

50376  
1984  
273

N° D'ORDRE : 355

# THESE

présentée

à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR INGENIEUR

par

**Dominique COLLARD**

**Ingenieur ISEN**

APPLICATION DE LA METHODE DES ELEMENTS FINIS  
A LA SIMULATION BIDIMENSIONNELLE DE TECHNOLOGIES SILICIUM

soutenu le 3 octobre 1984 devant la commission d'examen :

Président	M. ESCAIG
Rapporteur	M. DECARPIGNY
Examineurs	M. DEMOULIN
	M. FAUQUEMBERGUE
	M. LANNOO
	M. MARTINEZ
	M. PFISTER

*A la mémoire  
de mon Grand-Père*

*A Marie-Christine*

*A ma famille*

*A mes amis.*

*A l'amitié qui émane de la franchise*

Cette thèse a été préparée à l'INSTITUT SUPERIEUR  
D'ELECTRONIQUE DU NORD, au sein du Laboratoire Associé 253  
au C.N.R.S., dans le cadre d'une action du Groupement  
Circuits Intégrés Silicium (G CIS).

*J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur B. ESCAIG, qui a accepté la présidence de ce jury.*

*Je remercie Messieurs E. DEMOULIN, R. FAUQUEMBERGUE, A. MARTINEZ et J.C. PFISTER pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et pour la disponibilité qu'ils m'ont réservée dans leur participation au jury.*

*J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur M. LANNOO, pour l'accueil qu'il m'a réservé au sein du Laboratoire de Physique des Solides, ainsi que pour sa participation au jury.*

*Comment ne pas remercier Monsieur J.N. DECARPIGNY, initiateur de ce travail, et qui a su, par la qualité de son encadrement, me communiquer son enthousiasme pour la recherche. Jean-Noël, trouve ici l'expression de ma plus sincère amitié.*

*Je remercie l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord qui a encouragé ce travail. Que Messieurs G. VANDECANDELAERE et P. ASTIER trouvent en ces lignes toute ma reconnaissance et mon profond attachement.*

*Que Monsieur le Professeur P. JESPERS et Monsieur M. LOBET du Laboratoire de Microélectronique de Louvain-la-Neuve trouvent ici mes plus sincères remerciements. Ils m'ont apporté plus que le réalisme nécessaire au développement de cette étude.*

*Je remercie Messieurs E. CAQUOT et S. MARTIN du C.N.E.T. avec qui j'ai eu de nombreuses discussions fructueuses tout au long de ce travail.*

*Je tiens à remercier très sincèrement tous ceux qui ont participé au développement du code MOBIDIC : I. DESOUTTER, V. CEUGNIET, O. HECQUET, ainsi que J.C. DEBUS, B. HAMONIC et P. TIERCE pour leur aide sur divers problèmes numériques et G. ALLAN et J.L. CARTON pour leur prompt assistance sur le plan informatique.*

*Enfin je tiens à remercier très vivement Madame M.T. LEMAN et Mademoiselle B. BOEL pour leur excellent travail de frappe, malgré les difficultés dues au manuscrit.*

## SOMMAIRE

	Pages
INTRODUCTION .....	1
Références bibliographiques de l'Introduction .....	4
CHAPITRE I : QUELQUES EFFETS BIDIMENSIONNELS EN TECHNOLOGIE M.O.S. ....	6
1. TECHNOLOGIE N-M.O.S. ....	7
1.1. Largeur du canal - coupe transversale .....	8
1.2. Longueur du canal - coupe longitudinale .....	9
1.3. Limitations du microdimensionnement dues aux effets bidimensionnels .....	12
2. TECHNOLOGIE C-M.O.S. ....	14
3. STRUCTURE D-M.O.S. ....	16
Références bibliographiques du Chapitre I. ....	18
CHAPITRE II : LES ÉTAPES TECHNOLOGIQUES ET LEURS MODÈLES .....	19
1. LA DIFFUSION DES DOPANTS DANS LE SILICIUM .....	20
1.1. Equation de diffusion à coefficient constant .....	20
1.2. La diffusion sous conditions extrinsèques .....	30
1.3. Modèle de diffusion de l'arsenic sous forte concentration .....	45
1.4. Modèle de diffusion du phosphore .....	52
2. MODELES D'IMPLANTATION IONIQUE .....	63
2.1. Modèle unidimensionnel .....	64
2.2. Modèle bidimensionnel .....	72

	Pages
3. OXYDATION DU SILICIUM .....	81
3.1. Généralités .....	82
3.2. Cinétique d'oxydation .....	84
3.3. Forme bidimensionnelle d'oxyde .....	100
3.4. Ségrégation des impuretés à l'interface Si/SiO <sub>2</sub> ....	102
3.5. Diffusion sous ambiance oxydante .....	105
4. REDISTRIBUTION DES DOPANTS AUX INTERFACES .....	111
4.1. Evaporation .....	112
4.2. Prédépôt .....	113
4.3. Interface SiO <sub>2</sub> /Si .....	114
Références bibliographiques du Chapitre II .....	116
 CHAPITRE III : MÉTHODES NUMÉRIQUES .....	 123
1. REMARQUES PRELIMINAIRES .....	123
2. FORMULATION DE L'EQUATION DE DIFFUSION DANS LE FORMALISME DE LA METHODE DES ELEMENTS FINIS .....	125
2.1. Présentation, discrétisation spatiale et notation ..	125
2.2. Fonctions de forme .....	129
2.3. Equations différentielles et fonction d'essai .....	132
2.4. Méthode des résidus pondérés .....	133
2.5. Transformation de Green et assemblage .....	134
3. DISCRETISATION TEMPORELLE ET RESOLUTION .....	136
3.1. Méthode implicite incomplète .....	136
3.2. Résolution du système linéaire .....	137
3.3. Diffusion simultanée de plusieurs impuretés .....	140
4. SIMULATION DES RECUITS SOUS AMBIANCE OXYDANTE .....	141
4.1. Algorithmes basés sur la méthode des différences finies .....	141
4.2. Méthode proposée .....	143
Références bibliographiques du Chapitre III .....	149

	Pages
CHAPITRE IV : LES CRITÈRES DE SIMULATION .....	150
1. JUSTIFICATION DU CHAPITRE ET PRESENTATION .....	150
2. SIMULATION DE TEST ET DEGRE DE NON-LINEARITE .....	151
2.1. Prédépôt de Bore .....	151
2.2. Quantification du degré de non-linéarité .....	154
3. ETUDE DE FAISABILITE SUR DES EXEMPLES LINEAIRES .....	156
3.1. Exemple unidimensionnel .....	156
3.2. Exemple bidimensionnel .....	158
4. INFLUENCE DE L'INCREMENT DE TEMPS .....	160
5. INFLUENCE ET CHOIX DU MAILLAGE. CORRELATION INCREMENT DE TEMPS - PAS D'ESPACE .....	164
5.1. Tests de maillages réguliers .....	164
5.2. Cause d'instabilité numérique. Corrélation incrément de temps / pas d'espace .....	167
5.3. Raffinements locaux. Maille orientée .....	168
5.4. Techniques de simulation appliquées à des exemples bidimensionnels .....	170
Références bibliographiques du chapitre IV .....	176
CHAPITRE V : SIMULATION DE MOTIFS TECHNOLOGIQUES ..	177
1. IMPLANTATION IONIQUE ET RECUIT INERTE .....	178
2. STRUCTURE N.P.N. EN AMBIANCE INERTE .....	178
3. STRUCTURE LOCOS .....	183
4. SIMULATION COMPLETE DE LA ZONE SOURCE/DRAIN EN TECHNOLOGIE N-M.O.S. GRILLE POLYSILICIUM .....	192
4.1. Description du procédé .....	192
4.2. Simulation .....	193
5. DIFFUSION COUPLEE ARSENIC/BORE EN AMBIANCE OXYDANTE .....	196
Références bibliographiques du Chapitre V .....	198
CONCLUSION .....	199

## INTRODUCTION

Les progrès réalisés dans les procédés de microfabrication en technologie Silicium [1] permettent déjà l'intégration de systèmes électroniques très complexes tels que microprocesseurs, mémoires de grandes capacités, systèmes complets de filtrage ... Les récents perfectionnements des techniques de lithogravure [2] laissent entrevoir la réalisation en site industriel de composants microniques (1 à 2 $\mu$ ), voire submicroniques (< 1 $\mu$ ) qui permettront d'augmenter encore densité et performances des circuits tout en limitant leurs coûts. Pour concevoir de tels systèmes VLSI, une modélisation précise des caractéristiques électriques du composant élémentaire est nécessaire afin de maîtriser les nombreux effets parasites inhérents au microdimensionnement. A cette fin, plusieurs logiciels de simulation et d'analyse de dispositifs [3,4,5] ont été développés, travaillant sur des structures bi ou tri-dimensionnelles pour prendre en compte le fait que l'extension latérale des zones actives est du même ordre de grandeur que leur extension en profondeur. Pour résoudre les équations de transport et de continuité, ces programmes nécessitent une description physique précise du transistor (cartes de dopage, topologie de surface,...). C'est en ce sens que des simulateurs de technologie, au moins bidimensionnels, doivent être créés.

Plusieurs codes de simulation bidimensionnelle de technologie sont en cours d'élaboration [6-12], qui se différencient essentiellement par les algorithmes numériques qu'ils utilisent. Dans la majorité de ces programmes

[6-10], la résolution des équations de diffusion, nécessaire au calcul des profils de dopage finaux, est réalisée par une approche de type différences finies. Cette méthode possède un grand avantage dû à la souplesse de sa mise en oeuvre qui lui confère de bonnes performances sur le plan informatique. Par contre, elle présente de fortes restrictions quant à la géométrie de la structure simulée.

Afin de s'affranchir de ces limitations spatiales, des algorithmes basés sur la méthode des éléments finis [13] ont été mis au point [11,12] dans le cas d'éléments triangulaires munis de fonctions d'interpolation linéaires (P1). Dans ce travail, la méthode des éléments finis a également été utilisée mais sur une base d'éléments triangulaires quadratiques (P2), la résolution temporelle du système discrétisé étant menée à l'aide d'un schéma implicite incomplet. Une étude systématique des performances de la méthode de discrétisation couplée à la résolution implicite incomplète a été réalisée dans le cas de très fortes non-linéarités. Cette étude a permis de définir une technique de raffinement local de maillage qui consiste à conserver de fortes densités d'éléments uniquement sur les zones à fort gradient de concentration. Une telle méthode réduit considérablement les temps de calcul et s'avère être une contribution intéressante sur un plan numérique car elle permet la simulation d'étapes technologiques complexes et de leur enchaînement avec des ressources informatiques raisonnables. De même, un algorithme original permettant la simulation de recuits en ambiance oxydante par la méthode des éléments finis a été développé. Il consiste en l'alternance d'étapes de diffusion et de déformation de maillage, toute dégradation de la solution due aux interpolations multiples sur les mailles successifs étant évitée grâce, notamment, à la discrétisation spatiale quadratique. Ces deux contributions sont incluses dans le logiciel de simulation bidimensionnelle de technologie MOBIDIC qui a été conçu dans le cadre de cette étude. Compte tenu des approches numériques utilisées, ce programme est capable, entr'autre, de simuler la redistribution simultanée de plusieurs types d'impuretés, en tenant compte des effets de couplage en ambiance inerte ou oxydante, ce qui constitue actuellement son originalité.

Dans un premier chapitre, quelques effets parasites, typiquement latéraux, sont répertoriés dans le cas de structures MOS, afin de justifier brièvement la nécessité de moyens de simulation bidimensionnelle de techno-

logie. Le second chapitre propose une revue bibliographique détaillée des modèles de diffusion, implantation ionique et oxydation qui sont utilisés lors des simulations. Il décrit ces différents modèles en précisant nettement leur origine physique et leur domaine d'application. Les deux chapitres suivants s'intéressent à la partie numérique de ce travail. La méthode des éléments finis appliquée à la résolution des équations de diffusion ainsi que l'algorithme simulant l'oxydation sont précisés dans le chapitre 3. Les critères de simulation issus d'une analyse systématique et la méthode de raffinement de maillage qui en a été déduite sont décrits dans le chapitre 4. Enfin, le cinquième chapitre donne quelques exemples de simulation : implantation ionique, recuits en ambiances inerte et oxydante de systèmes multidopants ...

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DE L'INTRODUCTION

1. S.M.S. LIU, C.H. FU, G.E. ATWOOD, H. DUN, J. LANGSTON, E. HANASI, E.Y. SO, S. SACHDEV and K. FUCHS, "H.MOS III technology", IEEE J. Solid State Circuits, Vol. SC-17, pp. 810-815, 1982.
2. W. FICHTNER, R.K. WATTS, D.B. FRASER, R.L. JOHNSON and S.M. SZE, "0.15  $\mu$ m channel-length MOSFET's fabricated using E. Beam lithography", IEEE Electron. Devices Letters, Vol. EDL-3, pp. 412-414, 1982.
3. J.A. GREENFIELD and R.W. DUTTON, "Non planar VLSI device analysis using the solution of Poisson's equation", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-27, p. 1520, 1980.
4. S. SELBERHERR, A. SCHUTZ and W. POTZL, "MINIMOS, a two-dimensional MOS transistor analyzer", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-27, p. 1540, 1980.
5. A. HUSAIN and S.G. CHAMBERLAIN, "Three-dimensional simulation of VLSI MOSFET's the three-dimensional simulation program WATMOS", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 631-638, 1982.
6. R. TIELERT, "Two-dimensional numerical simulation of impurity redistribution in VLSI processes", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-27, pp. 1479-1483, 1980.
7. D. CHIN, M.R. KUMP, H.G. LEE and R.W. DUTTON, "Process design using two-dimensional process and device simulators", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 336-340, 1982.
8. B.R. PENUMALLY, "A comprehensive two-dimensional VLSI process simulation program, BICEPS", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 986-992 1983.
9. C.D. MALDONADO, F.Z. CUSTODE, S.A. LOUIE and R. PANCHOLY, "Two-dimensional simulation of a 2- $\mu$ m C.MOS process using ROMANS II", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 1462-1469, 1983.
10. K. TANIGUCHI, M. KASHIWAGI and H. IWAI, "Two-dimensional computer simulation models for MOSLSI fabrication processes", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-28, pp. 574-580, 1981.

11. E. CAQUOT and A. MAROCCO, "Numerical simulation with finite elements of non-linear impurity diffusion in silicon", 2nd Int. Conf. on Numerical Analysis of Semiconductor Devices and I.C.'s, Ireland, Dublin, June 17-19, 1981.
12. K.A. SALSBERG and H.H. HANSEN, "FEDSS. Finite element diffusion simulation system", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 1004-1017, 1983.
13. O.C. ZIENKIEWICZ (ed.), "The finite element method", Mc Graw-Hill, New-York, 1977.
14. MOBIDIC : sigle du code pour "MOdélisation BIdimensionnelle de DIffusion Couplée" sur une proposition de l'Equipe de Physique des Solides de l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord, LILLE.

## - CHAPITRE I -

### QUELQUES EFFETS BIDIMENSIONNELS EN TECHNOLOGIE M.O.S.

Le but de ce premier chapitre est de présenter quelques procédés types de fabrication de circuits intégrés ou de composants afin d'en dégager les motifs dans lesquels les effets bidimensionnels sont critiques. Trois familles technologiques M.O.S. sont ici considérées :

- n-M.O.S.
- C-M.O.S.
- D-M.O.S.

Vue la spécificité des techniques industrielles développées pour la réalisation de chacune de ces familles, cette étude se base sur des procédés schématiques qui préservent cependant les aspects bidimensionnels les plus marqués. Dans la majeure partie de ces cas, l'influence des paramètres de fabrication sur ces effets latéraux peut être déduite de moyens de simulation bidimensionnelle de technologie.

I. - TECHNOLOGIE n-M.O.S.

La figure I.1. présente une vue schématique en perspective d'un transistor n-M.O.S.

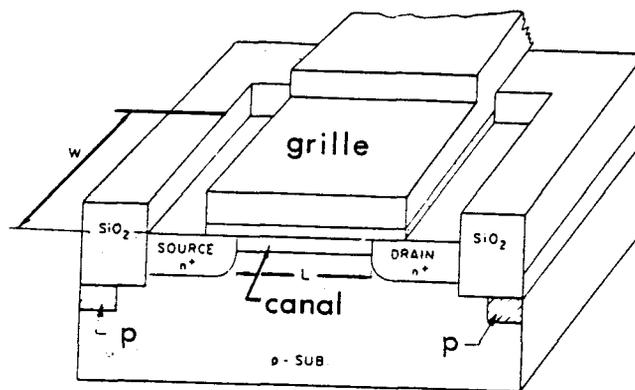


Figure I.1. Représentation schématique tridimensionnelle d'un transistor n-M.O.S. Grille polysilicium. Source : Réf. [1]

Sur cette figure, sont précisés, outre les points de polarisation (source, grille, drain et substrat), la longueur  $L$  et la largeur  $W$  du transistor. Ces deux dimensions interviennent directement dans l'expression du courant drain,  $I_D$ , du transistor M.O.S. A titre d'exemple, l'équation I.1. donne l'expression de ce courant en zone linéaire dans laquelle l'effet substrat est négligé [2]

$$I_D = \mu C_{Ox} \frac{W}{L} \left( V_{GS} - V_{TH} - \frac{V_{DS}}{2} \right) \cdot V_{DS} \quad (I.1)$$

avec

- $\mu$  : mobilité des porteurs dans le canal
- $C_{ox}$  : capacité de grille par unité de surface
- $V_{GS}$  : tension grille-source
- $V_{DS}$  : tension drain-source
- $V_{TH}$  : tension de seuil par rapport à la source

Mais, comme vont le montrer les deux parties suivantes, le dimensionnement du transistor, donc le courant drain, dépend essentiellement de la diffusion latérale des dopants intervenant lors des cycles technologiques.

#### I.1. Largeur du canal - Coupe transversale

La figure I.2. présente en coupe transversale (selon W), le procédé LOCOS définissant la largeur du canal du transistor M.O.S. de la figure I.1. Il est clair, sur la figure I.2.b. que la largeur effective du canal, W, est donnée par l'extension latérale de la diffusion de Bore durant la croissance de l'oxyde de champ.

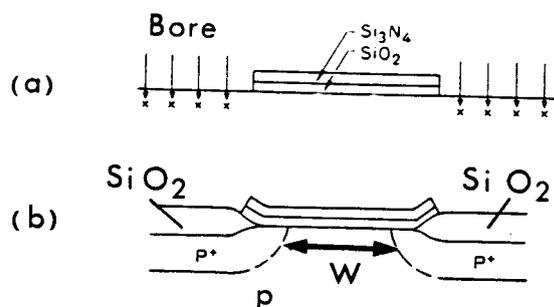


Figure I.2. Coupe transversale de la structure M.O.S. durant le procédé LOCOS

(a) Implantation de champ (Bore)

(b) Croissance de l'oxyde de champ

Source : Réf. [3]

Le contrôle de la largeur effective du canal est un paramètre critique pour la réalisation de structures micrométriques. La réduction de cette dimension pose un problème de reproductibilité car elle induit un accroissement de la tension de seuil,  $V_{TH}$ , des transistors enrichis [4]. Cet accroissement, fonction de la largeur des transistors, est dû à une perturbation de la charge du canal par l'extension latérale des zones de champs. La figure I.3. donne un exemple de cette variation de tension de seuil pour une technologie micrométrique.

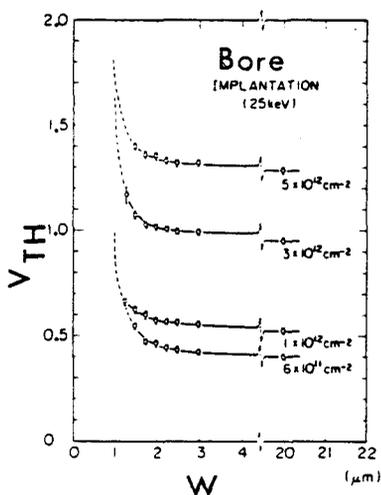


Figure I.3. Variation de la tension de seuil d'un transistor M.O.S. ( $L = 3.5 \mu\text{m}$ ) en fonction de sa largeur et de la dose d'implantation de canal.

Source : Réf. [5]

### I.2. Longueur du canal - Coupe longitudinale.

De même, comme le montre la coupe longitudinale du transistor M.O.S., figure I.4., la longueur effective du canal,  $L$ , dépend de la pénétration latérale des zones de source et de drain sous la grille en polysilicium.

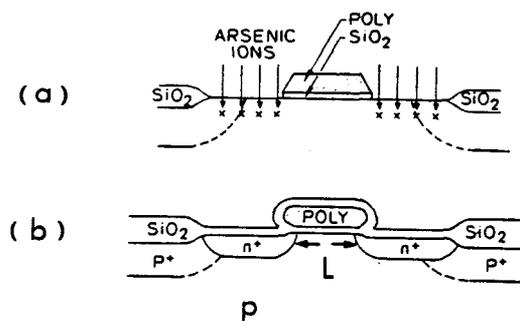


Figure I.4. Coupe longitudinale de la structure M.O.S.

(a) Implantation de source et de drain

(b) Recuit du profil implanté en ambiance oxydante.

Source : Réf. [3]

L'extension latérale des zones de source et drain sous la grille est fonction de la forme du masque de polysilicium et de la redistribution des dopants durant les différents recuits thermiques.

Cette réduction de longueur de canal qui est du même ordre de grandeur que la profondeur de jonction des zones de source/drain pouvait être négligée par des technologies de moyenne intégration ( $L \approx 10 \mu\text{m}$ ). Les performances modernes des moyens de lithogravure du polysilicium permettent d'obtenir des longueurs de canal de l'ordre du micron. Hors, comme les profondeurs de jonction ne peuvent être réduites dans les mêmes proportions, ceci étant dû essentiellement à des problèmes de perçage à la métallisation, les conséquences du recouvrement grille/source ou grille/drain deviennent critiques.

Hormis le problème purement technologique de définition de longueur du canal, l'augmentation du rapport entre la diffusion latérale et la longueur de canal induit des effets canaux courts qui diminuent les performances intrinsèques des transistors. Parmi ces effets canaux courts, on peut noter une augmentation de la transconductance de sortie des transistors et une variation de la tension de seuil avec la longueur du canal, figure I.5.

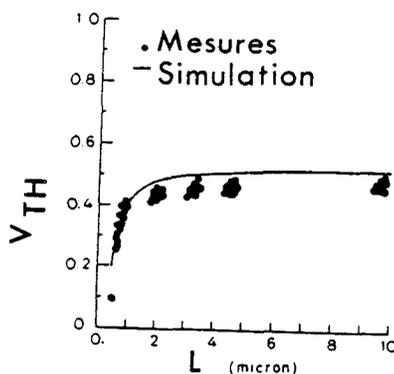


Figure I.5. Exemple de variation de la tension de seuil d'un transistor M.O.S. en fonction de la longueur du canal.

Source : Réf. [3]

Des modèles analytiques électriques ont été développés afin de simuler ces effets canaux courts [6]. Ces modèles montrent, en outre, que le comportement électrique du transistor dépend essentiellement de la forme et de la position de la jonction latérale source/drain près de la grille.

I.3. Limitations du microdimensionnement dues aux effets bidimensionnels [7]

La figure I.6. présente une coupe transversale d'un transistor M.O.S. et d'une ligne d'interconnection  $N^+$ . Sur cette figure ont été mentionnées les principales limitations technologiques du procédé n-M.O.S. vis-à-vis du microdimensionnement.

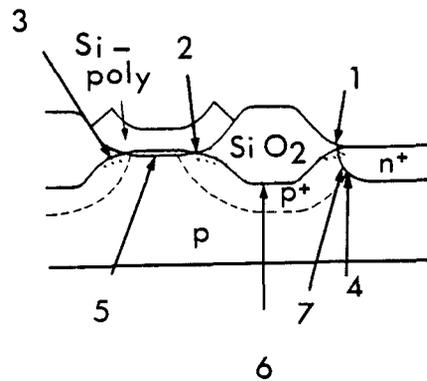


Figure I.6. Limitations technologiques du procédé n-M.O.S. vis-à-vis du microdimensionnement

Source : Réf. [7]

Ces limitations sont répertoriées de la manière suivante :

- 1) Extension de la zone de transition oxyde mince/oxyde épais.
- 2) Réduction de l'épaisseur de l'oxyde de grille, près de la zone d'oxyde de champ.
- 3) Défauts introduits dans le silicium sous l'oxyde épais.
- 4) Capacité de jonction  $N^+ P^+$
- 5) Effet de canal étroit
- 6) Tension de seuil du transistor M.O.S. sur oxyde épais.
- 7) Tension de claquage de la jonction  $N^+ P^+$ .

Exceptés les trois premiers facteurs qui sont essentiellement dus aux matériaux eux-mêmes, ces limitations sont introduites par

des effets typiquement bidimensionnels tels que l'extension latérale des zones dopées.

Le tableau I.1. synthétise les effets de la réduction des dimensions, de la polarisation et de la dose d'implantation de champ sur les 4 dernières limitations présentées précédemment.

La troisième ligne de ce tableau, par exemple, indique qu'une situation de compromis existe quant au choix des paramètres technologiques de fabrication. La détermination d'un procédé optimal doit se baser sur l'étude précise des effets latéraux. Pour ce faire, des programmes de simulation bidimensionnelle de technologie performants doivent être développés.

	Capacité de jonction N <sup>+</sup> P <sup>+</sup>	Effet de canal étroit	V <sub>TH</sub> du transistor sur oxyde épais	Tension du claquage de la jonction N <sup>+</sup> P <sup>+</sup>
Dimensions	-	-	-	-
Tension de polarisation	-	-	+	+
Dose d'implan- tation de champ	-	-	+	+

Tableau I.1. - Effets de la réduction des dimensions, de la réduction des tensions de polarisation et de l'accroissement de la dose d'implantation de champs sur les limitations 4, 5, 6 et 7 de la figure I.6. Les signes "+" et "-" indiquent des effets respectivement positif et négatif.

Source : Réf. [7]

## II. - TECHNOLOGIE C-M.O.S.

Une coupe longitudinale d'une structure C-M.O.S. à caisson n utilisée pour la réalisation de mémoires RAM est présentée en figure I.7.

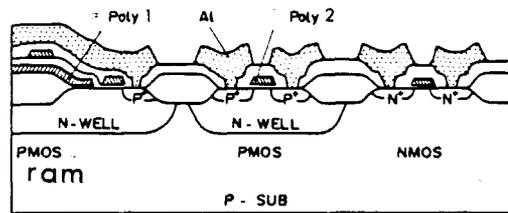


Figure I.7. Coupe d'une structure C-M.O.S.

Source : Réf. [8]

La complexité topologique de cette structure C.M.O.S. fait intervenir de nombreux effets latéraux qui sont ici répertoriés en deux types.

Le premier conditionne directement la réalisation correcte de la topologie de la structure..On peut y mentionner :

- la longueur et la largeur des canaux des transistors n-M.O.S. et p-M.O.S.
- l'extension latérale des zones de source/drain des transistors p-M.O.S. vis-à-vis de celle du caisson n.
- la position de la jonction entre le caisson n et l'implantation de champ p sous l'oxyde épais.

Le second type d'effets bidimensionnels se situe au niveau des performances électriques des technologies C-M.O.S. En effet, le comportement dynamique de ces structures est perturbé par des transistors parasites M.O.S. ou bipolaires créés par la disposition des zones n et p, figure I.8.

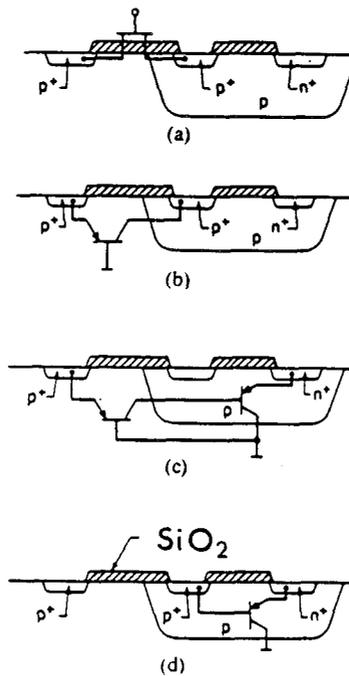


Figure I.8. Composants parasites intervenant dans une structure C-M.O.S.

(a) p-M.O.S. (b) transistor p.n.p. latéral

(c) transistor n.p.n. vertical

(d) structure SCR

Source : Réf. [9]

L'influence de ces éléments parasites doit être minimisée. Pour ce faire, les choix technologiques doivent réduire à la fois la tension de seuil des transistors p-M.O.S. sur oxyde épais et le gain des transistors bipolaires parasites, ces deux grandeurs dépendant là encore des dimensions latérales des zones dopées.

### III. - STRUCTURE D-M.O.S.

Le procédé D-M.O.S. est certainement la technologie qui présente l'effet bidimensionnel le plus marqué. Dans une structure D-M.O.S., illustrée en figure I.9., la longueur du canal est donnée par la différence entre les extensions latérales des diffusions de source et de drain. Des transistors à canaux très courts peuvent ainsi être réalisés avec des moyens de lithographie usuels. Cette caractéristique majeure a motivé de nombreuses applications des structures D-M.O.S. [10] : amplification haute fréquence, commutation forte tension, logique rapide et plus récemment les mémoires dynamiques [11].

Le procédé de fabrication qui est présenté en figure I.10 indique clairement que seul un calcul bidimensionnel peut prévoir la longueur effective du canal, très sensible à l'extension latérale de la diffusion de drain, figure I.10.e. De même, le profil superficiel de dopage, figure I.9.b. qui conditionne les performances électriques du transistor D-M.O.S., ne peut être donné que par une simulation 2-D de l'ensemble de la structure, les moyens de mesure usuels étant inefficaces pour une caractérisation longitudinale.

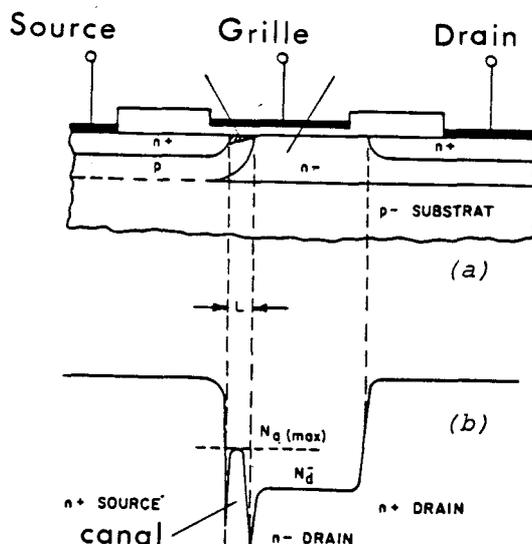


Figure I.9. Structure D-M.O.S. Vue en coupe et profil longitudinal du dopage.

Source : Réf. [10]

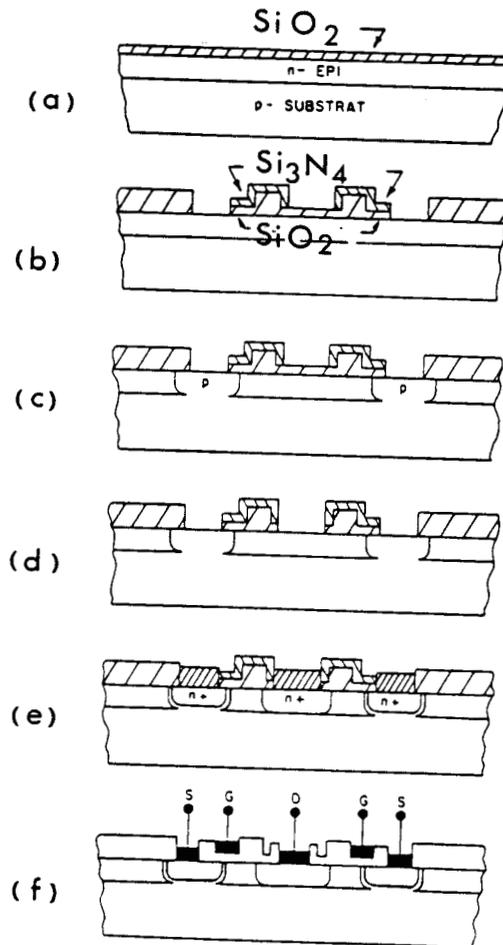


Figure I.10. Etapes de fabrication d'un transistor D-M.O.S.

- (a) Croissance d'oxyde épais
- (b) Définition de la grille. Ouverture des zones de source.
- (c) Diffusion de source
- (d) Ouverture des zones de drain
- (e) Diffusion de drain
- (f) Métallisation.

Source : Réf. [10]

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES du Chapitre I

1. A. HUSAIN and S.G. CHAMBERLAIN, "Three-dimensional simulation of VLSI MOSFET's : the three-dimensional simulation program WATMOS", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 631-638, 1982.
2. C.T. SAH, "Characteristics of the Metal-Oxyde-Semiconductor transistors", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-11, p. 324, 1964.
3. R.W. DUTTON and S.E. HANSEN, "Process modeling of integrated circuit device technology", Proceedings of the IEEE, Vol. 69, pp. 1305-1320.
4. K.O. JEPPSON, "Influence of the channel width on the threshold voltage modulation in MOSFET's", Electronics Letters, Vol. 11 (14), 1975.
5. T. SHIBATA, K. HIEDA, M. SATO, M. KONAKA, R.L.M. DANG and H. IIZUKA, "An optimally designed process for submicrometer MOSFET's", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 531-535, 1982.
6. R.L.M. DANG, "A simple current model for short-channel IGFET and its application to circuit simulation", IEEE J. Solid State Circuits, Vol. SC-14, pp. 358-367, 1979.
7. H. IWAI, K. TANIGUSHI, M. KONAKA, S. MAEDA and Y. NISHI, "Two-dimensional nature of diffused layers and certain limitation in scaling-down coplanar structures", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 625-690, 1982.
8. K. SHIMOHIGASHI, H. MASUDA, Y. KAMIGAKI, K. ITOH, N. HASHIMOTO and E. ARAI, "An n-well C-M.O.S. dynamic RAM", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 714-718, 1982.
9. W. FICHTNER, D.J. ROSE and R.E. BANK, "Semiconductor device simulation", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 1018-1030, 1983.
10. E. FONG, D.C. PITZER and R.J. ZEMAN, "Power D.MOS for high frequency and switching applications", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-27, pp.322-330, 1980.
11. K. TERADA, M. TAKADA, S. KUROKAWA and S. SUZUKI, "A new VLSI memory cell using D.MOS technology (D.MOS cell)", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 1301-1308, 1982.

## - CHAPITRE II -

### LES ETAPES TECHNOLOGIQUES ET LEURS MODELES

Afin d'établir les équations qui sont à résoudre lors de la simulation des étapes technologiques, il importe de synthétiser les différents modèles qui ont été développés dans le cadre d'études théoriques ou expérimentales. Ce chapitre qui se veut de revue se limitera aux procédés technologiques ayant un modèle étudié et s'attachera à la spécificité des dopants si nécessaire. Cette étude bibliographique se décompose en quatre parties :

- . La diffusion des dopants dans le silicium
- . L'implantation ionique
- . L'oxydation du silicium
- . Le flux d'impuretés aux interfaces

Les trois premières sont spécifiques aux procédés technologiques eux-mêmes, la quatrième permettra l'approche des structures multi-couches.

## 1 - LA DIFFUSION DES DOPANTS DANS LE SILICIUM

Le mécanisme de diffusion des impuretés dans le silicium a conditionné, avec des critères d'activation électrique, le choix des dopants couramment utilisés en technologie silicium : Arsenic et Phosphore comme donneurs, Bore comme accepteur. Ces trois impuretés diffusent essentiellement par un mécanisme substitutionnel, leurs migrations s'effectuant par recombinaisons successives avec les lacunes du cristal [1,2]. Vu les nombreuses étapes haute température intervenant dans les filières technologiques, la résolution des équations de diffusion s'avère être d'un intérêt considérable tant pour l'estimation des profondeurs de jonction et des concentrations en surface que pour le contrôle des doses de dopants.

### 1.1. Equation de diffusion à coefficient constant

Bien que validée uniquement lorsque les concentrations en présence sont inférieures à la concentration intrinsèque du silicium à la température du process, l'équation de diffusion à coefficient constant est à la base des premières abaques utilisées par les technologues. De plus, par le fait même qu'elle accepte des solutions analytiques, son intégration numérique a permis les premières validations des algorithmes de calcul.

Soit un volume évolutif  $V(t)$  défini par une surface  $S(t)$ , (figure II.1.), le bilan de l'évolution de la quantité d'impuretés qu'il contient conduit à l'équation générale de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} C \, dV = - \int_{S(t)} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS + \int_{V(t)} (g-l) \, dV \quad (\text{II.1.})$$

où  $C$  est la concentration en impuretés,  $\vec{F}$  est le flux en surface compté positif sortant,  $g$  et  $l$  étant respectivement les taux internes de génération et de perte.

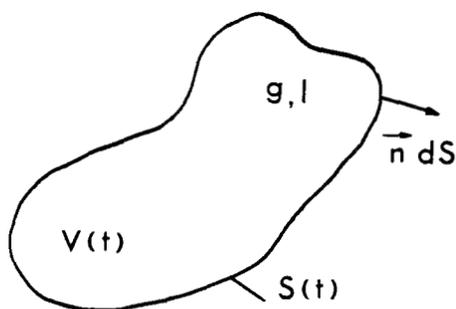


Figure II-1. Définition du domaine pour l'équation de continuité

Pour un domaine fixe et sous faibles concentrations pour lesquelles les termes de génération-perte sont négligeables l'équation (II.1) se résume à :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V C dV = - \int_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS \quad . \quad (II.2.)$$

L'application du théorème d'Ostrogradski à l'équation (II.2.) conduit à la seconde loi de Fick qui s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \text{div } \vec{F} \quad . \quad (II.3.)$$

Le flux des impuretés est d'autre part relié au gradient de leur concentration par la première loi de Fick :

$$\vec{F} = - D_{int} \cdot \vec{\nabla} C \quad , \quad (II.4.)$$

où  $D_{int}$  est le coefficient de diffusion intrinsèque.

Dans l'hypothèse où le coefficient de diffusion est constant, les équations II.3 et II.4 conduisent à l'équation de diffusion intrinsèque :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{int} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (II.5.)$$

1.1.a) Coefficient de diffusion intrinsèque

Lié à l'énergie de formation des lacunes dans le silicium, le coefficient de diffusion intrinsèque est régi par une loi d'Arrhénius en température :

$$D_{int} = D_{io} \exp\left(\frac{-E_m}{kT}\right) \quad (II.6.)$$

$D_{io}$  est le terme préexponentiel exprimé en  $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ,  $E_m$  étant l'énergie d'activation liée à la formation des lacunes, exprimée en eV.

Basées sur des études expérimentales, les valeurs numériques du coefficient de diffusion intrinsèque ont été obtenues, après révélation des profils, par ajustement numérique ou par analyse de Boltzmann-Matano. Le tableau II-1 regroupe les valeurs nominales les plus couramment utilisées, notamment par le programme SUPREM II [3], pour les différents types d'impuretés.

Impureté	Bore [4]	Phosphore [5]	Arsenic [6]
$D_{io} \text{ (cm}^2 \text{ s}^{-1}\text{)}$	0.5554	3.85	24.
$E_m \text{ (eV)}$	3.42565	3.66	4.08

Table II-1. Valeurs des coefficients de diffusion intrinsèque dans le silicium orienté  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ .

1.1.b) Expression réduite de l'équation de diffusion

L'équation de diffusion intrinsèque (II.5.) peut s'exprimer, comme suit, sous forme réduite. Vu le caractère isotrope de sa formulation, nous nous limiterons à l'équation unidimensionnelle :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{int} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad . \quad (II.7.)$$

par changement de variable :

$$X = \sqrt{D_{int} T}$$
$$\tau = \frac{t}{T} \quad (II.8.)$$

où T est la durée de diffusion, l'équation (II.7.) se résume à :

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \quad (II.9.)$$

Sous cette forme, il est clair que le coefficient de diffusion et le temps de process ne sont que des facteurs d'échelle. C'est sous cette expression réduite que les solutions analytiques ont été développées. Les abaques résultants font directement intervenir la longueur de diffusion,  $L_D$ , définie par :

$$L_D = 2 \sqrt{D_{int} T} \quad . \quad (II.10.)$$

1.1.c) Diffusion à concentration superficielle constante

La première technique de dopage utilisée, notamment en technologie bipolaire, fût le prédépôt thermique. Cette méthode consiste à placer la surface nue du silicium dans une enceinte contenant un gaz riche en impuretés, et ce, à haute température :  $900^{\circ} \text{C} \rightarrow 1200^{\circ} \text{C}$ . Une migration naturelle des dopants s'effectue du gaz vers le silicium. Les conditions expérimentales sont telles que la pression partielle de dopants dans l'enceinte reste constante, imposant une concentration en impuretés constante,  $C_s$ , à la surface du silicium. Considérant que le problème est unidimensionnel, le profil de concentration dans le silicium est obtenu en résolvant l'équation de diffusion intrinsèque dans un domaine semi-infini, comme précisé en figure II.2.

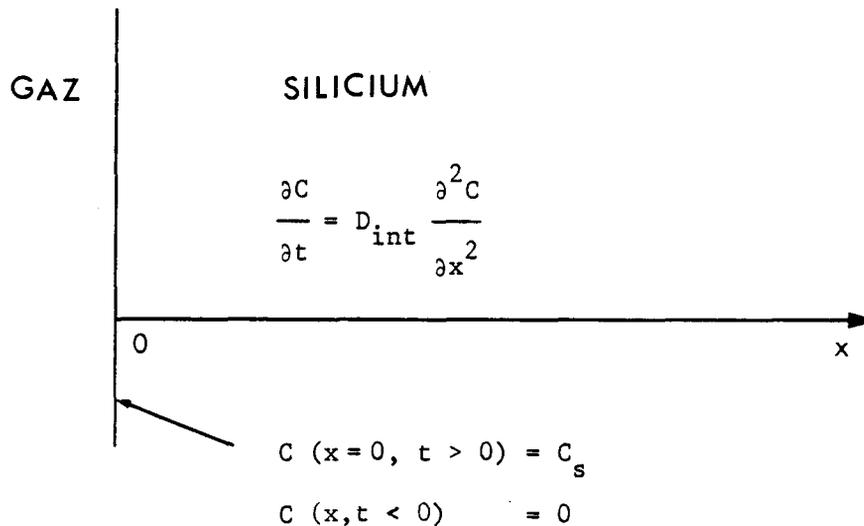


Figure II.2. Conditions aux limites de l'équation de diffusion pour le prédépôt thermique.

Sous cette forme, le problème accepte une solution analytique :

$$C(x, t) = C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2 \sqrt{D_{\text{int}} \cdot t}}, \quad (\text{II.11.})$$

La fonction erreur complémentaire étant normée :

$$\begin{aligned} \operatorname{erfc}(\alpha) &= 1 - \operatorname{erf}(\alpha) \\ &= 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\alpha \exp(-u^2) du \end{aligned} \quad (\text{II.12.})$$

La figure II.3. présente en échelle logarithmique, les profils de concentration pour différentes longueurs de diffusion.

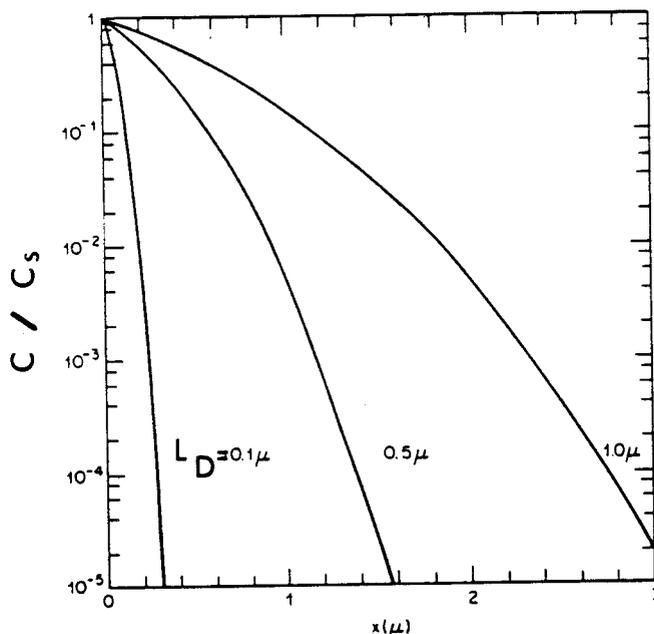


Figure II.3. Fonction erreur complémentaire  
source : réf. [7]

La dose du dopage, définie comme la quantité d'impuretés introduite par unité de surface, est obtenue par l'intégration spatiale du profil :

$$Q_{\square} = \int_0^{\infty} C_s \operatorname{erfc} \frac{x}{2 \sqrt{D_{\text{int}} T}} dx = 2 C_s \sqrt{\frac{D_{\text{int}} T}{\pi}} \quad (\text{II.13.})$$

où  $T$  est la durée du prédépôt. La dose  $Q_{\square}$ , paramètre technologique important, est généralement exprimée en  $\text{cm}^{-2}$ .

#### 1.1.d) Diffusion à partir d'une quantité finie

Une fois les impuretés introduites dans le silicium, les tranches subissent un recuit thermique servant soit à l'activation des impuretés après implantation ionique soit à l'augmentation des profondeurs de jonction. Cette étape est couramment précédée d'une oxydation afin de limiter l'exodiffusion des dopants.

Si l'on considère que la dose maintenue constante est initialement localisée près de la surface, le profil à l'issue du recuit est régi par une loi gaussienne :

$$C(x, t) = \frac{Q_{\square}}{\sqrt{\pi D_{\text{int}} T}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 D_{\text{int}} T}\right) \quad (\text{II.14.})$$

où  $T$  est la durée du recuit.

La longueur de diffusion intervient à la fois sur la valeur de la concentration de surface et sur la forme du profil comme illustré en figure II.4.

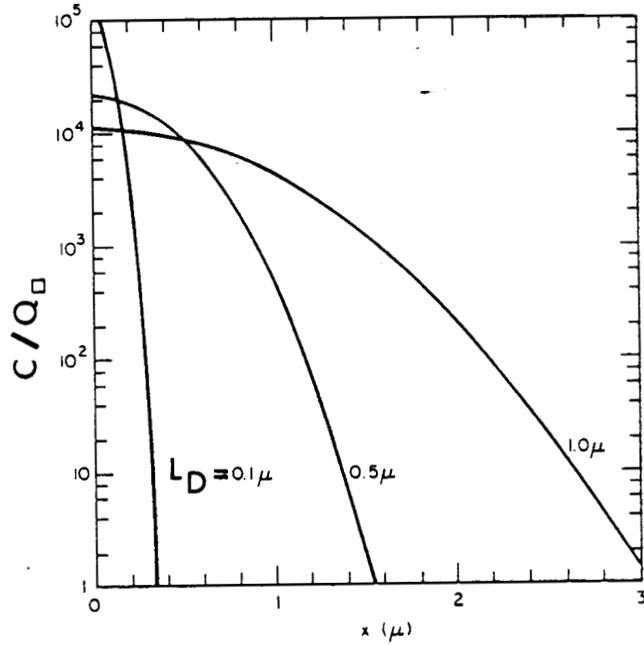


Figure II.4. Profils de concentration issus de diffusion à dose constante.  
Source : réf. [7]

Dans le cas d'un prédépôt suivi d'un recuit les équations II.13. et II.14. conduisent à l'expression du profil final :

$$C ( x, T_1 + T_2 ) = \frac{2C_s}{\Pi} \sqrt{\frac{D_1 T_1}{D_2 T_2}} \exp \left( - \frac{x^2}{4 D_2 T_2} \right) \quad (\text{II.15.})$$

où  $T_1$  et  $D_1$  sont respectivement la durée du prédépôt et la diffusivité de l'impureté à la température correspondante,  $T_2$  et  $D_2$  les mêmes grandeurs pour le recuit.

L'équation II-15 est exacte si la longueur de diffusion du recuit est grande devant celle du prédépôt :

$$D_2 \cdot T_2 \gg D_1 \cdot T_1 \quad (11.16.)$$

Si cette condition n'est pas satisfaite, des abaques plus complexes sous forme de tables numériques sont utilisables [7].

#### 1.1.e) Solutions analytiques bidimensionnelles [8]

Dès l'apparition des technologies PLANAR, des développements mathématiques ont été élaborés afin de résoudre l'équation de diffusion à 2 dimensions et donc avoir accès à la pénétration latérale des dopants. La figure II.5. schématise le domaine silicium et les conditions initiales utilisées pour ces calculs.

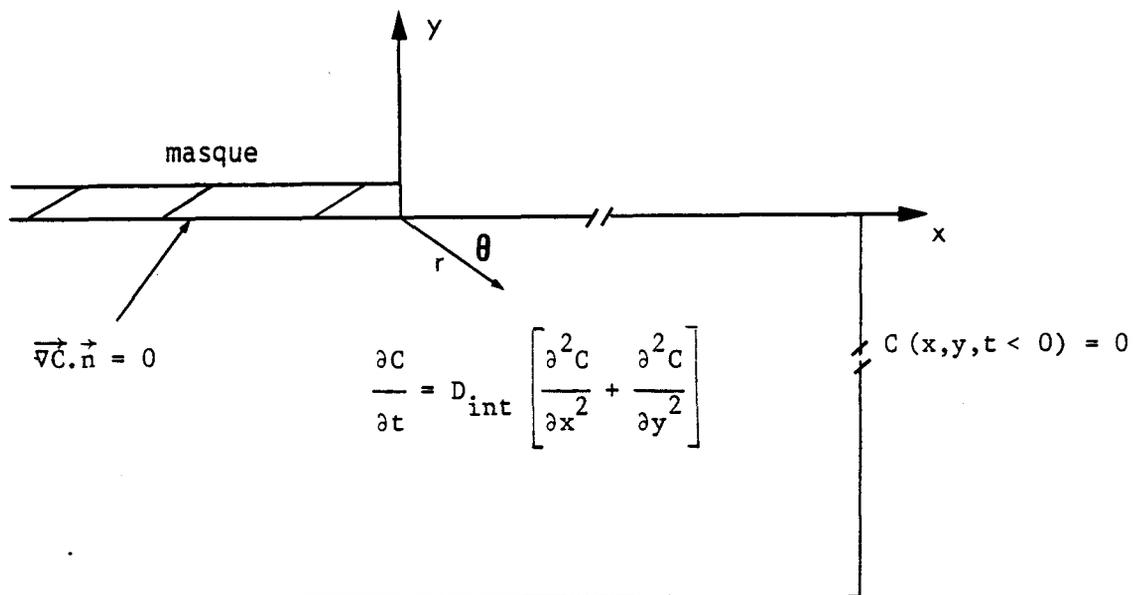


Figure II.5. Domaine 2-D idéalisé

Le masque de diffusion est pris totalement imperméable, et les effets de l'interface masque-silicium sont négligés.

. Prédépôt thermique

$$C ( 0 < x < +\infty , y = 0 , t > 0 ) = C_s$$

La solution est obtenue par transformée de Laplace en coordonnées polaires. Le profil résultant est représenté en figure II.6.(a) où les iso-valeurs sont normées à la concentration de surface.

. Diffusion à partir d'une source constante.

Les solutions sont obtenues par fonctions de Green. Les isovaleurs présentées en figure II.6.(b) sont normées cette fois à la concentration maximale instantanée (équation II.14.)

$$C_{\max}(t) = C(x = +\infty, y = 0, t) = \frac{Q_{\square}}{\sqrt{\pi D_{\text{int}} t}}$$

Ces développements publiés dès 1965 sont très révélateurs de l'intérêt porté aux résultats bidimensionnels. Le domaine d'application des courbes II.6. est malheureusement limité aux conditions intrinsèques d'une part, et aux procédés en ambiance inerte d'autre part. La résolution des modèles extrinsèques, qui fait l'objet de la partie suivante, nécessite des moyens informatiques, les non-linéarités introduites ne permettant plus l'obtention de solutions analytiques.

