

Chapitre 3

Diffusion dans les semi-conducteurs

3.1. Lois de Fick

La théorie de diffusion comporte deux lois qui sont les lois de Fick.

La première loi de Fick établit que le flux de particules est proportionnel au gradient de concentration.

$$\text{Soit : } \Phi = -D \frac{\partial N}{\partial x}$$

Où,

Φ : est le flux de particules, c'est-à-dire, le débit d'atomes d'additifs par unité de surface et par seconde.

D : est le coefficient de diffusion (qui s'exprime en cm^2/s).

N : est la concentration d'additifs (ou nombre d'atomes par unité de volume).

Le signe (-) indique que les particules se dirigent dans le sens des concentrations décroissantes (*Figure 3.1*).

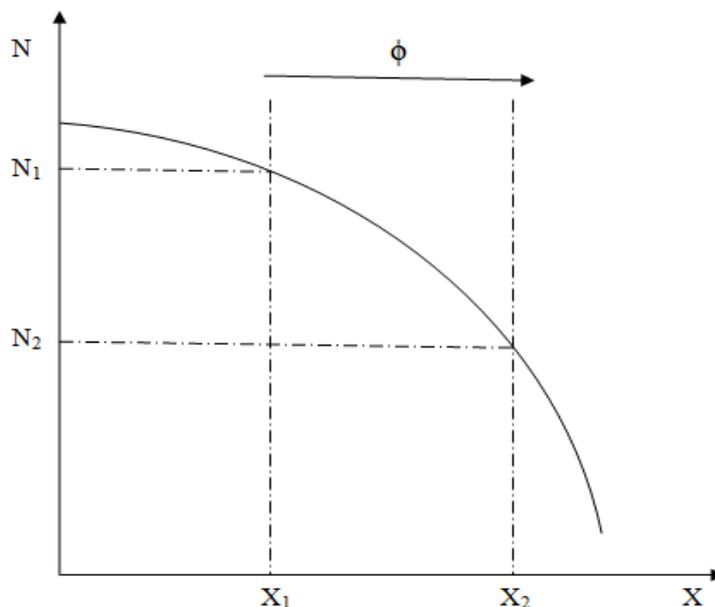


Figure 3.1 : Variation de la concentration d'atomes d'additifs en fonction de la profondeur du semi-conducteur.

La seconde loi de Fick établit, que lors de la traversée par des particules d'une couche mince d'épaisseur dx , la variation du flux entre les deux surfaces limitant la couche est égale à la variation de la concentration dans la couche pendant le temps de traversée (Figure 3.2).

$$\text{Soit, } \frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

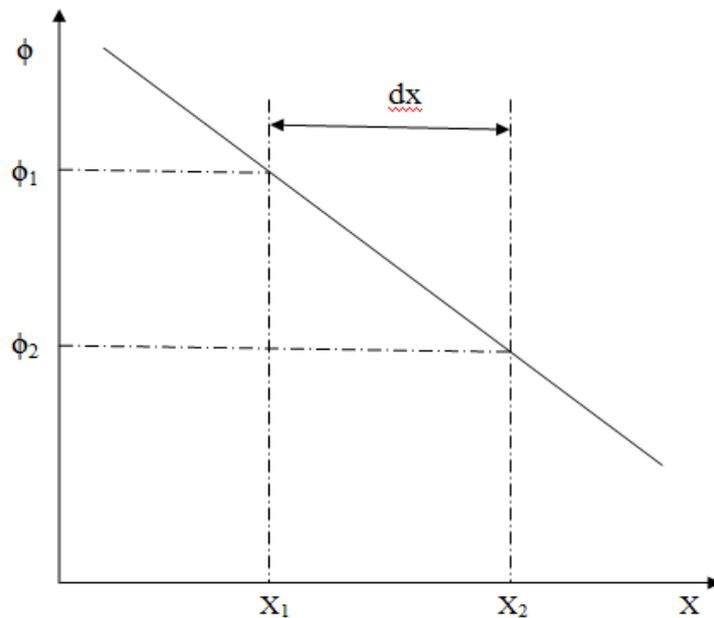


Figure 3.2 : Variation du flux d'atomes d'additifs en fonction de la profondeur du semi-conducteur.

