

ACADEMIE DE MONTPELLIER

UNIVERSITE MONTPELLIER II

--- SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC ---

THESE

présentée à l'Université de Montpellier II Sciences et Techniques du Languedoc
pour obtenir le diplôme de DOCTORAT

SPECIALITE : Electronique, Optronique et Systèmes
Formation Doctorale : Sciences pour l'Ingénieur
Ecole Doctorale : Electronique

SIMULATION NUMERIQUE DU PIEGEAGE ET DU DEPIEGEAGE DANS LES OXYDES DE COMPOSANTS MOS.

par

Claude CIRBA

Soutenu le 16 Décembre 1996 devant le Jury composé de:

MM.

R. ALABEDRA,	Professeur,	UMII Montpellier	Président
G. SARRABAYROUSE,	Directeur de recherche,	LAAS/CNRS Toulouse	Rapporteur
J. FESQUET,	Maître de conférence,	UMII Montpellier	Examineur
J.-C. MANIFACIER,	Professeur,	UMII Montpellier	Examineur
A. MICHEZ,	Maître de conférence,	UMII Montpellier	Examineur
J. OUALID,	Professeur,	ENSP Marseille	Examineur
P. PAILLET,	Ingénieur,	CEA, Bruyères-le-Châtel	Examineur
G. BORDURE,	Professeur,	UMII Montpellier	Directeur de thèse
<hr/>			
J.-L. LERAY,	Directeur de recherche,	CEA Bruyères-le-Châtel	Rapporteur

Ce travail a été réalisé au Centre d'Electronique et de Micro-optoélectronique de Montpellier II, en collaboration avec le laboratoire d'électronique du CEA de Bruyères-le-Châtel.

Je remercie Monsieur Robert Alabedra, Directeur du CEM2, de m'avoir fait l'honneur d'assumer la présidence du jury qui m'a décerné le grade de Docteur.

Que Monsieur Jean-Luc Leray, Directeur de recherche et chef de section au CEA de Bruyères-le-Châtel, veuille bien accepter mes chaleureux remerciements pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant la lourde tâche de rapporteur de ce travail. Ses commentaires m'ont été d'une aide précieuse. J'ai regretté que des contraintes de calendrier l'aient empêché d'assister à la présentation de mon travail.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur Gérard Sarrabayrouse, Directeur de recherche au LAAS/CNRS de Toulouse, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter d'être rapporteur pour ce travail.

Je tiens à exprimer ma chaleureuse et profonde gratitude à Monsieur Alain Michez, Maître de conférence à l'UMII, pour avoir su, au-delà de sa collaboration efficace, m'apporter un soutien décisif dans les moments difficiles. Plus qu'un collègue de travail, il est devenu un ami et m'a fait l'honneur de participer au jury de soutenance.

Je suis très reconnaissant envers Messieurs Jean Fesquet, Jean-Claude Manificier, Jean Oualid et Philippe Paillet de m'avoir fait l'honneur d'être membre du jury de soutenance.

Monsieur Guy Bordure, Professeur à l'UMII, m'a accueilli au sein de son équipe et a assumé la tâche de Directeur d'étude pour ce travail. Qu'il trouve ici le témoignage de ma reconnaissance et de ma sympathie.

Je ne saurais, par ces quelques mots maladroits, exprimer à Cathy, Romain, Maxime et Thierry Dufour l'amour profond que je ressens à leur égard. L'achèvement de ce travail est le fruit de l'affection constante qu'ils m'ont témoignée dans les instants de doutes.

Que ceux qui par leur soutien m'ont aidé à achever ce travail soient assurés de ma gratitude.

A ma mère et mon père, ma soeur et mon frère, avec tout l'amour que j'ai pour eux.

SOMMAIRE

SOMMAIRE	2
-----------------	----------

INTRODUCTION	8
---------------------	----------

III - TRANSPORT ET PIEGEAGE DANS SiO₂	9
---	----------

A - LES PIEGES DANS SiO₂	9
--	----------

1 - ORIGINE DES PIEGES	9
------------------------	---

2 - LOCALISATION DES PIEGES	10
-----------------------------	----

B - CREATION ET INJECTION DE CHARGES DANS LES MATERIAUX	12
--	-----------

1 - INJECTION PAR EFFET SCHOTTKY ET FOWLER-NORDHEIM	12
---	----

2 - GENERATION PAR EFFET POOLE-FRENKEL	13
--	----

3 - GENERATION DE PAIRES PAR RAYONNEMENT DANS LE SiO ₂	13
---	----

C - TRANSPORT DES PORTEURS DANS SiO₂	16
--	-----------

1 - LE PIEGEAGE	17
-----------------	----

2 - LE DEPIEGEAGE	18
-------------------	----

a - Excitation thermique	18
--------------------------	----

b - Effet tunnel	20
------------------	----

1 - LA RECOMBINAISON	22
----------------------	----

B - METHODES EXPERIMENTALES DE CARACTERISATION	23
---	-----------

1 - MESURE DE LA DERIVE DE TENSION SEUIL	23
--	----

2 - RECUIT ISOTHERME ET ISOCHRONE	23
-----------------------------------	----

3 - MESURE DU COURANT THERMO-STIMULE	25
--------------------------------------	----

A - MODELE	30
1 - LIMITATIONS DU MODELE	30
2 - LES EQUATIONS	31
3 - LOIS ASSOCIEES	35
a - Sections efficaces de capture et de recombinaison	35
b - Séparation des paires générées : Fonction Yield	37
c - Densité d'états dans les bandes de conduction et de valence	38
d - Vitesse d'agitation thermique	38
e - Niveau énergétique des pièges : effet Poole-Frenkel	39
B - DISCRETISATION ET RESOLUTION DES EQUATIONS	39
1 - DISCRETISATION SPATIALE	39
a - Equation de Poisson	40
b - Equations de continuité	41
c - Equations d'évolution des densités de porteurs piégés	43
2 - DISCRETISATION TEMPORELLE	43
3 - CONSTITUTION DU SYSTEME D'EQUATIONS	44
4 - METHODES DE RESOLUTION	44
5 - EXEMPLE DE RESOLUTION D'UNE EQUATION DIFFERENTIELLE NON-LINEAIRE	45
A - COMPLEMENTS NUMERIQUES	50
1 - MODELISATION DE L'INTERFACE SiO ₂ -Si	50
2 - MODELISATION DU DEBIT DE DOSE	52
1 - QUELQUES ASPECTS DU MAILLAGE	53
a - Maillage auto-adaptatif	53
b - Respect des variations rapides de grandeurs - Influence des approximations	54
c - Problèmes non stationnaires	55

III - RESULTATS DE SIMULATIONS

A - SIMULATIONS DES PROTOCOLES DE CARACTERISATION	57
1 - SIMULATION DE LA MESURE DES COURANTS THERMO-STIMULES (CTS)	57
a - Influence du re-piégeage	57
i) Faible dose - Faible densité de pièges $N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	58
ii) Faible dose - Forte densité de pièges $N_p = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$,	61
a - Contribution du courant de déplacement	66
1 - SIMULATION DU RECUI ISOCHRONE	68
a - Influence du re-piégeage	68
2 - CONCLUSION	69

B - EFFET DE LA POLARISATION SUR LES MESURES DE COURANTS THERMO-STIMULES	70
1 - PRESENTATION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX	70
a - Mesures sous polarisations négatives de la grille	70
b - Mesure sous polarisation positive de la grille	72
2 - PRESENTATION DE LA SIMULATION	73
i) Piégeage des trous	73
ii) Piégeage des électrons	75
3 - PRESENTATION DES RESULTATS	75
a - L'irradiation	75
a - Effet de la polarisation - champ interne	76
b - Résultats de CTS à 30V	78
c - Résultats de CTS à -30V	79
a - Résultats de CTS à -60V	82
b - Résultats de CTS à -100V	86
2 - CONCLUSION	88

CONCLUSION **74**

BIBLIOGRAPHIE **76**

INTRODUCTION

L'oxyde de silicium, SiO_2 , est présent dans la plupart des composants de l'électronique moderne (de type Metal-Oxide-Semiconductor ou Silicon-On-Insulator). Il peut être soumis, du fait de ses propriétés isolantes, à des tensions de polarisation importantes. Il peut aussi être soumis, lors de son utilisation dans les domaines spatial ou nucléaire, à un rayonnement ionisant.

Les stress de tension ou les rayonnements ionisants font apparaître dans ce matériau, par injection ou par génération des porteurs de charge. Ces porteurs sont susceptibles d'être piégés et d'engendrer ainsi une charge d'espace. Cette charge d'espace a une influence sur le comportement des structures environnant l'oxyde de silicium dans les composants et peut, entraîner des dysfonctionnements importants.

La connaissance des différents pièges existant dans l'oxyde, de leur répartition spatiale, de leur spectre d'énergie et des différentes lois de piégeage et de dépiégeage est fondamentale pour la maîtrise de cette technologie. Cependant, cette connaissance est souvent imparfaite. Les phénomènes relatifs au piégeage et au dépiégeage des charges sont représentés par des modèles déduits des résultats expérimentaux et qui mettent en jeu un nombre important de paramètres.

L'outil de simulation facilite d'une part l'évaluation de ces modèles et permet d'autre part d'analyser le comportement des composants utilisant ces oxydes lorsqu'ils sont soumis à des stress, en particulier à un rayonnement ionisant.

Dans ce travail, nous avons développé un logiciel de simulation du transport, du piégeage et du dépiégeage des charges dans l'oxyde de silicium plus généralement associés à des structures MOS.

Dans le premier chapitre, nous présentons les propriétés essentielles des pièges du SiO_2 associés à une structure MOS et les différents processus physiques permettant de décrire la charge de ces pièges sous l'effet d'un rayonnement ionisant ou leur décharge. Nous présentons ensuite les méthodes expérimentales habituelles permettant de caractériser les pièges dans les structures MOS.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les différents modèles ainsi que l'ensemble des méthodes numériques utilisées pour la simulation. Nous précisons les limitations de l'outil. Nous abordons aussi les points délicats spécifiques à la simulation numérique.

Dans le troisième chapitre enfin, nous présentons différents résultats de simulation mettant en jeu le piégeage-dépiégeage associé à une distribution de pièges et analysons les conséquences sur l'analyse des résultats expérimentaux de caractérisation de matériaux. Nous évaluons, en particulier, l'influence de phénomènes difficilement ou non discernables par une analyse directe et simple des résultats expérimentaux. Nous validons enfin notre étude par la simulation d'une caractérisation expérimentale de capacités MOS par la méthode de mesure du courant thermo-stimulé.

CHAPITRE I

TRANSPORT ET PIEGEAGE DANS SiO₂

I - Transport et piégeage dans SiO₂

A - Les pièges dans SiO₂

Les technologies micro-électroniques utilisent essentiellement l'oxyde de silicium SiO₂ tant comme couche isolante à l'origine de l'effet de champ (oxyde de grille des structures MOS) que comme isolant de passivation ou de séparation des couches actives (technologie SOI). Ces oxydes sont fabriqués de différentes façons : oxydation thermique, dépôt chimique en phase vapeur (CVD), implantation ionique d'oxygène (procédé SIMOX), etc. . Le matériau ainsi fabriqué est amorphe. Quel que soit le soin apporté à l'élaboration du matériau, la présence de défauts est inévitable. Ces défauts peuvent être dus à une impureté (atome étranger à la composition de l'oxyde), on parle alors de défauts extrinsèques, ou à une imperfection due à la nature même du matériau, on parle alors de défauts intrinsèques. L'oxyde est positionné dans un environnement de silicium monocristallin pour la constitution de la zone active du composant et de silicium polycristallin ou de métal pour la constitution des électrodes. Ces associations de matériaux de structure différente sont à l'origine de défauts localisés à l'interface ou au voisinage immédiat de l'interface dans chacun des matériaux. Une importante documentation concerne la nature des défauts dans SiO₂^[SAH 90].

Ces défauts, qui sont à l'origine du piégeage de charges, peuvent être classés suivant leur origine et leur localisation.

1 - Origine des pièges

Nous nous restreindrons dans ce travail à un type de piège que l'on appelle les pièges électroniques^{[FLEETWOOD 93][SAH 90]}. Ces pièges sont définis comme des imperfections (défauts ponctuels) qui peuvent être associés à la capture d'un électron ou d'un trou.

On peut considérer en effet un autre type de piège appelé par Sah^[SAH 85] piège à proton qui est associé à une liaison^[PAULING 60]. Un piège à proton peut capturer un ou plusieurs protons ou des atomes d'hydrogène. Avant la capture, le piège à proton peut-être un piège électronique à trou ou à électron. La capture d'un proton, connue sous le terme d'hydrogénation, peut annihiler le piège électronique correspondant.

Les expériences sur les charges piégées dans les structures MOS sont souvent menées pendant ou après l'application d'un stress (stress de tension, irradiation par un rayonnement ionisant, injections de porteurs chauds). Ce sont généralement ces stress qui sont à l'origine de la dégradation des propriétés des composants en chargeant les pièges existants déjà dans la structure étudiée. Cependant, il est vraisemblable que les stress soient eux-mêmes générateurs de nouveaux pièges aux emplacements de centres précurseurs ou bien qu'ils puissent annihiler des pièges existants. Il est aussi vraisemblable que les pièges générés soient de même nature que les pièges initiaux.

Il est difficile dans ce contexte, lors d'une simulation, de parler de densité de pièges préalablement à l'application d'un stress, c'est à dire préalablement à l'irradiation dans notre cas. Nous ferons dans ce travail l'hypothèse de l'existence préalable du piège avant l'application du stress, le stress ne faisant que générer les charges susceptibles de charger ou décharger le piège.

2 - Localisation des pièges

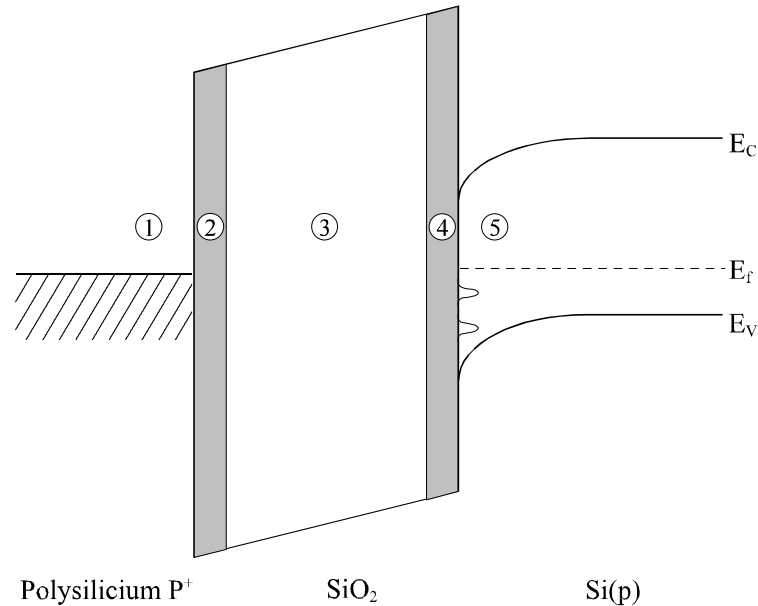


Figure I - -1: Schéma de la localisation des pièges dans le SiO_2 .

La localisation des pièges dans l'oxyde joue un rôle fondamental dans le comportement des composants et dans leur dégradation.

Suivant la figure I - -1, on peut considérer cinq zones de localisation des pièges suivant le type d'interaction existant entre les pièges de chaque zone et les porteurs des matériaux adjacents.

Zones 1 et 5

Elles correspondent aux états habituellement appelés états d'interface ; ces états sont en communication électrique directe avec les états électroniques de la grille ou du silicium. Leur occupation est décrite à l'aide de la fonction de Fermi et du pseudo-niveau de Fermi du Si dans le cas de l'interface avec le silicium.

Zones 2 et 4

Elles correspondent aux perturbations dues au passage d'un matériau à l'autre. La dimension de cette zone dépend fortement de la technologie utilisée pour fabriquer le SiO_2 . A l'intérieur de ces zones, et en particulier à l'intérieur de la zone 4, les états peuvent

communiquer électriquement avec les états électroniques du silicium par effet tunnel. Cette communication décroît cependant rapidement avec la distance à l'interface et la profondeur du piège. Les échanges avec le silicium dépendent alors de l'échelle de temps des mesures et du champ électrique appliqué. La zone de transition 2 est très fine^[SAH 90] (quelques Å) et son rôle dans le fonctionnement du composant est négligeable lorsque l'épaisseur de l'oxyde est supérieure à quelques 10Å.

Zone 3

La zone 3 correspond aux états qui ne peuvent communiquer qu'indirectement avec les états de la grille ou du silicium. Une nomenclature des états de la structure MOS a été proposée par Fleetwood^[FLEETWOOD 93].

Dans les composants

Dans un circuit électronique en technologie MOS, on peut dénombrer trois types principaux d'oxydes de silicium : les oxydes thermiques (oxyde de grille, bec d'oiseau), les oxydes enterrés (technologie SOI) et les oxydes multicouches (permettant d'améliorer le durcissement aux radiations).

A.) *Les oxydes à densité de pièges uniforme :*

Il s'agit principalement des oxydes enterrés SIMOX (Séparation par IMplantation d'OXygène) pour lesquels une couche d'oxyde est obtenue sous la surface du silicium puis recuite à très haute température.

B.) *Les oxydes à densité de pièges non uniforme :*

- les oxydes multicouches :

Ces oxydes sont constitués d'un empilement de nitrure sur un oxyde thermique, les nitrures étant peu sensibles aux irradiations et l'oxyde thermique étant conservé pour garder une bonne interface SiO₂-Si. Des couches à forte densité de pièges alternent avec des couches à densité de pièges relativement faible. Notre étude ne porte pas sur ce type d'oxyde.

- les oxydes thermiques :

Les oxydes obtenus par oxydation classique en atmosphère humide à 950°C d'un substrat Si sont présents dans toutes les technologies CMOS. Il s'agit des oxydes de grille et des oxydes de débordement latéraux de part et d'autre de la grille (figure I - -2).

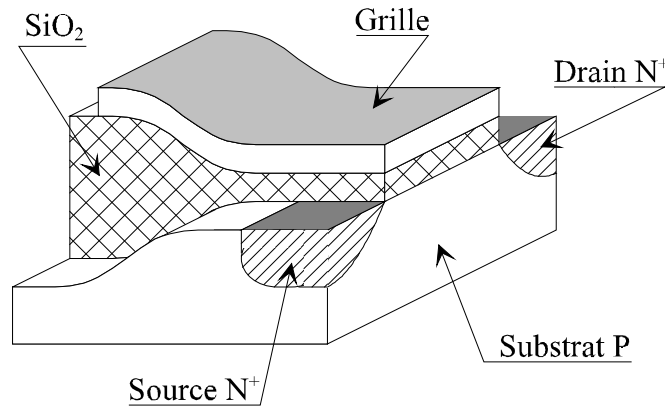


Figure I - -2 : Constitution d'un transistor MOS.

B - Création et injection de charges dans les matériaux

Dans une structure MOS, les charges peuvent être créées ou injectées dans l'oxyde par différents processus associés à un stress de tension ou à un stress d'irradiation par un rayonnement ionisant.

Le champ électrique auquel est soumis l'isolant peut être la cause d'injection de porteurs au niveau des électrodes par effet Fowler-Nordheim ou par effet tunnel associé aux pièges localisés près des interfaces et de création de porteurs en volume par effet Poole-Frenkel.

Dans ce travail, on ne considère que la création de charges en volume par l'intermédiaire d'un rayonnement ionisant en négligeant de plus l'injection des porteurs excités par ce rayonnement dans les matériaux adjacents constituant les électrodes. Nous rappelons brièvement les principes des effets Fowler-Nordheim et Poole-Frenkel.

1 - Injection par effet Schottky et Fowler-Nordheim

A fort champ électrique, la force image abaisse de façon significative la barrière de potentiel électronique et facilite l'injection des porteurs du métal dans le SiO_2 . C'est l'injection par effet Schottky.

Le champ électrique a d'autre part pour effet de rapprocher les niveaux de la bande de conduction du SiO_2 des niveaux du métal au voisinage du niveau de Fermi, le caractère ondulatoire de l'électron lui permet alors de traverser la barrière de potentiel par effet tunnel. Cette émission est indépendante de la température. C'est l'injection par effet Fowler-Nordheim.

La figure I - -4 schématise ces deux types d'injection.

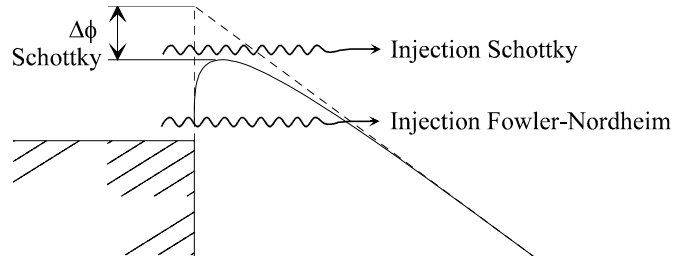


Figure I - -4 : Injection de porteurs par effet Schottky et Fowler-Nordheim.

2 - Génération par effet Poole-Frenkel

Elle correspond à l'émission thermo-ionique sous l'effet du champ électrique des porteurs piégés dans le volume de l'isolant. Le champ électrique abaisse la barrière de potentiel ϕ vu par le porteur piégé de la valeur $\Delta\phi = \beta_{PF}E^{1/2}$. La figure I - -6 illustre cet effet.

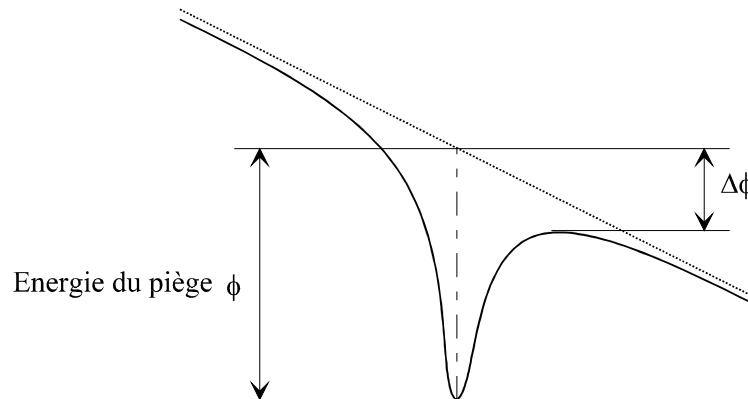


Figure I - -6 : Représentation de l'effet Poole-Frenkel.

3 - Génération de paires par rayonnement dans le SiO₂

Lors d'une irradiation, l'absorption de l'énergie du rayonnement se traduit par l'excitation d'électrons dits "primaires" qui acquièrent une énergie cinétique élevée. Ces électrons excitent à leur tour d'autres électrons de la bande de valence (dits secondaires). Ces électrons sont alors décrits sous forme de quasi-particules : les plasmons. Le plasmon se désintègre ensuite en paires électron-trou après quelques périodes d'oscillations ($f_p \approx 5,6 \cdot 10^{15} \text{ Hz}^{[AUSMAN 75]}$).

