleur façon de juger l'efficacité de ces modèles de simulation

3.3.2 Présentation du programme

Description du Programme

Les entrées du programme se divisent en paramètres technologiques et expérimentaux. Elles se résument en

- la densité de dopage en surface "N₀",
- la profondeur de jonction "x_j",
- la densité de dopage en volume "N_b",
- les dimensions de la jonction (largeur et longueur ou rayon),
- les paires de données capacité-tension (C-V) mesurées.

Le fichier de sortie contient un listing de la densité de dopage en fonction de la profondeur.



2.4 CONCLUSION

La jonction pn est le composant test de base de tout circuit discret ou intégré. C'e t pourquoi, l'amélioration de ses caractéristiques électriques a suscité l'intérêt de plusieu s chercheurs Cependant, ses propriétés électriques sont définies par la qualité de la couche diffusice et celle de la zone active. La première est conditionnée par la concentration, le type de dopage et la température de fonctionnement, alors que la seconde est liée à la densité et à la distribution des ions électriquement actifs

Guidés par cette conviction, nous avons élaborés les deux modèles de calcul décrits précédemment L'exploitation de ces programmes dans la simulation de ces deux régions de la jonction (couche diffusée et zone de charge d'espace) fera l'objet du chapitre prochain.

chapitre 3

RESULTATS ET INTERPRETATION

INTRODUCTION

Avec le développement de l'industrie informatique, la conception assistée par ordinateur (CAO) est devenue une étape indisponsable lors de la réalisation des circuits électroniques à tres haute intégration.

La jonction *PN* étant la structure test de base de tout circuit intégré, plusieurs rechèrches de simulation ont été effectuées dans le but d'améliorer ses caractéristiques électriques. L'etude des paramètres électriques des semi-conducteurs dopés permet la prédiction de la caractéristique conductrice des couches diffusées. En effet, plusieurs recherches se sont intéressées à la détermination de la dépendance en fonction de la température et la concentration de dopage de la mobilité des porteurs (et par suite la conductivité électrique) dans les semi-conducteurs extrinsèques [18,19,20,21,22,23]. Ces études contribuent à l'amélioration des caractéristiques électriques des dispositifs électroniques. Cependant, lors de l'élaboration des composants simulés, les processus technologiques de fabrication interviennent et entrainent une dégradation plus ou moins importante de leurs qualités. En conséquence, la fiabilité de la simulation est conditionnee par la prise en considération de l'environnement technologique du composant.

Ainsi, notre étude se décompose en deux parties principales:

• Simulation des paramètres électriques d'une couche diffusée N/P, indépendamment des traitements technologiques subits par les échantillons;

• Etude de la distribution des ions dopants électriquement actifs dans la zone de charge d'espace de la jonction

Dans la partie A, nous présenterons les résultats de la premiere étude dans laquelle nous nous sommes interessés à l'effet de la température, de l'espèce et de la concentration de dopage sur les caractéristiques électriques de la couche diffusée en particulier la conductivité électrique et la mobilité des porteurs majoritaires

Dans la partie B, nous présenterons les profils de distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace des jonctions N^*P afin d'optimiser les paramètres du recuit rapide isothèrme (RRI) subit par les échantillons.

En plus, pour donner à notre travail une application directe et industrielle, nous avons jugé tres opportun d'étudier les composants fabriqués par l'Entreprise Nationale des Industries Electroniques (ENIE). Ceci nous permet de déterminer la qualité du processus technologique d'une part et la validité de notre programme d'une autre part.

50

SIMULATION DES PARAMETRES ELECTRIQUES D'UNE COUCHE DIFFUSEE

A.1 INTRODUCTION

La qualité d'une couche diffusée est liée principalement à sa caractéristique conductrice Du point de vue électrique, cette dernière est définie par la concentration, le type et l'espèce des impuretés introduites. En outre, la température joue un rôle préalable dans l'ionisation des atomes dopants. Par suite, elle participe à la définition des paramètres électriques de la couche diffusée. C'est par là que nous nous sommes intéressés à l'étude de l'évolution de la conductivité électrique et de la mobilité des porteurs libres avec la température et la concentration de dopage afin de pouvoir simuler les caractéristiques électriques d'une couche diffusée en espérant qu'elle sera exploitée industriellement. L'étude est menée en présence d'une impureté métallique inévitable lors de l'élaboration des composants électroniques, particulièrement par la méthode Cz. Les résultats de cette simulation constituent la première partie du chapitre.

A.2 EFFET DE LA CONCENTRATION

Dans une couche diffusée NP, l'impureté principale est celle des majoritaires Celle des minoritaires est dite "auxiliaire" ou de "compensation". L'étude de l'influence de l'une ou l'autre de ces impuretés sur la conductivité électrique du matériau de base (le Silicium dans notre étude)

SIMULATION DES PARAMETRES ELECTRIQUES D'UNE COUCHE DIFFUSEE

A.1 INTRODUCTION

La qualité d'une couche diffusée est liée principalement à sa caractéristique conductrice Du point de vue électrique, cette dernière est définie par la concentration, le type et l'espèce des impuretés introduites. En outre, la température joue un rôle préalable dans l'ionisation des atomes dopants. Par suite, elle participe à la définition des paramètres électriques de la couche diffusée C'est par là que nous nous sommes intéressés à l'étude de l'évolution de la conductivité électrique et de la mobilité des porteurs libres avec la température et la concentration de dopage afin de pouvoir simuler les caractéristiques électriques d'une couche diffusée en espérant qu'elle sera exploitée industriellement. L'étude est menée en présence d'une impureté métallique inévitable lors de l'élaboration des composants électroniques, particulièrement par la méthode Cz.. Les résultats de cette simulation constituent la première partie du chapitre.

A.2 EFFET DE LA CONCENTRATION

Dans une couche diffusée NP, l'impureté principale est celle des majoritaires. Celle des minoritaires est dite "auxiliaire" ou de "compensation". L'étude de l'influence de l'une ou l'autre de ces impuretés sur la conductivité électrique du matériau de base (le Silicium dans notre étude)

permet le choix de le densité de dopage des deux regions de la jonction. Dans cette perspective nous avons orienté cette première étape de simulation

Un paramètre dont nous ignorons l'effet en premier heu est l'espèce dopante. Ceci nous a menés a choisir deux espèces pour chaque type de dopage. l'Arsenic (As) et le Phosphore (P) d'une part, le Bore (B) et le Gallium (Ga) d'autre part. Ce choix d'especes est basé sur le fait qu'elles sont très utilisées dans la technologie Silicium de fabrication des composants discrets ou intégrés

Dans la présente étude, nous traitons les quatre combinaisons Donneur/Accepteur suivantes:

- Phosphore/Bore (P/B);
- Phosphore/Gallium (P/Ga),
- Arsenic/Bore (As/B),
- Arsenic/Gallium) (As/Ga)

A.2.1 Choix de la Concentration Optimale du Dopage Principal

Considérons le cas d'une couche diffusée NP. A température ambiante (300 K), nous commençons par traiter l'influence de la concentration des majoritaires sur la conductivité électrique de la jonction, celle des minoritaires est fixée à 10^{14} cm⁻³ (tableau A 1) La variation de la conductivité électrique σ en fonction de la concentration N_D des donneurs est illustrée sur la figure A.1(a)

