

Recristallisation du silicium dopé par faisceau laser pulsé : Etude numérique du couplage champ thermique et diffusion du bore en extrême surface (< 50 nm)

Mohamed DARIF¹, Nadjib SEMMAR^{*1}, Eric MILLON¹, Djaffar SEMMAR²

¹Groupe de Recherche sur l'Energétique des Milieux Ionisés, UMR-6606, CNRS-Université d'Orléans
14 rue d'Issoudun, BP 6744, 45067 Orléans Cedex 2, France

²Université Saad Dahleb, Route de Soumaa, BP 270, Blida, Algérie
(*auteur correspondant : nadjib.semmar@univ-orleans.fr)

Résumé – Dans ce travail les résultats numériques de la simulation d'un traitement laser de recristallisation du silicium dopé, en utilisant l'outil Comsol Multiphysics®, sont illustrés et discutés. Un profil laser 'Top-Hat' à 248 nm est utilisé pour le procédé de recristallisation, et donc de l'activation des dopants (bore), en extrême surface sur des profondeurs de l'ordre de 50 nm. Les résultats concernent essentiellement la cinétique de fusion/recristallisation : Calcul du champ de température instationnaire, la durée des phases de fusion, la profondeur des zones fondues et finalement la variation du profil de concentration des dopants en régime de fusion (phase Si liquide). Des analyses physico-chimiques par spectroscopie de masse 'TOF-SIMS' et des mesures par réflectométrie résolue en temps 'RRT' sont utilisées pour valider respectivement la distribution des dopants en surface (avant et après activation) et les profondeurs de fusion/recristallisation.

1. Introduction

Les simulations numériques sont indispensables pour prédire le comportement des systèmes physiques étudiés, pour mieux interpréter et analyser les résultats expérimentaux obtenus et optimiser ainsi un procédé de fabrication comme les procédés thermiques lasers (LTP).

Dans cette partie nous présentons un calcul ayant pour objectif de décrire l'effet du rayonnement laser UV sur la surface de substrats de silicium cristallin, et de silicium préamorphisé par implantation ionique du germanium (PAI). Ce travail de simulation a été réalisé en utilisant le logiciel de calcul par éléments finis COMSOL Multiphysics®. Nous allons ainsi déterminer l'influence des paramètres laser (longueur d'onde λ , durée d'impulsion τ) sur la cinétique de fusion du silicium cristallin (c-Si) et du silicium préamorphisé (a-Si). L'objectif est de présenter une modélisation d'un impact laser lors d'une séquence de chauffage et de refroidissement. Un modèle thermique 1D permet de mettre en évidence les grandeurs physiques importantes (conductivité thermique, chaleur spécifique, ...) en fonction des phases du Si (cristallin, amorphe, liquide) et de comprendre ainsi un certain nombre de résultats expérimentaux obtenus par réflectométrie résolue en temps (TRR) [1].

2. Modélisation sous Comsol

Ce modèle repose sur la résolution de l'équation de la chaleur avec un terme source (G) qui tient compte de l'énergie apportée par l'irradiation laser ainsi que celle consommée par une transition de phase (puit de chaleur). Considérons le cas de l'interaction d'un faisceau laser d'une densité

surfacique d'énergie (fluence) uniforme (profil top hat) avec une surface de silicium préamorphisé par implantation ionique (a-Si) d'une couche amorphe de 20 nm et avec du silicium cristallin (c-Si) homogène et semi-infini [2]. Cette situation correspond au cas où les dimensions de la zone traitée par le laser sont bien plus grandes que la zone du matériau affectée thermiquement [3].

2.1. Hypothèses de travail et approximations

L'utilisation du modèle thermique pour calculer l'évolution spatio-temporelle de la température d'un matériau soumis à une irradiation laser nécessite de faire un certain nombre d'hypothèses qu'il convient de vérifier :

- Le faisceau laser est homogène et il agit comme une source de chaleur pulsée.
- Le rayonnement UV est absorbé en volume suivant la loi de Beer-Lambert.
- La chaleur diffuse uniquement dans l'épaisseur du matériau (modèle essentiellement 1D).
- Les pertes de chaleur par rayonnement et par convection sont négligeables sur le volume irradié.