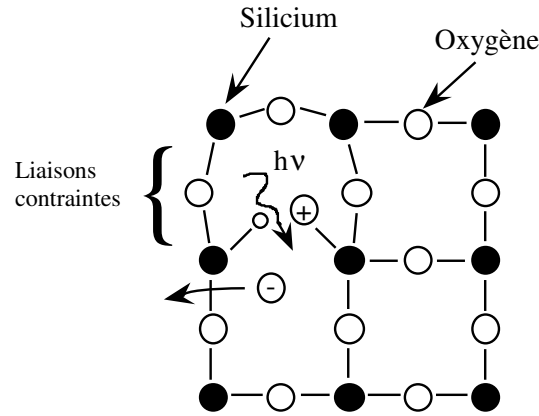


Figure I - 8 : Création d'une paire par un photon incident.

Un photon du rayonnement transférera une certaine quantité d'énergie **D** par unité de masse du matériau. **D**, appelée dose, est exprimée en rad(SiO₂). Le nombre de paires **N** créées par unité de volume est alors le rapport de la dose reçue par l'énergie w nécessaire à la création d'une paire pour une masse volumique du matériau. On définit le facteur de génération **g₀**, spécifique au matériau, comme le rapport de la masse volumique par l'énergie w nécessaire à la création d'une paire. On écrit : $N = g_0 \cdot D$. Le taux de création de paires par unité de temps, dans le cas d'irradiation étendue dans le temps, est proportionnel au débit de dose. Dans SiO₂, $g_0 = 7,6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{rad}^{-1}$ et $w \approx 18 \text{ eV}$.

Les paires générées en l'absence de perturbations (champ, agitation thermique) se recombinent rapidement (10^{-13} s) ou forment des excitons^[MOTT 78]. Sous l'effet du champ électrique des paires se dissocient. On définit alors la fonction de séparation de paires **Y(E)** qui traduit la probabilité de non-recombinaison en fonction du champ électrique à température ambiante. La densité de paires générées et non-recombinées s'écrit alors :

$$N = g_0 \cdot Y(E) \cdot D.$$

Deux modèles de recombinaison ont été proposés pour exprimer **Y(E)**, la recombinaison colonnaire^[OLDHAM 85] et la recombinaison préférentielle^[ONSAGER 38]. Cependant la situation réelle correspond à un phénomène intermédiaire qui a motivé l'utilisation d'une formulation empirique de **Y(E)**.

Elle peut s'exprimer par l'expression analytique suivante^[LERAY 89] :

$$Y(E) = Y_0 + \frac{|E/E_0|}{1 + |E/E_0|} (1 - Y_0)$$

où E_0 et Y_0 sont spécifiques du rayonnement incident.

Sur la figure I - 9 nous avons représenté les variations de cette formulation de **Y(E)** en fonction du champ électrique pour une source de rayons γ de 1MeV.

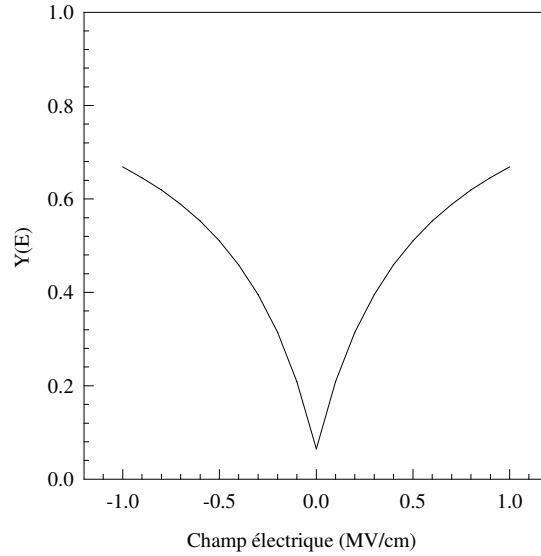


Figure I - -9 : Allure générale de la fonction yield^[LERAY 89] avec les paramètres caractéristiques de rayons γ à 1MeV, $Y_0 = 0,065$ et $E_0 = 0,55$ MV/cm.

ou par l'expression analytique suivante^[DOZIER 87] pour les faibles doses :

$$Y(E) = \left(\frac{|E|}{E_c + |E|} \right)^m$$

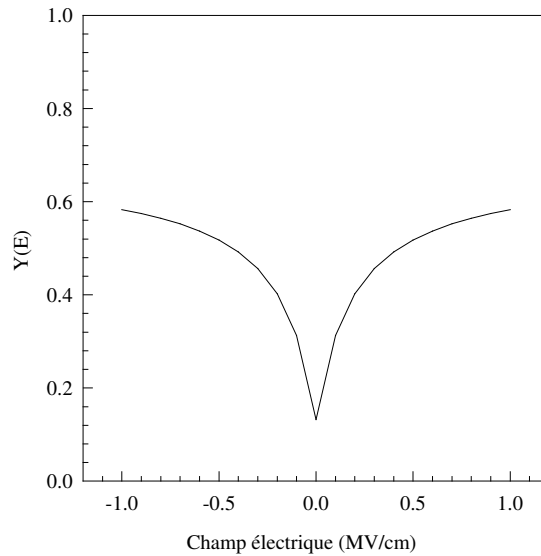


Figure I - -11: Allure générale de la fonction yield^[DOZIER 87] avec les paramètres caractéristiques d'une source Co⁶⁰, $E_c = 0,55$ MV/cm, $m = 0,7$.

C - Transport des porteurs dans SiO₂

La façon la plus simple de considérer la conduction électronique dans un isolant du type SiO₂, est de modifier le modèle déduit de la théorie des bandes d'énergie électronique appliquée habituellement aux semi-conducteurs^[O'DWYER 73].

Le transport y est décrit par l'intermédiaire de la bande de conduction, de la bande de valence et de niveaux localisés dont l'énergie est située dans la bande interdite et qui agissent comme centres pièges. L'introduction du désordre à longue distance (matériaux amorphes) crée des "queues de bandes" correspondant à une distribution de niveaux situés dans la bande interdite^{[MOTT 77][COHEN 69]}.

Dans le modèle de transport que nous utilisons, nous supposons donc que les porteurs (électrons et trous) se déplacent dans un "continuum" de niveaux délocalisés appelé bande de mobilité, et subissent une suite de piégageages et de dépiégeages sur des niveaux localisés (théorie MTD, "Multiple Trapping Detrapping"^[SCHER 73], ou conduction contrôlée par les pièges) ou peuvent se recombiner par l'intermédiaire de centres (recombinaison de type SHR "Shockley-Read-Hall"^[van der ZIEL 76]).

On définit une mobilité μ du porteur dite mobilité de bande. Cette mobilité est différente de la mobilité intégrant le temps de vol dans la bande de mobilité et les piégeages-dépiégeages successifs^[HUGHES 78].

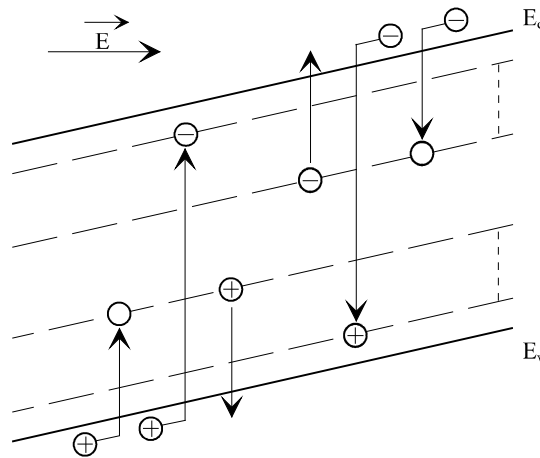


Figure I - -12 : Mécanismes du transport dans les SiO₂.

Le piégeage correspond à la capture par un centre neutre d'un porteur libre ou à la capture par un centre coulombien répulsif (ayant déjà piégé un porteur de même signe). Nous ne retiendrons que la capture par centre neutre dans ce travail.

Le dépiégeage correspond à la réémission d'un porteur piégé vers sa bande de mobilité.

La recombinaison décrit l'attraction d'un porteur libre par le centre coulombien créé par un porteur piégé de signe opposé.

1 - Le piégeage

Nous négligeons toute interaction directe des pièges de l'oxyde avec les porteurs libres du silicium et du matériau constituant la grille. Nous rappelons que ces interactions sont décrites par un mécanisme d'effet tunnel mettant en jeu des niveaux localisés près de l'interface.

Le piégeage des porteurs libres sur les pièges est habituellement décrit à l'aide de la section efficace de capture^[van der ZIEL 76]. Un modèle de description des interactions entre le piège initialement neutre et le porteur libre est donné par Krantz^[KRANTZ 87] :

Pour l'électron libre

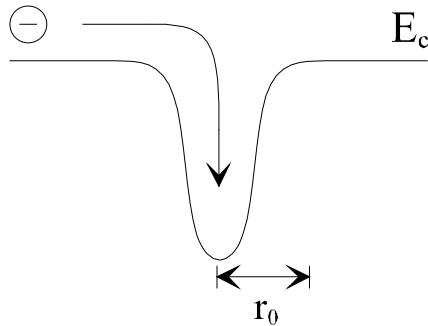


Figure I - -13 : Piégeage d'un électron sur un site vide.

A la périphérie du piège vide, l'énergie potentielle est donnée par^[TZOU 83] :

$$V(r) = \frac{A}{r^m}$$

m prend les valeurs 4 ou 6,5 et A est proportionnel à $q^2/\epsilon_{\text{SiO}_2}$.

La section efficace de capture est alors déterminée par la résolution de l'équation de l'énergie potentielle : $V(r) = -2kT$.

La littérature donne $\sigma_{\text{nt}_0} \approx 10^{-14} \text{ cm}^2$ et $\sigma_{\text{pt}_0} \approx 1,4 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ à température ambiante.

Influence de champ électrique

L'effet du champ électrique sur les sections de capture des pièges se traduit par l'expression générale suivante :

$$\sigma(E) = \sigma_0 \cdot \alpha \cdot E^{-n}$$

Ning^[NING 76] puis Krantz ont montré une plus faible influence du champ sur la section efficace de capture de pièges à électron neutres. On peut écrire que $\sigma_{\text{nt}}/\sigma_{\text{nt}_0} \approx 0,3 \cdot \sigma_{\text{pt}}/\sigma_{\text{pt}_0}$. Nous admettrons dans ce travail que $\sigma_{\text{nt}}/\sigma_{\text{nt}_0} \approx \sigma_{\text{pt}}/\sigma_{\text{pt}_0}$.

2 - Le dépiégeage

Le dépiégeage correspond au transfert d'un porteur piégé sur centre vers la bande de mobilité correspondante ou vers le matériau voisin (silicium ou métal). Ce transfert s'effectue suivant différents processus représentés schématiquement sur la figure I - -14 :

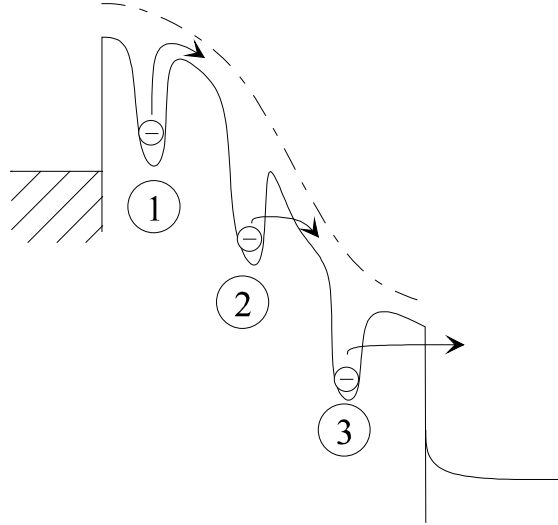


Figure I - -14 : Représentation schématique des processus de dépiégeage dans le SiO₂.

Les processus représentés schématisent :

- 1 - La réémission par excitation thermique.
- 2 - Le dépiégeage tunnel par effet Poole-Frenkel.
- 3 - Le dépiégeage par effet tunnel des pièges voisins de l'interface.

a - Excitation thermique

Ce processus correspond à la libération du porteur par une interaction de celui-ci avec les vibrations du réseau. La fréquence de libération ν_{TH} d'un porteur est donnée par :

$$\nu_{TH} = \nu_0 \exp\left(-\frac{qE_a}{kT}\right)$$

où ν_0 est la fréquence associée à la vibration du phonon, habituellement de l'ordre de 10^{12} s^{-1} . E_a représente l'énergie d'activation thermique, c'est-à-dire l'énergie qui sépare le piège de la bande de mobilité. Le facteur de Boltzmann $\exp\left(-\frac{qE_a}{kT}\right)$ représente la probabilité qu'un porteur piégé de gagner une énergie E_a par période de vibration. Ainsi, si p_t est la concentration de porteurs piégés et si la concentration de niveaux libres dans la bande de mobilité est grande alors le taux de libération est le produit de ν_{TH} par p_t .

Principe de l'équilibre détaillé

On peut relier v_0 à la section efficace de capture σ du piège, en utilisant le principe de l'équilibre détaillé associé à la statistique de Fermi-Dirac. L'équation d'évolution des électrons piégés s'écrit :

$$\frac{dn_t}{dt} = \sigma_{nt} v_{th} (N_t - n_t) n - v_0 n_t \exp\left(-\frac{qE_a}{kT}\right)$$

où N_t , n_t et n sont respectivement la densité de pièges à électron, la densité d'électrons piégés et la densité d'électrons libres, v_{th} est la vitesse d'agitation thermique des porteurs, σ_{nt} la section efficace de capture des électrons et E_a est l'énergie d'activation du piège.

A l'équilibre, en identifiant l'équation précédente à zéro, sachant que :

$$n_t = N_t \frac{1}{1 + \exp\left(-q \frac{E_a - E_f}{kT}\right)} \quad \text{et} \quad n = N_c \exp\left(-q \frac{E_f}{kT}\right)$$

avec E_f le niveau de Fermi et N_c la densité d'états de la bande de conduction.

La référence en énergie étant la bande de conduction, on en déduit la relation :

$$v_0 = N_c \cdot \sigma_{nt} \cdot v_{th} \quad \text{avec} \quad N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad v_{th} = \left(\frac{3kT}{m_e} \right)^{1/2}$$

où m_e est la masse efficace de l'électron dans la bande de conduction.

Un raisonnement identique permet de relier la fréquence d'émission des pièges à trou à leur section efficace.

On constate que v_0 varie suivant le carré de la température en supposant que σ est indépendante de celle-ci.

Modèle analytique

L'évolution de la densité des électrons piégés en fonction de l'énergie d'activation E_a et du temps, induite par la variation température, se modélise alors par l'expression suivante^[MILLER 92], déduite du raisonnement précédent :

$$\frac{\partial n_t(E_a, t)}{\partial t} = -n_t(E_a, t) A T^2(t) \exp\left(-q \frac{E_a - R}{k \cdot T(t)}\right) \quad (1)$$

$$A = 2\sigma_{nt} \left(\frac{3 \cdot k}{m_e} \right)^{1/2} \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot m_e \cdot k}{h^2} \right)^{3/2}$$

où $n_t(\phi, t)$ est la densité d'électrons piégés avec une énergie d'activation E_a , $R = \beta\sqrt{E}$ rend compte de l'abaissement de la barrière en fonction du champ électrique par l'effet

Poole-Frenkel^[FRENKEL 38] ($\beta = \beta_{PF} = \sqrt{q/\pi\epsilon}$), ou par l'effet Schottky^[SIMMONS 67] ($\beta = \beta_S = \beta_{PF}/2$). m_e est la masse efficace des électrons.

La réémission des trous piégés se modélise avec la même expression en tenant compte des grandeurs qui leur sont associées.

b - Effet tunnel

Le dépiégeage d'un porteur par effet tunnel vers la bande de mobilité de l'isolant peut être en compétition avec le dépiégeage thermique. Ce processus qui a lieu dans la masse de l'isolant est assimilable à une ionisation par effet de champ. La théorie décrivant ce processus est assez délicate et nécessite d'autre part une connaissance précise de la bande de conduction sous l'effet du champ électrique. Les méthodes théoriques pour décrire le phénomène utilisent la règle d'or de Fermi^[COHEN-Tannoudji 73]. Le taux de dépiégeage est donné par :

$$v_T = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E)$$

où $\rho(E)$ est la densité d'états, à l'énergie E , dans la bande de conduction de l'isolant soumis au champ électrique F et M est l'élément de matrice reliant l'état initial (état associé à la charge piégée) et les états finals de la bande. La règle d'or de Fermi impose un faible recouvrement des fonctions d'ondes donc une profondeur de piège suffisante et un champ suffisant compte tenu de cette profondeur. D'autre part, l'évaluation de M est faite en utilisant la méthode BKW^[MESSIAH 65] qui nécessite un champ pas trop important. Des résultats ont été proposés par Sah^[SAH 90] en considérant une barrière de potentiel de forme triangulaire :

$$v_T = \left(\frac{\pi^2}{h^3} \right) \sqrt{m^*} \left(\frac{qF}{E_a} \right) W^2 \exp(-2\theta) \text{ avec } 2\theta = \int_0^{\frac{E_a}{qF}} \sqrt{8m_0 \hbar^2 (-qFx + E_a)} \cdot dx = \frac{4}{3} \frac{E_a}{qF} \frac{\sqrt{2m_0}}{\hbar}$$

La valeur de W^2 est évaluée avec peu de précision. La valeur habituellement prise est $W^2 = 10^{-24} \text{ V}^2 \cdot \text{cm}^3$.

Sur la figure I - 11 nous donnons une comparaison des fréquences d'émission v_{TH} et v_T , en fonction de l'énergie d'activation du piège sous un champ électrique de 1MV/cm pour les températures 200 °K et 300 °K.

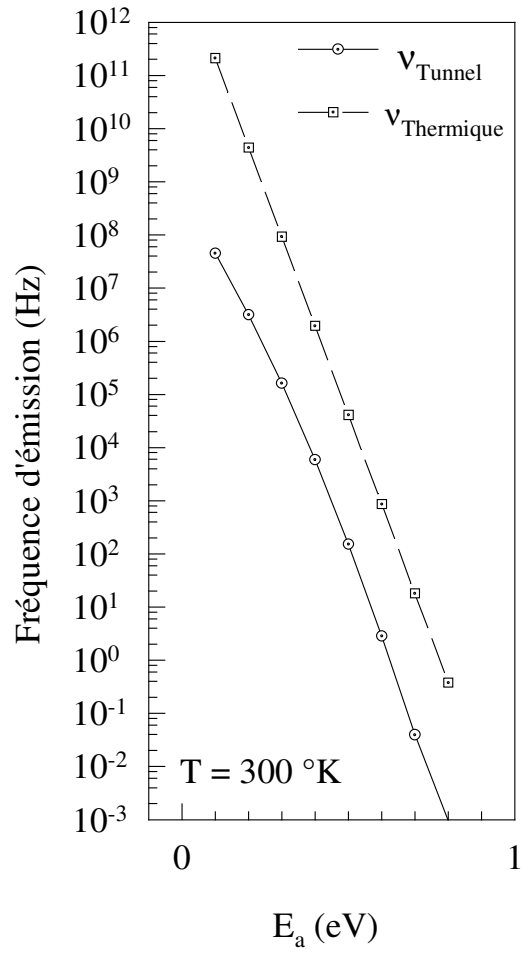
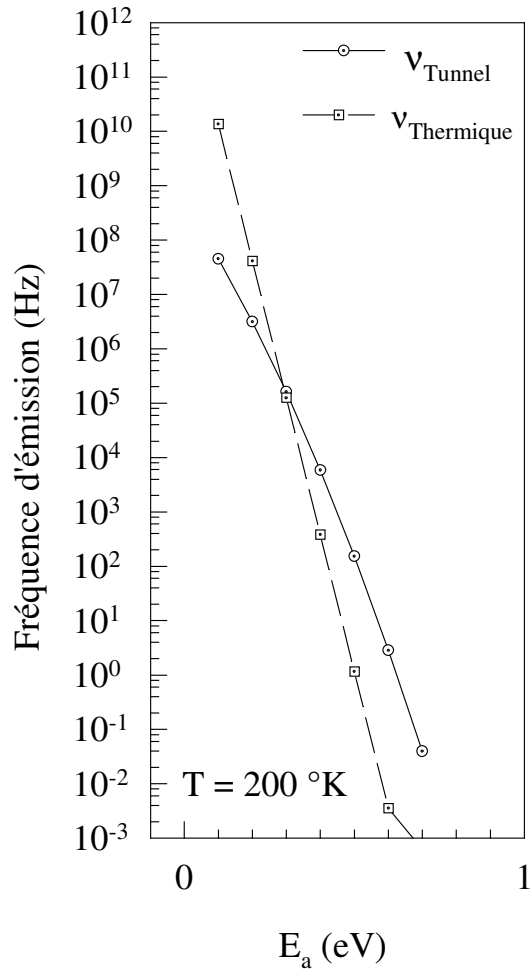


Figure I - -16: Comparaison des fréquences d'émission Tunnel et Thermique à 200 °K et 300 °K pour 1 MV/cm.

D'après ce modèle, il paraît difficile de faire la part des choses au voisinage de 200 °K.

Le traitement du dépiégeage par effet tunnel vers les états du Si présente les mêmes difficultés. Ce dépiégeage est cependant limité aux niveaux très voisins de l'interface.

1 - La recombinaison

La recombinaison correspond à l'annihilation d'un porteur piégé par le porteur libre de signe opposé. On distingue alors deux types de recombinaison caractérisés par leur section efficace de recombinaison. Nous appelons σ_{pr} la section efficace de recombinaison d'un électron piégé avec un trou libre et σ_{nr} celle associée à la recombinaison d'un trou piégé avec un électron libre. Les centres de recombinaison sont dans ce cas des centres coulombiens attractifs^[DUSSEL 70]. L'interaction est schématisée par :

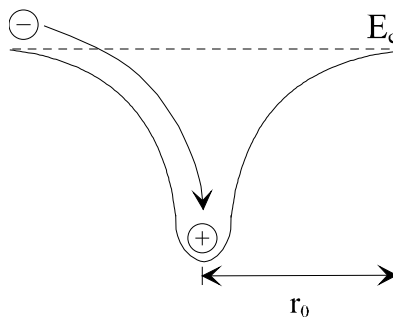


Figure I - -17: Piégeage d'un électron sur un site coulombien attractif

La section efficace est déterminée par la résolution de l'équation : $\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_{\text{SiO}_2} r} = -2kT$

Influence du champ électrique

De même que pour les sections efficaces de capture, les sections efficaces de recombinaison sont sensibles au champ électrique. Ces pièges chargés étant des centres coulombiens, leur section efficace est d'autant plus sensible. Elles suivent une loi proportionnelle à $E^{-\alpha}$ ^[NING 76], α étant un paramètre prenant les valeurs 1,5 et 3 suivant le domaine de champ électrique. Nous indiquerons dans le deuxième chapitre les lois utilisées pour modéliser cette influence.