 La première remarque à constater est la non-dépendance de cette caractéristique en espèce dopante auxiliaire (B ou Ga), ni en espèce principale (As ou Ga). La très légère influence de cette dernière pour (10¹⁶ ≤ N_D ≤ 10¹⁹) cm⁻³ peut être considérée comme négligeable

Il suit également, à partir de cette figure, que la conductivité électrique passe par un maximum correspondant à une concentration optimale. Celle-ci est de 10¹⁹ cm⁻³ (tableau A 1)

$N_{\rm P}$ (cm ⁻³)	1016	5. 10 ¹⁶	10 ¹⁷	5.1017	10 ¹⁸	5 1018	1019	5 10 ¹⁹	1020	10 ²¹
σ (mho/cm)	1.827	6.917	11.37	2939	42.18	86.34	97.21	74.46	53 89	12.67
μ_n (cm ² /V sec)	1156	87 9.3	732 5	409.1	304.6	135.2	88.1	23.16	11 46	1 001
$(N_{\rm D}^+ / N_{\rm D}^-)$ %	99.67	98.40	96.94	89.68	86 43	79 68	68.86	40 14	29 36	7 897

Tableau A.1: caractéristiques Electriques d'une couche diffusée Obtenuesà T = 300 K pour $N_A = 10^{14}$ cm⁻³

Pour prendre la valeur de 10^{19} cm⁻³ comme concentration optimale, nous avons juge intéressant de voir si un compromis entre conductivité et mobilité est atteint. La figure $\Lambda 1(b)$ donne la variation de la mobilité avec la concentration. N_D des majoritaires. D'apres cette figure, nous constatons que la diminution de la mobilité est plus accentuée a des concentrations superieures à 10^{19} cm⁻³. A cette concentration, la mobilité des électrons est de 88.1 cm²/Vs

A.2.2 Choix de la Concentration Optimale du Dopage Auxiliaire

La concentration des majoritaires étant fixée à 10^{19} cm⁻³, il reste à déterminer celle du dopage auxiliaire (dopage du substrat) Pour ce faire, nous avons fait varier la concentration des minoritaires entre 10^{14} et 10^{19} cm⁻³ (tableau A 2) La figure A 2(a) illustre la dépendance en fonction de la concentration N_A des accepteurs, de la conductivité électrique à température ambiante.

• Comme pour le cas du dopage principal, aucun effet de l'espèce n'est apparu

• En outre, nous remarquons que la conductivité électrique ne change pas pour des concentrations comprises entre 10^{14} et 10^{16} cm⁻³ Par contre lorsque cette dernière augmente au-delà de 10^{16} cm⁻³ une diminution brusque de la conductivité est constatée. Le même comportement est observé pour la mobilité électrique μ_n des électrons (Fig. A.2 (b)) Cette allure nous a menés à opter pour la densité de 10^{14} cm⁻³ afin de s'approcher le plus possible d'une couche très dissymétrique NP

$N_{\rm D}$ (cm ⁻³)	1014	1015	5 1015	1016	5. 10 ¹⁶	1017	5 1017	1018	5. 1018	1019
σ (Ω cm) ⁻¹	97 20	97.1	97 11	97.03	96.36	95 54	89 47	81.53	34 59	1 39 10 - ⁶
$\mu_n (cm^2/V s)$	88.09	88.08	88.06	88.03	87.80	87.52	85.38	82.86	65 91	9.766

Tableau A.2 Caractéristiques Electriques d'une couche diffusée NP Obtenues à T = 300 K pour N_D = 10^{19} cm⁻³

Sommairement, cette étape de simulation a abouti à une couche diffusée N/P de concentration principale en donneurs $N_D = 10^{19}$ cm⁻³, et un dopage du substrat en accepteurs de concentration $N_A = 10^{14}$ cm⁻³. Dans toute la gamme de température traitée, nous remarquons que l'espèce dopante n'a aucune influence sur ces caractéristiques. L'évolution des caractéristiques électriques de cette couche avec la température est illustrée sur la figure A.3.



(a)



(b)

- Fig A.1: Caractéristiques d'une couche diffusée N/P en fonction de la concentration N_D (T=300K et N_A = 10¹⁴ cm⁻³):
 (a) Conductivité électrique; (b) Mobilité des porteurs;

L'allure de la caractéristique Conductivité-Température confirme le choix précédent des concentrations optimales. Ce choix étant effectué à température ambiante (300 K), il s'étend à une gamme entière de température (300 < T < 500) K vu que la conductivité électrique ne varie que légèrement dans ce domaine. L'importance de ce résultat reside dans le fait que cette gamme de température est celle de fonctionnement de la majorité des composants électroniques.

<u> </u>	20	25	50	100	125	200	250	300	400	500
σ (mho/cm)	5 625	7.293	16 41	35 31	44 54	7 0 37	85-14	97 12	1117	1147
$\mu_{\rm m}$ (cm ² /v.s)	35.322	37.175	45.903	58.882	64.141	77 152	83.599	88.064	91.00	87 460
$\mu_{\rm p}({\rm cm}^2/{\rm v}{\rm s})$	51.72	52.69	58 81	67.41	70.22	74.39	73.68	70.59	60.16	48.33
$n (\times 10^{18} \text{ cm}^{-3})$	1	1.225	2.231	3.742	4.334	5.694	6.356	6.883	7 658	8.184

Tableau A.3: Caractéristiques Electriques d'une couche diffusée NPde Dopage $N_D = 10^{19}$ cm⁻³ et $N_A = 10^{14}$ cm⁻³



(a)



(b)

- Fig A.2: Caractéristiques d'une couche diffusée N/P en fonction de la concentration N_A (T=300K et $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$):
 - (a) Conductivité électrique; (b) Mobilité des porteurs;



(b)

Fig A.3: Caractéristiques de la couche diffusée N/P simulée en fonction de la Température (N_A = 10¹⁴ cm⁻³ et N_D = 10¹⁹ cm⁻³):
(a) Conductivité électrique; (b) Mobilité des porteurs;

A.3 EFFET DE L'ESPECE

Aux concentrations de dopage de la couche diffusée simulée ($N_A = 10^{11}$ cm⁻¹ et $N_D = 10^{-7}$ cm⁻³), l'espèce dopante n'a présenté aucune influence sur les caractéristiques électriques etudiées. De ce fait nous avons complété notre simulation par le traitement de l'effet de l'espèce a des concentrations principales autres que 10^{19} cm⁻³. Pour atteindre cet objectif, nous avons étudié la variation de la conductivité électrique avec la température. La concentration N_D des majoritaires est prise comme paramètre (tableau A 4). Une illustration de cette étude est représentée par la figure A.4