Comme la durée de l'impulsion laser (25 à 30 ns pour les lasers à excimère que nous avons utilisés) est beaucoup plus longue que le temps de relaxation thermique des électrons ($\sim 10^{-13}$ s), nous pouvons considérer que le faisceau laser absorbé agit comme une source de chaleur distribuée sur une certaine profondeur selon la loi de Beer-Lambert (Fig.1).

Pour supposer que la chaleur ne diffuse que dans l'épaisseur du matériau, il faut que la diffusion latérale de la chaleur (diffusion vers l'extérieure de la surface chauffée) soit négligeable par rapport à la diffusion en profondeur. Cette hypothèse sera vérifiée si la dimension de la surface irradiée est grande devant la dimension de la longueur de diffusion thermique. Dans notre cas la surface irradiée est d'environ 4 mm², et la profondeur de diffusion thermique de l'ordre de 1 μ m [3], l'hypothèse est largement validée. Enfin, une estimation rapide des pertes thermiques par rayonnement et convection à des températures supérieures à la température de fusion du Si (2000 K) montre que ces pertes peuvent être réellement négligées par rapport aux rayonnement UV incident [4].

2.2. Couplage thermodiffusion et système d'équations

Afin d'étudier la distribution des dopants (bore) dans les substrats de Si recristallisés, il est nécessaire de réaliser le calcul en couplant les équations de la chaleur à celle de diffusion. Le formalisme mathématique utilisé sous Comsol est résumé par le système d'équations donné ci-dessous et qui correspond au volume de travail illustré sur la figure 2 (sous domaine 1 et 2) :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(k \nabla T) = Gt \quad \text{Avec} \quad Gt(y, t) = I(t) \cdot (1 - R(T)) \cdot \frac{e^{-\frac{y}{\delta_i}}}{\delta_i} - \frac{\rho_L L_F}{\tau} \quad (1)$$

et

$$\frac{\partial C(y, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[D(T) \frac{\partial C(y, t)}{\partial y} \right] \quad \text{Avec} \quad D(T) = D_o (\exp - Ea / kT) \quad (2)$$

Les conditions aux limites thermiques correspondant à la figure 2 sont respectivement :

$$\begin{aligned} \vec{n} \cdot (k \nabla T) &= h(T_{\text{inf}} - T) + \sigma \cdot \varepsilon (T_{\text{amb}}^4 - T^4) \quad \text{Pour la frontière 5 en dehors de la zone irradiée} \\ \vec{n} \cdot (k \nabla T) &= 0 \quad \text{Pour les frontières 1, 2, 3, 6 et 7} \\ \vec{n} \cdot (k_1 \nabla T_1 - k_2 \nabla T_2) &= 0 \quad \text{Pour l'interface 4 entre les sous domaines 1 et 2.} \end{aligned} \quad (3)$$

Notons également que la prise en charge de la fusion intervient ici dans le terme source ($\frac{\rho_L L_F}{\tau}$) uniquement lorsque la température de surface devient égale ou supérieure à la température de fusion

T_f . Pour ce qui concerne les conditions aux limites de l'équation (2), le nombre d'atomes de bore global implanté initialement se conserve (système fermé) pendant le traitement laser. Il s'agit donc d'évaluer l'évolution temporelle de la concentration en bore. Celle-ci dépend en toute évidence du coefficient de diffusion $D(T)$ dans le cas d'une matrice de silicium [5]. Typiquement dans la relation (2), D_0 et Ea (énergie de migration de l'espèce diffusante) sont respectivement de $7.87 \text{ cm}^2/\text{s}$, et 3.75 eV .