D - Méthodes expérimentales de caractérisation

1 - Mesure de la dérive de tension seuil

Les charges localisées dans l'oxyde et aux interfaces induisent une variation de la tension de bande plate dans le silicium. La dérive de la tension de seuil correspond à la tension qu'il faut appliquer sur la grille pour compenser la charge image induite dans le silicium par les charges piégées dans l'oxyde. Cette dérive correspond, dans une structure unidimensionnelle, au premier moment de la charge par rapport au canal. Elle se calcule par l'intégration suivante, de la grille ($x = 0$) vers l'interface ($x = e_{ox}$) :

$$\Delta V_t = -\frac{q}{\epsilon_{SiO_2}} \int_0^{e_{ox}} xQ(x)dx$$

où $Q(x) = Q_{ox}(x)$ et $Q(e_{ox}) = Q_i$, Q_{ox} étant la charge dans le volume, Q_i étant la charge due aux états d'interface et e_{ox} l'épaisseur de l'oxyde (la grille étant prise comme origine des x).

Des mesures expérimentales on peut déduire la densité équivalente de charges Q_{eff} ramenée à l'interface, connaissant la capacité surfacique associée à l'oxyde C_{ox} , en effet l'expression de ΔV_t devient :

$$\Delta V_t = -\frac{Q_{eff} + Q_i}{C_{ox}}$$

Un calcul approché de la dérive de tension seuil ^{[ESCOFFIER 95][PAILLET 94][LERAY 89]} en considérant un modèle simple de transport et de piégeage des porteurs libres et en faisant l'hypothèse que la mesure expérimentale donne l'indication de la charge nette équivalente ramenée à l'interface, permet d'extraire à partir des mesures expérimentales les sections efficaces de capture et les densités équivalentes, ramenées à l'interface, des charges piégées dans l'oxyde. On a :

$$\Delta V_{FB} = \frac{qe_{ox}}{\epsilon_{SiO_2}} \left(N_n \left(1 - \exp(\sigma_{nt} \cdot g_0 \cdot e_{ox} \cdot Y(E) \cdot D) \right) - N_p \left(1 - \exp(\sigma_{pt} \cdot g_0 \cdot e_{ox} \cdot Y(E) \cdot D) \right) \right)$$

où N_n , N_p , e_{ox} , σ_{nt} et σ_{pt} sont respectivement, les densités équivalentes de pièges à électron et à trou, ramenée à l'interface, l'épaisseur de l'isolant SiO₂ considéré, les sections efficaces de capture des pièges à électron et à trou. D correspond à la dose reçue, $Y(E)$ est le terme de non-recombinaison, g_0 est le facteur de génération.

2 - Recuit isotherme et isochrone

Recuit isotherme

Le composant est laissé pendant un temps très long à une température constante. On fait l'hypothèse que le seul mécanisme de guérison est l'émission thermique à partir des pièges. De plus on peut supposer que les charges réémises sont évacuées du composant sans re-piégeage possible. Lorsque la température est constante, l'équation d'activation thermique (1) s'intègre et on obtient :

$$n(\phi, t) = n(\phi, t_0) \exp\left(-AT^2 \exp\left(-q \frac{\phi - R}{k.T}\right).t\right)$$

où R est le facteur de diminution de l'énergie d'activation du piège par effet Poole-Frenkel, A est la fréquence d'échappement indépendante de la température, ϕ est l'énergie d'activation du piège.

On introduit la notion de front de transition^[MILLER 91A] $\phi_m(t)$ qui correspond au niveau pour lequel, à un instant t, le taux d'émission est maximum. Le passage de $n(\phi, t) \approx n(\phi, t_0)$ à $n(\phi, t) \approx 0$ se produit en quelques kT/q autour de $\phi_m(t)$. Les pièges d'énergie $\phi < \phi_m(t)$ sont quasiment dépeuplés et les pièges d'énergie $\phi > \phi_m(t)$ ont une concentration initiale $n(\phi, t_0)$.

L'expression de $\phi_m(t)$ est :

$$\phi_m(t) = R + \frac{kT}{q} \ln(AT^2 t)$$

Cette méthode est toutefois très lente, un niveau d'énergie $E_a = 1,35$ eV sous un champ de 1MV/cm à température ambiante nécessite 140 h pour être dépiégé.

Recuit isochrone

On effectue une succession de paliers isothermes. Le composant polarisé est chauffé pendant une dizaine de minutes puis on mesure la dérive de tension seuil à température ambiante. Le composant est ensuite ramené à une température plus élevée d'une vingtaine de degrés. Le processus de chauffe et de mesure se poursuit à des températures supérieures à celle des mesures de courant thermo-stimulés (CTS) décrit au paragraphe suivant et permet une caractérisation des niveaux profonds.

L'équation d'activation s'intègre sur chaque palier. On démontre^[MILLER 91A] dans ce cas, que le front de transition peut se déduire de la résolution de l'équation suivante :

Au n^{ième} palier

$$\phi_m(t_n) = R + \frac{kT_n}{q} \ln\left(\sum_{k=1}^n (t_k - t_{k-1}) AT_n T_k \exp\left(-\phi_m(t_n) \left[\frac{q(T_n - T_k)}{kT_n T_k}\right] + \left[\frac{qR}{kT_k} - \frac{qR}{kT_n}\right]\right)\right)$$

Une méthode de calcul^[MILLER 91B], basée sur l'analyse de l'évolution temporelle du front d'émission thermique, permet d'extraire la distribution énergétique ainsi que les quantités de charge pour toutes les énergies à partir des résultats de mesures expérimentales de dérive de tension seuil. On a en première approximation :

$$Kn(\phi_m(t), t) \approx -\frac{dV_{th}(t)/dt}{d\phi_m(t)/dt}$$

où K est le premier moment de la distribution normalisée de la charge piégée dans le volume, il s'exprime par :

$$K = \frac{q}{\epsilon_{SiO_2}} \int x \frac{n(x, \phi, t)}{n(\phi, t)} dx$$

L'utilisation de K suppose que la distribution spatiale de la charge piégée sur chaque niveau soit identique et de plus qu'elle soit connue. Dans la mesure où l'on s'intéresse à la charge équivalente, ramenée à l'interface, K est simplement égal à $q \cdot e_{ox}^2 / 2 \cdot \epsilon_{SiO_2}$.

3 - Mesure du courant thermo-stimulé

Cette méthode permet un décompte de la quantité de trous piégés dans l'oxyde ainsi que la détermination de la distribution énergétique de ces trous.

Dans ce cas la température augmente de façon continue avec une pente constante de faible valeur. Le composant est polarisé sous un fort champ et l'on mesure le courant induit par la réémission des porteurs piégés. L'application d'un fort champ permet de faire l'hypothèse que le re-piégeage est négligeable. Cette caractérisation peut être associée à des mesures C-V pour déterminer, sous une configuration précise de la charge piégée, la quantité d'électrons^[FLEETWOOD 92] piégés dans SiO₂.

La méthode générale de calcul^[MILLER 91A] permettant d'extraire les distributions énergétiques des pièges est similaire à celle du recuit isochrone. Le front de transmission est calculé de la même façon, en effet on identifie la rampe de température à de petits paliers. La distribution de la charge piégée s'obtient, en première approximation, par :

$$qn(\phi_m(t), t) \approx -\frac{J(t)}{d\phi_m(t)/dt}$$

A titre d'illustration, nous résolvons numériquement l'équation différentielle pour deux niveaux discrets d'énergie $\phi = 1,4$ et $1,6$ eV dans un oxyde de 350 nm d'épaisseur sous un champ de 2,2 MV/cm. La densité initiale de trous piégés sur ces niveaux est $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. T(t) est une fonction linéaire du temps de pente 0,1 °C/s. Sur la figure I - -18 nous représentons l'évolution de la densité de trous piégés sur chaque niveau en fonction de la température.

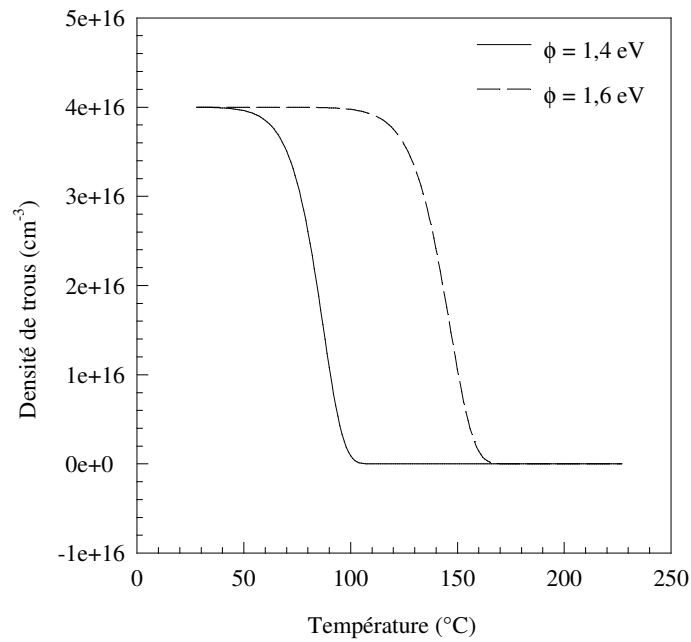


Figure I - -18 : Evolution de la densité de trous piégés en fonction de la température calculée par résolution de l'équation différentielle pour une température variable- Dépiégeage par émission thermique.

Les porteurs libérés sont collectés aux électrodes par l'application d'un fort champ électrique. Sur la figure I - -20 nous présentons la variation de la densité de courant calculée en supposant que tous les porteurs libérés se meuvent vers les électrodes sans re-piégeage et sans recombinaison.

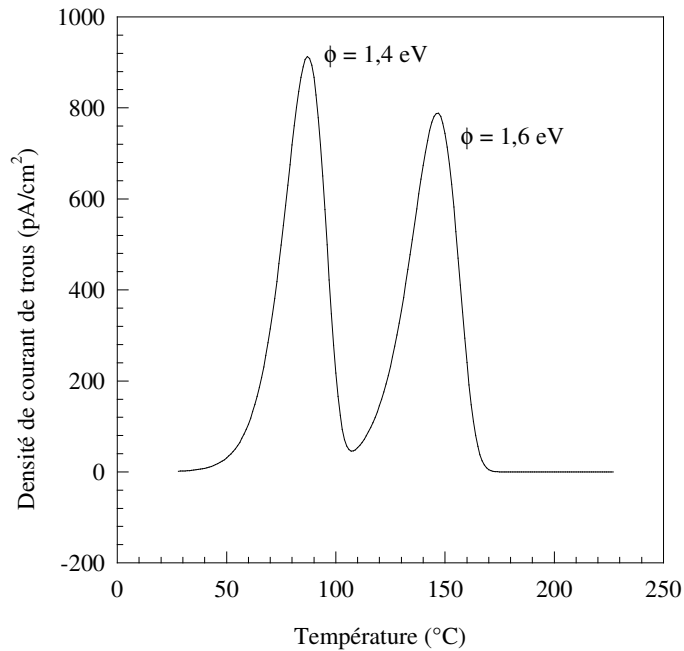


Figure I - -20 : Variation de la densité de courant thermo-stimulé de trous pour deux niveaux 1,4 eV et 1,6 eV.

La densité équivalente de charges piégées du dispositif est de $1,4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, l'intégrale du courant thermo-stimulé de la figure I - -20 est égale à cette densité. A partir du résultat de CTS et en utilisant la méthode de calcul du front d'émission thermique, nous représentons sur la figure I - -22 l'évolution de la charge collectée en fonction de l'évolution du front de transition avec la température, nous retrouvons le maximum de chaque pic de courant pour l'énergie qui correspond au niveau dépiégé.

Le calcul de la densité de trous représentée par la figure I - -22 est égale à $1,51 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, soit une erreur $< 10\%$ par rapport à la densité de trous présents.

La principale limitation de cette technique réside dans la possibilité de re-piégeage dans le volume de l'oxyde. Les charges dépiégées peuvent être re-piégées sur des sites plus profonds en énergie. Ces mesures sont aussi limitées en température, au-delà d'une certaine température la détection de charges dépiégées devient impossible avec l'augmentation du bruit thermique dans le composant non irradié.

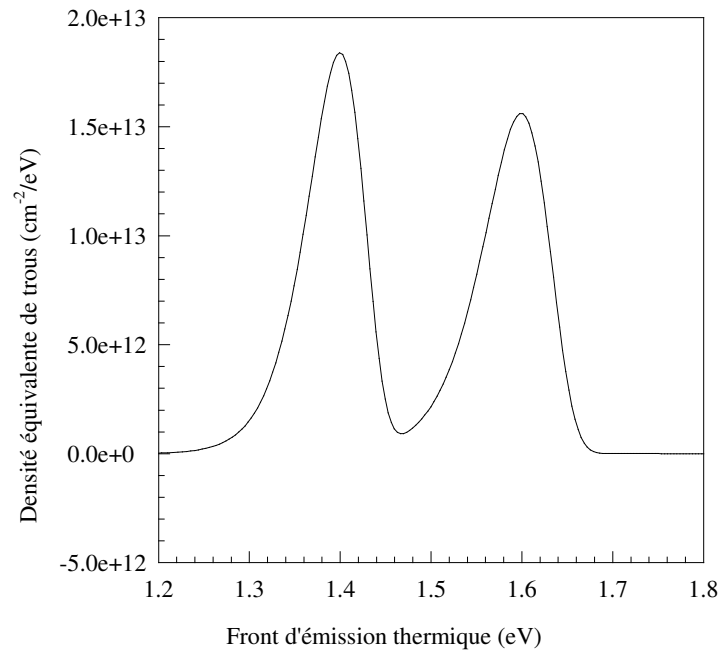


Figure I - -22 : Distribution énergétique des trous piégés déduite du calcul du CTS présenté en figure I - -20 .

CHAPITRE II

MODELE ET METHODES NUMERIQUES

I - Modèle et méthodes numériques

Nous avons décrit précédemment différents mécanismes physiques susceptibles de se produire dans les oxydes soumis à des rayonnements ionisants.

Nous présentons ici le modèle avec lequel nous réalisons la simulation de ces phénomènes physiques survenant dans le SiO₂ sous irradiation ainsi que les différentes techniques numériques qui nous permettent de réaliser cette étude.

A - Modèle

Ce modèle tente de décrire les interactions présentées dans le chapitre précédent. Les porteurs générés dans l'oxyde se déplacent librement dans leur bande permise, interagissent avec un piège vide ou occupé. Le déplacement des porteurs dans leur bande permise est gouverné par leur mobilité et les successions d'événements "déplacement + piégeage + réémission".

1 - Limitations du modèle

Nous rappelons ici les limitations du modèle tel que nous l'avons introduit dans notre simulateur. Ces limitations sont autant de sujets de perfectionnement du modèle et fournissent une base de réflexion.

Pas d'effet tunnel

Nous avons rappelé le principe de l'effet tunnel dans le chapitre précédent. Nous avons pu montrer le domaine de température dans lequel cette limitation n'est pas un handicap majeur.

Pas de création de défaut en cours d'irradiation

Notre modèle ne tient pas compte de la création de pièges en cours de simulation, la quantité de pièges est un paramètre donné en début de simulation et invariant au cours du temps. Or, selon la littérature il est probable qu'en plus des pièges initiaux, les perturbations soient elles-mêmes génératrices ou réductrices de défauts. Nous ne possédons pas de description de ces phénomènes, ils ne figurent pas dans notre modèle.

Pas de capture par agitation thermique

Dans la littérature sur les modélisations du piégeage dans les oxydes par le modèle MTD, le piégeage des porteurs libres est souvent modélisé par l'intermédiaire de la vitesse d'agitation thermique^{[VASUDEVAN 94][LERAY 89]}. Cette modélisation nous semble incomplète dans la mesure où les résultats expérimentaux montrent l'effet du champ appliqué sur le taux de piégeage et la relation entre le piégeage et la vitesse des porteurs correspondant au courant J. La vitesse d'agitation thermique correspond, compte tenu de la mobilité des

trous dans notre modèle, à un champ appliqué de 0,1 MV/cm. Ce modèle classique ne nous permettrait pas de simuler les phénomènes de piégeage se produisant pour des polarisations engendrant des champs supérieurs. De plus la charge d'espace en se formant perturbe la distribution du champ électrique dans le volume qui peut devenir localement supérieur au champ appliqué. Nous aurions, avec le modèle classique, une description incomplète de ces phénomènes.

La question qui se pose cependant concerne les faibles champs, doit-on supposer que le piégeage par agitation thermique se substitue au piégeage tel que nous le modélisons à faible champ; cette approche semble réaliste. Il est possible, même sous fort champ appliqué, d'observer des diminutions, voire des inversions locales, du champ interne. Le modèle de capture dépendant uniquement de la densité de courant pose alors des problèmes de convergence car les porteurs libres s'accumulent dans des cuvettes de potentiel en l'absence de recombinaison.

Si on se réfère à la définition simple de la section efficace de capture, c'est-à-dire une section telle que la capture se produise si le volume décrit par le produit de cette section par le trajet du porteur contient un piège, les deux modèles sont coexistants. Cependant le porteur dans son mouvement en absence de champ ne décrit qu'un volume effectif restreint.

Ces remarques nous laissent penser que la modélisation du piégeage par la vitesse d'agitation thermique doit se faire par l'intermédiaire de sections efficaces adaptées.

Dans notre travail nous considérerons que le piégeage n'est dû qu'au mouvement des porteurs sous l'effet de la conduction et de la diffusion.

Pas d'injection aux électrodes

Nous ne modélisons pas les effets Schottky et Fowler-Nordheim à la grille et à l'interface.

2 - Les équations

Le diagramme énergétique de la figure I - -1 illustre les interactions décrites par le modèle du multiple piégeage-dépiégeage dans les oxydes, que nous nous proposons de simuler.

Nous discrétisons la distribution énergétique des pièges dans la bande interdite de l'oxyde par un ensemble de niveaux caractérisés par leur énergie d'activation thermique notés sur la figure I - -1 E_p pour les pièges à trou et E_n pour les pièges à électron.

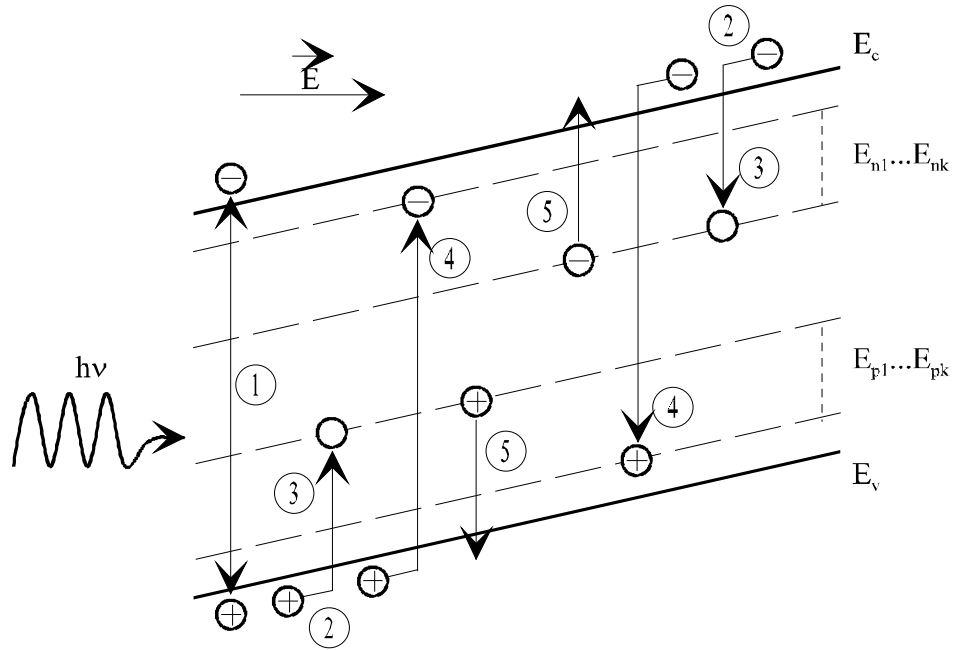


Figure I - -1 : Interactions modélisées, génération, capture, recombinaison et réémission pour les trous et les électrons.

Avec ce modèle, nous décrivons la création de paires électron-trou par rayonnement (1), la conduction et la diffusion des porteurs dans leur bande permise respective (2), le piégeage d'un porteur en mouvement sur un piège d'énergie donnée (3), la recombinaison d'un porteur piégé par un porteur en mouvement de signe opposé (4) et la réémission thermique d'un porteur piégé vers sa bande permise (5). Les échanges de porteurs entre les différents niveaux de piégeage se font uniquement par l'intermédiaire des bandes permises.

Conduction et diffusion

Le déplacement des porteurs dans leur bande permise est modélisé par les équations des densités de courant de trou et d'électron, classiques aux semi-conducteurs^[MATHIEU 87].

$$\begin{aligned}\vec{J}_p &= q\mu_p p\vec{E} - qD_p \vec{\nabla}p \\ \vec{J}_n &= q\mu_n n\vec{E} + qD_n \vec{\nabla}n\end{aligned}\quad (1)$$

où D_p et D_n représentent les coefficients de diffusion des trous et des électrons liés aux mobilités μ_p et μ_n par la relation d'Einstein. Ces mobilités caractérisent le déplacement des porteurs dans leur bande permise respective, nous utiliserons dans SiO_2 les valeurs issues de la littérature suivante :

$$\mu_p = 1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$$

$$\mu_n = 20 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$$

Piégeage de porteurs libres

Le piégeage est décrit par les taux de porteurs piégés sur chaque niveau. Ils s'écrivent pour les trous piégés sur le niveau i et les électrons piégés sur le niveau j :

$$C_p^{(i)} = \sigma_{pt}^{(i)} \left(N_p^{(i)} - p_t^{(i)} \right) \left\| \vec{J}_p \right\|$$

$$C_n^{(j)} = \sigma_{nt}^{(j)} \left(N_n^{(j)} - n_t^{(j)} \right) \left\| \vec{J}_n \right\|$$

où J_p , p_t et N_p , (respectivement J_n , n_t et N_n) représentent la densité de courant de trous, la densité volumique de trous piégés et la densité volumique de pièges à trou (respectivement pour les électrons), σ_{pt} et σ_{nt} les surfaces de capture de trous et d'électrons.

Recombinaison d'un porteur piégé par un porteur libre de signe opposé

Le taux de recombinaison des électrons libres avec des trous piégés sur le niveau i et celui des trous libres avec des électrons piégés sur le niveau j sont décrits par :

$$Re_p^{(i)} = \sigma_{nr}^{(i)} p_t^{(i)} \left\| \vec{J}_n \right\|$$

$$Re_n^{(j)} = \sigma_{pr}^{(j)} n_t^{(j)} \left\| \vec{J}_p \right\|$$

J_p et p_t (respectivement J_n et n_t) représentent la densité de courant de trous, la densité volumique de trous piégés (respectivement pour les électrons), σ_{pr} et σ_{nr} les surfaces efficaces de recombinaison d'un trou libre avec un électron piégé et d'un électron libre avec un trou piégé.

