

Introduction

Ce chapitre, donne un panorama des différentes étapes technologiques de fabrication de la jonction PN latérale réalisée sur un silicium polycristallin.

Nous débuterons par une présentation détaillée du logiciel de simulation TCAD-SILVACO, son principe de fonctionnement est éclairci, une description exhaustive des modules de simulation : ATHENA pour la simulation des processus technologiques, et ATLAS pour la simulation du comportement électrique des composants. Puis, nous terminerons par une description des différentes étapes de simulation du procédé technologique telles que l'oxydation, l'implantation, la diffusion, la gravure, etc.....

III . Conception par simulation (TCAD-SILVACO) du jonction PN latérale

III .1. Présentation du logiciel TCAD-SILVACO

SILVACO vient de l'abréviation (**Silicon Valley Corporation**) est un logiciel de simulation électrique et de processus technologique des dispositifs électroniques à semiconducteur. Il a été fondé en 1984 par Dr. Ivan PESIC [1][2], il est composé de plusieurs outils (tels que ATLAS, ATHENA, DECKBUILD...) qui s'unissent pour obtenir une simulation complète. Ces outils démarrent par la compréhension de la physique de base des semi-conducteurs, isolants et conducteurs. L'environnement virtuel de la simulation de la technologie de Fabrication permet aux simulateurs ATHENA et ATLAS de préparer, exécuter, optimiser, et analyser des expériences sur les semiconducteurs pour réaliser des dispositifs optimales. Les outils de base les plus importants de SILVACO sont :

III.1.1. DECKBUILD

C'est un environnement où on peut inviter les simulateurs ATHENA et ATLAS simultanément ou, à tour de rôle, pour définir le programme de simulation : La structure, le maillage et les calculs électriques nécessaires peuvent être également définis dans DECKBUILD [3].

III.1.2. ATHENA

Il est fréquemment employé en même temps avec le simulateur de dispositif d'ATLAS. ATHENA fournit une plateforme facile à employer, modulaire, et extensible pour simuler l'implantation ionique, la diffusion, la gravure, le dépôt, la lithographie, et l'oxydation...etc. donc, il prévoit la structure physique qui résulte du traitement. Ces structures physiques sont employées comme des entrées en ATLAS, qui prévoit alors les caractéristiques électriques liées à des conditions de polarisation indiquées.

III.1.3. DEVEDIT

C'est un environnement où on peut dessiner les structures des dispositifs (dimension, dopage, ...), Il peut être employé pour produire d'une nouvelle maille sur une structure existante, pour modifier un dispositif ou pour créer un dispositif à partir de zéro. Ces dispositifs peuvent alors être employés par les simulateurs 2D et 3D de SILVACO. DEVEDIT peut être employé par une interface utilisateur graphique (GUI abréviation de Graphics User Interface) ou comme simulateur sous DECKBUILD.

III.1.4. ATLAS

Le logiciel de simulation ATLAS est un simulateur de modélisation bidimensionnelle ou tridimensionnelle (3D) de composants capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semiconducteurs en régime continu, transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, etc., autant de données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure défini par l'utilisateur ou par le programme. Ce simulateur est composé de deux parties :

- Une partie traitement numérique (méthode d'intégration, de discrétisation...).
- Une partie formée des modèles physiques des composants semiconducteurs les plus récents : modèles de recombinaisons, d'ionisation par impact, de mobilités, en température et statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann notamment.

ATLAS a été conçu de façon à pouvoir utiliser les autres outils qui facilitent son utilisation tel que : ATHENA, DEVEDIT, TONYPLOT, DECKBUILD.

III.1.5 TONYPLOT

Est un puissant outil conçu pour visualiser les structures 1D et 2D produits par les simulateurs de SILVACO, distributions de grandeurs diverses dans celui-ci, caractéristiques électriques...). Il fournit également beaucoup de fonctions spécifiques de visualisation de TCAD telles que les lignes de la coupe 1D, l'animation des marqueurs pour exposer la variation des vecteurs, intégration des fichiers de données 1D ou les fichiers (.log). Il y a aussi un autre outil similaire à celui-là, sauf qu'il est conçu pour visualiser les structures 3D, nommé TonyPlot3D. Dans ce mémoire, nous présenterons les résultats de la simulation en deux dimensions, comme c'est illustré sur la figure III.1, à titre d'exemple.

