

## A MONTÉ CARLO MODEL FOR SIMULATING THE NITROGEN DIFFUSION EFFECT INTO B-LPCVD-NIDOS POLYCRYSTALLINE THIN FILMS.

S. ALLAG, S. MERABET, M. BOUKEZZATA

Département d'Electronique, Faculté de Science de l'ingénieur,  
Université Mentouri -Constantine, Algérie.

Reçu le 02/05/2008 – Accepté le 28/06/2012

### Résumé

L'objectif principal de notre travail actuel, est d'étudier l'influence de différents traitements de la surface qui permet d'améliorer les propriétés des matériaux par la technique de l'implantation d'ions (diffusion-implantation), sur la distribution des particules dans un semi-conducteur de la tendance de silicium polycristallin de notre étude, largement utilisé en micro-électronique. L'intérêt de cette étude est liée à des exigences incessantes dans l'industrie pour de plus en plus réduits, matériels performants et avec un prix de revient plus faible que possible.

On a donc, fait une nitruration en phase gazeuse pendant la phase de dépôt LPCVD de silicium polycristallin, puis une implantation ionique avec des ions de bore. Les résultats obtenus, à partir d'une simulation basée sur la méthode de Monte Carlo, même si elles sont réalisées avec des quantités beaucoup plus faibles que les montants réellement introduites, étant donné la limitation de la machine utilisée, satisfait les prévisions établies au début et à nous encourager à poursuivre cette étude surtout du point de vue de l'utilisation de ce matériau, en particulier dans des domaines différents.

**Mots clés :** Monte Carlo simulation, LPCVD, Boron Implantation, Polycrystalline silicon.

### Abstract

The principal objective of our current work, is to study the influence of different treatment from surface which makes it possible to improve the properties of materials by technique of beam of ions (diffusion – implantation), on the distribution of the particles in a semiconductor the prone polycrystalline Silicon of our study, largely used in micro-electronics. The interest of this study is related to the ceaseless requirements in industry for increasingly reduced, powerful materials and with the weakest possible cost price.

We thus have, makes a nitriding in gas phase during the phase of deposit LPCVD of polycrystalline Silicon, then one made an ionic implantation with the Bore ions. The results obtained, starting from a simulation based on the Monte Carlo method, although they are carried out with amounts much lower than the really introduced amounts, being given the limitation of the machine used, satisfied the predictions established at the beginning and encourage us to continue this study from the point of view of the use of this material in particular in varied fields.

**Keywords :** monte carlo simulation, LPCVD, Boron Implantation, Polycrystalline silicon.

### ملخص

الهدف الرئيسي لعمليتنا الحالي، هو دراسة تأثير مختلف المعالجات السطحية مما يجعل إمكانية تحسين خواص المواد بواسطة تقنية إدخال الأيونات (انتشار-زرع)، على توزيع الجسيمات داخل أشباه الموصلات كالسيليكون متعدد البلورات من دراستنا، وتستخدم إلى حد كبير في الإلكترونيات الدقيقة. ويرتبط بمصلحة هذه الدراسة للمتطلبات الملحة في صناعة المواد، وانخفاض متزايد و مواد قوية مع سعر التكلفة ضعيف قدر الإمكان. وبذلك نكون قد، قمنا بعملية نتردة في حالة الطور الغازي خلال مرحلة إيداع LPCVD من السيليكون متعدد البلورات، ثم قدمت غرس الأيونية مع أيونات تتحمل. الحصول على النتائج، بدءاً من محاكاة