Réémission thermique

Les coefficients de réémission des trous piégés R_p et des électrons piégés R_n , sont :

$$R_p^{(i)} = \sigma_{pt}^{(i)} v_{thp} N_V e^{-q(E_p^{(i)} - E_V)/kT}$$

$$R_n^{(j)} = \sigma_{nt}^{(j)} v_{thn} N_C e^{-q(E_C - E_n^{(j)})/kT}$$

ici, pour l'expression des trous, l'énergie d'activation est $E_a = E_p^{(i)} - E_V$.

Nous améliorons la modélisation de la réémission en tenant compte de l'influence du champ électrique sur l'énergie d'activation par effet Poole-Frenkel que nous rappelons dans la suite du chapitre.

De la description des phénomènes modélisés, nous déduisons le système d'équations décrivant la variation des densités de trous, d'électrons, libres et piégés et leurs influences sur le potentiel à l'intérieur de la structure :

Dans l'oxyde

$$\begin{aligned}\nabla^2 \varphi &= -\frac{q}{\epsilon_{\text{ox}}} \left(p - n + \sum_{i=1}^k p_t^{(i)} - \sum_{j=1}^l n_t^{(j)} \right) \\ q \frac{\partial p}{\partial t} &= -\text{div} \bar{J}_p + qG - \sum_{i=1}^k \left(\sigma_{pt}^{(i)} \left(N_p^{(i)} - p_t^{(i)} \right) \|\bar{J}_p\| - qR_p^{(i)} p_t^{(i)} \right) - \sum_j^l \sigma_{pr}^{(j)} n_t^{(j)} \|\bar{J}_p\| \quad (2) \\ q \frac{\partial n}{\partial t} &= \text{div} \bar{J}_n + qG - \sum_{j=1}^l \left(\sigma_{nt}^{(j)} \left(N_n^{(j)} - n_t^{(j)} \right) \|\bar{J}_n\| - qR_n^{(j)} n_t^{(j)} \right) - \sum_i^k \sigma_{nr}^{(i)} p_t^{(i)} \|\bar{J}_n\|\end{aligned}$$

Pour chaque niveau de pièges à trou modélisé

$$q \frac{\partial p_t^{(i)}}{\partial t} = \sigma_{pt}^{(i)} \left(N_p^{(i)} - p_t^{(i)} \right) \|\bar{J}_p\| - \sigma_{nr}^{(i)} p_t^{(i)} \|\bar{J}_n\| - qR_p^{(i)} p_t^{(i)}$$

Pour chaque niveau de pièges à électron modélisés

$$q \frac{\partial n_t^{(j)}}{\partial t} = \sigma_{nt}^{(j)} \left(N_n^{(j)} - n_t^{(j)} \right) \|\bar{J}_n\| - \sigma_{pr}^{(j)} n_t^{(j)} \|\bar{J}_p\| - qR_n^{(j)} n_t^{(j)}$$

Dans le semiconducteur

$$\begin{aligned}\nabla^2 \varphi &= -\frac{q}{\epsilon_{\text{sc}}} \left(N_D - N_A + p - n \right) \\ q \frac{\partial p}{\partial t} &= -\text{div} \bar{J}_p + qG \\ q \frac{\partial n}{\partial t} &= \text{div} \bar{J}_n + qG\end{aligned}$$

où J_n et J_p , sont les densités de courant des électrons et des trous rappelées en (1).

Conditions aux limites

Nous modélisons les conditions aux limites de la structure par des conditions de Dirichlet^[DHAT 81] pour l'équation de Poisson en fixant la valeur du potentiel aux contacts et par des conditions de Cauchy^[DHAT 81] pour les densités de porteurs libres (n et p) par la vitesse de recombinaison aux contacts. L'expression du courant aux contacts est^[van der ZIEL 76] :

$$J_c = qv(n - n_0)$$

où n_0 est la densité de porteur à l'équilibre, n la densité de porteur au temps de calcul, v est la vitesse de recombinaison aux contacts.

Nous prendrons dans notre modèle une vitesse de recombinaison élevée, de valeur typique $v = 10^{10}$ m/s.

3 - Lois associées

a - Sections efficaces de capture et de recombinaison

Nous tenons compte de l'influence du champ électrique pour le calcul des sections efficaces de capture et de recombinaison.

Sections efficaces de capture

Nous utilisons la formulation proposée par Krantz pour les pièges à électron et les pièges à trou :

$$\sigma(E) = \sigma_0 \cdot (1 + 1,9 \cdot 10^{-4} \cdot E^{0,55})^{-1}$$

La figure I - -2 représente la variation normalisée de σ pour les électrons et les trous en fonction du champ électrique.

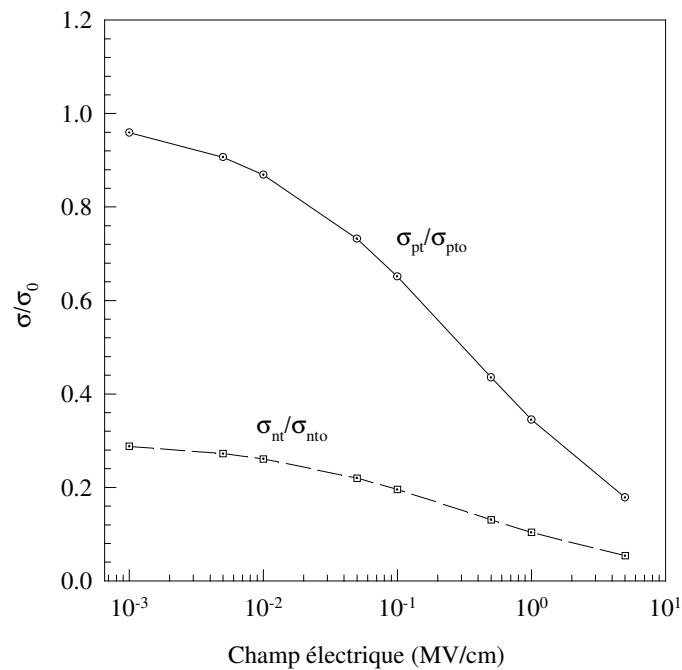


Figure I - 2 : Influence du champ électrique sur les sections efficaces de capture des pièges vides.

Sections efficaces de recombinaison

Nous nous reportons à l'étude faite par Ning^[NING 76] pour la modélisation de l'influence du champ électrique sur la section efficace de recombinaison. La figure I - -4 récapitule l'évolution de la section de recombinaison en fonction du champ électrique.

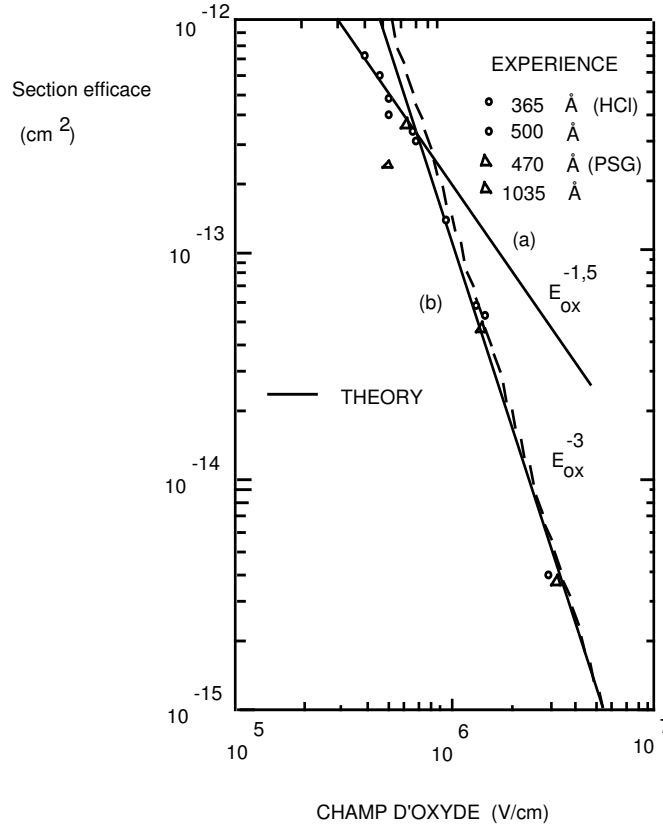


Figure I - -4 : Sections efficaces de recombinaison d'un électron sur un centre coulombien attractif dans le SiO₂[NING 76].

Le modèle implanté est directement issu du modèle analytique qu'il propose dans l'article. La figure I - -4 montre deux domaines distincts d'influence du champ électrique, rappelée dans le tableau I - -1.

$E \leq 0,7 \cdot 10^6$	$0,7 \cdot 10^6 \leq E$
$\sigma \approx \sigma_o \cdot \alpha \cdot E^{-1,5}$	$\sigma \approx \sigma_o \cdot \beta \cdot E^{-3}$

Tableau I - -1: Expression de la section efficace de recombinaison en fonction du champ électrique

Le calcul numérique supporte mal les non-uniformités dans la variation des grandeurs, pour éliminer la cassure de pente nous avons "mis en parallèle" les deux modèles d'influence du champ électrique, nous avons :

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \left(f_a(E)^{-1} + f_b(E)^{-1} \right)^{-1}$$

où $f_a(E)$ modélise l'influence des champs inférieurs à 0,7 MV/cm et $f_b(E)$ modélisent les champs supérieurs.

La figure I - -6 reprend les courbes théoriques données par Ning et montre les variations de l'expression que nous avons utilisée.

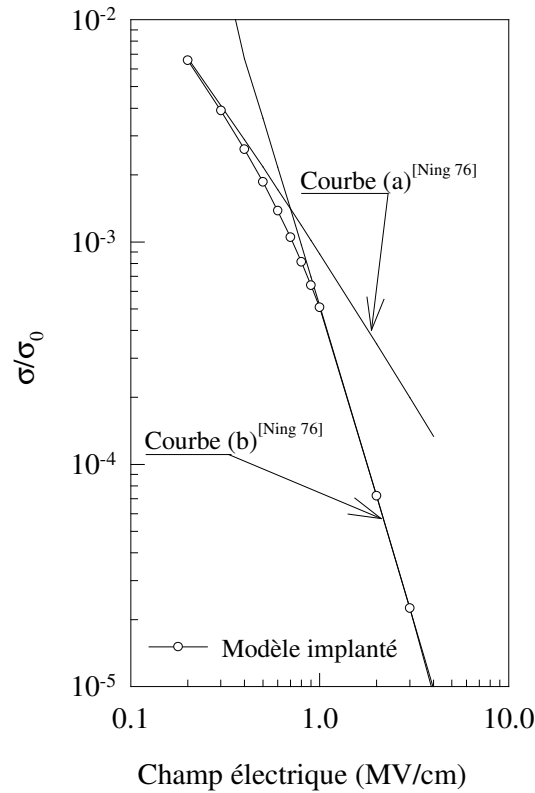


Figure I - -6 : Comparaison du modèle utilisé avec les modèles théorique.

Le modèle utilisé est appliqué aux électrons et aux trous.

b - Séparation des paires générées : Fonction Yield

Nous modélisons la génération induite par rayonnement par l'expression du taux de génération :

$$G = Dg_0Y(E) \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$$

D : débit de dose ($\text{rad}\cdot\text{s}^{-1}$).

g_0 : facteur de génération de paire fonction du matériau ($\text{rad}^{-1}\cdot\text{cm}^{-3}$)

$Y(E)$: fonction de génération de la fraction de paires non recombinées.

Nous retenons pour ce travail la formulation relative aux rayonnements $X^{[LERAY 89]}$ rappelée au chapitre I en prenant $E_0 = 0,55$ MV/cm et $Y_0 = 0,065$. L'expression devient :

$$Y(E) = \left(\frac{|E| + 0,036}{|E| + 0,55} \right) \text{ où } E \text{ est exprimé en MV/cm.}$$

La figure I - -8 décrit l'évolution de $Y(E)$ utilisée pour ce travail.

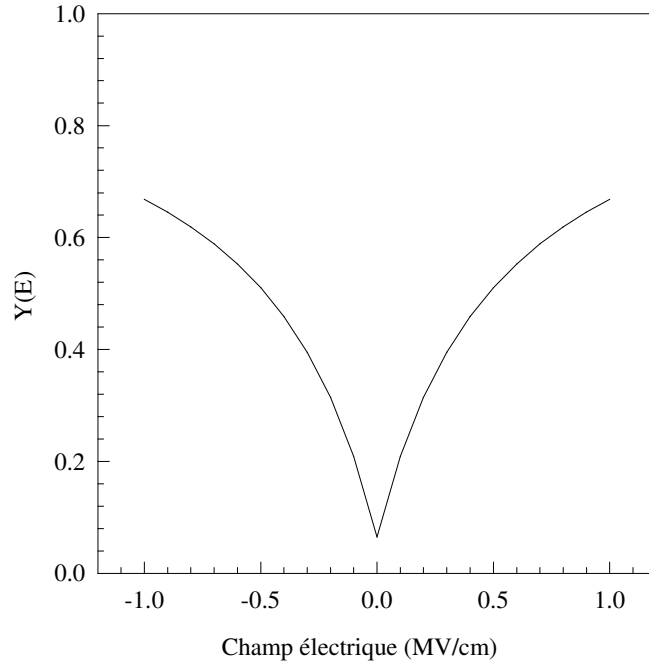


Figure I - -8 : Allure générale de la fonction yield^[LERAY 89] avec les paramètres caractéristiques de rayons γ à 1MeV $Y_0 = 0,065$ et $E_0 = 0,55$ MV/cm.

c - Densité d'états dans les bandes de conduction et de valence

Les densités d'état des bandes de conduction N_c et de valence N_v s'expriment :

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad N_V = 2 \cdot g \cdot \left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

g est la multiplicité d'état du trou prise égale à 1.

d - Vitesse d'agitation thermique

L'expression de la vitesse d'agitation thermique est la suivante : $v_{th} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$

m étant la masse efficace des porteurs.

Nous avons pour les électrons $m_e = 0,5 m_0$, et pour les trous $m_h = m_0$.

e - Niveau énergétique des pièges : effet Poole-Frenkel

L'expression analytique de l'effet Poole-Frenkel se rapproche de celle de l'effet Schottky à un facteur 2 près^[O'DWYER 73]. Cependant les travaux de Miller^[MILLER 92] indiquent que l'effet mesuré par les expérimentations se rapproche plus de la formulation Schottky. Nous avons donc utilisé dans notre modèle la formulation Schottky. L'expression de l'énergie d'activation d'un niveau piège à trous discret i , d'énergie initiale E_p , en fonction du champ électrique s'écrit :

$$E_a^{(i)} = E_p^{(i)} - E_v - \sqrt{\frac{qE}{4\pi\epsilon_{ox}}}$$

L'expression pour les électrons est identique.

B - Discrétisation et résolution des équations

Les équations présentées au paragraphe précédent décrivent le comportement des grandeurs dans des domaines continus. Ce sont des équations aux dérivées partielles non linéaires pour lesquelles il n'existe pas de solution analytique. La résolution numérique de ces équations impose de les transposer dans un domaine discret et de les rendre linéaires par des méthodes adaptées. Nous présentons brièvement les techniques de discrétisation spatiale à une dimension.

1 - Discrétisation spatiale

Nous décomposons le domaine continu de la structure étudiée à l'aide d'un maillage en un ensemble d'éléments 1D (lignes) dans lesquels les équations seront transposées en équations algébriques sous certaines approximations sur la variation de la solution à l'intérieur des éléments. La validité de ces approximations ira de pair avec la finesse des éléments des zones dans lesquelles la solution présente de fortes variations.

Les éléments sont définis par les coordonnées de leurs noeuds. Ils sont juxtaposés sans recouvrement et représentent un partitionnement exact du domaine continu étudié.

Les noeuds de ces éléments sont les points géométriques sur lesquels nous relevons l'évolution des grandeurs du modèle. Nous construisons alors un système de N équations algébriques, où N est le produit du nombre de noeuds représentant la structure étudiée et du nombre de grandeurs dont nous suivons l'évolution à savoir : le potentiel, la densité de trous, la densité d'électrons, les densités de trous et d'électrons piégés sur les différents niveaux représentés.

Dans la modélisation 1D, nous attribuons à la structure simulée une surface fictive unité, perpendiculaire à la structure 1D pour le respect de la dimension physique des équations modélisées en (2).

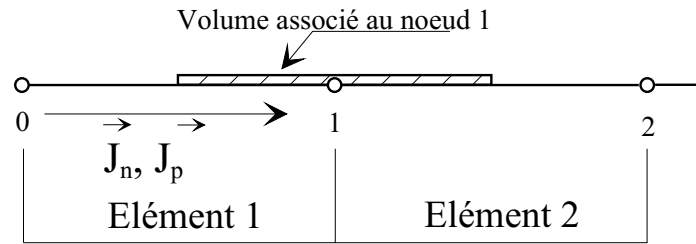


Figure I - -10 : Volume associé.

Nous utilisons la "Box Method" proposée par Cottrell et Buturla^[COTTRELL 79], qui impose les approximations suivantes :

Approximations de la "Box Method" :

- La variation du potentiel est linéaire dans chaque élément.
- Les densités de porteurs, de dopants, de porteurs piégés et de pièges à l'intérieur des volumes associés aux noeuds sont constantes.
- Les vecteurs densité de courant sont constants à l'intérieur d'un élément.

Les équations écrites dans la suite sont indiquées pour un élément référence de noeud 0 et 1. E_{x1} désigne l'équation discrétisée x (Poisson, continuité n, ...) pour le noeud 1. Nous détaillons chaque équation pour chaque noeud de l'élément référence. Ces équations sont identiques pour tous les éléments de la structure.

a - Equation de Poisson

Le terme différentiel de l'équation de Poisson est rendu algébrique par la méthode des éléments finis^[DHAT 81] en prenant pour fonctions de pondération des fonctions polynomiales d'ordre 1 (méthode de Galerkin).

L'équation de Poisson dans l'élément repéré 1 sur la figure I - -10 se réduit alors aux équations algébriques suivantes :

Dans le cas d'un élément appartenant au SiO₂

$$E_{\varphi_0}: \quad \varepsilon_{\text{SiO}_2} \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{x_1 - x_0} - qV_0 \left(p_0 - n_0 + \sum_i p_{t_0} - \sum_j n_{t_0} \right) = 0$$

$$E_{\varphi_1}: \quad \varepsilon_{\text{SiO}_2} \frac{\varphi_1 - \varphi_0}{x_1 - x_0} - qV_1 \left(p_1 - n_1 + \sum_i p_{t_1} - \sum_j n_{t_1} \right) = 0$$

Dans le cas d'un élément appartenant au Si

$$E_{\varphi_0}: \quad \varepsilon_{\text{Si}} \frac{\varphi_0 - \varphi_1}{x_1 - x_0} - qV_0 \left(p_0 - n_0 + N_{D_0} - N_{A_0} \right) = 0$$

$$E_{\varphi_1}: \quad \varepsilon_{\text{Si}} \frac{\varphi_1 - \varphi_0}{x_1 - x_0} - qV_1 \left(p_1 - n_1 + N_{D_1} - N_{A_1} \right) = 0$$

où φ , n , p , sont respectivement le potentiel électrostatique et les densités d'électrons et de trous, n_t , p_t , les densités d'électrons piégés, de trous piégés dans le SiO₂, N_D , N_A les densités de dopant dans le Si. x est la position et V le volume associé au noeud dans l'élément considéré. Les indices 0 et 1 repère le noeud de départ et le noeud d'arrivée (choisis arbitrairement) dans l'élément considéré.

b - Equations de continuité

Nous devons discrétiser l'expression de la densité de courant J à l'aide de la statistique de Boltzman, ce travail a été détaillé par Michez^[MICHEZ 91B], nous rappelons la formulation :

$$J_{n_{01}} = q\mu_{01} \frac{kT}{q} \frac{1}{\ell} \left(n_0 Z(\Delta_{n_{01}}) - n_1 (\Delta_{n_{01}} + Z(\Delta_{n_{01}})) \right)$$

$$J_{p_{01}} = q\mu_{01} \frac{kT}{q} \frac{1}{\ell} \left(p_1 Z(\Delta_{p_{01}}) - p_0 (\Delta_{p_{01}} + Z(\Delta_{p_{01}})) \right)$$

où $Z(\Delta) = \frac{\Delta}{e^{\Delta} - 1}$ est la fonction de Bernouilli.

