

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université Mentouri de Constantine
Faculté des sciences de l'ingénieur
Département d'Electronique

N° d'ordre :.....
Série :.....

THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de
Doctorat en sciences en Electronique
Option
Electronique

Présentée par
Souad MERABET

Intitulée

Simulation à l'aide d'un modèle dit de "Monté Carlo" des profils de bore implantés requis pour la réalisation des jonctions courtes utilisées dans les processus de haute densité d'intégration
(PHDI)

Soutenue le : 29/06/2009

Devant le Jury :

Président :	Mr M. Bouchemat	Prof. Université de Constantine
Rapporteur :	Mr M. Boukezzata	Prof. Université de Constantine
Examineur :	Mr K. Mirouh	Prof. Université de Constantine
Examineur :	Mr B. Birouk	M. C. Université de Jijel
Examineur :	Mr H. Bouridah	M. C. Université de Jijel

Merabet Souad

"A Monté Carlo Simulation study of high-dose and low-energy boron implantation into LPCVD-NiDoS polycrystalline thin films"

Abstract

This work presents a Monté Carlo simulation study of boron profiles implanted at high dose ($5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) and low-energy (10 keV) into Nitrogen Doped Silicon (NiDoS) thin films (250 nm of thickness). These films are obtained by low-pressure chemical vapor deposition from Si_2H_6 and NH_3 gas sources. Four values of the ratio $\text{NH}_3/\text{Si}_2\text{H}_6$ are deliberately chosen to obtain four series of samples, differently in-situ nitrogen-doped ($N_1 = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $N_2 = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; $N_3 = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$; and $N_4 = 1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$). Taking into account the effects of the codoping case, and the structure specificity of these films, an accurate Monté Carlo model based on binary collisions in two-atomic target was performed.

As previously demonstrated, the presence of nitrogen atoms in the target is shown to affect the boron profiles and confirm clearly a reduction penetration effect which becomes more significant at high nitrogen concentrations. Whereas, the fine-grained polysilicon structure, and thus the presence of grain boundaries (GB), is known to enhance the opposite phenomenon. This last behavior is taken into consideration by assuming that the grain boundary plays an effective role in the scattering calculation process of the incident ions. This role is represented by the change in direction of the incident ion after interaction with GB without corresponding loss in its energy.

The results obtained show an enhancement of stopping phenomenon when nitrogen concentration increases, while the interaction part with GB remains very important. This behavior is explained by the fact that the great number of GB's interactions with boron atoms gave low deflection angles. So that, the average positions described by the final sequences of each trajectory take place farther than what would be expected with channeling effect in crystal silicon materials.

Keywords: Monté Carlo simulation, LPCVD, NiDoS, boron implantation, codoping.

Dédicaces

*"A ceux qui me sont
Chers..."*

Remerciements

En premier lieu, je souhaite vivement remercier mon enseignant et encadreur le professeur **M. Boukezzata** pour tout le mal qui s'est donné en me suivant de la première inscription à la soutenance. Suivi presque quotidien pendant ces quatre années de thèse et les six mois de rédaction qui ont succédé. Son calme inconditionnel, son optimisme à toute épreuve même lorsqu'il est évident que les travaux vont partir en vrille, sa rigueur de raisonnement mais aussi d'écriture, dont il a su m'inculquer de nombreux principes, sa patience, sa compréhension face à mes colères, à mon pessimisme, et mon impatience ont fait preuve de maturité exceptionnelle, et ont rendu riche et agréable ce travail de thèse.

Ce fut un plaisir de poursuivre la recherche et les études universitaires avec lui, après m'être retirée cinq longues années. A lui je dis MERCI.

Je remercie l'ensemble des membres du jury pour l'attention qu'ils ont porté à ce travail. Merci à Monsieur **M. Bouchemat**, Professeur au département d'électronique, Faculté d'ingénieur, université de Mentouri-Constantine, d'avoir accepté de présider le jury. Merci à Monsieur **K. Mirouh**, Professeur au département de physique, université de Constantine, d'avoir accepté de participer à mon jury de thèse; Merci à Monsieur **B. Birouk**, Maître de Conférence à l'université de Jijel, et Merci à Monsieur **H. Bouridah**, Maître de Conférence à l'université de Jijel, d'avoir bien voulu se déplacer pour venir participer à mon jury de thèse.

Un chaleureux remerciement à mon frère **N. Merabet**, pour tous les articles qu'il m'a téléchargé et envoyé du laboratoire où il se trouve, pour son soutien, ses encouragements et ses suggestions intarissables.

Je remercie aussi, mes amis et collègues Dr. **M. Lashab** et Dr. **S. Ouachtati**, de l'université de Skikda, pour les services, les conseils, et les appuis perpétuels qu'ils ne cessent de me prodiguer.

*Un adorable et très particulier remerciement à mon amie **Dounia-Zed**, qui m'a remis sur la route de l'espoir et de la réussite.*

*Merci au respectueux, Monsieur **R. Remmouche** chef de département d'électronique à l'université de Jijel, pour sa serviabilité, toujours avec un plaisant sourire.*

*Enfin merci à toute ma famille qui m'a apporté un soutien inconditionnel tout au long de ces années. Merci à **mes parents**, à **mes frères** et à **ma sœur**.*

*Et sans oublier, les **amis** d'hier et ceux d'Aujourd'hui...*

Table des matières

Résumé.....	3
Introduction générale.....	4
Chapitre 1 : <i>Rappels des principaux éléments mathématiques de prédiction des profils de dopage d'implantation ionique</i>	7
I.1- Introduction.....	8
I.2- Eléments de base de la méthode de Monté Carlo.....	10
I.2.1- Nombres aléatoires et nombres pseudo-aléatoires.....	10
I.2.1.1- Nombres aléatoires.....	10
I.2.1.1- Nombres pseudo-aléatoires.....	10
I.3– Probabilités et Statistiques.....	12
I.3.1– Quelques propriétés essentielles des probabilités.....	12
I.3.2- Les statistiques d'ordre supérieur (S.O.S).....	12
I.3.2.1- Les outils clés des statistiques d'ordre supérieur.....	12
I.3.2.1.1- Fonctions caractéristiques, moments et cumulants dans le cas d'une variable aléatoire scalaire.....	12
I.3.2.1.2- Relation entre cumulants et moments de variables aléatoires réelles.....	15
I.3.2.2- Quelques propriétés des moments et des cumulants.....	16
I.4- Conclusion.....	18
Chapitre 2 : <i>Implantation ionique dans le silicium</i>	19
II.1- Introduction.....	20
II.2- Les théories du ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau.....	22
II.2.1- Principe de l'interaction ion-matière.....	22
II.2.1.1- Collisions nucléaires.....	23

II.2.2.2- Angles de déflexion d'une collision élastique.....	25
II.2.2.3- Mécanisme de la perte d'énergie.....	27
II.2.2.3.1– Le pouvoir d'arrêt nucléaire.....	28
II.2.2.3.2– Le pouvoir d'arrêt électronique.....	31
II.2.2.3.3–Le pouvoir d'arrêt global.....	33
II.2.2.3– Distribution des ions implantés en profondeur.....	34
II.3– Modèles de distributions théoriques.....	35
II.3.1– Modèle de distributions Gaussiennes.....	35
II.3.2– Modèle de la fonction demi- Gaussienne.....	35
II.3.3– Modèle de la distribution de Pearson IV.....	36
II.4– Canalisation.....	39
II.5– Simulation de l'effet de canalisation.....	43
II.6– L'endommagement du matériau implanté : Théorie – Modèles.....	44
II.6.1– Théorie.....	44
II.6.2– Modèle.....	45
II.6.2.1– La méthode de Kinchin-Pease.....	45
II.6.2.2– La simulation Monté Carlo : TRIM.....	45
II.7– Conclusion.....	46
Chapitre 3 : <i>Etude et résultats expérimentaux des films de silicium dopés azote et dopés bore et azote</i>	48
III.1- Introduction.....	49
III.2- L'analyse par SIMS.....	49
III.2.1- Le principe.....	50
III.2.2- Les possibilités et les performances de la technique.....	50
III.3- Avantages d'une grille en poly Silicium.....	51
III.3.1- Comportement de l'azote dans le Silicium.....	52
III.3.2- Les méthodes d'augmentation de la taille des grains.....	52
III.4– Dépôt de films à partir de la filière Disilane.....	54
III.5- Technique d'incorporation de l'azote dans la structure MOS.....	55
III.5.1- Dopage du silicium par le mode In Situ.....	55

III.5.2- Elaboration du silicium dopé In Situ azote ou NiDoS.....	55
III.5.2.1- Présentation du Four LPCVD.....	55
III.5.2.2- Mécanismes réactionnels des dépôts à partir du mélange Si ₂ H ₆	58
III.5.3- Description de la première série des échantillons.....	59
III.6.4- Cinétique de dépôt et composition des films de Si dopés azote.....	60
III.6.5- Caractéristiques électriques et structurales des films de Si dopés azote.....	61
III.6.6- Effet du taux d'azote sur la taille des grains et des joints de grains.....	62
III.7- Résultats expérimentaux.....	63
III.7.1- Profils de dopage In Situ dopés azote.....	65
III.7.2- Description de la 2 ^{ème} série d'échantillons.....	66
III.8- Comparaison des résultats obtenus avec la littérature.....	68
III.9- Comparaison de la diffusion du bore dans le silicium polycristallin et dans le silicium monocristallin.....	69
III.10- Conclusion.....	70
 Chapitre 4 : <i>Confrontation des résultats simulés aux résultats expérimentaux</i>	 72
 IV.1- Introduction.....	 73
IV.2- Simulation Monté-Carlo.....	73
IV.2.1- Le code TRIM.....	74
IV.2.2.1- Les principaux éléments du programme.....	75
IV.2.2.2- Fonctionnement du programme.....	76
IV.2.2.3- L'organigramme du programme.....	77
IV.2.2.4- Paramètres de la simulation.....	79
IV.2.2.5- Validation de la simulation.....	80
IV.3- Résultats des simulations.....	83
IV.3.1- Effets de la concentration d'azote sur le bore.....	85
IV.3.2- Comparaison avec les résultats expérimentaux.....	85
IV.3.2.1- Profils dans les films déposés à T _d = 460°C.....	85
IV.3.2.2- Profils dans les films déposés à T _d = 480°C.....	86
IV.3.2.3- Superposition des profils 460°C/480°C.....	87
A) Echantillon N ₁	87

B) Echantillon N ₂	89
C) Echantillon N ₃	90
D) Echantillon N ₄	91
IV.3.2.4- Etude comparative de la diffusion d'ions bore dans le Silicium monocristallin et Silicium Polycristallin.....	92
IV.3.2.5- Paramètres caractérisant les profils.....	93
IV.4- Conclusion.....	94
Introduction générale.....	96
Références bibliographiques.....	100
Abstract.....	107

Résumé

La simulation numérique joue un rôle de première importance dans l'amélioration des performances des transistors MOS; ce sont ces mêmes transistors qui sont intégrés dans les microprocesseurs et participent ainsi à la montée en puissance des calculateurs; calculateurs qui sont indispensables à la simulation numérique.

La connaissance du profil de dopage du dopant Bore dans la Grille MOS constitue une étape clé dans l'amélioration des propriétés électriques du composant, le moyen expérimental le plus utilisé et connu dans le domaine de la microélectronique est la technique d'analyse SIMS (spectroscopie de masse d'ions secondaire), une méthode très précise et fiable, mais cette méthode a l'inconvénient d'être destructive. Alors pour contourner ce problème, on propose dans notre travail un moyen théorique basé sur des méthodes de simulation numérique appelée méthode de Monté Carlo basé sur le Code TRIM, capable de reproduire le plus fidèlement possible les profils de concentration de dopant dans des films de Silicium. En fait l'objectif de ce mémoire est double, d'une part nos recherches sont motivés par l'étude des potentialités technologiques des films minces de Silicium dopé In-Situ azote visant à leurs intégration dans la structure MOS, et d'autre part nous traitons de la simulation numérique en tant que méthode pour la recherche scientifique.

Nous nous sommes intéressés à l'étude d'une structure de film Si-LPCVD dopée bore par implantation ionique constituant l'échantillon de référence, et trois structures de silicium dopée In-Situ azote appelés NiDoS (Nitrogen Doped Silicon), implantées au bore, déposés à basse température ($T_d = 460^\circ\text{C}$ et $T_d = 480^\circ\text{C}$), afin de coupler les avantages liés au silicium déposé à l'état polycristallin et ceux relatifs à la présence de l'azote, dans un souci de remédier technologiquement aux problèmes de pénétration du bore dans la couche d'oxyde isolante ou carrément dans le substrat.

Deux séries de films sont donc étudiées, la première série représente les deux films déposés à 460°C et 480°C , dopés In-Situ azote pendant la phase de formation des films, avec une concentration que l'on peut estimer négligeable de l'ordre de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, considérée

comme échantillon de référence, ensuite implantés au Bore avec deux doses différentes : $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

La seconde série de films, représentée par les deux catégories de films déposés sous les mêmes conditions de dépôt que les précédents, mais cette fois-ci, dopés avec trois diverses valeurs de concentration d'azote : $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, et $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, une fois avoir subis un pré-recuit de 900°C pendant une durée de 20 minutes de temps, sont implantés au bore avec une même énergie d'accélération 10KeV, et aux doses d'implantation d'ions bore : $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ et $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

Le programme basé sur le code de simulation Monté Carlo mis au point au sein de notre équipe de recherche a permis de reproduire ces profils des ions Bore obtenus expérimentalement par l'analyse SIMS, les résultats simulés obtenus dans les différents films sont très satisfaisants.

- ✓ Parmi les points importants constatés, le freinage du bore par l'azote, devient plus important lorsque ce dernier augmente en concentration jusqu'à une valeur limite, estimée à $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$,
- ✓ La température de dépôt joue un rôle important dans la détermination de la taille des grains par suite, la densité de joint de grains présent dans le matériau, mais on remarqué que son influence reste négligeable (cas de l'échantillon du film N_1) lorsqu'il n'y a pas d'azote,
- ✓ En présence d'azote, avec la variation de la température de dépôt, un autre effet a été constaté, le ralentissement du bore est plus important dans les films déposés à 460°C que dans les films déposés à 480°C , mais cet effet tend à s'inverser lorsque la concentration de l'azote atteint sa valeur limite estimée à $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, d'après les résultats obtenus.

Cette dernière constatation, nous ouvre une nouvelle perspective de recherche, afin de confirmer l'exactitude du phénomène en réalisant d'autres dépôts à diverses températures de dépôt, et différentes valeurs de concentration d'azote.

Pour clôturer notre étude, nous avons terminé par un tableau récapitulatif, dans lequel on a rassemblé tous les résultats de la simulation de tous les profils expérimentaux étudiés, on

comparant les valeurs obtenues aux valeurs publiés dans la littérature, dans les deux cas de dopage au bore: dans des films de Si-LPCVD et dans des films de silicium monocristallin de type Si (100).

Introduction générale

Qui aurait pu imaginer, il y a une cinquantaine d'années, alors que les tous premiers ordinateurs occupaient des pièces entières, que posséder un ordinateur portable serait devenu chose courante de nos jours (l'ENIAC pour Electronique Numerical Integrator and Computer mis en service en 1946 occupait 23 m et pesait environ 30 tonnes) ?. Et les téléphones portables ?. Bien malin, qui, aujourd'hui parvient à en acheter un sans écran couleur et sans appareil photo intégré car ceux-ci sont déjà obsolètes. C'est évident, la marche de l'électronique est marquée par une évolution fulgurante vers des appareils toujours plus petits, toujours plus performants et toujours moins onéreux. Cette progression est principalement due à l'évolution de l'augmentation des fréquences d'utilisation et des densités d'intégration des circuits intégrés à base d'une structure CMOS (Complementary Metal Oxyde Semiconductor) en particulier, la diffusion accélérée du Bore dans la grille polysilicium après recuit thermique, ont suscité un intérêt croissant pour de nouveaux matériaux répondant aux exigences de la miniaturisation des composants. C'est dans ce contexte que s'inscrit le travail présenté dans notre thèse. En fait, l'objectif de ce mémoire est double ; d'une part, nos recherches sont motivées par l'étude des potentialités technologiques des films minces de Silicium dopé In-Situ azote visant à leurs intégration dans la structure MOS, et d'autre part nous traitons de la simulation numérique en tant que méthode pour la recherche scientifique.

L'activité scientifique s'est longtemps articulée autour d'une démarche dialectique entre la théorie et l'expérience. Les dernières décennies ont vu la simulation numérique s'imposer comme une troisième approche dans la plupart des disciplines de la recherche et du développement (R & D) et en particulier dans le domaine de la microélectronique. Le triptyque théorie-modélisation, simulation numérique et expérimentation s'est ainsi affirmé comme le coeur du processus de R & D, soutenu par les progrès des ordinateurs et du génie logiciel ; La simulation, dit le dictionnaire, est la représentation d'un objet par un modèle analogue, plus facile à étudier ou encore la représentation mathématique d'un certain nombre d'éléments pouvant intervenir sur un système, afin d'étudier les conséquences de la variation de certains de ces éléments.

La simulation numérique consiste donc à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système préalablement décrit par des modèles. Ces modèles s'expriment au travers d'équations mathématiques qui, dans les cas les plus simples, présentent des solutions analytiques. Cependant, ce n'est en général pas le cas et l'on a alors recourt à la résolution numérique effectuée à l'aide d'un ordinateur.

La simulation numérique joue un rôle de première importance dans l'amélioration des performances des transistors MOS ; ce sont ces mêmes transistors qui sont intégrés dans les microprocesseurs et participent ainsi à la montée en puissance des calculateurs ; calculateurs qui sont indispensables à la simulation numérique.

La connaissance du profil de dopage du dopant Bore dans la Grille MOS constitue une étape clé dans l'amélioration des propriétés électriques du composant, le moyen expérimental le plus utilisé et connu dans le domaine de la microélectronique est la technique d'analyse SIMS (spectroscopie de masse d'ions secondaire), une méthode très précise et fiable, mais cette méthode a l'inconvénient d'être destructive, le matériau est détérioré, et par conséquent sera inutilisable. Alors pour contourner ce problème, on propose dans notre travail un moyen théorique basé sur des méthodes de simulation numérique appelée méthode de Monté Carlo et utilisant un code appelé Code TRIM, capable de reproduire le plus fidèlement possible les profils de concentration de dopant dans des films de Silicium polycristallin dopés azote, connus sous le nom anglophone court de NiDoS (Nitrogen Doped Silicon), et codopés azote et bore.

Nous nous sommes intéressés dans le cadre de ce travail à l'étude et la simulation d'une structure à base de silicium dopée bore par implantation ionique constituant l'échantillon de référence, et une structure de silicium dopée In-Situ azote et implantée au bore, élaborées par LPCVD à basse température ($T_d = 460^\circ\text{C}$ et $T_d = 480^\circ\text{C}$), afin de coupler les avantages liés au silicium déposé à l'état polycristallin et ceux relatifs à la présence de l'azote, dans un souci de remédier technologiquement aux problèmes de pénétration du bore dans le substrat.

L'organisation du mémoire comprendra quatre parties :

Le premier chapitre, présentera une vue générale des méthodes de Monté Carlo, en rappelant les notions de base de cette méthode, ainsi les statistiques d'ordre supérieurs destinées à la détermination des paramètres clés des profils de dopage obtenus par implantation ionique.

Le second chapitre, est consacré à la description du mécanisme de dopage utilisé pour nos films, une présentation du principe et de l'appareillage fut étalée, ensuite un développement très détaillé des théories de ralentissement des particules dans une cible donnée est schématisée par les équations mathématiques dans le système de laboratoire et du centre de masse. On parlera aussi de l'endommagement induit par les particules incidentes dans le matériau, de la canalisation dans le cas de dopage dans un matériau de silicium cristallin.

Le troisième chapitre, est consacré à la description des méthodes d'obtention, de traitement et de caractérisation des films dopés azote, et co-dopés : bore et azote. Nous présentons les caractéristiques du système LPCVD ainsi que les conditions et les paramètres de dépôt et de dopage des films. Nous y présenterons les différents résultats des profils expérimentaux obtenus par analyse SIMS dans les différents cas de films, superposés et comparés à des résultats publiés.

Le quatrième et dernier chapitre, la phase cruciale de notre travail nous présentons l'ensemble des résultats simulés, que nous avons confronté aux résultats expérimentaux, la comparaison ensuite est faite dans chaque cas de film, d'autres résultats seront aussi donnés de la littérature pour validation et un tableau récapitulatif englobera tous les paramètres calculés pour chaque profil de chaque film comparé à d'autres résultats publiés.

Et enfin, nous terminerons notre étude par une conclusion générale présentant la synthèse des principaux résultats établis ainsi que les perspectives.

Chapitre 1

Rappels des principaux éléments
mathématiques de prédiction des
profils de dopage d'implantation
ionique

I.1- Introduction

On désigne de manière générale, sous le nom de "méthode de Monté Carlo", les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires trop complexes pour être résolus analytiquement. La méthode est applicable lorsque le processus global peut être décomposé en séquences de processus élémentaires, corrélés ou non, et décrits chacun par une ou plusieurs variables aléatoires de fonction de densité de probabilité connue. Elle consiste à simuler le processus par la génération successive de valeurs typiquement arbitraires pour les variables distribuées aléatoirement suivant leurs fonctions de densité de probabilité respectives [1]. Un ensemble de valeurs numériques spécifiant chacune des variables décrit complètement une configuration possible du processus étudié. Le nombre de configurations à simuler dépendra de la précision statistique souhaitée. Et, pour une précision donnée, de la nature du processus étudié est complètement décrit au travers des variances des fonctions de densité de probabilité prises en considération.

Ces méthodes consistent donc en des simulations expérimentales des problèmes mathématiques, dans lesquels des nombres aléatoires sont utilisés pour trouver une solution, qui dans certains cas, n'est pas aléatoire. Pour illustrer les potentialités de cette technique, nous donnons l'exemple suivant :

On considère le cercle de rayon 1 inscrit dans un carré de côté 1. On tire un grand nombre de points au hasard dans ce carré reporté dans le tableau I.1. On calcul le rapport entre le nombre de points qui sont tombés dans le cercle et le nombre de points total.

26099	65801	69870	84446	58248	21282	56938	54729	67757
71874	61692	80001	21430	02305	59741	34262	15157	27545
08774	29689	42245	51903	69179	96682	91819	60812	47631
37294	92028	56850	83380	05912	29830	37612	15593	73198
33912	37996	78967	57201	66916	73998	54289	07147	84313

Tableau I.1 : *Nombres aléatoires*

Ces nombres sont constitués par des suites de chiffres entre 0 et 9 tirés au sort (chacun de ces chiffres a donc une chance égale d'être tirés) ; à partir du premier nombre, soit 26099, nous pouvons extraire les quatre premiers chiffres 2609 et constituer deux nombres issus de 26 et 09, soient $r_1 = 0.26$ et $r_2 = 0.09$. Chaque paire de nombre $\{r_1, r_2\}$ est représentée en coordonnées cartésiennes par un point à l'intérieur du carré de côté 1 (voir Figure I.1).

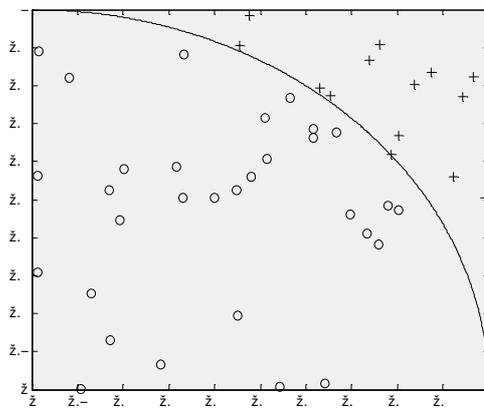


Figure I.1 : Détermination du π à l'aide des nombres aléatoires

En procédant ainsi pour chacun des 45 nombres du tableau I.1, on obtient 45 points, qui ont été placés sur la figure I.1 : 31 parmi ces 45 points sont dans le quart de cercle de rayon 1 : l'estimation de $\pi/4$ vaut donc sur cet exemple : $31/45 = 0.689$ alors que $\pi/4 = 0.785$, l'erreur est ici de 12.3 %.

La proportion p de points telle que $r_1^2 + r_2^2 \leq 1$ tend, si le nombre de point est très grand, vers la surface du quart de cercle, soit $\pi/4$. En pratique, on est bien sur, limité à un nombre N d'essais (ou d'épreuves) fini. Il s'ensuit que le résultat n'est pas exactement $\pi/4$, mais une estimation de $\pi/4$ (d'autant meilleur que N est plus grand). Ici $N = 45$ et $p = p_1 = 0.689$. Pour une seconde série de N autres épreuves, on obtiendra une autre estimation p_2 , puis p_3 pour une troisième série, etc... Ces estimations sont dispersées autour de leur valeur moyenne $p = \pi/4$.

1.2- Eléments de base de la méthode de Monté Carlo

Le caractère commun essentiel à tous les calculs de type Monté Carlo est que l'on doit substituer à une variable aléatoire un ensemble de valeurs réelles ayant les propriétés statistiques de la variable aléatoire. Les valeurs que l'on substitue sont appelés nombres aléatoires. La question que nous devons poser n'est pas d'où viennent ces nombres ?, mais ces nombres sont-ils correctement distribués ?, cette question trouve sa réponse dans les tests statistiques sur les nombres eux-mêmes.

Les générateurs de nombres aléatoires utilisés en informatique renvoient classiquement un nombre entier compris entre 0 et N. Pour obtenir un nombre aléatoire entre 0 et 1 (0 et 1 inclus), il faut diviser le nombre obtenu par N (le pas entre chaque nombre est donc de $1/N$) [2]. Pour obtenir une bonne précision il convient d'avoir un nombre N le plus grand possible.

1.2.1- Nombres aléatoires et nombres pseudo-aléatoires

1.2.1.1- Nombres aléatoires

Les calculs de Monté Carlo, sont caractérisés par le fait d'introduire dans le processus de la solution non aléatoire, des nombres aléatoires, c'est-à-dire tirés au sort. Pour obtenir ces nombres, on peut se référer à des tables préétablies. Lorsqu'on utilise un calculateur, on construit des nombres produits par le hasard à l'aide d'un processus adéquat. Le tableau de l'exemple précédent illustre un exemple de nombres aléatoires.

1.2.1.1- Nombres pseudo-aléatoires

Les nombres pseudo-aléatoires sont différents des nombres non-aléatoires, car, pour les nombres pseudo-aléatoires, lorsque le ou les premiers nombres sont arbitrairement choisis, toute la suite est complètement déterminée. La séquence est alors reproductible, ce qui permet de vérifier les programmes dans lesquels ils sont exécutés. Le point important est que leurs propriétés sont identiques à celles des nombres aléatoires. Ceci en fait, ne peut être prouvé,

mais on peut soumettre les nombres pseudo-aléatoires aux mêmes tests que les nombres aléatoires, et les utiliser si les tests sont satisfaisants.