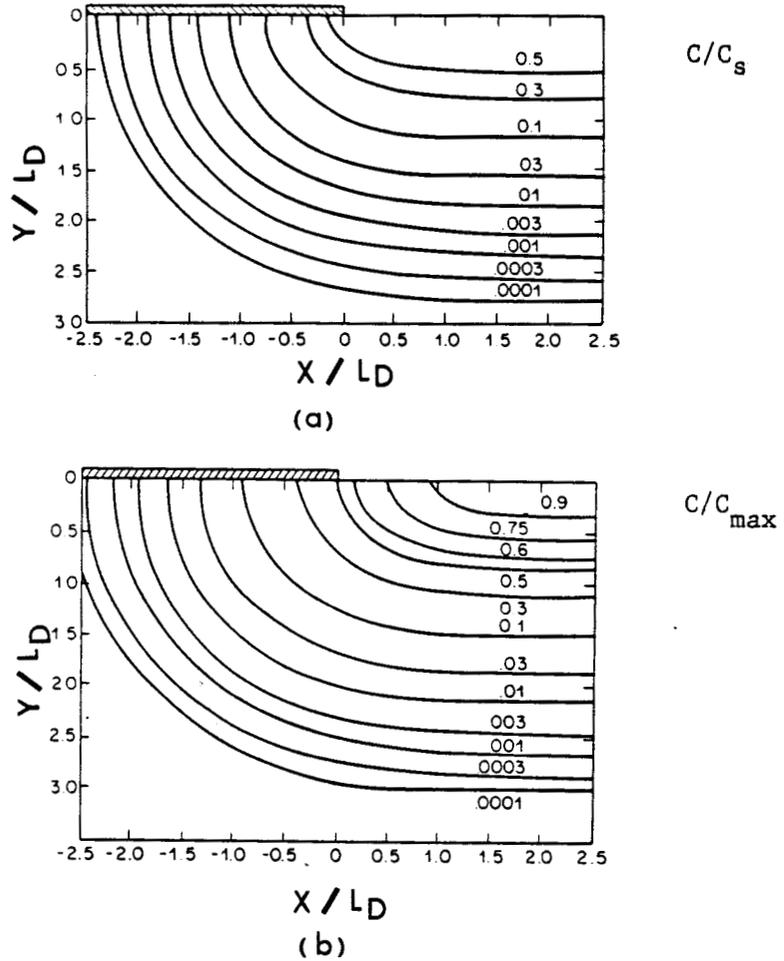


Figure II.6. Solutions analytiques bidimensionnelles  
a) Prédépôt  
b) Source constante.

Source : réf. [8]

### 1.2. La diffusion sous conditions extrinsèques.

Des évidences expérimentales [9] ont montré, très tôt, que le modèle de diffusion à coefficient constant est insuffisant dans les cas de moyens et forts dopages. Pour expliquer l'accélération de la diffusion dans les cas de fortes concentrations deux facteurs sont à prendre en compte. Le premier est l'autoaccélération de la diffusion par action du champ électrique induit par les dopants ionisés, le second est l'effet de la variation des concentrations en lacunes chargées dans le silicium extrinsèque, variations perturbant fortement la cinétique du mécanisme de diffusion substitutionnelle. Ces effets doivent être intégrés dans les simulations dès que les concentrations en présence sont supérieures à la concentration intrinsèque du silicium à la température du procédé thermique. Cette concentration intrinsèque,  $n_i$ , est donnée par la formule de Morin et Maita [10] :

$$n_i \text{ (cm}^{-3}\text{)} = 2,09717 \cdot 10^{16} \exp \left( - \frac{0.561839}{kT} \right) \cdot T^{3/2}, \quad (\text{II.17.})$$

dont la dépendance en température est représentée en figure II.7.

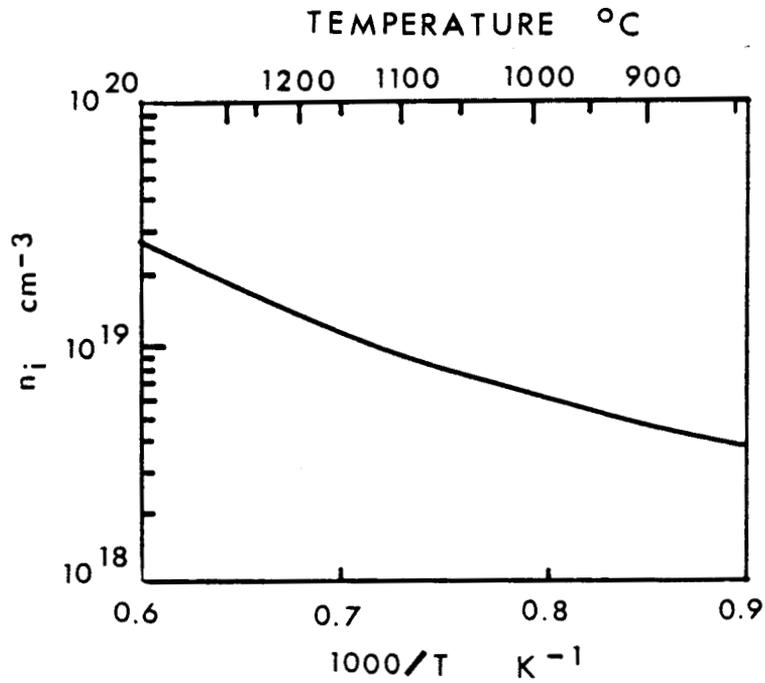


Figure II.7. : Variation de la concentration intrinsèque du silicium avec la température.

Source : Réf. [3]

### 1.2.a) Effet du champ électrique

Le terme de conduction dans l'équation de diffusion des dopants III - V a initialement été pris en compte par Hu et Schmidt [11]. Le développement proposé [12] est une généralisation de ce modèle dans le cas d'ionisation complète.

Soit un type d'impureté (j) présente dans un milieu contenant plusieurs types d'impuretés. Son flux unidimensionnel  $J_j$  qui dépend du gradient du potentiel chimique et du champ électrique interne s'exprime par :

$$J_j = - D_j \frac{\partial C_j}{\partial x} - Z_j \mu_j C_j E \quad (\text{II.18.})$$

- où  $J_j$  : est le flux de la j<sup>ieme</sup> impureté, ( $\text{cm}^{-2} \text{S}^{-1}$ )  
 $D_j$  : coefficient de diffusion effectif ( $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ )  
 $\mu_j$  : mobilité ( $\text{cm}^2 \text{S}^{-1} \text{V}^{-1}$ )  
 $Z_j$  : état de charge (+1 accepteur ; -1 donneur)  
 $E$  : champ électrique local

La deuxième loi de Fick (II.3.) nous donne :

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \frac{\partial J_j}{\partial x} \quad (\text{II.19.})$$

Combinant (II.18.) et (II.19.) l'équation de diffusion avec le terme de conduction s'écrit :

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_j \frac{\partial C_j}{\partial x} + Z_j \mu_j C_j E \right) \quad (\text{II.20.})$$

Le champ électrique local est donné pour la distribution de potentiel U par :

$$E = - \frac{dU}{dx} . \quad (\text{II.21.})$$

En négligeant la génération locale d'électron-trou, le potentiel est relié aux charges en présence par l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2U}{dx^2} = \frac{q}{\epsilon} (n - p - M) \quad (\text{II.22.})$$

où n et p sont respectivement les concentrations d'équilibre en électrons et en trous et M représente la concentration de tous les donneurs moins celle de tous les accepteurs :

$$M = C_D - C_A . \quad (\text{II.23.})$$

Les températures auxquelles les étapes de diffusion ou de recuit s'effectuent sont telles que la concentration intrinsèque est importante, ce qui implique de faibles variations du potentiel avec la distance. Le terme

$\frac{d^2U}{dx^2}$  dans l'équation de Poisson pourra donc être négligé.

Dans ces conditions l'équation (II.22.) s'écrit :

$$n_i \exp\left(\frac{qU}{kT}\right) - n_i \exp\left(-\frac{qU}{kT}\right) - M = 0 , \quad (\text{II.24.})$$

d'où

$$U = \frac{kT}{q} \operatorname{Argsh} \frac{M}{2 n_i} \quad (\text{II.25.})$$

En reprenant l'équation (II.21.), le champ électrique s'exprime alors directement en fonction des concentrations en présence :

$$E = \frac{kT}{q} \frac{1}{2n_i \sqrt{\frac{M^2}{4n_i^2} + 1}} \frac{dM}{dx} \quad (II.26.)$$

En substituant (II.26.) dans (II.20.) et en utilisant la relation d'Einstein :

$$D_j = \frac{kT}{q} \mu_j \quad (II.27.)$$

L'équation de diffusion générale tenant compte du couplage électrique est obtenue :

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_j \left( \frac{\partial C_j}{\partial x} - Z_j \frac{C_j / 2 n_i}{\sqrt{\frac{M^2}{4n_i^2} + 1}} \frac{\partial M}{\partial x} \right) \right] \quad (II.28.)$$

### 1.2.b) Effet des lacunes chargées

De par sa nature substitutionnelle, le mécanisme de diffusion est très sensible à la concentration de défauts dans le silicium. Les concentrations en lacunes chargées, dont les différents états de charge ont été reportés en figure II.8., dépendent de la position du niveau de Fermi, qui est lui-même fonction de la concentration en impuretés.

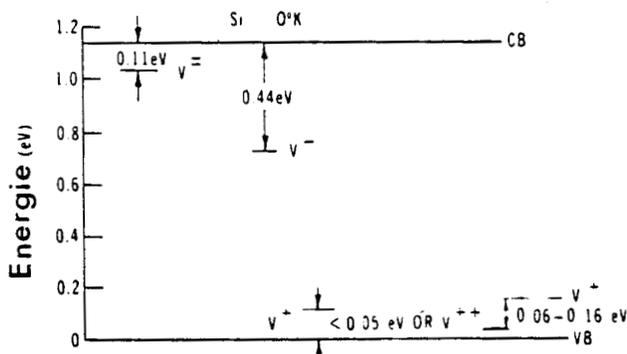


Figure II.8. Estimation des niveaux d'énergie des lacunes chargées dans le Gap du silicium à 0° K

Source : Réf. [1]

La prise en compte de ce modèle consiste à identifier le coefficient de diffusion effectif à la somme des contributions des divers types de lacunes [13]. Sous ces hypothèses, le coefficient de diffusion effectif s'exprime par :

$$D_j = D^x + D^- [V^-] + D^= [V^=] + D^+ [V^+] , \quad (\text{II.29.})$$

où  $D^i$  (  $i = x, -, =, +$  ) représente la diffusivité due à chaque état de charge, respectivement : neutre, négatif, doublement négatif et positif,  $[V^i]$  représentant la concentration de lacunes de charge (i) normée à sa valeur en condition intrinsèque.

En se référant à l'approximation de Boltzmann ces concentrations normées sont données par :

$$[V^-] = \frac{n}{n_i} ; [V^=] = \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 ; [V^+] = \frac{n_i}{n} , \quad (\text{II.30.})$$

où  $n$  est la concentration en électrons libres.

Sous condition intrinsèque (  $n = n_i$  ) , l'équation II.29. devient

$$D_{int} = D^x + D^- + D^= + D^+ ,$$

où  $D_{int}$  est la diffusivité intrinsèque phénoménologiquement définie en II.6.

Excepté pour le phosphore, seules les lacunes neutres ou une fois chargées interviennent effectivement dans le mécanisme de diffusion, ainsi les sites  $V^x$  ,  $V^-$  contribuent à la migration des donneurs,

$V^x$  ,  $V^+$  à la migration des accepteurs. Le coefficient de diffusion effectif s'exprime donc par :

$$D_j = D_{int} \frac{1 + \beta f}{1 + \beta} , \quad (\text{II.31.})$$

$$\begin{aligned} \text{où } f &= \frac{n}{n_i} \text{ pour les donneurs} \\ f &= \frac{n_i}{n} \text{ pour les accepteurs} \end{aligned} \quad (\text{II.32.})$$

Le coefficient  $\beta$ , algébriquement défini par :

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{D^-}{D^x} \text{ pour des donneurs} \\ \beta &= \frac{D^+}{D^x} \text{ pour les accepteurs ,} \end{aligned} \quad (\text{II.33.})$$

est un index quantifiant la contribution des lacunes chargées dans le mécanisme de diffusion. La variation du coefficient de diffusion effectif avec la concentration en électrons libres est représentée en figure II.9., pour diverses valeurs de  $\beta$ . Sous cette représentation, le modèle conduit soit à une accélération de la diffusion, donneur dans le silicium de type n, accepteur dans le silicium de type p, soit à un ralentissement dans les cas contraires.

Les valeurs les plus couramment observées sont :

$\beta = 100$  pour l'arsenic

$\beta = 3$  pour le bore

De plus, par manque d'évidences expérimentales, ce paramètre est pris indépendant de la température.

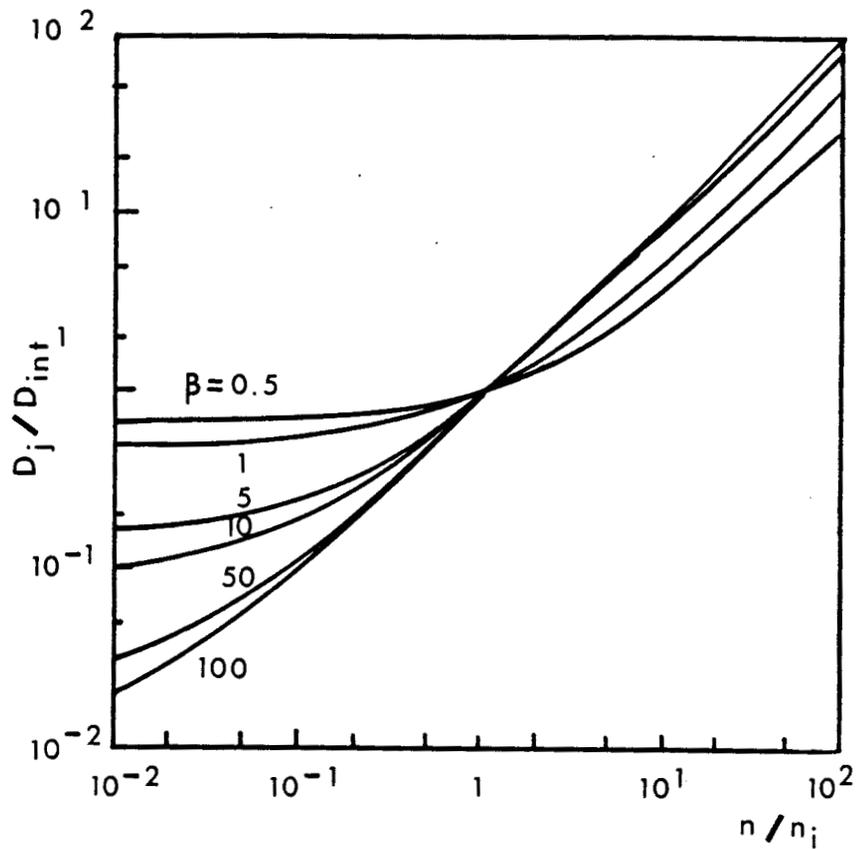


Figure II.9. Influence de la concentration en électrons libres sur le coefficient de diffusion effectif.  
Source : réf. [3]

La neutralité électrique locale, équation II.24. , étant vérifiée, les concentrations en électrons et en trous s'expriment directement en fonction des concentrations en dopant :

$$\frac{n}{n_i} = \frac{M}{2n_i} + \sqrt{\frac{M^2}{4n_i^2} + 1}$$

$$\frac{n_i}{n} = -\frac{M}{2n_i} + \sqrt{\frac{M^2}{4n_i^2} + 1}$$

(II.34.)

Dans ces conditions, les équations II.23. , II.28. , II.31. et II.34. permettent, sous leur forme générale, l'écriture du système différentiel couplé pour le calcul de l'évolution d'un processus multi-dopant. Pour ce faire, il suffit d'identifier l'index j aux différents types d'impuretés en présence.

1.2.c) Effet du modèle extrinsèque, couplage entre impuretés

La résolution du modèle extrinsèque nécessite des moyens de calcul numérique. Cependant il importe de définir quantitativement les effets introduits et ce, comparativement à l'équation intrinsèque.

. Système à un seul type d'impureté.

Avant de considérer le cas de diffusion séquentielle, il est intéressant de voir comment le champ électrique et la variation de la concentration en lacunes chargées affecte la diffusion d'un seul type d'impureté. Dans ce cas, les équations II.23. et II.31 permettent d'écrire [14] :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_T \frac{\partial C}{\partial x} \right] , \quad (\text{II.35.})$$

$$\text{avec } D_T = D_{\text{int}} \left[ 1 + \frac{C / 2 n_i}{\sqrt{1 + C^2 / 4 n_i^2}} \right] \cdot \left[ \frac{1 + \beta (C / 2 n_i + \sqrt{1 + C^2 / 4 n_i^2})}{1 + \beta} \right]$$

effet électrique
effet lacunaire

Quel que soit le type d'impureté, sous réserve qu'elle soit la seule présente dans le système, le champ électrique et l'effet dû aux lacunes chargées conduisent individuellement vers une diffusion accélérée, leurs influences conjuguées étant contenues dans l'expression du coefficient de diffusion total  $D_T$ .

La figure II.10. illustre l'influence du champ électrique seul sur le coefficient de diffusion total. L'effet est relativement peu important, la valeur maximale étant bornée à 2 pour les fortes concentrations.

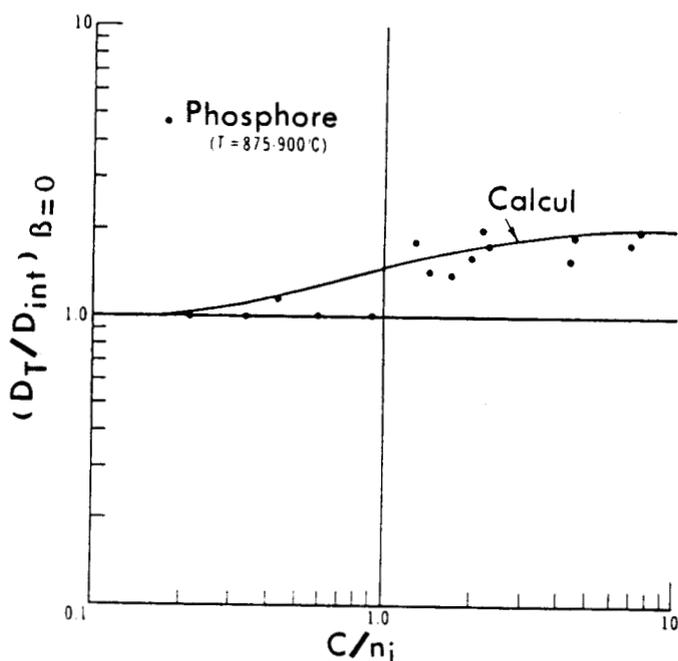


Figure II.10. Effet du champ électrique seul sur le coefficient de diffusion total. Variation du facteur d'accélération.

$$\left( \frac{D_T}{D_{int}} \right)_{\beta = 0} \quad \text{avec la concentration}$$

Source : réf. [1]

En figure II.11. ont été tracés des profils de dopage théoriques par prédépôt. Ces courbes ont été obtenues en résolvant l'équation II.35. avec  $\beta = 0$ . Les concentrations  $y$  sont normalisées à la concentration de surface, maintenue constante. Le paramètre  $\alpha$ , concentration superficielle réduite, est déterminé par :

$$\alpha = \frac{C_S}{2n_i}$$

Ces différents profils confirment le fait que le champ électrique n'introduit qu'une accélération limitée dans le processus de diffusion, la condition intrinsèque étant donnée pour  $\alpha = 0$ .

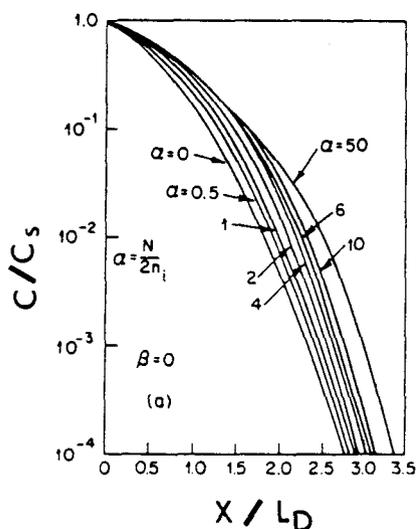


Figure II.11. Influence du champ électrique ( $\beta = 0$ ) sur des profils issus de simulations de prédépôts.

Source : réf. [11]

La répercussion du modèle extrinsèque complet sur le coefficient de diffusion total, illustré par la figure II.12., démontre que l'effet des lacunes chargées est dominant lorsque le système contient un seul type d'impureté. Ce tracé, addition des effets contenus dans les figures II.9. et II.10., montre la variation de  $D_T$  en fonction de la concentration réduite  $C_R$  définie par :

$$C_R = \frac{C}{2n_i}$$

Pour  $\beta = 100$ . La figure II.12. présente une forte dépendance du coefficient de diffusion total avec les fortes concentrations et permet de fixer de degré de non-linéarité inhérent au modèle.

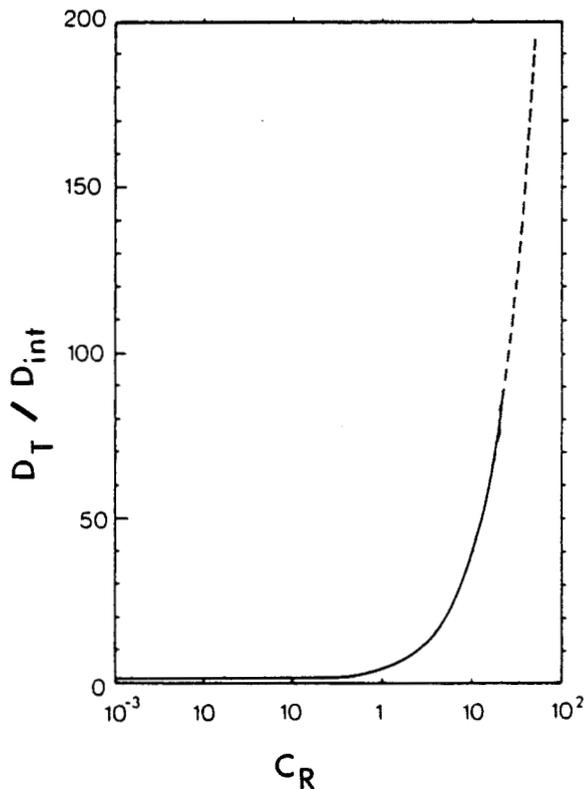


Figure II.12. : Variation du coefficient de diffusion total avec la concentration pour  $\beta = 100$   
(modèle extrinsèque complet)

L'intégration numérique de l'équation II.35. complète dans le cas de prédépôt, figure II.13. , montre une nette avancée des fronts de jonction comparativement à la fonction erreur complémentaire ( $\alpha = 0$ ), cette accélération est d'autant plus marquée que la concentration superficielle réduite,  $\alpha$ , prend des valeur importantes. Il est intéressant de noter que les profils extrinsèques présentent des fronts de jonctions abrupts où le gradient de concentration est toujours supérieur au gradient issu du cas intrinsèque. Cette remarque est appuyée par analyse de Boltzmann - Matano [11].

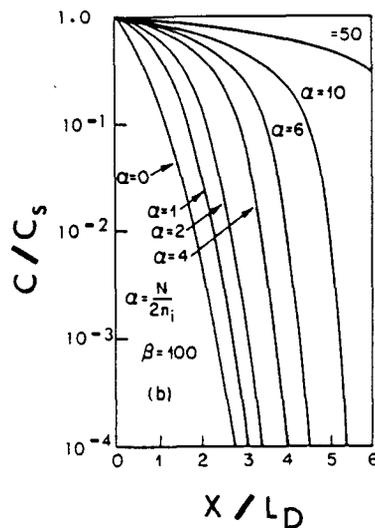


Figure II.13. Influence du modèle extrinsèque ( $\beta = 100$ ) sur des profils issus de simulation de prédépôts.

Source : Réf. [11]

. Diffusion séquentielle

Dans sa formulation générale, le modèle extrinsèque permet la compréhension du couplage entre impuretés dans un système multi-dopants. Cette situation est expressément présente dans le cas de technologies NPN où la diffusion de l'émetteur, fortement dopé, perturbe la diffusion de base et donc la longueur de base en fin de procédé. Dans ce cas, le modèle extrinsèque permet d'écrire le système différentiel sous forme matricielle :

$$\text{bore} : \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_{int_1} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{1 + \beta_1 f_1}{1 + \beta_1} \right) \left( h_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} - (h_1 - 1) \frac{\partial C_2}{\partial x} \right) \right] \quad (\text{II.36.})$$

$$\text{arsenic} : \frac{\partial C_2}{\partial t} = D_{int_2} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{1 + \beta_2 f_2}{1 + \beta} \right) \left( h_2 \frac{\partial C_2}{\partial x} - (h_2 - 1) \frac{\partial C_1}{\partial x} \right) \right]$$

$$\text{avec } h_i = 1 + \frac{C_i / 2 n_i}{\sqrt{\frac{(C_1 - C_2)^2}{4 n_i^2} + 1}} \quad f_1 = \pm \frac{(C_1 - C_2)}{2 n_i} + \sqrt{\frac{(C_1 - C_2)^2}{4 n_i^2} + 1} .$$

. Dans la zone de l'émetteur ( $C_2 > C_1$ ) la diffusion de bore est le résultat de deux contributions opposées :

- . Une diffusion positive due à son propre gradient
- . Une diffusion négative due au champ électrique créé par l'arsenic

Ces différents effets sont illustrés en figure II.14. Partant d'un profil de base initial  $C_1(x,0)$ , un émetteur est formé par prédépôt  $C_2(x,t)$ . La figure II.14.(a) compare, en tenant compte du champ électrique seul ( $\beta_1 = \beta_2 = 0$ ), le profil de base avec interaction  $C_1(x,t)$  au profil intrinsèque  $C_{int}(x,t)$ . Une accumulation de bore s'opère en surface du au fort champ électrique au début du procédé ( $t \ll$ ) crée par le fort gradient d'arsenic. A l'issue du prédépôt, le profil de base, globalement retardé, présente un appauvrissement au niveau de la jonction émetteur - base,

et peut même, suivant les conditions expérimentales, occasionner un recul de la jonction base collecteur. La figure II.14.(b) présente la même simulation en tenant compte de l'effet des lacunes chargées où deux approximations ont été faites :

$$\beta_1 = 0 \tag{II.37.}$$

$$\frac{1 + \beta_2 f_2}{1 + \beta_2} = f_2 .$$

Outre l'accélération de la diffusion de l'émetteur, les effets du couplage sont accentués par le fait que le profil d'Arsenic présentant un front abrupt induit un champ électrique plus important qu'en figure II.14.(a).

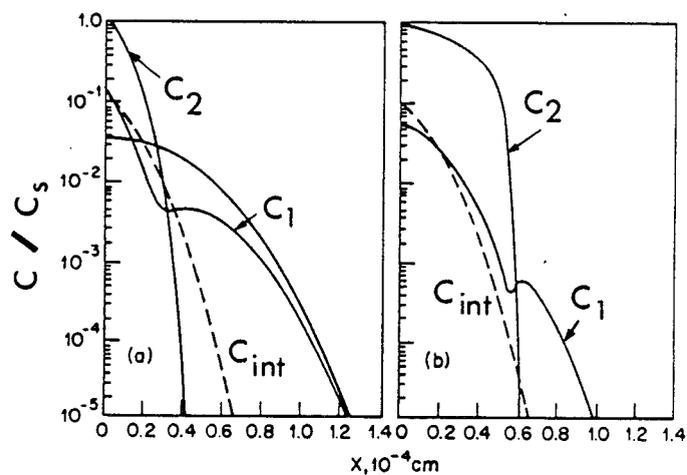


Figure II.14. Influence du modèle extrinsèque sur des diffusions séquentielles.

(a) champ électrique seul.

(b) champ électrique + lacunes chargées

Le modèle extrinsèque, tel qu'il a été présenté, permet de rendre compte du retard de la jonction base-collecteur dans le cas de base étroite, le couplage électrique agissant à courte distance. Cet effet a été également remarqué dans le cas de base plus large [9], l'interaction s'effectuant sur une gamme de 1-2  $\mu\text{m}$ . Pour retrouver numériquement ce phénomène, il importerait de calculer, outre les concentrations en dopants, les variations de concentrations en lacunes dues à la formation d'agglomérats non diffusants [15].

Hors, comme le micro-dimensionnement des structures impose des jonctions très fines, le modèle extrinsèque, ici exposé, semble suffisant pour les applications technologiques modernes. Cependant un intérêt particulier doit être porté à la diffusion de l'arsenic sous très forte concentration et à la diffusion du phosphore pour lesquelles le modèle doit être affiner.

### *1.3. Modèle de diffusion de l'arsenic sous forte concentration*

Les performances électriques des microstructures nécessitent la réalisation de jonctions fines  $n^+p$  fortement dopées. Vu sa faible diffusion (tableau II.1.), l'arsenic est couramment utilisé pour la formation des zones de source et drain en technologie MOS et des émetteurs des transistors bipolaires.

#### *1.3.a) Le modèle de clustering*

Sous fortes concentrations, des agglomérats d'arsenic se forment [16] et perturbent le mécanisme de diffusion où seul les atomes en site substitutionnel sont mobiles. Afin d'affiner le modèle extrinsèque, il importe d'y inclure le clustering et notamment de définir une relation entre la concentration totale d'arsenic  $C$  et sa concentration active  $N$ . Des convergences expérimentales [17, 18] tendent à prouver que le mécanisme de clustering peut se résumer à l'équation de réaction suivante :



avec  $m = 3$ , nombre d'atomes par cluster.

. La concentration en cluster,  $C_{cl}$ , est déduite de la loi d'action de masse :

$$C_{cl} = k N^m n \quad (\text{II.39.})$$

où  $k$ , constante d'équilibre, dépend uniquement de la température. La concentration totale en arsenic peut alors s'écrire :

$$C = N + m C_{cl} = N + mk N^m n \quad (\text{II.40.})$$

La neutralité électrique restant vraie, la concentration en porteurs est donnée successivement par :

$$n = N + (m - 1) C_{cl} \quad (\text{a})$$

$$n = N + \frac{m - 1}{m} (C - N) \quad (\text{b}) \quad (\text{II.41.})$$

$$n = N + (m - 1) k N^m n \quad (\text{c})$$

Cette dernière relation permet d'exprimer la concentration électrons libres directement en fonction de la concentration active :

$$n = \frac{N}{1 - (m - 1) k N^m} \quad (\text{II.42.})$$

Il est apparent que l'équation (I.42.) impose une limite de solubilité à l'arsenic substitutionnel pour préserver une valeur finie à la concentration en électrons libres. Cette limite de solubilité,  $N_{max}$  est donnée par :

$$N_{max} = \frac{1}{[(m - 1) k]^{1/m}} \quad (\text{II.43.})$$

sa variation en fonction de la température, représentée en figure (II.15.) pouvant être approximé par [18] :

$$N_{\max} = 1.89637 \cdot 10^{22} \exp \left( - \frac{0.453 \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^{-3} \quad (\text{II.44.})$$

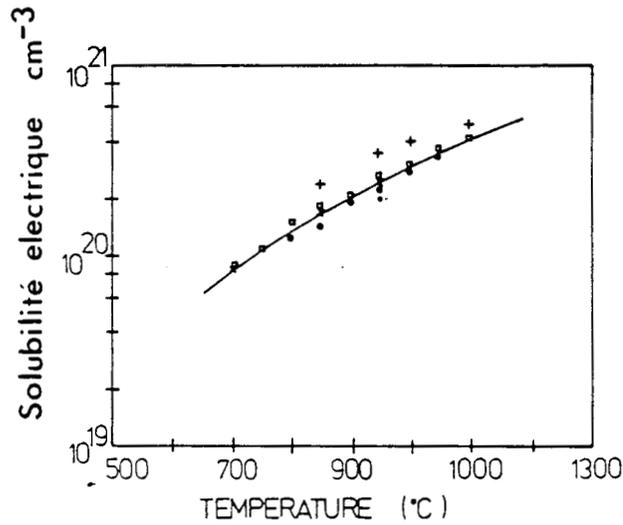


Figure II.15. : Limite de solubilité électrique de l'arsenic en fonction de la température  
Source : Réf. [18]

En introduisant (II.43.) dans l'équation (II.40.), la relation d'équilibre entre concentration totale et active s'écrit :

$$C = N \left[ 1 + \frac{\frac{m}{m-1} \left( \frac{N}{N_{\max}} \right)^m}{\left( 1 - \frac{N}{N_{\max}} \right)^m} \right] \quad (\text{II.45.})$$

La figure II.16. présente la relation entre concentration active et concentration totale de l'arsenic (II.45.) à 1000° C, montrant le degré de validité du modèle présenté.

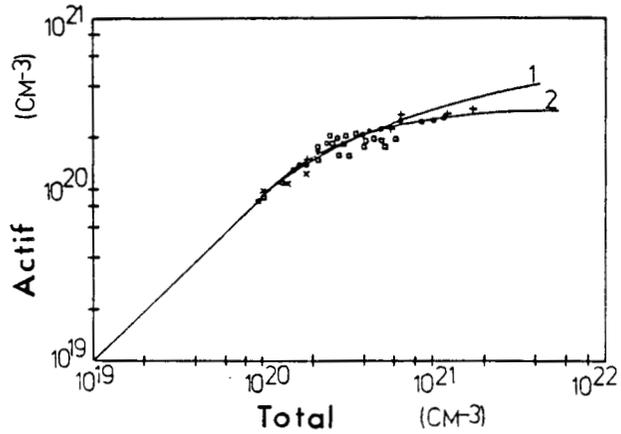


Figure II.16. Variation de la concentration totale d'arsenic en fonction de la concentration active  
 1 :  $m = 4$  cluster neutre  
 2 : (I.45.)  $m = 3$

Source : Réf [18]

### 1.3.b) Modélisation

Pour des raisons technologiques évidentes, il s'avère intéressant de formuler les équations de diffusion d'un système bore-arsenic en tenant compte de l'effet du clustering. Les équations de base du système s'écrivent [19]

$$\frac{\partial C_{AS}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{AS} \frac{\partial N_{AS}}{\partial x} + D_{AS} N_{AS} \frac{\partial}{\partial x} \log \frac{n}{n_i} \right] \quad (\text{II.46.a})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_B \frac{\partial C_B}{\partial x} - D_B C_B \frac{\partial}{\partial x} \log \frac{n}{n_i} \right] \quad (\text{II.46.b})$$

$C_{AS}$ ,  $N_{AS}$ ,  $C_B$  désignent successivement la concentration totale d'arsenic, sa concentration active et la concentration de bore. Le flux, dans l'équation (II.46.a), ne dépend que de la concentration active, les atomes en agglomérat étant immobiles.

La condition de neutralité électrique donnée par l'équation (II.41.b) dans le cas d'un silicium de type n, peut être étendue au cas intrinsèque, en exprimant la concentration en électrons libres comme suit :

$$n = \frac{U + \sqrt{U^2 + 4 n_i^2}}{2} \quad (\text{II.47.a})$$

avec 
$$U = N_{AS} + \frac{m-1}{m} (C_{AS} - N_{AS}) - C_B \quad (\text{II.47.b})$$

Le champ électrique réduit s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial x} \log \frac{n}{n_i} = \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{U^2 + 4 n_i^2}} \left( - \frac{1}{m} \frac{\partial N_{AS}}{\partial x} + \frac{m-1}{m} \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} - \frac{\partial C_B}{\partial x} \right), \quad (\text{II.48.})$$

et nécessite donc la détermination simultanée des deux états de l'arsenic. La relation d'équilibre (II.45.) étant établie, le problème peut se simplifier en ne résolvant que la concentration total,  $C_{AS}$ , et en remarquant que pour une température donnée :

$$\frac{\partial N_{AS}}{\partial x} = \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} \quad (\text{II.49.})$$

En substituant l'expression du champ électrique réduit (II.48.) dans le système initial (II.46.) et en utilisant la relation de différentiation (II.49.) le système d'équations couplées se résume à :

$$\frac{\partial C_{AS}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{AS} \left\{ \left[ \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} \right] \cdot \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} + \frac{N_{AS}}{\sqrt{U^2 + 4 n_i^2}} \right. \right. \\ \left. \left. \left[ \left( \frac{m-1}{m} + \frac{1}{m} \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} \right) \cdot \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} - \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] \right\} \right] \quad (\text{II.50.a})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_B \left\{ \frac{\partial C_B}{\partial x} - \frac{C_B}{\sqrt{U^2 + 4 n_i^2}} \right. \right. \\ \left. \left. \left[ \left( \frac{m-1}{m} + \frac{1}{m} \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} \right) \cdot \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} - \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] \right\} \right] \quad (\text{II.50.b})$$

dans lequel l'effet des lacunes chargées intervient dans les coefficients de diffusion effectifs :

$$D_{AS} = \frac{1 + \beta_{AS} \frac{n}{n_i}}{1 + \beta_{AS}} \quad \text{avec} \quad \beta_{AS} = 100 \quad (\text{II.50.c})$$

$$D_B = \frac{1 + \beta_B \frac{n}{n_i}}{1 + \beta_B} \quad \text{avec } \beta_B = 3. \quad (\text{II.50.d})$$

Si l'arsenic est la seule impureté présente, l'équation (II.50.a) permet d'écrire :

$$\frac{\partial C_{AS}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{ASCl} \frac{\partial C_{AS}}{\partial x} \right) \quad (\text{II.51.})$$

où  $D_{ASCl}$ , tient compte du clustering, du champ électrique et de l'effet des lacunes chargées :

$$D_{ASCl} = D_{AS} \left[ \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} + \frac{N_{AS}}{\sqrt{\left[ N_{AS} + \frac{m-1}{m} (C_{AS} - N_{AS}) \right]^2 + 4 n_i^2}} \right] \cdot \left( \frac{m-1}{m} + \frac{1}{m} \frac{\partial N_{AS}}{\partial C_{AS}} \right) \quad (\text{II.52.})$$

L'équation (II.51.) permet sous cette forme la simulation précise de la formation des zones  $n^+$  en application VLSI où les dopages sont très importants.

L'effet de ce modèle est illustré en figure (II.17.), la mesure de résistivité différentielle reproduit la concentration active d'arsenic, les clusters perdant leur charge à température ambiante [17] .

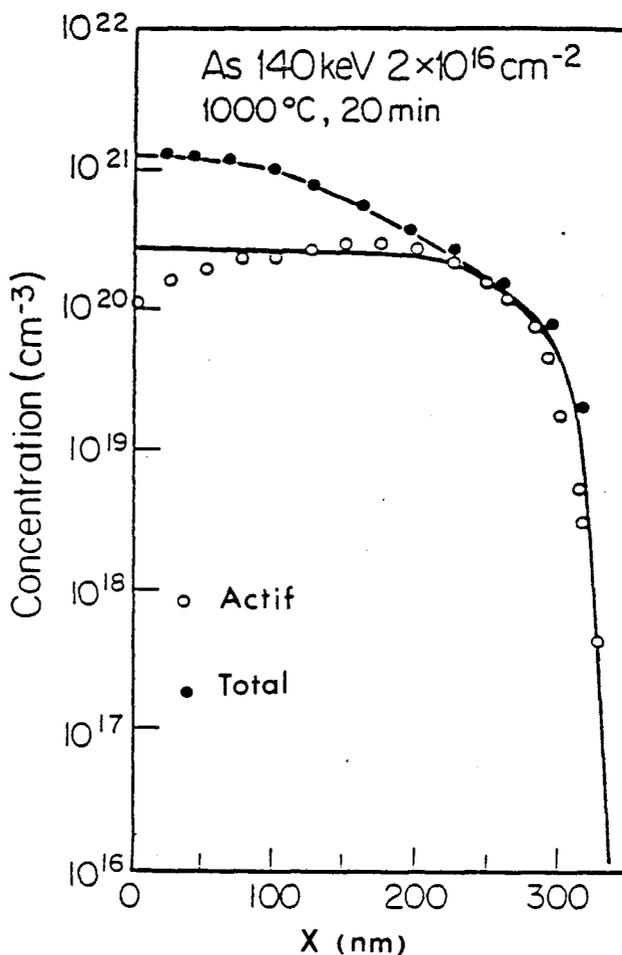


Figure II.17. Profil de concentration d'arsenic, total et actif, dans un cas de fort dopage.

Source : Réf. [17]

#### 1.4. Modèle de diffusion du phosphore

Les profils de dopage obtenus avec le phosphore présentent des écarts importants comparativement à ceux prédits par le modèle extrinsèque [9]. En effet, contrairement au bore et à l'arsenic où seuls deux types de lacunes ( $V^x$ ,  $V^+$  ou  $V^-$ ) interviennent de façon notable, la diffusion du phosphore s'avère être fortement influencée par les lacunes ( $V^=$ ). Un tout autre modèle à été développé [5] pour rendre compte des trois contributions ( $V^x$ ,  $V^-$ ,  $V^=$ ).

La figure II.18. présente un profil de phosphore obtenu par prédépôt sur lequel les espèces diffusantes ont été précisées. Près de la surface se situe une zone où la concentration reste quasiment constante. Le phosphore y diffuse par complexe  $(P^+ V^-)$ . Cette zone se termine dès que le niveau de Fermi attend le seuil de dissociation, de  $(P^+ V^-)$ . Une sursaturation en lacunes  $(V^-)$  issue de cette dissociation se crée alors dans le substrat, y accélérant la diffusion du phosphore. Cette sursaturation affecte également les autres impuretés présentes et serait responsable de l'accélération de la diffusion de base lors de la formation d'émetteurs en phosphore [5].

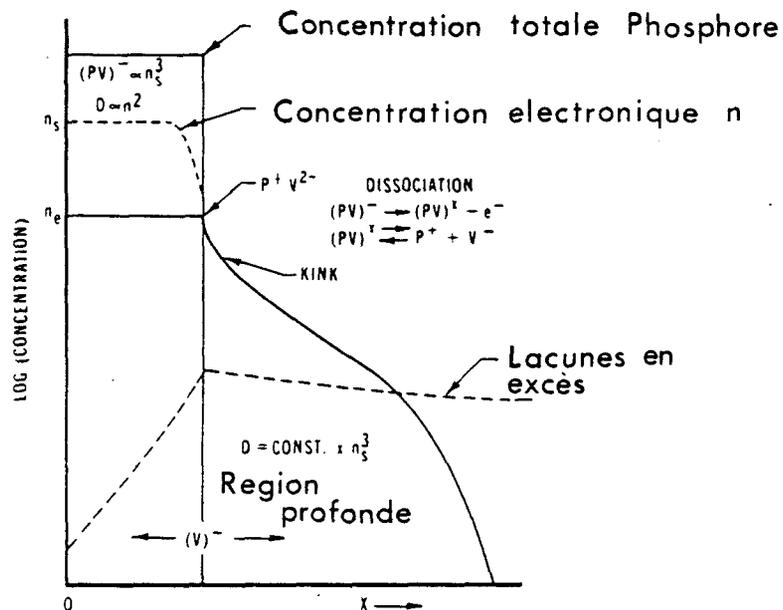


Figure II.18. Mécanisme de base de la diffusion du phosphore

Source : Réf. [1]

Des analyses de Boltzmann-Matano ont en fait permis de définir trois zones distinctes dans les profils de dopage. Sur la figure II.19. a été reproduite la variation du coefficient de diffusion du phosphore en fonction de la concentration en électrons libres, les différentes zones se définissant comme suit :

. Région I : zone de surface

$n > n_e$  seuil de dissociation ( $P^+ V^{\equiv}$ )

$$D_I \propto n^2$$

. Région II : zone de transition

$n_e > n > n_{\text{kink}}$

$$D_{II} \propto n^{-2}$$

. Région III : zone profonde

$n < n_{\text{kink}}$

$$D_{III} = C \text{ st}$$

$n_{\text{kink}}$  étant défini par :

$$D_{II} (n_{\text{kink}}) = D_{III} (n_{\text{kink}}) \quad (\text{II.53.})$$

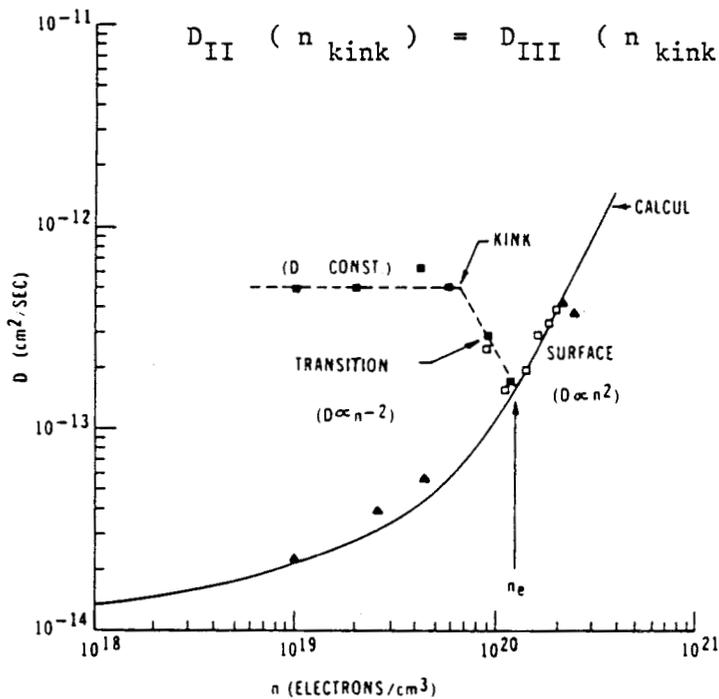


Figure II.19. Variation du coefficient de diffusion en fonction de la concentration en électrons libres à  $1000^\circ \text{C}$ .

Source : Réf. [5]

Ces différentes zones, ainsi que la variation de la diffusivité correspondante sont illustrées sur un profil caractéristique en figure II.20.

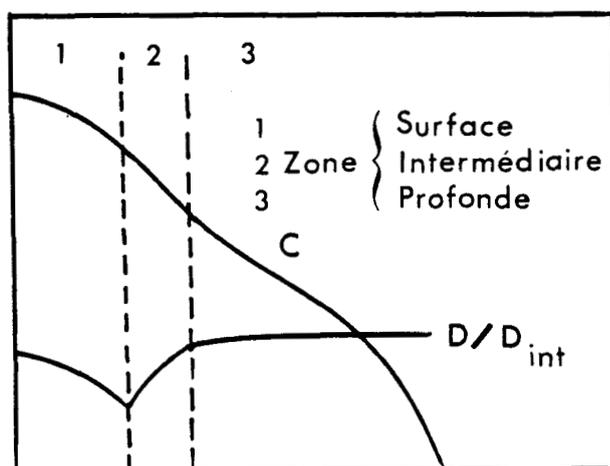


Figure II.20. Schématisation de la variation du coefficient de diffusion du phosphore le long d'un profil de prédépôt.

Source : Réf. [3]

Afin de compléter le modèle une relation empirique entre la concentration totale de phosphore C et la concentration en électrons libres a été proposée [5]

$$C = n + 2.04 \cdot 10^{-41} n^3 \quad (\text{II.54.})$$

qui rend compte d'un effet de saturation de phosphore substitutionnel. L'équation (II.54.), déduite de caractérisations SIMS et de mesures électriques est précisée en figure II.21.

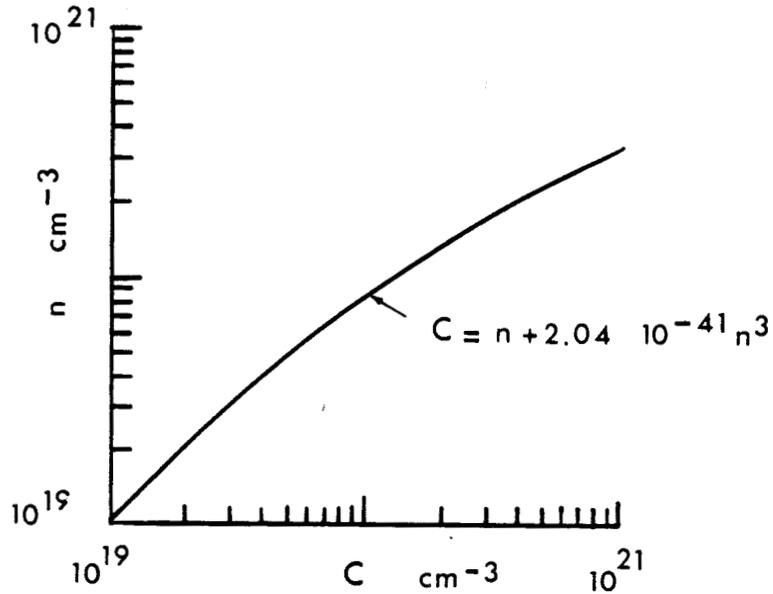


Figure II.21. Variation de la concentration totale de phosphore en fonction de la concentration en électrons libres.

1.4.a) Modèle quantitatif

L'évolution de la concentration totale de phosphore,  $C$ , peut être calculée par une équation de diffusion unique :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (\text{II.55.})$$

dans laquelle le coefficient de diffusion total  $D$  sera spécifique aux différentes zones. Les diffusivités intrinsèques correspondant à la contribution des divers types de lacunes sont données par :

$$D^x = 3.85 \exp \left( - \frac{3.66 \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D^- = 4.44 \exp \left( - \frac{4. \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D^{\bar{}} = 44.2 \exp \left( \frac{- 4.37 \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$$

. Région de surface

Région pour laquelle  $n > n_e$  avec

$$n_e = 4.61 \cdot 10^{21} \exp \left( - \frac{0.39 \text{ eV}}{kT} \right) \text{ cm}^{-3} \quad (\text{II.56.})$$

$$D_I = F_e \left\{ D^x + D^{\bar{}} \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \right\} \quad (\text{II.57.})$$

où  $F_e$ , terme multiplicatif dû au champ électrique peut être approximé par :

$$F_e = \left( 1 + \frac{C / 2 n_i}{\sqrt{\frac{C^2}{4 n_i^2} + 1}} \right)$$

. Région intermédiaire

$$n_e > n > n_{\text{kink}}$$

$$D_{II} = F_e \left\{ D^x + D^{\bar{}} \left( \frac{n_e}{n_i} \right)^2 \right\} \left( \frac{n_e}{n} \right)^2 \quad (\text{II.58.})$$

Cette région se termine lorsque  $D_{II} = D_{III}$

. Région profonde

$$n < n_{\text{kink}}$$

$$D_{III} = F_e \left\{ D^X - D^- \frac{n_s^3}{n_e^2 n_i} \left( 1 + \exp \frac{0.3 \text{ eV}}{kT} \right) \right\} \quad (\text{II.59.})$$

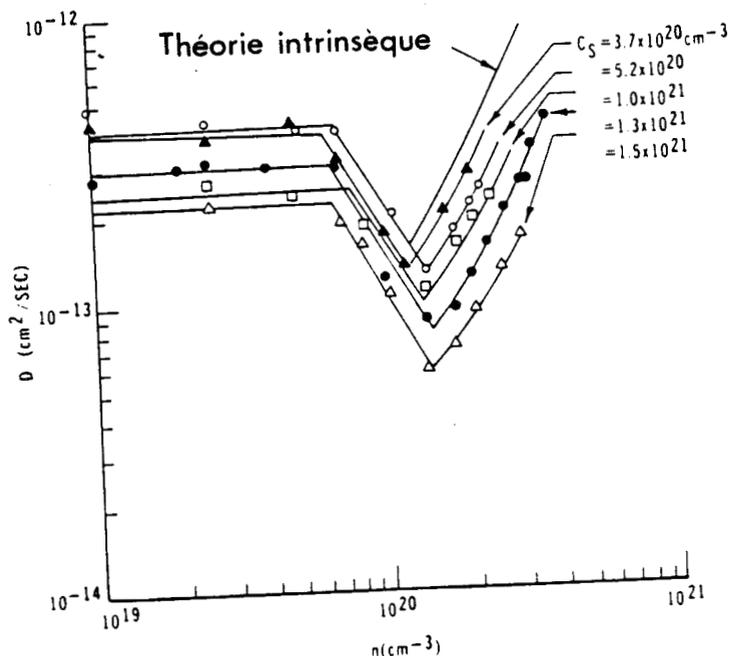
où  $n_s$  est la concentration en électron libre à la surface. Cette zone peut être étendue à l'infini, la sursaturation en lacunes s'effectuant sur une profondeur supérieure à celle des motifs technologiques. Il est à noter que le coefficient de diffusion  $D_{III}$  présente une accélération importante comparativement au cas intrinsèque, le facteur multiplicatif :

$$f_{\text{enh}} = \frac{D_{III}}{F_e (D^X + D^- + D^=)} \quad (\text{II.60.})$$

dépend du degré d'injection de lacunes par le biais de  $n_s$ . Le terme  $f_{\text{enh}}$  multiplie également la diffusivité intrinsèque  $D_{\text{int}}$  de toutes les impuretés, en présence de phosphore. Ce dernier point permet de modéliser empiriquement les diffusions accélérées de base lors de la formation d'émetteur.