_										
	Т	P/B	P/Ga	As/B	As/Ga					
$N_{A} = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	20	5.603 10-7	5.603 10-7	3 604 10-9	3.604 10 ⁻⁹					
$N_{\rm D} = 10^{16} {\rm cm}^{-3}$	100	4.751	4.750	3.932	3.932					
	300	1.827	1.827	1.825	1.825					
$N_{\rm A} = 10^{14} {\rm cm}^{-3}$	20	6 022 10 ⁻³	6.061 10-3	8 386 10 ⁻⁵	8.284 10-5					
$N_{\rm D} = 10^{18} {\rm cm}^{-3}$	100	1 259	12.82	9.023	9.013					
	300	42.30	42.17	40.43	40.40					
$N_{A} = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	20	9.616								
$N_D = 4.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	100	<u>39.46</u> 81.14								
	300									

Tableau A 4: Valeurs de $\sigma = f(T)$ d'une couche diffusée N'Paux Différentes Concentrations des Majoritaires

D'après ces résultats, nous remarquons que, indépendamment de la concentration N_D , l'espèce dopante auxiliaire n'a aucun effet sur cette caractéristique. Par contre, l'effet de l'espèce dopante principale diminue avec l'élévation de sa concentration pour disparaître complètement au-delà de 4.10¹⁸ cm⁻³

La figure A.4 montre que les combinaisons P/B et P/Ga présentent les meilleures valeurs de la conductivité, indépendamment de la concentration et de la température. De même pour une couche diffusée P N, les meilleurs caractéristiques sont obtenues pour les combinaisons B/P et B/As (Fig. A.5). De par ce résultat nous avons opté pour la combinaison P/B (ou B/P pour une couche diffusée P/N) comme combinaison optimale d'espèce.



(b)

Fig. A.4: Caractéristique $\sigma = f(T)$ d'une couche diffusée N/P avec N_A=10¹⁴ cm⁻³ (a) N_D=10¹⁸ cm⁻³; (b) N_D=4.10¹⁸ cm⁻³.


Fig. A.5: Caractéristique $\sigma = f(T)$ d'une couche diffusée N/P avec N_D=10¹⁴ cm⁻³ et N_A=10¹⁷ cm⁻³.

.

A.4 EFFET DE LA TEMPERATURE SUR LA CONCENTRATION OPTIMALE DES MAJORITAIRES

Les concentrations optimales du dopage ont été choisies dans un domaine de température limité ($T \ge 300$ K) Pour voir si ce choix est valide dans toute la gamme de température étudiée. nous avons étudié l'effet de cette dernière sur la concentration optimale des majoritaires (Fig. A 6) Pour différentes valeurs de la température, les résultats du tableau A.5 montrent clairement que la densité optimale augmente avec cette dernière

T (K)	20	50	100	200	250	300	400	500
N _D (Optimale)	3.1018	3.10 ¹⁸	4 .10 ¹⁸	9.10 ¹⁸	1019	10 ¹⁹	2.10 ¹⁹	3 10 ¹⁹
σ(T)	11.06	23.31	39.45	70.99	85.86	97.19	120.7	137.3

 Tableau A.5: Variation de la Concentration Optimale des Majoritaires avec la Température



Fig A.6: Variation de la Concentration Optimale des Majoritaires avec la Température (couche diffusée N/P avec $N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$)

A.5 INTERPRETATION DES RESULTATS

Après simulation de la couche diffusée N/P, plusieurs remarques importantes peuvent être faites sur la dépendance en température ou en concentration de

- la conductivité électrique;
- la mobilité des porteurs libres
- D'emblée, nous pouvons conclure que l'espèce dopante auxiliaire n'influe pas sur ces caractéristiques (conductivité électrique et mobilité)

Nous avons attribué ce résultat à la présence de cette espèce en faible concentration par rapport à celle du dopage principal Ainsi, l'effet de l'espèce est masqué par un phénomène de compensation partielle des donneurs par les accepteurs. En effet, les niveaux accepteurs étant à plus basse énergie que les niveaux donneurs, une fraction de donneurs (égale à N_A) s'ionise pour peupler ces niveaux. Les $N_D - N_A$ donneurs restants sont susceptibles de peupler la bande de conduction [24] En conséquence, la concentration des porteurs participant à la conduction est définie par le dopage principal. Cette dernière demeure, donc, insensible à l'espèce auxiliaire

Avec plus de détails, nous présenterons les remarques concernant chacun des deux paramètres cités précédemment (conductivité électrique et mobilité)

• Conductivité électrique

- Aux faibles concentrations de dopage, la combinaison Phosphore/Bore ou Gallium (P/B(Ga)) a presenté de meilleurs résultats vis à vis de celle Arsenic/Bore ou Gallium (As/B(Ga)). C'ette remarque peut être expliquée par la vitesse d'ionisation de chaque espèce En se référant à la figure A 7, nous remarquons qu'au dessous de 250K, la fraction ionisée du Phosphore est supérieure à celle de l'Arsenic Au-delà de cette température, l'ionisation est presque totale et l'effet de l'espèce disparaît En effet, l'énergie d'activation du Phosphore (0 0450 ev) étant inférieure à celle de l'Arsenic (0 0537 eV), un même apport énergétique (thermique dans ce cas) engendre deux fractions ionisées différentes. L'Arsenic nécessite, ainsi, plus d'énergie pour s'ioniser et participer à la conduction.
- Pour des concentrations de dopage assez fortes ($N_D \ge 4 \ 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), les quatre combinaisons d'espèce traitées ont abouti à des résultats identiques Nous pensons que ce comportement est lié à la diminution de l'effet de l'énergie d'activation avec la concentration de l'impureté considérée (Fig A.8). En effet, la valeur de $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ correspond à une concentration limite au-delà de laquelle les énergies

d'activation n'ont aucune influence sur la conductivité électrique. Ce résultat est conforme a celui trouvé par S S Li et W R _ I HURBER [20]

• La figure A.1 montre une décroissance de la conductivité électrique de part et d'autre de la concentration $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Dans le domaine des faibles concentrations, cette décroissance est due au phénomene de compensation expliqué précédemment. Cependant, à partir de 10^{19} cm⁻³, la diminution de la conductivité est liée à la solubilité du Phosphore (ou de l'Arsenic) dans le Silicium. En effet, dans cette gamme de concentration, nous remarquons que la fraction ionisée du phosphore (ou de l'Arsenic) diminue au fur et à mesure que la concentration de dopage augmente. Pour $N_D = 10^{19}$ cm⁻³, nous avons $-N_D^+/N_D = 68.86\%$ alors que cette fraction n'est que de 7.897% à 10^{21} cm⁻³. Un compromis entre les deux phénomènes, de compensation et de précipitation est, indépendamment de l'espèce, obtenu pour $N_D = 10^{19}$ cm⁻³.

