

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

Abdelkader SOUIGAT¹ et Kamal Eddine AIADI^{2,*}

¹Département de Sciences de la Matière, Faculté des Sciences et de la Technologie et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah Ouargla, Ouargla 30000 (Algérie)

²Laboratoire LENREZA, Département de Sciences de la Matière, Faculté des Sciences et de la Technologie et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah Ouargla, Ouargla 30000 (Algérie)

* aiadik10@gmail.com

ملخص: يهدف هذا العمل إلى نمذجة ومحاكاة انتشار الأرسونيك في الجيرمانيوم بالثنائيات المشكلة بالفجوات والشوائب. كانت نتائجنا، بعد الحل العددي للمعادلة التفاضلية الجزئية لقانون فيك الثاني بأسلوب الفروق المتناهية، قريبة جدا من النتائج التجريبية وبينت أن الانتشار في هذه الحالة يتحقق أساسا عبر الفجوات ثنائية الشحنة السالبة. كلمات مفتاحية: نمذجة، محاكاة، التطعيم، الانتشار بالثنائيات، العيوب النقطية، البيئات الذاتية

Résumé : Le but de ce travail est de modéliser et simuler la diffusion de l'arsenic dans le germanium, par les paires formées par les lacunes et le dopant. Nos résultats, de la solution numérique de l'équation aux dérivées partielles de la deuxième loi de Fick par la méthode des différences finies, sont très proches des résultats expérimentaux et ils ont montré que la diffusion dans ce cas est obtenue principalement par les lacunes qui possèdent une charge négative double.

Mots clés: modélisation ; simulation ; dopage ; diffusion par les paires ; défaut ponctuel; auto-interstitiels

1. Introduction

Le dopage des semi-conducteurs est un élément clef pour la fabrication des composants électroniques. En effet, un semi-conducteur pur (intrinsèque) est quasiment un isolant à la température ambiante, avec une bande de valence presque entièrement pleine, et une bande de conduction presque entièrement vide. A titre d'exemple, la densité intrinsèque de porteurs libres dans le silicium est seulement de l'ordre de 10^{10} cm^{-3} à 300K. Les propriétés électroniques intéressantes sont donc liées à la possibilité de "doper" le matériau par l'introduction d'impuretés adéquates (les dopants) permettant d'introduire des porteurs libres.

La diffusion thermique est une méthode qui nous permet d'introduire les dopants dans les semi-conducteurs. Cette diffusion n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels structuraux. Ces défauts sont soit des lacunes (sites vacants dans le réseau), soit des auto-interstitiels (atomes en surnombre dans le réseau).

Nous nous intéressons ici au germanium et plus particulièrement à la diffusion de l'arsenic dans celui-ci.

2. Coefficient de la diffusion intrinsèque :

Les variations du coefficient de la diffusion intrinsèque de l'arsenic avec la température peuvent en général être aisément décrites par une loi d'Arrhenius [1]

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \quad (1)$$

T est la température absolue (en Kelvin)

k est la constante de Boltzmann.

Q s'appelle l'énergie d'activation du dopant, D_0 un facteur d'ajustement de la diffusivité.

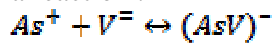
Tableau 1 : différentes mesures du coefficient de diffusion de l'arsenic dans le germanium

D_0 (cm^2/s)	Q (eV)	référence
0.7-11.3	2.25-2.5	[1]
5.8	2.42	[9]
32	2.71	[8]

Nous prendrons pour la simulation $Q = 2.4eV$ Et $D_0 = 1.6(cm^2/s)$ [2]

3. Modèle utilisé

Le mécanisme, par lequel diffuse l'arsenic dans le germanium, est aujourd'hui bien compris. En raison des fortes énergies d'interactions entre les lacunes doublement chargées négativement $V^{=}$ dans le germanium et les dopants en site substitutionnel, la diffusion de l'arsenic s'effectue principalement par l'intermédiaire de la migration de la paire $(AsV)^{-}$ [3] [4] [5], suivant la réaction :



As^+ l'arsenic en site substitutionnel

$$C_{(AsV)^{-}} = k(T) \times C_{As^+} C_{V^{=}} \tag{2}$$

où: $C_{(AsV)^{-}}$, C_{As^+} , $C_{V^{=}}$ sont successivement les concentrations de la paire $(AsV)^{-}$ et de l'arsenic et de la lacune doublement chargée négativement et $k(T)$ est la constante de loi d'action de masse de la réaction de formation du paire $(AsV)^{-}$.

