

I- Introduction

La simulation numérique est un moyen performant d'analyse et de compréhension des phénomènes physiques.

Les modèles proposés sont parfois complexes et ne présentant, en général, pas de solutions analytiques, donc des méthodes numériques doivent être employées. Elles permettent, soit d'orienter le choix des approximations dans les approches analytiques, soit d'obtenir des résultats directement comparables à ceux de l'expérimentation.

L'objectif de ce chapitre est de résoudre les équations de diffusion en proposant les méthodes décrites dans la littérature, et de proposer un modèle de simulation de la diffusion du phosphore dans le silicium cristallin en se basant sur les modèles déjà décrits dans les références.

A la fin, et en s'appuyant principalement sur l'effet du changement des différents paramètres de la diffusion du phosphore dans le silicium, nous verrons l'effet de cette variation sur les performances d'une cellule solaire conventionnelle.

II- Résolution de l'équation de diffusion

Dans un premier paragraphe nous rappellerons tout d'abord le cas simple où l'on considère le coefficient de diffusion constant, ce qui conduit à une solution analytique.

Nous exposerons ensuite la méthode numérique que nous avons adoptée pour traiter le cas général où le coefficient de diffusion est quelconque,

Dans les deux cas, nous expliciterons les méthodes qui permettent de déterminer les paramètres de l'équation et notamment les variations du coefficient de diffusion en fonction de la concentration

II-1. Cas d'un coefficient de diffusion constant

Dans l'hypothèse où le coefficient de diffusion est indépendant de la concentration en impuretés, l'équation de diffusion et la condition d'interface sont données par les relations :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{V-1}$$

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = g[C(0,t) - C_s] \quad \text{V-2}$$

Le fait que l'épaisseur des couches diffusées est toujours très faible devant l'épaisseur totale de l'échantillon de silicium, justifie la deuxième condition aux limites suivante :

$$C(x, t) \rightarrow 0 \quad x \rightarrow \infty \quad t \geq 0 \quad \text{V-3}$$

L'échantillon de silicium étant initialement dépourvu d'impuretés de l'espèce diffusante, la condition initiale est :

$$C(x, 0) = 0 \quad \text{V-4}$$

L'intégration de l'équation (V-1) soumise aux conditions (V-2), (V-3) et (V-4) conduit à la solution

$$\frac{C(x,t)}{C_s} = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) - \exp(gx + g^2Dt) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + g\sqrt{Dt}\right) \quad \text{V-5}$$

L'expression (V-5) est la somme de deux termes dont un seul fait intervenir la condition d'interface sous la forme du paramètre sans dimension $g(Dt)^{1/2}$. Ce terme, partie de la solution, est une fonction décroissante de $g(Dt)^{1/2}$. Il représente donc un phénomène transitoire lié à la condition d'interface (V-2).

Lorsque $g(Dt)^{1/2} > 10$, l'équation (V-5) est pratiquement égale à la forme asymptotique suivante : [73]

$$C(x,t) = C_s \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad \text{V-6}$$

Dans deux cas l'expression générale (V-5) peut se confondre avec la forme asymptotique (V-6) :

- Considérer des temps de diffusion tels que :

$$t > 100 (g^2/D) \quad \text{V-7}$$
- Considérer que le paramètre d'interface g tend vers l'infini, soit :

$$C(0, t) = C_s \quad \text{quel que soit } t$$

II-2. Résistance de couche et concentration en surface

Si l'on suppose des profils suffisamment dopés pour que les variations de mobilité ainsi que la contribution des impuretés du substrat puissent être négligeables, la résistance de couche obéit à la relation :

$$\frac{1}{R_{\square}(t)} = q\bar{\mu} \int_0^{\infty} C(x,t) dx \quad \text{V-8}$$

Soit en utilisant la solution générale (V-5) :

$$\frac{1}{R_{\square}(t)} = \frac{C_s q \bar{\mu}}{g} \left[\exp(g^2 D t) \operatorname{erfc}(g \sqrt{D t}) + 2 g \sqrt{\frac{D t}{\pi}} - 1 \right] \quad \text{V-9}$$

Lorsque $g(Dt)^{1/2} > 10$, l'expression (V-9) tend vers la forme asymptotique suivante :

$$\frac{1}{R_{\square}(t)} = \frac{2 q \bar{\mu} C_s}{\sqrt{\pi}} \sqrt{D t} - \frac{q \bar{\mu} C_s}{g} \quad \text{V-10}$$

Expérimentalement, une diminution de la résistance est obtenue avec la variation du temps de la redistribution des impuretés. En effet, il a été constaté une dégradation de la résistance de couche lorsque le temps augmente. [55]

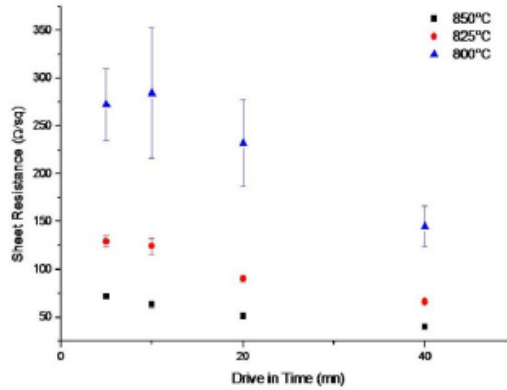


Fig.V.1 : variation de la résistance de couche en fonction du temps de drive-in pour trois différentes températures. [55]

Il est possible de déterminer l'ensemble des paramètres D , g et C si l'on possède les valeurs de résistance de couche R_{\square} et les profondeurs de jonction x_j pour différents temps de diffusion à même température.

Si on trace, les variations de $1/R_{\square}$ en fonction de la racine carrée du temps, on obtient une droite aux caractéristiques suivantes :

- Pente :

$$P_{R_{\square}} = 2 q \bar{\mu} C_s (D/\pi)^{1/2} \quad \text{V-11}$$

- Abscisse à l'origine

$$\sqrt{\tau} = \frac{\sqrt{\pi}}{2 g \sqrt{D}} \quad -12$$

Par ailleurs, compte tenu de la relation (V-5), la concentration en surface est donnée par la relation :

$$\frac{C(0,t)}{C_s} = 1 - \exp(g^2 D t) \operatorname{erfc}(g \sqrt{D t}) \quad \text{V-13}$$

On voit que pour des temps suffisamment grands : $C(0, t) \rightarrow C_s$

D'autre part, si on suppose que la forme des profils de diffusion est voisine d'une fonction d'erreur complémentaire, la relation (V-8) devient :

$$\frac{1}{R_{\square}(t)} = C(0, t) 2\sqrt{D t} \int_0^{\infty} q \bar{\mu} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D t}}\right) d\left(\frac{x}{2\sqrt{D t}}\right) \quad \text{V-14}$$

Soit :

$$\frac{1}{R_{\square}(t)} = 2\sqrt{\frac{D}{\pi}} \sqrt{t} C(0, t) q \bar{\mu}$$

En dérivant l'équation (V-14) par rapport à $(t)^{1/2}$ la pente de l'asymptote s'écrit :

$$P_{R_{\square}} = 2 q \bar{\mu} \sqrt{\frac{D}{\pi}} \left[C(0, t) + \sqrt{t} \frac{dC(0, \sqrt{t})}{d\sqrt{t}} \right] \quad \text{V-15}$$

L'intégration de cette équation, compte tenu de la relation (V-11) et de la condition initiale $C(0, t) = 0$ pour $t = \tau$ conduit à :

$$C(0, t) = C_s \left(1 - \sqrt{\frac{\tau}{t}} \right) \quad \text{V-16}$$

II-3. Cas général - Analyse de Boltzman –Matano

Dans le cas général, où le coefficient de diffusion est une fonction de la concentration des impuretés, la méthode de résolution est beaucoup plus compliquée, et le recours à la modélisation et calcul numérique s'avère, obligatoire.

Des organigrammes de résolution existent depuis longtemps [72, page 65], mais l'analyse par modèle d'avère plus adéquate pour ce genre de problèmes.