Prise en charge du changement de phase

La prise en compte du changement de phase et des propriétés physiques du substrat à l'état solide et liquide peut être réalisée en utilisant soit une fonction 'Heaviside', soit une fonction d'interpolation. Nous avons utilisé ici, une fonction Heaviside lissée (deux fois dérivable) [6], notée flc . La syntaxe utilisée, dans le cas de la variation de la propriété physique « x » avec la température, est la suivante :

$$x = x_s + (x_l - x_s) \cdot flc.(T - T_f, \Delta T) \quad (4)$$

où x_s et x_l sont respectivement les valeurs de la propriété physique « x » à l'état solide et à l'état liquide, T_f la température de fusion du matériau. Le terme ΔT définit la demi-largeur de l'intervalle sur lequel la fonction change de valeur (Fig.3). La fonction flc vaut ainsi zéro (0) lorsque $T - T_f > \Delta T$. La transition est lissée lorsque $T - T_f < \Delta T$ et la fonction flc prend la valeur un (1), tenant compte ainsi du changement de phase du substrat.

2.3. Maillage des sous-domaines 1 et 2

Comme indiqué sur le figure 4, nous avons choisi deux types de mailles pour les deux sous-domaines considérés. Le sous-domaine 1 qui représente la phase préamorphisé du Si est discrétisé avec des mailles rectangulaires de tailles maximales inférieures à 1 nm jusqu'à l'interface. Ensuite des mailles également rectangulaires de tailles maximales inférieures à 100 nm (loin de la zone de perturbation et de l'interface). Ces tailles de mailles sont justifiées par le fait que l'absorption des rayons UV se produit sur les 6 premier nm, et que la zone préamorphisée existe physiquement sur une profondeur de 20 nm comme indiqué sur la figure 5.

3. Résultats numériques

Les principaux résultats concernent les profils de la température de surface à différents instants après un tir laser UV de 27 ns. La figure 6 illustre bien la présence de températures supérieures à la température de fusion du Si amorphe (1420 K) pour les instants 20, 30 et 40 ns. Notons également une augmentation rapide de la température de surface (de 0.5 à 20 ns), et une phase de relaxation beaucoup plus 'lente' qui présente encore une température de surface supérieure à 400 K à 200 ns. La figure 7 donne un résultats important quand à la validation de la simulation, réalisée sous environnement Comsol, par spectroscopie de temps de vol 'TOF-SIMS'. Ces résultats concernent uniquement le Si préamorphisé (a-Si) sur une couche de Si cristallin (c-Si). Enfin, en injectant dans ce code de simulation le profil de concentration du bore en profondeur dans le substrat de Si avant le recuit laser (fig.8), on obtient un premier résultat sur l'évolution du profil de concentration en fonction du temps dans la figure 9. Celui-ci bien que non calibré encore, montre bien l'évolution du profil de concentration qui tend à présenter un plateau au bout de quelques centaines de nanosecondes pour former une jonction activée.

4. Conclusion

Ce dernier résultat (fig.9) basé sur les lois de diffusion classique (Fick) avec prise en compte de la thermodépendance du coefficient de diffusion est actuellement en cours de validation pour les phases après recuit laser par analyse spectroscopie TOF-SIMS. Il doit permettre à terme de disposer d'un outil de prédiction de la profondeur des jonctions ultraminces activées par les procédés LTP en général.

Références

- [1] N. Semmar, J. Martan, O. Cibulka, C. Leborgne, Actes SFT 2006, pp 875-880.
- [2] M. Darif, N. Semmar, Actes (CD-ROM) JITH, Djerba 2009.
- [3] J. Martan, N. Semmar, and O. Cibulka, *Journal of Applied Physics* 103, 2008.
- [4] Martin von Allmen. Laser-Beam interactions with materials, Springer Series in Materials Science 2 (1987), p. 13.
- [5] M. Hernandez, *Procédé laser de réalisation de jonctions ultra-minces pour la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Université Paris sud, 2005.
- [6] A-F. Soveja, *Modélisation du processus de texturation par faisceau laser: approche expérimentale et numérique*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne, 2007.
- [7] D. Bauërle, Laser processing and Chemistry, Springer, 1996.
- [8] E.Fogarassy, C.Fuchs, S. De Unamuno, and P. Siffert, *App. Surf. Science*, 43 :316, 1989.
- [9] S. De Unamuno and E. Fogarassy, *App. Surf. Science* 36, 1989
- [10] V. Vervish, Y. Larmande, P. Delaporte, *App. Surf. Science* 255, 2009.

