

Modélisation et simulation de la diffusion de l'antimoine dans le germanium

Abdelkader SOUIGAT et Kamal Eddine AIADI*

Univ Ouargla, Fac. des Mathématiques et des Sciences de la Matière, Lab. Développement des Energies Nouvelles et Renouvelables dans les Zones Arides et Sahariennes, Ouargla 30 000, Algeria

*Email : aiadik10@gmail.com

ملخص: الجيرمانيوم مرشح جيد لتعويض السيليسيوم في المكونات الميكروإلكترونية المتقدمة لكون حركية حاملات الشحنة مرتفعة لديه. يهدف هذا العمل إلى معرفة ظاهرة انتشار المطعمات في الجيرمانيوم والتي تعد ضرورية لصناعة دارات عالية الأداء. فبعد نمذجة الانتشار وفق الآلية الفجوية بالأخذ بعين الاعتبار ارتباط معامل الانتشار الفعال بمربع ومكعب كثافة الإلكترونات الحرة، ثم الحل العددي للمعادلة الجزئية لقانون فيك الثاني، تمكنا من محاكاة منحنيات انتشار الأنتيموان (الإثمد) التجريبية في الجيرمانيوم عند درجة حرارة 700°C مما يبين مساهمة الفجوات الثنائية والثلاثية المشحونة سلبا في هذا الانتشار حيث النسبة بين المساهمتين $\beta = 11.5$.

كلمات مفتاحية: نمذجة، محاكاة، آلية فجوية، الأثمد، كثافة الإلكترونات الحرة

Résumé : Le germanium est un bon candidat pour remplacer le silicium dans les dispositifs microélectroniques avancés car la mobilité de ses porteurs de charge est plus élevée. Le but de ce travail est de mieux connaître le phénomène de diffusion des dopants dans le germanium qui est essentielle pour la fabrication des circuits performants, en modélisant et simulant la diffusion de l'antimoine dans le germanium. Nous avons modélisé la diffusion par le mécanisme lacunaire en prenant en compte la dépendance du coefficient de diffusion effectif de l'antimoine avec le carré et le cube de la concentration d'électrons libres. Par la résolution numérique de l'équation aux dérivées partielles de la deuxième loi de Fick par la méthode des différences finies, nous avons pu simuler les profils expérimentaux de la diffusion de l'antimoine dans le germanium à la température 700°C. Ce qui montre la contribution des lacunes doublement et triplement chargés négativement dans cette diffusion, où le rapport de contributions dans la diffusion via les deux états de la lacune est $\beta = 11.5$.

Mots clés : modélisation, simulation, mécanisme lacunaire, l'antimoine, concentration d'électrons libres.

Abstract: Germanium is a good candidate to replace silicon in advanced microelectronic devices, due to its high charge carriers *mobility*. The purpose of this work is to know better the phenomenon of dopant diffusion in germanium by modeling and simulating the antimony diffusion in germanium, which is essential to perform efficient circuits. After the modelling of the diffusion using the vacancy mechanism, taking account of the antimony effective diffusion coefficient dependence of the square and the cube of the free electrons concentration and the numerical solution of partial differential equation of the second Fick law by finite differences method, we were able to simulate the Sb experimental profiles at temperature 700°C. Which shows the contribution of doubly negatively charged (2-) and triply negatively charged (3-) vacancies in this diffusion, where the contributions ratio is $\beta=11.5$.

Keywords: modelling, simulation, vacancy mechanism, antimony, concentration of free electrons

1. Introduction

La technologie du silicium aujourd'hui fait face à des limites physiques. Le germanium est considéré comme un matériau de voie prometteuse pour remplacer le silicium conventionnel dans la nouvelle génération à haut rendement des semi-conducteurs complémentaires à l'oxyde de métal (CMOS) à cause de la mobilité plus élevée de ses porteurs [1 - 5]. La connaissance des paramètres de la diffusion des dopants dans le matériau est primordiale pour la fabrication des dispositifs microélectroniques performants. Cette diffusion n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels structuraux [6]. Dans cet article, nous avons simulé les profils de la diffusion de l'antimoine mesurés au moyen de la Secondary Ions Mass Spectroscopy (SIMS) [6], en tenant compte de la contribution des lacunes doublement V^{2-} et triplement V^{3-} chargées négativement dans cette diffusion.

