



**HAL**  
open science

# Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, Soi et SiGe pour les MOS avancés

Mehdi Bazizi El

► **To cite this version:**

Mehdi Bazizi El. Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, Soi et SiGe pour les MOS avancés. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2010. Français. NNT: . tel-00509153

**HAL Id: tel-00509153**

**<https://theses.hal.science/tel-00509153>**

Submitted on 10 Aug 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université  
de Toulouse

# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse III - Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)

Discipline ou spécialité : *Micro et Nano Systèmes*

---

**Présentée et soutenue par** El Mehdi BAZIZI

**Le 30 juin 2010**

**Titre :** *Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, SOI et SiGe pour les MOS avancés*

---

**Ecole doctorale :**

Génie Electrique, Electronique et Télécommunications (GEET)

**Unité de recherche :**

Laboratoires d'Analyse et d'Architecture des Systèmes-UPR 8001

**Directeur(s) de Thèse :**

Fuccio CRISTIANO

Ardechir PAKFAR

**Rapporteurs :**

Professeur

Peter PICHLER

Professeur

Jean-luc AUTRAN

**Autre(s) membre(s) du jury**

Docteur

Bartek PAWLAK

Examineur

Professeur

Daniel ALQUIER

Examineur

Professeur

Thierry CAMPS

Examineur



# **Table des matières**



<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>11</b>
<b>Chapitre I : les jonction ultra-minces : présentation générale et problèmes inhérents .....</b>	<b>19</b>
<b>I Introduction .....</b>	<b>19</b>
<b>II Le MOSFET : limites et solutions à la miniaturisation .....</b>	<b>20</b>
II.1 Introduction au transistor MOS .....	20
II.1.1 Principe de fonctionnement.....	20
II.2 Fin du CMOS conventionnel .....	23
II.2.1 Loi d'échelle.....	23
II.2.2 La « Roadmap » .....	24
II.2.3 Limites : L'effet canal court (SCE) et l'effet drain (DIBL) .....	25
II.2.4 Resistances séries .....	26
II.2.5 Fuites.....	27
II.3 Solutions conventionnelles : LDD, poches et halo .....	28
II.4 Dispositifs émergents.....	28
II.4.1 Le substrat .....	29
II.4.2 Le canal .....	30
II.5 Bilan partiel.....	32
II.5.1 Figure de mérite de la jonction.....	32
II.5.2 Figures de mérite du transistor MOS .....	33
<b>III Technologies : Procédés de fabrication des jonctions ultrafines.....</b>	<b>33</b>
III.1 Techniques de dopage .....	34
III.1.1 Implantation ionique .....	34
III.1.2 Plasma .....	35
III.2 Technique d'activation .....	36
III.2.1 Le recuit rapide standard (RTP).....	36
III.2.2 Le recuit "Flash" milliseconde .....	37
III.2.3 Le recuit laser.....	37
III.2.4 Conclusion .....	37
<b>IV Diffusion des dopants .....</b>	<b>38</b>
IV.1 Equation de la diffusion : La loi de Fick .....	39
IV.2 Défauts ponctuels et mécanismes de diffusion des dopants .....	40
IV.2.1 Définitions.....	40
IV.2.2 Concentration à l'équilibre.....	42
IV.2.3 Diffusivité des défauts ponctuels .....	43
IV.2.4 Etat de charge majoritaire .....	45
IV.2.5 Diffusion des dopants usuels.....	46
IV.3 Conclusion .....	47
<b>V Implantation ionique et défauts .....</b>	<b>47</b>
V.1 Les clusters d'interstitiels .....	48
V.2 Les défauts {311} .....	48
V.3 Les boucles de dislocations.....	49
V.4 Position et origine des défauts étendus .....	49
V.4.1 Cas d'une implantation non-amorphisante .....	49
V.4.2 Cas d'une amorphisation du substrat.....	49
V.5 Conséquences des défauts étendus.....	50
V.5.1 La diffusion anormale .....	50

V.5.2	Influence des défauts sur l'activation des dopants .....	51
V.5.3	Effets des défauts étendus sur les propriétés électriques des composants .....	52
<b>VI</b>	<b>Intérêt des outils de simulation .....</b>	<b>53</b>
<b>REFERENCES DU CHAPITRE I.....</b>		<b>56</b>
<b>Chapitre II : Rappels théoriques sur l'évolution des défauts d'implantation et la diffusion des dopants .....</b>		
		<b>65</b>
<b>I</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>65</b>
<b>II</b>	<b>Implantation ionique .....</b>	<b>65</b>
<b>III</b>	<b>Evolution des défauts au cours du recuit d'activation .....</b>	<b>68</b>
III.1	Recombinaison des défauts ponctuels .....	68
III.1.1	Épitaxie en phase solide .....	68
III.1.2	Recombinaison en profondeur.....	69
III.1.3	Recombinaison avec des impuretés.....	69
III.1.4	Effet de la surface.....	70
III.2	Réaction d'agglomérats d'interstitiels .....	70
III.2.1	Structure des défauts étendus .....	71
III.2.2	Mécanisme et cinétique d'évolution au cours du recuit thermique .....	73
III.2.3	Modèles de la littérature .....	77
<b>IV</b>	<b>Formation d'agglomérats mixtes dopant-défauts.....</b>	<b>81</b>
IV.1	La solubilité limite .....	81
IV.2	Bore .....	82
IV.2.1	Observations expérimentales.....	82
IV.2.2	Calculs théoriques .....	84
IV.2.3	Modèles .....	84
IV.3	Cas des autres dopants .....	86
IV.3.1	Arsenic .....	86
IV.3.2	Phosphore.....	88
IV.3.3	Antimoine.....	89
<b>V</b>	<b>L'interface Si/SiO<sub>2</sub>.....</b>	<b>89</b>
V.1	Ségrégation des impuretés .....	89
V.2	Exo-diffusion .....	90
V.3	Modèle .....	91
<b>VI</b>	<b>Conclusion .....</b>	<b>92</b>
<b>REFERENCES DU CHAPITRE II .....</b>		<b>94</b>
<b>Chapitre III : Méthode de simulation .....</b>		
		<b>105</b>
<b>I</b>	<b>introduction.....</b>	<b>105</b>
<b>II</b>	<b>Implantation des dopants dans le Silicium.....</b>	<b>105</b>
<b>III</b>	<b>Modèle general de la diffusion des dopants dans le Silicium.....</b>	<b>106</b>
III.1	Modèle de diffusion.....	106
III.2	Modèle relatif aux amas d'interstitiels .....	110
III.3	Modèle relatif aux amas mixtes de dopant et d'interstitiels :	
$B_m I_n, A_{S_m} V_n$ .....		114

III.3.1	Présentation générale du modèle .....	114
III.3.2	Cas du bore.....	115
III.3.3	Cas de l'arsenic .....	117
III.4	Modèle d'interface pour les dopants .....	117
<b>IV</b>	<b>Conclusion .....</b>	<b>118</b>
<b>REFERENCES DU CHAPITRE III .....</b>		<b>119</b>
<b>Chapitre IV: Développement, optimisation et intégration de modèles physiques pour la simulation des défauts étendus et de la diffusion dans le Silicium .....</b>		
<b>I Introduction .....</b>		<b>123</b>
<b>II Modèle des agglomérats d'interstitiels dans le silicium .....</b>		<b>124</b>
II.1	Petits amas d'interstitiels (SMICs) et défauts {311} .....	124
II.2	Transformation {311}/boucles de dislocation .....	127
II.3	Conclusion .....	130
<b>III Formation de jonctions ultrafines .....</b>		<b>130</b>
III.1	Etudes fondamentales .....	130
III.2	Etudes appliquées .....	133
III.2.1	Diffusion des dopants après implantation directe.....	133
III.2.2	Diffusion des dopants après implantation préamorphisante.....	138
III.3	Conclusion .....	140
<b>IV Recuit Flash.....</b>		<b>140</b>
IV.1	Défauts étendus.....	141
IV.1.1	Détails expérimentaux.....	141
IV.1.2	Analyse.....	142
IV.1.3	Simulation et discussion.....	143
IV.1.4	Conclusion .....	148
IV.2	Dopant .....	148
<b>V Modèle relatif à l'interaction du bore avec les défauts étendus .....</b>		<b>152</b>
V.1	Etude expérimentale.....	153
V.1.1	Analyse MET .....	154
V.1.2	Analyse SIMS .....	155
V.2	Description du modèle .....	157
V.3	Simulation .....	159
V.4	Conclusion .....	161
<b>REFERENCES DU CHAPITRE IV .....</b>		<b>162</b>
<b>Chapitre V : Défauts étendus et diffusion dans le SOI : Caractérisation et modélisation du rôle de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> .....</b>		
<b>I Introduction .....</b>		<b>167</b>
<b>II Effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts étendus .....</b>		<b>168</b>
II.1	Expérience mise en place.....	169
II.2	Résultats et interprétation .....	170
II.3	Simulations .....	173
II.4	Conclusion .....	175

<b>III Evolution de la TED dans les substrats SOI .....</b>	<b>175</b>
III.1 Expérience mise en place .....	176
III.2 Résultats et discussion .....	177
III.3 Conclusion .....	180
<b>REFERENCES DU CHAPITRE V .....</b>	<b>181</b>
<b>Chapitre VI : Défauts étendus et diffusion dans les alliages SiGe : Caractérisation et modélisation du rôle de la composition chimique et de la contrainte .....</b>	<b>185</b>
<b>I Introduction .....</b>	<b>185</b>
<b>II Descriptif des échantillons étudiés .....</b>	<b>186</b>
<b>III Résultats préliminaires .....</b>	<b>189</b>
III.1 Couches relaxées .....	189
III.2 Couches contraintes .....	189
<b>IV Effet de la composition chimique .....</b>	<b>190</b>
IV.1 Résultats Expérimentaux : défauts étendus .....	191
IV.1.1 Implantation non amorphisante : 40keV Si <sup>+</sup> , 6x10 <sup>13</sup> at.cm <sup>-2</sup> .....	191
IV.1.2 Implantation amorphisante : 35keV Ge <sup>+</sup> , 1x10 <sup>15</sup> at.cm <sup>-2</sup> .....	192
IV.2 Simulations .....	194
<b>V Effet de la contrainte : Si et SiGe .....</b>	<b>200</b>
V.1 Résultats Expérimentaux : défauts étendus .....	200
V.2 Simulations .....	203
<b>VI Discussion .....</b>	<b>207</b>
<b>VII Conclusion .....</b>	<b>208</b>
<b>REFERENCES DU CHAPITRE VI.....</b>	<b>210</b>
<b>Chapitre VII : Simulation de dispositifs CMOS avancés : C65 SOI et C45 SiGe.....</b>	<b>215</b>
<b>I Introduction .....</b>	<b>215</b>
<b>II Outils de simulation.....</b>	<b>216</b>
II.1 Simulation des procédés industriels.....	216
II.2 Simulation électrique .....	217
<b>III Dispositifs SOI .....</b>	<b>217</b>
III.1 Dispositifs fabriqués .....	217
III.2 Simulation des procédés de fabrication .....	218
III.2.1 Les modèles utilisés pour le SOI.....	218
III.2.2 Résultats des simulations des procédés .....	219
III.2.3 Effet de l'interface Si/BOX sur les défauts étendus .....	219
III.3 Simulation électrique .....	220
III.3.1 Capacité.....	220
III.3.2 SOI NMOS.....	221
III.3.3 SOI PMOS .....	222
III.4 Impact des modèles ATOMICS .....	223

III.4.1	SOI NMOS.....	223
III.4.2	SOI PMOS .....	225
<b>IV</b>	<b>Caractérisation électrique de la distribution latérale du dopage source/drain dans les MOSFETS nanométriques.....</b>	<b>226</b>
IV.1	Principe de la méthode .....	227
IV.2	Application de la méthode sur des simulations TCAD d'un procédé industriel.....	229
IV.3	Mesures sur des PMOS 65 nm .....	230
IV.4	Conclusion .....	231
<b>V</b>	<b>Transistors à canal de silicium contraint pour les nœuds technologiques CMOS 45nm .....</b>	<b>232</b>
V.1	Structures fabriquées.....	232
V.2	Résultats de simulation procédé.....	234
V.2.1	Modèles pour Si contraint/SiGe (sSi/SiGe) .....	234
V.2.2	Transistor de type N à canal de Si contraint sur SiGe 20% - Etude de la diffusion des dopants .....	235
V.2.3	Transistor de type P à canal de Si contraint sur SiGe 20% - Etude de la diffusion des dopants .....	236
V.2.4	Conclusion .....	237
V.3	Simulation électrique .....	238
V.3.1	Transistor Silicium 45nm .....	238
V.3.2	Transistor à canal de Si contraint sur SiGe 20% .....	240
V.4	Impact des modèles ATOMICS .....	244
V.4.1	Transistor NMOS à canal de Si contraint sur SiGe 20% .....	244
V.4.2	Transistor PMOS à canal de Si contraint sur SiGe 20% .....	245
V.5	Conclusion .....	246
<b>VI</b>	<b>conclusion .....</b>	<b>246</b>
	<b>REFERENCES DU CHAPITRE VII.....</b>	<b>248</b>
	<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>251</b>
	<b>PRODUCTION SCIENTIFIQUE .....</b>	<b>257</b>

---



# **Introduction générale**



## INTRODUCTION GENERALE

Depuis plusieurs décennies, nous sommes témoins d'une incroyable augmentation de la capacité d'intégration du nombre de circuits intégrés sur substrat de silicium. Ce succès est principalement dû à la miniaturisation du composant essentiel en microélectronique : le Transistor Métal-Oxyde-Semiconducteur à Effet de Champ (MOSFET). Lors de ces 30 dernières années, la taille du transistor MOS a été réduite d'un facteur 1000 et de nos jours, des transistors d'une longueur de grille de 32 nm sont déjà en production et la recherche s'est tournée vers des dispositifs dont la longueur de grille peut atteindre jusqu'à 6 nm (Figure 1).

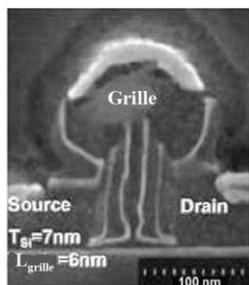


Figure 1 : Image TEM vue en coupe d'un transistor MOS d'une longueur de grille de 6 nm, composé d'un oxyde de grille de 1.2 nm de SiO<sub>2</sub> [1].

Déjà en 1965, Gordon Moore prédisait que la densité d'intégration des circuits micro-électroniques doublerait tout les dix-huit mois. Ainsi, avec l'avènement des microprocesseurs et de la microinformatique personnelle, le nombre de MOSFET par puce n'a pas cessé de croître. Cette évolution appelée "loi de Moore" régit aujourd'hui la ligne directrice des objectifs technologiques – connue sous le terme roadmap, la feuille de route – des différentes industries de la microélectronique [2].

Toutefois, au cours de cette course effrénée vers la miniaturisation des composants électroniques, les problèmes technologiques ne se limitent plus aux seules difficultés de réalisation. Nous voyons apparaître, à présent, des phénomènes parasites remettant en cause les avantages offerts par la technologie CMOS (Complementary MOS). Parmi ces phénomènes, nous avons notamment les effets de canal court (SCE), l'abaissement de la barrière de potentiel au niveau du drain (DIBL), les phénomènes de nature quantique, le courant tunnel de grille, la fluctuation aléatoire des dopants, etc. [3]. Ces phénomènes sont hélas devenus inévitables car les dimensions latérales et verticales des dispositifs sont réduites de manière drastique et rendent la miniaturisation difficile voire impossible. L'introduction de nouveaux matériaux tels que le SOI (Silicon On Insulator) ou les alliages SiGe est une des solutions envisagées pour améliorer les caractéristiques des CMOS de nouvelle génération.

Afin de repousser ces limites technologiques, on peut procéder empiriquement par de multiples essais expérimentaux. La démarche est cependant coûteuse, longue et plutôt

<sup>1</sup> H. Wong, H. Iwai, "On the scaling issues and high-k replacement of ultrathin gate dielectrics for nanoscale MOS transistors", *Microelectronics Engineering* – 83, 1867-1904 (2006).

<sup>2</sup> International Technology Roadmap for Semiconductors, <http://public.itrs.net>.

<sup>3</sup> N Arora, "MOSFET models for VLSI circuit simulation: theory and practice" ISBN-10 0387823956, Springer-Verlag Telos, 1993.

hasardeuse sans le soutien théorique des outils d'analyse numérique. Il est préférable de procéder à la place à des tests en simulation numérique, avec l'avantage d'une plus grande souplesse dans les essais envisageables. Pour cela, les logiciels de simulation des procédés de fabrication doivent combiner à la fois la connaissance des phénomènes physiques intervenant dans les étapes technologiques, les algorithmes avancés de maillage et les solveurs performants indispensables pour ce type d'outils.

Au cours de ces dernières années, l'élaboration de modèles physiques dans le domaine de la fabrication de composants micro-électroniques est devenue la clé du développement et de l'amélioration des outils de simulations technologiques. Ces modèles doivent décrire l'ensemble des étapes de fabrication des composants électriques.

Parmi les procédés de fabrication, on distingue d'une part les étapes structurales (gravure, dépôt et développement de masque) où l'on façonne la géométrie du dispositif et d'autre part, les étapes correspondant aux procédés thermiques et de dopage (implantation et recuit d'activation), où l'on manipule les profils d'impuretés. Les étapes d'oxydation, qui permettent de générer une couche isolante de  $\text{SiO}_2$ , interviennent à la fois sur le dopage et sur la géométrie du transistor.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la modélisation et à la simulation de la distribution des dopants dans les dispositifs MOS en fonction des procédés de fabrication utilisés. Ces simulations permettent par la suite d'établir les propriétés électriques et de déterminer les caractéristiques de fonctionnement du dispositif.

L'élaboration des jonctions Source/Drain (S/D) que l'on souhaite de plus en plus minces et très dopées ( $X_j \leq 15\text{nm}$  cf. Figure 2), s'effectue principalement en deux étapes distinctes. D'abord les impuretés dopantes sont introduites par implantation ionique (directe, ou dans des substrats préamorphisés). Il s'agit aujourd'hui de la technique la plus fiable, et la moins coûteuse. Elle permet, entre autre, le contrôle précis de la profondeur et de la quantité des dopants introduits. Ensuite, le recuit d'activation permet de réparer les dommages engendrés par l'implantation ionique et ainsi de restaurer le caractère cristallin du substrat. De plus, le recuit a pour objectif d'activer électriquement le dopant en le positionnant sur les sites substitutionnels du réseau cristallin du silicium.

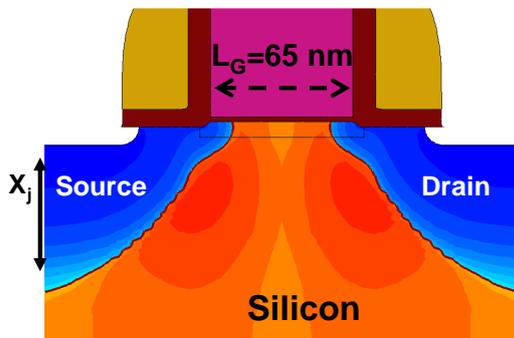


Figure 2 : Simulation de la répartition du dopage net dans un transistor MOS. La majorité du dopant incorporé dans le silicium se situe au niveau de la source et du drain qui constituent les zones actives du transistor MOS.

La modélisation du profil de dopant consiste donc à prédire les effets de la phase d'implantation ionique et à simuler correctement les profils de dopants diffusés (et en particulier son caractère plus ou moins abrupt) et d'en déterminer la proportion active après

un recuit. Ces simulations permettent par la suite d'établir les propriétés électriques du dispositif.

Cependant, les dopants usuels du silicium tels que le bore, le phosphore ou l'arsenic qui sont stables lorsqu'ils se trouvent en position substitutionnelle, ne diffusent pas en tant qu'espèces isolées. Pour se déplacer, ils requièrent l'assistance des défauts ponctuels, aussi bien les lacunes que les auto-interstitiels, avec lesquels ils forment des paires dopants-défauts. En conséquence, le coefficient de diffusion effectif du dopant sera fonction de la concentration locale de défauts ponctuels. L'implantation ionique crée une très forte concentration de défauts ponctuels dans le cristal et lorsque l'on réalise le recuit pour réparer les dommages générés des défauts étendus se forment et c'est leur évolution qui contrôle celle des défauts ponctuels, la diffusion du dopant s'en trouve donc fortement accélérée. Cette accélération brusque de la diffusion des dopants lors des premières secondes de recuit est connue sous le nom de TED (Transient Enhanced Diffusion) et constitue l'un des problèmes majeurs dans le contrôle du profil et de l'activation des dopants. Afin de diminuer l'effet de cette diffusion accélérée, la tendance actuelle est à la diminution du bilan thermique lors du recuit. On utilise pour cela des systèmes de recuit rapide permettant d'atteindre en quelques millisecondes une température située autour de 1300°C. Les modèles que nous allons décrire sont valables pour de tels recuits mais aussi pour des recuits plus conventionnels.

L'objectif de ces travaux de thèse est d'augmenter les capacités de prédiction des simulateurs de procédés technologiques silicium pour les technologies émergentes dans lesquelles les matériaux tels que le SOI et le Silicium-Germanium sont utilisés. Dans les technologies considérées, les dispositifs étant de plus en plus proches des interfaces, il est également primordial de modéliser précisément les mécanismes physiques liés aux interfaces semi-conducteur/isolants. La démarche que l'on a suivi dans ces travaux de thèse est de construire à partir d'un simulateur existant, dans lequel la diffusion des dopants tient compte de l'évolution des défauts étendus, un modèle valable pour les nouveaux procédés de fabrication (types recuits milliseconde) et de l'étendre aux nouveaux matériaux émergents. Pour cela, le cas échéant, nous avons réalisé des expériences dédiées nous permettant d'analyser les différents phénomènes entrant en jeu lors de la fabrication de jonction afin de compléter le modèle de simulation.

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre du projet européen **ATOMICS** (*Advanced Front-End Technology Modeling for Ultimate Integrated Circuits*) en collaboration avec de nombreux partenaires industriels et universitaires, notamment STMicroelectronics (Crolles – France) et le laboratoire **LAAS-CNRS** (Toulouse – France) au sein desquels j'ai effectué ces travaux de recherche.

Dans le premier chapitre, nous plaçons le contexte de ce travail, en particulier la miniaturisation des transistors MOS avancés. Nous présenterons brièvement le transistor MOS massif ainsi que les problèmes engendrés par sa miniaturisation. Nous évoquerons ensuite les solutions technologiques possibles pour répondre à ces problèmes. Nous exposerons ainsi le rôle important des jonctions ultra-minces, leurs techniques de fabrication ainsi que les problèmes associés, notamment la génération de défauts cristallins lors de leur fabrication.

Le deuxième chapitre de ce manuscrit sera consacré à la compréhension de la diffusion anormale des dopants qui apparaît au cours de la formation de jonctions ultrafines. Nous verrons que cette accélération est liée à la présence d'une forte sursaturation en auto-interstitiels de silicium générés au cours de l'implantation ionique, et que seule une description correcte de l'évolution de cette sursaturation nous permet de modéliser cette diffusion. En particulier, nous verrons comment la formation de défauts étendus pendant le recuit peut influencer la diffusion des dopants. Nous aborderons ensuite, la théorie classique de la diffusion. Nous traiterons des ressemblances et des spécificités de chacun des dopants usuels de la micro-électronique. Nous traiterons aussi, en nous basant sur l'exemple du bore, de l'interaction existante entre les défauts et le dopant lors de la création de défauts mixtes tels les BICs (Boron Interstitial Clusters) rendant le bore immobile et surtout inactif pour la réalisation de jonctions. Finalement, nous verrons que l'on peut étendre notre compréhension du problème des agglomérats mixtes aux autres dopants comme l'arsenic, le phosphore ou l'antimoine.

Nous présenterons, au chapitre trois, le modèle physique sur lequel sont basés nos travaux. Ce modèle est composé de trois parties concernant respectivement, la diffusion classique, la formation d'amas d'interstitiels de silicium et la formation d'agglomérats mixtes de dopants et d'interstitiels. Parce que la construction d'un simulateur de procédés technologiques efficace passe par un compromis entre la réalité physique des modèles et la rapidité d'exécution des simulations, nous expliquerons quels ont été les choix dans les simplifications des équations du modèle.

Le quatrième chapitre sera entièrement consacré aux travaux que nous avons menés sur le Silicium. Nous exposerons nos résultats obtenus grâce aux simulations. L'accent sera porté sur la compréhension des phénomènes physiques actifs dans les procédés de fabrication des jonctions, du rôle des défauts en général et des paramètres des différentes étapes de fabrication en particulier. Les modèles présentés dans le chapitre 3 seront calibrés individuellement grâce à des considérations physiques, en simulant des expériences particulières issues de la littérature. Et afin de vérifier la validité des modèles optimisés en dehors des conditions expérimentales pour lesquelles ils ont été conçus, nous les appliquons à des cas réels de nouveaux procédés de fabrication des jonctions ultra-minces. Nous avons particulièrement étudié la diffusion des dopants lors d'un recuit spike et l'évolution des défauts de fin de parcours au cours d'un recuit flash. La dernière partie de ce chapitre sera consacrée au développement de nouveaux modèles pour simuler un des phénomènes qui ne sont pas encore pris en compte par les simulateurs de procédé. En effet, sous certaines conditions de préamorphisation et d'implantation de bore, on assiste à l'apparition d'un pic de bore localisé au niveau des défauts EOR et juste à l'arrière de l'ancienne interface a/c. L'origine de ce pic étant difficilement explicable, une expérimentation rigoureuse, basée sur des 'profils plats', a été mise en place. Nous nous y attarderons plus en avant dans ce chapitre.

Dans la cinquième partie de ce manuscrit, nous étendons le modèle relatif aux agglomérats d'interstitiels au nouveau matériau SOI (silicium sur isolant) qui offrent des solutions pour réduire, entre autre, la profondeur des jonctions. Nous étudions expérimentalement l'effet de l'interface Si/oxyde enterrée sur la formation de défauts étendus. Nous menons ensuite une

étude précise de la TED du bore dans le cas de substrats de Si et SOI afin de quantifier la longueur de recombinaison à la couche d'oxyde enterrée.

L'utilisation d'alliages silicium/germanium sera étudiée dans le sixième chapitre. Nous étudions l'évolution thermique des défauts étendus dans ces alliages afin d'analyser les mécanismes physiques qui contrôlent cette évolution à la fois en fonction de la teneur en Ge et de la contrainte induite dans les couches SiGe. Nous évaluons aussi l'évolution de la TED pour plusieurs conditions d'implantation et de recuit dans ces alliages SiGe. En se basant ensuite sur ces études, le modèle relatif aux agglomérats d'interstitiels sera adapté à ces alliages en modifiant ses paramètres en fonction de la teneur en Ge et du niveau de contrainte.

Le septième et dernier chapitre sera enfin consacré à la simulation des dispositifs CMOS et des effets de petites géométries tels que les SCE et le DIBL, à partir desquels les différents modèles élaborés et calibrés au cours de nos travaux pour la fabrication des jonctions ultra-minces ont été testés. Le modèle général de diffusion présenté dans cette thèse, incluant l'ensemble des contributions à l'évolution des défauts et à la diffusion des dopants en fortes concentrations a été appliqué au cas des technologies industrielles actuellement en développement à STMicroelectronics-Crolles : C65 SOI et SiGe 45. Le très bon accord entre les résultats issus de notre simulateur de dispositif avec ceux issus des mesures, nous a donc permis de valider notre approche et notre modèle.



# Chapitre I

**Les jonctions ultra-minces :  
présentation générale et  
problème inhérent**



## CHAPITRE I : LES JONCTION ULTRA-MINCES : PRESENTATION GENERALE ET PROBLEMES INHERENTS

### I INTRODUCTION

Depuis l'antique boulier chinois, en passant par l'additionneur mécanique inventé par Blaise Pascal en 1642 et la machine à recenser de Hollerith en 1890, la puissance de calcul n'a jamais cessé d'être améliorée. Les systèmes électroniques ont supplanté depuis longtemps les systèmes mécaniques dans cette course à la performance. Cette augmentation de la vitesse de calcul a provoqué une réduction du coût de calcul. La Figure 3 retrace cette fulgurante baisse des prix au cours du vingtième siècle à travers l'augmentation exponentielle de la vitesse de calcul à prix constant. Elle a permis la diffusion à grande échelle de systèmes très complexes améliorant notre quotidien : ordinateurs, téléphones portables, ABS... Les tubes à vide puis les transistors, d'abord discrets puis intégrés en grande quantité sur des « puces », ont permis cette croissance exponentielle.

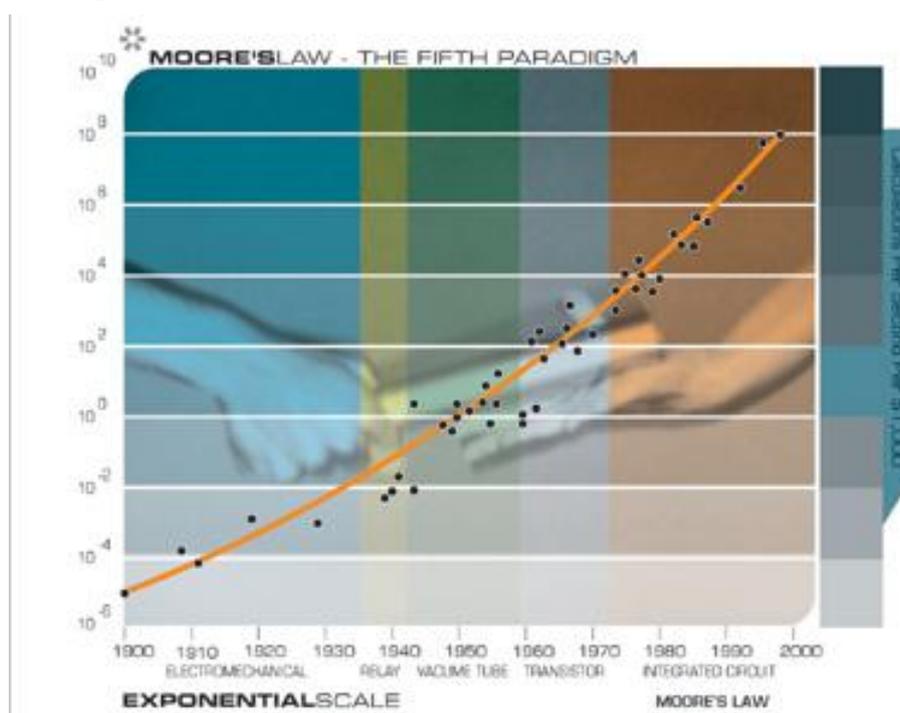


Figure 3 : Evolution de la vitesse de calcul à prix constant au cours du vingtième siècle.

A l'heure actuelle, les acteurs de cette accélération sont les transistors de type MOS (Métal Oxyde Semi-conducteur). Ce sont les briques de base des microprocesseurs et autres microcontrôleurs qui autorisent sur une surface de quelques centimètres carrés des calculs toujours plus complexes, à des prix toujours plus faibles.

Au cours de ce chapitre, nous allons, dans un premier temps, rappeler les principales caractéristiques physiques et électriques des transistors à effet de champ de type MOS. Nous dégagerons ainsi les motivations de la course effrénée à la miniaturisation des composants et

nous détaillerons les limites actuelles de cette miniaturisation, pour mettre en évidence la nécessité de réaliser, dans les régions source et drain des transistors, des jonctions ultra minces. L'analyse des méthodes utilisées pour optimiser le MOS conventionnel nous permettra de mieux saisir les compromis et les efforts de développement qu'il reste encore à fournir. Ceci nous mènera à décrire de nouvelles architectures basées sur les substrats SOI (Silicon On Insulator) et les alliages SiGe. Dans un deuxième temps, nous présenterons les techniques utilisées pour la réalisation de jonctions ultra-minces et en particulier l'implantation ionique. Dans l'étude de cette méthode de dopage, la plus répandue, nous mettrons l'accent sur les défauts ponctuels et étendus qui en résultent. Enfin, nous parlerons de l'intérêt des simulateurs de procédés technologiques et leur contribution dans le développement des nouvelles générations de dispositifs.

## II LE MOSFET : LIMITES ET SOLUTIONS A LA MINIATURISATION

Cette première section présente le transistor MOS, d'un point de vue fonctionnel et technologique. Elle introduit les expressions analytiques des différentes grandeurs caractéristiques du transistor MOS et détaille les leviers disponibles pour l'amélioration de leurs performances.

### II.1 Introduction au transistor MOS

Les bases théoriques nécessaires à la compréhension des travaux effectués sur les transistors MOS seront présentées dans ce paragraphe. Une brève description du fonctionnement d'un MOS et en particulier des deux régimes de faible et forte inversion sera donnée.

#### II.1.1 Principe de fonctionnement

Le transistor MOS est constitué de deux régions semi-conductrices fortement dopées appelées source et drain (de type N dans le cas d'un transistor NMOS et de type P pour un transistor PMOS) séparées par une région faiblement dopée et de type opposée (canal). Le principe du transistor MOS repose sur la possibilité de modifier localement la nature du dopage du canal (inversion) par un champ électrique (cf. Figure 4). Ce champ électrique est appliqué par l'électrode de commande appelée grille à travers un isolant (diélectrique de grille). Lorsque la tension appliquée sur la grille ( $V_{GS}$ ) est supérieure à une tension appelée tension de seuil ( $V_{th}$ ), des charges mobiles sont créés: électrons dans le cas d'un transistor NMOS, trous dans le cas d'un transistor PMOS. Ces charges mobiles constituent un canal de conduction entre la source et le drain. Lorsqu'une différence de potentiel  $V_{DS}$  est appliquée entre la source et le drain, les porteurs affluant de la source peuvent donc circuler dans le canal et sont collectés par le drain : le transistor est dit passant (régime de forte inversion). Lorsque la tension de grille n'est pas suffisante pour créer la couche d'inversion, le transistor est en régime de faible inversion. Ainsi de façon macroscopique, le transistor MOS est un dispositif régulant un courant entre deux électrodes par une commande en tension.

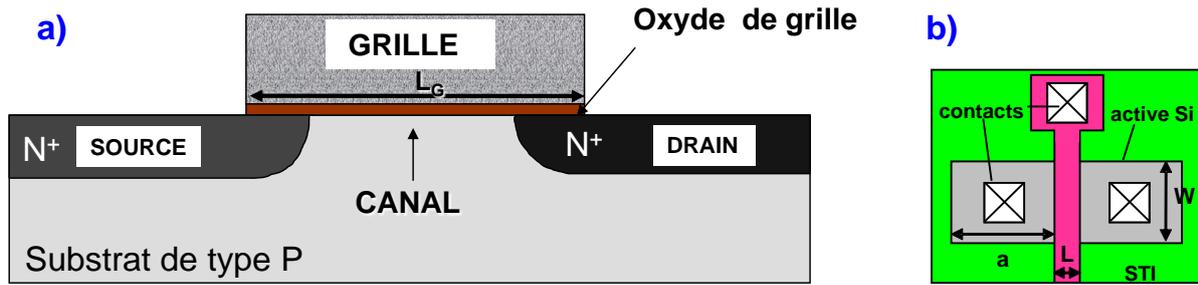


Figure 4: a) Structure générale d'un transistor MOS bulk conventionnel de type N et b) design associé et longueurs caractéristiques.

II.1.1.1 Le régime de forte inversion

Lorsque  $V_{GS} > V_{th}$ , la concentration de charges mobiles en surface devient très forte. On peut alors distinguer deux cas, selon la polarisation  $V_{DS}$ . Au même titre que  $V_{GS}$ ,  $V_{DS}$  va moduler la résistivité du canal en modulant l'effet de champ de la grille en chaque point du canal de conduction.

A tension de drain faible,  $V_{DS} < V_{GS} - V_{th}$ , l'ensemble du canal est inversé (Figure 5.a), l'effet de champ est quasiment uniforme, le canal se comporte alors comme une résistance. Le transistor fonctionne en régime linéaire. Un courant  $I_{DS}$  circule entre la source et le drain, et son expression simplifiée en régime linéaire peut s'exprimer sous la forme suivante [1] :

Équation 1 
$$I_{DS} = \frac{W}{L_G} \mu_{eff} C_{ox} (V_{GS} - V_{th} - \frac{1}{2} V_{DS}) V_{DS}$$

où  $C_{ox}$  est la capacité de l'oxyde grille,  $\mu_{eff}$  la mobilité des électrons (NMOS) ou des trous (PMOS) dans le canal de conduction,  $W$  et  $L_G$  la largeur et la longueur physique de la grille, et  $V_{GS}$ ,  $V_{th}$ ,  $V_{DS}$  sont respectivement, les tensions de grille, de seuil, et la tension entre la source et le drain.

Lorsque  $V_{DS} > V_{GS} - V_{th}$  la charge d'inversion devient nulle au drain lorsque la chute de potentiel s'annule au drain (Figure 5.b), pour  $V_{DS} = V_{GS} - V_{th} = V_P$ , le canal est dit "pincé" et le courant  $I_{DS}$  n'augmente plus avec  $V_{DS}$ . En augmentant  $V_{DS}$  au-delà de  $V_P$ , le point de pincement (point où la charge d'inversion devient nulle) se déplace vers la source (Figure 5.c). La charge d'inversion n'évoluant plus, le transistor est en régime de saturation. La valeur du courant de saturation  $I_{DSat}$  est alors donnée par l'expression suivante :

Équation 2 
$$I_{DSat} = \frac{1}{2} \mu_{eff} C_{ox} \frac{W}{L_G} (V_{GS} - V_{th})^2$$

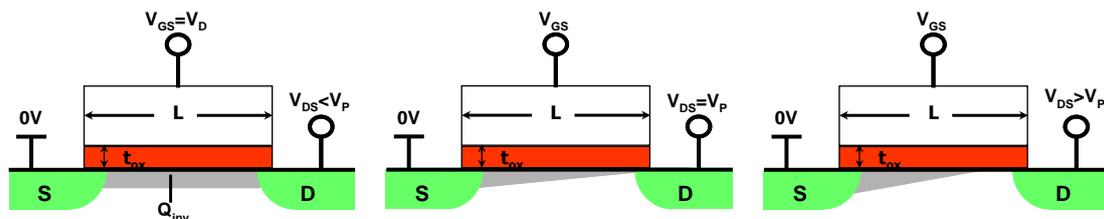


Figure 5 Différents régimes de conduction en fonction de la valeur de la tension de Drain  $V_{DS}$ . (a)  $V_{GS} < V_P$ , (b)  $V_{GS} = V_P$  (c)  $V_{GS} > V_P$  où  $V_P$  est la tension de pincement et est égale à  $V_{GS} - V_{th}$ .

En régime de fonctionnement normal, le drain et la grille sont polarisés à la tension d'alimentation  $V_{DD}$  et le calcul du courant de conduction  $I_{ON}$  se fait par l'Équation 3 :

$$\text{Équation 3} \quad I_{ON} = \frac{1}{2} \cdot \mu_{eff} \cdot C_{ox} \cdot \frac{W}{L_G} \cdot (V_{DD} - V_{th})^2$$

avec  $V_{DD}$  et  $V_{th}$  étant fixés pour chaque nœud technologique. L'augmentation du courant  $I_{ON}$  est recherché par la mobilité des porteurs (canal SiGe par exemple), en augmentant  $C_{ox}$  (i.e. en réduisant l'épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$ ) et en diminuant la longueur du canal  $L_G$ , et ce pour une largeur de transistor  $W$  donnée.

### II.1.1.2 Le régime de faible inversion

Dans le cas idéale, lorsque  $V_{GS} < V_{th}$  la charge dans le canal et le courant de drain  $I_{DS}$  devront s'annuler. Toutefois, une faible concentration de porteurs est toujours présente dans le canal pour toutes valeurs de  $V_{GS}$  comprises entre 0 et  $V_{th}$  : c'est le régime de faible inversion.

A  $V_{GS}=0$ , un courant de fuite noté  $I_{OFF}$  est donc inéluctable :

$$\text{Équation 4} \quad I_{OFF} = I_{th} \exp\left(\frac{-V_{th} \ln 10}{S}\right) \quad [1]$$

où  $I_{th}$  est le courant à la tension de seuil  $V_{GS}=V_{th}$ , et  $S$  est la pente du courant sous le seuil correspondant à l'augmentation nécessaire de la tension  $V_{GS}$  pour accroître le courant d'une décade et exprimée en V/dec. Cette grandeur permet d'évaluer la capacité de commutation du transistor à passer d'un régime de faible inversion à un régime de forte inversion.  $S$  doit être la plus faible possible afin d'assurer un courant de fuite minimal pour une tension de seuil  $V_{th}$  fixée.

Une caractéristique du courant entre la source et le drain  $\text{Log}(I_{DS})$  en fonction de la tension de grille  $V_{GS}$  d'un transistor NMOS est présentée sur la Figure 6.

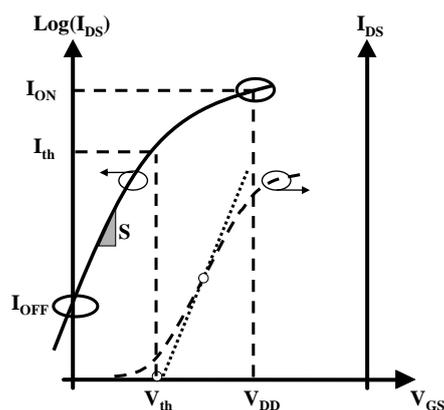


Figure 6 : Caractéristique du courant entre la source et le drain en fonction de la tension appliquée à la grille.

Pour conclure cette partie, notons que les figures de mérite des performances électriques d'un transistor MOS sont données, à tension d'alimentation  $V_{DD}$  fixée, par le courant de fuite  $I_{OFF}$  et le courant de saturation  $I_{ON}$ . L'optimisation d'un dispositif consiste au premier ordre à réduire  $I_{OFF}$  à un niveau acceptable et, dans le même temps, à augmenter  $I_{ON}$  au maximum pour augmenter les performances.

## II.2 Fin du CMOS conventionnel

### II.2.1 Loi d'échelle

Le monde de la microélectronique est en perpétuelle recherche d'améliorations de la rapidité et de la densité d'intégration de ses composants élémentaires. La réduction de la taille du composant, c'est-à-dire de sa longueur de grille  $L_G$ , le rend intrinsèquement plus rapide car le temps de transit des porteurs dans le canal diminue :  $t = L_G^2 / (\mu_{eff} \cdot V_{DS})$  à faible  $V_{DS}$ . Cette accélération de la réponse du transistor se répercute sur les circuits logiques dérivés.

Cette miniaturisation doit être effectuée sans dégrader les caractéristiques du transistor. Pour cela, il faut adapter les paramètres géométriques (épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$ , largeur de canal  $W$ ...), électriques (tension d'alimentation  $V_{DD}$ ...), et physiques (dopages) en fonction de la longueur de grille visée. Ces paramètres de dimensionnement suivent des lois d'échelle proposées par Dennard [2]. Ces règles reposent sur un facteur de réduction  $k$  qui permet de passer d'une génération technologique à une autre en conservant un champ électrique constant. En effet, elles prévoient la conservation de l'intégrité électrostatique du transistor (conservation des champs électrostatiques internes). La réduction des dimensions du dispositif ( $L_G$ ,  $W$ ,  $T_{ox}$ , profondeur de jonction  $X_j$ ) par un facteur  $k$  est accompagnée par une réduction de la tension d'alimentation et une augmentation de la concentration de dopants dans le canal par le même facteur  $k$ .

L'utilisation de transistors dimensionnés selon ces lois d'échelle a permis, entre autres, une augmentation exponentielle du nombre de transistors par puce au cours du temps, nommée communément loi de Moore. La Figure 7 illustre cette évolution à travers les microprocesseurs d'Intel.

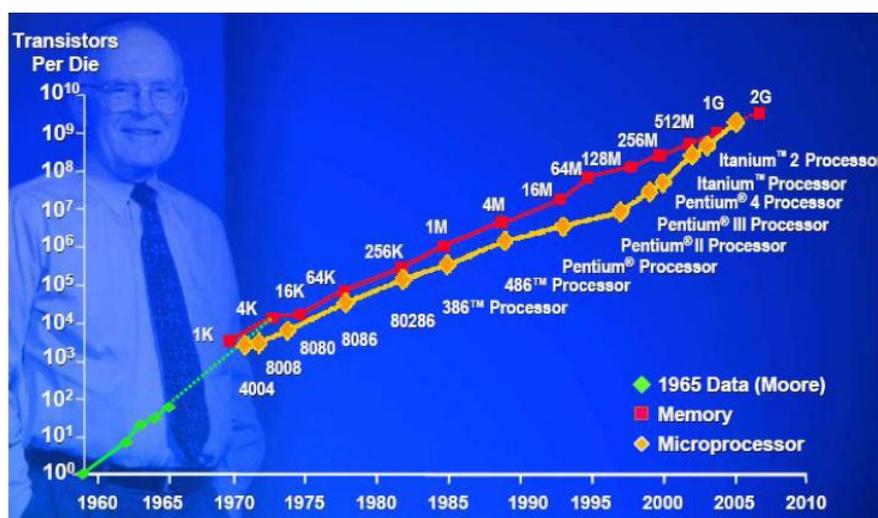


Figure 7 : Nombre de transistors par puce en fonction des années de production pour les processeurs (losanges oranges) et les mémoires (carrés rouges). Cette évolution est connue sous le nom de Loi de Moore. Gordon Moore avait en effet prédit dans les années 60 cette augmentation exponentielle (losanges verts). [source [www.intel.com](http://www.intel.com)]

II.2.2 La « Roadmap »

Pour suivre la loi de Moore, l'évolution des transistors MOSFET dans cette course à la miniaturisation, est encadrée par des feuilles de route, les « roadmaps » de l'ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductors) qui doivent orienter les recherches. Un extrait de la feuille de route 2007 (mise à jour en 2008), concernant les applications hautes performances (symbole bleu) et les applications basses consommations (symboles rouge et vert), est présenté dans le Tableau 1. Pour pouvoir continuer cette course à la miniaturisation, il devient nécessaire d'introduire de nouveaux procédés et d'envisager de nouvelles architectures. En effet, si l'on regarde de plus près les spécifications de l'ITRS pour les applications hautes performances par exemple (Tableau 1, symbole bleu), cette miniaturisation va trouver ces limites à partir de 2013.

Années	2009	2010	2012	2013	2015	2016	2018	2019	2021	2022
Noeuds		45		32		22		16		11
$L_G$ (nm)	27	24	20	18	15	14	11,7	10,7	8,9	8,1
EOT (Å)	10	9,5	7,5	6,5	5,3	5	5	5	4,5	3,5
$V_{DD}$ (V)	1	1	0,9	0,9	0,9	0,8	0,7	0,7	0,65	0,65
$J_{G,max}$ (A/cm <sup>2</sup> )	650	830	1000	1100	1300	1400	1700	1900	2200	2500
$I_{ON}$ (µA/µm)	1639	1807	1762	2109	2030	2627	2804	2768	2799	2786
$I_{OFF}$ (µA/µm)	0,7	0,64	0,68	0,56	0,6	0,44	0,45	0,47	0,62	0,6
$R_{acc}$ (Ω.µm <sup>2</sup> )	200	180	180	170	160	155	145	145	135	135

Tableau 1 : Besoins pour les circuits à Logique Haute Performance (ITRS 2008 [3]). En gris, des solutions existent et sont en voie d'optimisation, en jaune les solutions sont connues et en rouge, aucune solution n'inconnue. (Blanc : limite de la réduction d'échelle pour la technologie sur substrat massif, hachuré pointillé).

Comme on peut le constater sur l'extrait de l'ITRS du Tableau 1, la loi d'échelle indiquée au paragraphe II.2.1 laissant invariants les champs électriques, n'est pas suivie pour des longueurs de grille submicroniques : par exemple  $V_{DD}/T_{ox}$  n'est pas constant (on a toujours  $T_{ox} \propto 1/k$  mais  $V_{DD} \propto \alpha/k$  avec  $k > \alpha > 1$  [4]...). La limitation de la réduction des tensions d'alimentation  $V_{DD}$  est importante car une faible  $V_{DD}$  ne permet pas de garantir des marges de bruit suffisantes dans les circuits. Par conséquent, les champs électriques présents dans le transistor augmentent avec la miniaturisation et certaines caractéristiques des transistors se dégradent. Ces dégradations typiques sont appelées "effets de canal court".

II.2.3 Limites : L'effet canal court (SCE) et l'effet drain (DIBL)

Dans le cas d'un transistor long, la charge de déplétion dans le canal est majoritairement contrôlée par la grille, le reste étant assuré par les jonctions source-substrat et drain-substrat. Lorsque la dimension de la grille diminue, l'influence de la zone de charge d'espace des jonctions augmente : c'est l'effet géométrique SCE (Short Channel Effect). L'augmentation de la polarisation du drain  $V_{DS}$  entraîne l'extension de la zone de charge d'espace (ZCE) des jonctions source-canal et canal-drain dans le canal et réduit la longueur effective du canal ( $L_{eff}$ ) d'une quantité  $W_{ZCE}$  (Figure 8.a) ce qui contribue aussi à faire chuter la tension de seuil (l'abaissement de la barrière de potentiel) : c'est l'effet électrique DIBL (Drain Induced Barrier Lowering). Ces deux phénomènes ont la même incidence, ils abaissent la barrière de potentiel que représente le canal entre les zones de source et de drain comme illustré sur la Figure 8.b. Le premier effet (SCE) se traduit par une chute de la tension de seuil du dispositif à faible tension d'alimentation, entre un transistor long et un transistor court, Figure 9.a. Le deuxième se caractérise par une chute supplémentaire de la tension de seuil due à l'influence croissante du champ électrique latéral sur le potentiel du canal, autrement dit de la polarisation du drain  $V_{DS}$ , Figure 9.b. Ces deux effets se traduisent par une diminution de la tension de seuil  $V_{th}$  pour les petits dispositifs et un décalage de la courbe  $I_{DS}(V_{GS})$  vers les tensions de seuil les plus basses lorsqu'on diminue la taille de la grille, d'où une détérioration du contrôle de la densité de charges mobiles dans le canal par la grille.

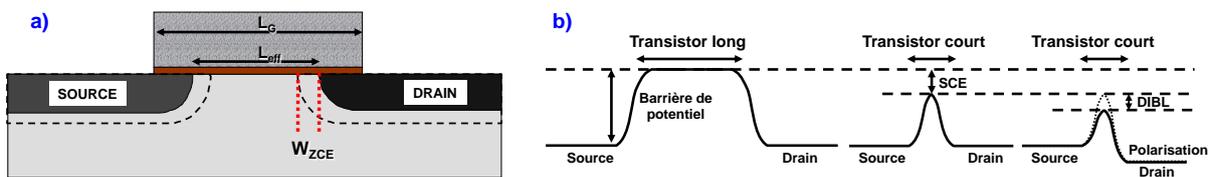


Figure 8 : a) Schéma de la réduction de la longueur du canal  $L_G$  à cause de la zone de charge d'espace d'épaisseur  $W_{ZCE}$  aux jonctions source-canal et canal-drain. b) Illustration de l'effet de la réduction de la longueur de grille sur la barrière de potentiel. Lorsque les zones de charges d'espace (ZCE) des jonctions source/substrat et drain/substrat se recouvrent, le couplage électrostatique augmente entre source et drain et abaisse la barrière (SCE+DIBL). La grille perd ainsi une partie du contrôle [5].

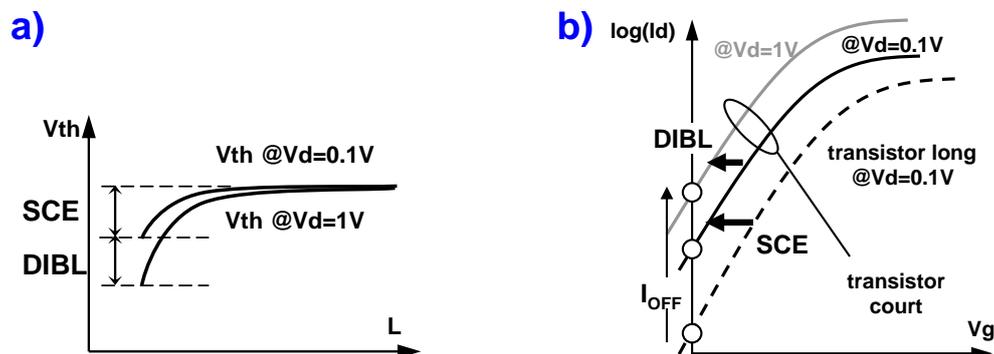


Figure 9 : Impacts du SCE et du DIBL sur a) la tension de seuil et b) sur les courants de fuites.

Avec la diminution de la longueur de grille  $L_G$ , ces deux effets deviennent particulièrement critiques pour les performances des transistors. Les effets canaux courts SCE et DIBL constituent une limitation importante pour la miniaturisation des technologies, car ils engendrent, via une réduction de  $V_{th}$ , une augmentation incontrôlée du  $I_{OFF}$ . En effet, la zone

de charges d'espace des jonctions source-substrat et drain-substrat s'étend essentiellement vers la zone la moins dopée et induit des effets canaux courts. Par conséquent, une solution pour maîtriser ces effets consiste à réduire la zone de charges d'espace de ces jonctions en contrôlant le dopage des zones source et drain [6]. Cependant, la résistivité de ces régions augmente lorsque leur dopage diminue et pour éviter la formation d'une résistance trop forte, une petite zone faiblement dopée appelée extension (ou LDD pour "Lightly Doped Drain"), est créée entre le canal et les zones de source et de drain. Ceci a été possible grâce à de nombreuses innovations technologiques, en particulier l'introduction d'espaceurs qui permet la formation auto-alignée des extensions à proximité du canal (Figure 10).

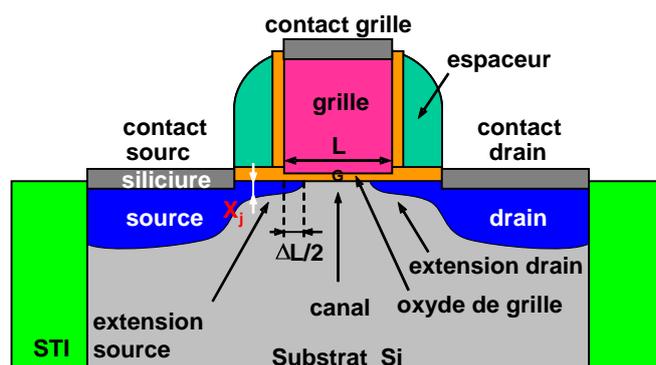


Figure 10 : schéma illustrant le principe d'utilisation d'espaceurs pour lutter contre les effets canaux courts. L'implantation LDD du même type de dopage que la source et el drain permet de limiter les effets SCE.

### II.2.4 Resistances séries

La résistance série ( $R_{série}$ ) d'un transistor MOS est la résistance que voient les porteurs de charge pendant leur parcours entre la source et le drain indépendamment de la tension de grille et donc de la résistance de canal. La Figure 11 décrit la décomposition de la résistance série ( $R_{série}$ ). La minimisation de cette résistance devient particulièrement importante pour accroître les performances des dispositifs. En effet, le courant circulant entre la source et le drain va être directement affecté par ces résistances parasites (Figure 11). L'augmentation du courant  $I_{ON}$  en régime de saturation passe donc par une diminution de  $R_{série}$ .

Équation 5 
$$R_{série} = R_{cont} + R_{S/D} + R_{ext} + R_{recouv}$$

Cette résistance parasite peut être décomposée selon 4 composantes principales :

- $R_{recouv}$  (résistance de recouvrement), qui correspond à la résistance des extensions de Source/Drain situées sous la grille et qui ne font pas partie du canal de conduction.
- $R_{ext}$  (résistance d'extension de Source/Drain), qui correspond à la résistance des extensions de Source/Drain localisée sous les espaceurs de Source/Drain.
- $R_{S/D}$  (résistance de Source/Drain), qui correspond à la résistance de la région des Source/Drain.
- $R_{cont}$  (résistance de contact), qui correspond à la résistance de l'interface silicium-siliciure.

En raison de la faible résistive de la zone Source/Drain (dose implantée plus élevée) que celle des extensions, on peut négliger la composante  $R_{S/D}$  devant  $R_{ext}$ .

Dans le cas de jonctions uniformes et très abruptes, la résistance de couche,  $R_s$ , de l'extension de Source/Drain s'écrit :

$$R_s = \frac{1}{qN_j\mu X_j} [\Omega.\mu\text{m}]$$

où  $N_j$  est le dopage actif et  $X_j$ , la profondeur de l'extension (Figure 10.a).

Ainsi, la diminution des résistances séries du transistor implique soit une diminution de la longueur de l'extension de Source/Drain, soit la réduction de sa résistance.

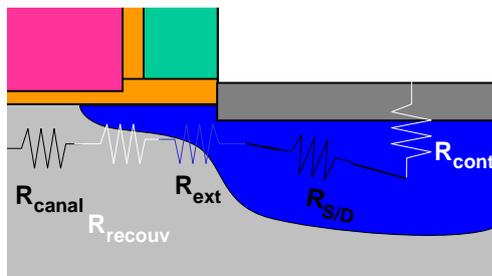


Figure 11 : Schéma de la décomposition de la résistance totale en 5 résistances séries (les résistances d'interconnexion ne sont pas représentées).

Les jonctions ainsi fabriquées doivent être à la fois fines ( $X_j$  faible) pour éviter la génération d'effets parasites (effets canaux courts) et suffisamment dopées (forte dose) pour diminuer les résistances séries du transistor afin de garantir une valeur satisfaisante de  $I_{ON}$ . Cependant, comme nous le verrons par la suite, les moyens utilisés pour améliorer  $R_s$  peuvent dégrader le contrôle des effets canaux courts.

### II.2.5 Fuites

L'amélioration des performances des transistors est faite aussi par le contrôle du courant en mode bloqué ( $I_{OFF}$ ) qui caractérise les fuites et donc la consommation statique. Ce paramètre est de plus en plus problématique comme peut en témoigner la Figure 12.a où une importante augmentation du courant de fuite est menée avec la loi de Moore.

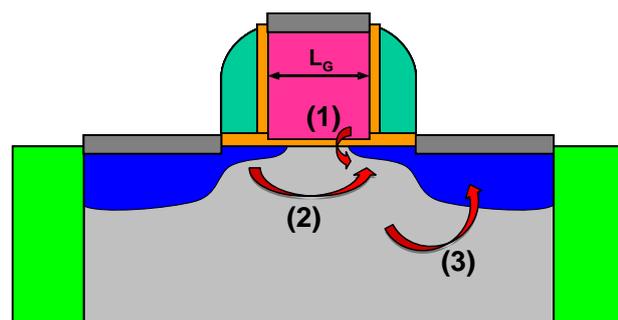
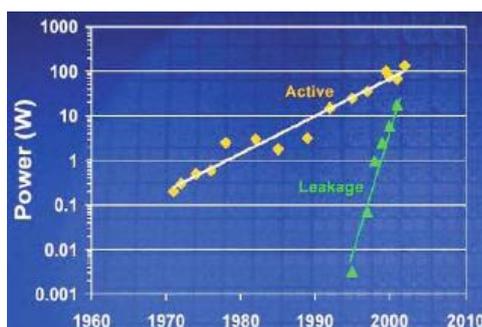


Figure 12 : a) Evolution des performances et des fuites exprimées en terme de puissance des processeurs au cours du temps (source : Intel). b) Schéma récapitulatif des différents phénomènes de fuites dans un transistor MOS qui contribuent au courant de fuite total  $I_{OFF}$ .

La Figure 12.b résume les différentes contributions du courant de fuite total dans un transistor. Il est décomposable en 3 parties principales :

- (1) le courant de fuite de grille par effet tunnel.
- (2) le courant direct entre la source et le drain qui est fortement dépendant des jonctions latérales et de la diffusion des dopants sous la grille.

(3) le courant de fuite de jonction aussi appelé courant de bulk, directement dépendant de la jonction drain-substrat.

### II.3 Solutions conventionnelles : LDD, poches et halo

Pour contrer les effets canaux courts, différentes stratégies sont mises en place au niveau des composants : utilisation d'espèces chimiques plus ou moins diffusantes, limitation du bilan thermique, ajout d'implantations. Ce dernier point est particulièrement intéressant car il permet d'augmenter le dopage canal moyen lorsque la longueur de grille diminue. En effet, en plus des implantations LDD que nous avons citées plus haut, l'implantation de poches et halos est une implantation de la même espèce que celle implantée dans le canal comme montré dans la Figure 13.a. Cette implantation est faite après la définition des grilles sous un angle afin de permettre une partie des dopants de se retrouver de part et d'autre de la grille. Le canal quant à lui n'est pas implanté car masqué par la grille. A l'origine, l'architecture LDD de la jonction permettait notamment de réduire le champ électrique au niveau du drain [7]. Actuellement, les zones LDD (ou extensions) sont formées par implantation ionique faible énergie (ULE) suivi d'un recuit d'activation haute température ( $>1000^{\circ}\text{C}$ ) très court ("spike",  $< 5\text{sec.}$ ). L'objectif est de former des extensions (i) fortement dopées pour réduire les résistances d'accès, (ii) les plus fines possibles pour limiter les effets canaux courts et la pénétration des zones source-drain sous la grille.

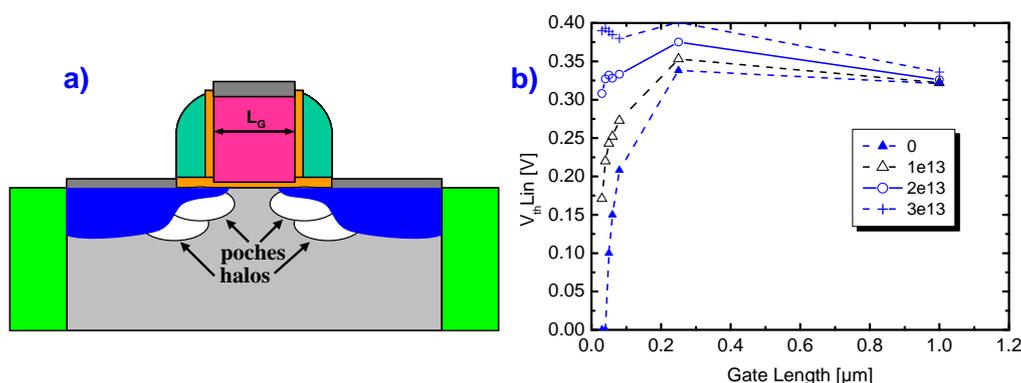


Figure 13 : a) Implantations des poches et halos. Ces implantations augmentent le dopage moyen du canal uniquement sur transistors courts. b) Effet de l'implantation des poches sur la tension de seuil. Plus la longueur de grille diminue et plus le dopage moyen du canal augmente, contrant ainsi les effets canaux courts (chute modérée de la tension de seuil) (résultats obtenus avec [Sentaurus Process A-2008.09]).

L'implantation de poches permet de sur-doper le canal à proximité des jonctions et donc de réduire la zone de déplétion créée par les zones source et drain. Les effets de canaux courts sont alors nettement améliorés mais ce sur-dopage du canal provoque une dégradation de la mobilité des porteurs [8].

### II.4 Dispositifs émergents

Les solutions conventionnelles ne sont plus adaptées pour contrer les effets de canal court des technologies de dernière génération. En effet, pour viser des longueurs de grille de moins de 25 nm, il faudrait réaliser des oxydes de moins de 1 nm, très favorables aux fuites par effet tunnel, et des dopages progressifs entre le canal et la source avec des gradients de dopants difficilement réalisables. Le pic de dopage doit atteindre  $10^{19}\text{at.cm}^{-3}$  à une profondeur de 10

nm tout en conservant un dopage de canal raisonnable d'environ  $10^{17}$  at.cm<sup>-3</sup>. Comme suggéré par l'extrait de l'ITRS du Tableau 1, le monde de la microélectronique est actuellement face à des problèmes bien plus complexes qu'auparavant. Pour poursuivre la miniaturisation, il faudra avoir recours à des alternatives au MOS massif. L'introduction de plusieurs innovations par nœud technologique constituera un défi majeur mais indispensable [9].

#### II.4.1 Le substrat

Par opposition aux substrats massifs, qui sont souvent sous forme de plaque de silicium dopée uniformément, il existe des substrats dits "isolants" composés d'un empilement de trois couches : un oxyde, dit "enterré" intercalé entre deux couches de silicium cristallin : la zone active, le film superficiel de silicium, et le substrat.

Le transistor fabriqué sur ce substrat SOI (Silicon On Insulator) [10, 11, 12, 13, 14] se distingue donc du transistor massif conventionnel (Figure I. 26.a) par cette couche d'oxyde enterrée : le BOX (Buried OXide). Lorsque l'épaisseur du film de silicium  $T_{Si}$  constituant le canal de conduction est grande, la zone de désertion sous le canal de conduction ne s'étend pas suffisamment en profondeur pour atteindre l'oxyde enterré. On parle de dispositifs partiellement désertés (PD-SOI pour Partially Depleted SOI) (Figure 14.b et Figure 14.d). Ils présentent des propriétés proches du transistor conventionnel et ils permettent de réduire la profondeur des jonctions grâce à la présence de l'interface Si/BOX [15, 16]. En revanche, lorsque l'on réduit l'épaisseur du film de silicium, cette couche de désertion peut atteindre le BOX. On parle alors de transistors totalement désertés (FD-SOI pour Fully Depleted SOI) (Figure 14.c). Le film mince de silicium, en limitant physiquement la profondeur des jonctions source/drain et la profondeur de déplétion  $T_{DEP}$ , permet un meilleur contrôle électrostatique de la grille sur le canal. Etant moins sensibles que les transistors massifs aux effets de canal court, il n'est pas nécessaire de doper fortement le canal et il est possible d'ajuster la tension de seuil à une valeur plus petite. Ainsi, évitant une perte de mobilité, et grâce à la réduction du DIBL et de la pente sous le seuil améliorée, on obtient une augmentation de  $V_{DD}-V_{th}$  avec la même tension d'alimentation  $V_{DD}$ .

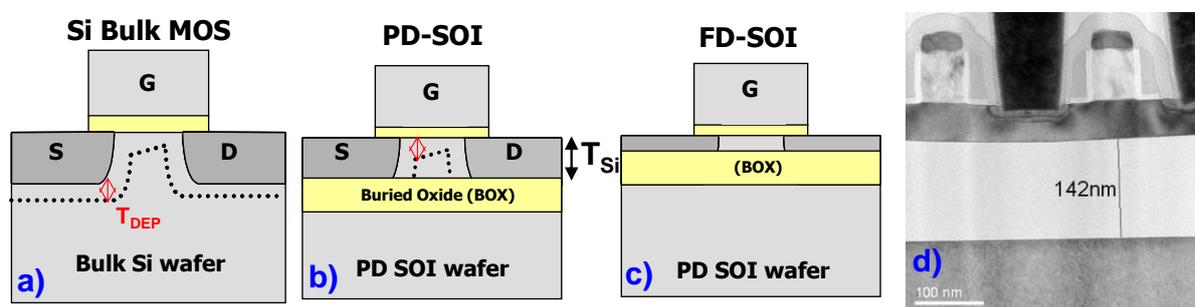


Figure 14 : Représentation schématique des structures transistors MOS sur Bulk et SOI partiellement et totalement dépeuplés. d) Image TEM (Transmission Electron Microscopy) d'un transistor PD-SOI.

Le fait que le SOI soit partiellement ou entièrement dépeuplé dépend essentiellement de l'extension de la couche de désertion dans le film de silicium. La profondeur  $t_{Si}$  de la zone de désertion dans le film dépendra du dopage du film [17].

L'utilisation de substrats SOI présente aussi d'autres avantages [9] tels qu'un gain en vitesse des circuits grâce à une faible capacité de jonction; une faible fuite de jonction ou encore un design optimisé par rapport aux transistors massifs. Dans un transistor MOS massif, le substrat de silicium est le siège d'un courant de fuite dû au perçement volumique. Dans un MOS sur SOI, en lieu et place de cette zone de perçement, on trouve un isolant : l'oxyde enterré [18].

La diminution des surfaces des jonctions caisson-canal, par rapport à celles du transistor massif équivalent, minimise les impédances associées. En outre, si l'on utilise des zones actives non dopées, l'épaisseur de la zone de charge d'espace sous l'oxyde de grille  $T_{DEP}$  est très grande. Cela réduit considérablement la capacité surfacique  $C_{ZCE}$ . De plus, pour de faibles épaisseurs  $T_{Si}$  inférieures à  $T_{DEP}$ , cas du FD-SOI, la zone active peut être complètement désertée dans la plage normale de fonctionnement. L'épaisseur de la zone de charge d'espace reste constante ; Il n'y a pas de variation  $\Delta Q_{ZCE}$  de la charge de la ZCE et donc la capacité  $C_{ZCE}$  est quasi-nulle.

Cependant, cette approche présente aussi quelques inconvénients [9]. En effet, les fluctuations d'épaisseurs du film de silicium peuvent impacter les caractéristiques électriques des transistors. La tension de seuil des dispositifs n'est plus contrôlée par la profondeur de désertion mais par l'épaisseur de silicium  $T_{Si}$ . De plus, les fluctuations de dopage associées aux films minces impliquent l'utilisation de films non dopés. Il convient alors d'ajuster la tension de seuil par le travail de sortie du matériau de grille. Pour ces dispositifs, l'intégration d'une grille métallique avec un travail de sortie proche du milieu de la bande interdite du silicium (mid-gap) est préférable.

Malheureusement, la relativement faible profondeur des caissons source et drain dans les transistors MOS sur SOI peut accroître dramatiquement la valeur des résistances d'accès. En outre, ces dispositifs peuvent être le siège d'effets d'échauffement importants dus à l'importance de la résistance thermique de l'oxyde enterré [19]. Pour de forts niveaux de dissipation de puissance, ce phénomène entraîne une diminution de la mobilité effective des porteurs et donc une diminution de la conductance de drain qui peut s'avérer préjudiciable.

## II.4.2 Le canal

### II.4.2.1 Principe

Dans le cadre de la technologie CMOS, on cherche à augmenter le courant  $I_{ON}$  à l'état passant via l'augmentation de la mobilité  $\mu_{eff}$  des porteurs dans le canal. En effet, nous avons vu que le calcul du courant de conduction  $I_{ON}$  se fait par l'Équation 3 :

$$I_{ON} = \frac{1}{2} \cdot \mu_{eff} \cdot C_{ox} \cdot \frac{W}{L_G} \cdot V_{DD}^2$$

Cette équation montre que le courant de conduction  $I_{ON}$  est proportionnel à la mobilité des porteurs. Par conséquent, l'augmentation de la mobilité se traduit par un gain en performances. Pour ce faire, on peut soit réduire le dopage du canal, soit introduire des

contraintes dans le canal (que ce soit en Si ou SiGe) [20]. On peut aussi jouer sur la direction cristallographique de circulation du courant [21].

#### II.4.2.2 Contrainte uniaxiale, biaxiale, tensile, compressive

La mobilité comme toutes les propriétés électroniques des semi-conducteurs dépend de la périodicité des atomes [22]. En modifiant celle-ci, la mobilité est impactée. Le principe est d'appliquer une contrainte (stress) sur le canal. La maille est alors déformée (strain), ce qui modifie la mobilité des porteurs dans ces matériaux.

Les contraintes et les déformations s'expriment sous forme de tenseurs. Grâce aux symétries du cristal de silicium, il est possible de réduire le tenseur des contraintes à deux cas principaux:

- la contrainte est dite uniaxiale lorsqu'elle est appliquée uniquement dans la direction source/drain.
- la contrainte est dite biaxiale lorsque elle appliquée dans le plan du transistor.

De plus, la contrainte sera dite de compression si elle tend à réduire le paramètre de maille du cristal de silicium, de tension dans le cas contraire.

#### II.4.2.3 Méthodes technologiques pour obtenir la contrainte

Récemment, l'introduction d'une contrainte dans le canal a permis d'améliorer le courant  $I_{ON}$  autrement que par une réduction de la longueur de grille.

Pour un transistor NMOS, une contrainte en tension uni-axiale selon la direction du canal est bénéfique. Elle est généralement induite par un ou plusieurs films "tensiles" de nitrure déposés par-dessus la grille à la fin du procédé de fabrication (par exemple le CESL « Contact Etch Stop Layer », initialement utilisé pour la gravure des contacts) [23], [24], [25] (Figure 15.a). Il est également possible de déposer une couche contrainte avant le recuit de recristallisation de la grille. Ceci permet de transférer la contrainte au canal via la grille. On parle de SMT (Stress Memorization Technique) [26]. Le cumul de ces innovations technologiques et autres optimisations du procédé de fabrication permet de gagner jusqu'à 20% sur les performances en  $I_{ON}$  [27].

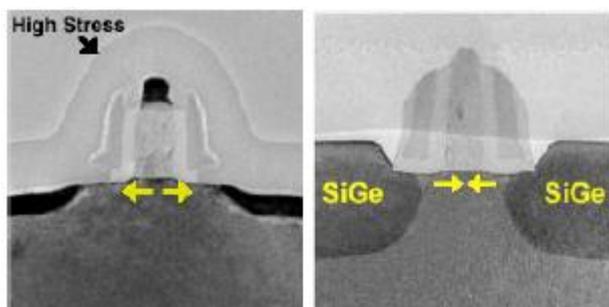


Figure 15 : Images TEM d'un transistor NMOS montrant le film tensile de nitrure CESL et d'un transistor PMOS montrant des zones source-drain en SiGe (Intel technology [28]).

Pour un transistor PMOS en revanche, le transport est favorisé par une contrainte en compression uni-axiale selon la direction du canal. Elle est actuellement induite par un film CESL compressif ou par la formation de source et drain en SiGe par gravure à l'aplomb des espaceurs puis épitaxie (gains en  $I_{ON}$  : 20-38% [28], [29], [30]) (Figure 15.b). Il est donc

nécessaire d'envisager des architectures duales pour améliorer le  $I_{ON}$  à la fois côté NMOS et côté PMOS [24, 25, 31, 32].

Enfin, la structure du canal peut être modifiée et le SiGe qui est le matériau le plus prometteur pour l'ingénierie de canal. En effet, le SiGe contraint en tension permet d'obtenir une plus grande mobilité des électrons pour les transistors NMOS alors que, s'il est contraint en compression, il permet un gain de mobilité des trous dans le canal pour les PMOS à canal long [33, 34, 35]. L'explication physique de ce gain est, d'une part que la masse effective des trous dans ce matériau est plus faible que dans le silicium non contraint, et d'autre part que les maxima des bandes de valence correspondant aux trous lourds et légers ne sont plus confondus, contrairement au silicium non contraint. Cependant, pour intégrer ce matériau au process MOS, il faut faire face à plusieurs problèmes majeurs en particulier le bilan thermique du procédé complet qui doit être adapté de telle sorte que la contrainte du SiGe soit maintenue.

## II.5 Bilan partiel

L'ensemble des phénomènes indésirables dans un transistor, discutées dans les sections précédentes, nous permet donc de définir des figures de mérite pour les jonctions S/D est, plus en général, pour le MOS. Elles sont présentées dans les sections suivantes.

### II.5.1 Figure de mérite de la jonction

Il faut considérer la jonction sous deux approches assez différentes.

D'abord une approche purement "matériau". Bien qu'elle soit incomplète pour la caractériser parfaitement, la figure de mérite d'une jonction est un graphique de la résistance de couche  $R_s$  en fonction de la profondeur de jonction  $X_j$ . Les études portent donc sur la réduction du rapport  $R_s/X_j$ . La Figure 16 représente la tendance à laquelle doit répondre la jonction pour avoir un bon rapport  $R_s/X_j$ , comme le prévoit de l'ITRS pour les transistors de longueurs de grille de 32 et 45 nm.

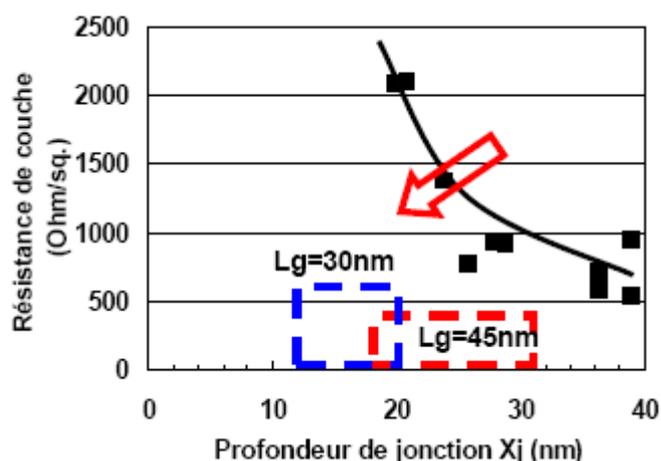


Figure 16 : Figure de mérite  $R_s/X_j$  d'une jonction de résistance de couche  $R_s$  en fonction de la profondeur de jonction  $X_j$  pour une jonction P+N et les spécifications de l'ITRS pour les longueurs de grille 30 et 45 nm

D'autre part, si la jonction est considérée pour l'intégration dans les transistors CMOS, nous avons vu précédemment dans le modèle de résistance série que la résistance de couche de la jonction, qui s'approche fortement de la résistance d'extension, a un impact très limité sur les

performances électriques des transistors NMOS et PMOS. Par contre, les effets canal court sont liés de manière très forte à la profondeur de jonction et à la longueur électrique effective. Donc pour les transistors CMOS, la profondeur de jonction et la diffusion latérale de la jonction sont des paramètres plus importants que la résistance de couche. De plus, les courants de fuites des jonctions sont extrêmement importants, surtout pour les applications basse-consommation.

Une figure de mérite qui représente tous ces aspects de l'intégration dans les transistors CMOS serait trop complexe. Il serait cependant judicieux de proposer une figure de mérite représentant le courant à l'état passant en fonction d'un paramètre électrique représentant la profondeur de jonction. Ainsi, un graphe de courant à l'état passant en fonction de l'abaissement de la barrière de potentiel par la polarisation du drain semble être une bonne approche pour bien faire apparaître l'impact de la résistance de couche en fonction de la profondeur de jonction.

### II.5.2 Figures de mérite du transistor MOS

La figure de mérite principale d'un transistor MOS représente un graphique du courant à l'état passant  $I_{ON}$  en fonction du courant de fuite total  $I_{OFF}$ . La seconde figure de mérite du transistor MOS représente sa sensibilité aux effets canal court. C'est un bon indicateur de la qualité du contrôle du canal par la tension appliquée sur la grille. Ces deux figures de mérite principales sont illustrées par un exemple dans la Figure 17.

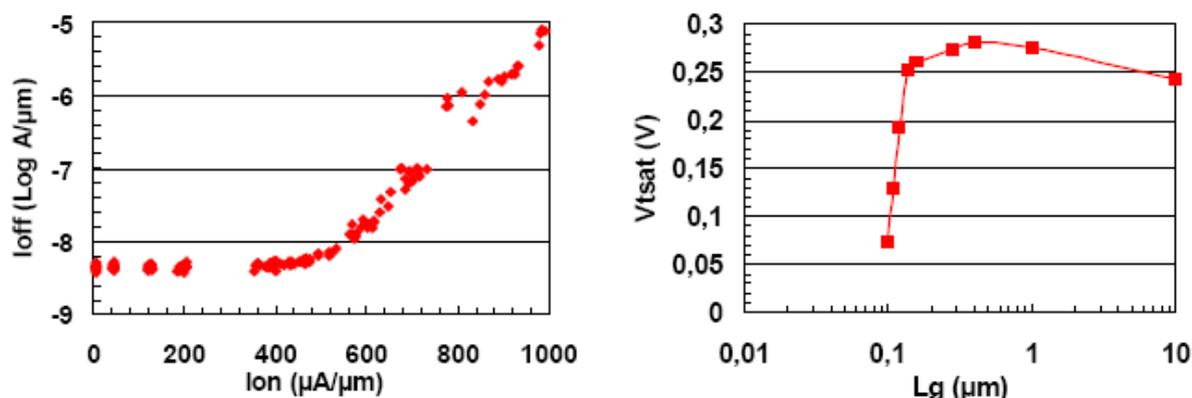


Figure 17 : Figures de mérite principales d'un transistor MOS. Le graphe  $I_{ON}/I_{OFF}$  représente le courant à l'état passant dans le transistor pour différentes géométries de grille et le graphe de la tension de seuil en fonction de la longueur de grille représente les effets SCE.

### III TECHNOLOGIES : PROCÉDES DE FABRICATION DES JONCTIONS ULTRAFINES

Dans la partie précédente, le transistor MOS réel a été décrit, ainsi que certains problèmes associés à la réduction des dimensions et notamment les effets canal court SCE et DIBL. Par des considérations géométriques, les expressions de ces effets parasites à faible longueur de grille SCE et DIBL peuvent être décrites par les formules ci-dessous [36]:

$$SCE = \left(1 + \frac{X_j^2}{L_G^2}\right) \cdot \frac{\epsilon_{Si}}{\epsilon_{ox}} \cdot \frac{T_{ox}}{L_G^2} \cdot \frac{T_{dep}}{L_G} \cdot \phi_d \text{ et } DIBL = \left(1 + \frac{X_j^2}{L_G^2}\right) \cdot \frac{\epsilon_{Si}}{\epsilon_{ox}} \cdot \frac{T_{ox}}{L_G^2} \cdot T_{dep} \cdot V_{DS}$$

où SCE est l'effet canal court (exprimé en V), DIBL l'effet d'abaissement de la barrière de potentiel par le drain (exprimé en V),  $\phi_d$  la hauteur de la barrière dans le canal,  $T_{dep}$  la profondeur de déplétion de la grille coté poly-silicium,  $L_G$  la longueur électrique effective,  $C_{ox}$  capacité d'oxyde et  $\epsilon_{Si}$  constante diélectrique du Silicium.

Ces effets sont fortement influencés par la de profondeur de jonction  $X_j$  et pour les contrôler, il est donc nécessaire de maîtriser  $X_j$  pour de petites longueurs de grille lors de la fabrication du transistor MOS. Ces jonctions peu profondes sont appelées jonctions fines ou ultrafines.

Dans cette section, nous allons exposer les techniques classiques de fabrication d'une jonction, en précisant le rôle, les mécanismes physiques impliqués, les limites et les inconvénients des étapes d'implantation et de recuit, pour en arriver à la conclusion que les spécifications ITRS des jonctions ultrafines sont difficilement contrôlables par les techniques actuelles, et qu'il est donc nécessaire de trouver de nouvelles méthodes de réalisation de jonctions ultrafines. Ainsi, un état de l'art des méthodes en cours d'évaluation pour réaliser des jonctions ultrafines et compatibles avec les exigences des technologies 65nm, 45nm, et 32nm sera fait.

### III.1 Techniques de dopage

L'objectif de l'intégration des jonctions ultrafines dans le transistor est de trouver le meilleur compromis entre la diminution de la profondeur de jonction ( $X_j$ ), par implantation et/ou par contrôle de la diffusion des dopants, et l'augmentation de la résistance de couche ( $R_S$ ) résultant de la diminution de la profondeur de jonction, en améliorant l'activation électrique des dopants. Tout en cherchant le juste milieu entre ces deux points, il est nécessaire de contrôler les mécanismes de fuite de jonction à travers la génération, l'évolution, le placement des défauts induits par implantation et en maîtrisant la géométrie de la jonction.

#### III.1.1 Implantation ionique

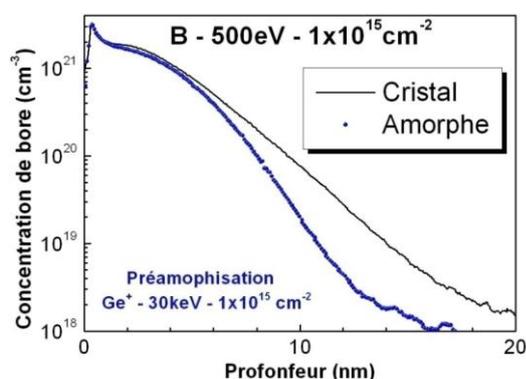
Les progrès réalisés par l'implantation ionique ont fait d'elle la meilleure méthode pour introduire les impuretés dans le silicium. Elle permet un contrôle précis de l'énergie du faisceau, et par conséquent de la distribution en profondeur des impuretés implantées en connaissant parfaitement la dose introduite. La formation de jonctions minces peut être envisagée selon deux méthodes : Soit on implante directement l'atome dopant dans le matériau cristallin (implantation "directe"), soit on préamorphise le substrat par un bombardement ionique avec des ions non-dopants dans le Silicium ( $Ge^+$ ,  $Sn^+$ ,  $Si^+$ ) avant implantation du dopant.

L'implantation directe du bore présente des inconvénients pour la fabrication des jonctions ultra minces. Son principal désavantage est le phénomène de canalisation [37] qui se traduit, expérimentalement, par une pénétration de l'atome dopant dans la matrice deux à cinq fois supérieure à celle obtenue pour une cible amorphe. Il en résulte l'obtention d'une jonction plus profonde et moins abrupte, ce qui va à l'opposé des caractéristiques des jonctions que

l'on cherche à obtenir. Il est à noter que, comme dans le cas du bore, la pénétration et la canalisation d'un ion implanté est d'autant plus importante que sa taille et sa masse sont faibles.

Une première solution pour limiter ces effets de canalisation est d'orienter le substrat à implanter de telle façon que les ions incidents ne "voient" plus les canaux cristallins. De manière générale, le faisceau incident est dévié d'un angle de  $7^\circ$  (tilt) et on applique au substrat une rotation d'un angle de  $22$  ou  $28^\circ$  (twist) par rapport à l'axe du faisceau d'ions.

D'autre part, l'étape de préamorphisation consiste à "casser" la structure cristalline du substrat afin de le rendre amorphe. Cette étape va considérablement atténuer le phénomène de canalisation comme le montre la Figure 18 qui représente des profils de concentration de bore implanté dans des substrats de silicium cristallin et amorphe. Dans les deux cas, l'implantation ionique laisse le cristal de silicium dans un désordre relativement important, où se mélangent les espèces implantées et les défauts générés par implantation. Une étape de recuit est ensuite nécessaire, non seulement pour restaurer la cristallinité de la région amorphisée mais aussi pour activer électriquement les atomes dopants en les plaçant dans les sites substitutionnels du réseau. Cependant, les températures de recuit typiquement utilisées après une étape de préamorphisation sont nettement inférieures à celle nécessaires après une implantation directe des dopants. Ainsi la diffusion en profondeur des dopants est limitée. De plus, après une étape de préamorphisation, les niveaux d'activation obtenus sont très importants et peuvent dépasser largement les valeurs de solubilité limite du bore dans le silicium [38].



**Figure 18 :** Profils de concentration de bore implanté dans des substrats de silicium cristallin et amorphe. On observe nettement les effets de la préamorphisation du substrat : le profil de bore est plus abrupt dans le cas du substrat préamorphisé, les effets de canalisation sont réduits.

### III.1.2 Plasma

Les problèmes de l'implantation ionique en particulier à basse énergie (effet de charge d'espace, courant d'implantation) sont principalement liés à la sélection des ions et au transport du faisceau de la source à la cible. Une solution pour s'en affranchir consiste à placer la cible au contact de la source d'ions : c'est le dopage par plasma, basé sur le principe de la décharge plasma à champ électrique continu, mis en évidence pour la première fois par Hans Strack en 1963 [39]. Cette technique peut être utilisée conjointement avec n'importe quel type de recuit comme le recuit classique de type "Spike" ou les recuits sub-milliseconde LASER ou Flash ou encore le recuit de recristallisation en phase solide (SPE) qui seront présentés dans la section suivante. L'équipement du dopage par plasma permet d'avoir des énergies d'implantation extrêmement faibles comprises entre 10 keV et 0,1 keV, car la plaque

de silicium est directement mise dans la source des ions à implanter, ce qui évite les problèmes rencontrés lors du transport des ions de faible énergie lors d'une implantation ionique classique. La profondeur des dopants après implantation est alors très faible et permet d'obtenir des jonctions fines après recuit et un bon contrôle des effets canal court [40, 41, 42]. D'autres techniques non étudiés lors de nos travaux sont aussi utilisées et permettent de réduire ou d'éviter une profondeur importante des jonctions [43, 44].

### III.2 Technique d'activation

Comme les dimensions des dispositifs sont réduites, la diffusion latérale des dopants sous la grille (extensions) doit être limitée pour éviter les effets canaux courts. Cependant l'activation doit être gardée élevée pour maintenir un bon compromis  $I_{ON}/I_{OFF}$  : le rapport  $X_j/L_G$  doit être conservé pour maintenir un bon contrôle des effets de canaux courts mais la résistance des extensions  $R_{EXT}$  est inversement proportionnelle à  $X_j$ . Il convient alors de trouver des techniques permettant d'améliorer l'activation des dopants (jusqu'à leur solubilité maximale dans le Si, voire au-delà) tout en créant des extensions extrêmement fines et abruptes. Les solutions technologiques à ce problème se basent principalement sur le constat que les mécanismes de diffusion et d'activation des dopants sont thermiquement activés, et qu'il existe un compromis entre l'activation des dopants et leur diffusion [45]. Ainsi, un recuit à température élevée pendant un temps très court favorise l'activation sur la diffusion ce qui a mené à l'apparition de plusieurs techniques pour améliorer le compromis activation/profondeur-diffusion des jonctions : Le recuit spike, flash ou laser ou encore l'épitaxie en phase solide (SPE).

#### III.2.1 Le recuit rapide standard (RTP)

Les équipements RTP (Rapid Thermal Processing) permettent à la fois d'effectuer des recuits dits "Soak" avec plateau en température (de l'ordre de quelques dizaines de secondes) utilisés pour les procédés de croissance (oxydes et oxy-nitrides) et aussi les recuits d'activation "Spike" (jusqu'à 250°C/s en montée pour des températures de l'ordre de 1000-1100°C) comme le montre la Figure 19. La plaque de silicium est chauffée de façon radiative sur la face avant par des lampes tungstène ou halogènes disposées en nid d'abeilles. Elle est en rotation afin de garantir une bonne uniformité du procédé. Un balayage de gaz inerte ( $N_2$  ou  $H_2$ ) permet d'assurer une bonne conductivité thermique dans la chambre de procédé et de refroidir la plaque lors de la descente en température (jusqu'à 100°C/s en descente).

Il est à noter que le passage du recuit plateau au recuit spike par les équipements RTP standards a permis de prolonger dans le temps l'association "implantation standard-RTP" pour la fabrication des jonctions ultrafines. Néanmoins, les spécifications actuelles pour les transistors CMOS 32nm et en deçà ne sont plus atteintes et le recuit spike standard après implantation ULE a atteint ses limites pour les prochaines années. Ainsi, pour obtenir des profils beaucoup plus fins tout en gardant les implantations actuellement réalisables par ULE, le recuit flash a été développé afin d'atteindre les besoins de la technologie 32nm.

### ***III.2.2 Le recuit "Flash" milliseconde***

Le recuit développé par l'équipementier Vortek dit "recuit flash" consiste dans un premier temps à chauffer la plaque de silicium à l'aide de lampes primaires incandescentes jusqu'à une température dite intermédiaire  $T_i$  autour de  $700^\circ\text{C}$  (rampe de montée comparable au recuit spike). Ensuite l'utilisation d'une lampe à arc fonctionnant à l'Argon permet de fournir une puissance instantanée très importante et d'atteindre des rampes de température en montée proche de  $10^6^\circ\text{C/s}$ . Lors du flash, seule une couche superficielle du substrat est chauffée (jusqu'à  $1300^\circ\text{C}$ ), ensuite la chaleur est principalement dissipée par conduction thermique dans le substrat jusqu'à  $T_i$ . Enfin, le retour à température ambiante s'effectue comme pour un recuit spike par radiation (utilisation de gaz inertes). De bons résultats sont obtenus par Ito et al. [46] sur l'amélioration des effets canal court des transistors CMOS. Ces recuits ont été testés au cours de cette thèse en combinaison avec des implantations faible énergies. En terme de compromis  $R_s/X_j$ , nous montrerons que les résultats sont inégalables avec les procédés actuels. Toutefois, son industrialisation nécessite une amélioration du contrôle du procédé, en particulier de l'uniformité thermique et du contrôle du choc thermique subi par la plaquette.

### ***III.2.3 Le recuit laser***

Il existe deux grandes familles d'équipements utilisés pour les recuits lasers selon qu'il y ait ou non fusion de la surface du substrat. Toutefois, la principale caractéristique de ce type de recuit est l'utilisation d'un faisceau laser venant balayer la plaque de silicium. Les jonctions ainsi obtenues sont particulièrement fines, abruptes et peu résistives. L'industrialisation de tels équipements est néanmoins difficile car elle nécessite d'importants changements dans l'architecture des transistors (diffusion des dopants sous la grille difficile, désactivation éventuelle des dopants). De plus, les jonctions formées sont métastables (particulièrement pour l'arsenic) ce qui peut conduire à une désactivation significative des dopants lors des procédés thermiques ultérieurs. Actuellement les nouveaux équipements de recuit laser sans fusion (non-melt laser annealing) permettent la réalisation de jonctions activées particulièrement fines. Le budget thermique étant très faible, les profils recuits sont quasiment identiques aux profils post-implantation. Le procédé laser peut être réalisé après un recuit spike pour augmenter l'activation des dopants. Cette approche permet de conserver une architecture standard tout en améliorant les performances des transistors CMOS [47], même si elle nécessite des temps de procédé plus long (deux étapes au lieu d'une seule). Des travaux récents ont permis de montrer des résultats très encourageants [48], mais la guérison des défauts induits par l'implantation reste difficile lorsque ce procédé n'est pas précédé d'un recuit conventionnel. Enfin, le balayage complet de la plaque de silicium nécessite des durées de procédé peu compatibles avec les contraintes actuelles de production.

### ***III.2.4 Conclusion***

La Figure 19 récapitule les caractéristiques des différents recuits disponibles actuellement.

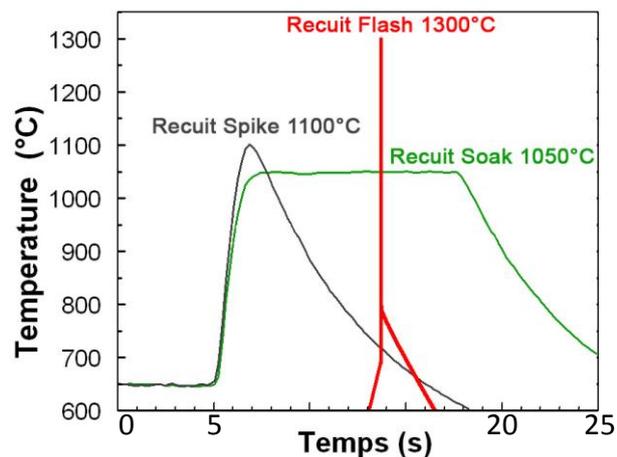


Figure 19 : Récapitulatif des caractéristiques des différents types de recuit.

Les nouveaux procédés technologiques du recuit flash et laser sans fusion constituent des candidats potentiels pour améliorer les caractéristiques des jonctions pour les futures générations de transistors. Toutefois, le manque de maturité des équipements et les modifications d'architecture à prévoir constituent actuellement des inconvénients majeurs à leur intégration.

Un état de l'art a été dressé pour la fabrication de jonctions ultrafines. Deux grandes visions ont été présentées : une vision à long terme avec une maîtrise de la profondeur de jonction par l'architecture même des transistors (technologies SOI par exemple), et une vision plus pragmatique à court terme applicable dans l'industrie du semi-conducteur pour les nœuds technologiques 65 et 45 nm actuellement en développement sur silicium massif (implantation ionique et recuit d'activation). L'ensemble des phénomènes physiques liés à cette méthode de fabrication de jonctions, comme l'activation ou la diffusion des espèces implantées, ainsi que la génération et l'évolution des défauts induits par ce type de fabrication seront décrits dans la section suivante.

#### IV DIFFUSION DES DOPANTS

La compréhension des phénomènes de diffusion des dopants passe par le rappel des équations générales de Fick mais surtout par une bonne connaissance des défauts ponctuels du silicium. En effet, dans le cas de la diffusion de dopants après implantation ionique, les lois énoncées par Fick, valables pour des phénomènes de diffusion proches de l'équilibre thermodynamique, s'avèrent trop simplistes car le coefficient de diffusion  $D_A$ , d'une espèce diffusante  $A$ , est une quantité complexe dépendante entre autre de la concentration en impuretés mais aussi de la présence de défauts ponctuels et de précipités de certaines espèces. La prise en compte des défauts ponctuels générés est primordiale pour modéliser des profils diffusés après implantation. Ceux-ci participent aux mécanismes de diffusion des dopants au sein de la matrice silicium. On rappellera donc quelles sont les caractéristiques physiques et thermodynamiques de ces défauts intrinsèques présents dans le réseau cristallin du silicium. Nous appuierons ce descriptif par un rappel des travaux expérimentaux et théoriques réalisés sur le sujet. Enfin, nous verrons plus précisément comment ces défauts interviennent dans les différents mécanismes atomistiques de la diffusion.

### IV.1 Equation de la diffusion : La loi de Fick

Le silicium étant de structure cristalline de type diamant, en l'absence de déformation, le coefficient de diffusion  $D_A$  d'une espèce diffusante A peut être considéré comme un scalaire ne dépendant que de la température. La première loi de Fick traduit la dépendance entre le flux  $J$  d'espèces diffusantes A et sa concentration  $C$ . Dans le cas unidirectionnel considéré, cette loi s'écrit :

$$\text{Équation 6} \quad J = -D_A \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}$$

Le signe moins de l'équation précédente traduit simplement le fait que la diffusion a lieu des zones à fortes concentrations vers les zones à faibles concentrations. Le coefficient  $D_A$  suit généralement une loi d'Arrhenius :

$$\text{Équation 7} \quad D_A = -D_0 \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right)$$

où  $E_a$  est l'énergie d'activation et  $D_0$  le terme pré-exponentiel.

Etablie pour un système conservatif, c'est-à-dire où il n'y a ni perte, ni création d'atomes de l'espèce A, la deuxième loi de Fick permet de décrire l'évolution temporelle de la concentration en espèce diffusante en un point donné. Le bilan de matière conduit à l'équation de conservation (ou équation de continuité) suivante :

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

En substituant l'Équation 6 dans l'Équation 8, on obtient la seconde loi de Fick:

$$\text{Équation 9} \quad \frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \right)$$

Une solution analytique décrivant la distribution en profondeur de l'espèce A pour une concentration superficielle constante existe :

$$\text{Équation 10} \quad C_A(x,t) = C_A^{surf} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{D_A t}} \right) \right]$$

où  $C_A^{surf}$  est la concentration constante de l'espèce A maintenue à la surface pendant le temps  $t$  du recuit à la température  $T$ . La quantité  $\sqrt{D_A t}$  représente la longueur de diffusion effective de l'espèce A.

Lorsque la concentration totale de dopants est constante (cas de l'implantation ionique standard en première approximation), on obtient pour solution une courbe Gaussienne :

$$\text{Équation 11} \quad C_A(x,t) = \frac{Dose}{\sqrt{2\pi \cdot (\Delta R_p^2 + 2D_A t)}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \cdot \frac{x - R_p^2}{\Delta R_p^2 + 2D_A t} \right]$$

avec  $R_p$  le parcours projeté moyen et  $\Delta R_p$  l'écart type.

Tant que les procédés expérimentaux utilisés pour étudier la diffusion ne mettent pas en jeu des phénomènes ayant lieu hors-équilibre thermodynamique, il est possible de modéliser la diffusion des dopants simplement à l'aide des mécanismes décrits précédemment. En particulier, lorsque la concentration d'impuretés est inférieure à celle de porteurs intrinsèques  $n_i$  leurs profils se décrivent parfaitement par une distribution analytique calculée à partir de la deuxième loi de Fick avec un coefficient de diffusion constant.

Le coefficient  $D_A$  (coefficient de diffusion intrinsèque) obtenu dans ces conditions intrinsèques est utilisé comme point de référence dans les différents calculs de la diffusion. La variation du coefficient intrinsèque avec la température, pour les principaux dopants de la micro-électronique, est reportée sur la Figure 20.