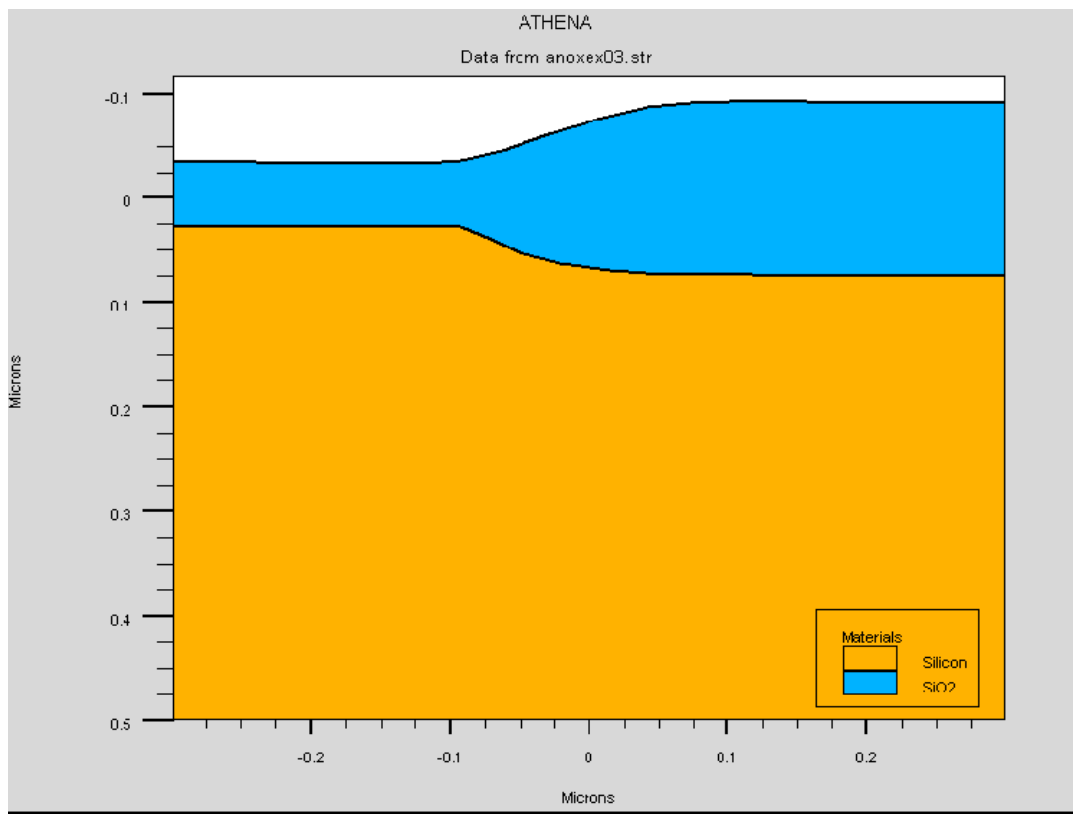


Fig III.1 Exemple de simulation en 2D de l'étape d'oxydation sous ATHENA. [3]

Dans le schéma de la figure (III.2) nous voyons les types d'informations qui circulent en entrée et en sortie « d'Atlas »

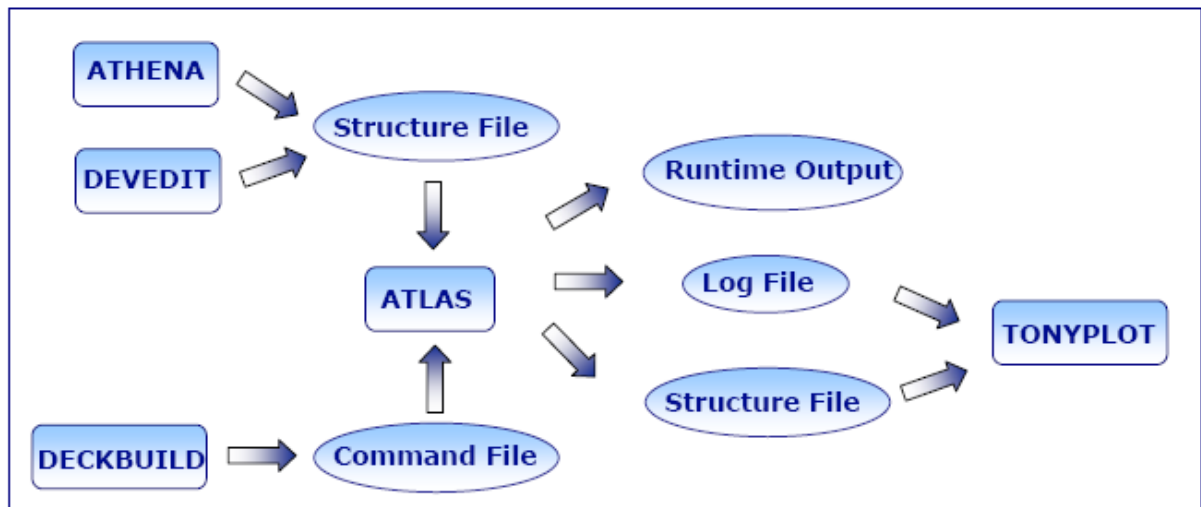


Figure III.2 Présentation schématique montrant la participation des outils de SILAVACO lors de la simulation. [4]

La plupart des simulations réalisées par « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier script contenant les commandes pour qu'Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » qui définit la structure qui va être simulée. A la sortie « d'Atlas », nous avons trois types de fichiers. Le premier de ces fichiers est la sortie « Runtime » qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique). Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions dans le dispositif en un point donné (c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot ».

Dans le cadre de notre travail, on utilise uniquement les outils : DECKBUILD, ATLAS, ATHENA et TONYPLOT.

III.1.6 Logique de programmation

Après la présentation de la chaîne progicielle TCAD de SILVACO, sa composition interne et le fonctionnement « d'Atlas » nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation « d'Atlas ». Ainsi il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement (voir Figure III.3). Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ou les modèles de matériaux ne sont pas placés dans l'ordre adéquat, le simulateur ne les prend pas en compte [2].

Groupes		Commandes
1. Spécification de la structure	>>>>	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles de couches	>>>>	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode numérique	>>>>	METHOD LOG
4. Spécification des solutions	>>>>	SOLVE LOAD SAVE
5. Analyses des résultats	>>>>	EXTRACT TONYPLOT

Fig III.3 Ordre des groupes des commandes dans un programme Atlas (les commandes fondamentales afférentes). [5]

Les commandes fondamentales sont :

- MESH : cette commande produit un maillage ou lit un maillage qui a été défini auparavant. L'élément de maille utilisé est le triangle.
- REGION : indique l'endroit des matériaux dans une maille précédemment définie. Chaque triangle doit être défini comme matériel.

- ELECTRODE : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une maille précédemment définie.
- DOPING : indique analytiquement des profils de dopage ou prend de tels profils déjà prédéfinis dans les fichiers dédiés.
- MATERIAL : associe des paramètres physiques aux matériaux dans la maille. (Il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standard)
- MODELS : indique les carreaux constitutifs du modèle, ils indiquent les inclusions de différents mécanismes physiques, de modèles ou des autres paramètres comme par exemple la température globale pour la simulation.
- CONTACT : indique les attributs physiques d'une électrode.
- INTERFACE: indique les paramètres d'interface aux frontières de semiconducteur/ isolant. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière exceptés la où ils sont déjà indiqués.
- METHOD : place les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes.
- LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transitoire ou C.A., générée par la commande SOLVE et sauvée après la commande LOG (donc les informations sauvées sont de type électrique et elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Aussi n'importe quel paramètre spécifié par la commande PROBE est stocké dans le fichier de type log. Si dans le programme il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.
- SOLVE : ordonne à Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.
- LOAD : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conjectures initiales à d'autres points de polarisation.
- SAVE : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.