Le flux $J_{(AsV)^{-}}$ du paire $(AsV)^{-}$ est donné par l'équation suivant [6] :

$$J_{(AsV)^{-}} = -d_{(AsV)^{-}} \cdot \frac{\partial C_{(AsV)^{-}}}{\partial x} + Z_{(AsV)^{-}} \cdot d_{(AsV)^{-}} \cdot C_{(AsV)^{-}} \cdot \frac{q}{kT} E \tag{3}$$

$d_{(AsV)^{-}}$ représente la diffusivité de la paire $(AsV)^{-}$, E le champ électrique induit par le gradient du dopant et q la charge élémentaire, $Z_{(AsV)^{-}}$ la charge de la paire $(AsV)^{-}$.

On a la densité globale de charge est nulle

$$C_{As^+} + p - n - 0 \tag{4}$$

Les populations des électrons et des trous sont à l'équilibre thermodynamique à la température considérée:

$$p \cdot n = n_i^2 \tag{5}$$

où: n , p sont successivement les concentrations des électrons, trous, n_i est la densité intrinsèque des porteurs qui est reliée avec la bande interdite E_g par la relation suivante [8] [7].

$$n_i = \sqrt{N_c \cdot N_v} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2k \cdot T}\right) \tag{6}$$

Pour le germanium $E_g = 0.66(eV)$ [10]

N_c et N_v les densités effectives d'états dans les bandes de conduction et de valence.

Il ya un autre formule qui permet de calculer la densité intrinsèque des porteurs [4]

$$n_i^2 (cm^{-6}) = 3,10 \cdot 10^{32} \cdot T^3 \cdot \exp\left(-\frac{0.785}{K \cdot T}\right) \tag{7}$$

La concentration $C_{V^{=}}$ est reliée avec la concentration intrinsèque $C_{V^{=}}^i$ par la relation suivant :

$$C_{V^{=}} = - C_{V^{=}}^i \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \tag{8}$$

Le flux de l'arsenic est décrit dans ce cas par l'expression suivante:

$$J_{As^+} = J_{(AsV)^{-}} \tag{9}$$

D_V^- représente le coefficient de diffusion via la lacune doublement chargée négativement est reliée avec la diffusivité de la pair $d_{(AsV)^-}$ par la relation suivante :

$$D_V^- = d_{(AsV)^-} \cdot \frac{C_{(AsV)^-}^i}{C_{As^+}} \quad (10)$$

à partir des équations (2), (3), (4), (5), (8), (9) et (10) le coefficient de la diffusion effectif est décrit par l'expression suivante :

$$D_{As}^{eff} = h D_V^- \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \quad (11)$$

h est le facteur d'accélération :

$$h = 1 + \frac{C_{As^+}}{2n_i} \left[\left(\frac{C_{As^+}}{2n_i}\right)^2 + 1 \right]^{-1/2} \quad (12)$$

Dans les conditions intrinsèques ($n = n_i$ et $C_{As^+} \ll n_i$) on peut écrire :

$$D = D_V^- \quad (13)$$

D représente le coefficient de la diffusion intrinsèque de l'arsenic.

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{As}^{eff} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (14)$$

En général la résolution de cette équation n'est pas possible analytiquement, ce qui implique la nécessité d'avoir recours aux résolutions numériques par ordinateur.

4. Simulation de la diffusion :

On a trouvé les profils théoriques de redistribution de l'arsenic, après le traitement thermique, en solvant numériquement l'équation aux dérivées partielles (14) par la méthode des différences finies.

On discrétise l'espace en k tranches (cas unidimensionnel) d'épaisseur Δx et on effectue la diffusion sur de petits intervalles de temps Δt .

La première loi de Fick exprime le flux des dopants qui passent d'une tranche à une autre :

$$J = -D_{As}^{eff} \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \quad (15)$$

en tenant compte de la discrétisation, ce flux devient :

$$J(i,j) = -D_{As}^{eff}(i,j) \times \frac{[c(i,j) - c(i-1,j)]}{\Delta x} \quad (16)$$

$J(i,j)$ représente le flux passant de la couche $i-1$ à la couche i pendant l'intervalle de temps compris entre l'instant $(j-1)\Delta t$ et $j\Delta t$.