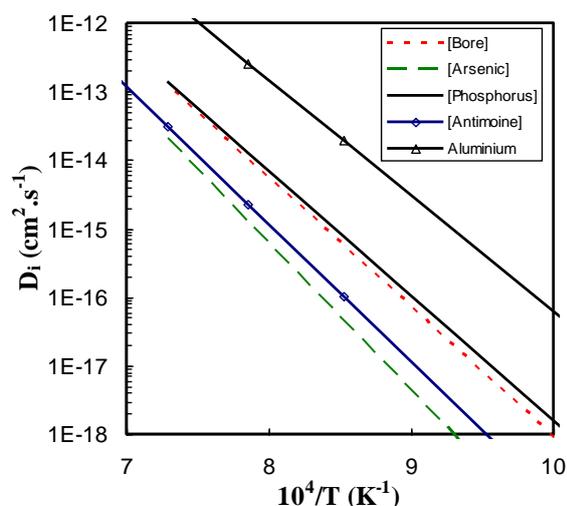


Figure 20 : Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés en micro-électronique. Bore [49], arsenic [50], phosphore [49], antimoine [51], aluminium [52].

## IV.2 Défauts ponctuels et mécanismes de diffusion des dopants

On distingue deux types de défauts fondamentaux dans les semi-conducteurs élémentaires comme le silicium ou le germanium. Le premier est la lacune notée  $V$  (Vacancy) qui correspond à un atome manquant dans un réseau cristallin parfait. Le second est l'auto-interstitiel  $I$  de silicium, que nous appellerons simplement par la suite "interstitiel" et qui représente un atome de silicium intercalé dans le réseau périodique du silicium. Ces défauts ponctuels sont caractérisés par deux principales propriétés qui nous intéressent particulièrement dans l'étude de la diffusion : leurs concentrations à l'équilibre ( $C_I^*$  pour les interstitiels et  $C_V^*$  pour les lacunes) et leurs vitesses de migration dans le silicium ( $D_I$  pour les interstitiels et  $D_V$  pour les lacunes). Nous présentons ici les principaux résultats issus de la littérature concernant ce sujet.

### IV.2.1 Définitions

Les dopants sont des impuretés dont la configuration stable se situe sur des sites substitutionnels du réseau. Lorsque ces impuretés se positionnent sur un site dédié au silicium, elles peuvent se ioniser et devenir électriquement actives, c'est-à-dire "jouent leur rôle" de dopants. Cependant la diffusion de ces impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels et intrinsèques du silicium. Ces défauts sont soit les lacunes, soit des

auto-interstitiels, ce qui donne lieu à deux types de mécanismes élémentaires de diffusion présentés dans cette section.

Les principales réactions relatives aux mécanismes de diffusion impliquant des défauts ponctuels sont :

Équation 12  $A_S + V \leftrightarrow AV$  (réaction entre l'atome substitutionnelle et la lacune),

Équation 13  $A_S \leftrightarrow AI + V$  (réaction de "Franck-Turnbull"),

Équation 14  $A_S + I \leftrightarrow AI$  (réaction entre l'atome substitutionnel et l'auto-interstitiel),

Équation 15  $A_S + I \leftrightarrow AI$  (réaction dite de "kick-out"),

où  $A_S$  représente l'impureté en site substitutionnel,  $AI$  l'impureté en site interstitiel,  $V$  la lacune et  $I$  l'auto-interstitiel de Si [53].

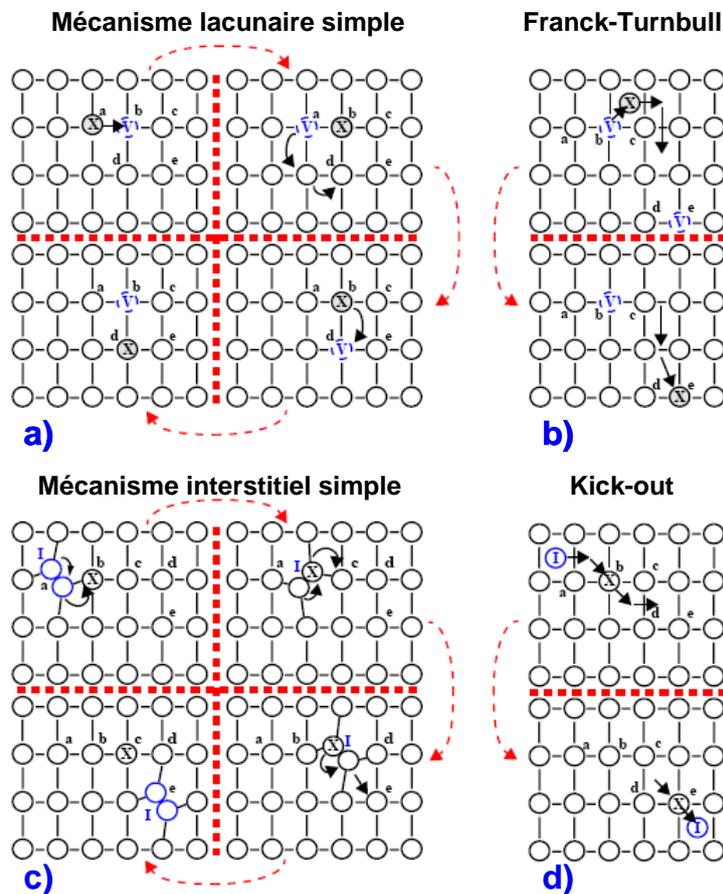


Figure 21 : Représentations schématiques des principaux mécanismes de diffusion assistés, par lacunes : Mécanismes simples (a) et dit de Franck-Turnbull (b) et par interstitiel : Mécanismes simple (c) et dit de kick-out ou indirect (d) [54].

IV.2.1.1 Mécanismes lacunaires

La diffusion assistée par lacunes peut s'effectuer suivant deux mécanismes prépondérants schématisés sur les Figure 21.a et Figure 21.b.

Dans le premier cas, correspondant au mécanisme lacunaire simple (Figure 21.a), l'impureté en position substitutionnelle diffuse en échangeant son site avec une lacune située en premier voisin (passage de a à b) selon l'Équation 12. La lacune peut ensuite évoluer en échangeant elle-même son site avec des atomes voisins de la matrice et ainsi faciliter la diffusion de l'impureté de son nouveau site d'équilibre vers une nouvelle position (passage de b à d), la lacune réoccupant son site de départ (b). La diffusion des impuretés suivant ce mécanisme est donc proportionnelle à la concentration de lacunes.

Le second mécanisme lacunaire, dit de Franck-Turnbull (Figure 21.b), est lié à la dissociation d'une impureté en position substitutionnelle devenant un défaut interstitiel extrinsèque en laissant place à une lacune suivant la relation d'équilibre donnée par l'Équation 13. L'impureté interstitielle peut alors diffuser à travers le réseau cristallin pour se recombinaison avec une autre lacune (passage en e) et ainsi réoccuper une position substitutionnelle. La diffusion d'impuretés suivant ce mécanisme (par exemple l'Antimoine) est donc encore une fois proportionnelle à la concentration de défauts lacunaires.

#### IV.2.1.2 Mécanismes interstitiels

Comme dans le cas des mécanismes lacunaires, la diffusion atomique assistée par des défauts interstitiels peut être régie suivant deux mécanismes principaux schématisés sur les Figure 21.c et Figure 21.d.

Le mécanisme interstitiel simple (Figure 21.c) correspond à la déformation locale des liaisons atomiques obtenue par le couplage entre un atome interstitiel intrinsèque et l'impureté. La formation de cette paire, selon l'Équation 14, permet d'abaisser la barrière d'énergie que doit franchir l'impureté pour diffuser. Ainsi, avant de se dissocier et de "laisser" l'impureté dans une nouvelle position substitutionnelle (passage de b à c), la paire pourra parcourir une certaine distance avant de se dissocier.

Le second mécanisme, le plus souvent appelé "kick-out" [55] (Figure 21.d), est d'une importance particulière puisqu'il est notamment le mécanisme prépondérant de la diffusion du bore dans le silicium. Il correspond à la dissociation assistée par un auto-interstitiel d'une impureté substitutionnelle en une impureté interstitielle mobile suivant la relation d'équilibre donnée par l'Équation 15. L'impureté peut alors diffuser dans le cristal de site interstitiel en site interstitiel sur une longue distance jusqu'à se repositionner dans un site substitutionnel du cristal en libérant un nouvel interstitiel. Pour les deux mécanismes décrits, le coefficient de diffusion des impuretés considérées est proportionnel à la concentration de ce type de défauts ponctuels.

#### *IV.2.2 Concentration à l'équilibre*

Selon la thermodynamique statistique, pour une température donnée différente de 0K, il existe une concentration non nulle de défauts ponctuels en équilibre thermodynamique. Cette configuration reflète le fait que le cristal est dans un état qui minimise son énergie libre de Gibbs. Toujours d'après les résultats issus de la thermodynamique, la concentration à l'équilibre d'un défaut ponctuel  $X$  peut s'exprimer par :

Équation 16 
$$C_X^* = C_S \cdot \theta_X \cdot \exp\left(\frac{S_X^f}{k}\right) \cdot \exp\left(-\frac{H_X^f}{kT}\right)$$

où  $C_S$  est le nombre de sites disponibles dans le réseau cristallin du silicium,  $H_X^f$  est l'enthalpie de formation d'un défaut ponctuel  $X$ ,  $\theta_X$  le nombre de degrés de liberté du défaut dans le site cristallin,  $S_X^f$  est un terme de désordre entropique généralement attribué aux vibrations cristallines [53]. La génération des défauts ponctuels est un phénomène physique thermiquement activé.

De nombreuses études expérimentales ont été menées afin d'évaluer la concentration de défauts ponctuels et leur diffusion dans le Silicium à l'équilibre thermodynamique, et un consensus reste difficile à trouver. Pour illustrer cette difficulté, nous présentons dans les Figure 22.a et Figure 22.b une compilation des résultats obtenus par différents auteurs concernant les valeurs de concentration et du coefficient de diffusion des interstitiels à l'équilibre. Comme le montrent ces deux figures, il existe une grande dispersion des résultats expérimentaux. Il en est de même pour la concentration et la diffusivité des lacunes dans le silicium [56]. Cette importante dispersion est due pour une part aux différentes méthodes expérimentales utilisées, mais surtout à la complexité du phénomène à mesurer.

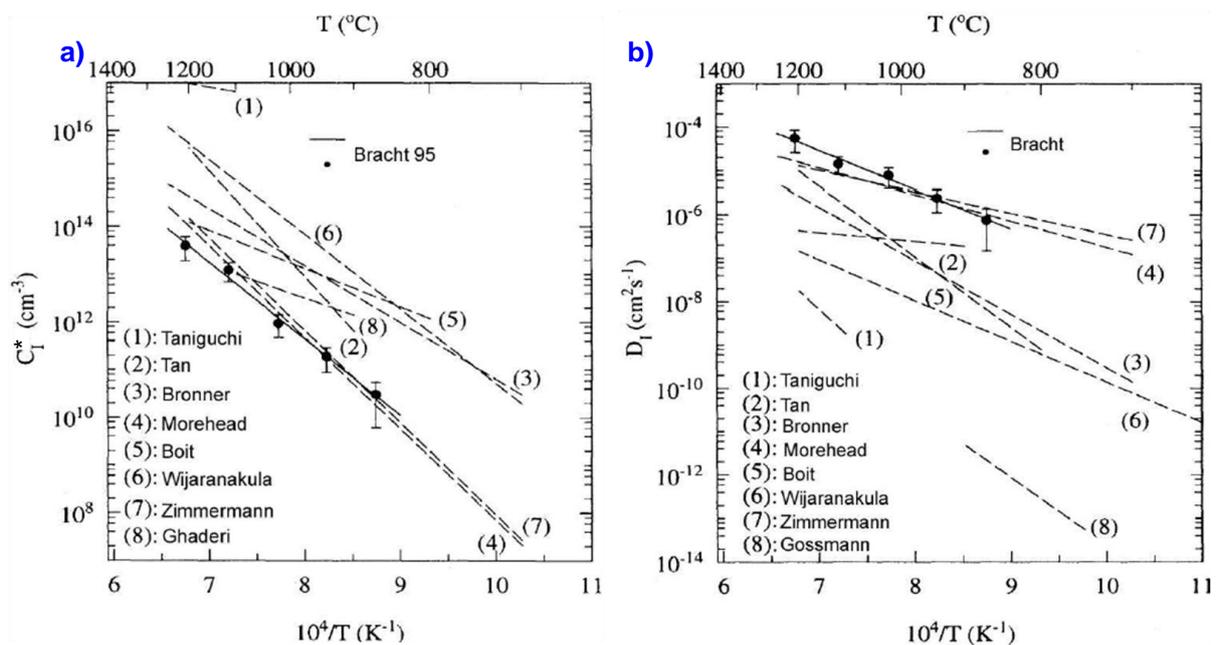


Figure 22 : (a) Estimation de la concentration à l'équilibre des interstitiels dans le silicium. (b) Coefficients de diffusion des auto-interstitiels de silicium issus de la littérature.

#### IV.2.3 Diffusivité des défauts ponctuels

L'autodiffusion dans le silicium peut être considérée comme un cas limite de la diffusion des impuretés stables en site substitutionnel, où la diffusion des atomes n'apporte aucun excès de charge et n'introduit pas de distorsion dans le réseau cristallin. Pour ces raisons, l'étude de l'autodiffusion devient très importante dans la compréhension des mécanismes de diffusion des dopants. Elle peut être représentée par un coefficient suivant une loi d'Arrhenius (Équation 17) où  $H_a^{SD}$  est l'enthalpie d'activation qui représente la barrière énergétique de

migration d'un défaut ponctuel et  $D_0^{SD}$  est le préfacteur de la diffusion qui comprend l'effet du terme entropique [57].

$$\text{Équation 17} \quad D^{SD} = D_0^{SD} \cdot \exp\left(-\frac{H_a^{SD}}{kT}\right)$$

Comme dans le cas des dopants, les atomes de silicium vont diffuser via les défauts ponctuels. Le coefficient d'autodiffusion peut donc être considéré comme la somme de deux contributions  $D_V^{SD}$  et  $D_I^{SD}$  et représentant respectivement les mécanismes interstitiels et lacunaires [58]. Chacune des contributions pouvant s'écrire séparément sous la forme :

$$\text{Équation 18} \quad D_I^{SD} = \frac{D_I \cdot C_I^*}{C_{Si}} = D_{I_0} \exp\left(-\frac{E_M^I + E_F^I}{kT}\right)$$

$$\text{Équation 19} \quad D_V^{SD} = \frac{D_V \cdot C_V^*}{C_{Si}} = D_{V_0} \exp\left(-\frac{E_M^V + E_F^V}{kT}\right)$$

où  $C_{Si}$  est la concentration atomique du silicium et  $D_{X0}$  est le préfacteur de la diffusion relatif au défaut ponctuel X.

On notera, que l'étude de l'autodiffusion ne peut nous apporter que des informations sur le produit  $D_X \cdot C_X^*$ . En effet, dans la formulation des coefficients  $D_X^{SD}$ , les termes d'énergie de migration  $E_M^X$  et d'énergie de formation  $E_F^X$  se trouvent dans le même terme exponentiel. Par conséquent, ils ne pourront pas être différenciés.

Malgré de nombreuses études théoriques et expérimentales sur l'autodiffusion dans le silicium, les contributions des auto-interstitiels et des lacunes dans la diffusion du silicium restent incertaines. En effet pour étudier l'autodiffusion dans les solides, on utilise souvent des traceurs radioactifs combinés avec des techniques de caractérisation, permettant de suivre précisément l'espèce diffusante. Malheureusement, dans le silicium, la période radioactive de l'isotope  $^{31}\text{Si}$  est très courte (2.6h) et ces expériences sont limitées à des intervalles de température située autour de 1050°C [59]. Par conséquent on a souvent recours à la diffusion des métaux lourds afin d'extraire les paramètres de l'autodiffusion. Il faut alors recourir à l'utilisation de silicium enrichi en isotope plus stable pour contourner ce problème. Cette approche ne nécessite aucune hypothèse pour mesurer le préfacteur et les énergies d'activation de la diffusion des auto-interstitielle et des lacunes.

Une méthode plus sophistiquée a récemment été développée. Bracht et al. [60] ont fait croître une couche épitaxiée enrichie en isotope  $^{28}\text{Si}$  sur un substrat de silicium FZ (Float Zone). Le  $^{30}\text{Si}$  issu naturellement du substrat diffuse dans la couche épitaxiée de  $^{28}\text{Si}$  et le profil peut être suivi par technique SIMS. Ils ont ainsi pu déterminer le coefficient d'autodiffusion pour un plus large domaine de température (855 - 1388 °C). La diffusivité extraite  $D_{Si}$  (Équation 20) contient à la fois la contribution du mécanisme interstitiel et lacunaire. Substituant la diffusion des auto-interstitiels ( $C_I^* D_I$ ) (Équation 21) par celle du zinc [61], ils ont pu extraire la valeur de  $C_V^* D_V$  (Équation 22).

$$\text{Équation 20} \quad D_{Si} = (530 \pm_{170}^{250}) \exp\left(-\frac{(4.75 \pm 0.04)eV}{kT}\right) \left[cm^2 / s\right]$$

$$\text{Équation 21} \quad D_I^{SD} = \frac{C_I^* \cdot D_I}{C_{Si}} = 2980 \exp\left(-\frac{4.95eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

$$\text{Équation 22} \quad D_V^{SD} = \frac{C_V^* \cdot D_V}{C_{Si}} = 0.92 \exp\left(-\frac{4.14eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

Ural et al. [62] ont effectué une étude similaire pour mesurer l'autodiffusion à partir de la diffusion de l'isotope  $^{30}\text{Si}$  d'une couche naturellement enrichie, vers une couche appauvrie en isotope. Les auteurs ont réalisé trois différents recuits : sous ambiance neutre, sous  $\text{NH}_3$  et sous  $\text{O}_2$ . Le recuit oxydant va en effet injecter des interstitiels dans le silicium [63], tandis que la nitruration injecte des lacunes [64] à partir de la surface. Cette perturbation de la concentration des défauts ponctuels permet l'extraction, sans aucune hypothèse complémentaire, de la contribution des interstitiels ( $f_I$ ) et des lacunes ( $f_V$ ) dans l'autodiffusion. L'Auto-diffusivité mesurée en ambiance inerte  $D^{SD}$  (Équation 23), correspondant aux valeurs de Bracht et al. [61]. La valeur de  $f_I$  extraite se retrouve dans une gamme de 0.55 - 0,6 ( $\pm 0,1$ ). Les coefficients d'auto-diffusion via les auto-interstitiels  $D_I^{SD}$  et les lacunes  $D_V^{SD}$  sont [65]:

$$\text{Équation 23} \quad D^{SD} = 560 \exp\left(-\frac{4.76eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

$$\text{Équation 24} \quad D_I^{SD} = 149 \exp\left(-\frac{4.68eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

$$\text{Équation 25} \quad D_V^{SD} = 636 \exp\left(-\frac{4.86eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

La Figure 22.b résume les résultats obtenus par différentes méthodes de caractérisation. La majorité des résultats donne pour la diffusivité des auto-interstitiels de silicium une énergie d'activation comprise entre 4.5 et 5.0eV.

#### IV.2.4 Etat de charge majoritaire

Les défauts ponctuels peuvent exister sous plusieurs états de charge électrique [66]. Sur la base d'études expérimentales dédiés [68], les auto-interstitiels peuvent avoir trois états de charge stables ( $I^0$ ,  $I^+$  et  $I^-$ ) et que les lacunes existent sous la forme de quatre états de charge ( $V^0$ ,  $V^-$ ,  $V^{2-}$ ,  $V^{2+}$ ). Chaque espèce chargée résulte d'une réaction du type :



où X représente un défaut ponctuel (I, V) dans son état de charge  $i$ ,  $e^j$  est soit un électron ( $j = -1$ ) ou un trou ( $j = +1$ ). On considère généralement, que les réactions mettant en jeux des électrons (ou trous) sont plus rapides que les réactions chimiques. Par conséquent, l'équilibre de ces réactions est atteint beaucoup plus rapidement que pour l'ensemble des autres réactions des différents mécanismes de diffusion. La concentration d'un défaut ponctuel chargé s'exprime à l'équilibre (Équation 27), en fonction de la concentration des défauts neutres  $C_X^0$ , du niveau de Fermi et des concentrations locales des porteurs :

$$\begin{aligned}
 C_{I^-} &= C_{I^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{I^-} - E_F^i}{kT}\right) \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right); C_{I^+} = C_{I^0} \cdot \exp\left(-\frac{-E^{I^+} + E_F^i}{kT}\right) \cdot \left(\frac{p}{n_i}\right) \\
 \text{Équation 27 } C_{V^-} &= C_{V^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{V^-} - E_F^i}{kT}\right) \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right); C_{V^{2-}} = C_{V^0} \cdot \exp\left(-\frac{E^{V^{2-}} + E^{V^-} - 2 \cdot E_F^i}{kT}\right) \cdot \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \\
 C_{V^{2+}} &= C_{V^0} \cdot \exp\left(-\frac{-E^{V^{2+}} - E^{V^+} + 2 \cdot E_F^i}{kT}\right) \cdot \left(\frac{p}{n_i}\right)^2; \text{avec } \frac{n_i}{p} = \frac{n}{n_i} = \exp\left(\frac{\Delta E_F}{kT}\right)
 \end{aligned}$$

où  $E_F^i$  est l'énergie de Fermi intrinsèque,  $E^X$  est l'énergie de formation du défaut ponctuel  $X$  qui représente sa position dans la bande interdite,  $\Delta E$  est égale à  $(E_F - E_F^i)$ ,  $n_i$  est la densité de porteurs intrinsèques et  $n$  et  $p$  sont les concentrations en porteurs libres, électrons et trous respectivement. Nous voyons que la concentration de défauts chargés dépend de la position du niveau de Fermi. La variation du niveau de Fermi entraîne la variation de la concentration globale des défauts.

#### IV.2.5 Diffusion des dopants usuels

La diffusion d'un dopant au sein du silicium ne peut se produire sans couplage avec un défaut ponctuel. Aussi, il est important de connaître la contribution relative de chacun des mécanismes (lacunaire ou interstitiel) selon les dopants utilisés pour prévoir le comportement de ceux-ci lors du recuit d'activation.

A l'équilibre thermodynamique dans du silicium intrinsèque (la concentration d'espèce  $A$  en sites substitutionnels  $C_A$  est inférieure à  $n_i(T)$ ), nous pouvons écrire pour une impureté dopante en substitution :

$$\text{Équation 28} \quad D_A^* \cdot (C_{A_s} + C_{AI} + C_{AV}) = D_{AV} C_{AV}^{eq} + D_{AI} C_{AI}^{eq}$$

$$\text{Équation 29} \quad D_A^* = D_A^{AV} + D_A^{AI}$$

$$\text{avec : } D_A^{AV} \equiv \frac{C_{AV}^{eq} D_{AV}}{C_{A_s}^{eq}} \text{ et } D_A^{AI} \equiv \frac{C_{AI}^{eq} D_{AI}}{C_{A_s}^{eq}}$$

où  $C_{AV}^{eq}$  et  $C_{AI}^{eq}$  sont les concentrations des paires  $AI$  et  $AV$  à l'équilibre thermodynamique et  $D_A^{AV}$  et  $D_A^{AI}$  les coefficients de diffusion assistée par lacunes et par auto-interstitiels de l'espèce  $A$ .

Lorsque la quantité de défauts ponctuels présents dans le silicium est hors-équilibre, l'Équation 29 reste vraie, le coefficient de diffusion  $D_A$  devient [67]:

$$\text{Équation 30} \quad \frac{D_A}{D_A^*} = (1 - f_A^{AI}) \frac{C_V}{C_I^{eq}} + f_A^{AI} \frac{C_I}{C_I^{eq}}$$

$$\text{avec : } f_A^{AI} \equiv \frac{D_A^{AI}}{D_A^{AI} + D_A^{AV}} = \frac{D_A^{AI}}{D_A}$$

$f_A^{AI}$  et  $f_A^{AV}$  dénotent respectivement la composante relative de la diffusion de l'impureté A par couplage dopant-interstitiel et dopant-lacune.

Les dopants n'utilisent pas dans la même proportion l'un ou l'autre des mécanismes. Le paramètre  $f_I$  caractérise la proportion que va prendre le mécanisme interstitiel dans l'ensemble des mécanismes de migration du dopant. Les valeurs trouvées dans la littérature pour ce paramètre présentent des écarts parfois importants. Pour une revue très complète des valeurs trouvées ces 25 dernières années, on pourra se reporter au livre de Pichler sur la diffusion [68]. Les récentes études menées par Ural et al. [69], dans la gamme de températures habituelles de la diffusion 900-1100°C, semblent parmi les plus fiables. Les valeurs obtenues pour les quatre principaux dopants de la microélectronique sont rassemblées dans le Tableau 2.

Dopant	$f_A^{AI}$
Bore	$\geq 0.84$
Phosphore	$\geq 0.86$
Arsenic	0.42-0.47
Antimoine	$0.16 \leq$

Tableau 2 : Estimations des coefficients  $f_A^{AI}$  pour les dopants usuels à 1100°C [69].

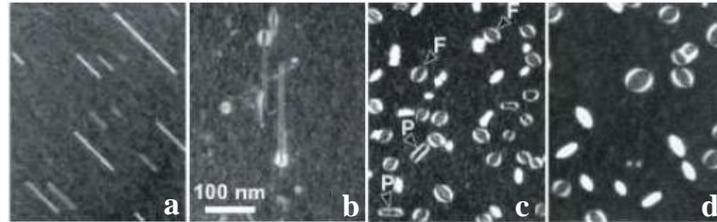
### IV.3 Conclusion

Nous avons traité dans cette partie des éléments nécessaires à la compréhension de la théorie classique de la diffusion des dopants dans le silicium. Il est important de garder à l'esprit que ces mécanismes de diffusion mettent en jeu les interactions du dopant avec les défauts ponctuels présents dans le silicium. Nous avons rappelé les propriétés intéressantes concernant ces défauts. Notons qu'un des points souvent oubliés dans les nombreux modèles développés précédemment concerne les différents états de charges existant aussi bien pour les défauts que pour les paires dopant-défaut.

## V IMPLANTATION IONIQUE ET DEFAUTS

Comme cité précédemment, la formation de jonctions ultra minces peut être envisagée selon deux méthodes : soit on implante directement le dopant dans le matériau cristallin, soit on préamorphise le substrat avant l'introduction du dopant. Dans les deux cas, l'implantation ionique dans le silicium génère une grande concentration de défauts ponctuels. On distingue deux types de défauts fondamentaux dans les semi-conducteurs élémentaires comme le silicium ou le germanium. Le premier est la lacune notée V (Vacancy) qui correspond à un atome manquant dans un réseau cristallin parfait. Le second est l'auto-interstitiel I de silicium, que nous appellerons simplement par la suite "interstitiel" et qui représente un atome de silicium intercalé dans le réseau périodique du silicium. Au cours du recuit, ces défauts diffusent et se recombinaient sous la forme de défauts étendus de plusieurs types. Bien que l'origine et la position de ces défauts étendus diffèrent, leur nature est la même après implantation directe ou après préamorphisation du substrat : il s'agit de précipités d'atomes de Si interstitiels [70]. Trois grandes catégories d'agglomérats peuvent être distingués : des petits amas d'interstitiels appelés clusters, les défauts {311} (cf. Figure 23.a) et enfin les boucles de

dislocation, fautées ou parfaites (cf. Figure 23.c et Figure 23.d). les deux types peuvent être présents simultanément (cf. Figure 23.b). D'une manière générale, tous ces défauts sont observables par Microscopie Electronique en Transmission (MET), exception faite des clusters qui de par le faible nombre d'atomes qu'ils contiennent (moins d'une vingtaine) ne sont pas observables.



**Figure 23 : Les 4 grands types de défauts d'interstitiels dans le silicium implanté recuit. (a) Les clusters d'interstitiels. (b) Les défauts {311}. (c) Transformation des défauts {311} en boucles de dislocation. (d) Boucles de dislocations parfaites P et fautées F. (e) Boucles de dislocation fautées seulement [71].**

### V.1 Les clusters d'interstitiels

Initialement, après une implantation et/ou pendant la rampe de montée en température du recuit, la plupart des défauts ponctuels se recombinent et s'agglomèrent sous la forme de di-interstitiels [72]. Au cours du recuit, ces di-interstitiels évoluent d'abord vers la forme de petits clusters. A cause de leur petite taille ( $<2\text{nm}$ ), la structure cristallographique exacte de ces clusters ne peut pas être identifiée par microscopie électronique conventionnelle ou haute résolution. Toutefois, Cowern et al. [73] ont pu expérimentalement montrer l'existence de tailles "magiques" pour lesquelles ces défauts ont des configurations énergétiques stables : les clusters sont ainsi principalement composés de 4 ou 8 atomes de Si interstitiels. Parmi les modèles de structure cristallographique proposés, on peut noter que certains [74] sont en bon accord avec les résultats obtenus par Cowern.

### V.2 Les défauts {311}

Au cours du recuit, ces clusters grandissent et évoluent alors vers des défauts {311}. De nombreuses études ont été menées concernant les mécanismes de formation et la structure atomique de ces défauts particuliers ; en effet les défauts {311} sont propres aux cristaux covalents silicium et germanium et ne peuvent être observés dans les métaux. Plusieurs types de structures ont été proposées au fil de leur "longue" histoire, mais il a été montré [75] que ces défauts sont constitués de chaînes de di-interstitiels qui s'insèrent dans le cristal parfait selon des directions de type  $\langle 110 \rangle$  et s'arrangent périodiquement entre deux plans de type {311}. En réalité, il existe deux morphologies de défauts {311}, et ceci explique certaines confusions dans la littérature. Dans le cas d'une implantation ionique, ces défauts ont habituellement la forme de longs bâtonnets très fins : ils sont connus sous le nom anglais de "rodlike defects". Par opposition, lors d'une irradiation par des électrons, on observe des défauts plus larges qui en apparence ont la même structure globale. Il est important de noter que nos connaissances sur les défauts {311} allongés reposent sur l'hypothèse qu'ils ont la même structure atomique que les défauts {311} plans.

### V.3 Les boucles de dislocations

Au cours du recuit, les défauts  $\{311\}$  peuvent grandir et se transformer en boucles de dislocation ; cette évolution est d'autant plus favorable que le bilan thermique appliqué est élevé. Ce sont des précipités d'atomes de Si interstitiels à deux dimensions qui ont des formes plus ou moins circulaires. On en distingue deux types : les boucles fautes, qui sont circulaires, et les boucles parfaites qui sont de forme allongée (cf. Figure 23.c et Figure 23.d). La différence entre ces deux types de boucles est leur vecteur de déplacement (vecteur de Burgers) qui appartient ou non au plan de la boucle.

D'une manière générale, au cours du recuit, les défauts grandissent et évoluent toujours vers des formes cristallographiques énergétiquement plus stables [76]. Toutefois, les défauts ont également la possibilité de se dissoudre suivant les conditions expérimentales utilisées. Ainsi, par exemple, après recuit d'un échantillon implanté  $\text{Si}^+$  à 40 keV pour une dose de  $5.10^{13} \text{at.cm}^{-2}$ , des défauts  $\{311\}$  se forment puis se dissolvent [77], alors que si on augmente la dose à  $1.10^{14} \text{ions/cm}^2$  et l'énergie d'implantation à 100 keV (c'est-à-dire que la bande de défauts se forme plus profondément dans le substrat) les défauts  $\{311\}$  ne se dissolvent plus mais grandissent puis se transforment en boucles de dislocation [78]. Globalement, la possibilité pour les défauts étendus d'évoluer vers des formes plus stables nécessite une population initiale d'atomes de Si interstitiels suffisamment élevée et que la surface de l'échantillon soit assez éloignée de la région des défauts [70]. Après une préamorphisation du substrat avec des ions  $\text{Ge}^+$  ou  $\text{Si}^+$  ces conditions sont pratiquement toujours satisfaites, alors que dans le cas d'une implantation directe elles dépendent du choix de la dose et de l'énergie.

### V.4 Position et origine des défauts étendus

#### V.4.1 Cas d'une implantation non-amorphisante

Après une implantation directe de dopant, les défauts s'étendent en profondeur sur une bande qui est d'autant plus large que la dose est importante. Cette bande est toujours localisée autour du rang projeté ( $R_p$ ), qui correspond au libre parcours moyen des ions implantés dans le cristal. L'origine de ces défauts provient de la précipitation de l'excès d'interstitiels qui est généré dans cette région. L'implantation ionique crée un grand nombre de défauts ponctuels (lacunes et interstitiels). Au début du recuit, on suppose que ces défauts ponctuels se recombinaient entièrement entre eux [79] ne laissant qu'un excès d'interstitiels correspondant à la dose de dopant implantée qui évolue en défauts étendus près du maximum de dopage.

#### V.4.2 Cas d'une amorphisation du substrat

Dans ce cas, on peut soit assister à une amorphisation du substrat par le dopant lui-même. C'est le cas des impuretés à masse élevée ( $\text{BF}_2^+$ ,  $\text{As}^+$ ). Soit le dopant est implanté dans une couche préalablement amorphisée. Après recuit, des défauts apparaissent derrière l'ancienne interface cristal/amorphe (c/a). Ces défauts sont appelés défauts "End-Of-Range" (EOR), c'est-à-dire défauts de fin de parcours. La nature de ces défauts est la même que celle des défauts formés après implantation directe. Seul change leurs position puisqu'ils se forment à

l'interface cristal/amorphe au lieu du  $R_p$  du profil de dopant. Dans ce cas, c'est l'étape de préamorphisation qui génère les atomes de Si interstitiels en excès trouvés derrière l'interface c/a. La formation des défauts étant plus rapide que la recristallisation de la couche amorphe lors du recuit, et l'autodiffusion du Si étant plus faible dans l'amorphe que dans le cristal, ces défauts restent localisés derrière l'interface c/a d'origine [80]. Le nombre total d'atomes pris dans ces défauts EOR est alors approximativement égal au nombre d'atomes de Si généré par la préamorphisation dans la partie cristalline [81].

En résumé, les défauts étendus que l'on rencontre après une implantation directe du dopant ou après une étape de préamorphisation ont la même nature cristallographique. Même si leurs positions respectives diffèrent, leur origine provient dans chaque cas de la précipitation au cours du recuit de l'excès d'atomes de Si interstitiels présents dans la matrice cristalline. Les modèles permettant de calculer le nombre d'atomes de Si interstitiels pris dans les défauts étendus seront détaillés dans le second chapitre.

## V.5 Conséquences des défauts étendus

### V.5.1 La diffusion anormale

La formation de jonctions ultrafines fortement activées constitue un challenge majeur en microélectronique. Les efforts pour obtenir de telles jonctions se portent également sur le développement des procédés de recuit d'activation. De la température des traitements d'activation va dépendre la limite de solubilité qui définit la quantité maximum de dopants qu'on peut activer électriquement : plus la température de recuit est élevée, plus la limite de solubilité des impuretés dans le silicium est élevée. Sa durée doit être la plus courte possible pour minimiser la diffusion des dopants tout en permettant la réparation de la majorité des défauts créés par l'implantation ionique.

Malheureusement, même lors des recuits "spike" (cf. section III.2) [82], ayant des rampes de montée et de descente en température abruptes (150°C/s et 90°C/s respectivement), il est apparu que la réduction de diffusion obtenue par rapport aux recuits de type "soak" (cf. section III.2) n'était pas suffisante pour obtenir les caractéristiques des jonctions ultrafines recherchées dans les technologies futures. Bien que les durées de recuit se comptent en secondes plutôt qu'en heures comparées aux recuits classiques, il apparaît qu'une accélération importante de la diffusion se manifeste dès les premiers instants du recuit, phénomène que l'on nomme diffusion accélérée et transitoire (TED pour Transient Enhanced Diffusion).

Dans ces conditions, la diffusion mesurée peut atteindre des valeurs jusqu'à  $10^6$  fois plus grandes que la diffusion à l'équilibre. Comme illustré par la Figure 24.a, à 800°C, la TED est transitoire car elle est importante en début de recuit et s'estompe rapidement pour les temps de recuit plus longs jusqu'à atteindre les valeurs de diffusion à l'équilibre. La durée de cette accélération est fonction de la température [83] comme on peut le constater sur la Figure 24.b où pour un recuit à 950°C, on retrouve le même phénomène de TED mais avec une amplitude moins importante.

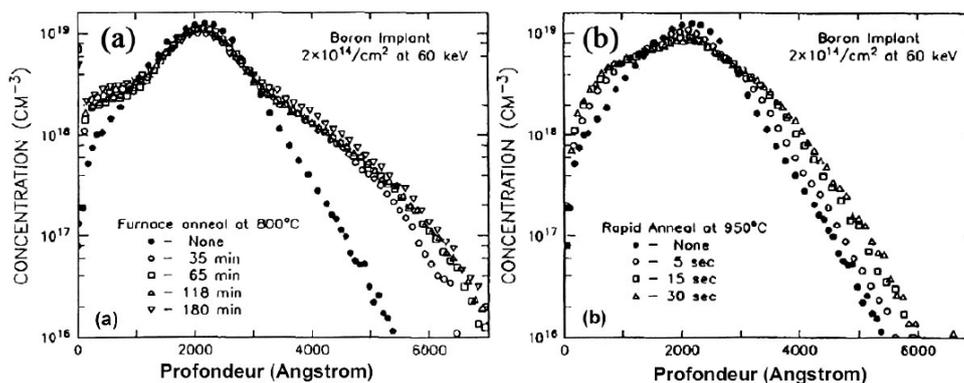


Figure 24 : Profils SIMS de bore obtenus après recuit (a) classique à 800°C, et (b) RTA à 950°C, pour plusieurs durées. Le bore a été implanté à une énergie de 60keV avec une dose de  $1 \times 10^{14}$  at.cm<sup>-2</sup>. La majorité de la diffusion a lieu au cours des premiers instants du recuit et on observe une immobilisation du bore au niveau du pic de maximum de concentration. [84].

En plus de cette accélération de la diffusion du dopant, on peut observer une immobilisation de la partie du dopant pour les concentrations les plus fortes même au-dessous de la solubilité limite [85]. Cette immobilisation est accompagnée d'une inactivation du dopant. Ce phénomène est maintenant identifié et attribué à la formation de petits agrégats composés à la fois de dopant et d'auto-interstitiels.

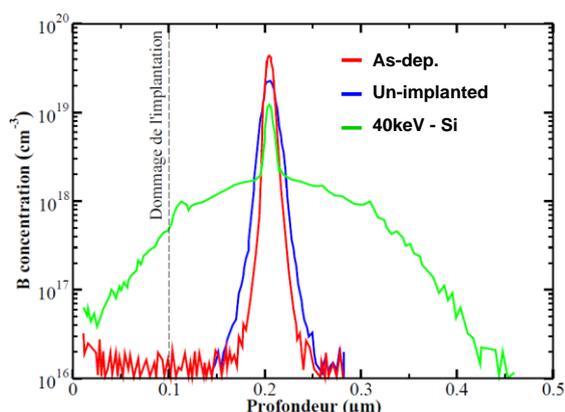


Figure 25 : Pic de bore déposé par technique MBE puis recuit à 810°C pendant 15min avec ou sans stock d'interstitiels généré près de la surface par implantation de silicium (d'après [86]).

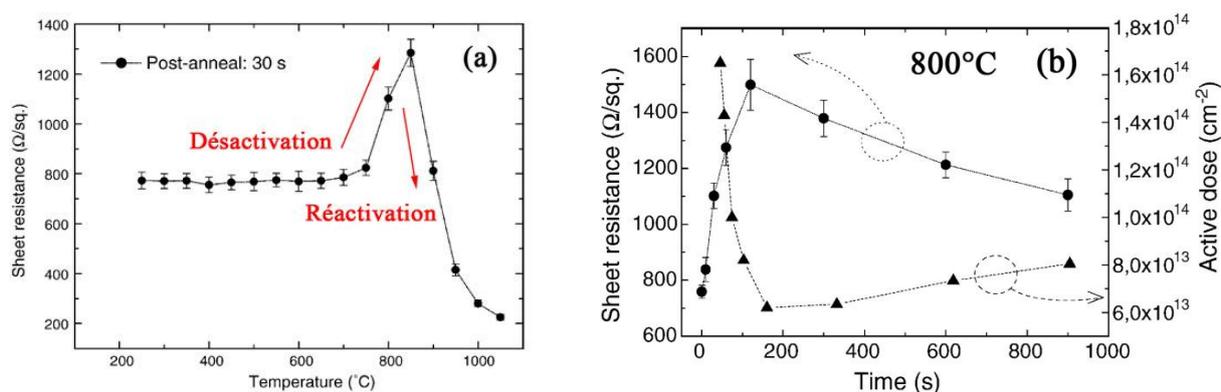
La Figure 25 met en évidence le rôle des auto-interstitiels pour voir apparaître la formation de ces amas mixtes de bore et d'interstitiels. En effet, alors qu'en l'absence de défauts générés par l'implantation de surface la diffusion à l'équilibre du bore donne un étalement peu marqué du profil de dopant, la génération d'un important réservoir d'interstitiels par une étape d'implantation entraîne le piégeage du pic de bore et une forte accélération de sa diffusion.

La création de ces défauts d'implantation, leur évolution durant le recuit à haute température sera étudiée dans le prochain chapitre car, comme déjà proposé par Michel et al. [84], une part importante de ces défauts va se regrouper en défauts étendus et est responsable des phénomènes mis en jeu lors de la diffusion accélérée.

### V.5.2 Influence des défauts sur l'activation des dopants

Les premières études détaillées où l'on suit simultanément l'évolution des défauts (par TEM) et l'activation électrique du bore (par mesure de résistance carrée) sont très récentes. Elles ont été réalisées dans le cas de substrats de silicium cristallin via des études expérimentales [87, 88, 89] et théoriques [90, 91]. C'est en 2004 que Pawlak et al. [92], en étudiant le cas de

jonctions ultra-minces réalisées dans du silicium préamorphisé, mettent en évidence l'impact des défauts EOR sur l'activation du bore. Après un recuit de recristallisation et d'activation d'une minute à 600°C juste après l'implantation de bore, ils réalisent des recuits isochrones de 650°C à 950°C pendant une minute. L'activation du bore et l'évolution des défauts au cours de ces recuits sont caractérisés respectivement par mesure de résistance carrée et TEM. Il apparaît nettement un phénomène de désactivation puis de réactivation des atomes de bore au cours des recuits, comme montré sur la Figure 26 qui provient d'une étude similaire menée dans notre équipe de recherche [93]. Ce phénomène a été étudié en détail de manière expérimentale [92, 94, 95] et théorique [96, 97]. L'ensemble de ces études montre clairement que l'activation du bore est un phénomène directement lié à la sursaturation, de la concentration, d'atomes de Si évoluant dans la région où il est localisé.



**Figure 26 :** Phénomène de désactivation et réactivation du bore observé après plusieurs post-recuits isochrones (a) ou isothermes (b) [93]. Dans les deux cas présentés (a) et (b), la préamorphisation est réalisée par implantation d'ions  $\text{Ge}^+$  à 30keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , et les conditions d'implantation de bore sont 500eV  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Le recuit de recristallisation et d'activation a été réalisé à 650°C pendant 5s. L'augmentation des valeurs de résistance carrée correspond à une baisse de la dose active de porteurs (b).

### V.5.3 Effets des défauts étendus sur les propriétés électriques des composants

L'influence des défauts EOR sur les courants de fuite d'une jonction a fait l'objet de nombreuses études. En 1984, Solmi et al. [98] étudient les courants de fuite dans des jonctions minces  $p^+/n$  réalisées par implantation ionique après une étape de préamorphisation. Ils observent que la diminution de la température du recuit a tendance à augmenter les fuites de jonction. Les défauts résiduels dus à l'implantation ionique et à la préamorphisation sont, pour eux, responsables de ces forts courants de fuite. En 1986, ils réalisent une nouvelle expérience [99], et décident d'utiliser des énergies différentes lors de l'étape de préamorphisation (par des ions  $\text{Si}^+$ ) afin de modifier la position des défauts EOR formés. La position des défauts EOR apparaît cruciale, en effet des courants de fuites importants apparaissent seulement lorsque les défauts sont situés dans la zone de charge d'espace de la jonction. Ces défauts constituent des pièges qui favorisent la recombinaison des porteurs et la conduction par effet tunnel à l'origine de ces courants de fuite. Alquier et al. confirment ces observations en 1997 [100] dans une étude plus poussée qui, via des mesures à basse température, montre également l'impact de la position des EOR sur le bruit basse fréquence des diodes p-n. Plus récemment en 2004, Lindsay et al. [101] ont étudié le cas des jonctions ultra-minces, et identifié les paramètres responsables des courants de fuite, ce qui leur a

permis d'optimiser les paramètres d'implantation et de recuit pour diminuer au maximum ces fuites. En jouant sur les conditions de préamorphisation, d'implantation de bore et de recuit ils obtiennent des courants de fuites de l'ordre de  $1.10^{-6}$  A/cm<sup>2</sup> tout en conservant des valeurs de profondeur et de résistance carrée également en accord avec l'ITRS.

Des études concernant des procédés de fabrication plus complexes et proches de ceux utilisés en production ont été effectuées en 2007 par Faifer et al. [102] Dans le cadre de la fabrication des transistors MOS, des poches sont implantées (cf. Figure 13.a), juste après l'étape de préamorphisation. Ces poches du même type de dopage que le substrat mais de concentration plus élevée, permettent de fixer la tension de seuil du transistor en minimisant les phénomènes de canal court (cf. section II.2.3). Faifer et al. [102]. ont montré que les courants de fuite augmentaient de manière significative en présence d'halo fortement dopés en raison de la création de défauts supplémentaires dans la ZCE.

L'influence des défauts EOR sur les courants de fuite d'une jonction a fait l'objet de nombreuses études, on sait notamment que ces derniers doivent être situés en dehors de la ZCE pour ne pas générer de fuites. Mais les défauts d'implantation peuvent également avoir un impact sur l'activation des dopants, c'est ce que nous allons aborder dans la section suivante.

## **VI INTERET DES OUTILS DE SIMULATION**

L'un des enjeux les plus importants que doit relever l'industrie de la micro-électronique actuellement est sans doute la diminution ininterrompue de la taille des dispositifs afin de repousser jusqu'à leurs extrêmes limites la vitesse et la densité de transistors intégrés sur une seule puce. Chaque nouvelle génération requière de très larges efforts de recherche et de développement qui, traditionnellement, consistent à diminuer proportionnellement les règles de dessins de la génération précédente pour satisfaire aux exigences des nouvelles spécifications. Les procédés de fabrication sont alors modifiés en conséquence et optimisés grâce à l'utilisation de plans d'expériences. Le coût de développement de chacune des générations devient alors chaque année plus important. Cette course à la miniaturisation des transistors nécessite obligatoirement une compréhension approfondie et une maîtrise parfaite de l'ensemble des étapes technologiques entrant dans l'élaboration des nouveaux dispositifs. Dans cette optique, les outils de simulation des procédés de fabrication peuvent fournir une aide précieuse et un apport significatif à la diminution des coûts et des temps de développement. Ainsi, les différents effets physiques engendrés par la diminution en taille d'un composant électronique peuvent être analysés plus rapidement et plus finement au cours de simulations sur ordinateur. Pour cela, les logiciels de simulation des procédés de fabrication doivent combiner à la fois la connaissance des phénomènes physiques intervenant dans les étapes technologiques, les algorithmes avancés de maillage et les solveurs performants indispensables pour ce type d'outils. Manifestement, ces programmes de simulation technologique n'ont pas atteint une maturité et une sophistication suffisantes pour totalement abandonner les essais expérimentaux mais ils sont devenus le complément indispensable à tout avancement dans le développement d'une nouvelle génération de puce.

Parmi les procédés de fabrication, on distingue d'une part les étapes structurales (gravure, dépôt et développement de masque) où l'on façonne la géométrie du dispositif et d'autre part les étapes correspondant aux procédés thermiques et de dopage (implantation et recuit d'activation), où l'on manipule les profils d'impuretés. L'étape d'oxydation, qui permet de générer une couche isolante de  $\text{SiO}_2$ , intervient à la fois sur le dopage et sur la géométrie du transistor. L'ensemble de ces étapes peut être étudiée par simulation. D'un point de vue industriel, elle est incontournable car des expériences répétées peuvent s'avérer très coûteuses. La pertinence des résultats de simulation, cependant, dépendra intimement des modèles physiques utilisés et une précision accrue implique également un temps de calcul plus important. Toutefois la fiabilité des simulations est renforcée par la capacité de cette méthode à s'imbriquer avec les autres: paramètres provenant de calculs ab-initio ou calibrés sur données expérimentales en un ensemble complet et cohérent de modèles représentant de façon fiable les données expérimentales disponibles. Nous introduirons dans le paragraphe suivant quelques exemples de simulateurs de procédé de fabrication les plus utilisés dans l'industrie microélectronique.

### **Revue de simulateurs d'implantation et de diffusion**

Pour simuler le profil de dopant et de défauts, il existe plusieurs approches qui ont toutes leurs avantages et leurs inconvénients.

#### Implantation ionique

Les simulateurs actuellement disponibles sont le plus souvent basés sur la méthode de Monte-Carlo. Cette méthode consiste à simuler les collisions successives entre deux atomes pour pouvoir estimer l'emplacement des atomes implantés et les déplacements des atomes de la cible. Les simulateurs les plus performants utilisent l'approximation de collision entre deux atomes (BCA) Parmi ces logiciels, on retrouve :

- Marlowe : issu des travaux de Oen et Robinson [103] et capable de simuler un très grand nombre de conditions expérimentales reliées à l'implantation. Son adaptation aux problèmes plus pointus de la micro-électronique s'appelle UT-Marlowe [104].
- TRIM : (TRansport of Ions in Matter) développé initialement par Ziegler et adapté ensuite aux problèmes de la micro-électronique.
- Les outils de la plateforme Silvaco possèdent aussi leur propre programme BCA développé à l'université de Surrey par I.R. Chakarov [105] et qui permet d'obtenir à la fois le profil du dopant et celui des défauts.
- Synopsys : les profils implantés peuvent être calculés par méthode analytique ou MC. La méthode analytique offre plusieurs distribution : gaussienne, Pearson ou encore double-Pearson (cf. chapitre 2).

#### Diffusion des impuretés

Athena de Silvaco : C'est un simulateur de procédé qui permet de modéliser les différentes étapes de la fabrication des composants électroniques comme l'implantation ionique, la diffusion, la gravure, les dépôts, la lithographie... Cependant le modèle de diffusion utilisé

par Athena utilise les lois de diffusion à l'équilibre thermodynamique, et ne prend donc pas en compte la TED du bore.

- Sentaurus Process : est un simulateur de procédés de fabrication avancé développé par Synopsys®. Il réalise des simulations 1D (unidimensionnelle), 2D (bidimensionnelle) et 3D (tridimensionnelle) et est particulièrement approprié pour le silicium et les semi-conducteurs. Il est aussi bien adapté aux technologies actuellement en production qu'à celles de demain grâce à une base de données de modèles et des programmes régulièrement remis à jour afin d'être le plus prédictif possible. La majorité des étapes des procédés de fabrication peut être simulée telle que l'implantation (Monte Carlo, Taurus MC (Monte Carlo) ou Crystal-TRIM), la diffusion, l'oxydation, la gravure, les dépôts etc.... Il utilise un langage d'écriture Alagator qui permet à chaque utilisateur de créer sa propre simulation avec le choix des équations et des modèles, à partir d'une base commune. La base du modèle de diffusion des dopants dans le silicium utilisé dans ce logiciel est le modèle de diffusion dit "à 5 espèces". Les équations générales de ce modèle reposent sur la base de l'ensemble des réactions entre dopants et défauts ponctuels considérés en conditions hors-équilibre (cf. section IV.2.1). En effet, contrairement au simulateur Athena par exemple, si les concentrations de défauts ponctuels sont très importantes, ce qui est souvent le cas après bombardement ionique, alors les paires dopants-défauts ne peuvent plus être considérés en équilibre avec les dopants. Ceci signifie principalement que les mécanismes de Kick-Out et lacunaire doivent être adaptés à ces conditions particulières.

## REFERENCES DU CHAPITRE I

- 1 T. Skotnicki and P. Bouillon, "Electrical performances of retrograde versus conventional profile MOSFETs", Proc. on VLSI Symp. Tech., p. 327-328 (1996).
- 2 R. H. Dennard, F. H. Gaensslen, H. N. YU et al., "Design of Ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions", IEEE of Solid State Circuits, vol. 9, n°5, p. 256 (1974).
- 3 International roadmap for semiconductor technology. Website: <http://public.itrs.net>.
- 4 G. Baccarani and S. Reggiani, "Performance limits of CMOS technology and perspectives of quantum devices", C.R. Acad. Sci. Paris, t. 1, Série IV, p. 843-873 (2000).
- 5 S. Monfray, "Conception et caractérisation de dispositifs CMOS en technologie SON", thèse de doctorat, Université de Provence, 2003.
- 6 Z. H. Liu, C. Hu, J. H. Huang, T. Y. Chan, M. C. Jeng, P. K. Ko, Y. C. Cheng, "Threshold voltage model for deep-submicrometer MOSFETs", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 40, No. 1., p. 86-95 (1993).
- 7 T. Skotnicki, "Transistor MOS et sa technologie de fabrication", Technique de l'Ingénieur-Traité Électronique, E2430 (2000).
- 8 F. Andrieu, T. Ernst, F. Lime, F. Rochette, K. Romanjek, S. Barraud, C. Ravit, F. Boeuf, M. Jurczak, M. Casse, O. Weber, L. Brévard, G. Reibold, G. Ghibaud, S. Deleonibus, "Experimental and Comparative Investigation of Low and High Field Transport in Substrate- and Process-Induced Strained Nanoscaled MOSFETs", VLSI Tech. Dig., p.176, (2005).
- 9 T. Skotnicki, J.A. Hutchby, T.J. King, H.S.P. Wong and F. Bœuf, "The End of CMOS Scaling", IEEE Circuits and Devices Magazine, Vol. January/February, p. 16-26 (2005).
- 10 B. Doris, "Extreme scaling with ultrathin Si channel MOSFETs", International Electron Device Meeting Technical Digest, p. 267 (2002).
- 11 R. Chau, "A 50nm depleted-substrate CMOS transistor (DST)", International Electron Device Meeting Technical Digest, p. 621 (2001).
- 12 T. Schultz, "Impact of technology parameters on inverter delay of UTB-SOI CMOS", SOI conference Proceedings, Williamsburg. p. 176 (2002).
- 13 K. Uchida, H. Watanabe, J. Koga, A. Kinoshita, S. Takagi, "Experimental study on carrier transport mechanism in ultrathin-body SOI n and p MOSFETs with SOI thickness less than 5nm", International Electron Device Meeting Technical Digest, p. 47 (2002).
- 14 Y. K. Choi, K. Asano, N. Lindert, V. Subramanian, T.-J. King, J. Bokor, and C. Hu, "Ultrathin-body SOI MOSFET for deepsub-tenth micron era", IEEE Electron Device Letters, vol. 21, no. 5, p. 254 (2000).
- 15 H. Uchida, Y. Ieki, M. Ichimura, and E. Arai, "Retarded Diffusion of Phosphorus in Silicon-on-Insulator Structures", Jpn. J. Appl Phys. 39, L137 (2000).
- 16 G. Mannino, A. La Magna, V. Privitera, D. Giubertoni and M. Bersani, "Role of the Si/SiO<sub>2</sub> interface during dopant diffusion in thin silicon on insulator layers", J. Appl. Phys. 100, p. 096112 (2006).

- 17 S. Cristoloveanu and S. S. Li, "Electrical characterization of silicon-on-insulator materials and devices", Kluwer Academic Publishers (1995).
- 18 C. Fenouillet-Beranger, T. Skotnicki, S. Monfray, N. Carriere and F. Bœuf, "Requirements for ultra-thin-film devices and new materials for the CMOS roadmap", *Solid-State Electronics*, vol. 48, p. 961–967 (2004).
- 19 J. Gautier, "Physique des dispositifs pour circuits intégrés silicium", Hermès, 2003.
- 20 F. M. Bufler, A. Schenk, and W. Fichtner, "Strained-Si single-gate versus unstrained-Si double-gate MOSFETs", *Semicond. Sci. Technol.* 19, p. S122–S124 (2004).
- 21 M. Yang, M. leong, L. Shi, K. Chan, V. Chant, A. Chout, E. Gusev, K. Jenkins, D. Boyd, Y. Ninomiya, D. Pendleton, Y. Surpris, D. Heenan, J. Ott, K. Guarini, C. D’Emic, M. Cobb, P. Mooney, B. To, N. Rovedo, J. Benedict, R. MO and H. Ng, "High performance CMOS fabricated on hybrid substrate with different crystal orientations", *IEDM Tech. Dig.*, p. 453 (2003).
- 22 M. Lundstrom, "Fundamentals of Carrier Transport", 2<sup>nd</sup> ed. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 2000.
- 23 A. Shimizu, K. Hachimine, N. Ohki, H. Ohta, M. Koguchi, Y. Nonaka, H. Sata, and F. Ootsuka, "Local mechanical-stress control (LMC): A new technique for CMOS-performance enhancement", *IEDM Tech. Dig.*, p. 433 (2001).
- 24 T. Ghani, M. Armstrong, C. Auth, M. Bost, P. Charvat, G. Glass, T. Hoffmann, K. Johnson, C. Kenyon, J. Klaus, B. McIntyre, K. Mistry, A. Murthy, J. Sandford, M. Silberstein, S. Sivakumar, P. Smith, K. Zawadzki, S. Thompson, and M. Bohr, "A 90nm High Volume Manufacturing Logic Technology Featuring Novel 45nm Gate Length Strained Silicon CMOS Transistors", *IEDM Tech. Dig.*, p. 978 (2003).
- 25 S. Pidin, T. Mori, K. Inoue, S. Fukuta, N. Itoh, E. Mutoh, K. Ohkoshi, R. Nakamura, K. Kobayashi, K. Kawamura, T. Saiki, S. Fukuyama, S. Satoh, M. Kase, and K. Hashimoto, "A novel strain enhanced CMOS architecture using selectively deposited high tensile and high compressive silicon nitride films", *IEDM Tech. Dig.*, p. 213 (2004).
- 26 C.-H. Chen, T.L. Lee, T.H. Hou, C.L. Chen, C.C. Chen, J.W. Hsu, K.L. Cheng, Y.H. Chiu, H.J. Tao, Y. Jin, C.H. Diaz, S.C. Chen, M.-S. Liang, "Stress Memorization Technique (SMT) by Selectively Strained-Nitride Capping for Sub-65nm High-Performance Strained-Si Device Application", *VLSI Tech. Dig.*, p. 56 (2004).
- 27 F. Boeuf, F. Arnaud, B. Tavel et al., "A Conventional 45nm CMOS node Low-Cost Platform for General Purpose and Low Power Applications", *IEDM Tech. Dig.*, p. 425 (2004).
- 28 K. Mistry, M. Armstrong, C. Auth et al., "Delaying Forever : Uniaxial Strained Silicon Transistors in a 90nm CMOS Technology", *VLSI Tech. Dig.*, p. 50 (2004).
- 29 P.R. Chidambaram, B.A. Smith, L.H. Hall et al., "35% Drive Current Improvement from Recessed-SiGe Drain Extensions on 37nm Gate Length PMOS", *VLSI Tech. Dig.*, p. 48 (2004).
- 30 T. Ueno, H.S. Rhee, S.H. Lee et al., "Dramatically Enhanced Performance of Recessed SiGe Source-Drain PMOS by In-Situ Etch and Regrowth Technique (InSERT)", *VLSI Tech. Dig.*, p. 24 (2005).

- 31 P. Bai, C. Auth, S. Balakrishnan et al., "A 65nm Logic Technology Featuring 35nm Gate Lengths, Enhanced Channel Strain, 8 Cu Interconnect Layers, Low-k ILD and 0.57 $\mu\text{m}^2$  SRAM Cell", IEDM Tech. Dig., p. 657 (2004).
- 32 H.S. Yang, R. Malik, S. Narasimha et al., "Dual stress liner for high performance sub-45nm gate length SOI CMOS manufacturing", IEDM Tech. Dig., p. 1075 (2004).
- 33 S. Verdonckt-Vandebroek, E.F. Crabbe, B.S. Meyerson, D.L. Harame, P.J. Restle, J.M.C. Stork, J.B. Johnson, "SiGe-channel heterojunction p-MOSFET's", Transactions on Electron Devices 41, p90 (1994).
- 34 J. Alieu, P. Bouillon, R. Gwozieck, D. Moi, G. Bremond, T. Skotnicki, "Optimisation of Si<sub>0.7</sub>Ge<sub>0.3</sub> channel heterostructures for 0.15/0.18 $\mu\text{m}$  CMOS process", ESSDERC, p144 (1998).
- 35 G. Höck, E. Kohn, C. Rosenblad, H. von Känel, H.J. Herzog, U. König, "High hole mobility in SiGe channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors grown by plasma enhanced-chemical vapor deposition", Appl. Phys. Lett. 76, p. 3920 (2000).
- 36 T. Skotnicki, G. Merckel, T. Pedron, "The voltage-doping transformation: a new approach to the modeling of MOSFET short-channel effects", IEEE Electron Device Letters, vol. 9, n° 3, p. 109-112 (1988).
- 37 Y. M. Kim, G. Q. Lo, D. L. Kwong, H. H. Tseng, and R. Hance, "Anomalous transient diffusion of boron implanted into preamorphized Si during rapid thermal annealing", Appl. Phys. Lett. 55, p. 2316 (1989).
- 38 E. Landi, S. Guimaraes, and S. Solmi, "Influence of nucleation on the kinetics of boron precipitation in silicon", Appl. Phys. A: Materials Science & Processing, 44(2): p. 135-141 (1987).
- 39 H. Strack, J. Appl. Phys. 34(8), p. 2405 (1963).
- 40 D. Lenoble, M.J. Goeckner, S.B. Felch, Z. Fang, J. Galvier, A. Grouillet, "Evaluation of plasma doping for sub-0.18  $\mu\text{m}$  devices", International Conference on Ion Implantation Technology. Proceedings (Cat. No.98EX144), pt. 2, vol. 2, p. 1222-1225 (1998).
- 41 F. Lallement, A. Grouillet, M. Juhel, J.-P. Reynard, D. Lenoble, Z. Fang, S. Walther, Y. Rault, L. Godet, J. Scheuer, "Fabrication of N<sup>+</sup>/P ultra-shallow junctions by plasma doping for 65 nm CMOS technology", Surface & Coatings Technology, vol. 186 (1-2), p. 17-20 (2004).
- 42 B. Dumont, A. Pouydebasque, F. Lallement, D. Lenoble, G. Ribes, J.-M. Roux, S. Vanbergue, and T. Skotnicki, "PLASMA Doping for S/D Extensions: Device Integration, Gate Oxide Reliability and Dynamic Behavior", ESSDERC Proceeding, p.113-117 (2005).
- 43 E. C. Jones and E. Ishida, "Shallow junction doping technologies for ULSI", Mat. Sci. Eng. R24 1 (1998).
- 44 S. Yamakawa, K. Sugihara, T. Furukawa, Y. Nishioka, T. Nakahata, Y. Abe, S. Maruno, Y. Tokuda, "Drivability improvement on deep-submicron MOSFETs by elevation of source/drain regions", IEEE Electr. Dev. Lett. 20, p. 366 (1999).
- 45 K. K. Bourdelle, A. T. Fiory, H.-J. L. Gossmann, and S. P. McCoy, "Implant Dose and Spike Anneal Temperature Relationships", Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 669, J8.1 (2001).

- 46 T. Ito, K. Suguro, T. Itani, K. Nishinohara, K. Matsuo, T. Saito, "Improvement of threshold voltage roll-off by ultra-shallow junction formed by flash lamp annealing", VLSI Technology, Digest of Technical Papers, p. 53-54 (2003).
- 47 S.K.H. Fung et al., "65nm CMOS High Speed, General Purpose and Low Power Transistor Technology for High Volume Foundry Application" proceedings of VLSI 2004, Honolulu, HI, (2004).
- 48 A.Shima et al., "Ultrashallow Junction Formation by non-melt Laser Spike Annealing for 50-nm Gate CMOS," proceedings of VLSI 2004, Honolulu, HI, (2004).
- 49 Y. M. Haddara, B. T. Folmer, M. E. Law and T. Buyuklimanli, "Accurate measurements of the intrinsic diffusivities of boron and phosphorus in silicon", Appl. Phys. Lett., 77(13), p. 1976 (2000).
- 50 J.W. Armstrong. J. Electrochem. Soc., 109, p. 1065 (1962).
- 51 C. S. Fuller and J. A Ditzenberger, "Diffusion of donor and acceptor element in silicon", J. Appl. Phys., 27, p. 544 (1956).
- 52 O. Kraus, H. Ryssel and P. Pichler, "Determination of aluminum diffusion parameters in silicon. J. Appl. Phys., 91(9), p. 5645 (2002).
- 53 P.M. Fahey, P.B. Griffin and J.D. Plummer, "Point defects and dopant diffusion in Si", Rev. of Mod. Phys., vol. 61, n° 2 (1989).
- 54 A. Pakfar, "Modélisation de la diffusion des dopants dans les alliages SiGe et SiGeC", thèse de doctorat , présenté à Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (2003).
- 55 U. Gösele and H. Strunk, "High-Temperature diffusion of phosphorus and boron in silicon via vacancies or via self-interstitials", J. Applied Physics, 20, p. 265 (1979).
- 56 P. Pichler, "Properties of Vacancies in Silicon Determined from Laser–Annealing Experiments", In Proceedings of the 32<sup>nd</sup> European Solid-State Device Research Conference (2002).
- 57 P. E. Blochl, E. Smargiassi, R. Car, D. B. Laks, W. Andreoni and S. T. Pantelides, "First-principles calculations of self-diffusion constants in silicon", Phys. Rev. Lett., 70(16), p. 2435 (1993).
- 58 K. Pandey, "Defects in semiconductors", Material Science Forum, 10-12, p. 121 (1986).
- 59 H.J. Mayer, H. Mehrer and K. Maier, "Radiation effects in semiconductors", Technical report, Institut of physics conference Serie number 31, London, p. 186 (1977).
- 60 H. Bracht, E. E. Haller and R. Clark-Phelps, "Silicon self-diffusion in isotope heterostructures", Phys. Rev. Lett., 81(2), p. 393 (1998).
- 61 H. Bracht, N. A. Stolwijk and H. Mehrer, "Properties of intrinsic point defects in silicon determined by zinc diffusion experiments under nonequilibrium conditions", Phys. Rev. B, 52(23), p. 16542 (1995).
- 62 A. Ural, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Experimental evidence for a dual vacancy–interstitial mechanism of self-diffusion in silicon", Appl. Phys. Lett. 73, p. 1706 (1998).
- 63 S.M. Hu, "Formation of stacking faults and enhanced diffusion in the oxidation of silicon", J. Appl. Phys. 45, p. 1567 (1974).

- 64 P. Fahey, G. Barbuscia, M. Moslehi, and R. W. Dutton, "Kinetics of thermal nitridation processes in the study of dopant diffusion mechanisms in silicon", *Appl. Phys. Lett.* 46, p. 784 (1985).
- 65 A. Ural, P. B. Griffin and J. D. Plummer, "Self-Diffusion in Silicon: Similarity between the Properties of Native Point Defects", *Phys. Rev. Lett.* 83(17), p. 3454-3457 (1999).
- 66 R.B. Fair, "Impurity doping processes in silicon", *Appl. Sol. State Science Suppl.* 2B, F.F.Y. Wang editor, north Holland, (1981).
- 67 P. M. Fahey, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Point defects and dopant diffusion in silicon", *Rev. Mod. Phys.*, 61(2), p. 289 (1989).
- 68 P. Pichler, "Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon", Birkhäuser, Springer, p. 554, New York (2004).
- 69 A. Ural, P.B. Griffin, and J.D. Plummer, "Fractional contributions of macroscopic diffusion mechanisms for common dopants and self-diffusion in silicon", *J. Appl. Phys.*, vol. 85 (9), p. 6640 (1999).
- 70 A. Claverie, B. Colombeau, G. Ben Assayag, C. Bonafos, F. Cristiano, M. Omri and B. de Mauduit, "Thermal evolution of extended defects in implanted Si: impact on dopant diffusion", *Mat. Sci. in Semic. Proc.* 3, p. 269 (2000).
- 71 A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag and F. Cristiano, "Extended defects in shallow implants", *Appl. Phys. A* 76, 1025-1033 (2003).
- 72 J.W. Corbett, J.P. Karins and T.Y. Tan, "Ion-induced defects in semiconductors", *Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B* 182-183, p. 457 (1981).
- 73 N.E.B. Cowern, D. Alquier, M. Omri, A. Claverie and A. Nejim, "Transient enhanced diffusion in preamorphized silicon: the role of the surface", *Nucl. Inst. Meth. in Phys. Res. B* 148, p. 257 (1999).
- 74 M.M. De Souza, C.K. Ngw, M. Shishkin and E.M. Narayanan, "Planar Self-Interstitial in Silicon", *Phys. Rev. Lett.* 83, 1799 (1999).
- 75 S. Takeda, "The structures of extended defects in Si and other materials studied by HRTEM", *Inst. Phys. Conf. Ser.* 157, 25 (1997).
- 76 F. Cristiano, J. Grisolia, B. Colombeau, M. Omri, B. de Mauduit, A. Claverie, F. Giles and N.E.B. Cowern, "Formation energies and relative stability of perfect and faulted dislocation loops in silicon", *J. Appl. Phys.* 87, p. 8420 (2000).
- 77 D.J. Eaglesham, P.A. Stolk, H.J. Gossmann and J.M. Poate, "Implantation and transient B diffusion in Si: The source of the interstitials", *Appl. Phys. Lett.* 65, p. 2305 (1994).
- 78 J. Li and K.S. Jones, "{311} defects in silicon: The source of the loops", *Appl. Phys. Lett.* 73 (25), p. 3748 (1998).
- 79 P.A. Stolk, H.J. Gossmann, D.J. Eaglesham and J.M. Poate, "Implantation and transient boron diffusion: the role of the silicon self-interstitial", *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 96, p. 187 (1995).
- 80 E. Lampin, V. Senez and A. Claverie, "Modeling of the transient enhanced diffusion of boron implanted into preamorphized silicon", *J. Appl. Phys.* 85, p. 8137 (1999).

- 81 L. Laânab, C. Bergaud, M.M. Faye, J. Faure, A. Martinez and A. Claverie, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 279, 381 (1993).
- 82 J. Niess, S. Paul, S. Buschbaum, P. Schmid and W. Lerch, "Mainstream RTP for SD engineering first applications to latest results", *Mat. Sci. and Eng. B*, vol. 114-115, p. 141-150 (2004).
- 83 P. A. Packan and J. D. Plummer. "Transient diffusion of low-concentration B in Si due to <sup>29</sup>Si implantation damage", *Appl. Phys. Lett.*, 56(18), p. 1787 (1990).
- 84 A. E. Michel, W. Rausch, P. A. Ronsheim, and R. H. Kastl, "Rapid annealing and the anomalous diffusion of ion implanted boron into silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 50(7), p. 416-418 (1987).
- 85 W.K. Hofker, H. W. Werner, D. P. Oosthoek and N.J. Koeman, "Boron implantations in silicon : A comparison of charge carrier and boron concentration profiles". *Appl. Phys.*, 4(2), p. 125 (1974).
- 86 N. E. B. Cowern, K. T. F. Janssen and H. F. F. Jos, "Transient diffusion of ion-implanted B in Si : Dose, time, and matrix dependence of atomic and electrical profiles", *J. Appl. Phys.*, 68(12), p. 6191 (1990).
- 87 A. D. Lilak, M. E. Law, L. Radic, K. S. Jones, and M. Clark, "Kinetics of boron reactivation in doped silicon from Hall effect and spreading resistance techniques", *Appl. Phys. Lett.*, 81(12), p. 2244-2246 (2002).
- 88 A. Mokhberi, P.B. Griffin, J.D. Plummer, E. Paton, S. McCoy, K. Elliott, "A comparative study of dopant activation in boron, BF<sub>2</sub>, arsenic, and phosphorus implanted silicon", *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 49(7): p. 1183-1191 (2002).
- 89 Shauly, E.N. and S. Lachman-Shalem, "Activation improvement of ion implanted boron in silicon through fluorine co-implantation", *J. Vac. Sci. Technol. B, Microelectronics and Nanometer Structures*, 22(2): p. 592-596 (2004).
- 90 B. Sadigh, T. J. Lenosky, S. K. Theiss, M.-J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, and M. A. Foad, "Mechanism of Boron Diffusion in Silicon: An Ab Initio and Kinetic Monte Carlo Study", *Phys. Rev. Lett.*, 83(21): p. 4341 (1999).
- 91 S. K. Theiss, M. J. Caturla, M. D. Johnson, J. Zhu, T. Lenosky, B. Sadigh and T. Diaz de la Rubia, "Atomic scale models of ion implantation and dopant diffusion in silicon", *Thin Solid Films*, 365(2): p. 219-230 (2000).
- 92 B. J. Pawlak, R. Surdeanu, B. Colombeau, A. J. Smith, N. E. B. Cowern, R. Lindsay, W. Vandervorst, B. Brijs, O. Richard, and F. Cristiano, "Evidence on the mechanism of boron deactivation in Ge-preamorphized ultrashallow junctions", *Appl. Phys. Lett.*, 84(12): p. 2055-2057 (2004).
- 93 F. Cristiano, N. Cherkashin, P. Calvo, Y. Lamrani, X. Hebras, A. Claverie, W. Lerch and S. Paul, "Thermal stability of boron electrical activation in preamorphised ultra-shallow junctions", *Mat. Sci. Eng. B*, 114-115: p. 174-179 (2004).
- 94 B. Colombeau, A. J. Smith, N. E. B. Cowern, B. J. Pawlak, F. Cristiano, R. Duffy, A. Claverie, C. J. Ortiz, P. Pichler, E. Lampin, C. Zechner, "Current Understanding and Modeling of B Diffusion and Activation Anomalies in Preamorphized Ultra-Shallow Junctions", *MRS Proceedings*, 810(C3.6): p. 91 (2004).

- 95 J.-Y. Jin, J. Liu, U. Jeong, S. Metha, and K. S. Jones, "Study of reverse annealing behaviors of p<sup>+</sup>/n ultrashallow junction formed using solid phase epitaxial annealing", *J. Vac. Sci. Technol. B*, 20(1): p. 422-426 (2002).
- 96 M. Aboy, L. Pelaz, L. A. Marqués, J. Barbolla, A. Mokhberi, Y. Takamura, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Atomistic modeling of deactivation and reactivation mechanisms in high-concentration boron profiles", *Appl. Phys. Lett.*, 83(20), p. 4166-4168 (2003).
- 97 Mattoni, A. and L. Colombo, "Boron ripening during solid-phase epitaxy of amorphous silicon", *Phys. Rev.*, 69(4), p. 045204 (2004).
- 98 S. Solmi, E. Landi, and P. Negrini, "Effect of the annealing conditions on the electrical characteristics of p<sup>+</sup>/n shallow junctions", *Electron Device Letters, IEEE*, 5(9), p. 359-361 (1984).
- 99 E. Landi and S. Solmi, "Electrical characterization of p<sup>+</sup>/n shallow junctions obtained by boron implantation into preamorphized silicon", *Solid-State Electronics*, 29(11), p. 1181-1187 (1986).
- 100 D. Alquier, B. Van Haaren, C. Bergaud, R. Plana, J. Griffeuil and A. Martinez, "Influence of Depth Position of End-of-Range Defects on Current-Voltage and Noise Characteristics of Shallow (p<sup>+</sup> In) Junctions", *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 36: p. 1999-2003 (1997).
- 101 R. Lindsay, K. Henson, W. Vandervorst, K. Maex, B. J. Pawlak, R. Duffy, R. Surdeanu, P. Stolk, J. A. Kittl, S. Giangrandi, "Leakage optimization of ultra-shallow junctions formed by solid phase epitaxial regrowth", *J. Vac. Sci. Technol. B: Microelec-tronics and Nanometer Structures*, 22(1): p. 306-311 (2004).
- 102 V. N. Faifer; D. K. Schroder, M. I. Current, T. Clarysse, P. J. Timans, T. Zangerle, W. Vandervorst, T. M. H. Wong, A. Moussa, S. McCoy, J. Gelpy, W. Lerch, S. Paul, D. Bolze, "Leakage Current and Dopant Activation Characterization of SDE/Halo CMOS Junctions with Non-Contact Junction Photo-Voltage Metrology", *AIP Conference Proceedings*, 931(1), p. 246-250 (2007).
- 103 M.T. Robinson and I.M. Torrens, "Computer simulation of atomic displacement cascades in solids in the binary-collision approximation", *Physical Review B*, 9(12), 5008 (1974).
- 104 S.J. Morris, B. Obradovic, S.-H. Yang and A.F. Tasch, "Modeling of boron, phosphorous, and arsenic implants into single-crystal silicon over a wide energy range (Few keV to Several MeV)", In *IEDM Tech. Dig.* 96, San Francisco CA, page 721 (1996).
- 105 I. Chakarov and R.P. Webb, "Crystal - binary collision simulation of atomic collisions and dynamic buildup in crystalline silicon", *Radiation Effects and Defects in Solids*, 130/131, 447 (1994).

# **Chapitre II**

**Rappels théoriques sur  
l'évolution des défauts  
d'implantation et la diffusion  
des dopants**



## CHAPITRE II : RAPPELS THEORIQUES SUR L'EVOLUTION DES DEFAUTS D'IMPLANTATION ET LA DIFFUSION DES DOPANTS

### I INTRODUCTION

Ce chapitre, nous apportera les bases théoriques concernant les défauts induits par implantation ionique ainsi que la diffusion des dopants. Nous présenterons d'abord les différents types de défauts que nous pourrions rencontrer, la manière dont ils sont générés, et leur évolution lors des recuits thermiques. Nous expliquerons ensuite les effets qu'ils ont sur les dopants et en particulier leur diffusion anormale qui apparaît au cours de la formation de jonctions ultrafines. Nous verrons que cette accélération est liée à la présence d'une forte sursaturation en auto-interstitiels de silicium générés au cours de l'implantation ionique, et que seule une description correcte de l'évolution de cette sursaturation nous permet de modéliser cette diffusion. A ce phénomène, il convient d'ajouter un second effet, qui est relié à la présence pour des concentrations relativement fortes de dopants, d'amas mixtes de dopants et d'interstitiels. Nous traiterons alors, en nous basant sur l'exemple du bore, de l'interaction existante entre les défauts et le dopant lors de la création de défauts mixtes tels les BICs (Boron Interstitial Clusters) rendant le bore immobile et surtout inactif pour la réalisation de jonctions. Finalement, nous verrons que l'on peut étendre notre compréhension du problème des agglomérats mixtes aux autres dopants comme l'arsenic, le phosphore ou l'antimoine. Dans la dernière partie de ce chapitre, les problèmes liés à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , notamment la ségrégation et l'exo-diffusion des dopants, seront discutés.

### II IMPLANTATION IONIQUE

Comme évoqué dans le chapitre I, les progrès réalisés concernant l'implantation ionique, ont fait d'elle la meilleure méthode pour introduire les impuretés dans le silicium. Elle permet un contrôle précis de la dose de dopants introduits ainsi que de l'énergie du faisceau, et par conséquent de la distribution en profondeur des impuretés implantées.

#### II.1.1.1 Génération de défauts

L'implantation ionique n'est pas sans effet sur le réseau cristallin du substrat. En effet, chaque ion incident possède une énergie cinétique qui diminue lors des interactions ion-matière qui freinent l'ion implanté jusqu'à son arrêt total. Par conséquent, lorsqu'un ion incident rencontrant un atome cible possède une énergie  $E$  supérieure à  $E_L$  (énergie seuil prise égale à 15eV pour du silicium monocristallin), il va l'éjecter de son site substitutionnel et lui conférer une énergie comprise entre 0 et  $E-E_L$ . Si cette énergie est suffisamment élevée, l'atome ainsi déplacé pourra générer une cascade de collisions au sein du substrat. A chaque déplacement d'un atome du cristal, une paire interstitiel-lacune (appelée paire de Frenkel) est créée (cf. Chapitre I section IV). La grande majorité de ces paires peut se recombiner soit pendant l'étape même d'implantation, soit dès le début de l'étape de recuit. Néanmoins, le profil final de la jonction est étroitement lié à la quantité de défauts ponctuels qui "survivent" aux deux

étapes d'implantation et de recuit (cf. section III), leur concentration dépendant des paramètres d'implantation (ion implanté, énergie, dose, ...).

On distingue deux types d'implantation selon le degré d'endommagement du cristal : lorsque la densité de défauts ponctuels est supérieure à une densité critique, une zone amorphe est créée (Figure 27) jusqu'à une profondeur déterminée par les conditions d'implantation et l'implantation est dite "amorphisante". L'épaisseur de cette couche amorphe est généralement plus grande que le libre parcours moyen  $R_p$  des ions implantés et dépend de la masse de l'ion, de son énergie, et de la dose implantée. Pour des concentrations inférieures de défauts ponctuels, le substrat, tout en étant endommagé, conserve son caractère cristallin et l'implantation est dite "non-amorphisante".

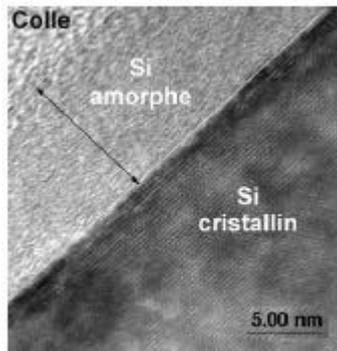


Figure 27 : Image TEM après implantation  $\text{BF}_2^+$  5keV  $10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

Suivant le type d'implantation, on estimera différemment la nature et la quantité des défauts ponctuels présents après implantation.

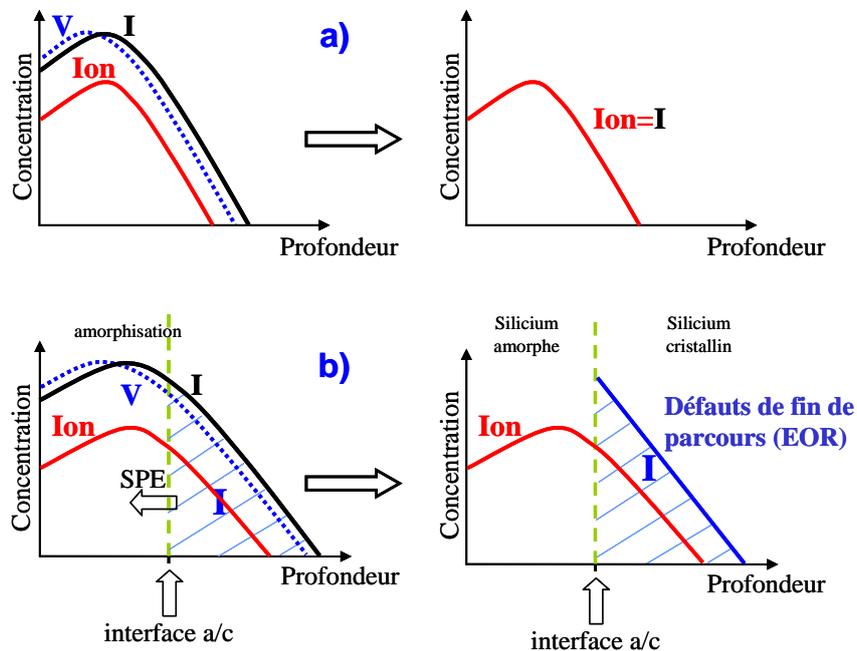


Figure 28 : Schéma de principe du calcul de l'excès net de défaut dans le cas a) où l'implantation n'est pas amorphisante et dans le cas b) où l'implantation amorphise le substrat.

La Figure 28.a illustre le cas où l'implantation du dopant génère une quantité importante de défauts sans toutefois amorphiser le substrat. Cette situation se présente pour des ions légers implantés à des énergies et à des doses faibles dans le silicium. En raison du recul des atomes de la cible lors des collisions successives, on retrouve un profil d'interstitiels situé plus en

profondeur par rapport à celui des lacunes. Néanmoins, leur distance étant négligeable, comparée à la diffusivité des I et des V aux températures de recuit utilisées, l'ensemble des lacunes et des interstitiels vont se recombinaison entre eux ( $C_I - C_V = 0$ ). Il ne subsiste alors que les impuretés dopantes en site interstitiel. Le passage du dopant en site substitutionnel lors de son activation va, par le mécanisme du kick-out, générer un auto-interstitiel de silicium ( $I_{act}$ ) pour chaque atome de dopant. Ce cas de figure est appelé le modèle "+1" [1, 2] qui stipule que dans le cas d'une implantation d'ions légers, les profils de dopant et d'interstitiels se superposent (cf. Figure 28.a). La densité totale d'interstitiels en excès ( $\Phi_{exces}$ ) est déterminée dans ce cas par :

$$\Phi_{exces} = \int_0^{L=\infty} (C_I - C_V + C_{I_{act}}) dz = \int_0^{L=\infty} (C_{I_{act}}) dz$$

Il prévoit que les défauts se forment autour du rang projeté  $R_p$  et que le nombre d'atomes de Si interstitiels pris dans les défauts étendus qui se forment au cours du recuit est égal au nombre d'atomes de dopant implantés, autrement dit à la dose. Plusieurs études ont permis de confirmer expérimentalement ce modèle [3] et de préciser qu'il ne s'applique convenablement que si les répartitions spatiales des lacunes et des interstitiels générés par l'implantation ne sont pas trop éloignés, permettant ainsi la recombinaison optimale de ces défauts ponctuels. Cette condition est bien vérifiée lorsque l'on implante des ions légers comme le bore à faible énergie, contrairement aux cas d'implantations d'ions lourds à haute énergie [4].

Le second cas où l'implantation amorphise le substrat est schématisé par la Figure 28.b : on considère que la couche amorphe va recristalliser parfaitement par épitaxie en phase solide (section III) lors du recuit, laissant dans cette zone la concentration de défauts à sa valeur d'équilibre thermodynamique. Par contre, en raison du décalage en profondeur entre les profils de concentration des interstitiels et des lacunes, la région située en dessous de la couche amorphe contiendra un excès d'interstitiels [5] dont la densité totale est déterminée par :

$$\Phi_{exces} = \int_{z_{a/c}}^{L=\infty} (C_I - C_V) dz$$

Ces interstitiels sont à l'origine des défauts étendus qui se forment pendant le recuit (cf. Chapitre I section V).

### II.1.1.2 Simulation Sentaurus Process

La distribution des profils des espèces implantées et la formation éventuelles de zones amorphes peuvent être décrites de deux façons différentes : Fonctions analytiques et calculs Monte Carlo (MC). Il est rare que les profils implantés soient correctement décrits à l'aide de distribution de Gauss, il est donc possible d'utiliser d'autres fonctions avec des moments d'ordre supérieur, telle que la distribution de Pearson ou encore double-Pearson. Ces moments de distribution, fournis sous forme de tables, dépendent de l'espèce ionique, de l'énergie et de la dose d'implantation, mais aussi des angles d'inclinaison et de rotation de l'échantillon. Lorsque l'implantation analytique est utilisée, la formation d'une couche amorphe est calculée avec les modèles développés par Hobler [6]. En effet, Hobler et al. ont noté qu'il y a une corrélation entre l'extension de la région amorphisée (déterminée par les

résultats expérimentaux) et la quantité de défauts ponctuels calculée à une concentration seuil de  $1.5 \times 10^{22} \text{at.cm}^{-3}$ . Pour les implantations MC on utilise une approche statistique, basée sur le module de collision binaire [7], pour calculer la pénétration des ions implantés dans la cible et l'accumulation du dommage dans le réseau cristallin. Deux codes de collisions binaires sont disponibles : Taurus MC [8] ou Crystal-TRIM [9].

### II.1.1.3 Conclusion

L'étude de l'implantation est importante pour la modélisation de la diffusion transitoire et accélérée. On retiendra que la simulation du recuit après implantation est fortement dépendante de la bonne estimation du profil initial d'implantation et du réservoir de défauts ponctuels générés au cours de cette opération.

## III EVOLUTION DES DEFAUTS AU COURS DU RECUIT D'ACTIVATION

Nous avons vu qu'au cours de l'implantation du dopant, de nombreux défauts ponctuels sont générés et qu'une majorité d'entre eux se recombinent immédiatement après leur création. Nous allons maintenant nous intéresser au devenir des interstitiels et des lacunes qui ont subsisté et qui vont évoluer durant le recuit d'activation. Nous allons décrire l'ensemble des possibilités d'évolution offertes à ces défauts. Comme nous l'avons démontré au cours du chapitre précédent, le coefficient de diffusion effectif du dopant est directement lié à la concentration de défauts ponctuels présents localement. Il est donc important de comprendre l'ensemble des phénomènes physiques pouvant modifier cette concentration locale de défauts.

### III.1 Recombinaison des défauts ponctuels

#### III.1.1 *Épitaxie en phase solide*

L'implantation, dans le cas des fortes doses ou lorsque l'ion implanté est relativement lourd, peut endommager fortement le substrat et lui faire perdre son caractère cristallin. On se retrouve alors avec un substrat présentant en surface une couche amorphe et, plus en profondeur, un matériau cristallin (voir Figure 28.b.). L'épaisseur de la zone amorphe est caractéristique des conditions d'implantations telles que la nature de l'ion implanté, l'énergie d'implantation, la dose ou la température du substrat. On observe de plus, proche de la limite amorphe/cristal (a/c) et après un recuit à plus de 900°C, des défauts de fin de parcours constitués essentiellement de boucles de dislocations [10]. Pendant les premiers instants du recuit et à basse température (typiquement entre 500°C et 600°C) la couche amorphe va recristalliser par épitaxie en phase solide (SPE) [11, 12]. La vitesse de recristallisation de la couche est déterminée en mesurant successivement l'évolution de l'épaisseur de la couche amorphe [13]. Ainsi pour du silicium orienté  $\langle 100 \rangle$ , on obtient une vitesse de recristallisation constante qui varie avec la température selon l'expression suivante [11] :  $V = V_0 \exp(-E_a/kT)$ . Cette vitesse de recristallisation est aussi fonction de l'orientation cristalline et de la concentration de dopant et de la température [12]. Pour une bonne revue, le lecteur pourra se reporter aux travaux de Olson et Roth [14]. La concentration de défauts ponctuels est considérée égale à sa valeur à l'équilibre thermodynamique après recristallisation.

### III.1.2 Recombinaison en profondeur

Parmi les possibilités d'évolution, la plus simple est l'annihilation des paires de Frenkel. Lorsqu'un auto-interstitiel de silicium passe à proximité d'une lacune, il va alors se repositionner en position substitutionnelle. Les recuits d'activation s'opérant à haute température, les défauts ponctuels diffusent alors très rapidement et ainsi augmentent la probabilité qu'un interstitiel rencontre une lacune.

La vitesse de recombinaison entre ces interstitiels et ces lacunes constitue un des paramètres importants pour déterminer l'évolution des concentrations de défauts ponctuels. La réaction peut être exprimée sous la forme :



où  $< 0 >$  représente l'absence de défauts dans le réseau cristallin. L'effet de cette réaction est d'apporter une interdépendance entre la distribution des lacunes et celle des interstitiels.

Les constantes de réaction  $k_f$  et  $k_r$  sont dépendantes de la barrière d'énergie d'activation qui elle-même est fonction des limites cinétiques et diffusionnelles de la réaction [15]. Ce mécanisme est supposé être thermiquement activé et pour que la recombinaison puisse se produire il est nécessaire de surmonter une barrière d'énergie libre. Afin de déterminer cette barrière d'activation, des études différentes [16, 17] proposent des valeurs situées entre 1.1 et 1.5eV.

Le simulateur Sentaurus Process considère que la vitesse de recombinaison est indépendante de la température et attribue la valeur de 0eV à cette barrière d'énergie.

### III.1.3 Recombinaison avec des impuretés

Une autre évolution possible à ne pas négliger est le piégeage des défauts ponctuels par une impureté différente du dopant. L'utilisation du carbone pour piéger les auto-interstitiels est l'une des techniques utilisées par les technologues pour réduire la diffusion. Pour le silicium, la formation du complexe  $C_S I$  va entraîner une diminution significative de la concentration d'interstitiels, réduisant ainsi la diffusion accélérée. De nombreuses études quantitatives ont montré qu'un atome de carbone  $C_S$  peut capturer en moyenne un peu plus qu'un atome de silicium interstitiel [18] [19] [20]. La formation des paires  $C_I C_S$  et  $C_I I$  contribue de la même façon à la diminution de la diffusion accélérée [21]. Le fluor peut également réduire la diffusion des dopants grâce à la formation du complexe F-V et F-I comme cela a été suggéré par la plupart des résultats expérimentaux de la littérature [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. L'oxygène influence aussi la diffusion des dopants en se couplant avec les défauts ponctuels, permettant la diffusion des atomes dopants. Les impuretés du cristal comme le carbone, l'oxygène mais aussi les atomes de dopants peuvent aussi constituer des pièges à interstitiels et à lacunes. Watkins [29] a ainsi pu identifier le mécanisme mis en jeu, à savoir le passage de l'impureté d'un site substitutionnel à un site interstitiel comme lors du mécanisme de "Kick Out". Les impuretés vont alors migrer (mobiles à température ambiante) et éventuellement former des complexes stables avec une autre impureté.

### III.1.4 Effet de la surface

Le contrôle des effets canaux courts pour les nouvelles technologies nécessite des énergies d'implantation sans cesse réduites. Ainsi les défauts ponctuels générés suite à l'étape d'implantation ionique du dopant sont très proches de la surface du silicium et le rôle de celle-ci devient d'autant plus prépondérant. Cette surface que l'on considère comme un puit infini de centres de recombinaison aussi bien pour les interstitiels que pour les lacunes, va entraîner une très forte diminution des défauts ponctuels. Le flux de recombinaison des défauts intrinsèques du silicium à la surface est donné par la formule [30] :

$$\text{Équation 32} \quad F_{Surf,x} = K_{Surf,eff} (C_x - C_x^*)$$

où  $C_x$  est la concentration du défaut dans le silicium proche de la surface,  $C_x^*$  est sa concentration à l'équilibre thermodynamique et  $K_{Surf,eff}$  représente la vitesse de recombinaison à la surface.

La vitesse de recombinaison à la surface constitue un paramètre physique qui retranscrit à la fois la capacité et l'efficacité pour l'interface à absorber les défauts ponctuels. Ce paramètre est le plus souvent considéré comme constant au cours du temps.

### III.2 Réaction d'agglomérats d'interstitiels

Même si la recombinaison des défauts ponctuels est le mécanisme prédominant après implantation ionique, certains défauts vont subsister en formant des paires mobiles ( $I_2$  ou  $V_2$ ), soit se regrouper pour former des agglomérats. Les amas lacunaires ne se forment que pour des conditions particulières qui ne correspondent pas aux conditions usuelles des procédés de fabrication en microélectronique. Ces amas lacunaires se forment généralement lorsque l'on implante un ion léger à haute énergie et qu'il subsiste une zone riche en lacunes suffisamment importante pour que les lacunes survivent à la recombinaison directe avec la surface ou avec les interstitiels [31]. C'est pourquoi nous nous focaliserons sur les phénomènes mettant en jeu uniquement des interstitiels.

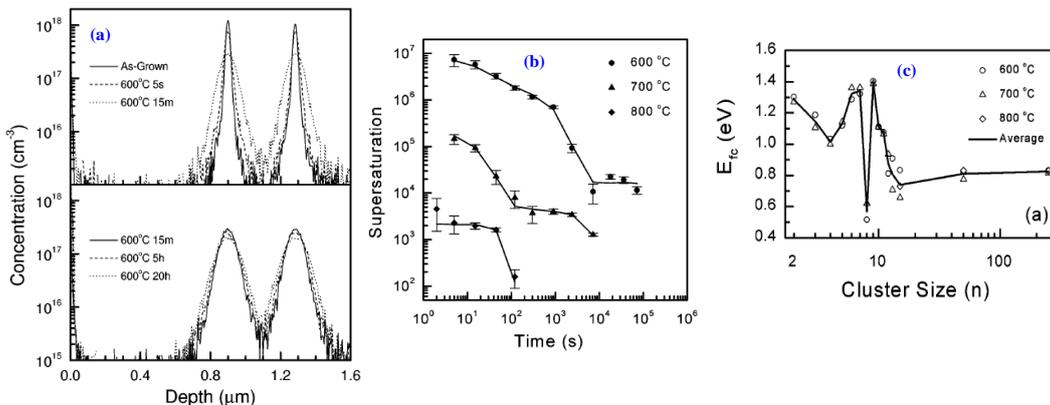
Nous allons, dans un premier temps, exposer les caractéristiques essentielles de ces amas formés uniquement d'auto-interstitiels. Nous distinguerons trois grandes catégories d'agglomérats en les classant selon leurs tailles et leurs structures cristallographiques. Nous retrouvons, parmi ces agglomérats, les petits amas d'interstitiels (SMICs pour Small Interstitial Clusters), les défauts {311} et les boucles de dislocations (parfaites ou fautées). Ensuite, nous expliquerons quels sont les mécanismes qui régissent leurs croissance ainsi que leurs transformations au cours du recuit. Nous verrons que ces défauts vont croître en échangeant les interstitiels qui les composent et vont donc maintenir une forte sursaturation d'interstitiels libres à leur voisinage. Cette évolution va donc influencer la diffusion des dopants. Finalement nous présenterons deux modèles proposés dans la littérature pour décrire la formation d'agglomérats d'interstitiels. Ces modèles, basés sur les mêmes considérations physiques, ont une approche très différente et caractéristique de la volonté de résoudre ce problème en ayant des préoccupations opposées. L'un des modèles est soucieux de respecter au mieux la physique des défauts et l'autre s'attache plutôt à la rapidité de calcul.

### III.2.1 Structure des défauts étendus

#### III.2.1.1 Petits amas d'interstitiels (SMICs)

Ce sont des agglomérats formés d'au moins deux atomes et au plus de quelques dizaines d'atomes de Silicium interstitiel. À cause de leur faible taille, leur détection par microscopie électronique à transmission est difficile et la connaissance de leur structure cristallographique est très imparfaite. Cependant, des études basées sur la spectroscopie transitoire des niveaux profonds (DLTS) ainsi que sur la photoluminescence (PL) permettent d'avancer que la différence entre ces petits clusters d'interstitiels et les défauts {311} n'est pas uniquement une question de taille mais qu'il existe aussi une distinction dans leur structure cristallographique [32]. On a alors souvent recours aux calculs ab-initio pour déterminer les configurations stables ainsi que les énergies de formation des petits amas ne contenant que quelques atomes.

Avec une toute autre approche, Cowern et al. [33] ont déterminé les énergies de formation des SMICs par ajustement de modèle, en observant la diffusion de deux marqueurs de bore (Figure 29.a) réalisés par technique CVD (Chemical Vapeur Deposition) à des profondeurs de 0.9 et 1.3 $\mu\text{m}$ . Ces auteurs ont généré un réservoir d'auto-interstitiels près de la surface en réalisant une implantation de silicium à 40keV avec une dose de  $2 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$ . A partir de cette sursaturation en interstitiels (Figure 29.b), toute une population d'amas d'interstitiels de tailles diverses va se former proche de la surface et au cours du recuit sous flux de  $\text{N}_2$ .



**Figure 29 :** a) Evolution de la diffusion à 600°C des deux pics de bore disposés à 0.9 et 1.3 $\mu\text{m}$ . b) Evolution de la sursaturation en auto-interstitiel après une implantation de Si à 40keV à  $2 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$  pour trois recuits à 600, 700 et 800°C. c) Estimation des énergies de formations des amas d'interstitiels en fonction du nombre d'atome de silicium qu'ils contiennent (d'après [33]).

Au cours du recuit, ces agglomérats vont, dans un premier temps, capturer des interstitiels libres, puis dans un second temps, et selon leurs tailles, libérer les atomes de silicium qui les constituent. Le nombre d'interstitiels libres présents dans le silicium est alors directement lié à l'évolution de ces amas d'interstitiels ainsi qu'à l'efficacité de recombinaison de la surface. L'intérêt majeur de cette expérience se situe dans la décorrélation spatiale des effets de la diffusion du bore avec la formation des amas d'interstitiels. A partir des observations sur la diffusion des marqueurs de bore, les auteurs ont calculé l'accélération de la diffusion et sont remontés à l'évolution au cours du temps de la sursaturation en interstitiels (cf. Figure 29.b). Ils en extraient, la valeur optimale du produit  $D_i C_i^*$  et les valeurs des énergies de formation des agglomérats d'interstitiels (Figure 29.c).