#### 1.4.b) Influence des forts dopages de phosphore sur la concentration intrinsèque

Le modèle précédemment développé prédit une accélération de la diffusion du phosphore dans la zone profonde avec la concentration superficielle. (II.59.). Hors il s'avère que pour des concentrations totales de surface  $C_s$  supérieures à  $3 \cdot 10^{20}$ , les profils obtenus présentent un ralentissement comparativement aux résultats escomptés. Ces observations qui se traduisent par une diminution de la diffusivité totale, sont illustrées en figure II.22., sur laquelle a été reportée la variation du coefficient de diffusion avec la concentration en porteurs pour diverses concentrations de surface.



a diffusivité du phosphore en concentration en électrons valeurs de concentration de surface à 1000° C

Source : Réf. [20]

Cet effet peut être attribué [20] à une réduction de la largeur de la bande interdite du silicium due aux contraintes créées dans le réseau cristallin par les fortes concentrations de phosphore. Cette variation  $\Delta E_g$  induit une augmentation de la concentration intrinsèque qui justifie une diminution du coefficient de diffusion (équations II.57. , II.58. , II.59.).

La réduction de la largeur de bande interdite est fonction de la concentration totale superficielle de phosphore comme suit [20].

$$\Delta E_g = - 1.3 \cdot 10^{22} (C_S - C_z) \text{ cm}^{-3} \text{ eV.} \quad (\text{II.61.})$$

Elle ne prend effet que lorsque  $C_S$  est supérieur à une concentration de seuil  $C_z$  qui peut être approximée par :

$$C_z = \frac{2.43 \cdot 10^{26}}{T_C^2} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{II.62.})$$

$T_C$  étant la température en degrés centigrades du procédé thermique.

La réduction de la diffusivité dans les différentes zones est reliée à la variation de la largeur de bande  $\Delta E_g$  par les trois relations suivantes [20] :

$$D_I = F_e \left[ D^x + D^- \cdot \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \cdot \exp \left( + \frac{\Delta E_g}{kT} \right) \right] \quad (\text{II.63.a})$$

$$D_{II} = F_e \left[ D^x + D^- \cdot \left( \frac{n_e}{n_i} \right)^2 \cdot \exp \left( + \frac{\Delta E_g}{kT} \right) \right] \left( \frac{n_e}{n} \right)^2 \quad (\text{II.63.b})$$

$$D_{III} = F_e \left[ D^x + D^- \cdot \frac{n_s^3}{n_e^2 n_i} \left( 1 + \exp \frac{0.3 \text{ eV}}{kT} \right) \cdot \exp \left( + \frac{3\Delta E_g}{kT} \right) \right] \quad (\text{II.63.c})$$

La simulation de la diffusion de phosphore sous haute concentration s'effectue en substituant les équations (II.57. , II.58. et II.59.) au système II.63.

La figure II.23. quantifie l'effet du modèle corrigé, pour un dopage phosphore où le rôle des contraintes est prédominant. Les différentes courbes présentées ont été calculées avec diverses valeurs de  $\Delta E_g$ .

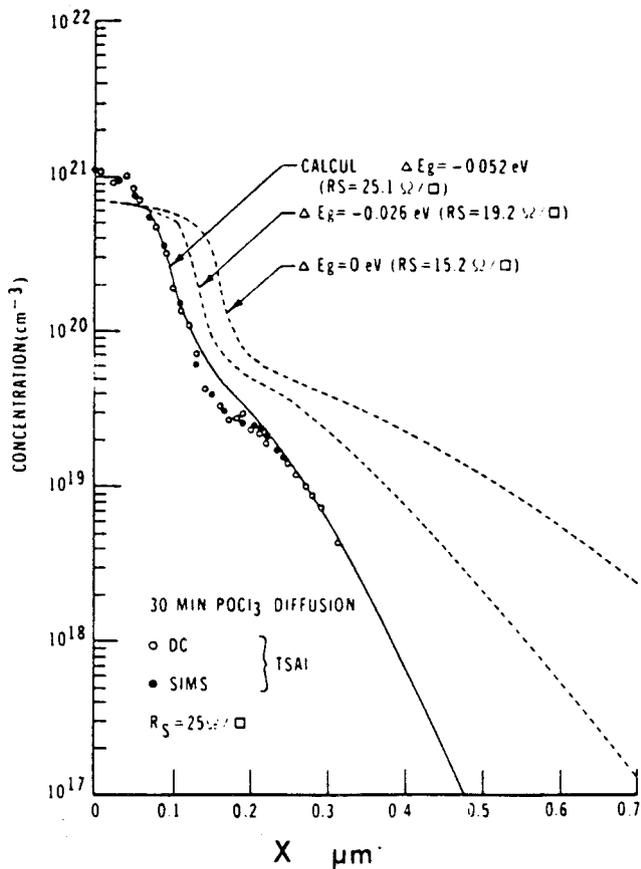


Figure II.23. Influence de la variation de la largeur de bande interdite sur des profils de phosphore simulés.

Source : Réf. [20]

1.4.c) Diffusion du phosphore à partir d'un profil initial

Les équations qui ont été avancées jusqu'ici ont été développées dans le cas de prédépôt où la concentration superficielle était maintenue constante. Lors de diffusion à partir d'un profil initial, les trois zones de variation du coefficient de diffusion subsistent [5], mais le degré d'injection de lacunes ne fait plus directement appel à la concentration de surface mais dépend de la concentration maximale que présente le profil. Ce maximum de distribution évoluant durant le procédé, l'argument précédemment avancé nécessite un traitement itératif du coefficient de diffusion.

De plus lorsque le profil initial a été produit par implantation ionique, des dislocations ont été créées dans le cristal qui ont pour effet une réduction complémentaire de la largeur de bande [20]. Cette réduction  $\Delta E_{g \text{ i.o.}}$  est fonction de la dose implantée  $Q_{\square}$  par la relation empirique [3] :

$$\Delta E_{g \text{ i.o.}} = - 2.3 \cdot 10^{-6} [ Q_{\square} (\text{cm}^{-2}) ]^{1/4} \text{ eV} \quad (\text{II.64.})$$

et  $n$  intervient que lors du premier recuit.

Les deux remarques précédentes permettent alors d'écrire l'expression du coefficient de diffusion dans les différentes zones pour une étape haute-température à partir d'un profil initial dans lequel les effets des contraintes et des dislocations sont cumulés [21]

. Zone I

$$n > n_e$$

$$D_I = F_e [D^x + D^= \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_{g_c} + \Delta E_{g \text{ i.o.}}}{kT}\right)] \quad (\text{II.65.})$$

$$\text{ou } \Delta E_{g_c} = - 1.3 \cdot 10^{-22} (C_{\text{peak}} - C_z) \text{ cm}^{-3} \text{ eV} \quad (\text{II.66.})$$

$C_{\text{peak}}$  étant la concentration atomique maximale instantanée du profil.

. Zone II

$$n_e > n > n_{\text{kink}}$$

$$D_{\text{II}} = F_e [ D^x + D^- \left( \frac{n_e}{n_i} \right)^2 \exp \left( \frac{\Delta E_{g_c} + \Delta E_{g \text{ i.o.}}}{kT} \right) ]. \left( \frac{n_e}{n} \right)^2 \quad (\text{II.67.})$$

. Zone III

$$n < n_{\text{kink}}$$

$$D_{\text{III}} = F_e [ D^x + D^- \frac{n_{\text{peak}}^3}{n_e^2 n_i} \left( 1 + \exp \frac{0.3 \text{ eV}}{kT} \right) \cdot \exp \left( \frac{6\Delta E_{g_c} + 3\Delta E_{g \text{ i.o.}}}{2 kT} \right) ]$$

où  $n_{\text{peak}}$  est la concentration maximale en électrons libres le long du profil,  $n_{\text{kink}}$  étant défini en (II.53.)

1.4.e) Validité du modèle

Le modèle global, tel qu'il a été présenté, est issu de nombreuses études expérimentales. Il semble éprouvé pour les simulations de prédépôt dans la mesure où les concentrations superficielles sont caractérisées mais reste très empirique au niveau du couplage du phosphore avec les autres impuretés. Puisque le modèle est sensible au phénomène complexe de la relaxation des défauts introduits par l'implantation ionique, la définition de son champ d'application nécessite des caractérisations nouvelles [21]. Enfin les équations avancées laissent quelques ambiguïtés quant aux exigences physiques fondamentales. [22]. De récents travaux [22, 23] ont permis la formulation théorique du mécanisme de diffusion du phosphore en tenant compte des équations de continuité des lacunes. Un modèle simplifié en a été déduit [24] qui est actuellement opérationnel dans le programme de simulation TITAN [25].

## 2 - MODELES D'IMPLANTATION IONIQUE

Introduite depuis une décade environ dans les filières de fabrication de circuits intégrés, l'implantation ionique est aujourd'hui la technique de dopage la plus utilisée. L'impact qu'elle a créé dans la miniaturisation des motifs élémentaires est étroitement lié aux divers avantages qu'elle présente vis à vis du prédépôt thermique [26] :

- L'implantation ionique produit des couches dopées extrêmement homogènes et reproductibles, le contrôle des doses s'effectuant en ligne par intégration du courant d'ions. Par ce fait elle permet l'ajustement des tensions de seuil des structures M.O.S.

- Pouvant s'effectuer sélectivement selon la topologie de masquage, elle est entièrement compatible avec les procédés PLANAR et permet une réduction du nombre d'opérations technologiques, le masquage pouvant être réalisé directement par la résine photosensible.

- C'est un procédé à température ambiante, bien qu'une étape thermique de guérison soit souvent nécessaire à l'activation des dopants.

Le principe de base acquis dès le développement des transistors bipolaires - 1957 - consiste à introduire les dopants dans le silicium par énergie cinétique. Les ions initialement accélérés vont perdre leur vitesse par interactions coulombiennes et nucléaires avec les atomes du cristal [27]. Les profils de dopage implantés, solutions de lois probabilistes d'interaction, sont régis par des fonctions de distribution dont le nombre de moments influents est spécifique de l'ion et de la cible. D'un point de vue numérique, la simulation de l'implantation ionique se résume à l'établissement, dans le domaine silicium, de profils analytiques. Ces profils seront pris comme conditions initiales des étapes de diffusion ultérieures.

### 2.1. Modèle unidimensionnel

Dans cette partie sont développées les distributions qui sont les plus couramment utilisées, de par leurs validations expérimentales. Bien que la position des tranches soit choisie telle que le faisceau ionique ne coïncide pas avec un axe principal du silicium, la cible ne peut pas être considérée comme totalement amorphe. Des canalisations résiduelles d'ions persistent qui créent des dissymétries dans les profils et requièrent donc des distributions complexes pourvues de paramètres ajustés.

#### 2.1.a) Distribution Gaussienne

La description la plus simple d'un profil implanté dans le silicium ou dans son oxyde est une courbe Gaussienne symétrique, définie par deux moments. La distribution est donnée par :

$$F(x) = \exp \left[ - \frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (\text{II.69.})$$

ou  $x$  est la distance mesurée le long de l'axe d'incidence,  $R_p$  et  $\Delta R_p$  étant respectivement la pénétration moyenne et l'écart type projetés. Ces deux valeurs, ainsi que les moments d'ordres supérieurs ont été tabulés [28] en fonction de l'énergie d'implantation pour les divers types d'impuretés et de cibles.

Le profil résultant est obtenu en multipliant la fonction de distribution par une constante de normalisation,  $A$ , restituant la dose introduite  $Q_{\square}$  :

$$A = \frac{Q_{\square}}{\int_0^{\infty} F(x) dx} = \frac{2 Q_{\square}}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right) \right]} \quad (\text{II.70.})$$

Cependant, pour les énergies couramment utilisées pour lesquelles  $R_p \gg \Delta R_p$ , le profil implanté peut être approximé par la relation suivante :

$$C(x) = \frac{Q_{\square}}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2 \Delta R_p^2}\right) \quad (\text{II.71.})$$

Le profil Gaussien est illustré en figure II.24. pour deux situations caractéristiques.

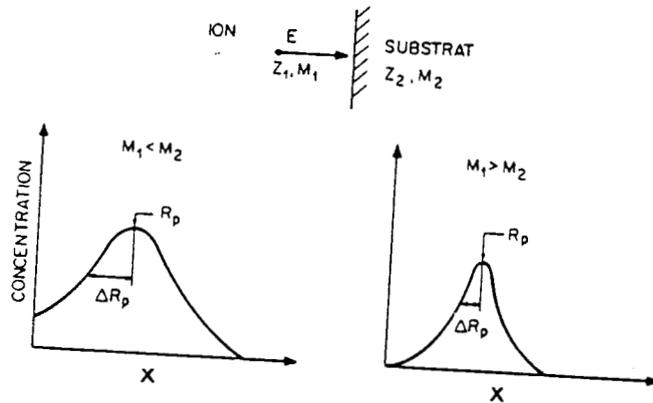


Figure II.24. Profils implantés de type Gaussien

### 2.1.b) Distribution bi-Gaussienne

La distribution Gaussienne symétrique précédente permet une estimation rapide de la pénétration des ions pour le choix des épaisseurs de masques. Cependant les relevés expérimentaux de profils implantés de phosphore et d'arsenic dans Si et  $\text{SiO}_2$  présentent des assymétries, nécessitant un troisième moment,  $\gamma_p$ , tabulé [28], pour leurs descriptions. Si cette dissymétrie n'est pas excessive, les distributions correspondantes peuvent être représentées par deux demi-Gaussiennes reliées à une pénétration moyenne pondérée  $R_m$  [29]. La distribution est donnée par :

$$F(x) = \exp \left[ - \frac{(x - R_m)^2}{2 \Delta R_{P_1}^2} \right], \quad x \leq R_m \quad (\text{II.72.a})$$

$$F(x) = \exp \left[ - \frac{(x - R_m)^2}{2 \Delta R_{P_2}^2} \right], \quad x \geq R_m \quad (\text{II.72.b})$$

où les trois caractéristiques pondérées  $R_m$ ,  $\Delta R_{P_1}$ ,  $\Delta R_{P_2}$  sont obtenues à partir des trois premiers moments  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma_p$  en résolvant le système [29] :

$$\begin{aligned} R_p &= R_M + 0.8 (\Delta R_{P_2} - \Delta R_{P_1}) & (\text{II.73.}) \\ \Delta R_p^2 &= -0.64 (\Delta R_{P_2} - \Delta R_{P_1})^2 + (\Delta R_{P_1} - \Delta R_{P_1}^2 \Delta R_{P_2} + \Delta R_{P_2}^2) \\ \gamma_p^3 &= (\Delta R_{P_2} - \Delta R_{P_1}) (0.224 \Delta R_{P_1}^2 + 0.352 \Delta R_{P_1} \Delta R_{P_2} + 0.224 \Delta R_{P_2}^2) \end{aligned}$$

ou en se référant à des valeurs tabulées [28].

Les constantes de normalisation  $A_1$  et  $A_2$  multipliant respectivement les distributions II.72.a et II.73.b sont obtenues en imposant la continuité des deux demi-Gaussiennes tout en restituant la dose totale par l'intégration. La résolution de ces deux conditions conduit à l'expression du profil suivante :

$$C(x) = \frac{2 Q_{\square}}{\sqrt{2\pi (\Delta R_{P_1} + \Delta R_{P_2})}} \exp \left[ - \frac{(x - R_m)^2}{2 \Delta R_{P_1}^2} \right], \quad x \leq R_m$$

$$C(x) = \frac{2 Q_{\square}}{\sqrt{2\pi (\Delta R_{P_1} + \Delta R_{P_2})}} \exp \left[ - \frac{(x - R_m)^2}{2 \Delta R_{P_2}^2} \right], \quad x \geq R_m$$

dont une schématisation est donnée en figure II.25.

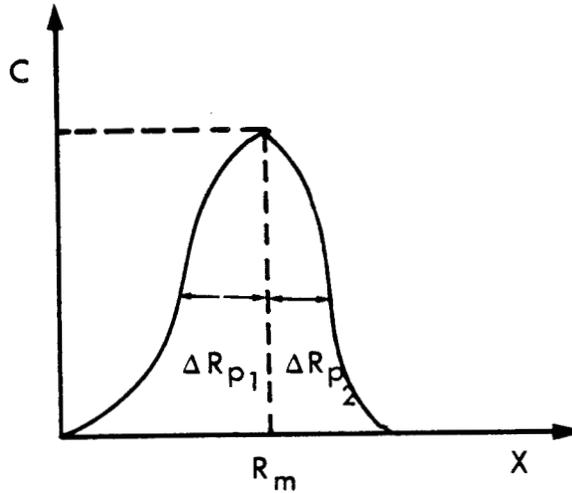


Figure II.26. Représentation schématique d'un profil implanté par deux demi-Gaussiennes.

### 2.1.c) Pearson - type IV

Plus sensible à la structure cristalline de la cible que le phosphore et l'arsenic, le bore nécessite, pour la description de ses profils d'implantation, une distribution paramétrée par quatre moments :  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma$  et  $\beta$ . La Pearson de type IV s'est avérée appropriée pour simuler des profils implantés de bore dans le silicium [30], dans  $\text{SiO}_2$  et  $\text{Si}_3\text{N}_4$  [31]. Cette distribution, centrée sur la pénétration moyenne  $R_p$  est donnée par :

$$F(x) = K [b_0 + b_1 (x - R_p) + b_2 (x - R_p)^2]^{1/2b_2} \exp \left[ - \frac{(b_1/b_2) + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2 (x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right] \quad (\text{II.75.a})$$

où

$$a = b_1 = \frac{\Delta R_p \gamma (\beta + 3)}{A} \quad (\text{II.75.b})$$

$$b_0 = - \frac{\Delta R_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A} \quad (\text{II.75.c})$$

$$b_2 = - \frac{2\beta - 3\gamma^2 - 6}{A} \quad (\text{II.75.d})$$

$$A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18 \quad (\text{II.75.e})$$

$$K = b_0^{-1/2} b_2 \quad (\text{II.75.f})$$

Dans le cas de cibles amorphes ( $\text{Si O}_2$ ,  $\text{Si}_3 \text{N}_4$ ), les trois premiers moments  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et  $\gamma$  répondent à la théorie L.S.S. [27],  $\beta$  pouvant être approximé par [31] :

$$\beta = 1.5 \beta_{\min} \quad (\text{II.75.a})$$

$$\text{avec } \beta_{\min} = \frac{48 + 49\gamma^2 + 6(\gamma^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma^2} \quad (\text{II.75.b})$$

Par contre, pour le silicium, seul les deux premiers moments restent valides,  $\gamma$  et  $\beta$  étant très sensibles à la structure cristalline. Ces deux dernières valeurs ont été déterminées expérimentalement [31] et peuvent être prises [26] empiriquement comme suit :

$$\gamma = \frac{E \text{ (keV)}}{300} \quad (\text{II.76.})$$

$$\beta = 8 + 25 (\beta_{\min} - 3) \quad (\text{II.77.})$$

où  $E$  est l'énergie d'implantation,  $\beta_{\min}$  étant défini en (II.75.b).

La constante de normalisation permettant de restituer le profil ne peut être définie que par intégration numérique, le profil d'implantation étant alors donné par :

$$C(x) = \frac{Q_{\square}}{\int_0^{\infty} F(x) dx} F(x) \quad (\text{II.78.})$$

La figure II.27. présente un exemple d'interpolation de profil expérimental de bore par Pearson IV.

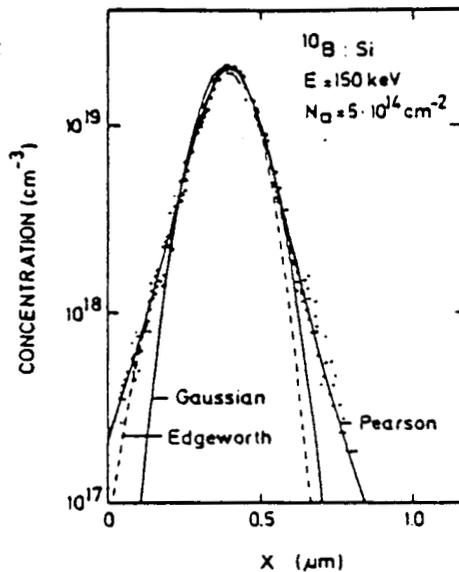


Figure II.27. Approximation d'un profil de bore implanté dans du silicium orienté <111> par Pearson IV

Source : Réf. [26]

2.1.d) Implantation sur système  $\text{SiO}_2 / \text{Si}$

Couramment les implantations ioniques s'effectuent à travers une fine couche diélectrique afin de préserver le silicium de toute contamination et d'ajuster la profondeur de pénétration des ions. Le calcul exact de la distribution spatiale du dopage sur ce système bi-couche nécessite des moyens de simulations particuliers tels que la méthode de Monte-Carlo. Cependant ces calculs, réclamant de grandes ressources informatiques, peuvent être évités moyennant certaines simplifications liées à la proximité des masses et numéros atomiques du silicium et de son oxyde.

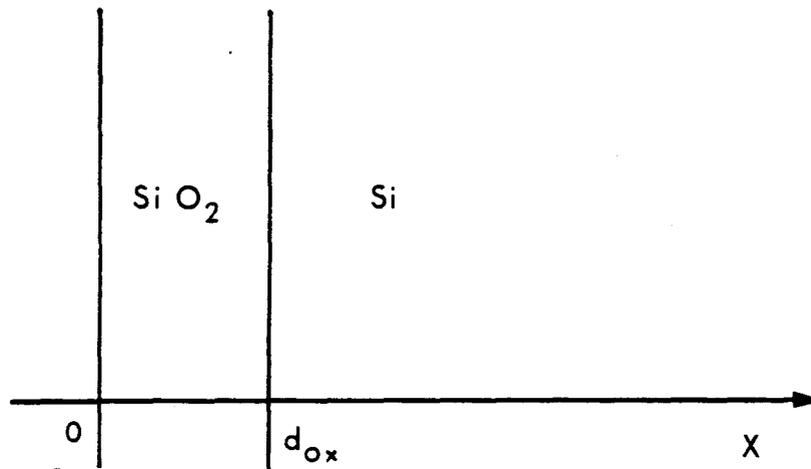


Figure II.28. Schématisation d'une structure bicouche

Dans la structure illustrée en figure II.28. et dans le cas de couche mince ( $d_{\text{ox}} < R_p \text{SiO}_2$ ), le profil peut être approximé par [3] :

$$C_1(x) = C_{\text{SiO}_2}(x), \quad x < d_{\text{ox}} \quad (\text{II.79.a})$$

$$C_2(x) = C_{\text{Si}}(x - d_{\text{ox}}) \left[ 1 - \frac{R_p \text{Si}}{R_p \text{SiO}_2} \right], \quad x \geq d_{\text{ox}} \quad (\text{II.79.b})$$

où  $C_{SiO_2}(x)$  et  $C_{Si}(x)$  sont respectivement les profils dans la silice et le silicium nu. Ce modèle peut être appliqué aux divers types de distribution, les fonctions  $C_{SiO_2}(x)$  et  $C_{Si}(x)$  pouvant être les fonctions (II.71., II.74., II.78.). L'équation (II.79.b) est écrite en substituant à  $d_{ox}$  une épaisseur de silicium équivalent au sens du pouvoir d'arrêt. Cette approximation peut créer une légère discontinuité à l'interface  $SiO_2/Si$ .

Pour les couches épaisses ( $d > R_{pSiO_2}$ ), la distribution peut être déterminée en modifiant le pouvoir d'arrêt du silicium. Développé pour une simple distribution Gaussienne, le profil est donné par [32] :

$$C_1(x) = \frac{Q_{\square}}{\sqrt{2\pi} \Delta R_{pSi}} \exp\left(-\frac{(x - R_{pSiO_2})^2}{2 \Delta R_{pSiO_2}^2}\right), \quad x < d_{ox} \quad (II.80.a)$$

$$C_2(x) = \frac{Q_{\square}}{\sqrt{2\pi} \Delta R_{pSi}} \exp\left(-\frac{(x - d_{ox} - (R_{pSiO_2} - d_{ox}) \frac{\Delta R_{pSi}}{\Delta R_{pSiO_2}})^2}{2 \Delta R_{pSi}^2}\right), \quad x \geq d_{ox} \quad (II.80.b)$$

Dans les structures multicouches, l'équation II.79. peut être généralisée mais nécessite une intégration du profil sur chaque couche afin de déterminer les constantes de normalisation et de préserver la dose totale d'implantation [26].

## 2.2. Modèle bidimensionnel

Le processus statistique régissant la perte de l'énergie des ions dans une cible amorphe induit une dispersion latérale du profil dont la modélisation est indispensable à toute simulation bidimensionnelle. Les premiers calculs dans ce sens [33] ont montré que l'extension latérale des distributions est comparable à la pénétration dans l'axe d'incidence. Ces calculs ont été menés pour un bord de masque abrupt et infiniment haut. Les topologies réelles de surface issues des procédés de lithrogravure ne peuvent pas toujours être assimilées au masque abrupt infini. Pour cette raison des traitements numériques plus récents [34, 35, 21] ont été développés permettant le calcul de distributions de profils implantés sous un masque de forme quelconque.

### 2.2. a) Modèle bi-couche [34]

Dans une structure homogène de silicium, (figure II.29.a), la probabilité pour qu'un ion, percutant la surface en  $(x_1, y_1)$ , se fige en  $(x, y)$  est donnée, pour une distribution Gaussienne par :

$$F(x, y) = \frac{1}{2\pi \Delta X \Delta R_p} \exp \left[ -\frac{(x - x_1)^2}{2 \Delta X^2} - \frac{(y - y_1 + R_p)^2}{2 \Delta R_p^2} \right] \quad (\text{II.81.})$$

$$(x, y) \in \Omega$$

où  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et  $\Delta X$  sont respectivement la pénétration moyenne, l'écart type et la dispersion latérale [28] de l'ion considéré dans le silicium.

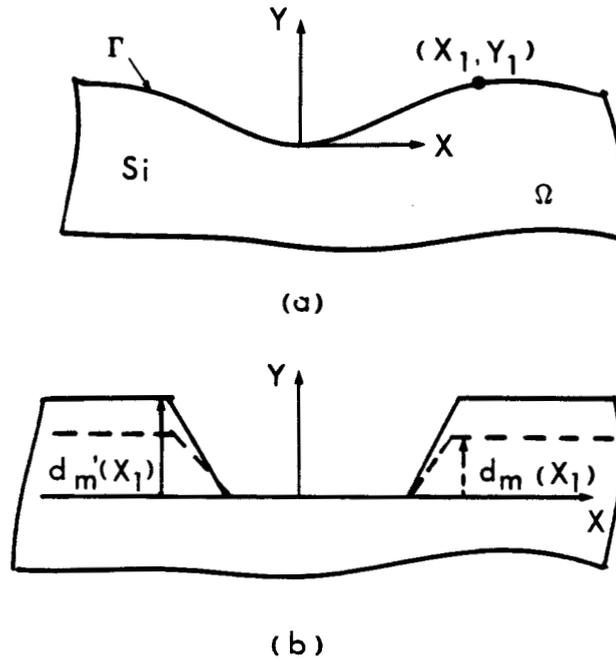


Figure II.29.: Schématisation de la structure silicium (a) et silicium-masque (b)

Si une structure est soumise à une implantation ionique de dose  $Q_{\square}$ , le profil résultant s'exprime sous la forme d'une intégrale de surface de la probabilité précédemment définie :

$$C(x, y) = \left[ \iint_{(x_1, y_1) \in T} F(x, y) dx_1 dy_1 \right] \cdot Q_{\square} \quad (\text{II.82.})$$

Dans une structure réelle, le matériau constitutif du masque dont le pouvoir d'arrêt est légèrement différent de celui du silicium, ne permet pas l'application directe de l'équation (II.82.). Ce masque doit être substitué numériquement en surépaisseur de silicium pour obtenir un domaine homogène permettant l'intégration (figure II.26.b). Cette substitution doit être équivalente au sens des pouvoirs d'arrêt des différents matériaux [19] :

$$d_m'(x_1) = d_m(x_1) \cdot \frac{R_p}{R_{p_m}}, \quad (\text{II.83.})$$

$R_{p_m}$  est la pénétration moyenne dans le matériau de masquage,  $d_m$ , l'épaisseur du masque en  $x$ , et  $d_m'$  l'épaisseur équivalente de silicium.

Comme il existe une relation définissant le domaine d'intégration de l'équation (II.82.)

$$(x_1, y_1) \in \Gamma \Rightarrow y_1 = d_m'(x_1), \quad (\text{II.84.})$$

le calcul du profil implanté se résume à une intégrale de long de l'axe des abscisses :

$$C(x, y) = \frac{Q_{\square}}{2\pi \Delta R_p \Delta X} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ - \frac{(x - x_1)^2}{2 \Delta X^2} - \frac{(y - d_m'(x_1) + R_p)^2}{2 \Delta R_p^2} \right] dx_1 \quad (\text{II.85.})$$

Le résultat est généralement obtenu par intégration numérique. Cependant l'équation II.85. peut être résolue analytiquement pour quelques géométries typiques de masquage :

$$\begin{aligned} \text{- Ecran total semi-infini : } & x_1 < 0 & d_m'(x_1) = +\infty \\ & x_1 > 0 & d_m'(x_1) = d \end{aligned}$$

$$C(x, y) = \frac{Q_{\square}}{2 \sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp \left[ - \frac{(y + R_p - d)^2}{2 \Delta R_p^2} \right] \operatorname{erfc} \left( - \frac{x}{\sqrt{2} \Delta X} \right)$$

(II.86.)

- Fenêtre dans un écran total :  $|x_1| > a$   $d_m'(x_1) = +\infty$   
 $|x_2| < a$   $d_m'(x_1) = d$

$$C(x, y) = \frac{Q_0}{2 \sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp \left[ - \frac{(y + R_p - d)^2}{2 \Delta R_p^2} \right]$$

$$\left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - a}{\sqrt{2} \Delta X} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{x + a}{\sqrt{2} \Delta X} \right) \right\} \quad (\text{II.87.})$$

En figure II.30. sont représentés des profils d'implantation bidimensionnelle correspondant aux équations (II.86.) et (II.87.) ainsi qu'un profil sous un masque obtenu par attaque chimique et pour lequel l'équation (II.85.) à été intégrée.

L'équation (II.85.) ne permet le calcul de profils implantés que dans les systèmes bi-couche pour lesquels les propriétés d'arrêt du masque sont proches de celles du silicium. Pour des structures plus complexes, ou pour des matériaux plus disparates, un contrôle de dose est nécessaire pour chaque couche comme précisé dans la partie suivante.

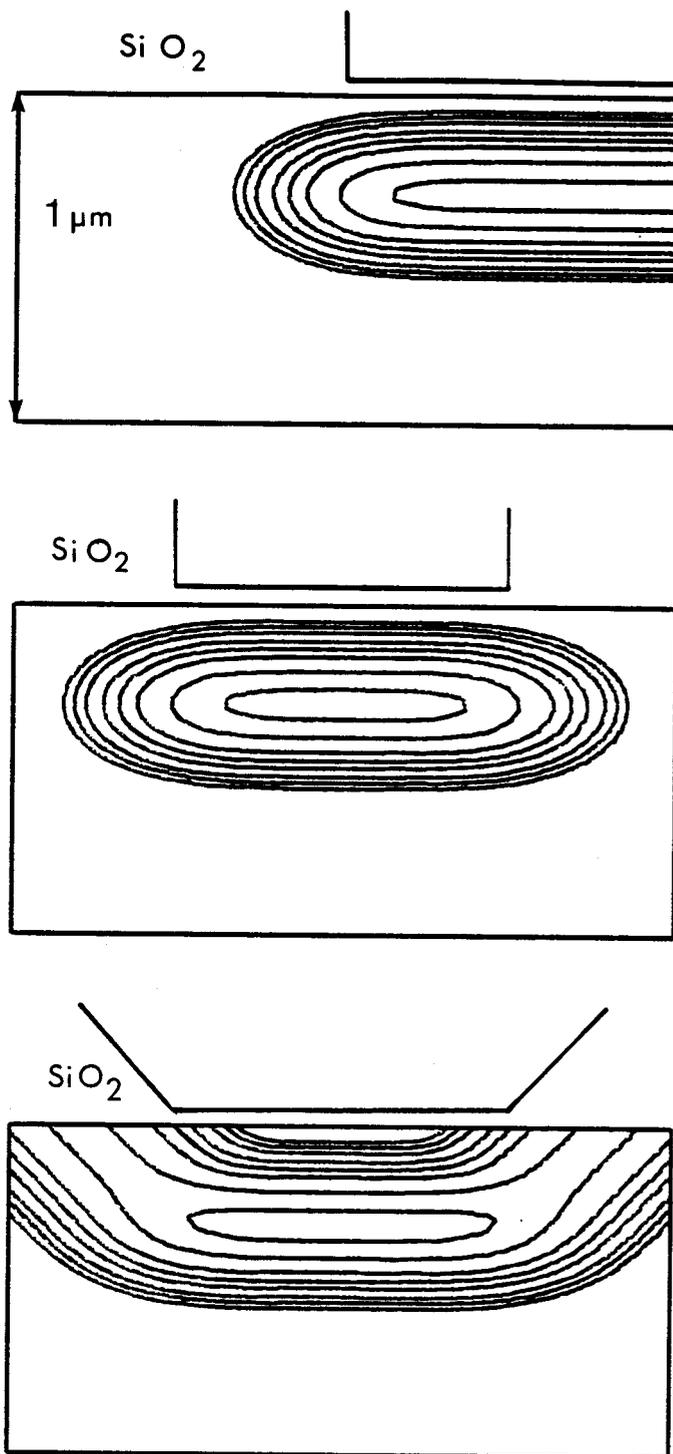


Figure II.30. : Profil d'implantation de Bore  
 $\Phi_{\square} = 2.3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $E = 120 \text{ keV}$   
(a) Ecran total semi-infini  
(b) Fenêtre dans un écran total  
(c) Masque obtenu par attaque chimique

Isoconcentrations :  
 $1.10^{17}$ ,  $5.10^{16}$ ,  $2.10^{16}$ ,  $1.10^{16}$ ,  $5.10^{15}$ ,  
 $2.10^{15}$ ,  $1.10^{15}$ ,  $5.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

### 2.2.b) Généralisation [21]

La structure subissant l'implantation ionique est divisée en segments verticaux. Chaque segment est suffisamment étroit pour que l'épaisseur du masque puisse y être considérée constante (figure II.31.). Les limites du segment  $k$  sont données par  $x_k$  abscisse au bord gauche et  $x_{k+1}$  abscisse au bord droit. Le profil final sera obtenu par la superposition d'implantations sélectives, élémentaires, sur chaque segment.

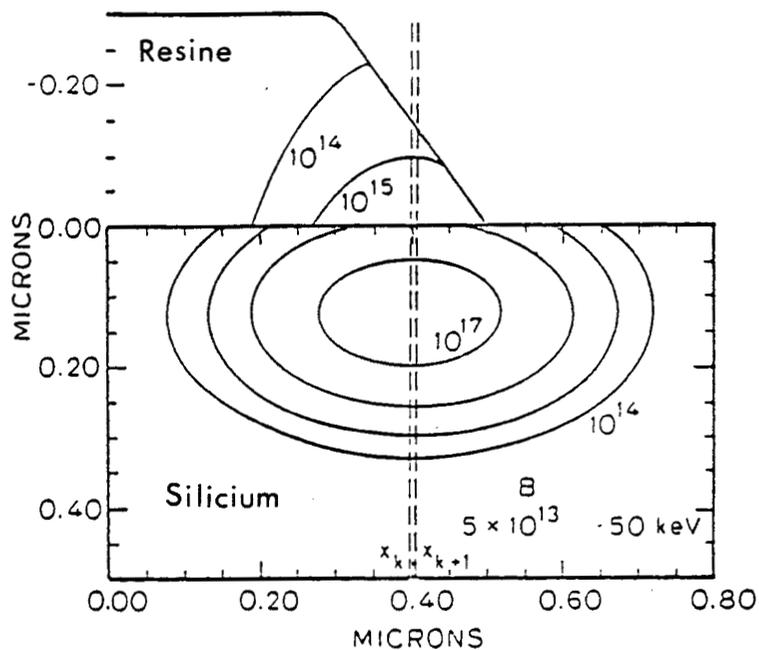


Figure II.31. Schématisation de la découpe de la structure en segments élémentaires. Profil d'implantation sélective sur le segment  $k$ .

Source : Réf. : [21]

Le problème majeur intervenant lors du calcul du profil implanté est de conserver la dose totale de l'implantation sur la structure. Pour s'affranchir de cette difficulté une méthode itérative est proposée [21].

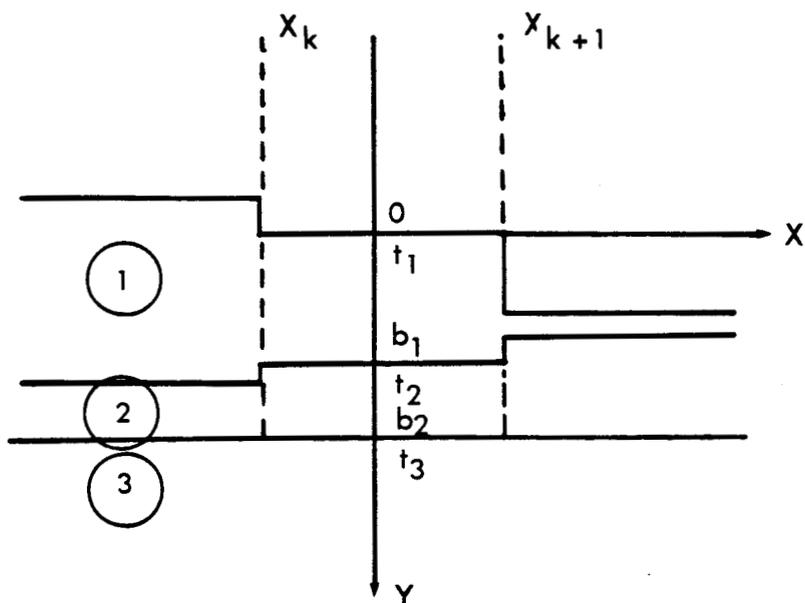


Figure II.32. : Structure multicouche d'un segment élémentaire

Dans le segment  $k$  schématisé en figure II.32., le profil vertical est calculé en traitant chaque couche successivement par ordonnée  $y$  croissante. A l'intérieur la  $j^{\text{ième}}$  couche est définie par :

$$t_j < y < b_j \quad , \quad (\text{II.88.})$$

le type de distribution verticale  $F_j (y)$  est choisi en fonction de l'ion implanté et du matériau constitutif de cette couche (Equation II.69. , II.72. ou II.75.)

Soit  $D_{in j}$  la dose atteignant la couche  $j$ , la constante de normalisation  $I_{max j}$ , par laquelle il faut multiplier la distribution pour obtenir le profil, est déterminée par :

$$I_{max j} = \frac{D_{in j}}{A_j} \quad (II.89.a)$$

$$\text{où } A_j = \int_{t_j}^{+\infty} F_j(y) dy \quad (II.89.a)$$

L'intégrale de la distribution,  $A_j$ , est calculée numériquement.

La dose  $D_j$ , réellement implantée dans la couche  $j$  est également calculée numériquement :

$$D_j = I_{max j} \int_{t_j}^{b_j} F_j(y) dy \quad , \quad (II.90.)$$

et la dose atteignant la couche  $j + 1$  est donnée par :

$$D_{in j+1} = D_{in j} - D_j \quad (II.91.)$$

La procédure (II.89 et II.91.), répétée pour chaque couche permet la conservation de la dose totale implantée et la répartition par couche.

Une généralisation de l'équation (II.87.) [34] est utilisée pour estimer le profil bidimensionnel résultant de l'implantation élémentaire dans le segment  $k$ . La contribution du segment  $k$  est donnée, pour la couche  $j$  par :

$$C_{jk}(x, y) = \frac{I_{\max j}}{2} F_j(y) \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - x_{k+1}}{\sqrt{2} \Delta X_j} \right) - \operatorname{erfc} \left( \frac{x - x_k}{\sqrt{2} \Delta X_j} \right) \right]$$

$t_j < y < b_j$  (II.92.)

ou  $\Delta X_j$  est la dispersion latérale dans la couche  $j$ .

La contribution  $C_{jk}$  est illustrée en figure II.31. sur un système bi-couche pour une implantation de bore sur résine.

Le profil final est obtenu par la superposition de toutes les contributions élémentaires et est donné par :

$$I(x, y) = \sum_k \sum_j C_{jk}(x, y) \quad \text{(II.93.)}$$

La figure II.33. présente un profil d'implantation d'arsenic, calculé par cette méthode, sur une structure d'oxyde de champ.

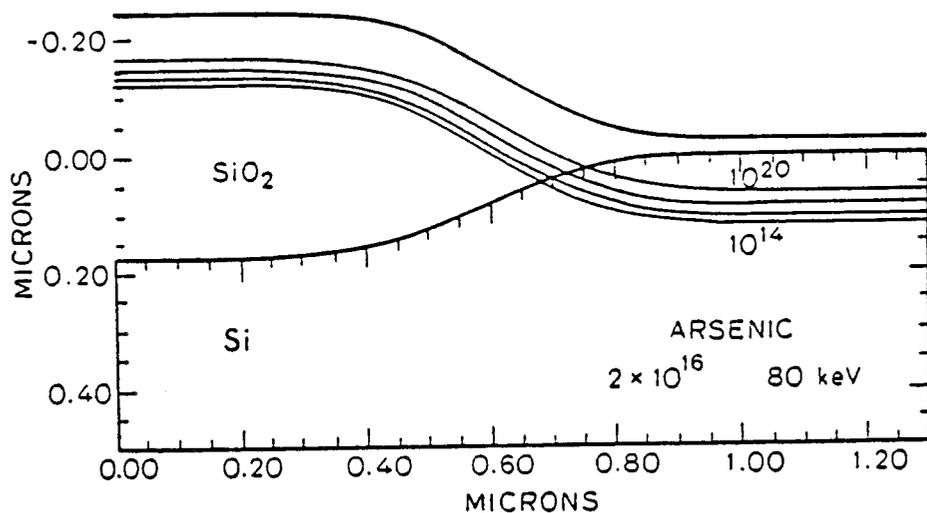


Figure II.33. Profil d'arsenic implanté sur une structure d'oxyde de champ

Toutes les formulations développées dans cette partie sont généralement applicables dans les gammes d'énergie et de dose utilisées pour les opérations de dopage. Pour des énergies plus basses, un auto-sputtering affectant la surface du substrat interfère avec l'implantation et limite alors la validité des distributions proposées [26] .

### 3 - L'OXYDATION DU SILICIUM

Le fait que le silicium ait un oxyde naturel doté de bonnes qualités mécaniques et diélectriques a contribué fortement à l'essor de la technologie des circuits intégrés.

Autant la technologie bipolaire est sensible au procédé de dopage et de diffusion, autant la simulation de l'oxydation du silicium s'avère essentielle pour le développement des technologies M.O.S. [36]. Dans cette technologie, non seulement l'oxyde de silicium intervient au niveau de la création de l'effet de champ (oxyde de grille) mais il réalise l'isolation en surface des structures actives (oxyde de champ) il est également utilisé comme masque contre la diffusion des dopants, en passivation et comme protection de pré-implantation afin de limiter l'amorphisation du substrat.

La modélisation de l'oxydation doit s'intéresser à la cinétique d'oxydation elle-même mais doit également prendre en compte le couplage diffusion-oxydation et la ségrégation des impuretés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> [37].

La dualité performance électrique-densité d'intégration motive actuellement des études approfondies sur les mécanismes de base de l'oxydation du silicium :

. Cinétique en début de réaction d'oxydation afin de contrôler la croissance de couches diélectriques très fines imposées par le micro-dimensionnement.

. Ecoulement et croissance de la silice dans des structures bi-dimensionnelles afin d'améliorer les topologies des oxydes de champ et d'augmenter ainsi la densité d'intégration et le contrôle des largeurs des canaux étroits des transistors M.O.S..

### 3.1. Généralités

Un processus d'oxydation est technologiquement défini par des paramètres physiques - température, durée, pression - ou physico-chimiques - type d'oxydation, ambiance.

Ces différents paramètres sont résumés en figure II.34. dans laquelle leurs gammes de variation sont précisées et ce, à titre indicatif.

Oxydation →	[	. Durée	: qlq minutes	→	qlq heures
		. Température	: 600° C	→	1250° C
		. Pression	: 1 at	→	20 at
		. Ambiance	: (a) - sèche		Si + O <sub>2</sub> → SiO <sub>2</sub>
			(b) - humide		Si + 2H <sub>2</sub> O → SiO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub>
	(c) - vapeur		(a) + (b)		
	(d) - chlor e		(a) + HCl		

Figure II.34. : Types d'oxydation

Pour des raisons de cinétique rapide, les oxydes épais sont obtenus par oxydation humide, tandis que les oxydes de grille sont plutôt produits par oxydation sèche, afin de garantir une bonne permittivité diélectrique et sous ambiance chlorée pour passiver au maximum les charges en présence. Comme toute opération haute-température induit une diffusion des impuretés présentes, les développements VLSI imposent des opérations sous forte pression pour accélérer les vitesses d'oxydation et donc diminuer ces cycles thermiques.

La croissance d'oxyde de silicium s'effectue en consommant le silicium présent à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. La figure II.35. schématise l'aspect volumétrique de cette réaction.

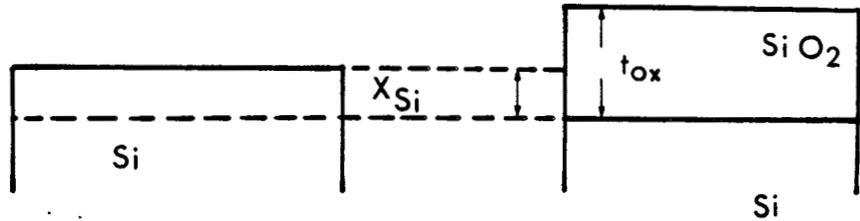


Figure II.35. : Schématisation de l'aspect volumétrique de la réaction oxydation du silicium

Soient  $N_{SiO_2}$  la concentration en silicium dans la silice et  $N_{Si}$  la densité atomique du silicium, la conservation impose :

$$N_{Si} x_{Si} = N_{SiO_2} t_{ox} \quad (II.94.a)$$

$$N_{Si} = 5.10^{22} \text{ cm}^{-3}, \quad N_{SiO_2} = 2.2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \quad (II.94.b)$$

le rapport volumétrique,  $\alpha$ , de la réaction est donné par :

$$\alpha = \frac{x_{Si}}{t_{ox}} = \frac{N_{SiO_2}}{N_{Si}} = 0,44 \quad (II.94.c)$$

Ce rapport volumétrique, ainsi que la différence de distance interatomique dans le silicium et la silice vont contribuer à la génération d'atomes de silicium interstitiels, qui, diffusant dans le substrat, perturberont la migration des impuretés.

### 3.2. Cinétique d'oxydation

#### 3.2.a) Modèle de base

. Modèle de Deal et Grove [38].

Validé dans de nombreux cas technologiques, le modèle de Deal et Grove [38] permet, dans une formulation unique, le calcul de cinétique d'oxydation tout en tenant compte des divers paramètres présentés en figure II.34. Ce modèle considère que toute réaction d'oxydation est régie par trois mécanismes physico-chimiques de base :

- . La migration des agents oxydants du gaz porteur vers la silice.
- . La diffusion de ces agents oxydants dans la silice.
- . La réaction d'oxydation

La cinétique de croissance d'oxyde est déterminée par une condition d'équilibre entre ces trois phénomènes.

Le modèle mathématique est illustré en figure II.36., les différents flux de l'espèce oxydante ( $O_2 - H_2O$ ) y ont été précisés, aux interfaces et dans l'oxyde, dans une formulation au premier ordre.

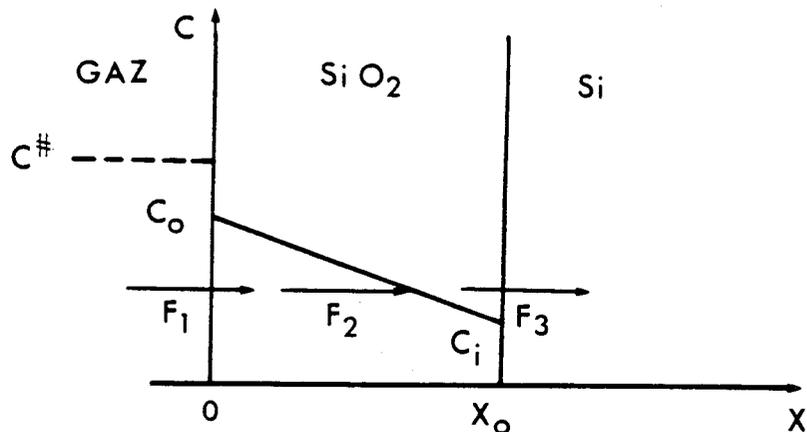


Figure II.36. : Modèle pour l'oxydation du silicium

Source : Réf. [38]

La condition d'équilibre dynamique sur cette structure impose l'égalité des trois différents flux mentionnés sur la figure II.38. :

$$F = F_1 = F_2 = F_3 \quad (\text{II.95.})$$

Le flux à l'interface Gaz / SiO<sub>2</sub>, F<sub>1</sub>, correspondant à une migration de matière entre deux milieux différents, il est donc donné par :

$$F_1 = h (C^{\#} - C_o) \quad (\text{II.96.})$$

où C<sup>#</sup> et C<sub>o</sub> sont respectivement la concentration en agent oxydant dans le gaz et sa limite de solubilité dans l'oxyde. C<sup>#</sup> est, de plus, reliée à la pression partielle, P, régnant dans l'enceinte par la relation de Henry :

$$C^{\#} = K \cdot P \quad (\text{II.97.})$$

Le flux dans l'oxyde, F<sub>2</sub>, est régi par la diffusion des espèces oxydantes, il s'exprime selon la première loi de Fick :

$$F_2 = D_{\text{eff}} \frac{C_o - C_i}{X_o} \quad (\text{II.98.})$$

ou D<sub>eff</sub> est le coefficient de diffusion de l'agent oxydant dans l'oxyde, C<sub>i</sub>, sa concentration à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> et X<sub>o</sub> l'épaisseur d'oxyde.

Le flux de réaction F<sub>3</sub> est pris proportionnel à C<sub>i</sub> :

$$F_3 = k_s C_i \quad (\text{II.99.})$$

ou k<sub>s</sub> est la constante de cinétique d'oxydation.