Une des formules les plus utilisées pour engendrer une suite de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme est :

$$x_i = a.x_{i-1} + c \quad [\text{modulo } m] \quad \dots\dots\dots(\text{I-1})$$

Ceci signifie que le nombre x_i est égal au reste de la division par m de $a \times x_{i-1} + c$, où m , a , et c sont des constantes.

La séquence de nombres générés par cette relation est périodique. On a intérêt à ce que la période soit la plus longue possible. Le cas le plus fréquent est $c = 0$, $m = 2^N$ (car un calculateur travaille facilement en binaire), N étant généralement voisin de 30 ou 40.

On obtient alors une période de 2^{N-2} à condition que a soit une puissance impaire de 5 (on la prend en général élevée) et que x_0 soit impair.

Ainsi :

$$x_i = a.x_{i-1} \quad [\text{modulo } m = 2^N] \quad \dots\dots\dots(\text{I.2})$$

Les nombres obtenus ont une distribution uniforme (dite aussi rectangulaire). La plupart des calculateurs, donnent des séquences de nombres pseudo-aléatoires à distribution rectangulaire sur $[1, 0]$. Ces nombres r_i sont obtenus facilement à partir des x_i en remarquant que le reste d'une division est inférieur au diviseur.

Par suite :

$$r_i = \frac{x_i}{(m-1)} \quad \dots\dots\dots(\text{I.3})$$

Il n'est pas rare d'utiliser dans certains cas des séquences pouvant générer q'une série limitée de nombres si la quantité des opérations de calculs répétitives s'avère beaucoup trop importante par rapport au nombres générés comme dans le cas d'une implantation ionique.

1.3– Probabilités et Statistiques

1.3.1– Quelques propriétés essentielles des probabilités

Considérons un ensemble d'événements, chacun caractérisé par un nombre η . Le nombre η est appelé variable aléatoire et il lui est associé une fonction de répartition $F(y)$. Cette fonction est définie comme étant la probabilité attribuée à l'événement qui s'est déjà produit et ayant une valeur η ne dépassant pas une valeur donnée y .

Ceci peut être écrit :

$$F(y) = P(\eta \leq y) \dots\dots\dots(I.4)$$

Si $g(\eta)$ est une fonction de η , l'espérance mathématique (ou valeur moyenne) de g est décrite et définie par :

$$Eg(\eta) = \sum_i g(y_i) f_i \dots\dots\dots(I.5)$$

1.3.2- Les statistiques d'ordre supérieur (S.O.S)

Les statistiques d'ordre supérieur "S O S" (Higher Order Statistics ou H O S en anglais) [3] sont les moments d'ordre supérieur et certaines combinaisons non linéaires de ces moments appelées **cumulants** que nous allons noter "*cum*" [4, 5].

1.3.2.1- Les outils clés des statistiques d'ordre supérieur

1.3.2.1.1- Fonctions caractéristiques, moments et cumulants dans le cas d'une variable aléatoire scalaire

La première fonction caractéristique d'une variable aléatoire est la transformée de Fourier de sa densité de probabilité [6] :

$$P_x(u) = E(e^{jux}) = \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) e^{jux} dx \quad \dots\dots\dots(I.6)$$

Et, en calculant le développement en fonction des puissances de u :

$$P_x(u) = E(e^{jux}) = \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) e^{jux} (1 + jux + \frac{j^2 u^2 x^2}{2!} + \frac{j^3 u^3 x^3}{3!} + \frac{j^4 u^4 x^4}{4!} + \dots) dx \quad \dots\dots\dots(I.7)$$

$$P_x(u) = E(e^{jux}) = \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) dx + ju \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) x dx + \frac{j^2 u^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) x^2 dx + \frac{j^3 u^3}{3!} \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) x^3 dx + \frac{j^4 u^4}{4!} \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x) x^4 dx + \dots \quad \dots\dots\dots(I.8)$$

$$P_x(u) = 1 + juE(x) + \frac{j^2 u^2}{2!} E(x^2) + \frac{j^3 u^3}{3!} E(x^3) + \frac{j^4 u^4}{4!} E(x^4) + \dots \quad \dots\dots\dots(I.9)$$

Le moment d'ordre k se calcule à partir de la fonction caractéristique :

$$E(x^k) = \frac{1}{j^k} \left[\frac{d^k P_x(u)}{du^k} \right]_{u=0} \quad \dots\dots\dots(I.10)$$

On appelle seconde fonction caractéristique le logarithme (néperien) de la première fonction caractéristique

$$P_x'(u) = \log P_x(u) \quad \dots\dots\dots(I.11)$$

Son développement en série de MacLaurin donne des coefficients qui ne sont plus les moments de x mais ses « cumulants » que nous avons déjà noté « cum » dans les formules.

$$cum(x) = \frac{1}{j^k} \left[\frac{d^k P_x'(u)}{du^k} \right]_{u=0} \quad \dots\dots\dots(I.12)$$

Le cumulant d'ordre un est la moyenne; le cumulant d'ordre deux est la variance

(moment d'ordre deux après soustraction du carré de la moyenne). Le cumulants d'ordre trois (*skewness* en anglais, dissymétrie en français) est nul lorsque la variable aléatoire est centrée et sa densité de probabilité est symétrique. Nous nous intéresserons surtout au cumulants d'ordre quatre appelé « *kurtosis* » à partir du mot grec signifiant « *épaule* ».

Les moments d'ordre supérieur sont définis comme étant les espérances mathématiques de produits multiples. Si on note par $x(n)$ un signal aléatoire stationnaire réel et discret, alors, les moments d'ordre 2, 3 et 4 sont définis, respectivement, par :

$$M_2(i) = E[x(n)x(n + i)] \dots\dots\dots(I.13)$$

$$M_3(i,j) = E[x(n)x(n + i) x(n + j)] \dots\dots\dots(I.14)$$

$$M_4(i,j,k) = E[x(n)x(n + i) x(n + j) (n + k)] \dots\dots\dots(I.15)$$

Où, l'opérateur E représente l'espérance mathématique.

Le cumulants de $k^{ème}$ ordre, (noté C_k , ou « *cum_k* ») d'un ensemble de variables aléatoires est défini comme articulation ou combinaison non linéaire des moments d'ordre inférieur ou égale à k de ces variables. Contrairement aux moments, les cumulants sont invariants (insensibles) aux changements de la moyenne [4].

Si les variables aléatoires réelles (x_1, x_2, x_3, x_4) sont à moyenne nulle, les cumulants de 2^{ème}, 3^{ème}, et de 4^{ème} ordre sont définis, respectivement, comme suit :

$$cum(x_1, x_2) = C_2(x_1, x_2) = M_2(x_1, x_2) = E[x_1 x_2] \dots\dots\dots(I.16)$$

$$cum(x_1, x_2, x_3) = C_3(x_1, x_2, x_3) = M_3(x_1, x_2, x_3) = E[x_1 x_2 x_3] \dots\dots\dots(I.17)$$

$$cum(x_1, x_2, x_3, x_4) = C_4(x_1, x_2, x_3, x_4) = M_4(x_1, x_2, x_3, x_4) \\ = E[x_1 x_2 x_3 x_4] - E[x_1 x_2]E[x_3 x_4]$$

$$- E[x_1 x_3]E[x_2 x_4] - E[x_1 x_4]E[x_2 x_3] \dots\dots\dots(I.18)$$

Dans le cas où les moyennes des variables aléatoires ne sont pas nuls il suffit de remplacer x_i par $x_i - E[x_i]$

I.3.2.1.2- Relation entre cumulants et moments de variables aléatoires réelles

En identifiant les développements de la seconde fonction caractéristique et du logarithme de la première, on obtient les relations entre cumulants et moments. Ainsi le cumulants d'ordre un est égal au moment d'ordre un [7].

$$E(x(t_1)) = cum_1(x(t_1)) \dots\dots\dots(I.19)$$

$$E(x(t_1)x(t_2)) = cum_1(x(t_1))cum_1(x(t_2)) + cum_2(x(t_1))x(t_2)) \dots\dots\dots(I.20)$$

Ou, encore

$$cum_2(x(t_1)x(t_2)) + E(x(t_1)x(t_2)) - E(x(t_1))E(x(t_2)) \dots\dots\dots(I.21)$$

Le cumulants d'ordre deux est égal à la variance (après soustraction du carré de la moyenne au moment d'ordre deux.) Pour donner les formules à l'ordre trois nous supposons que le signal est à moyenne nulle. Dans ce cas :

$$cum (x(t_1)x(t_2)x(t)) = E(x(t_1)x(t_2)x(t)) \dots\dots\dots(I.22)$$

Si $x(t)$ a une moyenne nulle, il y a identité entre moment et cumulants d'ordre trois, exactement comme à l'ordre deux ; mais ce n'est pas le cas si $x(t)$ n'est pas de moyenne nulle. A l'ordre quatre nous donnerons les relations en supposant que les densités de probabilité sont centrées et symétriques, $p_x(-\vec{x})=p_x(\vec{x})$ et donc que les moments et cumulants d'ordre trois sont nul ce qui est le cas la plupart du temps dans les applications.

On a alors la relation

$$\begin{aligned}
 E(x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4)) &= cum_4(x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4)) \\
 &+ cum_2(x(t_1)x(t_2)) cum_2(x(t_3)x(t_4)) \\
 &+ cum_2(x(t_1)x(t_3)) cum_2(x(t_2)x(t_4)) \\
 &+ cum_2(x(t_1)x(t_4)) cum_2(x(t_2)x(t_3)) \dots\dots\dots(I.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E(x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4)) &= cum_4(x(t_1)x(t_2)x(t_3)x(t_4)) \\
 &+ E(x(t_1)x(t_2))E(x(t_3)x(t_4)) \\
 &+ E(x(t_1)x(t_3))E(x(t_2)x(t_4)) \\
 &+ E(x(t_1)x(t_4))E(x(t_2)x(t_3)) \dots\dots\dots(I.24)
 \end{aligned}$$

Un moment d'ordre k se déduit des moments d'ordre inférieur par addition d'un terme qui n'en dépend pas et n'est autre que le cumulants d'ordre k .

En particulier :

$$cum_4(x) = E(x^4) - 3E(x^2) \dots\dots\dots(I.25)$$

I.3.2.2- Quelques propriétés des moments et des cumulants

- Multiplication des variables par des constantes

$$E(\alpha_1 x_1, \dots, \alpha_N x_N) = \left(\prod_{i=1}^N \alpha_i \right) E(x_1, \dots, x_N) \dots\dots\dots(I.26)$$

(Relation similaire pour les cumulants)

- Permutation des variables si on modifie l'ordre des variables (x_1, \dots, x_N) les moments et cumulants sont inchangés.
- Addition des variables

$$E(x_1 + y_1, \dots, x_N) = E(x_1, \dots, x_N) + E(y_1, \dots, x_N) \dots\dots\dots(I.27)$$

(Relation similaire pour les cumulants)

- Invariance par translation d'une variable pour les cumulants d'ordre supérieur à un

$$cum_k(x_1 + c, \dots, x_N) = cum_k(x_1, \dots, x_N) \dots\dots\dots(I.28)$$

(Cette relation n'est pas vérifiée pour les moments)

- Sommes de variables indépendantes si x_i et y_i sont deux variables aléatoires indépendantes

$$cum_k(x_1 + y_1, \dots, x_N + y_N) = cum_k(x_1, \dots, x_N) + cum_k(y_1, \dots, y_N) \dots\dots\dots(I.29)$$

(Cette relation n'est pas vérifiée pour les moments)

- Indépendance des composantes Si les premières composantes x_1, \dots, x_p sont indépendantes des dernières

$$cum_k(x_1, \dots, x_N) = cum_k(x_1, \dots, x_p) + cum_k(x_{p+1}, \dots, x_N) \dots\dots\dots(I.30)$$

(Cette relation n'est pas vérifiée pour les moments)

Par conséquent, les cumulants des échantillons d'une séquence d'échantillons indépendants de moyenne nulle $x(t_1), \dots, x(t_N)$ sont tous nuls sauf si

$$t_1 = t_2 = \dots = t_N \dots\dots\dots(I.31)$$

Un des intérêts majeurs des cumulants est la conséquence de l'indépendance qui simplifie considérablement les formules et les traitements. En particulier, si deux signaux sont indépendants et que l'un d'entre eux est gaussien à moyenne nulle, les cumulants d'ordre supérieur à deux seront ceux du deuxième signal car les cumulants du signal gaussien sont nuls; on peut ainsi étudier les caractéristiques des signaux malgré la présence d'un bruit additif gaussien [8].

I.4- Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé les principes essentiels du moyen théorique utilisé dans notre travail pour reproduire les profils de dopage d'implantation ionique, basé sur une méthode de simulation numérique appelée méthode de Monté Carlo.

La méthode de Monté Carlo, permet de contourner les problèmes de non linéarité et permet d'attribuer un niveau de confiance à une incertitude, l'une des principales caractéristiques est la génération de nombres aléatoires, tout les calculs reposent à la base, sur la génération de nombres suivant une distribution uniforme.

Nous avons vu que les statistiques d'ordre supérieur, permettent la détermination des quatre premiers moments, à partir d'une distribution donnée, la reconstitution du profil de dopage devenait possible grâce à un code de calcul dit "TRIM" (TRansport of Ion in Matter), basé sur les théories de la méthode de Monté Carlo, mise à part le temps de consommation de calcul, la méthode très souple et moins coûteuse, présente des caractéristiques très prometteuses avec l'apparition de machines puissantes, notamment les stations.

Chapitre 2

Implantation ionique dans le Silicium

II.1- Introduction

Utilisée initialement pour le nettoyage des surfaces, la modification des propriétés physiques sous la surface bombardée entraîna l'utilisation de l'implantation dans le dopage des semi conducteurs [9]. Les principes de base ont été élaborés en 1954 par Shockley (Bell Laboratories) [10], comme méthode pour introduire des impuretés étrangères dans un substrat. Cette méthode a connu des développements et des améliorations considérables dans les années 1960, afin de lui conférer une reproductibilité et un contrôle les plus parfaits possibles.

Par rapport aux méthodes classiques de dopage des semi conducteurs (diffusion, In-Situ pendant la croissance épitaxiale ou par alliage), l'implantation ionique implique un budget thermique moins important, le traitement thermique qui succède à l'implantation ionique suppose des températures plus faibles, en évitant ainsi la diminution de la durée de vie des porteurs ou la déformation du profil d'implantation. C'est d'ailleurs la souplesse de cette méthode dans le contrôle du profil de dopants désiré qui la propulsa comme une méthode indispensable dans la réalisation des dispositifs semi conducteurs avec un degré de plus en plus élevé d'intégration.

Le principe de base est le suivant, des atomes dopants sont vaporisés, ionisés, accélérés et projetés sur le matériau à doper (porté à une certaine température) dans lequel se produisent de nombreuses collisions avec les atomes cible. Les ions subissent alors une perte graduelle d'énergie, jusqu'à ce qu'ils s'arrêtent à une certaine profondeur.

Le contrôle de la distribution des dopants, l'endommagement du matériau cible suite à l'implantation ionique, sa "guérison" par recuit thermique et surtout les caractéristiques électriques du semi conducteur après implantation ionique et recuit post-implantation, sont les facteurs qui caractérisent l'efficacité du dopage par implantation ionique.

Dans un premier temps nous donnons le schéma de principe d'un implanteur ionique donné sur la Figure II.1, ensuite nous passerons en revue les principales théories du ralentissement dans le domaine de la simulation. Les théories modélisent les deux processus de pertes d'énergies (nucléaire et électronique), et tentent d'en déduire le profil de distribution des impuretés en volume dans le matériau, deux catégories sont distinguées, selon que le matériau dopé est amorphe ou bien cristallin.

Cet accélérateur de particules comprend une chambre d'ionisation où la génération des ions est réalisée dans un plasma excité à partir d'une source liquide, gazeuse ou solide. Après une première accélération la sélection des ions se fait dans un spectromètre de masse (champ magnétique). Les ions sont accélérés à l'énergie souhaitée, cette énergie étant directement liée à la profondeur d'implantation des ions dans le matériau cible. Le faisceau est ensuite focalisé par des lentilles électrostatique, un balayage en X et en Y étant également réalisé [9]. Avant que les ions ne frappent la cible un système de déflection électrostatique permet de supprimer les ions neutralisés sur leurs parcours, ceux-ci ne devant pas être comptés.

La quantité de matière implantée par unité de surface, c'est-à-dire la dose implantée, est mesurée en comptant la charge arrivant sur la cible en intégrant le courant pour une surface bien déterminée sur la durée de l'implantation.

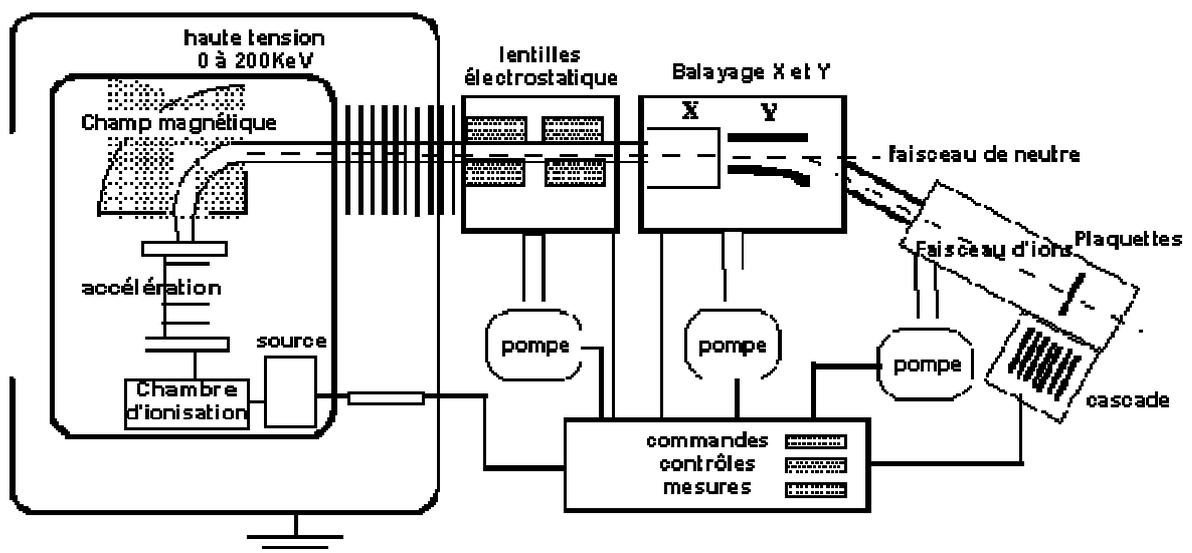


Figure II.1 : Présentation schématique simplifiée d'un implanteur ionique avec une énergie maximale d'implantation de 200 keV [9].

II.2- Les théories du ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau

L'interaction particules-matière peut donner lieu à quatre phénomènes physiques très différents : le transfert de quantité de mouvement aux atomes cibles (par des chocs élastiques), l'excitation-ionisation de la cible (chocs inélastiques), la production de photons, et diverses réactions nucléaires. Ces deux derniers processus se déroulent lors d'implantations à très hautes énergies (généralement supérieures au GeV), et ne seront pas étudiés ici.

Le domaine énergétique envisagé dans la plupart des modèles présentés s'étend environ de 1keV à 1MeV. Les hautes énergies sont utilisées pour l'implantation de couches conductrices ou isolantes enterrées (ex : formation de couche de SiO₂ profonde), et les très faibles énergies sont réservées pour la formation de jonctions superficielles en VLSI [11]. La profondeur de pénétration peut ainsi varier de 100Å à 10µm, et la dose de 10¹² à 10¹⁸ ions/cm².

Nous allons donner les principales théories de l'arrêt des ions dans un matériau, nous considérons ensuite les deux cas bien distinct qui peuvent se présenter : le matériau implanté est amorphe, ou bien de nature cristallin. Ce dernier cas présentant des difficultés supplémentaires de modélisation à cause du caractère anisotrope du phénomène (directions privilégiées axiales ou planaires), attachons nous d'abord à la structure amorphe.

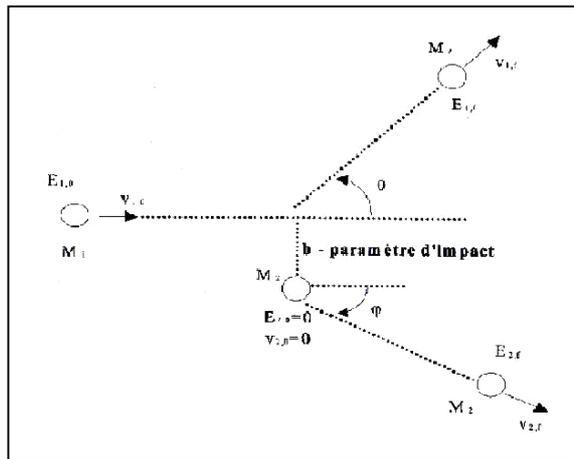
II.2.1- Principe de l'interaction ion-matière

Deux types d'interactions physiques peuvent se produire, chacun d'eux étant prédominant dans un domaine qui dépend des valeurs de l'énergie incident de l'ion et de sa masse atomique. Ces deux processus de pertes énergétiques sont : la collision nucléaire et la collision électronique. La première est élastique et met à contribution les électrons de la cible, de fait, les modélisations du ralentissement de l'ion dans le matériau vont étudier séparément ces deux phénomènes, et les additionner ensuite pour déterminer le pouvoir d'arrêt total S.

II.2.1.1- Collisions nucléaires

On dit qu'il y a collision quand deux ou plusieurs objets se rapprochent et subissent une interaction mutuelle sans forçement qu'un impact est eu lieu.

Dans le cas d'une collision élastique, l'énergie totale et la quantité de mouvement totale se conservent. Tout d'abord, on analyse deux états bien avant et bien après la collision entre les deux particules ne s'exerçant aucune force, leur énergie se trouve uniquement sous forme d'énergie cinétique



FigureII.2 : Collision élastique entre deux particules dans le système de référence du laboratoire (SL)

La conservation de l'énergie implique :

$$E_{1,0} = E_{1,f} + E_{2,f} \quad \frac{1}{2} M_1 v_{1,0}^2 = \frac{1}{2} M_1 v_{1,f}^2 + \frac{1}{2} M_2 v_{2,f}^2 \quad \dots\dots\dots(\text{II-1})$$

La conservation des quantités de mouvement :

$$M_1 \vec{v}_{1,0} = M_1 \vec{v}_{1,f} + M_2 \vec{v}_{2,f} \quad \dots\dots\dots(\text{II-2})$$

En décomposant suivant l'axe du mouvement et un axe perpendiculaire :

$$M_1 v_{1,0} = M_1 v_{1,f} \cos(\theta) + M_2 v_{2,f} \cos(\varphi) \quad \dots\dots\dots(\text{II-3})$$

$$M_1 v_{1,f} \sin(\theta) = M_2 v_{2,f} \sin(\varphi) \dots\dots\dots(\text{II-4})$$

Et en exprimant $E_{2,f}$ de deux manières différentes :

$$E_{2,f} = \frac{(M_2 v_{2,f})^2}{2M_2} = \frac{(M_2 v_{2,f} \sin(\varphi))^2 + (M_2 v_{2,f} \cos(\varphi))^2}{2M_2} \dots\dots\dots(\text{II-5})$$

$$\frac{1}{2} M_1 v_{1,f}^2 - \frac{1}{2} M_1 v_{1,0}^2 = \frac{(M_1 v_{1,f} \sin(\theta))^2 + (M_1 v_{1,0} - M_1 v_{1,f} \cos(\theta))^2}{2M_2} \dots\dots\dots(\text{II-6})$$

En simplifiant par M_1 , en multipliant par M_2 et en divisant par $v_{1,0}^2$:

$$\frac{v_{1,f}^2}{v_{1,0}^2} (M_1 + M_2) - 2 \frac{v_{1,f}}{v_{1,0}} M_1 \cos(\theta) + M_1 - M_2 = 0 \dots\dots\dots(\text{II-7})$$

D'où les solutions :

$$\frac{v_{1,f}}{v_{1,0}} = \frac{M_1 \cos(\theta) \pm \sqrt{(M_1 \cos(\theta))^2 - (M_1 + M_2)(M_1 - M_2)}}{(M_1 + M_2)} \dots\dots\dots(\text{II-8})$$

On garde la solution positive, les vitesses étant prises en valeurs absolues :

$$\frac{v_{1,f}}{v_{1,0}} = \frac{M_1 \cos(\theta) + \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2(\theta)}}{(M_1 + M_2)} \dots\dots\dots(\text{II-9})$$

Et ainsi on peut écrire :

$$E_{1,f} = k E_{1,0} \dots\dots\dots(\text{II-10})$$

Avec $k = \left(\frac{M_1 \cos(\theta) + \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2(\theta)}}{(M_1 + M_2)} \right)^2$

K, est appelé facteur cinématique ou de rétro-diffusion.

En éliminant la vitesse $v_{1,f}$ dans les relations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement on calcul l'énergie transmise à la particule de masse M_2 , en exprimant $E_{1,f}$ de deux manières différentes :

$$E_{1,f} = \frac{(M_1 v_{1,f})^2}{2M_1} = \frac{(M_1 v_{1,f} \sin(\theta))^2 + (M_1 v_{1,f} \cos(\theta))^2}{2M_1} \dots\dots\dots(\text{II-11})$$

$$\frac{1}{2} M_1 v_{1,0}^2 - \frac{1}{2} M_2 v_{2,f}^2 = \frac{(M_2 v_{2,f} \sin(\varphi))^2 + (M_1 v_{1,0} - M_2 v_{2,f} \cos(\varphi))^2}{2M_1} \dots\dots\dots(\text{II-12})$$

D'où : $v_{2,f} = \frac{2M_1}{M_1 + M_2} v_{1,0} \cos(\varphi)$

L'énergie transmise devient alors :

$$T = E_{2,f} = \frac{1}{2} M_2 v_{2,f}^2 = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{1,0} \cos^2(\varphi) \dots\dots\dots(\text{II-13})$$

Dans le cas d'une collision frontale :

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{1,0}, \dots\dots\dots(\text{II-14})$$

qui représente l'énergie maximale transmise :

$\cos(\varphi) = 1 \Leftrightarrow \sin(\varphi) = 0 \Leftrightarrow \sin(\theta) = 0 \Leftrightarrow \theta = 0 (\theta = \pi)$, en utilisant la conservation de la quantité de mouvement.

II.2.2.2- Angles de déflexion d'une collision élastique

Comme aucune force externe ne s'exerce sur le système formé par deux particules, les sommes des énergies et des quantités de mouvement se conservent. La vitesse du centre de masse (CM) du système formé par les deux particules est constante.

$$\vec{r}_{cm} = \frac{M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2}{M_1 + M_2} \dots\dots\dots(\text{II-15})$$

\vec{r}_1 et \vec{r}_2 étant les vecteurs position des deux particules

$$\vec{v}_{cm} \frac{M_1 \vec{v}_1 + M_2 \vec{v}_2}{M_1 + M_2} = cte \dots\dots\dots(\text{II-16})$$

$$\vec{v}_{cm} = \frac{M_1 \vec{v}_{1,0}}{M_1 + M_2}$$

Dans ce cas il est intéressant de regarder la collision dans le référentiel du CM qui devient un système de référentiel inertiel.