Ainsi, Cowern et al. ont obtenu plusieurs minima indiquant que certaines configurations d'amas sont plus probables que d'autres. La Figure 29.c rassemble les énergies de formation obtenues par Cowern et al.. Ils ont prévu ainsi une faible énergie de formation pour des amas de taille  $n=4$  et  $n=8$ , synonyme d'une grande stabilité pour les agglomérats de cette taille. Ils ont calculé de plus la répartition des interstitiels piégés en fonction de la taille de l'agglomérat. Kim et al. [34] ont extrait des énergies de formation par interstitiel qui varient en fonction de la taille du défaut et ont confirmé par calculs ab-initio la relative stabilité des agglomérats de taille  $n=4$  [35]. Schiettekatte et al. [36] ont pu confirmer expérimentalement la stabilité des amas de taille  $n=8$  sans pour autant valider les valeurs des énergies de formation obtenues par Cowern.

Ces petits agglomérats sont les précurseurs de la nucléation de défauts extrinsèques de plus grande taille comme les défauts  $\{311\}$  ou les boucles de dislocations.

### III.2.1.2 Défauts $\{311\}$

Les défauts  $\{311\}$  sont des précipités quasi unidimensionnels d'atomes de Si. Ces défauts sont constitués de chaînes d'interstitiels qui s'insèrent dans le cristal en position de faute d'empilement dans les plans de type  $\{311\}$  et s'allongent dans les directions de type  $\langle 110 \rangle$ . Leur vecteur de déplacement  $b$ , dit vecteur de Burgers, se trouve dans la direction  $\langle 116 \rangle$  et a pour norme  $b = 0,1076$  nm [37]. Ces connaissances sont la base nécessaire au calcul de l'énergie de formation et du rayon effectif de capture des défauts  $\{311\}$ . L'énergie de formation par interstitiel de ce type de défaut est la quantité d'énergie à fournir pour qu'un défaut de taille  $n$  capture un interstitiel et passe à la taille  $n+1$ . Pour calculer cette énergie, Colombeau et al. [38], considèrent que l'énergie interne de formation d'une dislocation est la somme de deux contributions qui sont l'énergie élastique  $E_{n(el)}$  de la ligne de dislocation qui la délimite et l'énergie  $E_{faute}$  de la faute d'empilement :

**Équation 33**     Énergie interne =  $E_{el} + E_{faute} = 2 \cdot (E_{disL} + E_{disW}) + \gamma \cdot n$  avec  $\gamma$  en eV/at.

En considérant que le défaut  $\{311\}$  est formé de deux dislocations coin dans le sens de la longueur  $L$  ( $E_{disL}$ ) et de deux dislocations mixtes selon la largeur  $W$  ( $E_{disW}$ ), on obtient alors le modèle de Parisini et al [39] :

$$\text{Équation 34} \quad E_{el} = 2 \cdot (E_{disL} + E_{disW})$$

$$\text{Équation 35} \quad E_{disL} = \frac{\mu b^2 L}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{2W}{b}$$

$$\text{Équation 36} \quad E_{disW} = \frac{\mu b^2 W}{2\pi} \left( \cos^2 \theta + \left( \frac{\sin^2 \theta}{(1-\nu)} \right) \right) \ln \frac{2W}{b}$$

où  $\mu$  est le module de cisaillement ( $7,55 \times 10^{10}$  N/m<sup>2</sup>),  $\nu$  le coefficient de Poisson (0.3),  $b$  est la norme du vecteur de Burgers (0.1076 nm),  $\theta$  est l'angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers ( $77,8^\circ$ ).

Dans ce modèle, le défaut  $\{311\}$  est considéré comme ayant une largeur  $W$  constante de 4nm. Ne connaissant pas la valeur exacte de la densité atomique  $d_{\{311\}}$  en Si interstitiels des défauts  $\{311\}$  allongés, celle des structures planes étudiées par Takeda est prise par défaut [40]. Elle

est de l'ordre de  $5 \text{ nm}^{-2}$ . La relation qui lie alors le nombre d'interstitiels capturés  $N$  avec la longueur du défaut  $L$ , en utilisant la densité des défauts  $\{311\}$  est donnée par :

$$\text{Équation 37} \quad N = d_{\{311\}} \cdot L \cdot W = 20 \cdot L \cdot (nm)$$

Quant au calcul de l'énergie de la faute d'empilement, il est réalisé en considérant que l'énergie de formation des défauts  $\{311\}$  tend vers une valeur estimée à  $0.65\text{eV}$  [33, 34] lorsque la taille du défaut ( $n$ ) tend vers l'infinie. Sa valeur est comprise entre  $0.45$  et  $0.9\text{eV/at}$ . [41].

Il est important de noter que des calculs équivalents ont été menés par Ortiz et al. [42] et les résultats obtenus par Ortiz et al. d'une part et par Claverie et al. d'autre part, conduisent tous deux à des énergies de formation des amas en fonction du nombre d'atomes piégés qui ont globalement la même forme à savoir une décroissance lente vers une valeur asymptotique  $E_f^\infty\{311\}$  (voir Figure 32 pour l'énergie de formation estimée par Claverie et al.).

### III.2.1.3 Boucles de dislocation

Comme pour les défauts  $\{311\}$ , l'énergie interne de ces boucles, s'écrit :

$$\text{Équation 38} \quad \text{Energie interne}_{\text{FDL}} = E_{\text{el-FDL}} + E_{\text{faute-FDL}}$$

Le calcul de l'énergie de formation des boucles de dislocations, a été fait par Cristiano et al. [43] à partir de l'énergie élastique des boucles :

$$\text{Équation 39} \quad E_{\text{el-FDL}} = \frac{\mu r}{4} \left( \frac{2a^2}{3(1-\nu)} \right) \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right)$$

$$E_{\text{faute-FDL}} = \pi r^2 \gamma$$

avec  $\mu$  le module de cisaillement ( $7,55 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ ),  $\nu$  le coefficient de poisson ( $0.3$ ),  $\gamma$  est l'énergie par unité de surface de la faute d'empilement entourée par la boucle (estimée expérimentalement à  $70 \text{ mJ/m}^2$  [44]) et  $r_0$  est le rayon de coupure.

Les boucles parfaites ont une forme circulaire à fort caractère coin et ne possèdent pas de faute d'empilement. Leur énergie interne s'écrit donc :

$$\text{Équation 40} \quad E_{\text{el-PDL}} = \frac{\mu r}{4} \left( \frac{a^2}{6} + \frac{5a^2}{6(1-\nu)} \right) \ln \left( \frac{2r}{r_0} \right)$$

Une représentation de ces énergies de formation en fonction du nombre  $n$  d'atomes contenus dans les boucles est représentée par la Figure 32.

### III.2.2 Mécanisme et cinétique d'évolution au cours du recuit thermique

Après avoir décrit la structure et les caractéristiques thermodynamiques des différents types d'amas d'interstitiels, nous allons maintenant nous intéresser à leur évolution au cours d'un recuit. Ainsi, nous allons voir que ces défauts extrinsèques du silicium vont, tout d'abord croître puis entrer en compétition. Cette compétition va alors diriger l'évolution de la sursaturation d'interstitiels qui influence indirectement la diffusion des dopants.

Nous exposons d'abord d'une façon générale la théorie de la maturation d'Ostwald. Cette théorie permet de comprendre et de décrire le comportement d'une collection de défauts ayant des énergies de formation différentes. Ensuite, nous verrons comment, de récents travaux ont

conduit les scientifiques à adopter cette théorie pour expliquer l'évolution des amas d'interstitiels dans le cas plus complexe où plusieurs types de défauts coexistent au sein de la même population.

III.2.2.1 Théorie de la maturation d'Ostwald

Historiquement les boucles de dislocations ont été les premiers défauts d'implantation dont l'évolution thermique a été étudiée en détail [45]. Ces défauts sont plus favorablement observés au cours de recuits à fort bilan thermique ( $T > 900^\circ\text{C}$ ) suite à une implantation amorphisante. La Figure 30 montre un exemple de ces études [46] qui consistent à suivre, grâce à la microscopie TEM, l'évolution de la taille moyenne et de la densité de ces défauts de fin de parcours après des recuits de durées et de températures variables. Ces observations montrent qu'au cours d'un recuit, la taille des boucles augmente, leur densité diminue (Figure 30.a) et que le nombre d'interstitiels piégés dans les boucles demeure constant (Figure 30.b).

Pour expliquer et modéliser cette évolution, Bonafos et al. ont alors utilisé la théorie de la maturation d'Ostwald appliquée au cas particulier des boucles. Cette théorie fut élaborée à partir d'observations faites par les chimistes lors de la croissance de particules en milieu saturé. Le principal résultat obtenu au cours de ces observations est que la concentration locale de la solution saturée est fonction de la taille des particules dans cette même solution. La première véritable étude a été menée par Ostwald au début du vingtième siècle [47]. Ostwald a observé que les particules les plus grosses en taille grossissaient au dépend des plus petites. A l'aide de ces observations, il a modélisé la cinétique de ces particules à partir des travaux de Thomson [48] et qui donnaient l'expression de la pression de la vapeur en équilibre avec une gouttelette d'eau en fonction du rayon  $r$  de cette gouttelette.

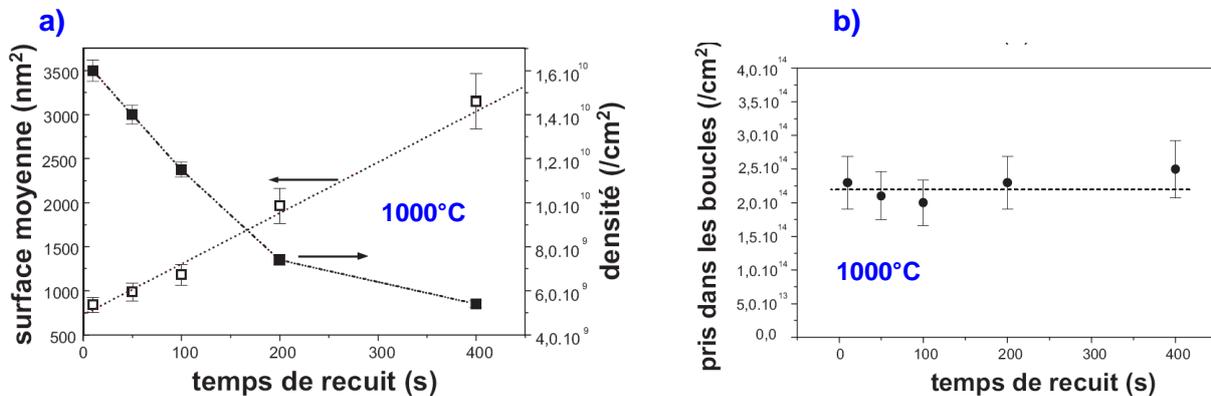


Figure 30 : a) Evolution au cours du temps de recuit de la densité et du rayon moyen des défauts de fin de parcours. b) La conservation du nombre total d'interstitiels pris dans les boucles de dislocation montre un mécanisme de croissance compétitive de type maturation d'Ostwald conservatif (d'après [46]).

Dans le cas des défauts d'implantation, la phase vapeur correspond aux interstitiels libres qui entourent les défauts, ces derniers jouent le rôle des gouttelettes d'eau. Dans ce cas, l'équation de Gibbs-Thomson stipule que chacun des défauts est en équilibre avec une sursaturation  $S_n$  d'auto-interstitiels libres. Cette sursaturation est directement reliée à  $\exp(E_{fn} / kT)$  où  $E_{fn}$  est l'énergie de formation par interstitiel de l'agglomérat de taille  $n$ .

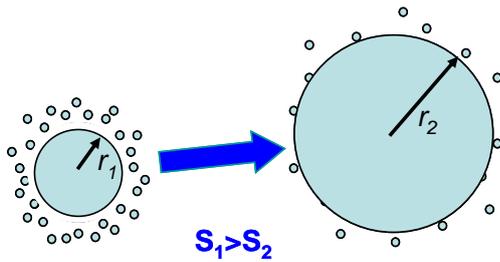


Figure 31 : Illustration de l'échange d'interstitiel entre deux défauts de taille différente. La sursaturation en auto-interstitiel libre en équilibre autour du défaut de taille  $r_1$  est plus élevée que celle autour du défaut de taille  $r_2$ . En conséquence, un flux d'auto-interstitiel va s'établir entre les deux défauts.

Comme nous le verrons dans la partie suivante, l'énergie de formation des boucles de dislocation décroît à mesure que leur taille augmente, on aura donc une sursaturation plus faible autour des plus gros agglomérats car  $S_n = \exp(E_{fn}/kT)$ . Un gradient de concentration d'interstitiels libres entre les défauts de différentes tailles va apparaître, créant ainsi un flux d'interstitiels allant des petits défauts vers les plus grands. La Figure 31 illustre ce concept de maturation d'Ostwald. Finalement, au cours du temps, le rayon moyen de la population de ces agglomérats va donc augmenter. La force motrice de cette évolution étant la réduction de l'énergie de formation consécutive à l'augmentation en taille des amas.

La théorie de la maturation d'Ostwald a été ensuite étendue aux autres familles de défauts extrinsèques formés après une implantation et elle a permis d'expliquer l'évolution d'une population contenant simultanément différents types de défauts, et en particulier les raisons de la transformation successive d'un défaut vers des configurations énergétiquement plus favorables (SMICs, {311}, FDL, PDL).

### III.2.2.2 Stabilité énergétique des défauts étendus

Sur la Figure 32, nous avons reporté les énergies de formation des différents types de défauts (petits amas d'interstitiels, défauts {311}, boucles de dislocation fautées (FDLs) et boucles de dislocation parfaites (PDLs) en fonction du nombre d'atomes de Si interstitiels qu'ils contiennent [33, 43, 49, 50]. Ce graphique met clairement en évidence l'existence d'une hiérarchie dans les énergies de formation des différents types de précipités.

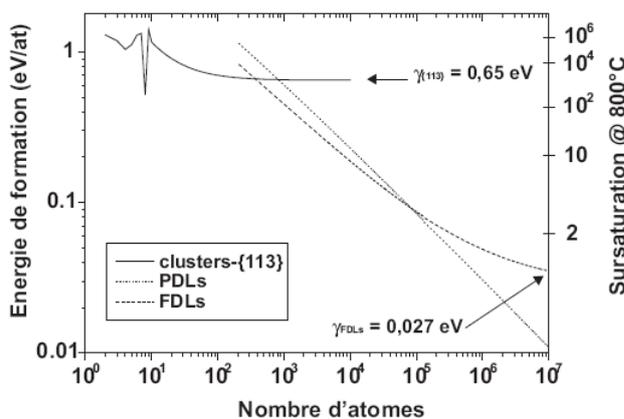


Figure 32 : Représentation schématique de l'évolution de la structure des défauts extrinsèques au cours du recuit. Les petits agglomérats ayant globalement une énergie de formation plus élevée vont se dissoudre pour alimenter les défauts de plus grande taille, plus stable donc ayant une énergie de formation moins élevée comme les défauts {311}. Cette évolution peut aller jusqu'à la formation de boucles de dislocations fautées ou parfaites (d'après [33, 43, 50]).

On s'aperçoit que l'énergie de formation pour ce type de défaut décroît à mesure que le nombre d'interstitiels piégés dans le défaut augmente. Ceci a pour conséquence d'amener lentement les petits amas à se transformer en défauts {311}. Lorsque le nombre d'interstitiels piégés augmente, la courbe d'énergie de formation des défauts {311} coupe celle des boucles de dislocation fautées et parfaites. Les défauts {311} vont alors se transformer à leur tour en

boucles de dislocation. Ces échanges permanents d'interstitiels maintiennent une sursaturation significative dans la région proche où ces défauts sont localisés et dont l'amplitude dépend de la distribution en taille de ces défauts. L'expérience de Cowern [33] (Figure 33), nous donne l'évolution de cette sursaturation au cours du temps. Si on considère le cas d'un recuit à 600°C (Figure 33), on peut observer un premier "plateau" de sursaturation entre 1 et 1000s.

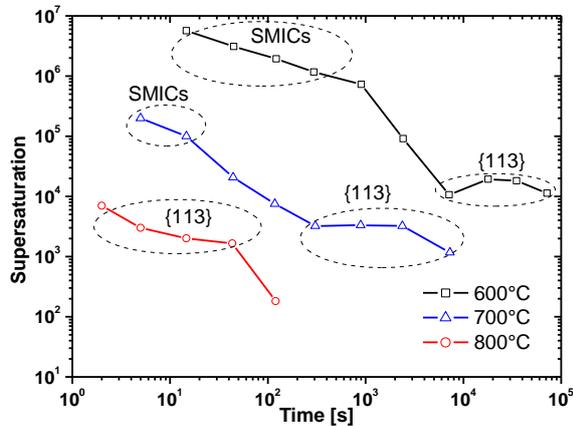


Figure 33 : Evolution au cours du temps de recuit de la sursaturation en interstitiel libre dans l'expérience de Cowern [33].

Ce plateau est relié à l'évolution des petits amas d'interstitiels (SMICs). En raison de la très forte sursaturation d'interstitiel présente au début du recuit, ces défauts sont les premiers à se former.

La diminution progressive de la sursaturation durant cette phase, induite par la recombinaison à la surface des interstitiels libres qui s'échappent de la zone des défauts, ainsi que par la croissance d'amas d'interstitiels, favorise leur transformation en défauts {311}, ce qui s'accompagne d'une forte chute de sursaturation entre 1000 et 10000s à 600°C (cf. Figure 33).

Le plateau apparaissant après cette forte chute est caractéristique de la croissance compétitive des défauts {311}. En effet, la variation relativement faible de l'énergie de formation de ces défauts (se reporter à la Figure 32 pour  $n$  compris entre 10<sup>2</sup> et 10<sup>3</sup> atomes) va entraîner une sursaturation en équilibre autour de ces défauts qui sera quasi-constante ( $S_n = \exp(E_f(n)/kT)$ ). Si la variation d'interstitiels libres entre ces défauts est faible, le gradient et donc le flux d'interstitiels échangés entre les défauts {311} sera petit. En conséquence, l'évolution temporelle de la sursaturation en interstitiel sera lente et, en absence d'une interaction forte avec la surface, le mécanisme de maturation d'Ostwald durant cette phase est "quasi-conservatif".

Au fur et à mesure du recuit, la densité des défauts étendus décroît, c'est-à-dire que la distance entre les défauts étendus augmente. Par conséquent, à faible densité, les échanges d'interstitiels entre les défauts {311} deviennent moins importants que les échanges avec la surface. Agissant comme un site de recombinaison très efficace pour les interstitiels, la surface impose donc autour d'elle une sursaturation d'interstitiels proche de l'unité.

Pour rester en équilibre avec cette chute de la concentration en auto-interstitiel, les amas vont augmenter leurs tailles et donc accélérer la dissolution des plus petits défauts aggravant encore plus le phénomène. Finalement, il se produit un phénomène d'avalanche conduisant à la dissolution complète des amas [51] comme observé alors sur la Figure 33. Le temps nécessaire pour atteindre cette limite critique sera fonction de la distance entre les défauts et la surface. Le mécanisme de maturation d'Ostwald n'est ici plus "conservatif".

### III.2.3 Modèles de la littérature

Nous allons décrire les deux approches utilisées pour simuler l'évolution des amas d'interstitiels au cours d'un recuit. La première appelée "*Frendtech*" [52] a été développée par Colombeau et la seconde à l'université de Boston par l'équipe de Dunham. Ces deux approches, bien que différentes, ont pour but de simuler la compétition existante entre les agglomérats d'interstitiels suivant la théorie de maturation d'Ostwald. Il existe bien évidemment de nombreux autres modèles concernant l'évolution des agglomérats d'interstitiels au cours d'un recuit [53, 54].

#### III.2.3.1 Approche atomistique

Dans cette approche, initialement développée par Cowern et al. [33] pour les petits amas d'interstitiels (SMICs), l'évolution des agglomérats d'interstitiels au cours du recuit thermique, est simulée en calculant la différence entre le taux d'émission d'interstitiels  $F_n$  et le taux de capture  $R_n$  de chacun des amas de taille  $n$ . Ce taux de croissance est considéré égal au produit de la surface de capture du défaut de taille  $n$  avec le flux d'interstitiels autour du défaut. Dans le cas d'une croissance uniquement limitée par la diffusion, c'est-à-dire en ne considérant pas l'existence d'une barrière énergétique limitant la capture d'un interstitiel par un défaut donné, ce taux de croissance peut s'écrire :

$$\text{Équation 41} \quad F_n - R_n = D_I C_I^* (\bar{S} - S_n) \cdot \frac{A_n}{R_{eff}}$$

où  $\bar{S}$  est la sursaturation moyenne en auto-interstitiels dans la matrice et  $S_n$  est la sursaturation en équilibre avec un précipité de taille  $n$ .  $S_n$  est directement donnée par l'énergie de formation  $E_f(n)$  du défaut de taille  $n$  en utilisant la loi de Gibbs-Thomson :

$$\text{Équation 42} \quad S_n = \exp\left(\frac{E_f(n)}{kT}\right)$$

Les taux de capture et d'émission des interstitiels pris dans un défaut de taille  $n$  sont définis par :

$$\text{Équation 43} \quad \begin{aligned} F_n &= D_I C_I^* \cdot \frac{A_n}{R_{eff}} \cdot \bar{S} \\ R_n &= D_I C_I \cdot \frac{A_n}{R_{eff}} \cdot \exp\left(\frac{E_f(n)}{kT}\right) \end{aligned}$$

Il est intéressant de remarquer à ce stade, que ces taux de capture ou d'émission tiennent compte de la géométrie du défaut par l'intermédiaire du nombre  $n$  d'interstitiels pris dans l'amas. En effet, le calcul du rayon efficace de capture ( $A_n/R_{eff}$ ) ainsi que l'énergie de formation  $E_f(n)$  du défaut sont fonction de la géométrie du défaut.

En se limitant ici aux défauts de petite taille (SMICs et {311}), on considère d'une part que les SMICs ( $n < 12$ ) ont une géométrie sphérique. D'autre part, pour calculer le rayon efficace de capture des défauts {311}, on considère que ce type de défaut peut être représenté par un rectangle de dimensions  $L.W$ , où  $L$  et  $W$  représentent respectivement la longueur et la largeur du défaut {311}. Finalement, le rayon efficace de capture  $A_n/R_{eff}$  est obtenu en fonction du

nombre  $n$  d'auto-interstitiels capturés (Figure 34.a). Ces paramètres ont été discuté en détails par Colombeau [38] et étendus au cas des boucles de dislocation par Calvo [55].

L'énergie de formation des agglomérats d'interstitiels (Figure 34.b) est calculée d'après les résultats obtenus par Cowern et al. [33] (cf. Figure 29.c) pour les SMICs et avec l'Équation 33 les défauts {311}.

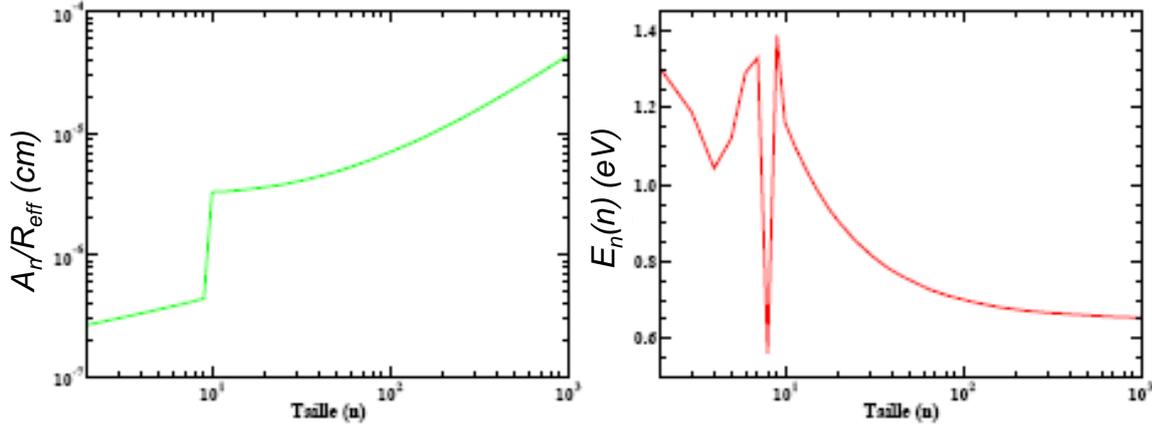
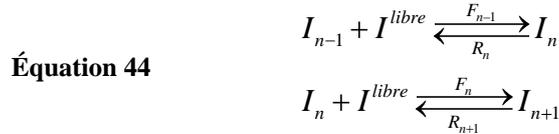


Figure 34 : a) variation de l'efficacité de capture et b) l'énergie de formation des clusters et des défauts {311} en fonction de la taille des défauts en nombre d'atomes qu'ils contiennent (d'après [38]).

Pour estimer l'évolution au cours du temps de la concentration d'amas  $I_n$  de taille  $n$ , il faut tenir compte des deux réactions suivantes :



Ainsi la concentration de l'agglomérat de taille  $n$  est fonction de l'évolution des amas  $I_{n-1}$  et  $I_{n+1}$ . On obtient donc l'évolution de la concentration  $C_n$  de l'amas  $I_n$  par l'équation aux dérivées partielles :

$$\text{Équation 45} \quad \frac{dC_n}{dt} = F_{n-1}C_{n-1} + R_{n+1}C_{n+1} - (R_n + F_n)C_n$$

Pour calculer la variation temporelle du nombre d'interstitiels libres, il faut ajouter le flux d'interstitiels vers la surface qui joue le rôle de puit infini de recombinaison. Pour estimer ce flux, Claverie et al. considèrent que la concentration d'interstitiels libres décroît linéairement entre les défauts et la surface.

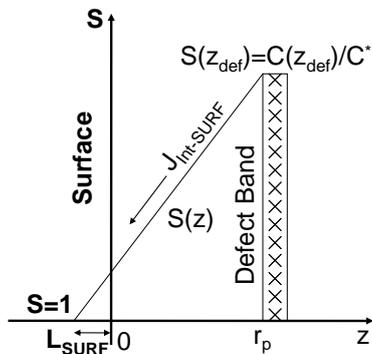


Figure 35 : Schéma de principe illustrant la notion de longueur de recombinaison à la surface  $L_{\text{surf}}$  (d'après [38]).

Ainsi d'après la Figure 35 le flux d'interstitiels libres  $J_{\text{int-surf}}$  vers la surface est donné par :

$$\text{Équation 46} \quad J_{int-Surf} = D_I C_I^* \cdot \frac{\bar{S} - S_0}{r_p} = D_I C_I^* \cdot \frac{\bar{S}}{r_p + L_{Surf}}$$

où  $L_{Surf}$  est la longueur de recombinaison à la surface et rend compte de l'efficacité de piégeage de la surface. Ce paramètre dépend essentiellement de l'atmosphère de recuit et de la température. La valeur de  $L_{surf}$  a été estimée à moins de 5 nm pour des températures de recuit s'élevant à 1050°C [51].

L'évolution temporelle des interstitiels libres est alors donnée par la relation composée d'un terme représentant l'ensemble des réactions issues des amas d'interstitiels et d'un terme relatif à la recombinaison en surface :

$$\text{Équation 47} \quad \frac{\partial C_I}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} (\beta R_n - F_n) C_n - \frac{D_I C_I^* \bar{S}}{r_p + L_{Surf}}$$

où  $\beta$  représente le nombre d'interstitiels relâchés par la réaction d'émission ( $\beta=2$  pour  $n=1$ , et  $\beta=1$  pour  $n \neq 1$ ).

La sursaturation moyenne dans la matrice est estimée en utilisant l'Équation 43 et en faisant l'hypothèse  $\partial C_I / \partial t = 0$  par la relation :

$$\text{Équation 48} \quad \bar{S} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \beta R_n C_n}{D_I C_I^* \left( \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_n}{R_{eff}} C_n \right) + \frac{1}{r_p + L_{Surf}} \right)}$$

### III.2.3.2 Approche des moments

Cette approche est différente et répond au besoin de calculer l'évolution d'un grand nombre de défauts tout en ayant une vitesse de calcul acceptable. En effet dans l'approche atomistique, l'évolution d'un agglomérat de taille  $j$  va dépendre de l'évolution des amas de taille immédiatement inférieure ( $j-1$ ) et supérieure ( $j+1$ ). Ce qui suppose alors, lorsque l'on veut calculer l'évolution des agglomérats d'une taille allant de 2 à 300, qu'il faut résoudre un système d'équations aux dérivées partielles de 300 équations. L'approche par les moments a été développée par Dunham et al. [56] puis appliquée à la cinétique des défauts étendus [57] [58] [59].

Dans le but de développer une approche plus efficace, la distribution en taille  $f_n$  des agglomérats est décrite en termes d'un nombre restreint de moments  $m_i$ . On définit les moments par :

$$\text{Équation 49} \quad m_i = \sum_{n=2}^{\infty} n^i f_n, \text{ pour } i=0,1,2,\dots$$

Le moment d'ordre 0 de la distribution représente la densité des précipités, alors que le moment d'ordre 1 correspond à la densité d'interstitiels piégés dans les agglomérats. Les moments d'ordre supérieur vont décrire la forme et la taille de la distribution de la population d'amas. L'évolution des moments au cours du temps, est alors donnée par la relation :

$$\text{Équation 50} \quad \frac{dm_i}{dt} = \sum_{n=2}^{\infty} n^i (C_{n-1} - C_n)$$

où  $C_n$  est le taux net de croissance pour un précipité passant d'une taille  $n-1$  à  $n$ .

Ce taux net de croissance peut être exprimé sous la forme :

$$\text{Équation 51} \quad C_n = g_n f_n - d_{n+1} f_{n+1}$$

avec  $g_n$  et  $d_n$  qui représentent les constantes cinétiques de formation et de dissociation pour un précipité de taille  $n$ .

L'évolution des premiers moments est alors donnée par :

$$\text{Équation 52} \quad \frac{dm_0}{dt} = g_1 - d_2 f_2 = C_1$$

$$\text{Équation 53} \quad \frac{dm_1}{dt} = 2C_1 + \sum_{n=2}^{\infty} (g_n f_n C_I^{libre} - d_{n+1} f_{n+1}) = C_1$$

### III.2.3.3 Comparaison des deux modèles

L'un des principaux intérêts du modèle *Frendtech* réside dans le calcul de chacune des concentrations des amas de taille  $n$ . Ce modèle est ainsi très intuitif et plus proche de la réalité que ne peut l'être tout autre modèle basé sur les moments puisqu'il simule l'ensemble des réactions retraçant l'évolution de chacun des amas par la capture ou l'émission d'un interstitiel. La taille et la structure des agglomérats sont prises en compte par l'intermédiaire de l'énergie de formation et du rayon de capture. Conformément à ce qui est prévu par la théorie de maturation d'Ostwald, cette énergie de formation a une tendance générale à diminuer pour permettre l'augmentation de la taille des amas. Ce modèle tient compte aussi de la particularité des petits amas en utilisant les énergies de formation discrètes calculées par Cowern et al..

Ce modèle pose cependant certaines hypothèses simplificatrices. On peut en citer le calcul de la sursaturation (Équation 48) qui est basé sur l'hypothèse  $\partial C_I^{libre} / \partial t = 0$ . De plus, le rayon de capture présente une brusque rupture non physique, justifiée par une différence de structure entre les petits agglomérats d'interstitiels et les défauts {311}. Enfin, ce modèle ne prévoit pas la répartition spatiale des défauts en profondeur (on parle de simulateur à zéro dimension ou '0D'). Or, nous avons montré que celle-ci varie au cours du temps par les fuites d'interstitiels vers la surface.

L'approche par les moments est apparue pour simplifier le nombre d'équations à résoudre. Cette approche est correcte mais ne peut tenir compte de l'oscillation des énergies de formation  $E_f$  pour les petits agglomérats. L'approche par les moments permet cependant d'obtenir de bons résultats en optimisant la distribution de la population des agglomérats d'interstitiels.

Pour ces raisons, notre choix c'est dirigé vers l'approche des moments car elle répond aux besoins industriels en termes de temps de calcul. Les détails du modèle utilisé au cours de cette thèse seront présentés dans le prochain chapitre. Il est basé sur l'approche développée par Zographos et al. [60] et prend en compte la majorité des effets physiques régissant la

cinétique des défauts étendus, en particulier la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation.

#### IV FORMATION D'AGGLOMERATS MIXTES DOPANT-DEFAUTS

Nous exposerons, dans un premier temps, l'influence de la formation de ces amas sur la diffusion accélérée du bore. Nous présenterons les différents travaux expérimentaux réalisés au cours de ces dernières années. Nous verrons quelles ont été les différentes techniques expérimentales qui ont pu mettre en évidence les caractéristiques de certains de ces amas. Enfin, nous verrons comment la formation de ces agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels a été intégrée dans les modèles de diffusion. Pour conclure, nous verrons, à partir du cas particulier du bore, comment généraliser la formation d'amas mixtes de dopants et de défauts ponctuels. Nous traiterons le cas des autres dopants (arsenic, phosphore, antimoine) en faisant une analogie avec le bore.

##### IV.1 La solubilité limite

Pour augmenter les performances des transistors, l'un des objectifs est d'accélérer la vitesse de commutation de l'état passant à l'état bloqué. Pour cela, il faut réduire verticalement et horizontalement la taille des dispositifs. Pour autant, il ne faut pas réduire la quantité de charges ni dans la source, ni dans le drain, ni dans le canal sous peine de voir la résistance du système croître. On crée donc des charges dans la source et dans le drain en ajoutant des atomes dopants à la matrice de silicium. Les concentrations de ces atomes dopants ont été plus que centuplées au cours de ces vingt dernières années. Cependant, au dessus d'une certaine concentration appelée solubilité limite, des phénomènes de précipitations surviennent. Dans ces conditions, les atomes dopants ne fournissent plus de charges.

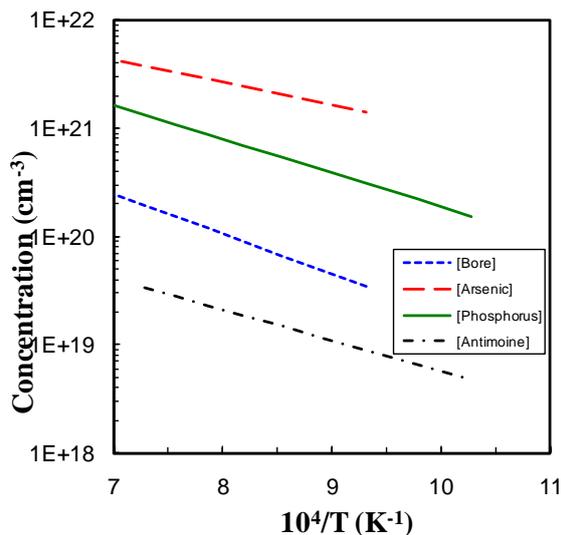


Figure 36 : Solubilité limite des principaux dopants entre 700 et 1100°C.

Bore :  $9.2 \times 10^{22} \cdot \exp(-0.73 \text{ eV/kT})$  [61]

Arsenic :  $1.3 \times 10^{23} \cdot \exp(-0.42 \text{ eV/kT})$  [62]

Phosphore :  $2.5 \times 10^{23} \cdot \exp(-0.62 \text{ eV/kT})$  [63]

antimoine :  $3.8 \times 10^{21} \cdot \exp(-0.56 \text{ eV/kT})$  [64]

La valeur de la solubilité limite est à la fois fonction du dopant et de la température. On utilise le plus souvent une loi d'Arrhenius pour quantifier cette concentration limite (cf. Figure 36).

IV.2 Bore

IV.2.1 Observations expérimentales

Les premières observations concernant la diffusion anormale du bore et plus particulièrement sur le blocage de la diffusion du bore à forte concentration ont été établies par Hofker et al. [65, 66]. Ils ont observé que seule la partie du bore située au-dessous de la concentration intrinsèque  $n_i$  diffusait et était activée alors que les plus fortes concentrations de bore demeuraient immobiles en dépit du fait que pour les températures utilisées (entre 800°C et 1000°C), les concentrations de bore se situaient au-dessous de la solubilité limite du bore.

De nombreuses expériences furent menées pour établir la concentration critique à partir de laquelle le bore ne diffuse plus lors du recuit. En effet le seuil de concentration au dessous duquel le bore est mobile semble être strictement corrélé à la concentration intrinsèque  $n_i$  dans le silicium [67, 68]. On observe sur la Figure 37 que pour des températures supérieures à 950°C, le seuil de concentration de bore séparant le bore mobile du bore immobile suit la solubilité limite, alors que pour les températures inférieures à 800-900°C il est décrit par :

Équation 54

$$C_B^{kink} = 2.82 \times 10^{22} \exp\left(-\frac{0.827}{kT}\right) \text{at.cm}^{-3}$$

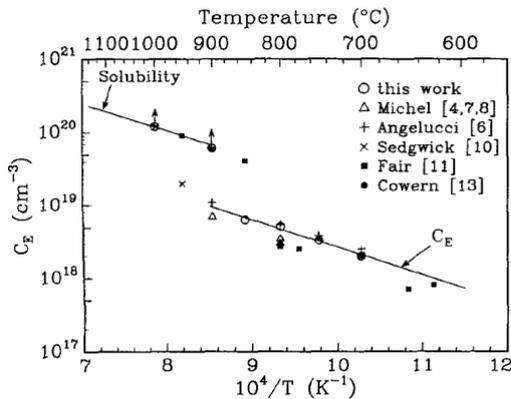


Figure 37 : le niveau d'activation  $C_E$ , en dessous duquel la TED se produit, en fonction des températures de recuit. La solubilité limite du bore dans le silicium pour des températures supérieures à 900°C est également signalée.

Différentes hypothèses ont été proposées depuis lors pour expliquer ce comportement anormal. Par exemple, en 1990, Cowern et al. introduit le concept de "défauts intermédiaires" pour décrire la configuration du bore dans la région où il apparaît immobile [67]. Ils suggèrent que des complexes Bore-Interstitiels "BI" (en anglais Boron Interstitials Clusters : BICs) se forment dans la région où la concentration d'atomes de Si interstitiel est importante rendant par la même le bore inactif et immobile. Ainsi, la grande quantité de bore inactif et immobile proviendrait de la formation de clusters de type  $B_mI_n$ .

Avec une approche originale, Solmi et al. [69] ont différemment mis en évidence les interactions entre le bore et les auto-interstitiels, et le rôle joué par la formation de ces agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels dans la diffusion accélérée. Leur expérience consiste à utiliser deux échantillons de silicium dans lesquels, ils ont réalisé par technique MBE (Molecular Beam Epitaxy) un pic de bore situé à une profondeur de  $0.5\mu\text{m}$  (cf. Figure 38.a). Sur l'un des échantillons, ils déposent à la surface, une couche de bore uniformément dopée à  $2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  et d'épaisseur  $0.25\mu\text{m}$  (cf. Figure 38.b). Les deux échantillons sont ensuite implantés avec du silicium à 40keV avec une dose de  $1 \times 10^{14} \text{at.cm}^{-2}$  pour générer des

auto-interstitiels puis recuits à 740°C pendant une durée allant de 15 min à 4 heures (Figure 38). Les deux pics de bore leurs permettent d’observer l’accélération ou le ralentissement de la diffusion, avec ou sans la présence d’une concentration non négligeable de bore située près de la surface.

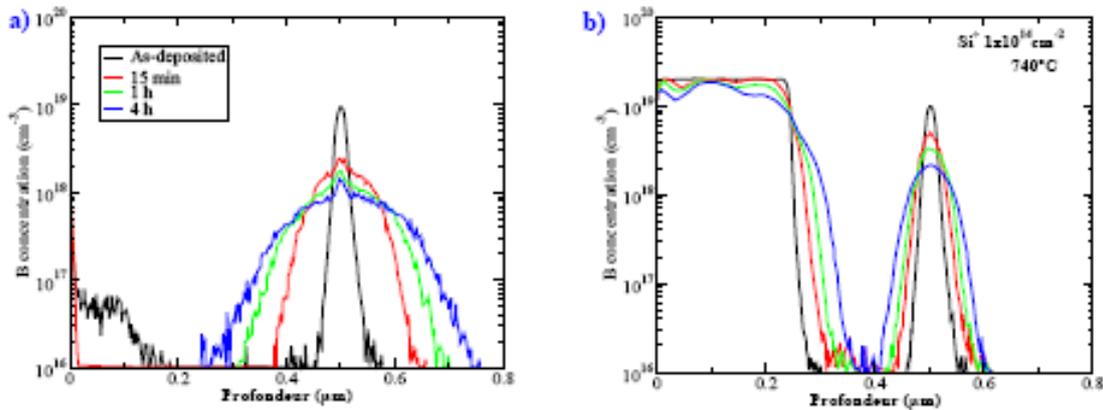


Figure 38 : Diffusion à 740°C d’un pic enterré de bore situé à 0.5µm de profondeur sans a) et avec b) une couche superficielle de bore servant de piège à interstitiel. (d’après [69])

On observe une très nette diminution de la diffusion en présence de la couche de bore uniformément dopée (Figure 38.b). Le bore situé en surface joue ici le rôle de pièges à interstitiels en formant à forte concentration des amas mixtes de bore et d’interstitiels. Ainsi piégés, les interstitiels ne vont plus contribuer à la diffusion accélérée du bore contenu dans le pic. De plus, on peut observer, dans le cas b), que le pic témoin de bore ne présente pas de formation de BIC alors que la concentration de bore était supérieure à  $10^{19} \text{at.cm}^{-2}$ . Il faut alors comprendre que la seule présence d’une forte concentration de bore ne suffit pas pour former ces amas mais qu’une forte sursaturation en interstitiels libres est aussi nécessaire. Dans le cas b), les interstitiels ayant été capturés par le bore situé en surface, la sursaturation présente au pic témoin n’était alors pas suffisamment forte pour autoriser la formation d’agglomérats mixtes de bore et d’interstitiels.

Les analyses d’images TEM à haute résolution (HRTEM, High-Resolution Transmission Electron Microscopy), nous apportent une information importante quand à la taille de ces amas mixtes de bore et d’interstitiels. Stolk et al. [70] et Zhang et al. [71] ne visualisant aucune trace de BIC, considèrent alors que ces agglomérats ne peuvent contenir qu’un nombre très restreint d’atomes de bore ou d’interstitiels. C’est en 2003 que Cristiano et al. [72] parviennent à les observer pour la première fois, prouvant ainsi que dans certains cas ces défauts s’avèrent plus grands que ce que l’on supposait. En 2005, la même équipe caractérise de manière détaillée la structure de ces défauts [73]. On apprend alors que ces clusters peuvent être composés de plusieurs centaines d’atomes et leur forme se rapproche de celle des boucles de dislocation parallèles au plan {100}. Très récemment en 2007, Boninelli et al. [74] ont étudié par TEM en détail l’évolution des BICs au cours du recuit thermique, ils ont montré que la dissolution de ces clusters est très lente et qu’au fur et à mesure du recuit, leur taille diminue jusqu’à atteindre les limites de détection du microscope.

### IV.2.2 Calculs théoriques

De nombreux travaux théoriques et de multiples simulations en dynamique moléculaire ont été réalisés au cours de ces dernières années grâce à la puissance des ordinateurs. Ces résultats concernant la formation et la stabilité des amas de bore dans le silicium ont permis de faire la lumière sur des questions restées jusque là inaccessibles, tout en soulevant de nouvelles questions. Cependant, il convient de rester prudent devant ces calculs purement théoriques car un grand nombre des résultats publiés sont parfois contradictoires et se pose souvent la question quant-à la validité et à l'exactitude des hypothèses posées.

Il existe en effet, plusieurs méthodes de calculs basées sur différentes hypothèses :

- Les calculs ab-initio qui considèrent les interactions de tous les électrons et qui utilisent l'approximation de densité locale. (Local Density Approximation).
- Les calculs dits de liaisons fortes (Tight-Binding) qui considèrent les électrons de cœurs comme étant liés à l'atome et ne participant pas aux liaisons inter-atomiques (Concentration Gradient Approximation).

Les travaux de W. Luo, P. Clancy et P.B. Rasband [75] sont basés sur les calculs dits de liaisons fortes pour les interactions  $B_{n+m}$  [76] ou  $B_m-I_n$  [77]. Le premier amas pour les BICs est le  $B_2I$ . Son énergie de formation dans son état de charge neutre est estimée à 2.7 eV. L'agglomérat suivant est le  $B_3I$  avec une énergie de formation de 3.1eV. Pour finir, l'agglomérat de type  $B_4I$  a une énergie de formation de 4eV pour l'état de charge neutre et de 3.1eV lorsqu'il se trouve dans sa configuration la plus stable [75].

Theiss et al. [78] et Lenosky et al. [79], ont pu réaliser de nombreux travaux portant sur le calcul des énergies de formation des amas mixtes de bore et d'interstitiels (Tableau 3). Ils ont aussi pu obtenir de ces travaux les énergies de dissociation des différents amas  $B_nI_m$  en utilisant les calculs ab-initio par pseudo-potentiel d'onde plane ou par simulation de dynamique moléculaire. L'énergie de dissociation obtenue inclut à la fois l'énergie de liaison et l'énergie de migration de l'espèce émise. Ces énergies sont alors utilisées dans les simulateurs Monte-Carlo cinétique (kMC) pour calculer le profil de diffusion du bore dans le silicium.

Q	+1	0	-1	-2	-3
$B_s$			0		
$B_2$		1.38	0.96	<b>0.93</b>	
$B_3$		1.54	1.03	<b>0.89</b>	1.14
$BI$	<b>-1.02</b>	-0.79			
$B_2I$	-1.43	<b>-2.12</b>	-1.60		
$B_3I$	-1.95	-2.72	<b>-3.09</b>		

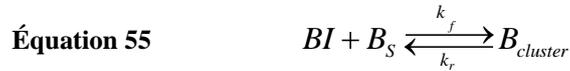
Q	+1	0	-1	-2
$B_4I$	-1.00	-1.85	-2.32	<b>-2.40</b>
$BI_2$	<b>-2.35</b>	-2.24	-1.89	
$B_2I_2$	-3.22	<b>-3.24</b>	-2.79	
$B_3I_2$	<b>-3.87</b>	<b>-4.41</b>	-3.57	
$B_4I_2$	-4.20	<b>-4.80</b>	-4.73	

Tableau 3 : Valeurs des énergies de formation issues de calculs théoriques de Lenosky et al. [79]. Les valeurs en gras représentent les configurations les plus stables.

### IV.2.3 Modèles

Pour prendre en compte la formation d'amas mixtes de bore et d'interstitiels, plusieurs modèles plus ou moins élaborés ont vu le jour au cours des années 90. Ces équations sont ensuite couplées à un modèle de diffusion classique.

Cowern et al. [80] [67] considèrent que les interstitiels générés au cours de l’implantation ionique vont jouer un rôle dans le blocage du pic de bore. Ils ajoutent donc la formation de  $B_2I$  à leur modèle tout comme Hane et Matsumoto [81] pour simuler la désactivation du bore et la concentration critique pour laquelle la diffusion du bore est bloquée :



Les constantes de réaction pour la formation de ces amas sont issues des ajustements réalisés quelques années auparavant par Mathiot et al. [82] dans le cas de diffusions à forte concentration de dopant. L’énergie de formation associée au  $B_2I$  étant de 1.61eV. Baccus et Vanderbosshe [83] ont inclus aussi la formation de  $B_2I$  pour des recuits de courtes durées à 900°C mais ils considèrent que pour des recuits de plus longues durées, il faut utiliser la précipitation du bore ( $B_{n+m}$ ) plutôt que la formation d’agglomérats de bore ( $B_m-I_n$ ). Longtemps après que ces effets aient été observés pour la première fois, peu de modèles ont incorporé la formation d’une collection d’agglomérats. Inspiré par le concept de ”configuration intermédiaire de défaut” introduit par Tan et al. [84], Cowern et al. [67] puis Stolk et al. ont suggéré la formation d’amas contenant un nombre moyen d’atome de bore  $m_{moy}$  avec un nombre moyen d’interstitiels  $n_{moy}$  pour expliquer et simuler la fraction immobile du bore dans les marqueurs de bore. A partir du même concept, M. Uematsu [85] développe un modèle complet de diffusion des dopants, dans lequel il tient compte aussi bien de la formation d’amas d’interstitiels que de la formation d’un agglomérat mixte de bore et d’interstitiels de type  $BI_{m+1}$  où  $m$  est un paramètre d’ajustement de son modèle. En confrontant son modèle à une grande variété de résultats expérimentaux, il obtient alors un  $m$  sensiblement égal à 1 ce qui équivaut à considérer en moyenne la formation d’un agglomérat de type  $BI_2$ . En revanche, Uematsu pose l’hypothèse que la formation de  $BI_2$  est beaucoup plus rapide que les temps caractéristiques de la TED. Il suppose donc comme condition initiale lors de ses simulations que la concentration de  $BI_2$  après implantation est à l’équilibre locale avec les profils d’interstitiels et de bore et que par conséquent, au cours du recuit, les agglomérats de bore ne vont que se dissoudre et ainsi libérer leurs interstitiels et rendre possible la diffusion du bore.

La véritable notion de BIC apparaît lors de travaux de Pelaz et al. [86, 87] et de Caturla et al.. Pelaz et al. ont présenté des modèles physiques, contenant explicitement les réactions pour chacune des espèces de BIC formés par l’ajout soit d’une paire  $BI$ , soit par celui d’un auto-interstitiel. L’ensemble des chemins possibles de réaction est présenté en Figure 39.

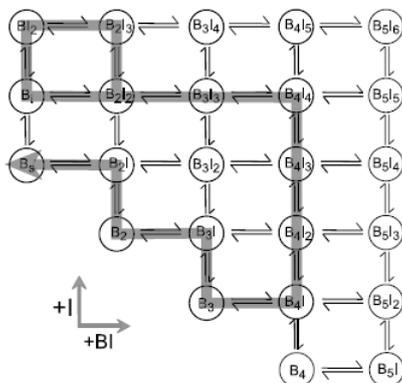


Figure 39 : Modèle de formation des différents amas mixtes de bore et d’interstitiels selon Pelaz et al. [86]. La flèche indique le chemin privilégié au cours du temps pour la formation de ces amas.

Ils suggèrent qu'il existe un chemin privilégié pour la formation de ces agglomérats. Ainsi, ils considèrent que dans les premiers instants du recuit, la formation des agglomérats de bore se réalise par la capture de paires mobiles  $BI$ . Puis, lorsque la sursaturation en auto-interstitiels a fortement chuté, ces amas vont alors libérer uniquement leurs interstitiels et ainsi tendre vers la formation d'agglomérats de type  $B_nI$ .

De récents travaux [88] ont démontré que des caractéristiques importantes de l'activation et de la TED du bore peuvent être reproduites quantitativement par un modèle cinétique continu de BIC, dans lequel seule la formation des clusters de taille inférieure à  $B_3I_2$  est autorisée. Afin de reproduire le pic du bore à plusieurs températures, les auteurs font l'hypothèse que les énergies de formation des amas dominants  $B_3I$  et  $B_3I_2$  sont thermiquement activés comme cela a été proposé par Pichler et al. [89]. Nous nous intéresserons en détail à ce modèle dans le troisième chapitre.

### IV.3 Cas des autres dopants

Nous nous sommes concentrés sur le cas particulier du bore, car il constitue actuellement le dopant le plus problématique et sur lequel le plus grand nombre d'études a été réalisé. Nous allons aborder le cas de la formation d'agglomérats mixtes de dopants et de défauts ponctuels impliquant le phosphore, l'arsenic ou l'antimoine. Nous ferons une analogie avec le cas particulier du bore, les équations alors générées étant très similaires. Nous commencerons avec le cas de l'arsenic, où la forte proportion de dopant non activé est attribuée à la formation d'amas mixtes d'arsenic et de lacunes. Le phosphore semble former des agglomérats mixtes de phosphore et d'interstitiels appelés par analogie avec le cas du bore, des PICs.

#### IV.3.1 Arsenic

Malgré les propriétés intrinsèques particulièrement intéressantes de l'arsenic en termes de diffusion et de niveau de solubilité, son utilisation nécessite des précautions particulières pour optimiser son activation et limiter à la fois son exo-diffusion et sa ségrégation lors de l'étape de recuit. En effet, il a été démontré que l'arsenic est susceptible de se désactiver lors de la rampe de descente en température du procédé de recuit. De plus, la formation d'un pic de ségrégation des atomes d'arsenic à l'interface  $SiO_2/Si$  peut conduire à une exo-diffusion significative et constitue une difficulté supplémentaire pour la réalisation de jonctions fortement activées.

La TED de l'arsenic a pu être mise en évidence dans des conditions très particulières [90, 91]. La Figure 40 montre comment ce phénomène peut se traduire par le déplacement du profil de l'arsenic durant les premiers stades de recuit [91]. Ce phénomène n'a pu être mis en évidence qu'à basse température (autour de  $700^\circ C$ ), il est négligeable dans les conditions de recuit utilisées pour la formation des jonctions fines.

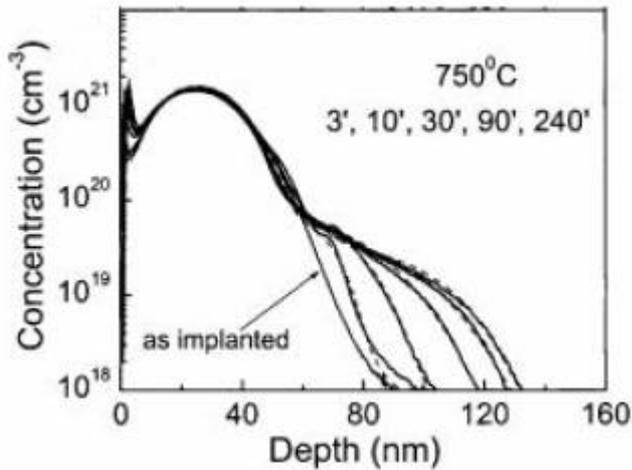


Figure 40 : Exemple de diffusion mettant en évidence la TED de l'arsenic. Profils SIMS de la concentration d'arsenic pour une implantation à 35 keV et recuit à 750°C pendant. (d'après [91])

Des études expérimentales ont longtemps suggéré que la TED de l'arsenic peut dépendre des mécanismes lacunaire ou interstitiel [15]. En injectant des quantités identiques de lacunes et d'interstitiels dans un substrat de silicium dopé arsenic, Ural et al. ont montré que 60% de la diffusion de l'arsenic est due à l'excès de lacunes, et que 40% est due à l'excès d'interstitiels [92]. Cependant, de récentes études portant sur la formation des jonctions ultra-fines, ont montré que la TED de l'arsenic est contrôlée par les interstitiels [91, 92, 93, 94]. Comme nous pouvons le voir, l'ensemble des résultats étudiés doit être examiné avec une très grande précaution car des incohérences peuvent être mises en évidence.

### Calcul théorique

Après implantation d'une forte dose d'arsenic ( $\sim 10^{14}$  at.cm<sup>-2</sup>) dans le silicium sans toutefois amorphiser le substrat, la majeure partie des atomes d'arsenic est contenue dans une zone riche en lacunes. Dès les premiers instants de la montée en température, les atomes d'arsenic vont donc préférentiellement réagir avec les lacunes les plus proches pour former des précipités  $As_nV_m$  inactifs (avec  $n > 2m$ ) :  $As_3V$ ,  $As_4V$ ,  $As_6V_2$ ... De nombreux calculs théoriques ont permis de montrer que l'énergie de formation de tels précipités est négative, leur formation est donc favorisée quel que soit le niveau de dopage et la température considérés [95, 96]. Néanmoins la structure exacte de ces précipités et leur mode de formation ne sont pas encore connus. Les deux principaux scénarios envisagés seront décrits successivement.

D'une part, de nombreuses publications considèrent que l'entité  $As_2V$  est aussi mobile et participe activement à la diffusion de l'arsenic par un mécanisme similaire à celui mis en jeu pour l'entité  $AsV$  [96, 97].

Lors de leur migration, les entités mobiles  $AsV$  et  $As_2V$  vont pouvoir former les précipités inactifs et immobiles du type  $As_nV_m$  par coalescence. Ce phénomène est d'autant plus important que la concentration en arsenic soit élevée.

D'autre part, la migration de l'arsenic est aussi assistée par des interstitiels ( $f_I$  autour de 0.45). Ainsi des entités mobiles  $AsI$  sont capables de migrer au sein de la matrice silicium pour former des précipités du type  $As_4I$  actifs dans lequel un atome de silicium est situé en site substitutionnel au centre d'un tétraèdre d'atomes d'arsenic (cf. Figure 41.a) [98, 99]. Lors de la désactivation, l'atome de silicium est éjecté par une des faces du tétraèdre (cf. Figure 41.a), un cluster inactif et thermodynamiquement plus stable de type  $As_4V$  est alors formé. Des

travaux utilisant des marqueurs de bore ont permis de mettre en évidence une augmentation de la concentration d’interstitiels de silicium lors de la désactivation de l’arsenic [100, 101] (voir Figure 41.b).

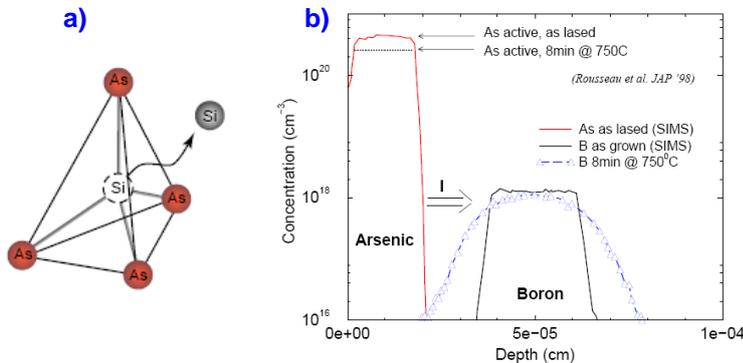


Figure 41 : Mécanisme de désactivation de l’arsenic d’après [98, 99].

Globalement, les deux scénarios précédemment décrits et largement traités dans la bibliographie sont en accords quant à une désactivation de l’arsenic par formation de clusters arsenic-lacunes.

### IV.3.2 Phosphore

De la même façon que l’arsenic, le phosphore implanté à forte dose peut ne pas être activé [63]. Le phosphore forme des agglomérats préférentiellement avec des lacunes de type P<sub>n</sub>V [102, 103]. Cependant, certains auteurs [104, 105] ont démontré l’existence de complexes phosphore–interstitiels, parfois appelés PICs (Phosphorous Interstitials Clusters) par analogie avec les BICs. Keys et al. [105, 106] ont développé un modèle utilisant une configuration moyenne P<sub>m</sub>moyIn<sub>moy</sub>. Leurs calibrations les amènent à considérer m<sub>moy</sub> = 3 et n<sub>moy</sub> = 2. Plus récemment, Sahli et al. [107] ont calculé les énergies de dissociation des différents amas P<sub>n</sub>Im (phosphore-interstitiels) et P<sub>n</sub>Vm (phosphore-lacunes) en utilisant des calculs ab-initio (Figure 42). L’énergie de dissociation obtenue inclut à la fois l’énergie de liaison et l’énergie de migration de l’espèce émise. Leur modèle prenant en compte plusieurs espèces de défauts (V, I, P, PV, PI, PI<sub>2</sub>, P<sub>2</sub>, P<sub>2</sub>V, P<sub>2</sub>I, P<sub>3</sub>, P<sub>3</sub>V, P<sub>3</sub>I et P<sub>4</sub>V) leur a permis de simuler le profil de diffusion de phosphore implanté dans le silicium dans plusieurs conditions de procédé.

<b>P<sub>4</sub>V</b>			
<b>-4.674</b>			
<b>-1.121</b>			
<b>P<sub>3</sub>V</b>	<b>P<sub>3</sub></b>	<b>P<sub>3</sub>I</b>	
<b>-3.328</b>	<b>0.127</b>	<b>-2.034</b>	
<b>0.225</b>	<b>0.127</b>	<b>1.419</b>	
<b>P<sub>2</sub>V</b>	<b>P<sub>2</sub></b>	<b>P<sub>2</sub>I</b>	
<b>-2.488</b>	<b>0.066</b>	<b>-2.037</b>	
<b>1.064</b>	<b>0.066</b>	<b>1.416</b>	
<b>PV</b>	<b>P</b>	<b>PI</b>	<b>PI<sub>2</sub></b>
<b>-1.207</b>	<b>-</b>	<b>-0.852</b>	<b>-2.583</b>
<b>2.346</b>	<b>-</b>	<b>2.601</b>	<b>4.323</b>
<b>V</b>	<b>No defect</b>	<b>I</b>	
<b>-</b>	<b>-</b>	<b>-</b>	
<b>3.553</b>	<b>-</b>	<b>3.453</b>	

Figure 42 : Valeurs des énergies de formation issues de calculs théoriques de Sahli et al. [107].

### IV.3.3 Antimoine

Le cas de l'antimoine est comparable à celui de l'arsenic. Gaiduk et al. [108] montrent que l'antimoine peut, dans certaines conditions, former des agglomérats de type  $Sb_2V$ . Cependant, il existe, à notre connaissance, très peu d'informations relatives à ces agglomérats.

## V L'INTERFACE Si/SiO<sub>2</sub>

Dans les technologies émergentes, les dispositifs étant de plus en plus proches des interfaces, il est primordial de modéliser précisément les mécanismes physiques liés aux interfaces semi-conducteur/isolants. En pratique, ces interfaces jouent un rôle dans la diffusion, de plus en plus prépondérant au fur et à mesure que les jonctions sont plus fines.

En premier lieu, il convient de remarquer que le silicium ne présente jamais une surface pure, directement en contact avec l'atmosphère ambiante. Il se forme toujours une couche d'oxyde natif à sa surface, d'environ 1 à 2 nm d'épaisseur. Nous allons donc nous intéresser dans cette partie aux différents phénomènes ayant lieu à l'interface entre le silicium et son oxyde, la silice (SiO<sub>2</sub>).

Nous allons tout d'abord nous pencher sur la façon dont les dopants interagissent avec cette interface. On distingue deux phénomènes, la ségrégation et l'exo-diffusion. Nous examinerons ensuite les modèles de la littérature pour décrire la distribution des dopants au voisinage des interfaces Si/SiO<sub>2</sub>. Ces modèles étant les mêmes pour tous les dopants, nous nous concentrerons sur le cas particulier de l'Arsenic, car il constitue actuellement le dopant le plus problématique et sur lequel le plus grand nombre d'études a été réalisé.

### V.1 Ségrégation des impuretés

Les fortes concentrations visées pour les composants micro et nano électroniques peuvent être pénalisées par la ségrégation des dopants (comme l'arsenic) aux interfaces SiO<sub>2</sub>/Si. Une perte partielle de la dose implantée est souvent constatée. Il est alors important de savoir si le dopant en ségrégation est immobile, et si cette perte est irréversible.

Une impureté mobile, par exemple en position interstitielle, peut être capturée à l'interface selon les mêmes mécanismes que les interstitiels par exemple. En fonction de la nature des impuretés, l'interface pourra accumuler plus ou moins d'atomes par unité de surface. On observera alors une ségrégation plus ou moins importante de cette espèce à l'interface. Par ailleurs, les atomes étrangers peuvent également s'échapper des pièges, c'est-à-dire être émis par l'interface SiO<sub>2</sub>/Si, dans l'un ou l'autre des deux côtés de l'interface. Cela va dépendre de la solubilité de l'impureté dans chacun de ces deux matériaux, et de sa concentration à proximité de l'interface. On sait par exemple que le fluor "préfère" s'accumuler dans l'oxyde ; mais si la concentration en fluor est trop élevée, l'oxyde ne sera plus en mesure d'en "absorber". L'émission de fluor de l'interface vers l'oxyde sera donc réduite, voire bloquée.

Par conséquent, si la diffusivité de l'impureté considérée est très faible dans un des matériaux jouxtant l'interface, celui-ci sera rapidement saturé en cette impureté, localement. Quand l'impureté sera relâchée, ce sera donc dans l'autre matériau.

La ségrégation de l'arsenic à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> a été identifiée dans la littérature comme un des facteurs les plus importants contribuant à la perte de l'arsenic électriquement actif [109, 110, 111]. Ce phénomène est thermodynamiquement favorisé lors de la recristallisation induite par le recuit [112]. D'après des analyses par faisceaux d'ions haute résolution (MEIS : Medium Energy Ion Scattering) il a été initialement proposé que le pic d'arsenic à l'interface est principalement localisé dans l'oxyde. Récemment, cet effet a été étudié de façon intensive dans le cadre du projet ATOMICS. Plusieurs approches ont été exploitées par nos partenaires de l'IISB-Erlangen (Peter Pichler); la problématique liée aux structures SiO<sub>2</sub>/Si fait que des techniques comme le SIMS soient peu adaptées notamment à cause des différentes probabilités d'ionisation dans les deux matériaux. Les chercheurs de ce laboratoire ont alors utilisé la GI-XRF (Grazing Incidence X-Ray Fluorescence spectrometry) en combinaison avec des gravures successives des couches pour remonter aux profils de concentrations. D'autres techniques utilisant la microscopie en transmission en mode balayage STEM (Z-contrast imaging, EELS) ont aussi été utilisées.

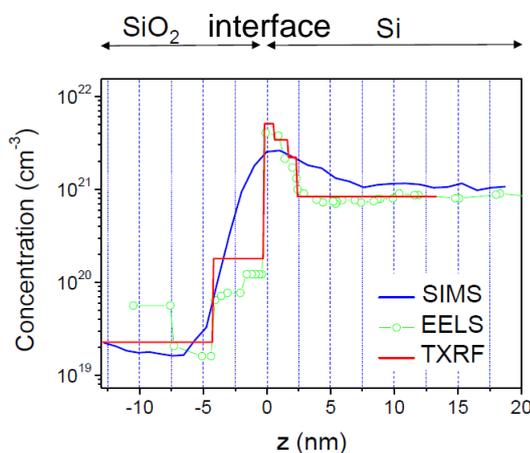


Figure 43 : Analyses comparatives de profils d'As à l'interface Oxyde/Si. Dose :  $10^{16}$ at.cm<sup>-2</sup>, E=32keV.

Comme montré sur la Figure 43, les principaux résultats obtenus [113, 114] s'accorde à montrer que l'arsenic s'accumule sur quelques nanomètres en dessous de l'interface SiO<sub>2</sub>/Si. L'origine de cet effet est que les atomes d'arsenic sont énergétiquement favorables à l'interface.

## V.2 Exo-diffusion

Lorsque le coefficient de diffusion de l'impureté dans l'oxyde est assez élevé, la concentration locale à proximité de l'interface n'est jamais maximale, car il se crée un gradient de concentration de l'impureté dans l'oxyde. Les impuretés diffusent alors dans l'oxyde, et s'éloignent donc de l'interface, diminuant la probabilité d'être recapturées et réinjectées dans le silicium. La dose présente dans le silicium à la fin du procédé de fabrication est donc moindre qu'au début : une partie est perdue. Par ailleurs, le même phénomène peut avoir lieu à l'interface entre l'oxyde et l'atmosphère ambiante, c'est-à-dire à la surface de l'échantillon. L'impureté peut s'évaporer dans la chambre de recuit, et disparaître totalement de l'échantillon. C'est ce phénomène qui est appelé exo-diffusion. Il est d'autant plus marqué que la pression partielle de l'impureté dans l'atmosphère de recuit est souvent nulle (on ne trouve initialement pas de bore, d'arsenic ou de carbone dans l'atmosphère de recuit).

L'arsenic présente la particularité de ségréger à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si lors du recuit d'activation, et selon l'atmosphère du recuit (sous azote, avec ou sans oxygène), une proportion plus ou moins importante de la dose d'arsenic implantée va subir de l'exo-diffusion. Ce phénomène est d'autant plus importante que le R<sub>p</sub> est proche de la surface et que la dose implantée est élevée [115]. On comprend donc que la fabrication de jonctions ultrafines en arsenic peut devenir problématique avec la réduction des dimensions des transistors (diminution du R<sub>p</sub>) et la nécessité de réduire les valeurs de résistivité (augmentation des doses implantées). En outre, dans le cas d'un recuit non oxydant (azote pur), la couche d'oxyde de surface mesure au maximum quelques Angströms (forme native) et ne peut empêcher l'exo-diffusion d'une quantité significative de la dose d'arsenic implantée (jusqu'à 70% selon [115]). Toutefois l'utilisation d'un recuit rapide (spike ou flash) limite ce phénomène grâce à la réduction du bilan thermique.

### V.3 Modèle

Plusieurs modèles de piégeage et de ségrégation des dopants aux interfaces ont été développées [116, 118, 117].

Basé sur le modèle de Lau [116], Oh et Ward [118] ont présenté un modèle pour le piégeage des dopants à l'interface pendant le recuit thermique, incluant la compétition entre les différentes espèces dopantes à piéger les sites libres présents à l'interface. Le flux d'un dopant du silicium vers l'interface est décrit par:

$$\text{Équation 56} \quad F = h \left\{ C_S \left[ 1 - \sum_{\text{species}} \left( \frac{\sigma_i}{\sigma_{\max}} \right) + \left( \frac{e}{a} \right) \frac{\sigma_i}{\sigma_{\max}} \right] - \left( \frac{e}{a} \right) \frac{C_{\text{solub}} \sigma_i}{\sigma_{\max}} \right\}$$

où  $\sigma_{\max}$  est la densité de piège à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si,  $C_{\text{solub}}$  est la limite de solubilité du dopant dans le silicium,  $a$  et  $e$  sont respectivement les probabilités d'absorption et d'émission, et  $h = a \cdot \sigma_{\max}$ . Enfin,  $C_S$  représente la concentration volumique du dopant à l'interface du côté matériau et  $\sigma_i$  la densité de dopants piégés à l'interface. Oh et Ward ont calibré les différents paramètres relatifs à la ségrégation du bore, du phosphore et de l'arsenic. Le modèle "ségrégation à trois phases" (cf. chapitre III) utilisé dans Sentaurus Process est basé sur ces études.

Vuong et al., ont étudié l'effet de piégeage du dopant sur les caractéristiques électriques pour les implantations BF<sub>2</sub>, P, et As [117]. Ils ont été en mesure de modéliser avec succès les caractéristiques électriques de deux dispositifs NMOS et PMOS utilisant une méthodologie de piégeage et d'émission. Ils font l'hypothèse qu'un flux de dopant arrive du coté substrat et se retrouve piégé à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si selon:

$$\text{Équation 57} \quad J_{\text{trap}} = r_t C_{\text{Si}}^A \left( 1 - \frac{Q_{\text{trap}}}{N_{\text{trap}}} \right) \quad \text{et} \quad J_{\text{detrap}} = \frac{r_d Q_{\text{trap}}}{t_{\text{trap}}}$$

où  $J_{\text{trap}}$  est le flux de dopants piégés à l'interface,  $r_t$  est le taux de piégeage,  $C_{\text{Si}}^A$  est la concentration des dopants actifs (cm<sup>-3</sup>),  $Q_{\text{trap}}$  est la dose piégée (cm<sup>-2</sup>), et  $N_{\text{trap}}$  est la concentration maximale de sites pièges (cm<sup>-2</sup>). Il est intéressant de noter que le flux des impuretés piégées est proportionnel à la concentration des dopants actifs. Les effets de

l'émission sont également simulée par  $J_{detrapp}$  où  $r_d$  est le taux d'émission, et  $t_{trap}$  l'épaisseur de la couche où sont situés les pièges.

Les récents travaux expérimentaux dans le laboratoire de EG Seebauer ont proposé une explication alternative au phénomène de la ségrégation des dopants [119, 120, 121]. Par l'utilisation de la photoréflectance, ils ont réussi à quantifier le degré de courbure des bandes d'énergie à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si après une implantation au Ar<sup>+</sup> à 0.5keV, avec une dose de 1.10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup> [119]. Ils ont montré que cette des bandes d'énergie persistaient à des températures allant jusqu'à 940°C pendant plusieurs minutes. Il en résulte un changement du potentiel de surface de 0,4 et 0,52 eV pour l'implantation avec et sans oxydation, respectivement. La variation du potentiel de surface témoigne de la présence d'un champ électrique net comme le montre la Figure 44.a. Les interstitiels chargés positivement qui migrent du substrat vers l'interface sont repoussés par le champ électrique. Les interstitiels à proximité de la surface peuvent être chargés négativement (en raison de la position du niveau de Fermi) et migrent vers la surface sans se recombinaer.

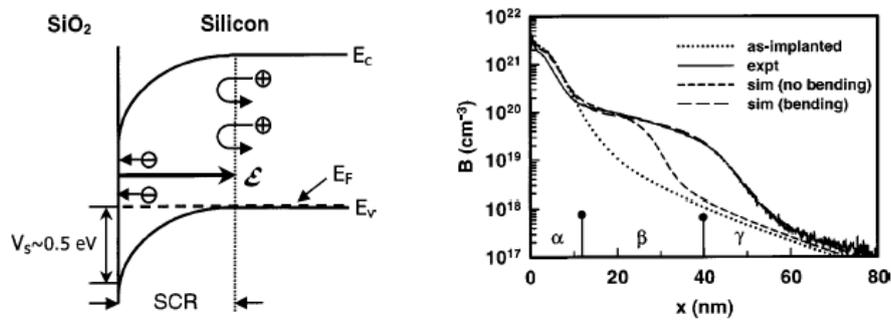


Figure 44 : a) Diagramme d'énergie potentielle des électrons dans un substrat Si de type p après implantation au Ar<sup>+</sup>. Les défauts à l'interface absorbent les charge positives provenant du substrat et crée une région de charge d'espace (SCR) et un champ électrique se dirigeant vers le substrat. Les interstitiels chargés positivement sont repoussés vers le substrat par le champ électrique. Les interstitiels à proximité de la surface peuvent se recombinaer puisque le niveau de Fermi s'approche le milieu de la bande interdite du silicium (*midgap*) [120]. b) Simulation de l'expérience de la TED du bore en utilisant le modèle de Jung et al. [120].

Jung et al., ont développé un modèle permettant de simuler à la fois la TED et la ségrégation des dopants en se basant sur ces résultats [120]. En ajoutant un terme d'électro-migration à la première loi de Fick, ils ont réussi à reproduire une large base de données de TED et de la ségrégation. Les équations générales du flux et du champ électrique sont :

$$\text{Équation 58} \quad J_j = -D_j \frac{\partial C_j}{\partial x} + z\mu_j C_j E(x) \text{ avec : } E(x) = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

où  $z$  est la charge des espèces  $j$ ,  $\mu$  la mobilité,  $E$  le champ électrique, et  $\Psi$  le potentiel électrostatique. Le modèle montre d'excellents résultats à la fois sur la diffusion de la queue du profil et des effets de surface exposés pour le bore dans la Figure 44.b.

## VI CONCLUSION

Ce chapitre a permis d'exposer les différentes relations qui existent entre la diffusion accélérée du bore et les défauts ponctuels et étendus. Nous avons établi le rôle joué par la formation d'agglomérats d'interstitiels dans l'évolution de la sursaturation des défauts

ponctuels. Nous avons présenté les différents types de défauts extrinsèques créés après une implantation de dopant. Nous en avons donné les structures et les énergies de formation. A partir des nombreux travaux d'observations expérimentales, nous avons pu exposer les mécanismes invoqués au cours de leurs évolutions en présentant la théorie de la maturation d'Ostwald. Au cours d'un recuit, les petits défauts se dissolvent au profit des plus gros. La force motrice de ce processus étant liée à la réduction de l'énergie de formation consécutive à l'augmentation en taille et au changement de structure cristalline. Ainsi on voit tour à tour la population de ces amas d'interstitiels évoluer de petits amas vers des défauts  $\{311\}$  puis si le processus continue vers des boucles de dislocations fautées et parfaites. A ce premier processus, il convient d'ajouter un second effet, qui est relié à la présence pour des concentrations relativement fortes, d'amas mixtes de bore et d'interstitiels. Nous avons alors fait l'état de l'art des informations relatives à ces agglomérats en commençant par les résultats issus des divers travaux expérimentaux puis provenant des calculs théoriques. De plus, nous avons évoqué le cas des autres dopants et montré qu'ils pouvaient être traités d'une façon très similaire au bore. Dans la dernière partie de ce chapitre, les problèmes liés à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  notamment la ségrégation et l'exo-diffusion ont été discutés.

A partir de cette étude complète des phénomènes susceptibles d'intervenir dans la diffusion des dopants dans le silicium, nous pouvons à présent présenter les modèles physiques utilisés dans Setaurus Process. Nous présenterons un système d'équations permettant de répondre aux besoins en matière de diffusion et d'activation des dopants.

**REFERENCES DU CHAPITRE II**

- 1 A. E. Michel, W. Rausch, P. A. Ronsheim and R. H. Kastl, "Rapid annealing and the anomalous diffusion of ion implanted boron into silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 50(7), p. 416 (1987).
- 2 M.D. Giles, "Transient Phosphorus Diffusion Below the Amorphization Threshold", *J. Electrochem. Soc.* 138, p. 1160 (1991).
- 3 D.J. Eaglesham, P.A. Stolk, H.J. Gossmann and J.M. Poate, "Implantation and transient B diffusion in Si: The source of the interstitials", *Appl. Phys. Lett.* 65, p. 2305 (1994).
- 4 S.B. Herner, H.-J. Gossmann, L.P. Pelaz, G.H. Gilmer, M. Jaraíz, D.C. Jacobson and D.J. Eaglesham, "Ion mass influence on transient enhanced diffusion and boron clustering in silicon: Deviation from the "+1" model", *J. Appl. Phys.*, 83(11), p. 6182 (1998).
- 5 A. Claverie, C. Bonafos, D. Alquier and A. Martinez, "Interactions between Dopants and End-of-Range Defects in Silicon", *Solid State Phenom.*, vol. 47-48, p. 195 (1996).
- 6 G. Hobler and S. Selberherr, "Two-Dimensional Modeling of Ion Implantation Induced Point Defects", *IEEE Transactions on Computer-Aided Design*, vol. 7, no. 2, p. 174-180 (1988).
- 7 J. P. Biersack, "Basic Physical Aspects of High Energy Implantation", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. B35, no. 2, p. 205–214 (1988).
- 8 S. Tian, "Predictive Monte Carlo ion implantation simulator from sub-keV to above 10 MeV" *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 10, p. 5893–5904 (2003).
- 9 M. Posselt, "Crystal-TRIM and Its Application to Investigations on Channeling Effects During Ion Implantation", *Radiation Effects and Defects in Solids*, vol. 130–131, p. 87–119 (1994).
- 10 B. De Mauduit, L. Laanab, C. Bergaud, M.M. Faye, A. Martinez and A. Claverie, "Identification of EOR defects due to the regrowth of amorphous layers created by ion bombardment", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 84(2), p. 190 (1994).
- 11 L. Csepregi, J.W. Mayer and T.W. Sigmon, "Channeling effect measurements of recrystallization of amorphous Si layer on crystal Si", *Appl. Phys. Lett.* A, 54, p. 322 (1975).
- 12 S.S. Lau, J.W. Mayer and W. Tseng, "Chapter 8 : Solid Phase Epitaxial Growth of Si and Ge", *Handbook of semiconductor* vol. 3 edited by S.P. Keller, p. 531 (1980).
- 13 R. G. Wilson, "The regrowth of implantation damage in silicon studied via silver depth profiling", *J. Appl. Phys.*, 60(8), p. 2810 (1986).
- 14 G. L. Olson and J. A. Roth, "Kinetics of solid phase crystallization in amorphous silicon", *Mater. Sci. Rep.* Vol. 3, no. 1, p. 1-78 (1988).
- 15 P. M. Fahey, P. B. Griffin and J. D. Plummer, "Point defects and dopant diffusion in silicon", *Rev. Mod. Phys.*, 61(2), p. 289 (1989).

- 16 D. A. Antoniadis and I. Moskowitz, "Diffusion of Substitutional Impurities in Silicon at Short Oxidation Times: An Insight into Point Defect Kinetics", *J. Appl. Phys.* 53(10), p. 6788-6796 (1982).
- 17 Meijie Tang, L. Colombo, Jing Zhu and T. Diaz de la Rubia, "Intrinsic point defects in crystalline silicon : Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes", *Phys. Rev. B*, 55(21), p. 14279 (1997).
- 18 A. Cacciato, J. G. E. Klappe, N. E. B. Cowern, W. Vandervorst, L. P. Birö, J. S. Custer and F. W. Saris, "Dislocation formation and B transient diffusion in C coimplanted Si", *J. Appl. Phys.*, 79(5), p. 2314 (1996).
- 19 N. E. B. Cowern, A. Cacciato, J. S. Custer, F. W. Saris and W. Vandervorst, "Role of C and B clusters in transient diffusion of B in silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 68(8), p. 1150 (1996).
- 20 F. Cristiano, A. Claverie, C. Bonafos, M. Omri, A. Nejim, P. L. F. Hemment, S. Lombardo, S. U. Campisano, D. Alquier and A. Martinez, "Interstitial trapping efficiency of C+ implanted into preamorphised silicon : Control of EOR defects", *Nucl. Instr. Meth. B*, vol. 127-128(1), p. 22 (1997).
- 21 S. Mirabella, S. Scalse, A. Terrasi, F. Priolo, A. Coati, D. De Salvador, E. Napolitani, and M. Berti, "Self-Interstitials and Substitutional C in Silicon : Interstitial-Trapping and C-Clustering", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. "Silicon Front-End Junction Formation Technologies"*, edited by D.F. Downey, M.E. Law, A.P., Claverie, M.J. Rendon, 717, C5 (2002).
- 22 H. A. W. El Mubarek and P. Ashburn, "Reduction of boron thermal diffusion and elimination of boron transient enhanced diffusion in silicon by high energy fluorine implantation", *Appl. Phys. Lett.* 83, p. 4134 (2003).
- 23 H. A. W. El Mubarek, J. M. Bonar, G. D. Dilliway, P. Ashburn, M. Karunaratne, F. Willoughby, Y. Wang, P. L. F. Hemment, R. Price, J. Zhang, and P. Ward, "Effect of fluorine implantation dose on boron thermal diffusion in silicon", *J. Appl. Phys.* 96, p. 4114 (2004).
- 24 G. Impellizzeri, S. Mirabella, F. Priolo, E. Napolitani, and A. Carnera, "Fluorine in preamorphized Si: Point defect engineering and control of dopant diffusion", *J. Appl. Phys.* 99, p. 103510 (2006).
- 25 N.E.B. Cowern, B. Colombeau, J. Benson, A.J. Smith, W. Lerch, S. Paul, T. Graf, F. Cristiano, X. Hebras, and D. Bolze, "Mechanisms of B deactivation control by F co-implantation", *Appl. Phys. Lett.*, 86, p. 101905 (2005).
- 26 R. Robison, PhD thesis, University of Florida, 2006.
- 27 P. Lopez, L. Pelaz, R. Duffy, P. Meunier-Beillard, F. Roozeboom, K. Van der Tak, P. Breimer, J.G.M. van Berkum, M.A. Verheijen, M. Kaiser, "Evolution of fluorine and boron profiles during annealing in crystalline Si", *J. Vac. Sci. Technol. B* 26, p. 377 (2008).
- 28 G. Impellizzeri, PhD thesis, University of Catania, 2004.
- 29 G. D. Watkins, "Native defects and their interactions with impurities in silicon", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 469, p. 139 (1997).
- 30 S.M. Hu, "Anomalous temperature effect of oxidation stacking faults in silicon", *Appl. Phys. Lett.* 27, p. 165 (1975).

- 31 O. Marcelot, "Ingénierie de défauts ponctuels pour le contrôle de la diffusion et de l'activation du Bore dans le silicium", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2007).
- 32 S. Coffa, S. Libertino and C. Spinella, "Transition from small interstitial clusters to extended {311} defects in ion-implanted Si", *Appl. Phys. Lett.*, 76(3), p. 321 (2000).
- 33 N.E.B. Cowern, G. Mannino, P. A. Stolk, F. Roozeboom, H. G. A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristiano, A. Claverie and M. Jaraiz, "Energetics of Self-Interstitial Clusters in Si", *Phys. Rev. Lett.*, 82(22), p. 4460 (1999).
- 34 Jeongnim Kim, Florian Kirchhoff, John W. Wilkins and Furrukh S. Khan, "Stability of Si-Interstitial Defects : From Point to Extended Defects", *Phys. Rev. Lett.*, 84(3), p. 503 (2000).
- 35 J. Kim, S. Birner, J.W. Wilkins D.A. Richie and A.F. Voter, "Thermodynamic Processes of Si-interstitial Clusters", In *Technical Proceedings of the ICCN 2001 International Conference on Computational Nanoscience*, p. 117 (2001).
- 36 F. Schiettekatte, S. Roorda, R. Poirier, M. O. Fortin, S. Chazal and R. Héliou, "Direct evidence for 8-interstitial-controlled nucleation of extended defects in c-Si", *Appl. Phys. Lett.*, 77(26), p. 4322 (2000).
- 37 S. Takeda, "The structures of extended defects in Si and other materials studied by HRTEM", *Inst. Phys. Conf. Ser.* 157, 25 (1997).
- 38 B. Colombeau, "Interactions entre les défauts étendus et anomalies de diffusion des dopants dans le silicium : modèle physique et simulation prédictives", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2001).
- 39 A. Parisini and A. Bourret, "Diamond hexagonal silicon phase and {113} defects Energy calculations and new defect models", *Phil. Mag. A*, 67(3), p. 605 (1993).
- 40 S. Takeda, "An Atomic Model of Electron-Irradiation-Induced Defects on {113} in Si", *Jpn J. Appl. Phys.* 30, L639 (1991).
- 41 S. Takeda, M. Kohyama and K. Ibe, "Interstitial defects on {'113} in Si and Ge Line defect configuration incorporated with a self-interstitial atom chain", *Phil. Mag. A* 70, 287 (1994).
- 42 C.J. Ortiz and D. Mathiot, "A new kinetic model for the nucleation and growth of self-interstitial clusters in silicon", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 669, p. J5.6.1 (2001).
- 43 F. Cristiano, J. Grisolia, B. Colombeau, M. Omri, B. de Mauduit, A. Claverie, L. F. Giles and N.E.B. Cowern, "Formation energies and relative stability of perfect and faulted dislocation loops in silicon", *J. Appl. Phys.*, 87(12), p. 8420 (2000).
- 44 J. Friedel, *Solid State Physics, Vol. 3: Dislocations*. Pergamon Student Editions, Paris (1967).
- 45 C. Bonafos, "Rôle des défauts End-Of-Range dans la diffusion anormale du bore dans le silicium". Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse (1996).
- 46 C. Bonafos, M. Omri, B. de Mauduit, G. BenAssayag, A. Claverie, D. Alquier, A. Martinez and D. Mathiot, "Transient enhanced diffusion of boron in presence of end-of-range defects", *J. Appl. Phys.*, 82(6), p. 2855 (1997).

- 47 W. Ostwald, "Über die vermeintliche isomerie des roten und gelben Quicksiberoxyds und die oberflächenspannung festen Körper", *Z. phys.*, 34, p. 495 (1900).
- 48 W. Thomson, "On the equilibrium of vapor at a curved surface of liquid", *Phil. Mag*, 42(448) (1871).
- 49 A. Claverie, B. Colombeau, F. Cristiano, A. Altibelli and C. Bonafos, "Atomistic Simulations of Extrinsic Defects Evolution and Transient Enhanced Diffusion in Silicon", *Mat. Res. Soc. Proc* 669, J9.4.1 (2001).
- 50 B. Colombeau, F. Cristiano, A. Altibelli, C. Bonafos, G. Ben Assayag and A. Claverie, "Atomistic simulations of extrinsic defects evolution and transient enhanced diffusion in silicon", *Appl. Phys. Lett.* 78 (7), p. 940 (2001).
- 51 N.E.B. Cowern, D. Alquier, M. Omri, A. Claverie and A. Nejim, "Transient enhanced diffusion in preamorphized silicon : the role of the surface", *Nucl. inst. Meth. Phys. Res. B*, 148(1-4), p. 257 (1999).
- 52 Freundtech model: Sentaurus Process manual version A-2008.09 Synopsys 2008 / E. Lampin, C. J. Ortiz, N. E. B. Cowern, B. Colombeau, F. Cristiano, "Combined master and Fokker-Planck equations for the modeling of the kinetics of extended defects in Si", *Sol. State Elec.* 49, p. 1168 (2005).
- 53 D. Stiebel, P. Pichler and N. E. B. Cowern, "A reduced approach for modelling the influence of nanoclusters and {113} defects on transient enhanced diffusion", *Appl. Phys. Lett.*, 79(16), p. 6454 (2001).
- 54 M. Uematsu, "Influence of Ostwald Ripening of End-of-Range Defects on Transient Enhanced Diffusion in Silicon", *Jpn. J. Appl. Phys.*, 38(11A), L1213 (1999).
- 55 P. Calvo, "Evolution cinétique des défauts {113} en cours de recuit thermique de Silicium implanté : Influence sur la diffusion des dopants", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2004).
- 56 S.T. Dunham, "Modeling of the Kinetics of Dopant Precipitation in Silicon", *J. Electrochem. Soc.*, 142, p. 2823 (1995).
- 57 I. Clejan and S.T. Dunham, "A reduced moment-based model for precipitant kinetics and application to dopant activation in silicon", *J. Appl. Phys.*, 78(12), p. 7327 (1995).
- 58 S. T. Dunham, I. Clejan and A. H. Gencer, "Accurate and Efficient Modeling of Nucleation and Growth Processes", *Mat. Sci. Eng. A*, 238, p. 152 (1997).
- 59 G. Hobler, C. S. Rafferty and S. Senkader, "A model of {311} defect evolution based on nucleation theory", *SISPAD'97 Proceedings*, p. 73 (1997).
- 60 N. Zographos, C. Zechner and I. Avci, "Efficient TCAD Model for the Evolution of Interstitial Clusters, {311} Defects, and Dislocation Loops in Silicon", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 994*, 0994-F10-01 (2007).
- 61 S. Solmi, E. Landi and F. Bruffaldi, "High-Concentration Boron Diffusion in Silicon : Simulation of the Precipitation Phenomena", *J. Appl. Phys.*, 68(7), p. 3250 (1990).
- 62 D. Nobili, S. Solmi, A. Parisini, M. Derdour, A. Armigliato and L. Moro, "Precipitation, aggregation, and diffusion in heavily arsenic-doped silicon", *Phys. Rev. B*, 49(4), 2477 (1994).

- 63 S. Solmi, A. Parisini, R. Angelucci, A. Armigliato, D. Nobili and L. Moro. Dopant and carrier concentration in Si in equilibrium with monoclinic SiP precipitates. *Phys. Rev. B*, 53(12), 7836 (1996).
- 64 D. Nobili, R. Angelucci, A. Armigliato, E. Landi and S. Solmi, "Equilibrium carrier density and solubility of antimony in silicon", *J. electrochem. Soc.*, 136(6), p. 1142 (1989).
- 65 W.K. Hofker, H.W. Werner, D.P. Oosthoek and H.A.M. de Grefte, "Influence of annealing on the concentration profiles of boron implantations in silicon", *Applied-Physics*, 2(5), p. 265 (1973).
- 66 W.K. Hofker, H. W. Werner, D. P. Oosthoek and N.J. Koeman, "Boron implantations in silicon : A comparison of charge carrier and boron concentration profiles", *Appl. Phys.*, 4(2), p. 125 (1974).
- 67 N. E. B. Cowern, K. T. F. Janssen and H. F. F. Jos, "Transient diffusion of ion-implanted B in Si: Dose, time, and matrix dependence of atomic and electrical profiles", *J. Appl. Phys.*, 68(12), p. 6191 (1990).
- 68 S. Solmi, F. Baruffaldi and R. Canteri, "Diffusion of boron in silicon during post-implantation annealing", *J. Appl. Phys.*, 69(4), 2135 (1991).
- 69 S. Solmi, M. Bersani, M. Sbeti, J. Lundsgaard Hansen and A. Nylandsted Larsen, "Boron-interstitial silicon clusters and their effects on transient enhanced diffusion of boron in silicon", *J. Appl. Phys.*, 88(8), p. 4547 (2000).
- 70 P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, D. C. Jacobson, J. M. Poate and H. S. Luftman, "Trap-limited interstitial diffusion and enhanced boron clustering in silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 66(5), p. 568 (1995).
- 71 L. H. Zhang, K. S. Jones, P. H. Chi and D. S. Simons, "Transient enhanced diffusion without {311} defects in low energy B<sup>+</sup>-implanted silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 67(14), p. 2025 (1995).
- 72 F. Cristiano, X. Hebras, N. Cherkashin, A. Claverie, W. Lerch, and S. Paul, "Clusters formation in ultralow-energy high-dose boron-implanted silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 83(26): p. 5407-5409 (2003).
- 73 N. Cherkashin, M. Hytch, F. Cristiano, and A. Claverie, "Structure Determination of Clusters Formed in Ultra-Low Energy High-Dose Implanted Silicon", *Solid State Phenomena*, 108-109: p. 303-308 (2005).
- 74 S. Boninelli, S. Mirabella, E. Bruno, F. Priolo, F. Cristiano, A. Claverie, D. De Salvador, G. Bisognin, and E. Napolitani, "Evolution of boron-interstitial clusters in crystalline Si studied by transmission electron microscopy", *Appl. Phys. Lett.*, 91(3): p. 031905-3 (2007).
- 75 W. Luo, "Simulation and experimental study of boron clustering in crystalline silicon", Ph.D. thesis, Cornell University (2000).
- 76 W. Luo, P. B. Rasband, P. Clancy and B. W. Roberts", Tight-binding studies of the tendency for boron to cluster in c-Si. I. Development of an improved boron-boron model", *J. Appl. Phys.*, 84(5), p. 2471 (1998).

- 77 W. Luo, Paul B. Rasband, Paulette Clancy, and Bruce W. Roberts, "Tightbinding studies of the tendency for boron to cluster in c-Si. II. Interaction of dopants and defects in boron-doped Si", *J. Appl. Phys.*, 84(5), p. 2476 (1998).
- 78 Silva K. Theiss, M. J. Caturla, M. D. Johnson, J. Zhu, T. Lenosky, B. Sadigh and T. Diaz de la Rubia, "Atomic scale models of ion implantation and dopant diffusion in silicon", *Thin Solid films*, 365(2), p. 219 (2000).
- 79 T. J. Lenosky, B. Sadigh, S. K. Theiss, M.-J. Caturla and T. Diaz de la Rubia, "Ab initio energetics of boron-interstitial clusters in crystalline Si", *Appl. Phys. Lett.*, 77(12), p. 1834 (2000).
- 80 N.E.B. Cowern, H.F.F. Jos and K.T.F. Janssen, "Role of point defects in the transient diffusion and clustering of implanted boron in silicon", *Material Science and Engineering B*, 4(1), p. 101 (1989).
- 81 M. Hane and H. Matsumoto, "A model for boron short time diffusion after ion implantation", In *IEDM Techn. Digest*, p. 701 (1991).
- 82 D. Mathiot and J.C. Pfister, "Dopant diffusion in silicon : A consistent view involving nonequilibrium defects", *J. Appl. Phys.*, 55(10), p. 3518 (1984).
- 83 B. Baccus and E. Vandenbossche, "Modelling high concentration boron diffusion with dynamic clustering : influence of the initial conditions", *Microelectronics Journal*, 26(2-3), p. 235 (1985).
- 84 T. Y. Tan, H. Föll and W. Krakow. In A. G. Cullis and D. C. Joy, editors, *Inst. Phys. Conf. Ser. : Microscopy of Semiconducting Materials*, page 1 (1981).
- 85 M. Uematsu, "Simulation of clustering and transient enhanced diffusion of boron in silicon", *J. Appl. Phys.*, 84(9), p. 4781 (1998).
- 86 L. Pelaz, M. Jaraiz, G. H. Gilmer, H.-J. Gossmann, C. S. Rafferty, D. J. Eaglesham and J. M. Poate, "B diffusion and clustering in ion implanted Si: The role of B cluster precursors", *J. Appl. Phys.*, 70(17), p. 2285 (1997).
- 87 L. Pelaz, G. H. Gilmer, H.-J. Gossmann, C. S. Rafferty, M. Jaraiz and J. Barbolla, "B cluster formation and dissolution in Si : A scenario based on atomistic modeling", *J. Appl. Phys.*, 74(24), p. 3657 (1999).
- 88 J. Schermer, P. Pichler, C. Zechner, W. Lerch and S. Paul, "On a computationally efficient approach to boron-interstitial clustering", In: D. Schmitt-Landsiedel and R. Thewes, Editors, *ESSDERC 2007*, IEEE, Piscataway, p. 342–345 (2007).
- 89 P. Pichler, A. Burenkov, W. Lerch, J. Lorenz, S. Paul, J. Niess, Z. N'enyeyi, J. Gelpey, S. McCoy, W. Windl, and L. F. Giles, "Process-induced diffusion phenomena in advanced CMOS technologies" in *Diffusion in Solids and Liquids*, ser. Defect and Diffusion Forum, A. Öchsner and J. Grácio, Eds., vol. 258-260, p. 510–521 (2006).
- 90 V. Krishnamoorthy, B. Beaudet, K. S. Jones, and D. Venables, "Energy dependence of transient-enhanced-diffusion in low energy high dose arsenic implants in silicon", *Tech. Dig. - Int. Electron Devices Meet.* p. 638 (1997).
- 91 S. Solmi, M. Ferri, M. Bersani, D. Giubertoni, and V. Soncini, "Transient Enhanced Diffusion of Arsenic in Silicon", *J. Appl. Phys.*, 94, p. 4950 (2003).

- 92 A. Ural, P.B. Griffin, and J.D. Plummer, "Fractional Contributions of Microscopic Diffusion Mechanisms for Common Dopants and Self-Diffusion in Silicon", *J. Appl. Phys.*, 85, p. 6440 (1999).
- 93 R. Kim, T. Hirose, T. Shano, H. Tsuji, and K. Taniguchi, "Influences of Point and Extended Defects on As Diffusion in Si", *Jpn. J. Appl. Phys.*, 41, p. 227 (2002).
- 94 C. Tsamis, D. Skarlatos, G. BenAssayag, A. Claverie, W. Lerch, and V. Valamontes, "Interstitial Injection in Silicon after High-Dose, Low-Energy Arsenic Implantation and Annealing", *Appl. Phys. Lett.*, 87, p. 201903 (2005).
- 95 V. Ranki, J. Nissilä and K. Saarinen, "Formation of Vacancy-Impurity Complexes by Kinetic Processes in Highly As-Doped Si", *Phys. Rev. Lett.* 88, p. 105506 (2002).
- 96 M. Ramamoorthy, S.T. Pantelides, "Complex Dynamical Phenomena in Heavily Arsenic Doped Silicon", *Phys. Rev. Lett.* 76, p. 4753–4756 (1996).
- 97 J. Xie and S.P. Chen, "Interaction potentials for vacancy-assisted As diffusion in silicon", *J. Phys. : Condens. Matter.*, 11(38), p. 7219 (1999).
- 98 P. Fastenko, "Modeling and simulation of arsenic activation and diffusion in silicon", Ph.D. thesis, University of Washington (2002).
- 99 M. A. Berding and A. Sher, "Electronic quasichemical formalism : Application to arsenic deactivation in silicon", *Phys. Rev. B*, 58(7), p. 3853 (1998).
- 100 P. Rousseau, PhD thesis, Stanford University, 1996
- 101 P. M. Rousseau, P. B. Griffin, W. T. Fang and J. D. Plummer, "Arsenic deactivation enhanced diffusion : A time, temperature, and concentration study", *J. Appl. Phys.*, 84(7), p. 3593 (1997).
- 102 D. J. Chadi, P. H. Citrin, C. H. Park, D. L. Adler, M. A. Marcus, H.-J. Gossmann, "Fermi-Level-Pinning Defects in Highly n-Doped Silicon", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79 (24), p. 4834-4837 (1997).
- 103 Y.-S. kim, E.-C. Lee, K. J. Chang, "Electrically Deactivating Nearest-Neighbor Donor Pair Defects in Si", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 125503 (2003).
- 104 M. Uematsu, "Simulation of High-Concentration Phosphorus Diffusion in Silicon Taking into Account Phosphorus Clustering and Pile-Up", *Jpn. J. Appl. Phys. (Part 1)*, vol. 38 (11), p. 6188-6192 (1999).
- 105 P. H. Keys, "Phosphorus-defect interactions during thermal annealing of ion implanted silicon", Ph.D. thesis, University of Florida (2001).
- 106 J. Li, J. Chen, P.H. Keys, M.E. Law and K.S. Jones, "Transient Enhanced diffusion of phosphorus and defect evolution in P<sup>+</sup> implanted Si", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 568(LI99), p. 175 (1999).
- 107 B. Sahli, K. Vollenweider, N. Zographos, C. Zechner, K. Suzuki, "Phosphorus diffusion and activation in silicon: Process simulation based on ab initio calculations", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 1070, 1070-E03-03 (2008).