La deuxième Loi de Fick peut se traduire, après la discrétisation, de la manière suivante :

$$\frac{[c(i,j) - c(i,j-1)]}{\Delta t} = \frac{[J(i,j) - J(i+1,j)]}{\Delta x} \quad (17)$$

n remplace le flux dans la deuxième loi par l'expression du flux de la première loi pour arriver à la relation exprimant les concentrations au temps $j\Delta t$ en fonction des concentrations au temps $(j-1)\Delta t$:

$$c(i,j-1) = -A(i,j) \cdot c(i-1,j) + [1 + A(i,j) + A(i+1,j)] \cdot c(i,j) - A(i+1,j) \cdot c(i+1,j) \quad (18)$$

Où : $A_0 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ et $A(i,j) = A_0 \times D_{As}^{eff}(i,j)$

4.1. Conditions aux limites :

On considère que le flux entre la couche extérieure (couche zéro) et la première couche (couche une), est nul. Autrement dit :

$$J(1, j) = 0 \tag{19}$$

Dans la couche k la concentration est négligeable, donc on peut considérer :

$$c(k, j) = c(k + 1, j) \tag{20}$$

et à partir des équations 18, 19 et 20 le système d'équations prend la forme matricielle suivante :
 $A = T.S$

Avec la matrice trigonale T qui s'exprime sous la forme :

$$\begin{pmatrix} 1 + A(2, j) & -A(2, j) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -A(2, j) & 1 + A(2, j) + A(3, j) & -A(3, j) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A(i, j) & 1 + A(i, j) + A(i + 1, j) & -A(i + 1, j) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Et les matrices (ou vecteurs) A et S :

$$A = \begin{pmatrix} c(1, j - 1) \\ c(2, j - 1) \\ \vdots \\ c(i, j - 1) \\ \vdots \\ c(k, j - 1) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S = \begin{pmatrix} c(1, j) \\ c(2, j) \\ \vdots \\ c(i, j) \\ \vdots \\ c(k, j) \end{pmatrix}$$

4.2. Données du programme de simulation de la diffusion :

Le dopant est modélisé par une concentration d'impuretés (C_0), à la surface de l'échantillon, supposée constante pendant toute la durée de la diffusion.

Tableau 2 : Paramètres utilisés pour la simulation

Echantillon	C_0 (atom/cm ³)	D_V^- (cm.s ⁻¹)
820°C	1.1×10^{17}	1.38×10^{-11}
868°C	8.9×10^{17}	4.04×10^{-11}
820°C	5.3×10^{19}	1.38×10^{-11}

5. Résultats et discussion :

On notera, d'après les figures 1 et 2, la bonne convergence entre les profils expérimentaux et les profils de nos simulations. La légère déviation des résultats par rapport aux points expérimentaux provient essentiellement des paramètres relatifs à la lacune doublement chargées négativement.