Liste des Tables et Figures

Paramètres	Silicium cristallin (c-Si)	Silicium amorphe (a-Si)	Silicium liquide (l-Si)
Masse volumique ρ (Kg/m ³)	2320	2200	2520
Température de fusion T_f (K)	1690	1420	-
Chaleur latente de fusion L_f (J/g)	1797	1317	
Chaleur spécifique C_p (J/g.K)	T<300K: 0,18e4,5.10-3.T T≥300: 0,694e2,375.10-4.T	0,184e0,45.10-2.T- 0,79.10-2+1,016.10-4.T	1.045
Conductivité thermique k (W/cm.K)	T<1200K: 1521T-1,226 T≥1200K: 8,99T-0,502	0.018	0.5 +29,3.10-5(T-Tf)
Réfectivité de surface R (à 248 nm)	0.66+1.8.10 ⁻⁵ *T	0.55	0.685
Coefficient d'absorption α (cm-1) à 248 nm	T<1000K: 1.7*106 T≥1000K: 1.8*106	1.6*106	1.56*106

Table 1. Paramètres thermiques et optiques du silicium cristallin, amorphe et liquide utilisés dans nos simulations. Données extraites des références [7-9].

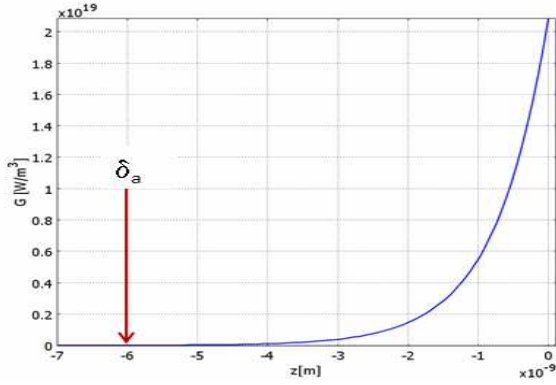


Figure 1. Distribution en profondeur (δ_a) de la densité de puissance laser absorbée.

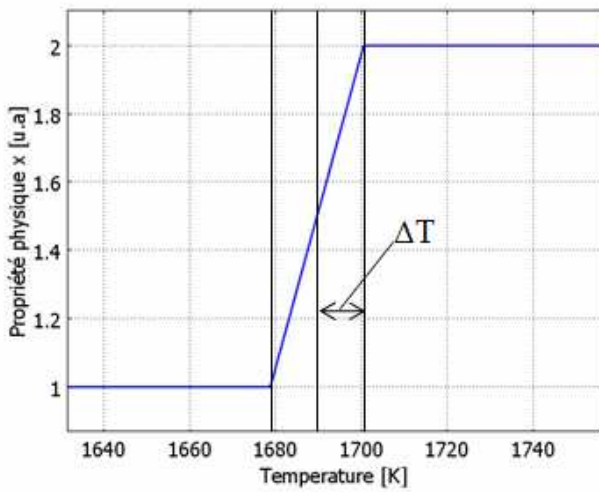


Figure 3. Evolution de la propriété physique « x » avec la fonction flc

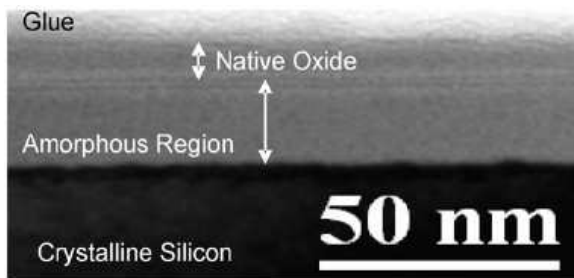


Figure 5. Photo MEB de l'extrême surface d'un échantillon de Si dopé en bore [10]