- 108 P. Gaiduk, J. Fage-Pedersen, J. Lundsgaard Hansen and A. Nylandsted Larsen, "Sb-precipitation-induced injection of Si self-interstitials in Si", *Phys. rev. B*, 59(11), p. 7278 (1999).
- 109 R. Kasnavi, Y. Sun, R. Mo, P. Pianetta, P.B. Griffin, J.D. Plummer, "Characterization of arsenic dose loss at the Si/SiO<sub>2</sub> interface", *J. Appl. Phys.* 87, p. 2255 (2000).
- 110 J. A. van den Berg, D. G. Armour, S. Zhang, S. Whelan, M. Werner, E. H. J. Collart, R. D. Goldberg, P. Bailey, and T. C. Q. Noakes, "Damage And Dopant Distributions Produced By Ultra Shallow B And As Implants Into Si At Different Temperatures Characterized By Medium Energy Ion Scattering", *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 717, C7.8.1 (2002).
- 111 M. Ferri, S. Solmi, A. Parisini M. Bersani, D. Giubertoni, M. Barozzi, "Arsenic uphill diffusion during shallow junction formation", *J. Appl. Phys.* 99, p. 113508 (2006).
- 112 F.F. Abraham, N.H. Tsai, and G.M. Pound, "Bond and strain energy effects in surface segregation: An atomic calculation", *Surface Sci.*, 83, p. 406 (1979).
- 113 L. Pei, G. Duscher, C. Steen, P. Pichler, H. Ryssel, E. Napolitani, D. De Salvador, A. M. Piro, A. Terrasi, F. Severac, F. Cristiano, K. Ravichandran, N. Gupta, and W. Windl, "Detailed arsenic concentration profiles at Si/SiO<sub>2</sub> interfaces", *J. Appl. Phys.*, 104, p. 043507 (2008).
- 114 C. Steen, A. Martinez-Limia, P. Pichler, H. Ryssel, S. Paul, W. Lerch, L. Pei, G. Duscher, F. Severac, F. Cristiano, and W. Windl, "Distribution and segregation of arsenic at the SiO<sub>2</sub>/Si interface", *J. Appl. Phys.*, 104, p. 023518 (2008).
- 115 G. Chaussemy, C. Gontrand, S. N. Kumar, B. Canut, D. Barbier, A. Laugier, "Rapid Thermal Annealing of Arsenic Implanted Monocrystalline Silicon", *Physica Status Solidi (a)*, vol. 124, issue 1, p. 103-114 (1990).
- 116 F. Lau, L. Mader, C. Mazure, C. Werner and M. Orlowski, "A model for phosphorus segregation at the silicon-silicon dioxide interface", *Appl. Phys. A*, 49, 671 (1989).
- 117 H. -H. Vuong, C. S. Rafferty, S. A. Eshraghi, J. Ning, J. R. McMacken, S. Chaudhry, J. McKinley, and F. A. Stevie, "Dopant dose loss at the Si-SiO<sub>2</sub> interface", *J. Vac. Sci. Technol. B* 18, p. 428 (2000).
- 118 Y.-S. Oh and D. E. Ward, "A Calibrated Model for Trapping of Implanted Dopants at Material Interface During Thermal Annealing", *IEDM* p. 509 (1998).
- 119 K. Dev, M. Y. L. Jung, R. Gunawan, R. D. Braatz, and E. G. Seebauer, "Mechanism for Coupling between Properties of Interfaces and Bulk Semiconductors", *Phys. Rev. B* 68, 195311 (2003).
- 120 M. Y. L. Jung, R. Gunawan, R. D. Braatz, and E. G. Seebauer, "Effect of Near-Surface Band Bending on Dopant Profiles in Ion-Implanted Silicon", *J. Appl. Phys.* 95, 1134 (2004).
- 121 K. Dev and E. G. Seebauer, "Band bending at the Si(111)-SiO<sub>2</sub> interface induced by low-energy ion bombardment", *Surface Sci.*, vol. 550 (1-3), p. 185 (2004).



# **Chapitre III**

## **Méthode de simulation**



## CHAPITRE III : METHODE DE SIMULATION

### I INTRODUCTION

Après avoir exposé dans les deux chapitres précédents l'état de l'art sur les principaux problèmes associés à la fabrication des jonctions ultra-minces, notamment ceux liés à la formation des défauts d'implantation et à leur impact sur la diffusion et l'activation des dopants, ce chapitre présente l'ensemble des modèles nécessaires à la simulation de procédé de fabrication de ces jonctions. En effet, l'objectif principal de ces travaux de thèse est de développer les "modèles manquants" pour le silicium, calibrer ceux existants, et les étendre aux nouveaux matériaux.

Pour cela, nous avons utilisé le programme commercial Sentaurus Process [1] dont l'objectif premier est de résoudre des problèmes généraux pour la fabrication de composants allant de l'implantation à la gravure ou à la diffusion de dopants. Mais son principal intérêt réside plutôt dans le fait que ce programme très ouvert nous donne un accès complet à son solveur d'équations aux dérivées partielles. Nous avons donc pu y insérer nos équations à résoudre mais aussi y ajouter nos propres routines nous permettant ainsi d'en extraire de nombreuses informations sur l'évolution au cours du temps des différentes variables. Sentaurus Process se charge en revanche de gérer le maillage et les différents paramètres relatifs à la résolution des équations aux dérivées partielles.

Avant de présenter notre propre travail, il est donc nécessaire, dans ce chapitre, de présenter les modèles physiques disponibles dans la plateforme de calcul numérique Sentaurus Process. Ce simulateur contient, entre autre, trois parties distinctes. La première traite des équations classiques de la diffusion dans le silicium. Nous y retrouverons l'ensemble des propriétés exposées au cours du chapitre précédent. Nous y aborderons donc le couplage avec les défauts ponctuels en considérant la contribution de leurs états de charge. La deuxième partie du modèle concerne la formation des amas d'interstitiels. Nous verrons au cours de cette partie comment la mécanique de ces défauts a été mise en place pour pouvoir simuler l'évolution décrite par les expériences présentées dans le chapitre 2. Finalement, la troisième partie de ce modèle est entièrement consacrée à la formation des agglomérats mixtes de dopants et de défauts ponctuels.

Dans un premier temps, nous décrirons brièvement les différentes méthodes proposées dans Sentaurus Process pour simuler l'implantation ionique, puis nous présenterons les trois modèles principaux nécessaires pour simuler la diffusion des dopants dans le silicium.

### II IMPLANTATION DES DOPANTS DANS LE SILICIUM

La distribution des profils des espèces implantées et les dommages générés peuvent être décrits de deux façons différentes : Fonctions analytiques et calcul Monte Carlo (MC). Il est rare que les profils implantés soient correctement décrits à l'aide de distribution de Gauss, il est donc possible d'utiliser d'autres fonctions avec des moments d'ordre supérieur, telle que la

distribution de Pearson ou encore double-Pearson. Ces moments de distribution, fournis sous forme de tables, dépendent de l'espèce ionique, de l'énergie et de la dose d'implantation, mais aussi des angles d'inclinaison et de rotation de l'échantillon. Lorsque l'implantation analytique est utilisée, les dommages générés sont calculés avec les modèles développés par Hobler [2]. En effet, Hobler et al. ont noté qu'il y a une corrélation entre l'extension de la région amorphisée (déterminée par les résultats expérimentaux) et la quantité de défauts ponctuels calculée à une concentration seuil de  $1.5 \times 10^{22} \text{at.cm}^{-3}$ . Pour les implantations MC on utilise une approche statistique, basée sur le module de collision binaire [3], pour calculer la pénétration des ions implantés dans la cible et l'accumulation des dommages du réseau cristallin. Deux codes de collisions binaires sont possibles : Sentaurus MC [4] ou Crystal-TRIM [5].

L'étude de l'implantation est importante pour la modélisation de la diffusion transitoire et accélérée. On retiendra que la simulation de recuit après implantation est fortement dépendante de la bonne estimation du profil initial d'implantation et du réservoir de défauts générés au cours de cette opération.

### III MODELE GENERAL DE LA DIFFUSION DES DOPANTS DANS LE SILICIUM

#### III.1 Modèle de diffusion

La diffusion des impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels structuraux du silicium. Il existe de nombreux modèles sur ce sujet [6] [7] [8] [9], chacun ayant plus ou moins axé son développement sur la physique du problème. Sentaurus Process est basé sur le modèle complet développé par Mathiot et al. [10] auquel il a été ajouté les suppléments nécessaires et indispensables pour répondre aux besoins actuels en matière de réalisation de jonctions ultrafines. Les principales caractéristiques de ce modèle sont les suivantes :

- La diffusion du dopant est assistée à la fois par les lacunes et les auto-interstitiels. Ceci offre la possibilité de simuler aussi bien les dopants utilisant préférentiellement le mécanisme lacunaire (antimoine) ou ceux utilisant majoritairement le mécanisme interstitiel (phosphore, bore).
- L'impureté dopante en site substitutionnel est considérée comme électriquement active et immobile. Sa diffusion se réalise uniquement via la formation et la migration des paires dopant-lacune et dopant-interstitiel.
- Les défauts ponctuels ainsi que les paires dopant-défauts coexistent sous plusieurs états de charge différents. Ces états de charge sont choisis en fonction des différentes connaissances publiées dans la littérature sur ce sujet. La concentration relative entre ces différents états de charges est gouvernée par la position locale du niveau de Fermi calculée à partir de l'équation de neutralité.
- L'équation de neutralité est obtenue en considérant l'ensemble des espèces présentes localement y compris les défauts ponctuels. De nombreux modèles anciens ne prennent pas en compte la contribution des lacunes et des interstitiels considérant que celle-ci est négligeable.

Alors que cette hypothèse se justifie lors des prédépôts, elle n'est en revanche plus correcte dans le cas d'une implantation de dopant où la présence des auto-interstitiels est au moins aussi importante que la concentration de dopant. Par contre, l'inconvénient de cette prise en compte de l'ensemble des espèces est qu'elle va entraîner de plus longs calculs.

- L'expression générale qui décrit le flux de diffusion de la particule A ayant une charge  $c$  prend en compte les effets électriques et la concentration de défauts sur le coefficient de diffusion. Elle est donnée par l'Équation 59 :

$$\text{Équation 59} \quad J_{A^c} = -D_{A^c} \left( \frac{n}{n_i} \right)^{-c} \nabla \left( C_{A^c} \left( \frac{n}{n_i} \right)^c \right)$$

Avec  $D_{A^c}$  le coefficient de diffusion de la particule A ayant une charge  $c$ ,  $n$  la concentration d'électrons libres et  $n_i$  la concentration intrinsèque d'électrons. L'équation de diffusion d'une particule A de charge  $c$  est :

$$\text{Équation 60} \quad \frac{\partial C_{A^c}}{\partial t} = -\nabla J_{A^c} + R_{A^c}^{trans} - R_{A^c}^{clus}$$

Avec les termes de recombinaisons de la contribution des modèles de transport pour  $R_{trans}$  et de la contribution des autres réactions (formation de clusters par exemple) pour  $R_{clus}$ .

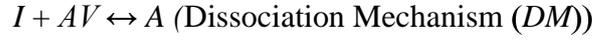
– Contrairement au modèle original de Mathiot et al. [10], l'équilibre local entre les paires et les défauts ponctuels n'est pas considéré. Ceci implique que ce modèle est dynamique et qu'il offre la possibilité de paramétrer les différentes vitesses de réactions entre chacune des espèces. L'inconvénient majeur est qu'il n'existe pas, à un instant donné, de relation simple entre les différentes espèces.

– La surface est considérée comme un piège pour les défauts ponctuels, à laquelle il faut assigner une certaine efficacité de recombinaison. Cela implique que les concentrations d'auto-interstitiels et de lacunes tendent, en surface, vers leurs concentrations d'équilibre avec une vitesse plus ou moins rapide. Cela permet donc d'ajuster ce paramètre en fonction de l'état de surface et de l'atmosphère de recuit.

Finalement, ce modèle de diffusion est constitué d'un système de six équations aux dérivées partielles à résoudre. Chacune de ces équations retrace l'évolution dans le temps et l'espace d'une espèce particulière. Les six variables que nous allons considérer sont les concentrations totales :

- de lacunes ( $C_V$ )
- d'auto-interstitiels ( $C_I$ )
- de paires dopant-lacune ( $C_{AV}$ )
- de paires dopant-interstitiel ( $C_{AI}$ )
- de dopants en position active ou substitutionnelle ( $C_{As}$ )
- de porteurs majoritaires libres (p ou n).

Les mécanismes de formation des paires AI et AV sont décrits par les réactions suivantes [chapitre 1]:



Auxquelles il faut ajouter la réaction de recombinaison interstitiels-lacunes :



Ces réactions nous permettent de calculer les concentrations hors équilibre de défauts en fonction du temps si on connaît les concentrations initiales. Pour cela, on définit des taux de réaction. Ce sont, de façon générale, des termes cinétiques de génération-recombinaison, (G-R), de chacune des réactions hors équilibre écrites précédemment (Équation 61).  $K^f$  et  $K^r$  sont respectivement les coefficients des réactions dans les sens direct et inverse des équations de réaction considérée précédemment.

$$\begin{aligned} (G-R)_{IM} &= K_{IM}^f \cdot C_I \cdot C_{A_s} - K_{IM}^r \cdot C_{AI} \\ (G-R)_{VM} &= K_{VM}^f \cdot C_V \cdot C_{A_s} - K_{VM}^r \cdot C_{AV} \\ (G-R)_{FT} &= K_{FT}^f \cdot C_V \cdot C_{AI} - K_{FT}^r \cdot C_{A_s} \\ (G-R)_{DM} &= K_{DM}^f \cdot C_I \cdot C_{AV} - K_{DM}^r \cdot C_{A_s} \\ (G-R)_{BR} &= K_{BR} \cdot (C_I \cdot C_V - C_I^* \cdot C_V^*) \end{aligned}$$

**Équation 61**

Où  $C$  est la concentration,  $C^*$  est la concentration à l'équilibre thermodynamique,  $K^f$  et  $K^r$  sont respectivement les coefficients des réactions dans les sens direct et inverse,  $K_{BR}$  est le coefficient de génération-recombinaison de la recombinaison des défauts ponctuels  $I$  et  $V$ .

A l'équilibre  $(G - R) = 0$  et le rapport  $K^r/K^f$  est égal à une constante. On retrouve donc les équations d'équilibre du chapitre 1 (Équation 27).

A partir de l'ensemble des réactions entre dopants et défauts ponctuels, plusieurs modèles de diffusion [trois espèces, cinq espèces] ont été élaborés selon que certains mécanismes sont considérés en conditions d'équilibre thermodynamique ou non. Cette section décrit brièvement la base du modèle de diffusion des dopants dans le silicium utilisé dans ce manuscrit.

Le modèle de diffusion à 5 espèces est la base du modèle de diffusion de Sentaurus Process. L'ensemble des équations de diffusion des différentes espèces est le suivant :

$$\frac{\partial C_{A_s}}{\partial t} = -(G-R)_{IM} - (G-R)_{VM} + (G-R)_{FT} + (G-R)_{DM} + (G-R)_{A_s}^{clus} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{AI}}{\partial t} = \nabla(D_{AI} \cdot \nabla D_{AI^0}) + (G-R)_{IM} - (G-R)_{FT} + (G-R)_{AI}^{clus} \quad (2)$$

**Équation 62** 
$$\frac{\partial C_{AV}}{\partial t} = \nabla(D_{AV} \cdot \nabla D_{AV^0}) + (G-R)_{VM} - (G-R)_{DM} + (G-R)_{AV}^{clus} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla(D_I \cdot \nabla D_{I^0}) - (G-R)_{BR} - (G-R)_{IM} - (G-R)_{FT} + (G-R)_I^{clus} \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla(D_V \cdot \nabla D_{V^0}) - (G-R)_{BR} - (G-R)_{VM} - (G-R)_{DM} + (G-R)_V^{clus} \quad (5)$$

Les différents termes de générations-recombinaisons, (G-R), sont exprimés selon les Équation 61. Les coefficients de réaction directe et inverse des termes de générations-recombinaisons des mécanismes interstitiels, lacunaires et de recombinaison des défauts ponctuels sont exprimés par les équations suivantes :

**Équation 63** 
$$K_{IM}^f = 4 \cdot \pi \cdot r \cdot D_I$$
 **Équation 64** 
$$K_{IM}^r = \frac{C_{Si}}{4} K_{IM}^f \cdot \exp\left(-\frac{E_{AI}}{kT}\right)$$

**Équation 65** 
$$K_{VM}^f = 4 \cdot \pi \cdot r \cdot D_V$$
 **Équation 66** 
$$K_{IM}^r = \frac{C_{Si}}{4} K_{VM}^f \cdot \exp\left(-\frac{E_{AV}}{kT}\right)$$

**Équation 67** 
$$K_{BR} = 4 \cdot \pi \cdot r \cdot (D_I + D_V)$$

où  $r$  est le rayon du volume dans lequel le dopant peut interagir avec le défaut et  $E_{AI}$ ,  $E_{AV}$  sont respectivement les énergies de liaison des paires dopant-interstitiel et dopant-lacune. En ce qui concerne la valeur de  $r$ , elle sera identique pour l'ensemble des termes cinétiques essentiellement afin de limiter le nombre de paramètres à déterminer. Les coefficients de réaction dans le sens direct des termes de générations-recombinaisons des réactions FT et DM, sont exprimés de la même façon que précédemment :

**Équation 68** 
$$K_{FT}^f = 4 \cdot \pi \cdot r \cdot (D_{AI} + D_V)$$
 **Équation 69** 
$$K_{DM}^f = 4 \cdot \pi \cdot r \cdot (D_{AV} + D_I)$$

En ce qui concerne les termes cinétiques dans le sens inverse des réactions FT et DM, il n'est pas possible d'y associer une énergie de liaison. Une façon d'obtenir ces termes est de considérer l'équilibre thermodynamique pour l'ensemble des réactions entre dopants et défauts ponctuels ainsi que pour les concentrations de défauts ponctuels :

**Équation 70** 
$$K_{FT}^r = K_{FT}^f \cdot C_V^* \cdot \frac{C_{AI}}{C_A} = K_{FT}^f \cdot C_V^* \cdot \frac{K_{IM}^f}{K_{IM}^r} \cdot C_I^*$$

**Équation 71** 
$$K_{FT}^r = \frac{4}{C_{Si}} \cdot K_{FT}^f \cdot C_I^* \cdot C_V^* \cdot \exp\left(\frac{E_{AI}}{kT}\right)$$

**Équation 72** 
$$K_{DM}^r = K_{DM}^f \cdot C_I^* \cdot \frac{C_{AV}}{C_A} = K_{DM}^f \cdot C_I^* \cdot \frac{K_{VM}^f}{K_{VM}^r} \cdot C_V^*$$

**Équation 73** 
$$K_{DM}^r = \frac{4}{C_{Si}} \cdot K_{DM}^f \cdot C_I^* \cdot C_V^* \cdot \exp\left(\frac{E_{AV}}{kT}\right)$$

En ce qui concerne le terme de génération-recombinaison de la réaction de recombinaison des défauts ponctuels, une barrière d'énergie de recombinaison  $\Delta E_{I,V}$  est introduite :

$$\text{Équation 74} \quad (G-R)_{BR} = K_{BR} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{I,V}}{kT}\right) \cdot (C_I \cdot C_V - C_I^* \cdot C_V^*)$$

Il s'agit d'une barrière d'énergie qu'il faut surmonter en plus de l'enthalpie de migration pour la recombinaison, mais il n'existe pas de conclusion définitive sur l'existence de cette barrière. Des valeurs comprises entre 0 et 1 eV sont généralement utilisées.

Chaque terme de génération-recombinaison, (G-R), contient toutes les contributions des espèces chargées (défauts ponctuels et paires dopants-défauts). L'ensemble des équations, au nombre de 5 (Équation 62), forme ainsi un modèle général de diffusion des dopants dans le silicium où les interactions entre dopants et défauts ponctuels sont traitées hors équilibre.

### III.2 Modèle relatif aux amas d'interstitiels

Nous avons vu dans les chapitres précédents que les amas d'interstitiels vont modifier le comportement de la diffusion des dopants en agissant sur la sursaturation d'auto-interstitiels libres au cours du recuit d'activation. Au cours du recuit, ces différents amas vont échanger leurs atomes d'interstitiels et évoluer selon une croissance de type maturation d'Ostwald. Ces agglomérats d'interstitiels sont de plusieurs natures (petits amas que nous appelons SMICs, défauts {311} et boucles de dislocation fautes ou parfaites) et ont des énergies de formation qui d'une façon générale décroissent à mesure que leurs tailles augmentent. La force motrice de ces échanges est la réduction de leur énergie de formation consécutive à l'augmentation en taille et à leur changement de structure cristallographique.

Dans la partie précédente qui expose le modèle de base relatif à la diffusion des dopants nous avons évoqué (Équation 62) un terme de génération-recombinaison  $(G-R)_I^{clus}$  relatif aux agglomérats d'interstitiels. Nous allons maintenant détailler ce terme qui comprend l'ensemble des équations de ce modèle. Il est important de rappeler que les équations de ce modèle, basé sur l'approche par les moments, sont inspirées des modèles développés par Gencer et al. [11], Law et al. [12], et Stiebel et al. [13], auxquelles des éléments nécessaires et indispensables à la résolution de notre problème ont été ajouté pendant le projet ATOMICS.

Ce modèle, que l'on nomme "ClusterModel", contient trois équations pour décrire les SMICs ( $I_2$ ,  $I_3$  et  $I_4$ ), deux moments pour les défauts {311} [15] et deux moments pour décrire les boucles de dislocation. En effet, Synopsys a étendu ce modèle à l'évolution des boucles de dislocation [14] dans le cadre du projet ATOMICS.

#### III.2.1.1 Présentation générale du modèle

Le modèle "ClusterModel" est destiné à simuler le comportement de l'ensemble d'une population de défauts étendus de tailles variables. Pour prédire l'influence de l'évolution de cette population sur la concentration locale d'auto-interstitiels, il est nécessaire de calculer en tout point de l'espace la répartition de chacun des agglomérats de taille  $n$ . Ces amas sont considérés comme étant immobiles, par conséquent leurs flux seront nuls. La seule possibilité d'évolution se limite alors à la capture ou à l'émission d'interstitiels libres. Ainsi, un agglomérat  $I_n$  de taille  $n$  peut capturer un interstitiel se trouvant à proximité de lui et se

transformer en un amas de taille  $n + 1$ . A l'inverse, un interstitiel peut se libérer de son amas de taille  $n + 1$  pour ainsi donner naissance à un amas de taille  $n$  et à un interstitiel libre.

Pour simuler la capture ou l'émission d'un interstitiel libre, les réactions entraînant la capture ou l'émission d'un interstitiel libre pour l'ensemble de la population des amas de taille  $n \geq 2$  sont considérés:



où  $k_n^f$  et  $k_n^r$  sont respectivement les constantes de formation et de dissociation de l'espèce  $I_n$ .

Ainsi, au cours du recuit, un amas de taille trois ( $I_3$ ) peut capturer un interstitiel libre pour former un amas de taille supérieure ou bien libérer un atome pour devenir un amas  $I_2$ . Il est important de remarquer à ce stade que l'ensemble des "informations la physiques" contenues dans ce modèle est incorporé à l'intérieur des constantes de réaction des différentes réactions. Ces constantes vont selon l'environnement favoriser plus ou moins un sens dans la réaction et ainsi engendrer tantôt la diminution ou l'accroissement en taille de l'agglomérat. D'autre part, la notation  $I$  est utilisée pour représenter les auto-interstitiels libres sans préciser leur état de charge. En effet, il n'existe actuellement aucune information précise sur l'état de charge des agglomérats d'interstitiels. Par conséquent, la notation  $I$  dans l'Équation 75 représente les auto-interstitiels libres dans leur globalité et ce quelque soit leurs états de charge.

L'évolution des différentes populations de défauts de taille  $n$  est donnée par la relation [13]:

$$\text{Équation 76} \quad \frac{dC_{I_n}}{dt} = k_n^f \cdot C_I \cdot C_{I_{n-1}} - k_n^r \cdot C_{I_n} + k_{n+1}^r \cdot C_{n+1}^r - k_{n+1}^f \cdot C_I \cdot C_{I_n}$$

### III.2.1.2 Les SMICS

Stiebel et al. [13] ont fait l'hypothèse que les amas d'interstitiels de taille  $n < 10$  sont des complexes qui ont des énergies de dissolution spécifiques alors que les amas d'interstitiels de taille  $n \geq 10$  sont considérés comme des défauts {311} décrits par deux moments. En effet, l'énergie de formation des SMICS ( $n < 10$ ) dépend fortement du nombre d'atomes les composants, comme l'indiquent les minima obtenus par Cowern et al. suggérant que certaines configurations sont plus probables que d'autres. Ainsi, il est impossible de tenir compte de l'oscillation des énergies de formation pour les petits agglomérats dans le cadre d'une description par les moments.

Dans le modèle "ClusterModel", le nombre d'atomes interstitiels contenus dans les SMICS est réduit à  $n=4$  [15], c'est-à-dire que l'amas  $I_5$  est déjà considéré comme un défaut {311}. Ainsi trois équations (Équation 76) sont respectivement utilisées pour simuler les amas  $I_2$ ,  $I_3$  et  $I_4$ . En effet, bien que Cowern et al. aient prévu une faible énergie de formation pour des amas de taille  $n=4$  et  $n=8$ , synonyme d'une grande stabilité pour les agglomérats de cette taille, Zechner et al., en se basant sur les travaux de Kim et al. [16], ont réussi à reproduire une large base de données en utilisant un seul amas,  $I_3$ , plus stable que les deux autres ( $I_2$  et  $I_4$ ).

La cinétique de chacun des amas de taille  $2 \leq n \leq 4$  est décrite par les deux constantes de réaction  $k_n^f$  et  $k_n^r$  qui sont fonction de la diffusivité des interstitiels [17]:

$$\begin{aligned} \text{Équation 77} \quad k_n^f &= \alpha \cdot 4 \cdot \pi \cdot r_n \cdot D_I \\ k_n^r &= \beta \cdot D_I \cdot C_I^* \cdot r_{n-1} \cdot \exp \left( \frac{Q - E_{diss}^n}{kT} \right) \end{aligned}$$

où  $r_n$  et  $E_{diss}^n$  sont respectivement le rayon de capture et l'énergie de dissolution des agglomérats d'interstitiels.  $Q$  est l'énergie d'activation du produit  $D_I C_I^*$ .

### III.2.1.3 Les défauts {311}

La cinétique des défauts {311} est décrite par deux "moments", le premier (Équation 78) représente la densité d'interstitiels piégés dans les agglomérats {311}  $C_{311}$ , alors que le deuxième (Équation 79) correspond à leur densité ( $D_{311}$ ).  $C_{311}$  croit via la capture d'interstitiels libres  $I$  par les amas  $I_4$  et les défauts {311}, et décroît via l'émission des interstitiels par les défauts {311} et la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation.

$$\text{Équation 78} \quad \frac{dC_{311}}{dt} = 5k_4^f \cdot C_I \cdot C_{I_4} + k_{311}^f \cdot C_I \cdot D_{311} - k_{311}^r \cdot D_{311} - k_{311 \rightarrow DL} \cdot C_{311}$$

$C_I$  est la concentration des interstitiels libres,  $C_{I_4}$  est la concentration des petits amas d'interstitiels de taille 4.  $k_4^f$ ,  $k_{311}^f$  et  $k_{311}^r$  sont respectivement les constantes de formation de  $I_4$  et {311} et de dissociation de {311}. Ces paramètres sont proportionnels à la diffusivité des interstitiels  $D_I$ . (Équation 77). En outre, le taux d'émission  $k_{311}^r$  dépend de l'énergie de liaison moyenne des interstitiels dans les défauts {311} [15].

$$\text{Équation 79} \quad \frac{dD_{311}}{dt} = k_4^f \cdot C_I \cdot C_{I_4} - k_{311}^r \frac{D_{311}}{C_{311}} D_{311} - k_{311 \rightarrow DL} \cdot k_{D_{311}} \cdot D_{311}$$

La densité  $D_{311}$  (Équation 78) augmente uniquement via la capture des interstitiels libres  $I$  par  $I_4$  et leur transformation en {311}, et décroît via la dissolution des défauts {311}, cette décroissance est contrôlée par l'évolution de la taille moyenne ( $D_{311}/C_{311}$ ) des défauts {311} et leur transformation en boucles de dislocation, régie par le paramètre  $k_{311 \rightarrow DL}$ .

### III.2.1.4 Les boucles de dislocation

En faisant une analogie avec les défauts {311}, la cinétique des boucles de dislocation est décrite par deux "moments", le premier (Équation 83) représente la densité d'interstitiels piégés dans les boucles de dislocation ( $C_{DL}$ ) et le deuxième (Équation 84) correspond à leur densité ( $D_{DL}$ ). Sur la base des observations expérimentales [18], la nucléation des dislocations se produit par la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation. Selon Huang et al. [19], la croissance des boucles dépend de la concentration des interstitiels libres ( $C_I$ ), alors que leur dissolution est régie par la concentration à l'équilibre des interstitiels présents au voisinage des boucles ( $C_{I,DL}^*$ ).  $C_{I,DL}^*$  est plus élevé que la concentration à l'équilibre habituelle des interstitiels ( $C_I^*$ ) à cause de la contrainte et de l'énergie interne de la boucle:

$$\text{Équation 80} \quad C_{I,DL}^* = C_I^* \exp\left(\frac{\gamma \Omega}{bkT}\right) \exp\left(\frac{\mu b \Omega}{4\pi R_{DL} kT(1-\nu)} \ln\left(\frac{8R_{DL}}{b}\right)\right)$$

où  $\gamma$  est l'énergie interne associée à la faute d'empilement,  $\Omega$  est le volume d'un atome de silicium,  $b$  est la norme du vecteur de Burgers pour les boucles de dislocation,  $\mu$  est le module de cisaillement,  $\nu$  le coefficient de Poisson.  $R_{DL}$  est le rayon moyen des boucles de dislocation défini par:

$$\text{Équation 81} \quad R_{DL} = \sqrt{\frac{C_{DL}}{\pi \cdot n_a \cdot D_{DL}}}$$

où  $n_a$  ( $1.5 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ ) est la densité atomique du silicium dans le plan {111}. L'évolution temporelle du rayon des boucles est donnée par la relation :

$$\text{Équation 82} \quad \frac{dR_{DL}}{dt} = k_{DL} \cdot \left( \frac{\pi}{n_a} \right) \cdot D_I \cdot (C_I - C_{I,DL}^*)$$

où  $k_{DL}$  est une constante qui représente la barrière de réaction pour la croissance des boucles [19]. L'évolution temporelle de  $C_{DL}$ , densité d'interstitiels piégés dans les boucles de dislocation, est calculée à l'aide des Équation 81 et Équation 82 :

$$\text{Équation 83} \quad \frac{dC_{DL}}{dt} = k_{311 \rightarrow DL} C_{311} + k_{DL} 2\pi^2 R_{DL} D_I (C_I - C_{I,DL}^*) D_{DL}$$

La densité des boucles ( $D_{DL}$ ) croit uniquement via la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation, limitée par le facteur  $k_{D311}$ . La diminution de la densité des boucles est due à la dissolution des boucles de dislocation en raison d'émission d'interstitiels, qui dépend de  $C_{I,DL}^*$ .

$$\text{Équation 84} \quad \frac{dD_{DL}}{dt} = k_{311 \rightarrow DL} k_{D311} D_{311} + k_{DL} 2\pi^2 R_{DL} D_I (-C_{I,DL}^*) \frac{D_{DL}}{C_{DL}} D_{DL}$$

Dans ce modèle, il est admis qu'un défaut {311} se transforme en boucle de dislocation fautive, une fois qu'il atteint une certaine taille. Par conséquent, le terme  $k_{311 \rightarrow DL}$ , régissant cette transformation (Équation 85), dépend de la taille des défauts {311} ( $D_{311}/C_{311}$ ). En outre, une forte dépendance de la densité des {311} a permis aux auteurs d'obtenir un bon accord avec l'expérience. D'où:

$$\text{Équation 85} \quad k_{311 \rightarrow DL} = k_{311} \frac{C_{311}}{D_{311}} D_{311}$$

La formation des boucles à travers la transformation des défauts {311} est déclenchée lorsque ces derniers atteignent une certaine taille. Assumant que cette transformation doit franchir une barrière énergétique, le terme  $k_{311}$  est thermiquement activé et vaut  $k_{311} = 2.5 \times 10^{-10} \cdot \exp(-3.0/kT)$  [14].

Le facteur d'échelle  $k_{D311}$  devrait être inférieur à 1 et supérieur à 0, et est fixé à 0.5, ce qui signifie que seuls les défauts {311} qu'ont une taille moyenne égale au double de la taille moyenne de l'ensemble des défauts {311}, se transforment en boucles de dislocation.

	$k_n^f$	$k_n^d$
$I_2$	$3.7e-7D_I$	$1.50e17 \exp(-3.22/kT)$
$I_3$	$3.7e-7D_I$	$1.50e17 \exp(-3.50/kT)$
$I_4$	$5.6e-7D_I$	$1.50e17 \exp(-3.22/kT)$
Sub_ {113}	$7.4e-7D_I$	-
{113}	$7.4e-7D_I$	$9.20e17 \exp(-3.73/kT)$
Boucles	$2.50e10 \exp(-3.0/kT)$	$C_{I,DL}$

Tableau 4 : Valeurs des constantes de formation et de dissociation des amas d'interstitiels.

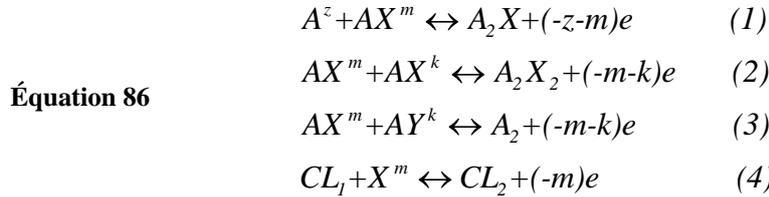
Nous avons présenté le modèle "ClusterModel" relatif aux agglomérats d'interstitiels qui sera couplé, par l'intermédiaire du terme de génération-recombinaison, au modèle de diffusion. Nous pourrions simuler l'évolution de la sursaturation en interstitiels libres après une implantation et ainsi retrouver les caractéristiques de la diffusion transitoire et accélérée. Ce modèle particulier pour les agglomérats d'interstitiels a été ajusté par Zographos et al. en utilisant une large base de données et est intégré dans le simulateur commercial Sentaurus Process. Le modèle "ClusterModel" peut être appliqué aux simulations 1D (unidimensionnelle), 2D (bidimensionnelle) et 3D (tridimensionnelle) de procédés de fabrication tout en gardant un temps de calcul acceptable.

### III.3 Modèle relatif aux amas mixtes de dopant et d'interstitiels : $B_m I_n, A_s V_n$

Le troisième modèle correspond à la formation d'agglomérats mixtes de dopants et de défauts ponctuels ( $I$  ou  $V$ ). Nous avons vu plus haut, que les informations relatives à ce type particulier de défauts ne sont que très aléatoires et que seuls les calculs ab-initio peuvent nous apporter un véritable point de départ pour simuler la formation de ces amas et surtout l'évolution qu'ils peuvent avoir au cours d'un recuit.

#### III.3.1 Présentation générale du modèle

Dans le cadre du projet Européen ATOMICS, un nouveau modèle d'activation applicable à tous les dopants appelé "ChargedCluster" a été élaboré. Dans ce modèle les agglomérats mixtes dopant-défaut ponctuel sont formés selon :



où  $A$  est le dopant substitutionnel,  $X$  ( $I$  ou  $V$ ) est le défaut ponctuel,  $AX$  et  $AY$  sont les paires dopant-défaut ponctuel,  $CL_1$  et  $CL_2$  sont les amas mixtes de dopant et de défauts ponctuels.  $z$ ,  $m$  et  $k$  représentent les états de charge.

Les constantes de formation des amas dépendent de la diffusivité des défauts ponctuels, alors que les constantes de dissolution sont extraites à partir des calculs d'état d'équilibre. Les constantes de réaction sont calculées pour tous les défauts ponctuels et les états de charge des paires dopant-défaut. Prenons l'exemple de la réaction (4) de l'Équation 86 :

$$\text{Équation 87} \quad k_{clusters}^f = 4 \cdot \pi \cdot a \cdot f \cdot D_X \cdot (C_{CL_1} \cdot C_X - C_{CL_2} \cdot C_X^*) \cdot \frac{N_{CL_1}}{N_{CL_2}} \cdot \exp\left(\frac{E_{CL_1} - E_{CL_2}}{kT}\right)$$

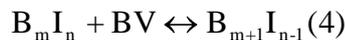
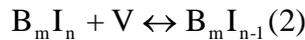
où  $C_X$  est la concentration des défauts ponctuels,  $C_X^*$  est la concentration des défauts ponctuels à l'équilibre,  $C_{CL_1}$  et  $C_{CL_2}$  sont les concentrations des agglomérats,  $D_X$  est la diffusivité des défauts ponctuels,  $N_{CL_1}$  et  $N_{CL_2}$  sont les nombres de configurations possibles relatives aux agglomérats,  $E_{CL_1}$  et  $E_{CL_2}$  sont les énergies de formation des amas,  $a$  est le paramètre de maille du silicium et  $f$  est le rayon de capture de l'amas  $CL_1$ .

III.3.2 Cas du bore

Nous avons vu au 2<sup>ème</sup> chapitre (cf. chapitre 2 section I.3.3) que lorsque la concentration de bore est suffisamment élevée, une partie des dopants va, avec la participation des auto-interstitiels de silicium, former des agglomérats mixtes de bore et d’interstitiels (BICs). Ces amas vont surtout se former suite à une implantation générant une forte sursaturation de défauts. Au cours du recuit, une part très importante de dopant ne diffuse plus et n’est pas activée. Les différentes expériences réalisées par le passé, ont montré que la formation d’une collection d’agglomérats tels que B<sub>2</sub>I, BI<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>I<sub>3</sub> ... ou plus généralement B<sub>n</sub>I<sub>m</sub> était à l’origine de ce comportement (cf. chapitre 2 section I.3.3.b). La cinétique de ces amas étant reliée à la fois à la présence de bore et à celle d’interstitiels, ce modèle nécessite donc d’être couplé avec un modèle physique de diffusion retraçant correctement l’évolution de la sursaturation au cours d’un recuit.

Alors que l’évolution des amas d’interstitiels se fait en capturant ou en libérant un auto-interstitiel, le cas des amas mixtes de bore et d’interstitiels est plus complexe. En effet, les BICs ont la possibilité de capturer ou de libérer un interstitiel pour augmenter ou diminuer le nombre d’atomes de silicium piégés (cf. Équation 86-4), mais ils peuvent aussi capturer ou libérer des paires BI pour modifier leur composition (cf. Équation 86-5). Dans ce dernier cas, le nombre d’atomes de bore est lui aussi incrémenté. Nous pouvons résumer la cinétique des agglomérats mixtes de bore et d’interstitiels par les réactions suivantes :

Équation 88



L’ensemble des chemins possibles de réaction est présenté en Figure 45.

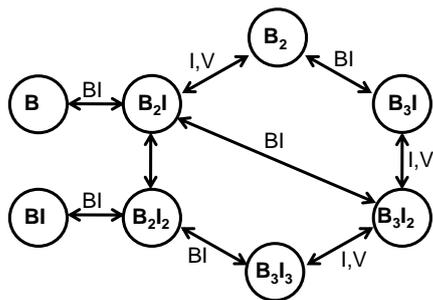


Figure 45 : Schéma de principe illustrant les différents chemins possibles pour la formation d’agglomérats mixtes de bore et d’interstitiels.

Les constantes de réaction du modèle relatives aux agglomérats mixtes de bore et d’interstitiels nous permettent d’ajuster la quantité d’agglomérats formés mais aussi leur vitesse de formation. En multipliant le nombre d’espèces de BIC, on augmente très rapidement le temps de calcul mais aussi le nombre de paramètres à ajuster. Nous avons donc, pour ces raisons, volontairement limité ce nombre mais en gardant la possibilité de pouvoir l’augmenter, à tout instant.

Chaque agglomérat ci-dessus possède son propre rayon de capture effectif. Typiquement, la valeur de ce rayon est proche du paramètre de maille du silicium. En utilisant une fonction

d'Arrhenius pour le rayon de capture, le terme de génération pourrait inclure une barrière d'énergie. Les constantes de formation sont exprimées par:

$$\text{Équation 89} \quad k_f = 4 \cdot \pi \cdot r_{\text{capture}} \cdot \exp\left(\frac{E_{\text{barrière}}}{kT}\right) \cdot C_A \cdot C_B \cdot (D_A + D_B)$$

où  $C_A$  et  $C_B$  sont les composants participant dans la réaction et  $D_A$  et  $D_B$  sont leurs diffusivités. Ces diffusivités sont nulles lorsqu'il s'agit d'un agglomérat. Il est à noter que si un ou les deux composants de la réaction acquièrent plusieurs états de charge (ce qui est possible pour les défauts ponctuels et les paires dopant-défaut), une addition est faite sur toutes les combinaisons possibles des états de charge.

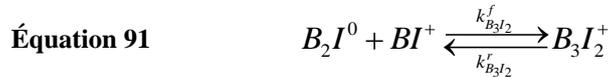
La dissolution des agglomérats se produisant par émission de particules mobiles est décrite par les réactions de dissolution. Les constantes de réaction sont extraites à partir des lois d'action de masse à l'équilibre thermodynamique (en équilibre thermodynamique, pour chaque réaction, les taux de formation et de dissolution doivent être égaux).

La concentration des agglomérats à l'équilibre, dérivé de la thermodynamique statistique, est :

$$\text{Équation 90} \quad C_{B_m I_n^c} = N_{B_m I_n} \cdot (C_{B_s})^m / (5 \cdot 10^{22})^{(m-1)} \cdot (C_I / C_I^*)^n \cdot (n/n_i)^{-(m-c)} \cdot \exp(E_{F(B_m I_n^c)} / k_B T)$$

où  $c$  est la charge de l'agglomérat  $B_m I_n$ ,  $m$  est la charge du bore substitutionnel,  $C_I / C_I^*$  est la sursaturation local en interstitiels,  $E_{F(B_m I_n^c)}$  est l'énergie de formation de l'amas  $B_m I_n^c$ , et  $N_{B_m I_n}$  est le nombre de configurations possibles relatives à l'amas  $B_m I_n$ .

Prenons l'exemple de l'agglomérat  $B_3 I_2^+$ . La formation et la dissociation de  $B_3 I_2^+$  sont prises en compte par la réaction :



La loi d'action de masse permet d'écrire à l'équilibre thermodynamique :

$$\text{Équation 92} \quad C_{B_3 I_2^+} = K_{B_3 I_2^+} \cdot C_{B_2 I^0} \cdot C_{B I^+}$$

avec :

$$\text{Équation 93} \quad \begin{cases} k_{B_3 I_2}^f = 4 \cdot \pi \cdot r_{B_2 I^0 - B I^+} \cdot D_{B I^+} \\ K_{B_3 I_2^+} = \frac{1}{N_{Si}} \cdot \exp\left(\frac{(E_{B_2 I^0} - E_{B_3 I_2^+})}{kT}\right) \\ k_{B_3 I_2}^r = k_{B_3 I_2}^f / K_{B_3 I_2^+} \end{cases}$$

où  $(E_{B_2 I^0} - E_{B_3 I_2^+})$  est l'énergie impliquée dans la formation de  $B_3 I_2^+$  à partir de  $B_2 I^0$  et  $B I^+$ .  $r_{B_2 I^0 - B I^+}$  est le rayon de capture effectif de l'agglomérat  $B_3 I_2^+$  et  $N_{Si}$  la densité du silicium.

Le terme de génération-recombinaison qui en résulte s'exprime par la relation :

$$\text{Équation 94} \quad (G - R)_{B_3 I_2} = k_{B_3 I_2}^f \cdot C_{B_2 I^0} \cdot C_{B I^+} - k_{B_3 I_2}^r \cdot C_{B_3 I_2^+}$$

Les termes de génération-recombinaison sont ensuite insérés dans le modèle de diffusion classique. Les paramètres  $r_{\text{capture}}$ ,  $E_{\text{barrière}}$  et  $E_{B_m I_n^c}$  sont les paramètres d'ajustement du modèle.

### III.3.3 Cas de l'arsenic

Le cas de l'arsenic est traité en faisant une analogie avec le bore. En effet le modèle "ChargedCluster" a été appliqué à ce dopant et l'ensemble des chemins possibles de réaction, conformément au modèle publié par Pinacho et al. [20], est présenté sur la Figure 46.

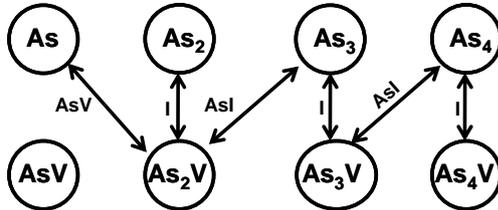
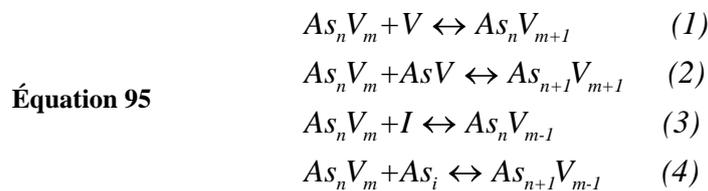


Figure 46 : Schéma de principe illustrant les différents chemins possibles pour la formation d'agglomérats mixtes d'arsenic et de lacunes.

Nous pouvons résumer la cinétique des agglomérats mixtes d'arsenic de lacunes par les réactions suivantes :



Équation 95

les principaux paramètres d'ajustement sont les énergies de formation des amas : As<sub>2</sub> (0.45 eV), As<sub>2</sub>V (1.1 eV), As<sub>3</sub> (0.3 eV), As<sub>3</sub>V (0.9 eV) et As<sub>4</sub>V (1.0)

### III.4 Modèle d'interface pour les dopants

Pour décrire la ségrégation à l'interface (cf. chapitre 2 section I.3.4), nous avons utilisé un modèle de ségrégation similaire à celui proposée par Lau et al. [24]. Comme illustré sur la Figure 47, les dopants peuvent ségréger à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> ainsi qu'à ses deux côtés. Ils sont électriquement inactifs à l'interface.

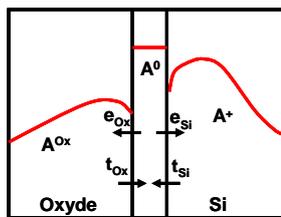


Figure 47 : Ségrégation à l'interface. Les dopants peuvent être piégés par l'interface et libérés dans le silicium et l'oxyde.

La cinétique de la concentration des impuretés à l'interface est donnée par :

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial N_A}{\partial t} = F_{Ox} + F_{Si} \\
 &\text{avec : } F_{Si} = t_{Si} (N_A^{\max} - N_A) \cdot C_{A^+} \cdot (n/n_i) - e_{Si} N_A \\
 &\text{et : } F_{Ox} = t_{Ox} (N_A^{\max} - N_A) \cdot C_{A^{Ox}} - e_{Ox} N_A
 \end{aligned}$$

$N_A$  représente la concentration inactive à l'interface,  $N_A^{\max}$  est la concentration maximale de pièges à l'interface.  $F_{Ox}$  et  $F_{Si}$  sont, respectivement, les flux des dopants de l'oxyde et du silicium vers l'interface. Les constantes  $t_{Si}$  et  $e_{Si}$  ( $t_{Ox}$  et  $e_{Ox}$ ) sont, respectivement, les taux de remplissage et d'émission dans le silicium (oxyde).  $C_{A^{Ox}}$  correspond à la concentration de l'impureté à l'interface coté oxyde. Pour  $F_{Ox} \ll F_{Si}$  la concentration d'équilibre à la interface devient [21] :

Équation 97 
$$N_A = \frac{N_A^{\max} \cdot C_{A^+} \cdot (n/n_i)}{C_{A^+} \cdot (n/n_i) + e_{Si} / t_{Si}}$$

Les principaux paramètres d'ajustement sont :  $t_{Si}$  et  $e_{Si}$ ,  $t_{Ox}$ ,  $e_{Ox}$  et  $N_A^{\max}$

#### IV CONCLUSION

Nous avons exposé au cours de ce chapitre l'ensemble des équations constituant les trois principaux modèles contenus dans le logiciel Sentaurus Process. Le premier modèle permet uniquement de simuler la diffusion du dopant dans le silicium. Il est basé sur le couplage des impuretés dopantes avec les défauts ponctuels présents dans le silicium. Il considère que la diffusion du dopant se faisait uniquement via la migration des paires dopant-lacune et dopant-interstitiel. En outre, l'effet de l'état de charge à la fois des défauts mais aussi des paires formées est pris en considération. Dans ce modèle on ne pose pas l'hypothèse d'équilibre local ce qui implique que nous devons prendre en compte la vitesse de formation ou de dissociation des paires.

Le logiciel Sentaurus Process contient deux autres modèles permettant respectivement de simuler la cinétique des agglomérats d'interstitiels et des amas mixtes de dopants et de défauts ponctuels. Nous verrons que le modèle relatif aux agglomérats d'interstitiels nous a permis de valider le concept de maturation d'Ostwald et que celui associé aux agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels a confirmé la désactivation du bore par la formation d'amas.

**REFERENCES DU CHAPITRE III**

- 1 Sentaurus Process User Guide, Synopsys Inc., Mountain View, CA (2009).
- 2 G. Hobler and S. Selberherr, "Two-Dimensional Modeling of Ion Implantation Induced Point Defects", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 7 (2), p. 174-180 (1988).
- 3 J. P. Biersack, "Basic Physical Aspects of High Energy Implantation", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, vol. B35 (2), p. 205-214 (1988).
- 4 S. Tian, "Predictive Monte Carlo ion implantation simulator from sub-keV to above 10 MeV", Journal of Applied Physics, vol. 93 (10), p. 5893-5904 (2003).
- 5 M. Posselt, "Crystal-TRIM and Its Application to Investigations on Channeling Effects During Ion Implantation", Radiation Effects and Defects in Solids, vol. 130-131, p. 87-119 (1994).
- 6 F. F. Morehead and R. F. Lever, "Enhanced "tail" diffusion of phosphorus and boron in silicon : Self-interstitial phenomena", Appl. Phys. Lett., 48(2), 151 (1986).
- 7 M. Orłowski, "Unified model for impurity diffusion in silicon", Appl. Phys. Lett., 53(14), p. 1323 (1988).
- 8 B. J. Mulvaney and W. B. Richardson, "The effect of concentration-dependent defect recombination reactions on phosphorus diffusion in silicon", J. Appl. Phys., 67(6), p. 3197 (1990).
- 9 S.T. Dunham and R.A. Meade, "Point Defect Models for High Concentration Phosphorus Diffusion. in Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology", Edited by G. R. Srinivasan, J. D. Plummer, and S. T. Pantelides (Electrochem. Soc. Proc. 91-4, Pennington, NJ), p. 287 (1990).
- 10 Henry Mathieu, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", Dunod editor (2001).
- 11 A.H. Gencer, S.T. Dunham, J. Appl. Phys. 78, p. 5313 (1997).
- 12 M.E. Law, K.S.Jones, Proceedings of the IEDM 2000, 2000 p. 21.4.1.
- 13 D. Stiebel, P. Pichler, N.E.B. Cowern, "A reduced approach for modeling the influence of nanoclusters and {113} defects on transient enhanced diffusion", Appl. Phys. Lett. 79, p. 2654 (2001).
- 14 N. Zographos, C. Zechner and I. Avci, "Efficient TCAD Model for the Evolution of Interstitial Clusters, {311} Defects, and Dislocation Loops in Silicon", Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 994, 0994-F10-01 (2007).
- 15 C. Zechner, N. Zographos, D. Matveev, A. Erlebach, "Accurate and efficient TCAD model for the formation and dissolution of small interstitial clusters and {311} defects in silicon", Materials Science and Engineering B 124-125, p. 401-403 (2005).
- 16 J. Kim, J.W. Wilkins, F.S. Khan, A. Canning, "Semiempirical model of covalent bonding in silicon", Phys. Rev. B 40, p. 10351 (1989).

17 L.F. Giles, B. Colombeau, N. Cowern, W. Molzer, H. Schaefer, K.H. Bach, P. Hiaibach and F. Roozeboom, "Transient enhanced diffusion of B at low temperatures under extrinsic conditions", *Solid State Electron.* 46, p. 618 (2005).

18 J. Li and K.S. Jones, "{311} defects in silicon: The source of the loops", *Appl. Phys. Lett.* 73 (25), p. 3748 (1998).

19 R. Huang, R. Dutton, "Experimental investigation and modeling of the role of extended defects during thermal oxidation", *J. Appl. Phys.* 74, p. 5821 (1993).

20 R. Pinacho, M. Jaraiz, P. Castrillo, I. Martin-Bragado, J.E. Rubio, J.Barbolla, "Modeling arsenic deactivation through arsenic-vacancy clusters using an atomistic kinetic Monte Carlo approach", *Appl. Phys. Lett.* 86, p. 252103 (2005).

21 C. Steen, A. Martinez-Limia, P. Pichler, H. Ryssel, L. Pei, G. Duscher, W. Windl, "Characterization of the pile-up of As at the SiO<sub>2</sub>/Si interface", *ESSDERC 2007*, IEEE p. 267 (2007).

# **Chapitre IV**

**Développement, optimisation  
et intégration de modèles  
physiques pour la simulation  
des défauts étendus et de la  
diffusion dans le Silicium**



## CHAPITRE IV: DEVELOPPEMENT, OPTIMISATION ET INTEGRATION DE MODELES PHYSIQUES POUR LA SIMULATION DES DEFAUTS ETENDUS ET DE LA DIFFUSION DANS LE SILICIUM

### I INTRODUCTION

Le simulateur Sentaurus Process comporte, comme vu dans le chapitre précédent, de nombreux modèles. Selon les conditions de fabrication d'une jonction, plusieurs de ces modèles (voire tous) doivent être appliqués simultanément pour bien simuler le procédé de fabrication. Les objectifs de ce chapitre sont donc d'optimiser la calibration de ces modèles en identifiant des jeux de paramètres valables pour une vaste gamme de conditions de fabrication d'intérêt technologique.

Pour ce faire, nous avons d'abord simulé des expériences particulières issues de la littérature sur la formation de défauts et sur la TED nous permettant d'isoler tout ou une partie des trois modèles décrits au chapitre 3. Par exemple, la simulation d'un recuit après prédéposition en surface permet de tester uniquement le modèle classique de diffusion. En effet, le cas de la prédéposition n'engendrant pas de forte sursaturation en interstitiels, les modèles de formation d'agglomérats d'interstitiels, et d'amas mixtes de bore et d'interstitiels ne sont pas sollicités et seront analysés par des expériences complémentaires. Grâce à des considérations physiques, on peut alors calibrer un seul des trois modèles sans que les deux autres interviennent dans la simulation. De la même façon, lorsque l'on réalise une implantation à faible dose de bore, il n'apparaît pas d'amas mixtes de bore et d'interstitiels. Ainsi, les termes de génération-recombinaison relatifs à ces amas sont inactifs, et la simulation permettra de baser l'ajustement des paramètres de formation des amas d'interstitiels sur le modèle de diffusion classique du dopant analysé précédemment.

Ensuite, afin de vérifier la validité des modèles optimisés en dehors des conditions expérimentales pour lesquelles ils ont été conçus, nous les avons appliqués à des cas réels de nouveaux procédés de fabrication des jonctions ultra-minces. Nous avons particulièrement étudié la diffusion des dopants lors d'un recuit spike et l'évolution des défauts de fin de parcours au cours d'un recuit flash.

La dernière partie de ce chapitre est consacrée au développement de nouveaux modèles pour simuler un des phénomènes qui ne sont pas encore pris en compte par les simulateurs de procédé. En effet, sous certaines conditions de préamorphisation et d'implantation de bore, on assiste à l'apparition d'un pic de bore localisé au niveau des défauts EOR et juste à l'arrière de l'ancienne interface a/c. L'origine de ce pic est difficilement explicable et plusieurs hypothèses ont été proposées dans la littérature : solubilité limite, ségrégation, piégeage et modification du régime de diffusion au niveau de l'interface entre autres. Pour lever l'ambiguïté entre ces possibles explications, une expérimentation rigoureuse, basée sur des 'profils plats', a été mise en place. Nous nous y attarderons plus en avant dans la dernière partie de ce chapitre.

## II MODELE DES AGGLOMERATS D'INTERSTITIELS DANS LE SILICIUM

Le modèle complet de l'évolution des agglomérats ("ClusterModel") comporte trois parties décrivant respectivement l'évolution thermique des clusters (SMICs), des défauts {311} et des boucles de dislocation. Nous allons tester séparément chacune de ces parties. D'abord, nous avons reproduit des expériences particulières, issues de la littérature, dans lesquelles seuls les SMICs et les défauts {311} sont formés. La croissance puis la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation ne pouvant être obtenues que pour une dose d'implantation ionique (et donc une concentration initiale de défauts ponctuels) suffisamment importante, nous avons utilisé les récentes expériences publiées par Boninelli et al. [9] afin de calibrer les modèles décrivant la transformation des défauts {311} en boucles ainsi que l'évolution thermique de ces dernières.

### II.1 Petits amas d'interstitiels (SMICs) et défauts {311}

Pour commencer nous présenterons le test et la validation du modèle des agglomérats d'interstitiels. Pour cela, nous avons reproduit l'expérience de Cowern [1] permettant de retracer l'évolution temporelle de la sursaturation en interstitiels libres en présence de SMICs.

Dans cette expérience, deux couches minces de silicium dopé bore ("δ-layers") sont déposés par technique CVD à des profondeurs de 0.9 et 1.2 μm. Un excès d'auto-interstitiels est généré près de la surface de l'échantillon à une profondeur d'environ 100 nm par une implantation de silicium à 40 keV avec une dose de  $2 \times 10^{13} \text{ at.cm}^{-2}$ .

Les auteurs ont ensuite mesuré l'évolution de la sursaturation en auto-interstitiels au cours de recuits à 600, 700 et 800°C (cf. Figure 48.a, symboles) et comme expliqué dans le chapitre 2 (cf. section I.3.2) en ont extrait les énergies de formation des amas d'interstitiels pour des tailles comprises entre 2 et 10 atomes.

Pour la simulation de cette expérience avec Sentauros Process, nous avons utilisé le "ClusterModel" seul sans le coupler à un quelconque modèle de diffusion du bore. Nous avons dû prendre en considération l'ensemble des évolutions possibles des auto-interstitiels telles que la diffusion en profondeur, la formation d'agglomérats ou la recombinaison à la surface. Nous avons posé comme condition initiale que (i) seuls les ions de silicium implantés ont généré des auto-interstitiels, ce qui équivaut à considérer le modèle "+1" [2], et (ii) qu'en début du recuit nous supposons que les di-interstitiels sont déjà formés.

La Figure 48.a représente l'évolution simulée de la sursaturation en interstitiels libres à une profondeur située entre 0.9 et 1.2 μm. La sursaturation est calculée en faisant le rapport de la concentration effective d'auto-interstitiels et de la concentration à l'équilibre :  $S = (C_I / C_I^*)_{x=0.9\mu\text{m}}$ . Nous pouvons constater que les trois courbes obtenues à des températures différentes ont la même allure générale. Les courbes sont en revanche décalées à la fois dans le temps et dans l'ordre de grandeur de la sursaturation. Le décalage dans le temps s'explique par le fait qu'à température plus élevée, la cinétique des amas d'interstitiels est plus rapide. Le décalage au niveau de la sursaturation s'explique simplement par le fait que la concentration à l'équilibre des auto-interstitiels  $C_I^*$  est plus grande lorsque la température est élevée.

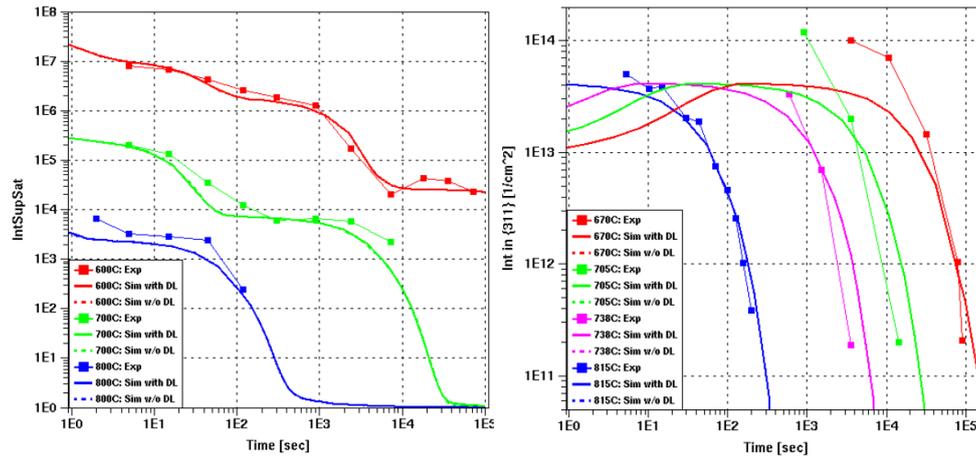


Figure 48 : a) Simulation de l'évolution de la sursaturation en interstitiels libres pour l'expérience de Cowern et al. [1]. b) Simulation de l'évolution du nombre total d'interstitiels piégés dans les défauts {311} pour l'expérience de Stolk et al. [3].

Nous pouvons observer que les trois phases décrites au chapitre II sont bien reproduites par le modèle.

Il est très important de noter que, bien que dans leur expériences originales les auteurs ont proposé qu'au moins deux pièges efficaces (minima de l'énergie de formation) entre 2 et 10 atomes étaient nécessaires, le modèle "simplifié" ClusterModel" contenu dans Sentaurus Process permet de bien reproduire les résultats expérimentaux avec un seul minima. En effet, il décrit correctement les deux parties liées aux défauts {311} et aux petits amas, en particulier le premier plateau de très grande sursaturation observée à 600°C [4].

### Valeurs de $D_I$ et $C_I^*$

L'intérêt que nous apporte cette expérience est de permettre l'ajustement séparé du coefficient de diffusion des auto-interstitiels  $D_I$  et de la concentration à l'équilibre des auto-interstitiels  $C_I^*$ . En effet, si on augmente d'une part la valeur  $D_I$ , on accélère la cinétique des amas d'interstitiels. Cette accélération va se traduire par un décalage horizontal et vers la gauche du réseau de courbes de sursaturation (Figure 48.a). D'autre part, une augmentation de  $C_I^*$  va directement diminuer la valeur de la sursaturation et entraîner une chute verticale de sa courbe. On a donc la possibilité d'ajuster séparément les valeurs des coefficients de diffusion et de concentration à l'équilibre des auto-interstitiels. Cette méthode d'ajustement nous sera utile pour reproduire l'évolution de la sursaturation dans les alliages SiGe (cf. chapitre V). Dans la suite de nos simulations, nous utilisons le couple:

Équation 98

$$C_I^* = 3.12 \cdot 10^{23} \exp\left(-\frac{2.932eV}{kT}\right) [cm^{-3}]$$

$$D_I = 51 \exp\left(-\frac{1.77eV}{kT}\right) [cm^2 / s]$$

Dans le résultat de nos ajustements, la concentration à l'équilibre obtenue nous indique que l'énergie de formation de l'auto-interstitiel de silicium est égale à 2.932eV. Cette valeur reste tout à fait en accord avec l'ensemble des valeurs publiées dans la littérature (cf. Figure 49).

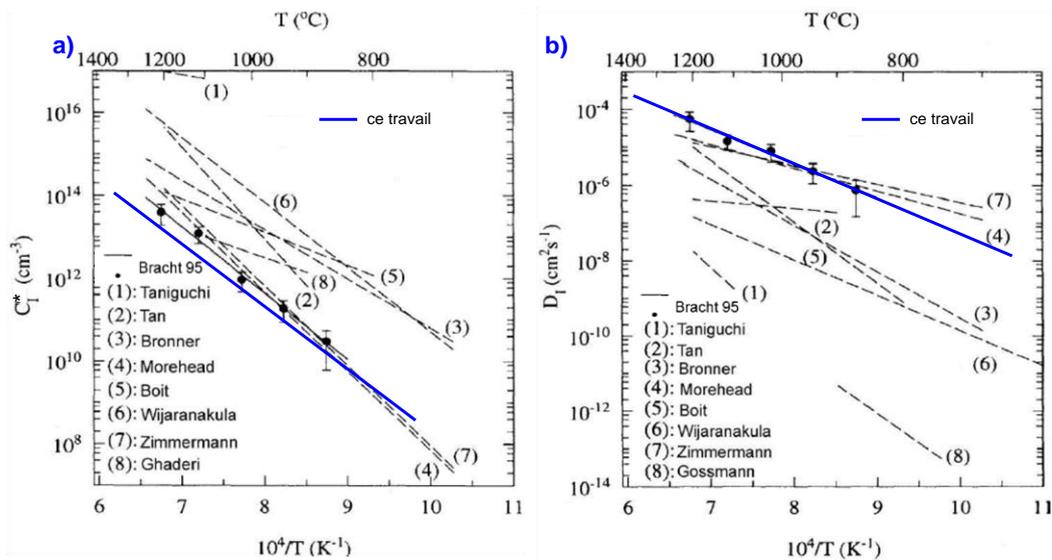


Figure 49 : Concentration à l'équilibre ( $C_I^*$ ) et diffusivité ( $D_I$ ) des auto-interstitiels.

Le produit  $D_I \cdot C_I^*$  ajusté nous donne une valeur d'énergie d'activation de 4.702eV. Ce qui le situe dans la limite inférieure des valeurs obtenues par autodiffusion. Nous pouvons apporter un élément de réponse à cette légère déviation en précisant que les simulations réalisées se font pour une gamme de température située entre 600°C et 800°C et donc à relativement basse température. En faisant l'approximation que le produit  $D_I \cdot C_I^*$  suit une simple loi d'Arrhenius, on considère que l'enthalpie de formation  $H_I^f$  (cf. section IV.2 du chapitre I) est indépendante de la température. Une des conséquences de cette approximation est qu'aux températures élevées, on tend à sous-estimer les énergies d'activation.

### Dissolution des défauts {311}

Le modèle "ClusterModel" donne de bons résultats pour la simulation de la composante "libre" des atomes de Si interstitiels, c'est-à-dire la sursaturation des auto-interstitiels. En revanche, pour un ajustement plus fin des constantes cinétiques de formation des amas d'interstitiels il faut compléter les données de Cowern et al. par d'autres expérimentations.

Nous testons l'aptitude du modèle à décrire la cinétique de croissance des agglomérats d'interstitiels grâce aux résultats des expériences réalisées par Eaglesham et al. [5] et Stolk et al. [3] étudiant par MET la dissolution des défauts {311} (cf. section I.3.2 du chapitre II). La Figure 48.b (symboles) représente l'évolution temporelle du nombre d'interstitiels piégés dans les défauts {311} après une implantation de silicium à 40 keV avec une dose de  $5 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$  dans du silicium et pour différents temps de recuit réalisés par Stolk et al. [3].

Pour la simulation de cette expérience, nous avons utilisé les mêmes paramètres d'entrée de l'étude précédente et nous n'avons changé que la dose d'implantation. Les courbes simulées sur la Figure 48.b exhibent un creux au début du recuit du aux interstitiels contenus dans les SMICs. Ces courbes montrent par ailleurs que le nombre d'auto-interstitiels pris dans les défauts {311} décroît au cours du temps. Le mécanisme de maturation d'Ostwald est quasiment conservatif au début du recuit puis devient non conservatif avec la dissolution totale de la population de défauts {311}. La dissolution se fait par recombinaison des interstitiels avec la surface caractérisée par une efficacité de capture  $L_{\text{surf}}$  [6]. Le modèle

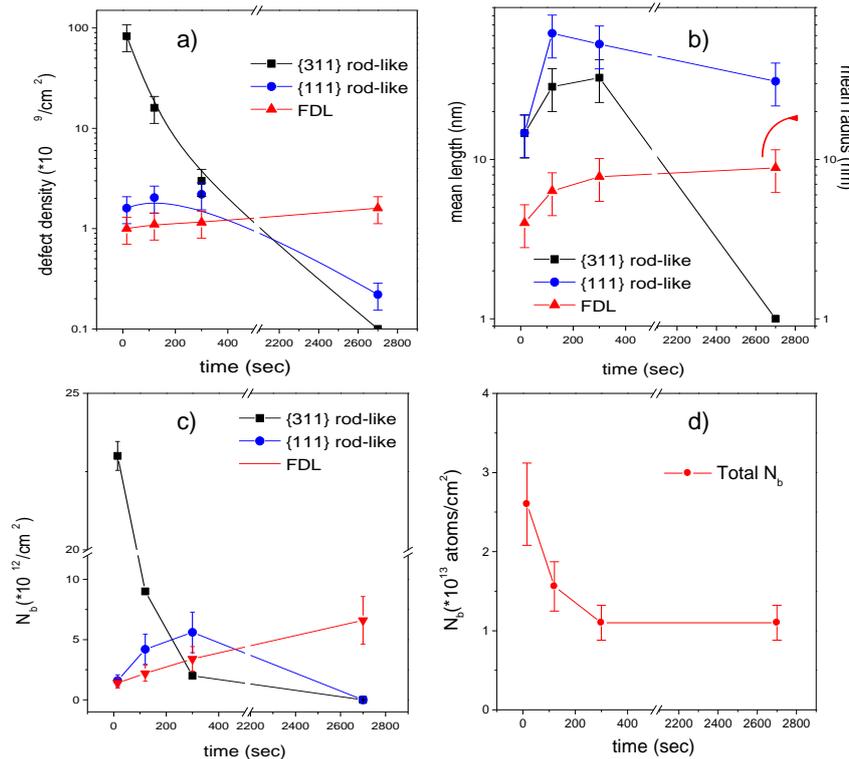
présente un bon accord avec les données expérimentales pour toutes les températures et en particulier, le temps de dissolution des défauts {311} est bien prédit (Figure 48.b). L'accord entre les simulations et les résultats expérimentaux ne peut être obtenu qu'en utilisant deux moments pour les défauts {311} (cf. section II.2.3 du chapitre II). En outre les résultats de simulation sont identiques avec et sans la partie du modèle qui décrit les boucles.

Nous avons montré que le modèle "ClusterModel" décrit correctement à la fois l'évolution temporelle de la sursaturation d'auto-interstitiels (Figure 48.a) et la dissolution des défauts {311} (Figure 48.b) après implantation à faible dose et faible bilan thermique. Nous nous intéresserons dans la partie suivante à l'implantation amorphisante car ce cas de figure favorise la formation des boucles de dislocation ce qui nous permettra d'étudier la cinétique de la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation.

## II.2 Transformation {311}/boucles de dislocation

Bien que le processus de dissolution des défauts {311} soit à présent bien compris, celui qui conduit ces défauts, à plus forte concentration, à se transformer en boucles de dislocation semble plus complexe à simuler. En effet, par comparaison avec la transition SMICs/{311}s où le nombre d'interstitiels pris dans les SMICs est inférieur à 10, cette dernière nécessite un réarrangement impliquant un nombre beaucoup plus important d'atomes de Si. En particulier, cette transformation peut se produire pour plusieurs tailles de défauts {311}. Toutefois, l'expérimentation ayant permis de définir les conditions requises pour favoriser cette transformation [7, 8] est à présent connue, nous allons étudier en détail sa cinétique sur la base d'expériences dédiées.

Dans l'étude menée par Boninelli et al. [9], des substrats de silicium ont été implantés au  $\text{Ge}^+$  à 30keV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  puis recuits en four RTA sous atmosphère  $\text{N}_2$  à 800°C pour des temps allant de 15s à 2700s. Les échantillons ont été étudiés par microscopie électronique à transmission (MET) afin de suivre l'évolution des défauts {311} et des boucles de dislocation. Boninelli et al. observent que, dans ces conditions expérimentales, deux familles de défauts allongés ('rod-like defects') coexistent : les défauts {311} conventionnels et les défauts allongés {111}. Les auteurs démontrent ensuite que la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation se fait par l'intermédiaire des défauts allongés {111}, comme montré sur Figure 50. Dans un premier temps, jusqu'à 200s de recuit, les défauts {311} grandissent en taille (Figure 50.b) et diminuent en densité (Figure 50.a) suivant un processus de maturation d'Ostwald et dans le même temps, le rayon des boucles augmente progressivement (Figure 50.b). Par la suite, au delà de 250s, la croissance de ces défauts ralentit fortement lorsque quelques boucles commencent à apparaître. On assiste alors à la dissolution progressive des défauts {311} et {111} et à la transformation de ces derniers en FDLs. L'amorce d'une décroissance en taille des défauts {311} ne devient réellement sensible qu'avec l'augmentation progressive du nombre de boucles, c'est-à-dire après 250s de recuit.



**Figure 50 :** Evolutions temporelles de la densité (a) et de la taille moyenne (b) des défauts de fin de parcours au cours d'un recuit à 800°C sous azote d'une implantation de Ge<sup>+</sup> à 30 keV pour une dose de 1x10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup> par Boninelli et al. [9]. Evolution temporelle du nombre total d'atomes contenus dans les différents types de défauts (c) et dans la totalité des défauts (d) pendant un recuit à 800°C après une implantation Ge<sup>+</sup> à 30 keV pour une dose de 1x10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup> par Boninelli et al. [9].

La Figure 50.c montre l'évolution du nombre d'atomes de Si pris dans ces défauts en fonction du temps de recuit à 800°C. Après 15 sec de recuit, la plupart des auto-interstitiels sont piégés dans les défauts {311} rod-like conventionnels. Pour les temps intermédiaires, la majorité des auto-interstitiels est prise dans les défauts {111}. Pour des durées de recuit plus longues, la majorité des auto-interstitiels est contenue dans les FDLs qui affectent la vitesse de "dissolution" des défauts {311} dès leur apparition. En effet, les FDLs étant bien plus stables, une fois formées, elles agissent comme des pièges forts pour les atomes de Si émis par les défauts {311} et, par conséquent, accélèrent leur dissolution. Afin d'illustrer ce point, la Figure 50.d présente la variation temporelle du nombre total d'atomes contenus dans l'ensemble de la population de défauts. Boninelli et al. relèvent une perte progressive des atomes de Si jusqu'à 300s de recuit. Une fois les boucles formées, la population de défauts ne perd que peu d'atomes de Si. Dans ces conditions, les atomes perdus par les défauts {311} sont capturés par les boucles et le système global suit alors un mécanisme de maturation d'Ostwald quasi-conservatif. Par conséquent, le flux d'interstitiels libres se recombinaut vers la surface est compensé par les flux allant des défauts {311} vers les boucles de dislocation.

La reproduction physique des résultats expérimentaux par la simulation numérique doit d'abord se baser sur un calcul le plus précis possible de l'épaisseur de la zone amorphe générée par l'étape d'implantation, car cela détermine le nombre initial de défauts ponctuels qui se retrouveront piégés dans les défauts étendus pendant le recuit. Nous nous sommes donc penchés sur cet aspect de l'implantation. En particulier, les simulations continues ont été

calibrées sur une large base de données relative aux implantations de germanium avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  et à plusieurs énergies comme en témoigne la Figure 51.

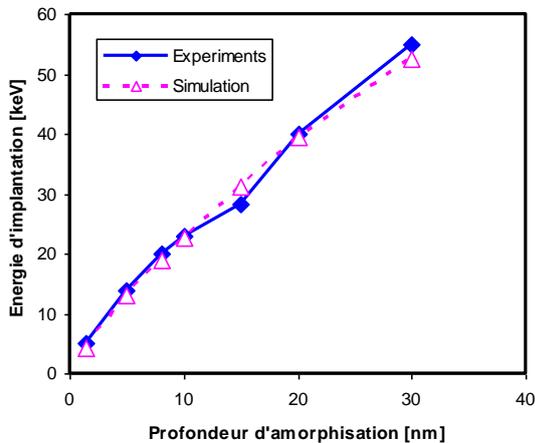


Figure 51 : Energie d'implantation-profondeur amorphe relative à une implantation de germanium avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

Basée sur une estimation précise de l'épaisseur de la couche amorphe, la simulation de l'étape d'implantation est suivie par celle du comportement thermique des défauts  $\{311\}$  et des boucles de dislocation dans ces conditions expérimentales. En suite, nous faisons l'hypothèse que tous les types de défauts "rod-like" ( $\{311\}$  et  $\{111\}$ ) sont confondus ainsi que tous les types de boucles de dislocation (FDLs et PDLs). Les résultats de notre simulation sont présentés dans la Figure 52 (lignes) pour la température de  $800^\circ\text{C}$  et comparés avec les résultats expérimentaux (symboles). Le bon accord entre les valeurs simulées et mesurées témoigne de la capacité du modèle "ClusterModel" à décrire correctement les mécanismes gouvernant l'évolution des défauts dans ces conditions expérimentales. Le modèle "ClusterModel" reproduit à la fois les évolutions temporelles de la densité des défauts (D311 et Dloops) et du nombre d'atomes pris dans ces défauts (C311 et Cloops). En particulier, le temps nécessaire pour que la transformation des défauts  $\{311\}$  en boucles de dislocation ait lieu est bien prédit. Cet accord entre les simulations et les résultats expérimentaux ne peut être obtenu qu'en utilisant pour la transformation des défauts  $\{311\}$  une barrière d'énergie  $k_{311 \rightarrow DL}$  (Equation 55 du chapitre II), équivalente à une taille de transition des défauts  $\{311\}$  en boucles de dislocation.

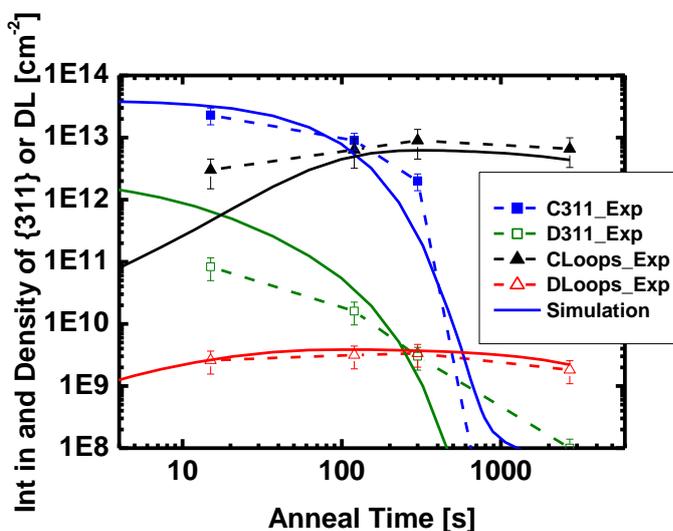


Figure 52 : Evolution thermique des défauts de fin de parcours. Comparaison entre nos simulations (courbes) et les expériences (symboles) de Boninelli et al. [9].

La simulation de l'évolution des boucles de dislocation est ensuite ajustée par les paramètres  $K_{D311}$  et  $K_{DL}$  (section II.2.4 du chapitre II) régissant la croissance des boucles de dislocation. Nous avons apporté une meilleure précision au modèle en introduisant une dépendance de  $K_{D311}$  et de  $K_{DL}$  de la température.

### II.3 Conclusion

Nous avons montré que l'évolution temporelle des défauts étendus est bien reproduite par nos simulations. Le modèle "ClusterModel" décrit correctement l'évolution de la sursaturation d'interstitiels libres dans la matrice mais aussi la croissance des défauts selon le mécanisme de maturation d'Ostwald. Le test du modèle d'amas d'interstitiels et son ajustement sur différentes expériences nous a permis d'obtenir un jeu de paramètres valable pour différentes conditions d'implantation ionique avec et sans amorphisation. On pourra se reposer sur ce modèle pour étudier les défauts dans le silicium au cours de procédés de fabrication, surtout pour effectuer des comparaisons entre différentes conditions. A ce propos, nous allons appliquer ces données communes à tous les dopants et les compléter pour différentes conditions de recuit et de matériaux étudiés lors des travaux de thèse.

## III FORMATION DE JONCTIONS ULTRAFINES

Cette section est consacrée à la simulation des profils de concentrations de dopants dans les jonctions ultrafines formées dans le silicium par implantation (amorphisante et non) suivie d'un recuit RTA ("soak" ou "spike", cf. Chapitre 1 section III.2). Pour cela, dans la première partie de cette section, nous allons valider séparément la fiabilité des différents modèles physiques nécessaires à la simulation des jonctions "réelles", en utilisant des expériences dédiées. Nous allons d'abord tester l'ensemble des paramètres relatifs au modèle de la diffusion, à l'aide d'expériences utilisant des marqueurs de bore. Ces expériences permettent en effet de mettre en évidence les couplages entre les défauts ponctuels et les impuretés dopantes en situation faiblement hors équilibre. Ensuite, en utilisant ces ajustements, ainsi que ceux relatifs au modèle des défauts étendus (cf. section précédente), nous allons calibrer et valider un troisième modèle, qui décrit les réactions se produisant lorsque les concentrations de dopant et de défauts ponctuels sont relativement fortes et entraînent la formation d'agglomérats mixtes de dopants et de défauts ponctuels. Nous traiterons les cas particuliers du bore et de l'arsenic. Enfin, nous présenterons dans la deuxième partie de cette section l'application de nos études de modélisation aux cas "réels" de jonctions ultrafines.

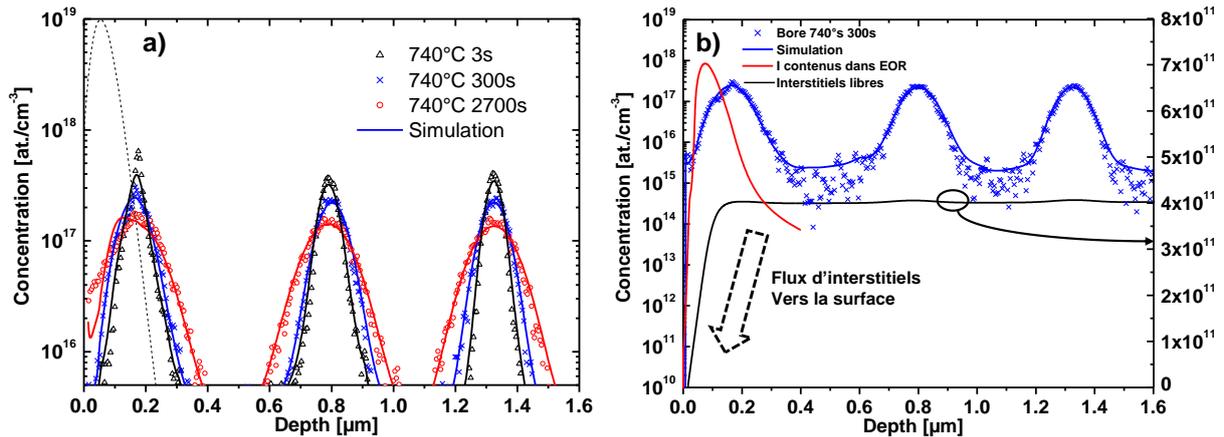
### III.1 Etudes fondamentales

#### Diffusion

Pour ajuster les paramètres du modèle de diffusion, nous avons utilisé des expériences qui utilisent des marqueurs de bore. En effet, ces expériences constituent un test hautement significatif permettant de valider les bases physiques du modèle de diffusion. En effet, dans le cas des marqueurs de bore, le substrat n'a subi aucun traitement susceptible d'introduire une grande quantité de défauts et on peut alors considérer que les défauts ponctuels sont initialement à leur concentration d'équilibre.

Nous avons couplé dans Sentaurus Process le modèle des défauts étendus "ClusterModel" à celui de la diffusion des dopants (5 espèces) afin de simuler l'expérience de Cowern (cf. section précédente) dans sa totalité. Ainsi, nous avons pu à la fois retracer l'évolution de la sursaturation en auto-interstitiel et simuler la diffusion des deux marqueurs de bore et les résultats de simulation sont en très bon accord avec les mesures.

La Figure 53.a représente à différents instants les profils des trois marqueurs de bore lors du recuit à 740°C. Cette expérience est équivalente à celle de Cowern mais elle issue de nos propres manipulations.



**Figure 53 :** a) Simulation de l'expérience complète similaire à celle de Cowern et al. à 740°C en couplant le modèle des agglomérats d'interstitiels avec celui de la diffusion classique. b) Profils simulés des concentrations de bore total, des auto-interstitiels et de la somme des auto-interstitiels contenus dans les agglomérats d'interstitiels.

Sur la Figure 53.b, nous avons représenté le profil de bore total, le profil des auto-interstitiels libres (ligne noire) et celui des auto-interstitiels contenus dans les agglomérats d'interstitiels (ligne rouge). La simulation confirme que les auto-interstitiels piégés dans les agglomérats se situent uniquement au niveau du libre parcours moyen des ions implantés. On confirme ainsi, qu'en dépit du fait que les phénomènes de formation des agglomérats et de diffusion du bore soient séparés dans l'espace, ils restent étroitement liés. On remarque aussi que les profils de bore ont la forme prédite par Cowern et al. [10], [11] qui observent pour des bilans thermiques faibles une distribution de type exponentiel et liée au mécanisme "kick-out".

Nous avons précisé au cours du chapitre I (cf. partie IV.2.4) que le bore diffusait majoritairement via un mécanisme interstitiel. Le paramètre  $f_i(B)$  caractérise la proportion du mécanisme interstitiel dans la diffusion totale du bore. La valeur que nous trouvons à partir des ces simulations (0.92) est en bon accord avec les estimations réalisées par des expériences sur l'OED [12], estimant une valeur supérieure à 0.95.

### **Formation de BICs**

La formation d'agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels se produit lorsque les concentrations de bore et d'auto-interstitiels sont relativement fortes. Ces amas, de type  $B_nI_m$ , sont de petite taille avec un nombre restreint d'atomes les constituant. Pour ne pas entraîner des temps de calculs rédhibitoires, nous avons limité le nombre d'espèces formées (cf. chapitre 3 section II.3).

Pour la calibration de ce modèle, nous avons utilisé l'expérience de Pelaz et al. [13] dans laquelle une couche de Si dopée bore est déposée par technique CVD à une profondeur de 0.12 $\mu\text{m}$ . Pour générer un excès d'interstitiels et ainsi entraîner la diffusion de cette couche enterrée située plus en profondeur, les auteurs réalisent une implantation de silicium à 40 keV avec une dose de  $2.10^{13}\text{at.cm}^{-2}$ . L'échantillon est ensuite recuit à 800°C pendant 35min sous ambiance neutre. Cette expérience est donc similaire à celle de Cowern et al. mais avec une dose de bore plus forte entraînant ainsi une concentration maximum de dopant supérieure à  $1.10^{19}\text{cm}^{-3}$ , cette concentration maximale étant suffisante pour engendrer la formation d'amas mixtes de dopants et de défauts ponctuels tout en restant en-dessous de la solubilité limite à 800°C.

Comme précisé précédemment il est important de rappeler que, dans une telle étude, le modèle de formation des agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels n'a de sens que s'il est couplé aux deux modèles précédemment étudiés (diffusion et défauts étendus). Les paramètres relatifs à ces deux modèles sont donc fixés dans cette étude et les ajustements se font uniquement sur les paramètres relatifs aux agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels.

Le résultat obtenu par notre simulateur est comparé aux données expérimentales de Pelaz et al. sur la Figure 54.

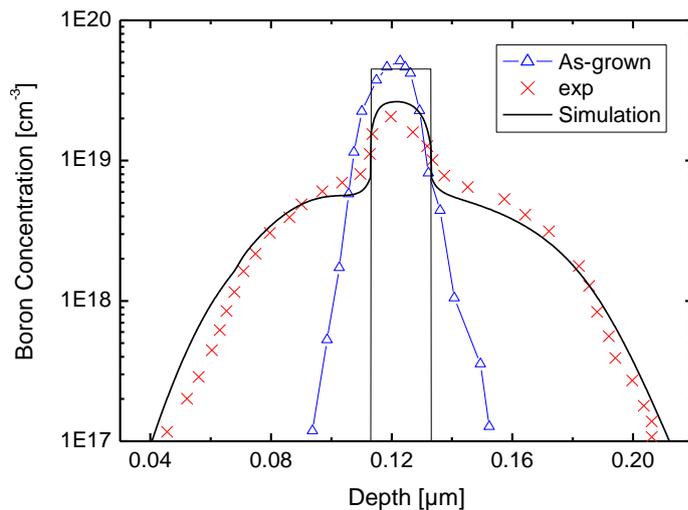


Figure 54 : Résultats de nos paramètres relatifs aux agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels pour l'expérience particulière de Pelaz et al. [13].

On remarque que les simulations reproduisent parfaitement non seulement le profil de distribution des BICs, représenté par la partie "immobile" du profil de bore à des concentrations supérieures à  $8 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ , mais aussi la partie diffusante du profil.

Les valeurs optimisées des paramètres relatifs aux agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels sont donnés dans le tableau suivant :

Agglomérat	Energie (eV)	Agglomérats	Energie (eV)
$B_2$	0.7	$B_3I$	-0.06
$B_2I$	0.976	$B_3I_2$	0.14
$B_2I_2$	1.108	$B_2I_2$	1.1

Tableau 5 : Valeurs des energies de formation relatifs aux agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels.

Nous avons aussi ajusté le rayon effectif de capture des différents agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels.

Cependant, ces ajustements sont réalisés sur une seule expérience et à basse température. Pour compléter les valeurs obtenues, une seconde calibration à température plus élevée est nécessaire.

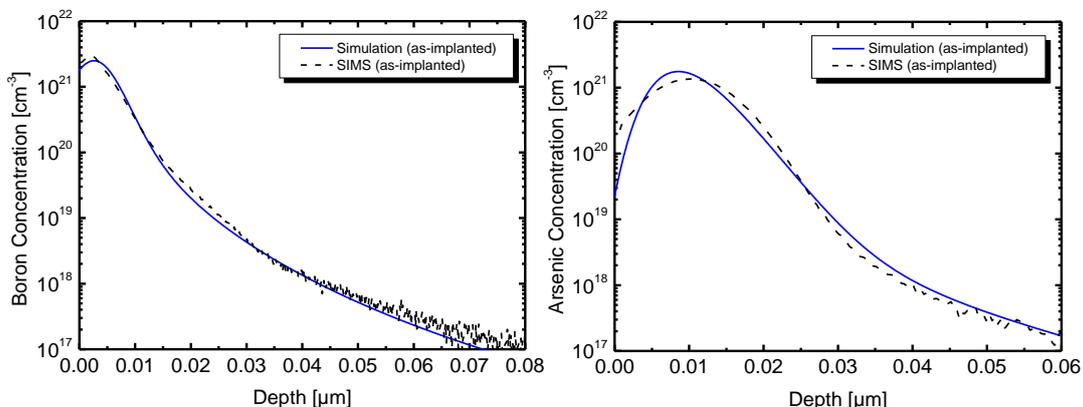
## III.2 Etudes appliquées

### III.2.1 Diffusion des dopants après implantation directe

Seuls le bore et l'arsenic ont fait l'objet d'études. Dans le cadre de cette thèse la simulation de la diffusion des autres dopants, tels le phosphore et l'indium, est possible dans Sentaurus Process en utilisant les mêmes mécanismes (activation, paires, agglomérats, etc...) mais avec des paramètres en cours de calibration au sein de l'équipe TCAD de STMicroelectronics-Crolles. Pour ces différents essais, nous nous sommes concentrés sur des conditions typiquement utilisées pour la fabrication de jonctions ultras minces à STMicroelectronics-Crolles. Pour les implantations, elles sont assez variées selon de l'architecture des MOSFETs. Pour les recuits en revanche, c'est un recuit rapide de type spike qui a été principalement testé pour l'activation et la diffusion des dopants. Quelques profils de diffusion après des recuits à plus basse température, entre 700°C et 850°C, ont également été étudiés.

Nous allons tenter dans cette partie de reproduire la profondeur et l'abrupteté des jonctions formées par implantation directe du bore et de l'arsenic dans un substrat cristallin suivi d'un recuit d'activation spike. Nous avons simulé deux implantations de bore et d'arsenic à faible énergie. La première de ces implantations est réalisée à 0.5keV avec une dose de  $2.10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup> et présente lors du recuit l'apparition d'une forte concentration de bore sous forme d'agglomérats (cf. Figure 56.a). La seconde implantation, celle de l'arsenic, est réalisée à 10keV avec une dose de  $2.10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>. Les deux échantillons ont ensuite subi un recuit spike à 1080°C.

Les profils obtenus après implantation sont représentés sur la Figure 55. Le simulateur calcule le profil d'implantation d'après les tables analytiques (tables définies à partir de calculs MC et de profils SIMS). Nous constatons sur la Figure 55 que les profils d'implantations sont bien simulés et sont valides pour les études de diffusion.



**Figure 55 : Profils implantés (a) Profils de bore simulés, et comparaison avec les profils obtenus par analyse SIMS, pour une implantation de B, 0.5 keV,  $2 \times 10^{15}$  cm<sup>-2</sup>, après implantation. (b) Profils d'arsenic simulés, et comparaison avec les profils obtenus par analyse SIMS, pour une implantation d'As, 10keV,  $2 \times 10^{15}$  cm<sup>-2</sup>, après implantation**

Pour initialiser les concentrations des défauts ponctuels après implantation nous avons utilisé le modèle "+1". Ainsi, à chaque atome dopant implanté correspond un auto-interstitiel généré. Les profils après recuit de bore et d'arsenic mesurés par SIMS et simulés sont présentés dans les Figure 56.a et Figure 56.b, respectivement.

Sur la Figure 56.a, le profil SIMS après recuit présente un pic statique (correspondant à des atomes de bore immobiles), un épaulement (ou « kink », indiqué par une flèche sur la Figure 56.a) et, sous ce niveau de concentration, une queue de diffusion. Le « kink » indique le niveau de concentration à partir duquel les atomes de bore précipitent et forment les BICs. Il est à noter que cette concentration est proche de la solubilité limite du bore dans le silicium à 1080°C. On remarque aussi que le profil de bore simulé reproduit très bien ces observations expérimentales. En particulier, les agglomérats mixtes de bore et d'interstitiels se sont formés aux concentrations de bore les plus fortes. Cette formation engendre d'une part le blocage de la diffusion mais aussi une désactivation du bore dans cette région. On observe cependant que la diffusion simulée est légèrement trop importante en queue de distribution. Nous attribuons cette légère différence, à l'ajustement des paramètres relatifs à la cinétique des agglomérats mixtes sur l'expérience de Pelaz et al. [13]. La principale différence entre cette expérience et le cas présent réside dans les conditions initiales. Dans l'expérience de Pelaz, les auto-interstitiels libres générés par l'implantation ionique ne sont pas directement au contact d'une forte concentration de bore. Ces auto-interstitiels vont alors dans un premier temps directement former des agglomérats d'interstitiels. Les interstitiels qui diffusent en profondeur à partir de la zone des défauts forment ensuite les BICs. Ici, la forte concentration de bore est initialement et directement en présence d'une forte sursaturation en auto-interstitiels et engendre une forte compétition entre la formation d'agglomérats d'interstitiels et les BICs. L'importante diffusion du bore constatée ici au niveau de la queue du profil simulé est due à un ajustement insuffisamment précis des agglomérats mixtes  $B_nI_m$ . En effet, certains types de ces agglomérats libèrent, du fait de leur faible stabilité, des paires BI mobiles qui peuvent diffuser relativement loin en profondeur. Du fait de ce mécanisme de diffusion, du à la dissolution d'agglomérats, non seulement le bore diffuse trop, mais la forme, en épaulement, du profil expérimental est mal reproduite (en partie due aux erreurs d'analyse expérimentale).

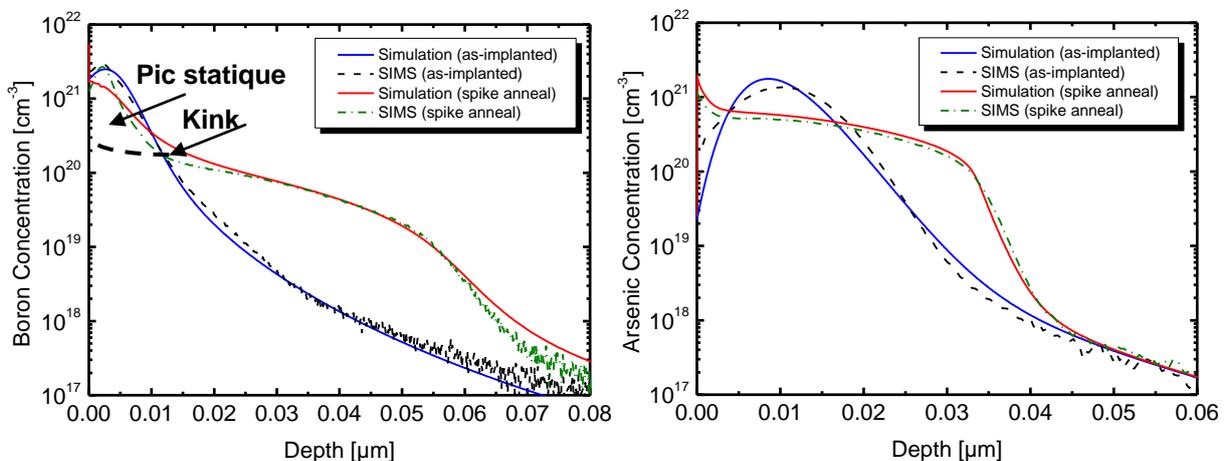


Figure 56 : Résultats obtenus pour un recuit spike à 1080°C après implantation (a) de bore à 0.5keV avec une dose de  $2.10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup> et (b) d'arsenic à 10keV avec une dose de  $2.10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>.

Les profils d'arsenic obtenus après recuit spike à 1080°C sont donnés sur la les Figure 56.b. La première remarque concernera la formation des agglomérats d'arsenic. Si l'accumulation d'arsenic immobile n'est pas visible sur les profils expérimentaux comme dans le cas du bore, elle est en revanche nécessaire dans les profils simulés pour reproduire les SIMS. L'absence d'un "Kink" caractéristique sur les profils SIMS n'indique pas une absence d'agglomérats mais simplement que leur concentration, nulle ou pas, est inférieure à la concentration totale d'arsenic. Au premier abord, la forme du profil simulé n'était pas bonne mais cela a été corrigé avec un meilleur ajustement des agglomérats mixtes. En effet, à défaut d'expériences dédiées de type Pelaz utilisées dans le cas du bore, les paramètres des agglomérats mixtes  $As_nV_m$  ont été directement ajustés sur des profils de jonction comme celles présentées ici. En revanche, par opposition au cas du bore avec les interstitiels, la queue du profil d'arsenic est bien reproduite ce qui est justifié par la stabilité des agglomérats mixtes  $As_nV_m$  empêchant ainsi l'émission de paires  $AsV$  mobiles.

Ainsi, pour des conditions d'implantation à très forte dose, la diffusion et l'agglomération du bore et de l'arsenic sont bien calibrées. Les concentrations élevées conduisent à une forte agglomération ce qui témoigne de la bonne calibration des amas mixtes. En outre, dans ces conditions d'implantation (très faible énergie) la surface joue un rôle très important. Ces études nous ont aussi permis d'ajuster les paramètres du modèle relatif à la ségrégation à l'interface  $SiO_2/Si$ .