**الكلمات المفتاحية:** مونت كارلو المحاكاة، LPCVD، زرع البورون والسليكون Polycrystalline

**Introduction :**

Cette étude qui a débutée en 1998 avec le mémoire de Magistère, se poursuit actuellement. On a choisi de traiter un matériau semi-conducteur largement utilisé dans le domaine de la microélectronique, du Silicium polycristallin. L'intérêt des couches minces de Silicium partiellement cristallisée réside dans la plus grande mobilité des porteurs libres par rapport au Silicium amorphe, ainsi que dans l'espoir d'une plus faible métastabilité[kleider'02], ces études sont en partie motivées par l'utilisation potentielle de ce matériau dans divers domaines, soit comme interconnexion (contacte métallique, contacte émetteur, grille CMOS, etc.....), soit en technologie VLSI qui exige des composants minces et courts nécessaires pour fabriquer des jonctions qui sont dopées à fortes doses facile à réaliser et aussi courtes que possibles. Autres application récentes, est son utilisation dans des cellules photovoltaïques embarquées dans des satellites, lesquels sont soumis à divers types de rayonnement notamment dans les ceintures de Van Hallen, la stabilité de ce matériau est testée par un rayonnement intense, soit de la part de photons (vieillessement sous lumière), soit de la part d'électrons ou de protons[Saadane'03].

Le mécanisme de croissance de ces films dopés s'avèrent intéressants, grâce à la nitruration le dopage in-situ à l'azote améliore la structure cristalline par l'augmentation de la taille des grains et la disparition de phases amorphes auparavant existantes sur les échantillons non dopés.

Le but de notre étude est la détermination de l'influence d'une telle nitruration sur les profils de dopage d'ions Bore dans des films de Silicium polycristallin, la détermination de ces profils se fait généralement avec une technique expérimentale dite SIMS (Spectrométrie de masse d'ions secondaires) une technique précise et fiable, son seul inconvénient et qu'elle est destructive, c'est-à-dire que l'échantillon analysé est irrécupérable, d'où l'intérêt d'une simulation.

En effet, plusieurs auteurs ont adaptées la méthode de simulation de Monté Carlo, basée sur les modèles physiques reconnus tels que le modèle de Lindhard, Scharff et Schiff [Lindhard'63]. Le logiciel que nous avons utilisé basé sur la méthode de Monté Carlo est le logiciel TRIM (Transport of ions in Matter) [Ziegler'85], il donne des informations sur la distribution des ions, des défauts créés par leur implantation, ainsi que les propriétés des ions réfléchis et éventuellement transmis, TRIM est applicable en principe à toutes sortes de combinaison ion/cible, en particulier pour les structures en couches (interfaces, présence d'oxyde), ou les matériaux composés binaires.

**Théorie :**

La méthode consiste à déterminer les trajectoires aléatoires des particules incidentes à l'intérieur d'une cible donnée, en se basant sur les équations régissant les phénomènes physique dans un matériau soumis à une implantation ionique et les interactions ion/matière. La méthode permet la simulation des trajectoires des particules individuelle à travers leurs collisions successives

avec les atomes cibles. Les collisions nucléaires et électroniques sont calculés de façon indépendantes et la sommation des pouvoirs d'arrêt est faite ensuite sur un nombre N de trajectoires (en général N>1000), elle est particulièrement utile dans le cas d'implantation à travers plusieurs couches de matériaux (exemple : Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si), cas assez courant en VLSI [Fichtner'88].

L'approche numérique consiste à discrétiser la cible en tranches élémentaires d'épaisseur Δx, et à effectuer ensuite une sommation le long du chemin parcouru. L'évaluation des collisions nucléaires se fait en utilisant le modèle de Lindhard [Lindhard'63], le choc élastique des noyaux est écrané par une fonction d'écran, et le potentiel inter atomique est :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi_0(r/a) \dots\dots\dots (1)$$

Avec Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub> les numéros atomiques de l'ion et de la cible, Φ<sub>0</sub>(r/a) est la fonction écran générée par les électrons entourant la charge nucléaire, elle est paramétrée suivant la distance r entre l'ion et le noyau, et suivant le rayon d'écran de Thomas-Fermi :

$$a = \frac{0.8853 \cdot a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \dots\dots\dots (2)$$

a<sub>0</sub>, est le rayon de Bohr et vaut 0.529Å (ħ<sup>2</sup>/m.e<sup>2</sup>).