Lorsque D dépend de la concentration ou plus généralement varie avec les coordonnées d'espace ou de temps, les équations établies par et pour le cas du coefficient de diffusion constant ne sont plus valables, et l'équation de continuité générale (V-18) ne peut plus être intégrée simplement :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad \text{V-17}$$

Cependant, une estimation de la variation du coefficient de diffusion avec C peut être obtenue à partir du profil de diffusion expérimental par la méthode de Boltzman-Matano : par le changement de variable $\lambda = x/(t)^{1/2}$, l'équation aux dérivées partielles (V-17) se transforme aisément en une équation différentielle simple :

$$\lambda \frac{dC}{d\lambda} = -2 \frac{d}{d\lambda} \left(D \frac{dC}{d\lambda} \right) \quad \text{V-18}$$

Si les conditions aux limites s'expriment simplement en fonction de la seule variable λ (ce qui est le cas par exemple pour une diffusion à concentration superficielle constante, mais pas de la redistribution d'un film mince ou d'une gaussienne), une double intégration conduit à la relation suivante :

$$D_{(C^*)} = -\frac{1}{2t} \frac{\int_0^{C^*} x dC}{\left(\frac{dC}{dx}\right)_{C^*}} \quad \text{V-19}$$

Comme on le constate sur la figure (V.2), le numérateur de cette expression est l'aire comprise entre le profil $C(x,t)$, l'axe des x et la droite $C=C^*$, tandis que le dénominateur est la tangente au profil au point $C=C^*$. Cette interprétation géométrique de la relation (V-19) permet donc la détermination de D par des moyens graphiques à partir du profil expérimental.

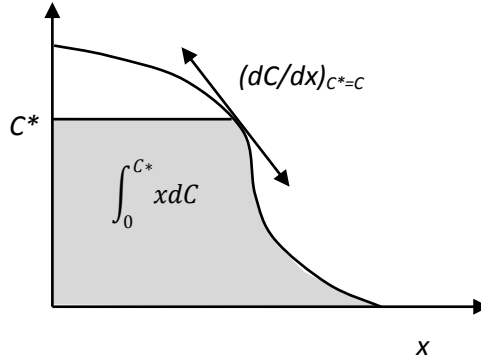


Fig. V.2 : Analyse de Boltzman-Matano

III- Intérêt des outils de simulation

Les outils de simulation des procédés de fabrication peuvent fournir une aide précieuse et un apport significatif à la diminution des coûts et des temps de développement. Ainsi, les différents effets physiques engendrés peuvent être analysés plus rapidement et plus finement au cours de la simulation sur ordinateur. Pour cela, les logiciels de simulation des procédés de fabrication doivent combiner à la fois la connaissance des phénomènes physiques intervenant dans les étapes technologiques, les algorithmes avancés de maillage et les solveurs performants indispensables pour ce type d'outils. Manifestement, ces programmes de simulation technologique n'ont pas atteint une maturité et une sophistication suffisantes pour totalement abandonner les essais expérimentaux mais ils sont devenus le complément indispensable à tout avancement dans le développement de la nouvelle génération de l'industrie.

Parmi les procédés de fabrication, on distingue d'une part les étapes structurelles où l'on façonne la géométrie d'un dispositif et d'autre part les étapes correspondant aux procédés thermiques et de dopage, où l'on manipule les profils d'impuretés, l'étape d'oxydation, qui permet de générer une couche isolante de SiO_2 qui intervient sur le dopage, ...

L'ensemble de ces étapes peut être étudiée par simulation. D'un point de vue industriel, elle est incontournable car des expériences répétées peuvent s'avérer très coûteuses. La pertinence des résultats de simulation, cependant, dépendra intimement des modèles physiques utilisés et une précision accrue implique également un temps de calcul plus important. Toutefois la fiabilité des simulations est renforcée par la capacité de cette méthode à s'imbriquer avec les autres: paramètres provenant de calculs ab-initio ou calibrés sur données expérimentales en un ensemble complet et cohérent de modèles représentant de façon fiable les données expérimentales disponibles. Nous introduirons dans le paragraphe suivant quelques exemples de simulateurs de procédé de fabrication.

III-1. Revue de simulateurs de diffusion des impuretés

Pour simuler le profil de dopant et de défauts, il existe plusieurs approches qui ont toutes leurs avantages et leurs inconvénients, citons à titre d'exemple :

Athena de Silvaco :

C'est un simulateur de procédés qui permet de modéliser les différentes étapes de la fabrication des composants électroniques comme l'implantation ionique, la diffusion, la gravure, les dépôts, la lithographie... et la majorité des étapes des procédés de fabrication peut être simulées.

Il est aussi bien adapté aux technologies actuellement en production qu'à celles de demain grâce à une base de données de modèles et des programmes régulièrement remis à jour afin d'être le plus prédictif possible.

- Sentaurus Process :

C'est un simulateur de procédés développé par Synopsys®. Il réalise des simulations 1D (unidimensionnelle), 2D (bidimensionnelle) et 3D (tridimensionnelle) et est particulièrement approprié pour le silicium et les semiconducteurs. Il utilise un langage d'écriture Alagator qui permet à chaque utilisateur de créer sa propre simulation avec le choix des équations et des modèles, à partir d'une base commune.

Pour ce qui nous concerne, nous avons opté pour Athena de Silvaco®, vu sa disponibilité au niveau de l'URMER, ainsi que sa facilité d'utilisation.

IV- Modèle général de la diffusion des dopants dans le silicium

VI-1. Modèle de diffusion dans ATHENA

La diffusion des impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels structuraux du silicium. Il existe de nombreux modèles sur ce sujet [71], chacun ayant plus ou moins axé son développement sur la physique du problème.

Le modèle de diffusion dans ATHENA décrit comment les profils de diffusion des dopants sont redistribués après un traitement thermique dû au gradient de concentration et aux champs électriques internes.

La diffusion des dopants dans ATHENA, repose sur un grand nombre de modèles spécifiques. Les trois principaux sont les suivants :

- Le modèle de diffusion de Fermi (The Fermi diffusion model).
- Le modèle de diffusion bidimensionnelle (The two dimensional diffusion model).
- Le modèle de diffusion complet (The fully coupled diffusion model).

Le modèle intégré dans ATHENA est l'extension naturelle de chacun de ces trois modèles, dans le sens où le modèle de Fermi est inclus dans le modèle bidimensionnel, qui est à son tour inclus dans le modèle de diffusion complet. Les deux principales différences significatives entre eux sont la façon dont les défauts ponctuels sont présentés et traités tout au long de la simulation et comment la diffusivité des dopants est formulée.

Les trois modèles sont réunis autour de l'idée qu'aucun dopant ne peut diffuser seul, il doit mettre en jeu un défaut ponctuel (lacune ou interstice), et diffuser selon la paire dopant-défaut.

Cependant, on doit savoir que l'interface gaz/solide et solide/solide ont été strictement modélisés dans ATHENA.

La définition mathématique d'un modèle de diffusion doit prendre en considération, pour chaque impureté :

- L'équation de diffusion.
- Un ou plusieurs termes du flux.
- Des conditions initiales et aux frontières.

Dans le cas de la diffusion dans les semiconducteurs, nous avons besoin d'un ensemble d'équations pour chaque dopant présent et pour chaque type de défauts ponctuels. L'équation de continuité des dopants est en fait la même pour les paires dopants-défauts.

IV-2. Modèle de diffusion avancée (Advanced Diffusion Models)

Le nouveau modèle de la diffusion des dopants dans ATHENA est nommé PLS. Il est développé en collaboration avec CNRS-Phase (Strasbourg, France), CEA-LETI (Grenoble, France) et SILVACO®. Il est mis à jour avec les modèles physiques actuels et contient seulement les paramètres physiques. Il consiste trois parties :

- Le modèle de diffusion classique (classical dopant diffusion (CDD) model) ;
- Le modèle des clusters interstitiels (interstitials clusters (IC) model) ;
- Et le modèle des clusters dopants-défauts (the model of mixed dopant-defect clustering (DDC)).

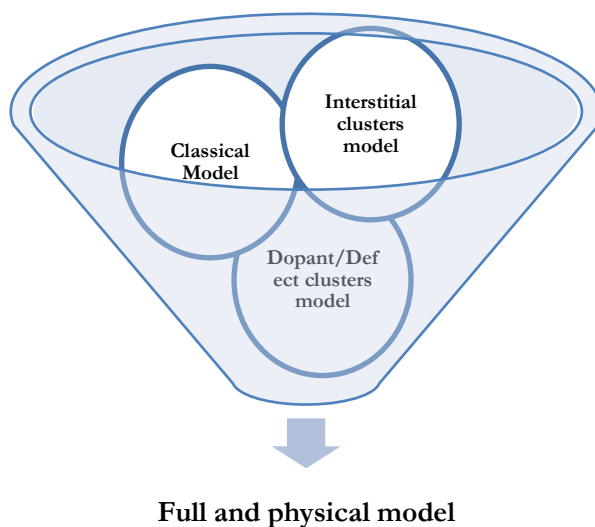


Fig. V.3 : Principe du modèle de diffusion PLS de Athena

Ce modèle est différent du modèle de diffusion complet, et il comporte les points importants suivants :

- La diffusion des dopants est assistée par les lacunes (V) et les auto-interstitiels (I). Ces défauts ponctuels existent suivant différents états de charges et leur concentration dépend de la position du niveau de Fermi.
- Les lacunes et auto-interstices ont de fortes énergies d'attraction avec les atomes des dopants et par conséquent, ils diffusent ensemble. Dans le modèle PLS, à haute concentration des dopants, la concentration de ces paires n'est considérée comme négligeable en respectant les dopants substitutionnels actifs.