La diffusion effective du bore ( $D_{eff}^B$ ) et de l'arsenic ( $D_{eff}^{As}$ ) exprimée en fonction des préfacteurs des coefficients de diffusion ainsi que les énergies d'activation des différents coefficients de diffusion du bore (ajustée selon l'expérience de Cowern) et de l'arsenic (ajustée sur la base de profil identique à celui de la Figure 56.b) sont donnés :

$$\text{Pour le bore : } D_{eff}^B(Si) = f_i(D_i^0 + D_i^+) + f_v(D_v^0 + D_v^+)$$

$$\begin{aligned} f_i * D_i^0 &= 0.291 * \exp -3.57 / kT \\ f_i * D_i^+ &= 1.746 * \exp -3.57 / kT \\ \text{avec : } f_v * D_v^0 &= 0.009 * \exp -3.57 / kT \\ f_v * D_v^+ &= 0.054 * \exp -3.57 / kT \end{aligned}$$

$$\text{et pour l'arsenic : } D_{eff}^{As}(Si) = f_i(D_i^0 + D_i^-) + f_v(D_v^0 + D_v^-)$$

$$\begin{aligned} f_i * D_i^0 &= 0.012 * \exp -3.44 / kT \\ f_i * D_i^- &= 9.3 * \exp -4.15 / kT \\ \text{avec : } f_v * D_v^0 &= 0.02 * \exp -3.44 / kT \\ f_v * D_v^- &= 15.5 * \exp -4.15 / kT \end{aligned}$$

Les valeurs des paramètres décrivant la ségrégation du bore et de l'arsenic à l'interface  $Si/SiO_2$  sont données dans le tableau suivant :

	Préfacteur		Energie d'activation (eV)	
	bore	arsenic	bore	arsenic
Concentration maximale du dopant qui ségrège à l'interface Si-SiO <sub>2</sub>	<u>3x10<sup>18</sup></u>	<u>2.4x10<sup>15</sup></u> <u>2.5x10<sup>16</sup></u>	<u>1.0</u>	<u>0.2</u> <u>0.45</u>
Vitesse de capture du dopant du côté du silicium (cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> )	<u>1x10<sup>-12</sup></u> <u>1x10<sup>-13</sup></u>	<u>1.5x10<sup>-10</sup></u> <u>6x10<sup>-13</sup></u>	<u>2.5</u>	<u>3.3</u> <u>2.8</u>
Vitesse d'émission du dopant du côté du silicium (cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> )	<u>1x10<sup>-13</sup></u> <u>1x10<sup>-14</sup></u>	<u>2.0x10<sup>-13</sup></u> <u>6x10<sup>-15</sup></u>	<u>2.2</u>	<u>2.4</u> <u>2.53</u>
Vitesse de capture du dopant du côté de l'oxyde (cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> )	<u>4.8x10<sup>-13</sup></u> <u>3.2x10<sup>-14</sup></u>	<u>1.0x10<sup>-10</sup></u> <u>1x10<sup>-16</sup></u>	<u>2.5</u>	<u>3.0</u> <u>1.5</u>
Vitesse d'émission du dopant du côté de l'oxyde (cm <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> )	<u>5x10<sup>-18</sup></u> <u>5x10<sup>-16</sup></u>	<u>1.2x10<sup>-18</sup></u> <u>4x10<sup>-19</sup></u>	<u>1.54</u> <u>2.44</u>	<u>2.0</u> <u>1.94</u>

Tableau 6 : Valeurs ajustées des paramètres relatifs à la segregation des dopants à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si. Les valeurs soulignées représentent celles paramètres par défaut.

Nous avons montré que le simulateur Sentaurus Process décrit correctement à la fois la formation des agglomérats mixtes mais aussi la diffusion des dopants dans des conditions "extrêmes" (faible énergie d'implantation, faible dose). Nous allons à présent tenter d'aller plus loin, en étudiant l'effet de la température de recuit spike sur la formation des BICs.

### Effet de la température

Pour cette étude, nous avons utilisé quatre échantillons implantés avec les mêmes conditions (une énergie de 0.5keV et une dose de 1.10<sup>15</sup>cm<sup>-2</sup> d'ions <sup>11</sup>B<sup>+</sup>) mais exposés à différents recuits. Les quatre échantillons ont été respectivement soumis à des recuits spike à des températures de 750, 1040, 1060 et 1080°C, conditions utilisées à STMicroelectronics pour la fabrication de jonctions ultra-minces. Les profils de bore obtenus par SIMS (lignes continues) de la Figure 57.a présentent les mêmes caractéristiques abordés plus haut sur la Figure 56.a : pic statique, un épaulement (ou "kink") et, sous ce niveau de concentration, une queue de diffusion. On peut aussi observer à partir des résultats de la Figure 57.a que, pour des recuits à haute température (≥ à 1000°C), la dose de bore piégée dans le pic statique diminue avec la température et dans le même temps la profondeur de la queue de diffusion augmente.

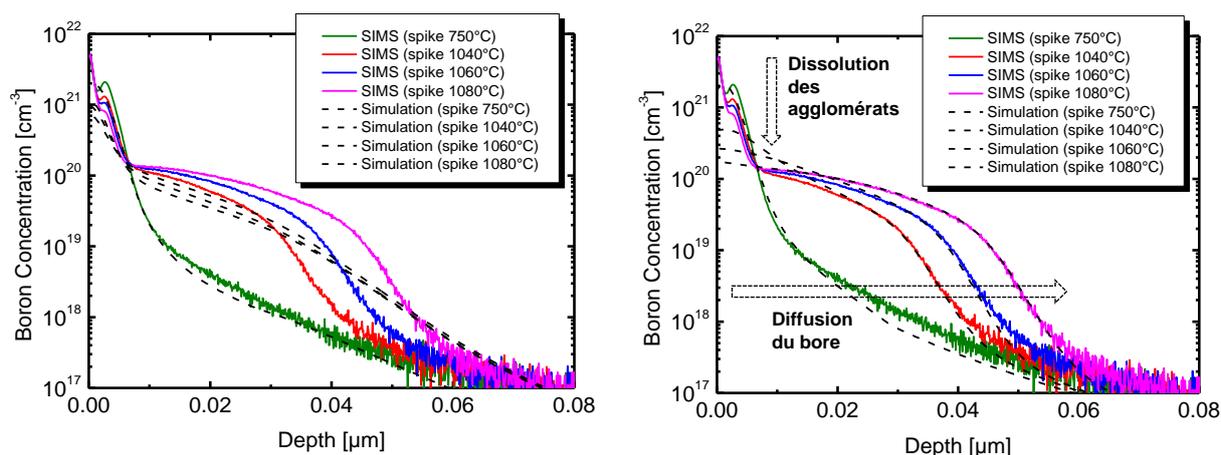


Figure 57 : Profils SIMS (lignes continues), simulation (courbes en pointillé) d'échantillons implantés avec une dose de 1x10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup> de bore à une énergie de 0.5keV soumis à des recuits spike à différentes températures : 750, 1040, 1060 et 1080°C. a) Simulation obtenue avec les valeurs ajustées du Tableau 5. b) Simulation obtenue en introduisant une variation les énergies de formation en fonction de la température des amas de bore les plus stables B<sub>3</sub>I et B<sub>3</sub>I<sub>2</sub>.

Pour les simulations, nous avons gardé inchangés les paramètres gouvernant la diffusivité du bore et des défauts ponctuels ainsi que la formation des agglomérats d'interstitiels. Nous avons ainsi simulé, à l'aide de l'ensemble des paramètres calibrés jusqu'à ici, Les quatre échantillons décrits ci-dessus. Nous avons ensuite comparé sur la Figure 57.a les résultats de simulation (ligne en pointillé) aux mesures SIMS. Il apparaît que la simulation sous-estime l'accélération de la diffusion du bore d'une température à l'autre. Les paramètres ajustés relatifs aux amas  $B_nI_n$  (cf. Tableau 5) ne sont donc pas suffisants pour reproduire l'évolution des BICs en fonction de la température.

Nous avons ensuite tenté de reproduire ces SIMS en utilisant la méthode présentée par Schermer et al. [14]. Les auteurs font l'hypothèse qu'il existe des BICs plus stables que d'autres dont l'énergie de formation varie en fonction de la température. Il est important de noter que la structure exacte des BICs n'est pas parfaitement connue et les travaux récents de Pichler et al. [15] suggèrent que pour parvenir à simuler correctement la diffusion et l'activation du bore, on doit considérer que les énergies de formation des BICs varient en fonction de la température. Les profils simulés de bore présentés sur la Figure 57.b ont été donc obtenus en suivant la procédure de Schermer et al. [14], nous avons trouvé que le meilleur accord avec les profils SIMS est obtenu avec les paramètres présentés sur la Figure 58.b. A faible température de recuit, le complexe  $B_3I$  est plus stable que  $B_3I_2$ . Cette tendance s'inverse pour les hautes températures au delà de 1060°C. Les BICs  $B_2$  et  $B_2I$ , dont l'énergie de formation est indépendante de la température ( $E_{B_2} = 0.7$  et  $E_{B_2I} = 0.976$ ), servent d'états intermédiaires nécessaires pour la formations des BICs les plus stables  $B_3I$  et  $B_3I_2$  selon les réactions illustrées sur la Figure 58.a. La nouvelle calibration simule correctement la profondeur et l'abrupteté des jonctions formées, cependant l'évolution du pic des profils expérimentaux est mal reproduite en fonction de la température.

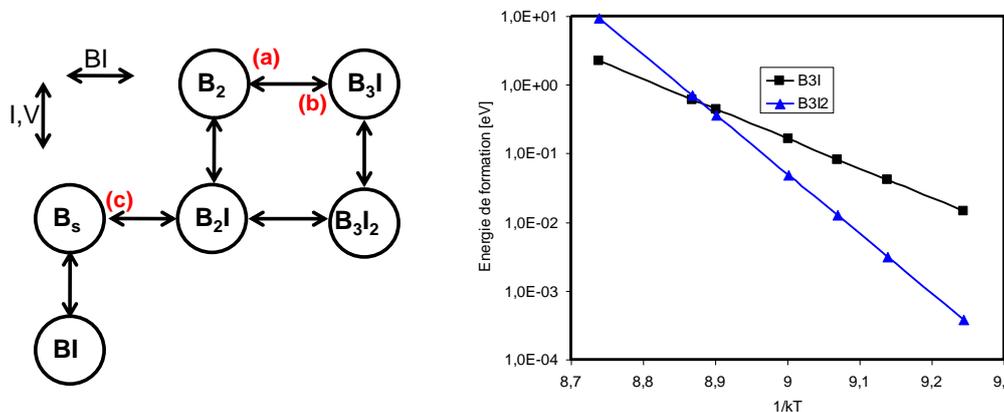


Figure 58 : a) Schéma de réactions du modèle de BICs simplifié. b) variation des énergies de formation en fonction de la température des amas de bore les plus stables  $B_3I$  et  $B_3I_2$ .

Après implantation la plupart des agglomérats de bore sont de composition soit  $B_3I$  soit  $B_2$ . En présence de ces deux types d'agglomérats, les réactions dominantes sont schématisées sur la Figure 58.a. L'agglomérat  $B_3I$  peut émettre un atome mobile de bore apparié avec un interstitiel, selon la réaction décrite par le chemin (a) de la Figure 58.a. Donc dès le début du recuit, les agglomérats  $B_2$  proviennent à la fois de la dissolution partielle des  $B_3I$ . Ce que captureront les  $B_2$  va déterminer l'évolution future des agglomérats de bore. Si un  $B_2$  capture une paire BI (chemin (b)) pour former à nouveau  $B_3I$ , le système évolue vers une certaine

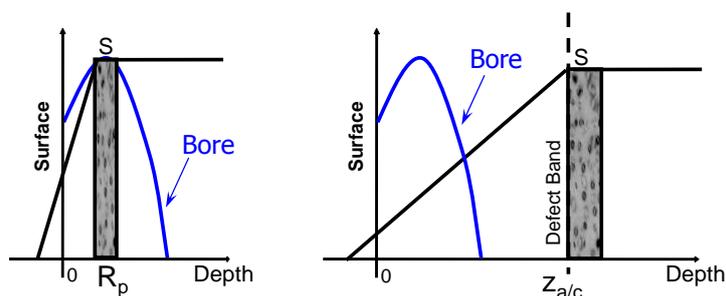
stabilisation des agglomérats. Si un  $B_2$  capture un interstitiel (chemin (c)) un  $B_2I$  se forme, qui est peu stable.  $B_2I$  va se dissoudre très rapidement, en émettant lui-même une paire BI, et en laissant dans le réseau un atome de bore substitutionnel et actif Bs. Or quand la concentration d'interstitiels dans la matrice est assez élevée, la capture d'un interstitiel par  $B_2$  devient hautement probable, plus probable que la capture d'une paire BI. La réaction (c) devient prépondérante devant (b). C'est la raison pour laquelle la dissolution des agglomérats est favorisée quand la concentration d'interstitiels augmente.

### III.2.2 Diffusion des dopants après implantation préamorphisante

L'enjeu des jonctions ultra-minces est d'introduire de fortes concentrations de dopants actifs dans les extensions de source et de drain, tout en contrôlant leur diffusion. Une des méthodes possibles pour atteindre le meilleur compromis résistance par carré/profondeur de jonction ( $R_s/X_j$ ) est d'utiliser des substrats amorphisés suivi de recuits à basse température ou des recuits ultra-rapides ( $\sim 1$ ms) à haute température.

Pendant le recuit d'un substrat amorphisé par implantation ionique, des défauts étendus (les défauts EOR) sont formés derrière l'ancienne interface a/c. De plus, le nombre d'interstitiels de Si disponibles pour former les défauts est cette fois égal au nombre d'interstitiel en excès derrière l'ancienne interface a/c. Il y a donc deux modifications à faire par rapport aux situations expérimentales de diffusion que nous avons simulées jusqu'à présent : (i) La profondeur à laquelle évoluent les défauts n'est plus le rang projeté de l'ion mais la profondeur de l'interface a/c. (ii) Le nombre total d'interstitiels mis en jeu n'est plus fixé par la dose mais par le nombre total d'interstitiels en excès derrière l'interface a/c.

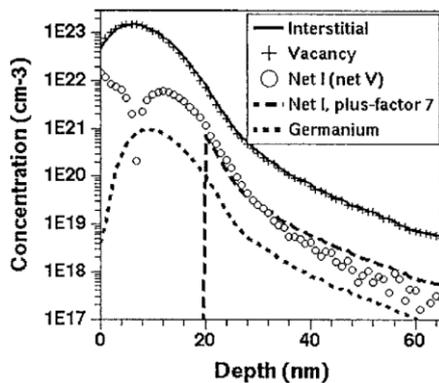
De plus le profil de bore n'est pas centré sur l'interface a/c mais plus proche de la surface. L'amplitude de la sursaturation est donc plus faible dans la région riche en bore que dans la région des défauts (cf. Figure 59). Pour simuler la diffusivité effective du bore, il faut connaître l'extension spatiale de cette sursaturation vers la surface. Ainsi la diffusion des atomes de bore sera accélérée d'un facteur égal à la sursaturation moyenne à la profondeur considérée.



**Figure 59 :** Evolution de la sursaturation d'interstitiels en fonction de la profondeur après a) implantation directe et b) implantation amorphisante.

Comme nous avons pu le démontrer au cours de ce chapitre, les simulations de recuit après implantation sont fortement dépendantes de la bonne estimation par le simulateur d'implantation du profil initial du dopant et de l'excès de défauts générés au cours de cette opération. Dans le cas d'une implantation amorphisante, les conditions initiales pour la simulation doivent prendre en compte les conditions d'amorphisation par des implantations de

germanium et par implantation du dopant. Nous avons utilisé des calculs analytiques pour reproduire la distribution initiale de particules obtenue par implantation du bore dans un substrat amorphe. La Figure 60 représente une condition initiale typique. L'excès de défauts générés au cours de l'étape d'amorphisation a été simulé grâce à l'ajustement de la profondeur de l'interface a/c calibré par le paramètre "dfactor" qui détermine la concentration "critique" de défauts ponctuels pour l'amorphisation (cf. chapitre 2 section I.2) et par le nombre total d'interstitiels en excès derrière l'interface a/c calibré par le paramètre "ifactor" qui est un facteur multiplicatif de la dose du dopant implanté pour déterminer la quantité d'interstitiels générés. Il est bien connu qu'après les toutes premières étapes d'un recuit thermique, une recristallisation de la zone amorphisée apparaît. Cette étape n'est pas prise en compte dans nos simulations et nous considérons que la couche amorphe se recristallise instantanément à  $t=0$ s du recuit. En fait, on considère les populations de défauts ponctuels à leurs concentrations d'équilibre dans cette région. Néanmoins, il peut y avoir une forte sursaturation de défauts ponctuels au-delà de  $z_{a/c}$ , comme illustrée sur la Figure 60 pour  $z_{a/c}=20$ nm. Dans cette zone, le profil des excès en interstitiels estimé par le modèle "+1" ajusté par un facteur multiplicatif "+1 x ifactor" (ifactor=7.0 sur la Figure 60). La valeur de "ifactor" est calibrée à partir de résultats extraits d'implantations ioniques Monte Carlo.



**Figure 60 :** Calibration de la quantité d'interstitiel "ifactor" pour une implantation au Ge à 8 keV avec une dose de  $10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup> Ge. Les premiers 20 nm de la surface sont amorphisés. Après la SPE, cette région est libre de défauts. La recombinaison des paires I-V laisse un profil d'excès d'interstitiels à l'extérieur de la zone amorphe, qui peut être approximé par la concentration du Ge multiplié par un facteur multiplicatif (7 ici). la concentration en interstitiels la plus élevée est obtenue immédiatement au dessus de l'interface a/c d'origine.

Dans le cas des implantations successives, les profils des espèces implantées dans la partie amorphe peuvent être correctement décrits par des fonctions avec des moments de plusieurs ordres, telle que la distribution de Pearson ou bien la double-Pearson [16] que nous avons choisi d'utiliser. L'avantage de cette fonction analytique est qu'elle contient une superposition de deux fonctions de Pearson :

**Équation 99**

$$f_p(x) = c_{head} f_{head}(x) + c_{tail} f_{tail}(x)$$

avec :  $c_{head} + c_{tail} = 1$

où  $f_{head}$  et  $f_{tail}$  sont des fonctions Pearson dont les paramètres sont calculés par interpolation à partir de tables de conversion générées par des simulations MC [17].  $f_{head}$  décrit la distribution des ions dans la partie endommagée du substrat.  $f_{tail}$  est la seconde fonction Pearson et décrit la distribution des ions canalisés.  $c_{head}$  et  $c_{tail}$  sont respectivement les fractions des ions décanalisés et canalisés. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle présente huit paramètres à calibrer. Finalement, nous avons obtenu une distribution de particules de bore avec un effet de canalisation bien simulé comme montré dans les exemples ci-après.

Deux expériences ont été étudiées. Dans la première, l'ion de bore est implanté à une énergie de 0.5eV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  dans un substrat amorphisé par une implantation de Ge à une énergie de 30 keV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  (les conditions utilisées par Boninelli et al.). L'échantillon est ensuite exposé à un recuit à 800°C. Dans la deuxième expérience, l'ion de bore est implanté à une énergie de 2.5eV avec une dose de  $3 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  dans un substrat amorphisé par une implantation de Ge à une énergie de 20 keV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . L'échantillon est ensuite exposé à deux recuits spike à 1010 et 1020°C. Les profils SIMS et les résultats de nos simulations sont reportés sur les Figure 61 et Figure 62 respectivement.

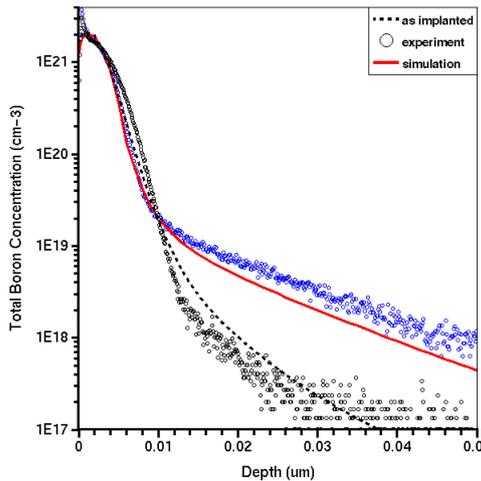


Figure 61 : Profils SIMS avant et après recuit à 800°C pendant 120s sous N2 d'une implantation de bore à 0.5 keV à une dose de  $1.10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  dans un substrat amorphisé par une implantation de Ge à 30 keV à une dose de  $1.10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

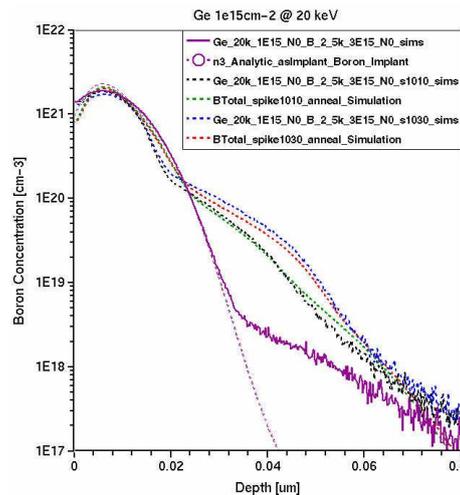


Figure 62 : Profils SIMS avant et après recuit spike à 1010 et 1020°C sous N2 d'une implantation de bore à 2.5 keV à une dose de  $3 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  dans un substrat amorphisé par une implantation de Ge à 20 keV à une dose de  $1.10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

Les Figure 61 et Figure 62 montrent les meilleurs résultats obtenus par les simulations en termes de profondeurs de jonction comparés aux résultats SIMS. Les profils de bore obtenus après recuit sont en bon accord avec les profils SIMS. Ce résultat montre que les effets des défauts étendus sur la diffusion du bore lors d'un procédé générant une zone amorphisée sont bien pris en compte sans ajustement supplémentaire.

### III.3 Conclusion

La diversité des expériences simulées en termes de conditions d'implantation et de recuit, nous permet de généraliser nos résultats aux différents procédés de fabrication. Nous pouvons donc utiliser les simulations comme outil d'investigation pour étudiés les phénomènes observés expérimentalement lors de la fabrication de jonctions ultrafines par des méthodes avancées.

## IV RECUIT FLASH

Une des solutions envisagées pour atteindre les spécifications de l'ITRS sur les jonctions S/D consiste à diminuer les bilans thermiques associés au procédé de recuit d'activation ne cessent

de diminuer. Sachant qu'une diminution de température conduit à une diminution de la solubilité limite du dopant sans s'affranchir complètement des mécanismes de diffusion assistée par interstitiels, il est nécessaire d'utiliser des températures élevées tout en réduisant le temps du recuit. C'est pourquoi les rampes de montée en température doivent aussi être rapides. Actuellement, la formation des zones source/drain (S/D), des extensions S/D (LDD) et l'activation électrique de la grille en polysilicium des transistors CMOS sont réalisées par implantation ionique suivie d'un recuit rapide à haute température (RTP : Rapid Thermal Process). Néanmoins, l'association de ces deux techniques semble atteindre ses limites pour les prochains nœuds technologiques [18]. A la manière du dopage par plasma développé pour améliorer les performances des implanteurs ioniques standards, de nouveaux types de recuit ont été mis au point pour remplacer les équipements RTP actuels. C'est dans cette optique que les recuits *flash* ont été développés.

Les recuits millisecondes (flash ou laser) assurent de très bons niveaux d'activation avec une très faible diffusion, mais doivent néanmoins être associés à des recuits RTA conventionnels afin de favoriser la dissolution complète des défauts étendus [19] après le procédé de fabrication et d'éviter que les profils de concentration de dopants ainsi générés soient trop abrupts, ce qui peut engendrer des courants de fuite inacceptables [20]. Toutefois les raisons derrière ces phénomènes observés restent inconnues. Par exemple, il a été proposé par Camillo-Castillo et al. [21], que les rampes élevées de température en montée et en descente (proche de  $10^6$ °C/s) peuvent altérer les mécanismes d'évolution des défauts par rapport aux recuits classiques. Ces auteurs ont mesuré une énergie d'activation de la dissolution des défauts différente de celle relative aux recuits standards soulignant l'aspect "hors-équilibre" de ces procédés.

Nous avons donc décidé d'utiliser les modèles de simulation physique disponibles dans Sentaurus Process afin d'identifier les mécanismes gouvernant l'évolution de ces défauts au cours de recuits flash, et de comprendre les effets des rampes ultra-rapides de montée en température. En particulier, grâce à ce logiciel, les données simulées sont accessibles à tout moment du procédé, ce qui n'est pas le cas expérimentalement.

Le but de ce travail est d'identifier dans la mesure du possible les mécanismes qui gouvernent l'évolution de ces défauts et, par ailleurs, venir alimenter la base de données nécessaire à l'optimisation des simulateurs de procédés. Dans un premier temps, nous étudions l'évolution des défauts étendus au cours de recuit milliseconde Flash. Les résultats expérimentaux seront appuyés par des simulations prédictives afin de mettre en évidence l'effet de la rampe ultra rapide de montée et de descente en température sur la cinétique des défauts étendus. Ensuite, nous nous focalisons sur l'impact des conditions d'implantation sur la dissolution de ces défauts au court de tel recuit.

## IV.1 Défauts étendus

### IV.1.1 Détails expérimentaux

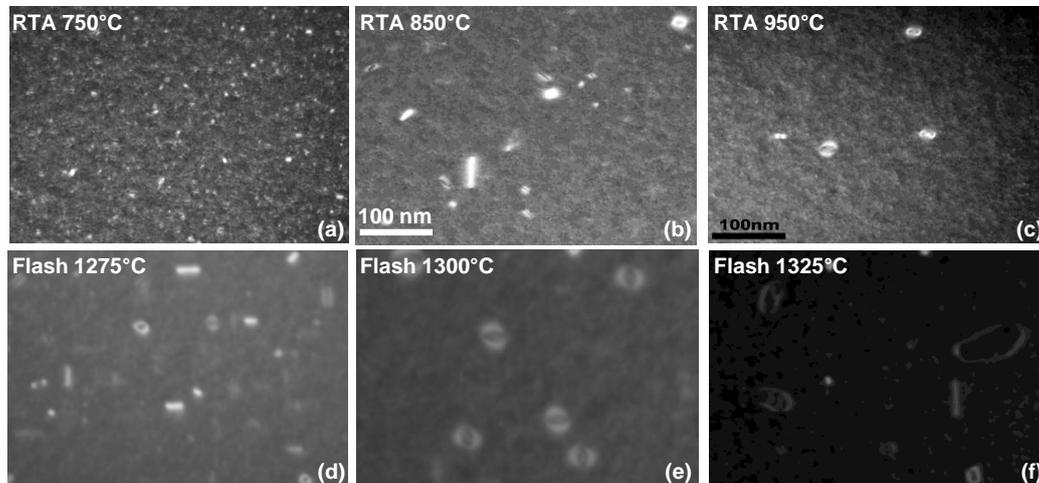
Pour cette étude, nous avons utilisé des plaques de silicium d'orientation (100) de type n et de faible résistivité (10-20  $\Omega$ /cm). Toutes les plaques ont été préamorphisées par implantation ionique avec une dose de  $1 \times 10^{15}$  cm<sup>-2</sup> d'ions <sup>74</sup>Ge<sup>+</sup> à plusieurs énergies 2, 15 et 30keV. Les

recuits Flash ont été effectués à l'aide du système Mattson Millios fRTP™ sous flux d'azote. D'une température intermédiaire  $T_i$  de 700°C (rampe de montée en température de  $\sim 150^\circ\text{C}/\text{sec}$ ), les plaques ont été exposées à un flash d'une température  $T_p$  de 1275°C, 1300°C ou 1325°C (les rampes de montée et de descente en température de  $T_i$ - $T_p$  est de  $\sim 10^6^\circ\text{C}/\text{sec}$ ). Pour comparaison, certaines plaquettes de silicium ont subi dans un premier temps, un recuit de pré-stabilisation de 650°C pour 5s, pour la SPER, suivie par le recuit RTA, réalisé par la société Mattson sur un appareillage Mattson 3000 plus RTP, sous flux d'azote, équipé d'un contrôleur de température et d'un système de rotation de la plaque, de 30s à des températures entre 750°C et 950°C. L'analyse de la nature, de la densité et de la taille des agglomérats formés dans les structures a été effectué par MET au CEMES sur un microscope JEOL 2010HC.

#### IV.1.2 Analyse

Pour mener cette analyse, la Microscopie Electronique en Transmission (MET) est l'outil de caractérisation structurale le plus adapté. En effet, elle permet d'identifier les différents types de défauts en présence, de déterminer leur position par rapport à la surface, et surtout, d'examiner leurs cinétiques de croissance par la mesure de l'évolution de leur densité et de leur distribution en taille au cours du recuit.

Afin de décrire l'évolution complète des défauts étendus au cours de recuits flash et de déterminer un éventuel effet de la température sur l'évolution des défauts, le recuit flash a été confronté au recuit RTA et l'ensemble des résultats est présentée sur la Figure 63. La profondeur de la couche amorphe mesurée expérimentalement est d'environ 50 nm.



**Figure 63 :** Images par MET d'échantillons implantés à 30 keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  après recuit à différents bilans thermiques : flash 1275°C 1300°C, 1325°C, RTA 750°C, 850°C, 950°C 30 sec.

Pour les recuits RTA, les défauts étendus suivent l'évolution attendue : les petits agglomérats, les défauts  $\{311\}$  puis les boucles de dislocations suivent un mécanisme de maturation d'Ostwald. A 750°C, après 30 secondes de recuit, seuls de petits défauts  $\{311\}$  sont visibles en grand nombre (Figure 63.a). A 850°C, les boucles de dislocations sont déjà apparues après 30 secondes de recuit, et cohabitent avec les défauts  $\{311\}$  largement majoritaires et vraisemblablement en cours de transformation (Figure 63.b). A 950°C, seules des boucles de dislocation (majoritairement des boucles fautées) "survivent" (Figure 63.c). Ainsi, l'évolution thermique des défauts étendus, exposée sur la Figure 63, montre que les défauts

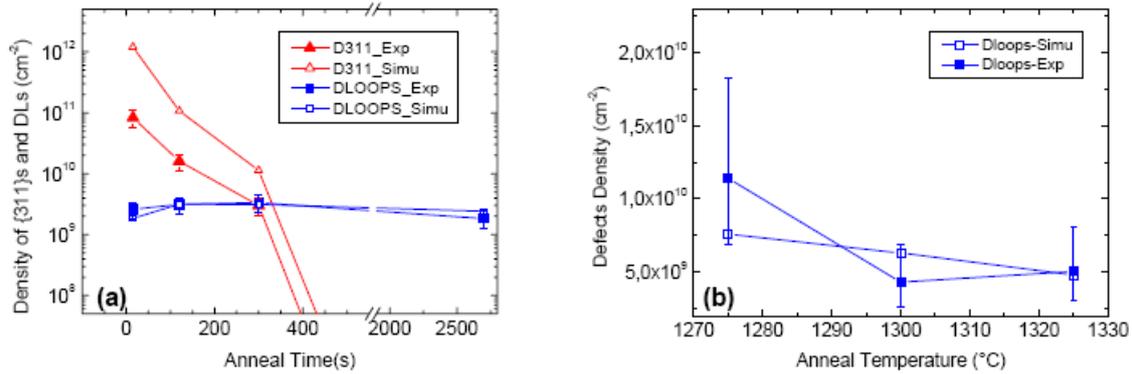
étendus grandissent en taille et diminuent en densité avec la température de recuit, en particulier les défauts {311} grandissent puis se transforment en boucles de dislocation et leur densité diminue brutalement jusqu'à leur disparition.

Pour les recuits flash, la gamme de températures utilisée ne permet pas de suivre avec précision l'évolution des défauts décrite ci-dessus. Toutefois, des ressemblances existent entre les deux types de recuit. D'abord, les défauts étendus observés au cours des recuits flash (Figure 63.d-f), majoritairement des boucles de dislocation (fautées et parfaites) à 1275°C, grandissent en taille et diminuent en densité lorsque l'on augmente la température du recuit flash et les boucles parfaites finissent par disparaître à 1325°C, en accord avec le mécanisme de maturation d'Ostwald. Si l'on compare maintenant les populations de défauts observées à 950°C (RTA) et à 1275°C (flash), on constate que les défauts observés dans les deux types de recuit ont une taille moyenne équivalente, cependant le recuit RTA présente une densité de défauts largement inférieure au recuit flash. On en déduit que le recuit RTA est plus efficace quant à la guérison des défauts. Une température plus importante (1325°C) permet de réduire la densité des défauts à des valeurs proches de celles trouvées à 950°C mais la taille des défauts reste largement supérieure dans le cas du recuit flash (i.e. plus d'atomes de Si piégés dans les défauts après un recuit flash). A la suite de cette analyse, nous pouvons conclure que la cinétique de dissolution des défauts est ralentie dans le recuit flash par rapport au recuit RTA.

La compréhension du mécanisme responsable de cette différence peut être acquise si l'on considère que l'évolution des défauts étendus est le résultat de plusieurs mécanismes concomitants, activés thermiquement. C'est le cas de la diffusion des auto-interstitiels libres qui composent les défauts, la capture des auto-interstitiels par les défauts, qui dépend de la sursaturation ( $C_I/C_I^*$ ), l'émission des auto-interstitiels par les défauts qui dépend de l'énergie de formation de ces défauts, et la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation qui est associée à une barrière d'énergie. Nous allons nous servir du modèle "ClusterModel" relatif à l'évolution des agglomérats pour établir si les énergies d'activation de ces différents mécanismes sont modifiées lors d'un recuit flash, comme proposé par certains auteurs ou, dans le cas contraire, si les résultats observés sont la simple conséquence de la combinaison de ces différents mécanismes "inchangés" mais dont la cinétique évolue de façon différente selon les valeurs respectives de leurs énergies d'activation.

### *IV.1.3 Simulation et discussion*

Afin de faciliter l'interprétation des simulations, et de favoriser la compréhension physique plutôt que la reproduction d'expériences, nous avons utilisé le modèle calibré des amas tout en gardant les mêmes paramètres d'entrée que les simulations précédentes y compris les paramètres thermiquement activés. Nous avons donc repris en guise de référence pour les recuits RTA, nos résultats de simulations à 800°C de l'évolution temporelle, de la densité et du nombre total d'atomes de Si ( $N_b$ ) contenus dans les défauts {311} et les boucles de dislocation (rapportée par Boninelli et al. [9]). Ces résultats sont reportés sur la Figure 64.a.

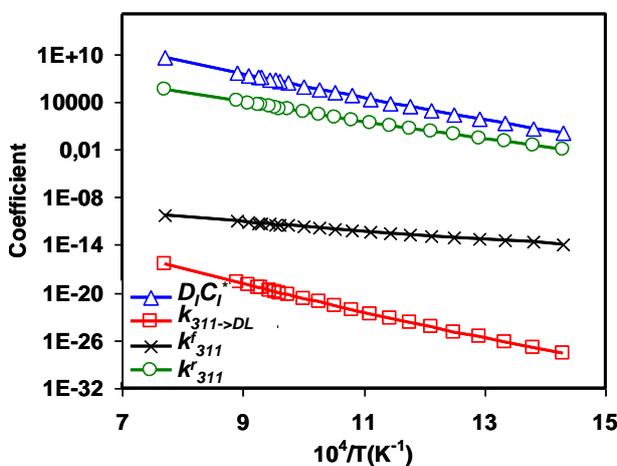


**Figure 64 :** Comparaison entre les résultats de simulations (trait continu) et les résultats expérimentaux (carrés). (a) RTA : densité des défauts {311} et des boucles et nombre d’interstitiels pris dans les défauts {311} et dans les boucles et (b) densité des défauts au cours des recuits flash.

Seuls la température et le temps de recuit ont été modifiés pour simuler les résultats obtenus par recuit flash.

Pour les recuits flash, les valeurs expérimentales (symboles remplis) de la densité des défauts sont comparées aux valeurs simulées (symboles vides) sur la Figure 64.b. Les importantes barres d’erreur de mesure sont dues à la quantité limitée d’images analysées par rapport au recuit RTA (Figure 64.a). Les valeurs calculées sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et le modèle prédit parfaitement la diminution observée de la densité des boucles de dislocation avec l’augmentation de la température maximale du recuit Flash. Ces résultats suggèrent que les rampes de montée et de descente en température au cours du recuit flash, n’altèrent pas les mécanismes de base gouvernant l’évolution des défauts. Ainsi, l’évolution puis la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation suit le même mécanisme quelles que soient les conditions de recuit (RTA ou Flash).

Les simulations montrent donc que les mécanismes sont exactement les mêmes avec les deux types de recuit. Il n’y a de différences que sur la cinétique de croissance et d’évolution des défauts étendus (plus la température est faible plus le processus est lent) notamment la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation qui devient plus efficace par rapport aux autres mécanismes (transformation SMICs/{311}, capture et émission des interstitiels par les défauts {311}...) au cours du recuit flash.

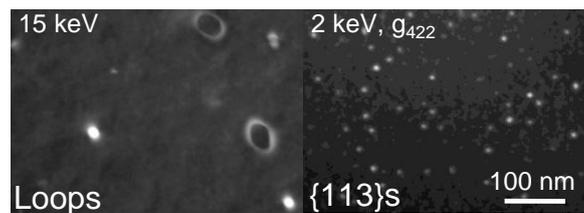


**Figure 65 :** Coefficients des paramètres utilisés dans le modèle relatif aux amas d’interstitiels.

La Figure 65 met en évidence le poids de l'énergie de formation de la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation (paramètre  $k_{311 \rightarrow DL}$ ) par rapport aux autres mécanismes particulièrement la croissance des défauts {311} qui dépend entre autres des paramètres  $k^f$ ,  $k^r$ , et du produit  $D_I C_I^*$ . Ainsi, en augmentant la température, cette transformation intervient plutôt par rapport au recuit RTA. Au même moment les défauts {311} sont toujours petits et n'ont pas encore perdu beaucoup d'interstitiels et dès lors que les boucles de dislocations sont formées le système devient quasi-conservatif (les boucles de dislocation sont très stables). Ainsi, on trouve dans le cas du recuit flash un plus grand nombre d'interstitiels que dans le recuit RTA.

Dans la deuxième partie de cette étude nous nous sommes intéressés à l'effet de la diminution de l'énergie d'amorphisation sur l'évolution des défauts lors d'un recuit flash. L'intérêt de la diminution de l'énergie d'implantation réside dans la possibilité de rapprocher les défauts de la surface, ce qui a pour conséquence d'accélérer la dissolution des défauts et réduire par l'occasion les courants de fuite [22].

Nous avons étudié par MET l'effet des conditions d'implantation sur l'évolution thermique des défauts au cours d'un recuit flash. Pour ce faire, des substrats de silicium ont été préamorphisés au  $\text{Ge}^+$  à 30, 15 et 2 keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ , puis recuits à  $1300^\circ\text{C}$  sous  $\text{N}_2$ .



**Figure 66 :** Images de MET de défauts de fin de parcours après recuit flash à  $1300^\circ\text{C}$  (a) 15keV et (b) 2keV.

Pour une énergie d'implantation de 15 keV, les défauts de fin de parcours sont localisés dans une bande "fine" à une profondeur d'environ 28nm. L'image MET de la Figure 66.a montre la présence exclusive de boucles de dislocation comme dans le cas d'implantation à 30keV (Figure 63.e). En ce qui concerne l'énergie d'implantation de 2 keV les défauts sont localisés à une profondeur de 5 nm de la surface. L'image MET de la Figure 66.b montre que les défauts étendus survivent malgré leur proximité de la surface et sont majoritairement des défauts {311} (taille < 10nm). A partir de ces mesures, nous avons tracé l'évolution spatiale (en fonction de la profondeur à laquelle les défauts sont situés) du nombre d'atomes contenus dans les défauts EOR pour chaque énergie d'implantation (Figure 67). Les profondeurs des trois points expérimentaux (5, 28 et 50 nm) correspondent à la profondeur d'amorphisation des trois énergies d'implantation étudiées 2, 15 et 30 keV, respectivement. Les résultats expérimentaux s'accordent à montrer que, pour les implantations 15 ou 30 keV, la population de défauts est majoritairement composée de boucles de dislocation alors que l'implantation 2 keV a entraîné la formation de défauts {311}. D'autre part la Figure 67 montre que la population de défauts dans le cas de l'énergie la plus faible, contient un nombre plus faible d'atomes de Si piégés ( $\sim 4.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ) par rapport aux implantations à plus haute énergie ( $\sim 2.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$  pour les implantations à 15 et 30 keV). Afin d'optimiser le processus de contrôle

et prédire l'impact électrique des défauts formés, il est important de comprendre l'origine de la diminution du nombre d'atomes de Si contenus dans les défauts lorsque l'on réduit l'énergie d'implantation pour des doses identiques.

Deux scénarios sont envisagés. Dans le premier, la proximité de la surface de la région de défauts étendus peut avoir un rôle crucial dans la réduction du nombre d'atomes capturés par ces défauts [23]. A ce propos, l'efficacité de cette surface est quantifiée par sa longueur de recombinaison,  $L_{surf}$ , qui représente la distance moyenne qu'un interstitiel, en provenance de l'intérieur du matériau, parcourt en surface avant de trouver un piège et de se recombinaison. La valeur de  $L_{surf}$  a été estimée à moins de 5 nm pour des températures de recuit s'élevant à 1050°C [24]. Alternativement, Camillo-Castrillo suggère [21] que les implantations à faibles énergies produisent un nombre plus faible d'atomes de recul derrière l'interface a/c que les implantations à fortes énergies, ce qui donne lieu à moins d'atomes piégés dans les défauts de fin de parcours.

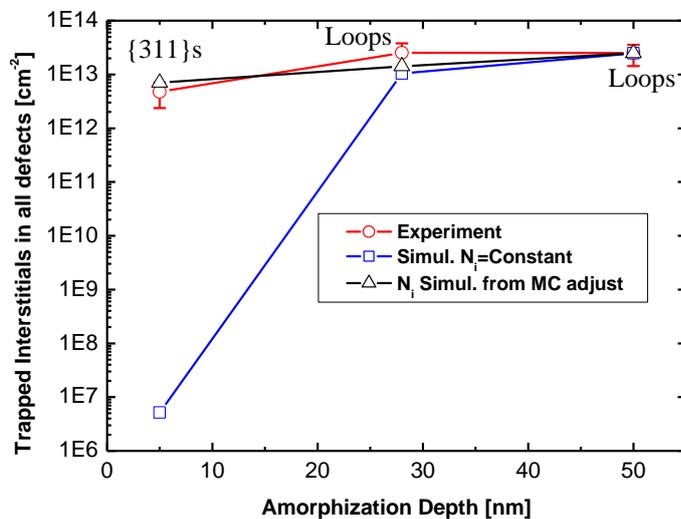


Figure 67 : Nombre expérimental et simulé d'atomes de Si interstitiels piégés,  $N_i$ , dans les défauts EOR après une implantation au  $Ge^+$  et un recuit Flash à 1300°C, en fonction de la profondeur d'amorphisation (5, 28 et 50nm). Les cercles : expériences. Les carrés : simulations avec un nombre initial constant d'atomes de Si dans la région EOR. Les triangles : simulations effectuées avec une valeur ajustée de  $N_i$  à partir de calculs MC [41].

Par analogie avec la partie précédente, nous allons utiliser la simulation pour tester ces différentes approches. Dans un premier temps, nous avons estimé l'impact effectif de  $L_{surf}$  sur la dissolution des défauts de fin de parcours. Nous avons donc simulé l'évolution des défauts pour les trois énergies d'implantation, en supposant que le nombre initial ( $N_i$ ) d'atomes de Si interstitiels en excès derrière l'interface a/c au début du recuit, est indépendant de l'énergie d'implantation. Nous avons utilisé une valeur de  $N_i = 1.08 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , tel que déterminé par l'ajustement du modèle sur la base des résultats expérimentaux obtenus avec une implantation  $Ge^+$  30keV (cf. Figure 64.a et Figure 64.b). Pour la longueur de recombinaison, nous avons utilisé la valeur de  $L_{surf} = 1 \text{ nm}$ .

Les résultats de ces calculs sont présentés sur la Figure 67 (symboles carrés). Ils montrent que lorsque l'on réduit la profondeur des défauts de fin de parcours de 50 à 28 nm, le nombre d'interstitiels de Si piégés dans les défauts diminue légèrement, ce qui indique que la surface influe peu sur l'évolution des défauts (la majorité des interstitiels émis par les défauts sont recapturés dans la région même des défauts). Cependant, lorsque la bande de défauts est située à seulement 5 nm de la surface, les défauts se dissolvent plus rapidement. Ce résultat est en contradiction avec les résultats expérimentaux et la valeur prédite par le modèle du nombre d'interstitiels piégés dans les défauts ( $N_B = 5.2 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$ ) est largement inférieure à la limite de

détection MET. Bien qu'en contradiction avec toutes les études précédentes, un mécanisme de recombinaison à la surface beaucoup moins efficace (i.e.  $L_{surf} \gg 1nm$ ) pourrait en principe expliquer cet écart. Nous avons donc effectué des simulations supposant des valeurs 'déraisonnablement' élevées de  $L_{surf}$  (quelques microns). Cependant le Ni correspondant à 2 keV (couche amorphe de 5nm) reste insuffisant pour reproduire la mesure. Visiblement, ces résultats montrent que ce scénario n'est pas valide et l'effet de la surface seul ne peut expliquer l'écart observé.

Une autre hypothèse pour expliquer l'écart observé à 2keV peut être que l'excès initial d'interstitiels, Ni, présent derrière l'interface a/c, augmente lorsque l'on réduit l'énergie d'implantation. Ceci est en contradiction avec l'hypothèse proposée par Camillo-Castillo et al. [21]. Nous avons donc utilisé deux simulateurs Monte Carlo (Synopsys / Sentaurus Process [25] et SRIM [26]) afin d'estimer la valeur de ce paramètre (Ni) pour les trois énergies d'implantation étudiées, en utilisant les profondeurs des couches amorphes mesurées par MET. Bien que le nombre total de défauts ponctuels (I ou V) diminue en diminuant l'énergie d'implantation, comme prévu par Camillo-Castillo et al., le nombre d'atomes de silicium interstitiels impliqués dans la formation de défauts est égale à l'intégrale de la différence entre le nombre d'interstitiels et de lacunes créés par l'implantation calculé à partir de la position de l'interface amorphe-cristal (comme montré dans la Figure 68, cf. lignes en pointillé). Nous avons trouvé un excès d'interstitiel de  $6 \times 10^{14}$  interstitiels.cm<sup>-2</sup> pour l'énergie de 2keV,  $2.07 \times 10^{14}$  pour l'énergie de 15keV et  $1.56 \times 10^{14}$  interstitiels.cm<sup>-2</sup> pour l'énergie de 30keV. Bien que les résultats dépendent fortement de la profondeur exacte de l'interface a/c, ces calculs indiquent sans ambiguïté que  $N_i$  augmente lorsque l'on réduit l'énergie d'implantation de 30 keV à 2 keV.

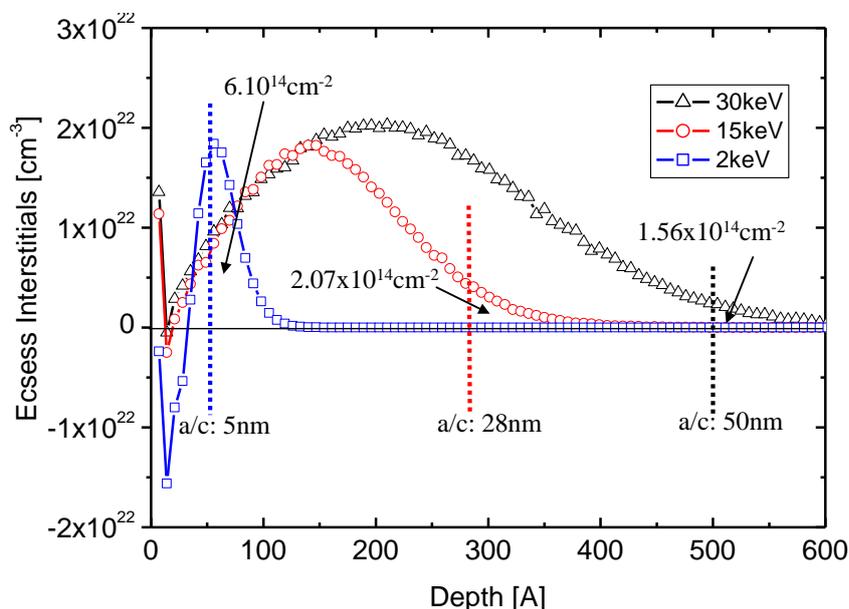


Figure 68 : Simulation sous SRIM de l'excès d'interstitiels par l'implantation ionique en fonction de la profondeur lorsque le Ge est implanté avec une dose de  $10^{15}$ at.cm<sup>-2</sup> à 2, 15 et 30keV.

Nous avons ensuite normalisé les valeurs de  $N_i$  relatifs aux énergies 2 et 15keV obtenus avec les calculs MC en prenant comme référence la valeur de  $N_i = 1.08 \times 10^{14}$ cm<sup>-2</sup> tel que déterminé par l'ajustement du modèle sur la base des résultats expérimentaux obtenus avec une implantation Ge<sup>+</sup> 30keV. Les valeurs obtenues sont reportées sur le tableau suivant :

	2keV	15keV	30keV
$N_i$ calculé par MC	$6 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$2.07 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$1.56 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
$N_i$ ajusté selon l'exp. 30keV	-	-	$1.08 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$
$N_i$ normalisé	$4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	$1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$	-

Les résultats de simulation obtenus avec ces nouvelles valeurs sont présentés sur la Figure 67 (cercles vides) pour  $L_{\text{surf}} = 1 \text{nm}$ . Un meilleur accord est obtenu pour 15 keV en comparaison avec les données expérimentales (profondeur de couche amorphe = 28nm) par rapport au calcul avec un  $N_i$  constant. En outre, l'augmentation de  $N_i$  estimée par les simulations Monte Carlo pour l'énergie d'implantation de 2keV est suffisante pour reproduire les résultats expérimentaux (cf. Figure 67, triangle ouvert).

En raison des grandes incertitudes relatives au calcul de  $N_i$  par les simulations Monte Carlo, les valeurs trouvées ici doivent être considérées comme indicatives. Toutefois, elles sont certainement cohérentes avec la diminution observée du nombre d'interstitiels de Si piégés dans les défauts de fin de parcours avec la diminution de l'énergie d'implantation amorphisante de 30keV jusqu'à 2keV. Celle-ci serait donc le résultat de deux phénomènes concomitants: (i) l'augmentation du nombre initial d'interstitiels,  $N_i$ , créé par l'étape d'amorphisation, lorsque l'énergie d'implantation est réduite et (ii) l'efficacité d'annihilation des interstitiels à la surface de silicium, dont la longueur de recombinaison,  $L_{\text{surf}}$ , est de l'ordre du nanomètre, même aux températures élevées utilisées au cours des recuits millisecondes Flash.

#### IV.1.4 Conclusion

Nous avons étudié l'évolution thermique des défauts étendus au cours de recuit Flash après implantation amorphisante. Les résultats expérimentaux appuyés par des simulations prédictives, indiquent qu'au cours de la rampe ultra rapide de montée et de descente en température, les mécanismes fondamentaux qui contrôlent la croissance et l'évolution des défauts étendus sont les mêmes avec les deux types de recuit flash et classique. Nous avons aussi étudié l'effet de la réduction de la distance entre la surface et la région des défauts étendus sur leur cinétique de dissolution. Nos expériences, soutenues par les simulations, indiquent que la diminution observée du nombre d'interstitiels piégés dans les défauts de fin de parcours lorsque l'on réduit l'énergie d'implantation de 30 keV à 2 keV est le résultat de deux phénomènes concomitants: (i) l'augmentation du nombre initial d'interstitiels créé par l'étape d'amorphisation avec la diminution de l'énergie d'implantation et (ii) la recombinaison des auto-interstitiels à la surface de silicium.

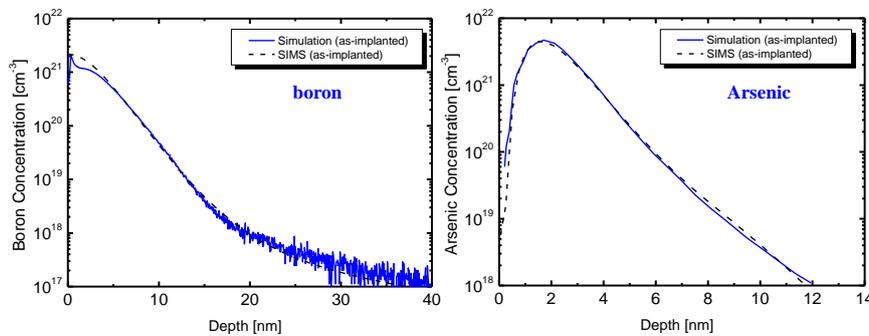
## IV.2 Dopant

Cette section décrit des résultats récents obtenus dans le cadre du projet ATOMICS consacrés au recuit flash de jonctions ultra-minces.

Les fortes concentrations visées pour les composants micro et nano électroniques peuvent être pénalisées par la ségrégation des dopants comme l'arsenic aux interfaces  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ . Une perte partielle de la dose implantée est souvent constatée. Il est alors important de savoir si l'impureté en ségrégation est immobile, et si cette perte est irréversible.

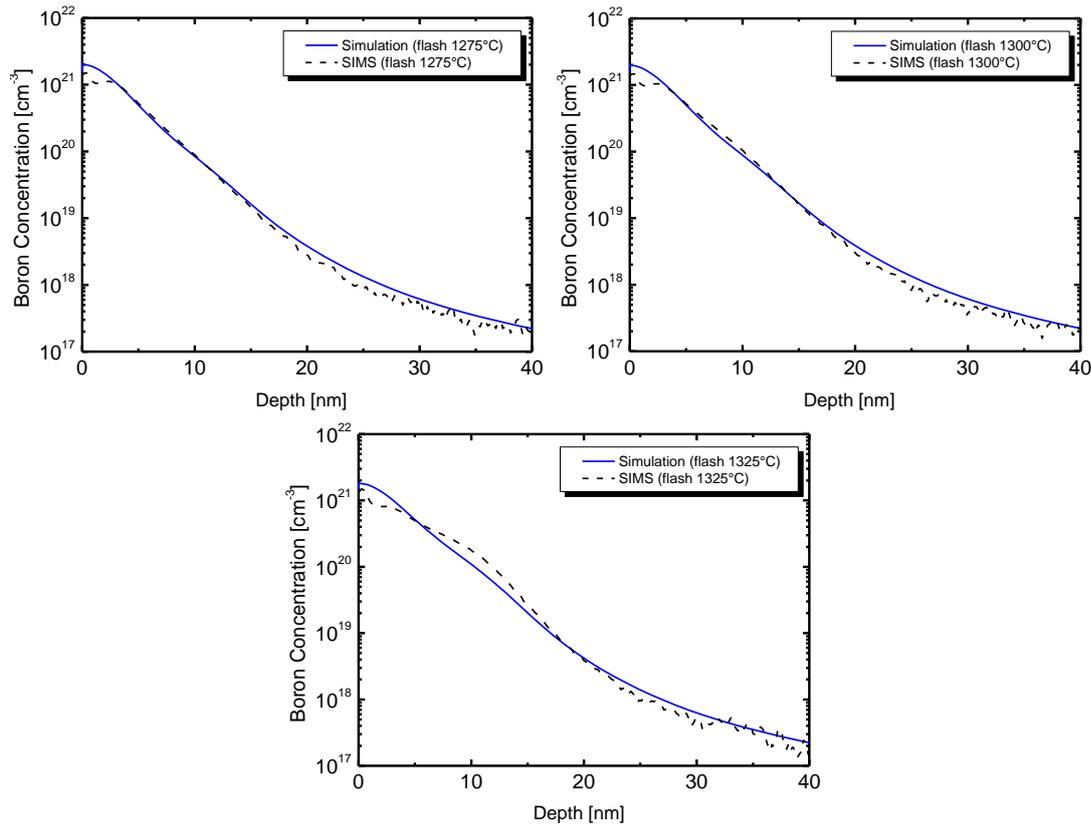
Des échantillons ont été implantés avec du bore et de l'arsenic à 0.5keV avec une dose de  $10^{15}$ at.cm<sup>-2</sup>. Les échantillons ont été respectivement soumis à des recuits flash à des températures de 1275, 1300 et 1325°C, avec des températures intermédiaires de 700°C pour le bore et 750°C pour l'arsenic. Le profil réel de la température des plaquettes en fonction du temps a été mesuré, puis utilisé dans les simulations. Cela nous a permis de simuler les mécanismes transitoires avec une grande précision. Nous nous intéresserons en particulier à la simulation des profils SIMS et des mesures de résistance carrée. Pour la simulation de l'implantation ionique, nous avons utilisé le modèle "+1". Nous avons gardé inchangé les paramètres ajustés de l'évolution des défauts étendus et de la diffusion et activation des dopants.

Penchons-nous d'abord sur les profils de bore et d'arsenic obtenus après implantation. Ils sont comparés aux résultats expérimentaux sur la Figure 69. Les profils d'implantation peuvent être simulés avec une bonne précision en ajustant les paramètres de la fonction analytique double-Pearson.



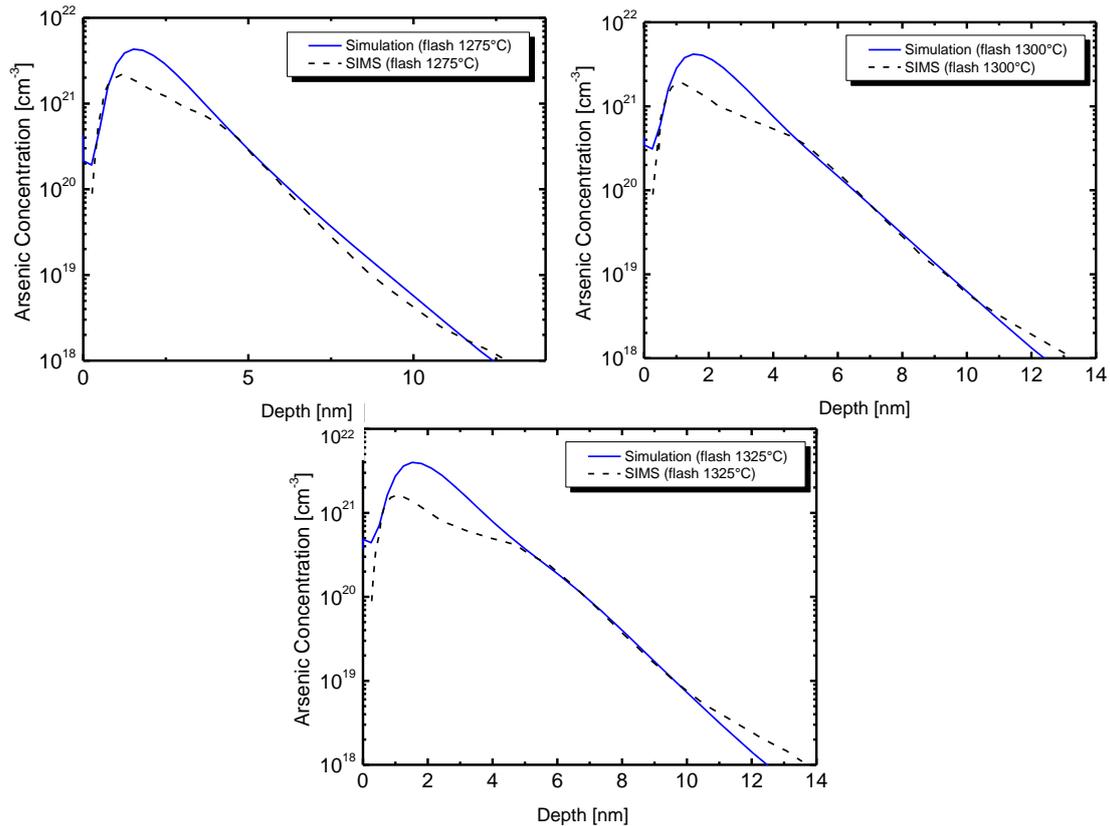
**Figure 69 : Profils après implantation de bore (a) et d'arsenic (b) simulés et comparés aux profils obtenus par analyse SIMS, pour une implantation de B, 0.5 keV,  $1 \times 10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>, et d'As 0.5 keV,  $1 \cdot 10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>.**

A propos des profils du bore après recuit, il est visible sur la Figure 70 que la profondeur et l'abrupteté des jonctions formées par implantation directe du bore suivi par un recuit d'activation flash sont bien reproduites par le modèle.



**Figure 70 :** Résultats obtenus pour un recuit flash à 1275°C (a), 1300°C (b) et 1325°C (c) après implantation de bore à 0.5keV avec une dose de  $1.10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>.

Pour l'arsenic, nous constatons que le profil SIMS présente un pic de concentration à la surface de l'échantillon c'est-à-dire l'interface oxyde native-silicium ( $\text{SiO}_2/\text{Si}$ ) (Figure 71) située à une profondeur d'environ  $x=1$ nm de la surface. L'interface est un site de piégeage de l'arsenic, accélérant sa diffusion à l'interface [27]. L'apparition de ce pic est le résultat d'un couplage de plusieurs phénomènes, en particulier la ségrégation et la redistribution des dopants au cours de la SPER 'Solid Phase Epitaxy Regrowth'. En effet, la couche amorphe créée par l'implantation d'arsenic est assez profonde pour rendre l'effet de la SPER significatif. En effet, lors de la recristallisation, une vague d'atomes d'arsenic est poussée vers la surface [28, 29] dû à l'effet 'chasse-neige' pendant le mouvement de l'interface a/c. Il en résulte le déplacement vers la surface du pic du profil observé expérimentalement [30]. Malheureusement, cette étape n'est pas prise en compte dans nos simulations et un modèle pour décrire la SPER est en cours de développement. Le phénomène de ségrégation à l'interface oxyde-silicium, présent tout au long du recuit est un phénomène continu. Une partie des atomes d'arsenic diffuse vers l'interface oxyde-silicium à la recherche de sites d'énergie minimale [31, 32]. La simulation de ce phénomène a été calibrée sur d'autres expériences.



**Figure 71 : Résultats obtenus pour un recuit flash à 1275°C (a), 1300°C (b) et 1325°C (c) après implantation d'arsenic à 0.5keV avec une dose de  $1.10^{15}$ at.cm<sup>-2</sup>.**

Finalement, la profondeur et l'abrupteté des jonctions formées par implantation directe de l'arsenic suivi d'un recuit d'activation flash sont bien reproduites par le modèle. Ce résultat a été obtenu en apportant un ajustement supplémentaire des agglomérats mixtes dopant-défauts. Seuls les paramètres de la réaction  $As_2V + I \Leftrightarrow As_2$  ont été modifiés.

Examinons maintenant les résistances par carré. Les valeurs calculées et mesurées sont indiquées sur la Figure 72. Un bon accord est obtenu entre les simulations et les expériences pour le bore. En ce qui concerne l'arsenic, un bon accord est également obtenu, toutefois les valeurs calculées montrent une plus forte dépendance de la température maximale que celles mesurées. Ce résultat est probablement dû à la solubilité limite de l'arsenic qui augmente lorsque la température augmente.

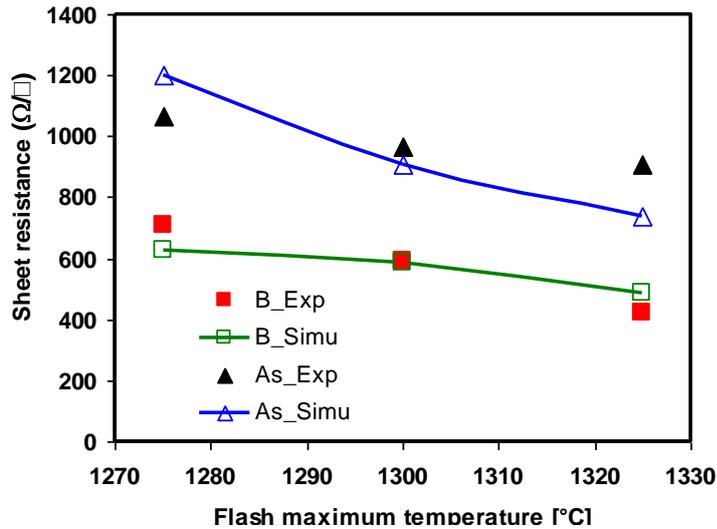


Figure 72 : Variation de la résistance par carré ( $\Omega/\square$ ) en fonction de la température d'un recuit flash. Comparaison des valeurs simulées aux valeurs mesurées.

## V MODELE RELATIF A L'INTERACTION DU BORE AVEC LES DEFAUTS ETENDUS

Sous certaines conditions de fabrication des jonctions ultras-fines p-n, en particulier de pré-amorphisation et d'implantation de bore, on assiste à l'apparition d'un pic anormal au niveau de la queue du profil de concentration, localisé au niveau des défauts EOR [33, 34] juste à l'arrière de l'ancienne interface a/c. Il est généralement admis dans la littérature que les atomes de bore piégés par les défauts EOR dans ce qu'on appelle le "pic de piégeage" sont immobiles et électriquement inactifs. Toutefois, les défauts EOR existent sous différents types: petites amas d'interstitiels (SMICs), les défauts {311} et les boucles de dislocation. Afin de reproduire et prédire de manière fiable ce phénomène, il est important de comprendre parmi ces défauts lesquels sont les plus efficaces à piéger les atomes de bore. Nous avons donc mis en place une expérience rigoureuse pour éclaircir ces points.

Colombeau et al. [34] ont élaboré un modèle de piégeage du bore. Les auteurs supposent que la capture des atomes de bore ne dépend que de la densité des SMICs. En raison de la nature intrinsèque du mécanisme de maturation d'Ostwald de l'évolution de défauts, ce modèle prédit donc systématiquement une décroissance de la valeur du pic de piégeage du bore lors de l'augmentation du budget thermique (la température ou le temps de recuit). Cependant, certaines données expérimentales [35] montrent que le pic de piégeage du bore peut avoir un comportement différent, par exemple, son amplitude augmente dès les premiers stades de recuit. Par conséquent, davantage de données et un modèle amélioré sont nécessaires pour prédire correctement le profil de diffusion du bore au voisinage de la région des défauts EOR.

Pour étudier le piégeage du bore par les défauts EOR, nous avons utilisé des structures dédiées dites 'profils plats', analysées par une combinaison de mesures SIMS et MET. Dans ce paragraphe, nous étudions, dans un premier temps, les modifications observées sur les profils du bore. Nous examinons alors l'influence que peut avoir le niveau du dopage sur les défauts EOR. A partir de ces observations, nous essayerons d'expliquer la présence du pic. Enfin nous détaillons comment ce type d'expérience nous a permis d'élaborer et ensuite implémenter dans Synopsys un modèle de piégeage du bore qui prend en compte l'influence directe des deux types de défauts : {311} et boucles de dislocation, et cela pour la première

fois. Les résultats montrent clairement que les défauts {311} sont plus efficaces à piéger les atomes de bore que les boucles de dislocation.

### V.1 Etude expérimentale

#### a- Méthodologie expérimentale et présentation des échantillons

La Figure 73 illustre schématiquement l'approche physique de notre étude. Afin de séparer les phénomènes liés au gradient de dopage et ceux dus uniquement aux défauts d'implantation, nous avons utilisé trois plaquettes de type p, orientées (100), deux sont dopées bore et la dernière est implantée au bore. En effet, pour examiner l'interaction du bore avec les défauts EOR, l'utilisation de plaquettes dopées simplifie la mise en place de l'expérience du bore et permet de les décorréler des effets induits par l'implantation de cet atome.

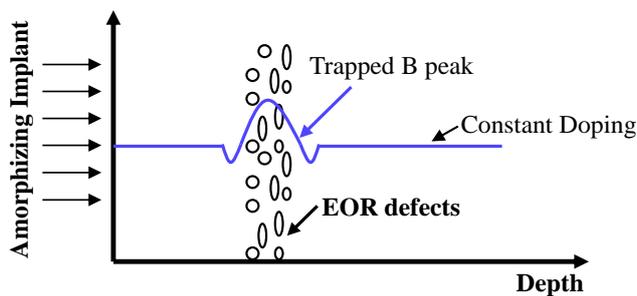


Figure 73 : Illustration schématique de la structure utilisée dans cette expérience et de la physique sous-jacente des conditions initiales pour étudier le piégeage du bore par les défauts EOR.

Il est important de noter que l'analyse des observations expérimentales existantes [36, 37, 38] suggère que l'évolution des défauts n'est pas affectée par la présence du bore pour des concentrations "modérées" de dopage. Par contre elle peut être fortement modifiée dans les échantillons dont la concentration de bore avoisine  $10^{19}$ - $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ . La limite inférieure de la concentration du bore nécessaire à modifier l'évolution des défauts n'est pas "absolue" et dépend généralement de la concentration d'interstitiels, et donc, des conditions de préamorphisation. Dans certains cas, l'effet peut être très prononcé et on n'observe pas d'amas d'interstitiels du à leur concentration ou taille inférieure à la résolution MET. En effet, lorsque la concentration de bore est suffisamment élevée, la formation des BICs intervient en plus de celle des défauts {311} et des boucles de dislocation. La quantité d'interstitiels présente dans le silicium est donc répartie entre les complexes de bore et les amas d'interstitiels [39].

L'expérience est basée sur trois échantillons représentés schématiquement dans la Figure 74.

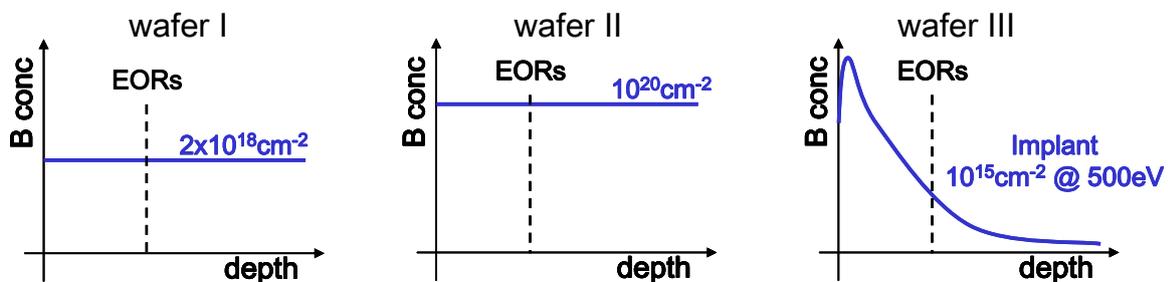


Figure 74 : Représentation schématique des trois structures utilisées dans cette étude.

Les deux premiers échantillons sont dopés bore et ont une concentration constante de  $\sim 2.10^{18}$   $\text{at.cm}^{-2}$  (échantillon I), et de  $\sim 1.10^{20}$   $\text{at.cm}^{-2}$  (échantillon II). Le troisième échantillon a

été implanté au bore à 0.5keV, avec une dose de  $1.10^{15}$ at.cm<sup>-2</sup> (échantillon III). Les trois échantillons ont été préamorphisés au Ge à 30keV, à dose de  $1.10^{15}$ at.cm<sup>-2</sup>, créant une couche amorphe homogène d'environ 50nm d'épaisseur (confirmé par des mesures en cross section MET (XTEM) (non représenté)). Des recuits rapides, sous azote, ont été ensuite effectués pour des températures de 700°C, 800°C et 900°C et des temps de 3s à 1000s. Les temps de recuit et les températures ont été choisis pour obtenir une répartition finale des défauts {311} et des boucles de dislocation facile à observer par MET.

### V.1.1 Analyse MET

Nous avons commencé notre analyse par le recuit à 300s puisque pour ce temps, différents types de défauts sont observés pour les trois températures utilisées dans notre expérience. La Figure 75 rassemble les images obtenues par MET de l'échantillon I (dopage constant nominal  $2.10^{18}$ cm<sup>-2</sup>) à 700°C (a), 800°C (b) et 900°C (c) après 300s.

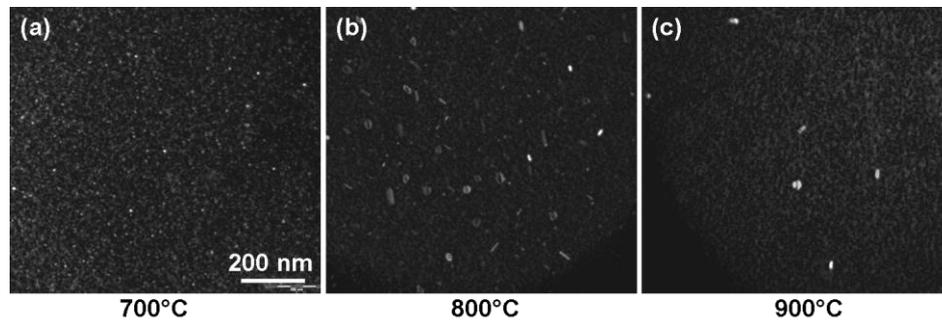


Figure 75 : Images par MET de l'échantillon I recuit pendant 300s à différentes températures : a) 700°C, b) 800°C, c) 900°C.

On constate que la forme et la densité des défauts varient d'un recuit à l'autre. À 700°C seuls les défauts {311} sont identifiés puisque leur énergie de formation à 700°C est très favorable si on la compare à celle des boucles de dislocation parfaites (PDL) et fautées (FDL). A 800°C des FDLs et PDLs sont visibles (de forme circulaire ou elliptique) et cohabitent avec les défauts {311}. À 900°C seules les boucles de dislocation (notamment FDL), plus stables à haut recuit thermique, sont observées.

Nous avons également comparé la densité des défauts dans les trois échantillons recuits à 700°C. Les images obtenues par MET sont présentées sur la Figure 76.

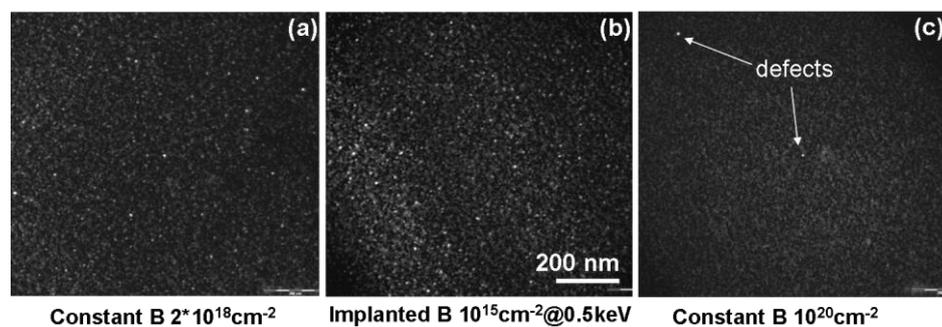


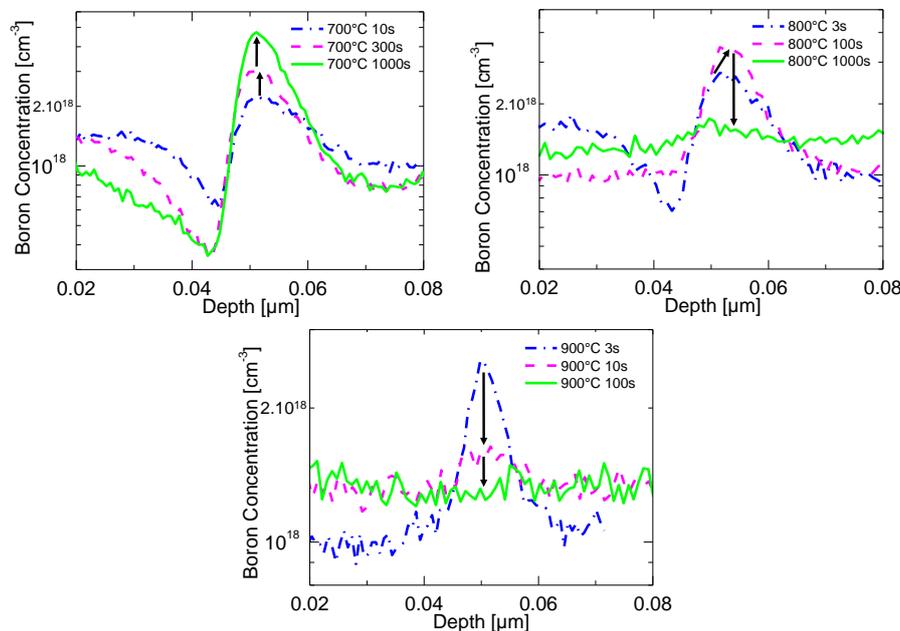
Figure 76 : Images par MET de a) l'échantillon I, b) l'échantillon III et c) l'échantillon II recuits pendant 300sec à 700°C.

On remarque qualitativement que les échantillons I (Figure 76.a) et III (Figure 76.b) présentent des densités de défauts équivalentes alors que l'échantillon II (Figure 76.c) a une

densité de défauts nettement inférieure. Il faut également noter que les mesures SIMS extraites de l'échantillon implanté (III) montrent que la concentration de bore au voisinage de la bande de EOR à 700°C est comprise entre  $8.10^{16} \text{at.cm}^{-3}$  et  $3.10^{17} \text{at.cm}^{-3}$  pour les temps de recuit entre 10s et 1000s, un ordre de grandeur inférieur à l'échantillon I. Ainsi, la distribution similaire des défauts dans les échantillons I et III montre que leur évolution n'est pas affectée par la présence du bore contrairement à l'échantillon II.

### V.1.2 Analyse SIMS

La Figure 77 présente les profils SIMS de bore obtenus pour l'échantillon I dopé bore  $1.10^{18} \text{at.cm}^{-3}$  et recuit à 700, 800 et 900°C, pour plusieurs périodes. Tous les profils montrent un pic localisé à 50 nm de la surface. Il est donc positionné au niveau de l'ancienne interface a/c où se situent les défauts de fin de parcours. Ce résultat met en évidence le phénomène du piégeage du bore par les EOR.



**Figure 77:** Profils SIMS de l'échantillon I recuit pendant plusieurs temps à a) 700°C, b) 800°C et c) 900°C.

A 700°C, la concentration des atomes de bore piégés dans le pic augmente continuellement au cours du temps (cf. Figure 77.a). En même temps, à cette température, les données MET montrent que seuls les défauts  $\{311\}$  sont visibles en grand nombre et grandissent en taille et diminuent en densité avec le temps de recuit. Ces résultats indiquent que les défauts  $\{311\}$  contribuent activement à la formation du pic. A 800°C, la Figure 77.b montre que le pic de bore augmente initialement avant de diminuer au cours du temps. A 900°C, le pic décroît systématiquement en fonction du temps (Figure 77.b). Les analyses MET indiquent qu'à 900°C, seules les boucles de dislocation sont visibles et grandissent en taille et leur densité diminue au cours de recuit, en analogie avec le comportement des défauts  $\{311\}$  à 700°C. D'autre part, une évolution plus complexe est observée à 800°C, avec les défauts  $\{311\}$  qui représentent initialement la grande majorité de la population de défauts et qui se transforment progressivement en boucles de dislocation.

Pour faciliter l'analyse des variations du pic de bore au cours du temps, un graphique montrant l'évolution temporelle de la concentration maximale du bore piégé dans le pic est indiqué sur la Figure 78 pour 700°C (bleu), 800°C (en vert) et 900°C (rouge).

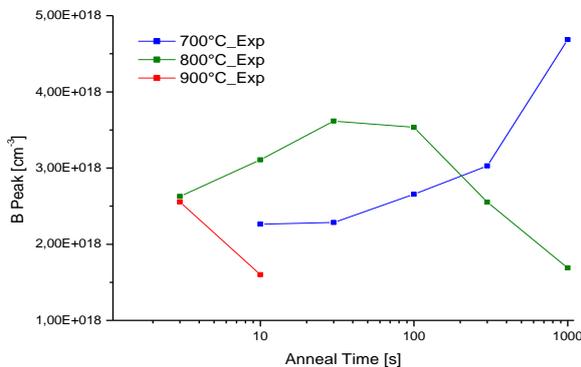


Figure 78 : variation du maximum du pic au cours du temps pour le substrat dopé à  $2 \times 10^{18} \text{at.cm}^{-3}$  (échantillon I).

A 900°C, la concentration de pic maximale atteinte au bout de 3s de recuit, reste inférieure à celle des autres températures, de plus son amplitude décroît au bout de quelques secondes de recuit. Dans le même temps, à cette température les boucles de dislocation sont toujours visibles (Figure 75.c) pour des temps allant jusqu'à quelques centaines de secondes. Cela indique que la contribution des boucles dans le piégeage du bore est moins prononcée que celle des défauts {311} et que le pic apparaissant au début du recuit pourrait en fait être associée à la présence initiale de défauts {311} qui se transforment entièrement en boucles après quelques secondes de recuit à 900°C. Cette hypothèse est compatible avec la tendance observée à 800°C où la valeur du maximum du pic commence à diminuer à un stade avancé du recuit. En effet, on peut considérer que la transformation des défauts {311} en boucles a lieu à des temps de recuit plus longs à 800°C par rapport au recuit à 900°C.

Sur la Figure 79, nous présentons les profils SIMS de l'échantillon II dopé au bore à  $1 \times 10^{20} \text{at.cm}^{-2}$  ayant subi un recuit à 900°C. On peut constater que l'amplitude du pic de bore ne cesse d'augmenter au cours du temps de recuit. Ce comportement est également observé pour les autres températures de recuit.

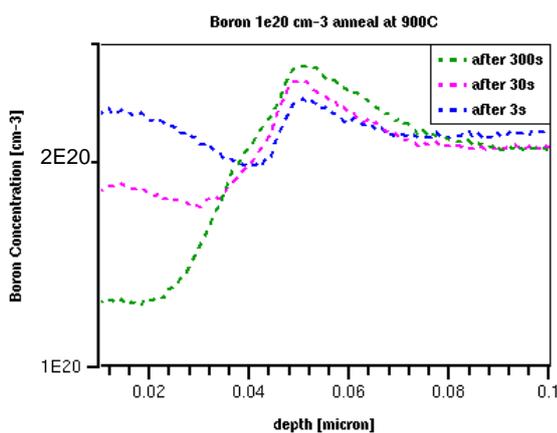


Figure 79 : Profils SIMS de bore de l'échantillon II à 900 °C.

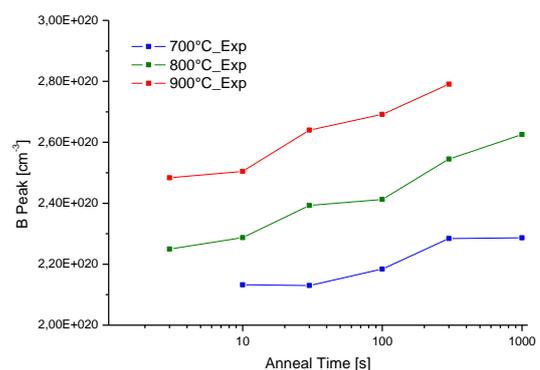


Figure 80 : variation du maximum du pic au cours du temps pour le substrat dopé à  $1.10^{20} \text{at.cm}^{-3}$  (échantillon II).

L'évolution temporelle de la concentration maximale du bore contenu dans le pic de l'échantillon II est indiquée sur la Figure 80 pour différentes températures. En se référant plus particulièrement à 800 et 900°C l'allure du pic de bore est différente de celle observée dans

l'échantillon I. En outre, nous avons montré qu'une faible concentration de défauts est observée par MET dans l'échantillon II. Ainsi, il est plus raisonnable de penser que ces pics sont associés à la formation des BICs, qui favorisée par la forte concentration de bore du substrat. Il en résulte l'évolution temporelle du pic qui continue d'augmenter à 800 et 900°C (Figure 80), puisque les BICs mettent plus de temps à se dissoudre que les défauts {311} et les boucles de dislocation.

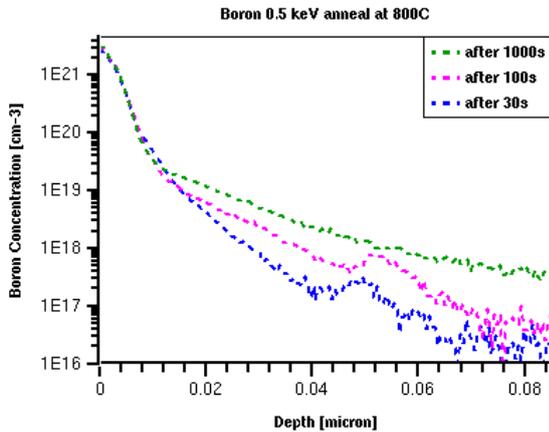


Figure 81 : Profils SIMS de bore de l'échantillon III à 800°C.

Les profils SIMS relatifs à l'échantillon III implanté au bore à 0.5keV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ , sont présentés sur la Figure 81. Dans ce cas particulier le piégeage du bore et la diffusion se produisent simultanément. Comme noté plus haut, l'évolution des défauts dans ce cas n'est pas affectée par la formation des BICs et le même raisonnement que l'échantillon I s'applique. On peut constater alors que le pic des profils de bore, formé à la position de la bande de défauts EOR, croit au début de recuit et commence à décroître au delà de 100s à 800°C, cette même tendance a été relevée pour l'échantillon I à 800°C. Le même accord entre les échantillons I et III est obtenu à 700°C et 900°C.

Les résultats montrent clairement que les défauts {311} sont plus efficaces que les boucles de dislocation à piéger les atomes de bore.

## V.2 Description du modèle

Afin de modéliser le piégeage des atomes de bore par les défauts EOR, certaines hypothèses simplificatrices ont été posées. D'abord seuls les paires BI neutres ( $\text{BI}^+$ ) peuvent être capturées et émises par les défauts étendus. Les petits amas d'interstitiels ( $\text{I}_2, \text{I}_3, \text{I}_4$ ) ne contribuent pas au phénomène du piégeage et seuls les défauts {311} ou les boucles de dislocation peuvent capturer les paires BI mobiles comme schématisé sur la Figure 82. On suppose enfin que les paires  $\text{BI}^+$  piégées sont situées le long du périmètre des défauts.

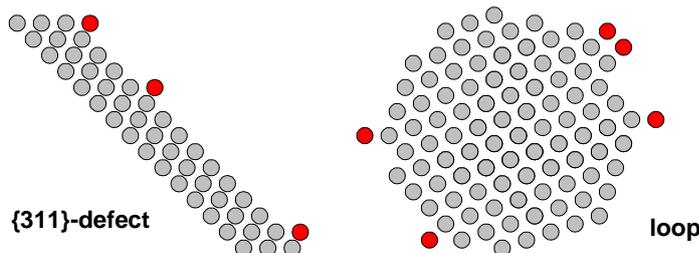


Figure 82 : Sites pièges des  $\text{BI}^+$  (rouge) par les défauts {311} et les boucles de dislocation, projetés selon les plans  $\langle 311 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ , respectivement. Pour les deux types de défauts, le nombre de sites pièges est proportionnel au périmètre des défauts selon le plan donné.

Nous définissons d'abord l'efficacité d'un défaut étendu à capturer une paire BI comme le ratio,  $\alpha_{Bdefect}^{max}$ , entre le nombre de pièges disponibles le long des bords du défaut et le nombre total d'atomes interstitiels contenu dans le défaut.  $\alpha_{Bdefect}^{max}$  est donnée par la formule suivante:

$$\text{Équation 100} \quad \alpha_{B311}^{max} = \frac{2 \cdot \sqrt{\rho_{311}} \cdot (L_{311} + w_{311})}{w_{311} \cdot L_{311} \cdot \rho_{311}}$$

où  $w_{311}$  est la largeur du défaut {311} dans le plan  $\langle 311 \rangle$  ( $w_{311} = 4 \text{ nm}$  [40]),  $\rho_{311} = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  est la densité des interstitiels dans un défaut {311}, et par conséquent,  $\sqrt{\rho_{311}}$  est la densité linéaire des interstitiels dans un défaut {311}.  $L_{311}$  est la longueur moyenne des défauts {311} et peut être calculée comme suivant:

$$\text{Équation 101} \quad L_{311} = \frac{C_{311}}{w_{311} \cdot \rho_{311} \cdot D_{311}}$$

où  $C_{311}/D_{311}$  représente le nombre moyen d'interstitiels piégés dans un défaut {311}.

Pour les boucles de dislocation, la définition de  $\alpha_{Loop}^{max}$  est la suivante:

$$\text{Équation 102} \quad \alpha_{BDL}^{max} = \frac{2\pi \cdot R_{Loop} \cdot \sqrt{d_{111}}}{\pi R_{Loop}^2 \cdot d_{111}} = \frac{2}{R_{Loop} \cdot \sqrt{d_{111}}}$$

où  $R_{Loop}$  est le rayon moyen des boucles de dislocation, donné par:

$$\text{Équation 103} \quad R_{Loop} = \sqrt{\frac{C_{Loop}}{2 \cdot \pi \cdot d_{111} \cdot D_{Loop}}}$$

avec  $C_{Loop}/D_{Loop}$  est le nombre moyen d'interstitiels piégés dans les boucles de dislocation et  $d_{111} = 1,57 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  est la densité planaire des atomes dans le plan {111} du silicium.

Nous supposons en outre que les taux de capture dépendent de la diffusivité et de la concentration des sites libres de piégeage des BI par les bords des défauts {311} et des boucles de dislocation, respectivement.

Le taux de capture de BI par les défauts {311} peut être exprimé par :

$$\text{Équation 104} \quad K_{311}^{cap} = 4\pi \cdot r_{B311}^{cap} \cdot D^{BI} \cdot C_{BI} \cdot C_{B311}^*$$

où  $r_{B311}^{cap}$  est le rayon de capture,  $D^{BI}$  est la diffusivité des paires  $BI^+$ ,  $C_{BI}$  est la concentration de  $BI^+$ ,  $C_{B311}^* = \alpha_{B311}^{max} \cdot C_{311} - C_{B311}$  est la concentration de sites libres de piégeage des BI par les défauts {311}. Le rayon de capture est un paramètre d'ajustement du modèle dont la valeur est proche de la distance interatomique dans le réseau Si ( $\sim 1 \text{ \AA}$ ).

Le taux de capture de BI au niveau du périmètre des boucles peut être également exprimé par:

$$\text{Équation 105} \quad K_{Loop}^{cap} = 4\pi \cdot r_{BDL}^{cap} \cdot D^{BI} \cdot C_{BI} \cdot C_{BLoop}^*$$

Une fois de plus,  $r_{BDL}^{cap}$  est un paramètre d'ajustement. Il est proche de la distance interatomique dans le réseau Si. La concentration total de sites de piégeage libre autour des boucles,  $C_{Loop}^*$ , est obtenu par:  $C_{BLoop}^* = \alpha_{BLoop}^{max} \cdot C_{Loop} - C_{BLoop}$

Le taux d'émission des BI capturés par les défauts {311} et les boucles sont simplement proportionnel au nombre de BI piégés:

$$\text{Équation 106} \quad E_{311}^{BI} = e_{311}^{BI} \cdot C_{B311}, \quad E_{BDL}^{BI} = e_{BDL}^{BI} \cdot C_{BDL}$$

où  $e_{311}^{BI}$  et  $e_{BDL}^{BI}$  sont les paramètres les plus importants pour l'ajustement du modèle. Puisque le mécanisme d'émission comporte une barrière de réaction, il est donc exprimé sous forme de fonction d'Arrhenius.

En conclusion, le modèle a quatre paramètres de calibration :  $r_{B311}^{cap}$ ,  $r_{BDL}^{cap}$ ,  $e_{311}^{BI}$  et  $e_{BDL}^{BI}$ , dont les valeurs doivent être déterminées à partir des données expérimentales.

### V.3 Simulation

Nous avons ajusté et validé les paramètres du modèle en simulant les échantillons décrits dans cette étude à l'aide du logiciel Sentaurus Processus [41]. Dans le modèle relatif au amas d'interstitiels, les défauts {311} et les boucles de dislocation peuvent capturer ou libérer des auto-interstitiels. Par conséquent, lors de l'implémentation du modèle relatif au piégeage de bore, les paires  $B\text{I}^+$  libres et les auto-interstitiels interagissent de façon indépendante avec les défauts {311} et les boucles de dislocation. Les paramètres de calibration utilisés dans les simulations sont présentés dans le tableau suivant:

Nom du paramètre	Valeur
$W_{311}$	4nm
$r_{B311}^{cap}$	0.06nm
$e_{311}^{BI}$ (T)	$3.92 \times 10^{18} \exp(4.45/kT)$

Tableau 7 : les paramètres de calibration relative au modèle de piégeage de bore.

Les résultats des simulations pour les échantillons I et III sont reportés respectivement sur les Figure 83 et Figure 84. Le phénomène observé dans ces échantillons peut être associé à la capture et à l'émission des atomes de bore par les défauts {311} formés dans la région EOR. L'allure générale est bien reproduite par les simulations pour les trois températures étudiées.

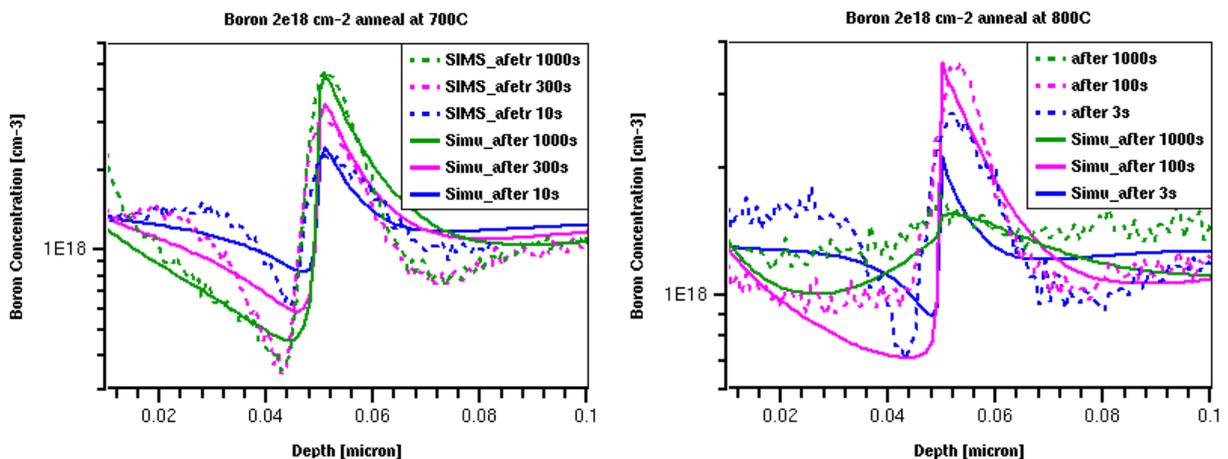


Figure 83 : Profils de bore de l'échantillon I à a) 700°C et b) 800°C. Les lignes en pointillés représentent les résultats expérimentaux et les lignes continues représentent les résultats de simulation.

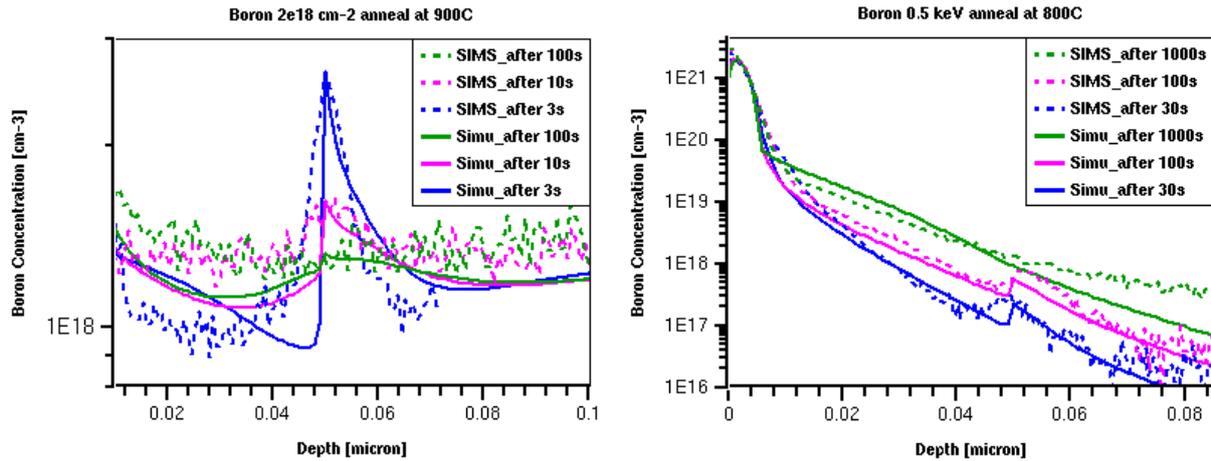


Figure 84 : Profils de bore de a) l'échantillon I à 900°C et b) l'échantillon III à 800°C. Les lignes en pointillés représentent les résultats expérimentaux et les lignes continues représentent les résultats de simulation.

L'évolution temporelle de l'amplitude du maximum du pic pour l'échantillon I est indiquée dans la Figure 85. On obtient une bonne concordance entre les expériences et les simulations.

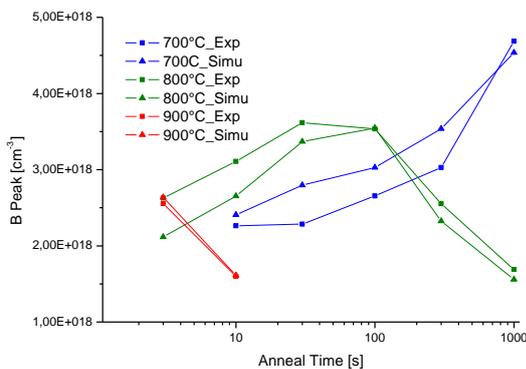


Figure 85: variation du maximum du pic au cours du temps pour le substrat dopé à  $2 \times 10^{18} \text{at.cm}^{-3}$  (échantillon I). Comparaison entre les résultats expérimentaux et les simulations.

Les données relatives à l'échantillon III sont présentées sur la Figure 86. La variation du pic contrôlée par la formation des BICs est reproduite qualitativement (i.e. le pic de piégeage augmente continuellement avec le temps de recuit, contrairement au cas de faible concentration de bore). Nous attribuons cette différence à un ajustement insuffisamment précis des agglomérats mixtes  $B_nI_m$ . En outre, avec ou sans modèle du piégeage de bore, les simulations donnent les mêmes résultats, ce qui indique que les pics de bore résultants sont uniquement dus à la formation de BICs.

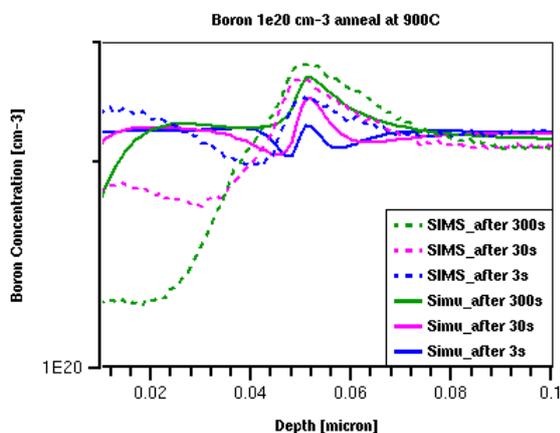


Figure 86 : profils de bore de l'échantillon II à 900°C. Les lignes en pointillés représentent les résultats expérimentaux et les lignes continues représentent les résultats de simulation.

#### V.4 Conclusion

Nous avons étudié l'agglomération du bore au niveau de la zone où l'on rencontre les défauts EOR. Nous avons montré, grâce à une étude expérimentale rigoureuse, que l'évolution du pic de bore est contrôlée par l'évolution des défauts  $\{311\}$  et que la contribution des boucles de dislocation à capturer les atomes de bore est moins prononcée.

Un modèle analytique basé sur de simples hypothèses physiques pour décrire le phénomène du piégeage du bore au niveau des défauts  $\{311\}$  et des boucles de dislocation a été élaboré en tenant compte de la géométrie des défauts EOR. Les espèces piégées sont représentées par des paires neutres BI qui peuvent être capturées par les deux types de défauts étendus (défauts  $\{311\}$  et boucles de dislocation). Après ajustement, le modèle reproduit précisément l'évolution complexe du pic de bore à la fois en fonction du temps de recuit et de la température. Les simulations confirment que l'évolution du pic de bore est étroitement liée à l'évolution des défauts  $\{311\}$ , ce qui suggère donc que le piégeage du bore est associé à la capture et l'émission de bore par les défauts  $\{311\}$  formés dans la région EOR. Finalement, pour les faibles concentrations de bore, les simulations montrent que le pic de bore est dû au phénomène du piégeage alors que ce sont les BICs qui contrôlent le pic pour le substrat le plus dopé (concentrations élevées de bore).

