

MCours.com

Chapitre III
Modélisation

III.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous commençons par une description brève des échantillons qui font l'objet de cette étude et nous définissons la technique de caractérisation SIMS utilisée pour l'obtention des profils expérimentaux. Sur la base de ces données nous établissons un modèle adéquat pour modéliser ces profils et à partir de cette modélisation, le paramètre physique décrivant la diffusion durant le processus de recuit est déterminé. L'interprétation des résultats est ensuite réalisée en fonction de la température de dépôt, du temps et de la température de recuit.

III.2. Description des structures étudiées

Dans ce travail, les structures à étudier concerne des films minces de silicium polycristallin obtenus par décomposition chimique en phase vapeur de silane SiH_4 à basse pression « LPCVD ». Ces films d'environ 250 nm d'épaisseur dopés "In-Situ" au bore avec une concentration de $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, ont été déposés à deux différentes températures sur des substrats de silicium monocristallins orientés (111) est faiblement dopés. Deux structures sont à considérer tel que représenté sur la **Figure III.1**, celles où le dépôt est effectué sur des substrats de silicium monocristallins oxydés (**Sipoly/SiO₂/c-Si**) notée structure 2 et celles où le dépôt est effectué sur des substrats de silicium monocristallins non oxydés (**Sipoly/c-Si**) notée structure 1.

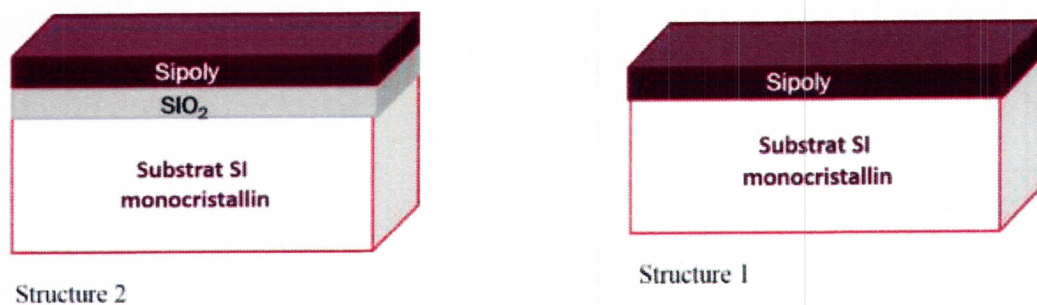


Figure III.1: Présentation des structures à étudier.

Après dépôt, ces films de silicium polycristallin ont été traités thermiquement sous atmosphère oxydante pour différentes températures et durées d'oxydation. Durant ces traitements thermiques la répartition des dopants initialement présents dans la couche a été modifiée, à cause de la redistribution par diffusion. La répartition du bore dans les films a été déterminée par analyse SIMS (spectrométrie de masse d'ions secondaires).

III.3. Dopage "in situ"

Le dopage "in-situ" s'effectue pendant la phase de formation de la couche de silicium elle-même. Le procédé qui permet de réaliser cela, consiste à faire introduire dans le four de dépôt deux gaz vecteurs, l'un véhiculant les atomes qui constitueront le film de silicium, et l'autre véhiculant l'atome dopant. Ce mode de dopage permet d'obtenir une distribution homogène des impuretés en ne nécessitant qu'une seule étape technologique. Par cette technique, on réalise les dépôts de silicium fortement dopés en ajoutant au silane : SiH_4 ou au disilane : Si_2H_6 du trichlorure de bore : BCL_3 , du diborane : B_2H_6 ou de phosphine : PH_3 [36].

Un avantage pour le dopage "in-situ" est qu'il permet l'incorporation directe de Bore dans le réseau cristallin, en éliminant ainsi la nécessité d'une étape de recuit pour activer le dopant sur une position de maille. Cependant, pour le poly-Silicium l'activation est incomplète due à une certaine quantité de dopant dans un état inactif au niveau des joints de grains [37].

III.4. La technique d'analyse SIMS

La spectroscopie de masse des ions secondaires ou SIMS est une technique de caractérisation, couramment utilisée dans le domaine de la caractérisation des matériaux. Elle permet de remonter aux profils donnant la répartition des atomes de dopants ou des impuretés en fonction de l'épaisseur du film dopé [4].

Le principe de la spectrométrie de masse des ions secondaire est basé sur la détection des ions secondaires produits sous l'effet d'un bombardement, de la surface d'un échantillon, par un faisceau d'ions primaire d'énergie et d'angle d'incidence optimale. L'impact d'un ion ou d'une molécule possédant une énergie de quelques keV produit l'émission de rayonnements et de particules de différentes natures caractéristiques de l'échantillon, parmi lesquelles on trouve des photons, des électrons, des atomes neutres et des ions mono ou poly -atomiques [38]. Ces derniers constituent le faisceau d'ions secondaires portant l'information utile représentant la structure analysée. Les particules éjectées sont collectées et analysées au moyen d'un spectrographe de masse. L'information donnée par l'analyseur ionique et le nombre de coups en fonction du temps de pulvérisation vont définir le profil de concentration en fonction de la profondeur [39].