2. Modèle utilisé

Il est clairement admis dans la littérature que les dopants de type N se diffusent dans le germanium par le mécanisme lacunaire [6 - 11]. Si on prend en compte l'interaction entre l'antimoine et les lacunes doublement et triplement chargés négativement, le coefficient de diffusion effectif dépendra du carré et du cube de la concentration des électrons libres selon la relation suivante :

$$D^{eff} = h \cdot \left(\frac{(n/n_i)^3 + \beta (n/n_i)^2}{1 + \beta} \right) D^i \tag{1}$$

β et D^i représentent, respectivement, le rapport de contributions et le coefficient de la diffusion intrinsèque. n, n_i et h sont, respectivement, la concentration des électrons libre, la densité intrinsèque des porteurs et le facteur d'accélération.

3. Simulation de la diffusion

La deuxième loi de Fick permet de décrire l'évolution temporelle de la concentration en espèce diffusante en un point donné :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial x} \left(D^{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \tag{2}$$

L'équation (2) a été résolue numériquement, en utilisant les approximations aux différences finies. On discrétise l'espace en N tranches (cas unidimensionnel) d'épaisseur Δx et on effectue la diffusion sur de petits intervalles de temps Δt [6].

La relation exprimant les concentrations au temps $i\Delta t$ en fonction des concentrations au temps $(i-1)\Delta t$ est donnée par l'expression suivante :

$$c(l, i - 1) = -\delta(l, i) \cdot c(l - 1, i) + [1 + \delta(l, i) + \delta(l + 1, i)] \cdot c(l, i) - \delta(l + 1, i) c(l + 1, i) \tag{3}$$

Où: $\delta(l, i) = \delta_0 \times D^{eff}(l, i)$; $\delta_0 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, i l'indice de temps et l l'indice de l'espace

Pour les conditions aux limites, le flux entre une couche extérieure et la première couche, est nul :

$$J(1, i) = 0 \tag{4}$$

Dans la couche N

$$c(N, i) = c(N + 1, i) \tag{5}$$

4. Caractéristiques de notre programme simulant la diffusion

Pour simuler les profils expérimentaux de l'antimoine, nous avons accompli un programme en langage FORTRAN. Le dopant est modélisé par une concentration d'impuretés (C_0), supposée constante, à la surface de l'échantillon pendant toute la durée de la diffusion qui va alors se diffuser dans le germanium suivant les équations (1) et (2). Le coefficient de diffusion effectif doit être recalculé pour chaque pas de temps.

Afin d'ajuster les profils simulés et les profils expérimentaux, nous avons choisi les valeurs de la densité de porteurs intrinsèques et le coefficient de diffusion intrinsèque dans le domaine de la référence (6) et nous avons pris, $\beta = 11.5$

Tableau1 : Les paramètres utilisés pour ces simulations

$C_0 (cm^{-3})$	t(s)	T (°C)	β	$n_i (cm^{-3})$	$D^i (cm^2 \cdot s^{-1})$
6.2×10^{18}	10800	700	11.5	4.1×10^{18}	9.9×10^{-13}
5.9×10^{18}	5400	700	11.5	4.1×10^{18}	9.9×10^{-13}

5. Résultats et discussion

Il est très clair, d'après la figure 1, la concordance entre les simulations (lignes) et les profils expérimentaux, ce qui confirme la contribution de V^{3-} avec V^{2-} dans la diffusion de l'antimoine dans le germanium.