En remplaçant Φ par son expression de la première loi de Fick et en supposant D indépendant de x , l'équation de la seconde loi de Fick, peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$$

Dans la pratique, tout problème de diffusion est défini par les conditions initiales et les conditions aux limites.

A l'instant $t=0$, la concentration a une certaine forme, ce qui nous donne les conditions initiales. De plus, on connaît la géométrie des échantillons, ce qui nous donne les conditions aux limites.

La résolution de la deuxième équation de Fick : $(\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2})$ nous donne la distribution de la concentration en fonction de x et de t (c'est-à-dire la solution du problème de diffusion).

Deux cas peuvent se présenter, la diffusion peut se faire, soit à partir d'une concentration constante ou à partir d'une concentration infiniment mince.

3.2. Diffusion à partir d'une concentration constante

Soit une plaquette de silicium pur dont une face est exposée à un certain volume semi-infini de gaz contenant une concentration uniforme N_0 d'un additif de type N (par exemple du phosphore PH_3) (Figure 3.3).

Le volume de gaz est supposé suffisant pour que l'on puisse admettre que la concentration N_0 reste constante.

L'ensemble (silicium+gaz) est alors chauffé, entraînant la diffusion des atomes de phosphore, du gaz vers le silicium où ils se répartissent avec une concentration décroissante.

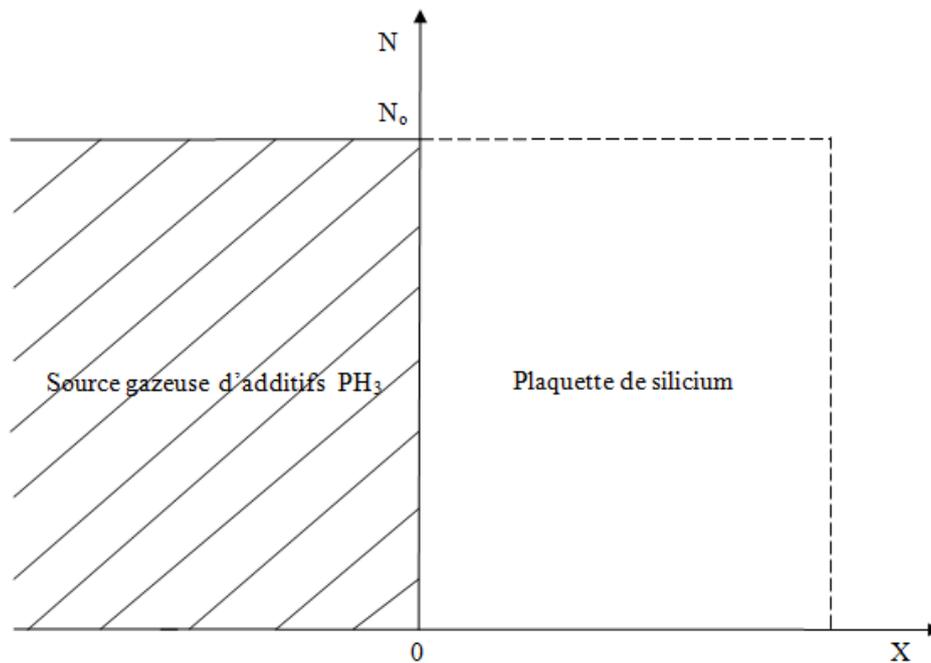


Figure 3.3 : Diffusion des atomes de phosphore d'une source gazeuse PH_3 vers une plaquette de silicium.