Δ traduit la variation des bandes de conduction pour les électrons et de valence pour les trous, du noeud 0 au noeud 1 et s'exprime par :

$$\Delta_{n_{01}} = \frac{q}{kT} (E_{C_0} - E_{C_1}) \quad \text{et} \quad \Delta_{p_{01}} = \frac{q}{kT} (E_{V_0} - E_{V_1})$$

Après intégration dans les volumes associés aux noeuds, les équations de continuité s'écrivent pour l'élément 1^{[MICHEZ 91B][ESCOFFIER 95]} :

Dans le cas d'un élément appartenant au SiO₂

Pour les trous :

$$E_{p_0}: J_{p_{01}} S_0 + \frac{\ell}{2} S_0 \left(qG_0 - \sum_{i=1}^k \left(\sigma_{pt_0}^{(i)} \left(N_{p_0}^{(i)} - p_{t_0}^{(i)} \right) \right) |J_{p_{01}}| - qR_{p_0}^{(i)} p_{t_0}^{(i)} \right) - \sum_{j=1}^l \sigma_{pr_0}^{(j)} n_{t_0}^{(j)} |J_{p_{01}}| - q \frac{\partial p_0}{\partial t} \right) = 0$$

$$E_{p_1}: J_{p_{10}} S_1 + \frac{\ell}{2} S_1 \left(qG_1 - \sum_{i=1}^k \left(\sigma_{pt_1}^{(i)} \left(N_{p_1}^{(i)} - p_{t_1}^{(i)} \right) \right) |J_{p_{10}}| - qR_{p_1}^{(i)} p_{t_1}^{(i)} \right) - \sum_{j=1}^l \sigma_{pr_1}^{(j)} n_{t_1}^{(j)} |J_{p_{10}}| - q \frac{\partial p_1}{\partial t} \right) = 0$$

Pour les électrons :

$$E_{n_0}: J_{n_{01}} S_0 + \frac{\ell}{2} S_0 \left(qG_0 - \sum_{j=1}^l \left(\sigma_{nt_0}^{(j)} \left(N_{n_0}^{(j)} - n_{t_0}^{(j)} \right) \right) |J_{n_{01}}| - qR_{n_0}^{(j)} n_{t_0}^{(j)} \right) - \sum_{i=1}^k \sigma_{nr_0}^{(i)} p_{t_0}^{(i)} |J_{n_{01}}| - q \frac{\partial n_0}{\partial t} \right) = 0$$

$$E_{n_1}: J_{n_{10}} S_1 + \frac{\ell}{2} S_1 \left(qG_1 - \sum_{j=1}^l \left(\sigma_{nt_1}^{(j)} \left(N_{n_1}^{(j)} - n_{t_1}^{(j)} \right) \right) |J_{n_{10}}| - qR_{n_1}^{(j)} n_{t_1}^{(j)} \right) - \sum_{i=1}^k \sigma_{nr_1}^{(i)} p_{t_1}^{(i)} |J_{n_{10}}| - q \frac{\partial n_1}{\partial t} \right) = 0$$

Dans le cas d'un élément appartenant au Si

Pour les trous

$$E_{p_0}: J_{p_{01}} S_0 + \frac{\ell}{2} S_0 \left(q(G_0 - R_0) - q \frac{\partial p_0}{\partial t} \right) = 0$$

$$E_{p_1}: J_{p_{10}} S_1 + \frac{\ell}{2} S_1 \left(q(G_1 - R_1) - q \frac{\partial p_1}{\partial t} \right) = 0$$

Pour les électrons

(5)

$$E_{n_0}: J_{n_{01}} S_0 + \frac{\ell}{2} S_0 \left(q(G_0 - R_0) - q \frac{\partial n_0}{\partial t} \right) = 0$$

$$E_{n_1}: J_{n_{10}} S_1 + \frac{\ell}{2} S_1 \left(q(G_1 - R_1) - q \frac{\partial n_1}{\partial t} \right) = 0$$

J_n et J_p représentent les densités de courant, dont l'expression discrétisée est rappelée en (5), allant par convention du noeud où les grandeurs sont calculées vers l'autre noeud de l'élément, S est la surface fictive que traverse le flux associé au noeud de calcul. ℓ représente la longueur de l'arête de l'élément considéré. Ici R est le terme de recombinaison Shockley-Read-Hall dans le Si.

c - Equations d'évolution des densités de porteurs piégés

Les équations d'évolution des porteurs piégés discrétisée s'écrivent^[ESCOFFIER 95] :

Pour l'évolution de la densité de trous piégés :

$$E_{pt_0} : \sigma_{pt_0}^{(i)} \left(N_{p_0}^{(i)} - p_{t_0}^{(i)} \right) \left| J_{p_{01}} \right| - \sigma_{nr_0}^{(i)} p_{t_0}^{(i)} \left| J_{n_{01}} \right| - q R_{p_0}^{(i)} p_{t_0}^{(i)} - q \frac{\partial p_{t_0}}{\partial t} = 0$$

$$E_{pt_1} : \sigma_{pt_1}^{(i)} \left(N_{p_1}^{(i)} - p_{t_1}^{(i)} \right) \left| J_{p_{10}} \right| - \sigma_{nr_1}^{(i)} p_{t_1}^{(i)} \left| J_{n_{10}} \right| - q R_{p_1}^{(i)} p_{t_1}^{(i)} - q \frac{\partial p_{t_1}}{\partial t} = 0$$

Pour l'évolution de la densité d'électrons piégés : (6)

$$E_{nt_0} : \sigma_{nt_0}^{(j)} \left(N_{n_0}^{(j)} - n_{t_0}^{(j)} \right) \left| J_{n_{01}} \right| - \sigma_{pr_0}^{(j)} n_{t_0}^{(j)} \left| J_{p_{01}} \right| - q R_{n_0}^{(j)} n_{t_0}^{(j)} - q \frac{\partial n_{t_0}}{\partial t} = 0$$

$$E_{nt_1} : \sigma_{nt_1}^{(j)} \left(N_{n_1}^{(j)} - n_{t_1}^{(j)} \right) \left| J_{n_{10}} \right| - \sigma_{pr_1}^{(j)} n_{t_1}^{(j)} \left| J_{p_{10}} \right| - q R_{n_1}^{(j)} n_{t_1}^{(j)} - q \frac{\partial n_{t_1}}{\partial t} = 0$$

2 - Discrétisation temporelle

Les équations que nous avons présentées en (3), (5) et (6) modélisent l'évolution dans le temps des grandeurs du système. La simulation des phénomènes transitoires nécessite une discrétisation des équations sur des pas de temps permettant une description fidèle de l'évolution du système. Ces pas de temps doivent être choisis de façon à ne pas occulter les événements brefs. D'autre part une description trop fine ne permettrait pas l'observation aisée des phénomènes lents. Nous devons nous munir d'une méthode de discrétisation stable et précise, à pas de temps variable offrant un bon compromis entre ces deux exigences.

Plusieurs méthodes ont été utilisées dans la littérature, en particulier la méthode d'Euler implicite et la méthode de Bank^[BANK 85]. Nous utilisons la méthode de Gear^[MICHEZ 91A], c'est une méthode de différences finies à gauche à l'ordre n , stable et présentant une erreur de troncature faible. Les n états précédents du système forment une base d'interpolation d'une fonction approchée par les polynômes de Lagrange qui permet de prédire l'état du système pour la date courante. Avec la prédiction de l'état courant nous

calculons une nouvelle fonction approchée que nous dérivons par rapport au temps pour la date courante. Le terme dérivé pour une grandeur G s'écrit :

$$\frac{\partial G}{\partial t} = F(G_i, G_{i-1}, \dots, G_{i-n})$$

3 - Constitution du système d'équations

Nous avons présenté les équations discrétisées pour l'élément de référence et nous appliquons ces équations à chaque élément de la structure simulée. Nous obtenons ainsi pour chaque élément un ensemble d'équations pour chaque noeud de l'élément. Ces noeuds possèdent un numéro qui les repère dans le maillage de la structure. A l'aide de ce numéro on construit le système assemblé en utilisant le principe de superposition. Nous noterons ce système $\{E_{\varphi, n, p, nt, pt}\}$.

4 - Méthodes de résolution

Nous résolvons le système d'équations non-linéaires couplées (3), (5) et (6) après avoir développé les termes de dérivée temporelle, par la méthode de Raphson-Newton qui à l'avantage de limiter les problèmes d'oscillation et de divergence.

Le système obtenu à résoudre est de la forme :

$$F(X) = 0$$

où F est l'ensemble des équations du système et X le vecteur représentant l'ensemble des grandeurs du système.

Supposons connue une valeur approchée X_0 de la solution d'un tel système. Par un développement de Taylor au premier ordre on peut écrire :

$$F(X) = F(X_0 + \Delta X) = F(X_0) + [J(X_0)].\Delta X$$

où $[J(X_0)]$ est la matrice Jacobienne du système de terme général

$$J_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \text{ et } \Delta X \text{ est le vecteur des variations des grandeurs.}$$

On peut alors exprimer ΔX par :

$$\Delta X = - [J(X_0)]^{-1} \cdot F(X_0) \quad (7)$$

soit obtenir une nouvelle valeur approchée du vecteur solution $X_1 = X_0 + \Delta X$. On peut alors remplacer X_0 par X_1 pour se rapprocher de la solution. On poursuit ce processus itératif jusqu'à l'obtention d'une valeur X_n suffisamment proche de X_{n-1} .

La résolution de l'équation (7) se fait par une méthode de résolution de système linéaire en écrivant :

$$[J(X_0)]^{-1} \cdot \Delta X = - F(X_0)$$

Nous avons la possibilité de choisir entre plusieurs méthodes de résolution de systèmes linéaires. L'équation de Poisson seule se résout rapidement avec une méthode de Gauss. Cependant les systèmes obtenus par la méthode des éléments finis pour la résolution des équations de continuité sont non-symétriques et très éparés. La résolution du système linéaire est alors effectuée par la méthode du gradient conjugué carré^[SONNEVELD 89] avec préconditionnement par décomposition LU incomplète^[VORST 92] d'ordre n .

De plus pour rendre le système le plus compact possible, nous utilisons la méthode de Gibbs^[GIBBS 76] pour la numérotation des noeuds du maillage.

5 - Exemple de résolution d'une équation différentielle non-linéaire

Nous nous proposons de résoudre, à titre d'illustration, une équation différentielle non-linéaire, et d'étudier pour cette équation les caractéristiques des méthodes de discrétisation en temps et de la méthode de résolution de Raphson-Newton.

Soit à résoudre : $F(G) = \frac{dG}{dt} + \frac{1}{G} = 0$, avec à $t = 0$, $G = 2$.

La solution analytique de cette équation différentielle est : $G(t) = \sqrt{G(0)^2 - 2t}$.

Nous discrétisons l'équation $F(G)$ dans le temps aux dates t_0, t_1, \dots, t_i .

Considérons que G varie linéairement entre deux dates (méthode d'Euler) nous avons alors :

$$\left. \frac{dG}{dt} \right|_{t_1} = \frac{G(t_1) - G(t_0)}{t_1 - t_0}$$

l'équation $F(G) = 0$ s'écrit alors à la date t_1 :

$$F[G(t_1)] = \frac{G(t_1) - G(t_0)}{t_1 - t_0} + \frac{1}{G(t_1)} = 0$$

Nous résolvons alors l'équation discrétisée par la méthode de Raphson-Newton. Le Jacobien s'écrit :

$$J[G(t_1)] = \frac{dF[G(t_1)]}{dG(t_1)} = \frac{1}{t_1 - t_0} + \ln[G(t_1)]$$

L'expression du Jacobien est très simple dans notre cas. Dans le cas de systèmes de n équations à n inconnues il s'écrit sous la forme d'une matrice $n \times n$ des termes dérivés des équations par rapport aux inconnues.

Nous devons résoudre :

$$J[G(t_1)]\Delta G = -F[G(t_1)]$$

La valeur initiale $G^{(0)}(t_1)$ est prise égale à $G(t_0)$. Nous appelons cette méthode d'estimation de la valeur initiale, prédiction à l'ordre 0. On calcule une nouvelle valeur de $G(t_1)$, plus proche de la solution avec l'équation :

$$G^{(1)}(t_1) = G^{(0)}(t_1) + \Delta G(t_1)$$

Nous poursuivons le processus itératif jusqu'à l'obtention de ΔG suffisamment petit.

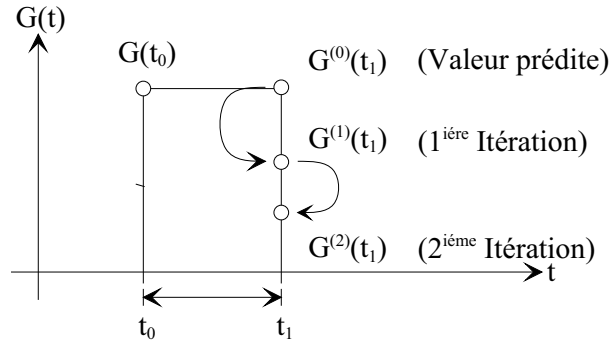


Figure I - -11 : Prédiction de la valeur à $t = t_1$ puis processus itératif de correction de $G(t_1)$ par la méthode de Raphson-Newton.

Une fois obtenue la valeur de $G(t_1)$, on estime la valeur t_2 par $G^{(0)}(t_2) = G(t_1)$ et on applique de nouveau la méthode de Raphson-Newton jusqu'à convergence.

Application numérique

Nous considérons un pas de temps constant $\Delta t = 10^{-1}s$ et $G(t_0) = 2$. Les valeurs estimées pour le calcul à chaque date sont calculées par la prédiction d'ordre 0 définie précédemment :

Date	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Analytique	1.94935887	1.89736606	1.84390889	1.78885438	1.73205081	1.67332005
Prédiction	2	1.94868330	1.89593898	1.84163954	1.78563712	1.72775867
Itération 1	1.95324108	1.90057609	1.84636593	1.79046510	1.73270365	1.67288106
Itération 2	1.94908152	1.89633971	1.84204359	1.78604556	1.72817290	1.66822132
Itération 3	1.94871804	1.89597356	1.84167403	1.78567162	1.72779331	1.66783439
Itération 4	1.94868633	1.89594197	1.84164249	1.78564004	1.72776157	1.66780232
Itération 5	1.94868356	1.89593924	1.84163979	1.78563737	1.72775891	1.66779966
Itération 6	1.94868332	1.89593901	1.84163956	1.78563714	1.72775869	1.66779944
Itération 7	1.94868330	1.89593899	1.84163954	1.78563712	1.72775867	1.66779942
Itération 8	1.94868330	1.89593898	1.84163954	1.78563712	1.72775867	1.66779942
Erreur rel.	0.035%	0.075%	0.12%	0.18%	0.25%	0.33%

Tableau I - -2 : Résolution numérique par la méthode de Raphson-Newton de $dG/dt + G^{-1} = 0$ sans prédicteur avec un pas de temps $\Delta t = 0,1s$.

Influence de la prédiction

Nous améliorons l'estimation de la valeur de G pour la date suivante en effectuant une prédiction d'ordre 1. Cette prédiction permet d'obtenir une valeur initiale plus proche de la solution et donc de réduire le nombre d'itérations de Raphson-Newton.

Nous effectuons la prédiction de G(t₂) en écrivant un polynôme de degré 1 passant par les deux points précédents et en extrapolant la valeur pour t = t₂ :

$$G^{(0)}(t_2) = \frac{t_2 - t_0}{t_1 - t_0} G(t_1) + \frac{t_2 - t_1}{t_0 - t_1} G(t_0)$$

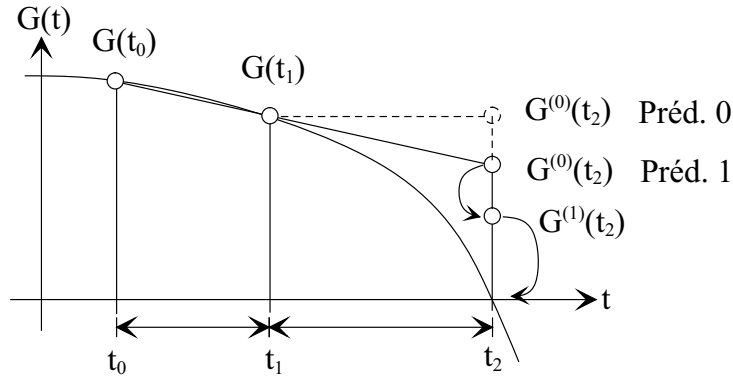


Figure I - -12 : Prédiction par extrapolation du polynôme de degré 1 passant par G(t₀) et G(t₁), en pointillé la valeur initiale obtenue sans prédiction.

La prédiction n'améliore pas la précision des résultats, mais elle permet une convergence plus rapide et donc nécessite moins de temps de calcul. Il n'est pas possible d'utiliser le prédicteur d'ordre 1 pour le calcul de G(t₁) puisque nous ne connaissons qu'un résultat à cette date. Pour ce premier pas de temps nous utilisons le prédicteur d'ordre 0.

Date	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Analytique	1.94935887	1.89736660	1.84390889	1.78885438	1.73205081	1.67332005
Prédiction	2	1.89736660	1.84319467	1.78734010	1.72963471	1.66988022
Itération 1	1.95324108	1.89606221	1.84177233	1.78578102	1.72791564	1.66797198
Itération 2	1.94908152	1.89594962	1.84165088	1.78564928	1.72777180	1.66781372
Itération 3	1.94871804	1.89593990	1.84164051	1.78563815	1.72775977	1.66780061
Itération 4	1.94868633	1.89593906	1.84163963	1.78563721	1.72775876	1.66779952
Itération 5	1.94868356	1.89593899	1.84163955	1.78563713	1.72775868	1.66779943
Itération 6	1.94868332	1.89593899	1.84163954	1.78563712	1.72775867	1.66779942
Itération 7	1.94868330					
Itération 8	1.94868330					
Erreur rel.	0.035%	0.075%	0.12%	0.18%	0.25%	0.33%

Tableau I - -3 : Résolution numérique par la méthode de Raphson-Newton de dG/dt + G⁻¹ = 0 avec prédiction à l'ordre 1 et un pas de temps Δt = 0,1s.

Influence du pas de temps

Nous reprenons la résolution précédente en réduisant le pas de temps de $\Delta t = 0,1s$ à $\Delta t = 0,01s$. Nous présentons les résultats obtenus aux dates 0,1 ; 0,2 ; 0,3 ; 0,4 ; 0,5 et 0,6s pour comparaisons avec les résultats précédents. Le résultat pour 0,1s bénéficie de la prédiction à l'ordre 1 et donc ne peut être comparé aux résultats des tableaux précédents.

Date	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Analytique	1.94935887	1.89736666	1.84390889	1.78885438	1.73205081	1.67332005
Prédiction	1.94930638	1.89724199	1.84370382	1.78855900	1.73165342	1.67280661
Itération 1	1.94929304	1.89722752	1.84368805	1.78854173	1.73163439	1.67278551
Itération 2	1.94929292	1.89722739	1.84368791	1.78854158	1.73163423	1.67278533
Itération 3	1.94929291	1.89722739	1.84368791	1.78854158	1.73163423	1.67278532
Erreur rel.	0.0034%	0.0073%	0.012%	0.017%	0.024%	0.032%

Tableau I - -4 : Résolution numérique par la méthode de Raphson-Newton de $dG/dt + G^{-1} = 0$ avec un pas de temps $\Delta t = 0,01s$.

Nous observons dans ce cas une convergence plus rapide et une erreur relative diminuée d'un facteur 10.

Influence de l'ordre de discrétisation temporelle

Nous allons maintenant discrétiser l'équation à l'ordre 2 en utilisant les polynômes de Lagrange constitués des 2 derniers résultats. On a pour une date t comprise dans l'intervalle $[t_{i-2}; t_i]$:

$$G(t) = \frac{(t - t_{i-2})(t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-2})(t_i - t_{i-1})} G(t_i) + \frac{(t - t_{i-2})(t - t_i)}{(t_{i-1} - t_{i-2})(t_{i-1} - t_i)} G(t_{i-1}) + \frac{(t - t_{i-1})(t - t_i)}{(t_{i-2} - t_{i-1})(t_{i-2} - t_i)} G(t_{i-2})$$

Ainsi en dérivant $G(t)$ par rapport à t à la date t_i on aura :

$$\left. \frac{dG(t)}{dt} \right|_{t=t_i} = \frac{(t - t_{i-2}) + (t - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-2})(t_i - t_{i-1})} G(t_i) + \frac{(t - t_{i-2}) + (t - t_i)}{(t_{i-1} - t_{i-2})(t_{i-1} - t_i)} G(t_{i-1}) + \frac{(t - t_i) + (t - t_{i-1})}{(t_{i-2} - t_{i-1})(t_{i-2} - t_i)} G(t_{i-2})$$

Le Jacobien s'écrit :

$$J[G(t_i)] = \frac{(t_i - t_{i-2}) + (t_i - t_{i-1})}{(t_i - t_{i-2})(t_i - t_{i-1})} + \ln(G(t_i))$$

Par la méthode de Raphson-Newton on obtient l'expression de $G^{(1)}(t_i)$:

$$G^{(1)}(t_i) = G^{(0)}(t_i) + \Delta G(t_i)$$

Le tableau I - -5 récapitule les étapes de la résolution pour un pas de temps de 0,1s. Le résultat pour la date 0,1s est calculé avec l'ordre 1 de discrétisation puisque nous n'avons qu'un résultat antérieur $G(t = 0)$.

Date	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Analytique	1.94935887	1.8973666	1.84390889	1.78885438	1.73205081	1.67332005
Prédiction	2	1.8973666	1.84322164	1.78789498	1.73095026	1.67211406
Itération 1	1.95324108	1.8964792	1.8428506	1.78768279	1.73077582	1.67193363
Itération 2	1.94908152	1.89642709	1.84282907	1.78767062	1.73076592	1.67192349
Itération 3	1.94871804	1.89642404	1.84282782	1.78766992	1.73076535	1.67192292
Itération 4	1.94868633	1.89642386	1.84282774	1.78766988	1.73076532	1.67192289
Itération 5	1.94868356	1.89642385	1.84282774	1.78766988	1.73076532	1.67192289
Itération 6	1.94868332	1.89642385				
Itération 7	1.94868330					
Itération 8	1.94868330					
Erreur rel.	0.035%	0.05%	0.059%	0.066%	0.074%	0.084%

Tableau I - -5 : Résolution numérique par la méthode de Raphson-Newton de $dG/dt + G^{-1} = 0$ discrétisé à l'ordre 2 avec un pas de temps $\Delta t = 0,1s$.

Nous utilisons ici un pas de temps de 0,01s :

Date	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Analytique	1.94935887	1.89736660	1.84390889	1.78885438	1.73205081	1.67332005
Prédiction	1.94934904	1.89735612	1.84389769	1.78884235	1.73203781	1.67330592
Itération 1	1.94934893	1.89735601	1.84389756	1.78884219	1.73203762	1.6733057
Itération 2	1.94934893	1.89735601	1.84389756	1.78884219	1.73203762	1.6733057
Erreur rel.	0.0005%	0.00056%	0.0006%	0.00068%	0.00076%	0.00086%

Tableau I - -7 : Résolution numérique par la méthode de Raphson-Newton de $dG/dt + G^{-1} = 0$ avec un pas de temps $\Delta t = 0,01s$.

La diminution du pas de temps apporte une amélioration d'un facteur 100 sur la précision du résultat. Il faut noter que dans le cas de l'ordre 1 de discrétisation l'amélioration n'était que d'un facteur 10. Le gain se fait aussi bien sur la précision que sur la rapidité d'obtention du résultat.

La figure I - -14 montre les erreurs relatives calculées pour les ordres 1 et 2 de discrétisation en temps avec un pas de temps de 0,01s.

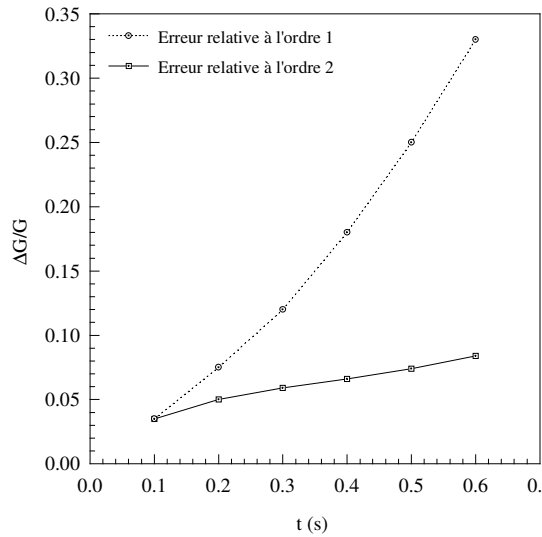


Figure I - 9 : Comparaison des erreurs relatives calculées pour les ordres de discrétisation 1 et 2 ($\Delta t = 0,1s$) pour l'équation $dG/dt + G^{-1} = 0$.

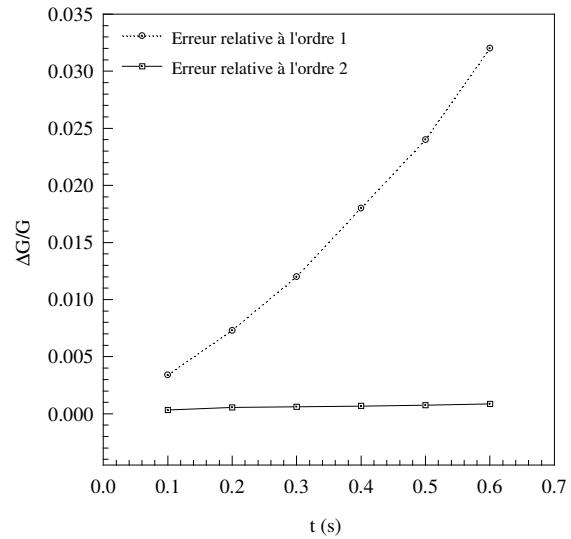


Figure I - 14 : Comparaison des erreurs relatives calculées pour les ordres de discrétisation 1 et 2 ($\Delta t = 0,01s$) pour l'équation $dG/dt + G^{-1} = 0$.