La résolution du système (II.95.) permet d'exprimer le flux en fonction de la concentration dans la phase gazeuse, C<sup>#</sup>, :

$$F = \frac{k_s C^{\#}}{1 + \frac{k_s}{h} + \frac{k_s X_o}{D_{\text{eff}}}} \quad (\text{II.100.})$$

Si N<sub>1</sub> est défini comme étant le nombre de molécules nécessaires à la formation d'un volume unitaire d'oxyde, la loi de croissance est décrite par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dX_o}{dt} = \frac{F}{N_1} = \frac{k_s C^{\#} / N_1}{1 + \frac{k_s}{h} + \frac{k_s X_o}{D_{eff}}} \quad (\text{II.101.})$$

En prenant comme condition initiale :

$$t = 0 \quad X_o = X_i$$

où  $X_i$  est soit l'épaisseur d'oxyde existant, soit l'épaisseur minimale nécessaire à l'établissement de l'équilibre thermodynamique, l'intégration de l'équation II.100. conduit à la loi de croissance.

$$X_o^2 + A X_o = B (t + \tau) \quad (\text{II.102.a})$$

dans laquelle

$$A = 2 D_{eff} \left( \frac{1}{k_s} + \frac{1}{h} \right) \quad (\text{II.102.b})$$

$$B = 2 D_{eff} C^{\#} / N_1 \quad (\text{II.102.c})$$

$$\text{et } \tau = \frac{X_i^2 + A X_i}{B} \quad (\text{II.102.d})$$

La variation temporelle de l'épaisseur d'oxyde est obtenue par la résolution de l'équation II.102.a :

$$X_o(t) = -\frac{A}{2} \sqrt{\frac{A^2}{4} + B(t + \tau)} + B(t + \tau) \quad (\text{II.103.})$$

Cette équation est intégrée dans plusieurs programmes de simulation [3, 31, 39]. Elle y est formulée, pour de simples raisons numériques, sous sa forme discrète par rapport au temps.

$$\Delta X_o = -\frac{A}{2} + \sqrt{\frac{A^2}{4} + X_o^2(t - \Delta T) + A \cdot X_o(t - \Delta T) + B \cdot t - X_o(t - \Delta T)}, \quad (\text{II.104.})$$

$\Delta X_o$  étant l'épaisseur d'oxyde formée durant l'intervalle de temps  $[t - \Delta T, t]$ .

Les équations II.102. , II.103. , II.104. permettent le calcul d'épaisseurs d'oxyde formées durant les cycles d'oxydation, les coefficients A et B étant déterminés en fonction des paramètres expérimentaux de ces cycles.

. Comportement linéaire / parabolique

Il est intéressant de considérer deux applications limites de la loi de croissance II.103. :

- Pour les longs cycles thermiques, la durée du procédé permet les deux approximations :

$$t \gg \frac{A^2}{4B} ; \quad t \gg \tau, \quad (\text{II.105.})$$

la loi de croissance présente alors un comportement parabolique :

$$X_o = \sqrt{B \cdot t} \quad (\text{II.106.})$$

dans lequel B s'identifie à la constante parabolique du modèle

- De même, pour les oxydations fines, les approximations suivantes peuvent être établies :

$$t \ll \frac{A^2}{4B} ; \quad \tau \ll \frac{A^2}{4B} \quad (\text{II.107.})$$

un développement au premier ordre de l'équation II.103. démontre un comportement linéaire.

$$X_o = \frac{B}{A} \cdot (t + \tau) \quad (\text{II.108.})$$

le terme B/A étant la constante linéaire du modèle.

La corrélation entre constante linéaire et parabolique et les spécifications technologiques fait l'objet des deux points suivants.

. Constante parabolique

$$B = 2 D_{\text{eff}} \frac{C^{\#}}{N_1}$$

(II.109.)

Proportionnalité en fonction de la pression

Variation de type Arrhénius en température

la constante parabolique est définie par :

- Une dépendance de type Arrhénius en fonction de la température due au coefficient de silicium ( $D_{\text{eff}}$ )
- Une relation de proportionnalité en fonction de la pression (équation II.97.) due à la limite de solubilité ( $C^{\#}$ ).

La variation de cinétique entre l'oxydation sèche et l'oxydation humide est explicitée, dans l'équation II.109. , par la spécificité du type d'oxydant (respectivement  $O_2$  et  $H_2O$ ) qui intervient dans la limite de solubilité  $C^{\#}$ , la diffusivité  $D_{\text{eff}}$  et dans  $N_1$ . De plus, dépendant essentiellement des phénomènes propres à la silice, la constante parabolique est peu sensible à l'état physico-chimique de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. Les effets de la température et de la pression sur la constante parabolique sont illustrés en figure II.37. et II.38.

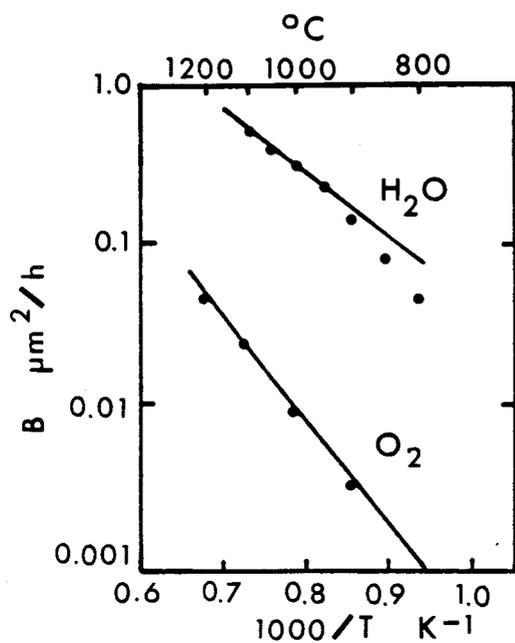


Figure II.37.  
Variation de la constante parabolique en fonction de la température sous ambiance sèche et humide

Source : Réf. [37]

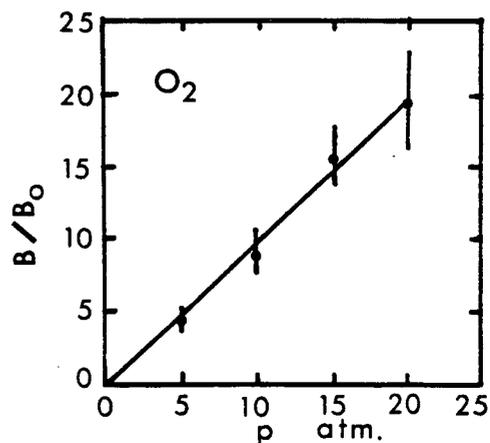


Figure II.38.  
Variation de la constante parabolique en fonction de la pression sous ambiance sèche

Source : Réf. [37]

Afin de synthétiser ces deux dépendances, la constante parabolique sera déterminée par :

$$B = p \cdot B_0 \exp \left( - \frac{E_B}{kT} \right) \quad (\text{II.110.})$$

ou p est la pression en atmosphère, B<sub>0</sub> et E<sub>B</sub> étant respectivement le terme

préexponentiel et l'énergie d'activation.

. Constante linéaire

$$\frac{B}{A} = \frac{C^{\#} / N_1}{1/k_s + 1/h} \approx k_s C^{\#} / N_1 \quad (\text{II.111.})$$

Proportionnalité en fonction de la pression

Variation de type Arrhénius en température

La constante linéaire est principalement régie par :

- Une dépendance de type Arrhénius en température due à la constante de cinétique  $k_s$
- Un comportement quasi-linéaire en fonction de la pression.

Une approche au premier ordre permet d'exprimer la constante linéaire sous la forme :

$$B/A = p \cdot (B/A)_0 \exp\left(-\frac{E_{B/A}}{kT}\right) \quad (\text{II.112.})$$

dans laquelle  $p$  est la pression en atmosphère,  $(B/A)_0$  et  $E_{B/A}$  sont respectivement le terme pré-exponentiel et l'énergie d'activation.

Les figures II.39. et II.40. illustrent expérimentalement l'effet de la température et de la pression sur la constante linéaire. Les écarts de cinétique entre oxydation sèche et humide sont dus aux limites de solubilité différentes des agents oxydants respectifs, la sensibilité à l'orientation étant justifiée par le rôle de la constante de réaction  $k_s$ .

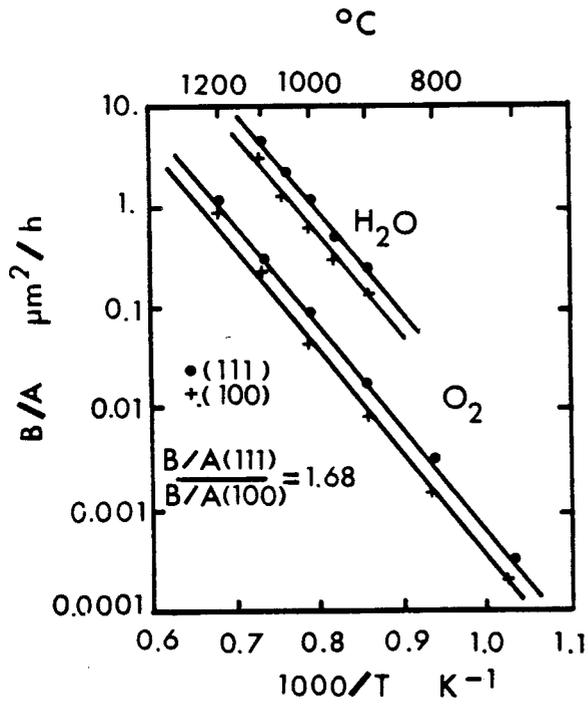


Figure II.39.  
Variation de la constante linéaire en fonction de la température pour les orientations  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  sous ambiance sèche et humide.

Source : Réf. [37]

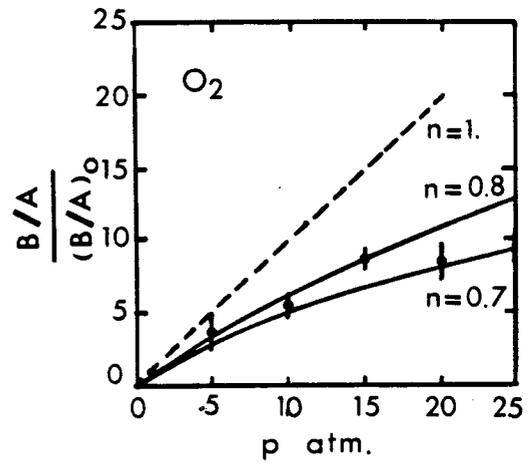


Figure II.40.  
Influence de la pression sur la constante linéaire pour les oxydations sèches

Source : Réf. [37]

. Modèle de Deal et Grove - Récapitulatif -

$$. X_o(t) = -\frac{A}{2} + \sqrt{\frac{A^2}{4} + B(t + \tau)}$$

$$. \tau = \frac{X_i^2 + AX_i}{B}$$

$$. B = p \cdot B_o \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right)$$

$$. \frac{B}{A} = p \left(\frac{B}{A}\right)_o \exp\left(-\frac{E_{B/A}}{kT}\right)$$

	$B_o$ $\text{Cm}^2 \text{ s}^{-1}$	$E_B$ eV	$\left(\frac{B}{A}\right)_o$ $\text{Cm s}^{-1}$	$E_{B/A}$ eV	$X_i$ Cm
$\text{H}_2\text{O}$	<100>	$1.071 \cdot 10^{-9}$	0.78	2.700	0
	<111>	$1.071 \cdot 10^{-9}$	0.78	4.516	0
$\text{O}_2$	<100>	$2.145 \cdot 10^{-9}$	1.23	2.00	$200 \cdot 10^{-8}$
	<111>	$2.145 \cdot 10^{-9}$	1.23	0.173	$200 \cdot 10^{-8}$

Figure II.41. Constantes numériques du modèle de Deal et Grove [3]

### 3.2.b) Modèle généralisé

Le modèle au premier ordre, résumé en figure II.41., se révèle suffisant pour la détermination de cinétiques d'oxydation relevant de motifs technologiques à faible et moyenne intégration.

Pour des applications de types V.L.S.I. des effets secondaires, qui jusqu'ici pouvaient être négligés, doivent être pris en compte. Ceci s'explique par le fait que les oxydes sont de plus en plus minces, et que leur cinétique rapide de croissance est affectée notamment par les fortes concentrations des zones dopées, par les hautes pressions partielles de gaz oxydant et par l'addition d'agents chlorés nécessaires à la passivation des charges mobiles. Pour compléter le modèle de Deal-Grove [38], en introduisant ces multiples effets, il suffit de constater que la constante parabolique est affectée par tout phénomène altérant l'état physico-chimique de la silice, la constante linéaire étant, quand à elle, sensible aux paramètres modifiant la réaction d'oxydation.

Un modèle généralisé est proposé dans le programme SUPREM III [40], dans lequel chaque paramètre technologique influant est simulé par un facteur multiplicatif intervenant dans l'expression des constantes linéaire et parabolique :

$$B = B_i [p] \cdot [1 + \delta C_T^q] [\epsilon] \quad (\text{II.113.})$$

$\uparrow$  valeur intrinsèque       $\uparrow$  dopage Si O<sub>2</sub>       $\downarrow$  Role HCl  
 $\uparrow$  pression

$$B/A = (B/A)_i \cdot [P^n] \cdot [1 + \gamma ([V_n^T] - 1)] \cdot [\eta] \cdot [\alpha] \cdot [1 + Ke^{-X/L}]$$

$\uparrow$  valeur in-       $\uparrow$  Pression       $\uparrow$  dopage       $\uparrow$  Role       $\uparrow$  orien-       $\uparrow$  début de  
 trinsèque           substrat      HCl      tation      réaction

(II.114.)

. Valeurs intrinsèques

Les valeurs intrinsèques sont exprimées sous forme de loi d'Arrhénius :

$$B_i = C_1 \exp \left( - \frac{E_1}{kT} \right) \quad (\text{II.115.a})$$

$$(B/A)_i = C_2 \exp \left( - \frac{E_2}{kT} \right) \quad (\text{II.115.b})$$

Pour les oxydations sèches ( $O_2$ ), les termes préexponentiels et les énergies d'activation des expressions II.115. restent constants sur la gamme de température permettant l'oxydation ( $800^\circ \text{C}$ ,  $1100^\circ \text{C}$ ) [41]. Dans le cas d'oxydation humide, les énergies d'activation des deux constantes présentent un seuil vers  $900^\circ \text{C}$ , comme illustré en figure II.42. [42]. Ce phénomène est attribué a une modification des paramètres visco-élastiques de la silice [40] qui affecte la diffusion des agents oxydants et la cinétique de réaction.

La figure II.43. regroupe les valeurs numériques permettant le calcul des constantes linéaire et parabolique en ambiance sèche et humide.

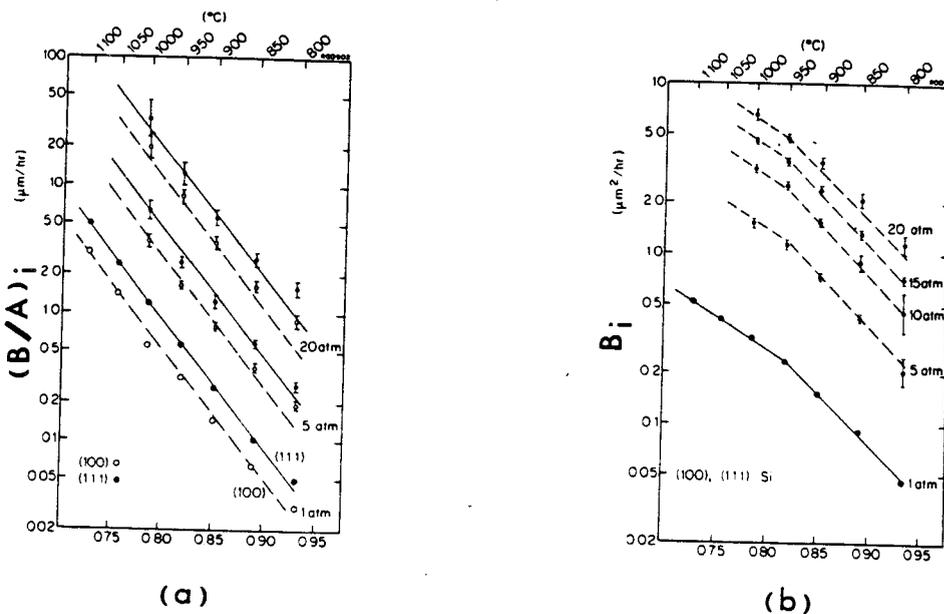


Figure II.42. Variation des constantes linéaires  $(B/A)_i$  (a) et parabolique  $B_i$  (b) en fonction de la température pour divers pressions d'oxydation humide.

Source : Réf. [40]

		$O_2$	$H_2O$
$B_i$	$C_1 = 2.14 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ $E_1 = 1.23 \text{ eV}$	$T < 950^\circ\text{C}$	$C_1 = 4.72 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ $E_1 = 1.17 \text{ eV}$
		$T > 950^\circ\text{C}$	$C_1 = 1.17 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ $E_1 = 0.78 \text{ eV}$
$(B/A)_i$	$C_2 = 1.73 \cdot 10^{-1} \text{ cm s}^{-1}$ $E_2 = 2.0 \text{ eV}$	$T < 900^\circ\text{C}$	$C_2 = 5.75 \cdot 10^{-2} \text{ cm s}^{-1}$ $E_2 = 1.60 \text{ eV}$
		$T > 900^\circ\text{C}$	$C_2 = 4.92 \text{ cm s}^{-1}$ $E_2 = 2.05 \text{ eV}$

Figure II.43. Valeurs numériques permettant le calcul des constantes  $B_i$  et  $(B/A)_i$  selon l'équation II.115.

Source : Réf. [40]

. Influence de la pression

Pour les oxydations humides, les constantes linéaires et paraboliques présentent un comportement linéaire en fonction de la pression partielle d' H<sub>2</sub>O [42], comme l'indique la figure II.42. Dans le cas d'oxydation sèche, la dépendance de B reste linéaire, figure II.37., alors que B/A montre un régime sublinéaire [43], figure II.40. Cet effet est modélisé par la valeur de l'exposant, n, dans l'équation II.114., valeur qui est prise conformément au tableau de la figure II.43.

	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
n	0,75	1

Figure II.44. Valeurs de l'exposant de la pression (atm) dans le calcul de la constante linéaire, équation II.114.

. Influence du dopage

Le dopage du substrat modifie à la fois la cinétique de réaction d'oxydation et la diffusion des espèces oxydantes dans la silice. Dans le cas de silicium extrinsèque, la concentration des divers types de lacunes chargées varie avec le niveau de dopage par le biais de la statistique de Boltzmann. Cette variation affecte la cinétique de réaction, [37], et l'effet correspondant peut-être modélisé par un terme multiplicatif de la constante linéaire :

$$1 + \gamma ([V_n^T] - 1) . \quad (II.116.)$$

Dans l'expression II.116. ,  $\gamma$  est un paramètre déterminé expérimentalement, [44, 45]

$$\gamma = 2.62 \cdot 10^3 \exp \left[ - \frac{3.10 \text{ eV}}{kT} \right] \quad (II.117.)$$

et  $[V_n^T]$ , la concentration normalisée totale de lacunes à l'interface, est donnée par :

$$[V_n^T] = \frac{1 + C^+ \left(\frac{n_i}{n}\right) + C^- \left(\frac{n}{n_i}\right) + C^{\bar{}} \left(\frac{n^2}{n_i}\right)}{1 + C^+ + C^- + C^{\bar{}}} \quad (\text{II.118.a})$$

où  $C^+ = \exp [(E^+ - E_i) / kT]$  (II.118.b)

$$C^- = \exp [(E_i - E^-) / kT] \quad (\text{II.118.c})$$

$$C^{\bar{}} = \exp [(2 E_i - E^- - E^{\bar{}}) / kT] \quad , \quad (\text{II.118.d})$$

$E_i$ ,  $E^+$ ,  $E^-$  et  $E^{\bar{}}$  étant les énergies liées au niveau de Fermi intrinsèque et aux 3 types de lacunes. Ce modèle confronté à l'expérimentation est illustré en figure II.44. [44, 45] et montre un net accroissement de la constante linéaire avec le dopage du substrat.

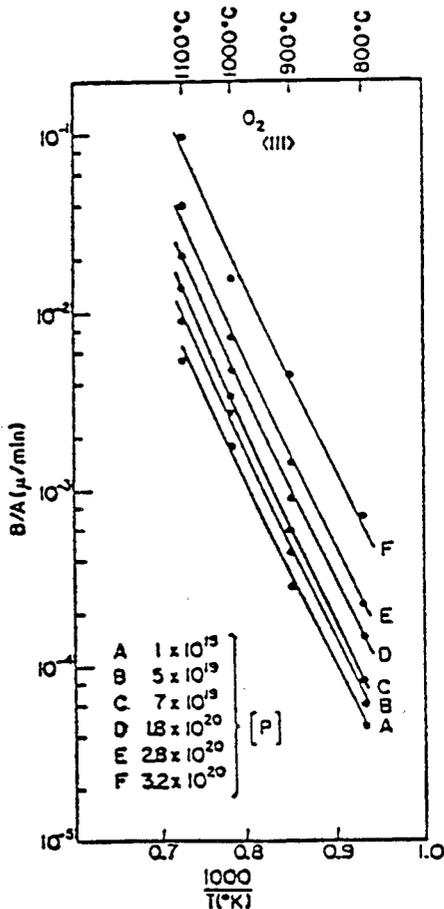


Figure II.45. Variation de la constante B/A avec la température pour divers dopages de substrat. (phosphore)

Source : Réf. [37]

La constante parabolique est également influencée par les effets de dopage pour les substrats de type n. Le mécanisme de ségrégation des impuretés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> introduit une dose partielle de dopant dans la silice qui facilite la diffusion des espèces oxydante O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O. Un facteur multiplicateur de la constante parabolique est proposé [44, 3] afin de simuler cette accélération de cinétique :

$$[1 + \delta C_T^q] \quad (\text{II.119.})$$

Dans la relation II.119. , C<sub>T</sub> est la concentration totale des donneurs dans le silicium à l'interface (cm<sup>-3</sup>) et [44] :

$$q = 0.22 \quad (\text{II.120.a})$$

$$\delta = 9.63 \exp \frac{2.85 \text{ eV}}{kT} \quad (\text{II.120.b})$$

#### . Rôle des agents chlorés

L'addition d'agents chlorés est également un paramètre qui modifie les cinétiques d'oxydation. Bien qu'un modèle complet n'ait pas encore été développé, les effets de ces agents peuvent être modélisés par les facteurs [η] et [ε] dans les équations II.113 et II.114. Vu la complexité du mécanisme d'oxydation par les espèces H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, HCl et la diversité possible des gaz chlorés oxydants, ces facteurs doivent être déterminés en fonction de l'environnement technologique.

Sous ambiance sèche les constantes linéaire et parabolique sont augmentées, les valeurs correspondantes de [η] et [ε] dépendant de la concentration de HCl dans le gaz oxydant et de la température [46]. [ε] est une fonction monotone croissante du pourcentage d'HCl tandis que l'accroissement de [η] présente une rapide saturation vers 1 - 2 % HCl [40].

Pour les oxydations humides, l'addition d'agents chlorés réduit les cinétiques d'oxydation. Cet effet est attribué à la dissolution des espèces oxydantes par HCl qui provoque une perte de pression partielle de H<sub>2</sub>O [40]. Les facteurs [ε, η] présentent alors une réduction qui est égale au pourcentage d'HCl dans le gaz oxydant [40].

. Rôle de l'orientation du silicium

L'orientation du substrat intervient directement dans la réaction d'oxydation et affecte donc la constante linéaire. Le rôle de l'orientation est contenu, pour les ambiances sèches et humides [41], dans le terme  $[\alpha]$  de l'équation II.144. qui est pris conformément au tableau de la figure II.45. [40] :

	<100>	<100>
$\alpha$	1	0.595

Figure II.46. Valeurs numériques du facteur  $\alpha$ , équation II.114., pour les orientations <111> et <100>.

Cet écart de cinétique est attribué à la différence de densité atomique que présentent les orientations <111> et <100>, orientation plus rapide pour <111> du à la plus forte densité atomique de ce plan cristallin. La validation expérimentale de ce modèle est présente en figure II.39. et II.42.a).

. Cinétique d'oxydation très mince

La croissance des fines couches d'oxyde ( $< 500 \text{ \AA}$ ) est régie par un mécanisme différent de celui proposé dans le modèle de Deal et Grove [37, 38]. Plusieurs modèles ont été proposés [37, 47] afin de justifier les cinétiques rapides intervenant en début de croissance en ambiance sèche. Bien qu'un modèle physique complet n'ait pas encore été établi, des résultats expérimentaux systématiques, figure II.46., permettent de simuler le régime rapide d'oxydation par un facteur multiplicatif de la constante linéaire, équation II.114. [40] :

$$[1 + K.e^{-X/L}] \quad . \quad (II.121.)$$

Dans l'expression II.121., X est l'épaisseur d'oxyde formée et L ( $\approx 70 \text{ \AA}$ ), quasiment indépendant de la température [40], représente



l'épaisseur caractéristique d'oxyde en dessous de laquelle l'effet d'accélération est dominant. Le facteur  $k$  est déterminé pour l'oxydation sèche à partir de la figure II.46. et représente une dépendance en fonction de la température avec une énergie d'activation de 2.35 eV pour le silicium  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$ . Pour les oxydations humides, cet effet est négligé ( $k = 0$ ).

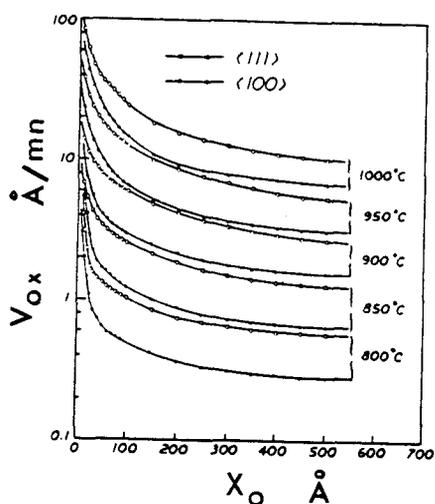


Figure II.46. Vitesse d'oxydation en début de croissance en fonction de la température.

Source : Réf. [36]

### 3.3. Forme bidimensionnelle d'oxyde

Les modèles de croissance d'oxyde, développés dans la partie précédente, ont été établis à partir d'une théorie unidimensionnelle dans laquelle le flux des espèces oxydantes est pris normal à la surface. Dans le cas d'oxydation localisée, cette dernière condition n'est plus vérifiée dans la zone de transition oxyde fin - oxyde épais. La détermination de la forme de l'oxyde nécessite la résolution bidimensionnelle des équations de Deal et Grove [38] dans la silice.

Plusieurs programmes spécialisés [47, 48, 49] sont en développement. Ces logiciels résolvent les équations de diffusion des espèces oxydantes et la cinétique bidimensionnelle de croissance en tenant compte des propriétés mécaniques de la silice et des contraintes induites par le nitrure de silicium. L'objectif de ces calculs est de déterminer les paramètres technologiques qui réduisent au minimum l'extension latérale des

oxydes de champ, facteur prédominant pour la densité d'intégration.

Cependant, dans le cas du procédé LOCOS la forme d'oxyde peut être correctement décrite par une loi analytique. La structure avant oxydation, représentée en figure II.47.(a), est réalisée par une lithrogravure de nitrure de silicium ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) sur une couche d'oxyde tampon. L'oxyde de champ est obtenu par croissance thermique, le nitrure préservant les zones actives, figure II.47.(b).

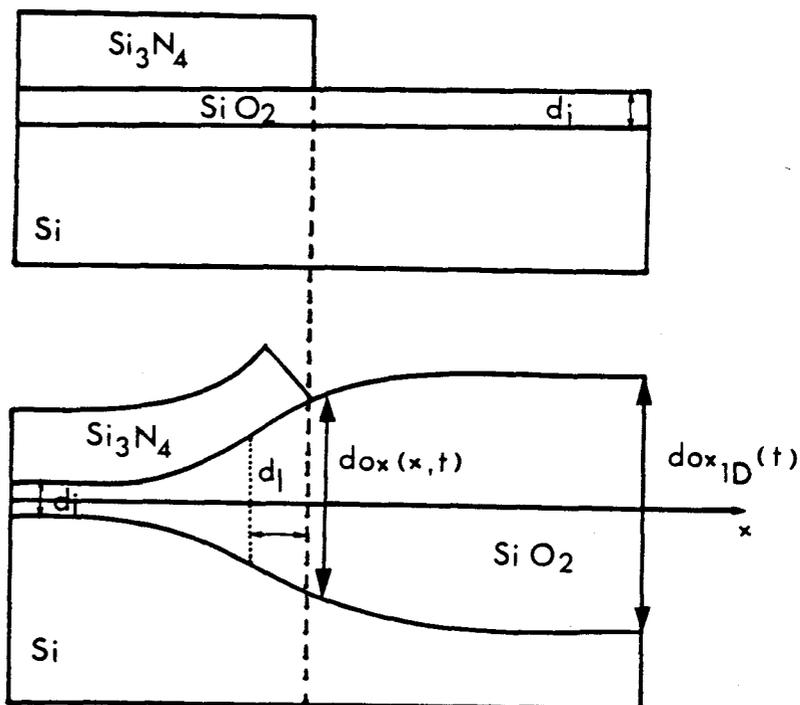


Figure II.47. Structure intervenant dans un procédé LOCOS  
(a) avant oxydation  
(b) après oxydation

La variation de l'épaisseur d'oxyde, en fonction de la coordonnée latérale peut être approximée par [50] :

$$\text{dox}(x, t) = d_i + (\text{dox}_{1D}(t) - d_i) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[ 1 + \operatorname{erf} \frac{\sqrt{2}}{\gamma} \frac{x + d_1}{\text{dox}_{1D}(t)} \right] \quad (\text{II.122.})$$

où  $d_i$  est l'épaisseur initiale de l'oxyde tampon et  $\text{dox}_{1D}(t)$  l'épaisseur d'oxyde à une dimension donnée par la loi linéaire parabolique généralisée.  $\gamma$  et  $d_1$  sont respectivement le facteur de forme et l'origine de la fonction erf par rapport à l'extrémité du masque initial de nitrure. Ces deux derniers paramètres sont déterminés en fonction des caractéristiques technologiques de l'oxydation [51, 52, 53]

#### 3.4. Ségrégation des impuretés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>

Lors d'une phase d'oxydation de silicium dopé d'impuretés de groupe III et V, la redistribution de ces impuretés dans le système Si/SiO<sub>2</sub> est gouvernée par l'égalité de leurs potentiels chimiques de part et d'autre de l'interface. Dans sa forme conventionnelle le potentiel chimique d'une impureté  $i$  dans le silicium s'écrit [31] :

$$\mu_i = \mu_i^\circ + kT \log \gamma_i C_i \quad (\text{II.123.})$$

où  $\mu_i^\circ$  est la partie indépendante de la concentration de ce potentiel,  $\gamma_i$  et  $C_i$  étant respectivement le coefficient d'activité et la concentration de l'impureté  $i$ . Le calcul du potentiel chimique dans SiO<sub>2</sub> et la condition d'égalité impose une discontinuité de concentration à l'interface régie par le coefficient de ségrégation  $m$  défini par :

$$m_i = \frac{C_i^{\text{Si}}}{C_i^{\text{SiO}_2}} \quad (\text{II.124.})$$

où  $C_{iSi}$  et  $C_{iSiO_2}$  sont respectivement la concentration de l'impureté  $i$  à l'interface coté silicium et coté silice.

Cette ségrégation est schématisée en figure II.48. dans les deux cas de figure :  $m < 1$  (bore) et  $m > 1$  (arsenic)

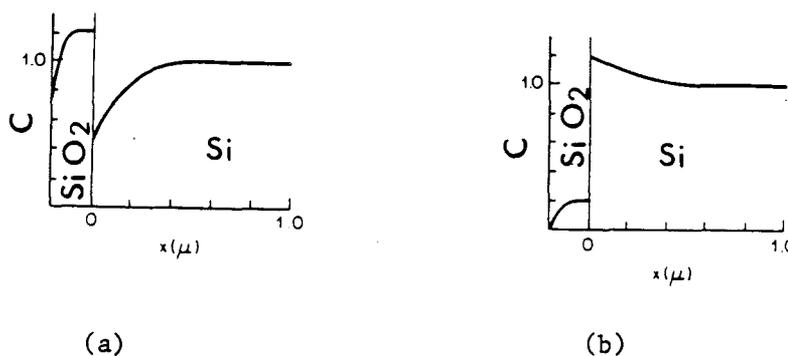


Figure II.48. Schématisation de l'effet de la ségrégation sur des profils, de concentration de bore (a) et d'arsenic (b)

Source : Réf. [7]

Vue la faible diffusivité des impuretés III.V. dans la silice, cette ségrégation crée soit une accumulation de dopants dans le silicium ( $m > 1$ ), soit un appauvrissement ( $m < 1$ ) et va donc affecter directement les résistivités superficielles de couches dopées.

#### . Bore

De nombreuses études expérimentales ont été menées sur la ségrégation du bore qui influence fortement la distribution des dopants dans les zones  $p^+$  de champs [4, 54]. Le coefficient de ségrégation se révèle dépendant essentiellement de la nature du gaz oxydant et présente une variation de type Arrhénius en température :

$$m = m_0 \exp \left( - \frac{E_m}{kT} \right) \quad (\text{II.125.})$$

Les valeurs du terme pré-exponentiel  $m_0$  et de l'énergie d'activation  $E_m$  sont reportées en figure II.49. , ces valeurs ont été déterminées directement à partir de caractérisations SIMS [54].

Ambiance oxydante	100 % O <sub>2</sub>		H <sub>2</sub> O	
Orientation du silicium	< 111 >	< 100 >	< 111 >	< 100 >
$m_0$	13.4	13.4	65.2	104.0
$E_m$ (eV)	0.33	0.33	- 0.66	- 0.66

Figure II.49. Valeurs numériques permettant le calcul du coefficient de ségrégation du bore.

#### . Arsenic et Phosphore

Peu de résultats expérimentaux ont été reportés sur le coefficient de ségrégation de l'arsenic et du phosphore [31] . Cependant, pour ces deux impuretés, l'interface Si/SiO<sub>2</sub> s'avère être une barrière à l'exodiffusion. Pour modéliser cet effet une valeur constante du coefficient de ségrégation :

$$m = 10 \quad (\text{II.126.})$$

est utilisée dans la plupart des simulateurs [3, 31, 39] et permet l'obtention correcte des profondeurs de jonction et des résistivités de couche n.

### 3.5. Diffusion sous ambiance oxydante

#### 3.5.a) Présentation

De nombreuses évidences expérimentales [4, 55, 59] ont montré que la diffusion des impuretés III.V. est affectée par le mécanisme d'oxydation. Pour le bore, le phosphore et l'arsenic les coefficients de diffusion sous ambiance oxydante sont augmentés par rapport aux valeurs déterminées en ambiance inerte. Il est généralement admis que cet effet est dû à une diffusion assistée par des atomes de silicium interstitiels générés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> par la réaction d'oxydation [60].

Le rôle des atomes de silicium interstitiels sur la diffusion des impuretés peut être synthétisé par le mécanisme de remplacement de Watkins [61], illustré en figure II.50. et régi par les deux relations suivantes



(II.127.)



La première phase du mécanisme de Watkins, équation II.127.(a) consiste en la création d'une impureté interstitielle,  $\text{I}_I$ , par échange entre un atome de silicium interstitiel,  $\text{Si}_I$ , et une impureté substitutionnelle  $\text{I}_S$ . La seconde phase qui induit la diffusion, équation II.127.(b) est le retour en site substitutionnel de l'impureté par recombinaison avec une lacune de silicium  $\text{V}_{\text{Si}}$ .

La modélisation de la redistribution des dopants sous ambiance oxydante nécessite la formulation du coefficient de diffusion en tenant compte des contributions respectives des mécanismes lacunaire et interstitiel.

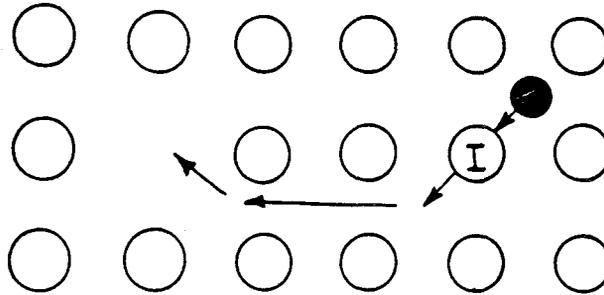


Figure II.50. Schématisation de la diffusion assistée par intersticiels - Mécanisme de Watkins

Source : Réf. [61]

### 3.5.b) Modèle [40]

Considérant que la diffusivité d'une impureté est due à la somme des mécanismes lacunaire et interstitiel, son coefficient de diffusion total,  $D_T$  s'écrit :

$$D_T = D^V + D^I \quad (\text{II.128.})$$

où  $D^V$  et  $D^I$  sont respectivement les contributions des deux mécanismes. Sous ambiance inerte et dans les cas de faible dopage, la contribution des intersticiels ne représente qu'une fraction,  $f_I$ , de la contribution lacunaire,  $D_i^V$ , le coefficient de diffusion intrinsèque,  $D_{\text{int}}$ , s'écrit alors :

$$D_{\text{int}} = D_i^V + f_I D_i^V \quad (\text{II.129.})$$

Dans les cas plus généraux de diffusion, l'accroissement de la concentration lacunaire entraîne une augmentation de  $D^V$  et de même, l'accroissement de la concentration de silicium interstitiel  $[\text{Si}_I]$  induit une augmentation de  $D^I$ . En reprenant la formulation de l'équation II.129., le coefficient de diffusion total s'exprime alors :

$$D_T = D^V + f_I D_i^V \frac{[Si_I]}{[Si_I]_i} \quad , \quad (II.130.)$$

$[Si_I]_i$  étant la concentration en intersticiels en condition intrinsèque et sous ambiance inerte.

Sous cette dernière forme, il apparait que le coefficient de diffusion total peut se mettre sous la forme :

$$D_T = D_N + \Delta D_{ox} \quad (II.131.)$$

$D_N$ , étant la diffusivité en ambiance inerte et  $\Delta D_{ox}$ , l'accroissement dû à l'oxydation. Les termes  $D_N$  et  $\Delta D_{ox}$  sont calculés respectivement en fonction de la concentration en intersticiels créés dans le substrat lors de recuits inerte ou oxydant.

. Ambiance inerte

La concentration en intersticiels est reliée à la concentration en lacune  $[Si_V]$  en considérant que ces deux espèces interagissent pour restituer un atome de silicium au site cristallin  $Si_s$



La relation d'action de masse ;

$$[Si_V] \cdot [Si_I] = K_{in} (T) \quad ,$$

dans laquelle  $K_{in}$  ne dépend que de la température donne :

$$\frac{[Si_I]}{[Si_I]_i} = \frac{[Si_V]_i}{[Si_V]} \quad (II.133.)$$

Le coefficient de diffusion en ambiance inerte,  $D_N$ , se déduit alors de l'équation II.133. :

$$D_N = D^V + f_I D_i^V \frac{[Si_v]_i}{[Si_v]} \quad (\text{II.134.})$$

Il est à noter que la contribution des interstitiels est alors négligeable dans ce cas,  $f_I$  ne représentant qu'une faible partie de la diffusivité globale en condition intrinsèque qui est encore réduite en régime extrinsèque. Ainsi l'approximation :

$$D_N = D^V \quad (\text{II.135.})$$

utilisée dans la première partie de ce chapitre et dans les publications qui y sont référées est largement justifiée.

. Ambiance oxydante

De nombreux relevés expérimentaux de profils de dopage après recuits oxydants [4, 55-59] démontrent qu'en se référant au modèle de l'équation II.130., l'excès de silicium interstitiel est proportionnel à  $(V_{ox})^n$ ,  $V_{ox}$  étant la vitesse d'oxydation et  $n$  une constante déterminée empiriquement. En considérant que cette sursaturation en silicium n'affecte pas la concentration lacunaire, l'accélération de la diffusion sous ambiance oxydante,  $\Delta D_{ox}$  est alors déterminée par :

$$\Delta D_{ox} = f_I D_i^V \frac{[Si_v]_i}{[Si_v]} \cdot \frac{K^*(T)}{\phi} V_{ox}^n \quad (\text{II.136.})$$

où  $\phi$  tient compte de l'orientation cristalline du substrat. Vue l'approximation qui a permis d'établir l'équation II.135., le rapport des concentrations lacunaires peut être défini à partir de la diffusivité intrinsèque  $D_{int}$ , et de la diffusivité en ambiance inerte  $D_N$  :

$$\frac{[Si_v]}{[Si]_i} = \frac{D_N}{D_{int}} \quad (\text{II.137})$$

Ainsi  $\Delta D_{ox}$  peut être approximé par :

$$\Delta D_{ox} = f_I D_{int} \cdot \frac{D_{int}}{D_N} \frac{K(T)}{\phi} V_{ox}^n \quad (II.138.)$$

A titre d'illustration, la figure II.51. présente l'évolution du coefficient de diffusion du bore avec la température, en ambiance inerte et en ambiance oxydante. La réduction de l'accélération de la diffusivité dans les cas de forts dopages, équation II.138., est présentée en figure II.52. pour le bore et le phosphore.

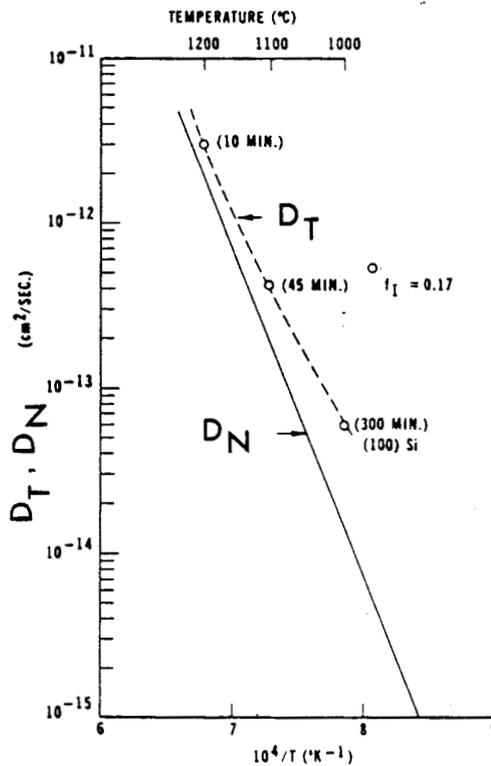


Figure II.51. Variation du coefficient de diffusion du bore avec la température sous ambiance inerte et sous oxydation sèche. Faible dopage, silicium <100>

Source : Réf. [61]

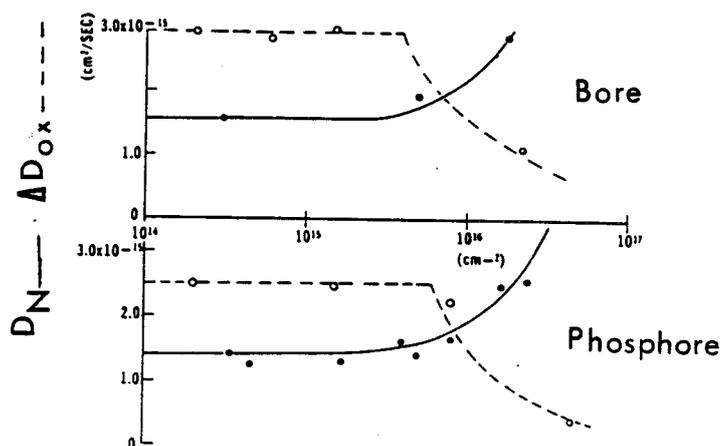


Figure II.52. Variation de  $D_N$  et de  $\Delta D_{ox}$  avec la dose de dopage  $N$  à  $100^\circ C$  en ambiance humide.

Source : Réf. [57]

3.5.c) Valeurs numériques des paramètres du modèle

Les paramètres de l'équation II.136. ont été déterminés à partir de profils expérimentaux obtenus en condition intrinsèque. Pour le bore et le phosphore, les valeurs numériques ont été ajustées par rapport aux mesures effectuées par Tanigushi [57], et pour l'arsenic, à partir des abaques développés par Ishikawa [59]. L'ensemble de ces valeurs numériques est synthétisée dans le tableau de la figure II.53.

$\Delta D_{ox}$ ( $cm^2 s^{-1}$ )	$f_I$	$K = K_o \exp \left( \frac{eK}{kT} \right)$		$n$	$\varphi$
$V_{ox}$ ( $cm s^{-1}$ )	[61]	$K_o$	$eK$		[62]
Bore	0.17	$3.27 \cdot 10^{-2}$	1.35 eV	0.3	<100>
Phosphore	0.12	$5.57 \cdot 10^{-3}$	1.59 eV	0.3	1
Arsenic	0.09	$1.72 \cdot 10^{-9}$	4.81 eV	1	<111> 2.7

Figure II.53. Valeurs numériques du modèle d'accélération de la diffusion sous ambiance oxydante.

Vus les paramètres proposés en figure II.53. et les valeurs des diffusivités intrinsèques, plusieurs remarques sont à noter :

- L'excès de diffusion est plus important pour le silicium orienté  $\langle 100 \rangle$  comparativement au silicium  $\langle 111 \rangle$
- Pour le bore et le phosphore, le terme additif de diffusion,  $\Delta D_{ox}$ , croît avec la température, contrairement à l'arsenic
- Pour ces trois impuretés, la contribution de ce terme additif sur la diffusivité totale décroît rapidement avec la température.

Enfin, il est à remarquer que le modèle reste empirique au niveau de la contribution des interstitiels dans la mesure où les paramètres décrivant leur taux de génération ( $K, n$ ) doivent prendre des valeurs différentes suivant le type d'impureté afin de reproduire les courbes expérimentales.

#### 4 - REDISTRIBUTION DES DOPANTS AUX INTERFACES

Un interface est ici défini comme étant la surface qui sépare deux milieux homogènes et où se situe une discontinuité des coefficients de diffusion des dopants. Dans les motifs technologiques pour lesquels les modèles précédents ont été développés, trois types d'interface existent :

- Gaz / Si
- Gaz / SiO<sub>2</sub>
- SiO<sub>2</sub> / Si

Durant les cycles thermiques, la redistribution des dopants à ces interfaces est gouvernée par une condition de flux. En se référant au système schématisé en figure II.54., le flux global d'impuretés peut se décomposer en deux contributions : la première,  $F_s$ , due à la discontinuité et la seconde,  $F_b$ , induite lorsque l'interface n'est pas stationnaire.

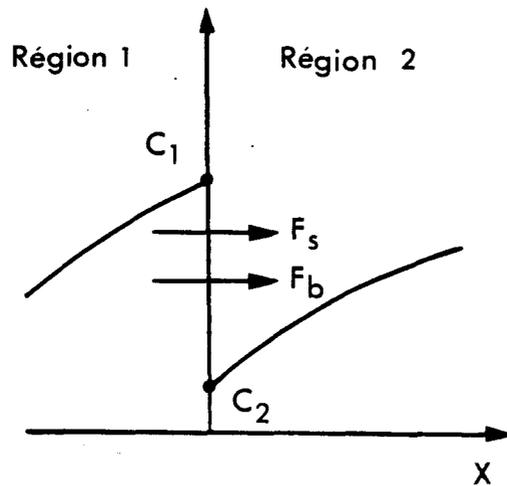


Figure II.54. Schématisation des conditions de flux interfaciaux. Les flux sont comptés positifs de la région 1 à la région 2

Généralement, le flux de dopant à travers un interface stationnaire est défini par un modèle de cinétique au premier ordre [3] :

$$F_s = h \left( C_1 - \frac{C_2}{m_{1-2}} \right) \quad (\text{II.139.})$$

$C_1$  et  $C_2$  sont respectivement les concentrations à l'interface côté région 1 et côté région 2,  $h$  est le coefficient de transfert de masse ( $\text{cm s}^{-1}$ ) et  $m_{1-2}$  est le coefficient de ségrégation à l'équilibre défini par :

$$m_{1-2} = \frac{C_2}{C_1} \Big|_{\text{équilibre}} \quad (\text{II.140.})$$

A partir de ces hypothèses, il est alors possible de définir quantitativement les transports de dopants survenant aux interfaces dans les diverses structures et cycles technologiques.

#### 4.1. Evaporation

L'évaporation d'un type de dopant survient lorsque la région 1 est un gaz inerte ( $N_2$ ) qui ne contient pas ce dopant en limite de saturation. Dans ce cas la condition de flux devient ( $C_1 = 0$  ;  $m_{1-2} = 1$ ) :

$$F_S = - h C_2 \quad (\text{II.141.})$$

où le coefficient de transport de masse,  $h$  s'identifie à un coefficient d'évaporation dépendant de la température. Cette condition s'applique à la fois pour les interfaces Gaz / Si et les interfaces Gaz / SiO<sub>2</sub>, et les mêmes coefficients d'évaporation peuvent être pris dans ces deux cas [3] :

$$h = h_0 \exp \left( - \frac{E_h}{kT} \right) . \quad (\text{II.142.})$$

Les valeurs du terme pré-exponentiel,  $h_0$ , de l'énergie d'activation,  $E_h$ , sont reportées dans le tableau de la figure II.55. pour le bore, le phosphore et l'arsenic.

	$h_0$ cm. S <sup>-1</sup>	$E_h$ eV
Bore	27.9	2.48
Phosphore	1.5	1.99
Arsenic	1.5	1.99

Figure II.55. Valeurs numériques des coefficients d'évaporation

#### 4.2. Prédépôt

Le prédépôt chimique est obtenu pour un interface gaz / silicium tel que le gaz contient un type de dopants en limite de saturation. Dans ce cas la condition de flux, pour l'impureté considérée, s'écrit ( $m_1 - 2 = 1$ ) :

$$F_S = h (C_S - C_2) \quad (\text{II.143.})$$

dans laquelle le coefficient de transfert de masse est imposé à une valeur de l'ordre de  $1.10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ ,  $C_S$  étant la limite de solubilité du dopant dans le silicium. Il est à noter que vu la valeur importante du coefficient de transfert de masse, la concentration en surface du silicium,  $C_2$ , se stabilise rapidement à la limite de solubilité  $C_S$ . Ceci justifie l'emploi courant de conditions de surface de type Dirichlet ( $C_2 = C_S$ ) pour la simulation de prédépôt. Tel est le cas par exemple dans la partie (1.1.c) de ce chapitre.

#### 4.3. Interface $\text{SiO}_2/\text{Si}$

Sous ambiance oxydante, le flux d'impuretés à l'interface  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  est obtenu en additionnant la contribution du flux de ségrégation,  $F_S$ , (équation II.139.) et celle du flux induit par le déplacement de l'interface,  $F_b$ . Ce dernier est proportionnel à la vitesse d'oxydation,  $V_{\text{ox}}$ , et tient compte du rapport volumique de la réaction d'oxydation,  $\alpha$  (figure II.35.) :

$$F_b = - V_{\text{ox}} (C_1 - \alpha C_2) \quad (\text{II.144.})$$

Cependant, toutes les caractérisations réalisées sur le système  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  en ambiance oxydante ont prouvé que la cinétique de ségrégation est plus rapide que celle de l'oxydation : ( $h \gg V_{\text{ox}}$ ) [3]. De ce fait, la condition d'équilibre de l'équation II.140. est satisfaite et le flux total à l'interface,  $F_T$ , s'écrit en fonction de la concentration à l'interface coté silicium,  $C_2$  :

$$F_T = F_S + F_b = - V_{\text{ox}} C_2 \left( \frac{1}{m_{1-2}} - \alpha \right). \quad (\text{II.145.})$$

Les valeurs numériques du coefficient de ségrégation ont été reportées dans le paragraphe 3.4.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES du Chapitre II

- 1) R.B. Fair, "Physics and chemistry of impurity diffusion and oxydation in silicium", in "Silicon Integrated Circuits", part. B, Ed. by D. KAHNG, Académic Press (1980).
- 2) D.A. Antoniadis, "Diffusion in silicon", NATO ASI on process and Devise simulation for MOS - VLSI Circuits, Urbino, Italy, July 12-23, 1982.
- 3) D.A. Antoniadis, S.E. Hansen, and R.W. Dutton, "SUPREM II - a program for I.C. process modeling and simulation", TR N° 5019-2, Stanford Electronics Laboraty, CA, 1978.
- 4) D.A. Antoniadis, A.G. Gonzales, and R.W. Dutton, "Boron in Near-Intrinsic <100> et <111> silicon under inert and oxidizing Ambients - Diff - fusion and Ségregation", J. Electrochem. Soc, Vol. 125, pp 813-819, 1978.
- 5) R.B. Fair and J.C.C. Tsai, "Quantitative model for diffusion of phosphorous in silicon and Emitter dip Effect", J. Electrochem. Soc., Vol 124, pp 1107-1118, 1977.
- 6) T.L. Chiu and H.N. Gosh, "A diffusion model for arsenic in silicon", IBM J. RES. DEV., Vol 15, pp 472 - 476, 1971.
- 7) A.B. Glaser, G.E. Subak-Sharpe, "Integrated circuit engineering", Addition-Westey publishing compagny, 1979.
- 8) D.P. Kennedy and R.R. O'Brien, "Analysis of the impurity atom distribution near the diffusion mask for a planar p-n junction", IBM J., Vol. 9, pp 179 - 186, 1965.
- 9) A.F.W. Willoughby, "Interaction between sequential dopant diffusions in silicon a review", J. Phys. D : Appl. Phys., Vol 10, pp 455, 1977.
- 10) F.J. Morin and S.P. Maita, Phys. Rev., Vol 96, p 28 (1954).