- EXTRACT : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou structure.
- TONYPLOT : démarre le programme « TonyPlot » de post processus graphique des donnés.

III.2. Spécification de la Structure du cas traité

III.2.1. Le Maillage

Les spécifications des mailles impliquent une compensation entre les conditions de l'exactitude et l'efficacité numérique. L'exactitude exige une maille fine qui rend le programme converge facilement. L'efficacité numérique exige une maille épaisse qui réduit au minimum tout le nombre de points de grille donnant une réduction du temps d'exécution. Cette compensation entre l'exactitude et l'efficacité numérique est fréquemment une source des problèmes, elle nécessite assez d'expériences pour définir les mailles raisonnables.

La zone la plus importante dans une diode latérale est la jonction entre l'anode et la cathode . Typiquement, cette région doit être résolue avec des mailles très fines.

III.2.2. La structure du dispositif

Après le maillage, il faut désigner la structure du dispositif que l'on veut simuler, par la définition des régions et leurs dimensions, les matériaux utilisés (Si, Polysi, ...etc.), les additions s'ils existent et leur profil de distribution (Ge, Al...), le type et la concentration du dopage dans chaque région ont un effet très important sur les caractéristiques de la diode. Enfin, on spécifie les positions des électrodes.

III.2.3. Les paramètres des matériaux

Pour faire une simulation d'un dispositif il faut définir les paramètres des matériaux employés dans la fabrication de ce dispositif tel que la structure de bande, la densité des états, l'affinité, et ainsi de suite les paramètres utilisés pour n'importe quelle simulation. Les valeurs de ces paramètres varient selon le type des matériaux : pour les matériaux simples sont définis par des valeurs exactes, dans les cas complexes où les matériaux sont des alliages dont des fractions molaires bien définis. Les paramètres sont déterminés avec des modèles en fonction de ces fractions (x).

III.2.4. Les paramètres de silicium

Les paramètres du matériau qu'on a utilisé dans notre exemple sont définis par défaut dans la base des données d'ATLAS, ces paramètres sont représentés dans l'annexe 1 [5].

III.2.5. Les modèles physiques pour une diode

SILVACO fournit des modèles physiques spéciaux pour la simulation d'une diode. Ces modèles peuvent être devisés en deux groupes :

Le premier est considéré comme un modèle de base et il représente:

- la dépendance de la mobilité de la concentration du dopage (CONMOB) et le champ électrique (FLDMOB).
- la variation de la bande interdite (BGN).
- la dépendance du temps de vie de la concentration (CONSRH) et la recombinaison d'AUGER (AUGER).

le second, pour les simulations bipolaires les plus précises, le modèle de mobilité devrait être utilisé avec :

- ✓ le modèle Auger de KLAASSEN (KLAAUG).
- ✓ la dépendance de la concentration SRH (SCHOKLEY READ HALL) de KLAASSEN (KLASRH).
- ✓ la dépendance du champ électrique (FLDMOB) pour modéliser la saturation de vitesse.
- ✓ BAND-TO-BAND Pour les transitions directes. Nécessaire avec des champs très élevés.
- ✓ KLAASSEN les transitions directes et indirectes.
- ✓ POOLE-Frenkel Barrier.
- ✓ TRAP.COULOUMBIC Cet effet consiste en l'abaissement du bord d'un puits de potentiel coulombien en présence d'un champ électrique.

III.2.6 Equations de base de semi-conducteur en ATLAS-SILVACO

De façon très succincte, nous pouvons dire que ce simulateur est basé sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. Il calcule à chaque instant et en tout point de l'espace en une suite d'éléments finis, la concentration

des électrons et des trous et la valeur du potentiel électrostatique. L'équation de Poisson montre une relation entre le potentiel et la densité des porteurs [3]:

$$\varepsilon \Delta V = -q(p - n + N_D^- - N_A^+) \quad (III.1)$$

Où:

ε est la constante diélectrique,

V le potentiel,

q est la charge élémentaire d'électrons,

N_D^- et N_A^+ sont les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisés,

n et p sont les densités des porteurs.

L'évolution temporelle des densités de porteurs obéit aux équations de continuité pour les électrons et les trous :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - V_p + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p \quad (III.2)$$

Où :

G et U sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs, $\vec{J}_n$ et $\vec{J}_p$.

sont respectivement les densités de courant des électrons et des trous.

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle d'entraînement

diffusion. Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier correspond à

l'entraînement des charges par le champ électrique, le second correspond à la diffusion des porteurs.

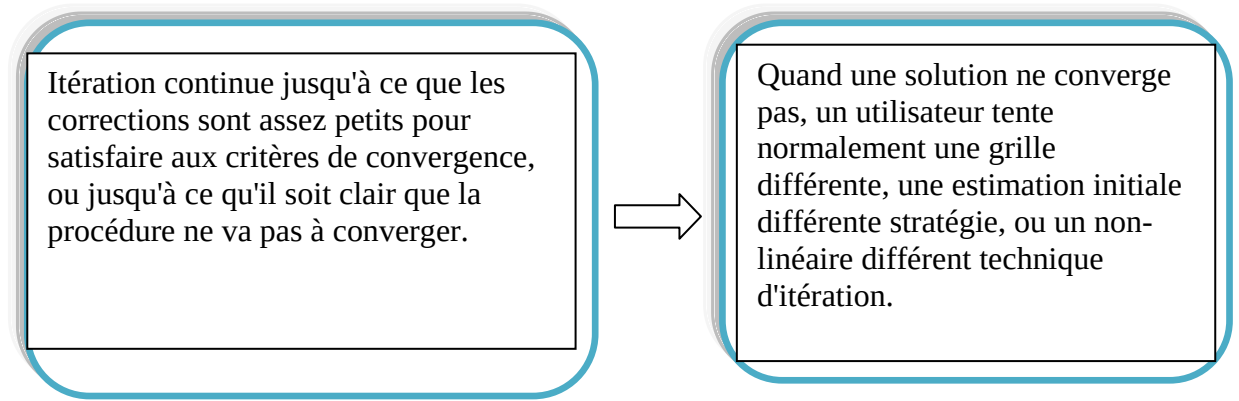
$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \overrightarrow{\operatorname{grad} n} \quad (III.3)$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} + qD_p \overrightarrow{\operatorname{grad} p} \quad (III.4)$$

$$E = -\overrightarrow{\operatorname{grad} p} \quad (III.5)$$

III.2.6.1 Les méthodes numériques

La procédure d'itération non linéaire commence à partir d'une estimation initiale et utilise une procédure itérative qui affine les estimations successives de la solution.