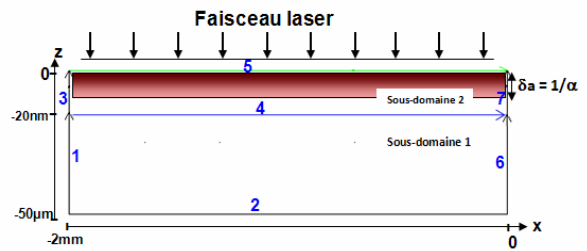


Figure 2. Vue schématique des sous-domaines de calcul (1 et 2) et des frontières.

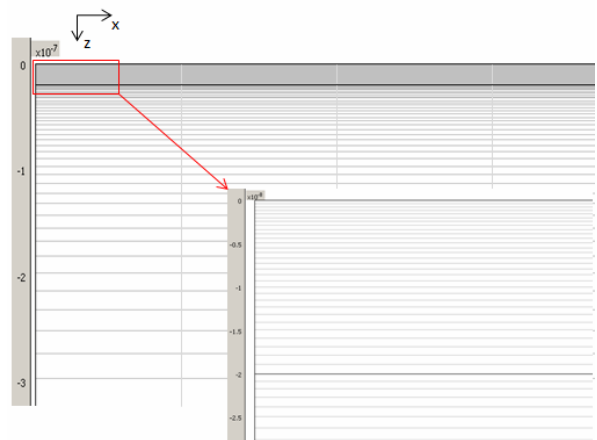


Figure 4. Géométrie du maillage utilisé dans le modèle de simulation

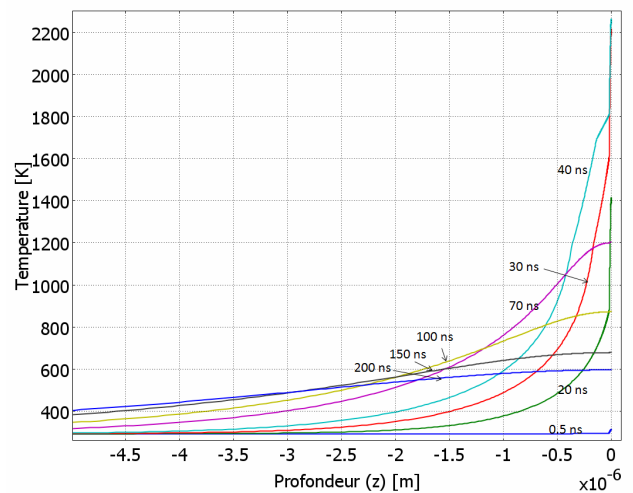


Figure 6. Evolution de la température en profondeur à différents instants lors d'un recuit par laser KrF ($\lambda=248$ nm, $\tau=27$ ns, $F=800$ mJ/cm²) d'un échantillon de Si préamorphisé