•En outre, la conductivité électrique a été trouvée fortement dépendante de le température, aux faibles concentrations de dopage principal (Fig A 9)

Nous avons attribué ce comportement à la variation des mécanismes de diffusion des porteurs libres avec la température. En effet, dans le domaine des faibles concentrations, il y a dominance du mécanisme de diffusion par le biais du réseau[20]

Contrairement, lorsque la concentration augmente, d'autres mécanismes interviennent En particulier, nous citons celui de la diffusion par le biais des impuretés[25]

• Mobilité électrique

La première remarque qui s'est présentée au cours de cette étude est qu'aux basses températures ($T \le 200$ K) la mobilité des minoritaires (trous) dépasse celle des majoritaires (électrons) (Fig A 3(b)) Le même comportement est constaté aux fortes concentrations de dopage en donneurs ($N_D > 10^{19}$ cm⁻³) pour T=300K (Fig A 1(b))

La deuxième remarque tirée est que, indépendamment de la température, la mobilité des porteurs diminue avec l'élévation de la concentration Pour les minoritaires, un tel comportement est expliqué par la durée de vie des porteurs qui est inversement proportionnelle à la mobilité [14]. Des résultats expérimentaux et de simulation ont montré que la durée de vie des minoritaires diminue quand la concentration augmente

d'activation n'ont aucune influence sur la conductivité électrique. Ce résultat est conforme a celui trouvé par S S Li et W R THURBER [20]

• La figure A.1 montre une décroissance de la conductivité électrique de part et d'autre de la concentration $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Dans le domaine des faibles concentrations, cette décroissance est due au phénomene de compensation expliqué précédemment Cependant, à partir de 10^{19} cm⁻³, la diminution de la conductivité est liée à la solubilité du Phosphore (ou de l'Arsenic) dans le Silicium En effet, dans cette gamme de concentration, nous remarquons que la fraction ionisée du phosphore (ou de l'Arsenic) diminue au fur et a mesure que la concentration de dopage augmente Pour $N_D = 10^{19}$ cm⁻³, nous avons $-N_D^+/N_D = 68.86\%$ alors que cette fraction n'est que de 7.897% à 10^{21} cm⁻³. Un compromis entre les deux phénomènes, de compensation et de précipitation est, indépendamment de l'espèce, obtenu pour $N_D = 10^{19}$ cm⁻³.

•En outre, la conductivité électrique a été trouvée fortement dépendante de le température, aux faibles concentrations de dopage principal (Fig A 9)

Nous avons attribué ce comportement à la variation des mécanismes de diffusion des porteurs libres avec la température En effet, dans le domaine des faibles concentrations, il y a dominance du mécanisme de diffusion par le biais du réseau[20]

Contrairement, lorsque la concentration augmente, d'autres mécanismes interviennent En particulier, nous citons celui de la diffusion par le biais des impuretés[25].

Mobilité électrique

La première remarque qui s'est présentée au cours de cette étude est qu'aux basses températures ($T \le 200K$) la mobilité des minoritaires (trous) dépasse celle des majoritaires (électrons) (Fig A 3(b)) Le même comportement est constaté aux fortes concentrations de dopage en donneurs ($N_D > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) pour T=300K (Fig A 1(b))

La deuxième remarque tirée est que, indépendamment de la température, la mobilité des porteurs diminue avec l'élévation de la concentration Pour les minoritaires, un tel comportement est expliqué par la durée de vie des porteurs qui est inversement proportionnelle à la mobilité [14]. Des résultats expérimentaux et de simulation ont montré que la durée de vie des minoritaires diminue quand la concentration augmente



Fig. A.7: Evolution de la densité ionisée des donneurs (P, As) avec la température d'une couche diffusée N/P ($N_D=10^{18}$ cm⁻³ et $N_A=10^{14}$ cm⁻³).



Fig A.8: Variation de l'énergie d'activation de l'espèce dopante principale avec sa concentration

(couche diffusée N/P à T=300K, $N_A=10^{14}$ cm⁻³).



Fig. A.9: Evolution de la conductivité Electrique avec la Température à différentes concentrations de dopage principal $(N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}).$

A.6 CONCLUSION

La multitude des mécanismes de diffusion des porteurs de charge et leur variation avec la température et la concentration de dopage ont créées une certaine complexité dans l'étude des paramètres électriques des semi-conducteurs dopés (en particulier, la mobilité).

Dans le cas du silicium, la simulation d'une couche diffusée en fonction de la conductivite électrique a aboutie aux résultats suivants

- une concentration de dopage principal $N_D=10^{19}$ cm⁻³.
- une concentration de dopage auxiliaire $N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$,
- une combinaison d'espèce Phosphore/Bore.

Pour un fonctionnement à des températures supérieures ou égales à 300K, la couche diffusée aux concentrations citées ne nécessite pas une combinaison particulière d'espèce (l'espèce est sans effet). Cependant, pour un fonctionnement à des températures inférieures, la concentration N_D optimale diminue avec la température en restant comprise entre 10^{18} et 10^{19} cm⁻³.

ETUDE DES PROFILS DE DOPAGE

.

B.1 INTRODUCTION

Si les caractéristiques électriques de la couche diffusée sont d'une importance majeur dans la détermination des performances des composants discrets ou intégrés, la qualité de la zone active est encore plus impétueuse. Celle ci est généralement liée à la concentration des atomes électriquement actifs et leur distribution dans la zone de charge d'espace

Ces paramètres peuvent être obtenus par différentes techniques de caractérisation SIMS, RBS, seulement la méthode de C-V mètrie demeure la plus utilisée vu sa nature non-destructive et sa facilité de mise en oeuvre.

Le programme de calcul, décrit dans le chapitre 2, permet à partir des mesures capacité-tension d'accéder à la concentration et au profil de dopage, dans les différentes régions de la zone de charge d'espace

Dans cette partie, ce programme est exploité, pour déterminer la qualité du processus technologique de fabrication des jonctions *pn*.

B.2 PRESENTATION DES ECHANTILLONS

Les échantillons traités sont du silicium Cz(100) de résistivité $2 - 5\Omega$ cm implantés As⁺ a 70 KeV

Ces jonctions ayant subit des traitements thermiques par Recuit Rapide Isotherme (RRI) sont classés en deux séries selon les conditions suivantes.

- dose constante (4 10¹⁵ cm⁻²) et différentes températures de recuit (900, à 1050°C),
- température de recuit constante (1010°C) et différentes doses (2E+14 à 1E+16 cm⁻²)

La durée de recuit était de 5 secondes

Pour voir la qualité des composants réalisés par l'Entreprise Nationale des Industries Electroniques (ENIE), une jonction *pn* fabriquée par cette entreprise sera également traitée. Les différentes caractéristiques des échantillons traités sont regroupée dans le tableau B 1.

Echantillons	$N_0(cm^{-3})$	$N_{b \text{ estime}}(\text{cm}^{-3})$	T _{recuit} (°C)	x _J (μm)
	2 10 ²⁰	1.46 10 ¹⁶	1050	
	2.10 ²⁰	1.5.10 ¹⁶	1010	
Série I	2.10 ²⁰	1.42.10 ¹⁶	950	
	2.10^{20}	2.10 ¹⁶	900	0.2
	5 10 ²⁰	1.44 10 ¹⁶	1010	
Série II	$2 10^{20}$	1.5 10 ¹⁶	1010	
	1.10 ¹⁹	1.58.10 ¹⁶	1010	
ENIE	3 2 10 ¹⁸	5 10 ¹⁵	?	2.46

Tableau B.1	Caractéristiq	ues technologiques	des	échantillons	traitées.
-------------	---------------	--------------------	-----	--------------	-----------

B.3 RESULTATS OBTENUS

Le programme de calcul utilisé permet l'obtention des profils de dopage N(A), N(B), N(W) dans les régions la plus dopée, la moins dopée et la zone de charge d'espace de la jonction respectivement. Il permet également, par une comparaison entre l'allure du profil idéal et celle du profil expérimental, d'estimer la valeur exacte de la résistivité.