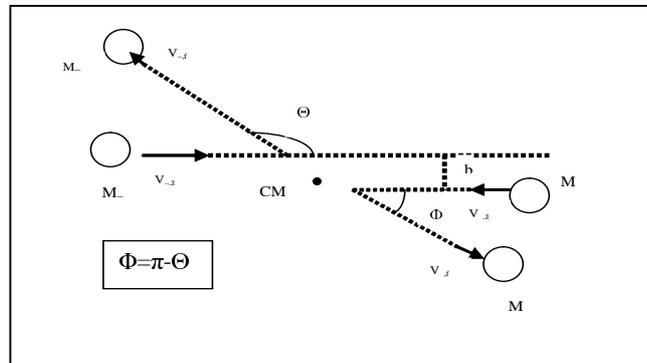


Figure II.3 : Collision élastique entre deux particules dans le système de référence du centre de masse (SCM)

En utilisant la conservation de la quantité de mouvement totale nulle et de l'énergie du système, on trouve une égalité entre les vitesses initiales et finales des particules, l'angle de déflexion devient :

$$\tan(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta) + \frac{M_1}{M_2}} \dots\dots\dots(\text{II-17})$$

Les angles de déflexion des particules après collision sont déterminés par le paramètre d'impact b et par le potentiel inter - particules V(r) lors de la collision, ce calcul est plus facile à faire dans le référentiel du centre de masse.

L'angle final de la déviation est obtenu par une intégration suivant r :

$$[\Theta]_{\pi}^{\Theta} = \int_{+\infty}^{r_{\min}} \frac{-b}{-r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{c,0}} - \frac{b^2}{r^2}}} dr + \int_{r_{\min}}^{+\infty} \frac{-b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{c,0}} - \frac{b^2}{r^2}}} dr \dots\dots\dots(\text{II-18})$$

Avec, $E_{c,0} = \frac{M_{\text{atome}}}{M_{\text{ion}} + M_{\text{atome}}} E_{\text{ion},0}$

Où, r_{\min} est la distance minimale entre les deux particules lors de la collision.

$$\frac{dr}{dt} = \pm v_{1,0} \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{c,0}} - \frac{b^2}{r^2}} = 0 \Rightarrow r = r_{\min} \dots\dots\dots(\text{II-19})$$

$$1 - \frac{V(r_{\min})}{E_{c,0}} - \frac{b^2}{r_{\min}^2} = 0 \dots\dots\dots(\text{II-20})$$

On trouve finalement l'intégrale de diffusion :

$$\Theta = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{+\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{c,0}} - \frac{b^2}{r^2}}} dr \dots\dots\dots(\text{II-21})$$

II.2.2.3- Mécanisme de la perte d'énergie

Une particule chargée pénétrant dans un solide, va perdre son énergie par différents types d'interactions avec le milieu cible pour s'arrêter finalement à une certaine profondeur ou rebondir à la surface (phénomène de rétrodiffusion), ou encore transmise si elle a assez d'énergie.

On appelle cette perte d'énergie de la particule par unité de distance parcourue pouvoir d'arrêt du matériau cible :

$$P_E = -\frac{dE}{dx} \dots\dots\dots(\text{II-22})$$

Ce concept peut être défini en ramenant l'interaction de la particule avec un constituant élémentaire de la cible comme par exemple ses atomes. On définit dans ce cas la section efficace d'arrêt :

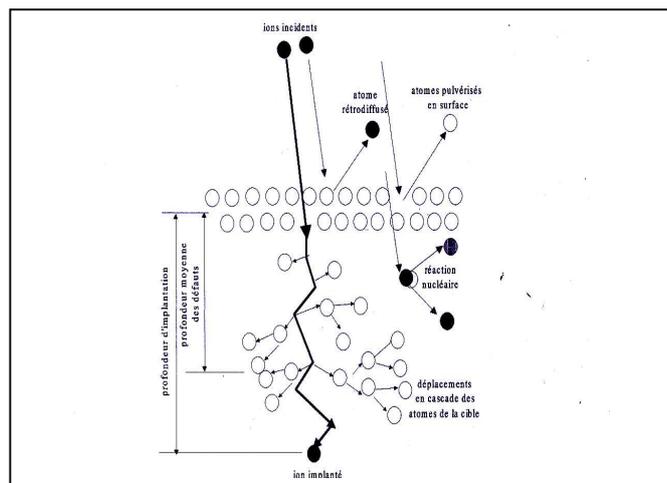
$$S_E = \frac{1}{N} P_E = S_n + S_e \dots\dots\dots(\text{II-23})$$

S_E , est le pouvoir d'arrêt atomique, ou section efficace de ralentissement, S_n est le pouvoir d'arrêt nucléaire, S_e le pouvoir d'arrêt électronique et N la concentration atomique du matériau implanté.

Macroscopiquement la perte d'énergie totale globalise le freinage électronique et nucléaire :

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \dots\dots\dots(\text{II-24})$$

Si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cible est supérieure à l'énergie de liaison, ces noyaux vont acquérir une énergie de déplacement qui leur permette d'interagir avec d'autres noyaux du matériau cible, en les délocalisant à leur tour. On assiste à un processus en cascade de création de défauts, ce qui endommage le matériau. On peut avoir une pulvérisation de la cible quand ce processus a lieu en surface, les noyaux peuvent être éjectés du matériau. On précise aussi que si la masse des ions incidents est plus faible que celle des atomes du matériau cible, les ions incidents peuvent rebondir sur les noyaux, en ayant un phénomène de rétrodiffusion.



FigureII.4 : Différentes interactions dans le matériau cible

II.2.2.3.1– Le pouvoir d'arrêt nucléaire

Ce sont des collisions élastiques qui ont lieu à faible vitesse, avant l'arrêt de la particule ionique dans le matériau implanté.

S'agissant d'une collision élastique entre deux particules l'énergie transmise au noyau du matériau cible ou la perte d'énergie de la particule incidente s'exprime :

$$T = \frac{4M_{io} M_{atome}}{(M_{io} + M_{atome})^2} E_{io,0} \cos^2(\varphi) = T_{max} \cos^2(\varphi) = T_{max} \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \dots\dots\dots(\text{II-25})$$

Avec, $\varphi = \frac{\pi - \Theta}{2}$

On définit également la section efficace de diffusion :

$$\sigma = \pi.b^2 \dots\dots\dots(\text{II-26})$$

Où, $d\sigma = 2\pi b db \dots\dots\dots(\text{II-27})$

Avec, b paramètre d'impact.

Le paramètre d'impact b est la distance minimale entre les centres des noyaux, T(E, b) l'énergie transférée à l'atome cible, et qui est donc susceptible de déplacer ce dernier et de créer un défaut ponctuel, le pouvoir d'arrêt atomique ou section efficace de ralentissement nucléaire, est défini comme suit :

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} = \int T.d\sigma \dots\dots\dots(\text{II-28})$$

Pour le calcul de l'angle de déflexion et en conséquence le pouvoir d'arrêt nucléaire, on utilise des potentiels coulombiens (en 1/r) ion-noyau cible écrantés par la charge électronique suivant la méthode de Thomas-Fermi. A la base de la méthode de Thomas-Fermi on trouve le modèle statistique de l'atome dans lequel on suppose une distribution continue des charges électriques ayant une densité de charge satisfaisant à l'équation de Poisson par rapport au potentiel du champ électrique. La densité de charge est calculée indépendamment, à l'aide de la statistique de Fermi-Dirac et en tenant compte du principe d'exclusion de Pauli.

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} f_{TF}\left(\frac{r}{a}\right) \dots\dots\dots(\text{II-29})$$

Avec Z₁, Z₂ : numéro atomiques de l'ion et de la cible.

Ce potentiel est donc égal au potentiel de Coulomb classique multiplié par une fonction d'écran $f_{TF}\left(\frac{r}{a}\right)$, cette dernière est générée par les électrons entourant la charge nucléaire. Elle

est paramétrée suivant la distance r entre l'ion et le noyau, et suivant le rayon d'écran de Tomas-Fermi :

$$a = \frac{0,8853 \cdot a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \dots\dots\dots(\text{II-30})$$

$a_0 = 0.529 \text{ \AA} (\hbar^2 / me^2)$, est le rayon de Bohr.

La fonction d'écran est une somme de trois ou de quatre fonctions exponentielles [12], avec l'apparition de la possibilité d'utiliser des calculs numériques à l'aide des ordinateurs, on peut donner le potentiel de Molière :

$$f_{TF}\left(\frac{r}{a}\right) = 0,35 \exp\left(-0,3\frac{r}{a}\right) + 5,5 \exp\left(-1,2\frac{r}{a}\right) + 0,1 \exp\left(-6\frac{r}{a}\right) \dots\dots\dots(\text{II-31})$$

Ou le potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark connu sous le nom de "potentiel universel" et utilisé par une multitude de simulateurs d'implantation ionique comme par exemple SRIM :

$$f_{TF}\left(\frac{r}{a}\right) = 0,1818 \exp\left(-3,2\frac{r}{a}\right) + 0,5099 \exp\left(-0,9423\frac{r}{a}\right) + 0,2802 \exp\left(-0,4028\frac{r}{a}\right) + 0,02817 \exp\left(-0,2016\frac{r}{a}\right) \dots\dots\dots(\text{II-32})$$

Le résultat final du calcul de $V(r)$ est utilisé pour déterminer la variation de $d\sigma$ et de l'énergie transférée T en fonction de l'angle de diffusion θ , angle entre la trajectoire de l'ion et l'axe x perpendiculaire à la surface du matériau implanté.

Le pouvoir d'arrêt S_n d'une particule incidente est finalement calculé en intégrant $T(b)$ et $d\sigma$ sur le chemin parcouru, en utilisant des unités réduites (par rapport à la masse atomique) pour l'énergie et la profondeur de pénétration. Il faut noter que ces mêmes énergies réduites sont également utilisées dans le calcul du pouvoir d'arrêt électronique. Plusieurs auteurs ont calculé la section de capture $d\sigma$ et le pouvoir d'arrêt S_n pour des matériaux différents [13, 14].

$$S_n = \frac{\pi Z_{ion}^2 Z_{atome}^2 e^4}{E_{ion,0}} \cdot \frac{M_{ion}}{M_{atome}} \ln\left(\frac{T_{max}}{T_{min}}\right) \dots\dots\dots(II-33)$$

Et,

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -\frac{\pi N Z_{ion}^2 Z_{atome}^2 e^4}{E_{ion,0}} \cdot \frac{M_{ion}}{M_{atome}} \ln\left(\frac{T_{max}}{T_{min}}\right) \dots\dots\dots(II-34)$$

Lindhard et al.(1963 et 1968) ont eu une approche du modèle Thomas-Fermi bien plus appropriée avec les valeurs expérimentales, ils utilisent les notions d'énergie et longueur réduite définies par :

$$\varepsilon = \frac{aM_{atome}}{Z_{ion}Z_{atome}e^2(M_{ion} + M_{atome})^2} E \quad \text{ou} \quad \varepsilon = k_e E \dots\dots\dots(II-35)$$

$$\rho = 4\pi a^2 N \frac{M M_e}{(M + M_e)^2} x \quad \text{ou} \quad \rho = k_x x \dots\dots\dots(II-36)$$

Avec k_e et k_x des constantes dépendantes de la nature de l'ion et de la cible, la section efficace d'arrêt devient :

$$S_n(\varepsilon) = -\frac{d\varepsilon}{d\rho} = -\frac{k_e}{k_x} \left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{k_e}{k_x} N \int_0^\infty T \cdot 2\pi \cdot b \cdot db \dots\dots\dots(II-37)$$

Il faut remarquer que les deux grandeurs énergie réduite et longueur réduite sont adimensionnelles (sans unités de mesures) et en conséquence le pouvoir d'arrêt en coordonnées réduites défini ci-dessus.

II.2.2.3.2– Le pouvoir d'arrêt électronique

Elles résultent des interactions entre l'ion implanté et les électrons de la cible, ces collisions sont en principe inélastiques. Mais l'approximation du choc par une collision élastique est souvent faite. En effet, les implantations ioniques ne dépassent généralement pas la zone II, et l'arrêt électronique se reste proportionnel à vitesse de l'ion dans cette zone (car

les électrons de la cible ajustent leur mouvement orbital en fonction de la position instantanée du projectile).

Cette hypothèse est justifiée par les valeurs utilisées de l'énergie dans notre travail qui est toujours inférieure à 1MeV, cas assez courant pour l'implantation ionique dans les semi conducteurs. Par conséquent, seule la zone I nous sera accessible, et l'approximation de la proportionnalité entre Se et la vitesse ionique est donc pleinement justifiée.

Deux modèles principaux peuvent être utilisés pour les collisions électroniques : le modèle de Firsov [15], et le modèle LSS [16]. Celui de Firsov modélise le projectile et l'atome-cible par une quasi-molécule, dans laquelle les états électroniques deviennent des orbitales moléculaires dont l'énergie dépend de la distance entre les noyaux. L'interaction entre les deux corps donne lieu à des échanges électroniques qui produisent une décélération de la vitesse de l'ion. Ce phénomène est gouverné par le potentiel interatomique de Thomas-Fermi.

Ce modèle utilise l'approximation de la collision binaire, les chocs ne sont pas corrélés, étant supposés indépendants les uns des autres. Cette approximation est presque toujours utilisée dans les logiciels de simulation ionique.

Notons que pour des raisons de calcul, ce modèle est restreint au domaine des numéros atomiques suivants : $\frac{1}{4} \langle \frac{Z_1}{Z_2} \rangle < 4$. D'autre part, il approxime relativement bien les valeurs expérimentales, mais ne rend pas compte d'un phénomène très important : le comportement oscillatoire de la valeur de Se en fonction de Z_1 , systématiquement observé expérimentalement.

La proportionnalité entre les pertes d'énergie électroniques et la vitesse de l'ion a conduit Lindhard [17] à modéliser l'interaction par un projectile de charge $Z_1.e$ se déplaçant dans un gaz électronique. L'énergie est alors considérée comme étant transférée au nuage électronique, en produisant des vibrations thermiques au sein de celui-ci. Dans ce modèle LSS, la densité électronique D de la cible est nécessaire pour le calcul du pouvoir d'arrêt.

La relation obtenue est la suivante :

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6} \cdot Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \cdot \frac{V}{V_0} \cdot D \quad \dots\dots\dots(\text{II-38})$$

Soit, $S_e = K \cdot E^{1/2}$

Où, V_0 et a_0 sont la vitesse et le rayon de Bohr,

E est l'énergie de l'ion,

K est une constante tabulée théoriquement par Lindhard et al.[18] et expérimentalement par d'autres auteurs.

Les résultats numériques montrent généralement une meilleure approximation qu'avec le modèle de Firsov, mais le comportement oscillatoire n'est toujours pas modélisé.

II.2.2.3.3 –Le pouvoir d'arrêt global

En considérons les pertes d'énergies électroniques et nucléaires indépendantes et additives, la perte d'énergie totale s'exprime comme la somme des deux processus :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_n - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = N(S_e(E) + S_N(E)) \quad \dots\dots\dots(\text{II-39})$$

N , est la densité volumique atomique du matériau exprimée en cm^{-3}

Pour les matériaux composés, on utilise la loi de Bragg pour le calcul du pouvoir d'arrêt, il faut tenir compte des contributions des constituants de chaque élément dans le calcul du pouvoir d'arrêt global.

Pour un matériau composé quelconque $A_n B_m$:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{(AB)} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{(A/AB)} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{(B/AB)} \quad \dots\dots\dots(\text{II-40})$$

$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{(A/AB)}$, est le pouvoir d'arrêt des atomes de A présents dans le composé AB et $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{(B/AB)}$, celui des atomes de B présents dans le composé AB.

La section efficace d'arrêt d'un matériau composé est égale à la somme des sections efficaces d'arrêt des éléments constituants pondérés par leur rapport stœchiométrique, cette relation se généralise par :

$$S(E)_{A_nB_m} = \frac{n}{n+m} S(E)_A + \frac{m}{n+m} S(E)_B \dots\dots\dots(\text{II-41})$$

II.2.2.3– Distribution des ions implantés en profondeur

Le parcours de l'ion incident dans le matériau cible se calcule à partir de l'énergie perdue par collisions électroniques et nucléaires :

$$R = \int_0^R dx = \int_{E_{ion,0}}^0 \frac{dE}{\frac{dE}{dx}} = \int_0^{E_{ion,0}} \frac{dE}{-\left(\frac{dE}{dx}\right)_n - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e} = \frac{1}{N} \int_0^{E_{ion,0}} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \dots\dots\dots(\text{II-42})$$

Expérimentalement nous n'avons pas accès à la distance parcourue R par l'ion incident, mais plutôt à la projection de ce parcours sur la direction perpendiculairement à la surface du matériau implanté. Rp sera appelé parcours moyen projeté, car il correspond en fait à la moyenne de tous les parcours projetés particuliers. Il peut être déterminé ainsi :

$$Rp = \frac{1}{\Phi} \int x.n(x).dx \dots\dots\dots(\text{II.43})$$

Φ , est la dose totale implantée (en ions/cm²). La fonction $n(x)$ représente la distribution en profondeur de tous les ions, et elle peut être caractérisée à l'aide de ses moments de distribution.

II.3– Modèles de distributions théoriques

II.3.1– Modèle de distributions Gaussiennes

Considéré comme le plus classique des modèles analytiques, ce modèle est exprimé par la relation suivante :

$$C(x) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\delta R_p} \exp\left(\frac{-(x - R_p)^2}{2\delta R_p^2}\right) \dots\dots\dots(\text{II-44})$$

Où N est le nombre total d'ions implantés par unité de surface, R_p est la profondeur moyenne de pénétration (projected range) et δR_p est un facteur qui caractérise la déviation standard du profil (projected straggle). Pour le calcul et la détermination de ces deux paramètres, qui ne sont en fait que les deux premiers moments de la distribution gaussienne, il suffit simplement de se référer aux formules qui ont été rapportées dans la littérature et qui sont données par plusieurs auteurs [19].

II.3.2– Modèle de la fonction demi- Gaussienne

Nous venons de voir que la première description des profils de dopage a été basée sur la distribution de probabilité Gaussienne centrée autour de la portée projetée R_p avec une déviation standard projetée (l'écart type) δR_p . Généralement, le profil Gaussien de l'équation précédente est insuffisante pour décrire parfaitement les profils réels. Si le profil est légèrement asymétrique, alors un troisième moment devient indispensable pour obtenir une bonne description des profils. Dans ce cas le profil est donné par le joint des deux profils demi-gaussiens avec la portée R_m et les déviations δR_{p1} et δR_{p2} .

$$x \leq R_m \quad C(x) = \frac{2N}{\sqrt{2\pi}(\delta R_{p1} + \delta R_{p2})} \exp\left(\frac{-(x - R_m)^2}{2\delta R_{p1}^2}\right) \dots\dots\dots(\text{II-45-a})$$

$$x \geq R_m \quad C(x) = \frac{2N}{\sqrt{2\pi}(\delta R_{p1} + \delta R_{p2})} \exp\left(\frac{-(x - R_m)^2}{2\delta R_{p2}^2}\right) \dots\dots\dots(\text{II-45-b})$$

R_m , δR_{p1} et δR_{p2} peuvent être calculés ou donnés par des tables :

$$R_p = R_m + 0,8(\delta R_{p2} - \delta R_{p1})$$

$$\delta R_p^2 = -0,64(\delta R_{p2} - \delta R_{p1})^2 + (\delta R_{p1}^2 - \delta R_{p2} + \delta R_{p2}^2)$$

$$\gamma = \delta R_p^{-3}(\delta R_{p2} - \delta R_{p1}) \times (0,218\delta R_{p1}^2 + 0,362\delta R_{p1}\delta R_{p2} + 0,128\delta R_{p2}^2)$$

$$\beta \approx 2,91 + 1,56\gamma^2 + 0,59\gamma^4$$

Ces dernières équations se résolvent itérativement et les valeurs approchées de δR_{p1} et δR_{p2} sont obtenues par une interpolation. Pour la plupart des implantations dans le Silicium et dans beaucoup d'autres semi conducteurs [20, 21]. On en déduit que si on utilise d'avantage des moments d'ordre supérieurs, les résultats sont beaucoup plus meilleurs. Donc, il apparaît nécessaire de travailler avec des distributions ayant des distributions d'ordre supérieur qui deviennent de plus en plus recherchées.

II.3.3– Modèle de la distribution de Pearson IV

La correction par la distribution de type Pearson a pour objectif d'améliorer la description du profil de dopage des particules en rendant son allure plus proche avec celui obtenu expérimentalement, cette distribution est définie par les quatre paramètres suivants : la position moyenne (R_p), l'écart type (σ_p), l'asymétrie (γ) et l'aplatissement (β)[22]. Afin de calibrer ces paramètres de manière à ce que les distributions Pearson IV aient une allure

similaire à celle des profils expérimentaux, commençons par caractériser ces fonctions en fonction de chacun de ces quatre paramètres.

D'une manière générale, une distribution $f(x)$ se caractérise en fonction de ses moments. Le moment d'ordre 1, μ_1 est défini par :

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx \quad \dots\dots\dots(\text{II-46})$$

Où, μ_1 correspond à la position moyenne de la distribution, on le note en générale R_p .

Les moments d'ordre supérieurs μ_i ($i=2, 3, \dots$), s'expriment en fonction de R_p de la manière suivante :

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i \cdot f(x) \cdot dx \quad \dots\dots\dots(\text{II-47})$$

Les distributions de type Pearson sont solutions de l'équation différentielle [23] :

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(x - a)f(x)}{b_0 + b_1x + b_2x^2} \quad \dots\dots\dots(\text{II-48})$$

Où, les quatre coefficients a , b_0 , b_1 et b_2 s'expriment par :

$$a = b_1 = -\frac{\gamma\sigma_p(\beta + 3)}{A} \quad b_0 = -\frac{\sigma_p^2(4\beta - 3\gamma^2)}{A} \quad b_2 = -\frac{2\beta - 3\gamma^2 - 6}{A} \quad \dots\dots\dots(\text{II-49})$$

Où, $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$ et σ_p représente l'écart type de la distribution.

Le coefficient γ mesure l'asymétrie (*skewness*) de la distribution ; Si $\gamma < 0$, nous avons une queue vers la surface, par contre si $\gamma > 0$ la queue sera après R_p et donc le profil aura une descente moins abrupte [9]. Des exemples sur la figure II.5 de profils d'implantation représentant, le coefficient β mesure l'aplatissement (*kurtosis*) de la distribution ou le pic.

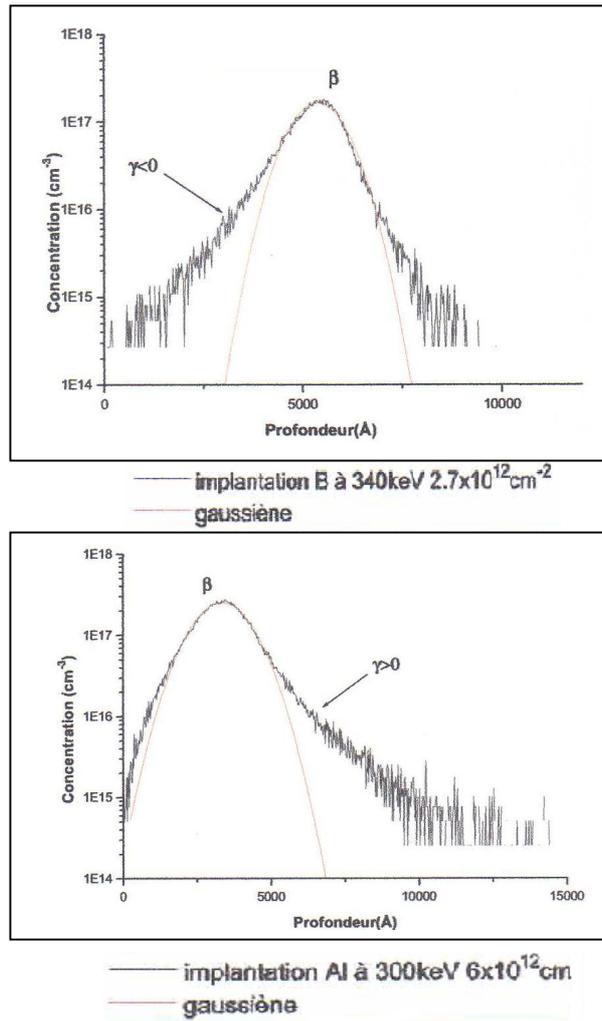


Figure II.5 : Exemples de profils d'implantation A1 et B dans le SiC [9].

La distribution de Pearson s'exprime en fonction de ses quatre moments :

$$R_p = \mu_1 \quad \sigma_p = \sqrt{\mu_2} \quad \gamma = \frac{\mu_3}{\sigma_p^3} \quad \beta = \frac{\mu_4}{\sigma_p^4} \quad \dots\dots\dots(\text{II-50})$$

Selon la valeur de ces coefficients, nous pouvons distinguer sept types de distributions Pearson, mais dans notre cas on utilise la distribution Pearson IV, car elle est définie pour tout x tel que $-\infty < x < +\infty$, alors que les autres types sont définis sur des domaines restreints [22]. De plus, elle présente un unique maximum à la profondeur $x = R_p + a$, avec a le coefficient défini par l'équation (II.49) et décroît de manière monotone vers 0 de chaque côté de ce

maximum, dans ces conditions des distributions PearsonIV, les coefficients asymétrie γ et aplatissement β doivent satisfaire les conditions énoncées ci-dessous [22] :

$$0 < \gamma^2 < 32 \quad \text{et} \quad \beta > \frac{39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma^2} \dots\dots\dots(\text{II-51})$$

L'expression de la distribution PearsonIV se présente alors sous la forme :

$$f(x) = K \left[b_0 + b_1(x - R_p) + b_2(x - R_p)^2 \right]^{1/2b_2} \exp \left[- \frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} a \tan \left(\frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \right) \right] \dots\dots\dots(\text{II-52})$$

Avec, K une constante de normalisation dont la valeur est fixée de manière à ce que la relation suivante soit vérifiée :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x).dx = 1 \quad \dots\dots\dots(\text{II-53})$$

II.4– Canalisation

La théorie exposée jusqu'à maintenant s'applique aux matériaux amorphes, la structure cristalline d'un matériau cristallin est anisotrope dont les effets directionnels peuvent jouer un rôle important dans la distribution des ions implantés. Si la pénétration des ions se fait suivant des axes cristallographiques à faible indices la probabilité de collision ion-cible diminue par rapport à une pénétration suivant des axes à grands indices ou dans un matériau amorphe. La perte d'énergie dans ces conditions est plus faible et la pénétration des ions implantés augmente. Cet effet, appelé canalisation, est présenté dans la figureII.6 où on peut voir un étalement du profil d'implantation jusqu'à R_{\max} . Un deuxième pic dans le profil des impuretés peut apparaître dans le cas où cet effet deviendrait très important. Si le faisceau d'ions possède une direction quelconque par rapport aux axes et aux plans cristallographiques, l'effet directionnel est nul, et tout se passe comme si le matériau implanté était amorphe.