III.5. Caractérisation électrique

De nombreuses études, ont montré que la résistivité d'un film de silicium polycristallin est supérieure à celle du silicium cristallin à dopage équivalent [40,41]. Cet écart s'explique par la nature hétérogène du matériau poly-cristallin [42]. D'abord, les dopants présents dans les joints de grains sont électriquement inactifs, ce qui augmente la résistivité du matériau. En outre, la présence des joints de grains réduit la mobilité des porteurs. Ces deux phénomènes dépendent de la densité de joints de grains. Bien évident, la résistivité du polysilicium varie également en fonction des conditions de dépôt du matériau, des conditions de dopages et des bilans thermiques.

Dans un premier temps, nous allons présenter l'influence de la température de dépôt sur la résistivité dans les films considérés qu'on a déterminé par la technique des quatre pointes, représenté sur la **Figure III.2**.

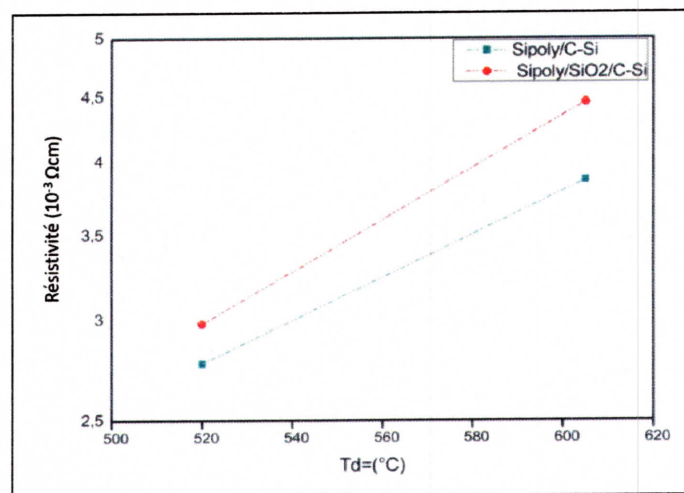


Figure III.2 : Présentation de la résistivité des deux structures étudiées en fonction de la température de dépôt.

Sur la **Figure III.2**, on voit que la résistivité augmente avec la température de dépôt ceci peut être expliqué par le fait que les films Si-LPCVD, évoluent vers une structure polycristalline caractérisée par une plus petite taille des grains. En effet, la réduction de la taille des grains avec l'augmentation de la température de dépôt induit une augmentation de la densité des zones intergranulaires, en augmentant en même temps, le nombre des états des pièges et des sites de

ségrégation dans les joints de grains. Par conséquent la résistivité des joints de grains est plus élevée comparée à celle des grains, d'où une plus grande résistivité du matériau.

Par ailleurs, on observe que la résistivité dans les deux structures est différente, cette différence s'explique par la présence de l'oxyde à l'interface silicium polycristallin / silicium monocristallin.

III.6. Profils expérimentaux

Deux séries de films minces sont étudiées dans le cadre de ce travail, selon deux structures (voir **Figure III.1**) élaborés à deux températures 520°C et 605°C. Rappelons que ces films sont dopés au bore avec une même dose et ont subi un recuit thermique sous oxygène sec à différentes températures 840°C, 945°C et 1050°C pendant diverses durées 16 heures, 13h06 minutes et 1h33 minutes respectivement.

Dans un premier temps, nous allons présenter les profils expérimentaux obtenus dans les différentes structures en fonction de la température de dépôt, du temps et de la température du traitement thermique.

Sur les **Figures III.3-6**, la répartition du bore après recuit dans la couche est représentée en fonction de la profondeur.

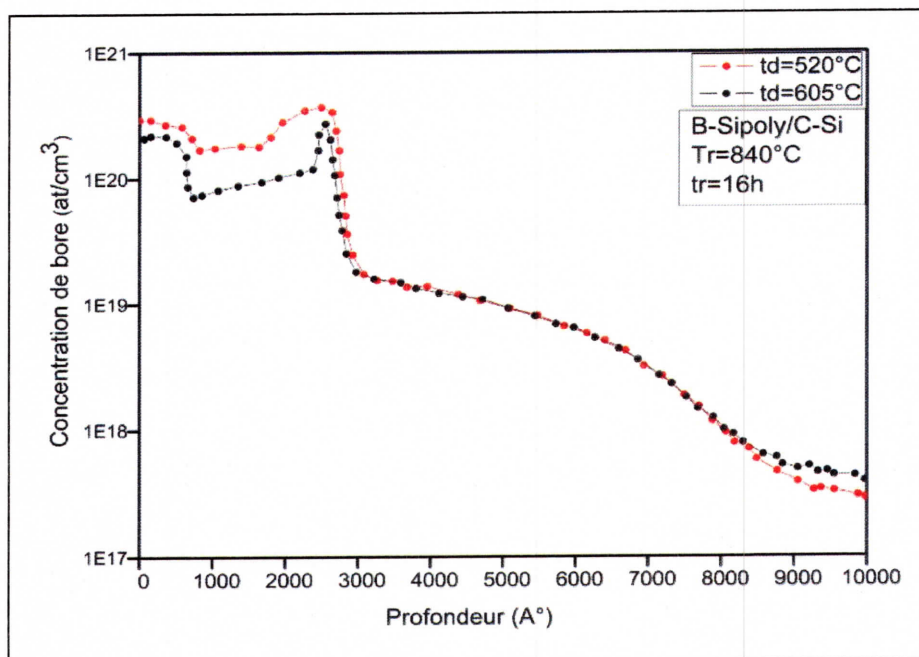


Figure III.3 : Profils de bore dans des films de Sipoly /c-Si déposés à Td=520°C et Td=605°C, traité thermiquement pendant 16h à Tr=840°C.