Dans le cas d'une diffusion à partir d'une concentration constante, les conditions initiales et les conditions aux limites sont les suivantes :

- Conditions initiales :

$$\text{A } t=0 \begin{cases} N=N_0 & \text{si } x \leq 0 \\ N=0 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

- Conditions aux limites :

$$x \rightarrow -\infty \begin{cases} N=N_0 \\ \frac{\partial N}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (\text{Pas de variation à } -\infty \text{ car } N=N_0=c^{te})$$

$$x \rightarrow +\infty \begin{cases} N=0 \\ \frac{\partial N}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (\text{Pas de variation à } +\infty \text{ car } N=0)$$

La résolution de la deuxième équation de Fick ($\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$) dans ces conditions initiales et aux limites, conduit à la fonction suivante :

$$N(x, t) = \frac{N_0}{2} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{D.t}}} \exp(-y^2) dy \right]$$

Où y est une variable d'intégration.

L'intégrale est connue sous le nom de : fonction d'erreur, ou erf.

$$\text{Soit, } \text{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u \exp(-y^2) dy$$

$$\text{Donc, } \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{D.t}}} \exp(-y^2) dy = \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}}\right)$$

Par suite l'expression de N(x,t) peut s'écrire sous la forme :

$$N(x, t) = \frac{N_0}{2} \left[1 - \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}}\right) \right]$$

$$\text{Ou encore, } N(x, t) = \frac{N_0}{2} \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}}\right)$$

Où erfc : est la fonction d'erreur complémentaire.

$$\text{Par définition, on a : } \text{erf}(0)=0 \quad \Longrightarrow \quad N(0, t) = \frac{N_0}{2}$$

On peut donc écrire : $N(0,t) = \frac{N_0}{2} = N_S$

Où, N_S est la concentration à l'origine (à $x=0$)

Cette concentration N_S ne peut en aucun cas dépasser la solubilité limite.

Nous pourrions donc avoir : $N(x,t) = N_S \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}} \right) \right]$

Ou bien, $N(x,t) = N_S \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}} \right)$

On peut donc en conclure que la diffusion à partir d'une concentration constante conduit à une répartition selon la fonction d'erreur complémentaire (*Figure 3.4*).

La solubilité limite du diffusant à la température T c'est la concentration d'additifs au dessus de laquelle tous les atomes additifs se regroupent en amas d'atomes électriquement inactifs.

La répartition des additifs est définie entièrement par trois paramètres :

- la concentration constante des additifs ;
- le coefficient de diffusion D ;
- la durée de diffusion t .