Il ya trois types de techniques de solution: Gummel, Newton et Block.

- Les méthodes numériques sont données dans les états MÉTHODE du fichier d'entrée.
- Si plus d'une méthode est précisé dans la même déclaration de méthode, chaque Procédé de la solution est appliquée en succession jusqu'à ce que la convergence soit obtenue.
- L'ordre que les méthodes de résolution seront appliquées est Gummel puis Block ensuite Newton. Si aucune des méthodes de résolution sont spécifiées Newton est appliqué par défaut.

Plusieurs méthodes numériques peuvent être utilisées pour résoudre les équations des semi-conducteurs. En général, il y a trois approches:

- découplé (méthode de GUMMEL).
- couplé (méthode de Newton)
- La troisième méthode est la combinaison de ces deux premières.

III.2.7. Comparaison des méthodes

Chaque itération de la méthode de GUMMEL résout une équation des sous-problèmes par rapport à sa variable primaire, tout en tenant compte d'autres variables à leurs valeurs le plus récemment calculées. Une étape de l'itération de GUMMEL est accomplie quand le procédé a été exécuté pour chaque variable indépendante. L'itération de GUMMEL converge relativement lentement, mais la méthode ne demande pas de bonnes prédictions.

Chaque itération de la méthode de block résout certaines équations entièrement couplés tandis que d'autres sont découplé.

Par contre pour la méthode de NEWTON, chaque itération résout le système des inconnus ensemble. La taille du problème est relativement grande, et chaque itération prend un temps relativement long. Cependant, l'itération convergera rapidement à condition que les prédictions soient suffisamment près de la solution finale.

Il est possible de combiner les deux méthodes en commençant par la méthode de GUMMEL et puis ressortir à la méthode de NEWTON si la convergence n'est pas réalisée dans un certain nombre d'itérations. L'avantage de cette troisième méthode est que l'itération de GUMMEL peut raffiner les prédictions à un point du quel l'itération de Newton peut converger.

III.2.8. La solution

En effectuant une simulation, le dispositif démarre par une polarisation nulle sur toutes les électrodes. Les solutions sont obtenues par le balayage de la polarisation sur les électrodes de l'état d'équilibre, en utilisant des petits pas du variable (par exemple la tension). Une fois qu'une solution est obtenue, le courant traversant chaque électrode est calculé par l'intégration numérique. Des quantités internes, telles que les distributions des porteurs et le champ électrique dans tout le dispositif, peuvent alors être calculées ou présentées sous forme de graphes.

III.3. La structure de la diode latérale du cas envisagé

III.3.1. Maillage du dispositif

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. Pour obtenir des résultats fiables et précis, la finesse du maillage doit être définie en fonction des variations des grandeurs physiques. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats [6].le maillage doit être très fin pour les régions telles que :les régions des jonctions, alors qu'il peut être moins serré pour d'autres régions.

La maille conçue pour notre dispositif est montrée par la (figure III.4) ci-dessous.

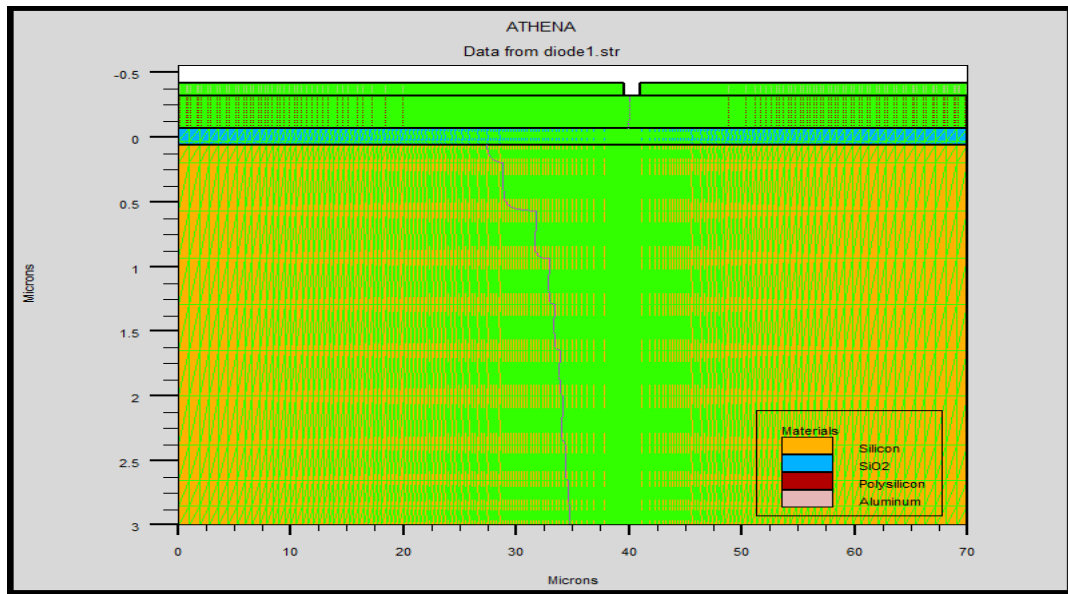


Fig III.4 Maillage du dispositif.

III.3.2. Choix du substrat

Avant de réaliser tout composant microélectronique, il faut définir le substrat, c'est à-dire le matériau dans lequel sera réalisé le dispositif.

Comme dans tout processus de réalisation de diode, le substrat utilisé est une plaquette de silicium d'orientation cristallographique $\langle 100 \rangle$, de type N et de résistivité variant de 2 à $5 \Omega \cdot \text{cm}$. La figure III.5 montre le substrat choisie telle quelle est donnée par SILVACO.

La couche en jaune montre la partie en silicium sur la quelle on diffuse de l'oxyde de silicium montré en bleu.