Nous remarquons que les résultats obtenus avec un ordre 1 de discrétisation s'éloignent progressivement de la solution exacte. L'ordre 2 offre une précision plus grande. D'autre part le choix du pas de temps est d'une grande importance. La figure I - 9 montre la comparaison des erreurs relatives obtenues pour l'ordre 1 et 2 avec un pas de temps de 0,1s. sur la figure I - 14, pour laquelle le pas de temps est de 0,01s, nous pouvons observer qu'alors que l'erreur relative pour l'ordre 1 garde la même évolution dans le temps, l'erreur relative obtenue à l'ordre 2 évolue moins rapidement.

Nous utilisons pour nos simulations l'ordre 5 de discrétisation et de prédiction en temps qui nous assure à la fois une bonne convergence, une grande précision et nous autorise des pas de temps importants.

A - Compléments numériques

1 - Modélisation de l'interface SiO₂-Si

Les composants que nous simulons sont composés de SiO₂ sur Si. Le respect des conditions de contact entre ces deux composants et de façon générale entre deux matériaux différents, impose de modéliser une interface sous forme de sous-domaine aux caractéristiques particulières.

La méthode des éléments finis permet, par la technique de superposition, de modéliser sans traitement spécifique la discontinuité du champ électrique due à la différence de permittivité aux interfaces. En effet le potentiel est calculé dans chaque élément et ne dépend pas du potentiel de l'élément voisin, même si celui-ci a une permittivité différente. L'assemblage et la résolution couplée du système fournissent le potentiel dans l'ensemble de la structure. Il n'en va pas de même pour les équations de continuité ; il nous faut modéliser les différences de travaux de sortie des matériaux mis en contact et modéliser la barrière de potentiel vue par les porteurs d'un des matériaux pour aller dans l'autre. Si nous ne modélisons pas cette barrière par une technique numérique, nous ne tiendrions pas compte du fait qu'elle ne subit pas l'influence du potentiel appliqué aux électrodes et nous supprimerions cette barrière pour des polarisations élevées.

Sur la figure I - -11 est représenté le diagramme de bande de la structure Poly-SiO₂-Si.

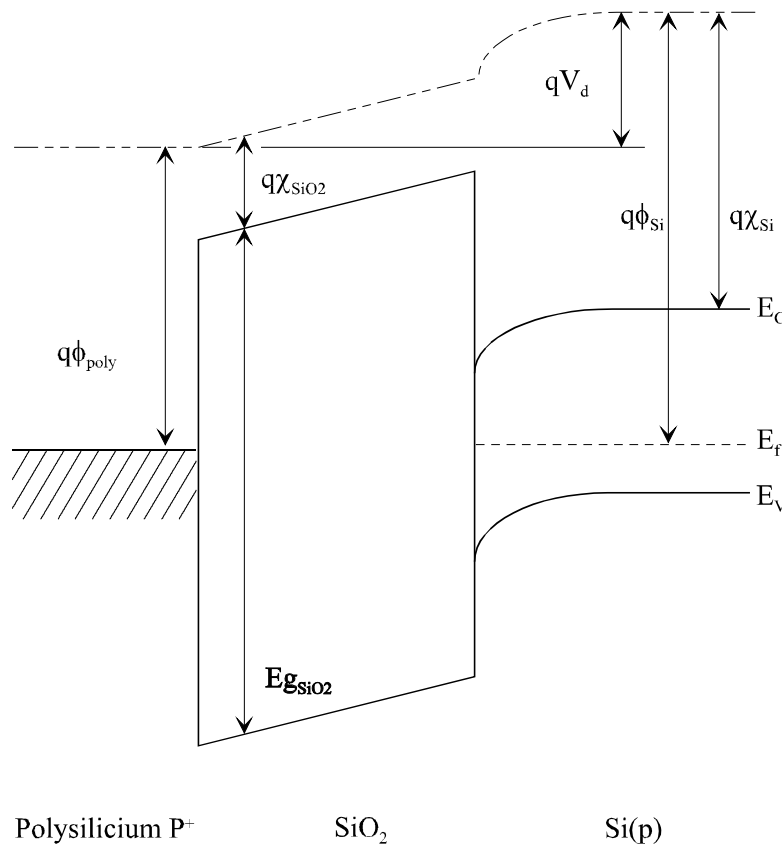


Figure I - -11 : Diagramme de bande de l'hétérojonction SiO₂-Si.

La modélisation de l'hétérojonction complète se fait par superposition d'une tension $V = -\phi_{\text{Poly}}$ au potentiel de polarisation de l'électrode en contact avec l'oxyde et d'une

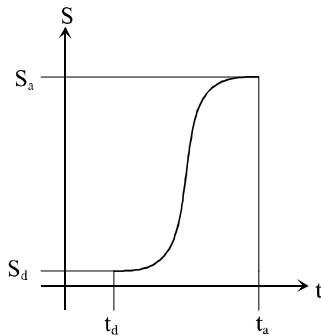
tension $V = -\chi_{\text{Si}} - \frac{E_{\text{gSi}}}{2q} - \frac{kT}{q} \log\left(\frac{N_a}{n_i}\right)$ au potentiel de polarisation de l'électrode Si, dans

le cas d'un dopage en accepteur. Ceci permet de respecter les barrières de potentiel vues par les porteurs au voisinage de l'interface Si-SiO₂.

Du point de vue du maillage, nous modélisons l'interface par un élément "virtuel" de taille nulle, à cheval sur les deux matériaux, dont un des noeuds se trouve dans le SiO₂ et l'autre dans le Si. La barrière est alors respectée pour le calcul des densités de courant le long de l'arête de l'élément. Le potentiel dû à la polarisation est identique en chacun des noeuds de cet élément d'interface.

2 - Modélisation du débit de dose

Nous modélisons le rayonnement incident, qui génère les paires dans nos dispositifs, par le débit de dose qu'il occasionne. La discrétisation temporelle des équations nous conduit à respecter la continuité de la dérivée des grandeurs par rapport au temps. Pour ces raisons nous avons introduit un modèle transitoire de génération de la dose. Nous adoucissons les phases d'établissement et d'arrêt du débit par la définition de temps de montée et de descente pendant lesquels nous appliquons des splines d'ordre 3, dont les dérivés sont nulles au départ et à l'arrivée. Elles ont la forme suivante :



$$S(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3$$

avec

$$S(t_d) = S_d \quad S(t_a) = S_d$$

$$\left. \frac{\partial S(t)}{\partial t} \right|_{t_d} = \left. \frac{\partial S(t)}{\partial t} \right|_{t_a} = 0$$

Ces temps sont introduits pour faciliter la résolution du système, ils ne tendent pas à modéliser les paramètres réels de l'expérimentation. La variation de la dose dans le temps sera modélisée de la façon suivante :

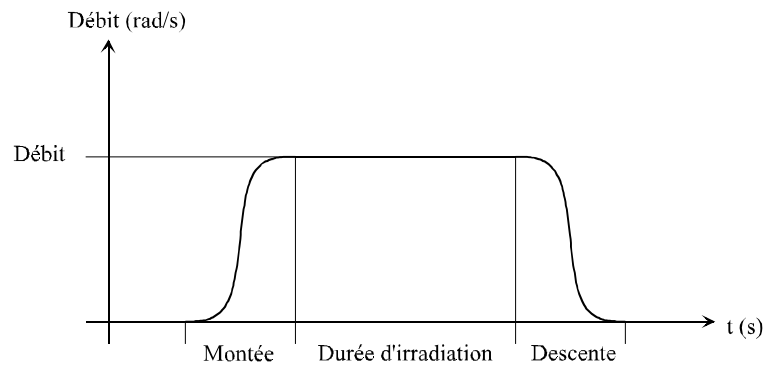


Figure I - -13 : Allure du débit de dose.

Nous appliquons ce principe à tous les stimuli dont la variation temporelle est brutale, les paliers des simulations de recuit isochrone sont adoucis de cette façon.

1 - Quelques aspects du maillage

L'une des étapes essentielles de la simulation numérique est l'établissement du maillage destiné à représenter la structure réelle. Ce maillage sera d'autant meilleur qu'il sera fidèle à la structure géométrique réelle, mais aussi qu'il fournira une description précise des variations des grandeurs du modèle sous l'influence des divers stimuli, tout au long de la simulation. Pour cela nous avons besoin de définir des critères de maillage. Certains critères de maillage sont imposés par la nature même des modèles utilisés. Dans notre cas, les approximations définies lors de la discrétisation des équations nous donnent les critères principaux de maillage. Pour certains cas nous introduisons des paramètres supplémentaires nous permettant d'avoir un raffinement du maillage dans les zones où les critères principaux sont respectés à l'état initial, mais sont susceptibles de ne plus l'être à une étape ultérieure de la simulation pendant laquelle nous ne pourrions pas intervenir sur le maillage.

a - Maillage auto-adaptatif

Nous utilisons dans notre simulateur un mailleur auto-adaptatif qui permet, à partir de la description géométrique sommaire de la structure réelle, d'obtenir un premier maillage respectant les données physiques de base telle que les zones de dopages, les interfaces entre matériaux, les électrodes. Le calculateur fournit ensuite une première solution sur laquelle les critères de raffinement sont appliqués. Le maillage est raffiné aux endroits où les critères ne sont pas respectés, les valeurs des grandeurs sont alors interpolées linéairement. Le mailleur auto-adaptatif est d'une grande simplicité dans son processus de raffinement, il coupe chaque arête ayant de trop fortes variations en deux et reconstruit les nouveaux éléments issus de ce raffinement.

Ce processus de raffinement est d'une très grande efficacité pour des problèmes où l'état stationnaire peut-être calculé. Dans le cas de polarisation de diode, nous obtenons des descriptions aussi fines que voulues en jouant sur les critères de raffinement. Chaque grandeur peut être affinée indépendamment aussi bien en fonction de sa variation qu'en fonction de la variation de son gradient.

Cette indépendance de raffinement est très utile. L'une des limitations que nous rencontrons dans la phase de maillage est celle du nombre de noeuds. En effet le temps de calcul est directement proportionnel au carré du produit du nombre de noeuds par le nombre de grandeurs de chaque noeud. Des maillages trop précis deviennent impossible à simuler par ce fait. Ainsi nous devons centrer notre attention sur la zone d'intérêt de la simulation et fixer les critères en ce sens.

Bien que souple, notre mailleur ne peut résoudre tous les cas de figure, notamment lorsque la même grandeur présente des variations dans une zone d'intérêt et dans une zone d'intérêt moindre, les deux zones seront maillées suivant les mêmes critères.

L'expérience de la construction du maillage permet de contourner les principales difficultés par des astuces et la combinaison astucieuse de tous les paramètres.

b - Respect des variations rapides de grandeurs - Influence des approximations

La préoccupation principale est le respect autant que possible de la structure modélisée. Lors des simulations de capacités MOS, nous avons été confrontés à un problème de respect de la densité de pièges du fait d'un maillage mal adapté.

Nous simulons en 2D une capacité MOS dont la densité de piège décroissait de façon exponentielle à partir de l'interface, soit :

$$N_p(x) = N_{p_0} \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)$$

L'étude de la conduction sous le seuil post-irradiation décrivait un régime de faible inversion qui perdurait pour des tensions de grille bien supérieures à celles obtenues par l'expérience. L'explication de ces divergences nous est apparue lors de l'étude du maillage et plus particulièrement lors du calcul de la quantité de piège effectivement simulée.

Nous présentons sur la figure I - -14 une description simplifiée du problème, nous représentons une coupe latérale d'un oxyde de 100 Å, les mailles sont régulièrement espacées de 20 Å, λ est égal à 20 Å. L'interface est située en $x = 0$, la densité est normalisée par N_{p_0} .

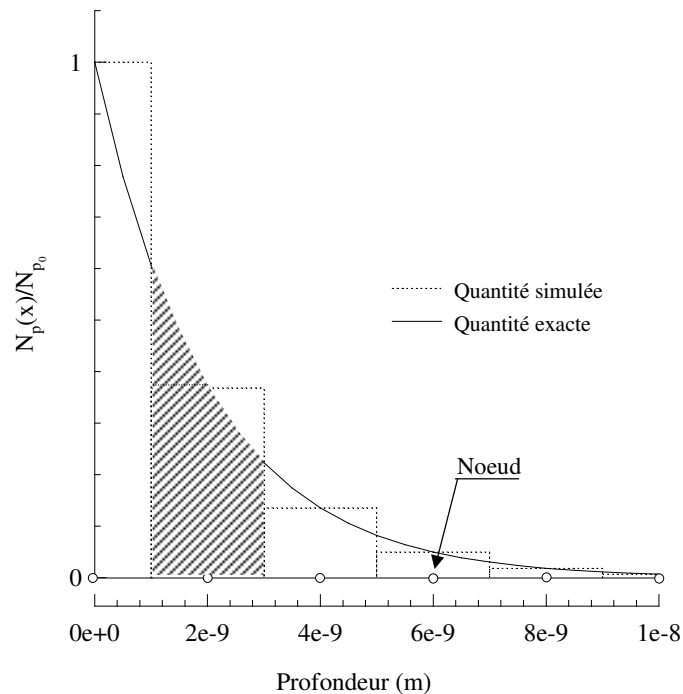


Figure I - -14 : Comparaison des quantités de pièges à simuler et simulée.

Nous rappelons que la discrétisation spatiale des équations de notre modèle nous impose une densité de pièges constante à l'intérieur du volume associé à chaque noeud du maillage. Nous représentons 6 noeuds. Les pointillés décrivent la quantité de pièges à

l'intérieur de chaque volume associé à chaque noeud. La courbe en trait plein est celle de la distribution réelle que nous modélisons. Nous l'approchons, dans notre simulateur, par des marches d'escalier et la somme de la quantité de piège simulée est supérieure à l'intégrale de la distribution réelle, comme le montre la comparaison de la partie hachurée avec la boîte en pointillé correspondante.

Incidence de la taille de maille

Nous présentons sur le graphe suivant le rapport de la quantité de pièges simulée sur la quantité de pièges exacte, que nous cherchons à modéliser, en fonction de la taille de maille de la structure modélisée.

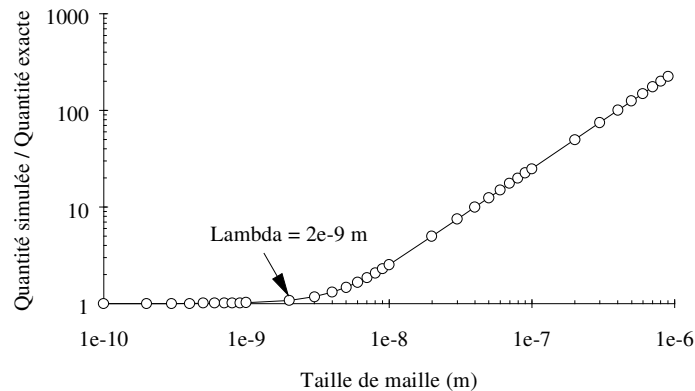


Figure I - 16 : Influence de la taille de maille.

Nous remarquons que l'accroissement du rapport d'erreur est proportionnel à l'agrandissement de la taille de maille, pour des tailles de maille supérieure à la constante de décroissance.

Dans nos simulations, nous devons être vigilants à ce type de problème et modifier nos critères de raffinement pour obtenir des maillages précis sans pour autant nuire au temps d'obtention de la solution.

c - Problèmes non stationnaires

Un des inconvénients majeurs en relation avec le maillage est l'impossibilité de le modifier dans les simulations de problème transitoire. En effet, plusieurs méthodes ont été étudiées afin de pouvoir modifier le maillage en cours de simulation transitoire, pour l'adapter à l'évolution des grandeurs, elles aboutissent toutes sur des instabilités du système qui conduisent à terme à des divergences. Nous sommes donc tenus de prédire l'évolution du système et de prévoir un maillage fin dans les zones où les variables auront une forte variation au cours de la simulation. Ceci est particulièrement vrai pour les simulations que nous effectuons où la charge piégée est inexistante en début d'irradiation. La localisation des fortes variations dans ce cas est difficile et nous sommes contraints d'avoir un maillage fin dans tout l'oxyde afin de ne pas occulter certains phénomènes.

CHAPITRE III

RESULTATS DE SIMULATIONS

I - Résultats de simulations

La motivation première d'un travail de simulation est d'obtenir, par la définition d'un modèle, une représentation de la réalité vue d'une certaine distance d'observation. Il faut pour cela, après avoir défini le modèle, le "calibrer", c'est à dire ajuster ses paramètres à son comportement attendu, de façon à retrouver les résultats expérimentaux.

Dans notre modèle, le nombre de paramètres est élevé : la distribution spatiale et énergétique des pièges ainsi que les sections efficaces capture et de recombinaison pour chaque niveau piège. Par ailleurs, les résultats de manipulations ne donnent pas nécessairement une indication directement paramétrable dans le modèle.

Nous allons dans un premier temps illustrer le comportement du modèle par des simulations simples et interpréter les résultats obtenus en les comparant à ceux qu'aurait fournis une expérimentation.

Ensuite nous tacherons de reproduire des résultats expérimentaux en construisant le dispositif modélisé à partir de paramètres extraits de ces résultats. Cette démarche est la plus complexe. Elle dépend fortement des limitations inhérentes au modèle et de la description extraite des résultats expérimentaux.

A - Simulations des protocoles de caractérisation

Nous détaillons l'influence du mécanisme de re-piégeage sur la mesure du courant thermo-stimulé et sur la mesure de la dérive de tension seuil sur des dispositifs simples.

1 - Simulation de la mesure des Courants Thermo-Stimulés (CTS)

a - Influence du re-piégeage

Le principe de la caractérisation de la charge piégée dans les oxydes par la méthode des courants thermo-stimulés est décrit au chapitre I. Les charges dépiégées et libres se déplacent sous l'effet du champ électrique et sont susceptibles de s'immobiliser de nouveau sur des pièges vides. La durée d'immobilisation dépend de la profondeur énergétique des pièges, les trous se re-piégeant sur les niveaux d'énergie inférieure ou égale à celle du niveau dont ils ont été libérés par la température seront réémis rapidement. Les trous se re-piégeant sur les niveaux plus profonds seront piégés plus longtemps. Le phénomène macroscopique est un re-piégeage des trous libérés sur des niveaux d'énergie plus profonds pour lesquels la température est insuffisante pour une réémission rapide.

Ces charges sont alors absentes de la mesure du courant thermo-stimulé correspondant à ce niveau. Le courant mesuré n'est plus proportionnel à l'occupation du niveau. Le re-piégeage des trous sur des niveaux plus profonds augmente, a contrario, les courants mesurés pour ces niveaux quand la température devient suffisante.

Dispositifs simulés

Pour illustrer ce phénomène, nous nous proposons de simuler le comportement d'un dispositif avec un oxyde SiO₂ de 4000Å, comprenant deux niveaux de pièges à trou distincts à 1,2 et 1,9 eV (valeurs arbitraires prises à titre d'exemple).

Le simulateur nous permet de supprimer la capture des porteurs libres pendant la phase de mesure du courant thermo-stimulé et nous comparerons le comportement de notre dispositif dans les deux cas de figure afin de montrer l'effet du re-piégeage.

Nous considérons deux configurations, l'une avec une distribution spatiale uniforme des pièges (que nous repérerons U), l'autre avec une distribution gaussienne localisée à l'interface de largeur de gaussienne $\sigma = 100\text{Å}$ (que nous repérerons G). Les paramètres de capture et de recombinaison sont identiques pour les deux niveaux qui sont différenciés uniquement par leur énergie d'activation. Nous choisissons les paramètres de piégeage en nous inspirant de ceux des oxydes enterrés de 4000Å, $\sigma_{pt} = 1,5 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$ et $\sigma_{nr} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^2$.

La densité de pièges vides avant le processus de dépiégeage est un paramètre déterminant du phénomène. Nous présentons les résultats de simulations obtenus pour deux densités de pièges différentes dans le dispositif U, $N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $N_p = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Dans le cas du dispositif G, la densité maximale de la distribution gaussienne est calculée pour obtenir une quantité de charge piégée égale à celle obtenue pour U pour comparaison de CTS mesurés. Nous appellerons N_t la quantité de trous piégés.

Protocole simulé

Nous simulons la charge des dispositifs à densité uniforme par irradiation aux rayons X, la dose reçue est de 10krad sous une polarisation de 40V à température ambiante. La simulation de la mesure du courant thermo-stimulé est faite sous une polarisation de -40V avec une rampe de 0,1 °C/s. Nous effectuons une simulation de comparaison de la mesure de CTS en désactivant la capture.

i) Faible dose - Faible densité de pièges $N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

Distribution uniforme

La figure I - -1 montre la distribution de la densité de trous piégés à la fin de l'irradiation. Le taux de remplissage des pièges est faible. La charge totale dans le dispositif est $N_t = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ pour une quantité de pièges de $4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, les pièges sont remplis au dixième.

Durant la phase de mesure de CTS, le processus de re-piégeage a lieu. Cependant le taux de capture du niveau profond (1,9 eV) est insuffisant pour que les trous pendant le dépiégeage du niveau 1,2 eV ($25 < T < 100 \text{ °C}$) influent sur le courant thermo-stimulé. La figure I - -2 montre l'accroissement de la densité de trous piégés sur le niveau 1,9 eV quand le niveau 1,2 eV est vide, à $T = 100 \text{ °C}$, par rapport à celle de fin d'irradiation. Nous

constatons que la quantité de trous re-piégés est négligeable ($3,26 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$), elle est de l'ordre de grandeur de la quantité réémise du niveau 1,9 eV pendant cette plage de température. La partie négative de cet accroissement, au niveau de l'interface, indique l'ordre de grandeur de la quantité de trous dépiégés du niveau profond à $T = 100 \text{ °C}$. La figure I - -4 montre que cette capture n'est pas discernable par la mesure de CTS, les courbes avec et sans re-piégeage se confondent.

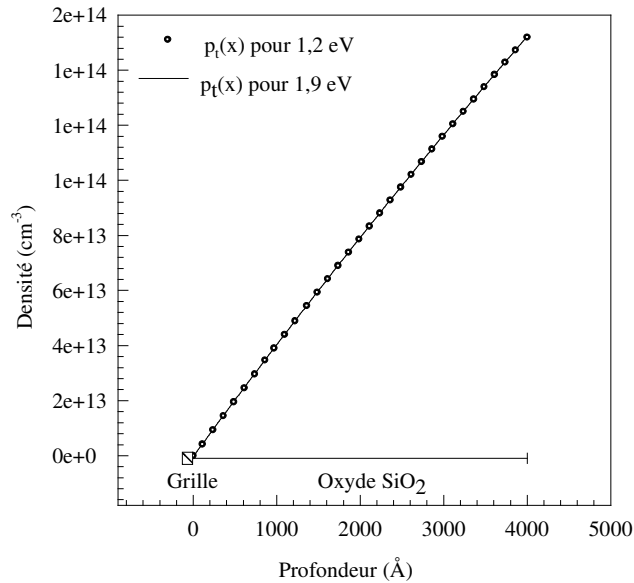


Figure I - -1 : Distribution de la densité de trous piégés sur chaque niveau (1,2 et 1,9 eV, courbes confondues) du dispositif à faible densité de pièges ($N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) à la fin de l'irradiation.