- Le flux de chaque espèce diffusante (paires dopant-défaut et défauts libres) inclus le terme « drift » causé par l'action du champ électrique induit, dû au gradient des dopants.
- Les lacunes et auto-interstices ne sont considérés en équilibre local mais, peuvent être annulé par la recombinaison bi-moléculaire, donc, le taux de la recombinaison (I)-(V) est fortement poussé à haute concentration des dopants.

V- Simulation du profil de diffusion du phosphore dans le silicium

Le profil de diffusion du phosphore dans le silicium tracé sous Matlab® nous a permis de renforcer ce que nous avons pu réunir dans la littérature concernant l'allure de ce profil de diffusion.

Néanmoins, Matlab® n'est pas un logiciel de simulation complet et ne permet pas de simuler totalement la distribution des impuretés dans le silicium cristallin. Pour cela, nous avons utilisé le logiciel Silvaco® basé sur des modèles physiques qui nous a permis de simuler d'une façon très proche de la réalité, la diffusion du phosphore dans le silicium.

Retrouvons notre profil expérimental de diffusion du phosphore dans le silicium à 40ohm/sq, réalisé sous Silvaco :

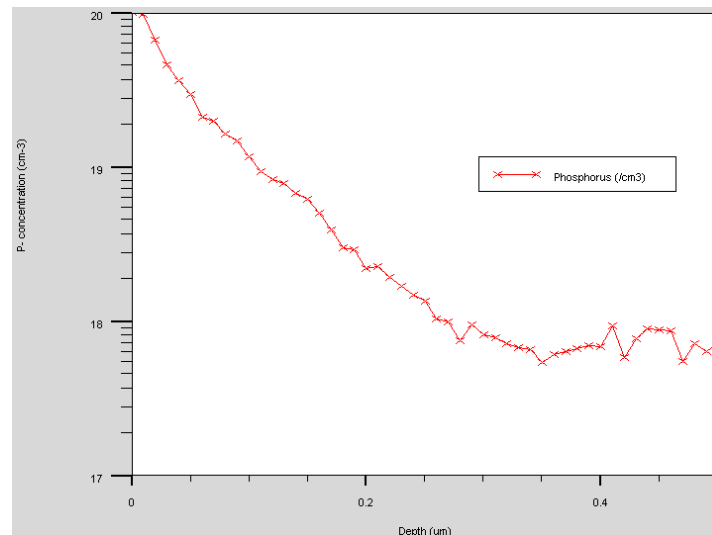


Fig.V.4 : Profil de diffusion à 40 ohm/sq réalisé par SILVACO

C'est le même profil déjà tracé sous Origin et sous Matlab.

Paramètres de simulations

Nos paramètres de simulation sont les suivants :

- Concentration initiale du bore : 1×10^{16} cm-3
- Temps de diffusion : 60 minutes
- Température de diffusion : 853°C
- Concentration du phosphore : 1.42×10^{20} cm-3
- Modèle de diffusion PLS

Le profil résultant de cette simulation est le suivant :

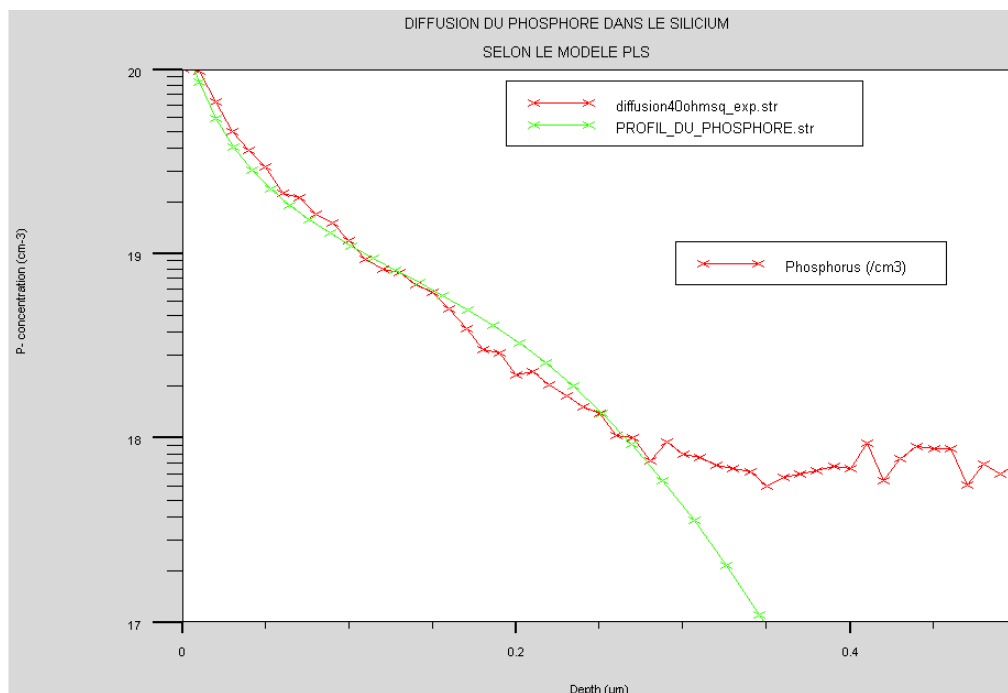


Fig. V.5 : Simulation de diffusion du phosphore dans le silicium en utilisant le modèle PLS intégré dans Athena de Silvaco

Nous remarquons que l'allure est bien définie selon notre résolution analytique des équations de Fick, ce qui justifie notre supposition que l'étape de pré-dépôt est décrite par une fonction erreur complémentaire, et que l'étape drive-in, est bien décrite par une fonction gaussienne.

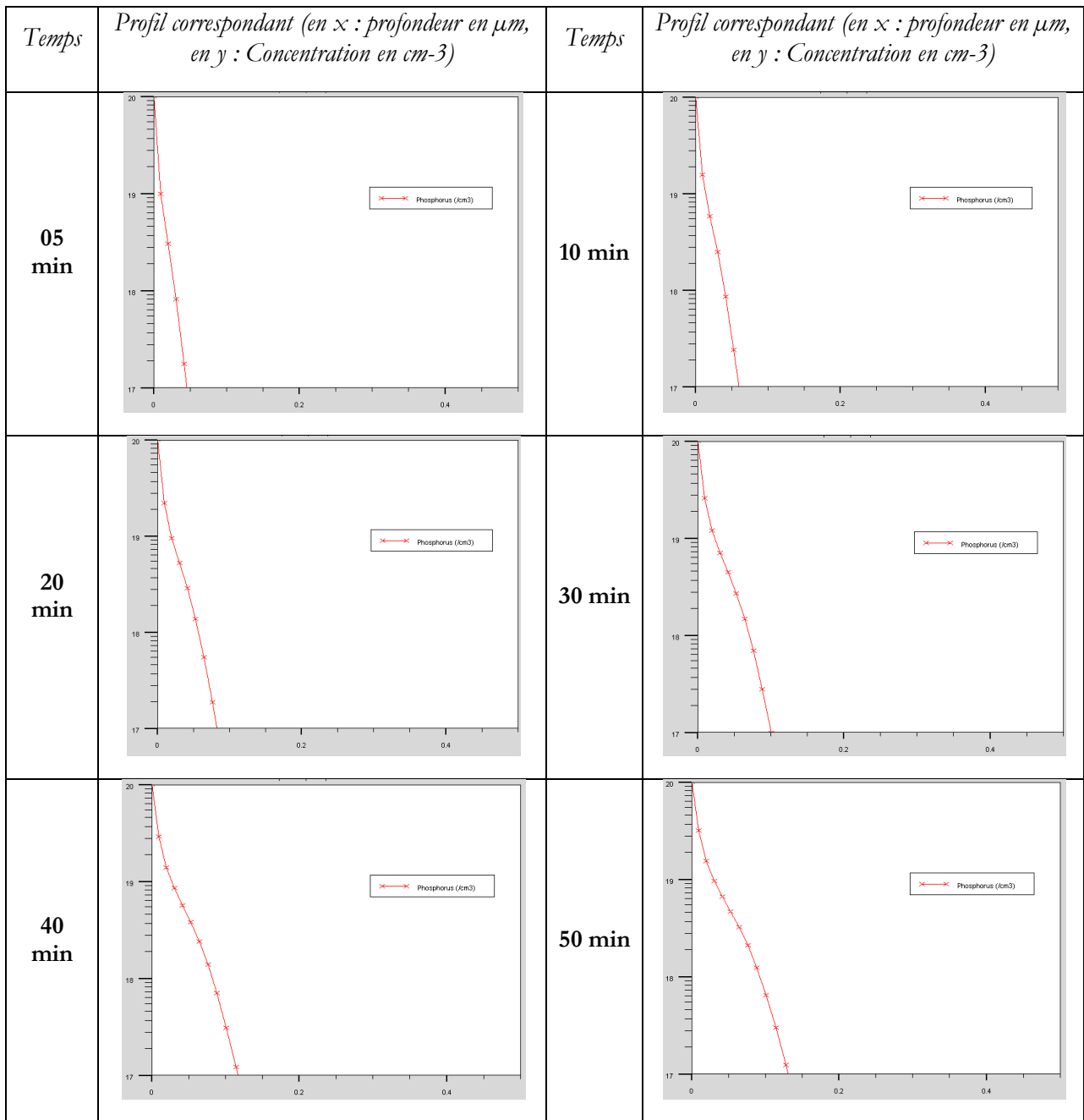
A partir de la figure ci-dessus, nous pouvons faire la distinction entre les trois régions du profil. La première région où la concentration du phosphore est très forte, la deuxième qui est une région de transition, et la troisième où l'on peut facilement remarquer la diminution de la concentration du phosphore due à la diffusion rapide du phosphore.