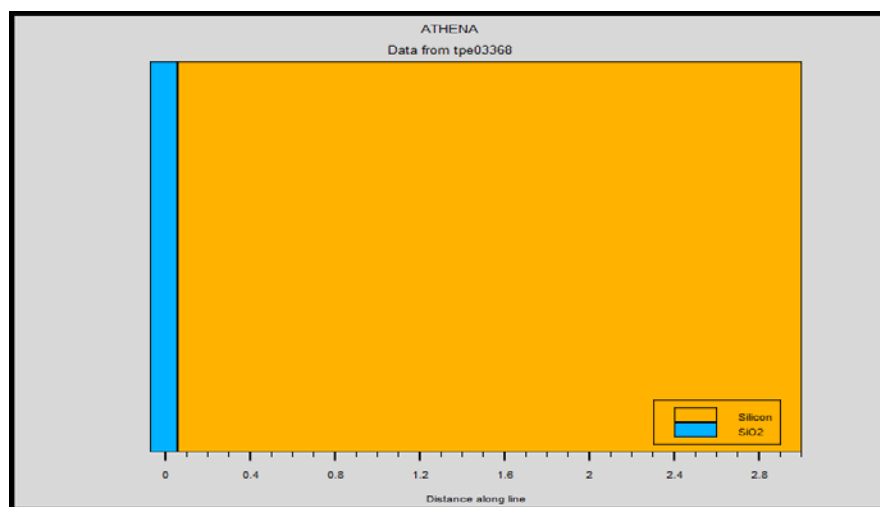


Fig III.5 le substrat utilisé

III.3.3. Dépôt de la couche polycristalline

La première étape consiste à faire un dépôt d'une couche polycristalline d'une épaisseur de $0.25\ \mu\text{m}$ comme il est montré par la figure III.6

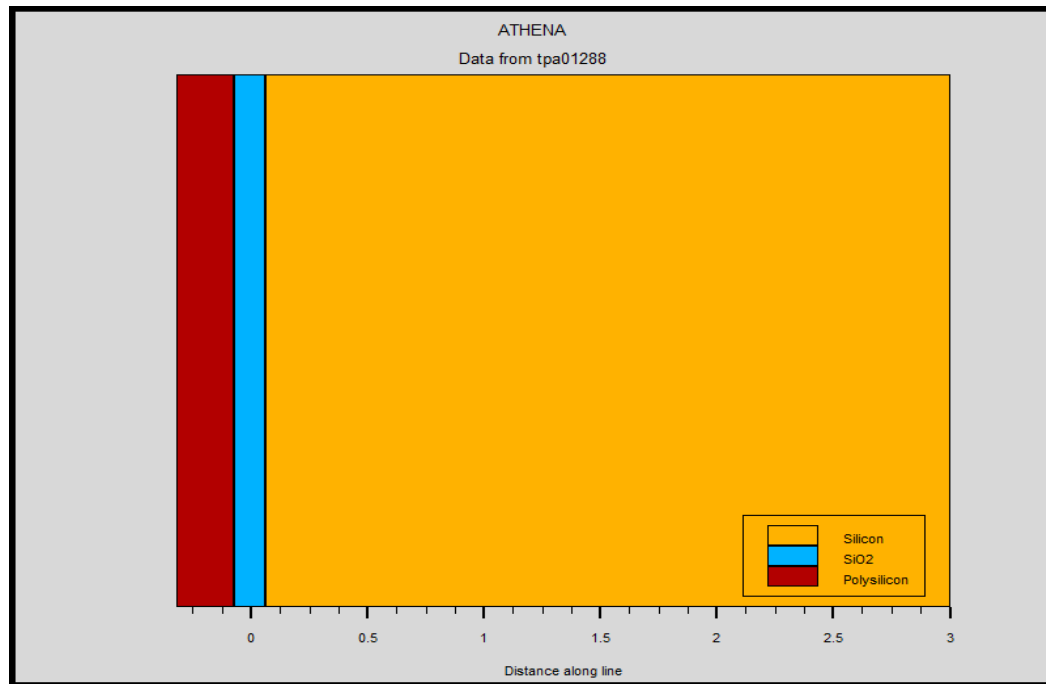


Fig III.6 Dépôt de la couche polycristalline

III-3-4. Implantation ionique de Bore avec recuit

Une ouverture de fenêtre pour implanter le Bore a une énergie de 30Kev et à une dose de $4 \times 10^{15}\text{cm}^{-2}$.

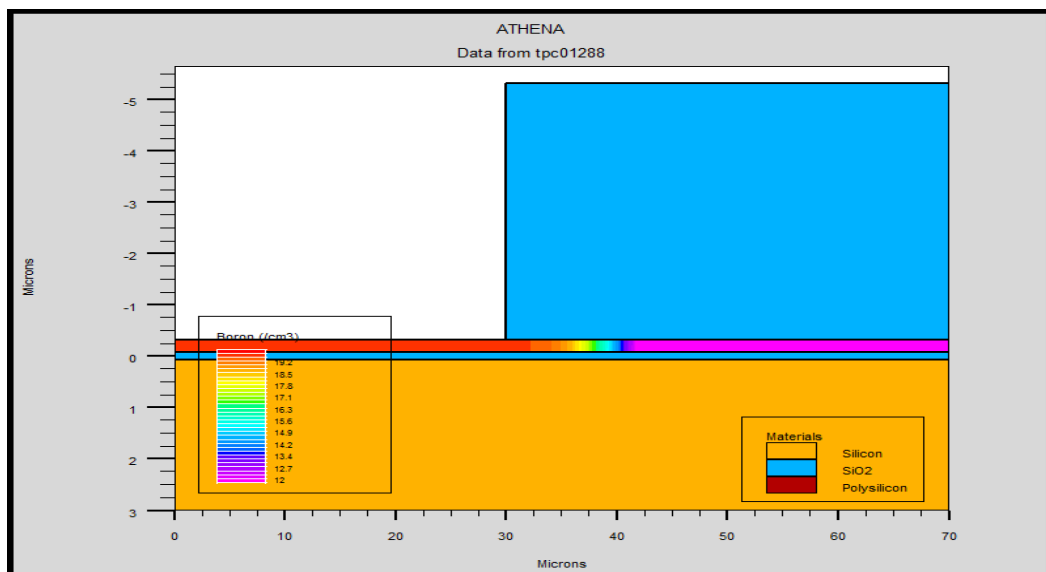


Fig III.7 Implantation ionique de Bore

III.3.5. Formation de l'oxyde

L'oxyde a été réalisé en utilisant une oxydation thermique humide pendant 40min à 1100C°. Ce dernier assure la croissance d'une couche d'oxyde de 0.3 μm .