- 11) S.M. Hu and S. Schmidt, "Interactions in sequential diffusion processes in semi-conductors", J. Appl. Phys., Vol 39, pp 4272 - 4283, 1968.
- 12) W. Nuyts and R. Van Overstraeten, "Computer calculations of impurity profiles in silicon (I)", Phys. Sol. (a), Vol. 15, pp 329 - 341, 1973.
- 13) S.M. Hu, "General theory of impurity diffusion in semi-conductors via the vacancy mechanism", Phys. Rev., Vol 180, pp 773-784, 1969.
- 14) D.D. Warner and C.L. Wilson, "Two-dimensional concentration dependent diffusion", Bell Syst. Tech. J., Vol 59, pp 1 - 41, 1980.
- 15) R.B. Fair, "Quantitative theory of retarded base diffusion in silicon n-p-n structures with arsenic emitters", J. Appl. Phys, Vol 44, pp 283 - 291, 1973.
- 16) R.B. Fair and G.R. Weber, "Effect of complex formation on diffusion of arsenic in silicon", J. Appl. Phys., Vol 44, pp 273, 1973.
- 17) M.Y. Tsai, F.F. Morehead, J.E.E. Baglin, A.E. Michel, "Shallow junctions by high dose As implants in Si : experiments and modeling", J. Appl. Phys., Vol 51, pp 3230 - 3235, 1980.
- 18) E. Guerrero, H. Pötzl, R. Tielert, M. Grasserbauer and G. Stingeder, "Generalised model for the clustering of As dopants in Si", J. Electrochem. Soc., Vol 129, pp 1826 - 1831, 1982.
- 19) R. Tielert, "Two-dimensional numerical simulation of impurity redistribution in VLSI processes", IEEE Trans. Electron Devices, Vol ED-27, pp 1479 - 1483, 1980.
- 20) R.B. Fair, "The effect of strain-induced band-gap narrowing on high concentration phosphorus diffusion in silicium", J. Appl. Phys., Vol. 50, pp 860 - 868, 1979.

- 21) M. Kump and R. Dutton, "Two dimensional process simulation SUPRA", NATO ASI on process and device simulation for MOS - VLSI Circuits, Urbino, Italy 12-23, 1982.
- 22) D. Mathiot, J.C. Pfister, "Influence of non-equilibrium vacancies on the diffusion of phosphorus into silicon", J. Appl. Phys., Vol. 53, pp. 3053, 1982.
- 23) D. Mathiot, J.C. Pfister, "High concentration diffusion of P and Si : a percolation problem ? ", J. Phys., Vol. 43, pp. 2453, 1982.
- 24) D. Mathiot, "Contribution à l'étude de la diffusion des dopants dans le silicium. Prise en compte des défauts hors équilibre", Thèse présentée à l'Université scientifique et médicale de Grenoble, 1983.
- 25) E. Caquot and A. Marocco, "Numerical simulation with finite elements of non-linear impurity diffusion in silicon", 2nd Int. Conf. on Numerical Analysis of Semiconductor Devices and I.C.'s, Ireland, Dublin, June 17-19, 1981.
- 26) H. Ryssel and K. Hoffman, "Ion implantation", NATO ASI on process and device simulation for MOS - VLSI Circuits, Urbino, Italy, July 12-23, 1982.
- 27) J. Lindhard, M. Scharff, and H.E. Schiott, kgl. Danske Videnskab, selskab, Math. Phys. Medd., Vol. 33, p 1, 1963.
- 28) J.F. Gibbons, W.S. Johnson, and S.W. Mylroie, "Projected range statistics", Stroudsburg, PA : Dowdon, Hutchinson and Ross, 1975.
- 29) J.F. Gibbons, S. Mylroie, "Estimation of impurity profiles in ion-implanted amorphous targets using joined half-Gaussian distributions", Appl. Phys. Lett., Vol 22, pp 568 - 569, 1973.
- 30) W.K. Holker, "Implantation of boron in silicon", Philips Res. Reports, suppl. 8, 1975.

- 31) H. Ryssel, K. Habberger, K. Hoffman, G. Prinke, P. Dümcke and A. Sachs, "Simulation of doping processes", IEEE Trans. Electron devices, Vol. ED - 27, pp 1484 - 1492, 1980.
- 32) H. Ishiwara, S. Furukawa, J. Yamada, and M. Kawamura in : "Ion implantation in semi-conductors", (Ed. S. Namba) p 423. Plenum Press, New York, 1975.
- 33) S. Furukawa, H. Matsumara, and M. Ishiwara, "Theoretical consideration on lateral spread of implanted ions", Japan J. Appl. Phys., Vol 11, pp 134 - 142, 1972.
- 34) H. Runge : "Distribution of implanted ions under arbitrarily shaped mask edges", Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 39, pp 595 - 599, 1977.
- 35) J.P. Krusius, J. Nulman, J.V. Faricelli, and J. Frey, "Two-and three dimensional analytical solution for post-anneal implant profiles through arbitrary mask edges", IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED - 29, pp 435-444, 1982.
- 36) R.W. Dutton, "Modeling of the silicon integrated circuit design and manufacturing process", Summer course on Process and Device modeling, Heverlee, Belgium, June 7-10, 1983.
- 37) J.D. Plummer, B.E. Deal, "Thermal oxidation : kinetics, charges, physical models and interaction with other processes in V.L.S.I. Devices", NATO ASI on Process and Device Simulation for MOS - VLSI Circuits, Urbino, Italy, July 12 - 23, 1982.
- 38) B.E. Deal and A.S. Grove, "General relationship for the thermal oxidation of silicon", J. Appl. Phys., Vol 36, pp 3770-3778, 1965.
- 39) R. Tielert "Numerical simulation of impurity redistribution near mask edges", NATO ASI on Process and Device Simulation for MOS. VLSI Circuits, Urbino Italy, July, 12-23, 1982.

- 40) C.P. Ho, J.D. Plummer, S.E. Hansen et R.W. Dutton, "VLSI process modeling - SUPREM III", I.E.E.E. Trans. Electron. Devices, Vol ED-30, pp 1438-1453, 1983.
- 41) B.E. Deal, "Thermal oxidation kinetics of silicon in pyrogenic H<sub>2</sub>O and 5 % HCl/H<sub>2</sub>O mixtures", J. Electrochem. Soc., Vol 125, pp 576-579, 1978.
- 42) R.R. Razouk, L.N. Lie and B.E. Deal, " Kinetics of high pressure oxidation of silicon in pyrogenic steam", J. Electrochem. Soc, Vol 128, pp 2214-2220, 1981.
- 43) L.N. Lie, R.R. Razouk and B.E. Deal, "high pressure oxidation of silicon in dry oxygen", J. Electrochem. Soc., Vol. 129, pp 2828-2834, 1982.
- 44) C.P. Ho and J.D. Plummer, "Si/SiO<sub>2</sub> interface oxydation kinetics : a physical model for the influence of high substrate doping levels. I. Theory", J. Electrochem, Soc, Vol. 126, pp 1516-1522, 1979.
- 45) C.P. Ho and J.D. Plummer, "Si/SiO<sub>2</sub> interface oxidation kinetics : a physical model for the influence of high substrate doping levels. II Comparison with experiment and discussion", J. Electrochem. Soc., Vol 126, pp 1523-1530, 1979.
- 46) D.W. Hess and B.E. Deal, "kinetics of the thermal oxidation of silicon in O<sub>2</sub> / HCl mixtures", J. Electrochem. Soc., Vol. 124, p 735, 1977.
- 47) A. Poncet, "Finite element simulation of local oxidation of silicon", Summer course on VLSI process and device modeling, Heverlee, Belgium, June 7-10, 1983.
- 48) D. Chin, S.Y. Oh, S.M. Hu, R.W. Dutton and J.L. Moll, "Two-dimensional oxidation", I.E.E.E. Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp 744-749, 1983.

- 49) D. Chin, S.Y. Oh et R.W. Dutton, "A general solution method for two-dimensional non planar oxidation", I.E.E.E. Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp 993-998, 1983.
- 50) B.R. Penumalli, "Lateral oxidation et redistribution of dopant" 2nd Int. Conf. on Numérical Analysis of semiconductor Device and I.C. s, Dublin, Ireland, June 17-19, 1981.
- 51) T.C. Wu, W.T. Stacy et K.N. Ritz, "The influence of the LOCOS processing parameters on the shape of the bird's beak structure" J. Electrochem Soc., Vol. 130, pp 1563 - 1566, 1983.
- 52) H.K. Lee et R.W. Dutton, "Two-dimensional low concentration boron profiles : modeling and measurement", I.E.E.E. Trans. Electron. Devices, Vol. ED 28, pp 1136-1147, 1981.
- 53) E. Bassous, H.N. Yu et V. Maniscalco, "Topology of silicon structures with recessed SiO<sub>2</sub> ", J. Electrochem. Soc., Vol. 123, pp 1729-1737, 1976.
- 54) R.B. Fair et J.C.C. Tsai, "Theory and direct measurement of boron segregation in SiO<sub>2</sub> during dry, near dry and wet O<sub>2</sub> oxidation", J. Electrochem. Soc., Vol. 125, pp 2050-2058, 1978.
- 55) D.A. Antoniadis, A.M. Lin et R.W. Dutton, "Oxydation-enhanced diffusion of arsenic and phosphorus in near-intrinsic <100> silicon", Appl. Phys. Lett., Vol. 33, pp 1030-1033, 1978.
- 56) R. Francis et P.S. Dobson, "The effect of oxidation on the diffusion of phosphorus in silicon", J. Appl. Phys., Vol. 50, pp 280-284, 1979.
- 57) K. Tanigushi, K. Kurosawa et M. Kashiwagi, "oxydation-enhanced-diffusion of boron and phosphorus in <100> silicon", J. Electrochem. Soc., Vol. 127, pp 2243-2248, 1980.

- 58) A.M. Lin, D.A. Antoniadis et R.W. Dutton, "The oxidation rate dependence of oxidation-enhanced diffusion of boron and phosphorus in silicon", J. Electrochem. Soc., Vol. 128, pp 1132-1137, 1981.
- 59) Y. Ishikawa, Y. Sakina, H. Tanaka, S. Matsumoto et T. Nümi, "The enhanced diffusion of arsenic and phosphorus in silicon by thermal oxidation". J. Electrochem. Soc., Vol. 129, pp 644-648, 1982.
- 60) G.D. Watkins in "Radiation damage in semiconductors", p 97, Dunod, Paris, 1964.
- 61) R.B. Fair, "Oxidation, impurity diffusion, and defect growth in silicon- An Overview", J. Electrochem. Soc., Vol. 128, pp 1360-1368, 1981.
- 62) k. Tanigushi, M. Kashiwagi et H. Iwai, "Two dimensional computer simulation models for MOSLSI fabrication processes", I.E.E.E. Trans. Electron. Devices, Vol. ED-28, pp 574-580, 1981.

## - CHAPITRE III -

### MÉTHODES NUMÉRIQUES

#### RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE DIFFUSION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

##### 1 - REMARQUES PRELIMINAIRES

Ce chapitre présente les méthodes numériques qui ont été développées afin de calculer l'évolution de la distribution des dopants au cours des étapes technologiques, conformément aux modèles décrits précédemment. Hormis le calcul de profils implantés qui est purement analytique, la simulation des autres étapes technologiques implique la résolution des équations de diffusion dans un domaine fixe, pour les recuits inertes, ou dans un domaine évolutif, pour les oxydations.

La méthode des différences finies est la plus couramment utilisée pour résoudre ces équations de diffusion dans un domaine bidimensionnel. Plusieurs logiciels de simulation de technologie utilisant cette mé-

thode ont déjà été développés [1-5]. L'avantage essentiel des différences finies réside dans la souplesse de leur mise en oeuvre qui permet de bonnes performances sur le plan informatique (temps de calcul et espace mémoire) [6]. Par contre cette méthode est très restrictive quand à la forme de la structure simulée et impose l'utilisation de grilles d'espace régulières pour préserver ses performances.

Afin de s'affranchir de ces limitations spatiales, la méthode des éléments finis a été utilisée ici pour résoudre les équations de diffusion. Cette méthode numérique, initialement conçue pour le calcul de structures mécaniques [7], permet une description précise de la forme des surfaces et des interfaces présentes dans les motifs technologiques. De plus, elle permet une description topologique fine qui doit conduire à la résolution des équations dans des structures multicouches. Enfin, contrairement aux différences finies, cette méthode conserve les flux même sur des maillages grossiers d'espace [8, 9].

La discrétisation spatiale est assurée par des éléments triangulaires à six noeuds (P 2) et le système différentiel est obtenu par une approche de résidus pondérés de type Galerkin, les inconnues du problème étant les concentrations. L'intégration temporelle est résolue de manière incrémentale dans un schéma implicite incomplet. La première partie de ce chapitre traite de la formulation de l'équation de diffusion dans le formalisme de la méthode des éléments finis. La seconde précise la méthode de discrétisation temporelle de l'équation de diffusion ainsi que sa résolution. Enfin, la troisième partie présente les algorithmes qui ont été élaborés afin de simuler la redistribution des dopants en ambiance oxydante.

## 2 - FORMULATION DE L'EQUATION DE DIFFUSION DANS LE FORMALISME DE LA METHODE DES ELEMENTS FINIS.

### 2.1. Présentation, discrétisation spatiale et notation .

Le domaine silicium, dans lequel l'équation de diffusion est résolue est divisé en éléments triangulaires simples. Ces éléments sont reliés entre eux par les noeuds du maillage qui sont ici les sommets des triangles ainsi que les milieux de leurs côtés. La figure III.1. schématise cette discrétisation et illustre les notations utilisées qui sont définies comme suit :

- N : nombre de noeuds dans la structure
- NT : nombre d'éléments dans la structure
- i : indice de noeuds  $1 \leq i \leq N$
- j : indice de noeuds  $1 \leq j \leq N$
- k : indice d'éléments  $1 \leq k \leq NT$
- $\Omega_k$  : aire du triangle k
- $i_k$  : ensemble des noeuds i du triangle k
- $e_k$  : ensemble des éléments k ayant au moins un côté commun avec la frontière de la structure
- $\Gamma_k$  : ensemble des côtés du triangle k appartenant à  $e_k$  communs à la frontière
- $e_{kj}$  : ensemble des éléments k contenant le noeud j
- $e_{kij}$  : ensemble des éléments k contenant à la fois les noeuds i et j
- $e_{Kj}$  : ensemble des éléments k appartenant à  $e_K$  et contenant le noeud j frontière
- $e_{Kij}$  : ensemble des éléments k appartenant à  $e_K$  et contenant les noeuds frontière i et j
- $\Gamma_{kj}$  : côtés frontières contenant j d'un élément k appartenant à  $e_{Kj}$ .

$\Gamma_{kij}$  : côtés frontières contenant  $i$  et  $j$  d'un  
élément  $k$  appartenant à  $e_{Kij}$

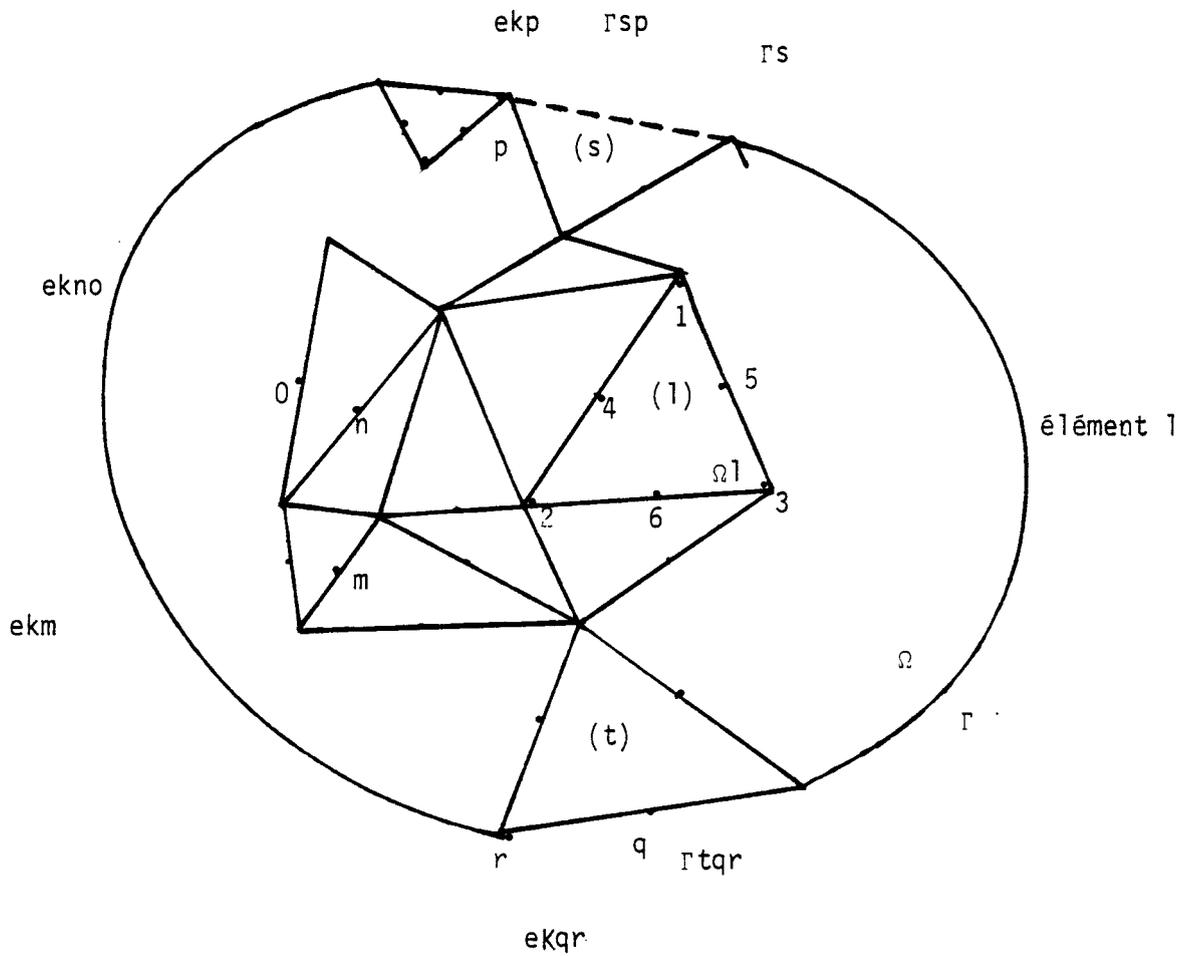
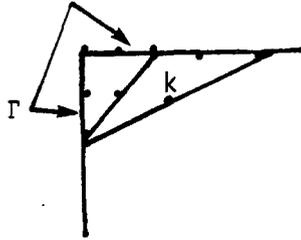


Figure III.1. Illustration de la décomposition en éléments  
simples et des notations utilisées

Remarque : Les notations ne s'appliquent pas à la topologie définie ci-dessous qui a été évitée dans ce travail.



En effet la configuration du triangle  $k$  (3 sommets frontières et 1 seule arête frontière) peut poser des problèmes de conditionnement d'éléments.

Cette méthode de discrétisation consiste à exprimer la valeur d'une variable en tout point d'un triangle sous forme d'une combinaison linéaire des valeurs aux noeuds de ce triangle. En se référant à la figure III.1., la valeur en tout point de l'élément  $l$  ne dépendra que des valeurs aux noeuds (1 - 6). Les inconnues du problème deviennent donc, pour l'équation de diffusion, les valeurs des concentrations aux noeuds du domaine. Les coefficients de la combinaison linéaire sont donnés par six fonctions de forme propres à chaque élément et qui ne dépendent que de la position du point de calcul dans l'élément. Ainsi la concentration en un point  $(x, y)$  de l'élément  $l$  est donnée par :

$$C(x, y) = \sum_{i=1}^6 N_{il}(x, y) \cdot C_i \quad , \quad (\text{III.1.})$$

où  $N_{il}$  est la fonction de forme du  $i^{\text{eme}}$  noeud de l'élément  $l$  tandis que  $C_i$  est la concentration nodale en  $i$ . D'une manière plus générale, la concentration en un point  $(x, y)$  de l'élément  $k$  s'exprime par :

$$C(x, y) = \sum_{i \in k} N_{ik}(x, y) \cdot C_i \quad , \quad (\text{III.2.a})$$

qui sera écrit, conformément aux notations précédentes :

$$C = \sum_{ik} N_{ik} \cdot C_i \quad (\text{III.2.b})$$

De même les dérivées spatiales des concentrations sont obtenues par combinaison linéaire des dérivées des fonctions de forme :

$$\frac{\partial C}{\partial x ; y} (x, y) = \sum_{ik} \frac{\partial N_{ik}}{\partial x ; y} (x, y) \cdot C_i \quad (\text{III.3.a})$$

soit :

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \sum_{ik} N_{ikx} \cdot C_i \quad , \quad (\text{III.3.b})$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \sum_{ik} N_{iky} \cdot C_i \quad (\text{III.3.c})$$

Les dérivées temporelles, quant à elles, s'écrivent :

$$\frac{\partial C}{\partial t} (x, y) = \sum_{ik} N_{ik} \cdot \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (\text{III.4.a})$$

que l'on note :

$$\dot{C} = \sum_{ik} N_{ik} \cdot \dot{C}_i \quad (\text{III.4.b})$$

Comme précisé dans la partie suivante, les fonctions de forme  $N_{ik}$  ne prennent de valeurs non nulles que dans l'élément  $k$ . Les concentrations ainsi que leurs dérivées sont exprimées indépendamment du reste de la structure. Ceci lève toute limitation quant à la géométrie du domaine simulé ainsi qu'à son maillage. Cette possibilité est la caractéristique essentielle de la méthode des éléments finis.

### 2.2. Fonctions de forme

La figure III.2. représente un triangle  $k$  dans le repère global. La numérotation des noeuds est ici référencée de manière locale et donne la topologie de cet élément.

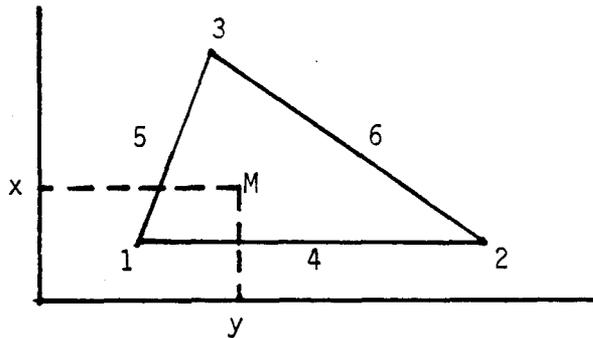


Figure III.2. Numérotation locale des noeuds du triangle  $K$ .

Conformément à la définition des fonctions de forme, la concentration au point  $M(x, y)$  est donnée par :

$$C(x, y) = N1k(x, y) \cdot C1 + N2k(x, y) \cdot C2 + \dots + N6k(x, y) \cdot C6 \quad (\text{III.5.})$$

#### 2.2.a) Système de coordonnées locales

Afin de déterminer aisément l'expression analytique des fonctions de forme un système de coordonnées locales triangulaires, interne à l'élément, est utilisé. Dans ce nouveau système, la position du point  $M$  dans l'élément est déterminée par 3 valeurs,  $L1, L2, L3$ , définies comme suit :

$$L1 = \frac{\text{Aire triangle } M23}{S}$$

$$L2 = \frac{\text{Aire triangle } M13}{S}$$

$$L3 = \frac{\text{Aire triangle M12}}{S} \quad (\text{III.6.})$$

avec  $L1 + L2 + L3 = 1$

où  $S$  est la surface du triangle  $k$ . La figure III.3. illustre ce nouveau système de coordonnées et précise quelques droites particulières qui donnent, entr'autre, les coordonnées nodales.

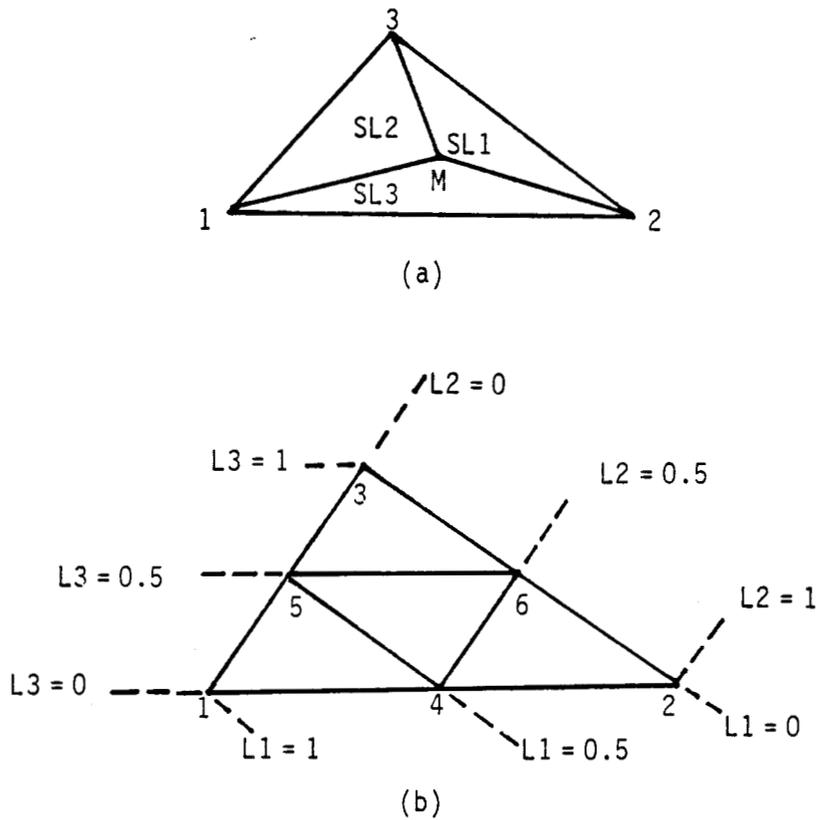


Figure III.3. Système de coordonnées triangulaires locales

- (a) coordonnées du point  $M$
- (b) droites particulières

### 2.2.b) Expression des fonctions de forme et propriétés

Pour les triangles à 6 noeuds d'ordre 2, les fonctions de forme sont données par des expressions quadratiques des coordonnées réduites. Les valeurs des fonctions de forme au point M sont calculées en fonction de ses coordonnées locales dans l'élément comme suit [7] :

$$\begin{aligned} N_{1k} &= (2 L_1 - 1) L_1 \\ N_{2k} &= (2 L_2 - 1) L_2 \\ N_{3k} &= (2 L_3 - 1) L_3 \\ N_{4k} &= 4 L_1 \cdot L_2 \\ N_{5k} &= 4 L_1 \cdot L_3 \\ N_{6k} &= 4 L_2 \cdot L_3 \end{aligned} \tag{III.6.}$$

Ces fonctions de forme ont été établies afin de répondre aux conditions suivantes :

. Les fonctions de forme  $N_{ik}$  ne prennent de valeurs non nulles que sur l'élément  $k$ .

$$\forall M (x, y) \in k, \forall i \quad N_{ik} = 0 \tag{III.7.}$$

. La somme des valeurs des fonctions de forme en tout point d'un élément égale l'unité.

$$\forall M (x, y) \in k, \sum_{ik} N_{ik} = 1 \tag{III.8.}$$

. La valeur de la fonction associée au noeud  $i$  de l'élément  $k$  égale l'unité sur ce noeud et est nulle sur tous les autres noeuds :

$$\forall k, \forall i, \forall j \quad N_{ik}(x_j, y_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \tag{III.9.}$$

. La fonction associée au noeud  $i$  de l'élément  $k$  prend une valeur nulle sur les côtés du triangle ne contenant pas ce noeud.

### 2.2.c) Expression analytique des fonctions de forme

L'expression analytique des fonctions de forme est obtenue en exprimant les coordonnées locales du point  $M$  en fonction de ses coordonnées cartésiennes  $(x, y)$ . En appelant  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  et  $(x_3, y_3)$  les coordonnées cartésiennes des noeuds 1, 2 et 3 du triangle de la figure III.3.a, le calcul des aires de l'équation III.6. donne :

$$\begin{aligned} L1 &= \frac{x_2 \cdot y_3 - x_3 \cdot y_1 + x (y_2 - y_3) + y (x_3 - x_2)}{2S} \\ L2 &= \frac{x_3 \cdot y_1 - x_1 \cdot y_3 + x (y_3 - y_1) + y (x_1 - x_3)}{2S} \\ L3 &= \frac{x_1 \cdot y_2 - x_2 \cdot y_1 + x (y_1 - y_2) + y (x_2 - x_1)}{2S} \end{aligned} \quad \text{(III.10.)}$$

L'expression analytique des fonctions de forme est alors obtenue en substituant ces dernières valeurs dans l'équation III.6.

Il est à noter que le système local de coordonnées triangulaires permet également de définir les fonctions de forme d'éléments d'ordre différent [7].

### 2.3. Equations différentielles et fonctions d'essai

Les modèles développés au chapitre précédent ont démontré que les équations de diffusion sont non-linéaires, dans la mesure où les diffusivités sont fonction des concentrations elles-mêmes. A cause de ces non-linéarités, une formulation variationnelle des équations ne peut être utilisée [7]. L'approche par les éléments finis est alors basée sur une technique de résidus pondérés.

Cette technique est développée ici dans le cas d'un processus de diffusion à deux impuretés couplées. L'équation différentielle régissant la redistribution d'une impureté peut s'exprimer, d'une manière générale, sous la forme (équation II.36.)

$$\dot{U} = \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} J_x + \frac{\partial}{\partial y} J_y \quad (\text{III.11.})$$

avec

$$J_{x ; y} = D_u (U, V) \frac{\partial U}{\partial x ; y} + D_v (U, V) \frac{\partial V}{\partial x ; y}$$

dans laquelle U et V sont les concentrations des deux types d'impuretés,  $D_u$  et  $D_v$  leurs contributions respectives à la diffusivité de U.

L'équation III.11. est une équation différentielle partielle possédant une condition initiale dans le domaine dans lequel elle est vérifiée. Elle peut alors être mise sous la forme :

$$H(U) = 0 \quad (\text{III.12.})$$

Une fonction d'essai  $\hat{U}$  est définie sur chaque élément à partir des fonctions de forme :

$$\hat{U} = \sum_{ik} N_{ik} U_i \quad (\text{III.13.})$$

où  $U_i$ , paramètre à optimiser, est, par le biais de la propriété III.9., la concentration au noeud i. Le nombre de paramètres à optimiser est alors égal au nombre de noeuds, N, existant dans la structure.

#### 2.4. Méthode des résidus pondérés

Notant R (x, y) l'erreur définie par :

$$H(\hat{U}) = R(x, y) ,$$

la méthode des résidus pondérés consiste à calculer les N valeurs  $U_i$  telles que :

$$\int_{\Omega} \omega_j (x, y) \cdot R (x, y) dx dy = 0 \quad . \quad (\text{III.14.})$$

où  $\omega_j$  est une fonction spatiale de pondération. N fonctions  $\omega_j$  sont alors à définir afin de permettre l'optimisation des paramètres  $U_i$ . Pour ce faire la méthode de Galerkin [7] est utilisée qui considère  $\omega_j$  comme étant l'union des fonctions  $N_{jk}$  associées au noeud j (fonction "chapeau") :

$$\omega_j = \sum_{k \in \text{ekj}} U_{jk} \quad (\text{III.15.})$$

Ce choix permet une pondération équivalente de l'erreur sur tous les noeuds, privilégiant les zones de forte densité nodale. De plus cette formulation symétrise le traitement matriciel de résolution, comme le justifie la partie suivante.

#### 2.5. Transformation de Green et assemblage

La méthode de Galerkin nous conduit à un système de N équations dont la j<sup>ieme</sup> équation s'écrit :

$$\int_{\Omega} \omega_j \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x} J_x + \frac{\partial}{\partial y} J_y \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} d\Omega = 0 \quad . \quad (\text{III.16.})$$

En appliquant à l'équation III.16. la transformation de Green, définie pour deux fonctions d'espace f et g par :

$$\int_{\Omega} f \cdot \frac{\partial g}{\partial x ; y} d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x ; y} g d\Omega + \int_{\Gamma} f \cdot g \cdot n_x ; y d\Gamma \quad (\text{III.17.})$$

où  $(n_x, n_y)$  sont les coordonnées du vecteur unitaire  $\vec{n}$  normal à la surface, on obtient :

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial x} \cdot J_x + \frac{\partial \omega_j}{\partial y} \cdot J_y \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \omega_j (J_x n_x + J_y n_y) d\Gamma \\ & - \int_{\Omega} \omega_j \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega = 0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{III.18.})$$

Dans l'intégrale linéaire, le terme  $(J_x n_x + J_y n_y)$  que l'on notera F, avec :

$$F = \vec{J} \cdot \vec{n} = J_x n_x + J_y n_y \quad (\text{III.19.})$$

correspond à une condition de flux de type Neumann imposée sur la frontière de la structure. La fonction F est ici une fonction linéaire de U.

Les intégrales de l'équation III.18., calculées sur tout le domaine, sont données par la somme des intégrales sur chaque élément :

$$\begin{aligned} & \sum_k \int_{\Omega k} \left( \frac{\partial \omega_j}{\partial x} \cdot J_x + \frac{\partial \omega_j}{\partial y} \cdot J_y \right) d\Omega k + \sum_{ek} \int_{\Gamma k} \omega_j \cdot F \, d\Gamma k \\ & - \sum_k \int_{\Omega k} \omega_j \frac{\partial u}{\partial t} \, d\Omega k = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.20.})$$

Les intégrands sont maintenant exprimés à l'aide des fonctions de forme et des valeurs nodales.

On obtient :

$$\begin{aligned} & - \sum_k \int_{\Omega k} \left[ \frac{\partial \omega_j}{\partial x} \cdot (D_u \sum_{ik} N_{ikx} \cdot U_i + D_v \sum_{ik} N_{ikx} \cdot V_i) + \right. \\ & \left. \frac{\partial \omega_j}{\partial y} \cdot (D_u \sum_{ik} N_{iky} \cdot U_i + D_v \sum_{ik} N_{iky} \cdot V_i) \right] d\Omega k \end{aligned} \quad (\text{III.21.})$$

$$+ \sum_{ek} \int_{\Gamma k} \omega_j \cdot F \, d\Gamma k - \sum_k \int_{\Omega k} \omega_j \cdot \sum_{ik} \dot{N}_{ik} U_i \, d\Omega k = 0$$

En appliquant la méthode de Galerkin, la fonction de pondération  $\omega_j$  s'identifie à la fonction de forme  $N_{jk}$  dans l'élément k conformément à l'équation III.15.. Vu le domaine dans lequel  $N_{jk}$  prend des valeurs non nulles, la sommation des intégrales est alors réduite à  $ek_j$ , ensemble des triangles contenant le noeud j. La j<sup>ème</sup> équation du système s'écrit :

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{ekj} \int_{\Omega k} [N_{jkx} (D_u \sum_{ik} N_{ikx} \cdot U_i + D_v \sum_{ik} N_{ikx} V_i) + \\
 & \quad N_{jky} (D_u \sum_{ik} N_{iky} \cdot U_i + D_v \sum_{ik} N_{iky} V_i) d\Omega k \\
 & + \sum_{ekj} \int_{\Gamma kj} N_{jk} \cdot F d\Gamma k - \sum_{ekj} \int_{\Omega k} N_{jk} \sum_{ik} \dot{N}_{ik} U_i d\Omega k = 0
 \end{aligned}$$

(III.22.)

Cette formulation par éléments finis permet d'obtenir pour N inconnues  $U_i$ , un système de N équations couplées dont les termes sont déterminés par intégration numérique d'expressions contenant les coefficients de diffusion, les fonctions de forme et leurs dérivées. A partir d'un profil initial de concentration, le système d'équation III.22., permet le calcul des dérivées temporelles en tout noeud du domaine. Il suffit alors, à partir d'un schéma de discrétisation temporelle, de résoudre de manière itérative le système III.22., pour obtenir l'évolution de la redistribution des dopants dans la structure.

### 3 - DISCRETISATION TEMPORELLE ET RESOLUTION

#### 3.1. Méthode implicite incomplète

Le système d'équations non linéaires III.22. fait intervenir, outre les fonctions de forme et leurs dérivées spatiales, les concentrations nodales  $U_i$  et leurs dérivées temporelles, les diffusivités  $D_u$  et  $D_v$  ainsi que les concentrations  $V_i$  et le flux F. Chaque équation peut être sous la forme symbolique :

$$A_j (U, \dot{U}, D(U, V), V, F) = 0 \quad \text{(III.23.)}$$

Soit  $U_{n-1}$ , l'ensemble des valeurs nodales vérifiant l'équation III.22. au temps  $(n-1) \cdot \Delta T$ , la méthode implicite incomplète permet de calculer  $U_n$  solution au temps  $n \cdot \Delta T$  en écrivant la  $j^{\text{ème}}$  équation de la manière suivante :

$$A_j (U_n, \frac{U_n - U_{n-1}}{\Delta T}, D(U_{n-1}, V_{n-1}), V_{n-1}, F_n) = 0 \quad (\text{III.24.})$$

où  $\Delta T$  est l'incrément de temps.

Dans ce schéma temporel, les coefficients de diffusion ainsi que les concentrations nodales  $V$  servant à déterminer les solutions  $U_n$ , sont calculés au temps  $(n-1) \cdot \Delta T$ . Cette approximation linéarise le système non-linéaire III.23. à chaque pas de temps, mais impose, en contre partie, des choix judicieux d'incrément  $\Delta T$ . Les pas temporels, qui sont de valeurs constantes pour toute une simulation, sont déterminés en fonction des résultats d'une étude systématique. Cette étude, reportée au sein du chapitre suivant, a entr' autre montré que ce schéma, inconditionnellement stable, limite correctement les erreurs de discrétisation temporelle, qui, de plus, sont contrôlables.

### 3.2. Résolution du système linéaire

La résolution du système linéaire III.24. est menée par une itération de type Newton - Raphson [7]. L'équation symbolique III.24. s'écrit alors, conformément à l'expression III.22. :

$$\begin{aligned} & - \sum_{ekj} \int_{\Omega k} [N_{jkx} (D_{u, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} U_{i_n} + D_{v, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} V_{i_{n-1}}) \\ & \quad + N_{jky} (D_{u, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} U_{i_n} + D_{v, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} V_{i_{n-1}})] d\Omega k \\ & + \sum_{ekj} \int_{\Gamma kj} N_{jk} F_n d\Omega k - \sum_{ekj} \frac{1}{\Delta T} \int_{\Omega k} N_{ik} \sum_{ik} N_{ik} (U_{i_n} - U_{i_{n-1}}) d\Omega k = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.25.})$$

Cette dernière équation peut se mettre sous la forme symbolique suivante :

$$B_{j_n} (U_{1_n}, \dots, U_{i_n}, \dots, U_{N_n}) = 0 \quad (\text{III.26.})$$

La méthode de Newton - Raphson appliquée au système III.25. consiste, à partir d'un vecteur d'essai  $\vec{U}_0$  de composantes  $U_{1_0}, \dots, U_{N_0}$ , à calculer le vecteur solution  $\vec{U}_n$  en le mettant sous la forme :

$$\vec{U}_n = \vec{U}_0 + \Delta \vec{U}_n. \quad (\text{III.27.})$$

Le vecteur  $\Delta \vec{U}_n$  vérifie alors :

$$[G_n] \Delta \vec{U}_n = - B_n (\vec{U}_0) \quad (\text{III.28.})$$

où  $B_n (\vec{U}_0)$  est le vecteur formé par les valeurs  $B_{j_n} (U_{1_0}, \dots, U_{i_0}, \dots, U_{N_0})$ . La matrice  $[G_n]$  est le jacobien du système défini par :

$$G_{ji_n} = \frac{\partial B_{j_n}}{\partial U_{i_n}} (U_{1_0}, \dots, U_{i_0}, \dots, U_{N_0}) \quad (\text{III.29.})$$

En prenant comme vecteur d'essai, la solution au temps  $(n-1) \Delta T$  :

$$\vec{U}_0 = \vec{U}_{n-1}, \quad (\text{III.30.})$$

La solution au temps  $n \Delta T$  est donnée par :

$$\vec{U}_n = \vec{U}_{n-1} + \Delta \vec{U}_n, \quad (\text{III.31.})$$

le vecteur  $\Delta \vec{U}_n$  vérifiant :

$$[G_n] \Delta \vec{U}_n = - B_n (\vec{U}_{n-1}). \quad (\text{III.32.})$$

Il est alors possible d'exprimer les termes du Jacobien et ceux du second membre grâce à l'équation III.25. :

$$\begin{aligned}
 G_{ji_n} = & - \sum_{ekij} \int_{\Omega k} [N_{jkx} \cdot D_{u, n-1} \cdot N_{ikx} + N_{jky} \cdot D_{u, n-1} N_{iky}] d\Omega k \\
 & + \sum_{eKij} \int_{\Gamma kij} N_{jk} \frac{\partial F_n}{\partial U_{i_n}} d\Gamma k - \sum_{ekij} \frac{1}{\Delta T} \int_{\Omega k} N_{jk} \cdot N_{ik} d\Omega k
 \end{aligned}
 \tag{III.33.}$$

$$\begin{aligned}
 B_{j_n} = & + \sum_{ekj} \int_{\Omega k} [N_{jkx} (D_{u, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} \cdot U_{i_{n-1}} + D_{v, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} \cdot V_{i_{n-1}}) \\
 & + N_{jky} (D_{u, n-1} \sum_{ik} N_{ikx} \cdot U_{i_{n-1}} \sum_{ik} N_{ikx} \cdot V_{i_{n-1}})] d\Omega k \\
 & - \sum_{eKj} \int_{\Gamma kj} N_{jk} F_{n-1} d\Omega k
 \end{aligned}
 \tag{III.34.}$$

Il est à noter que, compte tenu des propriétés des fonctions de forme, les termes de couplage  $G_{ji_n}$  ne prennent de valeurs non nulles que s'il existe au moins un élément contenant les noeuds  $i$  et  $j$ . De plus il est évident dans l'équation III.34., que le choix des fonctions de pondération de Galerkin a conduit à une forme symétrique du Jacobien du système. Cette symétrie est un avantage réel pour les performances informatiques des logiciels utilisant cette méthode.

Les intégrales de surface sont calculées, pour chaque élément par une méthode de Simpson à 7 points faisant intervenir, outre les 6 noeuds, le centre de gravité du triangle. Les intégrations de frontière sont réalisées par une méthode de Simpson à 3 points, [7] s'identifiant aux 3 noeuds du côté frontière.

Remarque

Comme les points d'intégration sont les noeuds eux-mêmes, sur lesquels les fonctions de pondération valent 0 ou 1, le calcul des termes des équations III.32 et III.33 se résume à l'intégration directe des coefficients de diffusion ou des flux et de leurs dérivées.

La résolution du système III.33 est menée par une méthode frontale, les substitutions successives étant réalisées par élimination de Gauss [7].

*3.3. Diffusion simultanée de plusieurs impuretés*

Lorsque plusieurs types d'impureté diffusent simultanément dans la structure la résolution numérique doit prendre en compte le couplage entre les différentes équations. Pour décrire correctement ces effets de couplage, deux traitements numériques sont compatibles avec la formulation développée précédemment.

. L'intégration simultanée du système III.28. pour tous les types d'impuretés en présence .

. Une résolution alternée de chaque équation de diffusion à chaque incrément de temps.

Afin de préserver le conditionnement des matrices et la symétrie du Jacobien, la seconde méthode a été retenue. La taille instantanée du Jacobien reste constante quel que soit le nombre de types d'impureté. Dès qu'un profil d'impureté,  $U$ , est obtenu au temps  $n\Delta t$ , la dernière solution  $U_n$  est substituée à la précédente pour le calcul des autres impuretés. Cette manière de faire, accroît de plus le degré d'implicité du schéma temporel.

#### 4 - SIMULATION DES RECUITS SOUS AMBIANCE OXYDANTE

Dans le cas de recuits sous ambiance oxydante, les équations de diffusion doivent être résolues dans un domaine évolutif, la réaction d'oxydation s'effectuant en consommant le silicium à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, figure II.35. . Hormis cette déformation de structure, l'obtention de résultats précis nécessite la prise en compte du phénomène de ségrégation des impuretés à l'interface Silicium/Silice (équations II.145.).

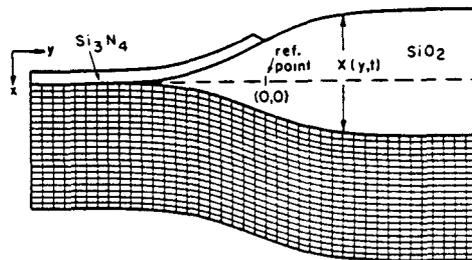
##### *4.1. Algorithmes basés sur la méthode des différences finies*

Plusieurs méthodes numériques ont déjà été proposées afin de simuler la redistribution bidimensionnelle des dopants sous oxydation. Une méthode proche du formalisme des différences finies a été développée qui consiste en la résolution des équations de diffusion dans un domaine rectangulaire obtenu par transformation ponctuelle de la structure réelle du silicium. Dans cette approche, illustrée en figure III.4.a, le domaine reste fixe, et les équations de diffusion sont écrites dans un système de coordonnées spatiales dépendant du temps et contenant la déformation de la structure réelle [5, 6]. Cette méthode, performante au niveau du temps de calcul, s'avère être limitative quand à la géométrie d'oxyde et est peu appropriée à la simulation de structures multicouches de formes complexes.

Une méthode entièrement analytique, figure III.4.b, a d'autre part, été proposée [2], mais cette solution impose une diffusivité constante des impuretés dans le silicium. Hors, il a été montré précédemment que cette diffusivité dépend de la concentration pour des dopages de moyenne et forte dose, et, de plus, que la diffusion est accélérée sous ambiance oxydante. De ce fait, le domaine technologique d'application de cette méthode s'avère être limité.

Un algorithme d'élimination de points [4] a été également proposé, figure III.4.c. Cette méthode est là aussi fortement limitative au niveau de la forme du profil d'oxyde.

Ces différents schémas, illustrés en figure III.4., ont été développés pour des programmes utilisant un formalisme de type différences finies qui présente conceptuellement des contraintes quant à la répartition des points de discrétisation dans la structure. La procédure qui a été développée ici et qui est présentée dans le paragraphe suivant, s'appuie sur la méthode des éléments finis et permet de s'affranchir des limitations inhérentes aux méthodes précédentes.

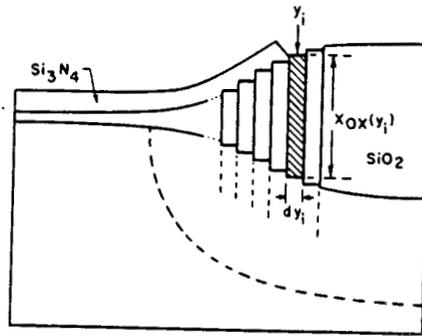


(a)

Figure III.4. Algorithmes basés sur la méthode des différences finies, permettant la simulation de recuits en ambiance oxydante.

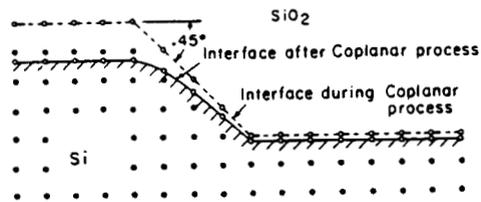
(a) Transformation ponctuelle.

Source : Réf. [ 5 ]



b) Solution analytique  
Source : Réf. [2]

(b)



c) Elimination de point  
Source : Réf. [4]

(c)

#### 4.2. Méthode proposée

##### 4.2.a) Principe

Les performances de la discrétisation spatiale de la méthode des éléments finis sont ici exploitées afin de simuler la diffusion des impuretés sous ambiance oxydante.

La méthode consiste en alternance d'étapes de déformation de la structure et d'étapes de diffusion sur un maillage fixe [10].

L'organigramme de l'algorithme de résolution est présenté en figure III.5. , dans laquelle  $\vec{C}(\tau_1, \tau_2)$  représente le vecteur formé des concentrations  $C_j(\tau_1, \tau_2)$  au temps  $\tau_1$  aux noeuds du maillage correspondant à la structure au temps  $\tau_2$ . Les équations de diffusion sont résolues dans le silicium uniquement, l'influence de la silice et de sa cinétique de croissance sur la ségrégation des impuretés à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> étant contenue dans une condition de flux de type Neumann durant la phase de diffusion. Comme précisé en figure III.5. , l'étape de déformation de la structure inclut, outre le remaillage, une procédure d'interpolation qui permet de reproduire la cartographie de dopage sur les maillages successifs. Chaque fonction de l'organigramme est développée et précisée comme suit.

#### 4.2.b) Déformation de la structure

La déformation géométrique est réalisée par une modification des coordonnées des noeuds du maillage afin de rendre compte du profil d'oxyde. Pour un incrément de temps  $\Delta T$ , l'évolution de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> est simulée par une translation des noeuds frontière selon la loi suivante :

$$(x_f, y_f) \longrightarrow (x_f, y_f - \alpha \cdot \Delta \text{dox}(x_f, t)) \quad (\text{III.35.})$$

où  $(x_f, y_f)$  représente les coordonnées des noeuds frontière,  $\Delta \text{dox}$  est l'épaisseur locale d'oxyde formée durant l'intervalle de temps  $\Delta T$  et  $\alpha$  est le rapport volumique de la réaction d'oxydation, équation II.94.  $\Delta \text{dox}$  est soit calculé par la loi linéaire-parabolique pour une oxydation opérée sur toute la surface, équation II.104., ou soit donné par une forme analytique d'oxyde pour un procédé LOCOS, équation II.122..

La relation III.35. ne donne que l'évolution de la frontière. Cette déformation est redistribuée sur tout le maillage de telle sorte que l'encombrement spatial du domaine reste constant. La figure III.6..