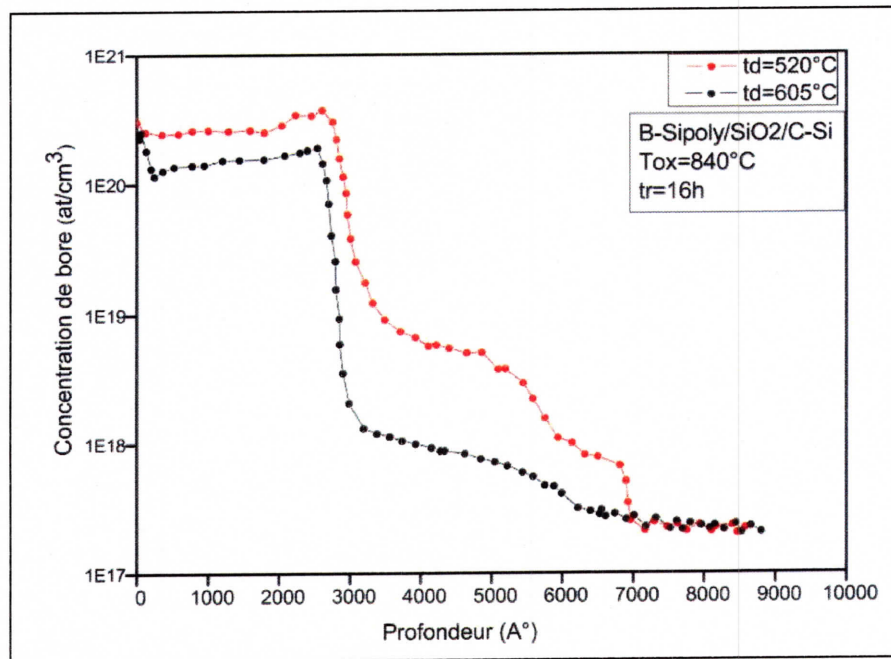


Figure III.4 : Profils de bore dans des films de Sipoly/SiO₂/c-Si déposés à Td=520°C et Td=605°C, traité thermiquement pendant 16h à Tr=840°C.

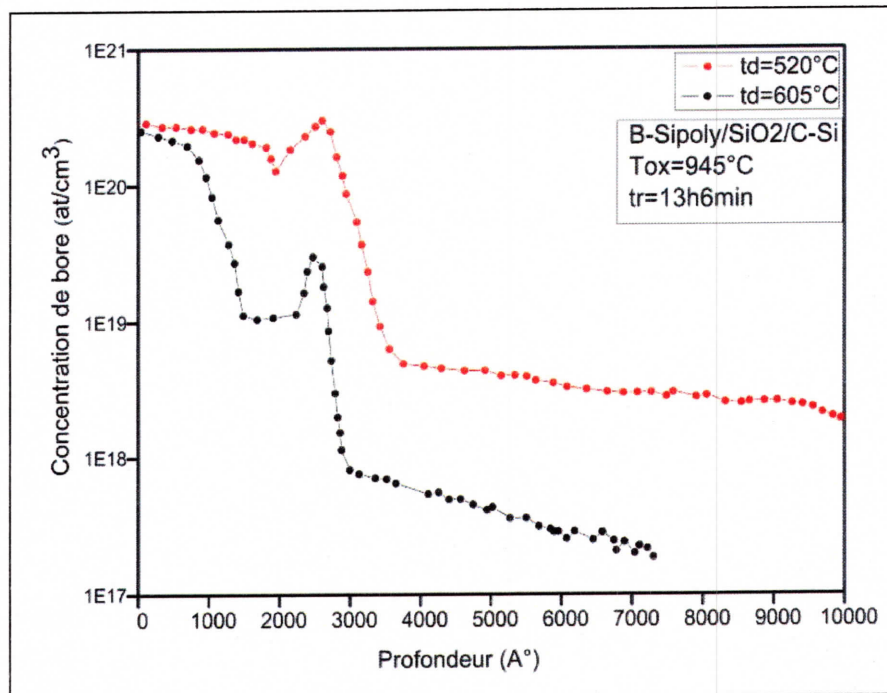


Figure III.5 : Profils de bore dans des films de Sipoly/SiO₂/c-Si déposés à Td=520°C et Td=605°C, traité thermiquement pendant 13h06mn à Tr=945°C.