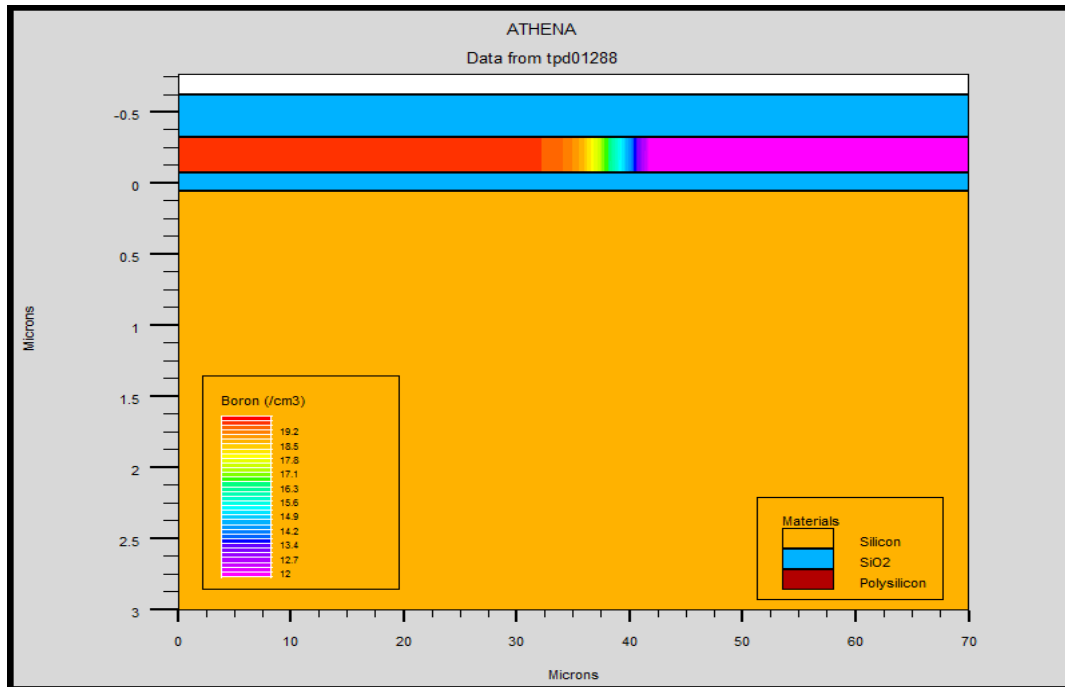


Figure III.8 Oxydation humide

III.3.6. Ouverture d'une fenêtre dans l'oxyde

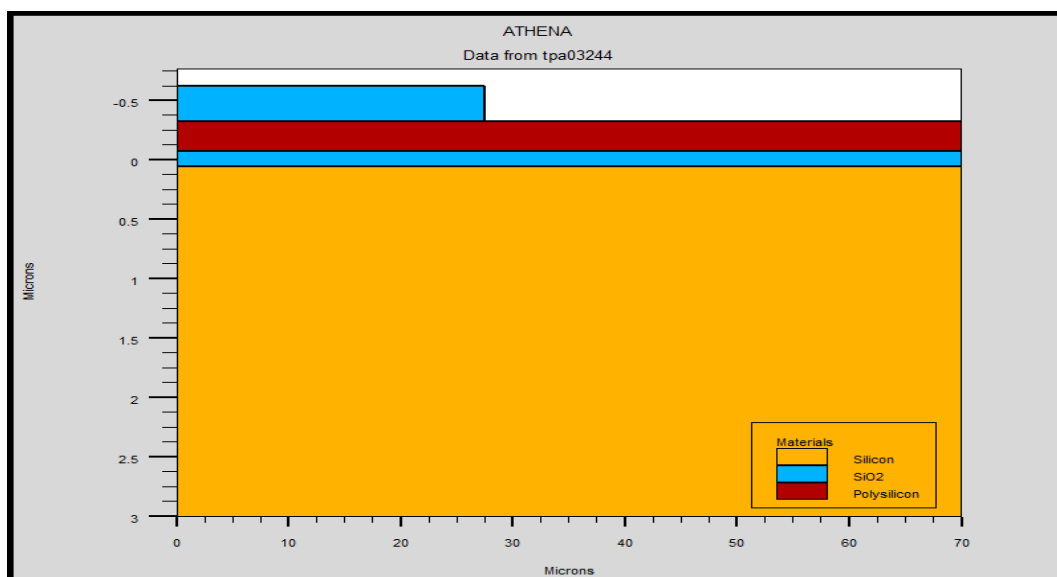


Fig.III.9 Ouverture d'une fenêtre

III.3.7. Implantation ionique de phosphore avec recuit

Nous procédons de la même façon pour le phosphore, une ouverture de fenêtre pour implanter le phosphore à une énergie de 80Kev et une dose de $4.5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.