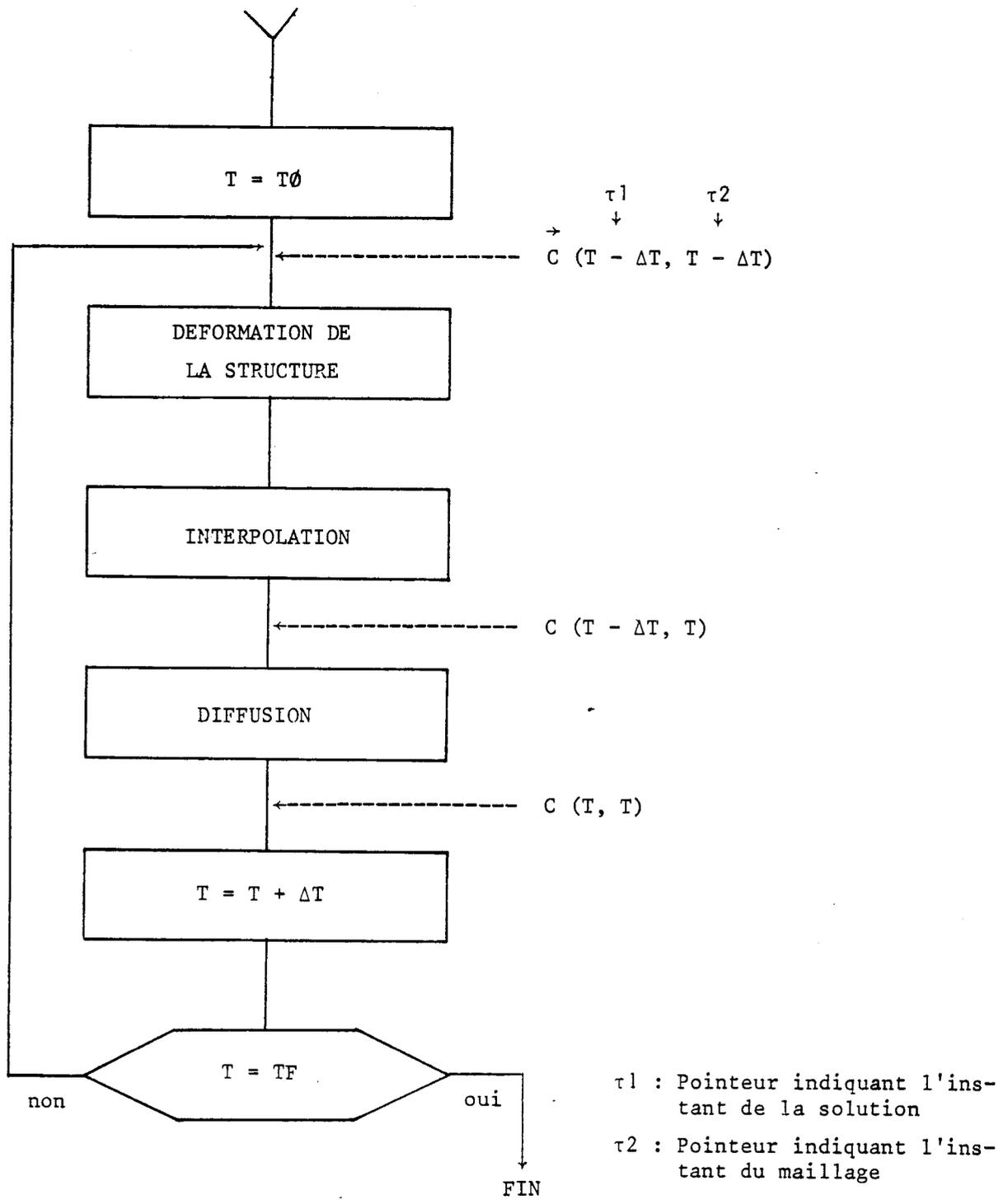
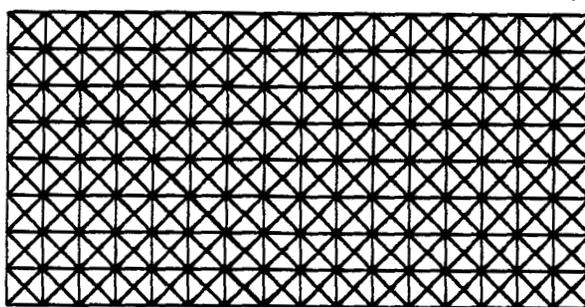
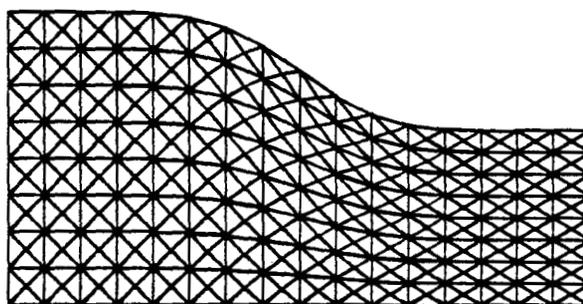


Figure III.5. Algorithme de résolution de l'oxydation

illustre la procédure de remaillage. La discrétisation présentée en figure III.6.b) correspond à la croissance d'oxyde de type LOCOS, équation II.122., le maillage initial étant reporté en figure III.6.a)



(a)



(b)

Figure III.6. Illustration de la procédure de remaillage  
(a) maillage initial  
(b) maillage final.

#### 4.2.c) Interpolation

Dès qu'une déformation incrémentale de structure est effectuée, le vecteur formé des concentrations aux noeuds du nouveau maillage doit être interpolé à partir des concentrations nodales avant déformation. Cette interpolation évite une diffusion parasite induite par les translations nodales.

La phase d'interpolation s'effectue en utilisant les fonctions de forme des éléments triangulaires. Il est à noter que cette phase est quasi-instantanée, conformément aux deux remarques suivantes :

- La topologie du maillage est conservée durant toute la simulation :

$$\forall j, \forall \tau_2 = T, \quad e_{kj}(T) = e_{kj}(T - \Delta T) \quad (\text{III.36.})$$

- Les déplacements incrémentaux de la structure garantissant le fait que chaque noeud, après translation se trouve dans l'espace créé par ses triangles adjacents avant déformation :

$$\forall j, \forall \tau_2 = T, \quad j(T) \in \bigcup_{e_{kj}} \Omega_k(T - \Delta T) \quad (\text{III.37.})$$

L'interpolation est complètement réalisée par un seul niveau de boucle balayant les noeuds  $j$  du nouveau maillage :

$$C_j(T - \Delta T, T) = \sum_{jk} N_{jk}(T - \Delta T) C_j(T - \Delta T, T - \Delta T) \quad (\text{III.38.})$$

Dans cette dernière équation,  $N_{jk}(T - \Delta T)$  représente la valeur que la fonction de forme  $N_{jk}$  associée au maillage au temps  $\tau_2 = T - \Delta T$  prend à la position occupée par le noeud  $j$  à l'instant  $T$ .

#### 4.2.d) Diffusion

L'étape de diffusion, permettant le calcul des concentrations nodales  $C(T, T)$  en fonction de  $C(T - \Delta T, T)$ , est opérée avec l'algorithme de résolution développé pour les recuits en ambiance inerte, équation III.25..

Afin de prendre en compte le mécanisme de ségrégation, une condition de flux de type Neumann est imposée sur les noeuds appartenant à l'interface mobile Si/SiO<sub>2</sub> durant la phase de diffusion. Si l'on considère que la cinétique de ségrégation est plus rapide que celle de l'oxydation, le flux local d'impureté, régissant le transport à l'interface s'écrit :

$$F_s = \vec{F} \cdot \vec{n} = - V_{ox} \frac{C_{si}}{m} \quad (\text{III.39.})$$

où  $V_{ox}$  est la vitesse d'oxydation locale,  $C_{si}$  la concentration à l'interface côté silicium et  $m$  le coefficient de ségrégation. Comme la procédure de remaillage et d'interpolation induit un flux équivalent dû à la déformation du domaine :

$$F_R = - \alpha V_{ox} C_{si}, \quad (\text{III.40.})$$

le flux total  $F_T$  à imposer sur la face oxydée s'écrit :

$$F_T = F_S - F_R = \vec{F} \cdot \vec{n} = - V_{ox} C_{si} \left( \frac{1}{m} - \alpha \right) \quad (\text{III.41.})$$

Cette condition de flux est introduite dans l'intégrale de surface de l'équation III.25.. Il est à remarquer que cette condition est identique à celle proposée dans l'équation II.145. qui conserve la dose totale dans le système Si/SiO<sub>2</sub>.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES du Chapitre III

1. R. TIELERT, "Two-dimensional numerical simulation of impurity redistribution in VLSI processes", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-27, pp. 1479-1483, 1980.
2. D. CHIN, M.R. KUMP, H.G. LEE and R.W. DUTTON, "Process design using two-dimensional process and device simulators", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29, pp. 336-340, 1982.
3. B.R. PENUMALLY, "A comprehensive two-dimensional VLSI process simulation program, BICEPS", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 986-992, 1983.
4. K. TANIGUSHI, M. KASHIWAGI and H. IWAI, "Two-dimensional computer simulations models for MOSLSI fabrication processes", IEEE Trans Electron Devices, Vol. ED-28, pp. 574-580, 1981.
5. C.D. MALDONADO, F.Z. CUSTODE, S.A. LOUIE and R. MANCHOLY, "Two-dimensional simulation of a 2.µm CMOS process using ROMANS II", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30, pp. 1462-1469, 1983.
6. W.D. MURPHY, W.F. HALL and C.D. MALDONADO, "Efficient numerical simulation of two-dimensional non-linear diffusion equations with non uniformly moving boundaries.a versatile tool for VLSI process modeling", 2nd Int. Conf. on Numerical Analysis of Semiconductor Devices and I.C.'s, Dublin, Ireland, June 17-19, 1981.
7. O.C. ZIENKIEWICZ (ed.), "The Finite Element Method", Mc Graw-Hill, New-York, 1977.
8. J.J. BARNES, R.I. LOMAX and G.I. HADDAD, "Finite element simulation of GaAs MESFET'S with lateral doping profiles and submicron gates", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-23, pp. 1042-1048, 1976.
9. J.J. BARNES and R.J. LOMAX, "Finite element methods in semiconductor device simulation", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-24, pp. 1982-1989, 1977.
10. D. COLLARD and J.N. DECARPIGNY, "Two-dimensional process simulation using a quadratic finite element discretisation", COMPEL, Vol. 3, pp. 17-33, 1984.

- CHAPITRE IV -

LES CRITÈRES DE SIMULATION [1,2,3]

1 - JUSTIFICATION DU CHAPITRE ET PRESENTATION

Le chapitre précédent a présenté les méthodes numériques qui ont été développées afin de résoudre les équations de diffusion en ambiances inerte et oxydante. Afin de pouvoir exploiter ces méthodes, il importe de définir les critères de simulation - incrément de temps et pas d'espace - qui permettent l'obtention de solutions convergées. Cette convergence est atteinte si d'une part aucune instabilité numérique n'apparaît dans la solution et si d'autre part les erreurs de discrétisation restent suffisamment faibles afin de préserver la signification physique du résultat obtenu.

Le comportement non-linéaire des équations différentielles, introduit par les modèles de diffusion, ne permet pas l'obtention des conditions de convergence par application directe de critères mathématiques simples. Le test des algorithmes et l'établissement des critères de simulation ont été réalisés de manière systématique en s'appuyant sur la connais-

sance des effets physiques induits par les modèles.

Le plan de ce chapitre reprend de manière séquentielle les méthodes de tests qui ont été développées. Ce travail a fortement été facilité par le fait que les limitations spatiales et temporelles des algorithmes peuvent être traitées de manière découplée.

La seconde partie de ce chapitre présente les simulations de test qui ont été choisies afin de mener cette étude. Une méthode permettant la quantification du degré de non-linéarité des équations de diffusion y est également proposée. La troisième partie relate une première étude de faisabilité sur des exemples linéaires tandis que la quatrième propose une approche permettant le choix des incréments de temps. La cinquième partie s'intéresse au choix du pas d'espace, propose une méthode originale de raffinement local de maillage et définit les critères de simulation.

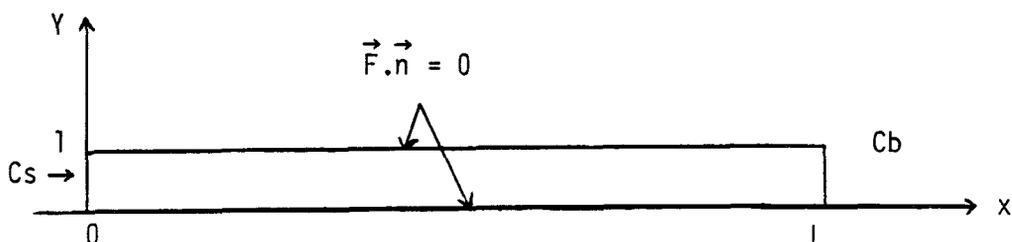
## 2 - SIMULATION DE TEST ET DEGRE DE NON-LINEARITE

### 2.1. *Prédépôt de Bore*

Pour se placer dans les cas numériques les plus défavorables, les tests simulent des prédépôts thermiques de Bore. Cette diffusion, à partir d'une concentration superficielle constante est numériquement équivalente à une réponse à l'échelon du système de discrétisation. Ces tests sont donc très révélateurs des performances des algorithmes et permettent une surestimation des erreurs de discrétisation.

Deux types de motifs test sont ici utilisés dans lesquels les équations bidimensionnelles sont résolues.

Le premier correspond à une structure dont la géométrie et les conditions frontière ne permettent qu'un transport unidimensionnel des impuretés. La figure IV.1 présente cette structure et précise son dimensionnement et les conditions aux limites.



$$0 < x < L$$

$$0 < y < 1$$

$$0 < t < T$$

$$C(x = 0, 0 < y < 1, 0 < t < T) = C_s$$

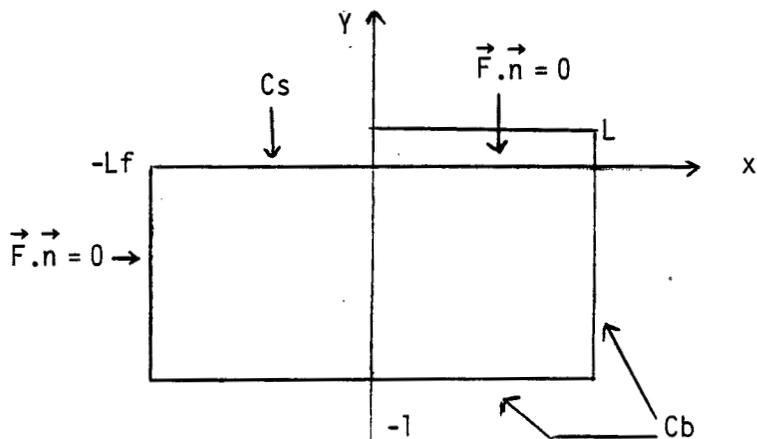
$$C(x = L, 0 < y < 1, 0 < t < T) = C_b$$

$$C(0 < x < L, 0 < y < 1, t = 0) = C_b$$

Figure IV.1. Définition de la structure 1-D

Le second motif est une extension de ce prédépôt à 2 dimensions, la structure et les conditions frontières sont précisées en figure IV.2.

Cette structure simule un prédépôt local s'effectuant dans une fenêtre gravée dans une couche d'oxyde. Le rôle de l'oxyde superficiel est simplement pris en compte par une condition de flux nul. Pour des raisons évidentes de symétrie, la figure IV.2. ne représente que la partie droite du motif technologique.



$$\begin{aligned}
 & -L_f < x < L \\
 & -1 < y < 0 \\
 & 0 < t < T
 \end{aligned}$$

$$C(-L_f < x < 0, y = 0, 0 < t < T) = C_s$$

$$C(x = L, -1 < y < 0, 0 < t < T) = C_b$$

$$C(-L_f < x < L, y = -1, 0 < t < T) = C_b$$

$$C(-L_f < x < L, -1 < y < 0, t = 0) = C_b$$

$$C(0 < x < L, y = 0, t = 0) = C_b$$

Figure IV.2. Définition de la structure 2-D

## 2.2. Quantification du degré de non-linéarité

En se référant au paragraphe 1.2.c du second chapitre, l'équation différentielle à résoudre dans les deux structures de test est donc, pour le Bore :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot [ D_T (C) \nabla C ] \quad (IV.1)$$

avec

$$D_T = D_{int} \frac{1 + \beta (C_R + \sqrt{C_R^2 + 1})}{1 + \beta} \cdot \left( 1 + \frac{C_R}{\sqrt{C_R^2 + 1}} \right)$$

et  $\beta = 19$

Dans l'expression précédente  $C_R$  est la concentration réduite donnée par :

$$C_R = \frac{C}{2n_i} \quad (IV.2)$$

$D_T$ ,  $D_{int}$  et  $n_i$  étant respectivement le coefficient de diffusion total, le coefficient de diffusion intrinsèque et la concentration intrinsèque du silicium.

Les difficultés numériques induites par ce modèle sont liées de la gamme de variation du coefficient de diffusion dans la structure. Comme le précise la figure IV.3, le facteur  $D_T/D_{int}$  est une fonction monotone de la concentration réduite. Ainsi le paramètre  $\alpha$ , défini par :

$$\alpha = \frac{Cs}{2n_i} \quad (IV.3)$$

donne le degré de non-linéarité des simulations de tests. L'équation de diffusion pouvant s'écrire sous une forme réduite par la transformation de Boltzmann, (équation II. 9), la longueur de diffusion  $L_D$  définie par :

$$L_D = 2 \sqrt{D_{int} T} \quad (IV.4)$$

est un facteur d'échelle qui n'affecte en rien le comportement non-linéaire donné par  $\alpha$ .

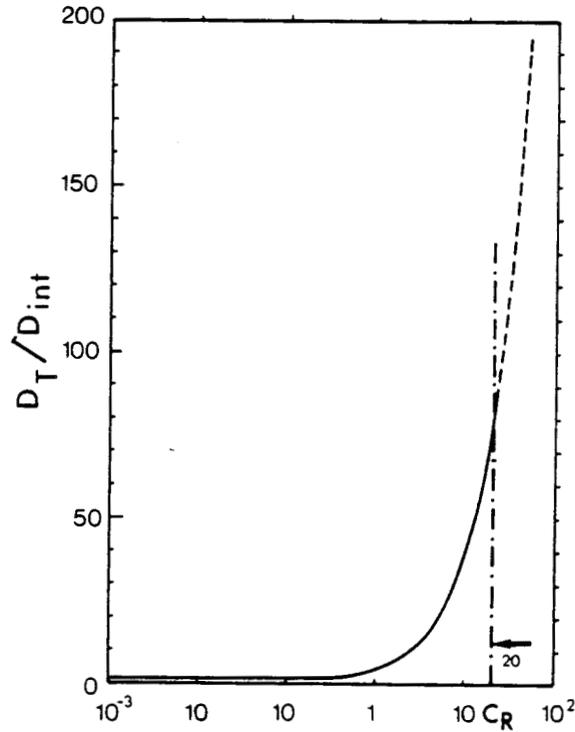


Figure IV.3. Variation de  $D_T/D_{int}$  en fonction de la concentration réduite  $C_R$

Plusieurs remarques peuvent déjà ici être formulées :

- Sur la figure IV.3, l'abscisse maximale  $C_R = 20$  est une limite moyenne de la validité du modèle de diffusion. Au-delà de cette valeur, des effets de fort dopage, tels que la formation d'agglomérats, interviennent qui réduisent la diffusivité totale limitant ainsi le degré de non-linéarité de l'équation de diffusion [4].

. Pour des recuits d'implantation ionique, le degré de non-linéarité sera donné par :

$$\alpha = \frac{C_{pic}}{2n_i} \quad (IV.5)$$

où  $C_{pic}$  est la concentration maximale du profil implanté.

. Lors de diffusions simultanées de plusieurs types d'impuretés, les critères de simulation devront être pris en fonction de l'équation présentant le plus grand degré de non linéarité.

. L'équation de diffusion à coefficient constant sera référencée, par la suite, par :

$$\alpha = 0 \quad (IV.6)$$

### 3 - ETUDE DE FAISABILITE SUR DES EXEMPLES LINEAIRES

Les premiers tests ont été effectués sur des exemples linéaires ( $\alpha = 0$ ). Cette étude de faisabilité a permis de vérifier la bonne implantation des algorithmes sur des exemples possédant une solution analytique.

#### 3.1. Exemple unidimensionnel

L'équation de diffusion à coefficient constant a été résolue dans la structure 1-D précisée en figure IV.1. Le maillage utilisé par cette simulation ainsi que les paramètres technologiques sont reportés sur la figure IV.4.

$$\begin{aligned} D_{int} &= 1.10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} & T &= 10\ 000 \text{ S} \\ C_s &= 2.10^{20} \text{ cm}^{-3} & C_b &= 0 \\ L_D &= 2.10^{-5} \text{ cm} \\ L &= 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ cm} & l &= 0.1 \cdot 10^{-4} \text{ cm} \end{aligned}$$

Figure IV.4. Conditions de simulation de l'exemple 1-D linéaire

La figure IV.5 compare le profil de concentration longitudinal calculé avec 80 incréments de temps et la solution analytique donnée au chapitre II, paragraphe 1.1.c. :

$$C(x) = C_s \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{L_D} \right) \quad (\text{IV.7})$$

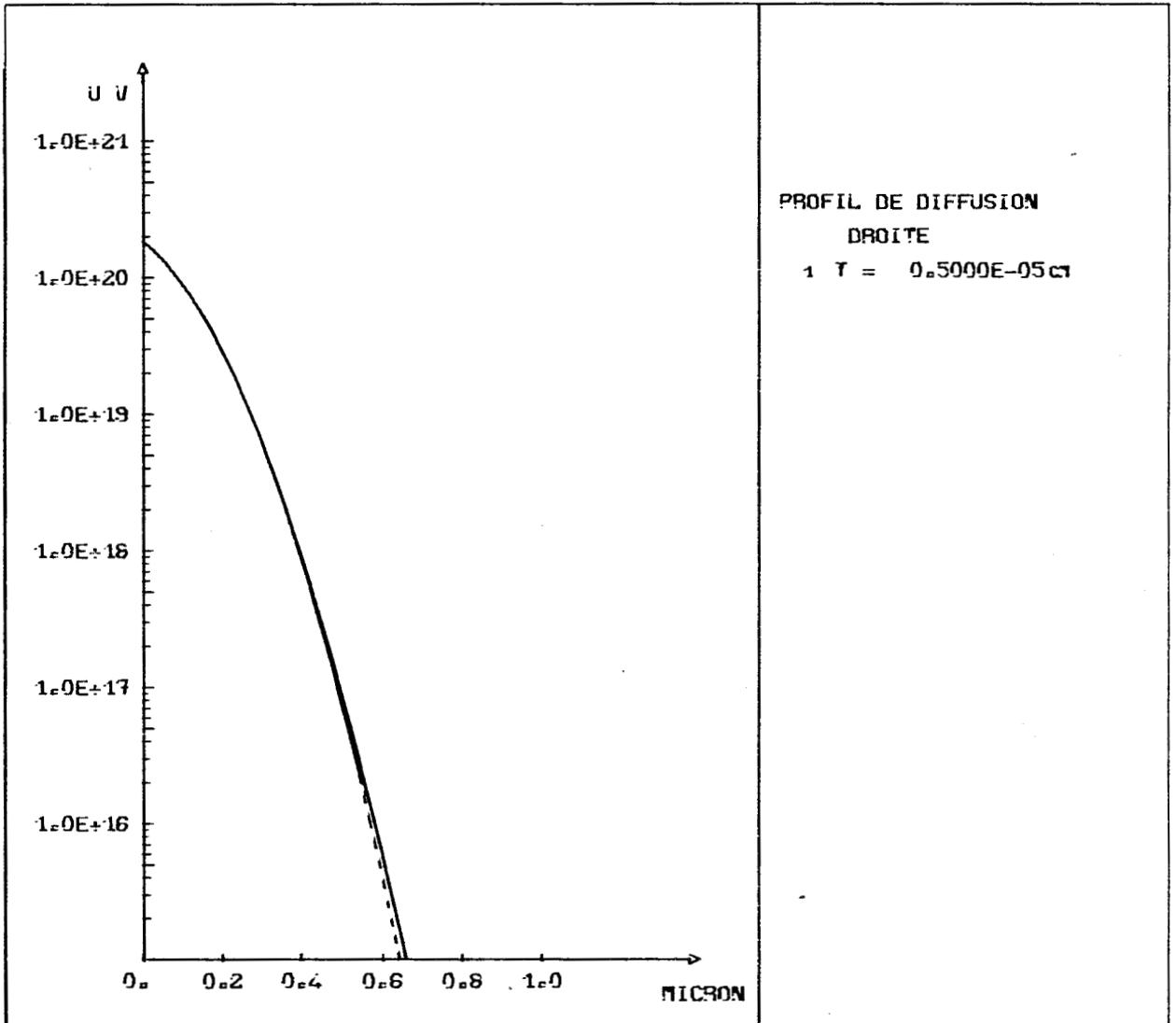


Figure IV.5. Profils de concentration pour l'exemple 1-D linéaire.

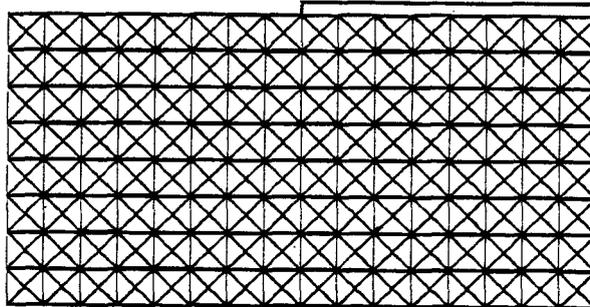
Traits pleins : simulation

Traits pointillés : solution analytique

Un très bon accord sur 5 décades est ici obtenu entre les deux profils de la figure IV.5 qui valide la méthode numérique employée ainsi que son implantation informatique.

### 3.2. Exemple bidimensionnel

Le test décrit précédemment a été simulé dans la structure 2-D de la figure IV.2, le maillage comportant 512 triangles est illustré en figure IV.6.



$$L_f = L = 1 = 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$$

Figure IV.6. Maillage utilisé pour la simulation bidimensionnelle linéaire.

Le résultat de la simulation est présenté sous forme d'isovaleurs en figure IV.7. Sur cette figure, ont été également reportés quelques points particuliers donnés par la solution analytique développée par Kennedy et par O'Brien [5] (chapitre II, paragraphe 1.1.e). Un bon accord est obtenu qui confirme l'efficacité de la méthode numérique sur un exemple typiquement bidimensionnel.

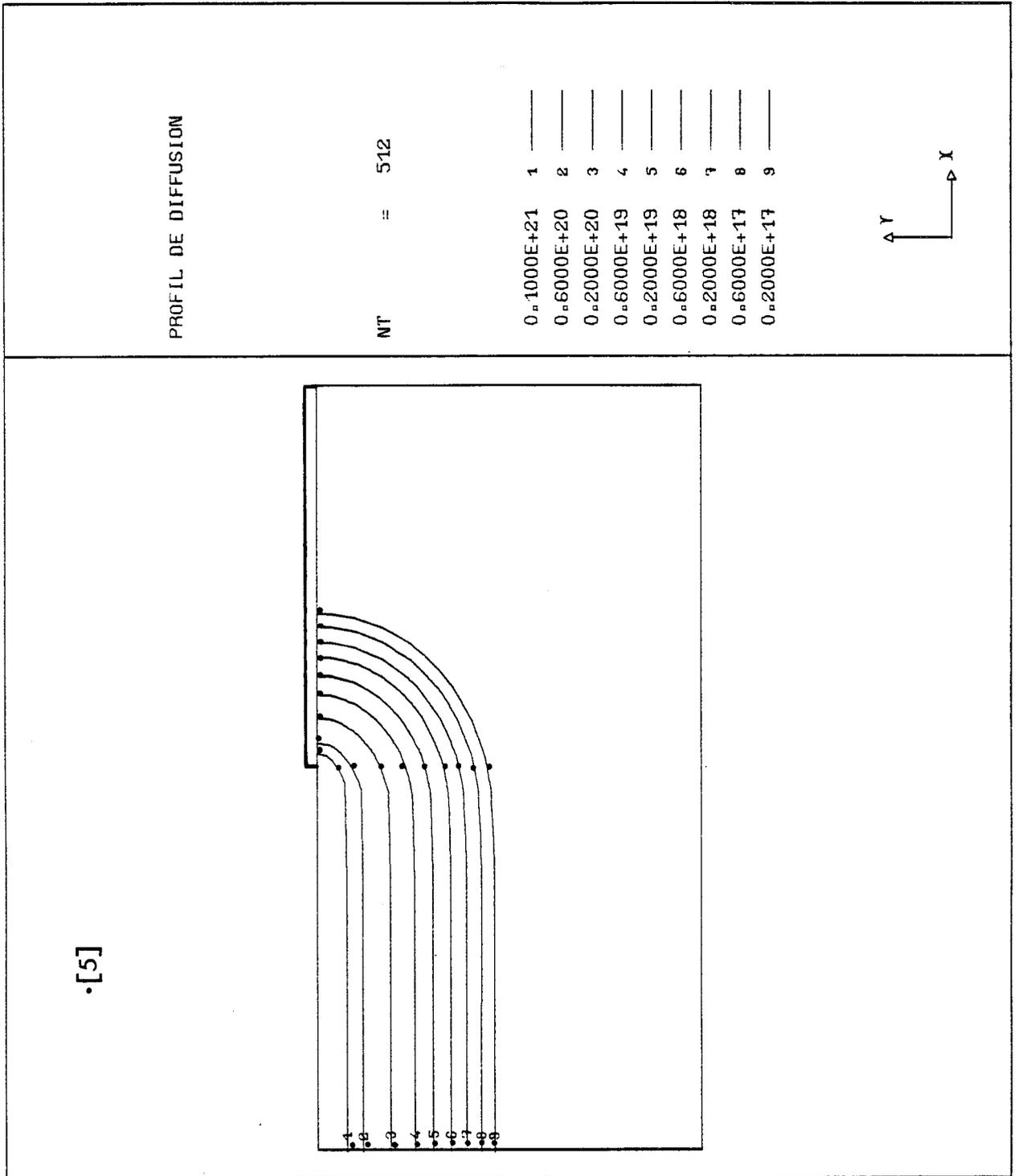


Figure IV.7. Isoconcentrations obtenues avec l'exemple 2-D linéaire. Comparaison avec la solution analytique de Kennedy et O'Brien [5].

#### 4. INFLUENCE DE L'INCREMENT DE TEMPS

Dans le cas de diffusion fortement non-linéaire, l'obtention de solutions convergées est étroitement liée au choix de l'incrément de temps. D'une manière plus précise, comme les pas temporels sont pris constants et que l'équation de diffusion admet une forme réduite, équation II.9, le paramètre à optimiser est le nombre de boucles temporelles.

Une étude systématique a été menée afin de définir l'influence du nombre de boucles sur les profils simulés. Pour cette étude, le maillage 1-D illustré en figure IV.8 a été utilisé. Ce maillage contenant 320 triangles a été choisi suffisamment dense afin de s'affranchir de tout problème lié au pas d'espace.



$$\begin{array}{ll} D_{\text{int}} = 1.10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} & T = 10\ 000 \text{ s} \\ C_s = 2.10^{20} \text{ cm}^{-3} & C_b = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3} \\ L_D = 2.10^{-5} \text{ cm} & \\ L = 2.10^{-4} \text{ cm} & l = 0.1 \cdot 10^{-4} \text{ cm} \end{array}$$

Figure IV.8. Maillage et conditions limites utilisés pour l'étude de l'influence de l'incrément de temps.

La figure IV.9 superpose les profils de concentration obtenus avec différents increments de temps dans le cas de non-linéarité maximale,  $\alpha = 20$ . Deux conclusions majeures sont à déduire de la figure IV.9 :

- . Ces différents profils montrent pour les grands increments de temps une dégradation de la solution présentant une réduction du gradient sur le front et un recul global de la jonction.
- . Pour un nombre de pas de temps correct une saturation de la solution apparaît indiquant la stabilisation du schéma temporel. Les résultats sont alors identiques à ceux obtenus par Warner et Wilson [6].

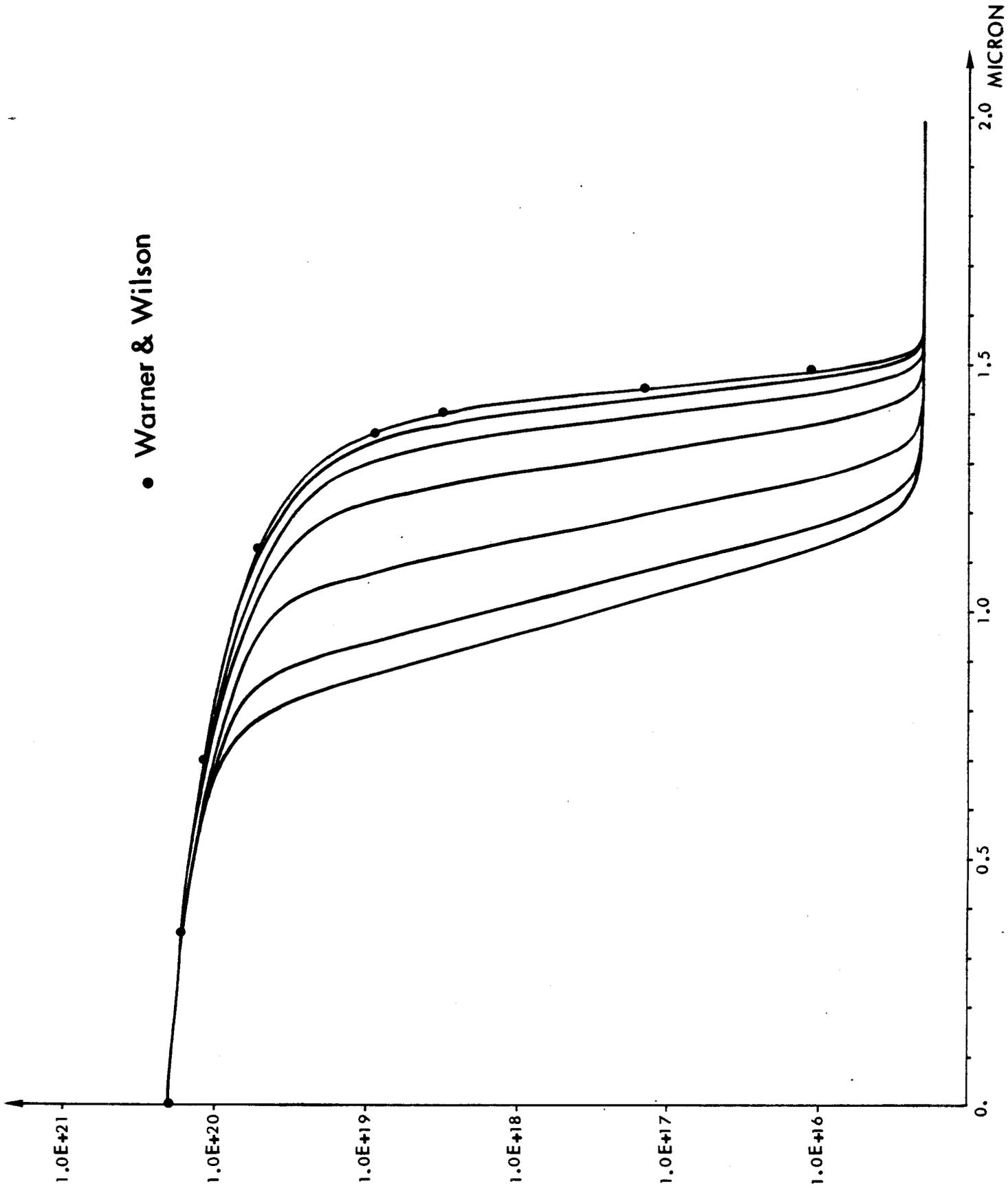


Figure IV.9. Influence du nombre de boucles temporelles sur les profils de concentrations calculées avec  $\alpha = 20$

Vue la forme abrupte des profils de concentration, le degré de convergence ne peut pas être obtenu de manière significative par une discussion directe des erreurs relatives des concentrations nodales. Une procédure plus globale a ici été utilisée qui consiste à reporter les profondeurs de jonction en fonction du nombre de boucles temporelles. La figure IV.10 présente ce tracé pour divers degrés de non-linéarité. Il est nettement apparent sur cette figure que chaque courbe présente un seuil de convergence d'autant plus marqué que le degré de non-linéarité est élevé. Par contre, le nombre de boucles temporelles nécessaires à l'obtention de ce seuil décroît pour les cas de faible non-linéarité.

En se reportant à la discussion de la figure IV.9, le changement de convexité qui intervient pour les exemples quasi-linéaires indique que la dégradation du gradient sur le front agit prioritairement sur le recul global de la jonction. Cette constatation indique que le recul de la jonction pour les cas fortement non-linéaires est expliqué par une mauvaise prise en compte des non-linéarités pour les grands increments de temps. Par contre l'adoucissement du gradient est dû aux erreurs de discrétisation temporelle, cet effet étant le seul présent pour les exemples linéaires.

Comme les courbes de la figure IV.10 sont tracées en coordonnées réduites, cette figure est utilisée en abaque. Le nombre de pas temporels est déterminé en fonction de  $\alpha$  et de la précision nécessaire à la simulation.

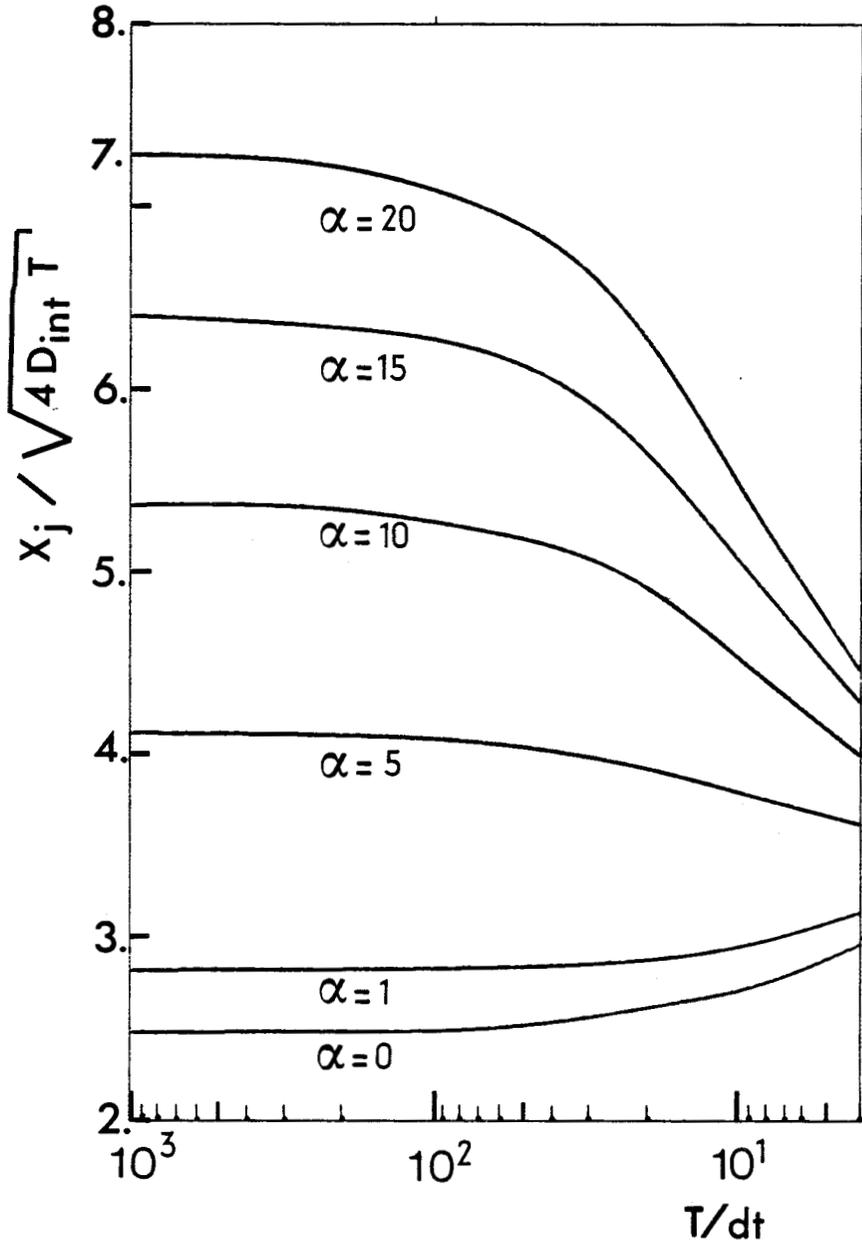


Figure IV.10. Variation de la profondeur de jonction ( $C = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) avec le nombre de boucles temporelles pour diverses valeurs de  $\alpha$ .

## 5 - INFLUENCE ET CHOIX DU MAILLAGE.

### CORRELATION INCREMENT DE TEMPS - PAS D'ESPACE

Dans le cas de l'étude précédente, le maillage utilisé, figure IV.8., a été choisi très dense afin d'éliminer toute instabilité numérique due au pas d'espace. Cependant, pour des raisons de temps de calcul évidentes, une telle densité d'éléments ne peut être conservée pour des applications bidimensionnelles. Le but de cette partie est de tester différents motifs de maillage afin de déterminer les causes d'instabilités numériques intervenant pour des pas d'espace trop importants. Cette étude a abouti à proposer une corrélation entre increment de temps et finesse de maille. Cette corrélation a été utilisée afin d'exploiter des structures d'espace orientées possédant des raffinements locaux.

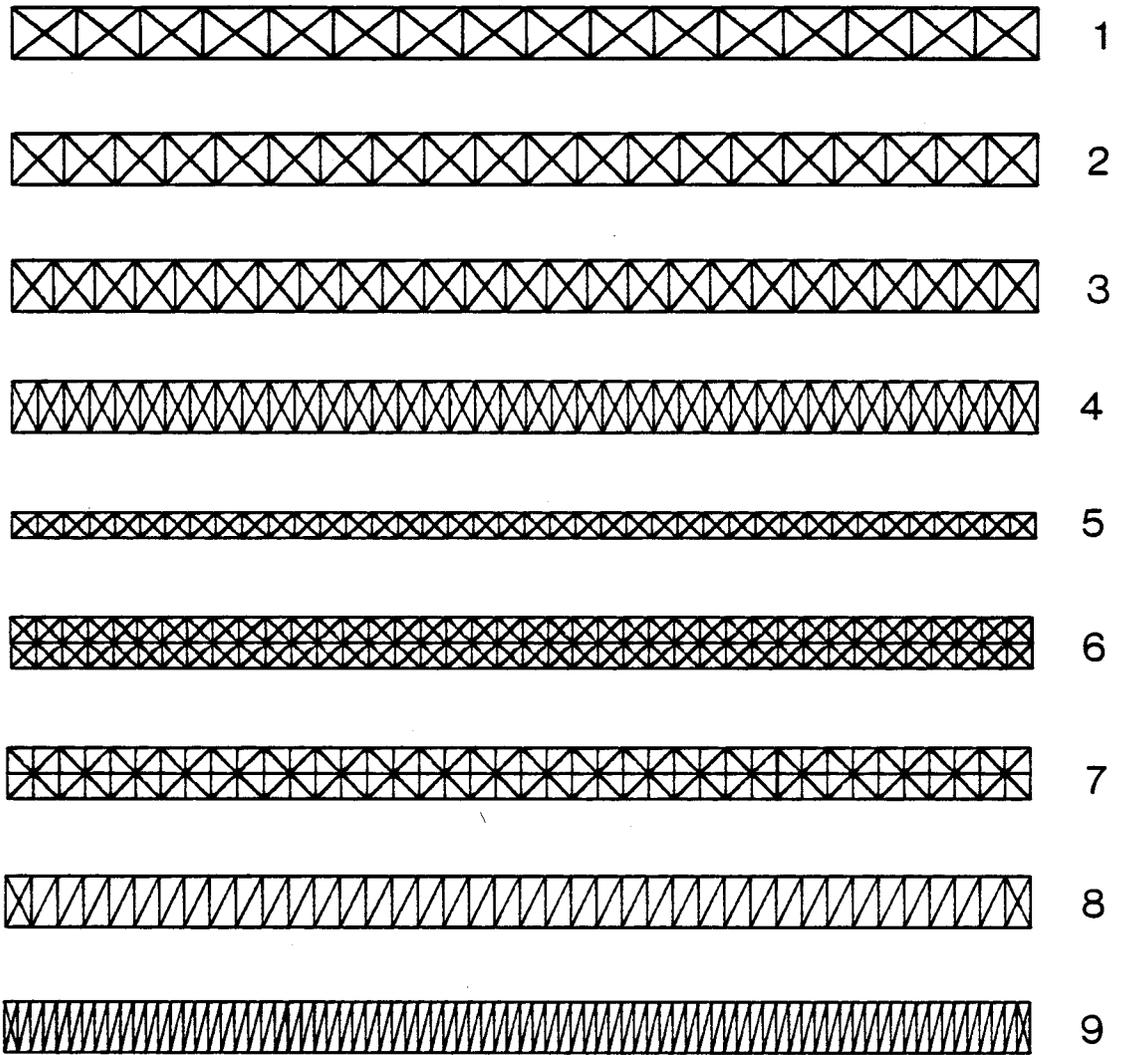
#### 5.1. Tests de maillages réguliers

A partir de la structure 1-D définie en figure IV.1, plusieurs maillages ont été testés. Les conditions de simulation sont proches de celles utilisées dans la partie précédente et sont définies comme suit :

$$\begin{array}{ll} D_{\text{int}} = 1.10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} & T = 10\ 000 \text{ s} \\ C_s = 2.10^{20} \text{ cm}^{-3} & C_b = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3} \\ L_D = 2.10^{-5} \text{ cm} & \\ L = 2.10^{-4} \text{ cm} & \alpha = 20 \end{array}$$

Tableau IV.1 : Conditions de simulation utilisée pour les tests de maillage.

Ces conditions correspondent à un cas maximal de non-linéarité afin d'augmenter la sensibilité des résultats. Les maillages, répertoriés en figure IV.11, ont la même longueur et se différencient par des structures de maille différentes. Ces structures ont été caractérisées par deux paramètres. Le premier,  $\epsilon_1$  est l'extension maximale d'un élément dans la direction de diffusion. Le second,  $\epsilon_2$ , est la distance séparant les plans nodaux perpendiculaires à la direction de diffusion.



*Figure IV.11. Maillages de test.*

Chaque maillage a été testé avec différents pas de temps et la stabilité numérique de chaque calcul a été quantifiée par le critère suivant. Comme la structure 1-D ne permet qu'un transport longitudinal des impuretés, les lignes d'isoconcentrations sont les plans nodaux perpendiculaires à la direction de diffusion. De ce fait le critère de stabilité défini comme étant l'erreur relative maximale entre les concentrations calculées sur ces plans nodaux est très significatif du degré de stabilité du calcul. D'une manière générale, les erreurs maximales se situent sur le front du profil. Dans le tableau IV.2, sont reportées les valeurs des erreurs maximales pour ces différents tests. Pour de fortes instabilités numériques, des valeurs nodales négatives apparaissent dans la solution, ces cas sont simplement référencés par une croix dans ce tableau.

MAILLAGE	Nombre de triangles	$\epsilon_1$	$\epsilon_2$	Nombre de boucles temporelles						
		$10^{-6}$ cm		1000	200	80	32	16	10	8
1	64	12.5	3.125	X	X	42.6	60.9	44.1	24.2	18.6
2	80	10.	2.5	X	25.9	76.4	44.9	24.8	7.0	4.7
3	100	8.	2.			13.4	19.34	7.2	4.1	3.0
4	160	5.	1.25		10.4	6.5	2.8	1.6	0.5	0.4
5	160	5.	1.25	9.3	6.5	5.3	2.7	1.4	0.6	0.3
6	320	5.	1.25				2.7		0.6	0.3
7	160	5.	2.5	45.7	42.8	28.1	16.1	8.3	4.4	3.2
8	84	5.	2.5	83.8	43.4	36.7	20.2	8.7		
9	160	2.5	1.25		2.8	2.2	1.2	0.8		

Tableau IV.2. : Erreurs relatives maximales (en %) apparaissant sur les lignes nodales d'isovaleurs.

Plusieurs remarques peuvent être clairement déduites de ces différents tests :

- D'une manière générale, pour chaque maillage, la stabilité du calcul augmente quand le nombre de boucles temporelles diminue.
- La comparaison des résultats obtenus avec les structures 4 et 7 ( $\epsilon_1$  identiques,  $\epsilon_2$  différents) indique que la performance d'un maillage est à relier à la distance entre ses lignes nodales  $\epsilon_2$ .
- Pour un même nombre de boucles temporelles, la stabilité du calcul augmente quand  $\epsilon_2$  diminue.
- Pour une valeur  $\epsilon_2$  fixée, les structures de maille utilisées dans les maillages 8 et 9 s'avèrent être les plus performantes.

Enfin, pour un increment de temps donné, les profondeurs de jonction obtenues avec des maillages suffisants (erreur 5 %), sont identiques, indépendamment du maillage choisi. Cette dernière remarque a permis une corrélation entre increment de temps et finesse de maille qui est proposée dans le point suivant.

*5.2. Cause d'instabilité numérique. Corrélation increment de temps et pas d'espace.*

La figure IV.9 et les remarques déduites du tableau IV.2 prouvent que les instabilités numériques apparaissent lorsque l'écart entre les lignes nodales,  $\epsilon_2$ , n'est pas suffisamment réduit pour supporter les forts gradients de concentration donnés par la résolution temporelle. Cette hypothèse est confirmée par les deux remarques complémentaires suivantes :

- Pour des maillages inadéquats, les instabilités numériques peuvent disparaître pour des grands increments de temps. Ceci est expliqué par la réduction du gradient de concentrations sur le front, figure IV.9. Les résultats alors obtenus sont stables mais n'ont pas atteint la convergence temporelle.
- Lorsque le degré de non-linéarité diminue, des résultats stables et

convergés peuvent être atteints avec des mailles plus lâches, le modèle de diffusion utilisé donnant alors des fronts moins abrupts, figure II. 13.

### 5.3. Raffinements locaux - Maille orientée.

Une fois déduite la cause d'instabilité numérique, la souplesse de la méthode des éléments finis est ici exploitée afin de générer des maillages optimisés faisant intervenir des raffinements locaux et des mailles orientées.

La figure IV.12 propose une suite de maillages qui ont été testés avec les données du tableau IV.1. Les profils de concentration calculés avec chacun de ces maillages sont identiques à ceux présentés en figure IV.9. Dans tous les cas, le degré de stabilité est semblable à celui obtenu dans le tableau IV.2 pour les maillages réguliers composés respectivement de la même maille élémentaire.

Ces derniers tests montrent qu'il suffit de conserver la distance imposée entre les plans nodaux près de la position du front de jonction final pour conserver la stabilité du calcul sur toute la structure. Ainsi des raffinements locaux réduisant considérablement les temps de calculs peuvent être exploités sur des maillages fixes, évitant ainsi l'utilisation de maillages évolutifs. La solution, qui présente de nettes oscillations en début de simulation, se stabilise à sa valeur nominale dès que la zone de forts gradients atteint la partie raffinée du maillage. Le fait qu'il n'y ait aucune perte de dose durant le calcul est essentiellement dû à la méthode des éléments finis elle-même qui est une méthode de discrétisation qui conserve les flux [7]. Cette propriété explique également que les solutions obtenues sont identiques, quel que soit le maillage utilisé, dès que ceux-ci vérifient localement le critère de stabilité numérique. Aucun autre argument mathématique complémentaire justifiant l'efficacité de cette méthode n'est pour le moment proposé.

Les deux dernières structures de la figure IV.12 indiquent que les éléments triangulaires à 6 noeuds peuvent supporter des angles très faibles, repoussant ainsi très loin les limitations dues au conditionnement de la maille élémentaire. Cependant de telles mailles doivent obligatoirement être orientées perpendiculairement à la direction de diffusion.