## REFERENCES DU CHAPITRE IV

- 1 N.E.B. Cowern, G. Mannino, P. A. Stolk, F. Roozeboom, H. G. A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristiano, A. Claverie and M. Jaraiz, "Energetics of Self-Interstitial Clusters in Si", *Phys. Rev. Lett.*, 82(22), p. 4460 (1999).
- 2 A. E. Michel, W. Rausch, P. A. Ronsheim and R. H. Kastl, "Rapid annealing and the anomalous diffusion of ion implanted boron into silicon", *Appl. Phys. Lett.*, 50(7), p. 416 (1987).
- 3 P. Stolk, H.-J. Gossmann, D.J. Eaglesham, D.C. Jacobson, C.S. Rafferty, G.H. Gilmer, M. Jaraiz, J.M. Poate, H.S. Luftman, and T.E. Haynes, "Physical mechanisms of transient enhanced dopant diffusion in ion-implanted silicon", *J. Appl. Phys.* 81, p. 6031 (1997).
- 4 C. Ortiz, P. Pichler, F. Cristiano, B. Colombeau, N.E.B. Cowern, A. Claverie, "A physically based model for the spatial and temporal evolution of self-interstitial agglomerates in ion-implanted silicon", *J. Appl. Phys.* 96, p. 4866 (2004).
- 5 D. J. Eaglesham, P. A. Stolk, H.-J. Gossmann and J. M. Poate, "Implantation and transient B diffusion in Si : The source of the interstitials", *J. Appl. Phys.*, 65(18), p. 2305 (1994).
- 6 N.E.B. Cowern, D. Alquier, M. omri, A. claverie and A. Nejim, "Transient enhanced diffusion in preamorphized silicon : the role of the surface", *Nucl. inst. Meth. Phys. Res. B*, 148(1-4), 257 (1999).
- 7 Y. Lamrani, "Contribution à l'étude expérimentale et à la simulation de la diffusion anormale du bore dans le silicium", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2005).
- 8 P. Calvo, "Evolution cinétique des défauts {113} en cours de recuit thermique de Silicium implanté : Influence sur la diffusion des dopants", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2004).
- 9 S. Boninelli, N. Cherkashin, A. Claverie, F. Cristiano, "Evidences of an intermediate rodlike defect during the transformation of {113} defects into dislocation loops", *Appl. Phys. Lett.* 89, p. 161904 (2006).
- 10 N.E.B. Cowern, G.F.A. van de Walle, D.J. Gravesteijn and C. J. Vriezema, "Experiments on atomic-scale mechanisms of diffusion", *Phys. Rev. Lett.*, 67(2), p. 212 (1991).
- 11 N.E.B. Cowern, G.F.A. van de Walle, P.C. Zalm and D.J. Oostra, "Reactions of point defects and dopant atoms in silicon", *Phys. Rev. Lett.*, 69(1), p. 116 (1992).
- 12 A. Ural, "Atomis-scale mechanisms of dopant and self diffusion in silicon", Ph.D. thesis, Standford university (2001).
- 13 L. Pelaz, M. Jaraiz, G.H. Gilmer, H.J. Gossmann, C.S. Rafferty, D.J. Eaglesham and J. M. Poate, "B diffusion and clustering in ion implanted Si : The role of B cluster precursors", *Appl. Phys. Lett.*, 70(17), p. 2285 (1997).
- 14 J. Schermer, A. Martinez-Limia, P. Pichler, C. Zechner, W. Lerch, S. Paul, "On a computationally efficient approach to boron-interstitial clustering", *Solid-State Electronics* 52, p. 1424-1429 (2008).

- 15 P. Pichler, A. Burenkov, W. Lerch, J. Lorenz, S. Paul, J. Niess, Z. Nenyeyi, J. Gelpey, S. McCoy, W. Windl, and L. F. Giles, "Process-induced diffusion phenomena in advanced CMOS technologies", in *Diffusion in Solids and Liquids*, ser. Defect and Diffusion Forum, A. Öchsner and J. Gracio, Eds., vol. 258-260, p. 510–521 (2006).
- 16 A. Tasch, H. Shin, C. Park, J. Alvis, and S. Novak, "An Improved Approach to Accurately Model Shallow B and BF<sub>2</sub> Implants in Silicon", *J. Electrochemical Society*, vol. 136, pp.810-814 (1989).
- 17 C. Zechner, A. Erlebach, A. Terterian, A. Scholze, M. Johnson, "New Implantation Tables for B, BF<sub>2</sub>, P, As, In, and Sb", 14<sup>th</sup> Internat. Conf. on Ion Impl. Technol. Proceedings (IIT 2002), Taos, USA, p. 567 (2002).
- 18 P. Kalra, P. Majhi, H.-H. Tseng, R. Jammy, T.-J. K. Liu, "Optimization of Flash Annealing Parameters to Achieve Ultra-Shallow Junctions for sub-45nm CMOS", *MRS Proceedings*, Vol. 1070, Warrendale, PA: Materials Research Society, p. 6 pg (2008).
- 19 A. Usami, Y. Tokuda, M. Katayama, S. Kaneshima, and T. Wada, "Studies of deep-level defects in flash lamp annealing of ion-implanted silicon", *J. Phys. Appl. Phys.* 19, p. 1079-1089 (1986).
- 20 S. B. Felch, D. F. Downey, E. A. Arevalo, S. Talwar, C. Gelatos, and Y. Wang, "Sub-melt laser annealing followed by low-temperature RTP for minimized diffusion", in *Conf. Ion Implantation Technology*, pp. 167–170 (2000).
- 21 R.A. Camillo-Castillo, M.L. Law, K.S. Jones, L. Radic, R. Lindsay, and S. McCoy, "Kinetics of the end of range damage dissolution in flash-assist rapid thermal processing", *Appl. Phys. Lett.*, 88, p. 232104 (2006).
- 22 S. H. Jain, P. B. Griffin, J. D. Plummer, S. McCoy, J. Gelpey, T. Selinger, and D. F. Downey, "Low resistance, low-leakage ultrashallow p -junction formation using millisecond flash anneals" *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 52, no. 7, pp. 1610–1615 (2005).
- 23 A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag and F. Cristiano, "Extended defects in shallow implants", *Appl. Phys. A* 76, 1025-1033 (2003).
- 24 N.E.B. Cowern, D. Alquier, M. Omri, A. Claverie, and A. Nejim, "Transient enhanced diffusion in preamorphized silicon: the role of the surface", *Nucl. Instr. Meth.*, B148, p. 257 (1999).
- 25 Sentaurus Process User Guide, Version Z-2007.03, Synopsys Inc., Mountain View, CA (2007).
- 26 Information on <http://www.srim.org/>
- 27 S. Solmi and M. Ferri, M. Bersani, D. Giubertoni and V. Soncini, "Transient enhanced diffusion of arsenic in silicon", *J. Appl. Phys.*, 94(8), p. 4950 (2003).
- 28 P. Fastenko, S.T. Dunham and B. Murphy, "Modeling of initial stages of annealing for amorphizing arsenic implants", *IEEE*, p. 171 (2000).
- 29 V.C. Venezia, R. Duffy, L. Pelaz, M. Aboy, "Dopant redistribution effects in preamorphized silicon during low temperature annealing", *IEDM proceedings*, 489 (2003).
- 30 W. Lerch, S. Paul, J. Niess, S. McCoy, J. Gelpey, D. Bolze, F. Cristiano, F. Severac, P.F. Fazzini, A. Martinez, P. Pichler, "Advanced Activation and Deactivation of Arsenic-

- Implanted Ultra-Shallow Junctions using Flash and Spike + Flash Annealing", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Advanced Thermal Processing of Semiconductors, IEEE p.191-196 (2007).
- 31 C. Steen, P. Pichler, H. Ryssel, L. Pei, G. Duscher, M. Werner, J. A. van den Berg, and W. Windl "Characterization of the Segregation of Arsenic at the Interface SiO<sub>2</sub>/Si", Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 994, 0994-F08-02 (2007).
- 32 C. Steen, A. Martinez-Limia, P. Pichler, H. Ryssel, L. Pei, G. Duscher, W. Windl, "Characterization of the pile-up of As at the SiO<sub>2</sub>/Si interface", ESSDERC 2007, IEEE p. 267 (2007).
- 33 R. Duffy, V.C. Venezia, A. Heringa, T.W.T. Husken, M.J.P. Hopstaken, N.E.B. Cowem, P.B. Griffin, C.C.Wang, "Boron uphill diffusion during ultrashallow junction formation", Appl. Phys. Lett. 82, p. 3647 (2003).
- 34 B. Colombeau, A.J. Smith, N.E.B. Cowern, B.J. Pawlak, F. Cristiano, R. Duffy, A. Claverie, C.J. Ortiz, P. Pichler, E. Lampin, and C. Zechner, "Current Understanding and Modeling of B Diffusion and Activation Anomalies in Preamorphized Ultra-Shallow Junctions", Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 810, C3.6 (2004).
- 35 J. Xia, T. Saito, R. Kim, T. Aoki, Y. Kamakura, K. Taniguchi, "Boron segregation to extended defects induced by self-ion implantation into silicon", J. Appl. Phys. 85, p. 7597 (1999).
- 36 T. E. Haynes, D. J. Eaglesham, P. A. Stolk, H.-J. Gossmann, D. C. Jacobson, and J. M. Poate, "Interactions of ion-implantation-induced interstitials with boron at high concentrations in silicon", Appl. Phys. Lett. 69 (10), p. 1376 (1996).
- 37 C. Bonafos, "Rôle des défauts End-Of-Range dans la diffusion anormale du bore dans le silicium". Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse (1996).
- 38 D. Alquier, Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (1998).
- 39 R. A. Camillo-Castrillo, M. E. Law, K. S. Jones, "Impact of dopant profiles on the end of range defects for low energy germanium preamorphized silicon", Mat. Sc. and Eng. B, vol. 114-115, p. 312-317 (2004).
- 40 A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag and F. Cristiano, "Extended defects in shallow implants", Appl. Phys. A 76, p. 1025 (2003).
- 41 Sentaurus Process User Guide, Version Z-2007.03, Synopsys Inc., Mountain View, CA, 2007.

# **Chapitre V**

**Défauts étendus et diffusion  
dans le SOI : Caractérisation  
et modélisation du rôle de  
l'interface Si/SiO<sub>2</sub>**



## CHAPITRE V : DEFANTS ETENDUS ET DIFFUSION DANS LE SOI : CARACTERISATION ET MODELISATION DU ROLE DE L'INTERFACE Si/SiO<sub>2</sub>

### I INTRODUCTION

L'utilisation des substrats silicium sur isolant (SOI) offre des avantages importants pour la fabrication des futures générations de dispositifs CMOS [1], tels qu'une réduction des effets de canal court, un gain en vitesse des circuits et une faible fuite de jonction [2]. Ces substrats permettent aussi de réduire la quantité d'interstitiels de silicium créée au cours de l'étape d'implantation source/drain, par recombinaison à l'interface Si/BOX. Il en résulte un meilleur contrôle de plusieurs effets néfastes, tels que la formation des défauts étendus [3, 4], la désactivation des dopants [5] et la TED [6].

Nous avons dédié le 4<sup>ème</sup> chapitre de cette thèse à l'inspection de la relation existante entre les évolutions thermiques de la TED et des défauts étendus dans le silicium. Cette étude se poursuit par l'extension des modèles de simulation dans le silicium, en particulier la relation entre défauts, diffusion et activation, aux nouveaux matériaux SOI. Ce matériau se distingue du silicium par la présence de l'interface Silicium/Oxyde Enterré (Si/BOX). Il est donc primordial de quantifier d'une façon fiable l'effet de cette interface afin de pouvoir en tenir compte dans les simulations.

L'étude de l'effet de l'interface sur l'évolution des défauts ponctuels générés par implantation ionique peut être envisagée selon deux axes : défauts étendus et/ou TED. Cet effet a été largement étudié dans la littérature et, à l'exception de quelques articles suggérant que l'interface n'a pas ou peu d'influence sur la diffusion des dopants [7] ou a un effet de réflexion par miroir pour les interstitiels, la grande majorité des articles de la littérature montrent qu'elle agit comme un piège fort pour les interstitiels [3, 4, 5, 6, 8, 9, 10]. Plusieurs phénomènes physiques ont été mis en jeu dans ces études donnant une preuve plus ou moins directe de la recombinaison des interstitiels à l'interface Si/BOX. Dans certains cas, une estimation quantitative de la longueur de recombinaison des interstitiels à l'interface,  $L_{int}$ , a également été proposée. Ogura et al. [11] ont étudié l'effet de l'interface en observant la ségrégation des dopants à l'interface Si-SiO<sub>2</sub> par les mesures SIMS. Cette technique d'analyse pose quelques difficultés dans ce type d'étude à cause des effets de matrice lors du changement de matériau à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. De plus, le résultat obtenu dépend aussi fortement de la méthode de fabrication du SOI. La désactivation du bore en raison des atomes de silicium interstitiels émis par les défauts de fin de parcours [5, 10] a aussi été utilisée pour quantifier l'effet de l'interface. Ceci requiert l'utilisation concomitante de mesures structurales et électriques (TEM, SIMS, effet Hall), et plusieurs hypothèses fortes pour leur modélisation quantitative.

Les études de diffusion des dopants, en particulier lorsqu'elles sont basées sur le dopage in-situ bore de couches minces de silicium déposées par CVD, fournissent l'estimation la plus fiable de  $L_{int}$ , car elles reposent uniquement sur des mesures SIMS et sur la modélisation de

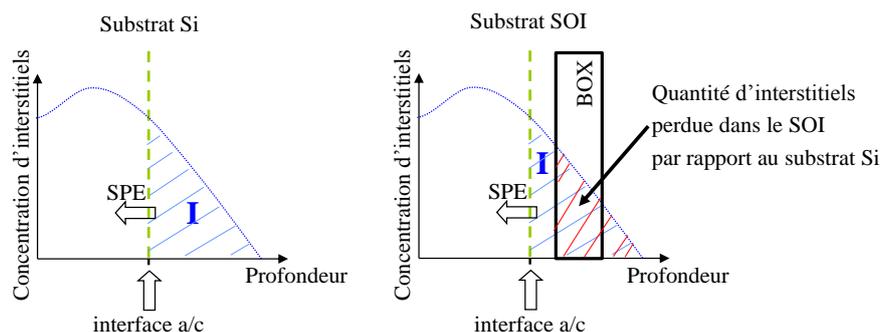
la diffusion des dopants. En effet, elles ont été utilisées dans le passé pour montrer et quantifier la recombinaison des interstitiels à la surface de silicium ( $L_{surf}$ ) [12, 13, 14, 15]. Cette méthode a été utilisée dans le passé mais principalement, pour étudier l'OED (Oxydation Enhanced Diffusion) [8], il en résulte des valeurs de  $L_{int}$  ( $> 1\mu\text{m}$  en-dessus de  $800^\circ\text{C}$ ) beaucoup plus grandes que les valeurs proposées dans les études fondées sur d'autres méthodes dans le SOI ( $L_{int} < 10\text{ nm}$  [5, 9, 10]).

Le but de ce chapitre est d'étudier l'effet de l'interface Si/BOX sur la TED de marqueurs de bore dans des substrats SOI. Toutefois, la compréhension du phénomène de la TED dans les substrats SOI passe forcément par une description précise de l'évolution thermique des défauts étendus dans ces substrats. La TED et l'évolution des défauts étendus sont en fait deux phénomènes concomitants, qui s'accompagnent d'une sursaturation en atomes de Silicium interstitiels. Ainsi, la première partie de ce chapitre sera consacrée à l'étude de l'évolution thermique des défauts étendus dans les substrats SOI. En s'appuyant sur des mesures quantitatives précises de la sursaturation en interstitiels, la deuxième partie fournira une estimation fiable de la longueur de la recombinaison à cette interface.

## II EFFET DE L'INTERFACE Si/BOX SUR L'EVOLUTION DES DEFAUTS ETENDUS

Il est communément admis que la densité et la taille des défauts étendus diminuent lorsque l'on compare les substrats SOI aux substrats silicium [5, 6, 19, 18, 16]. Cependant, différentes visions ont été avancées pour expliquer le rôle de l'interface Si/BOX dans cette réduction. Par exemple, l'effet de l'interface Si/BOX agissant comme un piège fort pour les interstitiels, a été confirmé par des analyses expérimentales [6, 18], et réfuté par d'autres [19, 16]. En effet, la présence de la seconde interface Si/BOX peut altérer la concentration des défauts ponctuels dans le film de Si non seulement par recombinaison [17, 18] mais aussi en réduisant la concentration initiale des auto-interstitiels générés par l'implantation ionique [5, 19]. Cet effet est schématisé sur la Figure 87, la quantité d'interstitiels en excès derrière l'interface a/c diminue d'une quantité égale à la dose située dans le BOX. Quant à la recombinaison des auto-interstitiels à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, elle est représentée par un flux d'interstitiels de la région des défauts étendus vers l'interface Si/BOX, en plus du flux vers la surface. On peut donc s'attendre à une diminution de la quantité d'interstitiels dans les échantillons SOI par rapport aux échantillons de silicium implantés et recuits dans les mêmes conditions.

On trouve peu de données quantitatives fiables dans la littérature mettant en évidence l'influence de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts étendus. En effet, les conséquences de la recombinaison des interstitiels à l'interface Si/BOX et la perte de dose implantée (Figure 87) sont souvent combinés [6]. D'autre part, les faibles tailles des défauts et des densités mesurées ne permettent pas [18] d'obtenir des données quantitatives fiables.

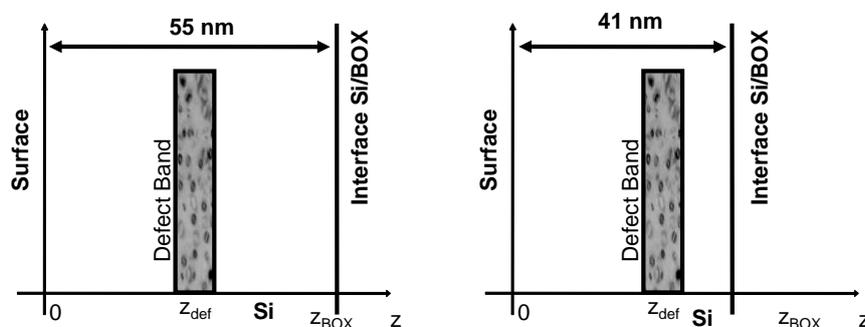


**Figure 87 : Illustration schématique de la quantité d'interstitiels en excès perdue dans l'oxyde enterré. Les interstitiels en excès de la couche amorphe "disparaissent" au cours de la recristallisation.**

Dans cette section, nous présentons une expérience mise en place pour étudier l'effet de la couche d'oxyde enterrée, que l'on trouve dans le SOI, sur la recombinaison des défauts ponctuels. Nous verrons que cette couche a un effet direct sur la dissolution des défauts EOR. Nous proposerons ensuite une interprétation des résultats obtenus à l'aide de simulations continues et atomistiques.

## II.1 Expérience mise en place

Afin de voir l'influence de la couche d'oxyde enterrée sur la dissolution des défauts EOR, trois substrats différents qui, pour la plupart, nous ont été fournis par CEA-LETI, ont été réalisés avec les mêmes conditions de préamorphisation et de recuit. Le premier est une plaque de silicium massif et nous servira de référence, le deuxième est une plaque de SOI dont la couche enterrée d'oxyde est située à une profondeur de 55nm, et le troisième est une plaque SOI dont la couche enterrée d'oxyde est située à une profondeur de 41nm.



**Figure 88 : Représentation schématique des structures SOI utilisées, la couche d'oxyde enterrée est située à 55nm de profondeur pour la première structure (a) et 41nm pour l'autre (b). Les défauts EOR restant à la même profondeur, on pourra voir l'influence de l'oxyde sur ces derniers au cours du recuit.**

Les trois structures (Si – SOI 55nm – SOI 41nm) ont été implantés conjointement au  $\text{Ge}^+$  à 13keV avec une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ , puis recuits dans un four classique à 700 et 800°C sous  $\text{N}_2$  pendant des temps différents : 30s, 300s et 1000s. Ces conditions d'implantation et de recuit ont été choisies de manière à générer des défauts de grosses tailles afin de pouvoir les caractériser facilement et d'observer leur évolution au fur et à mesure du recuit. La totalité des échantillons a été caractérisée par MET.

Les conditions de préamorphisation étant une implantation de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  atomes de germanium à 13keV, les défauts EOR se situeront à une profondeur d'environ 25-30nm

(d'après simulation MC). De cette façon les défauts de fin de parcours sont localisés plus ou moins au milieu du film de silicium, ce qui nous permet de nous affranchir de la perte partielle de la dose implantée dans le BOX (cf. Figure 87). La position relative de la couche de défauts et de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> dans les deux substrats SOI est représentée dans la Figure 88.

## II.2 Résultats et interprétation

Afin de mettre en évidence l'effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts ponctuels, nous avons entrepris une analyse comparative du comportement évolutif des défauts {311} et des boucles de dislocations dans les deux types de substrat Si et SOI. Un exemple de résultats de nos analyses MET est illustré sur la Figure 89. Nous y présentons le silicium (Figure 89.a) et le SOI 41nm (Figure 89.b). Ainsi pour un même recuit il y a moins de défauts dans le SOI que dans le silicium, autrement dit on observe qualitativement un effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts étendus à efficacité de surface identique. Cet effet a été vérifié pour toutes les températures et temps de recuits étudiés dont les résultats MET ne sont pas montrés.

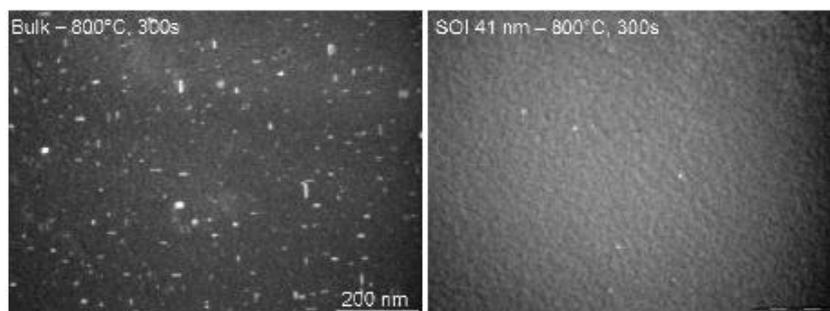


Figure 89 : Image de MET montrant (a) les défauts de fin de parcours dans le silicium et (b) et dans le SOI 41nm.

L'ensemble des résultats des mesures est regroupé dans les trois graphes des Figure 90 et Figure 91.

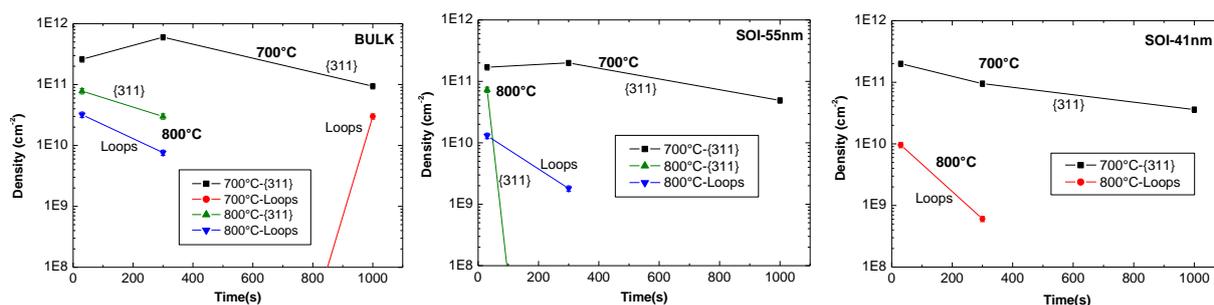
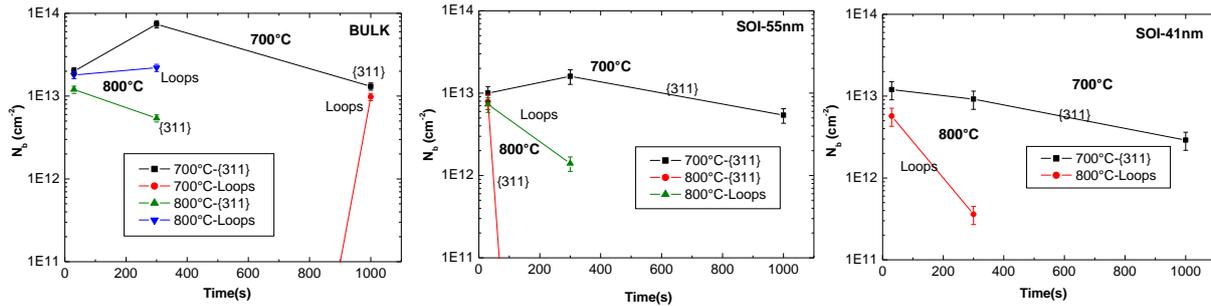


Figure 90 : Evolutions temporelles de la densité des défauts de fin de parcours au cours d'un recuit à 700°C et 800°C sous azote d'une implantation de Ge<sup>+</sup> à 13keV pour une dose de 1x10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup>



**Figure 91 : Evolution temporelle du nombre total d'atomes contenus dans les différents types de défauts ( $N_b$ ) pendant un recuit à 700°C et 800°C après une implantation  $\text{Ge}^+$  / 13 keV /  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . (a) : silicium, (b), SOI 55nm et (c) SOI 41nm**

Si l'on regarde tout d'abord l'évolution des défauts étendus dans le silicium, on observe que nos résultats réaffirment leurs caractéristiques générales décrites dans le chapitre III. A 700°C, après 300s de recuit, seuls de petits défauts {311} sont présents en grand nombre, les boucles de dislocation apparaissent après 1000s de recuit et cohabitent avec les défauts {311} largement majoritaires. A 800°C, les boucles de dislocations sont déjà apparues après 30s de recuit, et cohabitent avec les défauts {311} et vraisemblablement en cours de transformation. L'évolution temporelle de la quantité d'auto-interstitiels ( $N_b$ ) contenus dans les différents types de défauts au cours du recuit est représentée sur la Figure 91.a. On constate, pour les deux températures de recuit considérées, une perte de dose d'atomes pris dans les défauts {311}. En revanche, une fois les boucles formées, la population de défauts perd beaucoup moins d'atomes de Si. Dans ces conditions, les atomes perdus par les défauts {311} sont capturés par les boucles de dislocation énergétiquement plus stables et le système global suit alors un mécanisme de maturation d'Ostwald quasi conservatif. Cependant, l'évolution du  $N_b$ , dont la valeur augmente de 30s à 300s laissent supposer que des erreurs de mesure ont pu être commises en début du recuit, les défauts étant très petits et peu nombreux.

Si l'on s'intéresse maintenant aux résultats quantitatifs relatifs aux substrats SOI 55nm et 41nm, on observe que le même comportement des défauts étendus dans le silicium massif est reproduit dans les substrats SOI, en particulier la formation accélérée des boucles de dislocation et leur grande stabilité par rapport aux défauts {311} pour les budgets thermiques élevés. En revanche, les valeurs de densité des EOR dans le SOI sont plus faibles que dans le silicium. En effet, les défauts {311} disparaissent au delà de 30s de recuit à 800°C dans le substrat SOI 51nm (Figure 90.b) et seules les boucles de dislocation survivent dans le substrat SOI 41nm à 800°C (Figure 90.c). Ainsi, une meilleure dissolution des défauts étendus est obtenue dans les substrats SOI.

Pour vérifier cette hypothèse, regardons maintenant l'évolution de  $N_b$ , nombre d'interstitiels piégés dans les défauts étendus (Figure 91). La diminution de  $N_b$  pour les deux types de défauts montre que ces défauts évoluent suivant un mécanisme de croissance de type maturation d'Ostwald non conservatif au cours duquel les défauts échangent leurs atomes de Si en présence d'un piège qui est la l'interface Si/BOX. Dans ces conditions, le nombre d'interstitiels échangés entre les défauts n'est pas suffisamment élevé pour permettre de maintenir "le plus possible" un état de quasi-équilibre dans la matrice et les défauts finissent par se dissoudre. Ainsi, la réduction observée entre les deux types de substrats en termes de valeurs absolues de taille, de densité et de  $N_b$  est le résultat de la contribution de deux pièges

forts pour les interstitiels dans le SOI qui sont la surface et l'interface Si/BOX. Ainsi, le réservoir d'interstitiels présent dans substrat SOI se vide plus vite que celui présent dans le silicium. L'évolution thermique des défauts {311} et des boucles de dislocation en phase de croissance n'est donc pas sensible à un changement de nature du substrat et ces défauts évoluent selon les mêmes mécanismes dans les deux types de substrats.

Nous avons tracé sur la Figure 92 la variation de  $N_b$ , nombre total d'atomes de Si interstitiels pris aussi bien dans les défauts {311} que dans les boucles de dislocation, en fonction du substrat utilisé pour les différents bilans thermiques. Il apparaît que le  $N_b$  mesuré dans les substrats SOI est systématiquement inférieure à celui mesuré dans le silicium. En outre, sa valeur diminue lorsque l'on passe du substrat SOI 55 nm au SOI 41 nm. Donc, plus l'interface est proche de la zone des défauts étendus, plus fort sera le flux d'interstitiels vers l'interface Si/BOX devant les flux d'interstitiels entre les défauts étendus. Il en résulte une dissolution plus rapide de ces défauts. En effet, à efficacité de surface identique, l'interface Si/BOX agit comme un piège fort pour les atomes de Si interstitiels échangés dans la bande de défauts. Leur croissance est ainsi limitée par les flux externes vers l'interface Si/BOX. Or, au cours de cette croissance, les pertes deviennent aussi importantes que le nombre d'atomes de Si échangés par les défauts, alors ces défauts se dissolvent rapidement.

Une fois de plus la valeur de  $N_b$  qui augmente de 30s à 300s laisse supposer que des erreurs de mesure ont pu être commises en raison de la petite taille des défauts au début du recuit.

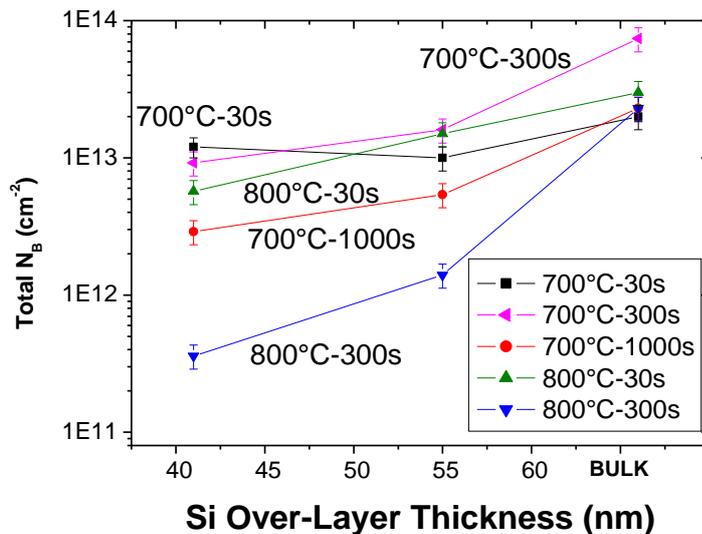


Figure 92 : Evolution temporelle du nombre total d'atomes de Si contenus dans les défauts {311} pour quatre températures de recuit.

En conclusion, nous retiendrons que les mécanismes qui gouvernent l'évolution des défauts étendus sont les mêmes avec les deux types de substrat Si et SOI. En revanche, si la zone des défauts est proche de l'interface Si/BOX, celle-ci peut entrer en compétition avec le processus de maturation d'Ostwald des défauts en absorbant des auto-interstitiels, ces deux phénomènes tendant conjointement à réduire l'énergie libre du système. Ainsi, on va assister à une dissolution plus rapide des défauts lorsque la distance "interface Si/BOX-défauts" devient moins importante.

Nous venons de mettre en évidence l'effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts étendus. L'hypothèse de la recombinaison des interstitiels vers la couche d'oxyde enterrée avait déjà été avancée dans des travaux récents [6] du même type, à la différence qu'au lieu de

changer la profondeur de la couche d'oxyde, c'est la position des EOR par rapport à l'oxyde qui variait (en changeant les conditions de préamorphisation).

Nous allons utiliser la simulation comme outil d'investigation pour vérifier cette hypothèse, et tenter dans la mesure du possible de quantifier le mécanisme associé.

### II.3 Simulations

Nous nous sommes focalisés sur les neuf échantillons recuits à 700°C, pour lesquels les seuls défauts observés sont les {311} (à l'exception du recuit 700°C 1000s dans le Si massif), ce qui facilite l'interprétation des résultats. Pour la simulation, nous avons utilisé les modèles "ClusterModel" et Frenitech (cf. chapitre III). Le calibrage et l'optimisation du simulateur Frenitech a déjà fait l'objet du travail de thèse de Younès Lamrani [20], ce modèle physique nous servira donc de référence.

Les résultats sont reportés sur les Figure 94.a et Figure 94.b, réalisées respectivement avec les modèles "ClusterModel" et Frenitech.

Pour les simulations "ClusterModel", nous avons pris comme paramètres d'entrée,  $N_i = 9 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$  comme estimé par les calculs MC. La position centrale des défauts EOR est située à  $\sim 25 \text{ nm}$  de la surface, ce qui est en accord avec les mesures MET. La longueur de recombinaison en surface ainsi qu'à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> est prise à 1nm [17].

Afin de mettre en évidence l'effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts, nous avons confronté sur la Figure 94 les résultats de simulation des substrats SOI au substrat Si. La densité des défauts {311} (D311) et du nombre d'atomes pris dans ces défauts (C311) simulés reproduit qualitativement la tendance de la mesure. En particulier, les valeurs de C311 et D311 dans les substrats SOI sont systématiquement inférieures à celles relatives au silicium. En outre, D311 et C311 diminuent lorsque l'on passe du substrat SOI 55 nm au SOI 41 nm. Ces résultats confirment la véracité de l'hypothèse selon laquelle l'interface Si/BOX est un piège fort pour les atomes de Si interstitiels. Nous avons ensuite tenté de reproduire quantitativement la mesure en prenant une longueur de recombinaison à l'interface Si/BOX de 10nm (ligne noir en pointillé cf. Figure 94) au lieu de 1nm (courbe bleue). On constate cependant que la simulation ne parvient pas à reproduire la mesure avec précision. En effet, les variations des simulations en fonction de la longueur de recombinaison à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> sont inférieures à l'incertitude "intrinsèque" des mesures TEM.

A partir de cet échec quantitatif, nous avons décidé d'utiliser le modèle Frenitech pour évaluer l'effet de l'interface Si/BOX sur l'évolution des défauts EOR.

Pour les simulations réalisées avec le modèle Frenitech, nous avons pris les mêmes paramètres d'entrée utilisés avec "ClusterModel". Dans ce modèle,  $N_n$ , le nombre de défauts de taille  $n$  est calculé pour un ensemble d'agglomérats de dimensions  $n$  allant de 1 à 10000. La densité de défauts visibles est calculée en additionnant le  $N_n$  avec  $30 < n < 10000$  pour tenir en compte le seuil de visibilité en MET des défauts. Les défauts de taille  $n$  avec  $30 < n < 350$  sont considérés comme défauts {311}. Pour  $n > 350$ , les défauts sont considérés comme étant des boucles de dislocation. Cela est compatible avec le fait que la formation de boucles, énergétiquement plus stables, est plus favorable que celle de défauts {311}, lorsque  $n > 350$ .

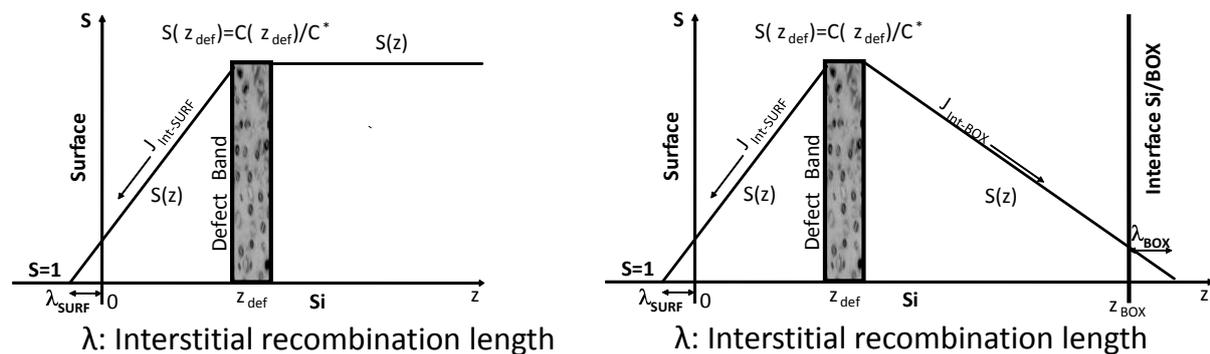
Pour prendre en compte l'effet de l'interface Si/BOX dans la simulation de l'évolution des défauts dans le SOI, le modèle Frendtech a été adapté en utilisant l'approche utilisée par Fazzini et al. [18]. L'interface Si/BOX est modélisée en utilisant la même hypothèse que pour la surface. En effet, la recombinaison de surface est simulé en supposant que le flux d'interstitiels est proportionnel à l'excès de défauts ponctuels (Figure 93.a) et que la recombinaison des interstitiels à l'interface est fonction des limites diffusionnelles [21,22]. Le flux des interstitiels vers la surface est ainsi donnée par l'équation suivante:

**Équation 107** 
$$J_{Int-Surf} = D_I C_I^* S(z_{def}) / (z_{def} + L_{Surf})$$

où  $D_I C_I^*$  est la diffusivité des interstitiels,  $S$  la sursaturation,  $z_{def}$  la position de la bande de EOR, et  $L_{surf}$  la longueur de recombinaison à la surface. En supposant que l'interface BOX agit également comme un piège fort pour les interstitiels, mais avec une longueur de recombinaison différente,  $L_{int}$ , le flux d'interstitiels vers l'oxyde enterré est donc donné par :

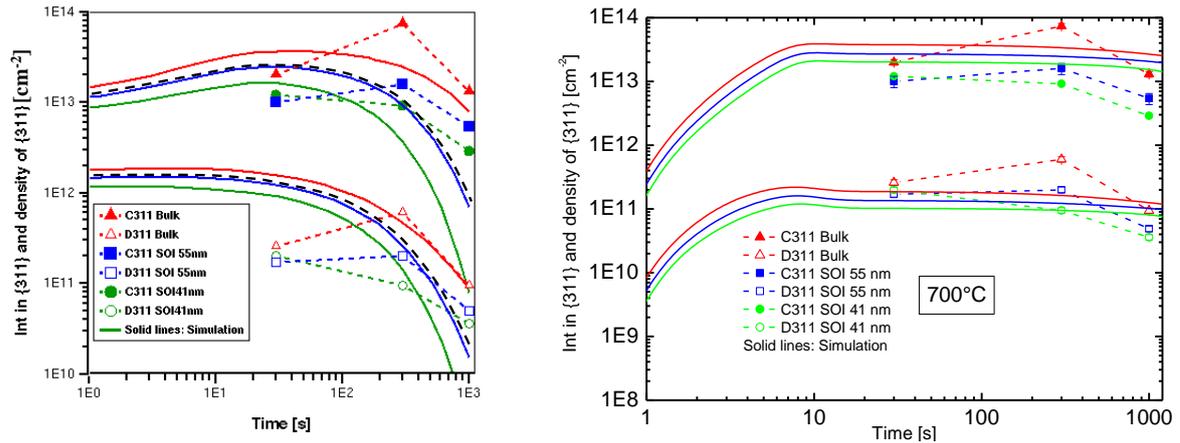
**Équation 108** 
$$J_{Int-BOX} = D_I C_I^* S(z_{def}) / (z_{BOX} - z_{def} + L_{int})$$

où  $z_{BOX}$  est l'épaisseur du film de Si. Une présentation schématique des flux et de la variation de la concentration des interstitiels dans les structures SOI est reportée dans la Figure 93.b [18].



**Figure 93 :** Evolution de la sursaturation d'atomes de Si interstitiels en équilibre avec une population de défauts. Les interstitiels de silicium viennent se recombinaison très rapidement en surface (a) dans le cas de substrat de Si, mais ils diffusent aussi en direction du volume. Sur le schéma (b), on a simplement rajouté une interface qui joue le même rôle que la surface pour observer l'évolution de la sursaturation  $S$  en profondeur.

La longueur de recombinaison associée à la surface de Si est prise à 1 nm valeur utilisée pour reproduire les données expérimentales issues du silicium. En revanche, nous avons fait varier la longueur de recombinaison à l'interface Si/BOX ( $L_{int}$ ) sur une gamme de l'ordre de quelques nanomètres ( $1 \leq L_{int} \leq 5$ ). Il est important de noter que, à l'exception du temps et de la température de recuit, tous les paramètres de simulation, y compris ceux qui dépendent de la température, n'ont pas été modifiés par rapport aux simulations des structures silicium.



**Figure 94 :** Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) pour un recuit à 700 °C sous N<sub>2</sub> après une implantation Ge<sup>+</sup>, 13 keV, 1x10<sup>14</sup>at.cm<sup>-2</sup> pour le substrat silicium (rouge), substrat SOI 55 nm (bleu) et SOI 41 nm (vert). Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations (trait continu) a) ClusterModel et b) Frenitech.

De façon générale, l'évolution temporelle des défauts {311} est bien reproduite à 700 °C par le modèle Frenitech ce qui confirme les résultats obtenus avec le modèle "ClusterModel".

## II.4 Conclusion

L'évolution thermique des défauts étendus dans les substrats SOI a été étudié dans cette section. Nous avons analysé des structures SOI composées de différents épaisseurs de film de Si. Ces derniers, permettent une détection aisée et précise de l'effet de l'interface Si/BOX. Nous avons montré que la dissolution des défauts devient plus rapide lorsque la distance "interface Si/BOX-défauts" est moins importante, prouvant ainsi, que l'interface Si/BOX agit comme un piège fort pour les atomes de Si interstitiels échangés dans la bande de défauts.

Afin d'étudier le mécanisme de recombinaison induit par l'interface et comprendre l'effet de la variation de la longueur de recombinaison en surface ( $L_{int}$ ), la simulation physique est incontournable. Nous avons utilisé deux modèles "ClusterModel" et Frenitech. Nous avons introduit l'effet de l'interface dans le modèle et montré que cette modification était suffisante pour reproduire qualitativement la tendance générale observée expérimentalement. Malheureusement, les variations des simulations en fonction de la longueur de recombinaison à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> étaient inférieures à l'incertitude "intrinsèque" des mesures TEM pour une détection précise de  $L_{int}$  cette étude ce poursuivra donc par une étude expérimentale de la TED dans les substrats SOI dans le but de quantifier la recombinaison des auto-interstitiels à l'interface Si/BOX.

## III EVOLUTION DE LA TED DANS LES SUBSTRATS SOI

L'objectif de cette section est de présenter les principaux résultats expérimentaux au sujet de l'évolution de la TED dans les substrats SOI afin d'évaluer quantitativement l'impact de l'interface additionnel Si/BOX sur l'évolution des interstitiels. Pour la première fois, une

étude rigoureuse basée sur les marqueurs de bore a été menée dans le SOI afin de modéliser l'effet de cette interface sur l'évolution des auto-interstitiels.

Afin d'étudier simultanément le comportement de la sursaturation d'interstitiels en équilibre avec les défauts, nous avons employé des plaquettes de Si, élaborées par CVD, contenant de fines couches de 10 nm d'épaisseur dopées bore à  $\sim 1.10^{18} \text{at.cm}^{-2}$  (Figure 95).

### III.1 Expérience mise en place

Les structures étudiées sont schématisées sur la Figure 95. Nous avons utilisé des substrats de Si (considéré comme référence) et de SOI (Figure 95.b) composé d'un film de Si superficiel de 160nm d'épaisseur et d'un oxyde enterré de 200nm d'épaisseur. Pour faciliter l'interprétation des résultats expérimentaux, nous avons séparé spatialement le "réservoir" d'atomes de Si interstitiels des zones dopées. Nous avons alors déposé sur les deux types de substrat une couche de Si d'environ  $1\mu\text{m}$  d'épaisseur par CVD et qui contient trois couches minces ( $\sim 10\text{nm}$ , "δ-layers") légèrement dopées bore ( $\sim 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ). Le "réservoir" d'interstitiels a été introduit dans les deux substrats par une implantation de Si à une énergie de 40keV avec une dose de  $6 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$ . Tous les échantillons ont été recuits dans un four classique sous azote à  $740^\circ\text{C}$ . Les temps de recuit ont été échelonnés de 1s à 7200s de manière à observer la croissance des défauts {311} et l'évolution de la diffusion du bore. La totalité des échantillons a été caractérisée par SIMS.

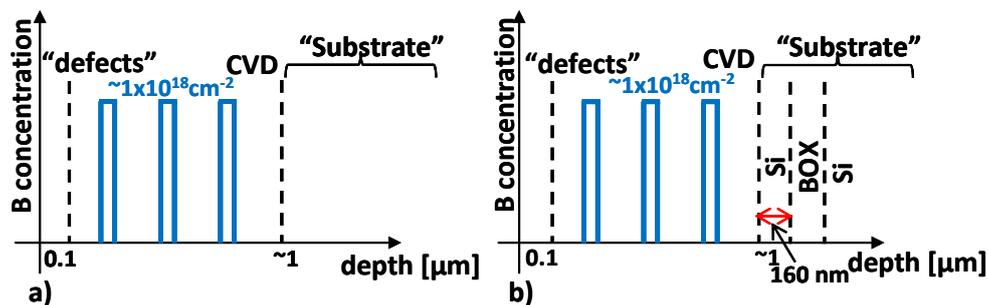


Figure 95 : Représentation schématique des échantillons pour l'étude de la dissolution des défauts {311} présentant la position moyenne de la couche de défauts par rapport aux différents marqueurs de bore obtenus par croissance CVD.

Pour la détection des atomes de bore, les analyses SIMS ont été réalisées dans un système CAMECA IMS 6F avec un faisceau d'ions primaires d'ions  $\text{O}^{2+}$  à basse énergie (1000eV) [23]. La calibration en profondeur a été effectuée en utilisant un profilomètre (Dektak) pour mesurer le cratère du SIMS.

Pour cette étude, il est tout d'abord nécessaire de connaître l'évolution temporelle de la sursaturation moyenne d'interstitiels libres dans la région des défauts. Pour tous les temps de recuit considérés, les profils de concentration des "marqueurs" de bore ont donc été mesurés par SIMS. Une méthode de calcul numérique, basée sur le mécanisme de diffusion par paire B-I (de type "kick-out" [24, 20]), permet, en reproduisant l'élargissement mesuré dans les profils de bore après le recuit, d'extraire l'accélération de la diffusion du bore par rapport à l'équilibre,  $D_B/D_B^*$ , sur les intervalles de temps de recuit. La valeur de cette accélération nous donne alors une mesure directe de la sursaturation moyenne d'interstitiels ( $D_B/D_B^* = C_I/C_I^* = S$ ) entre deux temps de recuit successif et à la profondeur correspondante à la position du

“marqueur” de bore étudié. On peut ainsi retracer l'évolution temporelle de sursaturation moyenne d'interstitiels au cours du recuit et à une profondeur préalablement choisie.

### III.2 Résultats et discussion

Les profils de concentration de bore en fonction de la profondeur mesurés par SIMS dans les substrats Si (témoin) et SOI sont présentés sur la Figure 96. On constate dans le substrat de Si que les trois marqueurs de bore ont subi un élargissement considérable au cours du recuit. Cet élargissement est nettement supérieur à celui qu'aurait provoqué une diffusion à l'équilibre thermodynamique, ce qui prouve que tous les marqueurs de bore ont bien subi de la TED. Ce résultat est en accord avec la présence d'une bande de défauts dans la région implantée [25], comme il a été vérifié par MET. En outre, les trois marqueurs de bore dans le Si montrent le même comportement de la diffusion accélérée indépendamment de leur profondeur.

En revanche, une analyse qualitative des profils SIMS dans l'échantillon SOI indique déjà que non seulement leur diffusion est moins prononcée que dans la référence Si, mais aussi la diffusion du marqueur du bore à proximité de l'interface Si/BOX est systématiquement moins prononcée que celle des autres. Ces résultats confortent la thèse déjà évoquée quant aux effets de l'interface Si/BOX agissant comme un piège fort pour les auto-interstitiels, en accord avec de précédents travaux [6, 26]. Afin de valider cette hypothèse, la sursaturation associée à la mesure de l'élargissement des profils de bore a été extraite en utilisant la méthodologie de "fit" décrite précédemment.

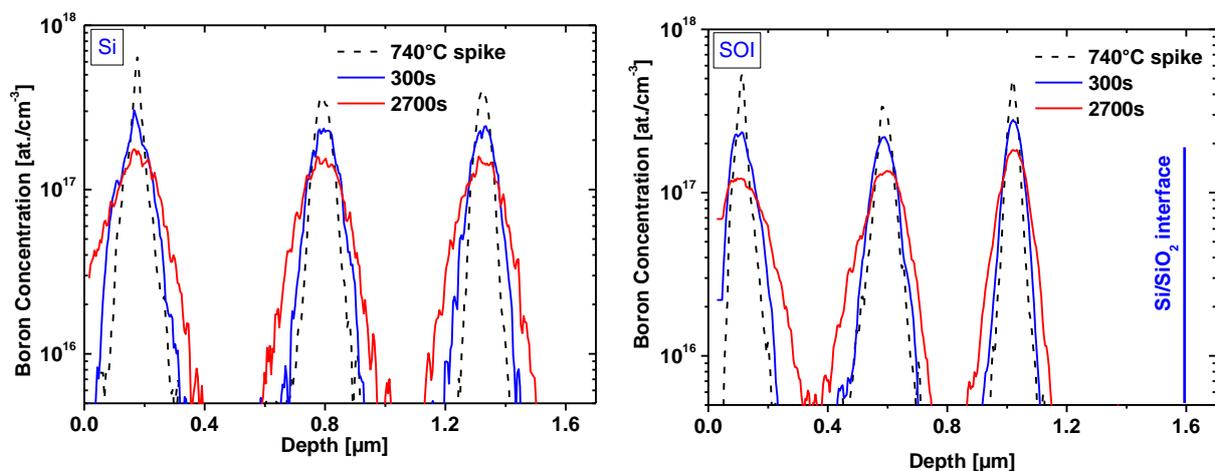
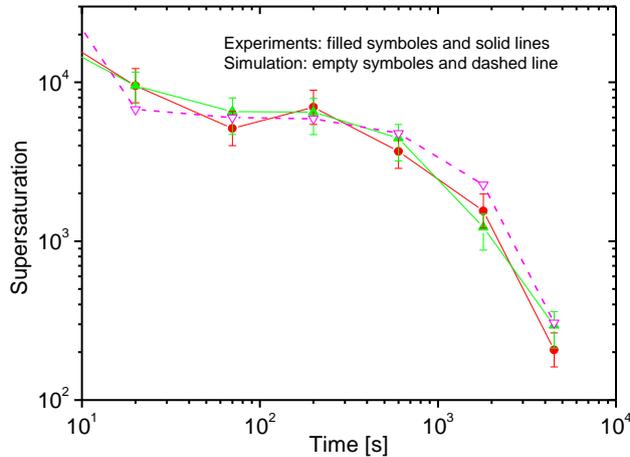


Figure 96 : Profils SIMS des delta-layers de bore mesurés après l'implantation de  $\text{Si}^+$  ( $40\text{keV}$ ,  $6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) et un recuit à  $740^\circ\text{C}$  pendant 1s, 300s et 2700s.

Les marqueurs de bore à proximité de la surface dans les deux échantillons Si et SOI n'ont pas été considérés dans l'évaluation de la TED, car ils se situent dans la région des défauts (à  $0.2$  et  $0.1\mu\text{m}$  dans les substrats Si et SOI, respectivement). En effet, la diffusion des atomes de bore contenus dans ces marqueurs peut être affectée par le voisinage de la surface en plus de leur interaction "directe" avec le réservoir d'interstitiels ce qui peut conduire à la formation de BICs. En revanche, compte tenu de la diffusivité élevée des interstitiels de silicium, la sursaturation d'interstitiels mesurée à partir des deux marqueurs les plus profonds contenus dans chaque échantillon reflétera celle existante dans la région de défaut et sa variation en

fonction de la profondeur dépendra uniquement de la présence éventuelle de pièges dans le volume dans les couches déposées par CVD.

Nous avons d'abord évalué l'amplitude de la TED relative à chaque marqueur de bore dans le substrat de Si. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 97.



**Figure 97 : Evolution de la TED en fonction du temps dans l'échantillon de référence (Si), pour les 2 delta-layers du bore, après l'implantation de  $\text{Si}^+$  ( $40\text{keV}$ ,  $6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ) et un recuit à  $740^\circ\text{C}$ . Mesures (symboles pleins et lignes continues) et simulation (symboles vides et ligne en pointillé).**

L'évolution de la sursaturation en fonction du temps est en accord avec l'évolution des défauts étendus induits par l'étape d'implantation et est responsable de l'accélération de la diffusion [17, 25]. En effet, comme on peut le constater sur la Figure 97, deux régimes différents sont à distinguer : le premier régime où on peut voir une stabilisation de la sursaturation jusqu'à 600s, correspond à l'évolution des défauts {311} suivant la maturation d'Ostwald. Le deuxième régime où on voit une chute de la sursaturation correspond à la dissolution des défauts {311}. Plus important encore, les deux marqueurs de bore présentent le même comportement de la diffusion accélérée, prouvant ainsi que l'évolution de la sursaturation est indépendante de la profondeur et que la couche CVD ne contient aucun piège lié à sa réalisation. Ainsi, en raison de la diffusion élevée des marqueurs de bore et de l'absence de pièges dans le volume dans cet échantillon, la sursaturation d'interstitiels mesurée correspond donc à celle présentée dans la région des défauts.

Ces résultats expérimentaux préliminaires ont été vérifiés par simulation. La Figure 97 contient aussi les résultats des simulations du substrat de Si dans les conditions expérimentales de cette étude. La cinétique de croissance des défauts étendus ainsi que l'évolution de la sursaturation (i.e. l'accélération de la diffusion) au cours du recuit thermique sont décrites par le modèle "ClusterModel" : petits amas, défauts {311}, boucles de dislocation, basé sur le mécanisme de maturation d'Ostwald non-conservatif du à la proximité de la surface qui joue le rôle de puit infini pour la recombinaison des interstitiels libres provenant de la région des défauts ( $L_{surf} = 1 \text{ nm}$ ). La Figure 97 montre qu'on peut parfaitement prédire l'évolution temporelle de la sursaturation dans le cas du substrat Si sans ajustements supplémentaires.

Concernant les résultats expérimentaux relatifs au substrat SOI, la Figure 98 présente l'évolution de la sursaturation en fonction de la position en profondeur des deux marqueurs de bore situés à une profondeur de 600 et 1000nm. Chaque courbe correspond à un intervalle de temps différent. Les points situés à 100 nm représentent la sursaturation présente dans la région des défauts, telle qu'elle a été mesurée dans le substrat de Si (cf. Figure 97). En effet,

l'évolution des défauts étendus est identique dans les types de substrats en raison de la grande distance séparant la région des défauts de l'interface Si/BOX ( $> 800\text{nm}$  dans le cas du substrat SOI). La dissolution des défauts dans les deux substrats est donc entièrement contrôlée par la proximité de la surface ( $\sim 100\text{ nm}$ ). Les résultats expérimentaux de la Figure 98 montrent qu'au cours de toute la gamme des temps de recuit considérés, la sursaturation extraite du substrat SOI, est non seulement inférieure à celle extraite du substrat de Si mais décroît en se rapprochant de l'interface Si/BOX, confirmant ainsi que les interstitiels libres provenant de la région des défauts se recombinaient à l'interface enterrée Si/BOX, en accord avec les études précédentes.

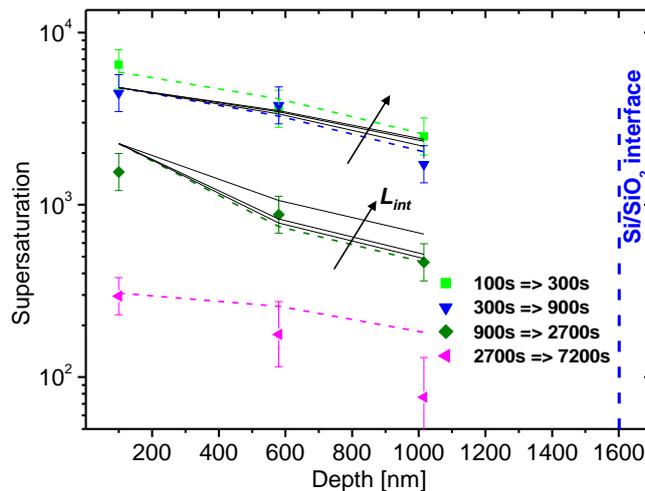


Figure 98 : Evolution de la TED en fonction de la profondeur, pour les différents intervalles de temps de recuit à  $740^{\circ}\text{C}$  après implantation de  $\text{Si}^+$  ( $40\text{keV}$ ,  $6 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ ). Mesures (symboles), simulation avec  $L_{\text{int}} = 1\text{nm}$  (lignes en pointillé) et  $L_{\text{int}} = 5, 10$  et  $40\text{nm}$  (lignes continues noires).

Pour simuler la structure SOI, nous avons placé l'oxyde enterré au-dessous de la couche CVD pour tenir compte de la présence de la nouvelle interface. Ainsi nous avons créé un flux secondaire d'interstitiels de la région des défauts étendus vers l'interface Si/BOX comme illustré sur la Figure 93. Nous avons bien évidemment gardé les autres paramètres du simulateur exactement les mêmes que pour les simulations précédentes. Les résultats de simulation relatifs à la structure SOI sont indiqués sur la Figure 98 (lignes en pointillé). Dans ces simulations, la longueur de recombinaison à l'interface  $L_{\text{int}}$ , vaut  $1\text{nm}$  (i.e. efficacité de piégeage identique à celle de la surface). A l'exception des long temps de recuit, lors de la phase de dissolution des défauts étendus (couleur rose sur la Figure 98), les résultats de simulation montrent que la sursaturation diminue continuellement à l'approche de l'interface Si/BOX. Ainsi, l'excellent accord entre les simulations et les expériences confirme clairement que le phénomène observé dans le substrat SOI peut être modélisé en termes d'une nouvelle capture d'interstitiels à l'interface Si/BOX.

L'écart observé entre la simulation et l'expérience pour l'intervalle de temps 2700-7200 est probablement dû à la difficulté rencontrée à extraire une valeur fiable de la sursaturation en interstitiels libres pendant les derniers stades de la TED, en raison du faible élargissement du profil de bore qui devient comparable au bruit du signal SIMS.

Des simulations ont été ensuite effectuées avec plusieurs valeurs de  $L_{\text{int}}$ , afin d'évaluer la capacité de cette approche à fournir une estimation fiable de l'efficacité de recombinaison. Les résultats sont présentés sur la Figure 98 pour les intervalles de temps 300-900s et 900-2700s (lignes continues noires) pour des valeurs  $L_{\text{int}}$  de 5, 10 et  $40\text{nm}$ , qui correspondent à des mécanismes de recombinaison progressivement affaiblis. Comme prévu, la sursaturation

d'interstitiels simulée dans la région de défauts étendus (située à plus de  $1\mu\text{m}$  de l'interface Si/BOX) est insensible aux variations de  $L_{int}$ . En revanche, au voisinage de l'interface Si/BOX, la sursaturation calculée augmente avec l'augmentation de  $L_{int}$ . On constate qu'à partir de 10 nm, au moins l'un des points expérimentaux n'est pas correctement simulé. Ces résultats confirment que l'interface Si/BOX agit comme piège fort pour les auto-interstitiels et donnent une limite supérieure d'environ 5 nm pour la longueur de recombinaison à l'interface.

Finalement, afin de valider l'ensemble de nos paramètres de simulation, nous avons reproduit la diffusion des marqueurs de bore dans le substrat SOI. La Figure 99 montre à différents instants le bon accord entre les profils des marqueurs de bore simulés et mesurés lors du recuit à  $740^\circ\text{C}$ .

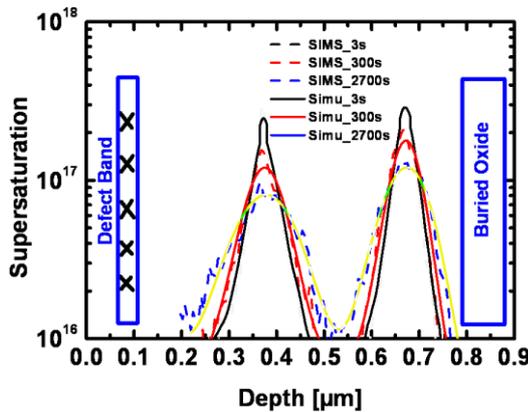


Figure 99 : Profils SIMS (pointillé), simulation (lignes) des marqueurs de bore considérés dans l'extraction de la TED à partir de l'échantillon SOI après l'implantation de  $\text{Si}^+$  ( $40\text{keV}$ ,  $6 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ) et un recuit à  $740^\circ\text{C}$ .

Dans ces simulations, seule la longueur de recombinaison à l'interface,  $L_{int}$ , qui vaut 1nm a été introduite par rapport aux simulations effectuées dans le silicium massif.

### III.3 Conclusion

Nous avons mené une étude précise de la TED du bore dans le cas de substrats de Si et SOI utilisant des marqueurs de bore après une implantation non-amorphisante. Les données obtenues à partir des expériences confirment clairement que l'interface Si/BOX est un piège efficace pour les atomes interstitiels diffusant de la région des défauts. Sur la base de ces expériences, le modèle existant de la TED dans le silicium a été modifié pour inclure un centre de recombinaison additionnel à l'oxyde enterré. Les résultats de simulation donnent une limite supérieure de  $\sim 5 \text{ nm}$  pour la longueur de recombinaison à l'interface.

REFERENCES DU CHAPITRE V

- 1 International Roadmap for Semiconductor Technology. Website: <http://public.itrs.net>
- 2 J.P. Colinge, "SOI technology: Materials to VLSI", 3rd ed.(Kluwer, Boston) (2004).
- 3 A. F. Saavedra, K. S. Jones, M. E. Law, and K. K. Chan, "Kinetics of {3 1 1} defect dissolution in silicon-on-insulator (SOI)", *Mat. Sci. Eng. B* 107, 198 (2004).
- 4 P.F. Fazzini, F. Cristiano, C. Dupré, S. Paul, T. Ernst, H. Kheyrandish, and K.K. Bourdelle, "Evolution of End-of-Range Defects in Silicon-on-Insulator Substrates", *Mat. Sci. Eng. B* 154-155, 256 (2008).
- 5 J. J. Hamilton, K. J. Kirkby, N. E. B. Cowern, E. J. H. Collart, M. Bersani, D. Giubertoni, S. Gennaro, and A. Parisini, "Boron deactivation in preamorphized silicon on insulator: Efficiency of the buried oxide as an interstitial sink", *Appl. Phys. Lett.* 91, p. 092122 (2007).
- 6 J. J. Hamilton, N. E. B. Cowern, E. J. H. Collart, B. Colombeau, M. Bersani, D. Giubertoni, A. Parisini, J. A. Sharp, and K. J. Kirkby, "Diffusion and activation of ultrashallow B implants in silicon on insulator: End-of-range defect dissolution and the buried Si/SiO<sub>2</sub> interface", *Appl. Phys. Lett.* 89, p. 042111 (2006).
- 7 K. L. Yeo, A. T. S. Wee and Y. F. Chong, "Evaluation of back-side secondary ion mass spectrometry for boron diffusion in silicon and silicon-on-insulator substrates", *J. Appl. Phys.* 96, p. 3692 (2004).
- 8 S. W. Crowder, C. J. Hsieh, P. B. Griffin, and J. D. Plummer, "Effect of buried Si-SiO<sub>2</sub> interfaces on oxidation and implant-enhanced dopant diffusion in thin silicon-on-insulator films", *J. Appl. Phys.* 76, p. 2756 (1994).
- 9 H.-H. Vuong, H.-J. Gossmann, L. Pelaz, G. K. Celler, D. C. Jacobson, D. Barr, J. Hergenrother, D. Monroe, V. C. Venezia, C. S. Rafferty, S. J. Hillenius, J. McKinley, F. A. Stevie, and C. Granger, " Boron pileup and clustering in silicon-on-insulator films ", *Appl. Phys. Lett.* 75, p. 1083 (1999).
- 10 K. R. C. Mok, B. Colombeau, M. Jaraiz, P. Castrillo, J.E. Rubio, R. Pinacho, M.P. Srinivasan, F. Benistant, I. Martin Bragado, J.J. Hamilton, "Modeling and Simulation of the Influence of SOI Structure on Damage Evolution and Ultra-shallow Junction Formed by Ge Preamorphization Implants and Solid Phase Epitaxial Regrowth", *Mat. Res. Symp. Proc.* 912, C03.04 (2006).
- 11 A. Ogura and M. Hiroi, "Depth profiles of As and B implanted into Si-on-insulator substrates", *Thin Sol. Films* 397, p. 56 (2001).
- 12 D. R. Lim, C. S. Rafferty and F. P. Klemens, "The role of the surface in transient enhanced diffusion", *Appl. Phys. Lett.*, 67(16), p. 2302 (1995).
- 13 A. Agarwal, H.-J. Gossmann, D. J. Eaglesham, L. Pelaz, D. C. Jacobson, T. E. Haynes, and Yu. E. Erokhin, "Boron-enhanced diffusion of boron from ultralow-energy ion implantation", *Appl. Phys. Lett.* 71, p. 3141 (1997).

- 14 N.E.B. Cowern, D. Alquier, M. Omri, A. Claverie and A. Nejim. "Transient enhanced diffusion in preamorphized silicon : the role of the surface", Nucl. inst. Meth. Phys. Res. B, 148(1-4), p. 257 (1999).
- 15 Y. Lamrani, F. Cristiano, B. Colombeau, E. Scheid, P. Calvo, H. Schaefer and A. Claverie, "Direct evidence of the recombination of silicon interstitial atoms at the silicon surface", Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B 216, 281 p. (2004).
- 16 A.F. Saavedra, A.C. King, K.S. Jones, E.C. Jones, K.K. Chan, "Secondary Defect Formation in Bonded Silicon-on-Insulator (SOI) after Boron Implantation", J. Vac. Sci. Technol. B 22, p. 459 (2004).
- 17 A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag and F. Cristiano, "Extended defects in shallow implants", Appl. Phys. A 76, p. 1025-1033 (2003).
- 18 P.F. Fazzini, F. Cristiano, C. Dupré, A. Claverie, T. Ernst and M. Gavelle, "Defect Evolution after Germanium Preamorphization in Silicon on Insulator Structures", J. Vac. Sci. Technol. B 26, p. 342 (2008).
- 19 A.F. Saavedra, J. Frazer, K.S. Jones, I. Avci, S.K. Earles, M.E. Law and E.C. Jones, "Influence of the Surface Si/Buried Oxide on Extended Defect Evolution in Silicon On-Insulator Scaled to 300Å", J. Vac. Sci. Technol. B 20, p. 2243 (2002).
- 20 Y. Lamrani, "Contribution à l'étude expérimentale et à la simulation de la diffusion anormale du bore dans le silicium", Thèse de doctorat, Université Paul-Sabatier (Toulouse) (2005).
- 21 S.M. Hu, "Anomalous temperature effect of oxidation stacking faults in silicon", Appl. Phys. Lett. 27 p. 165 (1975).
- 22 S.M. Hu, "Formation of stacking faults and enhanced diffusion in the oxidation of silicon", Appl. Phys. Lett. 45 p. 1567 (1974).
- 23 C. W. Magee, G. R. Mount, S.P. Smith, B. Herner and Hans-J Gossmann, "Sputtering rate change and surface roughening during oblique and normal incidence  $O_2^+$  bombardment of silicon, with and without oxygen flooding", J. Vac. Sci. Technol. B, Vol. 16 (6), p. 3099-3104 (1998).
- 24 N.E.B. Cowern, K.T.F. Janssen, G.F.A. van de Walle and D.J. Gravesteijn, "Impurity diffusion via an intermediate species: The B-Si system", Phys. Rev. Lett. 65, p.2434 (1990).
- 25 N.E.B. Cowern, G. Mannino, P. A. Stolk, F. Roozeboom, H. G. A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristiano, A. Claverie and M. Jaraíz, "Energetics of Self-Interstitial Clusters in Si", Phys. Rev. Lett., 82(22), p.4460 (1999).
- 26 H.-H. Vuong, H.-J. Gossmann, L. Pelaz, G. K. Celler, D. C. Jacobson, D. Barr, J. Hergenrother, D. Monroe, V. C. Venezia, C. S. Rafferty, S. J. Hillenius, J. McKinley, F. A. Stevie, and C. Granger, "Boron pileup and clustering in silicon-on-insulator films", Appl. Phys. Lett. 75, p.1083 (1999).

# **Chapitre VI**

**Défauts étendus et diffusion  
dans les alliages SiGe :  
Caractérisation et  
modélisation du rôle de la  
composition chimique et de  
la contrainte**



## CHAPITRE VI : DEFAUTS ETENDUS ET DIFFUSION DANS LES ALLIAGES SiGe : CARACTERISATION ET MODELISATION DU ROLE DE LA COMPOSITION CHIMIQUE ET DE LA CONTRAINTE

Les travaux présentés dans ce chapitre portent sur l'étude de l'effet de la teneur en germanium et des contraintes sur les évolutions des défauts étendus et de la diffusion accélérée du bore dans les alliages SiGe au cours d'un recuit thermique.

### I INTRODUCTION

Les modèles relatifs à la formation et l'évolution des défauts étendus dans le silicium sont à présent bien compris, cependant, leur validité doit être étendue au cas des alliages SiGe. Nous allons examiner la cinétique de cette évolution thermique à l'aide des études expérimentales menées au LAAS par F. Cristiano et P.F. Fazzini, et d'analyses par simulation des défauts étendus formés dans les couches relaxées et contraintes de Si et de SiGe. Les résultats expérimentaux les plus significatifs sont présentés car ils ont permis à la fois d'améliorer notre compréhension du comportement des défauts dans les alliages SiGe et de répondre à certaines interrogations quant au développement de modèles de simulation fiables et prédictifs.

De nombreuses études expérimentales ont été menées afin d'évaluer la formation des défauts dans le Silicium alors que la formation de défauts étendus dans le Ge a souvent été étudiée suite à une implantation d'ions  $\text{He}^+$  ou d'électrons [1, 2]. Par ailleurs, différents modèles pour décrire l'évolution des défauts  $\{311\}$  dans le Si et le Ge ont été élaborés [3, 4, 5, 6]. Cependant, peu de travaux expérimentaux portant sur l'évolution des agglomérats dans les alliages SiGe existent dans la littérature.

Dans un de ces travaux [7], des mesures HR-XTEM ont été utilisées pour examiner l'effet des contraintes et de la teneur en Ge sur l'évolution des défauts dans des alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  réalisés par épitaxie par jet moléculaire (MBE ou "Molecular Beam Epitaxy") et contraints en compression (empilement Si/SiGe/Si). Les structures étudiées présentaient des teneurs en Ge de 0.08, 0.13 et 0.22 et des épaisseurs de 40, 35 et 4.5nm respectivement. Suite à une irradiation avec des électrons, des défauts  $\{311\}$  et des boucles de dislocation fautes ont été observés dans les échantillons à faible concentration de Ge. Les défauts  $\{311\}$  n'étaient plus visibles après environ 40 minutes d'irradiation dans l'hétérostructure  $\text{Si}_{0.92}\text{Ge}_{0.08}$  et après 10 minutes dans l'hétérostructure  $\text{Si}_{0.87}\text{Ge}_{0.13}$ . Pour une fraction de Ge égale à 0.22, les défauts  $\{311\}$  n'ont pas du tout été observés, mais seules les boucles de dislocation étaient visibles. Les auteurs ont justifié leurs résultats par l'augmentation de la contrainte biaxiale associée à l'augmentation de la fraction de Ge, ce qui modifie la diffusivité et la cinétique de recombinaison des défauts ponctuels. En revanche, les auteurs ont exclu les effets de la composition (longueur de liaison, angle de liaison, énergie de liaison, etc...).

Cependant, un effet similaire a été récemment montré dans le cas de défauts étendus formés par implantation ionique dans des couches relaxées (i.e. non contraintes) de SiGe [8, 9]. Les

données expérimentales exposées dans ces publications montrent que la concentration de Ge dans la couche de SiGe affecte non seulement la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation, mais aussi la maturation de ces deux types de défauts. Plus en général, la stabilité des défauts diminue avec la teneur en Ge en raison de la dissolution plus rapide de ces défauts.

Comme nous pouvons le voir dans ces deux exemples, l'ensemble des résultats étudiés doit être examiné avec une très grande précaution car des incohérences peuvent être mises en évidence. En outre, en absence de consensus, ces résultats ne peuvent pas être utilisés comme base de données pour le développement de modèles d'évolution des défauts.

En parallèle, en présence d'une forte concentration en interstitiels, la prédiction de l'effet de la composition et des contraintes sur l'évolution temporelle des profils de dopant devient elle aussi plus compliquée. Lorsque l'on applique une contrainte en tension dans le Si, la TED est diminuée mais persiste dans le temps car la contrainte produite par la formation des défauts {311} est plus importante que celle des SMICs (de taille inférieure). En outre, la relaxation de la contrainte associée aux amas de taille élevée requière plus de temps [10] et augmente ainsi la durée de la TED. La tendance est inversée pour les agglomérats de taille supérieure (boucles de dislocation) qui engendrent une contrainte légèrement inférieure à celle des défauts {311}. Compte tenu de la différence relative entre les contraintes induites, Trzynadlowski et al. prédisent que la taille critique des défauts à partir de laquelle la transformation {311}/boucles se produit devient plus (moins) importante sous contrainte en tension (compression) [11].

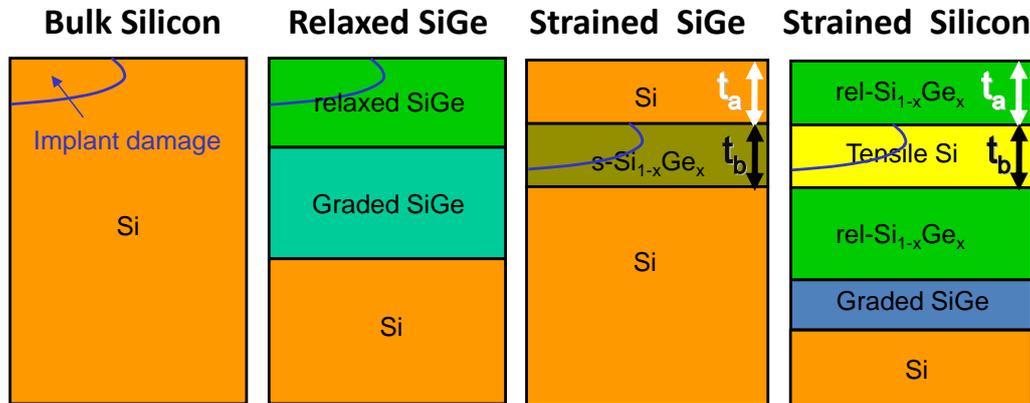
Il est donc essentiel de dissocier les effets des différents mécanismes qui contribuent à la modification de l'évolution des défauts dans les alliages SiGe, en particulier celui lié à la composition chimique (teneur en Ge) et celui associé à la contrainte. Ainsi, pour étudier ces deux effets séparément, une étude parallèle doit être menée sur les alliages SiGe ayant la même composition chimique et des niveaux de contrainte différents. En outre, il serait utile d'étudier l'évolution des défauts à différentes températures car les mécanismes intervenant dans la maturation d'Ostwald sont dans la plupart des cas thermiquement activés. En effet, l'analyse de plusieurs recuits isothermes peut fournir des informations supplémentaires sur les énergies de formation des amas d'interstitiels et sur leur cinétique dans le silicium et dans le SiGe contraint et relaxé.

Pour ces raisons, un ensemble approprié de tests a été conçu, réalisé et analysé dans le cadre du projet ATOMICS pour obtenir les données expérimentales nécessaires au développement de modèles fiables pour l'évolution des défauts dans les alliages SiGe.

## II DESCRIPTIF DES ECHANTILLONS ETUDIÉS

Des structures dédiées ont été utilisées afin d'analyser de manière rigoureuse l'évolution des défauts étendus et de la TED dans les alliages SiGe. Pour étudier indépendamment les effets de la teneur en Ge et de la contrainte, nous nous sommes orientés vers la fabrication, par STMicroelectronics, de quatre types de structure suivant les schémas de principe présentés sur la Figure 100.

Un réservoir localisé d'auto-interstitiels est introduit par implantation ionique réalisée au CEA-Leti. Les défauts étendus se forment et évoluent au cours d'une série de recuits réalisés par MATTSON. Un travail préalable de simulation (SRIM [12] et LUPIN [13]) a été entrepris afin de déduire les conditions expérimentales favorables aux analyses par MET et aux mesures de la TED : présence de défauts étendus dans la région ciblée et une sursaturation en auto-interstitiels suffisamment élevée pour la formation des défauts étendus.



**Figure 100 :** Représentation schématique des structures d'étude utilisées pour l'évolution des défauts étendus dans les alliages SiGe relaxés et contraints. L'échantillon silicium nous servira de structure de référence pour nos investigations.  $t_a$  et  $t_b$  représentent les épaisseurs des couches déposées (cf. Tableau 8).

La première série d'échantillons (Figure 100.b) utilisée pour étudier l'effet de la composition chimique correspond à un empilement de deux couches de SiGe réalisé sur un substrat de silicium. Une technique standard de LPCVD a été utilisée pour fabriquer les couches de SiGe relaxées déposées sur un substrat de silicium. D'abord, une couche de  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  à composition graduelle de Ge ( $0 < y < x$ ) est épitaxiée sur un substrat de Si où  $x$  est la composition maximale de Ge au sommet de la couche graduelle.  $x$  varie entre 20 % et 50 % suivant les échantillons. Ensuite une couche tampon de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  à composition constante de Ge est épitaxiée sur la couche de SiGe graduelle. La couche graduelle a été réalisée pour y confiner les dislocations créées par le désaccord de maille entre le Si et le SiGe, et afin de réduire la densité de dislocations dans la couche de SiGe du dessus.

La deuxième série d'échantillons, (cf. Figure 100.c et Figure 100.d) contient une couche contrainte réalisée par épitaxie. Dans le premier échantillon (Figure 100.c), une couche de SiGe d'épaisseur environ 40nm (Ge 20%) est directement épitaxiée sur un substrat de silicium ; un film de silicium (50nm) est ensuite déposé sur la couche SiGe contrainte en compression. Dans le deuxième échantillon (Figure 100.d), comme dans la première série, une couche de SiGe à composition constante (20 % Ge) est épitaxiée sur la couche graduelle. Puis une couche de Si (40nm) est épitaxiée sur la couche de reprise d'épitaxie pour obtenir un film de Si contraint en tension biaxiale. Enfin, une couche de SiGe (20 % Ge) de 50 nm d'épaisseur est épitaxiée au-dessus. Dans cette configuration, le film de Si contraint est encapsulé entre les deux couches de SiGe relaxé. Le rôle de la couche d'encapsulation est d'éviter la relaxation de la contrainte au cours des étapes d'implantation et de recuit. L'épaisseur de la couche contrainte est systématiquement inférieure à l'épaisseur critique, définie en fonction de la teneur en Ge de la structure.

Les échantillons de SiGe relaxés à plusieurs teneurs en Ge (20%, 35% et 50%) (Figure 100.b) ont été implantés et recuits puis comparés au silicium témoin (Figure 100.a) réalisé dans les mêmes conditions expérimentales et qui nous servira de référence dans la suite de ce travail.

Deux types d'implantation ont été utilisés pour générer la population initiale d'atomes de Si interstitiels : implantation non amorphisante de Si<sup>+</sup> à 40keV avec une dose de  $6 \times 10^{13}$  at.cm<sup>-2</sup> et implantation amorphisante de Ge<sup>+</sup> à 35keV avec une dose de  $1 \times 10^{15}$  at.cm<sup>-2</sup>. L'intérêt de l'implantation amorphisante réside dans le fait que les défauts générés sont confinés dans une région limitée et située juste derrière l'interface a/c. La position et l'extension de la zone amorphe peuvent ainsi être contrôlées avec précision. En revanche lors de l'implantation non-amorphisante, les défauts s'étendent en profondeur sur une bande d'environ 150nm. Cette bande est toujours localisée autour du Rp. Le modèle "+1" est adapté dans ce cas et prévoit que le nombre d'atomes de Si interstitiels générés est égal au nombre d'atomes de Si<sup>+</sup> implantés, autrement dit à la dose. La grande dispersion en profondeur des défauts générés dans ces conditions fait que ce type d'implantation n'est pas envisageable pour la création de zones endommagées dans les couches contraintes (~40nm).

Enfin, Pour étudier les effets de la contrainte et de la composition chimique sur la TED du bore, les échantillons de Si et de SiGe décrits précédemment (cf. Tableau 8) contiennent aussi des marqueurs de bore (cf. Figure 109). Ces expériences seront décrites plus tard dans la section IV.2 de ce chapitre.

La liste complète des échantillons utilisés dans cette étude (Figure 100), des conditions d'implantation, et des bilans thermiques est présentée dans le Tableau 8.

Wafer	Bulk Silicon		Relaxed Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>						Strained Si	Strained Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>	
			x=20%		x=35%		x=50%		x=20% t <sub>a</sub> =50nm t <sub>b</sub> =40nm	x=20% t <sub>a</sub> =50nm t <sub>b</sub> =40nm	
Implant	Si	Ge	Si	Ge	Si	Ge	Si	Ge	Ge	Ge	
<b>Anneal</b>											
600°C	240s									✓	✓
	300s		✓		✓		✓		✓		
680°C	900s		✓		✓		✓		✓		
	100s	✓		✓		✓		✓			
740°C	300s	✓	✓	✓	✓	✓		✓		✓	✓
	900s	✓	✓	✓	✓	✓		✓		✓	✓
	30s	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
800°C	300s	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Tableau 8 : Récapitulatif des échantillons analysés pour l'étude des effets de la composition chimique et de la contrainte sur l'évolution des défauts étendus. t<sub>a</sub> et t<sub>b</sub> représentent les épaisseurs des couches déposées (cf. Figure 100).

### III RESULTATS PRELIMINAIRES

Des analyses structurales préliminaires ont été effectuées sur toutes les plaquettes afin d'examiner la qualité cristalline et l'épaisseur des différentes couches des hétérostructures (Tableau 8). Ainsi, des analyses MET et GPA (Analyse de Phase Géométrique ou Geometric Phase Analysis) [14] ont permis de mesurer, pour toutes les couches de Si et de SiGe relaxées et contraintes, les épaisseurs des couches, la présence de défauts (à cause d'une relaxation partielle ou recristallisation imparfaite), la valeur de la contrainte dans la couche, et la position des défauts étendus créés par l'implantation ionique. Déterminer la position de ces défauts est nécessaire pour s'assurer que les défauts se forment et évoluent dans la couche appropriée. D'autre part, la valeur de la profondeur d'amorphisation est un paramètre important pour l'élaboration de modèles dans le cas d'implantation amorphisante.

#### III.1 Couches relaxées

Les couches de SiGe relaxé ont été utilisées pour analyser l'effet de la composition chimique sur l'évolution des défauts étendus. Les images MET prises en "cross section" dans des conditions de champ sombre en faisceau faible montrent que les défauts structuraux (dislocations de misfit) sont entièrement contenus dans le substrat virtuel, confirmant que la couche superficielle de SiGe est totalement relaxée et libre de défauts. Cela est vérifié sur la Figure 101.a où les défauts structuraux apparaissent comme des lignes de contraste clair.

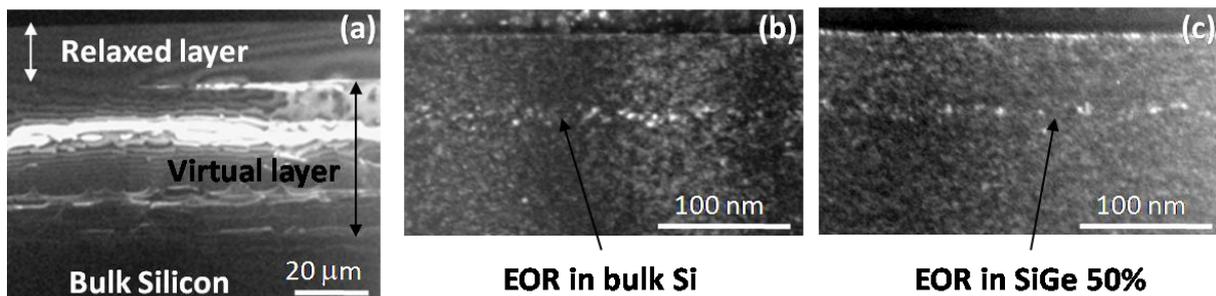


Figure 101 : (a) Images de MET de la couche de  $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$  relaxée en 'cross section' dans des conditions de champ sombre et (b) Images MET du silicium et (c) de la couche de  $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$  relaxée dans des conditions de champ sombre faisceau faible après recuit à 680°C 300s d'une implantation amorphisation de  $\text{Ge}^+$ .

La position de la bande de défauts suite à une implantation amorphisante a été également extraite à partir des mesures MET pour différentes teneurs en Ge. Les résultats montrent que les défauts se forment et évoluent à environ 65nm de la surface. Les Figure 101.b et Figure 101.c montrent clairement la profondeur de la bande des défauts EOR dans l'échantillon témoin et celui du SiGe de 50% de composition de Ge. Nous n'avons pas reproduit le même type de mesures dans le cas des implantations non amorphisantes de Si puisque dans ce cas une simple approximation du modèle "+1" permet de simuler avec précision la distribution initiale des interstitiels.

#### III.2 Couches contraintes

Un film de silicium contraint en tension entre deux couches de  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  de 20% de composition de Ge (cf. Tableau 8) a été utilisé pour étudier l'influence de la contrainte sur l'évolution des défauts étendus.

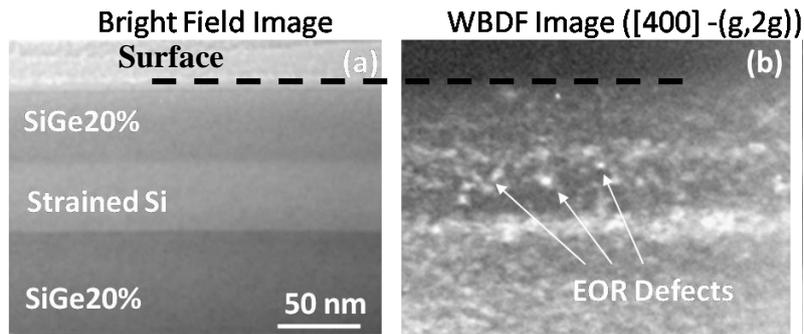


Figure 102 : (a) Images MET en cross section de la couche de Si contraint (SiGe20%/Si/SiGe20%) et (b) après recuit à 600°C 240s d'une implantation amorphisation de Ge<sup>+</sup>.

Les analyses MET de l'échantillon contenant les couches de SiGe de 20% de composition de Ge (Figure 102 (a, b)) montrent qu'en dehors du substrat virtuel les couches sont libres de défauts structuraux et elles ont bien les épaisseurs prévues. La bande de défauts de fin de parcours est elle aussi située à la position prévue, c'est à dire dans la couche de silicium contraint, à une distance d'environ 65nm de la surface. Des mesures GPA ont été effectuées pour confirmer l'état de contrainte du film de Si.

Comme pour le silicium contraint, une série de mesures a été réalisée dans l'échantillon de Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> contraint sur lequel se basera l'étude de l'évolution des défauts (cf. Tableau 8). Les images obtenues témoignent de la qualité de la structure de Si<sub>0,8</sub>Ge<sub>0,2</sub> (Figure 103.a et Figure 103.b), aucun défaut structural n'étant apparu dans ces couches. En outre, les défauts de fin de parcours sont bien situés à la position prévue.

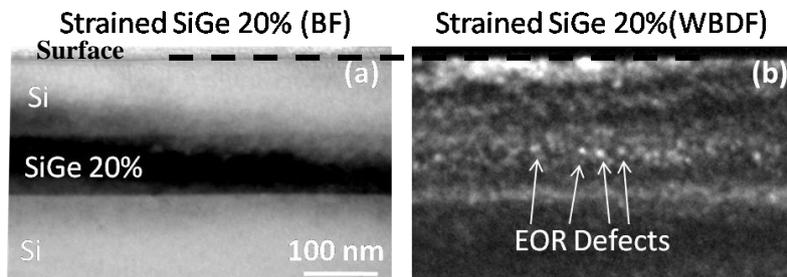


Figure 103 : (a) Images MET en cross section de la couche de SiGe contraint (Si/ SiGe20%/Si) et (b) après recuit à 600°C 240s d'une implantation amorphisation de Ge.

L'holographie électronique en champ sombre [15] a été utilisé pour déterminer la répartition des déformations dans la structure Si<sub>0,8</sub>Ge<sub>0,2</sub> et confirmer l'état de contrainte de la couche SiGe.

#### IV EFFET DE LA COMPOSITION CHIMIQUE

Dans cette section, nous présentons d'abord une étude rigoureuse de l'évolution des défauts étendus et de la diffusion accélérée du bore dans des substrats de silicium et d'alliages silicium/germanium à différents pourcentages de germanium. Ensuite, le modèle de simulation des défauts sera modifié pour tenir compte des effets observés.

## IV.1 Résultats Expérimentaux : défauts étendus

L'évolution des défauts étendus en fonction de la teneur en Ge des alliages  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  a été étudiée par MET. Nous avons extrait à partir des structures relaxées de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 20\%$ ,  $35\%$  et  $50\%$ ) (cf. Tableau 8), la densité de défauts et le nombre total d'interstitiels capturés dans les défauts étendus. Les deux types d'implantation, non amorphisante ( $\text{Si}^+$ ) et amorphisante ( $\text{Ge}^+$ ) sont traités. En effet, ils nous ont permis d'étudier l'évolution des défauts à la fois en faible et fort régimes de sursaturation en interstitiel. On note qu'une sursaturation élevée (dose importante) augmente la possibilité pour les défauts étendus d'évoluer vers des formes plus stables (boucles de dislocation). En outre, au cours du recuit, les défauts  $\{311\}$  peuvent grandir et se transformer en boucles de dislocation ; cette évolution est d'autant plus favorable que le bilan thermique appliqué est élevé. L'analyse des échantillons amorphisés au  $\text{Ge}^+$  devraient nous fournir des informations supplémentaires sur la cinétique de l'évolution des boucles de dislocation. Au cours de la description des résultats, l'évolution des défauts dans les couches SiGe sera régulièrement comparée à celle observée dans le silicium. En effet, les mécanismes régissant le comportement des défauts étendus dans le silicium étant identifiés et compris, se référer aux résultats du Si nous permettra d'introduire les concepts physiques de base nécessaires à l'interprétation de nos résultats dans les alliages SiGe.

### IV.1.1 Implantation non amorphisante : $40\text{keV Si}^+$ , $6 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$

Des échantillons de Silicium et de SiGe relaxés ont été implantés au  $\text{Si}^+$  à  $40\text{keV}$  pour une dose de  $6 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$ , et recuit à  $740^\circ\text{C}$  pendant 300 et 900s (cf. Tableau 8). La Figure 104 résume les résultats de l'étude par MET des échantillons recuits à  $740^\circ\text{C}$  pendant 900s.

Extended defects after Si Implant and anneal at  $740^\circ\text{C}$  for 900 s

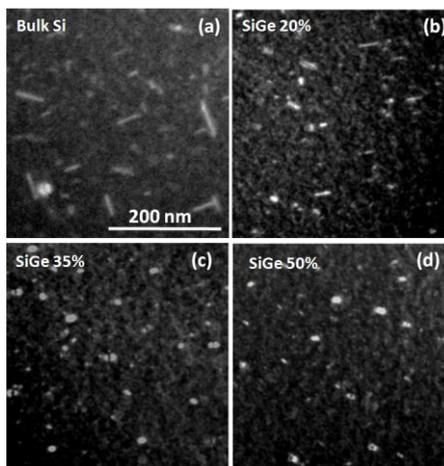


Figure 104 : Images de MET du silicium et de la couche de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  relaxée après 900s de recuit à  $740^\circ\text{C}$ . En vue plane dans des conditions de champ sombre ( $g=[422]$ ,  $s<0$ ), les défauts  $\{311\}$  et les boucles de dislocation partielle apparaissent sur les images par des zones de fort contraste clair sur fond sombre.

Les images MET montrent que la distribution des défauts varie d'un échantillon à l'autre. Si l'on regarde l'échantillon de référence (silicium), les défauts visibles sont majoritairement de type  $\{311\}$  (bâtonnets, Figure 104.a). Quelques boucles de dislocation fautées (FDL) sont également observées. Pour la structure  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$  relaxée (Figure 104.b) les deux types de défauts sont visibles. En revanche, la taille moyenne et la densité des défauts  $\{311\}$  sont inférieures par rapport à l'échantillon témoin alors que la densité des FDL a augmenté. Cet effet s'accroît dans les structures relaxées de  $\text{Si}_{0.65}\text{Ge}_{0.35}$  et  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  où la densité des dislocations FDLs continue d'augmenter. En particulier, dans le cas de la couche  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$

seules les FDLs sont observées (Figure 104.d). Il est important de noter qu'il est difficile de détecter les défauts {311} lorsque leur taille est faible. Des critères de visibilité ont été appliqués dans ce cas sur plusieurs images dans des conditions de champ sombre faisceau faible en utilisant différents vecteurs de diffraction ([220], [400] et [422]) afin de déterminer la nature des défauts.

La Figure 105 décrit les évolutions temporelles, extraites des images MET, de la densité des différents types de défauts ainsi que du nombre total d'atomes ( $N_b$ ) pris dans les défauts. Les défauts sont répartis en deux groupes : les défauts {311} et les boucles de dislocation. La catégorie des boucles contient les boucles de dislocation fautées (FDL), parfaites (PDL) et en forme de bâtonnet RL {111}. En effet, dans les modèles de simulation, les trois types de boucles sont confondus [16, 17] car ils ont une structure et des énergies de formation similaires.

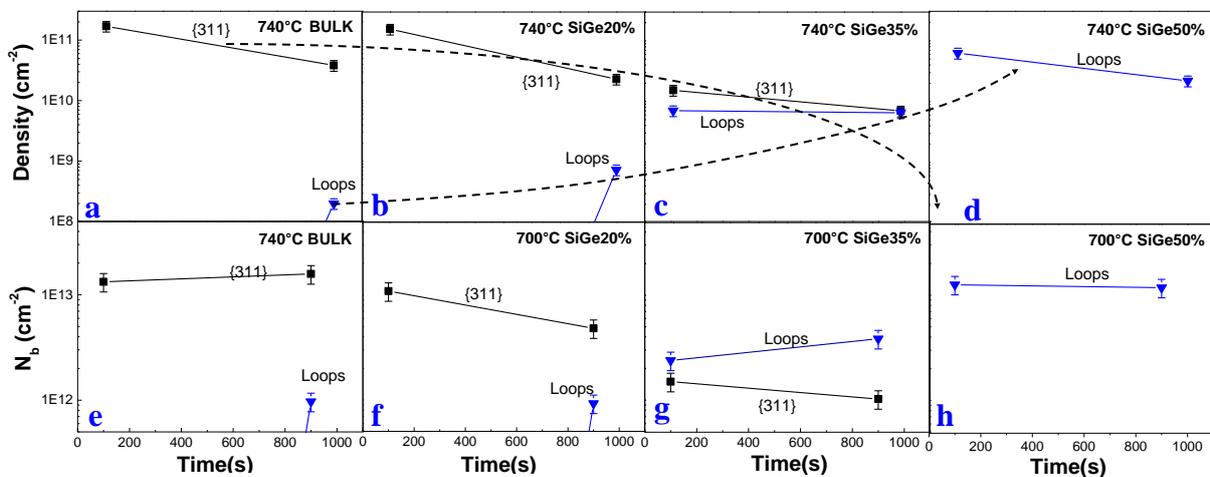


Figure 105 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} et dans les boucles ( $N_b$ ) pendant un recuit à 740°C dans le silicium et dans les couches  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ ,  $Si_{0.65}Ge_{0.35}$ , et  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  sous  $N_2$  après une implantation  $Si^+$ , 40 keV,  $6 \times 10^{13} \text{at.cm}^{-2}$ .

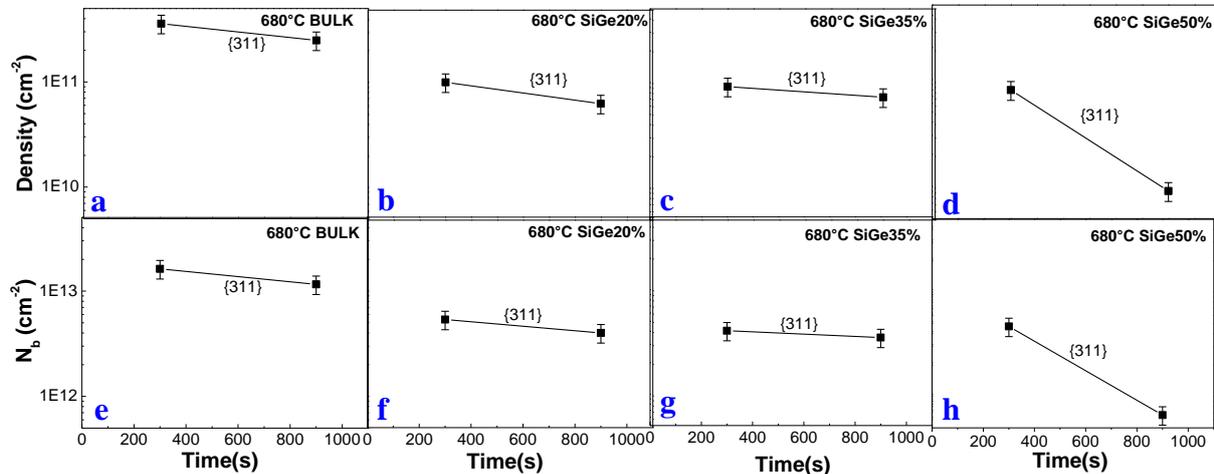
Ces résultats montrent clairement que, à cette température, la densité des défauts {311} diminue avec la teneur en Ge, alors que la formation des boucles est favorisée par la présence de germanium dans la couche comme indiqué par les deux flèches en pointillé sur la Figure 105 (a-d). Le fait que la densité d'atomes piégés dans les défauts {311},  $N_b$  {311} relatif aux défauts {311} diminue d'une structure à l'autre indique que ces défauts deviennent moins stables lorsque l'on augmente la concentration de Ge.

Les résultats obtenus aux autres températures étudiées, confirment ces conclusions : la formation de boucles de dislocation augmente avec la teneur en Ge alors que les défauts {311} deviennent moins stables lorsque l'on augmente la concentration de Ge d'une couche de SiGe relaxé.

#### IV.1.2 Implantation amorphisante : 35keV $Ge^+$ , $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$

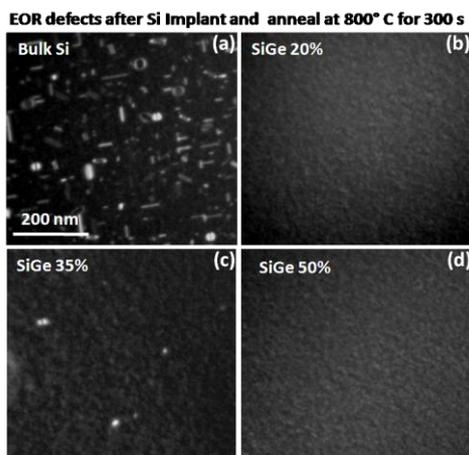
Les échantillons SiGe relaxés ont été recuits à 680 et 800°C après une implantation amorphisante au  $Ge^+$  à 35keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . La Figure 106 présente l'ensemble des résultats obtenus après recuit à 680°C pendant 300 et 900s. Ces résultats sont

particulièrement intéressants car à 680°C seuls les défauts {311} sont observés et les "isoler" nous permet de mieux comprendre les mécanismes physiques qui contrôlent leur évolution. Les évolutions temporelles de la densité et du  $N_b$  (311) rapportées sur la Figure 106 montrent que la stabilité des défauts {311} diminue avec la teneur en Ge de la couche relaxée de SiGe, en accord avec les conclusions de la partie précédente.



**Figure 106 :** Evolution temporelle de la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} et dans les boucles ( $N_b$ ) pendant un recuit à 680°C dans le silicium et dans les couches  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ ,  $Si_{0.65}Ge_{0.35}$ , et  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  sous  $N_2$  après une implantation  $Ge^+$ , 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

La diminution de la stabilité des défauts observés à 680°C est accentuée à 800°C comme en témoignent les images MET présentées sur la Figure 107 obtenues après un recuit de 300s. Les défauts {311} et les boucles de dislocation cohabitent dans l'échantillon de référence. Or, seules quelques boucles de dislocation résiduelles sont observées dans les échantillons SiGe. Dans ce cas, l'augmentation de la teneur en Ge dans les couches SiGe conduit à une transformation plus rapide des {311} en boucles. Plus "surprenant", nous n'avons pas observé de défauts dans les couches de SiGe lorsque la teneur en Ge est de 20% et 50%, tandis qu'une population résiduelle de boucles de dislocation se trouve dans l'échantillon à 35 % de Ge.