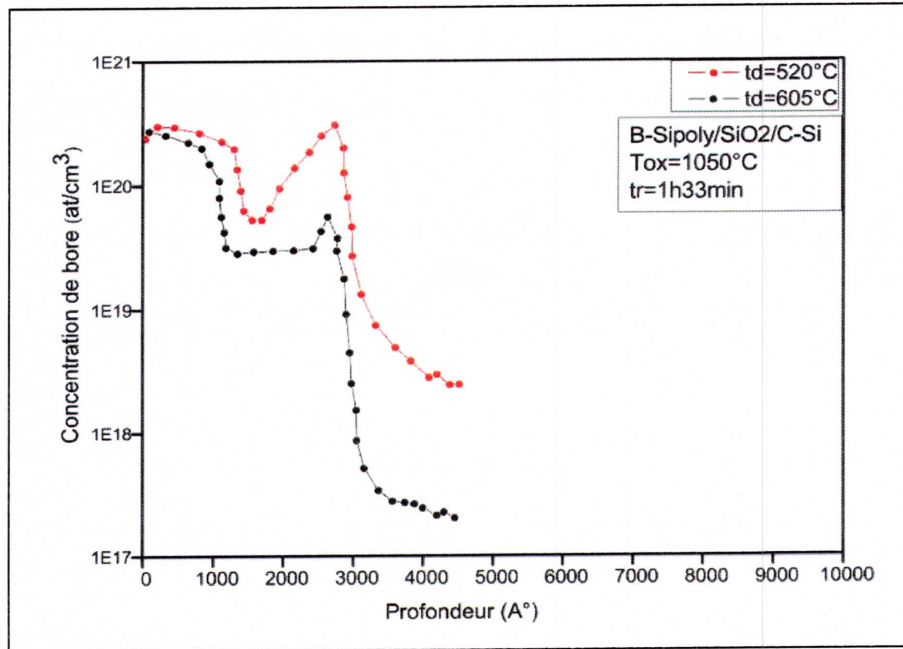


Figure III.6 : Profils de bore dans des films de Sipoly/SiO₂/c-Si déposés à Td=520°C et Td=605°C, traité thermiquement pendant 1h33mn à Tr=1050°C.

D'après les **Figures** ci-dessus, on remarque que l'évolution des dopants du bore peut être divisée en trois parties ou zones bien distinctes, d'abord une distribution importante est localisée (accumulation) près de la surface ensuite une deuxième du côté de l'interface ayant toutes deux l'allure d'une gaussienne, et une zone intermédiaire entre les deux, linéaire. Donc, à partir de ces constats on a modélisé le profil en se basant sur le travail de Horiuchi et Blanchard [43], qui prennent en compte le niveau de concentration sur les courbes dans les trois zones afin d'évaluer le coefficient de diffusion décrivant le processus de diffusion à l'intérieur de la couche.

III.7. Modélisation

La modélisation des profils après traitement thermique peut être effectuée selon trois zones tel que représenté sur la **Figure III.7**, une zone de surface et une zone d'interface où sont localisés la majorité des dopants ayant l'allure de gaussiennes légèrement asymétriques pouvant être modélisées par l'équation :

$$C(x,t) = C_0 \cdot \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) \quad (\text{III.1})$$

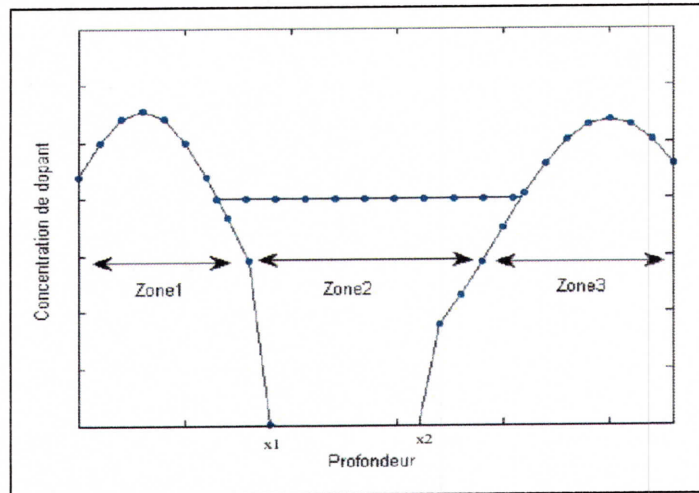


Figure III.7 : Description de la méthode de modélisation.

Et, une zone intermédiaire apparaissant quasiment linéaire (constante), qu'on a modélisé par l'équation [44]:

$$C(x,t) = C_p = \frac{Q}{2\sqrt{Dt\pi}} \tag{III.2}$$

Ainsi, les différentes étapes de la modélisation des courbes expérimentales précisées un programme en langage Matlab a été rédigé selon un organigramme établi, représenté sur la Figure III.8 ;

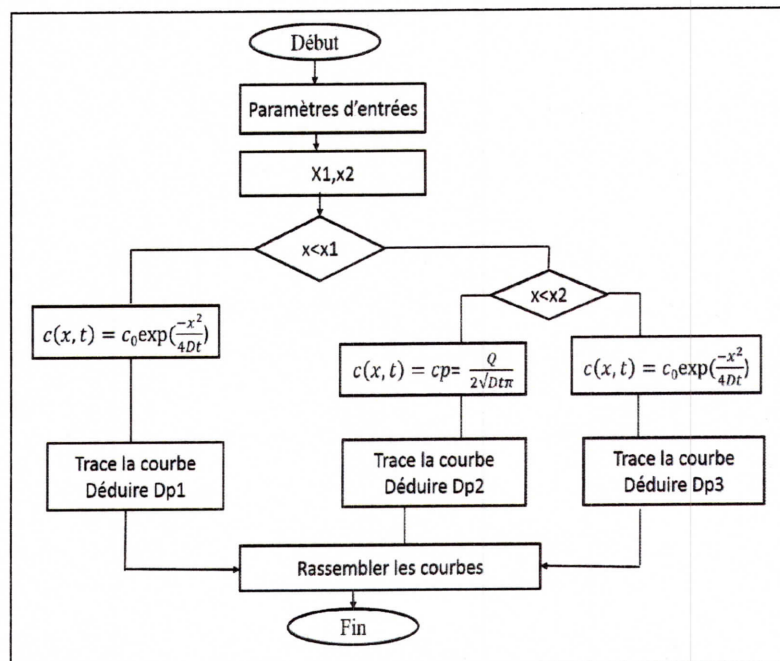


Figure III.8 : Organigramme de modélisation.