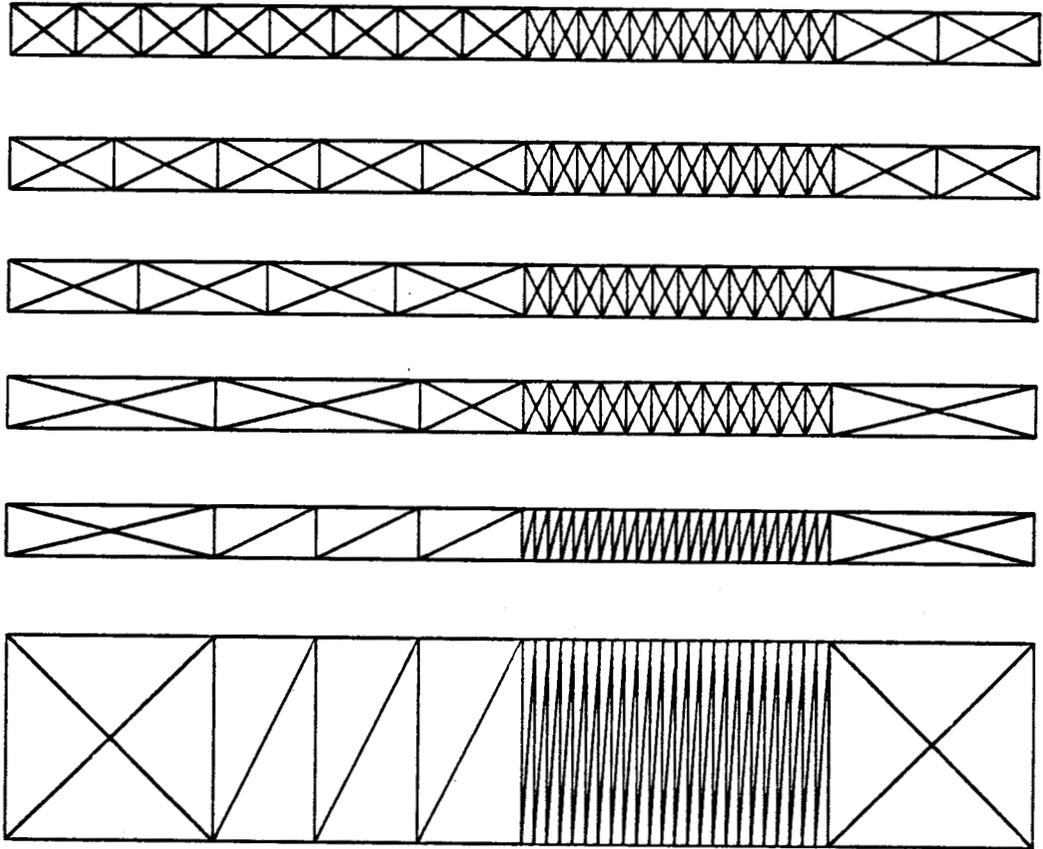


Figure IV.12. Progression de maillages optimisés.

5.4. *Techniques de simulation appliquées à des exemples bidimensionnels.*

De manière conséquente aux deux parties précédentes, les paramètres de simulation sont déterminés comme suit :

- Le nombre de boucles temporelles est déterminé grâce à l'abaque de la figure IV.10., fonction du degré de non-linéarité de la simulation, équation IV.3, et de la précision requise sur les profondeurs de jonction.
- Un maillage spécifique est généré pour assurer en tout point le critère de stabilité. Les triangulations sont réalisées par assemblage de motifs élémentaires. Une bibliothèque de maillages types correspondant à des motifs technologiques usuels a ainsi été élaborée.

Cette méthodologie est ici précisée dans deux cas de prédépôts bidimensionnels.

5.4.a. Cas de moyenne non-linéarité

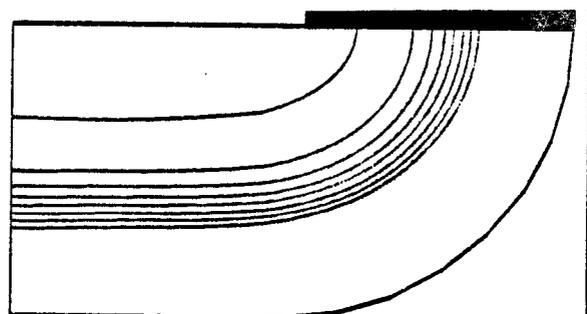
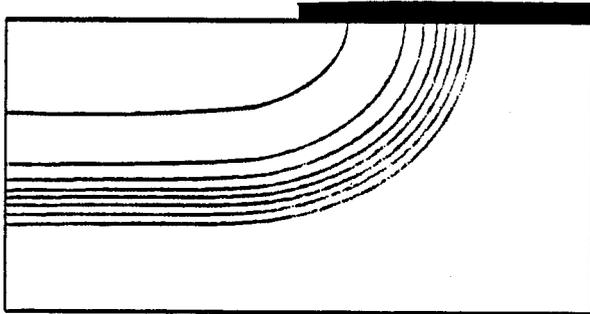
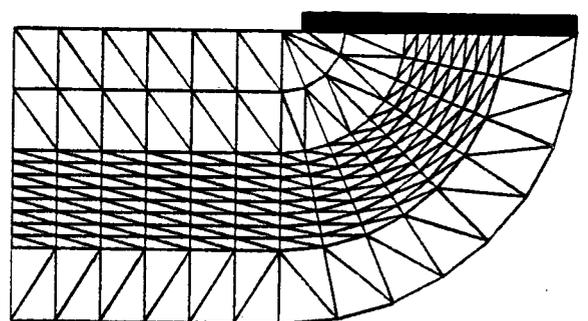
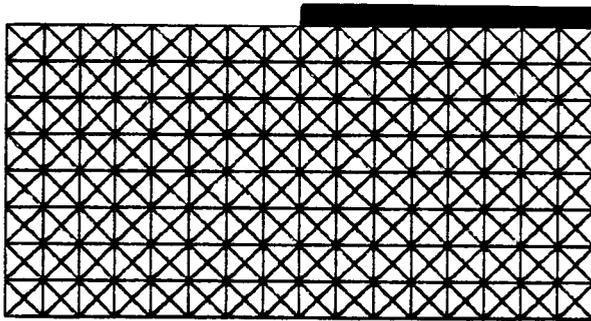
A partir de la structure 2-D illustrée en figure IV.2, un prédépôt bidimensionnel est simulé avec les données suivantes :

$$\begin{aligned} D_{\text{int}} &= 1.10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} & T &= 10\ 000 \text{ s} \\ C_s &= 2.10^{20} \text{ cm}^{-3} & C_b &= 2.10^{15} \text{ cm}^{-3} \\ L_D &= 2.10^{-5} \text{ cm} & \alpha &= 5 \\ \text{(a) } L_f = L = 1 &= 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ cm} & NT &= 512 \\ \text{(b) } L_f = 1 &= 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ cm} & L &= 1.1 \cdot 10^{-4} \text{ cm} \\ NT &= 299 \end{aligned}$$

Tableau IV.3. *Données pour la simulation bidimensionnelle du prédépôt de moyenne non-linéarité*

*(a) maillage régulier (b) maillage adapté*

Une précision supérieure à 5 % est obtenue avec 32 boucles temporelles permettant ainsi un incrément de temps de 312.5 secondes. La figure IV.13 compare les résultats obtenus avec un maillage régulier (a) puis optimisé (b) pour cet exemple de non-linéarité moyenne pour lequel le temps de calcul est encore raisonnable pour la structure régulière.



(a)

(b)

Figure IV.13. Simulation bidimensionnelle d'un prédépôt de Bore dans un cas de non-linéarité moyenne.

(a) Maillage régulier (b) Maillage adapté

Isoconcentrations :  $1.10^{20}$ ,  $3.10^{19}$ ,  $1.10^{19}$ ,  $3.10^{18}$ ,  $1.10^{18}$ ,  $3.10^{17}$ ,  $1.10^{17}$ ,  $3.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

Les résultats de la figure IV.13 confirment les conclusions qui ont été déduites des exemples de test 1-D, et les étendent aux structures bidimensionnelles. En effet, une excellente stabilité numérique est obtenue avec le maillage optimisé, démontrant ainsi l'efficacité des structures de maille raffinées et orientées pour les exemples 2-D. De plus, l'immunité au maillage est vérifiée, les courbes d'isovaleurs obtenues étant identiques.

#### 5.4.b. Cas de forte non-linéarité

L'exemple précédent est ici présenté dans le cas de non-linéarité maximale ( $\alpha = 20$ ) pour lequel un maillage régulier ne peut plus être utilisé, pour des raisons évidentes de temps de calcul et d'espace mémoire. Un increment de temps de 125 s a été choisi qui conduit à 80 boucles temporelles assurant ainsi une précision supérieure à 5 % sur la position de la jonction.

La figure IV.14 donne le maillage utilisé tandis qu'en figure IV.15, est reporté le tracé d'isovaleurs obtenu. Là encore un excellent degré de convergence est atteint sur toute la structure, qui est précisé par les différentes représentations en coupe de la figure IV.16.

Ce calcul bidimensionnel de prédépôt de non-linéarité maximale contient toutes les difficultés numériques majeures qui peuvent se présenter lors de simulation de cas concrets. Les résultats obtenus dans ce cas attestent la validité de la méthode numérique et des techniques développées et permettent d'entreprendre la simulation complète de procédés technologiques réels.

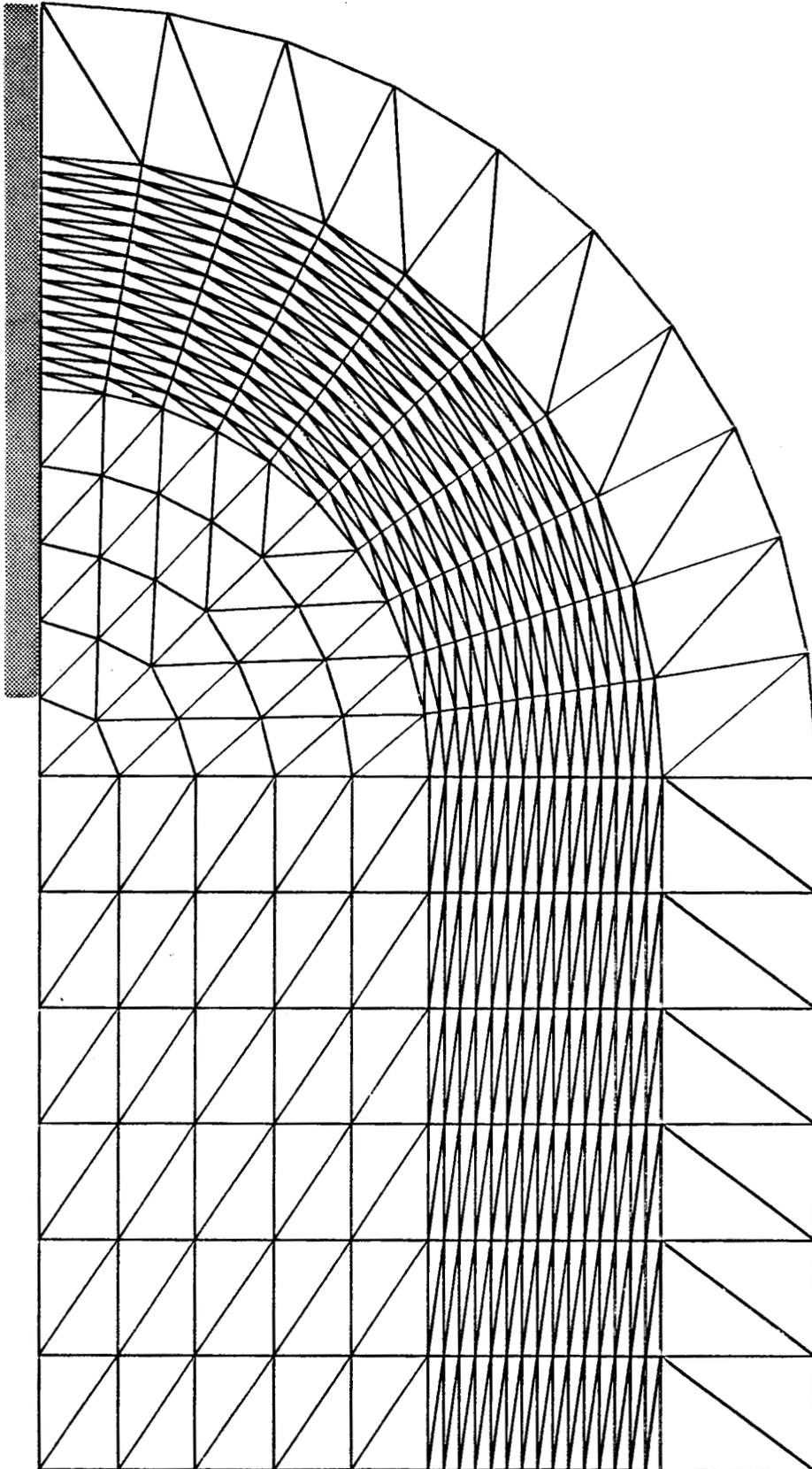


Figure IV.14. Maillage utilisé pour la simulation bidimensionnelle du prédépôt dans le cas de non-linéarité maximale.

$L_f = 1 = 2.10^{-4}$  cm     $L = 1.8 \cdot 10^{-4}$  cm     $NT = 622$

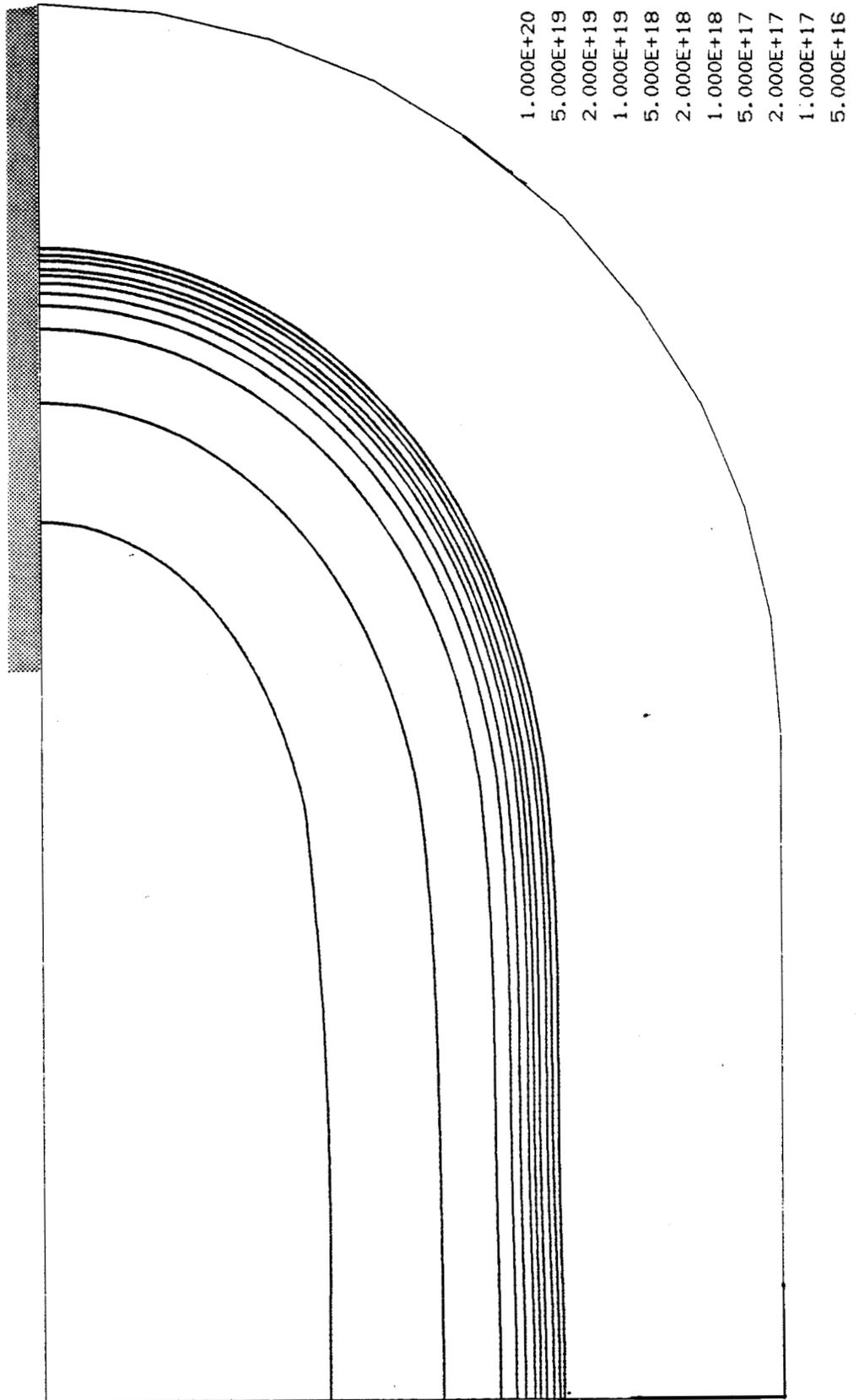
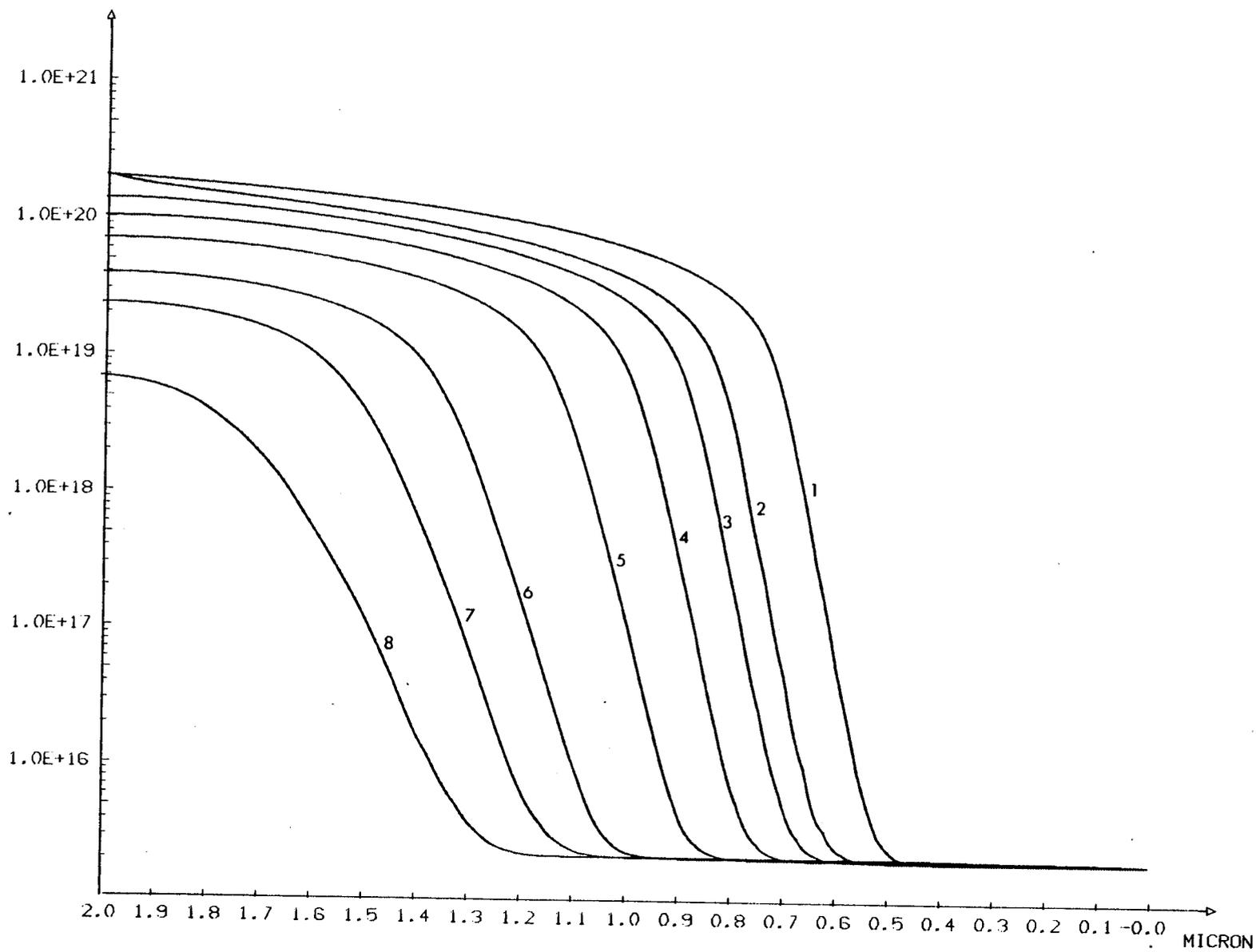


Figure IV.15. Tracé d'isovaleurs obtenues avec le maillage de la figure IV.14.

Figure IV.16. Représentation en coupe du profil de la figure IV.15.



PROFIL DE DIFFUSION  
DROITES

- 1 X = 0.000E+00 CM
- 2 X = 2.000E-04 CM
- 3 X = 2.200E-04 CM
- 4 X = 2.400E-04 CM
- 5 X = 2.600E-04 CM
- 6 X = 2.800E-04 CM
- 7 X = 2.900E-04 CM
- 8 X = 3.000E-04 CM

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES du Chapitre IV

1. D. COLLARD and J. DECARPIGNY, "Two-dimensional simulation of VLSI processes : a solution using finite element method", 3rd Int. Conf. on Numerical Analysis of Semiconductor Devices and I.C.'s, Galway, Ireland, June 15-17, 1983.
2. D. COLLARD and J.N. DECARPIGNY, "Two-dimensional process simulation using a quadratic finite element discretisation", COMPEL, Vol. 3, pp. 17-33, 1984.
3. D. COLLARD, M. LOBET, J.N. DECARPIGNY and I. DESOUTTER, "Two-dimensional process simulation using a quadratic finite element discretisation. The connection with device simulation", Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Swansea, U.K., July 8-12, 1984.
4. H. RYSSEL, K. HABERGER, K. HOFFMAN, G. PRINKE, P. DÜMCKE and A. SACKS, "Simulation of doping processes", IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED-27, pp. 1484-1492, 1980.
5. D.P. KENNEDY and R.R. O'BRIEN, "Analysis of the impurity atom distribution near the diffusion mask for a planar p-n junction", IBM J., Vol. 9, pp. 179-186, 1965.
6. D.D. WARNER and C.L. WILSON, "Two-dimensional concentration dependent diffusion", Bell Syst. Tech. J., Vol. 59, pp. 1-41, 1980.
7. J.J. BARNES and R.J. LOMAX, "Finite element methods in semiconductor device simulation", IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-24, pp. 1082-1089, 1977.

## - CHAPITRE V -

### SIMULATION DE MOTIFS TECHNOLOGIQUES

Afin d'illustrer les possibilités de simulation données par l'approche numérique et les critères développés dans le chapitre précédent, 5 thèmes technologiques ont été considérés. Ces motifs et les résultats de simulation correspondante sont présentés dans un ordre de complexité croissante et sont répertoriés de la manière suivante :

- . Motif 1 : Implantation ionique et recuit inerte
- . Motif 2 : Structure N.P.N. en ambiance inerte
- . Motif 3 : Structure LOCOS
- . Motif 4 : Simulation complète de la zone source/drain en technologie N-MOS
- . Motif 5 : Diffusion couplée Arsenic/Bore en ambiance oxydante

L'ensemble de ces simulations correspond à des enchaînements types d'étapes technologiques qui sont à la base de la plupart des procédés industriels. Ainsi les résultats obtenus pour chacun de ces motifs sont très révélateurs de l'efficacité des algorithmes numériques développés pour la simulation bidimensionnelle de technologie.

## 1. IMPLANTATION IONIQUE ET RECUIT INERTE

Une implantation ionique locale de bore est simulée, suivie d'un recuit inerte durant lequel l'exodiffusion est négligée. Pour cet exemple un maillage régulier d'extension  $1.6 \mu\text{m} \times 0.8 \mu\text{m}$  comportant 1024 éléments a été généré. L'implantation ionique locale (70 keV,  $Q_{\square} = 1.10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) est réalisée dans l'hypothèse d'un masque abrupt infini, le profil implanté étant alors donné par la formule analytique de l'équation II.86. Un coefficient de diffusion constant,  $D_{\text{int}} = 2.10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ , est utilisé pour le recuit thermique (1000°C, 3600 s).

La figure V.1. donne les isovaleurs superposées avant et après recuit, la figure V.2. étant une représentation en coupe de ces deux profils.

## 2. STRUCTURE N.P.N. EN AMBIANCE INERTE

Sur un substrat n, un caisson de type p est réalisé, suivi d'un prédépôt d'arsenic. Cette structure est représentative de procédés CMOS, DMOS et bipolaire. Chaque tracé d'isovaleurs est présenté avec son profil unidimensionnel correspondant.

### Etape 1

- . Implantation de bore (70 keV,  $Q_{\square} = 3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ )
- . Recuit ambiance inerte (1120°C, 20400s,  $D_{\text{int}} = 2.25 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ )

L'implantation de bore est réalisée à travers une fine couche d'oxyde d'épaisseur  $0.05 \mu\text{m}$ , la structure de masquage étant abrupte infinie comme précédemment. Un maillage fixe uniforme ( $8 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$ ) possédant 512 éléments est utilisé pour cette première étape. La figure V.3 donne un agrandissement du profil implanté tandis que le profil de dopage après recuit est reporté en figure V.4.

La longueur de diffusion du recuit étant nettement plus grande que la pénétration de l'implantation, le profil résultant (figure V.4.b) est proche d'une demi-Gaussienne. Malgré l'écart important entre les extensions du profil avant et après recuit, il est intéressant de constater qu'un maillage fixe est suffisant. Le contrôle du résultat de la figure V.4. a été effectué par un calcul précis de la dose par intégration numérique.

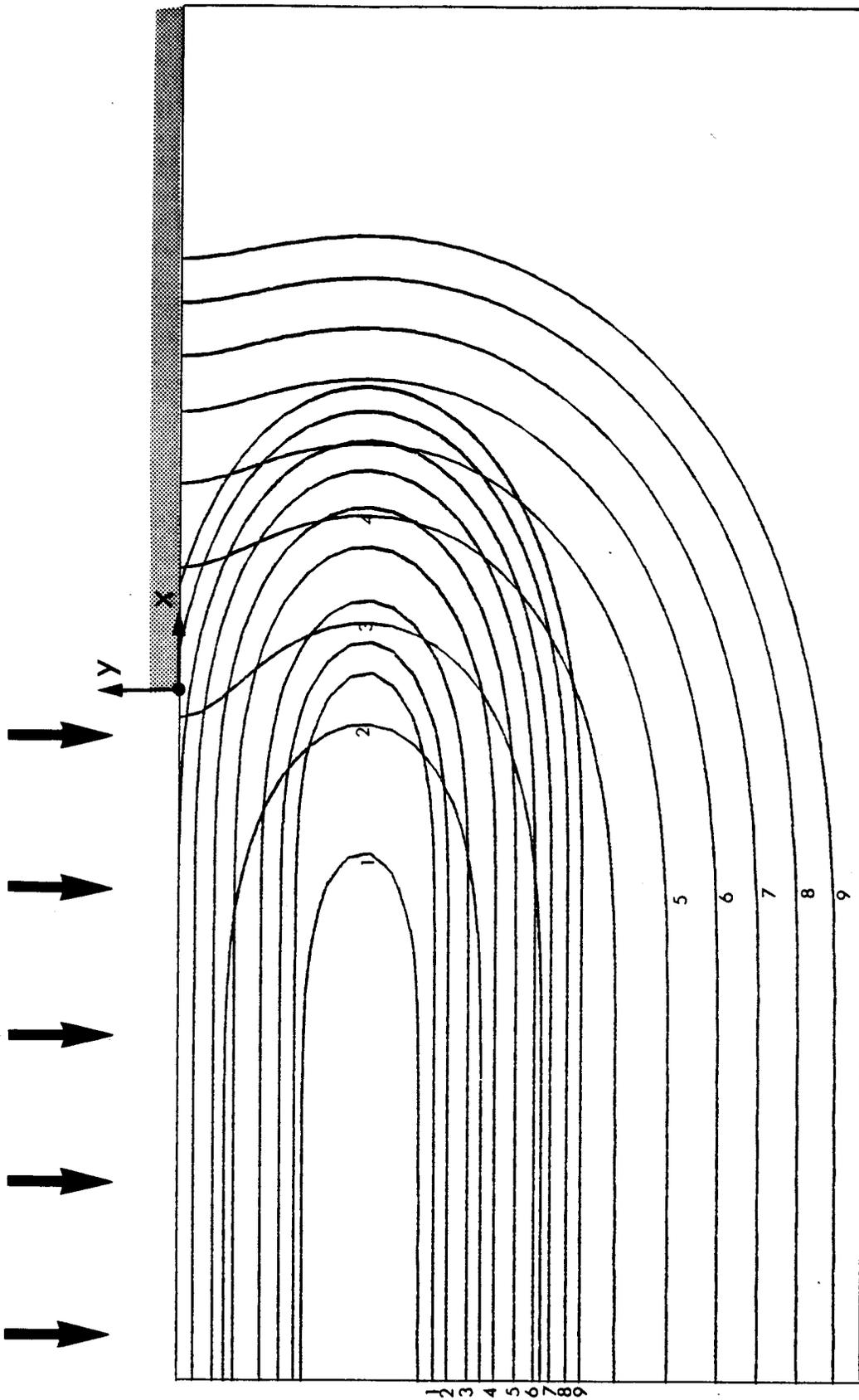


Figure V.1. - Isoconcentrations avant et après recuit  
Isovaleurs :  $3 \cdot 10^{17}$ ,  $2 \cdot 10^{17}$ ,  $1 \cdot 10^{17}$ ,  $3 \cdot 10^{16}$ ,  $1 \cdot 10^{16}$ ,  
 $3 \cdot 10^{15}$ ,  $1 \cdot 10^{15}$ ,  $3 \cdot 10^{14}$ ,  $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

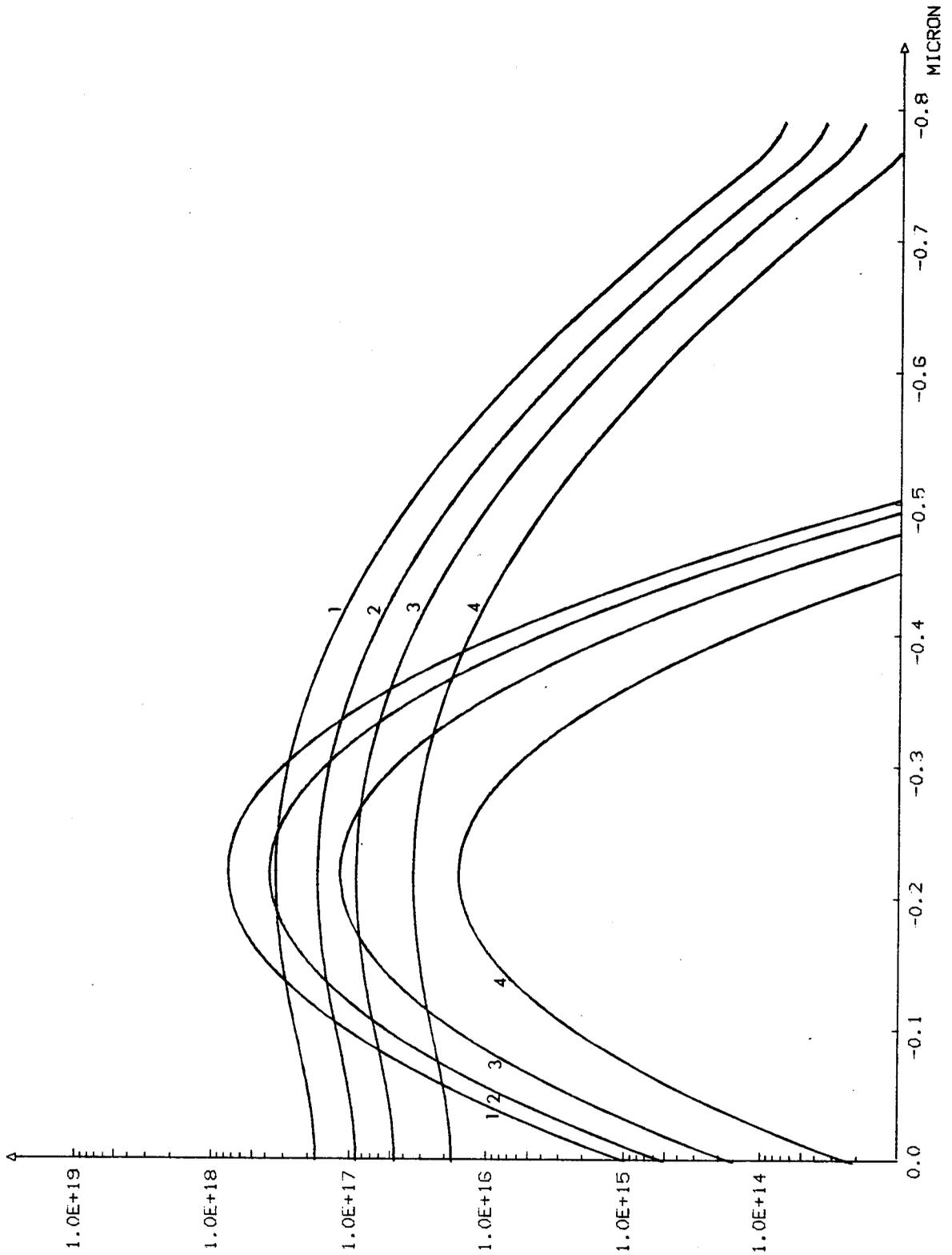
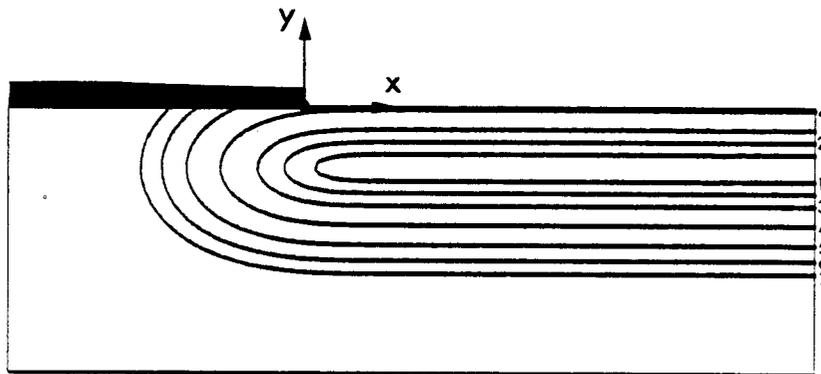


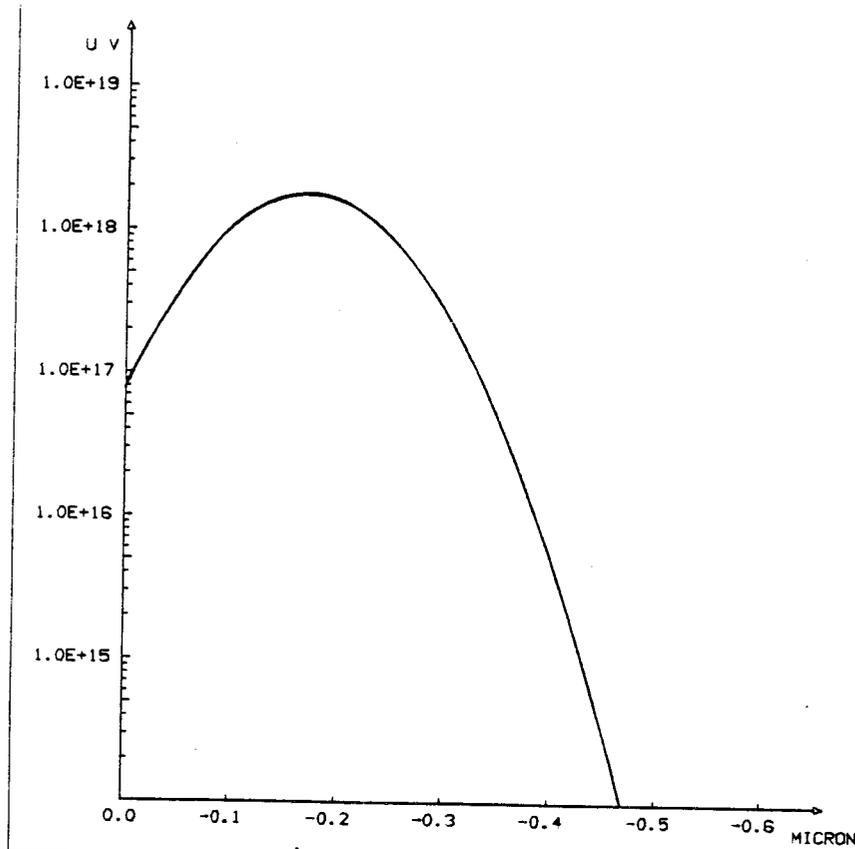
Figure V.2. - Représentation en coupe de la figure V.1.  
Coupes suivant les droites :  $X = -0.4, 0.4,$   
 $0.5, 0.6 \mu\text{m}$



PROFIL DE DIFFUSION  
 IMPLANTATION CAISSON-P  
 BORE AVANT RECUIT  
 E = 70 KEV  
 DOSE = 3E13 AT/CM2

1.500E+18	1	———
1.000E+18	2	———
5.000E+17	3	———
1.000E+17	4	———
1.000E+16	5	———
1.000E+15	6	———
1.000E+14	7	———

(a)



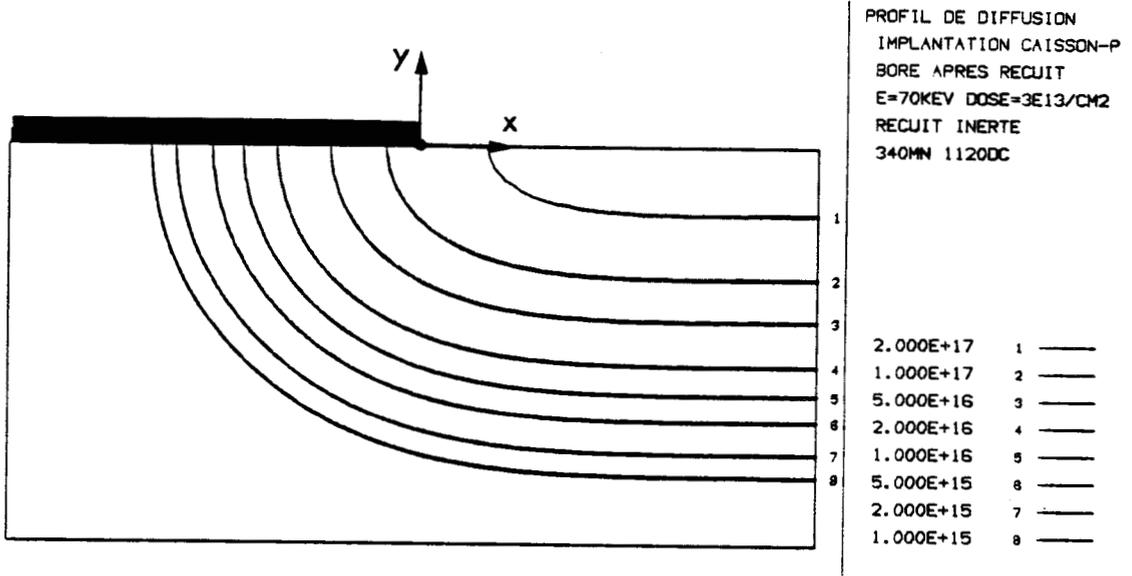
PROFIL DE DIFFUSION  
 DROITE  
 X = 1.500E-04 CM

——— Bore

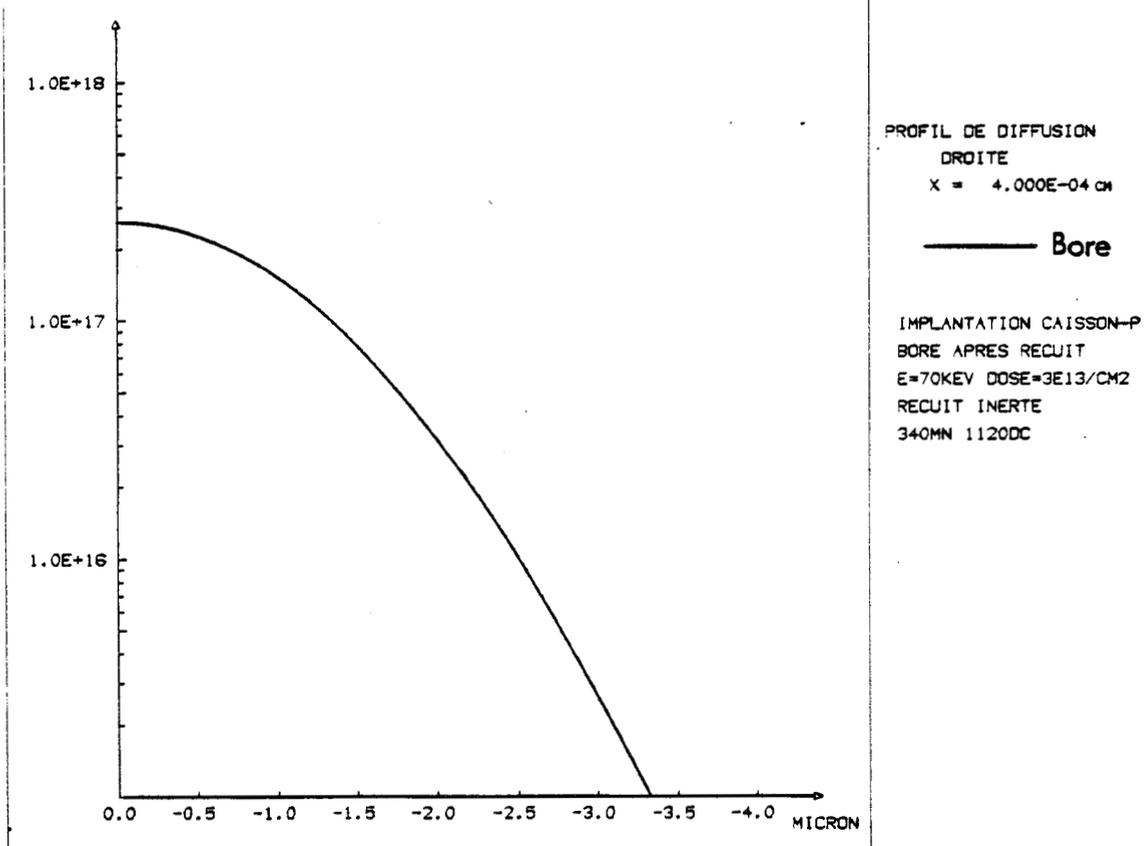
IMPLANTATION CAISSON-P  
 BORE AVANT RECUIT  
 E=70KEV DOSE=3E13/CM2

(b)

Figure V.3. - Profil de dopage après implantation  
 (Agrandissement sur une structure 2.25 µm x 0.75 µm)  
 (a) Isovaleurs - (b) Représentation en coupe



(a)



(b)

Figure V.4. - Profil de dopage à l'issue du recuit

(a) Isovaleurs - (b) Représentation en coupe

### Étape 2

. Prédépôt d'arsenic ( $C_s = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ,  $1110^\circ\text{C}$ ,  $4200 \text{ s}$ )

Un prédépôt local d'arsenic est ensuite réalisé durant lequel une évaporation naturelle de bore est simulée (Equation II.14). Un maillage optimisé, présenté en Figure V.5. a été généré sur lequel le profil du caisson p (figure V.4.) a été interpolé. La figure V.6.a donne les iso-concentrations de bore et d'arsenic à la fin de cette étape et montre des effets prononcés de couplage bidimensionnel. Ce couplage se traduit, dans le modèle de Hu [1] utilisé ici, équation II.36, par un ralentissement de la diffusion du bore dans la zone riche en arsenic. Le tracé du profil en coupe, figure V.6.b, donne un excellent accord avec le programme SUPREM II [2]. Les jonctions bidimensionnelles, reportées en figure V.7. pour deux valeurs différentes de concentration de substrat démontrent des effets marqués qui peuvent être critiques par la réalisation de structures CMOS, DMOS ou bipolaires.

### 3. STRUCTURE LOCOS

Un procédé LOCOS est présenté, les paramètres technologiques étant très voisins de ceux utilisés dans les simulations de R. Tielert [3]. L'implantation ionique de bore, figure V.8, est effectuée à travers une couche d'oxyde de  $0.05 \mu\text{m}$ . Le masque, issu de la photolithogravure des zones activées (nitrure, oxyde, résine) est considéré comme imperméable, le profil étant obtenu avec l'équation II.86.

A l'issue de cette implantation, 3 simulations différentes de recuits thermiques ( $1000^\circ\text{C}$ ,  $7200 \text{ s}$ ) sont réalisées sur un maillage de 330 éléments d'extension  $1.876 \mu\text{m} \times 1.36 \mu\text{m}$ . Pour ces trois calculs, une diffusivité constante est prise pour le bore,  $D_{\text{int}} = 1.527 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ . La première simulation, Figure V.9., est un recuit en ambiance inerte où l'exodiffusion du bore est négligée ( $F = 0$ ). Dans la seconde, cette exodiffusion, équation II.141, est prise en compte sur la frontière supérieure du domaine qui simule une évaporation de type silicium/gaz inerte. Le profil de concentration résultant, reporté en figure V.10, illustre, en

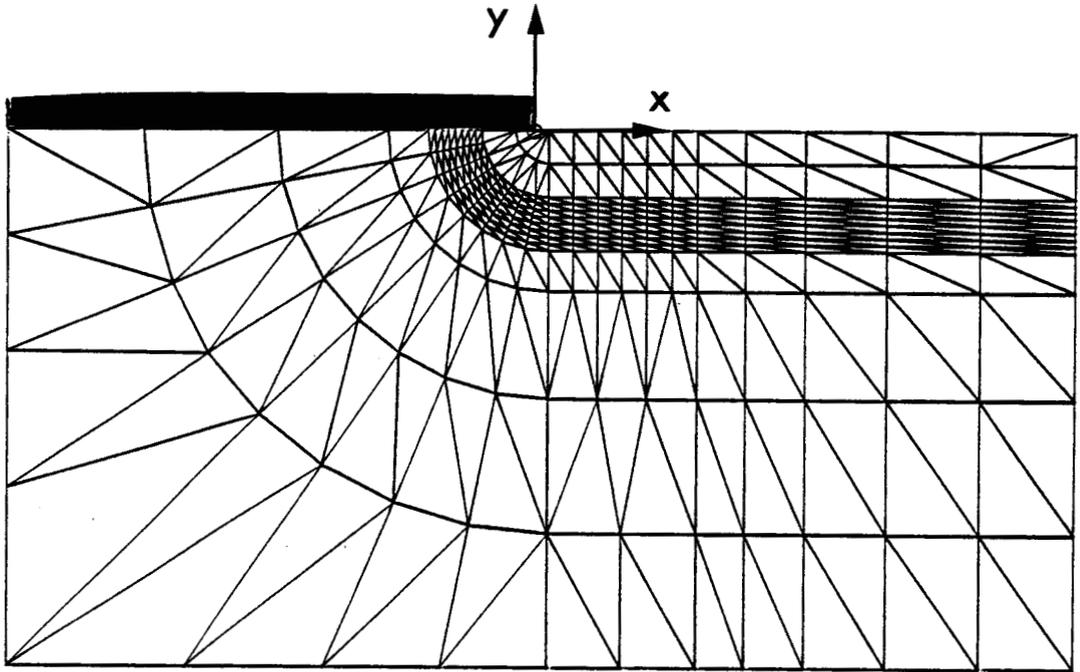


Figure V.5. - Maillage optimisé pour le prédépôt d'Arсениc

Extension :  $7.9 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$

Longueur de la fenêtre :  $4 \text{ m}$

$D_{\text{int}}$  : arsenic =  $0.25 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$

bore :  $0.18 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$

Evaporation bore :  $F = -0.25 \cdot 10^{-7} (\text{cm s}^{-1}) \cdot C$

comparaison avec la figure V.9. l'effet de l'évaporation sur la concentration superficielle. Le troisième recuit est simulé en ambiance oxydante. La forme de l'oxyde est définie de manière analytique grâce à l'équation II.122 où le facteur de forme,  $\gamma$ , est pris à une valeur moyenne :  $\gamma = 0.5$ . La cinétique d'oxydation est calculée avec les paramètres de Deal et Grove [4], figure II.41. La figure V.11. donne le profil de concentration à l'issue de l'oxydation superposé au maillage final.