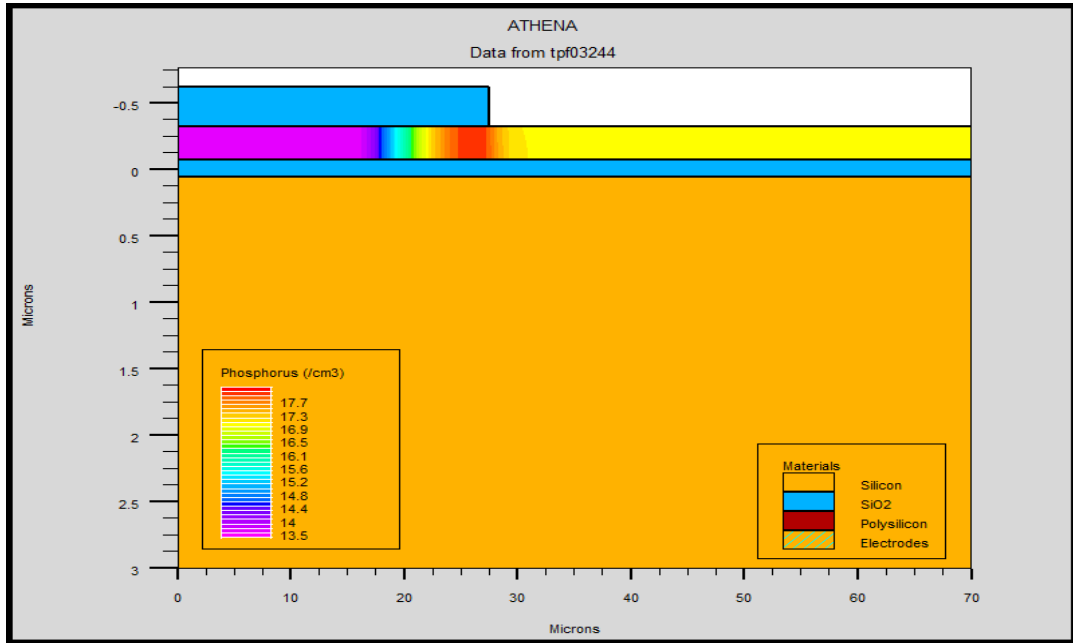


Fig. III.10 Implantation ionique de phosphore

La figure III.11 montre le profil de dopage après l'étape de redistribution des porteurs de charges durant le recuit, et elle montre la diminution de la concentration d'impuretés de Bore en surface.

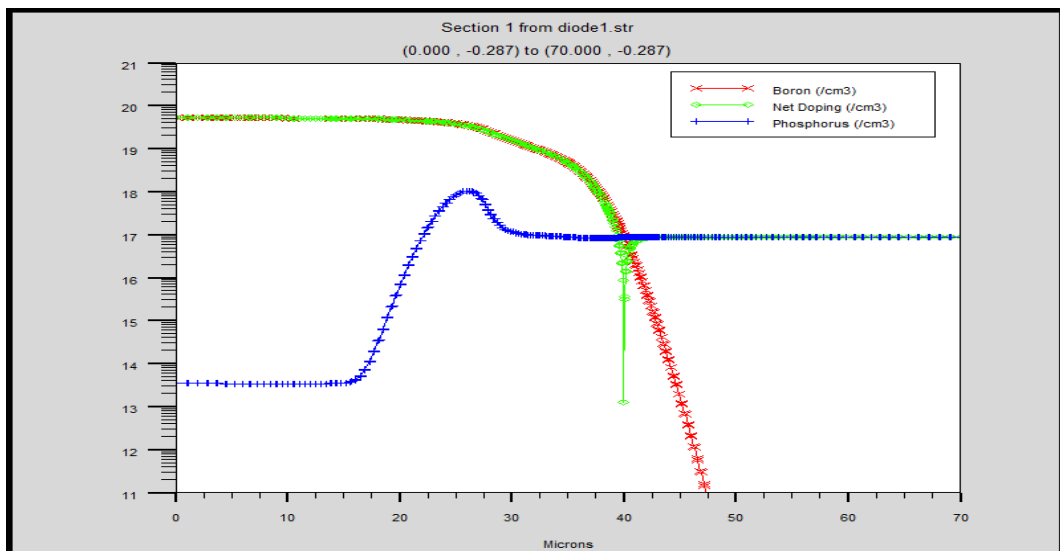


Fig. III.11 Profil de dopage après l'étape de redistribution durant le recuit (1D).

Une coupe de la structure simulée en 2D par ATHENA des zones actives après recuit est montrée sur la figure III.12.

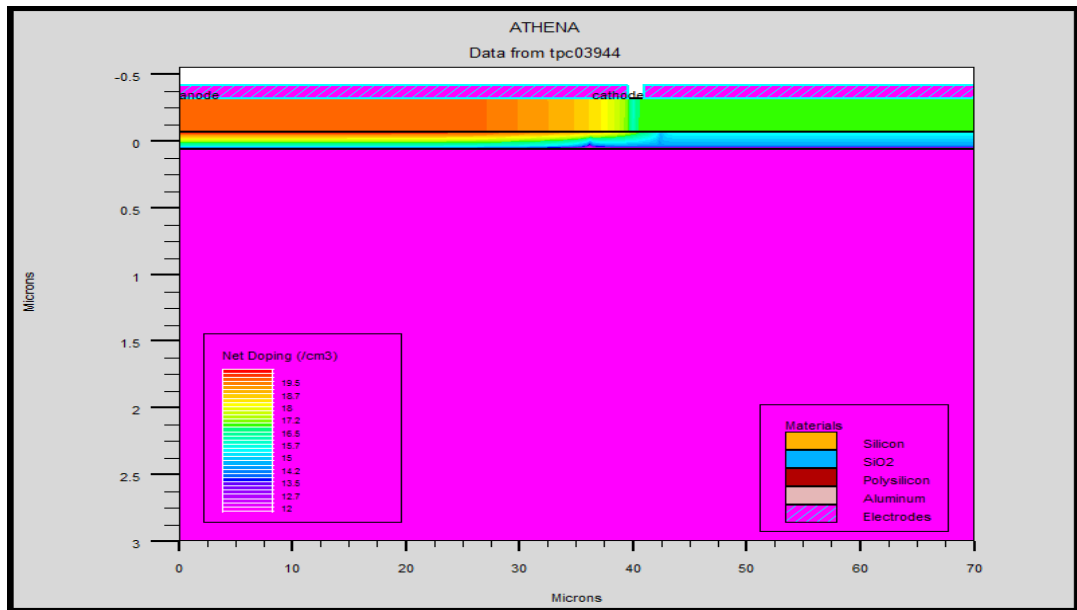


Fig. III.12 Structure bidimensionnelle simulée par ATHENA après redistribution.