III.8. Résultats et Discussions

III.8. 1. Résultats

L'ensemble des résultats obtenus à partir de la modélisation sont reportés sur les figures suivantes :

III.8.a) A température de dépôt $T_d=520^\circ\text{C}$

Nous commençons par présenter la modélisation des profils obtenus dans les films déposés à la température de 520°C ;

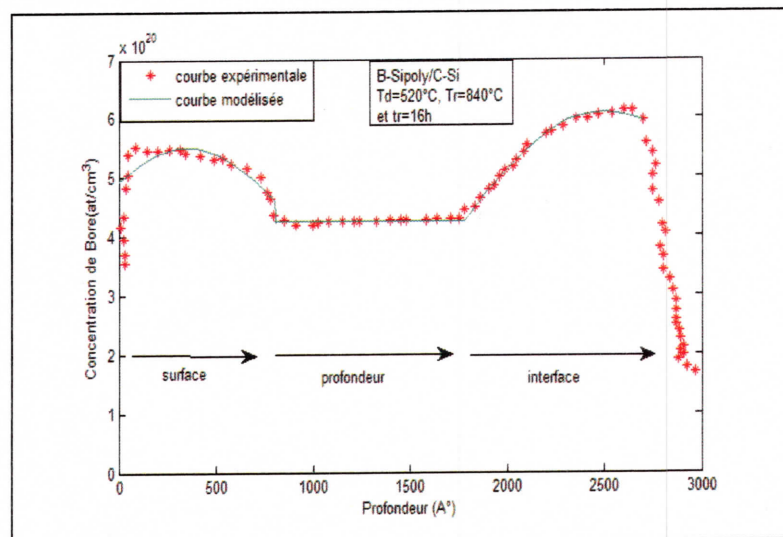


Figure III.9 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly /c-Si déposé à $T_d=520^\circ\text{C}$ et, traité thermiquement pendant 16h à $T_r=840^\circ\text{C}$.

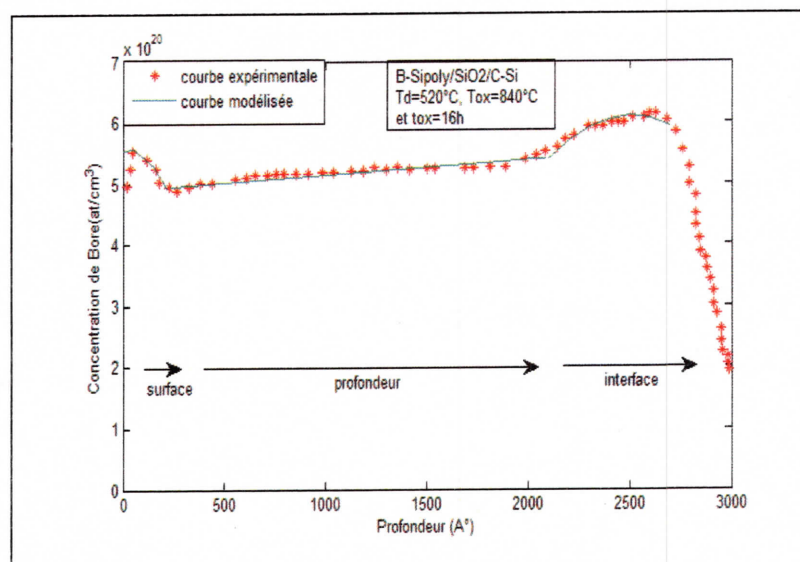


Figure III.10 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂ /c-Si déposé à $T_d=520^\circ\text{C}$ et, traité thermiquement pendant 16h à $T_r=840^\circ\text{C}$.