Dans ce qui suit, nous présenterons les résultats des échantillons considérés.

SERIE I

La première série d'échantillons est constituée de jonctions N'P implantées As (70 KeV, 4 10¹⁵ cm⁻²) et traitées par recuit rapide isotherme à différentes températures de recuit (900 à 1050°C).

Les profils de dopage obtenus sont illustrés sur les figures (B.1), (B 2) et (B 3). D'après ces caractéristiques, un schéma représentatif du profil de dopage dans les deux régions de la jonction peut être établit (Fig. B 4)

la première remarque tirée est l'uniformité de dopage dans la zone de charge d'espace aussi bien que dans la région la moins dopée de la jonction.

Une détérioration de cette uniformité est constatée pour l'échantillon traité à 900°C Ce dernier a présenté une dégradation du profil N(W) dans la région de la zone de charge d'espace située entre 0 268 et 0 311 µm (Fig B 3)

Vu l'uniformité de dopage dans la région la moins dopé de la jonction, la concentration N_A des centres ionisés (concentration des accepteurs) est obtenue par fittage linéaire de la caractéristique N(B) Cependant, la dégradation de l'uniformité de dopage, aperçue pour l'échantillon traité à 900°C, ne nous permet pas de déduire la valeur de N_A .

Une comparaison entre la concentration N_{A} ainsi obtenue et celle obtenue à partir de la caractéristique $1/C^2=f(V)$ montre la validité des deux méthodes de caractérisation (tableau B.2). Pour cette première série d'échantillons, le meilleur compromis entre uniformité et activation de dopage est obtenu pour la jonction traitée à 1010°C.







Fig. B.2: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la région la moins dopée de la jonction.
(a): T_{recuit} = 1050°C; (b): T_{recuit} = 1010°C;
(c): T_{recuit} = 950°C; (d): T_{recuit} = 900°C;



Fig. B.3: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace des jonctions dopées à 4.10¹⁵ cm⁻².
(a): T_{recuit} = 1050°C; (b): T_{recuit} = 1010°C;
(c): T_{recuit} = 950°C; (d): T_{recuit} = 900°C;

	N_{Λ} (cm)
température de recuit (°C)	(a)	(b)
1050	1 38 10 ¹⁶	1 45 10 ¹⁶
1010	1.41.10 ¹⁶	1.48.10 ¹⁶
950	1 33.10 ¹⁶	1 39.10 ¹⁶
900	1.16.10 ¹⁶	?

tableau B.2: Concentration des centres ionisés N_A obtenues à partir de (a) la pente de la courbe $1/C^2 = f(V)$;

(b) fittage linéaire de N(B).



Fig. B.4: Schéma représentatif du profil de dopage dans les deux régions de la jonction

.

	N_{Λ} (cm ⁻¹)		
température de recuit (°C)	(a)	(b)	
1050	1 38 10 ¹⁶	1 45 10 ¹⁶	
1010	1.41.10 ¹⁶	1.48.1 0 ¹⁶	
950	1 33.10 ¹⁶	1.39.10 ¹⁶	
900	1.16.10 ¹⁶	?	

tableau B.2: Concentration des centres ionisés N_A obtenues à partir de (a) la pente de la courbe $1/C^2 = f(V)$;

(b) fittage linéaire de N(B).



Fig. B.4: Schéma représentatif du profil de dopage dans les deux régions de la jonction

.

SERIE II

Ayant subits un recuit rapide isotherme à une température de 1010° C, les jonctions étudiées ont été implantées As' à différentes doses (2 10^{14} , 4 10^{15} et 10^{16} cm⁻²)

Les figures (B 5), (B 6), (B 7) montrent la redistribution des ions électriquement actifs dans les différentes régions de la zone de charge d'espace.

Les meilleures performances, déterminées par l'uniformité de dopage d'une part et la concentration active d'autre part, sont obtenues pour la dose de 4.10¹⁵ cm⁻².

ECHANTILLON DE L'ENIE

Contrairement aux deux séries d'échantillons présentées précédemment, le dopage des diodes fabriquées par l'ENIE est effectué par la technique de diffusion. En plus, cet échantillon possède les caractéristiques suivantes:

- dopage à faible dose $(8 \ 10^{14} \text{ cm}^{-2})$,
- jonction relativement profonde ($x_j = 2.46 \mu m$);
- substrat de dopage $N_b = 5 \ 10^{15} \text{cm}^{-3}$

La figure B 8 illustre les profils du dopage actif dans les différentes zones de la jonction. Le profil de dopage dans la région la moins dopée a abouti à une distribution Gaussienne (Fig. B.8(b)).

B.4 DISCUSSION ET INTERPRETATION

Cette étude a montré que le meilleur compromis entre uniformité et activation est obtenu pour la jonction implantée As' à 4 10¹⁵ cm⁻² et recuite à 1010°C. En effet, des mesures effectuées par la méthode de la résistance carré [2] ont montré qu'aux fortes doses (4E+15 et 1E+16 cm⁻²), l'activation électrique du dopage est satisfaisante pour un recuit de 1000°C pendant 5 secondes A des températures inférieures, une mauvaise activation est obtenue même pour les fortes doses. Les différentes températures traitées étaient suffisantes pour la recristallisation Des études faites par RBS ont montré qu'à partir de 850°C la recristallisation d'une couche amorphisée par implantation est totale [26]. De ce fait, la région dégradée de la zone de charge d'espace (Fig. 5.3) de l'échantillon traité à 900°C peut être attribuée à:



Fig. B.5: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la région la plus dopée des jonctions pn recuites à 1010°C et dopées à différentes doses:
(a): 10¹⁶ cm⁻², (b) 4 10¹⁵ cm⁻², (c): 2.10¹⁴ cm⁻²;



Fig.B.6: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la région la moins dopée des jonctions pn recuites à 1010°C et dopées à différentes doses:
(a): 10¹⁶ cm⁻², (b) 4 10¹⁵ cm⁻²; (c): 2.10¹⁴ cm⁻²;



Fig. B.7: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace des jonctions pn recuites à 1010°C et dopées à différentes doses:
(a) 10¹⁶ cm⁻², (b) 4 10¹⁵ cm⁻², (c): 2.10¹⁴ cm⁻²;



Fig. B.8: Profils de distribution des ions électriquement actifs dans les différentes régions d'une jonction pn fabriquée par l'ENIE dans:

- (a): la région la plus dopée;
- (b): la région la moins dopée;
- (c): la zone de charge d'espace

- la queue d'implantation (insuffisance de la temperature de recuit pour sa guerison),
- et / ou à l'existence de défauts résiduels ou induits par recuit rapide isotherme (RRI)