Le pouvoir d'arrêt électronique est considéré comme étant proportionnel à la vitesse ionique, la relation entre la perte d'énergie électronique et le paramètre d'impact P est issue des travaux de Oen et Robinson [Oen'76]. Ces derniers ont établi un modèle qui s'inscrit dans la théorie LSS, c'est-à-dire qu'ils considèrent le choc inélastique ions électrons comme étant dérivé du cas d'un proton qui pénètre dans un gaz électronique.

Le potentiel interatomique utilisé est celui de Hartree-Fock-Slater pour tenir compte de la périodicité électronique liée à la structure en couches, et la formule obtenue est la suivante :

$$\Delta E_e = \frac{0.045 \cdot K \cdot \sqrt{E}}{\pi \cdot a^2} e^{-0.3P/a} \dots\dots\dots (3)$$

Avec, S<sub>e</sub>=K.E<sup>1/2</sup> et K une constante tabulée théoriquement et E, l'énergie de l'ion incidente.

Ce formalisme n'implique aucune restriction sur Z<sub>1</sub> et Z<sub>2</sub> (contrairement par exemple au modèle de Firsov), et il est supérieur aux autres dans le domaine des hautes énergies, ou l'approximation de la proportionnalité entre S<sub>e</sub> et la vitesse devient moins évidente [Ottaviani'99].

**Résultats et discussion :**

On présente quelque résultats simulés obtenues au moyen de notre outil informatique à partir d'un programme de calcul basé sur le code TRIM, on a considéré trois cas

d'échantillons, le premier échantillon étant une cible de Silicium implantée par des ions Bore, qui nous servira de référence par rapport aux deux autres échantillons sur lesquels, on a fait pendant la phase de dépôt LPCVD du Silicium polycristallin un dopage in situ à l'azote, ensuite implantés au Bore. Afin de faire une comparaison et étudier l'influence d'une nitruration sur la profondeur de pénétration de particules incidentes.

On définit  $A_1$  et  $Z_1$ , comme la masse et le numéro atomique de l'atome constituant la cible (Silicium),  $A_2$  et  $Z_2$  la masse et le numéro atomique de l'atome constituant le faisceau incident et  $A_3$  et  $Z_3$ , comme la masse et le numéro atomique de l'atome dopant la cible (Azote).

En pénétrant dans la cible, l'ion va être dévié de sa direction initiale et perd une partie de son énergie, on répète cette séquence un grand nombre de fois afin d'avoir la trajectoire ionique voulue.

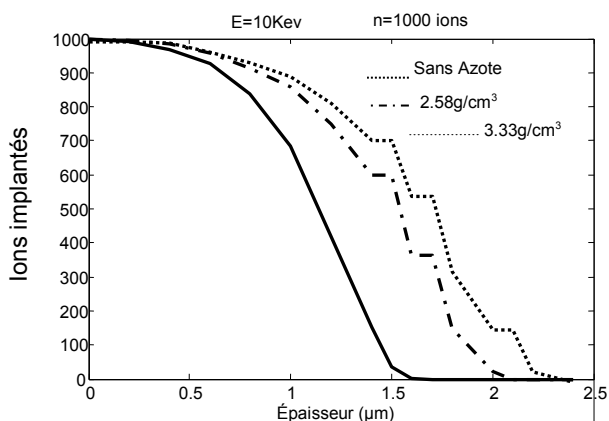
Une trajectoire est terminée quand l'ion perd la plus grande partie de son énergie cinétique (la valeur de la limite inférieure est évaluée à 15 eV) ; En connaissant l'histoire de toutes les particules, nous pouvons alors reconstituer le profil de dopage de chaque implantation.

La présence de l'azote dans notre programme de simulation est définie à partir de la variation de la densité de la cible, les valeurs de cette densité ont été choisies de telle façon qu'elles correspondent avec la concentration totale de l'azote introduite dans l'échantillon.