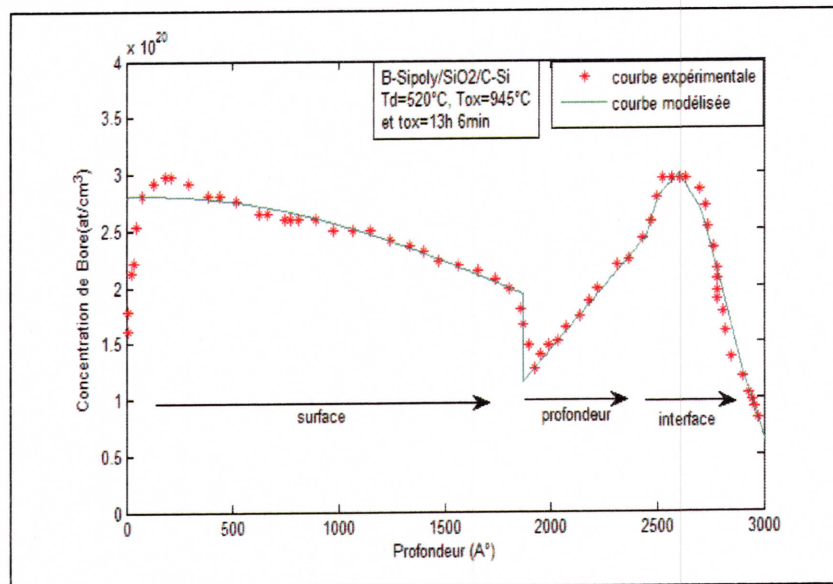


Figure III.11 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂/c-Si déposé à T_d=520°C et, traité thermiquement pendant 13h06mn à T_r=945°C.

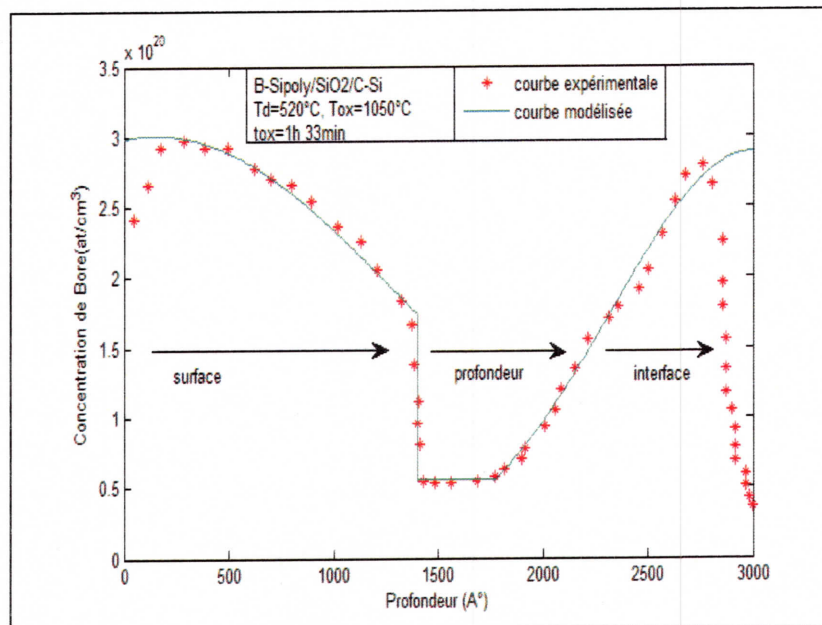


Figure III.12 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂/c-Si déposé à T_d=520°C et, traité thermiquement pendant 1h33mn à T_r=1050°C.

III.8.b) A température de dépôt $T_d=605^\circ\text{C}$

A présent, nous poursuivons la présentation de la modélisation des profils obtenus dans les films déposés à la température de 605°C ;

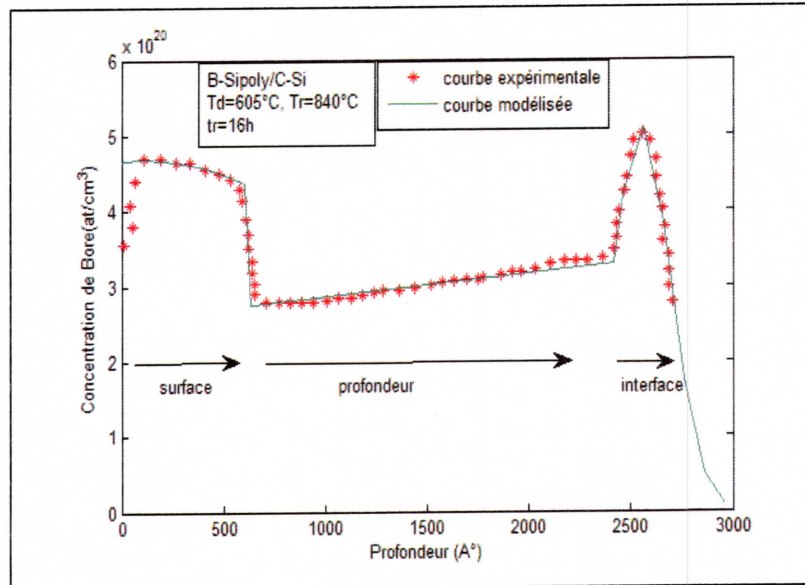


Figure III.13 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/c-Si déposé à $T_d=605^\circ\text{C}$ et, traité thermiquement pendant 16h à $T_r=840^\circ\text{C}$.