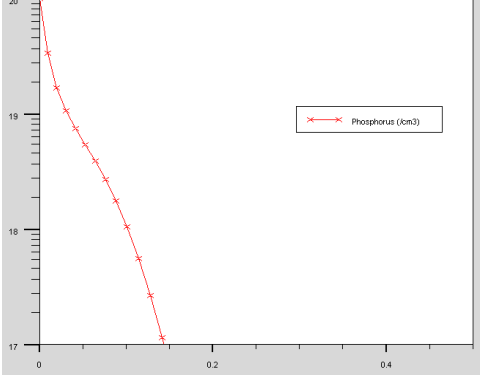
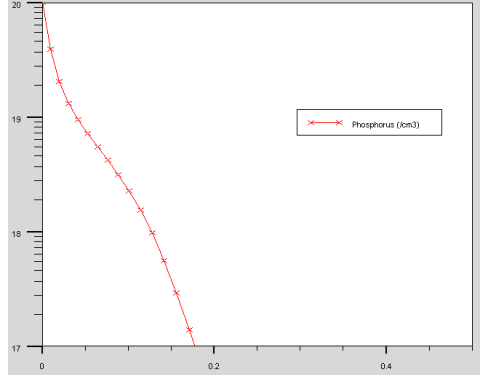
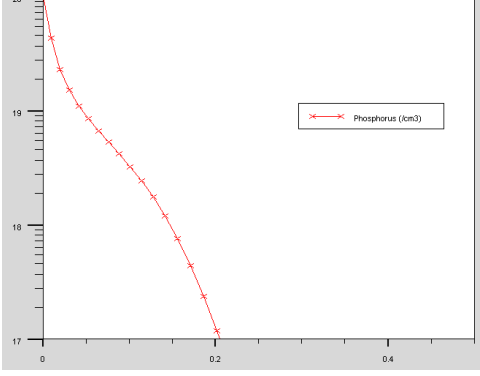
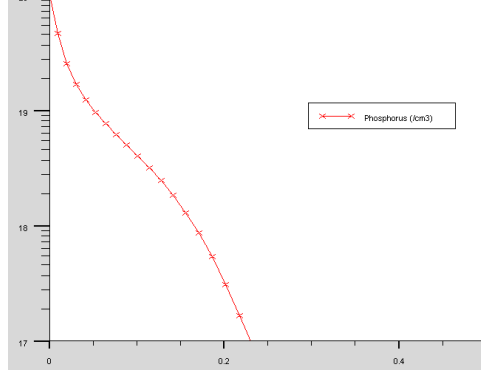
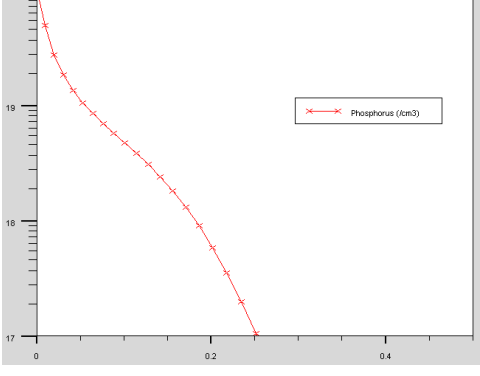
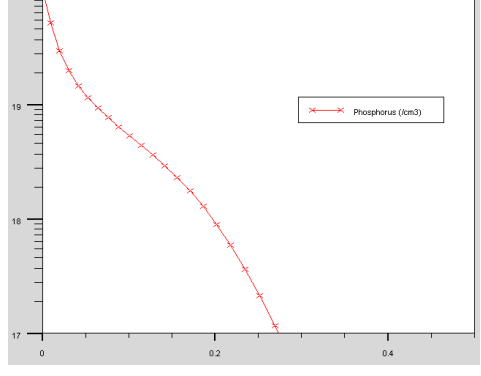
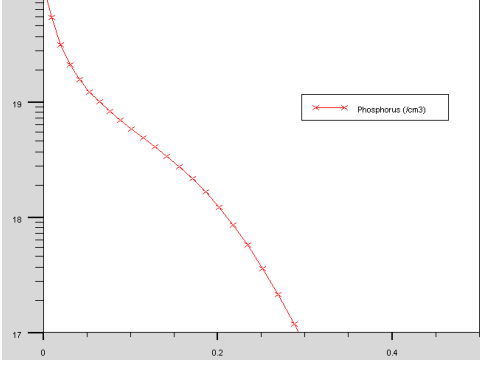
V-1. Evolution du profil de diffusion du phosphore avec le temps et la température

Puisque, la source dopante est considérée constante. La concentration à la surface est la même durant tout le processus. La diffusion du phosphore dans le silicium dépend donc, seulement du temps et de la température de diffusion.

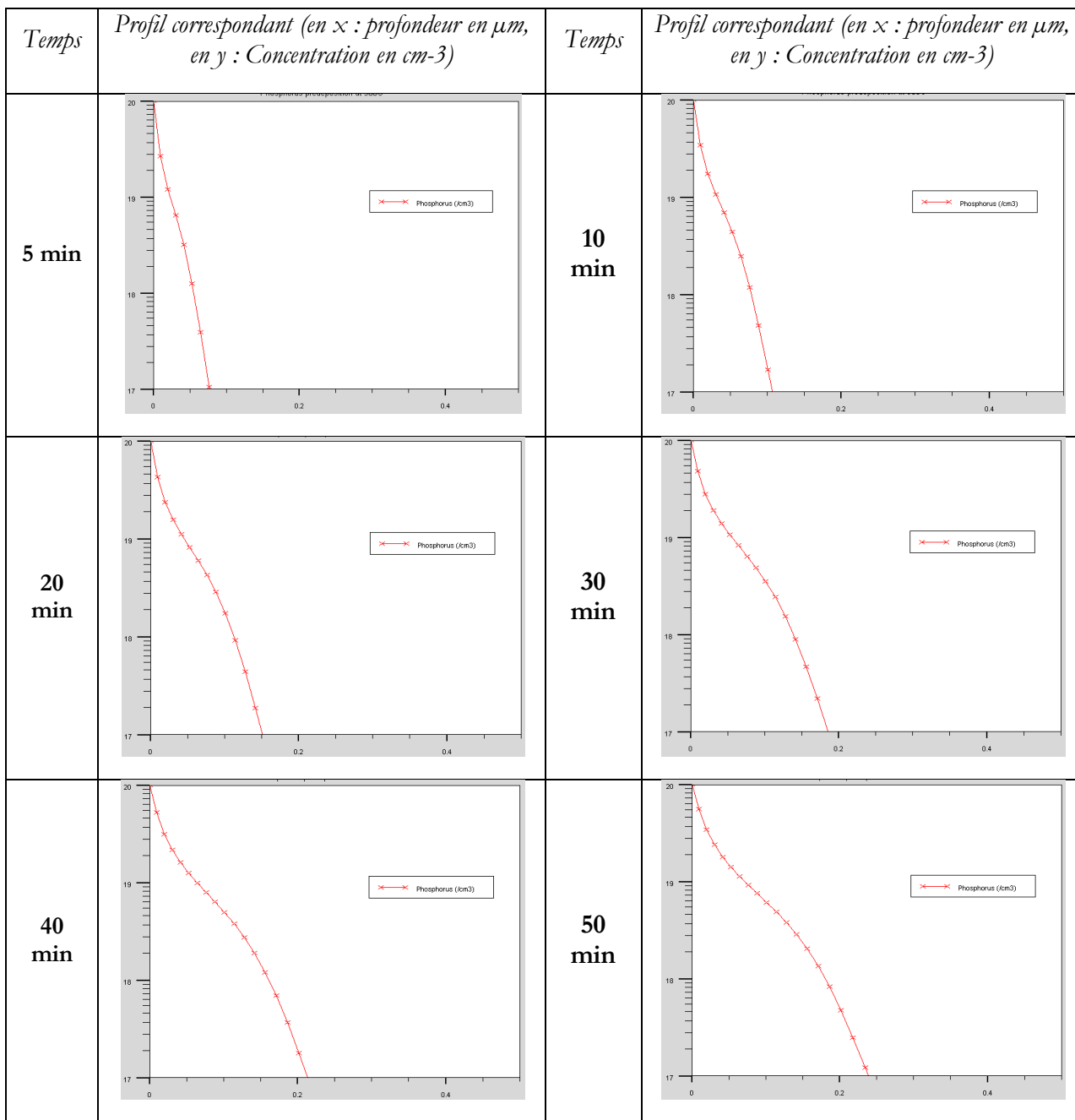
Pour cela, nous avons tracé différents profils en faisant varier la température et le temps de diffusion. Nous avons pu regrouper les profils trouvés dans les tableaux suivants :