En effet, il se trouve que la suppression de la queue d'implantation demande des énergies supérieures aux énergies d'activation des dislocations qui s'y trouvent (5eV), ce qui nécessite des températures de recuit supérieures à 1150°C pour un temps de recuit de 5 secondes [26] Cependant, ces températures ne sont guère utilisées en micro-électronique pour la fabrication des circuits intégrés à cause de l'étalement du profil de dopage préjudiciel à la miniaturisation. Un compromis est donc nécessaire

Etant réalisées par diffusion thermique, la jonction fabriquée par l'ENIE a présenté un profil de distribution Gaussien Une comparaison avec les différents profils obtenus dans le cas de l'implantation ionique (échantillons des séries I et II) prouve l'efficacité de cette dernière dans le contrôle de la profondeur de jonction En effet, si la queue d'implantation est complètement guérie, la concentration de dopage dans la région la moins dopée de la jonction est pratiquement constante et égale à celle du substrat Ceci est réellement obtenu pour les séries d'échantillons I et II. Cependant, dans le cas de la diffusion thermique, l'étape de redistribution fait pénétrer les atomes dopants au-delà de la profondeur de jonction désirée; ce qui provoque un étalement de la Gaussienne dans la région faiblement dopée.

B.5 CONCLUSION

L'application du modèle mathématique déterminant les profils de distribution des ions électriquement actifs dans les différentes régions de la zone de charge d'espace a abouti à des résultats conformes à ceux rencontrés lors de la recherche bibliographique.

L'uniformité de dopage électriquement actif dans la zone de charge d'espace des jonctions implantées As' à différentes doses et traitées par recuit rapide isotherme (R.R.I)à différentes températures est la première remarque à constater.

Parmi les échantillons des deux séries traitées, le meilleur compromis entre uniformité et activation est obtenu pour la dose de 4.10¹⁵ cm⁻² et la température de recuit de 1010°C. Cependant, la température de 900°C était soit favorable pour l'apparition des défauts induits par **R.R.I, ou insuffisante pour la guérison de la queue d'implantation. Dans les deux cas, cette** température était à l'origine d'une dégradation de l'uniformite de dopage dans la region la moins dopee de la zone de charge d'espace de la jonction considérée

En outre, la jonction fabriquée par l'ENIE a présenté un profil de distribution Gaussien Ce résultat était prévu puisque le dopage de cette dernière était réalisé par diffusion thermique

•

CONCLUSION GENERALE

Dans cette étude, nous avons atteints deux objectifs principaux:

- l'élaboration de deux modèles théoriques de simulation électrique et technologique,

- l'exploitation de ces modèles dans

- la simulation des paramètres électriques d'une couche diffusée sur un substrat de silicium type P,

- et la détermination des paramètres technologiques optimaux liés à l'étape du dopage dans le processus de fabrication, en particulier la dose implantée et la température de recuit subit par les échantillons. Ceci en se basant sur la distribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace.

Le premier programme est réalisé pour calculer les propriétés électriques du silicium dope et leur évolution avec la température et la concentration de dopage L'équation de neutralité permet de déterminer l'énergie de Fermi E_F qui mène à la détermination des densité de porteurs. Une conductivité-mobilité est calculée aussi bien pour les électrons que pour les trous, en tenant compte des différents mécanismes de diffusion. la résistivité est, ensuite, calculé à partir des mobilités et des densités de porteurs. Nous avons essayé, également, d'introduire la dépendance en température et en densité de dopage du plus grand nombre possible de paramètres (masse effective, énergie du Gap,...)

Le second modèle théorique traite la redistribution des ions électriquement actifs dans la zone de charge d'espace des jonctions à profil de diffusion Gaussien. La variation de la densité d'ions

N(W) avec la largeur W de la zone de charge d'espace est obtenue a partir des mesures expérimentales de la capacité de jonction sous polarisation inverse. Les effets de la capacité périphérique et du `back-depletion` sont pris en considération et sont introduits dans les corrections des équations de base établies par Schottky

Dans la première étude, la simulation a abouti à une couche diffusée NP de concentration de dopage $N_D = 10^{19}$ cm⁻³ et $N_A = 10^{14}$ cm⁻³. Ceci pour un fonctionnement à des températures supérieures ou égales à 300K. Pour des températures inférieures, la concentration optimale du dopage principal diminue pour atteindre 3 10^{18} cm⁻³ à T=20K.

L'effet de l'espèce apparent aux concentrations $N_D \le 10^{18}$ cm⁻³ nous a conduit à opter pour la combinaison Phosphore/Bore. Cette dernière qui est largement utilisée dans la technologie de fabrication des circuits discrets ou intégrés. Pour s'approcher le plus possible du cas réel, nous avons mené cette simulation en présence d'une impureté métallique (l'Aluminium) inévitable lors de fabrication du matériau de base, en particulier par la technique Cz

Le second programme permettant la détermination du profil de dopage des ions électriquement actifs a été exploité dans le traitement des jonctions test N'P dopées Bore de résistivité 2-5 Ω cm, et implantées As' à différentes doses. La guérison des défauts induits par l'implantation ionique est acquise par des recuits rapides isothermes à différentes températures. Une jonction fabriquée par l'Entreprise Nationale des Industries Electroniques (ENIE) a été également traitée

Pour les échantillons implantés As, le meilleur compromis entre uniformité et activation de dopage est obtenu pour la dose de 4 10¹⁵ cm⁻² et la température de recuit de 1010°C Résultat conforme à ceux rencontrés dans la littérature fournissant les résultats de différentes techniques de caractérisation telles que les technique de la résistance carré, SIMS, RBS, ...

Cependant, la dégradation de l'uniformité de dopage dans la jonction traitée à 900°C est attribuée soit à la queue d'implantation et/ou aux défauts résiduels ou induits par le recuit lui même D'autre part l'échantillon de l'ENIE, réalisé par diffusion thermique, a présenté un profil Gaussien même dans la région la moins dopée de la jonction. Ceci prouve l'efficacité de l'implantation ionique dans le bon contrôle de la profondeur de jonction

Les résultats obtenus, étant conformes à la littérature, ceci nous permet de juger l'efficacité des programmes de calcul établis dans le domaine étudié.

Une exploitation meilleure du premier programme peut être faite si une comparaison avec des résultats expérimentaux est possible. Ainsi, il pourra prouver son efficacité dans l'interprétation des résultats d'effet Hall [27] et des méthodes des quatre pointes. Elle pourra également être étendue à d'autres matériaux semi-conducteurs, en particulier les composés III-V. C'ependant, le second programme pourra être exploité dans le cas des structures multijonctions tels que les transistors et sous d'autres traitements, telle que l'oxydation.