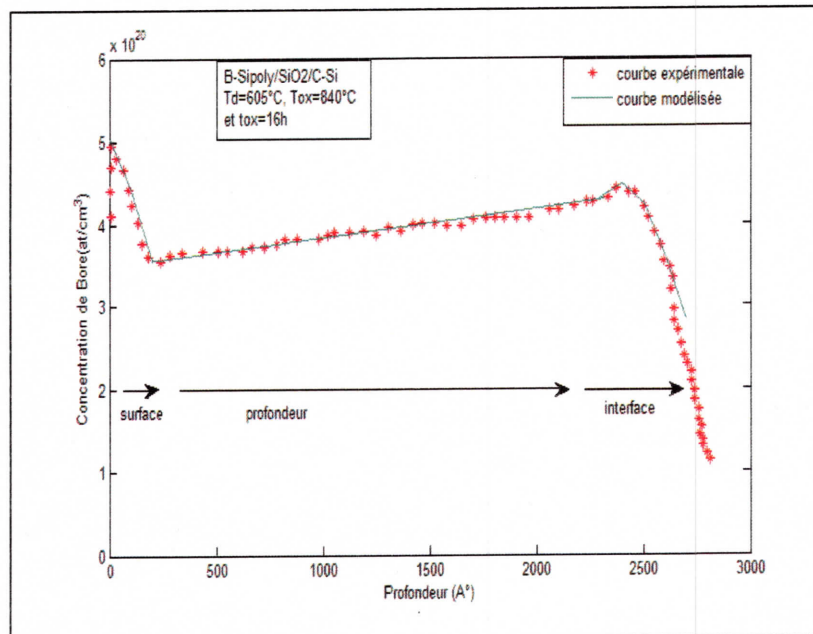


Figure III.14 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂/c-Si déposé à $T_d=605^\circ\text{C}$ et, traité thermiquement pendant 16h à $T_r=840^\circ\text{C}$.

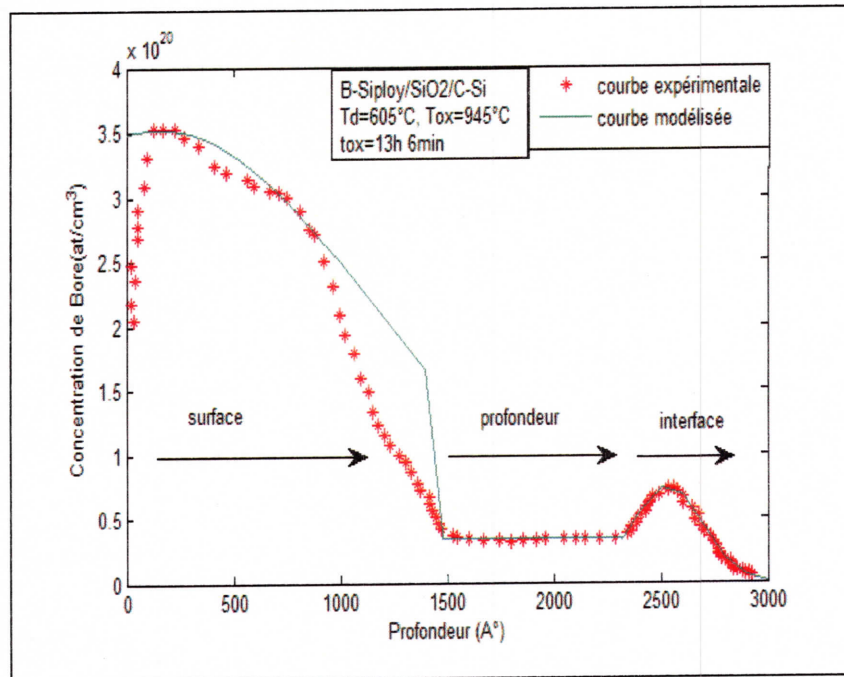


Figure III.15 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂ /c-Si déposé à Td=605°C et, traité thermiquement pendant 13h06mn à Tr=945°C.

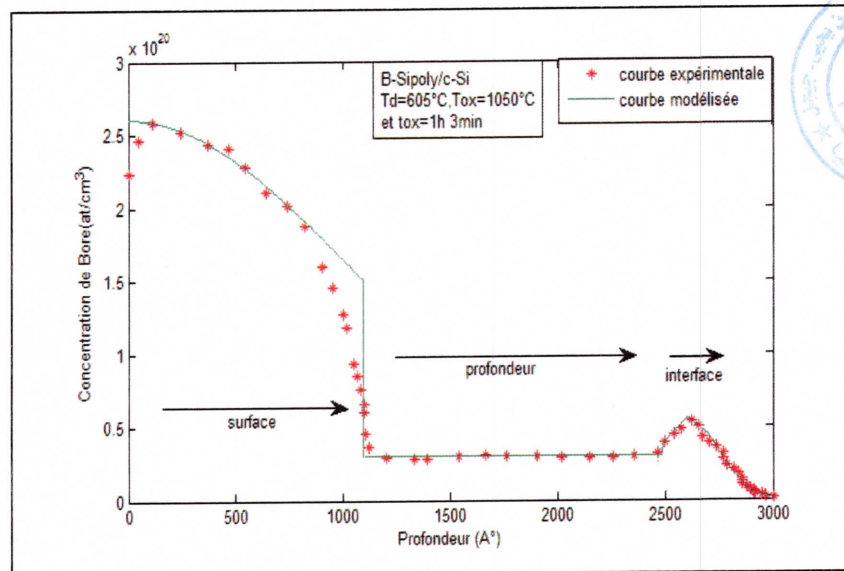


Figure III.16 : Modélisation du profil de bore dans un film de Sipoly/SiO₂ /c-Si déposé à Td=605°C et, traité thermiquement pendant 1h33mn à Tr=1050°C.