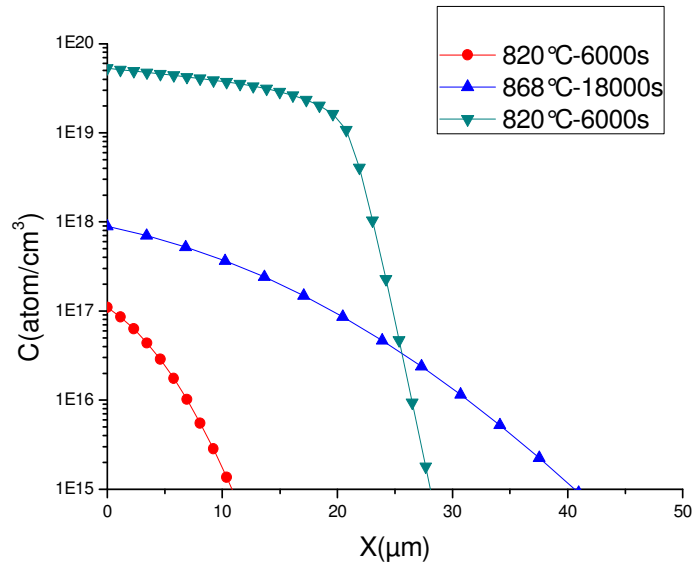


Figure 1 : les profils de concentration d'arsenic a partir de nos simulations

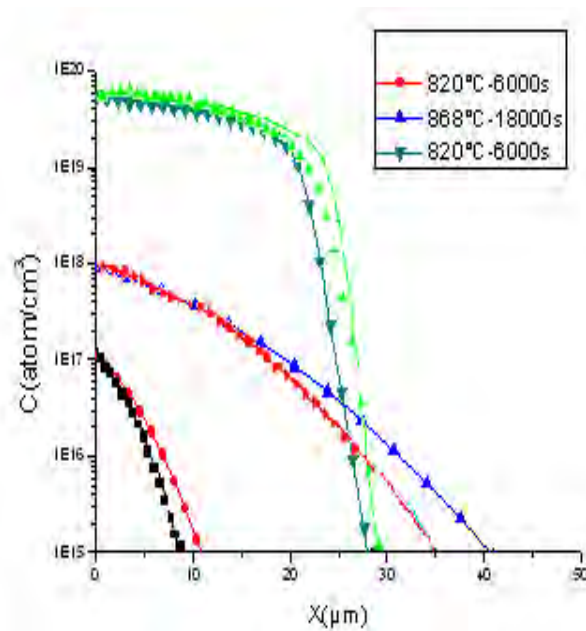


Figure 2 : Comparaison entre les profils expérimentaux de concentration d'arsenic provenant de [03] et nos simulations.

6. Conclusion :

La diffusion de l'arsenic s'effectue principalement via les lacunes doublement chargées négativement $V^{=}$, cette diffusion est réalisée par la migration de la pair $As^{+}V^{=}$.

Les paramètres concernant le coefficient de la diffusion via la lacune doublement chargées négativement $D_V^{=}$ que nous avons utilisés (l'énergie d'activation $E = 2.4eV$ et $D_0 = 1.6(cm^2/s)$) réalisent une bonne convergence entre les profils expérimentaux et les profils de nos simulations.

Références bibliographiques :

- [1] Vuvan Hung ; «Boron and Phosphorus Diffusion in Silicon:Interstitial, Vacancy and Combination Mechanisms» ; Conf. Theor. Phys. **35**, pp. 73-79 (2010).
- [2] B. Boltaks ; « Diffusion et Défauts Ponctuels Dans Les Semi-conducteurs » ; Pages (119,181), Editions Mir, Moscou, (1977).
- [3] Sergej Brotzmann et Hartmut Bracht ; « Intrinsic and extrinsic diffusion of phosphorus, arsenic, and antimony in germanium» ; Appl. Phys. **103**, 033508 (2008).
- [4] H. Bracht et S. Brotzmann ; « Atomic transport in germanium and the mechanism of arsenicdiffusion » ; Materials Science in Semiconductor Processing **9**, 471 (2006).
- [5] Masahiro Koike, Yoshiki Kamata, Tsunehiro Ino et Daisuke Hagishima ; «Diffusion and activation of n-type dopants » in germanium ; J. Appl. Phys. **104**, 023523 (2008).
- [6] J. R. King et C. P. Please ; «Diffusion of Dopant in Crystalline Silicon: An Asymptotic Analysis » ; J. Appl. Math. **37**, 185-197 (1986).
- [7] N. Moriya, L. C. Feldman, H. S. Luftman, C. A. King, J. Bevk et B. Freer ; «Boron Diffusion in Strained $Si_{1-x}Ge_x$ Epitaxial layers »; Phys. Review Lett. **71** (6), 883 (1993).
- [8] Chi On Chui, Kailash Gopalakrishnan, Peter B. Griffin, James D. Plummer et Krishna C. Saraswat; «activation and diffusion studies of ion-implanted p and n dopants in germanium »; Appl. Phys. Lett. **83** (16), 3275 (2003).
- [9] P. Laitinen, I. Riihimäki, J. Räisänen et la collaboration ISOLDE ; « Arsenic diffusion in relaxed $Si_{1-x}Ge_x$ » ; Physical Review B **68**, 155209 (2003).
- [10] PEJ Flewitt et R K WILD; « Physical Methods for Materials Characterisation »; Second Edition, Page 19, IOP (2003).