CALCUL DE LA MOBILITE

Mécanisme de diffusion	Formule
Réseau + (électron-électron)	$N_{D} \prec 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 108K; \mu_{L} = 1.89 \times 10^{7} T^{-1.52} \Big[1 - 0.08 N_{D} / (2 \times 10^{17}) \Big]$ $T \succ 108K; \mu_{L} = 7.98 \times 10^{8} T^{-2.32} \Big[1 - 0.08 N_{D} / (2 \times 10^{17}) \Big]$ $N_{D} \ge 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 108K; \mu_{L} = 1.89 \times 10^{7} T^{-1.52} (0.884)$ $T \succ 108K; \mu_{L} = 7.98 \times 10^{8} T^{-2.32} (0.884)$
Impureté ionisée + (électron-électron)	$\mu_{1} = \gamma \times 7.3 \times 10^{17} \text{ T}^{15} / \text{N}_{1} \text{G(b)}$ $\gamma = \frac{\text{N}_{D}^{*}}{n'} \left[1 - \exp(-n' \text{ N}_{D}^{*}) \right]$ $n' = n + p + \text{N}_{D}^{*} \left(1 - \text{N}_{D}^{*} / \text{N}_{D} \right)$ $G(b) = \ln(b + 1) - b / (b + 1)$ $b = \frac{24 \text{k}\epsilon_{0} m_{1}^{*} (\text{KT})^{2}}{q^{2} \hbar^{2} n'} \times 10^{6}$
Réseau et impureté ionis ée combinés	$\mu_{LL} = \mu_L f(X)$ $f(X) = 1 + X^2 \left[CiX \cos X + \sin X \left(SiX - \frac{\pi}{2} \right) \right]$ $X^2 = 6\mu_L / \mu_I$

CALCUL DE LA MOBILITE

Mécanisme de diffusion	Formule
Réseau + (électron-électron)	$N_{D} \prec 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 108K; \mu_{L} = 1.89 \times 10^{7} T^{-1.52} \Big[1 - 0.08 N_{D} / (2 \times 10^{17}) \Big]$ $T \succ 108K; \mu_{L} = 7.98 \times 10^{6} T^{-2.32} \Big[1 - 0.08 N_{D} / (2 \times 10^{17}) \Big]$ $N_{D} \ge 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 108K; \mu_{L} = 1.89 \times 10^{7} T^{-1.52} (0.884)$ $T \succ 108K; \mu_{L} = 7.98 \times 10^{6} T^{-2.32} (0.884)$
Impureté ionisée + (électron-électron)	$\mu_{1} = \gamma \times 7.3 \times 10^{17} \text{ T}^{15} / \text{ N}_{1} \text{ G(b)}$ $\gamma = \frac{\text{N}_{\text{D}}^{*}}{\text{n}'} \left[1 - \exp(-\text{n}' \text{ N}_{\text{D}}^{*}) \right]$ $n' = n + p + \text{N}_{\text{D}}^{*} (1 - \text{N}_{\text{D}}^{*} / \text{N}_{\text{D}})$ $G(b) = \ln(b + 1) - b / (b + 1)$ $b = \frac{24k\epsilon_{0} m_{1}^{*} (\text{KT})^{2}}{q^{2} \hbar^{2} n'} \times 10^{\circ}$
Réseau et impureté ionisée combinés	$\mu_{II} = \mu_L f(X)$ $f(X) = 1 + X^2 \left[CiX \cos X + \sin X \left(SiX - \frac{\pi}{2} \right) \right]$ $X^2 = 6\mu_L / \mu_I$

Impureté neutre

$$\mu_{N} = 0.82 \mu_{E} \left[\frac{2}{3} \left(\frac{KT}{E_{N}} \right)^{1/2} + \frac{1}{3} \left(\frac{E_{N}}{KT} \right)^{1/2} \right]$$

$$E_{N} = \frac{1.136 \times 10^{-19} m_{d}^{*}}{K^{2} m_{0}}$$

$$\mu_{E} = \frac{2\pi^{3} q^{3} m_{d}^{*}}{5N_{N} 4\pi K \varepsilon_{0} h^{3}} \times 10^{-2}$$
Mobilité totale des électrons

$$\mu = \left(1 / \mu_{LL} + 1 / \mu_{N} \right)^{-1}$$



.

Mécanisme de diffusion	Formule
Réseau + (trou-trou)	$N_{\perp} \prec 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 72K; \mu_{L} = 1.6 \times 10^{7} T^{-1.54} \Big[1 - 0.08 N_{A} (2 \times 10^{17}) \Big]$ $T \succ 72K; \mu_{L} = 2.3 \times 10^{9} T^{-2.7} \Big[1 - 0.08 N_{A} (2 \times 10^{17}) \Big]$ $N_{A} \ge 3 \times 10^{17} cm^{-3}$ $T \le 72K; \mu_{L} = 1.6 \times 10^{7} T^{-1.54} \big(0.884 \big)$ $T \succ 72K; \mu_{L} = 2.3 \times 10^{9} T^{-2.7} \big(0.884 \big)$
Impureté ionisée + (trou-trou)	$\mu_{1} = \frac{\gamma \left[\mu_{11} + \mu_{12} (m_{d2}^{*} / m_{d1}^{*})^{1.5} + \mu_{13} (m_{d3}^{*} / m_{d1}^{*})^{1.5} \exp(-0.044 / KT) \right]}{\left[1 + (m_{d3}^{*} / m_{d1}^{*})^{1.5} (m_{d3}^{*} / m_{d1}^{*})^{1.5} \exp(-0.044 / KT) \right]}$ $\gamma = \frac{N_{A}^{*}}{p'} \left[1 - \exp(-P' / N_{A}^{*}) \right]$ $p' = p + n + N_{A}^{*} (1 - N_{A}^{*} / N_{A})$ $pour i = 1, 2, 3$ $\mu_{h} = \frac{2^{3.5} (4\pi K \epsilon_{0})^{2} m_{d}^{*.0.5} (KT) 1.5}{\pi^{1.5} q^{3.5} m_{A}^{*.0.5} (KT) 1.5} \times 10^{-2}$ $G(b_{1}) = \ln(b_{1} + 1) - b_{1} / (b_{1} + 1)$ $b_{1} = \frac{24 k \epsilon_{0} m_{d}^{*} (KT)^{2}}{q^{2} \hbar^{2} p'} \times 10^{\circ}$
Réseau et impureté ionisée combinés	$\mu_{LI} = \mu_L f(X)$ $f(X) = 1 + X^2 \left[CiX \cos X + \sin X \left(SiX - \frac{\pi}{2} \right) \right]$ $X^2 = 6\mu_L / \mu_I$

$$\begin{aligned} \text{Impureté neutre} \\ \mu_{x} &= \frac{\left[\mu_{x_{1}} + \mu_{x_{2}} \left(\dot{\mathbf{m}_{d_{1}}} / \dot{\mathbf{m}_{d_{1}}} \right)^{1/2} + \mu_{x_{3}} \left(\dot{\mathbf{m}_{d_{1}}} / \dot{\mathbf{m}_{d_{1}}} \right)^{1/2} \exp(-0.044 / \text{ KT}) \right] \\ \text{pour } i &= 1,2,3 \\ \mu_{x_{1}} &= 0.82 \mu_{\text{E}} \left[\frac{2}{3} \left(\frac{\text{KT}}{\text{E}_{x_{1}}} \right)^{1/2} + \frac{1}{3} \left(\frac{\text{E}_{\text{N}}}{\text{KT}} \right)^{1/2} \right] \\ \text{E}_{x_{1}} &= \frac{1.136 \times 10^{-19} \text{m}_{a}}{\text{K}^{2} \text{m}_{0}} \\ \mu_{\text{E}} &= \frac{2\pi^{2} q^{3} \text{m}_{a}}{5 \text{N}_{N} 4\pi \text{K} \varepsilon_{0} \text{h}^{3}} \times 10^{-2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Mobilité totale des trous} \end{aligned}$$