Les valeurs indiquées sur les courbes correspondent en fait aux concentrations suivantes :

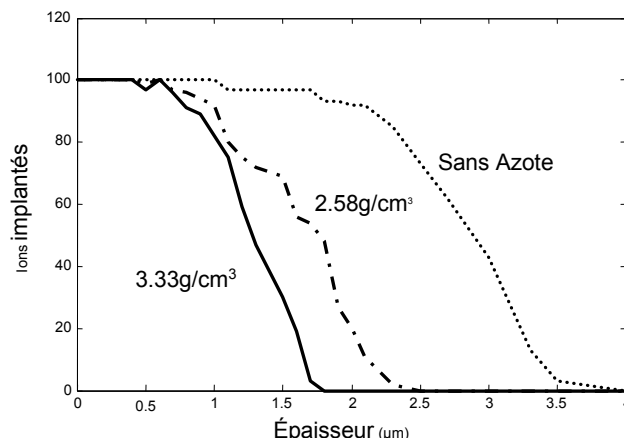
$$\begin{array}{ll} \rho=2.58 \text{ g/cm}^3 & c=7.9 \cdot 10^{20} \text{ at/cm}^3 \longrightarrow \\ \rho=3.33 \text{ g/cm}^3 & c=3.1 \cdot 10^{21} \text{ at/cm}^3 \longrightarrow \end{array}$$

Sur les figures (1) et (2) suivantes, nous présentons quelques résultats obtenus qui montrent dans leur ensemble que la méthode de Monté Carlo est bien adaptée à la simulation des trajectoires ioniques en permettant de reconstituer le profil de dopage associé, tout en donnant accès à des paramètres décisifs sur le contrôle du processus d'implantation d'ions dans un matériau micro électronique.



**Figure (1) :** Comparaison des profils simulés de 1000 ions Bore implantés avec une énergie  $E=10\text{Kev}$ , dans les cas d'un échantillon non dopé Azote et deux échantillons dopé

in- situ Azote pour deux valeurs de densité :  $2.58 \text{ g/cm}^3$  et  $3.33 \text{ g/cm}^3$ .



**Figure (2) :** Comparaison des profils simulés de 100 ions Bore implantés avec une énergie  $E=10\text{Kev}$ , dans le cas d'un échantillon non dopé Azote et deux échantillons dopé in-situ Azote pour deux valeurs de densité :  $2.58 \text{ g/cm}^3$  et  $3.33 \text{ g/cm}^3$ .

A partir de ces courbes, on suppose que la diffusion de l'azote dans la structure polycristalline, précisément au niveau des joints de grains satisfait les liaisons pendantes et guérit par conséquent les défauts de structure, en particulier le joint de grain est le lieu privilégié de phénomènes complexes : ségrégation, précipitation, discontinuité dans les directions d'aimantation, ... c'est un des principaux défauts des semi-conducteurs polycristallins [Poiton'00].

Les ions Bore pénétrant dans la cible rencontrent une structure plus dense et entrent en collision non seulement avec les atomes de Silicium, mais aussi avec les atomes d'azote, ce qui augmente le freinage de leurs trajectoires et limite ainsi leur zone de diffusion.

Pour consolider notre étude, nous nous sommes intéressés à étudier l'influence de quelques paramètres qui contrôlent l'implantation ionique, l'énergie et la dose d'implantation. Sur le tableau-1- pour trois valeurs d'énergie, on a relevé l'épaisseur maximale de pénétration des ions Bore dans les trois cas d'échantillons étudiés, on voit clairement que pour l'échantillon non nitruré, les ions atteignent des profondeurs bien plus importantes que pour les autres échantillons nitrurés et ceci pour les trois valeurs d'énergies d'implantation.