**Figure 107 :** Images de MET du silicium et de la couche de  $Si_{1-x}Ge_x$  relaxée après un recuit de 300s à 800°C. En vue plane dans des conditions de champ sombre ( $g=[422]$ ,  $s<0$ ), les défauts {311} et les boucles de dislocation apparaissent sur les images par des zones de fort contraste clair sur fond sombre.

La Figure 108 décrit l'ensemble des résultats obtenus après recuit à 800°C. Lorsque le budget thermique est important (800°C), une cinétique plus rapide de ces deux effets est attendue : la stabilité diminue et le taux de transformation des défauts {311} en boucles croît avec l'augmentation de la teneur en Ge. Le premier effet conduit à une dissolution plus rapide de

l'ensemble des défauts. En revanche, les boucles de dislocation étant énergétiquement plus stables, le second effet conduit à un ralentissement du processus global de dissolution. La combinaison de ces deux phénomènes peut donc expliquer les résultats "surprenants" obtenus dans ces conditions de recuit : pour un alliage SiGe 20%, la densité des interstitiels contenus dans les boucles n'était que de 35% du total après 30s (Figure 108.b). Dans ce cas, un recuit plus long (300s) conduit à la dissolution complète de défauts. En revanche, pour une teneur en Ge de 35%, la population de défaut est déjà entièrement composée de boucles de dislocation après 30s de recuit, qui peuvent par conséquent "survivre" au plus long recuit (300s). Enfin, pour un alliage  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ , la quantité des interstitiels contenus dans les défauts est déjà très faible au bout de 30s à  $800^\circ\text{C}$ , ainsi dans ce cas, un recuit plus long conduit inévitablement à une dissolution complète des défauts.

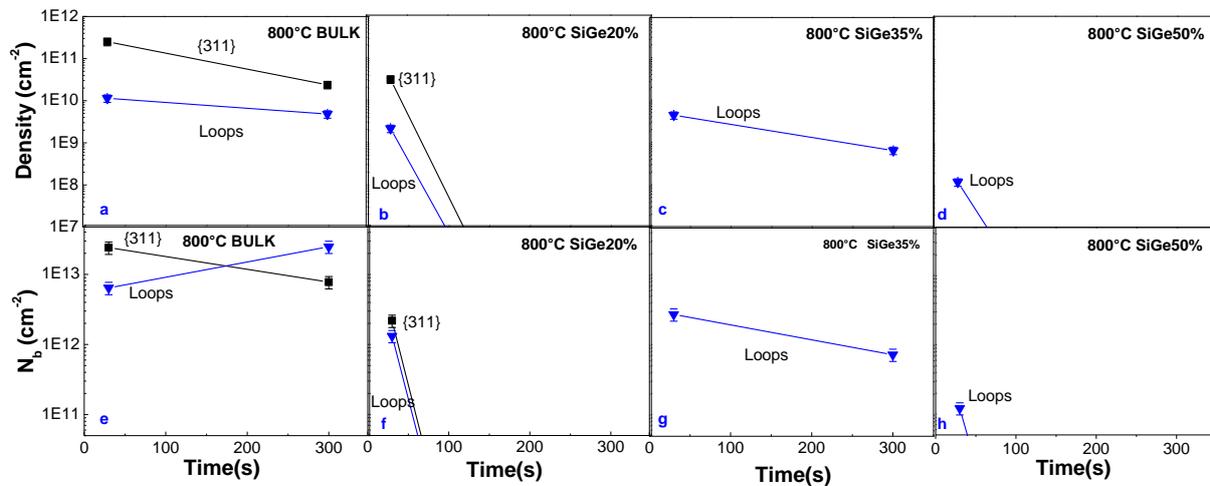


Figure 108 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} et dans les boucles ( $N_b$ ) pendant un recuit à  $800^\circ\text{C}$  dans le silicium et dans les couches  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ ,  $\text{Si}_{0.65}\text{Ge}_{0.35}$ , et  $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  sous  $\text{N}_2$  après une implantation  $\text{Ge}^+$ , 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

En résumé, l'étude des échantillons implantés au Si et au Ge a révélé que la composition des alliages a une influence fondamentale sur l'évolution des défauts dans les couches SiGe relaxées. En particulier, les défauts {311} et les boucles de dislocation sont moins stables lorsque l'on augmente la concentration de Ge. En outre, la formation de boucles de dislocation est favorisée lorsque la concentration de Ge augmente.

## IV.2 Simulations

L'étude expérimentale menée dans les empilements formés d'alliages et de fines couches relaxées de Si et de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  a permis de mettre en évidence les effets majeurs de la composition chimique sur l'évolution des défauts dans ces alliages. Le modèle utilisé pour décrire la cinétique de ces défauts repose sur le modèle "ClusterModel" que nous avons adapté à ces matériaux. L'intérêt majeur de ce modèle est de présenter une forme analytique compacte ne faisant intervenir qu'un nombre restreint de paramètres. Les paramètres ajustés à partir des résultats expérimentaux ont permis de valider l'aptitude du modèle à prédire les comportements des défauts dans les alliages SiGe sous l'effet de la variation de leur composition chimique.

Dans cette section, nous simulons tout d'abord les expériences menées dans le Si, nous présentons ensuite l'ensemble des résultats numériques obtenus dans les alliages SiGe et nous finissons par exposer les paramètres du modèle mis en jeu. Il est à noter que les profils d'implantation ont été simulés en utilisant la méthode analytique (cf. chapitre III, section II).

Pour modéliser les effets de composition sur l'évolution des défauts {311} et des boucles de dislocation dans les couches de SiGe, nous avons fait varier les paramètres suivants en fonction de la teneur en Ge :

- **"ifactor"**, qui détermine l'excès d'interstitiels contenus en dessous de la couche amorphe. Pour les implantations non amorphisantes en Si, un **"ifactor"** égal à zéro a été utilisé. Le **"ifactor"** relatif au Ge a été considéré comme un paramètre d'ajustement.
- **"dfactor"** : ce paramètre détermine la profondeur de la couche amorphe. Il est ajusté selon la profondeur d'amorphisation mesurée par MET.
- $k'_{311}$  : contrôle la formation des défauts {311}.
- $k_{311 \rightarrow DL}$  : contrôle la transformation des défauts {311} en boucles de dislocation.
- $k'_{311}$  : contrôle la dissolution des défauts {311} via leur taux d'émission d'interstitiels.

Le reste des paramètres du modèle, y compris le produit  $D_I C_I^*$  et les énergies de formation des petits clusters d'interstitiels (SMICs), a été gardé inchangé par rapport à leurs valeurs ajustées dans le silicium, comme décrit dans le quatrième chapitre, ceci pour garantir la compatibilité du modèle SiGe avec les autres modèles déjà développés et implémentés dans Sentaurus Process.

Ce choix a été aussi supporté par les résultats obtenus, pendant la dernière période du projet ATOMICS, par le groupe du Professeur Nick Cowern sur l'évolution de la diffusion accélérée du bore en présence de défauts étendus dans des couches de SiGe. En effet, les échantillons de Si et de SiGe décrits précédemment (cf. Tableau 8) contiennent aussi des marqueurs de bore pour l'étude de la TED (cf. Figure 109).

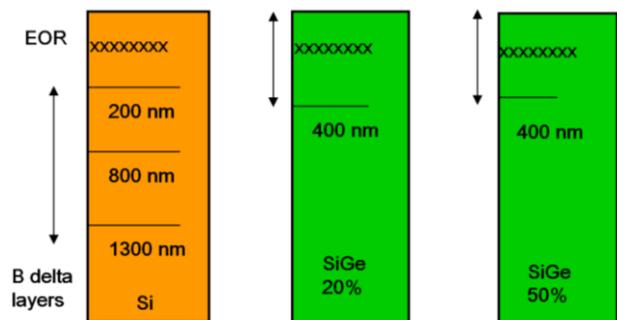


Figure 109 : Représentations schématiques des structures d'étude utilisées pour l'évolution de la TED dans les alliages SiGe relaxé. L'échantillon silicium nous servira de structure de référence pour nos investigations.

La Figure 110.a illustre un exemple de profils de concentration de bore mesurés par SIMS dans l'échantillon  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$  amorphisé au  $Ge^+$  ( $35keV, 10^{15}at.cm^{-2}$ ) avant et après recuit à  $800^{\circ}C$ .

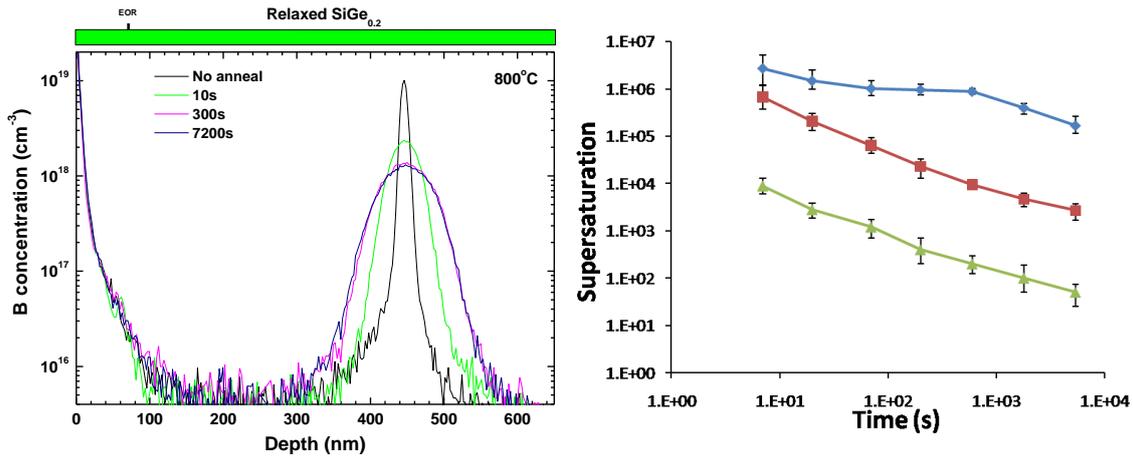


Figure 110 : Profils SIMS des marqueurs de bore implantés avec  $\text{Ge}^+$  à une énergie de 35keV et pour une dose de  $1.10^{15}\text{at.cm}^{-2}$ . Le profil noir correspond à l'échantillon non recuit. Les profils en couleurs correspondent aux échantillons recuits à 800°C pendant plusieurs temps. b) Accélération de la diffusion des marqueurs de bore, implantés avec  $\text{Ge}^+$  à une énergie de 35keV et une dose de  $1.10^{15}\text{at.cm}^{-2}$  et recuits à 800°C (courbe verte), 740°C (courbe rouge) et 680°C (courbe bleu), en fonction du temps de recuit.

A partir de ces profils SIMS l'amplitude de l'accélération de la diffusivité (ie. Sursaturation en atomes de Siliciums interstitiels) a été évaluée à l'aide de la méthode décrite au chapitre 5 (section III.1). Les résultats sont présentés dans Figure 110.b qui révèle l'évolution temporelle de la sursaturation de l'échantillon  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . Ensuite, les valeurs du produit  $D_I C_I^*$  (Figure 111.a) et de l'énergie de formation des petits clusters (SMICs) contenant jusqu'à 10 atomes ont été extraites à l'aide de la théorie de la maturation d'Ostwald (cf. chapitre 2 section I.3.2) (Figure 111.b). En effet, les deux paramètres étudiés varient très peu en fonction de la teneur en Ge.

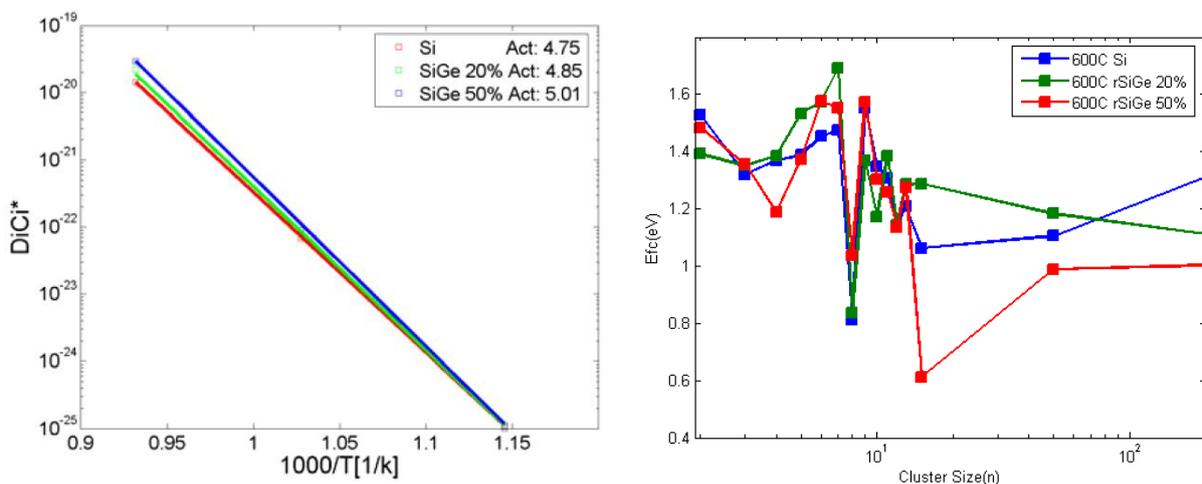
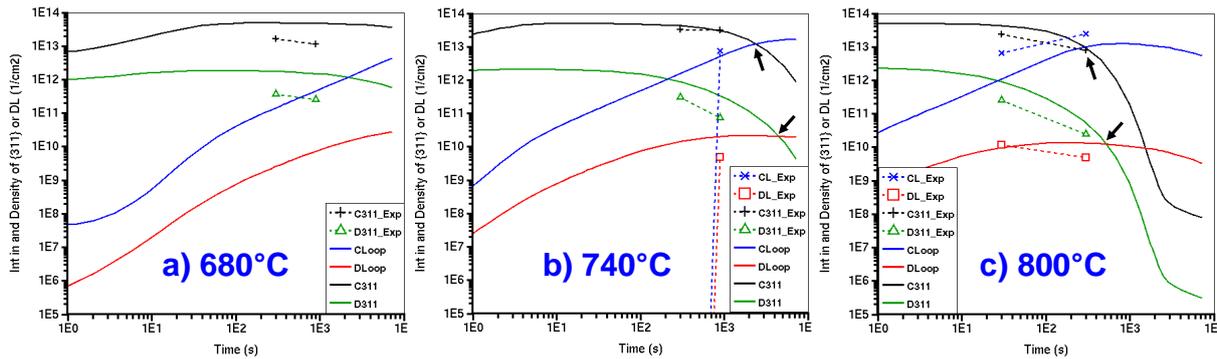


Figure 111 : a) Le produit  $D_I C_I^*$  (Courbe rouge) Si, (courbe verte) SiGe 20% et (courbe bleu) SiGe 50%. b) Energie de formation en fonction du nombre d'atomes de silicium interstitiels pris dans le défaut à 600°C. (Courbe bleu) Si, (courbe verte) SiGe 20% et (courbe rouge) SiGe 50%.

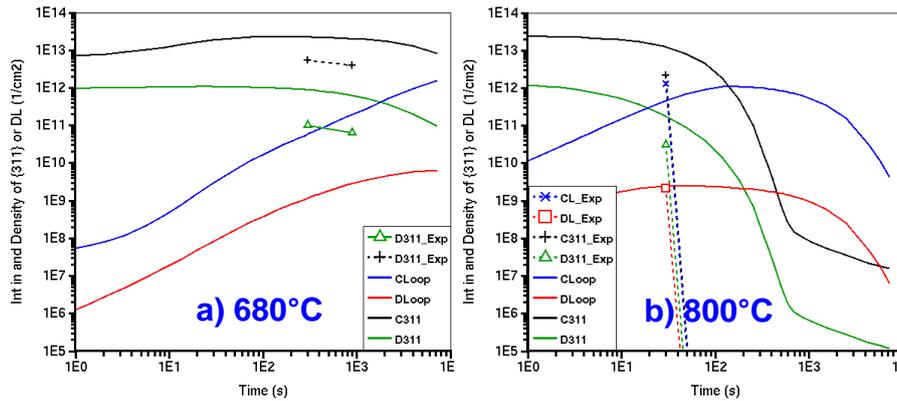
Nous avons simulé dans un premier temps les expériences effectuées dans le silicium pour le cas de l'implantation amorphisante, ensuite nous nous sommes intéressés au SiGe. Pour cela, nous avons repris les évolutions temporelles de la densité et du nombre total d'atomes de Si (Nb) contenus dans les défauts {311} et les boucles de dislocation à 680, 740 et 800°C après une implantation amorphisante ( $35\text{keV Ge}^+$ ,  $1.10^{15}\text{at.cm}^{-2}$ ). Ces résultats sont reportés sur la Figure 112.



**Figure 112 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) pendant un recuit (a) à 680°C, (b) à 740°C et (c) à 800°C sous  $N_2$  après une implantation  $Ge^+$ , 35keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  pour le silicium. Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations "ClusterModel" (trait continu).**

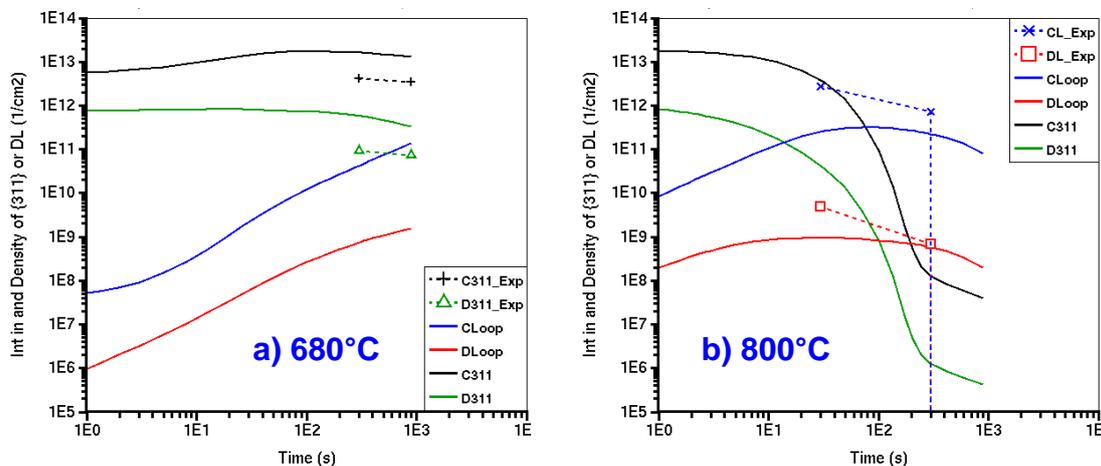
Le modèle "ClusterModel" reproduit bien la densité des défauts {311} (D311) (triangles) et la quantité d'auto-interstitiels contenus dans ces défauts (C311) (croix) à toutes les températures étudiées, exception faite à basse température où l'on constate une importante surestimation de ces paramètres à 680°C (cf. Figure 112.a). Ce résultat est probablement dû à l'extrême "simplification" de la modélisation des petits amas d'interstitiels, dont seulement trois tailles possibles sont considérées (cf. chapitre 3 section II.2.2). Cette faiblesse est d'autant plus lourde de conséquences sur les résultats des simulations que le pourcentage de SMICs dans la population totale de défauts est important, ce qui est le cas à basse température. En revanche, un meilleur accord est obtenu à 740 et 800°C en raison de la formation des boucles de dislocation et de la transformation des défauts {311} en boucles ce qui permet de réduire leur densité. En ce qui concerne la simulation des boucles de dislocation, le modèle montre un bon accord à 740 et à 800°C, bien que les simulations prévoient que les boucles de dislocation soient présentes déjà après des temps de recuit très courts. Ainsi, à l'exception d'une formation accélérée des boucles de dislocation par rapport aux mesures, le modèle "ClusterModel" reproduit correctement l'évolution des défauts étendus dans le silicium sans ajustement supplémentaire par rapport aux valeurs obtenus précédemment (cf. chapitre IV), notamment en ce qui concerne l'instant où les boucles de dislocation deviennent majoritaires (en termes de densité de défauts ou d'interstitiels piégés) au sein de la population de défauts (cf. flèches Figure 112.b et Figure 112.c).

Nous passons maintenant à la simulation des données expérimentales relatives aux couches relaxées de SiGe à différents teneurs en Ge (20, 35 et 50%). Pour la couche  $Si_{0.8}Ge_{0.2}$  relaxée, l'évolution temporelle des défauts étendus à 680 et 800°C est présentée sur les Figure 113.a et Figure 113.b, respectivement.



**Figure 113 :** Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) dans la couche Si<sub>0,8</sub>Ge<sub>0,2</sub> pendant un recuit (a) à 680°C et (b) à 800°C sous N<sub>2</sub> après une implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>, 35keV, 1x10<sup>15</sup>at.cm<sup>-2</sup>. Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations "ClusterModel" (trait continu).

Le comportement des défauts au cours du recuit à basse température (680°C) est similaire à celui observé dans l'échantillon témoin (Figure 112.a), toutefois, la densité des défauts {311} est légèrement plus faible dans le SiGe. Cette diminution est plus prononcée à 800°C où les deux types de défauts {311} et boucles de dislocation présentent une densité beaucoup plus faible après 30s de recuit par rapport au silicium (cf. Figure 112.c), entraînant une dissolution complète des défauts au bout de 300s de recuit. Ce comportement est qualitativement reproduit par les simulations (cf. Figure 113.b), mais le modèle prédit la présence d'une population résiduelle de boucles de dislocation après 300s de recuit.



**Figure 114 :** Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) dans la couche Si<sub>0,65</sub>Ge<sub>0,35</sub> pendant un recuit (a) à 680 °C et (b) à 800 °C sous N<sub>2</sub> après une implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>, 35 keV, 1x10<sup>15</sup> at.cm<sup>-2</sup>. Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations "ClusterModel" (trait continu).

L'augmentation de la teneur en germanium à 35% favorise la formation des boucles de dislocation par rapport aux défauts {311}, comme le montre la Figure 114. En outre, les boucles de dislocation sont relativement plus stables. Le modèle "ClusterModel" reproduit ce comportement avec une bonne précision.

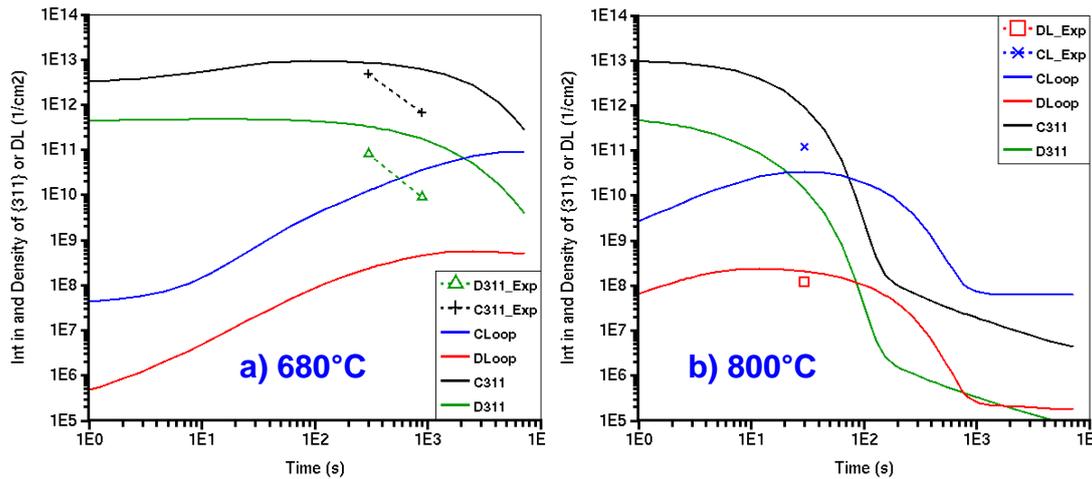


Figure 115 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) dans la couche  $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$  pendant un recuit (a) à 680 °C et (b) à 800 °C sous  $\text{N}_2$  après une implantation amorphisante au  $\text{Ge}^+$ , 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations "ClusterModel" (trait continu).

Enfin, dans la couche de SiGe à 50% de composition en Ge, la dissolution des défauts {311} est plus importante (cf. Figure 115.a). Pour les bilans thermiques élevés, les boucles de dislocation deviennent moins stables, tel que reproduit par le modèle (cf. Figure 115.b).

A partir de l'analyse des échantillons SiGe relaxés, amorphisés par une implantation  $\text{Ge}^+$ , l'évolution des défauts étendus a été reproduite avec les paramètres rassemblés dans la Figure 116. Ces valeurs sont des facteurs multiplicatifs appliqués aux paramètres du modèle dans le Silicium. En effet, pour  $x_{\text{Ge}} = 0\%$  on retrouve les valeurs calibrées dans le chapitre 4.

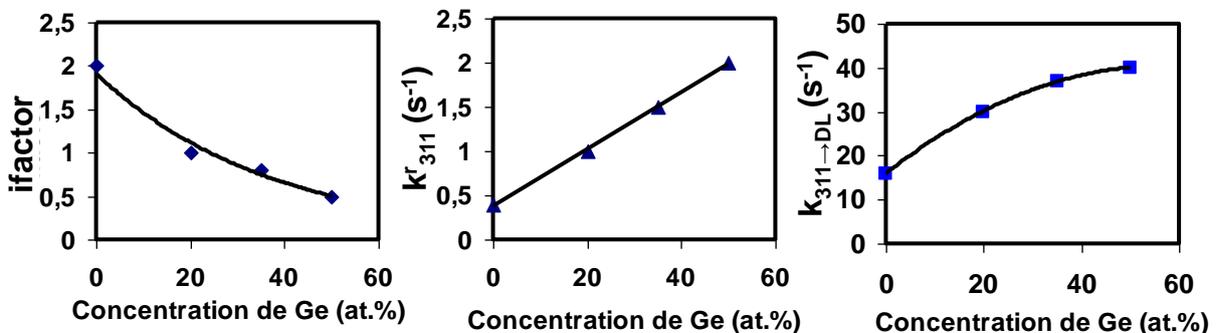


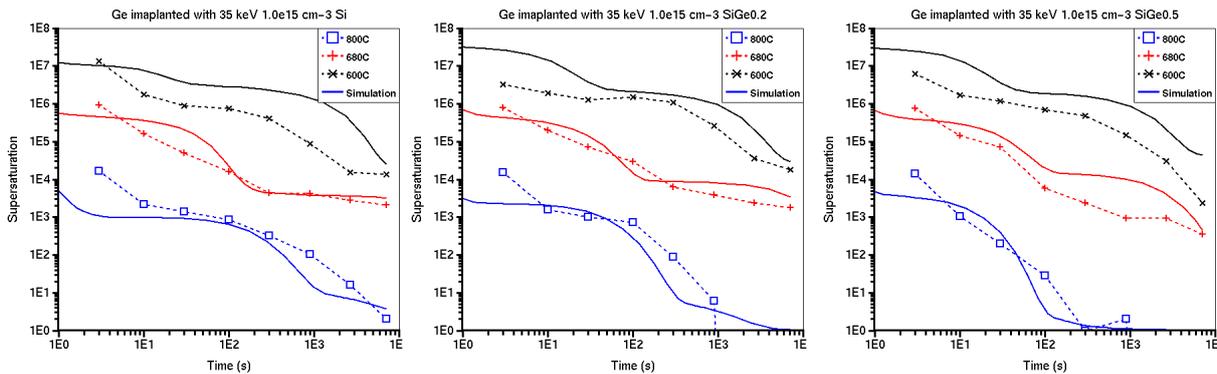
Figure 116 : Evolution des facteurs multiplicatifs appliqués aux paramètres du modèle "ClusterModel" dans le silicium en fonction de la teneur en Ge après implantation amorphisante au  $\text{Ge}^+$ .

La diminution de la stabilité des défauts {311} et des boucles de dislocation avec l'augmentation de la teneur en Ge est modélisée par une émission légèrement plus élevée d'interstitiels par les défauts {311} (paramètre  $k'_{311}$ ) et un taux de transformation plus élevé des défauts {311} en boucles de dislocation (paramètre  $k_{311 \rightarrow DL}$ ) en fonction de la teneur en Ge. Le paramètre  $ifactor$  est aussi ajusté afin de réduire le réservoir d'interstitiel ( $N_i$ ) avec l'augmentation de la teneur en Ge. Enfin, une régression des paramètres d'ajustement a été effectuée pour une meilleure implémentation de la version finale du modèle dans Sentaurus Process.

Pour simuler l'évolution de la sursaturation d'interstitiels, les valeurs du produit  $D_i C_i^*$  et des paramètres relatifs aux petits amas d'interstitiels n'ont pas été modifiés par rapport à leur

valeurs ajustés dans le silicium. Comme expliqué précédemment, seuls les paramètres relatifs aux défauts {311} et aux boucles de dislocations ont été modifiés.

Pour les différentes températures, on retrouve bien les principales caractéristiques de la TED; c'est-à-dire une accélération de la diffusion qui diminue avec le temps de recuit et qui augmente avec la réduction de la température. Aussi relève-t-on une grande amplitude de la TED aux temps de recuit les plus courts. Ces amplitudes passent par des valeurs intermédiaires avant de connaître une forte chute pour des temps de recuit très longs.



**Figure 117 : Sursaturation d'interstitiels en fonction du temps de recuit : comparaison entre les valeurs mesurées et la simulation. (a) Silicium, (b)  $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$  et (c)  $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ .**

Comme nous pouvons le constater sur la Figure 117, un bon accord est obtenu avec les résultats expérimentaux, exception faite à 600°C où la sursaturation en interstitiels est surestimée même dans le silicium. Comme considéré lors de la simulation de l'évolution des défauts, ce résultat est probablement dû à l'extrême "simplification" de la modélisation des petits amas d'interstitiels, dont seulement trois tailles possibles sont considérées (cf. chapitre 3 section II.2.2) et l'introduction de petits amas complémentaires pourrait sans doute contribuer à une meilleur predictivité à 600°C.

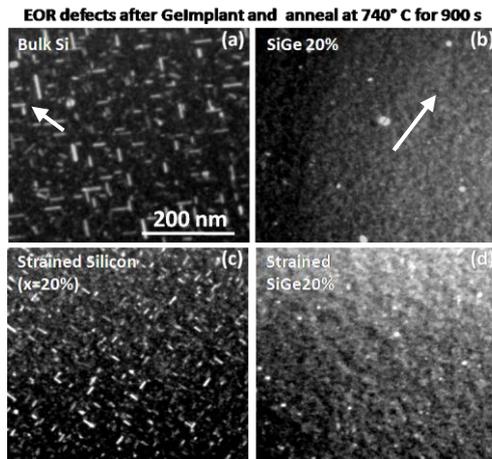
## V EFFET DE LA CONTRAINTE : SI ET SiGe

Dans cette partie, nous allons présenter les résultats expérimentaux de l'évolution des défauts étendus et de la TED dans des couches contraintes de Si et de SiGe. Le modèle "ClusterModel" sera adapté pour simuler l'ensemble de ces résultats.

### V.1 Résultats Expérimentaux : défauts étendus

Pour étudier les effets des contraintes sur l'évolution des défauts, les couches contraintes de Si (SiGe/s-Si/SiGe) et de  $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$  (Si/s-SiGe/Si) ont été utilisées. Tous les échantillons ont été amorphisés au  $\text{Ge}^+$  à 35keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . Les résultats obtenus sont comparés au silicium (référence) et au  $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$  relaxé. Il faut noter à ce stade que l'équivalence entre les structures relaxées et contraintes n'est que partielle. En effet, l'évolution des défauts dépend de la composition de la couche dans laquelle ils se forment mais elle peut aussi dépendre de la composition de la couche adjacente. En outre, la couche contrainte de Si est séparée de la surface par une couche de SiGe de 40 nm d'épaisseur (cf. Figure 100.d), tandis que dans la structure relaxée équivalente, c'est à dire l'échantillon de référence (silicium), aucune couche n'est déposée au dessus. Bien que cette différence puisse

compliquer l'interprétation directe des résultats, il ne limite pas la possibilité d'exploiter ces données pour élaborer le modèle.



**Figure 118 :** Images de MET du silicium et du silicium contraint et de la couche de  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  relaxée et contrainte en vue plane dans des conditions de champ sombre ( $g=[422]$ ,  $s<0$ ). Les défauts  $\{311\}$  et les boucles de dislocation partielle sont représentés sur ces images par des zones de fort contraste clair sur fond sombre.

Pour étudier les effets des contraintes, les échantillons amorphisés au  $\text{Ge}^+$  ont été analysés par MET dans des conditions de champ sombre en faisceau faible après recuit à 740 et 800°C. Le Tableau 8 résume tous les bilans thermiques utilisés pour les structures contraintes implantées au  $\text{Ge}^+$ .

Les images MET de la Figure 118 synthétisent l'évolution des défauts étendus dans les structures contraintes de Si et de SiGe recuits à 740°C pendant 900s. On constate que les défauts  $\{311\}$  ont une taille plus faible et une densité légèrement plus élevée dans l'échantillon de Si contraint (Figure 118.c) par rapport à la référence (Figure 118.a). En outre, alors que les défauts  $\{311\}$  représentent la totalité de la population de défauts dans l'échantillon de Si contraint, une petite fraction de boucles est présente dans la référence (cf. flèche, Figure 118.a). Ces résultats suggèrent que la maturation d'Ostwald des défauts  $\{311\}$  est en quelque sorte "retardée" par la présence de la déformation en tension, qui est également responsable d'une transformation  $\{311\}$ /boucles moins efficace. Le comportement inverse est observé dans le cas de la contrainte en compression introduite dans la couche de SiGe: alors que certains défauts  $\{311\}$  sont toujours présents dans la structure relaxée de SiGe (cf. flèche, Figure 118.b), l'échantillon de SiGe contraint en compression ne contient que des boucles de dislocation. Comme dans le cas précédent, la stabilité globale des défauts n'est pas fortement modifiée avec la densité des interstitiels contenus dans les défauts étant comparable dans les deux structures. L'analyse quantitative des échantillons étudiés confirme ce comportement. Les Figure 119 et Figure 120 rapportent, respectivement, les données quantitatives relatives aux échantillons recuits à 740 et 800°C.

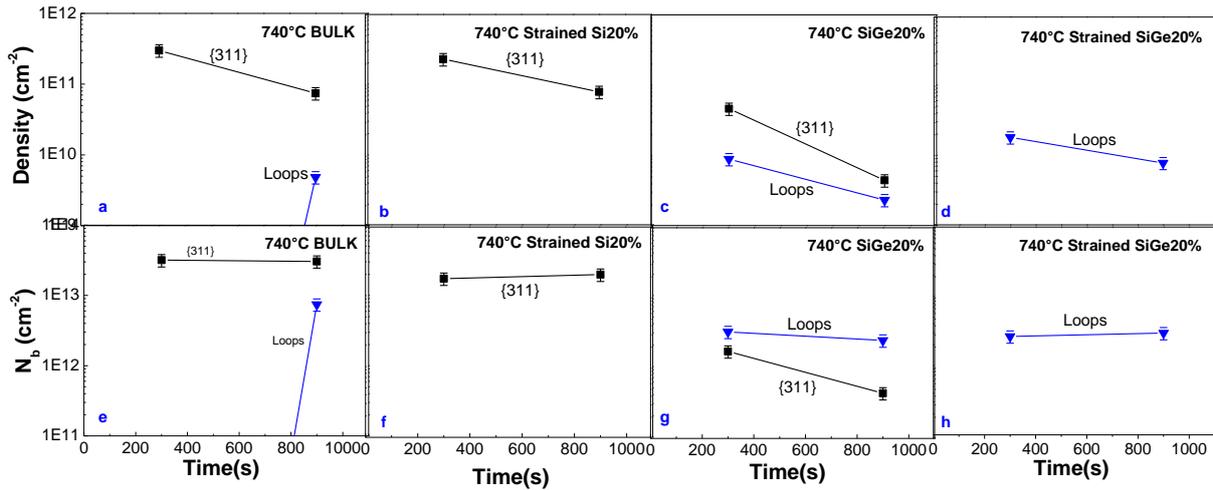


Figure 119 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} et dans les boucles ( $N_b$ ) pendant un recuit à 740°C dans le silicium dans le silicium contraint et dans les couches de  $Si_{0,8}Ge_{0,2}$  relaxé et contraint, sous  $N_2$  après une implantation  $Ge^+$ , 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

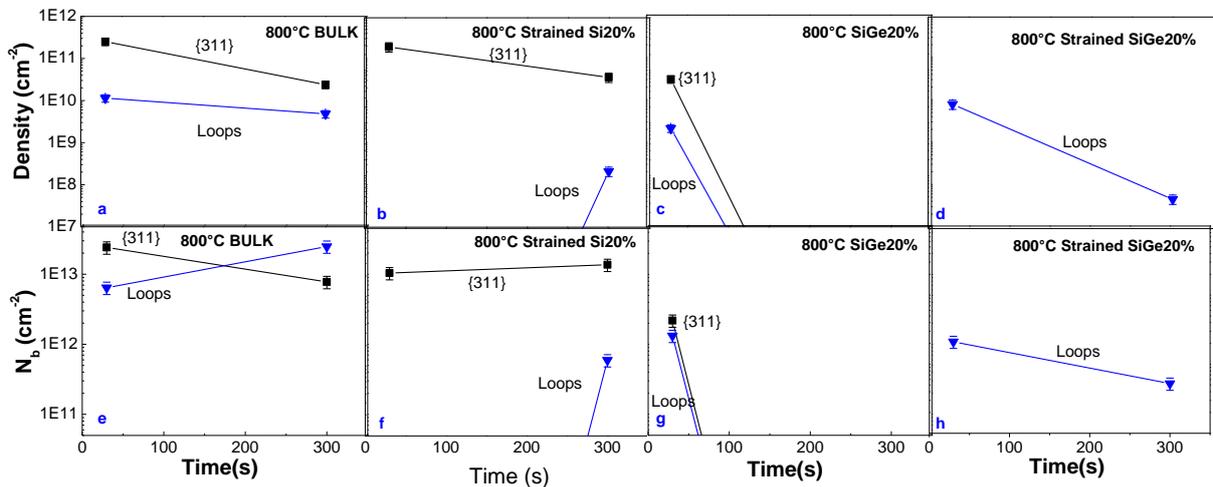


Figure 120 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} et des boucles de dislocation et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} et dans les boucles ( $N_b$ ) pendant un recuit à 800°C dans le silicium dans le silicium contraint et dans les couches de  $Si_{0,8}Ge_{0,2}$  relaxé et contraint, sous  $N_2$  après une implantation  $Ge^+$ , 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ .

L'effet majeur de la contrainte en tension dans le Si est de ralentir la transformation des défauts {311} (cf. Figure 120.a) en boucles (la fraction d'interstitiels contenus dans les boucles varie de 75% dans le Si jusqu'à environ 5% dans le s-Si à 800°C), tandis que la quantité d'interstitiels contenus dans l'ensemble des défauts n'est que faiblement affectée (cf. Figure 120.b). En revanche, la contrainte en compression dans la couche SiGe favorise la formation de boucles (de 65% à 100% à 740°C, Figure 119 c et d respectivement), avec, à nouveau, un léger impact sur la quantité d'interstitiel pris dans les défauts.

Des effets similaires sont observés à 800°C. En effet, lorsque l'on compare la quantité d'interstitiels contenus dans l'ensemble des défauts ( $N_b(\{311\}) + N_b(\text{Loops})$ ) de la Figure 120.e et f d'une part et de la Figure 120.g et h d'autre part, on constate que cette dernière varie peu en fonction de la contrainte. La formation des boucles est accélérée dans le cas d'une couche contrainte en compression (SiGe) et retardé dans le cas d'une couche contrainte en tension (Si). Le seul effet visible sur la cinétique de dissolution des défauts est observé dans la couche

contrainte de SiGe (Figure 120.d et Figure 120.h) où les défauts survivent beaucoup plus longtemps que dans la couche relaxé (Figure 120.c et Figure 120.g). Cette différence ne semble pas être un effet supplémentaire dû à la présence de la contrainte, mais est une conséquence de la formation accélérée des boucles. La densité des boucles à 30s est beaucoup plus élevée dans l'échantillon SiGe contraint alors que le  $N_b$  associé aux boucles est comparable. Cela signifie que, dans le cas de la couche relaxée, les défauts augmentent en taille et diminuent en densité alors que dans la couche contrainte ce mécanisme est ralenti, comme confirmé par des images MET.

En conclusion, les expériences menées dans les échantillons contraints ont montré que la contrainte en tension biaxiale ralenti la formation des boucles en limitant la transformation  $\{311\}$ /boucles alors que la contrainte en compression biaxiale la favorise. La stabilité des défauts ( $N_b$ ) change peu en fonction de la contrainte.

## V.2 Simulations

Les échantillons utilisés dans cette étude sont composés de structures contraintes de Si (SiGe/s-Si/SiGe) et de SiGe (Si/s-SiGe/Si) contenant des marqueurs de bore dans les couches épitaxiées contraintes. En effet, comme vu dans la partie précédente, le groupe du Professeur Nick Cowern ont aussi étudié l'évolution de la diffusion accélérée du bore en présence de défauts étendus dans ces mêmes structures contraintes de Si et de SiGe et ont en évalué la sursaturation en atomes de Siliciums interstitiels. Les résultats sont présentés dans la Figure 121 qui révèle l'évolution temporelle de la sursaturation de l'échantillon s-Si (Figure 121.a), de l'échantillon s-SiGe et enfin les valeurs du produit  $D_I C_I^*$  (Figure 121.c). A nouveau, l'ensemble de ces données montre que l'énergie de formation des SMICs ainsi que le produit  $D_I C_I^*$  varient très peu en fonction de la contrainte. Par conséquent, nous ferons les simulations en modifiant seulement les paramètres de défauts étendus présentés dans la section IV.2 de ce chapitre.

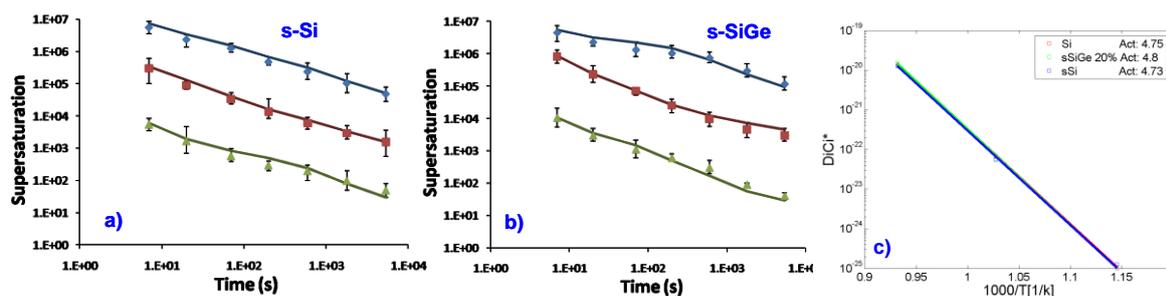


Figure 121 : Accélération de la diffusion des marqueurs de bore, implantés avec  $\text{Ge}^+$  à une énergie de 35keV et une dose de  $1.10^{15}\text{at.cm}^{-2}$  et recuits à 800°C (courbe verte), 740°C (courbe rouge) et 680°C (courbe bleu), en fonction du temps de recuit pour la structure s-Si (a) et s-SiGe (b). c) Le produit  $D_I C_I^*$  (Courbe rouge) Si, (courbe verte) s-SiGe (20% Ge) et (courbe bleu) s-Si (20% Ge).

Nous avons étudié l'effet des contraintes sur la formation et l'évolution des défauts étendus dans deux échantillons : le silicium contraint en tension (s-Si) épitaxié sur le SiGe (de 20% de Ge) et le SiGe contraint en compression (s-SiGe) épitaxié sur un substrat de Si et protégé par un film de Si. Pour ce faire, nous avons suivi la même approche utilisée dans le cas de l'effet de composition. Ainsi, seuls les paramètres de défauts étendus présentés dans la section IV.2 de ce chapitre sont modifiés. Le reste des paramètres du modèle, y compris le produit  $D_I C_I^*$  et

l'énergie de formation des petits clusters d'interstitiels (SMICs), a été gardé inchangé par rapport à leurs valeurs ajustées dans le silicium. La simulation de ces échantillons à l'aide du modèle "ClusterModel" est détaillée dans cette section.

V.2.1.1.1 Silicium contraint

L'évolution des défauts étendus dans le silicium contraint amorphisé au Ge<sup>+</sup> à 35keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  est présentée dans les figures suivantes.

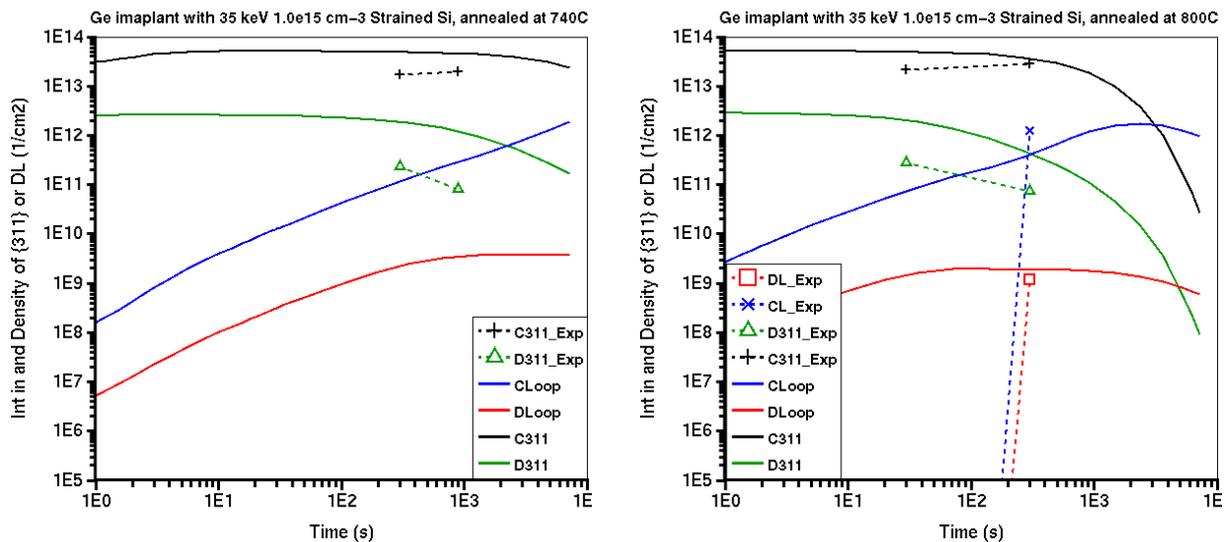


Figure 122 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) dans le Si contraint pendant un recuit (a) à 740 °C et (b) à 800 °C sous N<sub>2</sub> après une implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>, 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les courbes de simulations "ClusterModel" (trait continu).

A 740°C les deux échantillons de Si témoin (cf. Figure 112.b) et contraint (cf. Figure 122.a) montrent la présence exclusive des défauts {311} indiquant que la contrainte en tension biaxiale favorise la formation des défauts {311} plutôt que leur transformation en boucles de dislocation. Ce comportement est bien reproduit par le modèle. En effet, par rapport à l'échantillon de référence, la contrainte en tension biaxiale réduit les taux d'émission d'interstitiel par les défauts {311} (Figure 123.a) et donc leur dissolution, et retarde la formation des boucles de dislocation par un paramètre  $k_{311 \rightarrow DL}$  plus faible (Figure 123.b). Ces paramètres permettent aussi d'obtenir un bon accord à 800°C (Figure 122.b).

L'ensemble des paramètres de calibration détaillé dans la Figure 123 résulte de l'analyse des échantillons de silicium contraint. Dans les deux échantillons nous avons utilisé un  $ifactor=2$  c'est-à-dire un réservoir initial d'interstitiel identique à celui de l'échantillon témoin.

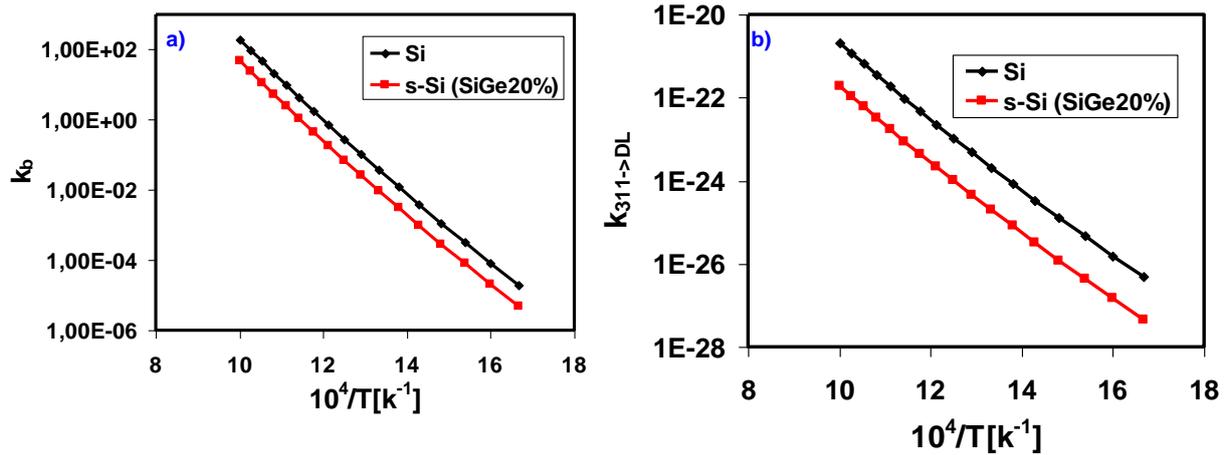


Figure 123 : Evolution thermique des facteurs multiplicatifs appliqués aux paramètres du modèle "ClusterModel" dans le silicium pour simuler le Si contraint après implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>.

V.2.1.1.2 SiGe contraint

L'évolution des défauts étendus dans le SiGe contraint amorphisé au Ge<sup>+</sup> à 35 keV pour une dose de  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$  et recuit à 740 et 800°C est présentée sur les Figure 124.a et Figure 124.b respectivement.

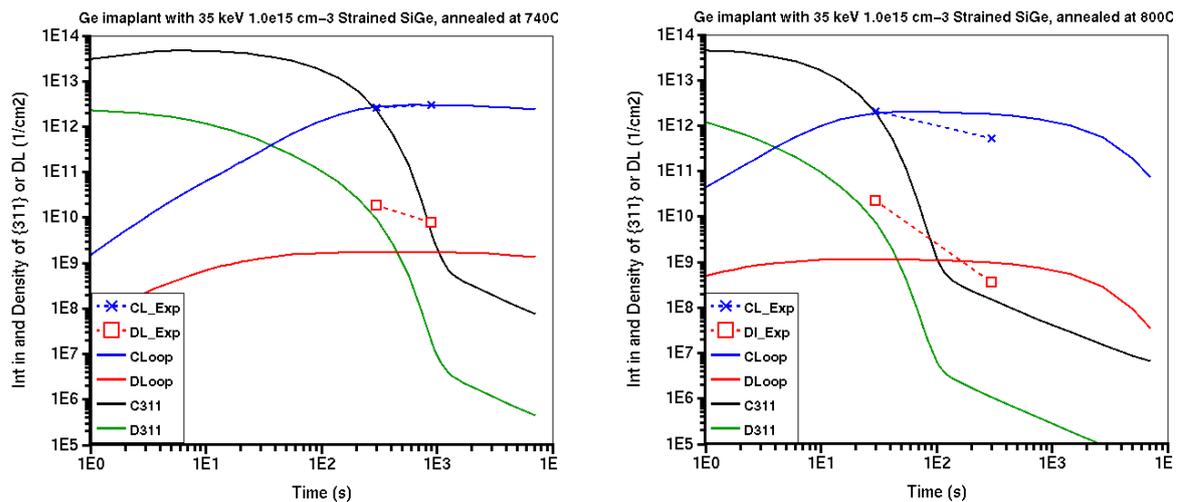


Figure 124 : Evolution temporelle de la densité des défauts {311} (D311) et des boucles de dislocation (DLoops) et du nombre d'atomes pris dans les défauts {311} (C311) et dans les boucles (CLoops) dans le SiGe contraint pendant un recuit (a) à 740 °C et (b) à 800 °C sous N<sub>2</sub> après une implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>, 35 keV,  $1 \times 10^{15} \text{at.cm}^{-2}$ . Comparaison entre les valeurs expérimentales (symboles) et les valeurs des simulations "ClusterModel" (trait continu).

Contrairement au silicium contraint en tension et au SiGe relaxé, les défauts {311} ne sont pas observés à 740°C dans le SiGe contraint en compression, seules les boucles de dislocation sont observables. Ce qui indique que la contrainte en compression biaxiale favorise la formation de boucles par rapport aux défauts {311}.

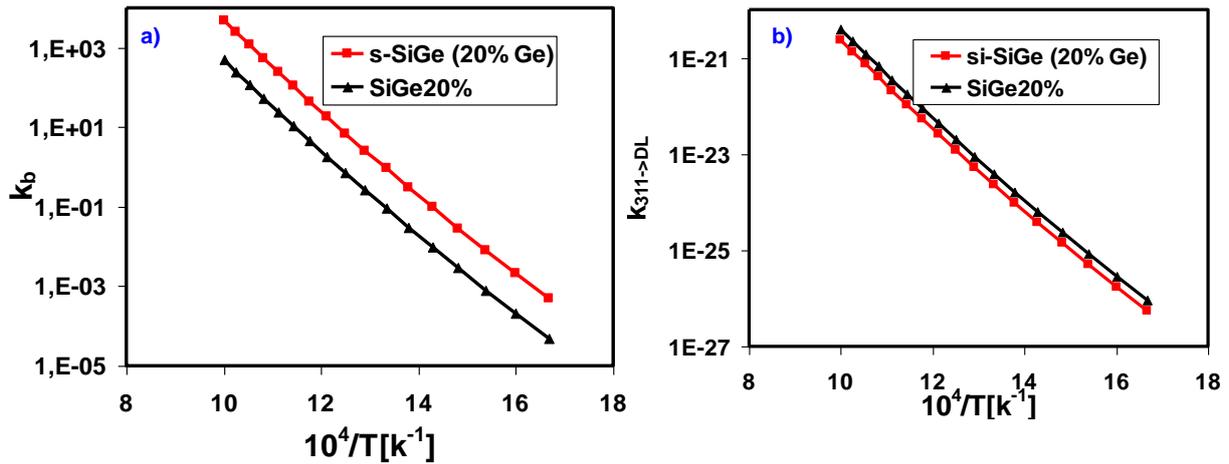


Figure 125 : Evolution thermique des facteurs multiplicatifs appliqués aux paramètres du modèle "ClusterModel" dans le silicium pour simuler le SiGe contraint après implantation amorphisante au Ge<sup>+</sup>.

Cet effet est bien reproduit par le modèle à travers l'augmentation des paramètres  $k'_{311}$  et  $k_{311->DL}$  par rapport au cas du SiGe relaxé pour respectivement accélérer la dissolution des défauts {311} et leur transformation en boucles de dislocation (cf. Figure 125).

Enfin, pour simuler l'évolution de la sursaturation d'interstitiels, les valeurs du produit  $D_I C_I^*$  et des paramètres relatifs aux petits amas d'interstitiels n'ont pas été modifiés par rapport à leur valeurs ajustés dans le silicium. Comme expliqué précédemment, seuls les paramètres relatifs aux défauts {311} et aux boucles de dislocations ont été modifiés. A partir de la comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux de la sursaturation dans le silicium contraint (Figure 126), il apparaît immédiatement la bonne précision avec laquelle la simulation peut prédire le résultat expérimental à 680 et 800°C. En revanche, la simulation surestime les valeurs de la sursaturation à 600°C. Nous pouvons ainsi constater que la modification des paramètres relatifs aux défauts étendus permet à elle toute seule de bien simuler les principales caractéristiques de la TED.

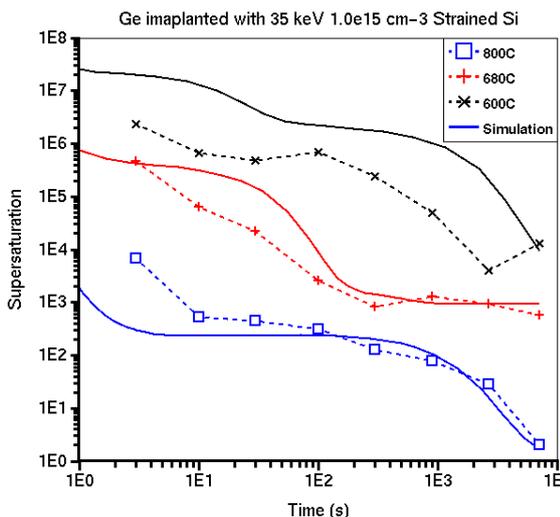


Figure 126 : Sursaturation en atomes de silicium interstitiels en fonction du temps de recuit, mesurée et simulée dans le silicium contraint pour un recuit à 600, 680 et 800°C précédé d'une implantation avec l'ion Ge<sup>+</sup> (35keV,  $1.10^{15}$  at. cm<sup>-2</sup>).

## VI DISCUSSION

Des techniques avancées de MET ont permis de caractériser un ensemble d'échantillons conçus pour examiner les effets de la composition en Ge et de la contrainte sur l'évolution des défauts et de la TED dans les alliages SiGe. Nous avons analysé les données expérimentales et une description détaillée des phénomènes observés a été donnée.

Les conclusions générales de cette étude sont :

a - Les défauts {311} et les boucles de dislocation sont moins stables lorsque l'on augmente la teneur en Ge dans les couches SiGe relaxées.

b - La formation des boucles de dislocation augmente avec la teneur en Ge dans les couches SiGe.

c - La contrainte en tension biaxiale a pour effet de favoriser la formation des défauts {311}.

d - La formation des boucles est ralentie avec la contrainte en tension tandis que la contrainte en compression biaxiale favorise leur formation.

e - La stabilité des défauts ( $N_b$ ) change peu en fonction de la contrainte.

L'évolution d'une population de défauts induite par implantation ionique lors du recuit est le résultat de plusieurs mécanismes concomitants, qui dans la plupart des cas sont activés thermiquement, tels que :

La diffusion des interstitiels libres qui composent les défauts ( $D_I$ ).

La capture d'interstitiels par un défaut qui est liée à la sursaturation en interstitiels ( $C_I/C_I^*$ ) qui l'entoure.

L'émission d'interstitiels par un défaut (liée à son énergie de formation,  $E_F$ ).

La transformation des défauts {311} en boucles de dislocation qui est associée à une barrière d'énergie qui limite cette transformation.

La recombinaison des interstitiels, migrant de la région de défauts vers la surface de l'échantillon.

Une étude rigoureuse de l'effet de la teneur en Ge et de la contrainte sur l'évolution des défauts et de la TED nécessiteront une étude détaillée de la variation de chacun de ces mécanismes dans les alliages contraints et relaxés de SiGe.

Cependant, dans le cadre de cette thèse, nous avons suivi une approche plus "pragmatique" en nous basant sur le modèle complet "ClusterModel" relatif à l'évolution des défauts étendus dans de silicium [18] dont les paramètres régissant l'évolution des défauts ont été modifiés afin de tenir compte des phénomènes observés dans les alliages SiGe. Le choix des paramètres modifiés a été alimenté par l'idée d'une intégration directe et simple du modèle dans Synopsys et sa compatibilité avec tous les autres modèles intégrés dans Synopsys.

Ainsi, la majorité des données expérimentales obtenues à partir des échantillons fabriqués dans le cadre du projet ATOMICS a été bien reproduite par les courbes simulées. Toutefois, ce modèle doit être considéré comme un premier essai pour comprendre et expliquer les effets

physiques induits dans les matériaux SiGe par la présence du germanium à des concentrations diverses et par l'application d'une contrainte biaxiale en tension ou en compression.

En effet, le modèle surestime les mesures expérimentales à faibles températures (600°C) à cause d'une mauvaise simulation des petits amas d'interstitiels. Un travail de calibration basé sur l'étude de la TED dans les alliages SiGe est donc à entreprendre, et l'introduction de petits amas complémentaires pourrait sans doute contribuer à une meilleure prédictivité à 600°C.

Un autre effet physique qui n'est pas pris en compte dans nos simulations est la SPE (épitaxie en phase solide). L'impact de la SPE sur l'évolution des défauts ponctuels au début du recuit thermique devrait être inclus dans l'analyse des différences observées entre les échantillons implantés au Si<sup>+</sup> et au Ge<sup>+</sup> (amorphisation). Cet effet a fait l'objet d'une étude en collaboration avec Julien Delalleau et un modèle est en cours de publication [19].

Idéalement, l'intégration de tous les effets physiques induits par la présence du Ge et des contraintes dans les couches SiGe devrait également être envisagée. Certains de ces effets ont été étudiés et modélisés par des partenaires du projet ATOMICS, en particulier la diffusion du bore dans les alliages SiGe, ce qui permettra d'optimiser davantage notre modèle par la suite. Toutefois, la compatibilité du modèle de défaut avec des modèles complémentaires élaborés pour simuler l'évolution de la concentration des interstitiels et de leur diffusivité en fonction de la composition et de la contrainte devrait d'abord être vérifiée avant la mise en œuvre d'un modèle global.

## VII CONCLUSION

Nous avons étudié expérimentalement l'évolution thermique des défauts étendus dans les alliages SiGe afin d'analyser les mécanismes physiques qui contrôlent cette évolution à la fois en fonction de la teneur en Ge et de la contrainte induite dans les couches SiGe. D'autre part, il est nécessaire de disposer d'une base de données sur laquelle les procédés de simulation puissent être testés de manière fiable. Nous avons donc examiné, dans les alliages SiGe, les caractéristiques essentielles des deux grandes catégories de défauts (défauts {311} et boucles de dislocation) qui résultent de l'étape indispensable à la fabrication de jonctions ultra minces p<sup>+</sup>/n, qu'est l'implantation ionique. Nous avons montré que l'évolution de ces défauts étendus dans les alliages SiGe est contrôlée dans chaque cas (implantation amorphisante ou non), par les mêmes mécanismes que dans le silicium. Toutefois, leur formation et dissolution changent en fonction de la teneur en Ge et de la contrainte.

Nous avons aussi suivi l'évolution de la TED et sa relation avec les défauts étendus. Nous avons mesuré l'évolution de la TED pour plusieurs conditions d'implantation et de recuit dans les alliages SiGe et nous avons montré que dans toutes les conditions expérimentales l'évolution de la TED et celle des défauts étendus sont liées.

En se basant sur le modèle "ClusterModel" relatif à l'évolution des défauts développé par Synopsys, nous avons montré que les concepts physiques liés au mécanisme de maturation d'Ostwald introduits dans le modèle sont suffisants pour rendre compte de bons nombres de résultats expérimentaux obtenus dans les alliages SiGe. Les résultats de simulation sont à considérer comme une des bases nécessaires à la compréhension des interactions complexes

et simultanées observées en présence du Ge sur les défauts étendus. Par ailleurs, nous avons présenté notre contribution à l'amélioration de ce modèle tout en gardant à l'esprit les phénomènes physiques. Nos efforts ont porté en particulier sur la correction des expressions qui contrôlent la formation et la dissolution d'un défaut  $\{311\}$  et sa transformation en boucle de dislocation dans le modèle "ClusterModel" pour une intégration rapide. En effet, nous avons montré par une dépendance de ces expressions de la teneur en Ge et du niveau de contrainte, que le modèle est capable de reproduire la majorité des mesures. Nous avons enfin examiné l'impact de ces modifications sur la diffusion des dopants.

## REFERENCES DU CHAPITRE VI

- 1 J. L. Hutchinson, A. L. Seev, and L. I. Fedina, "(113) Defects in He<sup>+</sup> implanted germanium", *Inst. Phys. Conf. Ser.* 134: p. 41-46 (1993).
- 2 C. A. Ferreira Lima and A. Howie. *Phil. Mag.* 34, 1057 (1976).
- 3 I. G. Salisbury and M. H. Loretto, "{113} Loops in electron-irradiated silicon", *Phil. Mag. A.* 39, p. 317 (1979).
- 4 T. Y. Tan, "Atomic modeling of homogeneous nucleation of dislocations from condensation of point defects in silicon", *Phil. Mag. A.* 44, p. 101 (1981).
- 5 A. Bourret, J. Thibault-Desseaux, and D. N. Seidman, "Early stages of oxygen segregation and precipitation in silicon", *J. Appl. Phys.* 55, p. 825 (1984).
- 6 H. Bender. *Phys. Stat. Sol. A.* 107, p. 455 (1984).
- 7 L. Fedina, O. I. Lebedev, G. Van Tendeloo, J. Van Landuyt, O. A. Mironov, and E. H. Parker, "In situ HREM irradiation study of point-defect clustering in MBE-grown strained Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/(001)Si structures", *Phys. Rev. B.* 61, p. 10336 (2000).
- 8 R.T. Crosby, "Evolution of self-interstitials induced by ion-implantation in SiGe alloys", Ph.D. Thesis, University Of Florida (2005).
- 9 R. T. Crosby, K. S. Jones, M. E. Law, L. Radic, P. E. Thompson, and J. Liu, "Dislocation loops in silicon-germanium alloys: The source of interstitials", *Appl. Phys. Lett.* 87, p. 192111 (2005).
- 10 H.-W. Guo, S.T. Dunham, C.-L. Shih, C. Ahn, "Modeling of Defect Evolution and TED under Stress Based on DFT Calculations", *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, SISPAD 2006*, 71 (2006).
- 11 B. Trzynadlowski et al., *Materials Research Society Symposium Proceedings* 1070, 255 (2008).
- 12 [www.srim.org](http://www.srim.org).
- 13 A Program developed at CEMES-CNRS for the simulation of the amorphisation depth due to preamorphising implants. C.Vieu, A.Claverie, J.Faure and J.Beauvillain, *Nucl. Inst. Meth. B*, 28 p. 229 (1987).
- 14 M. Hÿtch, J.L. Putaux, J. Thibault, "Stress and strain around grain-boundary dislocations measured by high-resolution electron microscopy", *Phil. Mag.* 86, p. 4641 (2006).
- 15 M. Hÿtch, F. Houdellier, F. Hue, E. Snoek, "Nanoscale holographic interferometry for strain measurements in electronic devices", *Nature* 453 p. 1086 (2008).
- 16 N. Zographos, C. Zechner, and I. Avci, "Efficient TCAD model for the evolution of interstitial clusters, {311} defects, and dislocation loops in silicon", *MRS Symp. Proc.*, vol. 994 F10-01 (2007).
- 17 Frendtech model: Sentaurus Process manual version A-2008.09 Synopsys 2008 / E. Lampin, C. J. Ortiz, N. E. B. Cowern, B. Colombeau, F.Cristiano, "Combined master and

Fokker–Planck equations for the modeling of the kinetics of extended defects in Si", *Sol. State Elec.* 49, p. 1168 (2005).

18 A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag, and F. Cristiano, "Extended defects in shallow implants", *Appl. Phys. A* 76, p. 1025-1033 (2003).

19 J. Delalleau, A. Pakfar, E.M. Bazizi, R. Simola, C. Tavernier, "Continuum simulation of Solid Phase epitaxial regrowth of Amorphized silicon including most advanced Physical interactions", Submitted to symposium I : Advanced silicon materials research for electronic and photovoltaic applications II of the E-MRS 2010 Spring Meeting.



# **Chapitre VII**

## **Simulation de dispositifs CMOS avancés : C65 SOI et C45 SiGe**



## CHAPITRE VII : SIMULATION DE DISPOSITIFS CMOS AVANCES : C65 SOI ET C45 SiGe

### I INTRODUCTION

Afin d'améliorer les performances et de repousser les limites technologiques que nous avons abordées au premier chapitre, on peut procéder empiriquement par de multiples essais expérimentaux. La démarche est cependant coûteuse, longue et plutôt hasardeuse sans le soutien théorique des outils d'analyses numériques. Il est préférable de procéder plutôt à des tests en simulation numérique, avec l'avantage d'une plus grande souplesse dans les essais envisageables. Par exemple, les outils de modélisation de transistors donnent la possibilité de faire une étude paramétrique en faisant varier chaque caractéristique de la structure afin d'en évaluer l'influence. Le niveau de complexité est au moins aussi important et la simulation a l'avantage de ne pas connaître de difficultés de réalisation technologiques. Il est alors possible d'obtenir une compréhension physique du fonctionnement du transistor et de prédire des comportements singuliers. Il existe un ensemble d'algorithmes différents pour simuler, comprendre, prédire et optimiser le fonctionnement des MOS. Les méthodes analytiques sont les plus adaptées aux besoins industriels et ce sont ces formulations empiriques que nous employons dans l'ensemble de nos travaux.

Ainsi, pour l'élaboration des futures générations de transistors, le développement d'outils de simulation fiables et rapides est une nécessité. Les outils TCAD sont des outils complexes permettant de simuler le procédé de fabrication des composants et de simuler numériquement son fonctionnement par la méthode des éléments finis. Le composant est maillé de manière stratégique de sorte à apporter la précision nécessaire dans les régions clefs (canal, extension...). C'est un procédé de simulation très long et complexe, permettant, du fait de la prise en compte des effets 2D, d'obtenir des résultats souvent proches de la réalité, mais dont la précision quantitative dépend néanmoins beaucoup de la fiabilité des modèles utilisés pour simuler les procédés de fabrication (implantation et recuit), de leur aptitude à décrire les phénomènes physiques observés et de la qualité de la calibration effectuée. Nous avons utilisé la simulation TCAD pour comparer les performances en transistor de plusieurs type de dispositifs Si, SOI et SiGe. Cette modélisation plus fine a permis de valider l'ensemble des modèles élaborés dans ces travaux de thèse encadrés par le projet ATOMICS et de confirmer leur fiabilité à travers une comparaison réussie des résultats de simulation électrique avec les résultats expérimentaux.

Dans ce chapitre, nous présentons les différentes modélisations mises en œuvre dans la simulation des composants MOS, sur lesquelles sont testées les modèles élaborés et calibrés pour la fabrication des jonctions ultrafines. Le modèle général de diffusion présenté dans cette thèse, incluant l'ensemble des contributions à la modélisation de l'évolution des défauts et à la diffusion des dopants en fortes concentrations, est centré sur les technologies industrielles actuellement en développement à STMicroelectronics-Crolles : C65 SOI et SiGe 45 pour finalement être testé sur le nœud technologique 32nm.

La première étude concerne les dispositifs MOS fabriqué sur substrat SOI. Nous avons vu qu'une des solutions est d'utiliser le substrat SOI puisque la diffusion y est réduite grâce à la présence de l'interface Si/BOX qui permet aussi de dissoudre les défauts étendus formés dans la zone de charge d'espace, néfastes pour les propriétés électriques des jonctions.

Dans la seconde étude, la distribution des dopants dans les dispositifs SiGe sera simulée. Dans une première approche, nous proposons une modélisation de l'effet du germanium et de la contrainte sur l'évolution des défauts et la diffusion des dopants.

Le but de ces modélisations est de mettre en avant le rôle déterminant de la distribution des dopants pour la fiabilité des simulations électriques des dispositifs. Les éléments de comparaison avec les résultats de simulation sont essentiellement les caractéristiques  $I_D(V_G)$ ,  $I_D(V_D)$ ,  $C(V)$  et  $V_{th}(L_G)$  pour les différents dispositifs étudiés.

## II OUTILS DE SIMULATION

Les principes de la simulation 2D de type TCAD sera présenté brièvement dans cette partie. L'étude a été réalisée au sein de l'équipe TCAD de STMicroelectronics Crolles. Les résultats obtenus à l'aide de la suite de logiciels Synopsys mais ont nécessité un long travail d'adaptation et de calibration des différents modèles, sans oublier l'optimisation de la convergence des différents outils de simulation numérique. La suite de logiciels Synopsys comprend plusieurs outils :

- le module Sentaurus Process pour la simulation du procédé de fabrication,
- le module SDE pour le maillage du composant,
- le module SDevice pour la simulation électrique,
- et les outils de visualisation et d'extraction des données Inspect et Tecplot.

Afin de valider l'ensemble des modèles physiques élaborés dans nos travaux, nous les avons appliqués à la simulation de deux dispositifs MOS : le premier dispositif est le MOS SOI 65nm partiellement déplété et le second est le MOS SiGe 45nm composé d'une couche de Si contraint déposée sur un substrat SiGe relaxé. Ces deux transistors seront décrits en détail dans ce chapitre. Le but de la simulation est de prouver la cohérence des modèles relatifs à la simulation du procédé de fabrication tout en mettant en avant l'intérêt des nouvelles versions physiques développées. Pour chaque type de dispositif, il a été nécessaire de simuler, dans un premier temps le procédé de fabrication des composants. Puis, les mesures expérimentales de dispositifs équivalents dans le silicium pur sont utilisées pour calibrer, qualifier et compléter les démarches de simulation numérique. Cette première phase étant achevée, nous nous sommes intéressés à la simulation des dispositifs réalisés dans différents matériaux en modélisant les effets physiques impliqués dans les profils de dopants.

### II.1 Simulation des procédés industriels

L'ensemble des modèles élaborés pendant le projet ATOMICS et décrit dans ces travaux de thèse a été utilisé dans ces simulations :

Modèle analytique pour l'implantation ionique, l'amorphisation et la génération de défauts ponctuels,

- Modèle de diffusion "5-espèces",
- Modèle de ségrégation à la surface: "Three phase segregation model",
- Modèle des amas d'interstitiels "ClusterModel" : SMICs, {311} et boucles de dislocation.
- Piégeage du bore par les défauts étendus.
- Diffusion du fluore et formation d'amas de fluore.
- Diffusion et activation du carbone.
- Amas d'arsenic  $As_mV_n$ .
- Amas de bore (BICs) :  $B_mI_n$ .

## II.2 Simulation électrique

Pour les simulations électriques, nous avons utilisé le logiciel Sentaurus Device (SDevice) développé par la société Synopsys. Cet outil standard est utilisé par l'équipe TCAD de STMicroelectronics et par la majorité des partenaires de l'industrie microélectronique.

Dans SDevice, nous avons utilisé la modélisation de type dérive–diffusion pour le transport des porteurs. Les polarisations effectuées dans les simulations des dispositifs sont identiques à celles des mesures. Afin de faciliter notre étude orientée sur la simulation de caractéristiques électriques statiques, nous nous sommes concentrés sur le mécanisme de génération Shockley–Read–Hall (SRH), prédominant aux faibles polarisations. Nous avons également activé les modèles standards prenant en compte l'influence des espèces dopantes ainsi que celle de la température sur la durée de vie des porteurs.

## III DISPOSITIFS SOI

Les modèles quantitatifs permettant de décrire les phénomènes physiques qui se produisent dans les nouveaux matériaux SOI lors du procédé de fabrication ont été élaborés dans cette thèse. Pour continuer l'étude et la validation de ces modèles, nous avons effectué des simulations électriques d'un transistor MOS réalisé en technologie 65nm sur substrat SOI. L'intérêt de ce travail est de mettre en évidence les éventuelles améliorations apportées par la simulation physique de l'effet de l'interface sur l'ensemble des étapes de procédé de fabrication, en particulier la diffusion des dopants et l'évolution des défauts étendus.

### III.1 Dispositifs fabriqués

Nous présentons ici de manière synthétique les étapes nécessaires à la fabrication de tous les éléments d'un transistor MOS réalisé en technologie 65nm sur substrat SOI. La Figure 127 illustre la succession des étapes dans l'ordre chronologique. Ce nœud technologique est basé sur un oxyde grille de grille d'environ 20Å. Les étapes d'implantation introduisent les dopants clefs du fonctionnement du dispositif et sont suivis par un recuit d'activation RTP standard. Les spécifications des implantations extensions, poches et source/drain sont dans la gamme

des énergies et des doses étudiés dans le cadre du projet ATOMICS et sur laquelle nos modèles ont été élaborés. Les étapes suivant le recuit spike sont dédiés à la métallisation, à la connexion des composants et à la protection de ceux-ci (communément appelé back-end). Ces dernières étapes ne sont pas pris en compte dans nos simulations car elles n'ont pas d'incidence sur les profils de dopants actifs.

• Ajustement Vth	NMOS	PMOS
• Oxyde de grille	bore	arsenic
• Dépôt grille poly-Si		
• Réoxidation		
• Implantation poches	BF2	arsenic
• Implantation LDD	arsenic	BF2
• Formation espaceur		
• Implantation S/D	P, As, P	B, B, B
• Recuit d'activation	"spike" 1060°C	"spike" 1060°C
• Procédé « Back-end »		

Figure 127 : Liste simplifiée des étapes de procédé fabrication des transistors CMOS SOI 65nm.

Les images MET de la Figure 128 ont été obtenues à partir d'un lot de transistor fabriqué à STMicroelectronics. Elles illustrent les mesures effectuées sur les couches constituant le transistor : oxyde enterré (Figure 128.a), film de silicium (Figure 128.b), architecture et longueur de grille (Figure 128.c). La longueur de grille des transistors testés varie entre 50nm et 10µm et leur largeur est de 10µm.

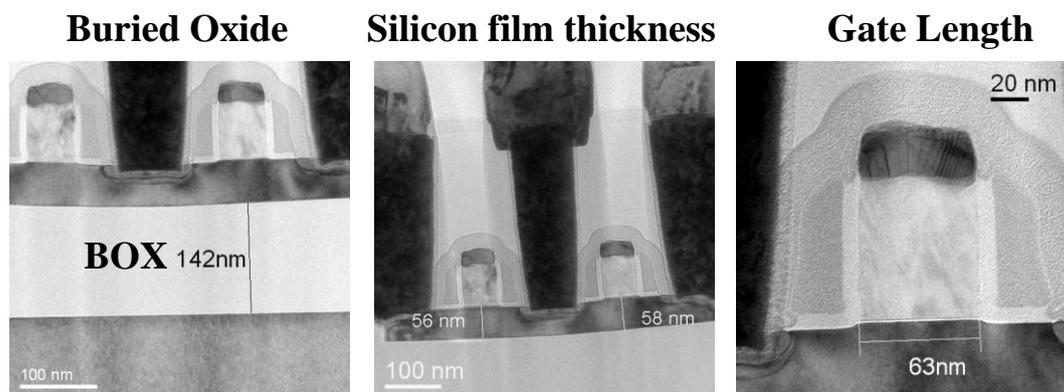


Figure 128 : Coupe par microscope électronique à transmission d'un transistor PMOS SOI.

De manière à améliorer les effets canal court dans les transistors, la température du recuit de Source/Drain utilisé est de 1060°C pour limiter la diffusion des espèces dopantes, tout en assurant une concentration d'atomes activés optimale.

### III.2 Simulation des procédés de fabrication

#### III.2.1 Les modèles utilisés pour le SOI

L'effet de l'oxyde enterré sur l'évolution des défauts étendus et sur la diffusion des dopants étudié au chapitre 5 est pris en compte dans les simulations.

### III.2.2 Résultats des simulations des procédés

Les Figure 129 et Figure 130 illustrent respectivement les dispositifs N et PMOS Si et SOI définies sous Sentaurus Process et les profils de dopage 2D obtenus par la simulation du procédé de fabrication. Celle-ci a été réalisée à partir du procédé standard de la technologie SOI 65nm décrit précédemment. Les dispositifs ont une longueur de grille de 65nm et un oxyde de grille d'environ 20Å d'épaisseur.

Le substrat SOI se compose d'une couche superficielle de silicium de 60nm d'épaisseur. Cette couche est séparée de la partie massive du substrat de silicium par une couche isolante d'oxyde de silicium de 140nm d'épaisseur.

L'utilisation de substrats SOI permet de réduire la diffusivité des dopants qui sont introduits dans la couche superficielle de silicium. En effet, la profondeur de la jonction source-drain du transistor réalisé sur le substrat SOI est réduite par rapport au transistor réalisé dans les mêmes conditions d'implantation et de recuit, sur le substrat de silicium massif (Figure 129).

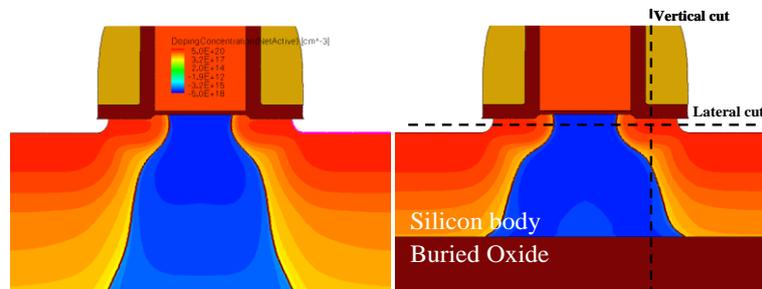


Figure 129 : Structures simulées du transistor NMOS (a) silicium 65nm et (b) SOI 65nm.

De même, la distribution des dopants dans les zones source-drain visualisée en bleu dans la Figure 130 montre que la présence de l'interface Si/BOX permet de réduire la profondeur de la jonction.

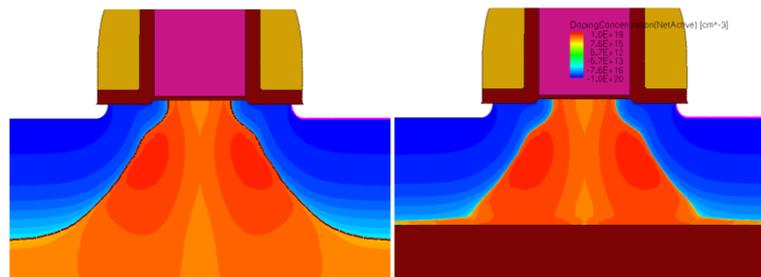


Figure 130 : Structures simulées du transistor PMOS (a) silicium 65nm et (b) SOI 65nm.

### III.2.3 Effet de l'interface Si/BOX sur les défauts étendus

La simulation physique de ces dispositifs nous permet d'étudier plus précisément l'évolution des défauts étendus dans un dispositif réalisé avec les mêmes conditions de procédé dans un substrat silicium et un substrat SOI.

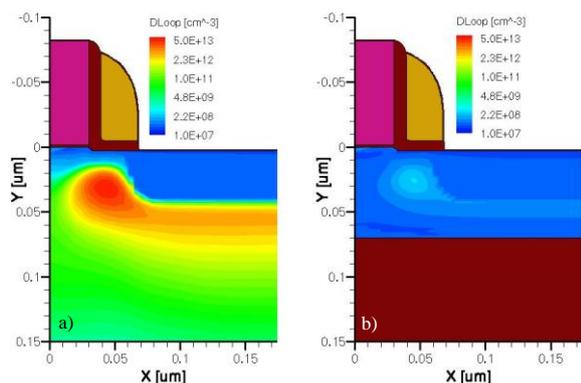


Figure 131 : (a) Sans interface (référence) des boucles de dislocations subsistent, (b) en revanche il ne reste pas de défauts étendus après le recuit d'activation dans le substrat SOI.

La Figure 131 montre la zone potentiellement riche en défauts étendus générées par l'implantation des poches. Ces défauts ont une distribution spatiale non-uniforme dans le substrat de Si après le recuit spike à 1060°C. La simulation nous montre que ce recuit ne présente pas un bilan thermique assez élevé pour les dissoudre complètement dans le silicium. En revanche, dans les mêmes conditions d'implantation et de recuit, la présence de l'interface Si/BOX accélère la dissolution des défauts étendus et peu de boucles subsistent à la fin du procédé de fabrication.

### III.3 Simulation électrique

Utilisant le simulateur électrique SDevice de Synopsys, les réseaux de caractéristiques classiques  $I_D=f(V_G)_{V_D}$  et  $I_D=f(V_D)_{V_G}$  sont calculés à partir des transistors élaborés précédemment pour différentes longueurs de grille. Les modèles physiques élaborés pour les simulations de procédé sont validés en calculant les caractéristiques électriques des transistors NMOS et PMOS SOI partiellement déplété (PD).

#### III.3.1 Capacité

Le module de grille voit les implantations des extensions et des zones source/drain et le recuit d'activation final. Les conditions d'implantation peuvent détériorer le diélectrique de grille par la traversée de grille. Mais nous avons vu précédemment la nécessité des implantations obliques pour la formation des SDE afin de couvrir la zone sous la grille. Or, il est primordial pour le bon fonctionnement des circuits d'avoir un diélectrique de bonne qualité, aussi l'impact du tilt des implantations sur la grille et son oxyde a une grande importance. Des mesures de capacité-tension  $C(V)$  ont été effectuées afin de vérifier, d'une part que celui-ci n'a pas été dégradé par le bombardement ionique, et d'autre part que le dopage de grille est bien adapté (par estimation de la déplétion de la grille).

L'intégrité de l'oxyde, son épaisseur électrique équivalente et la déplétion de grille se déterminent par des mesures de capacité sur des structures de test dédiées. Nous avons utilisé cette caractéristique afin d'ajuster le dopage du polysilicium. La Figure 132 montre les caractéristiques  $C_{surf}(V)$  surfaciques mesurées et simulées obtenues pour le SOI. Ces mesures permettent d'ajuster la permittivité ( $\epsilon_{Ox}$ ) de l'oxyde grâce à la relation  $e_{Ox}=\epsilon_{Ox}/C_{surf}$  où  $e_{Ox}$  est l'épaisseur d'oxyde entre la grille et le substrat. Cette épaisseur d'oxyde est étant fixée par les mesures MET et interférométriques.

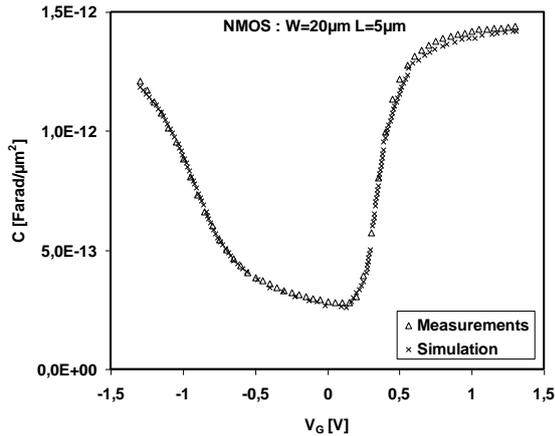


Figure 132 : Mesures et simulations de  $C_{surf}(V)$  surfacique obtenus pour le transistor.

La capacité simulée est comparable à celle mesurée et les déplétions de grille simulées sont en bon accord avec les caractéristiques  $C_{surf}(V)$ . Ces résultats montrent que l'oxyde n'a pas été impacté par le tilt d'implantation et que le pré-dopage de grille simulé était bien adapté. Les conditions choisies sont utilisées dans la simulation des différents transistors.

### III.3.2 SOI NMOS

Le transistor à canal long est le cas idéal du transistor MOS, sa taille importante le rend insensible aux effets parasites canaux courts et DIBL, non négligeables pour les technologies submicroniques. Nous avons vérifié dans un premier temps les caractéristiques obtenues pour un dispositif long. Cette étape a pour but de garantir que toutes les étapes technologiques sont bien simulées. En effet, pour les dispositifs à canal long, la tension de seuil est indépendante de la longueur de canal. Sur la Figure 133 sont représentées en échelle logarithmique les caractéristiques  $I_D$  en fonction de  $V_G$  à  $V_D$  faible (0.05V) et  $V_D$  fort (1.2V) d'un transistor à canal long (Figure 133.a) et canal court (Figure 133.b). Les croix représentent les points de mesures et les caractéristiques simulées sont des courbes continues. On notera la bonne concordance dans tout le domaine allant de la faible à la forte inversion. De même, la transition entre ces deux régimes est parfaitement reproduite.

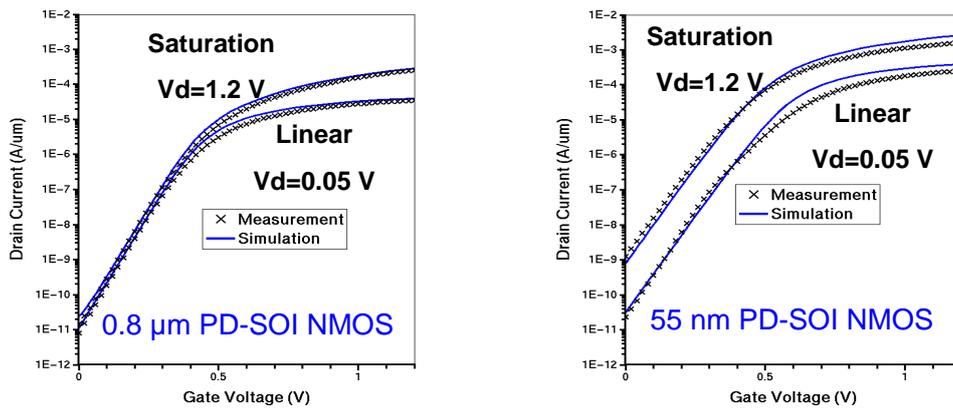


Figure 133 : Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à tension  $V_D$  faible (0.05V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2V) pour des transistors NMOS SOI dont les longueurs de grilles sont de 800nm (a) et 55nm (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

Sur la Figure 134.a, nous avons comparé les caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  mesurées et simulées de la tension de seuil en régime linéaire et saturé en fonction de la longueur de grille. Les transistors à canal court exhibent une tension de seuil qui varie fortement lorsque  $L_G$  diminue.

En vue d'expliquer ces observations pour les transistors à canal court, nous devons nous référer aux phénomènes SCE et DIBL (cf. chapitre 1). Rappelons que plus la chute de  $V_{th}$  se produit à des longueurs de grille ( $L_G$ ) élevées, plus l'effet de canal court est défavorable. Une élévation des valeurs de  $V_{th}$  avant leur chute témoigne d'un effet de canal court inverse (RSCE). Ces caractéristiques sont bien reproduites par les simulations. Ainsi, la distribution spatiale des dopants dans les régions d'extension de Source/Drain et de poche est bien décrite par les modèles de diffusion et les interactions dopant-défaut contrôlant cette distribution sont bien prises en compte.

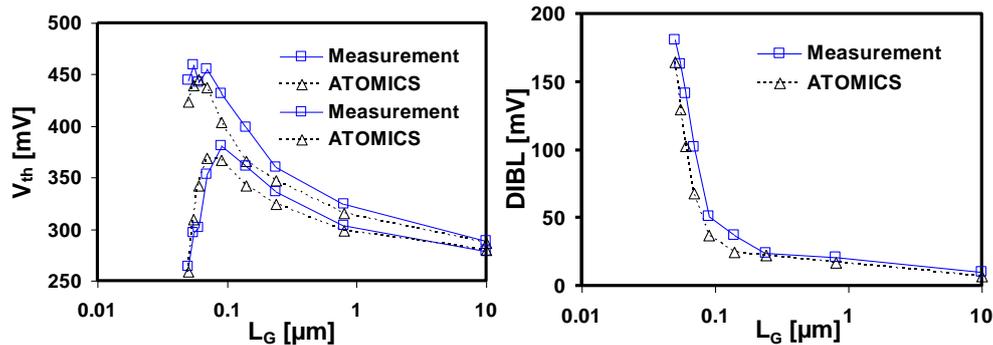


Figure 134 : Tension de seuil en régime linéaire et saturé (a) et DIBL (b) en fonction de la longueur de grille de transistor NMOS SOI.

### III.3.3 SOI PMOS

Les Figure 135.a et Figure 135.b présentent respectivement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors SOI PMOS de longueur de grille de 800 et 55nm mesurées à une tension de drain de 0.05 et 1.2V. La confrontation entre les résultats de simulation les mesures montre que les modèles de simulation de procédé reproduisent parfaitement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  en faible et forte inversion pour les dispositifs court et long. Les simulations des dispositifs longs confirment que le dopage dans le canal est bien pris en compte et que les charges situées à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  sont correctement calibrés.

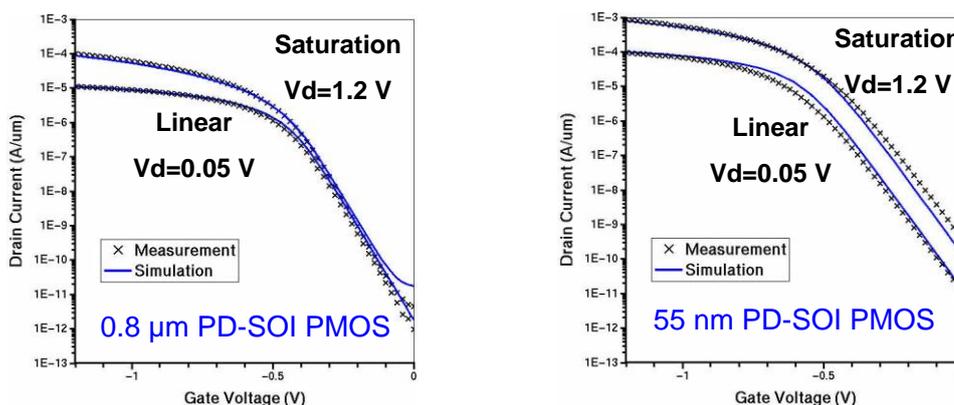


Figure 135 : Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible (0.05V) et  $V_D$  fort (1.2V) pour des transistors PMOS SOI dont les longueurs de grilles sont de 800nm (a) et 55nm (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

Les Figure 136.a et Figure 136.b représentent respectivement la tension de seuil en régime linéaire et saturé et le DIBL en fonction de la longueur de grille. Les mesures sont bien reproduites par les simulations, avec une légère dégradation du DIBL. Comme dans le cas des dispositifs NMOS, les tendances correctes des caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  montrent que la

distribution des dopants dans les zones d'extension S/D et de poche est bien décrite par les simulations TCAD.

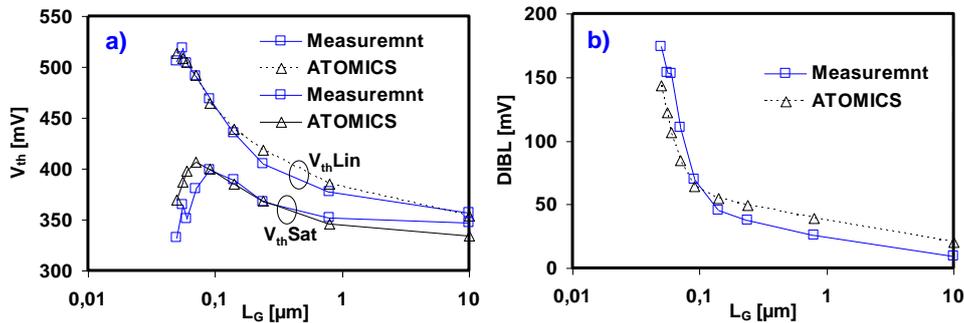


Figure 136 : Tension de seuil en régime linéaire et saturé (a) et (b) DIBL en fonction de la longueur de grille de transistor PMOS SOI.

Nous allons tenter à présent d'analyser ces résultats de manière à mettre en évidence les améliorations apportés par les modèles physiques (notés ATOMICS) présentés dans cette thèse et utilisés dans la simulation de procédé de fabrication.

### III.4 Impact des modèles ATOMICS

Pour comprendre le comportement physique des modèles et de quantifier le gain apporté, nous étudions l'impact des modèles développés dans le cadre du projet européen ATOMICS et incluant ceux de cette thèse en les comparant à la version Y-2006.06 lorsque se projet a débuté et à la dernière version C-2009.06 qui illustrent l'évolution de l'outil de simulation et contient les paramètres ajustés par les équipes de Synopsys.

#### III.4.1 SOI NMOS

La Figure 137 représente les caractéristiques  $I_D(V_G)$  pour un transistor long (Figure 137a) et un transistor court (b). Les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors longs simulés par les modèles ATOMICS sont correctes. En revanche, les versions 2006.06 et 2009.06 altèrent le comportement électrique des transistors NMOS en décalant la tension de seuil pour les transistors à grande et petite longueur de grille. Pour la version 2006-06, on observe que les transistors simulés ne sont plus fonctionnels pour la longueur de grille de 55nm, car la diffusion latérale des dopants sous la grille joue un rôle majeur dans les dispositifs courts. Ce constat illustre le progrès réalisé des simulations TCAD depuis la version Y-2006.06 en particulier grâce au projet ATOMICS qui avait pour objectif de développer de nouveaux modèles physiques pour la simulation des procédés de fabrication des transistors CMOS avancés (le nœud 32nm).

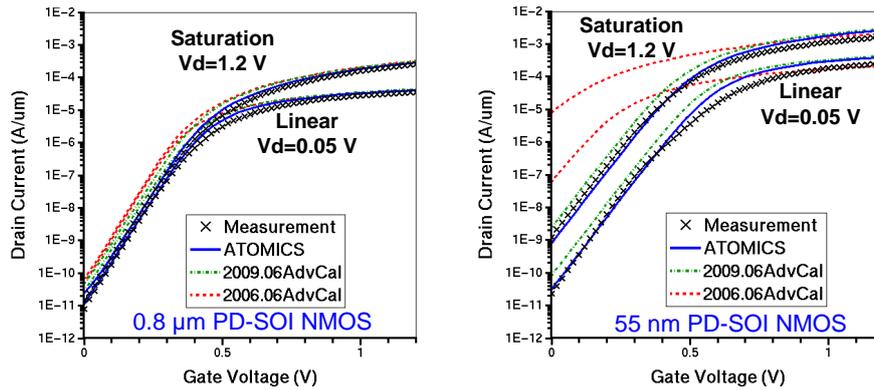


Figure 137: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à tension  $V_D$  faible (0.05 V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2V) pour des transistors NMOS SOI dont les longueurs de grilles sont de 800nm (a) et 55nm (b). Comparaison entre la simulation modèles (courbes) et la mesure (symbole).

La simulation de la diffusion de l'arsenic dans les extensions de Source/Drain a un impact très important sur les effets canal courts des transistors. La Figure 138 montre les améliorations apportées par les modèles implémentés depuis la version Y-2006.06. La tension de seuil obtenue avec les différentes versions du logiciel Sentaurus Process reflète la validité de la simulation d'implantation et de diffusion dans les extensions de Source/Drain. Une augmentation de 50mV est observée sur la tension de seuil des transistors longs simulés avec les versions C-2009.06 et Y-2006.06.

Le gain obtenu sur les effets canal court est aussi reporté dans la Figure 138.c qui représente l'abaissement de la hauteur de barrière sous influence du drain DIBL (Drain Induced Barrier Lowering) en fonction de la longueur de grille.

La simulation des caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  est considérablement améliorée grâce à un meilleur ajustement du profil initial des défauts ponctuels générés par les étapes d'implantation ionique et un meilleur control des régions extension et source-drain réalisés dans ce dispositif par des implantations d'arsenic et de phosphore. On notera en particulier l'effet de la modélisation physique des amas  $As_nV_m$  sur ces caractéristiques électriques sensibles au profile latéral des dopants.

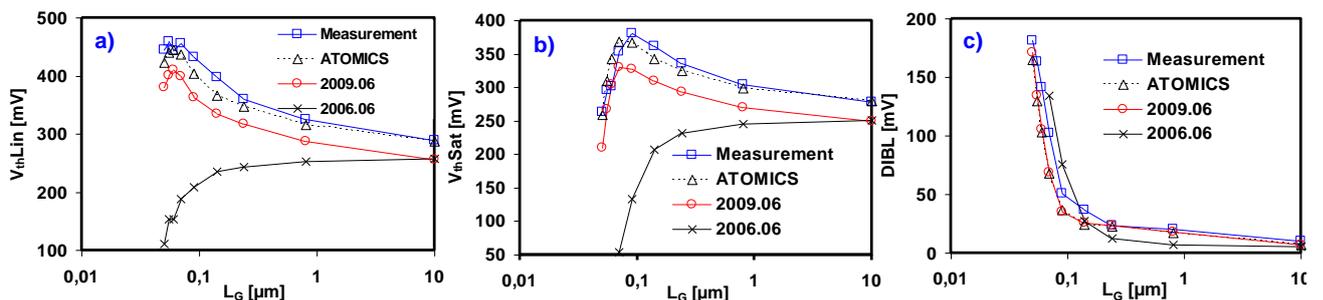


Figure 138: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor NMOS SOI.