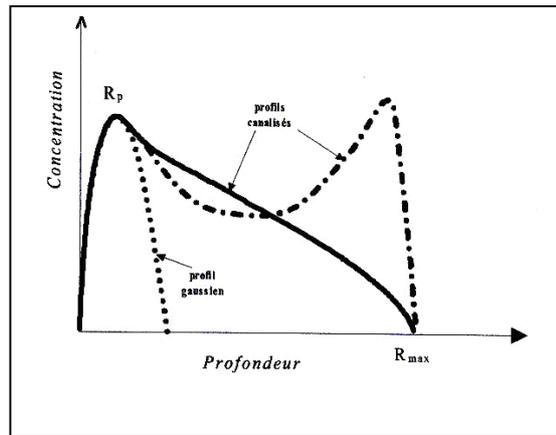


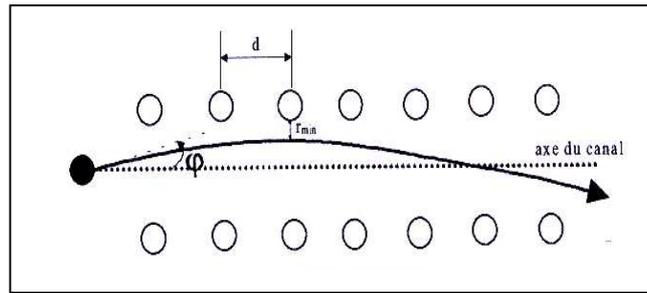
Figure II.6 : Distribution des ions implantés dans différents cas de canalisation comparée à un profil gaussien (cible amorphe).

La distribution des ions canalisés dépend de l'orientation du faisceau d'ions par rapport à la structure cristalline de la matière cible mais également de la température de la cible (vibration thermique du réseau), de l'état de surface de la cible et de la dose d'implantation (amorphisation).

L'ion incident pénétrant sous un petit angle par rapport aux rangées atomiques du réseau cristallin, sera guidé par ces atomes par des collisions successives sous faibles angles, l'ion restant à une distance considérable ($\langle r \rangle r_{\min}$) des atomes du réseau. Dans le cas contraire on assiste à une diffusion sous un grand angle.

La perte d'énergie des ions canalisés, essentiellement électronique, est plus faible, comparée à celle des particules non canalisés, ce qui est dû à une moindre densité électronique dans le canal.

En notons φ l'angle d'incidence de l'ion par rapport à l'axe du canal et E son énergie cinétique, l'énergie susceptible d'être transférée aux atomes du réseau est son énergie transversale : $E \sin^2(\varphi)$ (voir figure II.7). La distance minimale d'approche est obtenue quand



FigureII.7 : La trajectoire de l'ion incident dans un canal

La condition de canalisation de la particule incidente s'exprime par :

$$\varphi < \frac{r_{\min}}{d} \dots\dots\dots(\text{II-54})$$

Lindhard modélise l'interaction entre la particule incidente et la rangée des atomes en la considérant global et continue. Le potentiel transversal d'interaction dans le modèle de Thomas-Fermi s'exprime :

$$V(r) = \frac{Z_{\text{ion}} Z_{\text{atome}} e^2}{d} \ln \left[\left(\frac{a \cdot c}{r} \right)^2 + 1 \right] \dots\dots\dots(\text{II-55})$$

Avec a rayon d'écrantage de Thomas-Fermi exprimé par Lindhard et $c = \sqrt{3}$.

Dans le cas particulier des ions incidents à fortes énergies, c'est-à-dire quand les collisions électroniques règnent, la valeur de la distance minimale de rapprochement r_{\min} dans des conditions de canalisation est très proche de celle du rayon d'écrantage de Thomas-Fermi a . On obtient ainsi un potentiel $V(r_{\min})$ indépendant de l'énergie d'incidence et du rayon d'écrantage :

$$V(r_{\min}) \approx \frac{Z_{\text{ion}} Z_{\text{atome}} e^2}{d} 2 \dots\dots\dots(\text{II-56})$$

Et cela nous permet d'obtenir un angle critique de canalisation :

$$\varphi_{\text{cl}} \approx \left(\frac{2 Z_{\text{ion}} Z_{\text{atome}} e^2}{E_d} \right)^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots(\text{II-57})$$

Avec, $\varphi_{c1} < \frac{a}{d}$

Ce domaine énergétique est valable pour des vitesses d'incidence $v > (Z_{ion})^{2/3} \cdot e^2 / \hbar$

Pour des énergies plus faibles, la distance minimale de rapprochement devient plus grande que le rayon d'écrantage. Une expression dépendante du rayon d'écrantage est obtenue pour le potentiel :

$$V(r) = \frac{Z_{ion} Z_{atome} e^2}{d} \left(\frac{a \cdot \sqrt{3}}{r} \right)^2 \dots\dots\dots(\text{II-58})$$

Approximation $\ln(x + 1) \approx x$ pour x petit

Dans ce cas le potentiel s'exprime par :

$$V(r_{min}) = \frac{Z_{ion} Z_{atome} e^2}{d} \left(\frac{a \sqrt{3}}{r_{min}} \right)^2 = E \sin^2(\varphi_c) = E \frac{r_{min}^2}{d^2} \dots\dots\dots(\text{II-59})$$

On obtient ainsi l'angle critique de décanalisation :

$$\frac{Z_{ion} Z_{atome} e^2}{d^3 E} (a \sqrt{3})^2 = \frac{r_{min}^4}{d^4} = \varphi_c^4 \dots\dots\dots(\text{II-60})$$

Et,

$$\varphi_c = \left(\varphi_{c1} \frac{a \sqrt{3}}{d \sqrt{2}} \right)^2 \approx \left(\varphi_{c1} \frac{a}{d} \right)^2 \dots\dots\dots(\text{II-61})$$

On remarque que plus la distance interatomique d , est faible plus l'angle critique de décanalisation augmente. Cela signifie que, pour des matériaux denses la canalisation est importante.

Le phénomène de canalisation peut être exploité en obtenant des profondeurs d'implantation plus grandes dans un matériau cristallin avec un endommagement plus faible. Par exemple des jonctions plus profondes peuvent être réalisées pour les composants de puissances. Cependant l'utilisation d'implantation canalisée pour obtenir des jonctions profondes est délicate du point de vue technologique. L'alignement du faisceau incident par rapport à la cible est difficilement réalisable vu les moyens que cette méthode impose et surtout si on regarde l'incertitude sur l'orientation des substrats du commerce. C'est pour cela

que dans la plupart des cas, on évite cette canalisation des dopants implantés en désorientant volontairement la cible.

La désorientation d'une plaquette se fait en réalisant une rotation par rapport à l'axe qui suppose le faisceau incident suivie d'une inclinaison verticale (Tilt) de la plaquette par rapport à cet axe.

II.5– Simulation de l'effet de canalisation

Les deux angles d'implantation nécessaires pour paramétrer le faisceau ionique par rapport au réseau cristallin, sont le tilt et la rotation (Figure II.8). Le tilt T est l'angle entre le faisceau et la normale à la surface du matériau, la rotation R est l'angle entre le faisceau et l'axe du méplat.

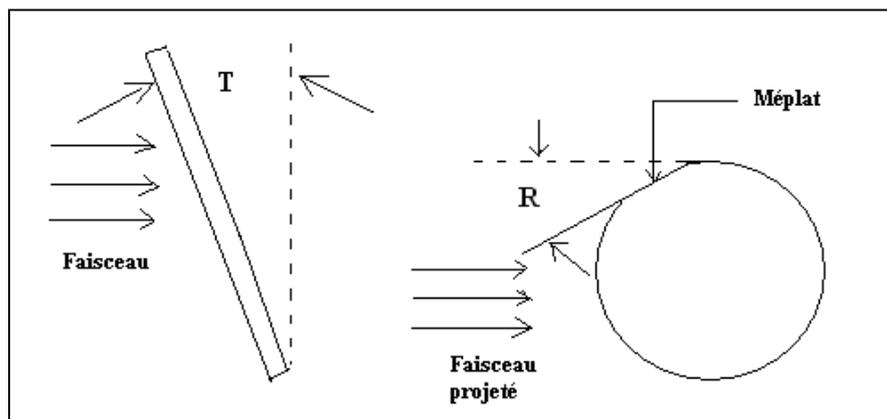


Figure II.8 : Les deux angles de l'implantation

Ces angles sont généralement choisis pour minimiser l'effet de canalisation, ce qui est le cas avec un tilt de 7° et une rotation de 30° pour une plaquette de silicium orientée (100).

La présence d'une canalisation résiduelle a pour effet, sur la distribution des impuretés, de rajouter une queue quasi-exponentielle en volume à la courbe qui correspond au matériau amorphe. La modélisation numérique de cette distribution doit alors être modifiée pour prendre en compte cette extension.

Le principal modèle de calcul numérique élaboré pour les matériaux monoatomiques cristallins, est basé sur l'approximation de la collision binaire dit : MARLOWE; le code Marlowe a été développé à l'origine pour simuler les déplacements atomiques par cascades dans une grande variété de cristaux. Sa première application était de déterminer la présence de défauts ponctuels induits par implantation. Les collisions élastiques sont régies par le potentiel de Molière, tandis que les pertes électroniques dépendant du paramètre d'impact et sont calculés avec le modèle de Firsov. Plusieurs modifications ont été apportées à ce modèle originel afin de simuler la distribution volumique des impuretés, le code UT-MARLOWE, configuré à l'origine pour l'implantation du bore dans du silicium monocristallin, est un des plus utilisés, la prévision du profil de dopants prend en compte le tilt, la rotation, la divergence du faisceau, d'éventuelles couches d'oxyde en surface, et la température du matériau.

II.6– L'endommagement du matériau implanté : Théorie – Modèles

II.6.1– Théorie

La production de défauts ponctuels ou étendus dans le matériau à doper est l'inconvénient majeur de l'implantation ionique. Deux types de défauts doivent être considérés : ceux qui proviennent directement de la présence physique des dopants implantés, et ceux qui sont générés dans le matériau par leurs collisions avec la matière.

Les premiers sont liés à la position des ions à la fin de leur trajectoire, les ions implantés peuvent s'arrêter sur deux sortes de sites : site substitutionnel ou site interstitiel.

Les seconds défauts proviennent de la modification de la structure du matériau au cours du bombardement ionique. Ils sont principalement issus des collisions nucléaires s'étant produites entre les dopants implantés et les noyaux des atomes-cibles ; A cause de l'effet de recul, un ion implanté peut générer plusieurs déplacement d'atomes, après avoir présenté sommairement la théorie de la création et de la distribution de ces défauts, nous en verrons les principales modélisations.

II.6.2– Modèle

Dans le but d'estimer le nombre d'atomes déplacés par ion, les formules de Kinchin-Pease ont été d'abord développées, en se basant sur un calcul local. Des développements dans les calculs de déplacement atomique ont conduit à d'autres méthodes d'estimations de la distribution de densité de défauts. Nous nous limiterons au programme principal utilisé dans notre travail basé sur la méthode de Monté Carlo, à savoir TRIM.

II.6.2.1– La méthode de Kinchin-Pease

Elle détermine le nombre total d'atomes déplacés dans le matériau par le simple calcul suivant [24]:

$$N(E) = \frac{E_n}{2.E_d} \dots\dots\dots(\text{II-62})$$

Où, E_n est l'énergie totale perdue par les chocs nucléaires,

E_d , est l'énergie de seuil de déplacement des atomes du matériau, cette énergie est de l'ordre de 15eV pour le Si [25]. Ce modèle considère qu'un ion incident augmente le nombre de particules en mouvement, uniquement si son énergie est supérieure à $2E_d$. Si elle est inférieure, l'atome sera délogé hors de son site, mais l'ion incident perdra une énergie au moins égale à E_d , et il sera stoppé. Le nombre de particules en mouvement restera donc identique dans le matériau.

II.6.2.2– La simulation Monté Carlo : TRIM

Plusieurs auteurs ont affiné le modèle de Kinchin-Pease, en l'adaptant à la simulation du type Monté Carlo. Dans le programme standard TRIM, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée pour donner les résultats suivants : l'ionisation induite par les atomes repoussés, le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions, et

également le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à E_d , et qui produisent des phonons .

Le code TRIM couple deux méthodes : celle de Kinchin Pease et celle des collisions (suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à E_d). Nous donnons le principe global de raisonnement :

Soit Z_1 le numéro atomique de l'ion, et Z_2 celui de l'atome cible, E_1 et E_2 sont les énergies des deux particules après la collision.

Si $E_2 > E_d$, l'atome bousculé a assez d'énergie pour quitter son site : c'est le déplacement. Si, en plus, $E_1 > E_d$, l'ion incident quitte également le site. L'atome cible devient à son tour une particule, d'énergie égale à E_2 moins son énergie de liaison cristallin.

En cas de déplacement de l'atome, mais si $E_1 < E_d$, deux cas de figures peuvent se présenter :

° $Z_1 = Z_2$, l'ion incident reste sur le site, c'est une collision de remplacement (équivalente à un 'carreau' au jeu de pétanque),

° $Z_1 \neq Z_2$, l'ion devient substitutionnel (électriquement actif)

Si $E_2 < E_d$, l'atome éjecté n'aura pas assez d'énergie et il retournera alors à son site en créant des phonons. Si, de plus $E_1 < E_d$, l'ion devient un interstitiel tout en produisant également des phonons, ce qui chauffe le matériau.

II.7– Conclusion

Après avoir exposé l'intérêt et les principes de la technique de dopage par implantation ionique et décrit son appareillage, nous avons passé en revue les principales théories du

ralentissement des particules incidentes introduites dans le matériau cible, ainsi que leurs applications dans le domaine de la simulation. Ces théories modélisent les deux processus de pertes d'énergies (nucléaire et électronique), et tentent d'en déduire le profil de distribution des impuretés en volume dans le matériau.

Deux catégories sont distinguées, selon que le matériau dopé est amorphe ou bien cristallin ; Nous avons étudié ensuite les principales fonctions de distribution donnée par les théories classiques, décrivant la répartition des particules implantés à l'intérieur du matériau cible, on a noté que le contrôle de la position moyenne (R_p) , et de l'écart type (δR_p ou σ_p) est possible avec une distribution Gaussienne, présentant une asymétrie nulle, mais une fonction de distribution de type Pearson IV, calibrée par quatre paramètres appelés les quatre moments de la distribution ($R_p, \delta R_p, \gamma, \beta$), utilisée de plus en plus en microélectronique pour la description des profils d'implantation ionique de dopants, présente une allure similaire à celle du profil expérimental en fonction de chacun de ces quatre paramètres, et est une généralisation des distributions gaussiennes et autorise entre autre le contrôle de leur position moyenne, de leur écart type et de leur asymétrie.

Ensuite, on a donné un brève résumé sur la théorie relative aux défauts créés lors de l'implantation ionique dans le silicium, du modèle de Kinchin Pease, ainsi que leur simulation par le code TRIM de la méthode de Monté Carlo.

Chapitre 3

*Etude et résultats expérimentaux
des films de silicium dopés azote
et dopés bore et azote*

III.1- Introduction

Quelle que soit l'application visée, la fabrication d'un dispositif requiert différentes étapes technologiques, et notamment la maîtrise du dopage localisé par implantation ionique, sujet ayant fait l'objet du chapitre précédent, le contrôle et l'activation des dopants nécessitant un recuit post implantation, et la détermination de la répartition de ces dopants en profondeur dans le matériau.

Ce chapitre est consacré à une brève description de la technique d'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires, et plus particulièrement aux performances qu'on est en droit d'en attendre. Ensuite, nous passerons rapidement en revue l'intérêt de réalisation de films polycristallins à base de la filière disilane et présenterons les films réalisés ainsi que les expérimentaux obtenus dans chaque cas.

III.2- L'analyse par SIMS

Le premier instrument destiné à l'analyse par spectrométrie de Masse des Ions Secondaires fut construit selon toute vraisemblance à Vienne en 1949 par Vieböck sous la direction de Herzog pour analyser l'émission ionique des métaux et oxydes. La méthode connut ensuite de rapides progrès dans les années 60, notamment sous l'impulsion de Liebl et Herzog qui améliorèrent les optiques ioniques [26]. Le problème était à l'époque de déterminer la composition de météorites tombées sur terre, et donc de disposer d'une technique d'analyse physico-chimique permettant de détecter tous les éléments de la classification périodique avec une sensibilité optimale. En France la technique fut développée par Slodzian et Castaing, également dans les années 60.

La technique d'analyse par spectrométrie de Masse des Ions Secondaires (SIMS) est devenue en quelques années un outil indispensable au développement de la microélectronique. La réalisation de profils en profondeur, grâce à la sensibilité de l'analyse et à ses performances en matière de résolution en profondeur, a contribué à l'imposer dans ce domaine où la détection d'éléments présents en faible quantité dans une matrice semi-conductrice, dopants ou contaminants, est vitale.

III.2.1- Le principe

L'analyse SIMS consiste à éroder progressivement et très lentement un échantillon au moyen d'un faisceau d'ions, et d'étudier la nature ainsi que la quantité des espèces chimiques présentes dans cet échantillon et qui ont été éjectées par l'érosion. Le faisceau d'ions incidents est dit primaire, par comparaison avec le faisceau d'ions secondaires provenant de l'échantillon analysé. Lors du bombardement, les ions primaires provoquent des collisions sur et sous la surface de l'échantillon, ce qui conduit à l'émission de diverses espèces : atomes et molécules neutres, ions mono et polyatomiques, ainsi que photons et électrons.

Les ions secondaires émis constituent l'information recherchée. Une partie provient des ions incidents, et l'autre de l'échantillon. La figure II.1 [27], nous montre le principe de l'érosion et de l'émission des ions secondaires :

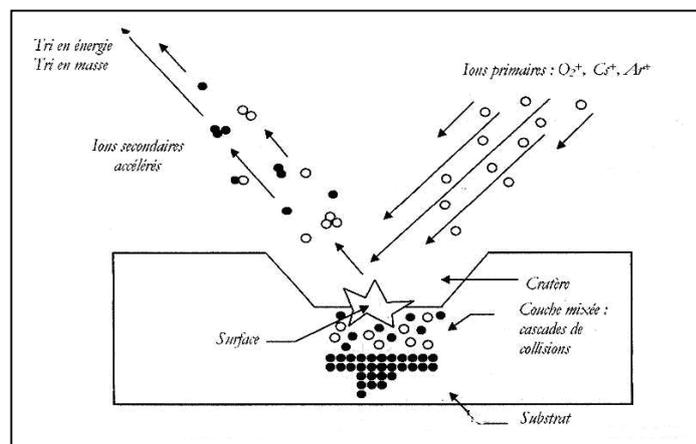


Figure III.1 : Principe de l'analyse par SIMS

III.2.2- Les possibilités et les performances de la technique

L'analyse SIMS permet la détection et la mesure de n'importe quel élément de la classification périodique dans une matrice donnée. La sensibilité est de l'ordre du ppm pour la plupart des éléments, voir du bpm. C'est donc une technique d'analyse très bien adaptée aux semi conducteurs, qui sont maintenant dopés avec des concentrations très faibles ou très

fortes sur des épaisseurs toujours plus petites. C'est une analyse dite « semi-quantitative », car on a besoin d'une mesure de référence pour comparer les concentrations réelles et mesurées.

La résolution est de l'ordre du μm latéralement, et du nm en profondeur. On peut ainsi aisément obtenir une image ionique d'une surface. La résolution en masse de la technique est tout aussi performante, puisqu'on peut discriminer deux éléments de même masse mais distantes de $\frac{\Delta M}{M}$ de l'ordre de 10^{-4} .

III.3- Avantages d'une grille en poly Silicium

L'utilisation de films en silicium polycristallin pour l'élaboration de la grille CMOS, a permis l'auto-alignement des zones de sources et de drain avec la grille et une amélioration significative de la fiabilité de l'oxyde [28, 29]. En effet, l'épaisseur de l'isolant étant très faible, les dopants peuvent facilement diffuser vers le substrat après recuit thermique.

Ce phénomène apparaît essentiellement pour le bore, vu sa faible dimension [30, 31, 32]. Une solution consiste à effectuer un recuit thermique, mais elle se heurte à l'effet de déplétion de grille lié à une mauvaise activation du bore à l'interface grille/oxyde [33, 34, 35].

La présence du bore dans le substrat de type N, où sera créé le canal, et dans le volume de l'isolant de grille, cause d'une part des instabilités dans la tension de seuil et d'autre part fait augmenter le nombre de défauts dans l'oxyde, ce qui dégrade la fiabilité du transistor [30, 36, 37, 38].

Une étude faite par M. Koda et al [39], portant sur l'effet d'une structure à gros grains sur les caractéristiques de transistors PMOS, a montré que la petite taille des grains de poly cristallin dégrade l'intégrité de l'oxyde de grille conduisant à des tensions de claquage au-dessous de 2V. Ces auteurs ont montré que l'utilisation d'une structure à gros grains, a amélioré la qualité de l'oxyde de grille. Une amélioration de l'activation du bore a été aussi

constatée avec une augmentation de la transductance du transistor, ainsi qu'une diminution du décalage de la tension de seuil [40].

Une grille en film polycristallin à gros grain couplée à un dopage à l'azote permet à la fois le freinage de la diffusion du bore et l'amélioration des propriétés de l'isolant de grille [41, 42, 43, 44].

III.3.1- Comportement de l'azote dans le Silicium

L'azote est introduit dans le silicium, par implantation ionique ou par le mode In Situ. Les diverses caractéristiques des atomes d'azote dans le silicium sont encore méconnues à cause du double comportement de l'azote dans le silicium [44]. D'une part, l'atome d'azote peut se trouver dans le silicium comme impureté substitutionnelle de type n et d'autre part, il peut se trouver dans des sites interstitiels et demeure électriquement inactif, suivant les liaisons atomiques Si-N présentes dans le matériau [40].

La solubilité solide de l'azote dans le silicium a été déterminée par Yatsurugi et al [45], sa valeur est de l'ordre de $(4.5 \pm 1.0) \cdot 10^{15}$ atomes / cm^3 , qui est une valeur très faible par rapport à celle du carbone ($3.2 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$), et de l'oxygène ($2.8 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$). L'azote au dessous de sa limite de solubilité solide, existe dans le silicium sous forme de paires d'atomes fortement liées [46]. Pavlov et al [47] suggèrent que l'azote peut exister sous forme moléculaire dans des sites interstitiels. Stein [48] quant à lui propose plusieurs possibilités de combinaison entre deux centres Si-N-Si à travers une liaison N-N avec la paire d'azote située dans un site lacunaire ou bi lacunaire.

III.3.2- Les méthodes d'augmentation de la taille des grains

Les propriétés électroniques des films de Silicium dépendent essentiellement de leur structure cristalline et de la taille des grains. Les couches de Silicium déposées directement à l'état polycristallin sont caractérisées par un grand nombre d'états de pièges dans les joints de grains formant des barrières de potentiel inter granulaires qui détériorent les performances électriques des transistors.

Ainsi l'augmentation de la taille des grains a un effet direct sur les caractéristiques électriques des transistors à effet de champ [49].

Plusieurs techniques sont proposées pour augmenter la taille des grains, telles que la cristallisation des films après une amorphisation par implantation ionique, et la cristallisation par balayage Laser permettant d'obtenir des grains de grande taille et de bonne qualité. La première technique présente l'inconvénient de nécessiter des étapes technologiques supplémentaires ainsi que des temps de recuit très longs. La deuxième méthode s'avère très coûteuse et difficile à mettre au point pour une utilisation industrielle.

Pour les films de Silicium amorphe déposés sur substrat oxydé, l'interface a-Si/Oxyde est une région préférentielle conduit après une cristallisation en phase solide à une structure poly cristalline avec des tailles de grains très faibles. Ryu et al [50], ont rapporté que la diminution des sites de nucléation à l'interface a-Si/Oxyde par l'incorporation de l'oxygène près de cette interface a fait augmenter la taille des grains de 1 à 5 μm . Cependant cette méthode nécessite une optimisation de la quantité d'oxygène vu que cette impureté cause la formation de complexes détériorant les performances de transistors.

M. K. Hatalis et al [51], ont étudié l'effet des températures de dépôts et de recuit sur la cristallisation d'une couche amorphe déposée par LPCVD à partir du silane, sur un substrat de silicium monocristallin oxydé. Ces auteurs ont montré que pour une température de dépôt donnée, la taille des grains est plus grande lorsque la couche amorphe est recuite à basse température de recuit ($T_r = 550^\circ\text{C}$) et que dans ce cas, elle est maximale (0.4 μm) quand la couche est déposée à 545 $^\circ\text{C}$. Ce même travail a mis en évidence l'augmentation, de la taille des grains avec l'accroissement des vitesses de dépôt. Cette dernière croit quand la température de dépôt diminue. Mais il existe une température critique ($T_d = 545^\circ\text{C}$) à partir de laquelle on observe une augmentation simultanée de la vitesse de dépôt et de la vitesse de germination, ce qui a pour conséquence la diminution de la taille des grains.

En effet, la structure du silicium amorphe cristallisé peut être liée au désordre structural du matériau déposé à l'état amorphe [52]. En augmentant le désordre initial du réseau de

silicium, un élargissement significatif de la taille des grains du silicium cristallisé peut être réalisé. Le désordre dans le réseau du silicium peut être alternativement augmenté en utilisant les basses températures de dépôt combinées avec des vitesses de dépôt élevées.

III.4– Dépôt de films à partir de la filière Disilane

L'utilisation du disilane comme source gazeuse pour le dépôt du silicium a permis l'obtention d'une structure polycristalline à gros grains.

Si le silane est utilisé comme source d'obtention du silicium, les vitesses de dépôt sont sensiblement réduites pendant que la température de dépôt diminue en dessous de 530°C [49]. Par contre, l'utilisation du disilane a permis des vitesses de dépôts élevées mêmes aux températures en dessous de 500°C, ce qui a conduit à l'obtention des grandes tailles de grains pouvant aller jusqu'à 5µm, dépassant de loin les tailles obtenues par la filière Silane [53].

Les travaux de J.Poyatos [54], ont mis en évidence une différence de qualité structurale pour les films obtenus par la filière silane et la filière disilane. Cette différence se trouve sur leur taux d'oxydation à basse température (600°C) en ambiante humide : les films obtenus à partir de disilane s'oxyde toujours plus vite que ceux déposés à partir de silane. Ces phénomènes renforcent l'intérêt potentiel de la filière disilane au niveau industriel. Ces mêmes travaux ont montré que les films de silicium à gros grains obtenus par LPCVD à partir du disilane présentent des qualités électriques plus que satisfaisantes en termes de mobilité plus élevée comparée à celle obtenue par utilisation de la filière silane.