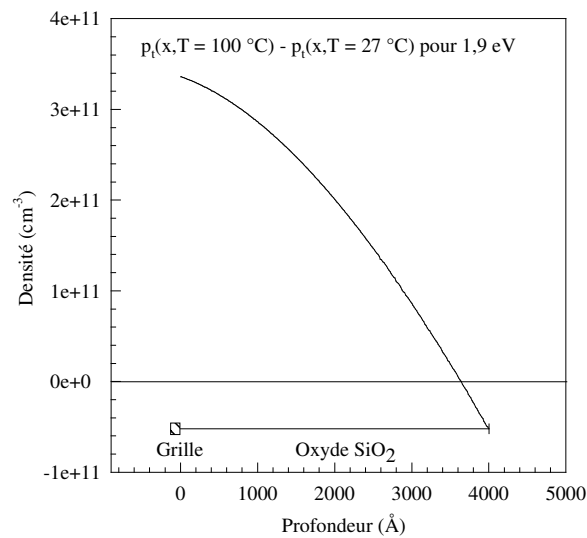


Figure I - -2 : Différence $p_t(100 \text{ °C}) - p_t(27 \text{ °C})$ pour le niveau 1,9 eV du dispositif uniforme de faible densité de pièges ($N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

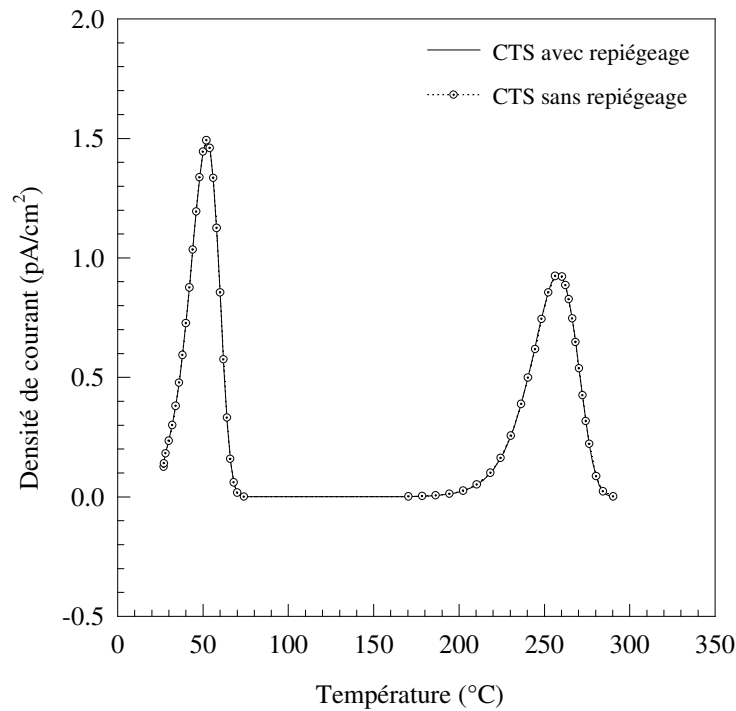


Figure I - 4 : CTS sur le dispositif à faible densité uniforme de pièges ($N_p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) pour les simulations avec et sans re-piégeage.

Les valeurs cerclées sur les figures précédentes sont issues de la simulation de comparaison pour laquelle la capture a été désactivée pendant la mesure du CTS. L'intégrale des densités de courant de trous est égale au produit de la quantité de charge ($N_t = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$) par q , pour chaque dispositif.

Distribution Gaussienne

Cette configuration se rapproche de la définition approchée des oxydes thermiques, dans lesquels il est admis de penser que la distribution des pièges est concentrée dans une zone de proximité de l'interface.

Toute la charge piégée se trouve confinée au voisinage de l'interface $\text{SiO}_2\text{-Si}$, sur une profondeur moyenne de 100 \AA . Quand la température est suffisante pour dépiéger les trous piégés sur le premier niveau ($25 < T < 100 \text{ °C}$), ceux-ci sont entraînés par le champ électrique vers la grille. Au cours de leur déplacement ils rencontrent très peu de pièges, dans la gaussienne, et sont pratiquement tous collectés sur la grille. Sur la figure I - 4 nous montrons le courant thermo-stimulé en fonction de la température pour le dispositif G. Nous remarquons que les maxima de densité de courant sont plus importants que pour le dispositif U ($5,7 \text{ pA/cm}^2$ contre $1,5 \text{ pA/cm}^2$, pour le premier pic). Cela est dû aux courants de déplacements qui sont différents dans les deux dispositifs. Nous détaillerons ce phénomène dans un paragraphe suivant.

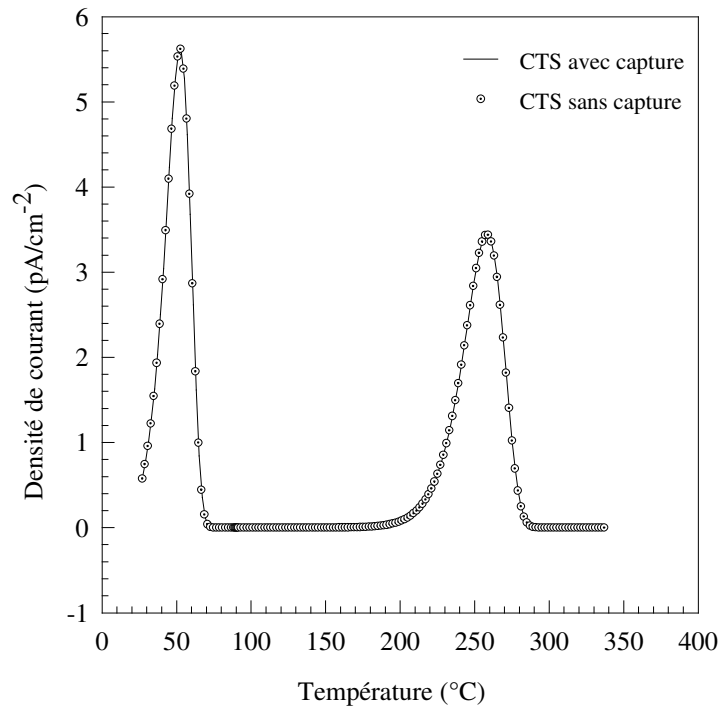


Figure I - -6 : Densité de courant thermo-stimulés pour le dispositif G.

ii) *Faible dose - Forte densité de pièges* $N_p = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$,

Distribution uniforme

En augmentant la densité de pièges, nous augmentons la probabilité qu'ont les trous réémis de rencontrer un piège vide dans leur déplacement vers la grille (le piégeage est proportionnel au nombre de pièges vides). La quantité de trous re-piégés est alors significative et influe sur le courant thermo-stimulé. $N_t = 6,6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ et la quantité de pièges est de $4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

La figure I - -7 montre les étapes de dépiégeage du niveau 1,2 eV à différentes températures. Nous observons que les trous sont réémis plus rapidement dans la première moitié du dispositif. Cette réémission s'explique en considérant la répartition du champ électrique dans le dispositif. L'accumulation de la charge à proximité de l'interface déforme le champ électrique initialement constant $E_i = 1 \text{ MV/cm}$ (figure I - -9). L'augmentation du champ, par l'intermédiaire de l'effet Poole-Frenkel, fait diminuer l'énergie nécessaire aux trous piégés pour être réémis.

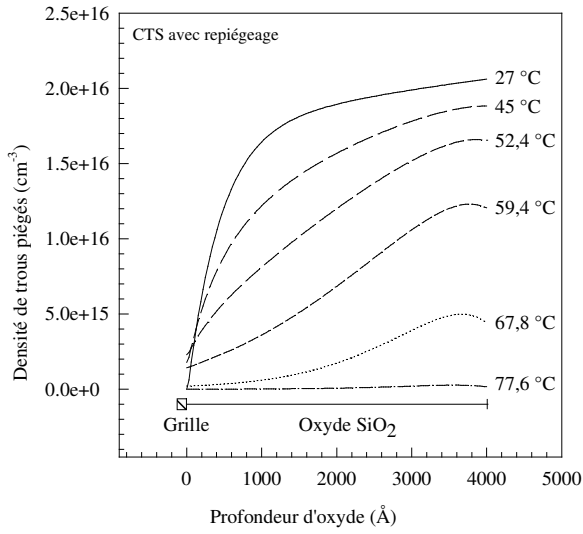


Figure I - 7 : Evolution de la densité de trous piégés en volume sur le niveau 1,2 eV en fonction de la température.

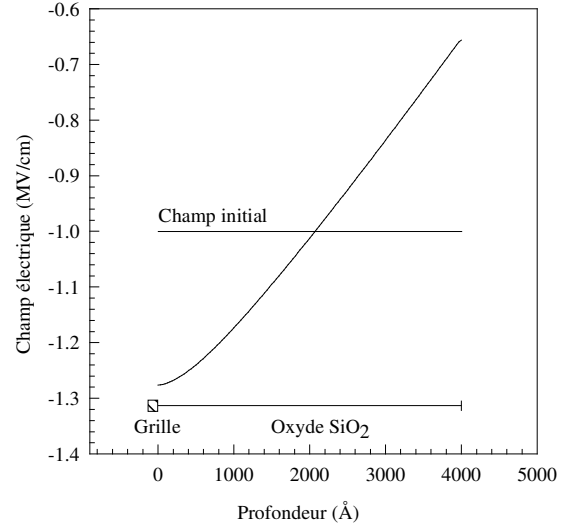


Figure I - 9 : Distribution du champ électrique dans le dispositif en fin d'irradiation.

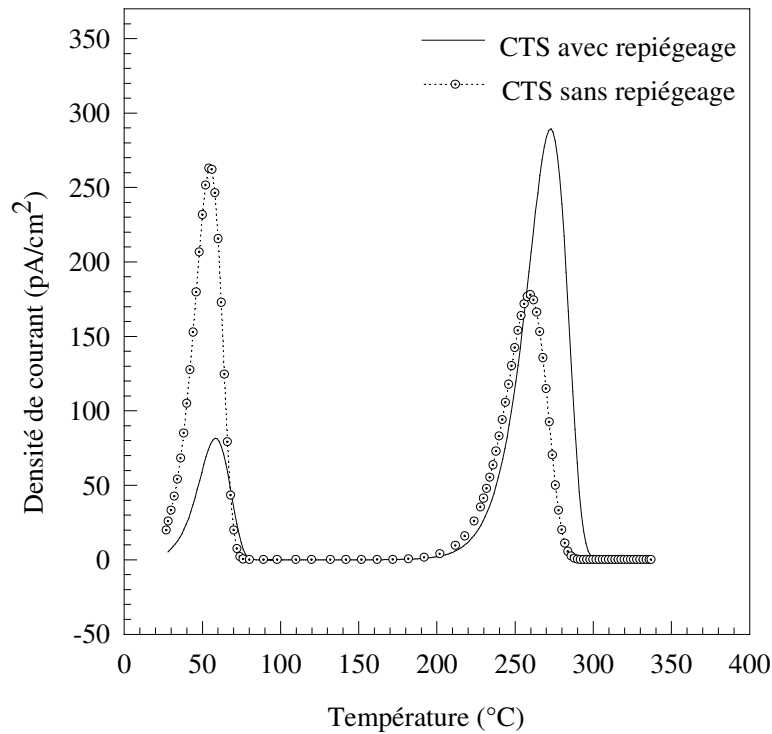


Figure I - 11 : Résultat de CTS sur les dispositifs de densité uniforme de pièges et de densité trous pièges $N_t = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

Nous pouvons remarquer que le CTS issu de la simulation dans laquelle nous avons supprimé le re-piégeage (figure I - -11) débute pour une température plus élevée. Le re-piégeage des trous libérés, dans la simulation avec re-piégeage, se fait indifféremment sur les 1,2 eV et 1,9 eV. Le processus de piégeage-dépiégeage sur le niveau 1,2 eV retarde la collection des porteurs à l'électrode. Ce phénomène ne se produit pas dans la simulation sans re-piégeage, les trous libérés se déplacent librement jusqu'à l'électrode de collection.

Ce comportement est atténué sur le second pic. La distribution des trous piégés sur le niveau 1,9 eV est localisée plus au centre du dispositif et dans une zone où le niveau d'énergie est abaissé par la déformation du champ électrique. Les trous sont réémis pour des températures plus basses. Ceci entraîne une compensation du premier phénomène.

Nous illustrons notre propos avec les figures suivantes.

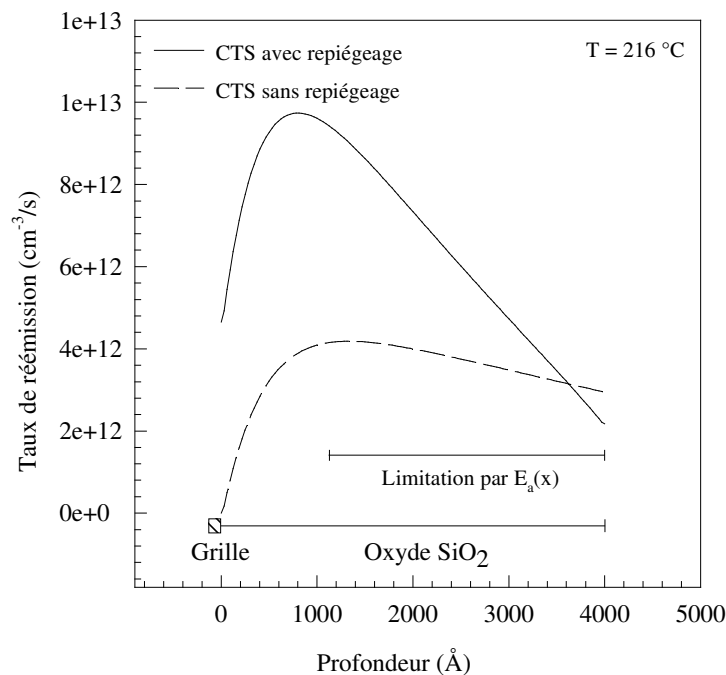


Figure I - -12 : Comparaison des taux de réémission du niveau 1,9 eV à 216 °C (début de la réémission du niveau 1,9 eV) pour les CTS avec et sans re-piégeage.

Nous avons représenté (figure I - -12) la variation du taux de réémission dans le volume du dispositif à $T = 216$ °C, au début du front de monté du CTS associé au niveau 1,9 eV. Nous savons (figure I - -11) qu'à cette température le CTS pour lequel le re-piégeage est bloqué est légèrement supérieur à celui avec re-piégeage. Pourtant le taux de réémission à 216°C lorsqu'il y a re-piégeage est plus important dans tout le dispositif. Cela traduit le re-piégeage important des trous réémis par ce niveau sur lui-même (et sur le niveau 1,2 eV, duquel ils sont réémis quasi instantanément). Les trous sont re-piégés et

immobilisés pendant un court instant avant d'être réémis puis re-piégés après un déplacement vers la grille.

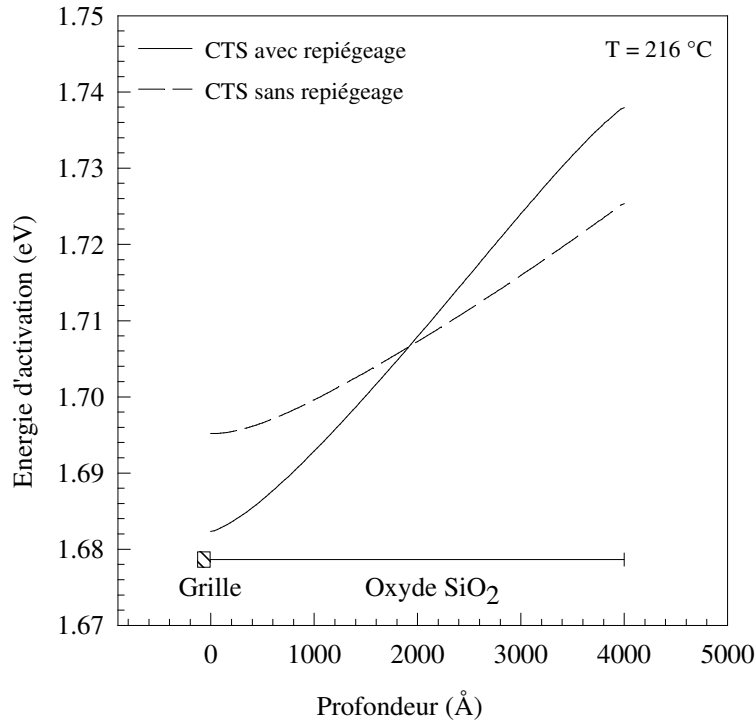


Figure I - -13 : Comparaison des déformations du champ interne associées à l'effet Poole-Frenkel à 216 °C, pour les CTS avec et sans re-piégeage.

La figure I - -13 montre l'effet de la déformation du niveau d'énergie sur le taux de réémission. La variation de l'énergie d'activation limite la réémission dans la zone comprise entre le maximum et l'interface. La densité de trous piégés décroît rapidement du point de réémission maximum à la grille, ce qui traduit l'allure de la courbe dans cette zone.

La figure I - -14 montre, pour la même température, la densité de trous piégés sur le niveau 1,9 eV pour les deux simulations de CTS. Les taux de réémission, étant proportionnels à la densité de trous piégés et à l'exponentielle de l'énergie d'activation pour une température donnée, auraient eu une distribution spatiale identique à celle des densités de trous piégés dans le cas d'une énergie d'activation constante. La déformation des niveaux d'énergie est bien à l'origine de la répartition spatiale des taux de réémission. La figure I - -14 montre la distribution spatiale des trous piégés à 216 °C.

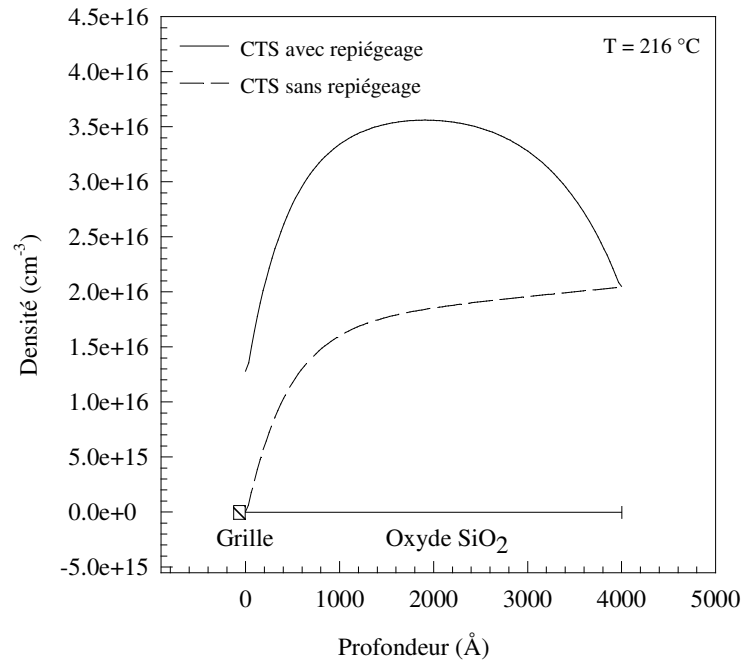


Figure I - -14 : Densité de trous piégés sur le niveau 1,9 eV pour les deux simulations de CTS, avec et sans re-piégeage à 216 °C.

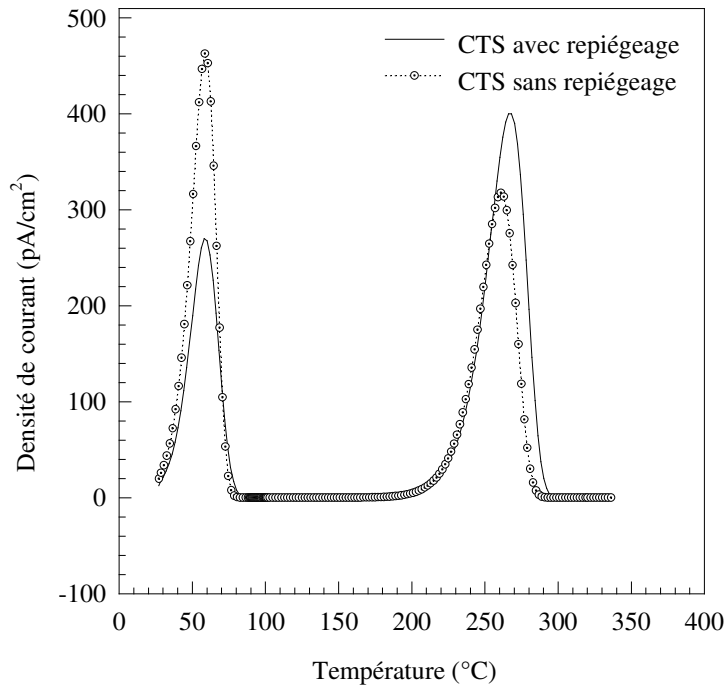


Figure I - -16 : Résultat de CTS sur les dispositifs de densité gaussienne de pièges et de densité de trous pièges $N_t = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

Distribution Gaussienne

Nous observons sur la figure I - -16 un phénomène similaire, de moindre intensité, à celui du dispositif uniforme. Une partie des trous réémis se re-piègent dans la queue de la gaussienne. Ceci nous permet de constater que le 'vol libre' des trous est limité. La conduction dans ce cas s'apparente plutôt à un saut de pièges en pièges, ce qui rapproche, dans les résultats, le modèle MTD du modèle CTRW, dont l'équivalence est démontrée de façon théorique par ailleurs^[PEYRE 91].

a - Contribution du courant de déplacement

La comparaison des courbes de densité de courant semble indiquer une quantité de trous piégés plus importante dans le cas des dispositifs à distribution gaussienne (G) que dans le cas des dispositifs à distribution uniforme (U). Cette différence s'explique en analysant les contributions des densités de courant de déplacement.

Le courant de déplacement est la mesure de la variation du champ électrique dans le temps. La modification de la distribution des trous piégés dans le volume de l'oxyde au cours du temps (déplacement, création ou disparition de trous) induit une modification du champ électrique et l'apparition d'un courant de déplacement. Ce courant se conçoit comme le déplacement de la charge image induite par la charge interne de la capacité dans les fils de connexion.

Dans le cas des dispositifs U, les trous piégés sont répartis dans le volume. Le maximum de densité de trous piégés croît au milieu de l'oxyde en induisant une augmentation du champ électrique d'un tiers de sa valeur initiale. Le dépiégeage et la collection des trous entraînent un courant de déplacement plus important que dans le cas des dispositifs G.