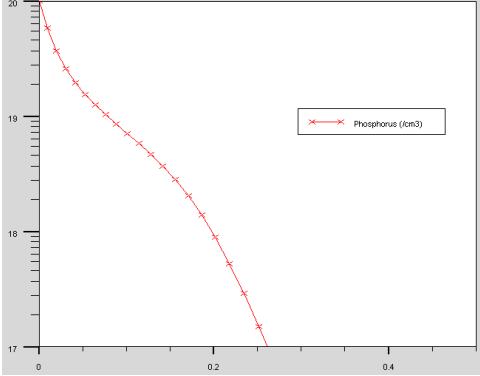
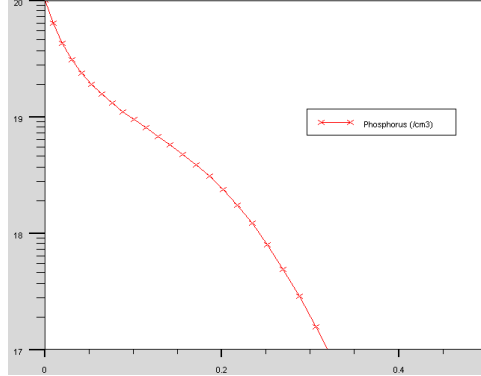
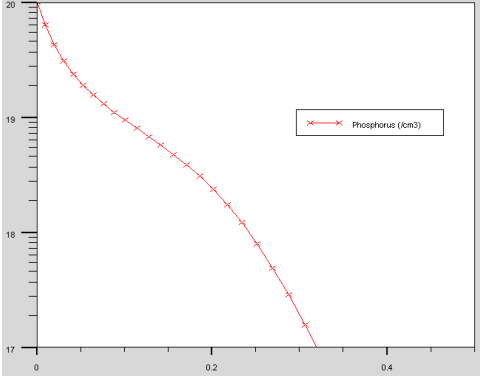
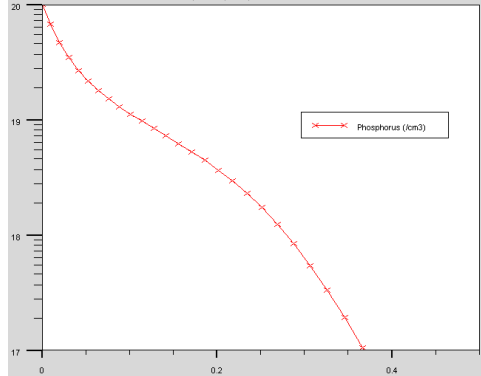
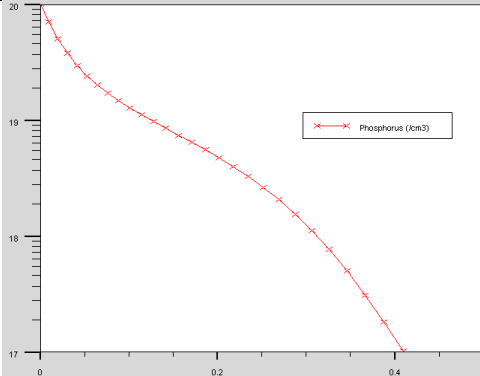
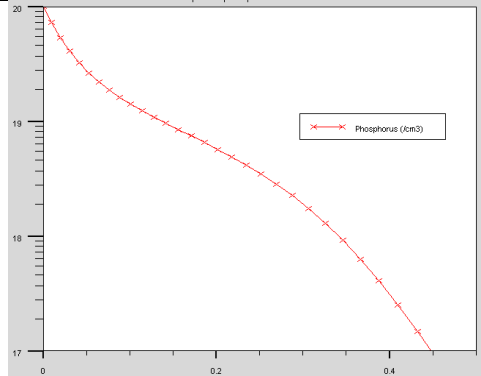
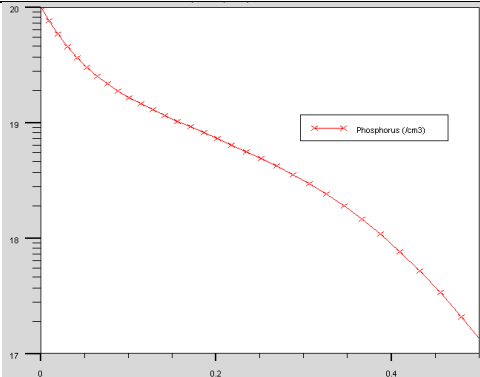
Pour une diffusion à 800°C



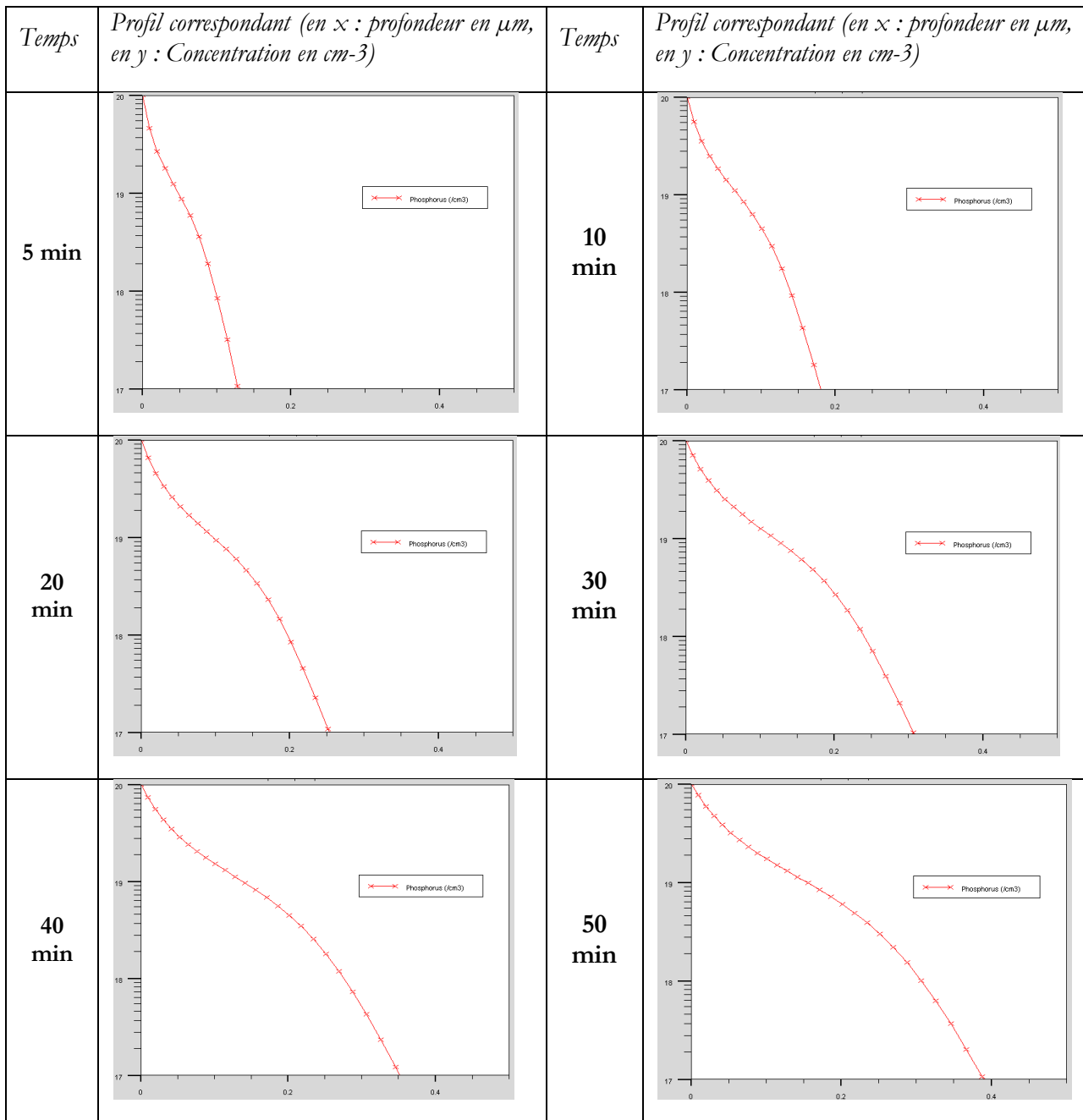
Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})	Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})
1 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 1 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>	1 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 1 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>
2 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 2 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>	2 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 2 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>
3 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 3 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>	3 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 3 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>
4 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 4 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.2$ μm.</p>		