Une étude faite par Nakazawa et al [55] a montré que la taille des grains de films obtenus en utilisant du disilane est plus large que celle obtenue en utilisant le silane, la taille maximale des grains est obtenue à partir d'un dépôt réalisé à 460°C, puis traité par recuit thermique, D.N.Kouvatos et al [56] ont vérifié pour les structure de grilles silicium obtenu par LPCVD à partir du disilane sont caractérisées par des faibles courants de fuite avec des grandes valeurs de mobilité.

III.5- Technique d'incorporation de l'azote dans la structure MOS

La présence d'azote dans la structure MOS apporte un élément de réponse aux problèmes de la pénétration du bore dans le substrat via l'oxyde de grille et sur l'amélioration de la fiabilité de l'isolant [40]. Nous présentons dans ce qui suit les deux séries de films élaborés et étudiés à partir de l'analyse SIMS.

III.5.1- Dopage du silicium par le mode In Situ

Le dopage In Situ s'effectue pendant la phase de formation de la couche de silicium elle-même. Le procédé qui permet de réaliser cela, consiste à faire introduire dans le four de dépôt deux gaz vecteurs, l'un véhiculant les atomes qui constitueront le fil de silicium, et l'autre véhiculant l'atome dopant. Ce mode de dopage permet d'obtenir une distribution homogène des impuretés en ne nécessitant qu'une seule étape technologique. Par cette technique, on réalise les dépôts de silicium dopés azote en ajoutant au disilane (Si_2H_6) de l'ammoniac (NH_3).

Un dopage à l'azote par le mode In Situ présente l'avantage de pouvoir incorporer de fortes concentrations à l'interface grille/oxyde en utilisant qu'une seule étape technologique [57].

III.5.2- Elaboration du silicium dopé In Situ azote ou NiDoS

Les films de silicium dopé azote sont obtenus par LPCVD, à partir d'un mélange de disilane (Si_2H_6) et d'ammoniac (NH_3), déposés à basse température.

III.5.2.1- Présentation du Four LPCVD

L'ensemble LPCVD développé au LAAS-CNRS comprend quatre fours horizontaux à murs chauds, dont les diamètres intérieur et extérieur du tube en quartz sont 135/141 mm

pour une longueur de 1970mm. Ils sont prévus pour accueillir des plaquettes de quatre pouces (100mm de diamètre). Comme illustré sur la figure III.2, chaque tube comprend un système de régulation en température, constitué de thermocouples de type R (platine/platine-Rhodium 10%), couvrant trois zones : la zone centrale est contrôlée à $\pm 0.5^{\circ}\text{C}$ sur une longueur de 70cm, et la température maximale est de 1150°C .

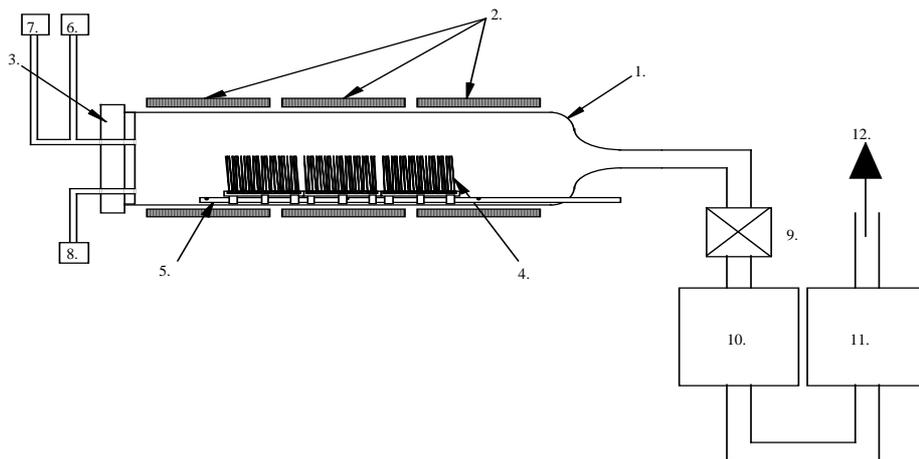


Figure III.2: Schéma de principe du Four LPCVD

1. Tube en quartz.
2. Corps de chauffe (3 zones).
3. Porte étanche.
4. 3 nacelles en quartz de 25 plaques de 100 mm ou 150 mm.
5. Sonde avec 3 thermocouples.
6. Injection d'ammoniac (NH_3) ou d'azote (N_2) pour la purge.
7. Injection de dichlorosilane (SiCl_2H_2) ou d'azote (N_2) pour la purge et la remise à pression atmosphérique.
8. Manomètre (jauge Baratron).
9. Vanne de régulation de pression.
10. Pompe Roots et pompe primaire sèche.
11. Nettoyeur de gaz (scrubber).
12. Evacuation.

Le bâti expérimental de la technique LPCVD, est composé principalement d'un tube de quartz équipé d'un système de régulation de température à trois zones, d'un système

produisant le vide le tube et d'un panneau pour l'électronique de commande. La température est mesurée dans les trois zones du four lorsqu'il est déchargé et sous circulation de gaz. Les gaz utilisés en LPCVD pour déposer du Silicium polycristallin dopé azote sont le SiH_4 ou Si_2H_6 ou SiH_2Cl_2 avec NH_3 l'ammoniac.

Capacité de l'équipement

- Le tube est équipé de nacelles pour des plaques de diamètre 100mm et 150mm.
- La capacité totale est de 75 plaques (3 nacelles de 25 plaques). Toutefois, pour garantir une uniformité en épaisseur de +/- 3% par plaque et sur le lot, la capacité réelle est de 50 plaques de 100mm ou 25 plaques de 150mm.

Le groupe de pompage ROOTS d'Alcatel (RSV250) assure l'évacuation par l'arrière du tube des gaz résiduels issus des différentes réactions, avec un débit supérieur à $15\text{m}^3/\text{h}$ dans une gamme de pression s'échelonnant entre 0.02 et 7mbars. Une vanne papillon permet de régler la pression dans le tube par l'intermédiaire de deux capteurs de pression capacitifs (jauges BARATRON) couvrant une gamme de 1.3 à 13.33 mbars. Les gaz impliqués dans le procédé étant particulièrement nocifs, toxiques, inflammables et /ou corrosifs, l'entrée du four (qui est aussi l'entrée des gaz) comporte une porte hérmétique en acier inox, et la sortie quant à elle, est équipée d'un piège à particules (issues notamment de la pyrolyse des gaz réactants) qui permet de protéger les pompes. Enfin l'évacuation des gaz refoulés par les pompes est assurée par un extracteur antidéflagrant et résistant aux gaz corrosifs.

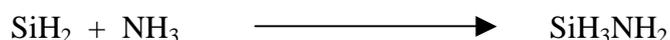
Des débitmètres massiques TYLAN peuvent délivrer les débits maximums suivants :

Silane	SiH_4	200sccm
Disilane	Si_2H_6	200sccm
Ammoniac	NH_3	200sccm

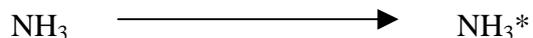
Le contrôle en température précis de la zone centrale impose une charge de 15 à 20 plaquettes avec un espacement minimal de 5mm.

III.5.2.2- Mécanismes réactionnels des dépôts à partir du mélange Si_2H_6

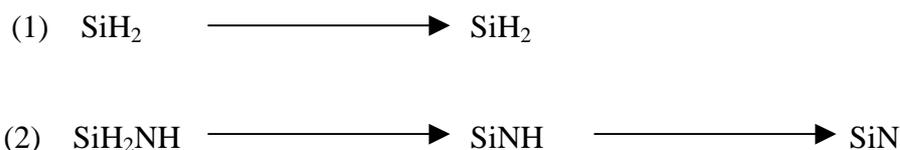
Dans la littérature, les étapes de la synthèse de silicium dopé azote à partir de disilane et d'ammoniac se présentent ainsi [57] :



Les produits de ces réactions sont adsorbés à la surface des plaquettes (matérialisé par un astérisque) et à ce niveau, se produit une réaction entre le silylène SiH_2 et l'ammoniac pour former finalement le composé le composé SiH_2NH^* .



Deux mécanismes sont en compétition puisque le silylène SiH_2 peut favoriser le dépôt de silicium, ou bien réagir avec l'ammoniac pour donner un composé azoté [40].



Ainsi, pour un faible débit d'ammoniac par rapport au débit de disilane, la réaction (1) est prépondérante, et il devient possible d'incorporer de faibles quantités d'azote lors du dépôt de silicium (dopage In-Situ), ce qui correspond au cas du NiDoS.

Dans le cas de forts débits d'ammoniac, l'azote inhibe fortement la réaction (1) au profit de la réaction (2) pour former des couches de nitrure riche en silicium.

L'analyse des mécanismes réactionnels met en évidence le rôle essentiel du silylène dans le dépôt de silicium. Aussi, dans la mesure où le NiDoS résulte d'une proportion plus importante de silicium que d'azote, l'utilisation du disilane à la place du silane pour réaliser du NiDoS est avantageuse du fait d'une présence plus abondante de silylène, ce qui autorise des vitesses de dépôts du NiDoS suffisamment élevées malgré la présence d'ammoniac qui tend, dans une moindre mesure, à la diminuer.

III.5.3- Description de la première série des échantillons

Dans notre travail, on a fait l'étude de films déposés à deux différentes températures pour montrer l'effet de la taille des grains et l'influence de la densité de joints de grain.

Les films de silicium dopés azote ont été déposés sur des plaquettes quatre pouces, d'orientation cristallographiques (1 1 1), ayant été préalablement oxydées (120 nm environ).

Les plaquettes sont positionnées verticalement sur une nacelle en quartz placée au centre du four lors du dépôt, leur face polie tournée vers l'entrée du tube pour recevoir le flux des gaz. L'écartement entre plaquettes est pris constant pour avoir une bonne homogénéité de dépôt le long de la charge. Les conditions de dépôts pour les deux séries de films pour le mélange disilane/ammoniac sont représentés dans le tableau III.1 :

	1 ^{ère} catégorie de films	2 ^{ème} catégorie de films
Température	460°C	480°C
Pression totale	200 mtorr	200 mtorr
Epaisseur de la couche déposée	250 nm	250 nm
Distance inter – plaquette	20 mm	20 mm

Tableau III.1 : Résumé des conditions de dépôts pour les deux séries de films ayant comme mélange disilane/ammoniac

Une première série de films constituée de quatre échantillons déposés à 460°C et quatre autres déposés à 480°C, de silicium dopé azote appelé aussi NiDoS, en fonction de la teneur en azote définie comme étant le rapport des concentrations totales d'azote et de silicium dans le NiDoS ($X = N/Si$) est donc obtenue avec des concentrations d'azote de : $N_1 = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $N_2 = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$; $N_3 = 1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$; et $N_4 = 1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ et sera étudiée et caractérisée après un recuit thermique de 900°C pendant 20mn.

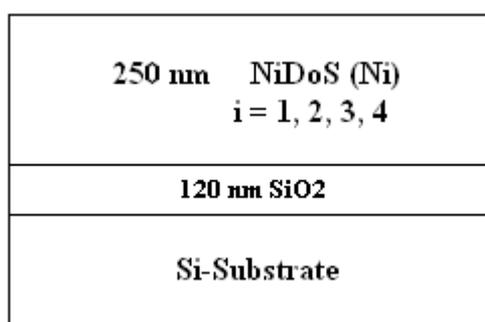


Figure III.2: Représentation schématique de la structure étudiée incluant les quatre échantillons test.

III.6.4- Cinétique de dépôt et composition des films de Si dopés azote

Des études menées au Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes (LAAS) du CRNS de Toulouse concernant la cinétique de dépôt des films de Silicium dopés azote ont abouti à mettre en évidence une relation entre les débits des gaz R et la vitesse de dépôts des

films de la forme [57] :

$$V_d = V_{d0} \frac{1}{1+R} \quad \dots\dots\dots(III.1)$$

Où, V_{d0} représente la vitesse de dépôt du silicium amorphe en disilane pur et R le rapport des débits des gaz donnés par :

$$R = \frac{d(NH_3)}{d(Si_2H_6)} \quad \dots\dots\dots(III.2)$$

On obtient donc

$$V_d = V_{d0} \frac{d(Si_2H_6)}{d(Si_2H_6) + d(NH_3)} = V_{d0} \frac{P(Si_2H_6)}{P(Si_2H_6) + P(NH_3)} = V_{d0} \frac{P(Si_2H_6)}{P_{totale}} \quad \dots\dots\dots(III.3)$$

Où, $P(Si_2H_6)$, $P(NH_3)$ et P_{totale} représentent respectivement les pressions partielles de disilane, d'ammoniac et la pression totale du dépôt.

III.6.5- Caractéristiques électriques et structurales des films de Si dopés azote

Les propriétés électriques des films polysilicium ont été interprétées en termes de deux modèles distincts [58, 59]. La théorie de ségrégation, selon laquelle les atomes d'impuretés tendent à s'isoler aux joints de grain où ils sont électriquement inactifs. La seconde est la théorie de piégeage aux joints de grain, qui suppose que la présence d'une grande quantité d'états pièges aux joints de grains est capable de capturer, et donc d'immobiliser, les porteurs libres.

Ces états chargés aux joints de grain créent des barrières de potentiel, qui s'opposent au passage des porteurs d'un grain à son voisin. La limitation du modèle de ségrégation est qu'il n'explique pas la dépendance de la résistivité du film en fonction de la température, alors que la résistivité est thermiquement active. En combinant le modèle de piégeage au joint de grain avec un mécanisme d'émission thermoionique à travers les barrières de potentiel, Seto[60] a développé une théorie complète de phénomènes de transport pour les matériaux

polycristallins qui stipule la création d'une densité d'états pièges au niveau du joint de grain, n'inclut pas la possibilité que ces états peuvent être partiellement remplis quand la région de déplétion ne s'étale pas dans toute la cristallite. Par conséquent, cette théorie est limitée à la situation particulière où l'énergie des pièges est au-dessous du niveau de Fermi.

Kamins [61] a supposé que le joint de grain agit en tant que piège pour les atomes des impuretés à cause de la ségrégation de ces derniers aux joints de grains. En conséquence, la quantité d'impuretés dans la cristallite est réduite, ce qui conduit à une concentration en porteurs libres beaucoup plus petite que la concentration d'impuretés uniformément distribuées. L'existence d'un grand nombre de défauts au niveau des joints de grains, dus aux liaisons atomiques inachevées, a pour conséquence la formation des états pièges, capables de piéger les porteurs de charge et de les immobiliser. Ceci réduit le nombre de porteurs libres disponibles pour la conduction électrique. Après avoir figé les porteurs mobiles, les pièges deviennent électriquement chargés, et forment une barrière de potentiel qui empêche le mouvement des porteurs d'une cristallite à l'autre, réduisant de ce fait leur mobilité.

Il est à noter, que la structure cristalline des films de silicium polycristallin en termes de taille de grain, affecte d'une manière significative leurs propriétés électriques. En effet, il est bien connu que le recuit, indépendamment du dopage, permet des réarrangements atomiques par diminution des contraintes internes et conduit normalement à un accroissement de la taille des grains [62], d'où une amélioration de la conductivité des films [62, 63]. Les mesures de résistivité des films de NiDoS en fonction de recuit (températures et durées) [40] et des taux d'azote dans les films, a permis de mettre en évidence l'influence des niveaux de dopage et des budgets thermiques utilisés sur les caractéristiques électriques des films NiDoS.

III.6.6– Effet du taux d'azote sur la taille des grains et des joints de grains

Une étude précédente [40] a confirmée que la taille moyenne des grains varie en fonction de la température et de la durée de recuit ainsi que de la quantité d'azote présente dans le matériau (voir figure III.3). Dans le temps de recuit thermique, les grains ont tendance à augmenter de taille, jusqu'à ce qu'ils forment une couche entièrement cristallisée. C'est la phase de saturation de la cristallisation thermique où les grains atteignent leurs tailles

maximales (T° de recuit maximale 1200°C et temps de recuit maximal 3h, la taille des grains atteinte se stabilise, même après augmentation du temps de recuit).

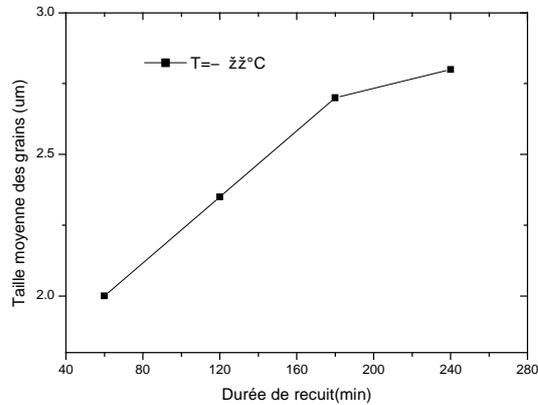


Figure III.3 : Evolution de la taille des grains en fonction de la durée de recuit [40].

Par contre, en présence d'azote les joints de grain deviennent de plus en plus important (voir figure III.4), ce qui entraîne une diminution de la conductivité électrique des films [64, 65], (pour une éventuelle amélioration des propriétés électriques et structurales des films de NiDoS, il faut réaliser des recuits à des températures supérieures à 1000°C)

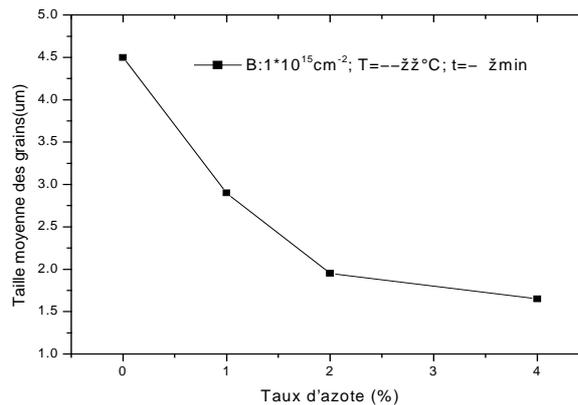


Figure III.4 : Variation de la taille des grains en fonction du taux d'azote [40].

III.7- Résultats expérimentaux

Les observations par microscope électronique à transmission ont montrés que les films déposés à l'état amorphe, sont transformés en une structure polycristalline à gros grains après recuit thermique de 900°C pour une durée de 20 minutes, l'étude structurale a été menée en fonction des quantités d'azote dans les films, sous ces conditions, on a supposé que l'azote demeure électriquement inactif dans le silicium. Nous présentons sur la figure III.5a et la figure III.5b, les deux photos TEM déposés à 480°C.



Figure III.5-a: Microscopie électronique de transmission (TEM): Films déposés à 480°C

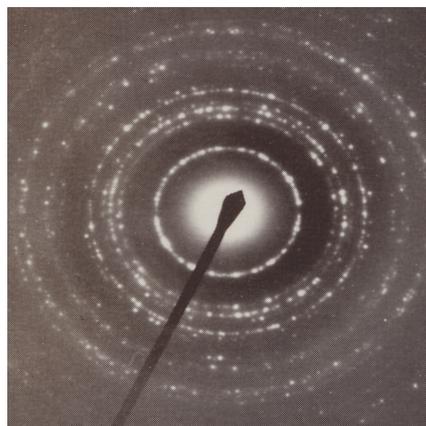


Figure III.5-b: Diffraction : Films déposés à 480°C

La taille moyenne des grains pour différents films réalisés varie de 3 μm , représentant

la plus grande taille, en fonction de l'augmentation de la concentration d'azote introduite atteignant une diminution de taille de l'ordre de $0,5\mu\text{m}$. Pour les films déposés à une température de dépôt de 460°C , la taille moyenne des grains pour l'échantillon non dopé azote (une concentration très faible de l'ordre de $1 \times 10^{17} \text{at}/\text{cm}^3$) est de l'ordre de $4,5\mu\text{m}$, ce qui représente la plus grande taille mesurée, ceci est en bon accord avec la littérature, Nakazawa et al [53] ont rapporté des tailles de grains allant jusqu'à $5\mu\text{m}$ pour des films obtenus par LPCVD à partir du disilane et déposés à 465°C .

III.7.1- Profils de dopage In Situ dopés azote

Nous donnons, l'un des résultats obtenus de la caractérisation des films par la technique d'analyse SIMS, la distribution des dopants azote en fonction de la profondeur sur la figure III.6.

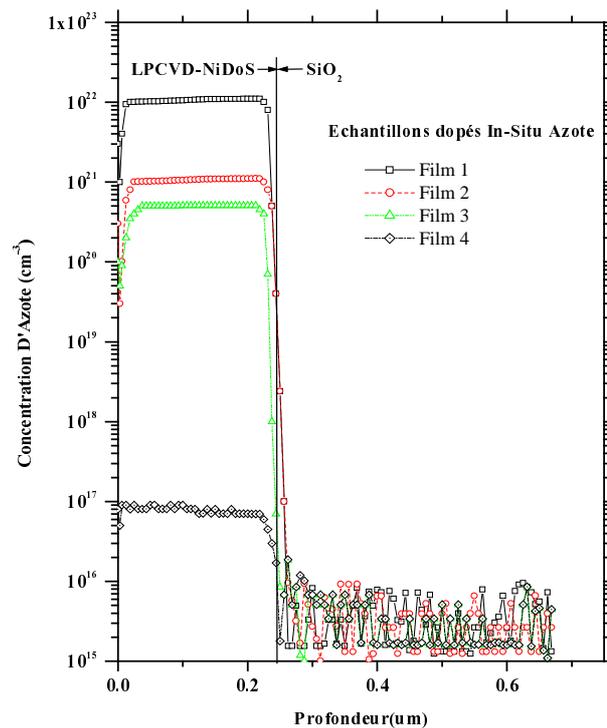


Figure III.6 : Profils expérimentaux de dopage In-Situ Azote

($T_d = 480^\circ\text{C}$, pour les quatre films)

Après dépôt, et dopage In-Situ les films ont subi comme mentionné

précédemment un près recuit de 900°C pendant 20 min, les profils plats décrivant la répartition de l'azote dans quatre films sur la figure III.6, confirme le mécanisme de dopage ainsi que la différence en teneur de concentration dans les films.

III.7.2- Description de la 2^{ème} série d'échantillons

Cette série d'échantillons correspond aux films de silicium copdopés bore et azote, les films NiDoS obtenus sous les mêmes conditions que ceux de la première série sont dopés par implantation ionique au bore à des doses de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ et $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ avec une énergie de 10 keV. Ces échantillons avec différents taux d'azote, ont subi un recuit thermique à 900°C pendant 20 minutes, ensuite implantés au bore.

L'analyse SIMS de ces échantillons a permis l'obtention des Figures III.7, III.8 de profils de dopage bore en fonction de la concentration d'azote dans ces échantillons (superposition des profils de 460°C pour les quatre échantillons et ceux du 480°C pour aussi les quatre échantillons)

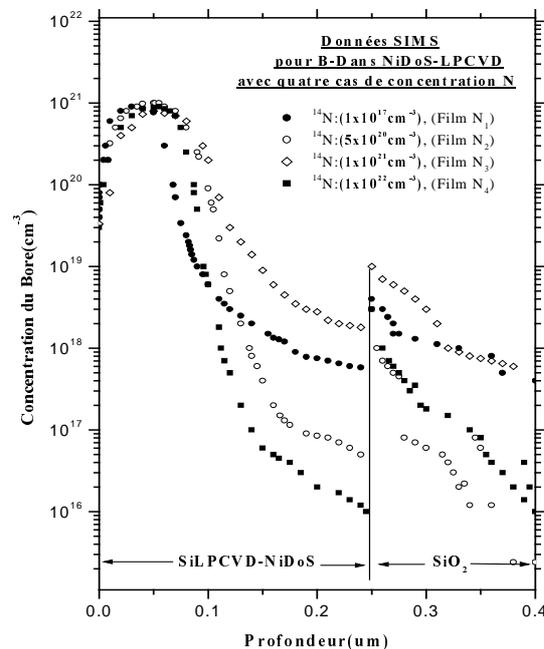


Figure III.7 : Superposition de profils SIMS de Bore dans les quatre échantillons déposés à 460°C et dopés In-Situ azote.

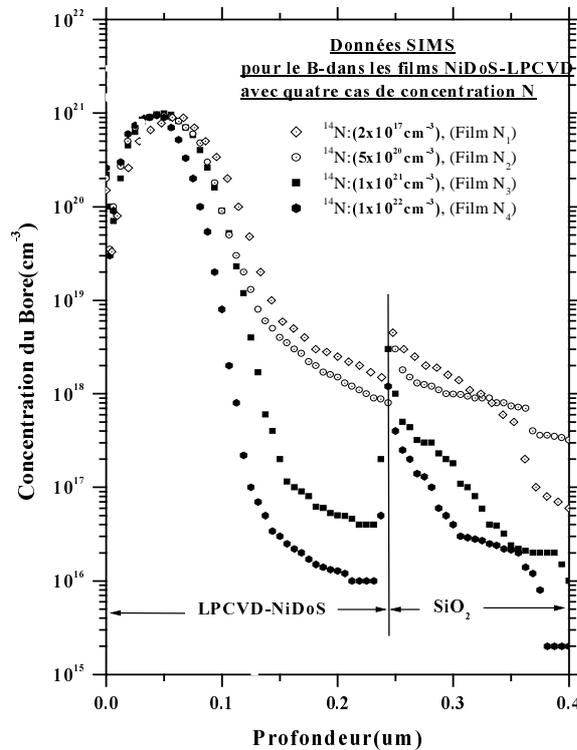


Figure III.8 : Superposition de profils SIMS de Bore dans les quatre échantillons déposés à 480°C et dopés In-Situ azote.

Sur la figure III.7, la superposition des profils de concentration du bore dans les quatre échantillons, montre déjà une différence remarquable, quant à la répartition des ions bore en profondeur, elle change au fur et à mesure que la concentration de l'azote augmente, et ce changement devient très accentué. Beaucoup plus, lorsqu'on approche vers l'interface Si-NiDoS/SiO₂, mais dans le cas des films déposés à $T_d = 460^\circ\text{C}$, lorsque la concentration d'azote atteint une valeur limite de $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, on voit bien sur la figure que vers l'interface, l'allure s'est inversée, le profil présente une queue très prononcée qui sera vérifiée par les résultats obtenus dans le chapitre suivant alors que le sommet est plus décalé vers la surface.

De même, que pour la catégorie de films suivants, on remarque dans la figure III.8, le même phénomène de ralentissement du bore par la présence d'azote, plus la

concentration introduite de ce dernier augmente plus le phénomène devient important, mais ce freinage est plus apparent vers l'interface Si-NiDoS/SiO₂ pour les quatre cas d'échantillons.