III.3.8. Métallisation

Les contacts métalliques du composant sont réalisés par un dépôt sur la surface avant du composant d'une couche d'aluminium avec une épaisseur de 0.1 μm . Puis une opération de gravure est nécessaire pour enlever le métal des zones non désirées.

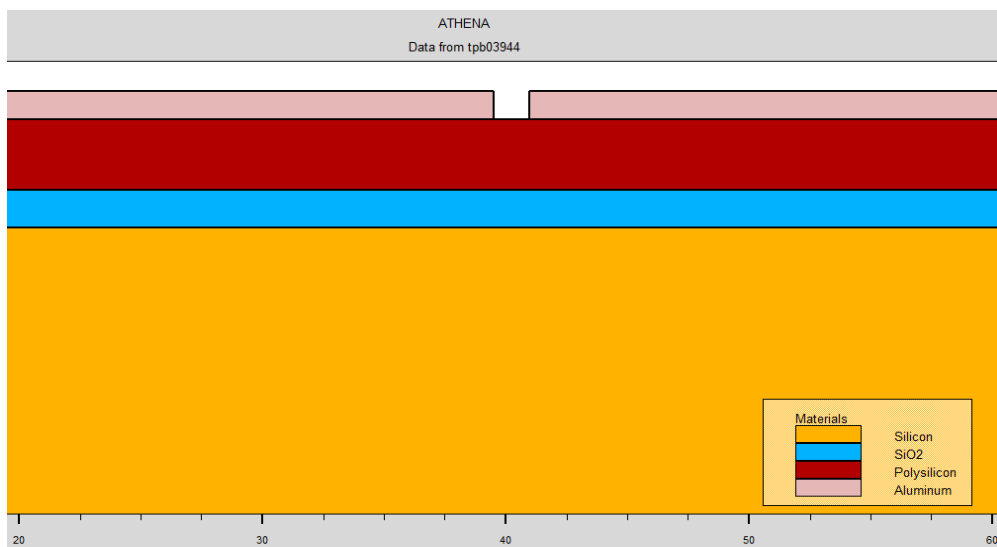


Fig. III.13 : Formation des contacts métalliques

III.3.9. Paramètres technologiques et géométriques du composant fini

En fin de ce chapitre, nous regroupant l'ensemble des paramètres de la diode réalisées sur silicium polycristallin suite à la simulation par ATHENA et nous donnons la figure du dispositif fini (figure III-14).

En ce qui concerne les paramètres technologiques, nous allons présenter une synthèse des caractéristiques du dispositif fini dans le tableau ci-dessous : le type et le dopage du substrat, le dopage des Anode et Cathode, l'épaisseur de l'oxyde, enfin l'épaisseur de la couche de métal (Aluminium) servant les électrodes.

	Substat	Anode	Cathode	Sio ₂	polisilcon	Metallisation
Orientation	100					
Epaisseur(μm)	3			0.12	0.25	0.1
Type		P⁺	N			
Dose(cm⁻²)		4.10¹⁵	4.5 10¹⁴			
Dopage(cm⁻³)		1.6 10²²	1.8 10²¹			

Tableau III.1 : Grandeurs optimales de la structure

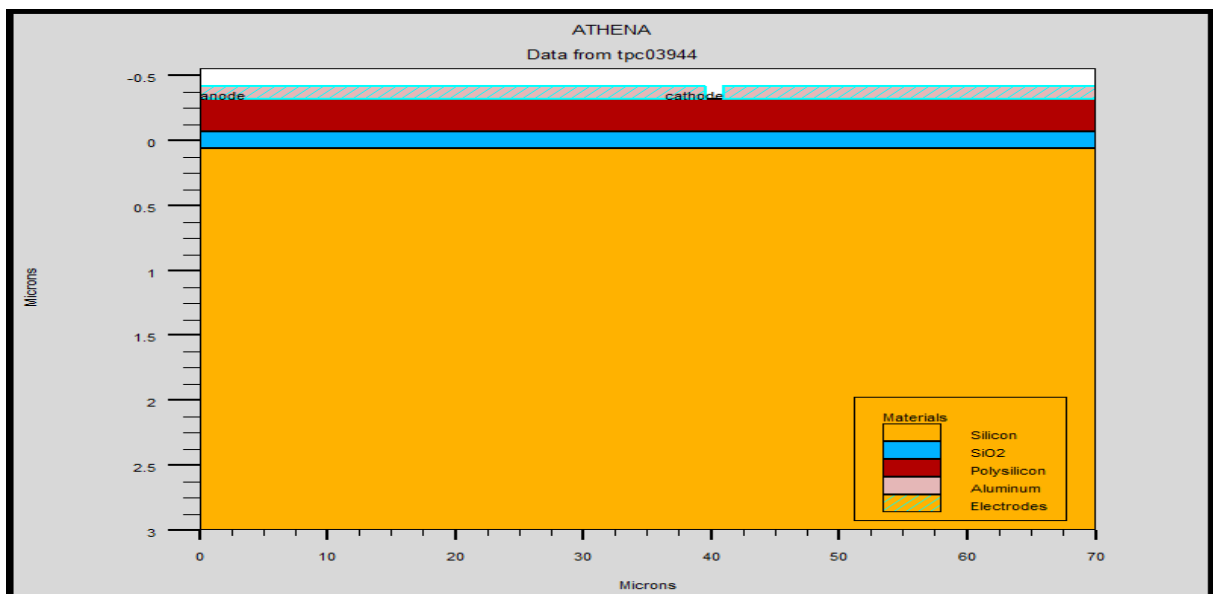


Fig.III.14 : Structure finale du composante simulée sous ATHENA.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modules de simulation ATHENA et ATLAS, l'environnement où est défini le programme de simulation (DECKBUILD), et l'outil de visualisation (TONYPLOT) du logiciel TCAD-SILVACO. Puis nous avons décrit les étapes de simulation du procédé technologique réalisé par le logiciel ATHENA, en présentant pour chaque étape technologique le modèle physique utilisé pour cette simulation. L'étude des profils de distribution des porteurs . Nous terminons ce chapitre en regroupant dans un tableau les principaux paramètres technologiques du dispositif simulé par ATHENA. Le dernier chapitre présente les résultats de simulation.