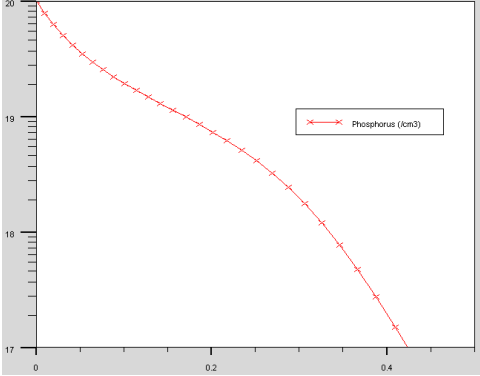
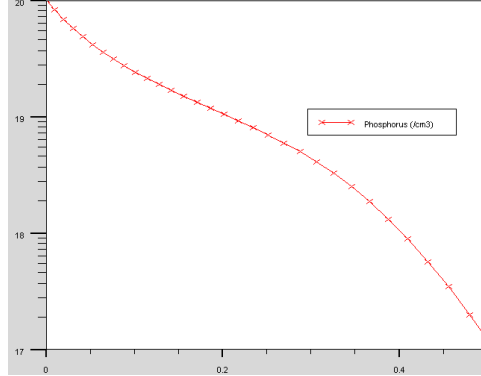
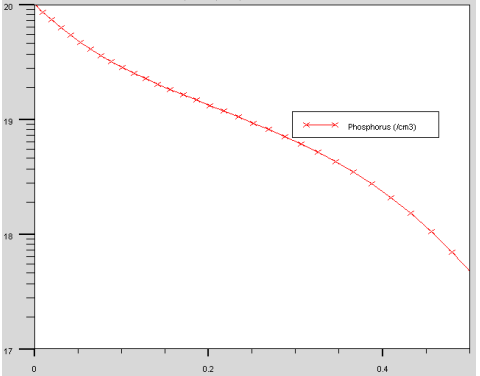
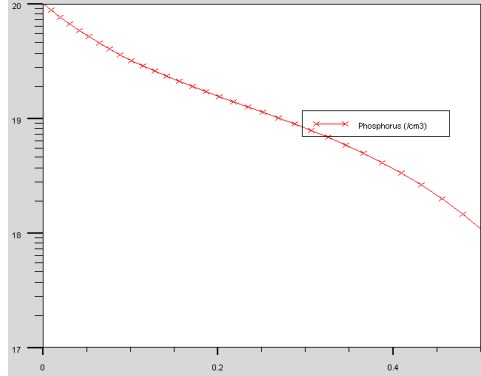
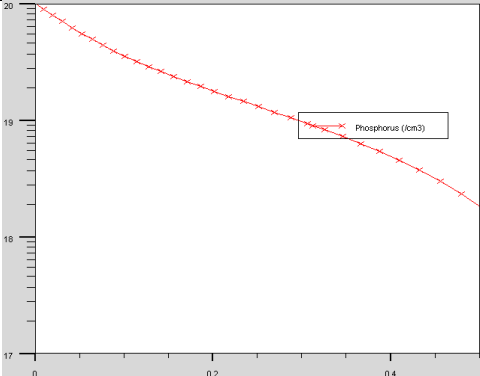
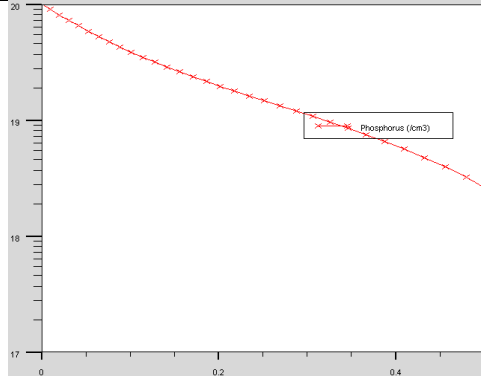
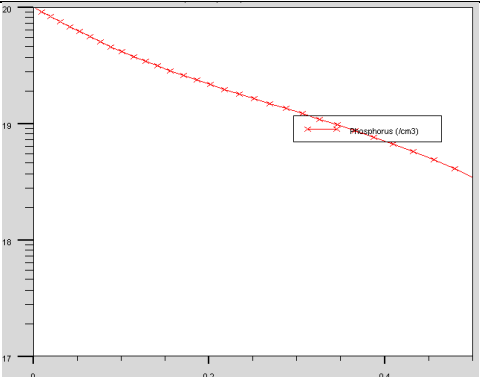
Pour une diffusion à 850°C



Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})	Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})
1 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 1 h. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	1 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 1 h 30min. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
2 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 2 h. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	2 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 2 h 30min. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
3 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 3 h. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	3 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 3 h 30min. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
4 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) at 4 h. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>		

Pour une diffusion à 900°C



Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})	Temps	Profil correspondant (en x : profondeur en μm , en y : Concentration en cm^{-3})
1 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 1 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	1 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 1 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 17.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
2 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 2 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 18 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	2 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 2 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 18.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
3 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 3 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 18.5 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>	3 h 30min	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 3 h 30min duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 19 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>
4 h	 <p>Graph showing phosphorus concentration (y-axis, 17 to 20 cm^{-3}) versus depth (x-axis, 0 to 0.4 μm) for a 4 h duration. The concentration starts at approximately 20 cm^{-3} at $x=0$ and decreases to about 19 cm^{-3} at $x=0.4$ μm. The data points are marked with red 'x' symbols and connected by a red line.</p>		

Nous pouvons remarquer facilement la grande influence des paramètres temps et température de diffusion sur les profils de diffusion.

Le contrôle de ces deux paramètres est primordial dans la fabrication du dispositif, puisque tout le processus de diffusion en dépend fortement.

V-2. Effet des paramètres de diffusion sur les paramètres de la cellule solaire

Nous avons essayé d'injecter nos paramètres de simulation de la diffusion du phosphore dans le silicium cristallin, dans un fichier Silvaco conçu pour une cellule solaire conventionnelle et nous avons essayé de voir l'influence des paramètres de diffusion sur les paramètres de cette cellule.