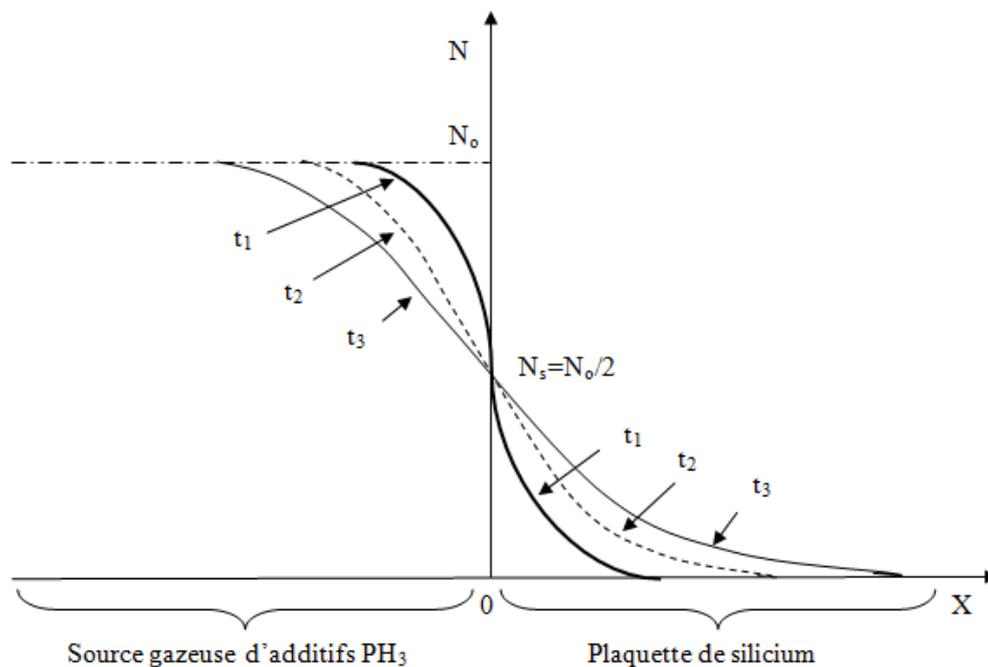


Figure 3.4 : Répartition des additifs dans la plaquette de silicium pour différentes durées de diffusion (Répartition selon la fonction d'erreur complémentaire).

3.3. Diffusion à partir d'une couche infiniment mince

Dans le cas de la diffusion à partir d'une couche infiniment mince, le dopage d'un semi-conducteur se fait en deux étapes :

- Pré-dépôt des additifs dans une faible épaisseur du matériau ;
- redistribution des additifs par diffusion.

En effet, au lieu d'exposer la plaquette de silicium à une source d'additifs à concentration constante, nous pouvons déposer sur une de ses faces une quantité définie Q d'atomes d'additifs par unité de surface, puis on chauffe l'ensemble (*Figure 3.5*).

Les atomes d'additifs vont alors diffuser dans le silicium, mais cette fois la source d'additifs est limitée, et non infinie comme dans le cas précédent.

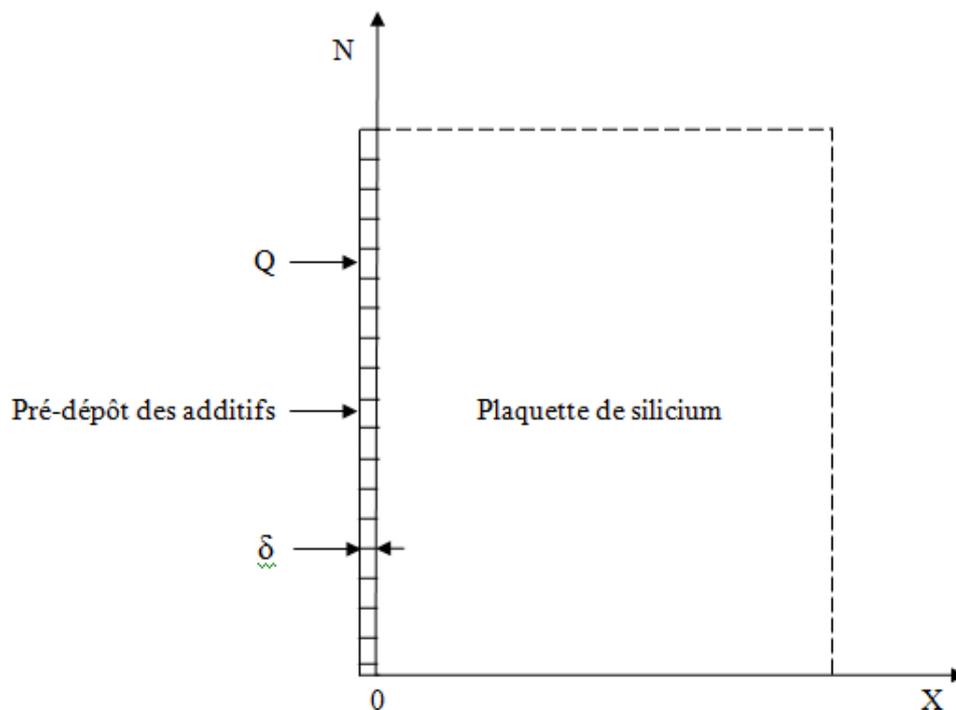


Figure 3.5 : Diffusion des additifs à partir d'une couche infiniment mince vers une plaquette de silicium.