III.8.2. Discussions

D'après les figures présentées ci-dessus (**Figure III.3-6**), on remarque que la diffusion est plus rapide dans les films déposés à $T_d=605^\circ\text{C}$ que dans les films déposés $T_d=520^\circ\text{C}$, ceci peut être expliqué par le fait que le silicium poly-cristallin présente une structure caractérisée par la juxtaposition de grains, séparés les uns des autres par des joints de grains. Ce qui nous permis de supposé que la structure de 605°C présente un taux de grains de petite taille plus élevé que la structure obtenue à 520°C , ce qui induit un pourcentage de joint de grains plus élevé, ces derniers étant le siège de nombreux défauts est constituant des « canaux » pour diffusion, renforce la diffusion du bore et ceci est confirmé par les résultats de calcul obtenus à partir de la modélisation reportés sur le **Tableau III.1**.

Température de dépôt	Température de recuit	Structure	Coefficient de diffusion		
			Surface	Profondeur	Interface
605°C	840°C	Sipoly/c-Si	9.2×10^{-14}	$8,6 \times 10^{-14}$	3.6×10^{-14}
		Sipoly/SiO ₂ /c-Si	8.83×10^{-14}	$8,6 \times 10^{-14}$	7.94×10^{-14}
520°C	840°C	Sipoly/c-Si	7.3×10^{-14}	$8,6 \times 10^{-14}$	1.2×10^{-14}
		Sipoly/SiO ₂ /c-Si	6.01×10^{-14}	$8,6 \times 10^{-14}$	4.3×10^{-14}
605°C	945°C	Sipoly/SiO ₂ /c-Si	12.1×10^{-13}	$1,063 \times 10^{-13}$	11.8×10^{-13}
520°C		Sipoly/SiO ₂ /c-Si	8.7×10^{-13}	$1,063 \times 10^{-13}$	8.1×10^{-14}
605°C	1050°C	Sipoly/SiO ₂ /c-Si	5.72×10^{-12}	$2,8 \times 10^{-12}$	5.1×10^{-13}
520°C		Sipoly/SiO ₂ /c-Si	5.01×10^{-12}	2.8×10^{-12}	2.2×10^{-13}

Tableau III.1 : Valeurs du coefficient de diffusion D_p déterminé à partir de la modélisation.

D'après les résultats du **Tableau III.1** issus de la modélisation, on voit que la diffusion est plus rapide à la surface qu'à l'interface et ce quelques soit la température de recuit, ce qui en bon accord avec la réalité. Car en fait, la ségrégation à l'interface Sipoly/oxyde dépend de la taille des impuretés, dans le cas des dopants de type N comme l'arsenic, le phosphore ou

l'antimoine l'oxyde joue le rôle de barrière à la diffusion, en revanche dans le cas de dopage de type P (très souvent le bore : notre cas) suivi d'un recuit, la diffusion du dopant à travers l'oxyde est possible du fait de la faible taille des atomes [45].

D'autre part, on constate que les coefficients de diffusion ont une tendance à augmenter avec la température de recuit ou traitement thermique à la surface et à l'interface. Ceci peut être expliqué par le fait, que la taille des grains augmente durant le processus thermique par conséquent le nombre de joints de grains diminue ce qui parvient donc à améliorer les propriétés électroniques du matériau, plusieurs travaux [46] ont confirmé l'augmentation de la taille des grains lors d'un traitement thermique sous atmosphère oxydante ce qui offre la possibilité de réduire la pénétration du bore à l'interface film/oxyde visant son activation électrique.

En effet, l'estimation des coefficients de diffusion au niveau des grains et des joints de grains reportée sur le **Tableau III.2**, a été faite à partir des relations présentées dans le chapitre II, en utilisant des données intrinsèques publiées dans d'autres travaux [35], il résulte des valeurs obtenues que la diffusivité au niveau des joints de grains est bien plus grande que dans les grains tant que la température de recuit est inférieure à 1000°C. Atteignant 1050°C, le phénomène est inversé.

Température de recuit	Température de dépôt	Coefficient de diffusion dans les grains		Coefficient de diffusion dans les joints de grains	
		Surface	Interface	Surface	Interface
840°C	605°C	3.89×10^{-14}	3.96×10^{-14}	4.94×10^{-14}	3.98×10^{-14}
	520°C	2.39×10^{-14}	1.98×10^{-14}	3.62×10^{-14}	2.32×10^{-14}
945°C	605°C	5.13×10^{-13}	5.32×10^{-13}	6.97×10^{-13}	6.48×10^{-13}
	520°C	3.52×10^{-13}	4.71×10^{-14}	5.18×10^{-13}	3.14×10^{-14}
1050°C	605°C	4.44×10^{-12}	4.53×10^{-13}	1.28×10^{-12}	0.57×10^{-13}
	520°C	3.39×10^{-12}	1.2×10^{-13}	1.62×10^{-12}	1×10^{-13}

Tableau III.2 : Valeurs des coefficients de diffusion D_G et D_{GB} .

Enfin, l'augmentation de la température de recuit (ou du traitement thermique), le cas à 1050°C devient le facteur dominant la diffusion des dopants et la ségrégation des dopants vers l'interface film/oxyde diminue, ce qui confirme bien que la diffusion est un phénomène activé thermiquement.