Comme le montrent les figures précédentes, les modèles et paramètres présentés dans cette thèse permettent de nettement améliorer la fiabilité des simulations TCAD grâce à la bonne compréhension des phénomènes physiques mis en jeu lors de la fabrication des transistors. En revanche, les versions Y-2006.06 et C-2009.06 altèrent le comportement électrique des transistors NMOS en décalant la tension de seuil pour les transistors à grande longueur de grille d'environ 50 mV. Les performances  $I_{on}/I_{off}$  des transistors NMOS sont donc aussi

fortement impactées. Ce décalage de la tension de seuil peut être la conséquence de plusieurs phénomènes dans le transistor NMOS SOI. L'hypothèse la plus probable est que l'arsenic implanté et recuit simulé avec ces deux versions est mal situé dans le canal car il n'a pas diffusé de la même manière qu'avec les modèles ATOMICS. Ainsi, le dopage effectif dans le canal simulé par les versions Y-2006.06 et C-2009.06 est plus fort ; ce qui augmente la tension de seuil de ce transistor. La seconde hypothèse est que les charges de l'oxyde de grille évoluent différemment en fonction de la version utilisée or, dans nos tests la densité surfacique de charge de l'oxyde de grille est la même dans l'ensemble des simulations. Cependant, cette seconde hypothèse ne permet pas d'expliquer les comportements illustrés dans la Figure 138.

La version C-2009.06 a connu des efforts considérables de calibration, profitant aussi des études théoriques du projet ATOMICS et permettant de rapidement paramétrer des modèles simplifiés. Toutefois, on peut imaginer que le modèle relatif aux amas  $As_mV_n$  (cf. chapitre 3) est primordial car l'effet court canal est décrit plus précisément avec ATOMICS. La version C-2009.06 utilise un modèle simplifié appelé "Transient" qui ne tient compte que d'un seul amas  $AsV$ .

Les modèles élaborés au cours du projet ATOMICS et l'ajustement dédié donnent des résultats plus proches de la réalité que les autres versions. Ces modèles permettent une meilleure description physique des phénomènes se produisant dans les dispositifs, notamment la cinétique des défauts étendus dans le SOI qui a un impact direct sur les profils des dopants dans les extensions et par conséquent sur l'ensemble des caractéristiques des dispositifs.

### III.4.2 SOI PMOS

La Figure 139 représente les caractéristiques  $I_D(V_G)$  pour un transistor long (Figure 139.a) et un transistor court (Figure 139.b). Les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors longs sont tout à fait correctes. En revanche, on observe que les transistors simulés avec la version Y-2006.06 ne sont plus fonctionnels pour la longueur de grille de 55nm, en partie par une mauvaise approximation de la diffusion latérale du bore sous la grille qui joue un rôle majeur dans les dispositifs courts.

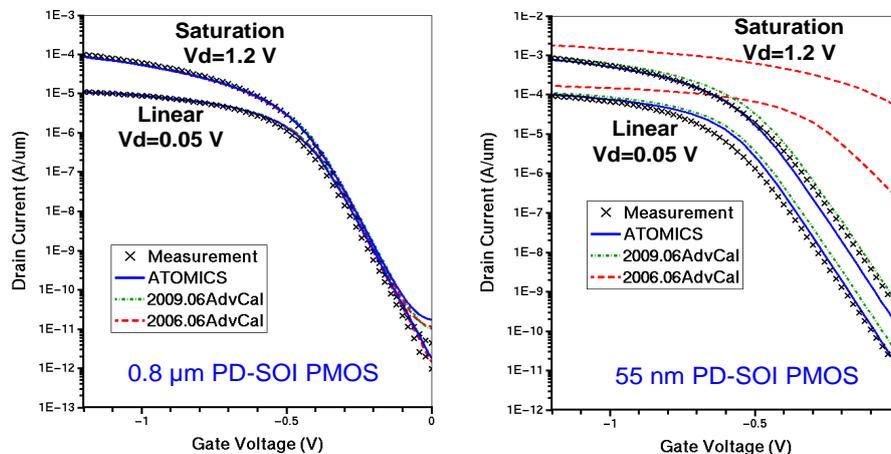


Figure 139: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à tension  $V_D$  faible (0.05V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors PMOS SOI dont les longueurs de grilles sont de 800nm (a) et 55nm (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

La simulation physique des effets associés à la diffusion du bore dans les extensions de Source/Drain a un impact très important sur les effets canal courts des transistors. La Figure 140.a et la Figure 140.b montrent les améliorations apportées par les modèles implémentés depuis la version Y-2006.06. La tension de seuil obtenue avec les différentes versions reflète la fiabilité de la simulation d'implantation et de diffusion dans les extensions de Source/Drain. Les versions C-2009.06 et Y-2006.06 sont moins précises que les modèles ATOMICS. Le gain obtenu sur les effets canal court est aussi reporté dans la Figure 140.c qui représente l'abaissement de la hauteur de barrière par influence du drain DIBL en fonction de la longueur de grille.

La simulation des caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  est améliorée grâce à un meilleur control des régions extensions et source-drain réalisés dans ce dispositif par des implantations de bore et de  $BF_2$ , en particulier grâce à la prise en compte, dans la simulation, des amas  $B_nI_m$ . L'incorporation des nouveaux modèles mais surtout les mécanismes liés à la recombinaison des défauts ponctuels dans les substrats SOI permet d'améliorer la simulation des gradients de dopants actifs obtenus pour le transistor court à partir de l'implantation  $BF_2$  et bore des extensions et des Source/Drain Ainsi, les modèles ATOMICS montrent une meilleure corrélation avec les caractéristiques électriques et reproduisent bien la diminution de diffusion du bore induit par la présence de l'interface Si/BOX.

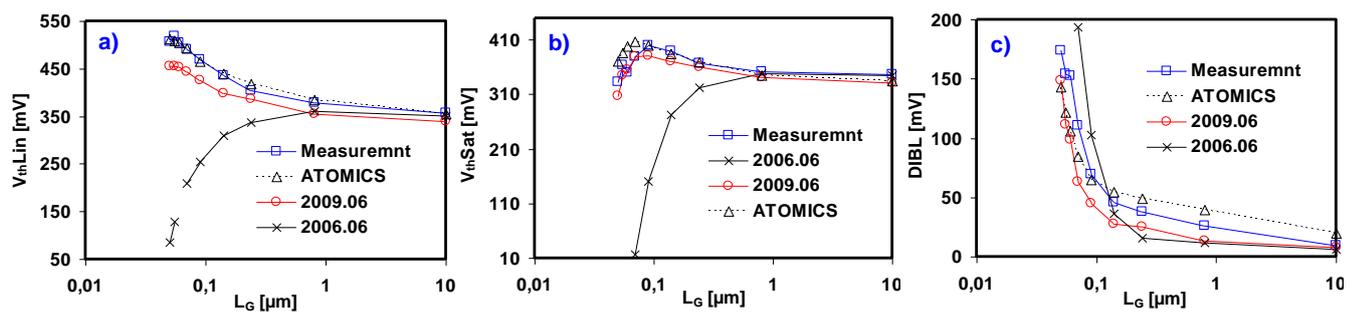


Figure 140: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor PMOS SOI. Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

Grâce à la fiabilité des simulations TCAD, nous pouvons utiliser les simulations comme outil d'investigation pour étudier les phénomènes observés expérimentalement lors de la fabrication de jonctions ultrafines par des méthodes avancées.

#### IV CARACTERISATION ELECTRIQUE DE LA DISTRIBUTION LATERALE DU DOPAGE SOURCE/DRAIN DANS LES MOSFETS NANOMETRIQUES.

Nous proposons ici une méthode de caractérisation de la distribution latérale du dopage dans les MOS basée sur la mesure de courant pour différentes longueurs de grille. La précision de la méthode et sa sensibilité aux variations dues au procédé de fabrication MOS sont ensuite évaluées au nœud technologique SOI 65nm en simulations numériques TCAD et en mesure.

Un contrôle parfait des distributions de dopage est impératif dans les technologies CMOS avancées. La profondeur de la jonction source/drain impacte directement les effets de canal court. La position latérale des jonctions détermine la longueur effective du canal ainsi que les capacités de recouvrement entre la grille et les source/drain. Le positionnement de ces profils de dopage dans les technologies actuels doit avoir une précision de l'ordre du nanomètre.

Bien qu'un certain nombre de méthodes permettent la mesure du dopage vertical avec cette précision, la mesure des profils latéraux est compliquée et requiert d'appliquer des mesures spécifiques à des échantillons préparés spécialement [1, 2]. Dans cette étude nous discutons de la sensibilité des mesures électriques par rapport à la distribution latérale du dopage et de la possibilité de caractériser ledit profil.

#### IV.1 Principe de la méthode

La méthode proposée repose sur l'analyse du courant de fuite entre source et drain et l'utilisation d'un jeu d'échantillons où l'on fait varier uniquement la longueur de grille. La variation de la longueur de grille entraîne un recouvrement progressif des profils de source et de drain et donc des zones de déplétions associées (Figure 141). Le recouvrement sous la grille par ces profils latéraux est défini par la longueur de grille, qui doit être connue, et par la diffusion des dopants des source/drain sous la grille. Ce recouvrement change significativement le comportement électrique de la structure de test, qui peut à son tour être utilisée pour caractériser le profil de dopage latéral.

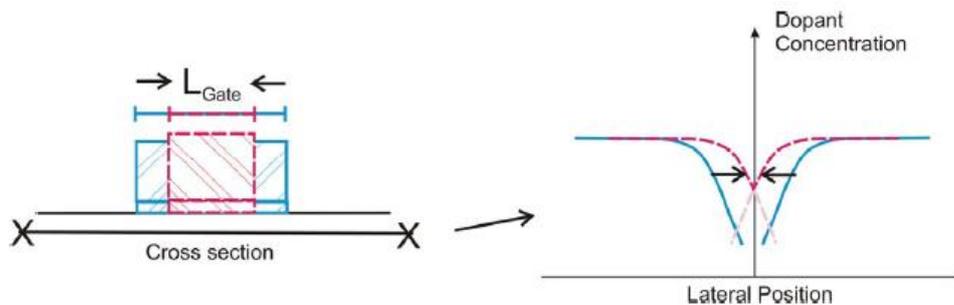


Figure 141 : Représentation schématique de l'influence de la réduction de la longueur de grille sur le profil latéral de la concentration de dopants.

En premier lieu l'influence du recouvrement des profils sur la capacité de grille et sur les courants de drain a été étudiée par nos partenaires de IISB via des simulations technologiques et électriques à l'aide de la suite logicielle Sentaurus de Synopsys [3]. Il en résulte que la sensibilité des courants de drain est bien plus prononcée que celle des capacités. Un schéma de la mesure proposée est en Figure 142.

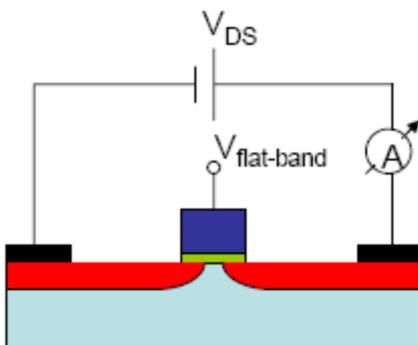


Figure 142 : Schéma de la mesure électrique pour caractériser le profil latéral de dopants.

Hormis la longueur de grille, les structures de test dont on étudie le profil latéral sont identiques. Afin de concentrer l'étude sur les effets du dopage latéral source/drain nous utilisons un dopage canal uniforme. Le dopage des source/drain est formé par implantation d'ions puis recuit d'activation.

Pour caractériser la distribution latérale du dopage nous suggérons de mesurer le courant de fuite  $I_D$  à faible tension de drain  $V_D$  et à une tension de grille constante et proche de la tension  $V_{fb}$  de bandes plates. La forme du profil latéral est alors estimée par ingénierie à rebours en utilisant les simulations technologiques et électriques.

La méthode présentée ici se distingue d'autres techniques de modélisation inverse [4, 5] par l'utilisation de longueurs de grille causant un recouvrement très significatif des profils de source et de drain.

Une première analyse de sensibilité à été conduite sur une architecture PMOS simplifiée avec un dopage constant de  $10^{17} \text{at.cm}^{-3}$  en appliquant des modèles de recuit rapide finement calibrés. La Figure 143 où le courant de drain  $I_D$  est tracé en fonction de la tension de drain  $V_D$  montre le résultat de ces simulations. Le courant  $I_D$  dépend fortement de la longueur de grille et varie d'environ 9 ordres de grandeurs lorsqu'elle passe 25 à 110nm, suggérant une forte sensibilité à la position et la forme du dopage source/drain.

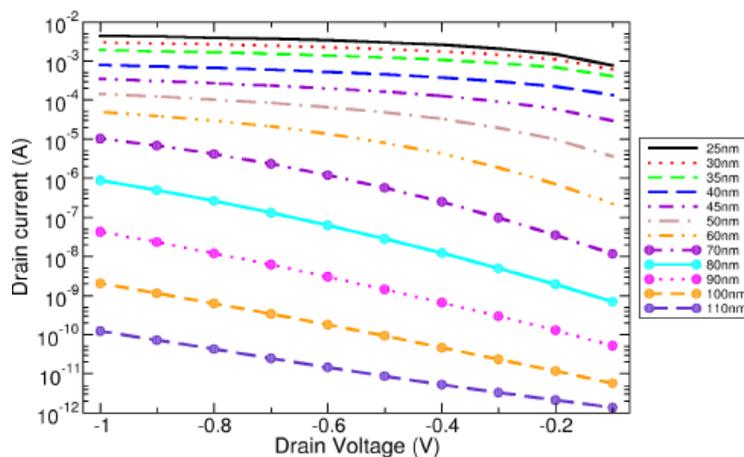


Figure 143 : Courant de drain  $I_D$  en fonction de la tension de drain  $V_D$  dans un PMOS et pour différentes longueurs de grille. ( $W = 1 \mu\text{m}$ ,  $V_G = +0.6\text{V}$ )

Une sensibilité similaire est attendue si la variation de position des jonctions source-canal et drain-canal est causée par une variation de température lors du recuit. La Figure 144 montre des simulations où la position de la jonction canal-drain a été variée en balayant volontairement la température maximum du recuit post-implantation par pas de  $10^\circ\text{C}$  (Figure 144.a). On observe que les décalages de la jonction sont également bien représentés sur les caractéristiques électriques avec une résolution de 2 nm (Figure 144.b).

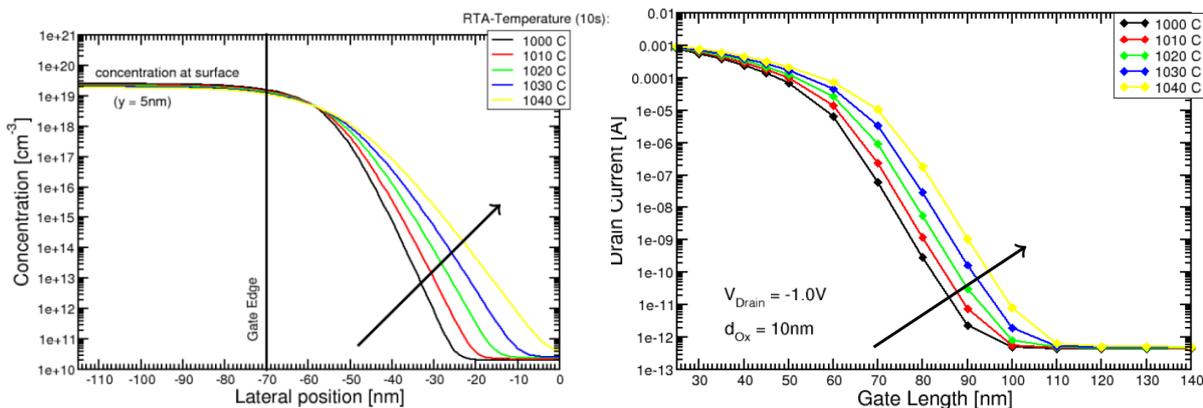


Figure 144 : (a) Profils de dopage latéraux pour différentes température de recuit rapide. (b) Effets du décalage de la jonction sur la caractéristique électrique.

La méthode présentée dans cette section, basée sur la mesure du courant  $I_D$  pour différentes longueurs de grille permet donc d'estimer l'extension latérale du profil de dopage. Dans les sections suivantes la précision de la méthode sur un procédé MOS complet ainsi que sa sensibilité à la variabilité de ce procédé sont évaluées.

#### IV.2 Application de la méthode sur des simulations TCAD d'un procédé industriel

Pour appliquer cette méthode nous simulons le procédé du nœud 65nm SOI que nous avons appliqué au silicium, en utilisant des longueurs de grille allant de 55 à 800 nm. Les simulations de procédé ont été réalisées en utilisant les modèles de diffusion récents calibrés pour les jonctions ultra-fines.

Comme référence, nous rappelons la distribution 2D du dopage obtenue à la fin de la simulation dans la Figure 145.

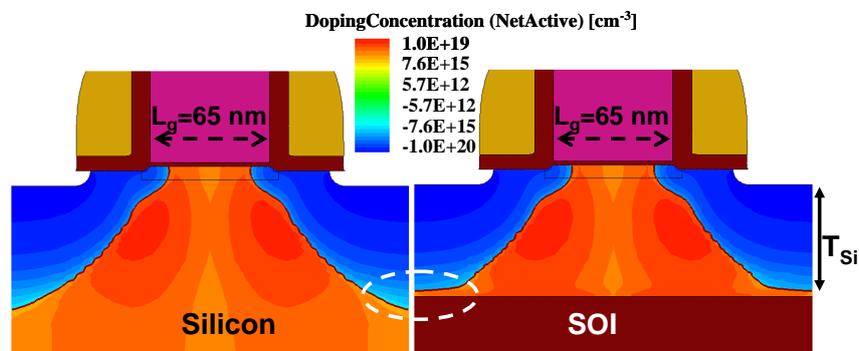


Figure 145 : Carte de dopage de la simulation 2D du PMOS (a) silicium et (b) SOI.

Comme expliqué dans la section précédente, la caractérisation du profil latéral est basée sur la mesure du courant  $I_D$  résultant du perçage entre le drain et la source. La caractéristique électrique est extraite en balayant  $V_D$  et avec  $V_G$  proche de  $V_{fb}$  pour éviter une redistribution des porteurs due à la tension de grille. Le résultat est montré en Figure 146 pour un PMOS avec une longueur de grille allant de 55 à 800 nm, à une largeur de  $1\mu m$ .

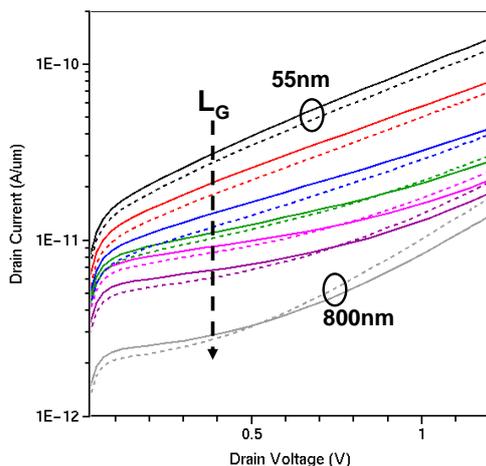


Figure 146 : Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de drain ( $V_D$ ) pour des transistors PD-SOI PMOS pour différentes longueurs de grilles. Comparaison entre le silicium (lignes continues) et le SOI (lignes en pointillé). La flèche indique les  $L_G$  croissant.

Les simulations électriques du PMOS sont basées sur le modèle de dérive-diffusion incluant les modèles les plus avancés, à l'exception de l'effet tunnel bande-à-bande et des effets quantiques qui sont négligeables dans ce régime de fonctionnement.

La Figure 146 démontre la forte dépendance de  $I_D$  sur la longueur de grille dans ce procédé PMOS comprenant toutes les étapes technologiques et valide le principe de la méthode. Cette validation est importante car ce flot de fabrication inclut des étapes conduisant à un profil à fort caractère bidimensionnel (implantations rétrogrades, et antiperçage).

Afin d'éviter l'influence du mécanisme d'effet tunnel bande-à-bande qui peut se produire dans un transistor réel, le courant de fuite n'est pas mesuré à  $V_D = V_{DD}$ , même si la sensibilité de la caractérisation serait maximisée dans ces conditions. Le courant de fuite  $I_D$  est donc mesuré à  $V_D = 0.4V$ . La Figure 146 montre  $I_D$  pour différentes longueurs nominales de grille. Le comportement est similaire à celui de la Figure 144.b. Le faible courant de fuite observé dans les dispositifs SOI est due à la diffusion légèrement plus faible des dopants dans les régions de source/drain grâce à la réduction de l'effet de TED dans la présence de l'interface Si/BOX.

### IV.3 Mesures sur des PMOS 65 nm

La faisabilité de la méthode de caractérisation électrique a été testée. Les mesures de  $I_D$  en fonction de  $V_D$  ( $V_G = V_{fb}$ ) sont tracées sur la Figure 147.a pour des longueurs de grille allant de 55 nm à 140  $\mu m$ . Ces caractéristiques électriques montrent la croissance exponentielle du courant de fuite  $I_D$  comme décrite dans la section précédente. La Figure 147 montre un effet inattendu pour les faibles valeurs de  $V_D$  résultant en un courant plus faible pour les petits transistors que pour les grands. Cela est dû à la redistribution des poches et du dopage substrat dans le cas des canaux courts, appelée RSCE pour reverse short channel effect. La croissance non monotone de  $I_D$  qui peut être expliquée qualitativement, doit être étudiée plus en détail. Comme le procédé réel présente un RSCE important, des structures de test dépourvues d'implantations de poche devraient être utilisées pour une utilisation optimale de cette méthode. La simulation (Figure 147.b) reproduit qualitativement la mesure.

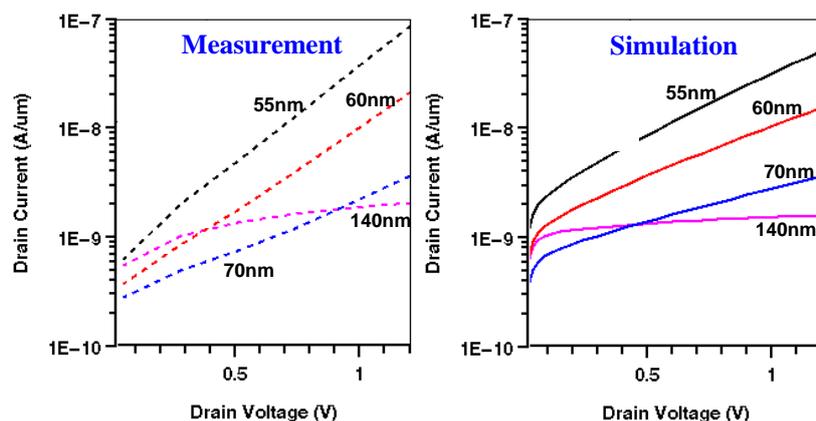


Figure 147 : Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de drain ( $V_D$ ) pour des transistors PD-SOI PMOS pour différentes longueurs de grilles (@ $V_g = -0.4 V$ ). Mesures (a) et simulation (b).

D'une part, la méthode montre sa capacité à distinguer des différences dans le profil de dopants qui apparaissent si la température de recuit change de seulement quelque degré. La précision absolue de la méthode tient à la précision des modèles de simulations et peut toujours être améliorée par un calibrage précis des modèles pour une longueur de grille donnée. D'autre part, des informations qualitatives sur la distribution de dopants peuvent être

extraites avec une résolution spatiale importante à partir de caractéristiques électriques. C'est donc un outil précieux dans le cadre du calibrage précis des simulations TCAD des technologies submicroniques.

#### **IV.4 Conclusion**

Nous avons montré que les mesures électriques peuvent être suffisamment sensibles à la distribution latérale des dopants pour permettre sa caractérisation. La méthodologie développée a été vérifiée par simulation numériques TCAD et sa sensibilité aux fluctuations du procédé a été évaluée. Les mesures électriques sur des dispositifs réels de technologie 65nm démontrent la bonne sensibilité des caractéristiques électriques et ont indiqué des difficultés d'interprétation sur des transistors présentant un dopage non uniforme du canal. Toutefois, cette technique apparait bien plus précise que les techniques de caractérisation physique et se présente comme un bon outil de calibrage TCAD.

## V TRANSISTORS A CANAL DE SILICIUM CONTRAINT POUR LES NŒUDS TECHNOLOGIQUES CMOS 45NM

L'objectif de cette section est de valider les modèles de procédé de fabrication dans les matériaux contraints et SiGe dans le cas de dispositifs multicouches. Les résultats électriques permettent de mettre en évidence un comportement diffusif des dopants totalement différent de celui observé dans du Si ainsi qu'un gain en mobilité des électrons et des trous. Les différents paramètres électriques seront décrits et nous détaillerons les différents phénomènes mis en évidence.

Les transistors simulés dans cette étude sont des transistors à canal de Si contraint. Le Si contraint est obtenue par épitaxie de 150Å de Si sur un substrat virtuel de SiGe 20%. Une vue d'ensemble du transistor est schématisée sur la Figure 148.

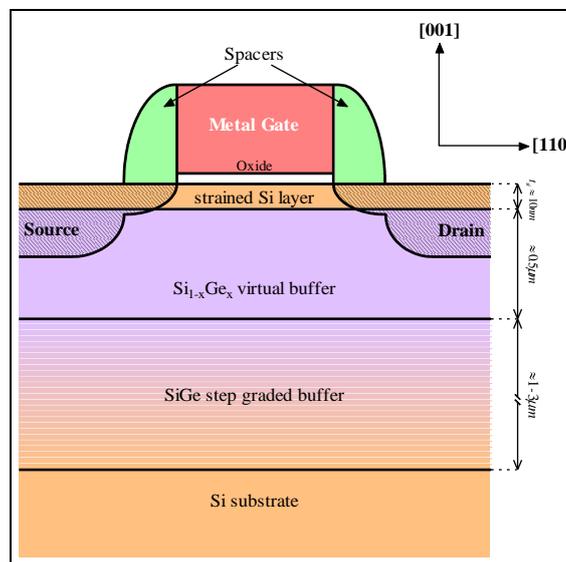


Figure 148 : Schéma du transistor à canal de Si contraint par substrat virtuel de SiGe.

### V.1 Structures fabriquées

Les échantillons utilisés pour cette étude ont été réalisés lors des travaux de thèse de F. PAYET [6]. Ces lots permettent de mettre en évidence l'impact de la contrainte sur les performances électriques des transistors, mais aussi le comportement de diffusion des dopants différents dans le Si contraint et le SiGe par rapport à celui couramment observé dans du Si relaxé. Les caractéristiques des lots sont les suivantes :

- substrat SiGe 20%,
- un film de Si contraint en tension biaxiale est obtenu par épitaxie d'un film de Si sur un substrat de SiGe.
- oxyde de grille nitruré de type RTN 13Å à 900°C,
- espaceur basse température ( $T < 500^\circ\text{C}$ ),
- recuit d'activation de type spike,
- une siliciuration à base de nickel.

La Figure 149 illustre la succession des étapes dans l'ordre chronologique. Ce nœud est basé sur un oxyde de grille d'environ 15Å. Les étapes d'implantation introduisent les dopants clés du fonctionnement du dispositif et sont suivis par un recuit d'activation RTP standard. Les spécifications des implantations extensions, poches et source/drain sont dans la gamme des énergies et des doses étudiés dans le cadre du projet ATOMICS et sur laquelle nos modèles ont été élaborés. Un recuit d'activation "Spike" termine le flot d'étapes du procédé. Le reste des étapes (back-end) est consacré à la métallisation, à la connexion des composants et à la protection de ceux-ci. Ces dernières étapes ne sont pas pris en compte dans nos simulations car elles n'ont pas d'incidence sur les profils de dopants actifs.

<ul style="list-style-type: none"> <li>● Ajustement Vth</li> <li>● Oxyde de grille</li> <li>● Dépôt grille poly-Si</li> <li>● Réoxydation</li> <li>● Implantation poches</li> <li>● Implantation LDD</li> <li>● Formation espaceur</li> <li>● Implantation S/D</li> <li>● Recuit d'activation</li> <li>● Procédé « Back-end"»</li> </ul>	<p><b>NMOS</b> bore</p> <p><b>BF2</b> arsenic</p> <p><b>As</b> "spike" 1080°C</p>	<p><b>PMOS</b> arsenic</p> <p><b>arsenic</b> <b>BF2</b></p> <p><b>B,</b> "spike" 1080°C</p>
--	---	---

Figure 149 : Liste simplifiée des étapes de procédé fabrication des transistors CMOS SiGe 45nm.

Des coupes TEM de transistors ont été effectuées afin de valider le procédé de fabrication. La Figure 150 présente les observations TEM d'un transistor de 32 nm de longueur de grille. La morphologie de ce transistor est correcte. Le procédé de fabrication est donc validé.

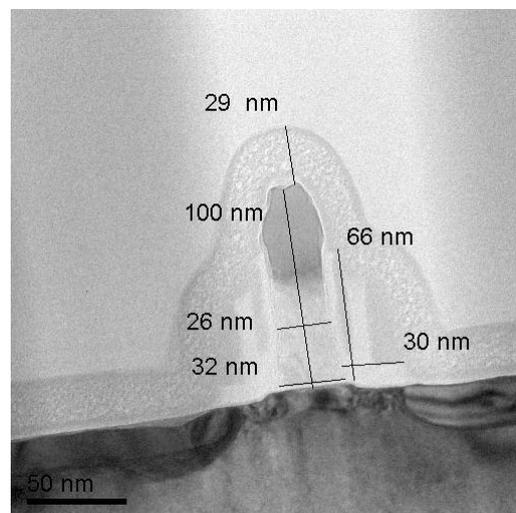


Figure 150 : Observation TEM d'un transistor Si contraint sur SiGe.

Nous avons utilisé ces mesures MET par la suite pour simuler l'architecture des transistors étudiés.

## V.2 Résultats de simulation procédé

### V.2.1 Modèles pour Si contraint/SiGe (sSi/SiGe)

La contrainte et l'introduction de Ge dans la matrice de Si modifient fortement les paramètres matériau du Si. Un des paramètres fondamentaux dans le procédé de fabrication est le coefficient de diffusion des dopants. Ce coefficient va modifier les profils de dopage et ainsi modifier les effets canaux courts. Il est donc nécessaire de bien simuler les différentes implantations (dose et énergie) afin de mieux contrôler les effets canaux courts et DIBL en limitant la profondeur de jonction et en augmentant la dose active de dopants. Dans un premier temps, nous évaluerons les coefficients de diffusion  $D_{A,i}$  de différentes espèces chimiques A dans le SiGe et le Si contraint (matériau i) normalisés au coefficient de diffusion dans le Si relaxé  $D_{A,Si\text{ relaxé}}$  :

$$\text{Équation 109} \quad \delta A_i = \frac{D_{A,i}}{D_{A,Si\text{ relaxé}}}, A = \{B, As, P\}$$

Cette approche permet de comprendre l'évolution de la diffusion des dopants dans les différents matériaux par les modèles présentés dans [7, 8, 9]. Il permet de déterminer l'évolution de  $\delta A_i$  en fonction de la concentration en germanium  $x_{Ge}$  pour du SiGe relaxé, et l'état de contrainte équivalente du Si contraint sur SiGe.

La Figure 151 présente l'évolution du coefficient de diffusion normalisé des différents dopants. Le bore est un élément critique dans les transistors conventionnels de type P car il diffuse très vite. Cependant, la diffusion du B est ralentie en présence de Ge pour une concentration en Ge de 20% le coefficient de diffusion est divisé par 3. Par contre, la contrainte amplifie sa diffusion et pour la même concentration en Ge, le coefficient de diffusion du B est multiplié par 4. La diffusion de l'arsenic est accélérée en présence de Ge et pour une concentration en Ge de 20%, le coefficient de diffusion est multiplié par 10. La contrainte par contre ne semble quasiment pas affecter la diffusion de l'arsenic jusqu'à des concentrations en Ge de 25%.

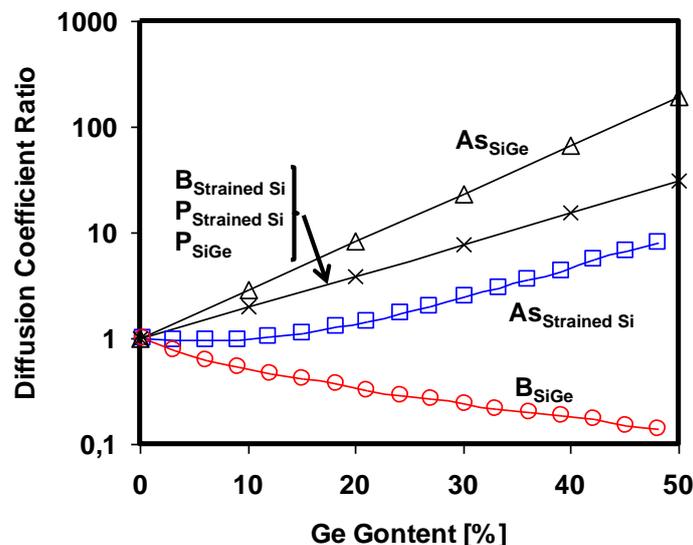


Figure 151 : Evolution de  $\delta$  en fonction de  $x$  à 1080°C.

Le phosphore de manière naturelle diffuse très vite dans le Si. C'est pour cela qu'il est utilisé comme implantation de type source/drain afin d'obtenir des jonctions profondes les moins abruptes possibles. La diffusion du phosphore réagit de la même manière en présence de Ge ou en présence d'une contrainte. Pour une concentration en Ge de 20%, elle est accélérée par un facteur 4.

Cette modification des coefficients de diffusion des espèces chimiques va avoir un effet important sur les profils de dopants dans un transistor à canal de Si contraint sur substrat virtuel de SiGe. En effet, les phénomènes de diffusion sont très complexes. Mais il est possible d'en prédire deux effets du premier ordre : i) les profils de dopants seront totalement différents dans un système Si contraint sur SiGe ; ii) les effets de diffusion couplés (couplage B-As par exemple) ne seront plus les mêmes comme les profils de dopage diffèrent d'une structure standard, il est nécessaire de réajuster certains paramètres de la simulation. De plus, l'étude simple des coefficients de diffusion n'est pas suffisante pour comprendre les phénomènes mis en jeu dans une structure bicouche Si contraint sur SiGe.

### V.2.2 Transistor de type N à canal de Si contraint sur SiGe 20% - Etude de la diffusion des dopants

La forte augmentation des coefficients de diffusion de l'arsenic et du phosphore (Figure 151) dans le SiGe et le Si contraint induit une variation des profils de dopage et donc une modification des effets canaux courts. Afin d'illustrer cet effet, un transistor MOS de 60nm de longueur de grille a été simulé avec les implantations standard d'un NMOS :

- implantation Vth : bore,
- implantation LDD : arsenic,
- implantation Poche et Halo : BF<sub>2</sub>,
- implantation S/D : arsenic,

Les résultats obtenus dans une structure MOSFET standard sont comparées à ceux obtenus dans une structure à canal de Si contraint sur substrat virtuel de SiGe (Figure 152).

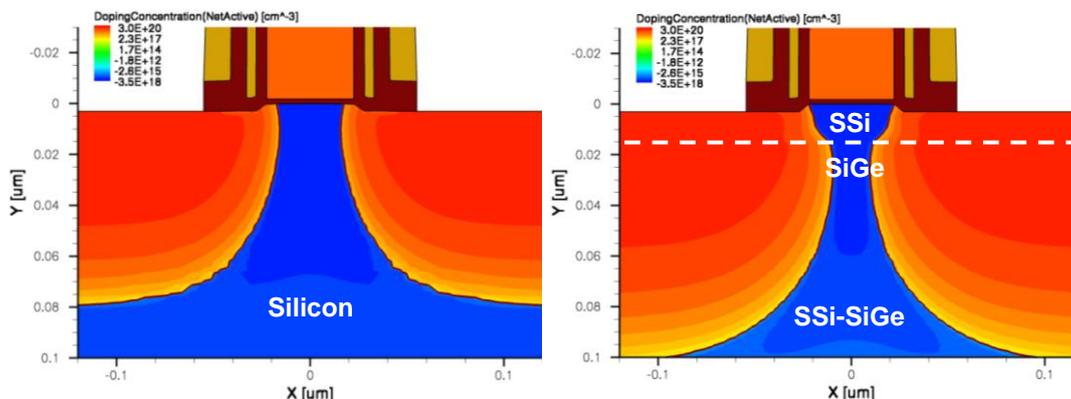


Figure 152: Simulation de la répartition du dopage net dans un transistor NMOSFET de longueur de grille de 45nm. a) silicium standard et b) 15nm Si contraint par SiGe 20%.

La Figure 152 présente les profils de dopants actifs dans un transistor standard (Figure 152.a) et un transistor à canal de Si contraint sur un substrat de SiGe 20% (Figure 152.b). L'augmentation de la diffusion de l'arsenic dans le SiGe (Figure 152.b) induit une profondeur S/D beaucoup plus grande. De plus la diffusion latérale est aussi augmentée.

La diffusion latérale plus importante de l'As va réduire le dopage canal des transistors à canal court. Cette réduction du dopage canal diminue la tension de seuil et il sera possible d'observer des effets canaux courts plus prononcés.

Le profil d'arsenic correspondant aux implantations LDD et S/D, malgré l'augmentation de sa diffusion dans le SiGe (Figure 152.b), on observe que les profils de LDD dans le canal du transistor à canal de Si contraint sur SiGe sont beaucoup plus abrupte que dans le cas du transistor MOSFET standard. Cette diffusion accélérée de l'arsenic dans le SiGe (Figure 152.b) est compensée par des effets de surface : en effet le coefficient de diffusion de l'arsenic dans la couche de Si contraint par le substrat SiGe (jusqu'à pour 20% de Ge) est équivalent à celui du Si relaxé. Lors des implantations LDD et S/D, la dose d'As se retrouve en partie dans la couche de Si contraint. Cette couche joue le rôle de capteur d'arsenic à cause de son faible coefficient de diffusion. La diffusion accélérée dans le SiGe est alors ralentie par manque de dopant lorsque l'on s'approche de l'interface Si contraint/SiGe.

Cependant pour les effets SCE et DIBL, un autre paramètre entre en jeu. Il s'agit de l'implantation poche. En effet, dans le cas du transistor MOS standard toutes les implantations sont optimisées. Les implantations de poches en bore sont bien placées pour obtenir un effet RSCE optimal. Dans le cas du transistor à canal de Si contraint sur SiGe le bore se retrouve principalement dans les zones de forte concentration en As (S/D et LDD). Ce couplage B/As associé à la réduction de la diffusion du bore dans le SiGe (Figure 151) crée des zones déplétées en bore en bord de grille dans le cas d'un dispositif à canal de Si contraint sur SiGe. Ce phénomène va se traduire par une réduction du RSCE et donc une augmentation des effets canaux courts SCE et DIBL.

A partir des simulations de diffusion de dopants incluant tous les effets physiques dus à la contrainte et à la présence de germanium, il est possible de déterminer les variations de la tension de seuil en fonction de la longueur de grille. Ces simulations de la tension de seuil ne prennent en compte que la variation de diffusion des espèces chimiques. En effet, la courbe tension de seuil à différents  $L_G$  n'est pas impactée par les phénomènes introduits par l'hétérostructure Si/SiGe car les variations induites par la présence de cette interface n'induisent qu'un décalage de la tension de seuil. De plus, la tension de seuil canal long n'est pas impactée par le changement de diffusion du B car le budget thermique utilisé est suffisant pour avoir des dopages de canal équivalents dans les sur les transistors de référence en silicium et ceux de canal Si contraint.

### ***V.2.3 Transistor de type P à canal de Si contraint sur SiGe 20% - Etude de la diffusion des dopants***

Les différentes implantations lors de la fabrication du transistor de type P sont les suivantes :

- implantation  $V_t$  : arsenic,
- implantation LDD :  $BF_2$ ,
- implantation Poche et Halo : arsenic,
- implantation S/D : bore

Pour l'étude du PMOS, seule l'implantation LDD bore semble être critique car elle contrôle les caractéristiques électriques du transistor. La Figure 153 présente le profil de diffusion des

dopants dans du Si standard (Figure 153.a) et dans une couche de 15nm de Si contraint sur un substrat virtuel SiGe 20% après recuit "spike" 1080°C (Figure 153.b). La première observation concerne la profondeur de diffusion au niveau de la zone non masquée par la grille du transistor (axe A-A'): dans le cas du Si relaxé, la profondeur de jonction est de 70nm alors que dans le cas du Si/SiGe, la profondeur de jonction est moins importante 41nm. Ceci est en accord avec le ralentissement attendu de la diffusion du bore dans le SiGe. Le LDD bore est partiellement implanté dans la couche de Si contraint : la concentration en atomes de bore y est donc importante. Le bore a un coefficient de diffusion plus important dans le Si contraint que dans le cas d'un substrat silicium et l'aggravation du gradient latéral du dopant dans la couche supérieure induit une accélération de la diffusion du bore sous la grille. Ces différents effets impliquent une réduction de la profondeur de jonction au niveau de la zone de recouvrement et la profondeur de jonction est de 15nm.

Ce comportement particulier du profil latéral du bore est lié au couplage entre le Si contraint à fort coefficient de diffusion et le SiGe à faible coefficient de diffusion. Le profil de dopage sous la grille est intéressant pour le contrôle des effets SCE et DIBL. En effet, la profondeur de jonction reste limitée à une épaisseur proche de celle du film de Si contraint. Par contre, la réduction de l'épaisseur de LDD risque d'augmenter les résistances séries du transistor si elle n'est pas contrebalancée par une augmentation de la concentration d'atomes de bore actifs et par une augmentation significative de la mobilité des charges.

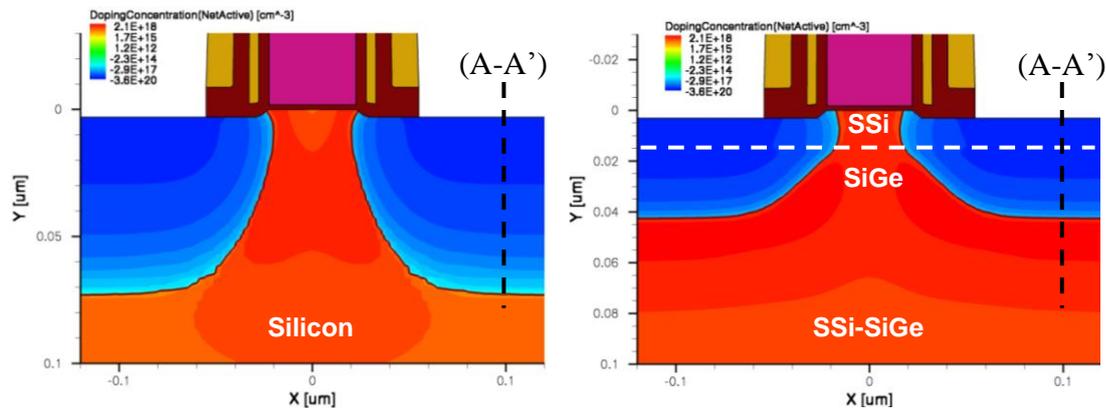


Figure 153 : Simulation de la répartition du dopage net dans un transistor PMOSFET de longueur de grille de 45nm. a) silicium standard et b) 15nm Si contraint par SiGe 20%.

#### V.2.4 Conclusion

Avec ces résultats de simulations, nous constatons qu'il n'est pas simple d'appréhender de façon simplifiée les phénomènes de diffusion dans un système bicouche Si contraint sur SiGe (sSi/SiGe). Un simple raisonnement sur les coefficients de diffusion n'est pas suffisant et l'outil de simulation est indispensable à la prise en compte de tous les phénomènes concomitants. La présence de la couche de Si contraint en surface induit des phénomènes de diffusion accélérée qui ne sont pas négligeables [9]. Même si l'évolution des profils suit les tendances attendus, seule une analyse des résultats électriques, détaillé dans le prochain paragraphe nous permettra de valider les modèles TCAD développés.

### V.3 Simulation électrique

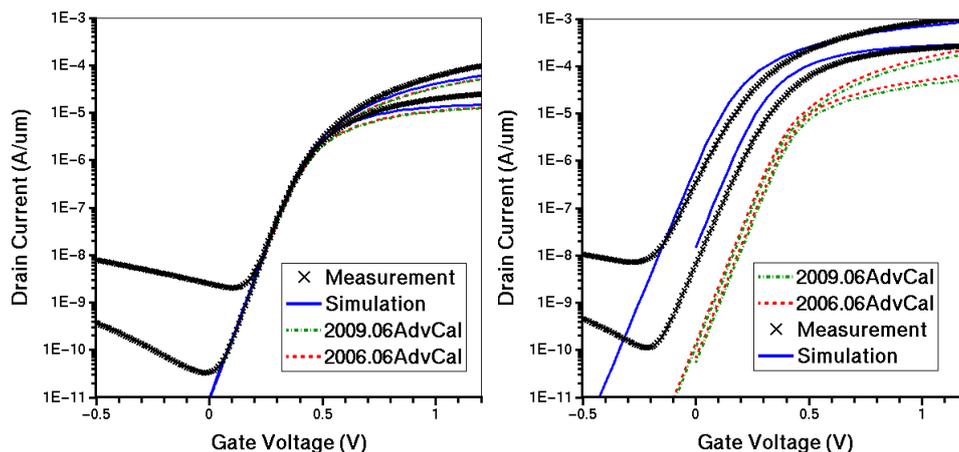
Le comportement de la tension de seuil en fonction de la longueur de grille est fortement dépendant de la profondeur de jonction  $X_j$  (cf. chapitre 1 section III). Or comme il a été présenté ci-dessus la diffusion des dopants dans le SiGe et le Si contraint n'est pas équivalente à celle observée dans du Si relaxé. De ce fait, la tension de seuil va s'en trouver fortement perturbée. Avant de s'intéresser aux dispositifs sSi/SiGe, nous avons simulé d'abord le dispositif Si de référence correspondant au dispositif sSi/SiGe analysé.

#### V.3.1 Transistor Silicium 45nm

Les premiers résultats de simulation permettent de mettre en évidence le comportement diffusif différent des espèces chimiques dans le silicium selon la version de Sentaurus Process utilisée. Les transistors silicium dont les résultats suivants ont subi un procédé de fabrication très proche du dispositif sSi/SiGe.

##### V.3.1.1 Silicium NMOS 45nm

Les Figure 154.a Figure 154.b présentent respectivement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors Si NMOS de longueur de grille de  $1\mu\text{m}$  et  $45\text{nm}$  mesurées et simulées à  $0.1\text{V}$  et  $1.2\text{V}$  respectivement. La confrontation entre les mesures et les résultats de simulation montre que les trois versions de Sentaurus Process reproduisent parfaitement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  en faible et forte inversion pour les dispositifs Si références NMOS longs. Ceci confirme que le dopage dans le canal est bien pris en compte et que la ségrégation des dopants à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  est correctement ajustée. En revanche, seuls les modèles ATOMICS permettent d'obtenir un bon accord avec les mesures du dispositif NMOS  $45\text{nm}$ . Contrairement aux précédentes structures SOI, le dispositif silicium court n'est pas correctement simulé par les deux versions Y-2006.06 et C-2009.06 qui sous-estiment les effets SCE.



**Figure 154:** Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible ( $0.1\text{V}$ ) et  $V_D$  fort ( $1.2\text{V}$ ) des transistors Si NMOS de longueur de grille de  $1\mu\text{m}$  (a) et  $45\text{nm}$  (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

Les Figure 155.a et Figure 155.b représentent respectivement la tension de seuil en régime linéaire et saturé et la Figure 155.c représente le DIBL, en fonction de la longueur de grille. Comme attendu les caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  mesurées sont correctement reproduites par les modèles ATOMICS (cf. Figure 155.a et Figure 155.b) alors que les calibrations avancées C-

2009.06 et Y-2006.06 échouent à reproduire ces caractéristiques. Les tendances correctes des caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  montrent que la distribution des dopants dans les zones d'extension S/D et de poche est bien décrite par les simulations TCAD.

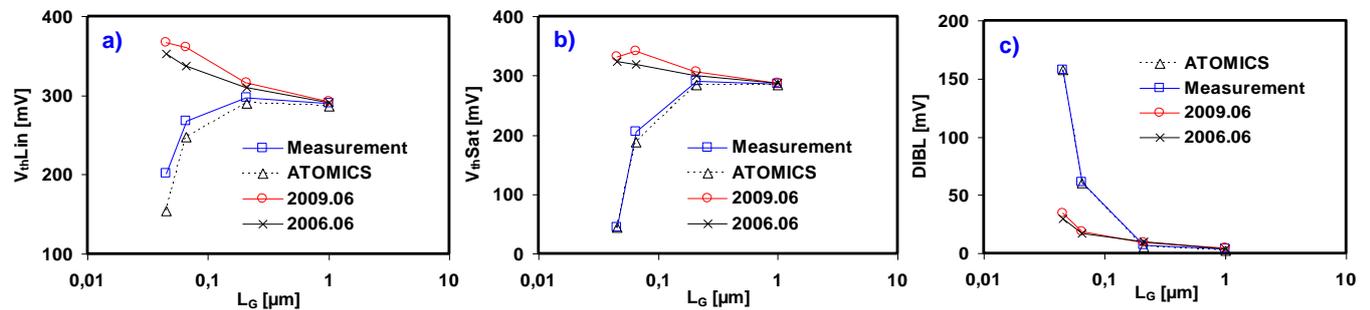


Figure 155: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor Si NMOS. Comparaison entre la simulation et la mesure.

La tension de seuil canal long est contrôlée par le dopage bore du canal en surface, ce qui est piloté par les modèles de diffusion à basse concentration donnant des résultats comparables dans les 3 cas simulés. Cependant les effets canaux courts SCE et DIBL sont beaucoup plus prononcés dans le cas des transistors simulés avec les versions C-2009.06 et Y-2006.06. Ce résultat est conforme à ce qui avait été prédit par les simulations TCAD : la diffusivité élevée du S/D arsenic augmente la profondeur de jonction, dégrade rapidement la tension de seuil et le recouvrement des poches se retrouve augmenter.

V.3.1.2 Silicium PMOS 45nm

Les Figure 156.a et Figure 156.b illustrent les améliorations apportées par les modèles ATOMICS dans la simulation physique des caractéristiques électriques  $I_D(V_G)$  du transistor PMOS sur substrat standard silicium. Bien que les dispositifs longs soient bien décrits par les trois versions, les calibrations avancées C-2009.06 et Y-2006.06 surestiment les effets de canal court. Les modèles ATOMICS permettant de bien décrire les amas  $B_m I_n$  et  $A_{sm} V_n$  grâce aux modèles de BICs et de AsV tendent à réduire la diffusion du bore à partir des régions LDD et source/drain vers le canal de réduire ainsi le DIBL.

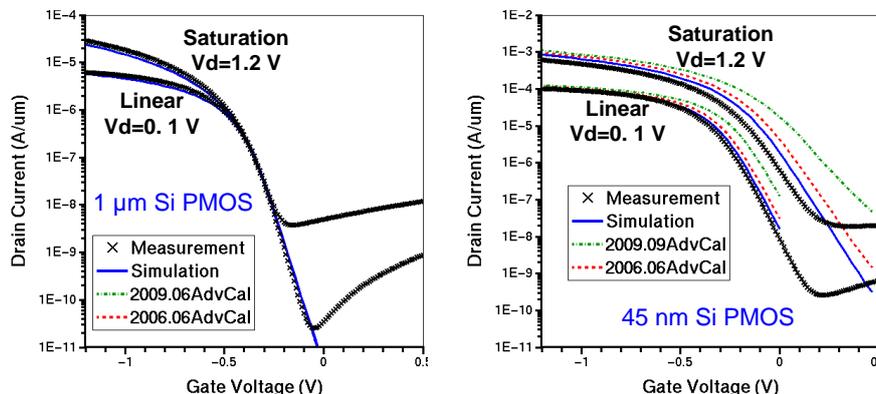


Figure 156: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible (0.1V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors PMOS Si dont les longueurs de grilles sont  $1\mu m$  (a) et  $45nm$  (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole).

Les Figure 157.a et Figure 157.b représentent respectivement la tension de seuil en régime linéaire et saturé et la Figure 157.c représente le DIBL, en fonction de la longueur de grille.

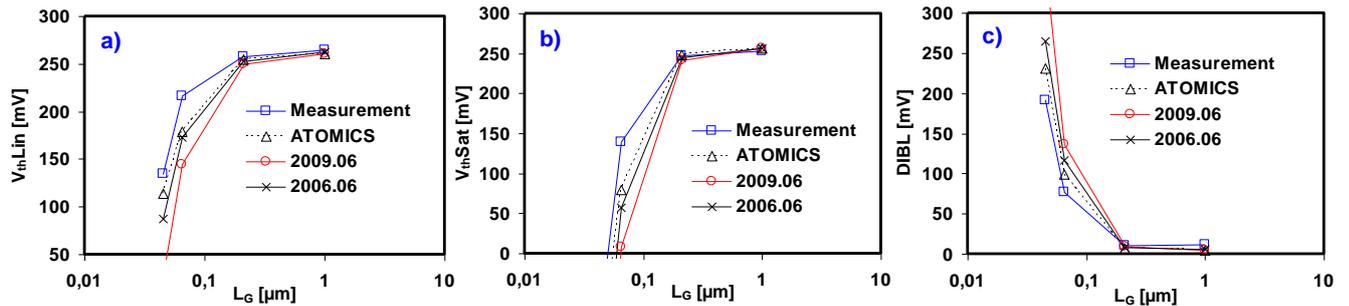


Figure 157: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor PMOS Si. Comparaison entre la simulation et la mesure.

Comme observé en simulation TCAD, pour le PMOS obtenu avec ATOMICS la profondeur de jonction est fortement réduite (Figure 158.a) ce qui se traduit directement sur le comportement des tensions de seuil (Figure 157) par un très bon accord des effets SCE et DIBL avec les mesures. En effet, ce dispositif contient des extensions S/D fabriquées avec du  $\text{BF}_2$  et la présence de fluor réduit la diffusion du bore dans le silicium (cf. chapitre 1 section I.3.1). Ce phénomène est pris en compte dans les modèles ATOMICS (Figure 158.a).

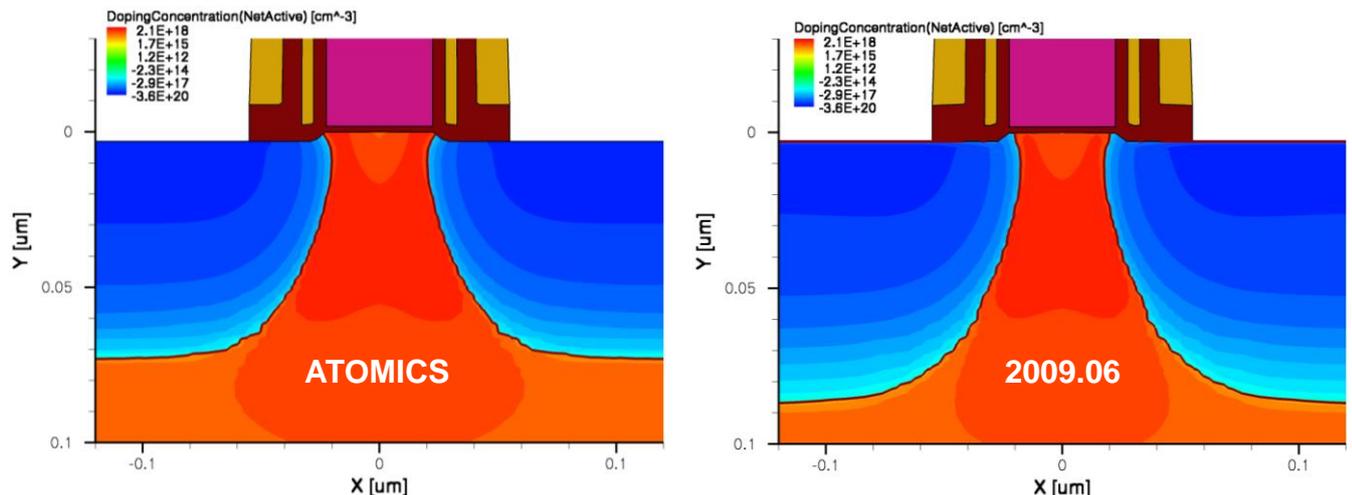


Figure 158: Simulation de la répartition du dopage net dans un transistor PMOSFET sur silicium de longueur de grille de 45nm. a) ATOMICS et b) C-2009.06.

Nous avons présenté dans cette étude préliminaire, les améliorations apportées par les nouveaux modèles physiques ATOMICS dans le silicium. Nous avons simulé des transistors NMOS et PMOS à l'aide de trois ensembles de modèles et paramètres différents : ATOMICS, C-2009.06 et Y-2006.06. Les indicateurs des effets canaux courts  $V_{th}(L_G)$  et  $DIBL(L_G)$  montrent que le meilleur accord est obtenu avec les modèles ATOMICS. Les modèles développés pour les matériaux SiGe et Si contraint (cf. chapitre 6) seront validés dans la partie suivante à travers la simulation électrique de dispositif à canal de silicium contraint par un substrat virtuel de SiGe pour les nœuds technologiques CMOS 45nm.

### V.3.2 Transistor à canal de Si contraint sur SiGe 20%

Nous présentons dans cette partie les résultats de simulation des transistors MOS à canal de Si contraint par un substrat virtuel de SiGe. Nous comparons dans un premier temps les

simulations ATOMICS aux mesures. Nous confrontons ensuite ces modèles aux versions précédentes afin de mettre en évidence les améliorations apportés par les modèles ATOMICS.

V.3.2.1 NMOS

Les Figure 159.a et Figure 159.b montrent respectivement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors NMOS de longueur de grille  $1\mu\text{m}$  et  $45\text{nm}$  mesurées à  $0.1$  et  $1.2\text{V}$ . La confrontation de ces simulations aux mesures montre que les modèles ATOMICS reproduisent parfaitement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  en faible et forte inversion pour les dispositifs longs. Les mesures relatives au dispositif court montrent qu'il n'est plus fonctionnel pour la longueur de grille de  $45\text{nm}$  en raison des courants de fuite élevés en régime saturé. On observe donc une dégradation de la simulation due en partie à la difficulté d'évaluer le comportement électrostatique en présence de forts courants de fuite. En revanche, ces simulations montrent que la distribution des dopants dans le dispositif correspond bien à la réalité.

L'effet de la contrainte sur la mobilité des électrons et des trous impacte le courant  $I_{on}$  obtenu. Malgré le fait de bien prendre en compte l'introduction de la contrainte dans nos simulations, son effet sur la mobilité n'était pas ajusté suffisamment, il en résulte une dégradation de la simulation de  $I_D(V_G)$  en régime linéaire.

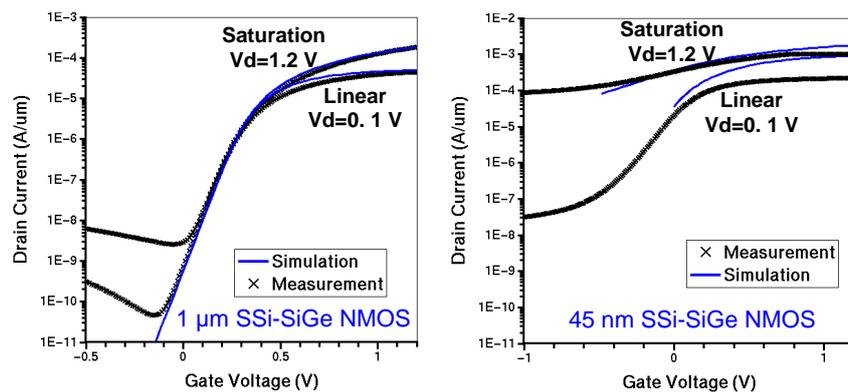


Figure 159: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) pour  $V_D$  faible ( $0.1\text{V}$ ) (cas a) et  $V_D$  fort ( $1.2\text{V}$ ) des transistors sSi/SiGe NMOS dont les longueurs de grilles sont  $1\mu\text{m}$  (a) et  $45\text{nm}$  (b). Comparaison entre la simulation avec les modèles ATOMICS (ligne continue) et la mesure (symbole).

Pour confirmer cette évaluation, nous comparons sur la Figure 160 les caractéristiques  $I_D(V_G)$  simulées et mesurées de dispositifs sSi/SiGe NMOS de longueurs de grille intermédiaires ( $210$  et  $65\text{nm}$ ).

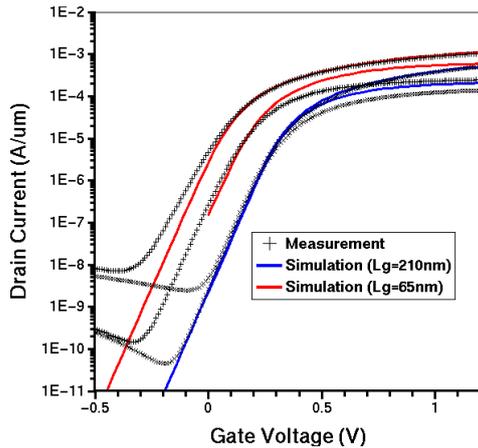


Figure 160: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) pour  $V_D$  faible (0.05V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors sSi/SiGe NMOS dont les longueurs de grilles sont 200 et 65nm. Comparaison entre la simulation avec les modèles ATOMICS (ligne continue) et la mesure (symbole).

Dans la Figure 161.a nous comparons les caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  mesurées et simulées de la tension de seuil en régime linéaire et saturé en fonction de la longueur de grille. Les effets canaux courts SCE et DIBL sont beaucoup plus prononcés dans le cas des transistors à canal de Si contraint. Ce résultat est conforme à ce qui avait été déduit par l'analyse des profils de dopants simulés : la présence de l'arsenic S/D augmente la profondeur de jonction et dégrade la tension de seuil (cf. Figure 152).

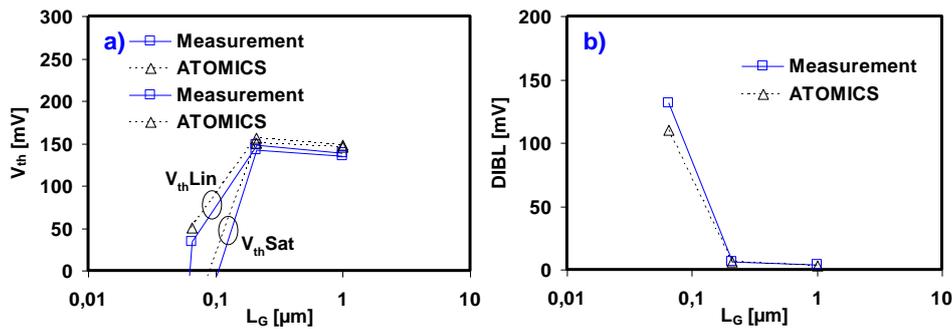


Figure 161: Tension de seuil en régime linéaire et saturé (a) et DIBL (b) en fonction de la longueur de grille de transistor sSi/SiGe NMOS. Comparaison entre la simulation obtenue avec les modèles ATOMICS et la mesure.

Les paramètres du procédé de fabrication relatif au dispositif 45nm à canal de silicium contraint par un substrat virtuel de SiGe utilisés dans ces expériences sont peu nombreux pour permettre une analyse détaillée des différents comportements électriques. En revanche, la simulation reproduit bien la tendance des effets physiques observés dans le dispositif NMOS.

### V.3.2.2 PMOS

Les Figure 162.a et Figure 162.b présentent respectivement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors PMOS de longueur de grille 1 $\mu$ m et 45nm mesurées à 0.1 et 1.2V. La confrontation de ces simulations aux mesures montre que les modèles reproduit parfaitement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  en faible et forte inversion pour les dispositifs longs et courts.

Comme pour les dispositifs NMOS, les modèles de transport des trous dans le dispositif simulé n'ont pas été suffisamment ajustés dans le SiGe, ainsi les simulations des courants en régime linéaire et saturé sont dégradées.

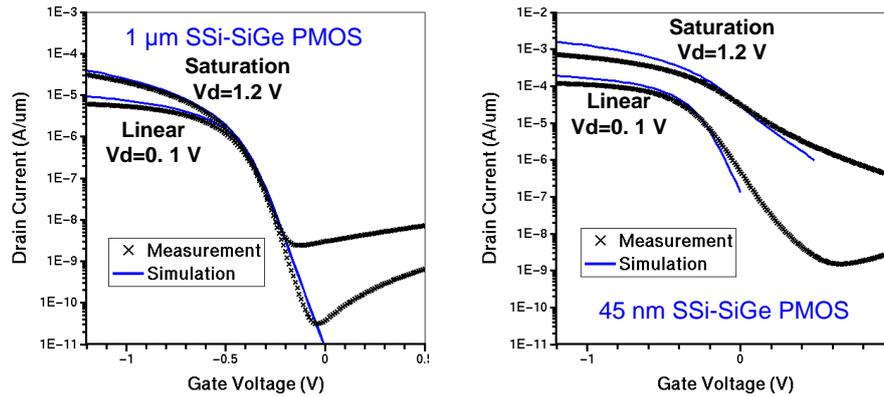


Figure 162: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible (0.1V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors sSi/SiGe PMOS dont les longueurs de grilles sont 1 $\mu$ m (a) et 45nm (b). Comparaison entre la simulation avec les modèles ATOMICS (ligne continue) et la mesure (symbole).

Nous comparons sur la Figure 163 les caractéristiques  $I_D(V_G)$  simulées et mesurées de dispositifs sSi/SiGe NMOS de longueurs de grille intermédiaires (210 et 65 nm).

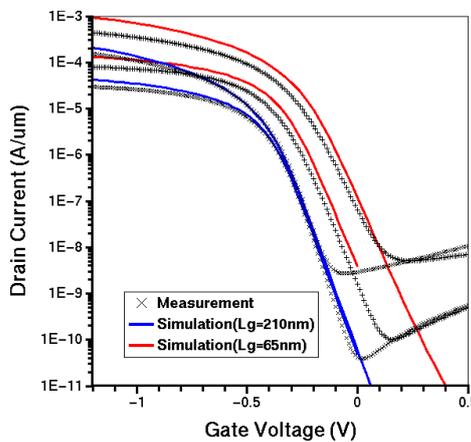


Figure 163: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) pour  $V_D$  faible (0.1V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors sSi/SiGe PMOS dont les longueurs de grilles sont 200 et 65nm. Comparaison entre la simulation avec les modèles ATOMICS (ligne continue) et la mesure (symbole).

La Figure 164 présente les caractéristiques  $V_{th}(L_G)$  mesurées et simulées de la tension de seuil en régime linéaire et saturé en fonction de la longueur de grille. Les effets canaux courts SCE et DIBL sont beaucoup plus prononcés dans le cas des transistors à canal de Si contraint. Ce résultat est conforme à ce qui avait été prédit par les simulations TCAD : la présence du bore S/D réduit la profondeur de jonction car sa diffusion est retardée dans le SiGe, en revanche l'incursion sous la grille des extensions S/D augmente et induit une forte dégradation SCE car la diffusion du bore est accélérée dans le Si contraint (cf. Figure 153).

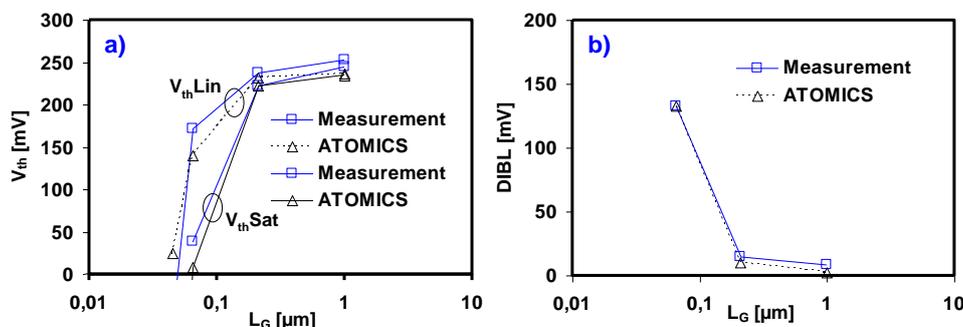


Figure 164: Tension de seuil en régime linéaire et saturé (a) et DIBL (b) en fonction de la longueur de grille de transistor sSi/SiGe PMOS. Comparaison entre la simulation obtenue avec les modèles ATOMICS et la mesure.

Les résultats de simulation présentés dans cette partie témoignent de la précision quantitative et de la fiabilité des modèles utilisés pour simuler les procédés de fabrication et décrire les phénomènes physiques observés avec précision dans les dispositifs sSi/SiGe 45nm. Maintenant que nous comprenons des phénomènes physiques reliant effets 2D et comportement électrique, il est possible d'étudier d'autres dispositifs à canal de Si contraint par un substrat SiGe et d'optimiser davantage le procédé de fabrication relatif à ces transistors.

#### V.4 Impact des modèles ATOMICS

A travers les transistors MOS à canal de Si contraint par un substrat virtuel de SiGe, nous allons comparer dans cette partie les simulations ATOMICS avec celles obtenues avec les calibrations avancées Y-2006.06 et 2009.06.

##### V.4.1 Transistor NMOS à canal de Si contraint sur SiGe 20%

Les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des dispositifs longs (Figure 165.a) et courts (Figure 165.b) montrent que l'ensemble des versions reproduit correctement le courant relatif au dispositif long en raison du dopage bore du canal qui n'est pas impacté par les modèles ATOMICS et est bien prédit par Sentaurus Process. Pour les dispositifs courts, seuls les résultats ATOMICS sont satisfaisants. En effet, les calibrations des outils Synopsys sous-estiment fortement l'effet de canal court induit par l'effet de la contrainte et de la teneur en Ge sur la distribution des dopants dans les régions S/D et extensions S/D.

Comme mentionné précédemment, le comportement électrique de ces dispositifs peut être expliqué par la diffusion accélérée de l'arsenic dans le Si Contraint et dans le SiGe combinée avec la diffusion retardée du bore dans le SiGe.

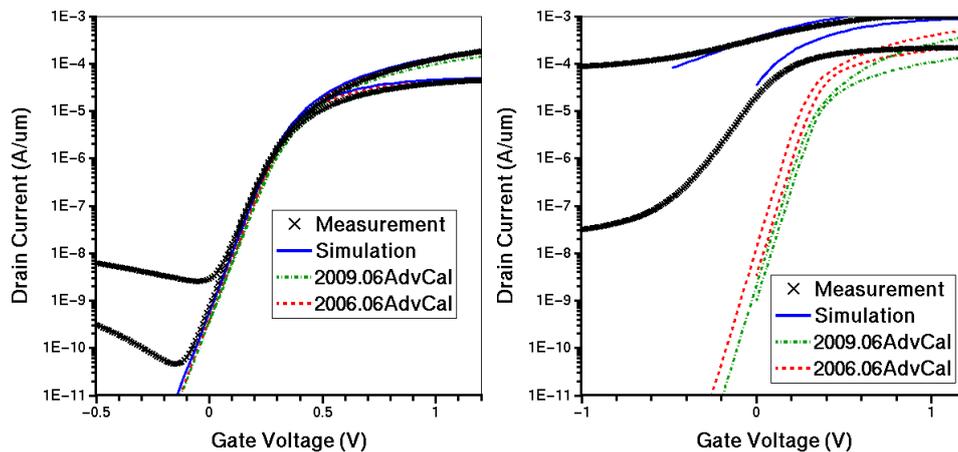


Figure 165: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible (0.1V) (cas a) et  $V_D$  fort (1.2 V) des transistors sSi/SiGe NMOS dont les longueurs de grilles sont  $1\mu\text{m}$  (a) et 45nm (b). Comparaison entre la simulation (lignes) et la mesure (symbole).

La caractéristique  $V_{th}(L_G)$  représentant la tension de seuil en fonction de la longueur de la grille est rapportée sur la Figure 166. Cet indicateur des effets de canaux courts montre clairement que seuls les modèles ATOMICS sont en bon accord avec la mesure.

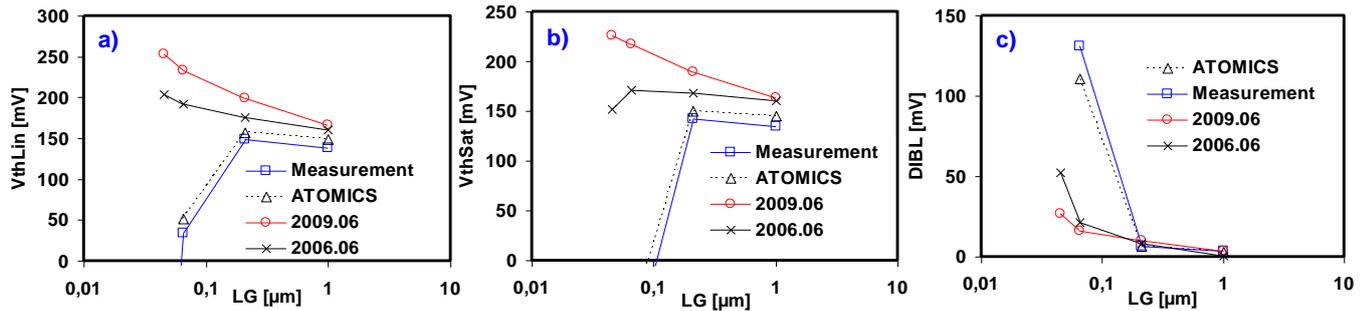


Figure 166: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et le DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor sSi/SiGe NMOS. Comparaison entre la simulation obtenue avec l'ensemble des versions et la mesure.

Les implantations extensions et S/D nécessitent une attention particulière lors de la simulation TCAD des dispositifs sSi/SiGe car la diffusion des dopants dans le SiGe et le Si contraint n'est pas équivalente à celle observée dans du Si relaxé (cf. Figure 152).

#### V.4.2 Transistor PMOS à canal de Si contraint sur SiGe 20%

Les Figure 167.a et Figure 167.b montrent respectivement les caractéristiques  $I_D(V_G)$  des transistors PMOS de longueur de grille  $1\mu\text{m}$  et  $45\text{nm}$  mesurées à  $0.1$  et  $1.2\text{V}$ . Comme pour le NMOS, toutes les versions prévoient à bien décrire les profils des dopants dans le canal du dispositif long.

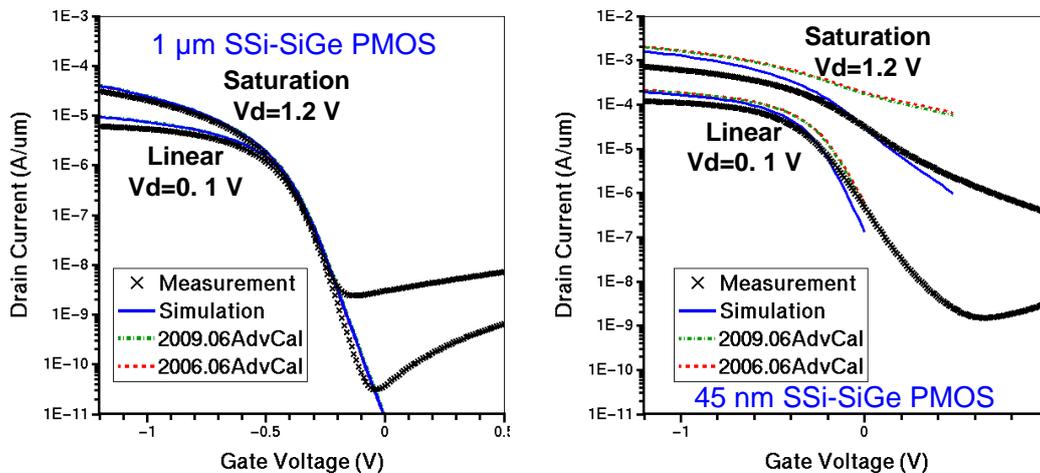


Figure 167: Caractéristiques courant de drain ( $I_D$ ) en fonction de la tension de grille ( $V_G$ ) à  $V_D$  faible ( $0.1\text{V}$ ) (cas a) et  $V_D$  fort ( $1.2\text{V}$ ) des transistors sSi/SiGe PMOS dont les longueurs de grilles sont  $1\mu\text{m}$  (a) et  $45\text{nm}$  (b). Comparaison entre la simulation (courbes) et la mesure (symbole). Pour les dispositifs courts, les modèles par défaut reproduisent correctement le courant à faible  $V_D$ , en revanche elles surestiment l'effet de canal court à  $V_D$  élevé.

Les indicateurs des effets de canaux courts présentés sur la Figure 168 montrent que seuls les modèles ATOMICS sont en bon accord avec la mesure.

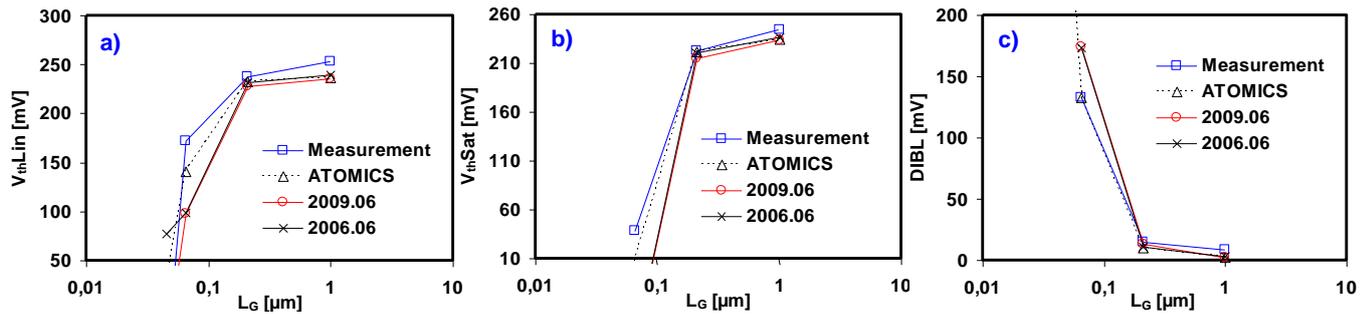


Figure 168: Tension de seuil en régime linéaire (a), saturé (b) et le DIBL (c) en fonction de la longueur de grille de transistor sSi/SiGe PMOS. Comparaison entre la simulation et la mesure.

En effet, les modèles ATOMICS bénéficient des modèles de BICs, As-V, l'impact du fluor sur la diffusion du bore et sa diffusion ralentie dans le SiGe. Il est intéressant de mentionner la forte augmentation des coefficients de diffusion de l'arsenic (Figure 151) dans le SiGe et le Si contraint induit une variation des profils de dopage et donc une modification des effets canaux courts. Par exemple, la diffusion de l'arsenic situé dans les poches vers le canal du PMOS est compensée par la diffusion retardée du bore dans le SiGe et le Si contraint jouant le rôle d'accélérateur de diffusion en surface pour les atomes de bore (cf. Figure 153).

## V.5 Conclusion

Nous avons présenté dans cette section les améliorations apportées par les nouveaux modèles ATOMICS notamment ceux développés pour les matériaux SiGe et Si contraint (cf. chapitre 6) à travers la simulation électrique de dispositif à canal de silicium contraint par un substrat virtuel de SiGe pour les nœuds technologiques CMOS 45nm et en deçà. Les transistors NMOS et PMOS ont été simulés avec trois ensembles de modèles et paramètres différents : ATOMICS, C-2009.06 et Y-2006.06. Les indicateurs des effets canaux courts  $V_{th}(L_G)$  et  $DIBL(L_G)$  montrent que le meilleur accord est obtenu avec les modèles ATOMICS. En effet, les propriétés matériaux du SiGe sont très différentes de celles du Si, nous avons donc modifié de manière importante le comportement des dopants et des défauts ponctuels (diffusion des dopants, évolution des défauts étendus). La transposition des paramètres d'implantation et de diffusion utilisés dans le Silicium demande une adaptation particulière pour le développement des dispositifs sSi/SiGe et la prise en compte de l'ensemble des modèles physiques dans les outils de simulations font de la TCAD un outil indispensable dans la réduction des coûts de développement de ces dispositifs.

L'impact en termes de temps de simulation est représenté par une augmentation d'environ un facteur 3 si l'on inclut les modèles ATOMICS. Ceci est aussi valable pour les simulations 1D. Ce résultat est justifié par le nombre élevé d'équations et de paramètres inclut dans l'ensemble des modèles physiques ATOMICS.

## VI CONCLUSION

Ce chapitre a été consacré à la simulation électrique de transistor MOS réalisé en technologie industrielle actuellement en développement à STMicroelectronics-Crolles : C65 SOI et SiGe 45nm. Nous avons appliqué dans ces simulations, le modèle général de diffusion présenté

dans cette thèse, incluant l'ensemble des contributions à l'évolution des défauts et à la diffusion des dopants en fortes concentrations valable pour les matériaux Si, SOI et SiGe.

Nous avons tenté de simuler les dispositifs, sur des structures identiques à celles mesurées. Nous nous sommes concentrés sur un seul des indicateurs celui des effets de canaux courts, car il est le plus dépendant de la distribution des dopants. Nous sommes arrivés au constat que, grâce à la prise en compte des phénomènes observés lors du procédé de fabrication dans les différents matériaux (Si, SOI, SiGe), les modèles physiques utilisés sont nécessaires pour décrire le comportement électriques des transistors.

Finalement, l'ensemble de ces modèles a été appliqué au cas du nœud technologique 32nm actuellement en développement à STMicroelectronics. Les résultats issus de nos simulations sont en bon accord avec ceux issus des mesures ce qui valide notre objectif principal.

## REFERENCES DU CHAPITRE VII

- 1 N. Duhayon and P. Eyben. "Assessing the performance of two-dimensional dopant profiling techniques", *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 22 (1), p. 385-393 (2004).
- 2 P. Eyben, T. Janssens and W. Vandervorst, "Scanning spreading resistance microscopy (SSRM) 2d carrier profiling for ultra-shallow junction characterization in deep-submicron technologies", *Mat. Sci. Eng. B*, p. 124-125 (2005).
- 3 TCAD Sentaurus Process, Version A-2007.12, Synopsys Inc., Mountain View, CA (2007).
- 4 N. Khalil, J. Faricelli, D. Bell, S. Selberherr, "The extraction of two-dimensional MOS transistor doping via inverse modeling", *IEEE Electron Dev. Lett.*, 16 :17 (1995).
- 5 I. J. Djomehri, and D. A. Antoniadis, "Inverse modeling of sub-100 nm MOSFETs using I-V and C-V", *IEEE Trans. Electron Dev.*, p. 568-575, (2002).
- 6 F. Payet, "Modélisation et intégration de transistors à canal de silicium contraint pour les nœuds technologiques CMOS 45nm et en deçà", thèse de doctorat, Université de Provence (2005).
- 7 C.-L. Liu, M. Orlowski, A. Thean, A. Barr, T. White, B.-Y. Nguyen, H. Rueda et X.-Y. Liu, "Theory and Simulation of Dopant Diffusion in SiGe", *Symp. D, MRS'03 Tech. Digest.*, (2003).
- 8 A. Pakfar, "Modélisation de la diffusion des dopants dans les alliages SiGe et SiGeC", thèse de doctorat, présenté à Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (2003).
- 9 A. Thean, A. Barr, T. White, Z.-H. Shi, B.-Y. Nguyen, C.-L. Liu, K. Beardmore, J. Z.-X. Jiang, P. Lerma, E. Duda, M. Sadaka, M. Orlowski, B. E. White, Jr. et J. Mogab, "Computer aided design of sub-100nm strained-Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> NMOSFET through integrated process and device simulations", *SISPAD'03 Tech. Digest.*, (2003).

# **Conclusion générale**



## **CONCLUSION GENERALE**

L'objectif principal de ces travaux de thèse était d'améliorer, dans le silicium, les modèles physiques nécessaires à simulation de la diffusion des dopants. En particulier, nous nous sommes intéressés à l'évolution des défauts étendus formés lors de la fabrication des jonctions Source/Drain par implantation ionique suivie d'un recuit d'activation des dopants et au rôle des amas dopant-défaut, présents en grande concentration dans ces jonctions fortement dopées, sur la diffusion des dopants. Ces modèles ont été ensuite étendus aux autres matériaux actuellement utilisés pour l'élaboration des futures générations de transistors, notamment le SOI (Silicium On Insulator) et les alliages SiGe. Pour cela, un travail fondamental sur ces phénomènes était nécessaire car l'évolution de ces défauts dans les nouveaux matériaux restait très peu étudiée jusqu'à ce jour.

Dans la première partie de ce manuscrit, nous avons présenté un état de l'art sur les jonctions ultra-minces, leur nécessité pour la miniaturisation des transistors MOS, leurs techniques de fabrication, mais aussi les différents problèmes associés à ces techniques et plus particulièrement la formation des défauts cristallins liés à l'implantation ionique des dopants. Après avoir brièvement décrit les différents types de défauts, nous avons exposé les différentes relations qui existent entre la diffusion accélérée du bore et les défauts ponctuels et étendus, ainsi que ce que l'on connaissait de leur influence sur les paramètres électriques et en particulier les courants de fuite.

Le deuxième chapitre de cette thèse portait sur l'aspect théorique de ces travaux : dans un premier temps nous avons présenté les structures et les énergies de formation des différents types de défauts créés après une implantation de dopant, ainsi que les mécanismes qui contrôlent leur évolution. En ce qui concerne les défauts contenant uniquement des atomes de Si auto-interstitiels, la force motrice de leur évolution est liée à la réduction de l'énergie de formation consécutive à l'augmentation en taille et au changement de structure cristalline. Ainsi on voit tour à tour la population de ces amas d'interstitiels évoluer de petits amas vers des défauts {311}, puis si le processus continue, vers des boucles de dislocations fautées et parfaites. A ce premier processus, il convient d'ajouter un second effet, qui est lié à la présence pour des concentrations relativement fortes de dopants, d'amas mixtes de dopants et d'interstitiels. Dans le cas du bore, nous avons alors fait l'état de l'art des informations relatives à ces agglomérats en exposant les résultats issus des divers travaux expérimentaux ainsi que ceux provenant des calculs théoriques. Ensuite, nous avons évoqué le cas des autres dopants et montré qu'ils pouvaient être traités d'une façon très similaire au bore. Dans la dernière partie de ce chapitre, les problèmes liés à l'interface SiO<sub>2</sub>/Si, notamment la ségrégation et l'exo-diffusion des dopants, ont été discutés.

Dans la troisième partie de cette thèse, nous avons présenté les modèles physiques que nous avons utilisés tout au long de ces travaux de recherche. Nous avons exposé l'ensemble des équations constituant les trois principaux modèles contenus dans le logiciel Sentaurus Process. Le premier modèle permet uniquement de simuler la diffusion du dopant dans le silicium. Il est basé sur le couplage des impuretés dopantes avec les défauts ponctuels présents dans le silicium. Il considère que la diffusion du dopant se fait uniquement via la

migration des paires dopant-lacune et dopant-interstitiel. Les deux autres modèles permettent respectivement de simuler la cinétique des agglomérats d'interstitiels et des amas mixtes de dopants et de défauts ponctuels.

Les étapes technologiques de fabrication des jonctions ultra-minces étant nombreuses et complexes, plusieurs de ces modèles (voire tous) doivent être donc appliqués simultanément pour bien simuler le procédé de fabrication. Par conséquent, il est primordial de valider la fiabilité de ces modèles tout en optimisant leur calibration en identifiant des jeux de paramètres valables pour une vaste gamme de conditions de fabrication d'intérêt technologique. Les résultats de ce travail ont été présentés dans le quatrième chapitre. Nous avons d'abord validé ces modèles de manière individuelle en simulant des expériences particulières relatives à l'évolution des défauts étendus et à la diffusion anormale du bore (TED). Ensuite, afin de vérifier leur validité en dehors des conditions expérimentales pour lesquelles ils ont été conçus, nous les avons appliqués à des cas réels de nouveaux procédés de fabrication des jonctions ultra-minces. Nous avons particulièrement étudié la diffusion des dopants lors d'un recuit spike et l'évolution des défauts de fin de parcours (EOR) au cours d'un recuit flash milliseconde. Enfin, la dernière partie de ce chapitre était consacrée au développement de modèles manquants dans la plateforme Synopsys pour simuler un des phénomènes qui ne sont pas encore pris en compte par les simulateurs de procédé. Nous avons étudié le piégeage du bore au niveau de la zone où l'on rencontre les défauts EOR. Nous avons d'abord montré, grâce à une étude expérimentale rigoureuse, que l'évolution du pic de piégeage du bore est contrôlée par l'évolution des défauts  $\{311\}$  et que la contribution des boucles de dislocation à la capture des atomes de bore est moins prononcée. Un modèle analytique basé sur de simples hypothèses physiques pour décrire le phénomène du piégeage du bore au niveau des défauts  $\{311\}$  et des boucles de dislocation a été élaboré en tenant compte de la géométrie de ces défauts.

Dans la cinquième partie de ce manuscrit, nous avons étendu le modèle relatif aux agglomérats d'interstitiels aux substrats SOI (silicium sur isolant) qui offrent des solutions pour réduire, entre autre, la profondeur des jonctions. Nous avons vu que l'utilisation de ce type de substrat permet de limiter la formation de défauts étendus grâce à la couche d'oxyde enterrée où les interstitiels de silicium vont se recombinaison. Nous avons ensuite mené une étude précise de la TED du bore dans le cas de substrats de Si et SOI. Après avoir confirmé expérimentalement que l'interface Si/BOX est un piège efficace pour les atomes interstitiels diffusant de la région des défauts, nous avons adapté le modèle existant de la TED dans le silicium pour inclure un centre de recombinaison additionnel pour les auto-interstitiels, en correspondance de l'interface Si/oxyde enterré. Les résultats de simulation donnent une limite supérieure de  $\sim 5$  nm pour la longueur de recombinaison à cette interface.

L'utilisation d'alliages silicium/germanium a été étudiée dans le sixième chapitre, de tels alliages permettant de profiter des propriétés intéressantes du germanium, en particulier des fortes mobilités des porteurs. Nous avons montré expérimentalement que l'augmentation du pourcentage de germanium dans les substrats SiGe permettait une accélération de la dissolution des défauts étendus. Nous avons ensuite étudié l'évolution thermique des défauts étendus dans ces alliages afin d'analyser les mécanismes physiques qui contrôlent cette évolution à la fois en fonction de la teneur en Ge et de la contrainte induite dans les couches

SiGe. Nous avons donc examiné, dans les alliages SiGe, les caractéristiques essentielles des défauts {311} et des boucles de dislocation qui résultent de l'étape d'implantation ionique. Nous avons montré que l'évolution de ces défauts étendus dans les alliages SiGe est contrôlée dans chaque cas (implantation amorphisante ou non), par les mêmes mécanismes que dans le silicium. Toutefois, leur formation et dissolution changent en fonction de la teneur en Ge et de la contrainte. Nous avons aussi mesuré l'évolution de la TED pour plusieurs conditions d'implantation et de recuit dans les alliages SiGe et nous avons montré que dans toutes les conditions expérimentales l'évolution de la TED et celle des défauts étendus sont liées. En se basant ensuite sur le modèle "ClusterModel", nous avons montré, en modifiant les valeurs des paramètres qui contrôlent la formation et la dissolution d'un défaut {311} et sa transformation en boucle de dislocation, en fonction de la teneur en Ge et du niveau de contrainte, que le modèle était capable de reproduire la majorité des mesures. Nous avons enfin examiné l'impact de ces modifications sur la diffusion des dopants.

Nous avons enfin consacré le septième et dernier chapitre à la simulation des effets de petites géométries tels que les SCE et le DIBL rencontrés dans les dispositifs CMOS relatifs au cas des technologies industrielles actuellement en développement à STMicroelectronics-Crolles : C65 SOI et SiGe 45. Nous avons pu vérifier par nos simulations que le modèle général de diffusion, incluant l'ensemble des contributions à l'évolution des défauts et à la diffusion des dopants en fortes concentrations, permettait de retrouver toutes les distributions réelles des dopants décrivant les effets SCE. Le très bon accord entre les résultats issus de notre simulateur de dispositif avec ceux issus des mesures, nous a donc permis de valider notre approche et notre modèle. Finalement, le modèle développé au cours de cette thèse a été intégré dans le simulateur de procédé Sentaurus Process de Synopsys. Cependant, de nombreux phénomènes physiques intervenant dans la diffusion restent encore à modéliser. Ainsi, l'impact que peut avoir la recristallisation épitaxiale des couches amorphes (SPE) sur la distribution et l'activation des dopants ou le rôle sans cesse croissant que jouent les défauts étendus sur les courants de fuite, constituent autant de problèmes à prendre en considération pour les futures améliorations des simulateurs de procédés.



# **Production scientifique**



PRODUCTION SCIENTIFIQUE

**Publications**

**E.M. Bazizi**, P.F. Fazzini, F. Cristiano, A. Pakfar, C. Tavernier, H. Kheyrandish, S. Paul, W. Lerch, *Modelling of the effect of the buried Si-SiO<sub>2</sub> interface on transient enhanced boron diffusion in Silicon-on-Insulator*, Accepted for publication, **Journal of Applied Physics**.

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P.F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, N. Zographos, C. Zechner, E. Scheid, *Transfer of physically-based models from process to device simulations: application to advanced SOI MOSFETs*, **Materials Science and Engineering B**, 518 (2010), pp. 2427-2430.

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P. F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, A. Burenkov and P. Pichler, *PD-SOI MOSFETs: interface effect on point defects and doping profiles*, **2009 IEEE International SOI Conference**, IEEE (2009).

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P. F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, A. Burenkov and P. Pichler, *Comparison between 65nm Bulk and PD-SOI MOSFETs: Si/BOX interface effect on point defects and doping profiles*, **Institute of Electrical and Electronics Engineers -IEEE-: ESSDERC / ESSCIRC 2009**, IEEE, 2009, pp. 292-295.

**E. M. Bazizi**, P. F. Fazzini, C. Zechner, A. Tsibizov, H. Kheyrandish, A. Pakfar, L. Ciampolini, C. Tavernier and F. Cristiano, *Modelling of Boron Trapping at End-Of-Range Defects in Pre-amorphized Ultra-Shallow Junctions*, **Materials Science and Engineering B**, 154–155 (2008) pp. 275–278.

**Conférences & Workshop**

**E.M. Bazizi**, P.F. Fazzini, F. Cristiano, A. Pakfar, C. Tavernier, N. Zographos, C. Zechner, A. Claverie, *Technology Computer Aided Design of 65nm SOI MOSFETs through Integrated Process and Device Simulations*, **International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2010) in Tokyo Japan**.

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P. F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, A. Burenkov and P. Pichler, *PD-SOI MOSFETs: interface effect on point defects and doping profiles*, **2009 IEEE International SOI Conference**, IEEE (2009).

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P. F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, A. Burenkov and P. Pichler, *Comparison between 65nm Bulk and PD-SOI MOSFETs: Si/BOX interface effect on point defects and doping profiles*, **Institute of Electrical and Electronics Engineers -IEEE-: ESSDERC / ESSCIRC 2009**, du 14 au 18 September 2009 à Athenes.

**E.M. Bazizi**, A. Pakfar, P.F. Fazzini, F. Cristiano, C. Tavernier, A. Claverie, N. Zographos, C. Zechner, E. Scheid, *Transfer of physically-based models from process to device simulations: application to advanced SOI MOSFETs*, **European Materials Research Society (EMRS)** – Du 08 au 12 Juin 2009 à STRASBOURG.

**E.M. Bazizi**, P.F. Fazzini, F. Cristiano, A. Pakfar, C. Tavernier, H. Kheyrandish, S. Paul, W. Lerch, *Evolution of defects and TED in SOI materials*, **EUROSOI 2008** – Du 19 au 21 Janvier 2009 à Gothenburg Suède.

**E. M. Bazizi**, P. F. Fazzini, C. Zechner, A. Tsibizov, H. Kheyrandish, A. Pakfar, L. Ciampolini, C. Tavernier and F. Cristiano, *Modelling of Boron Trapping at End-Of-Range Defects in Pre-amorphized Ultra-Shallow Junctions*, **European Materials Research Society (EMRS)** - Du 26 au 30 Mai 2008 à STRASBOURG.

**E. M. Bazizi**, F.Cristiano and A. Pakfar, *Etude physique et modélisation de la diffusion accélérée et transitoire des dopants dans les matériaux*, **Journées Nationales du Réseau Doctoral en Microélectronique, JNRDM**, du 18 au 20 Mai 2009 à LYON.

## **Contributions**

P. F. Fazzini, **M. Bazizi**, F. Panciera, M.Collet, J.Boucher, E.Bedel S. Paul, W. Lerch, A. Pakfar, J.M. Hartmann and F. Cristiano, *Extended defects evolution in ion implanted SiGe alloys and Germanium*, 18th Ion Implantation Technology International Conference (IIT 2010), Kyoto (Japon), 6-11 Juin 2010.

J. Delalleau, A. Pakfar, **E.M. Bazizi**, R. Simola, C. Tavernier, *Continuum simulation of Solid Phase epitaxial regrowth of Amorphized silicon including most advanced Physical interactions*, **Materials Science and Engineering B**.

Mathieu Gavelle, **El Mehdi Bazizi**, Emmanuel Scheid, Pier Francesco Fazzini, and Fuccio Cristiano, *Detailed investigation of Ge-Si interdiffusion in the full range of Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> (0 ≤ x ≤ 1) composition*, **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** 104, 113524 (2008).

Mathieu Gavelle, **El Mehdi Bazizi**, Emmanuel Scheid, Claude Armand, Pier Francesco Fazzini, Olivier Marcelot, Yves Campidelli, Aomar Halimaoui, and Fuccio Cristiano, *Study of Silicon-Germanium interdiffusion from pure Germanium deposited layers. Application to the formation of gradual SiGe ultra-shallow layers*, **Materials Science and Engineering B** B154-155 (2008) 110.

F.CRISTIANO, **E.M.BAZIZI**, P.FFAZZINI, S.BONINELLI, R.DUFFY, S.PAUL, W.LERCH, *Extended defects evolution in pre-amorphised silicon after millisecond flash anneals*, *Mat. Sci. Forum* 573-574 (2008) 269.

F.CRISTIANO, **E.M.BAZIZI**, P.F.FAZZINI, S.PAUL, W.LERCH, S.BONINELLI, R.DUFFY, A.PAKFAR, H.BOURDON, F.MILESI, *Defect evolution and C+/F+ co-implantation in millisecond flash annealed ultra-shallow junctions*, 8th International Workshop on Junction Technology (IWJT 2008), Shanghai (Chine), 15-16 Mai 2008.

Mathieu Gavelle et **El Mehdi Bazizi**, *Etude de l'interdiffusion Ge-Si à partir de sources solides Germanium sur Silicium pour la formation de couches graduelles Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>*, **Journées Nationales du Réseau Doctoral en Microélectronique, JNRDM**, du 14 au 16 Mai 2008 à BORDEAUX.

**AUTEUR :** El Mehdi BAZIZI

**TITRE :** Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, SOI et SiGe pour les MOS avancés.

**DIRECTEUR DE THESE :** Fuccio CRISTIANO

Dans les transistors MOS avancés, la réalisation de jonctions ultraminces (<15 nm) abruptes et fortement dopées par implantation ionique de dopant reste la voie privilégiée pour l'élaboration des extensions source/drain. Cependant, au cours du recuit d'activation, cette méthode s'accompagne de la formation de défauts étendus de type interstitiel (petits amas, défauts {311} et boucles de dislocation) et d'agglomérats défauts-dopants (BICs dans le cas du Bore, de l'anglais Boron Interstitial Clusters) qui sont à l'origine de problèmes majeurs tels que la diffusion accélérée et transitoire (TED) des dopants et la dégradation des propriétés électriques des jonctions. L'objectif de cette thèse a été de modéliser de façon globale ces différents phénomènes physiques afin de prédire la distribution des dopants dans les extensions source/drain. Pour ce faire, nous avons tout d'abord simulé la croissance compétitive de type maturation d'Ostwald que se livrent ces défauts au cours du recuit et nous l'avons couplée à la diffusion des dopants, notamment dans les cas d'intérêt technologique, lorsque l'étape d'implantations à forte dose cause la formation d'agglomérats défauts-dopants engendrant une immobilisation et une inactivation partielle du dopant dans le silicium. Nous avons ensuite étendu les modèles développés dans le silicium aux cas de nouveaux matériaux tels que le SOI (Silicon-On-Insulator) ou le SiGe (alliage silicium/germanium), matériaux utilisés pour les dernières générations de transistors. Enfin, l'ensemble des modèles élaborés et calibrés pour la fabrication des jonctions ultra-fines a été validé en simulant électriquement les technologies industrielles actuellement en développement à STMicroelectronics-Crolles : C65 SOI et SiGe 45, avec une attention particulière aux effets de petites géométries tels que le SCE (Short Channel Effects) et le DIBL (Drain-Induced Barrier Lowering). Le modèle physique général de diffusion, incluant l'ensemble des contributions dues à l'évolution des défauts et à la diffusion des dopants à forte concentration a été implémenté dans un simulateur commercial.

#### MOTS-CLES

Simulation prédictive, Jonctions ultra-fines, Implantation ionique, Diffusion, Dopage, Défaut ponctuel, BICs, EOR, Bore, SIMS, Silicium contraint, SOI, SiGe