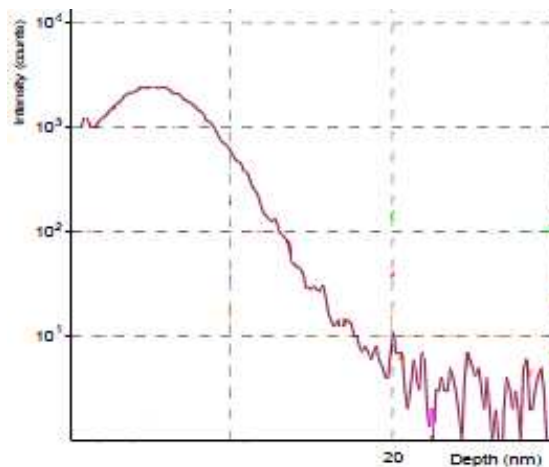
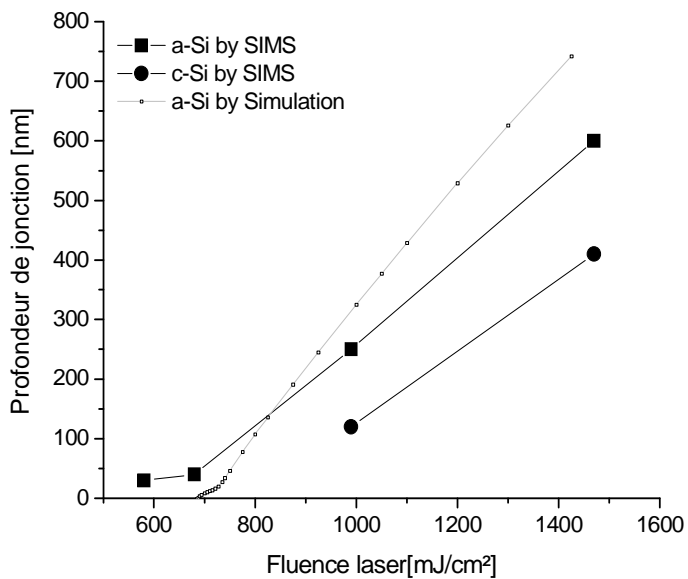


Figure 7. Comparaison résultats expérimentaux (TOF-SIMS) et simulation de la zone fondue en fonction de la fluence laser pour a-Si et c-Si

Figure 8. Profil de concentration du bore sur 20 nm avant traitement d'activation par laser

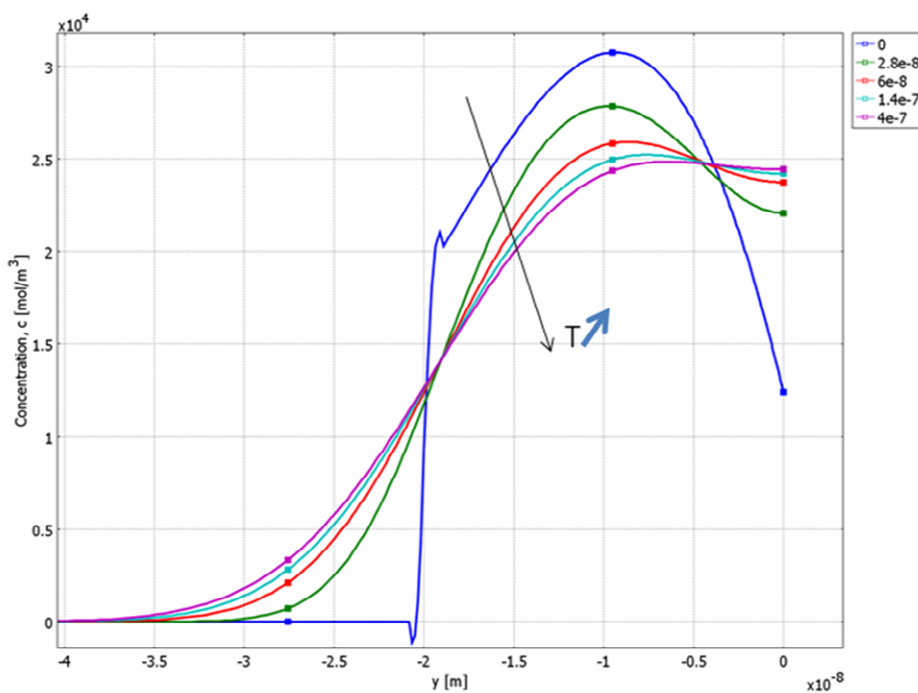


Figure 9. Evolution du profil de concentration du bore sur 20 nm avant traitement ($t = 0$) et après traitement LTP. Formation d'un plateau à partir de $t = 400$ ns