III.8- Comparaison des résultats obtenus avec la littérature

Dans le polysilicium ($T_d = 460^\circ\text{C}$, 480°C , et 650°C [66]) échantillon non dopé azote, films de référence décrivant la diffusion du bore dans les trois films de silicium polycristallin déposé par LPCVD à différentes température de dépôt :

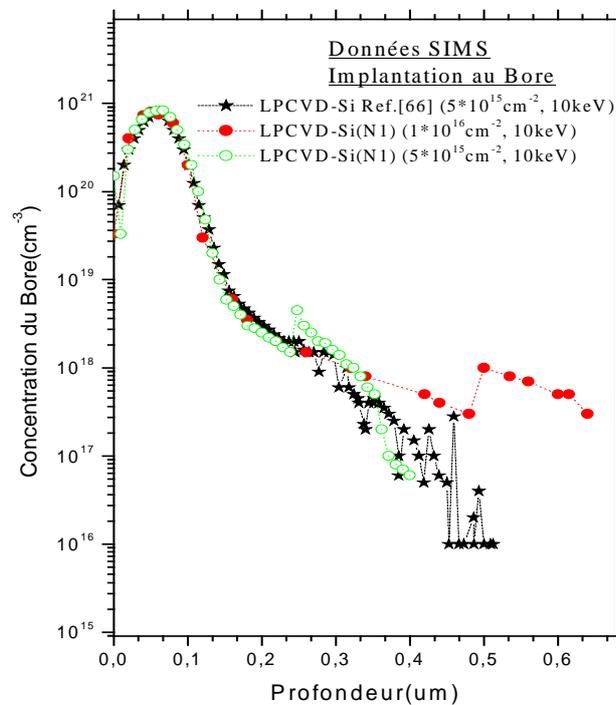


Figure III.9 : Comparaison des profils SIMS obtenus pour l'échantillon N1 déposé à 460°C et 480°C , avec un profil de film déposé à 650°C dans la littérature Réf [66].

Nous avons, considéré notre premier échantillon dans lequel la présence d'azote est pratiquement négligeable (voir figure III.6) un échantillon, pour l'étude comparative avec les trois autres échantillons, tout de même nous avons voulu comparer les profils obtenus dans le premier échantillon dans les deux catégories de films avec un résultat publié, d'un film

obtenu dans les mêmes conditions de dépôt, mais avec une température de dépôt $T_d = 650^\circ\text{C}$ [66], on remarque d'après la superposition des trois profils sur la figure III.9, l'obtention d'une même répartition de dopant bore, jusqu'à une épaisseur évaluée à 240 nm, ensuite des pics assez important deviennent visibles dus à l'approche de l'interface.

III.9- Comparaison de la diffusion du bore dans le silicium polycristallin et dans le silicium monocristallin

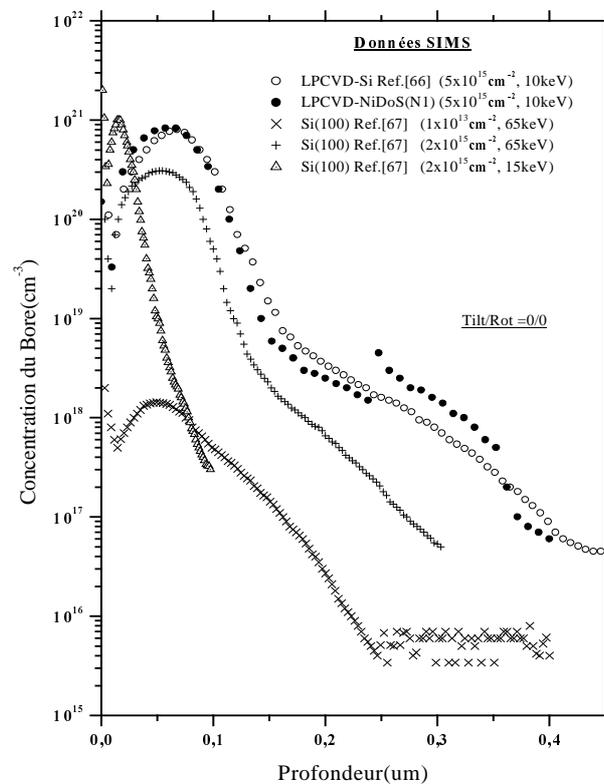


Figure III.10 : Comparaison des profils SIMS obtenus pour l'échantillon N1 déposé à 460°C et 480°C , et un profil de film déposé à 650°C dans la littérature Réf [66], représentant la concentration d'ions bore implanté, avec la diffusion d'ions bore dans des films monocristallins Réf [67].

Ayant parlé, de la canalisation dans la chapitre précédent pour la diffusion du bore dans une structure cristalline, nous avons voulu étudier cette aspect et le comparer avec le cas de notre échantillon de référence, d'après la figure III.10 que la profondeur atteinte par nos films

pour une énergie d'implantation ionique de 10 keV est beaucoup plus importante que celle atteinte dans le cas d'un dopage dans du silicium monocristallin, malgré l'énergie qui varie de 15 keV à 65 keV, la profondeur atteinte reste inférieure à celle dans le silicium polycristallin.

III.10- Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un succinct aperçu de la technique d'analyse expérimentale utilisée pour déterminer les profils de dopage dans les semi-conducteurs, utilisée pour la réalisation de composants électroniques, ensuite on a enchaîné sur la technique de dépôt utilisée dans notre travail pour la réalisation de nos films d'étude, nous sommes aussi penché sur les avantages que présente l'utilisation de la filière disilane par rapport au silane (augmentation de la taille des grains), l'incorporation de l'azote dans ces films, à une température donnée pour le maintenir inactif, diminué la taille des grains, plus on augmente la dose, plus l'effet devient important jusqu'à une valeur de concentration limite.

Deux températures de dépôt furent choisies, pour étudier l'effet de la température sur la taille des grains.

Ensuite, ayant fixé les paramètres de départ, nous avons entamé le dépôt des films selon deux séries, la première représente deux catégories de films déposés à 460°C et 480°C, dopés In-Situ azote pendant la phase de formation des films, dans lesquels on a déterminé les profils expérimentaux de dopage azote, pour une concentration que l'on peut estimer négligeable de l'ordre de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, considérée comme échantillon de référence et les trois autres échantillons avec des valeurs assez importantes, $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, et $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

La deuxième série de films, représentée par les deux catégories de films déposés sous les mêmes conditions de dépôt que les précédents, aux deux valeurs de températures de dépôt précédentes, mais cette fois-ci, une fois subis un pré-recuit de 900°C pendant une durée de 20 minutes de temps, sont implantés au bore avec une même énergie d'accélération 10 keV, pour les films déposés à 460°C, la dose d'ions est de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ et pour les films déposés à 480°C la dose d'ions bore est de l'ordre de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

L'observation des profils expérimentaux obtenus, montre un effet de ralentissement du bore dans les films où la concentration de l'azote est importante, cet effet devient plus accentué quand cette concentration atteint sa valeur limite, c'est-à-dire $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Pour compléter notre étude, nous avons comparé nos résultats expérimentaux obtenus pour le cas du films¹, avec des résultats publiés dans la littérature décrivant la diffusion du bore dans les films de silicium monocristallin, on a remarqué que la profondeur atteinte dans nos films de Si-LPCVD pour une énergie de 10 keV est bien plus grande (de l'ordre de 250 nm), alors que si on prend l'exemple du film de Si (100) Réf. [67], (une concentration de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, avec une énergie de 15 keV) la profondeur atteinte n'est que de 100nm, ceci peut être expliqué par le fait que les deux structures présentent un arrangement cristallin différent.

Chapitre 4

Confrontation des résultats simulés aux résultats expérimentaux

IV.1- Introduction

Afin de parvenir à une meilleure compréhension des mécanismes mis en jeu lors de l'implantation du bore dans les films LPCVD et LPCVD-NiDoS, nous avons confronté les résultats expérimentaux au modèle théorique utilisé basée sur une méthode statistique dite méthode de Monté Carlo. Le code de simulation permet de calculer l'évolution des espèces en fonction de la profondeur, en fonction des paramètres et des structures des échantillons qui sont choisis. Ce code permet d'atteindre des données auxquelles il est difficile d'accéder expérimentalement.

Dans les films considérés, on distingue deux grandes étapes: la diffusion le long des grains et la diffusion le long des joints de grains. Ces étapes modélisées par deux générateurs de nombre aléatoires se succèdent aléatoirement durant la trajectoire des ions bore.

Dans ce chapitre, le programme de simulation Monté-Carlo a été utilisé pour tenter de reproduire les profils de dopage et de codage décrits dans le chapitre III.

IV.2- Simulation Monté-Carlo

La méthode Monté-Carlo permet de modéliser des phénomènes complexes par une approche de type stochastique qui est particulièrement intéressante pour traiter les distributions de particules introduites dans les semi-conducteurs par implantation ionique. Le programme de simulation, utilisé dans ce travail, a été développé au sein du groupe de Recherches dans le Département d'Electronique, Faculté des Sciences de l'Ingénieur de l'Université de Mentouri de Constantine.

Pour traiter efficacement la simulation des profils de dopage de l'implantation ionique, considérée comme une étape incontournable en technologie microélectronique VLSI, par des calculs basés sur la méthode de Monté Carlo, il a fallu attendre jusqu'où les outils de calculs informatiques prennent un essor considérable. Depuis de longues années, le seul handicap qui a limité une utilisation large et diversifiée de telles simulations est directement lié aux

calculateurs. Ce n'est qu'après avoir vu un développement soutenu, ces dernières années, que cette technique a pu atteindre une avancée nette et considérable.

Ainsi, le premier type de simulation conçu pour l'étude de l'implantation ionique a été développé par Biersack et Huggmark [1] en Californie(USA). Ils ont attribué à leur programme le nom de code TRIM (Transport of Ions in Matter). Un peu plus tard, un second simulateur a été réalisé par Marlowe et Robinson [68].

Le programme Marlowe, a été initialement développé au laboratoire national de Oak Ridge en tennessee (USA), puis une nouvelle version beaucoup plus améliorée dite UT-Marlowe fut développée par l'université de Texas à Austin dans le but d'étudier l'implantation du Silicium dans son aspect le plus général. Ce qui différencie le code Marlowe, du code TRIM est le fait, que le premier utilise une évaluation numérique à partir de l'intégrale de dispersion (ou à l'aide de certaines tables préétablies), alors que le deuxième utilise un schéma analytique qui reproduit ces dispersions par l'intermédiaire de processus aléatoire. Et étant donné, l'intérêt de notre travail à vouloir reproduire ces dispersions à caractère aléatoire, nous avons opté pour le second code puisque, parmi ses avantages, à titre d'exemple, son processus aléatoire permet de ne pas distinguer un élément d'un autre, comme le choix des ions énergétiques incidents, et les calculs se font sur n'importe quel ion incident et sur n'importe quelle cible [69].

IV.2.1- Le code TRIM

La première version originale du programme TRIM fut publiée au cours de l'année 1980, pour traiter les ions de transport énergétiques dans une cible amorphe. Ensuite, depuis cette date, diverses améliorations ont été introduites ce qui a mené dans le temps à plusieurs modifications par rapport au programme initial.

En 1985, un large dictionnaire de configurations a été intégré dans les programmes ; L'arrêt des ions, qui était avant, basé sur un mécanisme simplifié est devenu, après, basé sur un formalisme beaucoup plus complet.

A partir de l'année 1990, d'autres versions se sont succédées, apportant chacune un ou plusieurs performances. Parmi les nouvelles notions introduites, à titre d'exemple, la version de l'année 1995, contenant de considérables ajustements, parmi lesquels, on peut facilement remarquer un changement compréhensif dans toutes les puissances d'arrêt ioniques, une nouvelle théorie pour les ions lourds, et une création de fichiers standard Output/Input pour l'enregistrement des calculs résultats.

Une année plus tard, une version très récente dite la version SRIM a été mise sur le marché, dans laquelle la fonction écran est donnée par quatre termes, au lieu de trois termes dans l'ancienne version [70].

En juin 1997, une correction a été introduite sur le libre parcours moyen pour des substrats de surface très minces [71].

Les hypothèses de bases utilisées dans les calculs considérant la cible avec une structure aléatoire, est justifiée par le fait que l'implantation ionique engendre obligatoirement un effet d'amorphisation d'une certaine épaisseur de la couche cible.

Le code TRIM est d'une importance certaine dans le sens où l'efficacité relative de l'ordinateur, qui utilise un schéma qui reproduit les résultats de l'intégrale de diffusion est estimé avec une précision de l'ordre de 2% [72].

IV.2.2- Description du programme TRIM

Le programme Monté-Carlo est rédigé en langage FORTRAN 77 et utilise un seul système d'ordinateur avec une section librairie. La fonction caractéristique définissant la méthode MC est le générateur de nombres aléatoires qui apparait dans notre programme en cinq cas qui représentent les différentes étapes du mécanisme de la diffusion des ions bore dans les films poly cristallin décrites dans le chapitre III, et permet de fournir des nombres aléatoires uniformément réparties entre 0 et 1.

IV.2.2.1- Les principaux éléments du programme

Nous pouvons à l'aide du programme contrôler 16 paramètres, l'ion incident est défini par le nombre atomique Z_1 , et la masse atomique A_1 , A_2 et Z_2 sont respectivement le nombre et la masse atomique de l'atome cible, ρ et z sont la densité et l'épaisseur de la cible, $c_k = k/k_l$, représente le facteur de correction pour la puissance d'arrêt électronique à basse énergie ; E_i , E_d , E_f sont l'énergie l'ion incident, l'énergie de déplacement de l'atome cible et l'énergie finale respectivement ; X_0 et Alpha, sont la position et l'angle initiaux de l'ion cible par rapport à la normale ; L_0 est le libre parcours moyen initial entre collisions ; c_w , est la distribution de profondeur représentant l'épaisseur de sortie ; R_l , est l'initialisation du générateur de nombre aléatoire ; et N_{max} le nombre d'histoire d'ions à étudier.

L'énergie de déplacement E_d est l'énergie nécessaire pour la création d'une paire de Frenkel (une valeur typique pour les métaux peut être 25 eV). Le facteur de correction pour l'arrêt électronique c_k est un moyen de corriger les déviations à partir de la puissance d'arrêt de Lindard-Scharff (valeur typique entre 2 et 1). Pour l'énergie finale E_f , souvent des valeurs de 5 ou 10 eV sont choisies suivant le choix de l'énergie initiale E_0 et de l'épaisseur du canal c_w . Le point de départ X_0 et la direction initiale Alpha sont utilisés avec des valeurs différentes de zéro dans les cas suivants : incidence non normale de l'ion, simulation des reculs nucléaires créées dans la matière ou, par exemple, le cas permettant d'obtenir le profil transversal de la distribution de la particule avec le présent code unidimensionnel.

L_0 est utilisée comme le libre parcours moyen pour les premières collisions seulement si les corrections sont introduites selon les conditions suivantes :

- Dans le programme, une correction est faite chaque fois où L_0 dépasse la valeur L , et un second test est exécuté pour s'assurer que la perte électronique par libre parcours moyen ne peut excéder 5% de l'énergie de l'ion, et finalement le programme vérifie que le libre parcours moyen ne peut être moins que la distance moyenne entre les atomes cible. Si une de ces conditions n'est pas vérifiée, le code va automatiquement réinitialiser L_0 près de la valeur admissible.

- Si on est intéressé par des calculs très rapides, on utilise pour initiale de L_0 un nombre élevé arbitraire et on laisse le code réajuster ce nombre au maximum acceptable du libre parcours moyen. Par contre, si on est intéressé par le cas des énergies basses la distance entre les collisions toujours égale à la distance interatomique, ceci est assuré en mettant $L_0 = I$, une valeur qui augmente par le code à la valeur de L_M .

La réinitialisation du nombre aléatoire R_I est utilisée pour déterminer si quelqu'un veut répéter la même séquence de nombres aléatoires ou non dans les événements ultérieurs du même cas. Le nombre d'histoires sera toujours choisi de l'ordre de 1000 ou plus pour obtenir des résultats satisfaisants.

En sortie, le programme donne premièrement les valeurs des variables d'entrées (avec la possibilité où L_0 peut être corrigé par le programme). Les deux lignes suivantes donnent quelques informations relevant du choix du libre parcours moyen tels que : le maximum de perte électronique par libre parcours moyen. Ensuite, quelques constantes sont imprimées comme : L_M , la distance moyenne entre les atomes cibles ; Epsilon, l'énergie initiale réduite sans dimension ; a la longueur écran de Thomas- Fermi-Firsov ; K , la puissance d'arrêt à basses énergies ; E_0 l'énergie moyenne d'ionisation utilisée dans la formule de Beth. On trouve aussi, le nombre et l'énergie des particules rétrodiffusées et le nombre et l'énergie des particules transmises, ainsi que les données concernant ceux arrêtés dans la cible.

IV.2.2.2- Fonctionnement du programme

La résolution d'un problème consiste généralement à établir un algorithme, qui permet la détermination de la solution exacte ou approchée d'une fonction, dans certains cas de problèmes où les phénomènes sont purement aléatoires, on est amené à utiliser des techniques et méthodes statistiques faisant appel aux nombres aléatoires.

Le code TRIM a été largement utilisé pendant ces dernières années pour calculer les distributions des particules dans les cibles complexes [73, 74]. Les basses de calculs ont été

établies à la fois, sur des méthodes semi-empiriques et des modèles physiques.

Les méthodes physiques sont typiquement basées sur l'approximation de collisions binaires (Binary Collision Approximation (BCA)). Ces simulations dépendent du calcul classique de l'intégrale de dispersion de deux particules, l'un en mouvement et l'autre stationnaire sous l'effet d'un potentiel d'interaction de type coulombien. Les atomes sont ensuite lancés en mouvement en accord avec la cinématique des collisions, développant une cascade d'interactions avec les atomes du système, mais seulement si leur énergie dépasse la valeur seuil estimée à 15 eV pour le Silicium.

Les effets d'implantation sont traités sous formes de deux aspects totalement indépendants l'un de l'autre, collision élastique (ion incident- ion cible) et inélastique (ion incident-gaz électronique de l'atome cible) ; Ces deux effets contribuent simultanément au processus de ralentissement.

L'utilisation de générateurs de nombre aléatoire dans les calculs est destiné à décrire et suivre un large nombre d'histoires individuelles d'ions ou de particules dans la cible [74, 75]. Chaque histoire commence avec une énergie, une position, et une direction donnée. La particule subit un changement successif de direction résultat de collisions nucléaires et se déplace en trajectoire droite et libre entre les collisions. L'énergie sera considérée comme déterminée si l'énergie tombe plus bas qu'une certaine valeur E_{min} ou si la position de la particule est en dehors de la cible [74, 75].

Cette méthode est applicable à un grand intervalle d'énergies incidentes comprises entre 0,1 eV et plusieurs MeV, dépendant des masses impliquées. Les pertes d'énergies électroniques et nucléaires ou puissance d'arrêt sont supposés être totalement indépendantes [74, 75] ; Ainsi, les particules perdent l'énergie avec des quantités discrètes dans les collisions nucléaires est continuellement lors des interactions élastiques.

A basses énergies, où la diffusion nucléaires et la perte d'énergie sont particulièrement importantes, le programme utilise une formule analytique basée sur le potentiel de Molière, et

la perte d'énergie est basée sur le traitement dépendant de la vitesse de Lindhard et Scharff [75, 76]. Par contre, à haute énergie, le potentiel coulombien a été trouvé suffisant pour cette diffusion, et la perte d'énergie électronique est traitée par la formule de Beth-Block.

IV.2.2.3- L'organigramme du programme

Pour simuler les profils de dopage dans les films de Silicium LPCVD et LPCVD-NiDoS, la méthode consiste à :

- Premièrement, déterminer les trajectoires des particules à l'intérieur de la cible, en se basant sur les équations régissant les phénomènes physiques dans un matériau soumis à une implantation ionique, et l'interaction ion-structure polycristalline,
- Deuxièmement, à partir des résultats obtenus dans la première partie, on reconstitue les profils de dopage.

La distribution en fonction de la profondeur est donnée à travers les premiers quatre moments (profondeur moyenne projetée R_p , déviation standard δR_p , le skewness γ et le Kurtosis β), le nombre moyen de collisions nécessaire pour arriver à l'arrêt total à partir de l'énergie initiale E_i et jusqu'à l'énergie finale E_f . Ces moyennes concernent seulement les particules qui s'arrêtent dans la cible, et elles deviennent égales à zéro, si toutes les particules sont réfléchies et/ou transmises.

Les trajectoires ioniques du dopant bore, dans le Silicium polycristallin présente un caractère typiquement aléatoire, chaque trajectoire est décomposée en un grand nombre de séquence élémentaires. Pour cela, nous allons nous intéresser à la description détaillée de la séquence de base qu'on peut choisir de façon aussi aléatoire, et ensuite généraliser la technique sur l'ensemble des autres séquences qui se répètent aussi nombreuses qu'il soit possible.

IV.2.2.4- Paramètres de la simulation

Dans les fichiers d'entrée du programme, on introduit les paramètres de départ, qui concernent le type de cible utilisé (Silicium LPCVD ou Silicium LPCVD-NiDoS), et le type d'atome constituant le faisceau incident (atome de Bore), par leurs paramètres physiques :

- La masse atomique : A_1, A_2, A_3 ($A_1 = 10$, pour le Bore, $A_2 = 28$ pour le Silicium et $A_3=14$ pour l'atome d'azote), et on définit une quatrième masse atomique fictive $A_4 = A_3 \times R_6$, qui désigne le joint de grain comme un atome virtuel et R_6 est un nombre aléatoire ayant pour valeur logique zéro et 1, lorsque $A_4 = 0$, sachant que $A_2 = 2 \times A_3$, la cible est similaire à une structure classique de Silicium cristallin dopé et azote ; Par contre, si $A_4 = A_3$, on a simultanément deux phénomènes opposés qui ont lieu, présence de l'azote et les joints de grains,
- Le numéro atomique Z_1, Z_2, Z_3 ($Z_1 = 10$ pour le Bore, $Z_2 = 14$ pour le Silicium et $Z_3 = 7$ pour l'azote),
- L'épaisseur de la couche : $zz = 250 \text{ nm}$,
- L'énergie d'implantation ionique des ions incidents $E_i = 10 \text{ keV}$,
- La densité volumique de la cible ρ

On définit l'état initial de chaque atome du faisceau incident suivant un système de coordonnées qui comporte trois axes (x, y, z) :

La première étape nécessite le calcul du libre parcours moyen L , les angles de diffusion φ et α après chaque collision. Pour réaliser ceci, on a besoin de trois nombres aléatoires R_1, R_2 et R_3 , tirés au hasard par un générateur de nombres pseudo-aléatoires, tel que :

$$L = \lambda_{tot} \ln R_1 \dots \dots \dots (V.1)$$

Où, λ_{tot} - désigne le libre parcours moyen entre deux collisions, R_1 , un nombre aléatoire uniformément répartie entre 0 et 1.

Ensuite, un second générateur de nombre aléatoire R_2 est nécessaire pour déterminer le paramètre d'impact, ayant pour formule :

$$P = \left[-\ln\left(\frac{R_2}{\pi NL}\right) \right]^{1/2} \dots\dots\dots(V.2)$$

Où, N est la densité atomique de la cible, et L le libre parcours moyen.

Le troisième générateur de nombre aléatoires, uniformément répartie entre 0 et 1, donne l'angle φ suivant la formule suivante :

$$\varphi = 2\pi R_3 \dots\dots\dots(V.3)$$

En pénétrant dans le solide, l'ion Bore va être dévier de sa trajectoire initiale et perd une partie de son énergie, durant son parcours il peut entrer en collision avec les atomes de la cible, dans le cas du Silicium LPCVD il va y avoir lieu soit d'une collision élastique, donc perte d'énergie sans pour autant changement de direction de sa trajectoire, soit interaction inélastique et dans ce cas une discrète perte d'énergie et changement de direction de la trajectoire ionique, ou avec les joints de grains qu'on a assimilés à des atomes virtuels en estimant qu'il n'y aura pas de perte d'énergie, dans ce cas un quatrième nombre aléatoire est nécessaire pour déterminer la nature de la collision qu'on désigne par R_4 , ayant deux états logiques 0 et 1, zéro définit une collision avec le joint de grain et 1 une collision avec l'atome cible.

Un cinquième nombre aléatoire R_5 , est utilisé dans notre programme qui sert à différencier, dans le cas de l'implantation d'ions bore dans les films LPCVD- NiDoS, les collisions de l'ion incident avec soit l'atome de l'azote ou celui de la cible, ayant pour valeurs logiques 0 et 1, le zéro désigne une collision avec l'atome azote et le 1 désigne une collision avec l'atome Silicium.

L'organigramme, décrivant les différentes étapes citées ci-dessus de notre programme de calcul est présenté sur la figure V.1, on considère que une trajectoire est terminée quand l'ion perd la plus grande partie de son énergie cinétique (la valeur limite doit être égale ou inférieure à 15 eV), qui est l'énergie nécessaire pour une liaison **Si-Si**.

A la fin de ces différentes étapes, un fichier nous donne l'évolution des paramètres de

toutes les particules ioniques en fonction de la profondeur, les distributions individuelles listées selon le canal de la profondeur obtenu : la première colonne donne les intervalles du pas de la profondeur, la suivante donne la portée projetée R_p , la perte d'énergie électronique, la perte d'énergie nucléaire au dessous de E_d et finalement l'énergie perdue au-dessus de E_d (responsable du dommage), tous sont en fonction de la profondeur [77] ; En connaissant, les histoires de toutes les particules ioniques, nous pouvons alors reconstituer le profil de dopage de chaque implantation ionique.

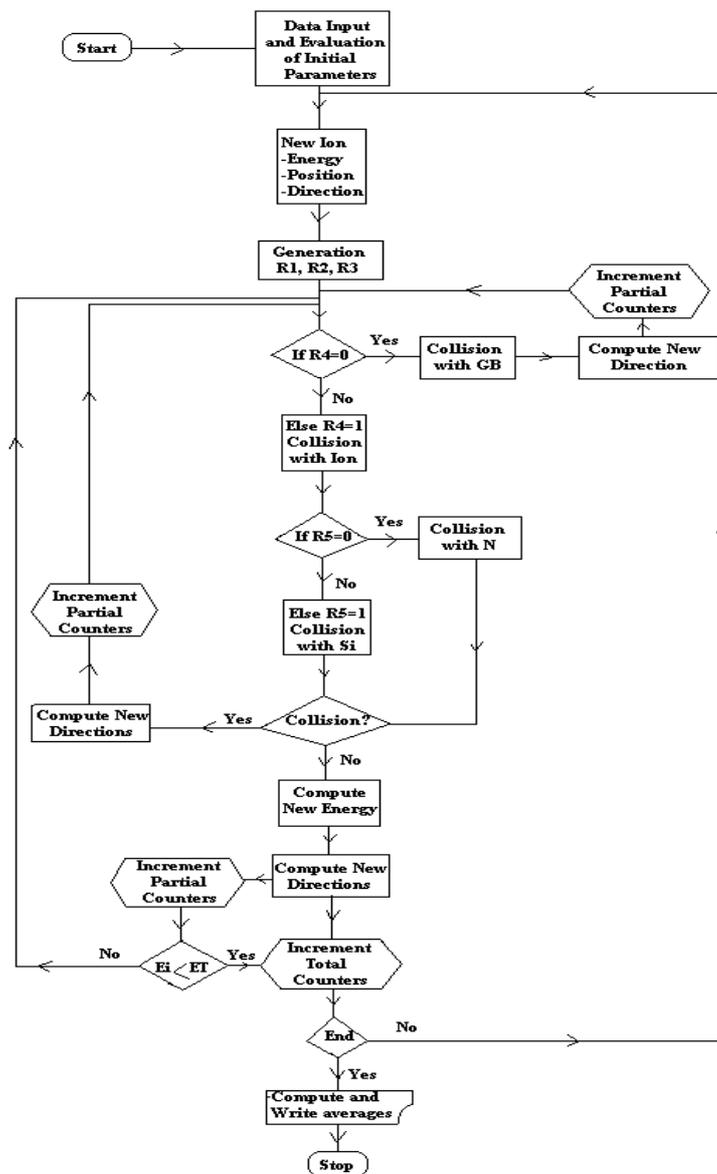


Figure IV.1: Organigramme du programme de Simulation

IV.2.2.5- Validation de la simulation

Après avoir installé et mis en marche le programme, il nous restait à vérifier la bonne marche et la validation des résultats qu'on a été entreint d'obtenir, alors avant de commencer le tracé des profils, on a comparé un résultat test avec un autre publié dans la littérature, la figure la Figure IV.2(a), permet de comparer les résultats d'un exemple de simulation obtenus test à partir de notre programme avec des résultats similaires, donnés par S. M. Sze (Figure IV.2 (b)) et publié dans la littérature [78], les résultats sont en très bon accord, on a utilisé les mêmes paramètres d'entrées pour pouvoir réaliser la comparaison (trajectoires simulées de 100 ions bore implantés dans le Silicium à 10 eV) ;

Ceci permet de confirmer la bonne mise en marche correcte de notre programme informatique réalisé au sein de notre équipe de recherche.