Pour cela, nous avons exécuté un fichier de simulation d'une cellule solaire conventionnelle à base de silicium cristallin avec la structure matérielle suivante :

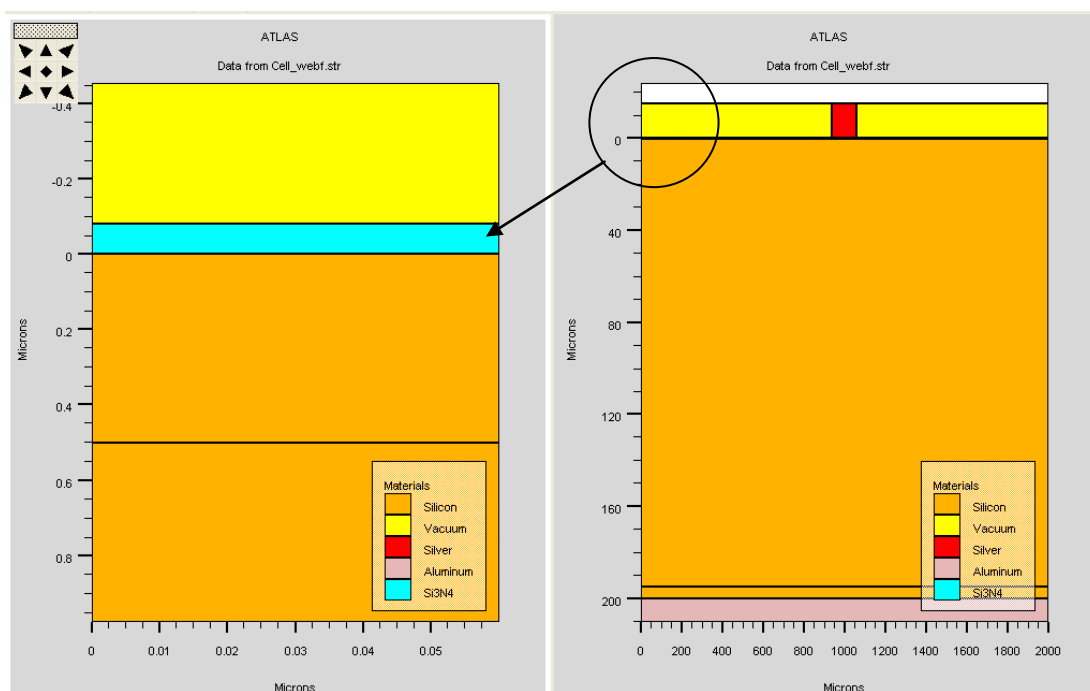


Fig. V.6 : Structure matérielle d'une cellule solaire conventionnelle (à droite) et vue rapprochée de l'émetteur (à gauche)

Les données injectées dans ce programme concernant l'émetteur sont les suivantes :

- Profondeur de jonction : $0.5 \mu\text{m}$
- Dopage : phosphore avec une concentration en surface de $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$
- Profil de diffusion : erfc (fonction erreur complémentaire)

Le reste des caractéristiques sont les caractéristiques usuelles pour une cellule solaire conventionnelle.

Les modèles physiques sont spécifiés en utilisant les commandes nécessaires. Ils incluent : la mobilité, la recombinaison, ...

Pour ce qui concerne la méthode numérique incluse dans le programme de simulation, nous avons utilisé la méthode Newton intégrée dans Silvaco, qui est une méthode de résolution numérique de la totalité du système d'équations en un seul bloc, et qui est utilisée dans les cas de la convergence quadratique. Elle est utilisée aussi pour améliorer la vitesse de simulation.

Ce programme nous donne directement après exécution les résultats concernant les paramètres de cette cellule à savoir :

Paramètres	Cellule solaire conventionnelle	Unités
I_{cc}	4.97	A
V_{oc}	0.668	V
V_{max}	0.58	V
I_{max}	4.75	A
P_{max}	0.00275696	Watts
FF	82.0	%
η	13.78	%

Tableau V.1: Paramètres calculés pour une cellule solaire conventionnelle

La caractéristique I(V) de cette cellule est la suivante :

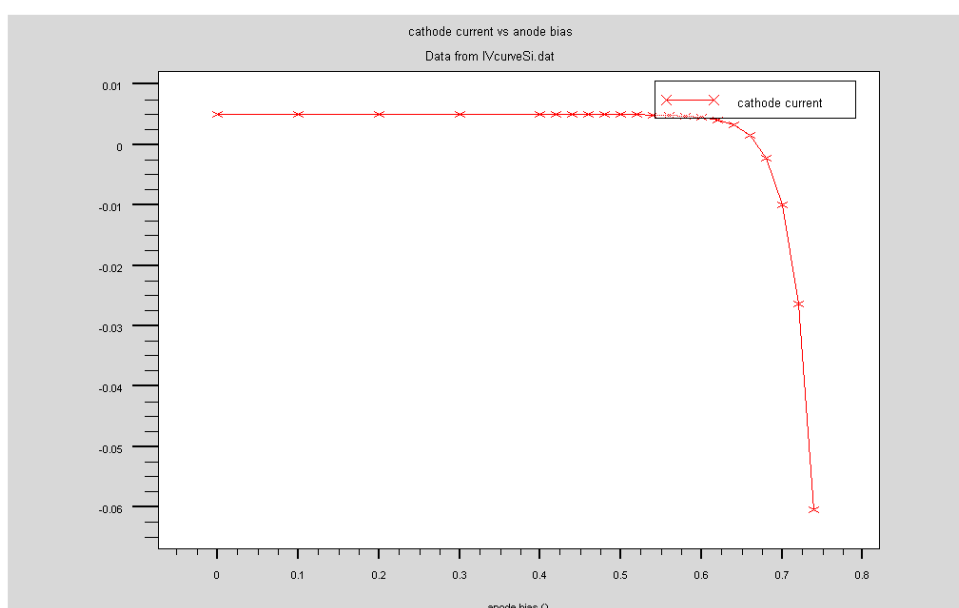


Fig. V.7 : Caractéristique I(V) de la cellule solaire conventionnelle considérée

V-3. Simulation de la cellule solaire avec les nouveaux paramètres de diffusion

Compte tenu des résultats précédents concernant l'effet de la distribution des dopants sur les paramètres de la cellule solaire, nous avons divisé notre émetteur en deux parties :

- La première d'épaisseur $0.2\mu\text{m}$ correspondante à l'étape de pré-dépôt du phosphore dans le silicium et qui suit une distribution analytique en fonction erreur complémentaire.
- La deuxième à une épaisseur de $0.3\mu\text{m}$ correspondante à une distribution gaussienne du phosphore dans le silicium.

Ceci nous a donné une structure matérielle différente de la cellule solaire conventionnelle, et qui est la suivante :

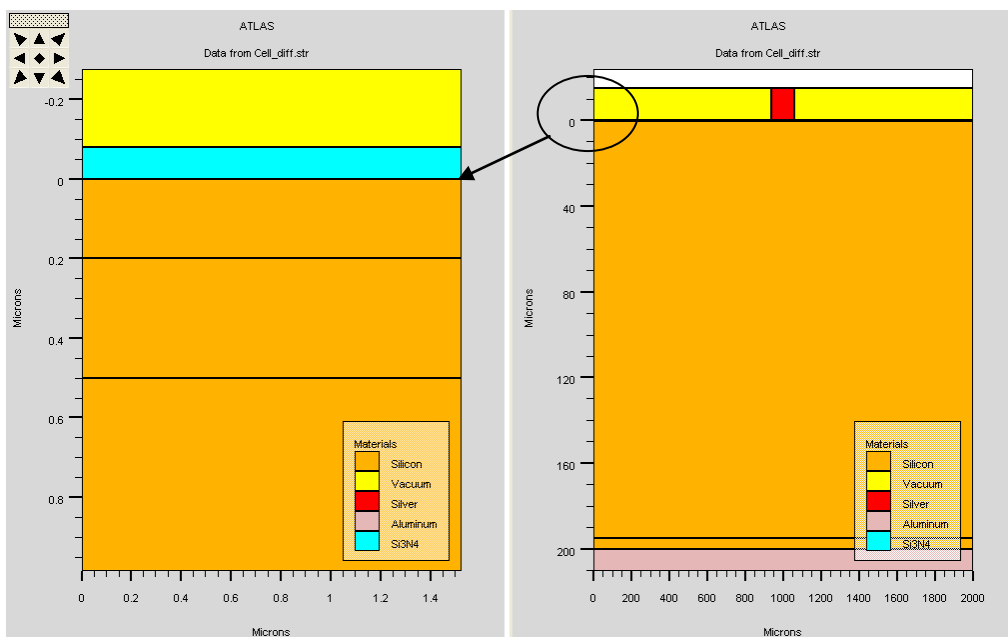


Fig. V.8 : Structure matérielle de la cellule solaire modifiée (à droite), et coupe de l'émetteur (à gauche)

Nous avons essayé de savoir si notre simulation correspond bien à l'analyse mathématique que nous avons déjà présentée dans le chapitre précédent.