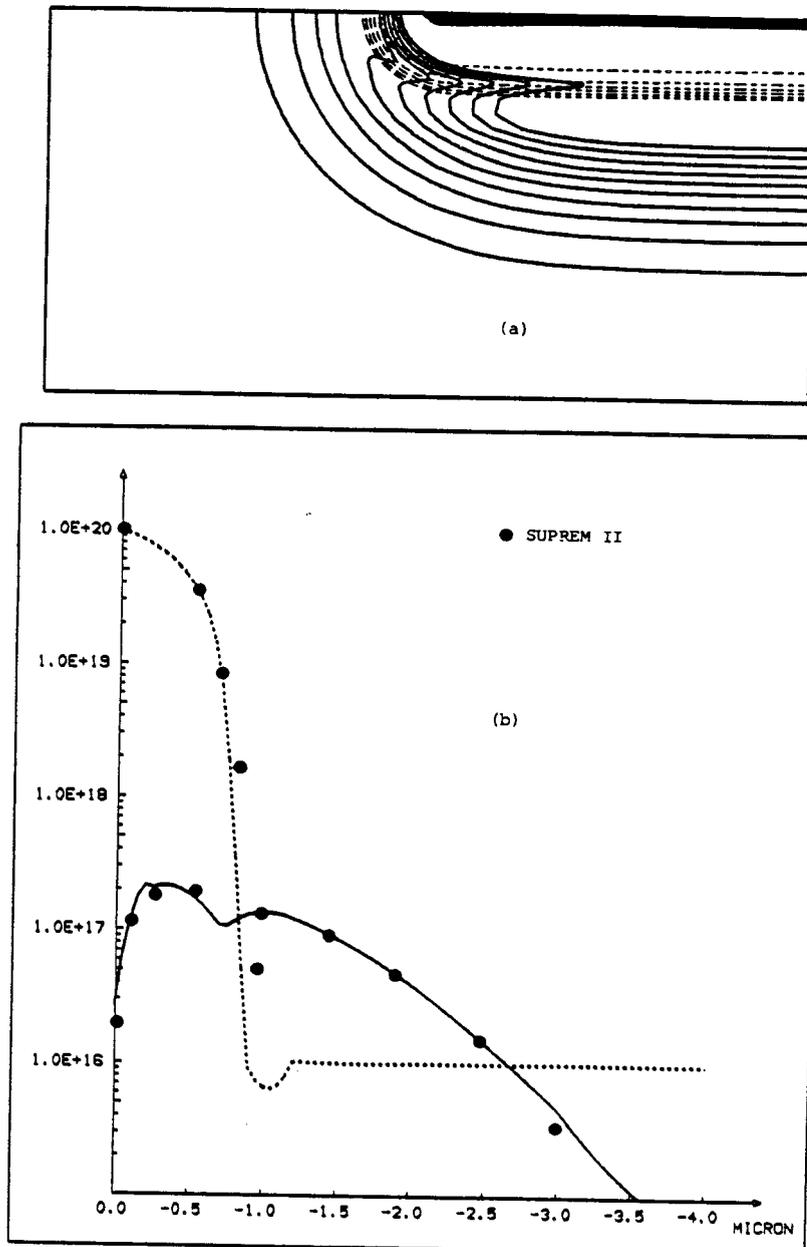


Figure V.6. - Profil de dopage à l'issue du prédépôt d'arsenic

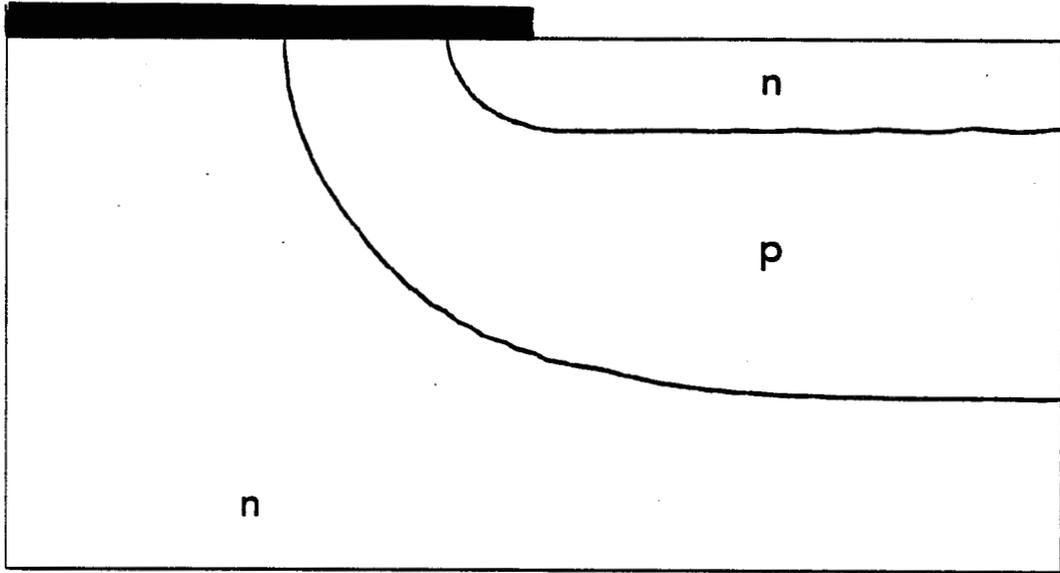
(a) Isovaleurs :

bore (traits pleins) : 8, 7, ..., 1 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>

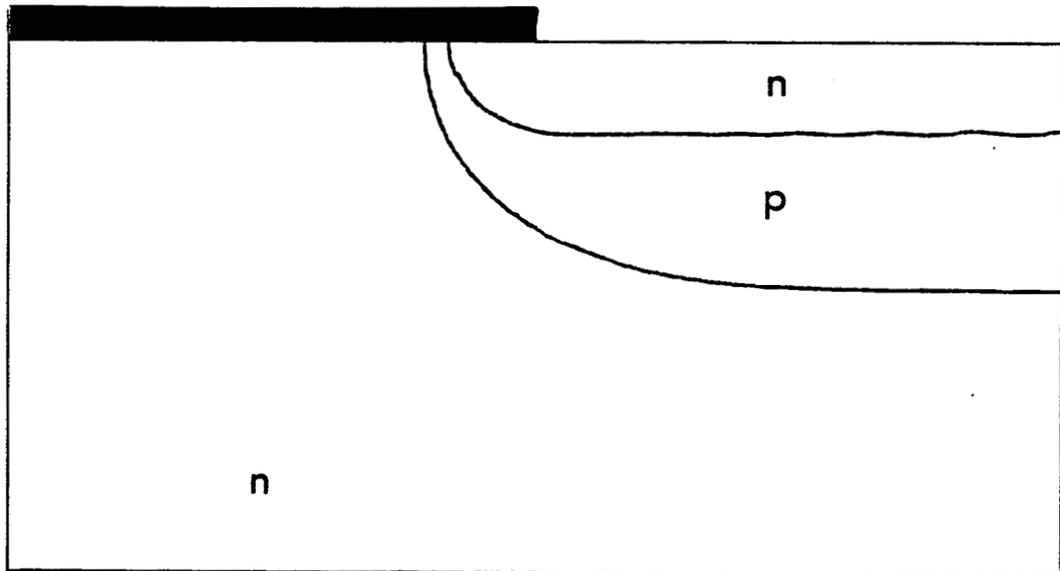
arsenic (traits pointillés) : 3.10<sup>19</sup>, 1.10<sup>19</sup>,

3.10<sup>18</sup>, 1.10<sup>18</sup>, 3.10<sup>17</sup>, 1.10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup>

(b) Représentation en coupe



(a)

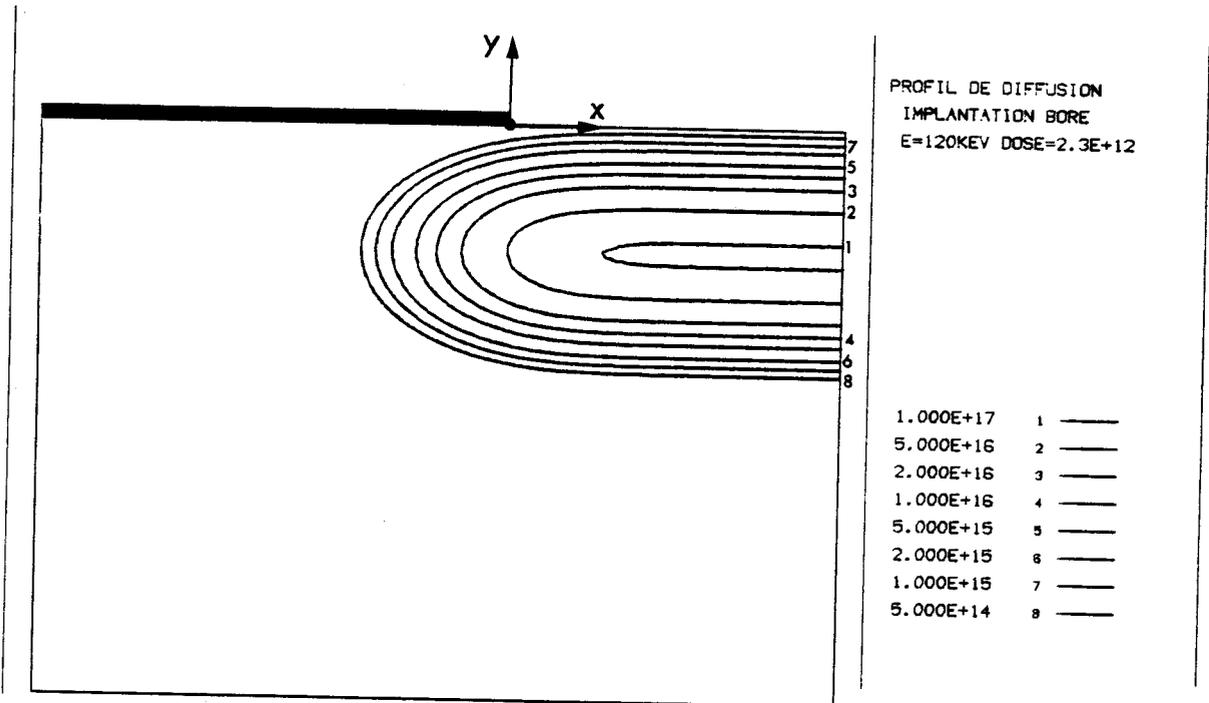


(b)

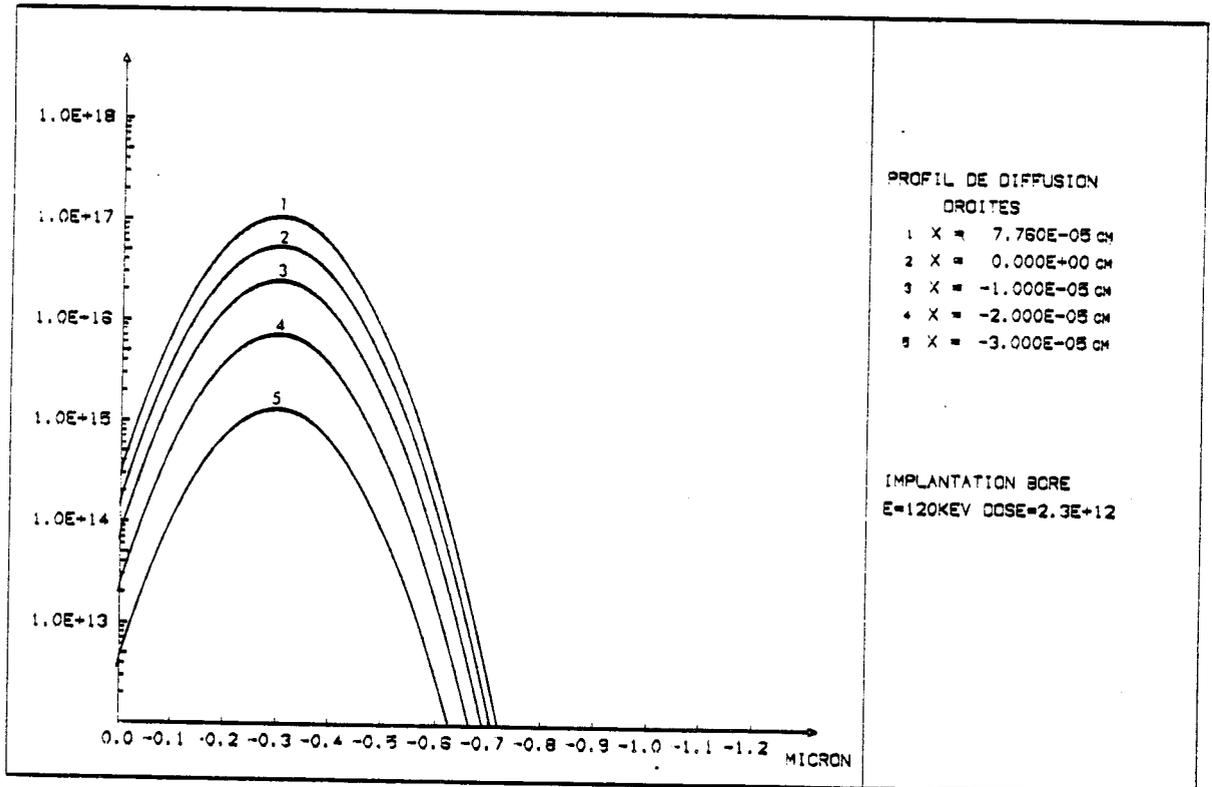
Figure V.7. - Tracés de jonctions bidimensionnelles

(a) : concentration substrat :  $1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$

(b) : concentration substrat :  $5.10^{16} \text{ cm}^{-3}$

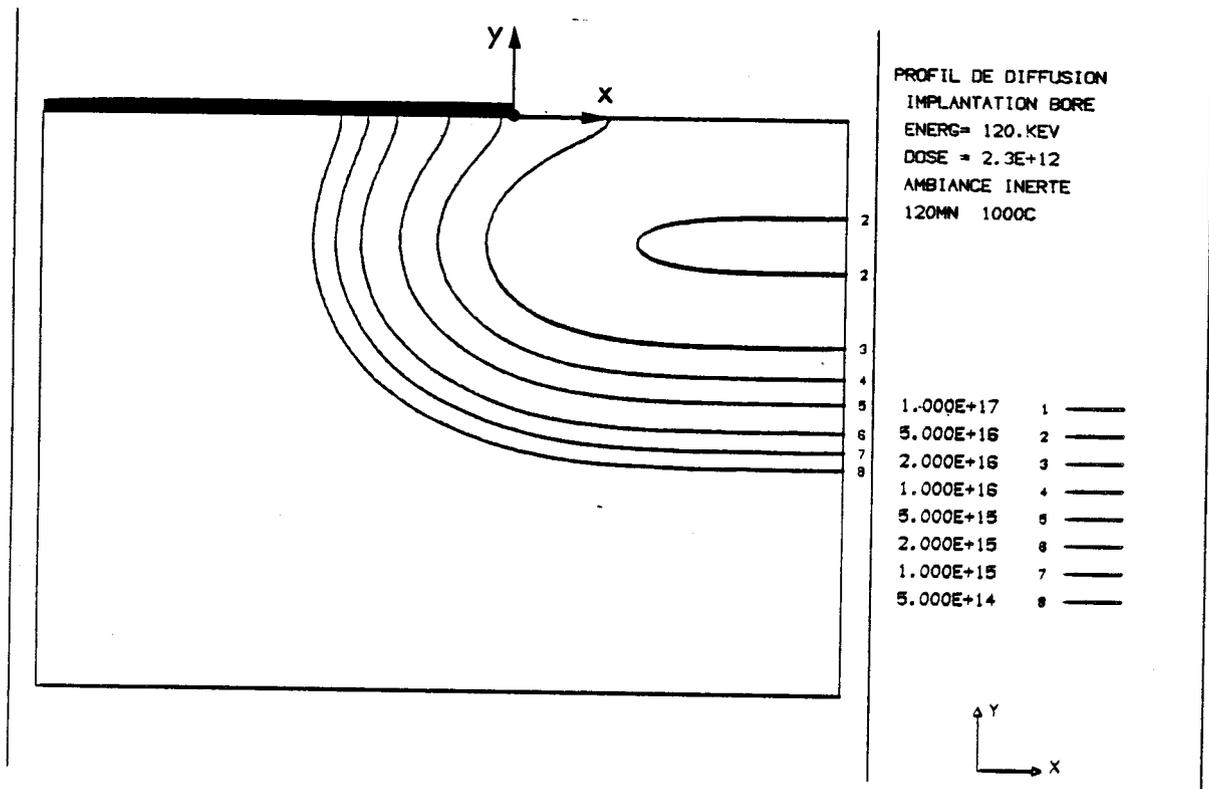


(a)

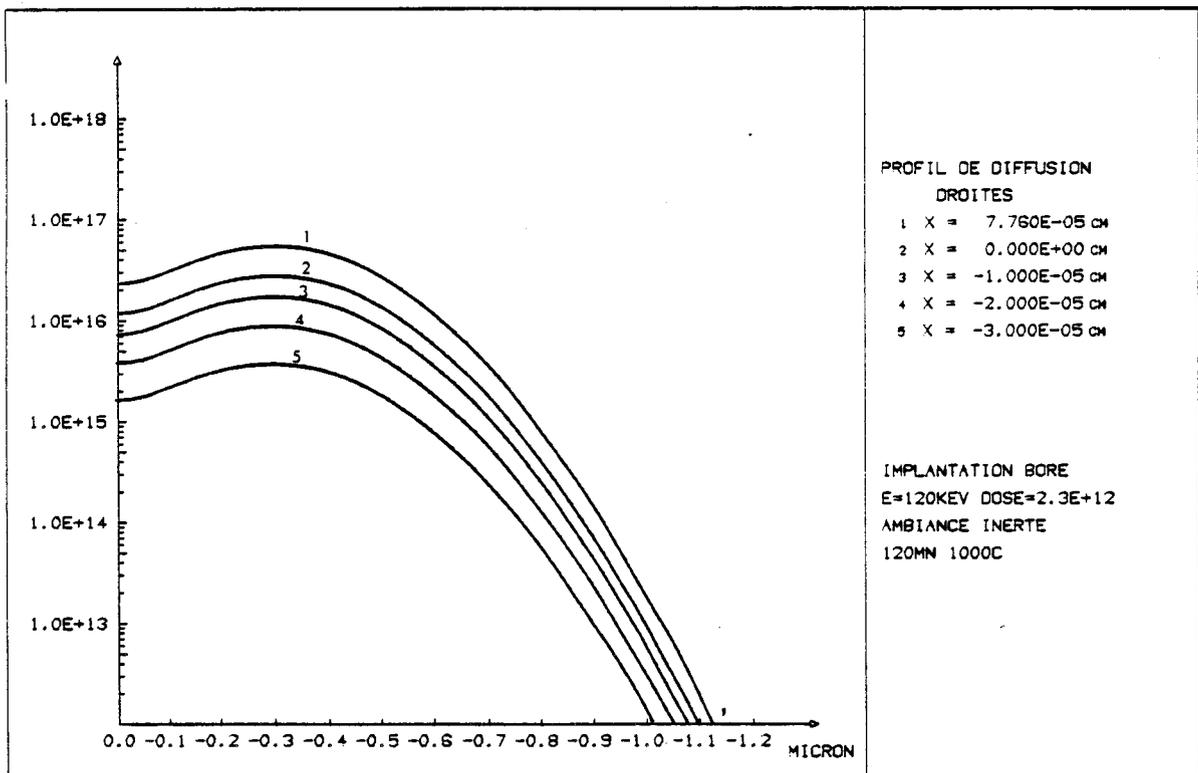


(b)

Figure V.8. - Profil de dopage à l'issue de l'implantation ionique  
(a) Isovaleurs - (b) Profil en coupe



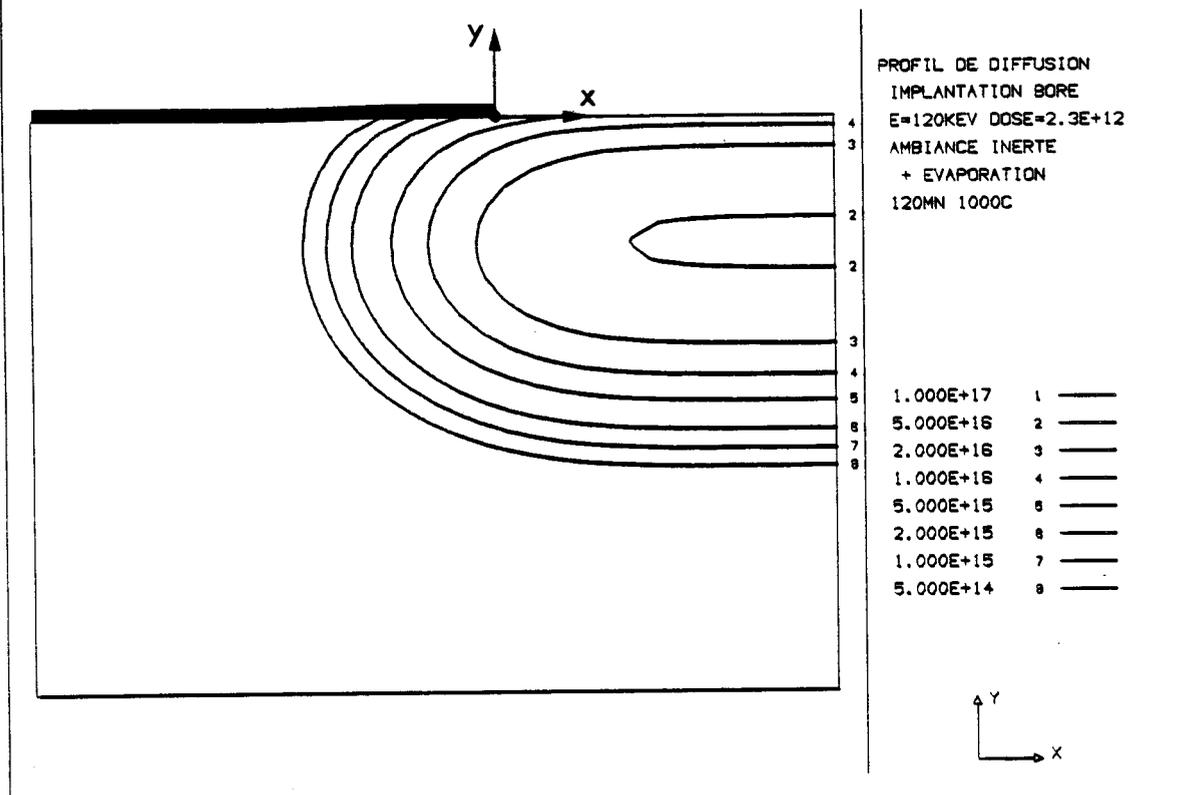
(a)



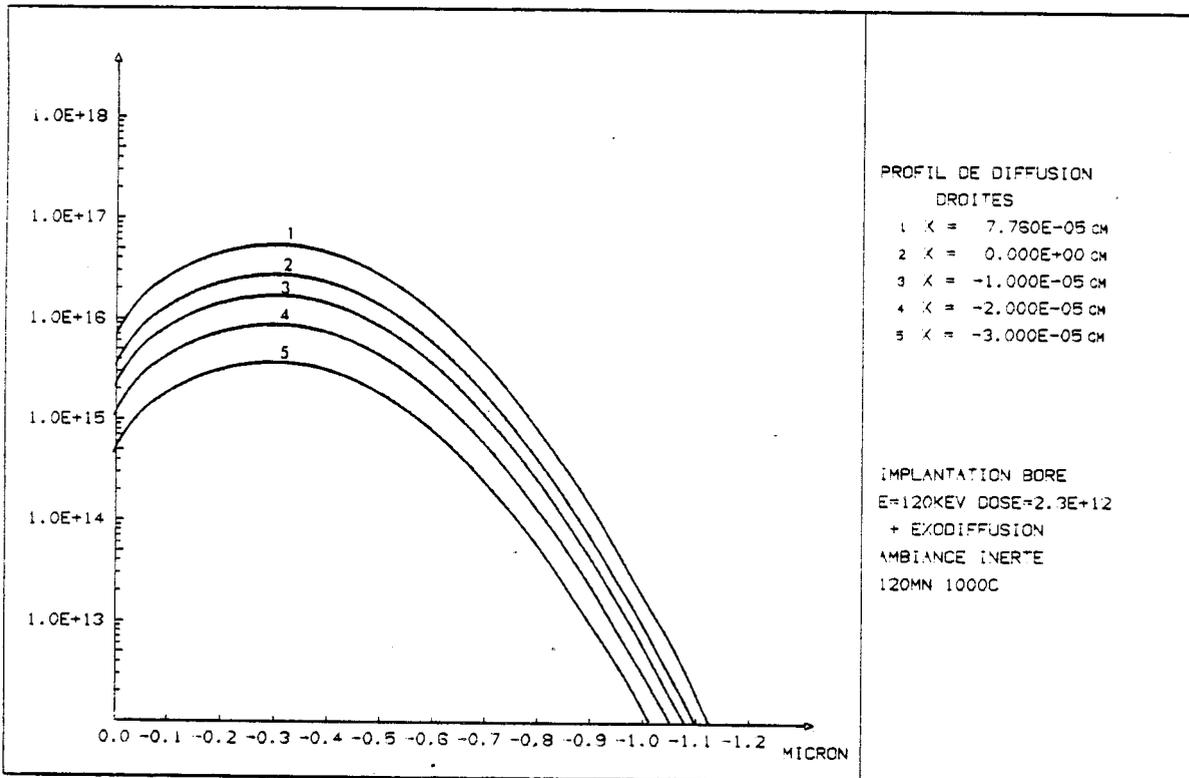
(b)

Figure V.9. - Profil de dopage à l'issue du recuit inerte (sans évaporation)

(a) Isovaleurs - (b) Profil en coupe



(a)

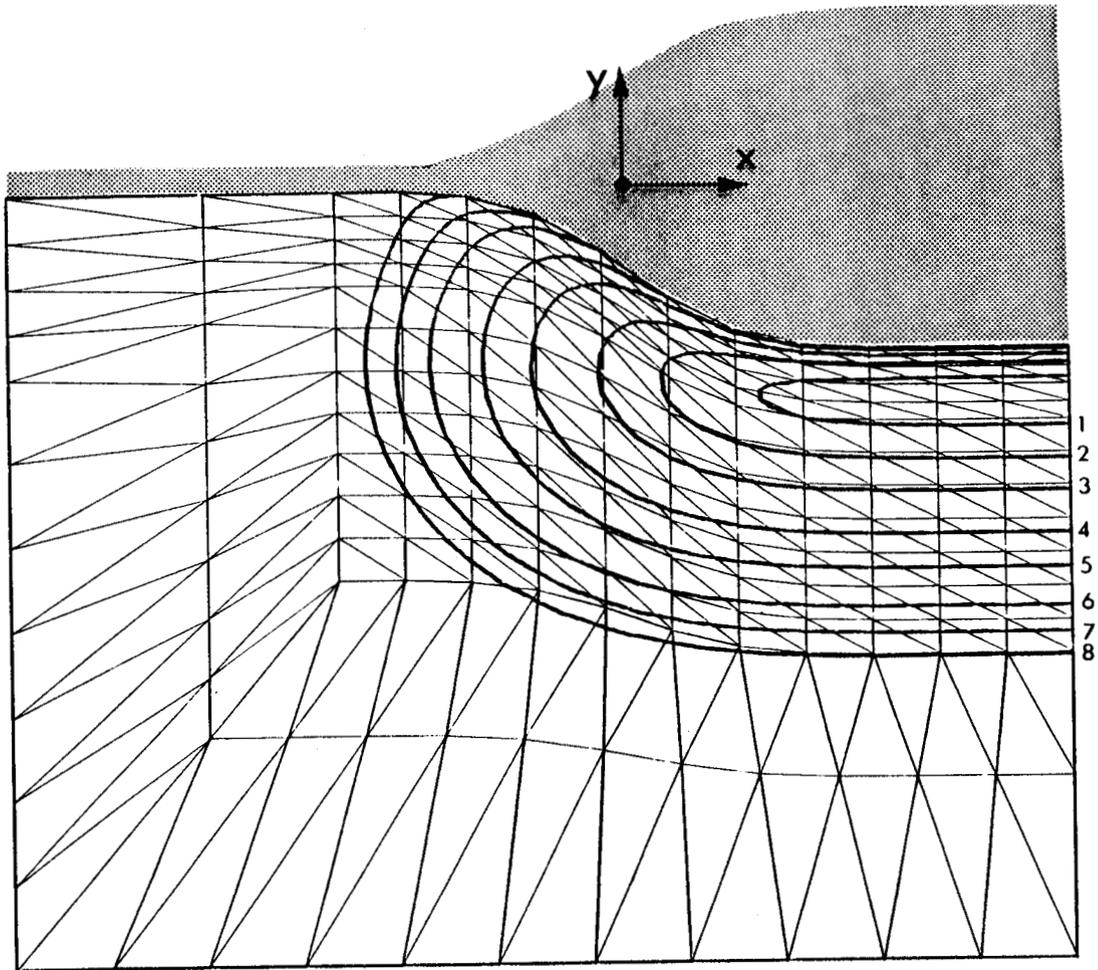


(b)

Figure V.10. - Profil de dopage à l'issue du recuit inerte (avec évaporation)

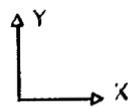
(a) Isovaleurs - (b) Profil en coupe

Figure V.11. - Profil de concentration à l'issue du recuit en ambiance oxydante (Maillage final et isovaleurs)



PROFIL DE DIFFUSION  
 IMPLANTATION BORE  
 E=120KEV DOSE=2.3E+12  
 OXYDATION HUMIDE  
 120MN 1000C

4.000E+16	1	—
3.000E+16	2	—
2.000E+16	3	—
1.000E+16	4	—
5.000E+15	5	—
2.000E+15	6	—
1.000E+15	7	—
5.000E+14	8	—



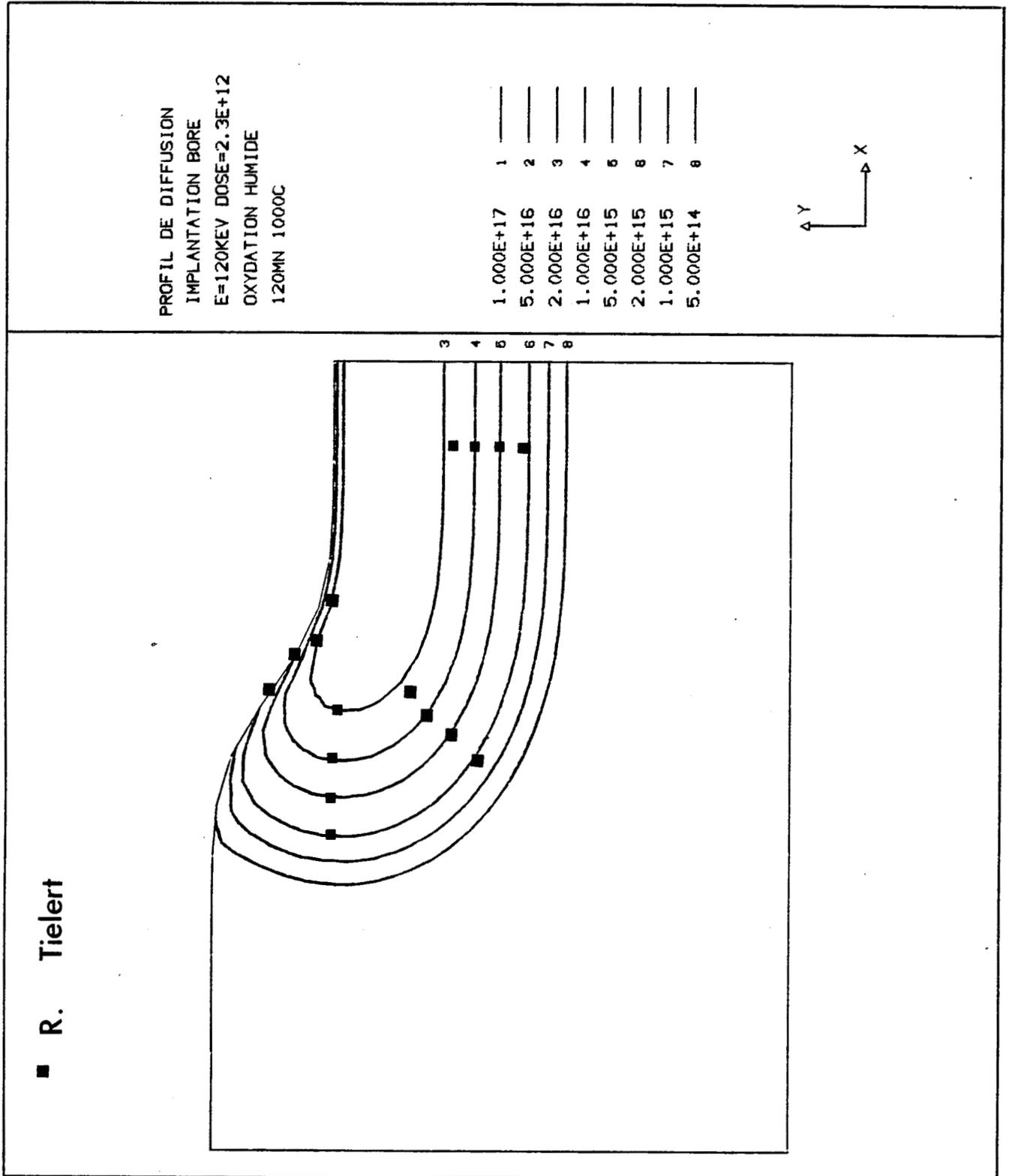


Figure V.12. - Isovaleurs de la Figure V.11. comparées  
aux résultats de Tielert [3]

La figure V.12. compare ce résultat à celui obtenu par Tielert [3] et démontre ici un excellent accord, notamment au niveau de l'extension de la zone p. Cette simulation valide la procédure algorithmique qui a été développée pour le traitement de l'oxydation (3ème partie du chapitre III) et prouve qu'aucune dégradation numérique n'intervient lors des multiples interpolations sur les maillages successifs.

#### 4. SIMULATION COMPLETE DE LA ZONE SOURCE/DRAIN EN TECHNOLOGIE N.MOS. GRILLE POLYSILICIUM [5]

Contrairement aux autres motifs présentés dans ce chapitre, cette simulation s'intéresse à un procédé de fabrication réel qui a été réalisé et caractérisé. L'intérêt de cette étude est d'utiliser les moyens de simulation développés en environnement technologique afin d'obtenir une meilleure compréhension du cycle de fabrication. Des caractérisations physiques ont été effectuées afin d'évaluer la précision des modèles et du calcul pour ce cas particulier.

##### 4.1. Description du procédé

La technologie utilisée ici est un procédé N-MOS 6 micron-grille polysilicium. L'isolation est réalisée par une technique LOCOS classique d'épaisseur d'oxyde de champ : 1  $\mu\text{m}$ . L'oxyde de grille d'épaisseur 950 Å est formé à 1100°C sur un substrat p orienté  $\langle 100 \rangle$  ( $1.10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ). La grille est réalisée par un dépôt LPCVD de polysilicium d'épaisseur 4500 Å. La grille est ensuite gravée dans un réacteur plasma (SF6). Les étapes suivantes ont été considérées pour la simulation : les zones de source et de drain sont formées par une implantation de phosphore à travers le masque de polysilicium et l'oxyde de grille (120 keV,  $Q_{\square} = 5.10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ) suivie d'une étape de réoxydation à 1000°C (5 mn O<sub>2</sub>, 15 mn H<sub>2</sub>O, 5 mn O<sub>2</sub> et 10 mn N<sub>2</sub>). Un oxyde de passivation (CVD) déposé sur le circuit est ensuite recuit à 1000°C durant 15 mn avant la métallisation. Les différentes étapes qui ont été simulées sont regroupées en 3 phases.

Phase 1 : Implantation du phosphore (120 keV,  $Q_{\square} = 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ )

Phase 2 : Recuit en ambiance oxydante (1000°C, 25 mn)

Phase 3 : Recuit inerte (1000°C, 25 mn)

#### 4.2. Simulation

Quelques pré-caractérisations ont été réalisées afin de fournir les paramètres nécessaires aux simulations. Le profil du polysilicium après l'attaque plasma a été relevé par microscopie électronique à balayage (S.E.M.). Cette caractérisation donne la forme réelle du masque nécessaire au calcul du profil implanté par la méthode de Runge [6], équation II.85. Le masque est approximé par le tracé en trait plein de la figure V.13. La forme de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> après la phase d'oxydation a également été caractérisée en microscopie électronique à balayage pour identifier le paramètre de forme dans la formulation analytique utilisée pour le déplacement du maillage, équation II.122. La valeur  $\gamma = 1.7$  a été estimée pour les 950 Å de grille et les 2450 Å d'oxyde final. Le procédé de fabrication a été simulé en trois phases, décrites précédemment, en exploitant le modèle de Fair [7,8] complet précisé en équations II.64.- II.68.

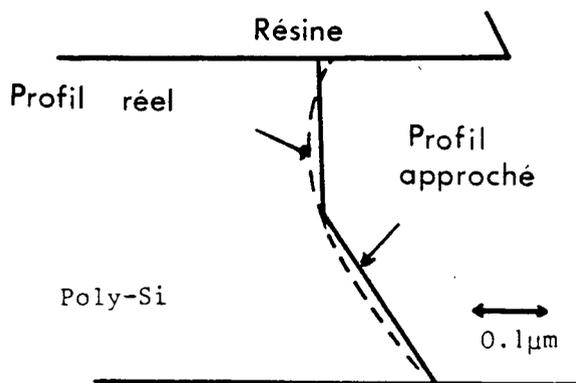
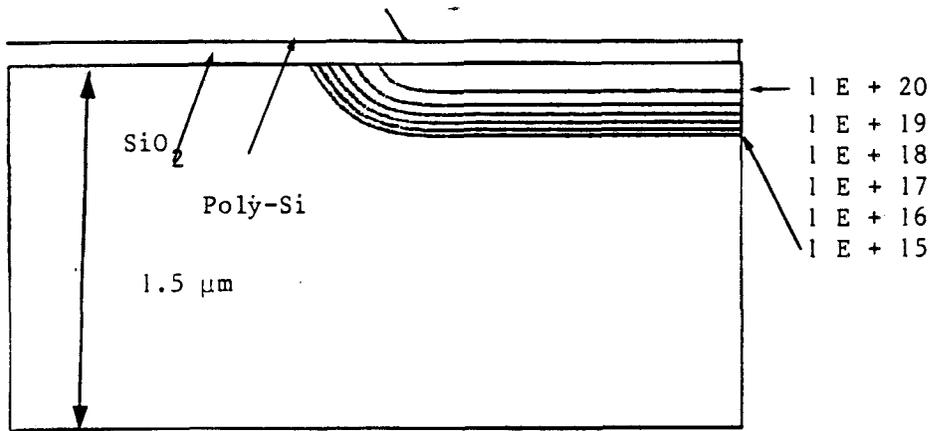
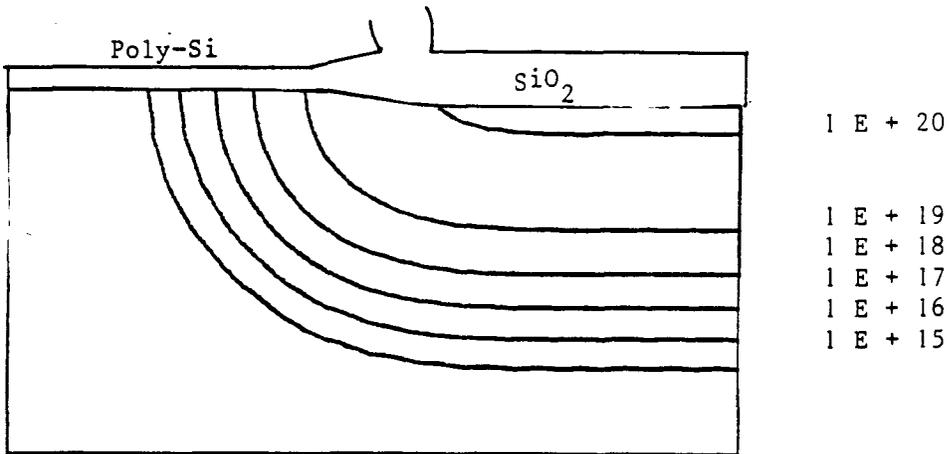


Figure V.13. - Profil du masque de poly-silicium

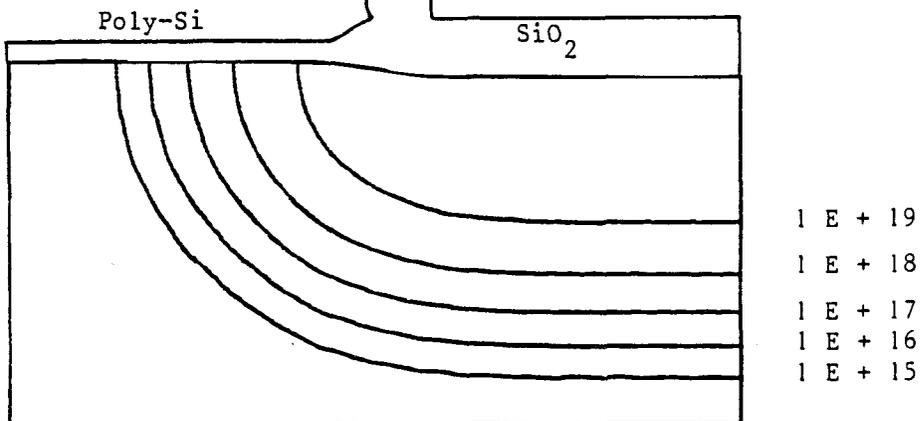
La figure 5.14.a. montre le profil bidimensionnel de dopage après l'implantation de phosphore à travers le profil réel de polysilicium et l'oxyde de grille restant sur les zones de source et de drain. La



(a)



(b)



(c)

- Figure V.14. - Profils de concentration du procédé n-MOS  
(a) Phase 1 - (b) Phase 2 - (c) Phase 3.

figure V.14.b. présente le profil de dopage à l'issue de l'étape d'oxydation . Cette simulation dans laquelle l'accélération de la diffusion sous oxydation a été prise en compte [9] a exploité les résultats de la pré-caractérisation de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. La ségrégation à cet interface a également été assurée conformément à l'équation II. . Finalement, le profil de dopage à l'issue du traitement en ambiance inerte est reporté en Figure V.14.c.

Une vérification expérimentale est présentée sur la photographie S.E.M. de la figure V.15. Cette photographie a été obtenue par une technique de coloration. La frontière de la région définit une isoconcentration dont la valeur a été déterminée par une analyse unidimensionnelle. Cette concentration a été mesurée par une technique de résistivité différentielle et une valeur de  $1.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  a été trouvée. La comparaison entre la courbe simulée de la figure V.14.c. pour cette valeur et la microphotographie de la figure V.15 donne un excellent accord, validant ainsi les moyens de simulation et le modèle pour ce cas technologique réel.

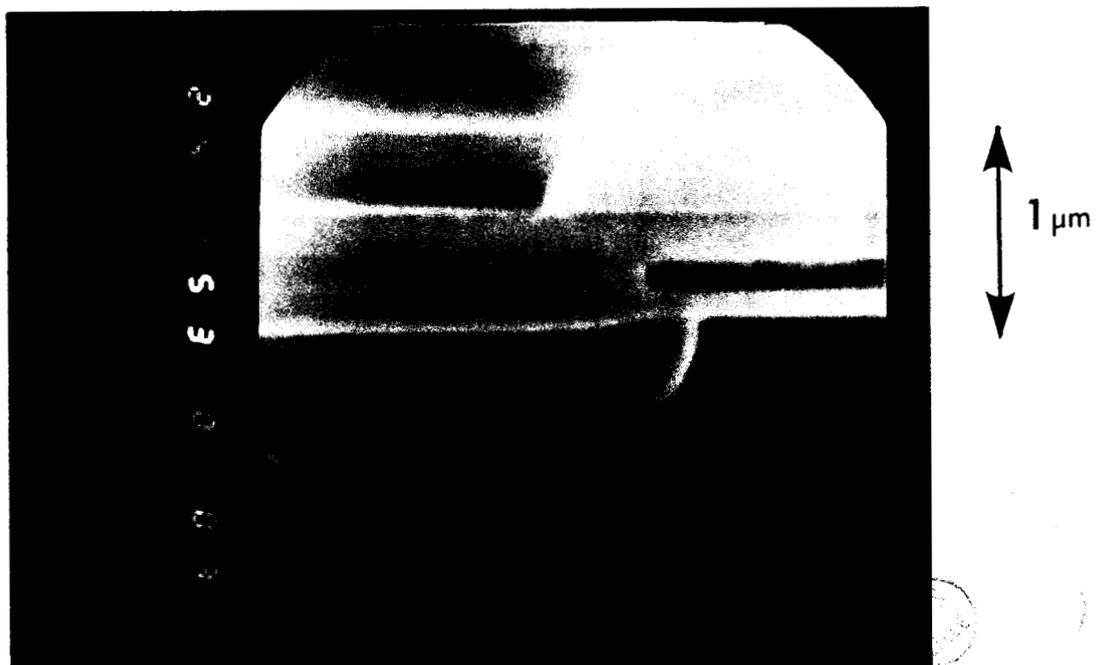


Figure V.15. - Microphotographie S.E.M. d'un transistor n-MOS à la fin du procédé de fabrication. Vue en coupe.

## 5. DIFFUSION COUPLEE ARSENIC/BORE EN AMBIANCE OXYDANTE

Ce dernier exemple s'intéresse à la diffusion simultanée arsenic/bore sous ambiance oxydante. Sur un substrat nu, une implantation homogène de Bore (100 keV,  $10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ) est simulée. Une implantation locale d'Arsenic (80 keV,  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ) est ensuite réalisée sur une structure de masque abrupte formé de nitrure de silicium  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Suite à ces deux implantations, un recuit en ambiance oxydante (1000°C, 3600 s,  $\text{H}_2\text{O}$ ), est simulé. La présence du nitrure de silicium conduit à une oxydation locale, la croissance de l'oxyde épais s'effectuant sur la zone implantée d'Arsenic.

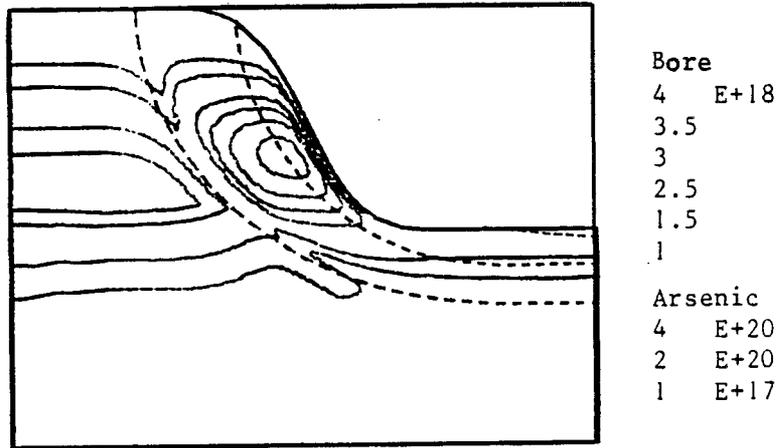
Pour réaliser ce calcul, un maillage d'extension  $1 \mu\text{m} \times 0.76 \mu\text{m}$  comportant 624 éléments a été généré, le masque de nitrure, de longueur  $0.5 \mu\text{m}$  étant simulé sur la partie gauche de la structure. La redistribution des impuretés durant le recuit est gouvernée par le système d'équations de diffusion de Hu [1], équation II.36, tandis que la forme du profil d'oxyde est donné par la loi analytique II.122 ( $\gamma = 0.5$ ).

Le tracé du profil final est donné en figure V.16.a. pour le Bore et l'arsenic et démontre des effets de couplage importants entre ces deux impuretés, notamment une forte accumulation de bore près de la zone de transition oxyde fin/oxyde épais. La jonction bidimensionnelle et le maillage à la fin de la simulation sont reportés en figure V.16.b.

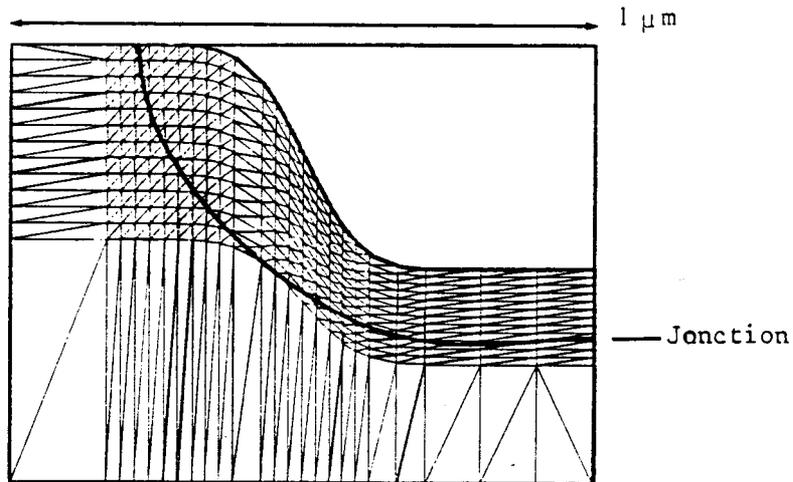
Cet exemple comporte toutes les difficultés numériques qui peuvent se présenter lors de simulation d'étapes technologiques et qui sont résumées ci-dessous :

- Diffusion couplée entre plusieurs types d'impuretés.
- Forte non-linéarité du système d'équation.
- Conditions de ségrégation de signe opposé pour les deux impuretés en présence (Accumulation pour l'arsenic, appauvrissement pour le Bore)
- Maillage évolutif et grand déplacement de l'interface.

La stabilité des résultats présentés en figure V.16 confirme l'efficacité des algorithmes développés à traiter les difficultés numériques résumées ci-dessus. Ceci laisse entrevoir de nombreuses applications des moyens de simulation mis au point.



(a)



(b)

Figure V.16. - Profil de concentration à l'issue de la simulation arsenic/bore sous ambiance oxydante

(a) Isovaleurs : traits pleins : bore  
traits pointillés : arsenic

(b) Maillage final et jonction

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES du Chapitre V

1. S.M. HU, "General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism", Phys. Rev., Vol. 80, pp. 773-784, 1969.
2. D.A. ANTONIADIS, S.E. HANSEN and R.W. DUTTON, "SUPREM II - a program for I.C.'s process modeling and simulation", TR N° 5019-2, Stanford Electronics Laboratory, CA, 1978.
3. R. TIELERT, "Numerical simulation of impurity redistribution near mask edges", NATO ASI on Process and Devices Simulation for MOS. VLSI Circuits, Urbino, Italy, July 12-23, 1982.
4. B.E. DEAL and A.S. GROVE, "General relationship for the thermal oxidation of silicon", J. Appl. Phys., Vol. 36, pp. 3770-3778, 1965.
5. D. COLLARD, M. LOBET, J.N. DECARPIGNY and I. DESOUTTER, "Two dimensional process simulation using a quadratic finite element discretisation. The connection with device simulation", Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Swansea, U.K., July 8-12, 1984.
6. H. RUNGE, "Distribution of implanted ion under arbitrarily shaped mask edges", Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 39, pp. 595-599, 1977.
7. R.B. FAIR and I.C.C. TSAI, "Quantitative model for diffusion of phosphorus in silicon and emitter dip effect", J. Electrochem. Soc., Vol. 124, pp. 1107-1118, 1977.
8. R.B. FAIR, "The effect of strain-induced band gap narrowing on high concentration phosphorus diffusion in silicon", J. Appl. Phys., Vol. 50, pp. 860-869, 1979.
9. K. TANIGUSHI, K. KUROKAWA and M. KASHIWAGI, "Oxidation-enhanced-diffusion of boron and phosphorus in 100 silicon", J. Electrochem. Soc., Vol. 127, pp. 2243-2248, 1980.

## CONCLUSION

Les choix algorithmiques, la détermination des critères de simulation et les premières applications qui sont présentés dans ce rapport sont les études de base qui ont permis le développement du logiciel de simulation bidimensionnelle de technologie : MOBIDIC. Ce programme permet le calcul de la redistribution simultanée de plusieurs dopants lors d'enchaînements technologiques complexes. Les profils de concentration obtenus par implantation ionique sont déterminés à partir de la topologie de masquage et des fonctions de répartition propres à chaque type d'impuretés. Les étapes de recuits thermiques en ambiance inerte ou oxydante sont simulées en tenant compte des modèles de diffusion spécifiques à chaque impureté et des effets de couplage dans le cas de procédés multi-dopants. Dans le cas de recuits en ambiance oxydante, une loi analytique donne le profil de croissance d'oxyde tandis que la redistribution des impuretés induit les effets de ségrégation à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> et d'accélération de diffusion inhérente à l'oxydation.

La méthode des éléments finis est utilisée pour la résolution des diverses équations de diffusion. La discrétisation spatiale est donnée par des éléments triangulaires quadratiques tandis que la résolution temporelle est menée suivant un schéma implicite incomplet. Cette approche numérique découple largement les conditions de convergence des problèmes spatiaux et temporels. Les incréments de temps sont choisis automatiquement en fonction du degré de non-linéarité des équations de diffusion et de la précision



nécessaire au calcul des profondeurs de jonction. Une technique de raffinement de maillage est élaborée qui consiste à préserver les pas d'espace nécessaires à la stabilité du calcul uniquement à proximité de la position finale de la jonction. Cette technique dont les performances sont éprouvées, limite le nombre total d'éléments et donc les temps de calcul. De plus, comme les maillages optimisés sont fixes durant les simulations, elle évite l'emploi de maillages évolutifs qui nécessiteraient de multiples interpolations. Une méthode originale permettant la simulation de recuits en ambiance oxydante par la méthode des éléments finis est développée. L'algorithme consiste en l'alternance d'étapes de diffusion sur maillages fixes et d'étapes de déformation de structure. Cette procédure permet de prendre en compte des formes quelconques de profils d'oxyde et de tester de nouveaux modèles de diffusion anisotrope sous oxydation. Dans le dernier chapitre de ce rapport, sont présentées quelques applications du programme MOBIDIC. Les exemples qui y sont traités regroupent à la fois des thèmes technologiques modernes sensibles aux effets parasites latéraux et les simulations qui présentent les difficultés numériques majeures induites par les modèles. La qualité des résultats obtenus pour ces différents tests valide le programme et définit clairement un vaste domaine d'application.

Les développements ultérieurs se dirigeront dans deux axes de recherche distincts. Le premier concernera la simulation du silicium polycristallin. Cette activité s'intéressera à la modélisation et la simulation de la diffusion des dopants dans le polysilicium ainsi qu'à son oxydation. Le second sera l'étude du couplage entre la simulation bidimensionnelle de technologie et l'analyse électrique de dispositif. Un système complet sera élaboré qui permettra l'optimisation de cycles technologiques en fonction des performances électriques nécessaires des microstructures.

## RESUME

Un code de simulation bidimensionnelle des technologies de fabrication de circuits intégrés au silicium, le - code MOBIDIC - a été développé. Il permet le calcul de la redistribution simultanée de plusieurs types de dopants lors d'enchainements technologiques complexes. Ce rapport présente une synthèse des modèles utilisés, décrit les algorithmes numériques qui ont été développés et testés et résume les principaux résultats obtenus.

Les profils de dopage réalisés par implantation ionique sont déterminés analytiquement, compte tenu de la topologie du masque et des fonctions de répartition propres à chaque type d'impureté. Les étapes de recuits thermiques sont simulées en considérant les modèles de diffusivités spécifiques à chaque impureté et les effets de couplage dans le cas de procédés multidopants, les diverses équations de diffusion étant résolues par la méthode des éléments finis à l'aide d'éléments triangulaires quadratiques, l'intégration temporelle étant menée suivant un schéma implicite incomplet. La simulation des recuits en ambiance oxydante est réalisée grâce à un algorithme original alternant des étapes de diffusion et de déformation de la structure. Cette méthode permet de prendre en compte des formes quelconques du profil d'oxyde et de tester de nouveaux modèles de diffusion anisotrope sous oxydation. Enfin, une technique nouvelle de raffinement local de maillage a été élaborée qui permet de réduire considérablement les temps de calcul nécessaires aux divers types de simulations.

Plusieurs exemples d'applications du programme MOBIDIC sont décrits qui regroupent les principales difficultés numériques. La qualité des résultats obtenus valide le programme et lui autorise un vaste champ d'application.

## MOTS - CLEFS

Simulation  
(simulation)

Profil dopage  
(Doping profile)

Elements finis  
(Finite element)

Conception assistée  
(Computer aided design)

Diffusion latérale  
(Lateral diffusion)

Oxydation  
(Oxidation)

Implantation-ion  
(Ion-implantation)