Tableau A.2: Formules de calcul de la mobilité des trous [13,27,28]

•

Liste des Notations

•

\mathbf{N}_{P}	Densité totale des donneurs
NA	Densité totale des accepteurs
N	Densité des impuretés ionisées
N_{\sim}	Densité des impuretés neutres
$oldsymbol{N}_D^+$	Densité totale des donneurs ionisés
$N_{\mathcal{A}}^{+}$	Densité totale des accepteurs ionisés
n	Densité des électrons
р	Densité des trous
n'	Effective electron screening density
p'	Effective hole screening density
$\mu_{\rm L}$	Mobilité des porteurs par le biais du réseau
μ	Mobilité des porteurs par les impuretés ionisées
μ_{\setminus}	Mobilité des porteurs par les impuretés neutres
m ₀	Masse d'électron libre
m_{i}	Masse effective longitudinale
m_d^{-}	Masse effective de densité d'états
m [*] _c	Masse effective de conductivité
γ	Facteur exprimant l'effet des interactions porteur - porteur sur la mobilité des
	impuretés ionisées

REFERENCES

[1] J Philibert, "*Diffusion et Transport de Matière dans les solides*" ", *Ed. S de physique*, France, Septembre 1985.

[2] M Draidi, "Recristallisation des Couches Implantées par Recuit Rapide Isotherme", Thèse de Magister, Université de Constantine, Algerie, 1996.

[3] C. Jacoboni et al, "A Review of Some Charge Transport Properties of Silicon", *Solid State Electronics*, Vol. 20, 1977.

[4] C. Jacoboni and P. Lugli, "The Monte Carlo Method for Semi-Conductor Device Simulation", Ed. S. Selberherr, 1989.

[5] A M Goodman, "Metal Semiconductor Barrier Height Measurement by the Differential Capacitance Method-One Carrier System", 1962

[6] F Boulgamh et F. Mokhbi, "Caractérisation des Structures Testes (contact schottky et jonction PN) Traitées dans un four de recuit rapide-JIPELEC- avec thermocouple", Mémoire d'ingénieur d'état en électronique Université de Constantine, Juin 1994.

[7] X. H. Fu and J. N. Chen, "A Point-by-Point Multiple-Sweep Numerical Algorithm for Dopant Profiling Based on C-V Data", *Solid-State Electronics*, Vol. 35, N° 2, 1992

[8] J. A. Jimenez-Tejada et al, "A Non-Destructive Method to Determine Impurity Profiles in Non-Abrupt P-N Junctions with Deep Levels", *Solid-State Electronics*, Vol. 35, N° 12, 1992

[9] Blackmore, J. S., Semiconductor statistics, Perçamon Press, New York, pp354-365, 1962

[10] Barber, H. D., "Effective Mass and Intrinsic Concentration in Silicon", Solid State Electronics 10, pp.1039-1051, 1967.

[11] Macfarlane, G. G., et al, "Fine Structure in the Absorption-Edge Spectrum of Si", *Phys Rev. 111*, pp. 1245-1254, 1958

[12] N. A. Penin, B.G. Zhurkin and B. A. Volkov, "Influence of the Concentration of Donors and Acceptors on the Electrical Conductivity of Heavily Doped n-Type Silicon", *Soviet Physics-Solid-State*, Vol. 7, N° 11, Mai 1966.

[13] R. D. Larrabee, W. R. Thurber and W. M. Bullis, "A Fortran Program for Calculating the Electrical Parameters of Extrinsic Silicon", *Semiconductor Measurement Technology*, *NBS* Special Publication 400-63, 1985

[14] S. M. Sze, "Physic of Semiconductor Devices", Ed. J. wiey and Sons, U.S.A, 1981

[15] M.G. Buehler, "Peripheral and Diffused Layer Effects on Doping Profiles", *IEEE Trans. Electron Devices*, Vol. E-D-19, N° 11, Nov 1972.

[16] P. R. Wilson, "Depletion Layer and Capacitance Calculations for Gaussian Diffused Junctions", *Solid-State Electronics, Pergamon Press*, Vol. 12, 1969.

[17] R L. Mattis and M G. Buehler, "A Basic Program for Calculating Dopant Density Profiles from Capacitance-Voltage Data", *Semiconductor Measurement Technology*, NBS Special Publication 400-11, 1982

[18] D. B. M. Klaassen, "A Unified Mobility Model for Device Simulation I Model Equations and Concentration Dependance", *Solid-State Electronics*, Vol. 35, N° 7, 1992

[19] D. B. M. Klaassen, "A Unified Mobility Model for Device Simulation II. Temperature Dependance of Carrier Mobility and Lifetime", *Solid-State Electronics*, Vol. 35, N° 7, 1992.

[20] S. S. Li and W. R. Thurber, "The Dopant Density and Temperature Dependance of Electron Mobility and Resistivity in n-Type Silicon", *Solid-State Electronics*, Vol. 20, 1977.

[21] L. S. Pan et al, "Temperature Dependent Mobility in Single-Crystal and Chemical Vapor-Deposited Diamond", *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, N° 6, Mars 1993

[22] M B. Zivanov and M M Jevtic, "Majority Carrier Mobility in High-Doped n-Type Si", Solid-State Electronics, Vol. 35, N° 9, 1992.

[23] S. C. Jain et al, "Determination of Minority Carrier Mobility in Heavily Doped Si Using a New Model Based on Percolation Theory", *IEEE*, 1988

[24] H. Mathieu, "Physique des Semi-Conducteurs et des Composants Electroniques", Ed. Masson, Paris, 1987.

[25] P. Norton, T. Baggins and H. Levinstein, "Impurity and Lattice Scattering Parameters as Determined from Hall and Mobility Analysis in n-Type Silicon", *Physical Review B*, Vol. 8, N° 12, Dec. 1973.

[26] M. Remram, "Défauts Electriquement Actifs Induits par le Recuit Rapide Isotherme dans le Silicium", Thèse de Doctorat I N.S.A de Lyon, France, 1987.

[27] R. D. Larrabee, "Interpretation of Hall Measurements", Semiconductor Characterization Techniques, Proc., Vol. 78-3, 1978.

[28] D. E. Kane and R. M. Swanson, "Effect of Electron-Hole Scattering on the Current Flow in Semi-Conductors", *Journal of Applied Physics*, Vol. 72, N° 11, Déc. 1992.

[29] N. Sclar, "Neutral Impurity Scattering in Semiconductors", *Physical Review*, Vol. 104, N° 6, Dec. 1956.