D'autre part, nous avons pris nos paramètres de simulation, et nous les avons injectés dans notre fichier de cellule solaire modifiée, à savoir :

- Concentration initiale du bore : $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
- Temps de diffusion : 60 minutes
- Température de diffusion : 853°C
- Concentration du phosphore : $1.42 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

Nous avons obtenu la caractéristique I(V) suivante :

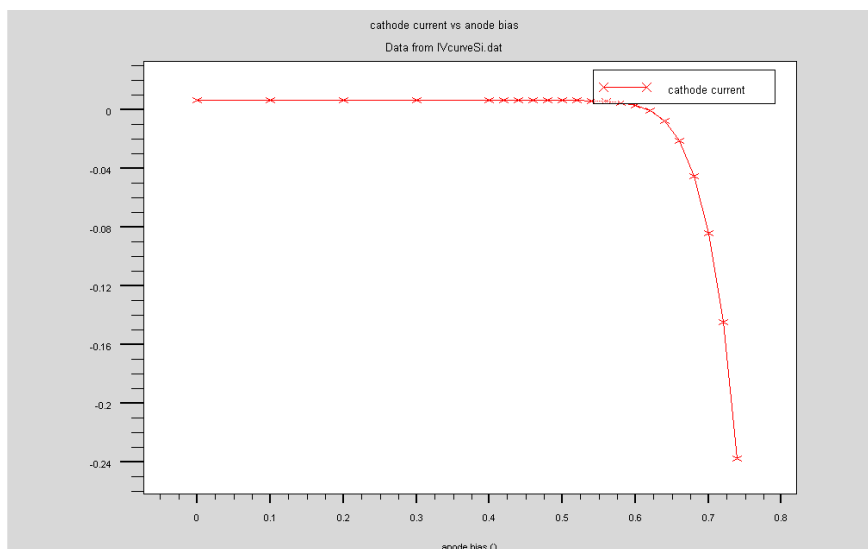


Fig. V.9 : Caractéristique I(V) de la cellule solaire modifiée

Et nos nouveaux paramètres de la cellule solaire avec influence des paramètres de diffusion sont les suivants :

Paramètres	Cellule solaire simulée	Unités
Icc	6.53	A
Voc	0.618	V
Vmax	0.54	V
Imax	6.13	A
Pmax	3.31	Watts
FF	82.1	%
η	16.55	%

Tableau V.2: Paramètres calculés pour une cellule solaire simulée

VI- Discussions des résultats

Dans ce chapitre nous avons essayé de mettre à pied d'œuvre ce que nous avons pu réunir comme informations à partir des différentes références en littérature concernant la diffusion des dopants dans le silicium de façon générale et plus spécialement celle du phosphore, par le biais de la technique dite Lydop.

La diffusion du phosphore dans le silicium n'échappe pas aux règles générales de la diffusion des impuretés dans ce semiconducteur, qui partent des énoncés édictés par Fick et toujours valables de nos jours.

Bien que la résolution analytique est simple et fructueuse dans certains cas de diffusion, elle ne l'est pas dans le cas général, où beaucoup de paramètres rentrent en jeu et influent d'une façon remarquable sur le procédé de diffusion.

Dans ces cas, le recours à la modélisation s'avère inévitable afin de voir l'influence des paramètres et faciliter ainsi la résolution des problèmes de diffusion.

Dans notre simulation, nous nous sommes inspirés du modèle PLS inclus dans le simulateur Athena de Silvaco, et nous avons essayé de voir l'influence du changement des paramètres non seulement sur l'étape de la diffusion de l'émetteur, mais d'une façon globale sur les paramètres de la cellule solaire photovoltaïque.

Notre analyse mathématique, nous a révélé que la distribution du phosphore dans le silicium cristallin n'échappe pas aux règles générales de diffusion, c'est à dire une diffusion selon une fonction erreur complémentaire durant l'étape de pré-dépôt du phosphore et suivant une distribution gaussienne pendant l'étape de redistribution.

Dans notre simulation nous avons essayé de diviser notre émetteur en deux parties (à une profondeur de $0.2\mu\text{m}$) selon ces résultats mathématiques, et en prenant en considération notre superposition du profil modélisé avec le profil expérimental à 40ohm/sq réalisé par la technique SIMS.

D'autre part, nous avons simulé une cellule solaire photovoltaïque avec les mêmes paramètres de diffusion résultant de notre première modélisation, et nous avons pu regrouper nos résultats dans le tableau suivant :

Paramètres	Cellule solaire conventionnelle	Cellule solaire simulée	Unités
Isc	4.97	6.538	A
Voc	0.668	0.618	V
Vmax	0.58	0.54	V
Imax	4.75	6.138	A
Pmax	2.76	3.32	Watts
FF	82.95	82.10	%
η	13.78	16.56	%

Tableau V.3: Comparaison des paramètres calculés pour une cellule solaire conventionnelle et simulée

Lorsque la nouvelle distribution du phosphore est prise en considération, nous constatons un changement de chacune des performances électriques (courant de court-circuit, tension en circuit ouvert, facteur de forme et rendement de conversion).

En conclusion de cette partie sur les résultats expérimentaux, nous pouvons dire que les performances photovoltaïques des structures des cellules solaires sont très fortement liées aux propriétés de la diffusion de l'émetteur et en particulier, la diffusion du phosphore.

Ce sont donc plusieurs paramètres à optimiser, et la simulation numérique qui est un moyen efficace pour approcher la réalité et trouver les remèdes nous a permis de constater les changements du aux paramètres physiques de la diffusion de phosphore dans le silicium.

VII- Conclusion

La diffusion des dopants dans le silicium est un sujet de mieux en mieux compris et il existe actuellement de nombreux modèles décrivant plus ou moins bien la physique de ce problème. Les nouveaux modèles sont bâtis en trois parties concernant respectivement, la diffusion classique, la formation d'amas d'interstitiels de silicium et la formation d'agglomérats mixtes de dopants et d'interstitiels. Le modèle qu'on a adopté dans ce travail, est le modèle qui traite les équations classiques de la diffusion dans le silicium. Il faut garder à l'esprit qu'il constitue les fondements des modèles récents.

La simulation a montré que le profil final de dopant ayant diffusé dans le silicium est fortement conditionné par les paramètres reliés à la surface. En effet, on a obtenu des profils très différents lorsque la concentration de surface est faible ou très forte. Deux effets importants doivent impérativement être pris en compte dans les semiconducteurs en présence d'un gradient de dopant, le premier est la température et le second est l'influence du temps de diffusion. Les profils obtenus par simulation mettent clairement en évidence ces effets.

Dans ce mémoire, la diffusion du phosphore dans le silicium a été étudiée avec un accent donné à la formation de l'émetteur dans le processus de fabrication des cellules solaires photovoltaïques. Deux grands sujets ont été traités, les mécanismes ainsi que la modélisation et par la suite la simulation de la diffusion du phosphore dans le silicium pour la formation de l'émetteur de la cellule solaire.

Le profil de diffusion du phosphore dans le silicium présente une allure appelée : « kink-and-tail profiles » et qui est due à l'interaction entre les défauts ponctuels intrinsèques avec les différents états de charges et il a été remarqué que la fin du profil de diffusion correspond à une dissociation des paires dopants-lacunes et que dans la région à basse concentration des dopants, est due à l'interaction avec les auto-interstitiels gouvernant la diffusion afin de rétablir la limite de

l'équilibre local. En outre, à une concentration de phosphore supérieure à la solubilité limite, il a été observé que la diffusion est ralentie par la formation des amas de dopants (clusters).

Concernant l'effet des différents paramètres sur la diffusion du phosphore il a été observé après simulation du profil que l'évolution de la distribution du phosphore dans le silicium est principalement liée à la température et au temps de diffusion, ainsi qu'à la concentration de surface, ceci a été bien observé en faisant varier ces paramètres et en observant l'évolution des profils de diffusion.

Cependant la diffusion du phosphore dans notre cas est reliée à la formation de l'émetteur dans la cellule solaire, ce qui nous a dirigés vers une simulation d'une cellule solaire en faisant varier les différents paramètres influençant la diffusion.

Dans ce contexte, il a été observé que les paramètres importants et influençant la cellule solaire sont bien liées à la formation de l'émetteur et ainsi à la diffusion du phosphore.

En effet, la concentration des dopants en surface est un facteur primordial, la diminution de sa valeur influe la collecte du courant à l'émetteur ainsi que la capacité de passivation, qui touche elle aussi au courant de saturation de la cellule solaire, qui dépend à son tour de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires et du niveau de dopage.

Concernant le simulateur utilisé, nous remarquons que le modèle de diffusion d'ATHENA utilise les lois de diffusion à l'équilibre thermodynamique, et ne prend donc pas en compte les autres cas de diffusion.

En effet, si les concentrations de défauts ponctuels sont très importantes, alors les paires dopants-défauts ne peuvent plus être considérés en équilibre avec les dopants. Ceci signifie principalement que les mécanismes de Kick-Out et lacunaire doivent être adaptés à ces conditions particulières.

Ceci, peut être corrigé en considérant un modèle de diffusion plus adapté aux différents cas observés lors de la diffusion des dopants, ou en faisant des améliorations dans le traitement des équations de diffusion en faisant rentrer plus de paramètres.