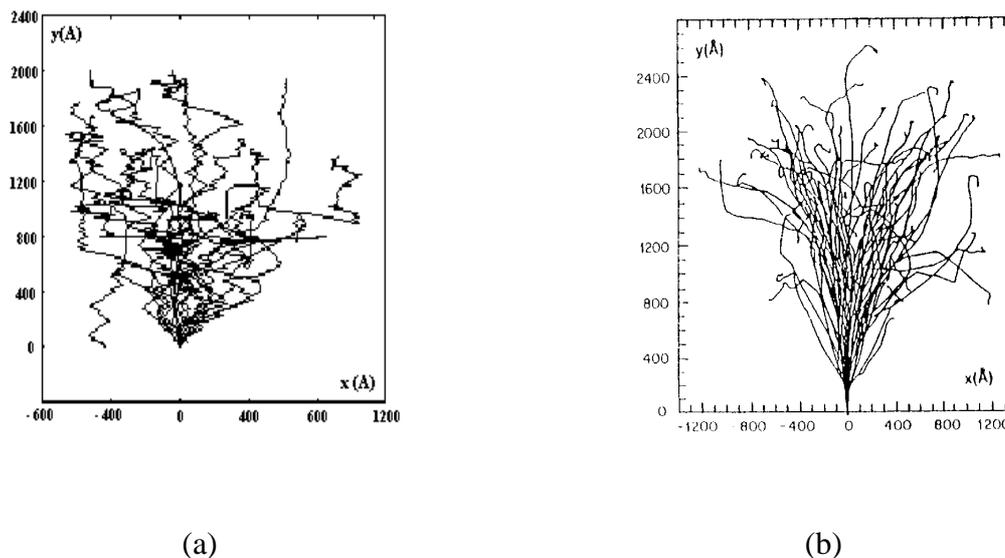


Figure IV.2: Comparaison de résultats test obtenus à partir de notre programme (a) (le nombre d'ions Bore $n = 100$, Energie initiale est $E = 10 \text{ keV}$, avec une direction incidente normale d'angle $\text{Alpha } \alpha = 90^\circ$), et ceux publiés dans la littérature (b) Réf. [78].

Ensuite, la confirmation de bonne marche obtenue du programme, on a entamé la reconstitution de profils de dopage avec de faibles valeurs (à cause de la puissance limitée de la machine utilisée, vu le temps de consommation d'exécution), pour 1000 ions de différents dopants tel que le bore dans le silicium, dépourvu d'azote et dopé azote, nous donnons sur la

figure IV.3 , un exemple parmi les résultats obtenus qui ont fait l'objet de communication internationale et publication dans un journal international [79, 80].

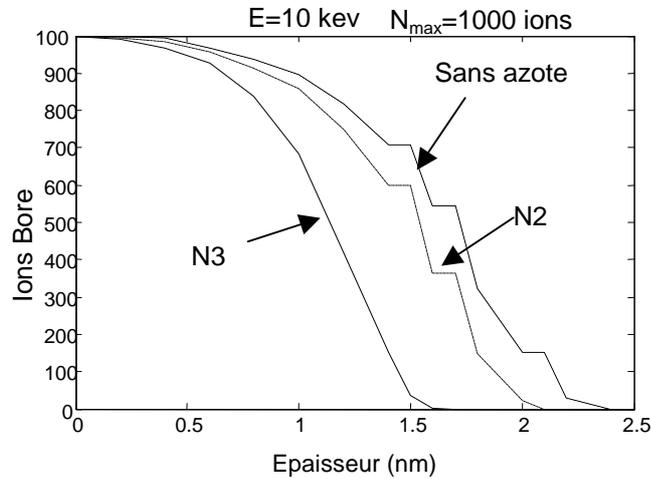


Figure IV.3 : Superposition des profils d'ions Bore pour les trois cas d'échantillons : Sans azote, $N_2=1.49 \times 10^{21} \text{ at/cm}^3$, et $N_3=1 \times 10^{22} \text{ at/cm}^3$

Bien entendu, les valeurs sont bien loin de celles utilisées habituellement pour le dopage, c'est pour cette raison qu'une fois la validation du programme obtenue, le travail fût poursuivi à l'étranger, sur une station Sun Ultra SPARC-II, pour de fortes doses d'implantation telles que, les deux doses utilisées dans les résultats expérimentaux pour pouvoir confronter ces résultats aux résultats simulés, on précise aussi que l'ensemble de ces résultats ont fait l'objet de publication dans un journal international [81]; Dans ce qui suit, nous allons donner les divers résultats obtenus par la simulation ainsi que leur comparaison avec les résultats expérimentaux.

IV.3- Résultats des simulations

L'ensemble des résultats montrent que la méthode de Monté-Carlo est bien adaptée à la simulation des trajectoires ioniques en permettant de reconstituer le profil de dopage associé, tout en donnant accès à des paramètres décisifs sur le profil d'implantation d'ions dans un matériau microélectronique ;

Généralement, on désigne par ces paramètres les quatre moments décrivant un profil cités précédemment.

IV.3.1- Effets de la concentration d'azote sur le bore

D'après les observations faites dans le chapitre précédent, on a vu que, lorsque la concentration d'azote augmentait dans les films déposés dans les mêmes conditions de dépôt, dans les deux cas de catégories de films, la pénétration du bore en profondeur tendait à diminuer, et le maximum de répartition de dopants se faisait près de la surface, ceci peut être expliqué par le fait, que le matériau à la base du Si-LPCVD, une fois l'azote introduit, il devient plus dense, plus la présence de ce dernier devient considérable, plus l'obstacle au passage des particules bore augmente, donc l'objectif de l'introduction de l'élément de l'azote dans les films s'estime atteint, puisque le bore a tendance à diffuser rapidement dans le silicium, en atteignant le SiO₂, c'est donc un moyen très efficace pour empêcher la dégradation de la qualité électrique d'une grille MOS.

IV.3.2- Comparaison avec les résultats expérimentaux

IV.3.2.1- Profils dans les films déposés à $T_d = 460^\circ\text{C}$

Notons bien que l'objectif de notre travail, est la reproduction des profils de dopage par un moyen de simulation numérique ne nécessitant que très peu de coût, dont l'intérêt est purement économique, préservant ainsi la détérioration des échantillons.

Les résultats obtenus par simulation, sont superposés aux résultats expérimentaux tel que illustré dans les paragraphes exposés ci-dessous.

Sur la figure IV.4, sont représentés les profils simulés dans le cas des profils déposés à $T_d = 460^\circ\text{C}$.

Dans le programme, cette température est traduite par un taux de présence en densité accrue de joint de grains.

Un accord très satisfaisant est observable pour des quatre profils.

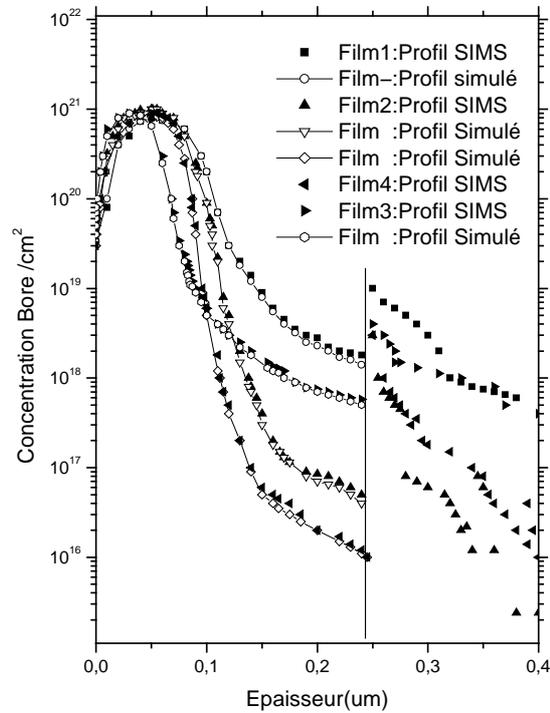


Figure IV.4: Superposition des profils Simulés aux profils expérimentaux des quatre échantillons déposés à 460°C

IV.3.2.2- Profils dans les films déposés à $T_d = 480^\circ\text{C}$

De même, que la figure précédente, les profils simulés dans le cas des films déposés à $T_d = 480^\circ\text{C}$, sont comparés aux profils expérimentaux. On a introduit, dans ce cas-là, un taux de densité de joint de grains plus élevé que ceux des cas précédents.

Dans le programme, d'après les constantats présentés dans le chapitre III, on retrouve encore une fois de plus, qu'un très bon accord est observable sur l'allure des quatre profils obtenus.

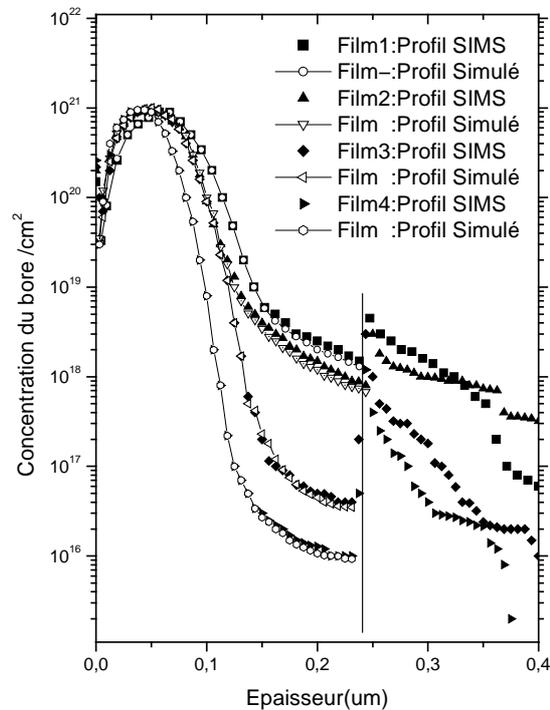


Figure IV.5: Superposition des profils Simulés aux profils expérimentaux des quatre échantillons déposés à 480°C

IV.3.2.3- Superposition des profils 460°C/480°C

A) Echantillon N_1

Après avoir obtenu une bonne adaptation entre les profils simulés et expérimentaux, on s'est intéressé à l'effet de variation de deux paramètres sur l'allure des profils de dopage dans le cas de chaque échantillon de profil.

Sur la figure IV.6, on superpose les trois courbes simulées et expérimental aux, on remarque, qu'il n'y a pratiquement aucune différence à part un léger décalage pour le profil de l'échantillon déposé à 460°C, rappelons que cet échantillon est estimé pratiquement dépourvu

d'azote, donc seule la température, affecte le profil, ce léger décalage qui ne peut être dû qu'à la différence de la taille des grains dans les deux films, et aussi à la quantité de joint de grains présents.

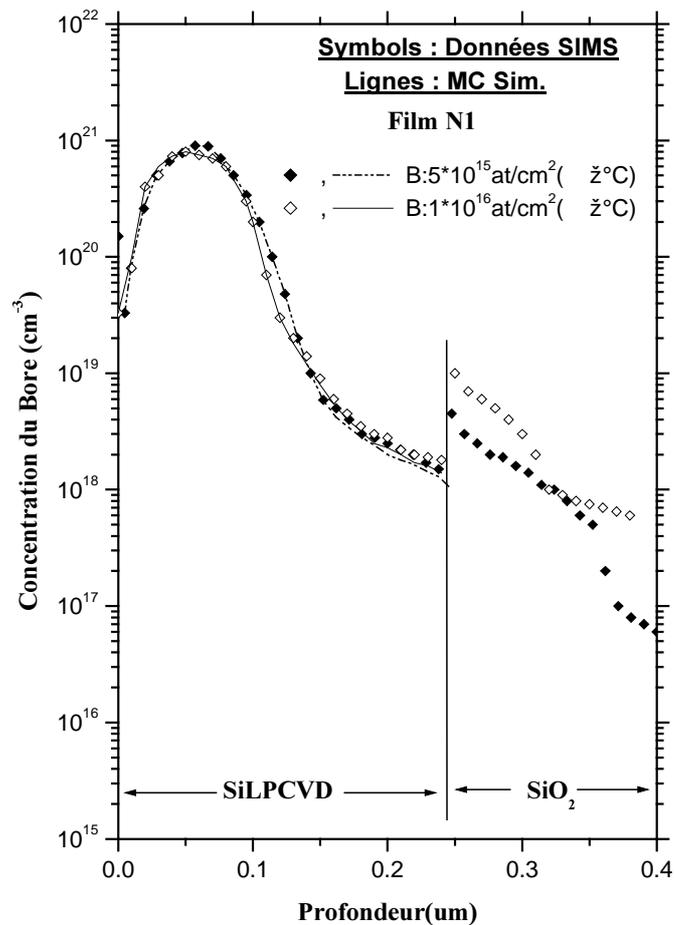


Figure IV.6: Comparaison entre le résultat de profil expérimental (cas du film N₁) déposé à 480°C dopé avec une dose $D = 5 \times 10^{15}$ cm⁻², et celui déposé à 460°C dopé avec une dose $D = 1 \times 10^{16}$ cm⁻² avec une énergie $E = 10$ keV.

B) Echantillon N_2

Maintenant, en plus de l'influence de la température de dépôt, un deuxième facteur joue un rôle très important dans la différence de diffusion du bore dans les deux films, effectivement la présence d'azote dans le film déposé à 460°C , là où il y a moins de joint de grains, augmente les collisions dans le matériau avec les particules bore, ce qui induit un arrêt bien précoce que dans le film déposé à 480°C (110nm par rapport à 135nm, une différence de 25nm).

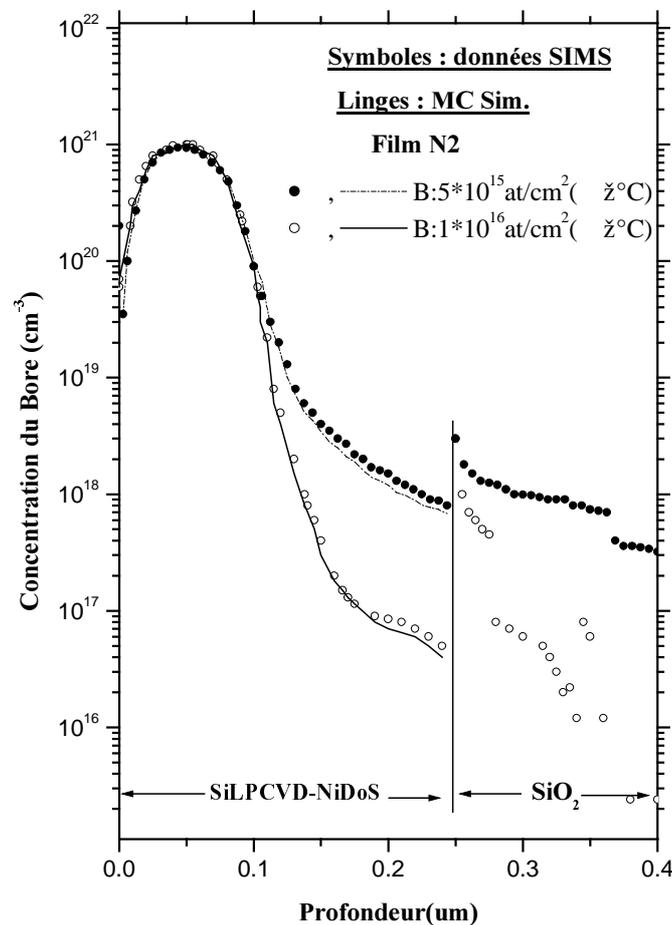


Figure IV.7: Comparaison entre le résultat de profil expérimental (cas du film N_2) déposé à 480°C dopé avec une dose $D = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, et celui déposé à 460°C dopé avec une dose $D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ avec une énergie $E = 10 \text{ keV}$.

C) Echantillon N_3

Avec l'augmentation de la concentration d'azote de $1 \times 10^{20}/\text{cm}^3$ à $1 \times 10^{21}/\text{cm}^3$, sur de la figure IV.7, l'effet observé est plus accentué, on a une augmentation (ayant mentionné ceci dans le chapitre III) de la taille des grains due à l'augmentation de la concentration d'azote dans le film le rendant plus dense, donc plus de collisions avec les ions incidents, le profil obtenu est moins profond (100nm par rapport à 130nm, une différence de 30nm).

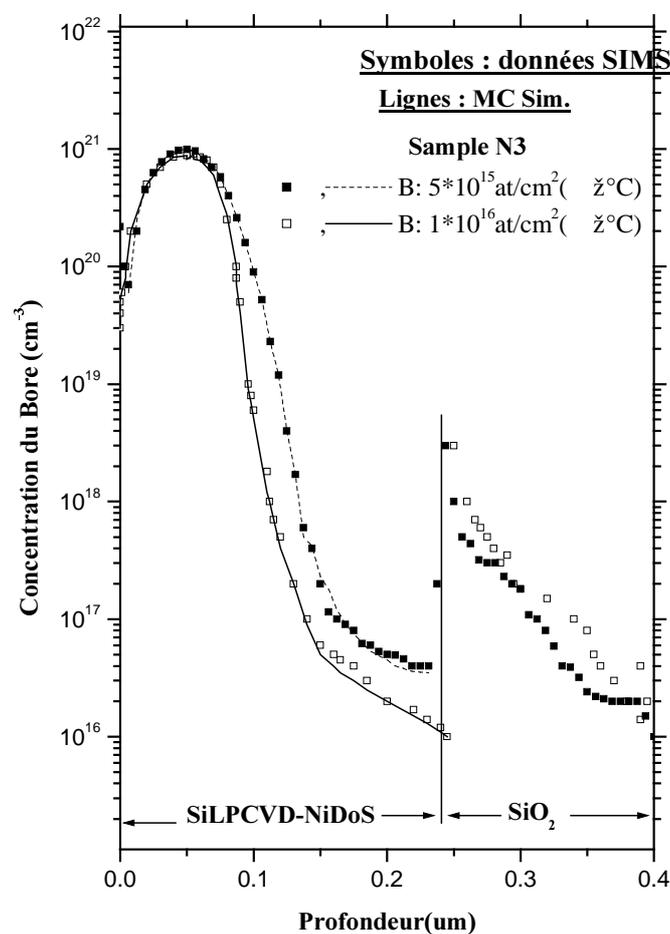


Figure V.8: Comparaison entre le résultat de profil expérimental (cas du film N_3) déposé à 480°C dopé avec une dose $D = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, et celui déposé à 460°C dopé avec une dose $D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ avec une énergie $E = 10 \text{ keV}$.

D) Echantillon N_4

Dans le cas de la figure IV.9, un effet inverse est observé du côté de l'interface, par contre côté surface le même effet de ralentissement et de décalage des deux profils est remarqué (on a que 80nm par rapport à 120nm, une différence de 40nm), pour expliquer l'inversion du phénomène, on pourrait interpréter ceci par le fait que, si on augmente la concentration de l'azote jusqu'à une valeur limite, l'effet de ce dernier sur l'augmentation de la taille des grains devient négligeable, donc il y a une valeur au-delà de laquelle l'enjeu de cet effet n'est plus exploitable, donc d'autres théories doivent être introduites pour expliquer le phénomène, un résultat qui nous ouvre de nouvelles perspectives de recherches pour mieux comprendre le phénomène.

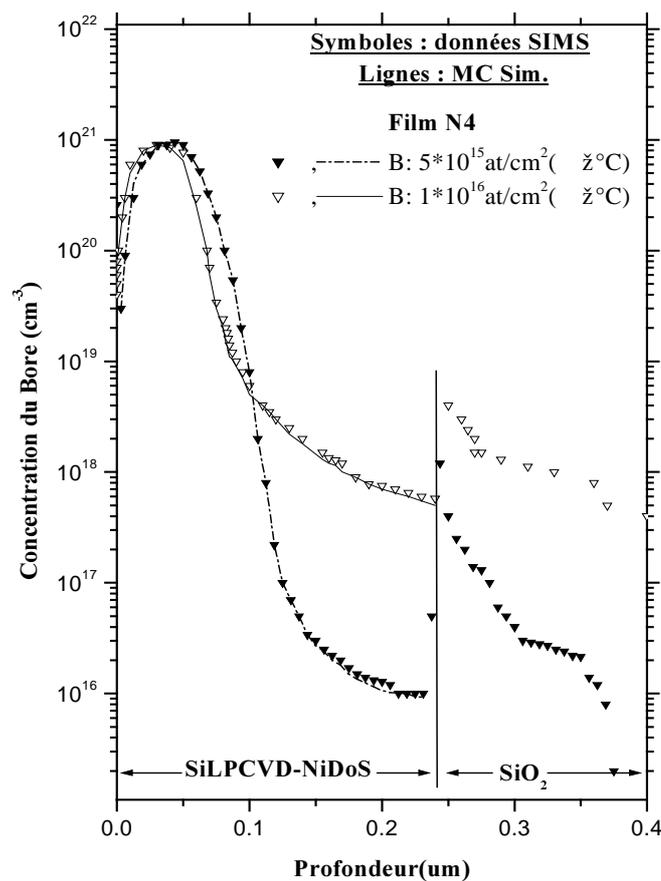


Figure IV.7: Comparaison entre le résultat de profil expérimental (cas du film N_4) déposé à 480°C dopé avec une dose $D = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, et celui déposé à 460°C dopé avec une dose $D = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ avec une énergie $E = 10 \text{ keV}$.

IV.3.2.4- Etude comparative de la diffusion d'ions bore dans le Silicium monocristallin et Silicium Polycristallin

Comme présenté dans le chapitre III, nous avons comparés les deux profils simulés dans l'échantillon de référence, à un résultat publié dans la littérature donnant le profil de diffusion du bore dans le silicium monocristallin donné sur la figure IV.10, le profil expérimental est simulé par le code de simulation MARLOWE, le mieux adapté pour la simulation des profils de dopage dans les semiconducteurs à structure cristalline. On observe un très bon accord entre les résultats expérimentaux et simulés, néanmoins une différence remarquable pour la profondeur de pénétration des dopants bore dans les films polycristallin estimée à 250 nm, alors qu'elle est de 125 nm dans le silicium cristallin, malgré la valeur de l'énergie d'accélération utilisée qui est plus élevée (de 15 keV) que celle dans le Si-LPCVD(10 keV).

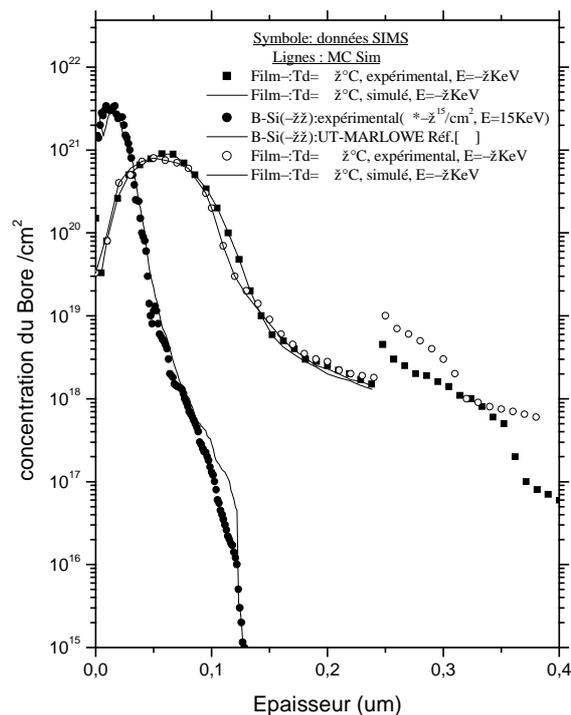


Figure IV.10: Superposition des profils Simulés aux profils expérimentaux dans le cas de l'échantillon N_1 déposés à 460°C et 480°C, pour une concentration d'azote de $1 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ comparés au résultat publié Réf [82], profil expérimental d'ions Bore implantés dans du Silicium monocristallin et simulé par le code UT-Marlowe.

IV.3.2.5- Paramètres caractérisant les profils

A partir de l'ensemble des profils simulés qu'on vient de présenté, on a pus déterminer les paramètres caractéristiques appelés : les quatre moments de la fonction de distribution des ions introduits dans le matériau, un tableau récapitulatif de tous les résultats sera donné dans ce qui suit, comparés à des résultats publiés dans la littérature.

Les valeurs des quatre moments données dans le tableau IV.1, vérifient et confirment les observations constatés sur les films. En effet, pour le parcours moyen, la déviation standard, lorsque la concentration d'azote varie, ces valeurs varient aussi et tendent à diminuer inversement proportionnels, pour le troisième moment et le quatrième moment les valeurs obtenus sont très proches de celles données par la littérature, elle varient autour du zéro et 3, valeurs très connues en théorie données dans la littérature, ce qui confirme la validation de notre méthode de simulation basé sur les méthode de Monté Carlo, pour décrire les profils d'implantation ionique.