Energie incidente	10 Kev	25 Kev	50 Kev
Sans azote	3.6411 µm	15.6827 µm	68.1565 µm
Avec l'azote $c=7.9 \cdot 10^{20} \text{ at/cm}^3$	2.0523 µm	10.5851 µm	37.3484 µm
Avec l'azote $c=3.1 \cdot 10^{21} \text{ at/cm}^3$	1.5901 µm	7.9332 µm	28.9366 µm

**Tableau -1-** Influence de l'énergie d'implantation ionique

Nous avons aussi essayé d'étudier l'influence d'un autre paramètre de contrôle de l'implantation ionique, qui est la dose d'ions implanté, précisons seulement que le calcul d'une seule itération à partir de notre outil informatique dure en moyenne cinq heures pour une dose de 1000 particules et parfois plus, ce qui nous a limité pour le récent travail. Les résultats obtenus sont reportés sur le tableau-2, qui restent à vérifier avec des valeurs usuelles habituellement prises aux environs de  $10^{15}$  ions /cm<sup>2</sup>. Néanmoins, on constate que pour la valeur de 1000 particules, les épaisseurs atteintes sont inférieures à celles de 100 particules, cela peut être expliqué par le fait, que plus le faisceau incident est dense plus les collisions nucléaires et les interactions électroniques augmentent toujours est-il que les épaisseurs des échantillons nitrurés sont inférieures à celles de l'échantillon non nitrurés.

Ions Bore	100 ions	1000 ions
Sans azote	e=3.507µm	e=2.195µm
Avec l'azote c=7.9*10 <sup>20</sup> at/ cm <sup>3</sup>	e=1.793µm	e=1.597µm
Avec l'azote c=3.1*10 <sup>21</sup> at/ cm <sup>3</sup>	e=1.575µm	e=1.198µm

**Tableau- 2-** : Influence de la dose implantée.

## CONCLUSION :

L'objectif recherché dans notre travail, était d'étudier l'influence d'une nitruration sur la diffusion de particules ioniques à l'intérieur d'une couche polycristalline. Effectivement, les trajectoires ioniques reconstituant les profils obtenus montrent dans leur ensemble que la rencontre des ions implantés dans une cible dense, une couche précédemment dopée avec un autre élément, cause un surplus de collisions entraînant le freinage et la déviation aléatoire des trajectoires. L'autre point prometteur, est une réduction appréciable de l'épaisseur de pénétration dans les échantillons contenant l'élément azote, en comparaison avec l'échantillon non nitruré.

Ces résultats obtenus incitent donc à poursuivre cette étude, pour caler de futurs calculs de phénomènes de diffusion et de collisions binaires.

## RÉFÉRENCES

- [Fichtner'88], Fichtner w, Process Simulation, in VLSI Technologie, New York : Mc Grow-Hill, 1988, PP. 422 – 465.
- [Kleider'02], Kleider . J.P. , R.OCA.P, Reverse bios annealing of schottky diods, evidence for the lower defect and better stability of polymorphous silicon compared to amorphous silicon, journal of Non- Crystalline solids 299-302(2002).
- [Poitou'00] : Poitou.F , Détermination de l'énergie au joint de grains par calculs ab initio et application à un modèle Monté carlo de croissance cristalline 2000.
- [Lindhard'63], Lindhard. J, Scharff M, Schiott H.E, Range concept and Heavy Ion Ranges, Materials Phisics Medd., 1963, Vol. 33, n° 14, PP.54 -73.
- [Saadane'03], Saadane. O, S. Lebib, A.V. Kharchenko, C. Longeaud et P. Roca Icabarrocas, Structural, optical, and electronic properties of hydrogenated polymorphous silicons films deposited from silane-hydrogen and silane-helium mixtures.J.Appl.Phys.93(11), 9371(2003).
- [Oen'76], Oen O.S., Robinson M.T.,Computer studies of the reflection of light ions from solids, Nuclear instruments and Methods,1976, Vol.132, pp.647-653.
- [Ottaviani'99], Ottaviani. L, Réalisation de jonctions pn dans le carbure de Silicium 6H par implantation ionique d'aluminium, 1999.
- [Ziegler'85], Ziegler J.f., Biersack J.P., Littmark U., The stopping and range of ions in solids, New York : Pergamen Press, 1985, 321p.