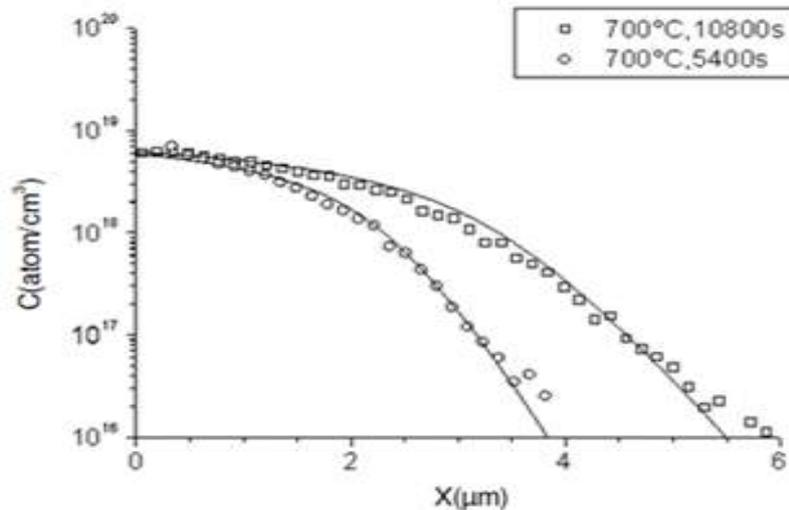


Figure 1 : Profils expérimentaux (réalisés par SIMS) [6] et simulés (lignes) pour la diffusion de l'antimoine dans le germanium.

6. Conclusion

La diffusion de l'antimoine dans le germanium s'effectue par le mécanisme lacunaire via les lacunes doublement et triplement chargées négativement, où le rapport de contributions dans la diffusion de l'antimoine via les deux états de la lacune est $\beta = 11.5$ à la température 700°C.

Référence bibliographique:

- [1] Mirabella S., Impellizzeri G., Piro A. M., Bruno E. and Grimaldi M. G.; Appl. Phys. **92**, 251909 (2008).
- [2] Shang H., Okorn-Schmidt H., Ott J., Kozłowski P., Steen S., Jones E. C., Wong H. S. and Hanesch W.; IEEE Electron Device Lett. **24**, 242 (2003).
- [3] Kim H., Chui C. O., Saraswat K. and McIntyre P. C.; Appl. Phys. Lett. **83**, 2647 (2003).
- [4] Xiaochen Sun, Jifeng Liu, Lionel C. Kimerling and Jurgen Michel; App. Phys. Lett. **95**, 011911 (2009).
- [5] Claeys C. and Simoen E.; Germanium Based Technologies: From Materials to Devices; edited by Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [6] Souigat A. et Aiadi K. E. ; Modélisation et simulation de la diffusion de l'arsenic dans le germanium ; Annales des Sciences et Technologie ; Vol. **4** N° 2, 63-68 (2012).
- [7] Sergej Brotzmann and Hartmut Bracht; Intrinsic and extrinsic diffusion of phosphorus, arsenic, and antimony in germanium; Appl. Phys. **103**, 033508 (2008).
- [8] Masahiro Koike, Yoshiki Kamata, Tsunehiro Ino and Daisuke Hagishima; Diffusion and activation of n-type dopants in germanium; J. Appl. Phys. **104**, 023523 (2008).
- [9] Chi On Chui, Kailash Gopalakrishnan, Peter B. Griffin, James D. Plummer and Krishna C. Saraswat; Activation and diffusion studies of ion-implanted p and n dopants in germanium; Appl. Phys. Lett. **83** (16), 3275 (2003).
- [10] Canneaux Th., Mathiot D., Ponpon J. P.; Modeling of phosphorus diffusion in Ge accounting for a cubic dependence of the diffusivity with the electron concentration; Elsevier **518**-09, pp 2394-2397 (2010).
- [11] Bracht H.; Phys. Rev. B **75**, 035210 (2007).