Films	Dose (cm ⁻²)	Energie (KeV)		Rp (nm)	δRp (nm)	Skewness γ	Kurtosis β
B-LPCVD-Si	5 x 10 ¹⁵	10	Réf.[66]	68	80	- 0.02	2.5
B-(LPCVD- NiDoS	5 x 10 ¹⁵	10	N ₁	67	81	- 0.05	4.0
			N ₂	57	71	- 0.03	3.0
			N ₃	44	71	+ 0.02	3.5
			N ₄	41	51	+ 0.04	3.0
B-(LPCVD- NiDoS	1 x 10 ¹⁶	10	N ₁	66	75	- 0.04	3.0
			N ₂	53	65.5	- 0.03	3.0
			N ₃	38	55	-0.05	3.0
			N ₄	33	48	+ 0.01	3.0
B-Si(100)	8 x 10 ¹⁵	15	Réf.[82]	15.4	12.1	-0.06	3.0
	2 x 10 ¹⁵	15	Réf.[67]	14.9	12.0	-0.06	3.0
	2 x 10 ¹⁵	65	Réf.[67]	53	69	-0.06	3.0
	1 x 10 ¹⁵	65	Réf.[67]	49	60	-0.06	3.0

Tableau IV.1 : Les valeurs des quatre moments de nos résultats comparés à ceux publiées dans la littérature

VI.4- Conclusion

Tout le long de ce chapitre, nous avons commencé par décrire les différents étapes du programme de simulation réalisé au sein de notre équipe de recherche, basé sur le code de simulation Monté Carlo, ensuite une fois le programme installé, nous l'avons exécuté, et des résultats test ont été effectués qu'on a comparé à d'autres résultats publiés pour confirmer la bonne marche du programme, puis à partir de l'étude de la répartition de quelques centaines de particules réalisables par la machine en notre possession, on a reconstitué le profil de leur trajectoire dans le silicium.

Pour simuler les profils expérimentaux obtenus dans nos films réalisés pour les deux séries d'échantillons, nous avons été obligés d'utiliser une machine beaucoup plus puissante, à cause du temps de consommation du programme lors de l'augmentation du nombre de particules à traiter, les résultats simulés obtenus dans les différents films sont très satisfaisants, on en déduit que l'utilisation d'un moyen numérique pour reconstituer les profils de dopage ouvre des perspectives très prometteuses dans le domaine de la microélectronique et le monde industriel, afin d'éviter le rejet des échantillons après détérioration une fois la caractérisation expérimentale effectuée (SIMS).

- ✓ Parmi les points importants constatés dans les résultats de ce chapitre, le freinage du bore par l'azote, devient plus important lorsque ce dernier augmente en concentration,
- ✓ La température de dépôt joue un rôle important dans la détermination de la taille des grains par suite, la densité de joints de grains présent dans le matériau, mais on remarque que son influence reste négligeable (cas de l'échantillon du film1), en absence d'azote,
- ✓ En présence d'azote, avec la variation de la température de dépôt, un autre effet a été constaté, le ralentissement du bore est plus important dans les films déposés à 460°C que dans les films déposés à 480°C, mais cet effet tend à s'inverser lorsque la concentration de l'azote atteint une valeur limite estimée à $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, d'après les résultats obtenus.

Cette dernière constatation, nous ouvre une nouvelle perspective de recherche, afin de confirmer l'exactitude du phénomène en réalisant d'autres dépôts à divers températures de dépôt, et différentes valeurs de concentration d'azote.

Pour clôturer notre étude, nous avons terminé par un tableau récapitulatif, dans lequel on a rassemblé tous les résultats de la simulation de tous les profils expérimentaux étudiés, on comparant les valeurs obtenues aux valeurs publiés dans la littérature, dans les deux cas de dopage au bore: dans des films de Si-LPCVD et dans des films de Si (100).

Conclusion générale

Nous nous sommes consacré tout le long de ce travail à l'étude de la résolution en profondeur de profils de dopage avant recuit thermique par une méthode numérique de simulation dite "Monté Carlo", dans des films minces de silicium dopés azote appelés aussi "NiDoS" (Nitrogen Doped Silicon), obtenus par LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition), à basse température (460°C et 480°C) ensuite implantés au Bore, nous nous sommes également intéressé aux paramètres caractérisant les profils, appelés "moments".

Nous avons dans un premier temps, effectué une revue aussi complète que possible des principes de base du moyen théorique utilisé, basé sur les méthodes de Monté Carlo, on a vu que cette dernière permettait de contourner des problèmes non linéaires et attribuait un niveau de confiance à une incertitude satisfaisant, son principal caractère est la génération de nombres aléatoires sur lesquels est fondé le calcul suivant une distribution uniforme donnée.

Par suite, nous avons présenté le mécanisme de dopage utilisé pour implanter les ions bore dans les films réalisés, un succinct exposé fut donné sur l'intérêt que présente l'implantation ionique dans le domaine de la microélectronique, les principales théories du ralentissement des particules incidentes introduites dans le matériau cible, ainsi que leurs applications dans le domaine de la simulation ont été aussi étudiés. Ces théories modélisent les deux processus de pertes d'énergies (nucléaire et électronique), et tentent d'en déduire le profil de distribution des impuretés en volume dans le matériau, deux catégories sont distinguées, selon que le matériau dopé est amorphe ou bien cristallin ;

Nous avons étudié ensuite les principales fonctions de distribution donnée par les théories classiques, décrivant la répartition des particules implantés à l'intérieur du matériau cible, on a noté que le contrôle de la position moyenne (R_p), et de l'écart type (δR_p ou σ_p) est possible avec une distribution Gaussienne, présentant une asymétrie nulle, mais une fonction de distribution de type Pearson IV, calibrée par quatre paramètres appelés les quatre moments de la distribution ($R_p, \delta R_p, \gamma, \beta$), utilisée de plus en plus en microélectronique pour la description des profils d'implantation ionique de dopants, présente une allure similaire à

celle du profil expérimental en fonction de chacun de ces quatre paramètres, et est une généralisation des distributions gaussiennes et autorise entre autre le contrôle de leur position moyenne, de leur écart type et de leur asymétrie.

On a présenté un brève résumé sur la technique d'analyse expérimentale utilisée pour déterminer les profils de dopage dans les semi conducteurs, ensuite on a enchaîné sur la technique de dépôt utilisée dans notre travail pour la réalisation de nos films d'étude, nous nous somme aussi penché sur les avantages que présente l'utilisation de la filière disilane par rapport au silane (augmentation de la taille des grains), l'incorporation de l'azote dans ces films, à une température donnée pour le maintenir inactif, permettait l'augmentation de la taille des grains, plus on augmente la dose, plus l'effet devient important jusqu'à une valeur de concentration limite. Deux températures de dépôt fut choisies, pour étudier l'effet de la température sur la taille des grains.

Ensuite, ayant fixé les paramètres de départ, nous avons exposé le dépôt des films selon deux série, la première représente deux catégories de films déposés à 460°C et 480°C, dopés In-Situ azote pendant la phase de formation des films, dans lesquels on a déterminé les profils expérimentaux de dopage azote, pour une concentration que l'on peut estimée négligeable de l'ordre de $1 \times 10^{17}/\text{cm}^3$, considérée comme échantillon de référence et les trois autres échantillons avec des valeurs assez importantes, $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, et $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

La deuxième série de films, représentée par les deux catégories de films déposés sous les mêmes conditions de dépôt que les précédents, aux deux valeurs de températures de dépôt précédentes, mais cette fois-ci, une fois subis un prés recuit de 900°C pendant une durée de 20minutes de temps, sont implantés au bore avec une même énergie d'accélération 10KeV, pour les films déposés à 460°C, la dose d'ions est de $1 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ et pour les films déposés à 480°C la dose d'ions bore est de l'ordre de $1 \times 10^{15}/\text{cm}^2$.

L'observation des profils expérimentaux obtenus, a montre un effet de ralentissement du bore dans les films où la concentration de l'azote est importante, cet effet devient plus accentué quand cette concentration atteint sa valeur limite, c'est-à-dire $1 \times 10^{22}/\text{cm}^3$.

Pour compléter notre étude, nous avons comparé nos résultats expérimentaux obtenus pour le cas du film¹, avec des résultats publiés dans la littérature décrivant la diffusion du bore dans les films de silicium monocristallin, on a remarqué que la profondeur atteinte dans nos films de Si-LPCVD pour une énergie de 10KeV est bien plus grande (de l'ordre de 250nm), alors que si on prend l'exemple du film se Si (100) Réf. [67], (une concentration de $1 \times 10^{15}/\text{cm}^2$, avec une énergie de 15KeV) la profondeur atteinte n'est que de 100nm, ceci peut être expliqué par le fait que les deux structures présentent un arrangement cristallin différent.

Après avoir décrit, les différentes étapes du programme de simulation réalisé au sein de notre équipe de recherche, basé sur le code de simulation Monté Carlo, des résultats test ont été effectués et comparés à d'autres résultats publiés pour confirmer la bonne marche du programme, puis à partir de l'étude de la répartition de quelques centaine de particules réalisables par la machine en notre possession, on a reconstitué le profil de leur trajectoire dans le silicium.

Pour simuler les profils expérimentaux obtenus dans nos films réalisés pour les deux séries d'échantillons, nous utilisé une station Sun Ultra SPARC-II, les résultats simulés obtenus dans les différents films sont très satisfaisants, on en a déduit que l'utilisation d'un moyen numérique pour reconstituer les profils de dopage ouvre des perspectives très prometteuses dans le domaine de la microélectronique et le monde industriel, afin d'éviter le rejet des échantillons après détérioration une fois la caractérisation expérimentale effectuée (SIMS) ;

- ✓ Parmi les points importants constatés dans les résultats, le freinage du bore par l'azote, qui devient plus important lorsque ce dernier augmente en concentration,
- ✓ La température de dépôt joue un rôle important dans la détermination de la taille des grains par suite, la densité de joint de grains présent dans le matériau, mais on a remarqué que son influence reste négligeable (cas de l'échantillon du film¹) lorsqu'il n'y a pas d'azote,
- ✓ En présence d'azote, avec la variation de la température de dépôt, un autre effet a été constaté, le ralentissement du bore est plus important dans les films

déposés à 460°C que dans les films déposés à 480°C, mais cet effet tend à s'inverser lorsque la concentration de l'azote atteint une valeur limite estimée à $1 \times 10^{22}/\text{cm}^3$, d'après les résultats obtenus.

Cette dernière constatation, nous ouvre une nouvelle perspective de recherche, afin de confirmer l'exactitude du phénomène en réalisant d'autres dépôts à diverses températures de dépôt, et différentes valeurs de concentration d'azote.

Nous avons terminé l'étude, par un tableau récapitulatif, dans lequel on a rassemblé tous les résultats de la simulation de tous les profils expérimentaux étudiés, et comparés les valeurs obtenues aux valeurs publiés dans la littérature, dans les deux cas de dopage au bore: dans des films de Si-LPCVD et dans des films de Si (100).

En perspective, nous proposons d'améliorer le travail avec d'autres informations sur les profils à reproduire, on peut également envisager d'améliorer le programme réalisé pour déterminer les profils de dopage dans des cibles composés ou formées de plusieurs couches.

Références Bibliographiques

- [1] J. P. Nougier, "*Méthodes de calcul numérique*", Edition Masson (3^e édition révisée), Paris (1999)
- [2] M. Ledra, "*Simulation Monté Carlo des trajectoires électroniques : Application au calcul des paramètres d'interaction électrons-matière. Cas du Germanium*", Thèses Magister. Université de Constantine, (1995).
- [3] J. Max, "*Méthodes et techniques de traitement de signal et applications aux mesures physiques*", Tome 1, Masson, Paris (1981).
- [4] J. M. Mendel, "*Tutorial on higher order statistics*", IEEE signal processing and syst. Theory, Vol. 79, n° 3, pp-277-303, March (1991).
- [5] Y. H. Chen and Y. S. Lin, "*A modified cumulant matrix for DOQ estimation*", IEEE signal processing and syst. Theory, Vol. 42, n° 11, pp-3287-3290, November (1994).
- [6] A. Benveniste, M. Goursat and G. Ruget, "*Robust identification of a nonminimum phase system: blind adjustment of a linear equalizer in data communications*", IEEE trans. automatic control, vol. AC-25, no. 3, June (1980), pp. 1740-1748.
- [7] J. A. Cadzow, "*Blind deconvolution via cumulant extrema*", IEEE sig. proc. magazine, (1996).
- [8] P. Comon, "*Independent Component Analysis, a new concept*", Signal Processing, Special issue on Higher-Order Statistics, vol. 36, no 3, April (1994), pp.287-314.
- [9] M. B. Lazar, "*Etude du dopage par implantation ionique d'Aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composants de puissance*", Thèse de Doctorat, INSA-CEGELY, n° 02 ISAL 0016, Lyon. France, (2002).
- [10] Schokley. W, "*Forming semiconductive Devices by Ionic Bombardement*", US Patent 2787564, (1954).
- [11] Giles M.D., "*Ion implantation, in VLSI Technology*", New York: Mc Graw-Hill, (1988), pp.327-374.
- [12] L. Ottaviani, "*Réalisation de jonctions pn dans le carbure de silicium 6H par implantation ionique d'aluminium*", Thèse de Doctorat, INSA-CEGELY, n° 99 ISAL 0010, Lyon. France, (1999).
- [13] Kalbitzer. S. Oetzmann. H., Grahmann H et al., "*A Simple Universal Fit Formula to Experimental Nuclear Stopping Power Data*", Zeitschrift Physic A, (1976), Vol. 223-232.

- [14] Wilson W. D., Hagmark L. G., Biersack J P., "*Calculation of Nuclear Stopping*, *Physical Review B*, (1977), Vol. 15, n°5, pp. 2458-2468.
- [15] Firsov O.B., "*A Qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collision*", *Soviet Physics*, 1959, Vol.36, n°5, pp.1076-1080.
- [16] Lindhard J., Scharff M., Schiott H E., "*Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Materials*" *Physics. Medd.*, (1963), Vol.33, n°14, pp.54-73.
- [17] Lindhard J., "*Slowing-Down of Ion*", *Proc. Royal Society of London A*, (1969), Vol.311, pp.11-19.
- [18] Lindhard J., Scharff M., "*Energy Dissipation by Ion in the KeV Region*", *Physical Review*, (1961), Vol.24, n°1, pp.128-130.
- [19] W. L. Engl, "*Process and Device Modeling*", North-Holland Editions, (1986), Chap.2.
- [20] H. Ryssel, K. Muller, K. Habberger, R. Hankelmanne, F. Jahel, *J. Appl. Phys.*, Vol.22, (1980), p.35.
- [21] J. H. Ryssel, K. Habberger, K. Hoffmann, G. Prinke, R. Dumcke, A. Sacks, *IEEE, Trans. Electron. Devices*, Vol. ED 27, (1980), p.1485.
- [22] M. A. JAUD, "*Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs*". Thèse de Doctorat, Paris Sud XI, Orsay, France, (2006).
- [23] S. Selberherr, "*Analysis and simulation of semiconductor devices*", Springer-Verlag, (1984).
- [24] Kinchin G. H., Pease R. S., "*The Displacement of Atoms in Solid by Radiation*", *Reports on Progress in Physics*, (1955), Vol. 18, pp. 1-25.
- [25] Alexander D. A., Cheung N. W., Park B. et al, "*Materials Modification and Synthesis by Ion Beam Processing*", *Materials Research Society Symposium Proc.*, (1996), Vol.438, pp.241-252.
- [26] G. Mancina., "*Amélioration de la resolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la micro-électronique silicium*", Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, France, (2001).
- [27] B. Gautier., "*Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*", Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, France, (1997).
- [28] W. G. Hawkins., "*Polycrystalline-silicon Device technology for large area electronics*". *IEEE Trans. Electron Devices*, Vol.33, N°4, (1986), p.477.

- [29] B. YU, D.G.JU, W.C.LEE, N. Kepler, T. J. King, and C. HU., "*Gate engineering for deep-submicron CMOS transistors*". IEEE Trans. Electron Devices, Vol.45, (1988), p.1253.
- [30] J.R.PFIESTER, F.K.BAKER, T.C.MELE, H.H.TSENG, P.J.TOBIN, J.D.HAYDEN, J.W.MILLER, C.D.GUNDERSON, and L.C.PARRILLO: "*The effects of boron penetration on p+ polysilicon gated PMOS Devices*". IEEE Trans. Electron Devices, Vol; 37, N°.8, (1990), p.1842.
- [31] G. HU, and R. H. Bruce., "*Design tradeoffs between surface and buried-channel FETs*". IEEE Trans. Electron Devices, Vol.32, (1985), p. 584.
- [32] Y. H. LIN, C. L. LEE, T.I.LEI, and T. S. CHAO, "*Suppression of boron penetration in PMOS by using oxide gatterng effect in poly-Si gate*", Jpn. J. Appl. Phys., Vol.34, (1995), p.752.
- [33] N. D. Arora, R. Rios, and C.L.Huang, "*Modeling the polysilicon depletion effects and its impact on submicrometer CMOS circuit performance*", IEEE Trans. Electron Devices, Vol.42, N°.5, (1995), p.935.
- [34] T. Aoyama, K. Suzuki, H. Tashiro, Y. Toda, T. Yamazaki, Y. Arimoto, and T. Ito, "*Boron diffusion through pure silicon oxide and oxynidride used of metal-oxide-semiconductor devices*". J. Electrochem. Soc., Vol.140, N°12, (1993), p.3624.
- [35] C.H.CHOI, P.R.CHIDAMBRAN, R.KHAMANKAR, C.F.MACHALA, Z.YU, and R.W.DUTTON: "*Dopant profile and gate geometric effects on polysilicon gate depletion in scaled MOS*". IEEE Trans. Electron Devices, Vol.N°7, (2002), p.1227.
- [36] J. M. Sung, and C. Y.LU, "*A comprehensive study on p+ polysilicon gate MOSFETs instability with fluorine incorporation*". IEEE Trans. Electron Devices, Vol.37, (1990), p.2312.
- [37] C. Y.LU, and J.M.Sung, "*Negative charge induced degradation of pMOSFETs with BF₂ implanted p+-poly gate*". IEEE Electron. Lett., Vol.25, (1989), p.1685.
- [38] G.O.LO, D.L.Kwong, and S.Lee, "*Anomalous capacitance-voltage characteristics of BF₂ implanted and rapid thermal annealed p+ polycrystalline silicon gate metal-oxide-semiconductor structures*". Appl. Phys. Lett., Vol.57, (1990), p.2573
- [39] M. Koda, Y.Shida, J. Kawaguchu, and Y. Kaneko, "*Improving gate oxide integrity in p+ PMOSFET by using large grain size polysilicon gate*"; Symposium on VLSI Technology, (1993), p.471
- [40] H. Bouridah, "*Etude des proprietes de couches minces de silicium dope azote obtenues par LPCVD et implantées au bore pour grille polysilicium de transistors MOS*". Thèse de Doctorat Sciences, Université Mentouri de Contantine, (2005).
- [41] S.NAKAYAMA, and T.SAKAI: "*The effect of nitrogen in a p+ polysilicon gate on*

boron penetration through the gate oxide". J.Electrochem. Soc., Vol.144, N°.12, (1997), p.4326.

[42] V. W. C. Chan, P. C. H. Chan, and M. Chan, "Multiple layers of CMOS integrated circuits using recrystallized silicon". IEEE Electron Device Lett., Vol.22, N°.12, (2001), p.77.

[43] H. H. TSENG, P. J. Tobin, F.K.Baker, J.R.Pfiester, K. Evans, P. Fejes, "The effect of silicon gate microstructure and gate oxide process on threshold voltage instabilities in BF_2 implanted p^+ gate p -channel MOSFETs". Symposium on VLSI Technology, p.111

[44] P.J.Ashby, "Diffusion of N in Si", Properties of silicon, EMIS. Data reviews series N°.4, An INSPEC Publication, (1988).

[45] Y. Yatsurugi, N. Akaiyama, U. Endo, and T. Nozaki, "Concentration, solubility, and equilibrium distribution coefficient of nitrogen and oxygen in semiconductor silicon", J. Electrochem. Soc., Vol.120, (1973), p.975.

[46] T. Abe, H. Harada, N. Ozawa, and K. Adomi, "Deep level generation annihilation in nitrogen doped FZ crystal", Mat. Res. Soc. Symp.(USA), Vol.59, (1986), p.537.

[47] P. V. Pavlov, E. I.Zorin, D.I.Tetelebaum, and A.F.Khokhlov, "Nitrogen as dopant in silicon and germanium", Phys. Status Solid (Germany), Vol.35, (1976), p.11.

[48] H.J.Stein, "Nitrogen in crystalline Si", Mat.Res.Soc.Symp. Proc.(USA), Vol.59, N°.35, (1986), p.523.

[49] C.ADimitriadis, P.A.Coxon, L. Dozsa, L. Papadmitriou, and N. Economou, "Performance of thin film transistors on polysilicon films grown by low pressure chemical vapor deposition at various pressures". IEEE Trans. Electron Devices, Vol.39, N°.3, (1992), p.598.

[50] M.K.Ryu, J.Y. Kwon, and K.B.Kim, "Solid phase crystallization (SPC) behavior of amorphous Si bilayer films with different concentration of oxygen", App.Phys. Lett., Vol.71, (1997), p.3063.

[51] M.K.HATALIS, and D.W.GREVE: "Large grain polycrystalline silicon by low temperature annealing of low pressure chemical vapor deposition amorphous silicon films", J.Appl. Phys., Vol.63, N°.7, (1991), p.2260.

[52] A.T.Voutsas, and M.K.Hatalis, "Deposition and crystallization of a -Si Low- Pressure Chemical Vapor Deposited Films Obtained by Low Temperature Pyrolysis of Disilane", J.Electrochem. Soc., Vol. 140, N°.3, (1993), p.871.

[53] K. Nakazawa, "Recrystallization of amorphous silicon films deposited by low pressure chemical vapor deposition from Si_2H_6 gas", J. Appl. Phys., Vol.69, N°.3, (1991), p.1703.

[54] J.J.Pedroviejo Poyatos, "Films de silicium déposés par LPCVD à partir de disilane : Mécanisme de dépôt, propriétés et aptitude à la réalisation de transistors sur films minces",

Thèse de Doctorat, INSA de Toulouse, France, (1993).

[55] B.YU, JU, N.Kepler, and C.HU, "*Impact of nitrogen (N_{14}) implantation into polysilicon gate on high performance dual gate CMOS transistors*". IEEE Electron Device. Lett., Vol.18, N°.7, (1997), p.312.

[56] D. N. Kouvatsos, A. T. Voutsas, and M.K.Hatalis, "*High performance thin film transistor in large grain size polysilicon deposited by thermal decomposition of disilane*", IEEE Trans. Electron Devices, Vol.43, N°.9 (1996), p.2080.

[57] P. Temple Boyer, "*Nouveaux procédé d'obtention d'oxynitride de silicium*", Thèse de Doctorat, INSA de Toulouse, France, (1995).

[58] A.L.Fripp, "*Dependence of resistivity on doping level of polycrystalline silicon*", J.Appl.Phys., Vol.46, (1975), p.1240.

[59] K.Suzuki, N.Miyat, K.Kawamura, "*Resistivity of feavily doped polycrystalline silicon subjected to furnace annealing*", Jpn.J.Appl.Phys., Vol.34, (1995), p.1748.

[60] J.Y.W.Kamins, "*The electrical properties of polucrystalline silicon films*", J.Appl.Phys., Vol.46, (1975), p.5247.

[61] T.IKamins, "*Hall mobility in chemically deposited polycrystalline silicon*", J.Appl.Phys., Vol.46,(1971), p.4357.

[62] T.I.Kamins, "*Structure and properties of LPCVD silicon films*", J.Electrochem.Soc., Vol.127, (1980), p.686.

[63] M.Lemiti, S. Audisio, B.Ballaud, "*Evaluation de la taille des grains du silicium polycristallin pendant les traitements thermiques ou oxydation*", Rev.Phys.Appl., Vol.24, (1989), p.133-41.

[64] P. Temple Boyer, L. Jalabert, and Lmasarotto, "*Properties of nitrogen doped silicon films deposited by low pressure chemical vapour deposition from silane and ammonia*", J.Vac.Sci.Technol., Vol.A18, N° .5, (2000), p.2389.

[65] T.Ehara, "*Electron spin resonance study of nitrogen doped microcrystalline silicon and amorphous silicon*", Applied Surface Science, Vol.113, (1997), p.126.

[66] S. Nédélec, D. Mathiot, and M. Gauneau, "*Diffusion of Boron in Polycrystalline Silicon*", reported in the ESSDERC'96 Proc., Edition Frontière, Bologna, Italy, (1996), p. 153.

[67] S. H. Yang, C. M. Snell, S. J. Morris, S. Tian, K. Parab, B. Obradovich, M. Morris, and A. F. Tasch, "*A Monte Carlo Binary Collision Model for BF_2 Implants into (100) Single-Crystal Silicon*", *J. Electron Matter*, **Vol. 143**, n° 11, (1996), pp. 3784-3790.

[68] A. Hall, "*On an experimental determination of π* ", Messeng. Math., Vol.2, (1873),

p.113.

[69] M. Ledra, "*Simulation Monté- Carlo des trajectoires électroniques: Application au calcul des paramètres d'interaction électron-matière. Cas du germanium*", Thèse de Magister, Université de Constantine, (1995).

[70] J. H. Curtiss et al. ,"*Monté Carlo method*", National Bureau of Standards Applied Mathematics, Vol.12, (1951).

[71] L. Kelvin, "*Nineteenth century clouds over the dynamical theory of heat and light*", Phil. Mag., Vol.2, N°.6, (1901), p.1.

[72] M. T. Robinson, "*Marlowe binary collision cascade simulation program version*", Oak Ridge national Lab., July, (1984), p.1.

[73] J. Lindard, M. Scharff, and H. E. Schiff, K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., Vol.33, N°14, (1963), p.1-39.

[74] J. Lindard, M. Scharff, and H. E. Schiff, K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., Vol.34, N°4, (1964), p.1-21.

[75] J. P. Biersack and L. G. Hagmark, "*A Monté Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*", Nul, Instrum. Methods, Vol.174, (1980), p.257-269.

[76] W. Husinsky, and G. Betz, *Thin Solid Films*, Vol.272, (1996), p.289.

[77] Documentation de présentation de la méthode TRIM, éditée par l'Université de Stanford, Californie, (1997).

[78] S. M. Sze, "*VLSI Technology*", 2nd Edition, McGraw-Hill, New York, (1988), chapter VIII, p. 327 and chapter X, p. 422.

[79] S. Merabet, M. Boukezzata, "*Etude et simulation par MC des profils d'implantation de films Si-LPCVD*", International Conference on Micro and Nano Technologies (ICMNT 06), Novembre 19-23(2006), Algeria.

[80] S. Merabet, M. Boukezzata, "*A Monte Carlo Simulation Study of Boron Implants Profiles into NiDoS-LPCVD- Thin Solid Films*", African Physical Review (2008) 2 Special Issue (Materials):0080, p.154-156.

[81] S. Merabet, M. Boukezzata, P. Temple-Boyer, and E. Scheid, "*A Monté Carlo simulation study of high-dose and low-energy boron implantation into LPCVD-NiDoS polycrystalline thin films*", Journal of Materials Science, Vol. 11, N°.3, (2009), p.71-80.

[82] K. M. Klein, C. Park, A. F. Tasch, "*Monté Carlo Simulation of Boron implantation into Single-Crystal Silicon*", *IEEE Trans. Electron Device*, **ED-39**, (1992), p. 1614.