Sur la *figure 3.5*, Q : représente la quantité d'atomes d'additifs par unité de surface et δ : l'épaisseur de la couche du pré-dépôt.

Dans le cas d'une diffusion à partir d'une couche infiniment mince, les conditions initiales et les conditions aux limites sont les suivantes :

- Conditions initiales :

$$\text{A } t=0 \quad \begin{cases} N=0 & \text{si } x \neq 0 \\ N = \frac{Q}{\delta} & \text{si } x=0 \end{cases}$$

- Conditions aux limites :

$$x \rightarrow +\infty \quad \begin{cases} N=0 \\ \frac{\partial N}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (\text{Pas de variation à } +\infty \text{ car } N=0)$$

La résolution de la deuxième équation de Fick ($\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$) dans ces conditions initiales et aux limites, conduit à la fonction suivante :

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 D t}\right)$$

$$\text{A } x=0, \quad N(0, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi D t}}$$

$$\text{On peut donc écrire : } N(0, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi D t}} = N_s$$

Où, N_s est la concentration à l'origine (à $x=0$)

Cette concentration N_s décroît lorsque la durée de diffusion t augmente.

Par ailleurs, cette concentration N_s ne peut en aucun cas dépasser la solubilité limite.

$$\text{Nous pourrions donc avoir : } N(x, t) = N_s \exp\left(-\frac{x^2}{4 D t}\right)$$

On peut donc en conclure que la diffusion à partir d'une couche infiniment mince conduit à une répartition gaussienne (*Figure 3.6*).

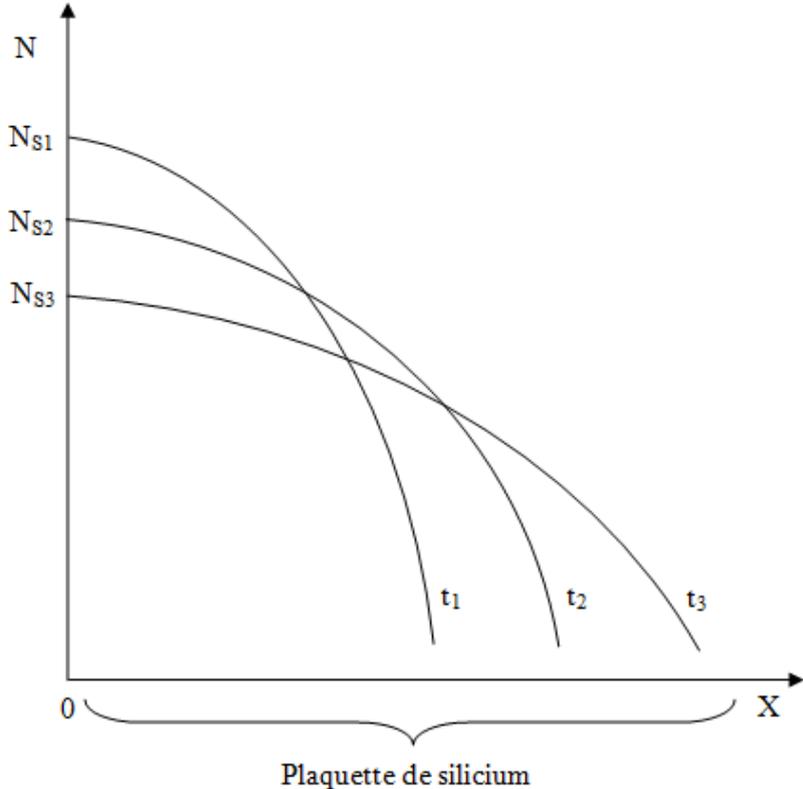


Figure 3.6 : Répartition des additifs dans la plaquette de silicium pour différentes durées de diffusion (Répartition selon une gaussienne).