Ce courant de déplacement s'oppose au courant de trous et diminue le courant total. Sur les figures I - -17 et I - -19 nous détaillons les contributions au courant total pour les dispositifs U et G.

Le courant mesuré pour le dispositif U informe sur la quantité de trous piégés (intégrale du courant) et la position de ces trous dans le volume (contribution du courant de déplacement) de façon indissociable expérimentalement. La mesure du courant total ne renseigne pas, dans ce cas, sur la quantité de trous effectivement piégés dans le volume du dispositif, mais sur le couple 'quantité-position' de ces trous.

Pour les dispositifs à distribution gaussienne, le courant mesuré informe sur la quantité de trous piégés puisque le courant de déplacement est négligeable.

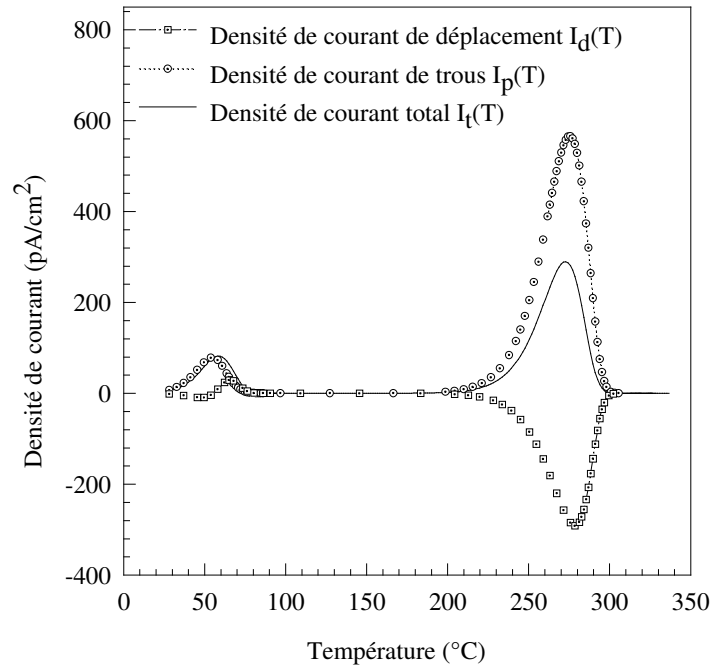


Figure I - -17 : Composantes de la densité de courant du dispositif U..

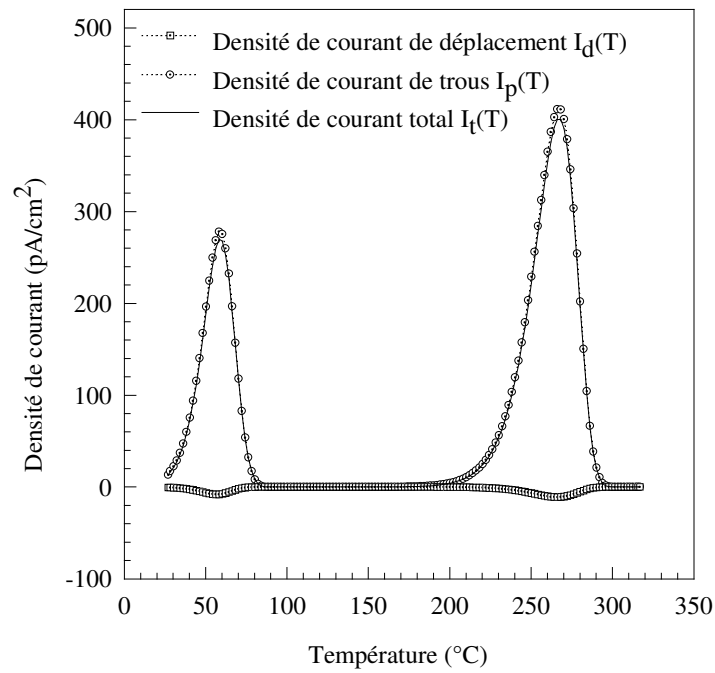


Figure I - -19 : Composantes de la densité de courant du dispositif G..

1 - Simulation du recuit isochrone

Nous avons effectué une simulation du recuit isochrone sur le dispositif uniforme dont la densité de pièges est $N_p = 10^{18} \text{ cm}^{-2}$.

Protocole simulé

Nous reprenons les mêmes conditions d'irradiation. Nous effectuons à partir de la température ambiante des recuits par paliers de 25°C pendant 10 minutes jusqu'à une température de 325 °C. A cette température les deux niveaux que nous simulons ont réémis tous leurs porteurs. Nous supposons que le retour à la température ambiante, nécessaire pour les mesures de la dérive de tension pendant l'expérimentation, ne modifie pas les caractéristiques du composant. Le calcul de la dérive de la tension de seuil est fait tout au long de la simulation.

a - Influence du re-piégeage

Nous présentons les résultats pour les simulations du recuit avec re-piégeage des trous libérés et du recuit effectué en supprimant la possibilité aux trous libérés de se piéger de nouveau sur leur site d'origine ou sur l'autre niveau.

Le détail du mécanisme de re-piégeage a été décrit lors de l'étude sur le CTS. Nous avons normalisé l'évolution de la dérive en fonction du temps. Nous observons une guérison plus rapide, comme l'indiquait le CTS, pour le recuit sans re-piégeage.

Les translations horizontales non rectilignes sur la figure I - -21 proviennent de la prédiction des pas de temps de simulation. Ceux-ci ne correspondent en début et en fin des paliers que si la résolution rencontre des problèmes de convergence. Les pas de temps maxima ont été réglés à $1/100^{\text{ième}}$ de la durée d'un palier.

Le front d'émission thermique $\phi_m(t)$ au bout du premier palier est de 1,16 eV et 1,26 eV à la fin du second palier, ce qui correspond au premier niveau simulé. La dérive initiale correspond à une densité équivalente ramenée à l'interface $N_{ts} = 7,66 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. La première réduction de la dérive correspond à l'évacuation de 17% de la charge (1/3 de la charge initiale du premier niveau) dans la simulation avec re-piégeage et à 50% (la totalité de la charge initiale du premier niveau) dans la simulation sans re-piégeage.

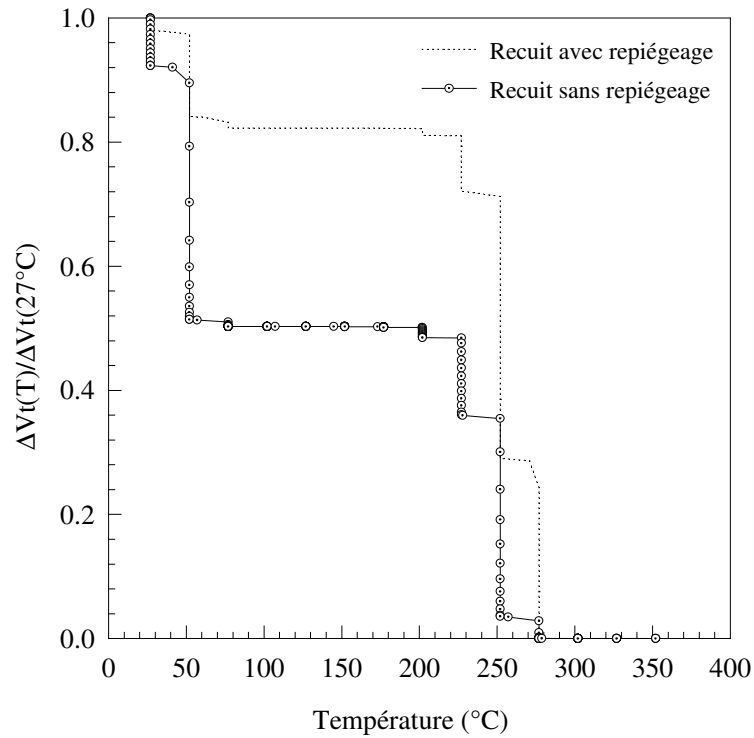


Figure I - 21 : Variation de la dérive de tension de seuil normalisée lors du recuit isochrone pour le dispositif uniforme de densité de piège 10^{18} cm^{-3} .

2 - Conclusion

Nous avons pu montrer les domaines d'influence du re-piégeage dans les méthodes de caractérisation des pièges par la méthode du CTS et du recuit thermique. Ce re-piégeage est très dépendant de la densité de pièges vides et de la distribution spatiale de ces pièges.

La distribution des trous influe de façon importante sur le résultat de la mesure CTS du fait de l'apparition du courant de déplacement avec l'étalement des pièges dans le volume de l'oxyde. La mesure CTS rend compte de la quantité de trous piégés dans le volume d'autant plus fidèlement que la distribution de trous est proche de l'interface.

La caractérisation par le recuit thermique est aussi sensible à l'effet du re-piégeage.

B - Effet de la polarisation sur les mesures de courants thermo-stimulés

Nous nous proposons de reproduire par la simulation les mesures effectuées par D. M. Fleetwood^[FLEETWOOD 91] pour montrer l'influence de la tension de polarisation sur les résultats de CTS. L'étude de Fleetwood et al. a été menée sur des capacités MOS épaisses (350 nm x 0,036 cm²) non-durcies et des capacités MOS fines (45 nm x 0,01 cm²) durcies. Nous nous intéresserons aux échantillons non-durcis.

1 - Présentation des résultats expérimentaux

a - Mesures sous polarisations négatives de la grille

La mesure du CTS sous polarisation négative de la grille est utilisée pour déterminer la densité et la distribution énergétique des trous piégés à la suite d'une irradiation de la structure MOS. La comparaison avec les mesures de la variation de la capacité en fonction de la tension en hautes fréquences (C-V) montre une différence qui est attribuée à la présence d'électrons piégés. Une irradiation de 20 krad(SiO₂) sous 30V induit une charge de trou $Q_h = 19$ nC et une charge d'électrons $Q_e = 1,7$ nC. La dérive de la tension de midgap est voisine de -50V. La figure I - 23 montre les CTS expérimentaux à -30V, -60V et -100V.

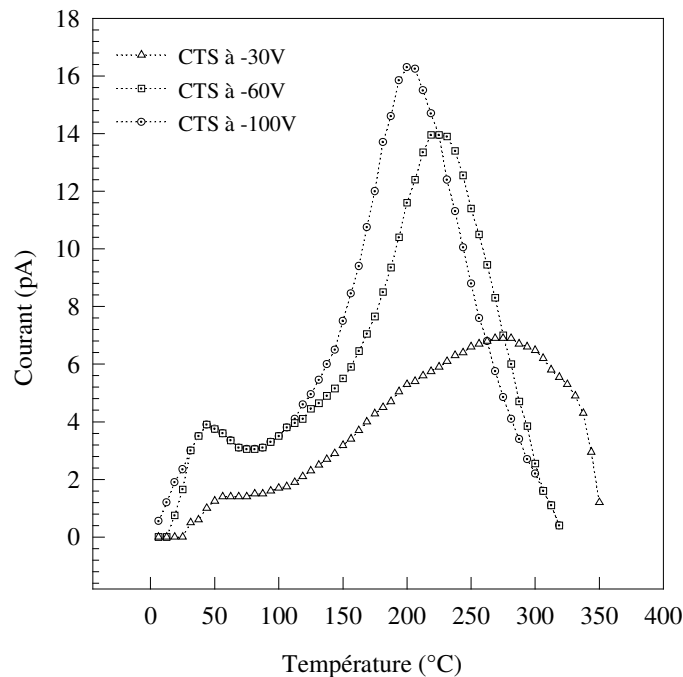


Figure I - 23 : Mesure de CTS sous les polarisations de -30V, -60V et -100V, issue de l'article de référence[FLEETWOOD 91].

Nous remarquons que pour les basses températures (25 à 100 °C), c'est-à-dire aux températures de caractérisation du premier pic, nous avons une superposition exacte des courants pour les polarisations -60V et -100V. Ce phénomène apparaît aussi en fin de mesure. D'autre part le CTS, sous -100V, montre pour le deuxième pic un courant de plus grande amplitude.

Notre compréhension du principe de la mesure du CTS nous conduit à penser que les pièges peu profonds sont insensibles à l'effet Poole-Frenkel. Avec les polarisations appliquées nous aurions dû observer un abaissement des niveaux. Ces abaissements auraient dû induire une caractérisation des niveaux de basse énergie à des températures différentes, échelonnées en proportion inverse de la polarisation (le pic issu du CTS sous -100V inférieur d'à peu près 25 °C à celui sous -60V sur l'échelle des températures).

La figure I - 25 montre la distribution énergétique des pièges calculée, avec la formulation présentée au chapitre I, à partir des résultats des courants de la figure I - 23 . Nous avons tenu compte de l'effet Poole-Frenkel (avec le coefficient de Schottky).

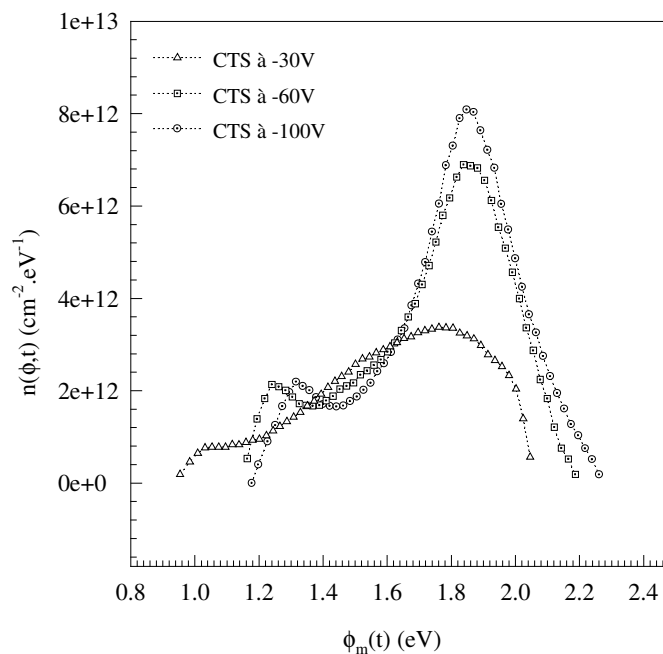


Figure I - 25 : Distributions énergétiques des trous piégés calculées à partir des mesures de CTS expérimentales.

Cette figure nous permet de confirmer, selon notre interprétation des phénomènes, l'insensibilité des niveaux peu profonds à l'effet Poole-Frenkel, ils se trouvent décalés sur l'échelle d'énergie. En ce qui concerne le deuxième pic nous observons une concordance exacte entre les résultats issus des mesures à -60V et -100V, le léger décalage sur l'échelle des densités peut s'expliquer par une différence de la charge effectivement piégée après l'irradiation.

Nous pensons que la modélisation de l'effet Poole-Frenkel est incomplète. Si l'explication des particularités de la figure I - -23 doit venir de la formulation de l'effet Poole-Frenkel, celle-ci doit alors varier en fonction de l'énergie du piège ou de la nature du piège.

Dans le cas de la mesure à la polarisation de -30V, la charge effectivement collectée est très nettement inférieure à celle piégée. Cela traduit le fait qu'à cette polarisation la zone de charge d'espace induite par les charges piégées n'est pas complètement compensée, le champ électrique s'inverse à proximité de l'interface, une partie des trous réémis est alors entraînée vers l'interface et échappe à la collection au niveau de la grille.

b - Mesure sous polarisation positive de la grille

Le principe de la mesure du CTS permet dans le cas d'une polarisation positive de la grille, et dans la mesure où le piégeage en volume est exclu, d'imaginer deux cas de figure (au moins). La mesure peut révéler la présence de trous piégés sous la grille, il s'agit alors d'un courant de déplacement. Elle peut aussi révéler la présence d'électrons piégés à proximité de l'interface, elle correspond cette fois à un courant de conduction.

Nous retiendrons cette hypothèse pour notre simulation. L'expérimentation révèle, par la combinaison des techniques de mesure, la présence d'électrons piégés que nous modélisons de cette façon.

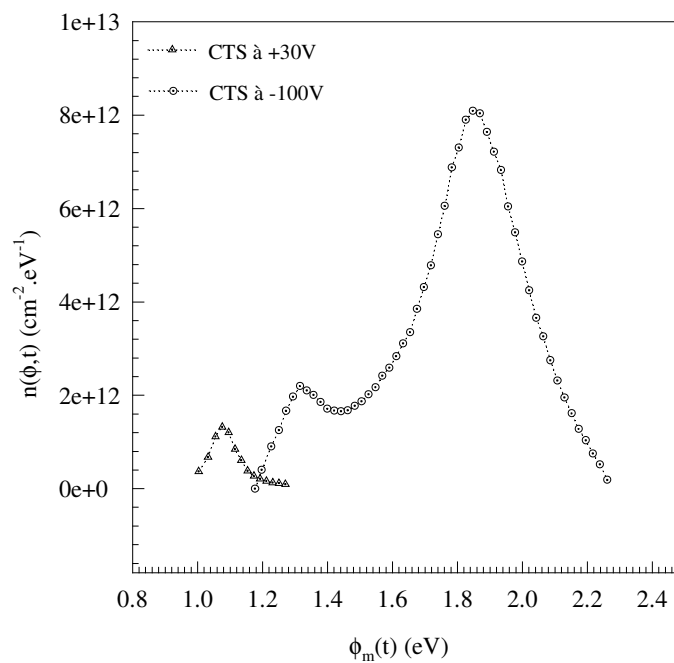


Figure I - -27 : Distribution énergétique des électrons et des trous piégés calculées à partir des mesures de CTS à 30V et -100V.

La figure I - 27 permet de comparer la distribution énergétique des électrons piégés issue de la mesure du CTS à 30V avec la distribution des trous piégés issue de la mesure à -100V. Nous n'avons, dans le cas des électrons, qu'une mesure de référence. Nous ne pouvons faire pas d'hypothèse sur la validité de l'effet Poole-Frenkel, la distribution calculée tient compte de l'effet induit par la polarisation appliquée.

2 - Présentation de la simulation

Dispositif simulé

Nous effectuons la simulation sur une capacité MOS non-durcie. L'oxyde a une épaisseur de 350 nm sur un substrat de type N.

i) Piégeage des trous

Les sections efficaces de capture et de recombinaison sont identiques pour tous les niveaux ($\sigma_{pt} = 1,5.10^{-13} \text{ cm}^2$ et $\sigma_{nr} = 1,6.10^{-12} \text{ cm}^2$). Nous extrayons les paramètres de piégeage des trous des résultats de caractérisation CTS de l'article.

L'auteur fait la supposition que les pièges sont localisés à proximité de l'interface Si-SiO₂. Nous représentons la distribution spatiale des pièges par une gaussienne dont nous déterminerons les paramètres. Tous les niveaux ont une distribution spatiale identique.

La densité maximale totale (sommation sur tous les niveaux) et la largeur de la gaussienne de la distribution de pièges sont déterminées à partir d'un dispositif de test dans lequel on ne modélise qu'un niveau. Elles sont ajustées afin d'obtenir une quantité de charge piégée proche de la valeur expérimentale ($Q_h = 19 \text{ nC}$). La densité de pièges est ensuite répartie proportionnellement sur les différents niveaux simulés pour la simulation finale. Cette simplification préalable permet de réduire le temps nécessaire au calibrage de la simulation.

La distribution énergétique est obtenue par un échantillonnage en 25 points de la figure I - 25 (CTS à -100V page 71). La figure I - 28 montre cette distribution normalisée de façon à ce que la somme des pics soit égale à l'unité. Elle représente la fraction de la densité maximale affectée à chaque niveau.

Nous avons montré que la charge mesurée par CTS sous polarisation négative de la grille dans le cas d'un piégeage proche de l'interface correspond à la charge effectivement piégée dans l'oxyde. Nous examinerons avec la simulation l'influence du piégeage en cours de mesure de CTS sur la détermination des niveaux telle que nous l'avons faite.

La quantité de charge piégée est moins sensible à la densité maximale de la distribution qu'à la largeur de gaussienne. L'explication de ce phénomène apparaîtra dans les résultats d'irradiation. La densité totale est $N_p = 5.10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et la largeur de gaussienne $L_p = 1,2 \text{ nm}$.

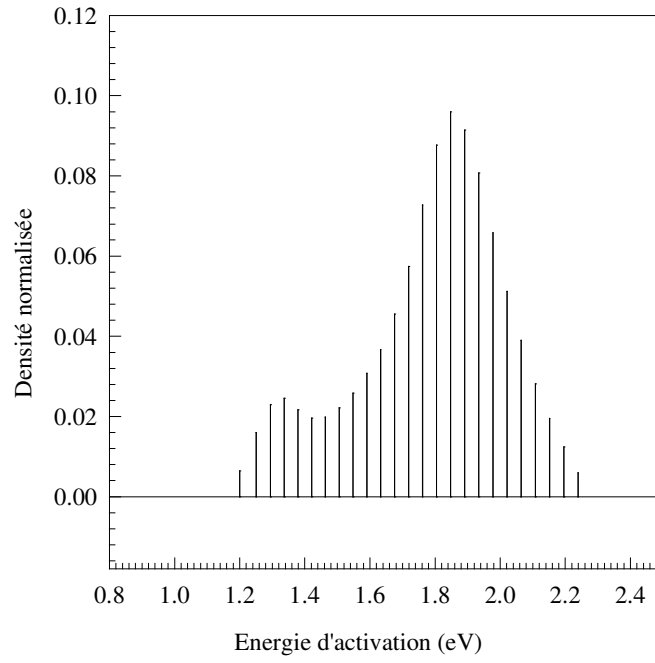


Figure I - -28 : Distribution énergétique normalisée des pièges à trous issue du résultat de CTS obtenu à -100V.

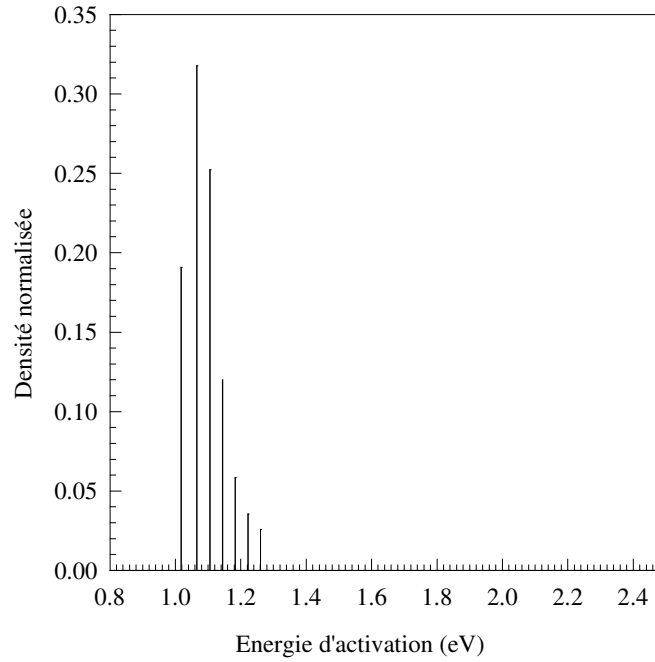


Figure I - -30 : Distribution énergétique normalisée des pièges à électrons issue du résultat de mesure du CTS à +30V.

ii) Piégeage des électrons

Les sections efficaces de capture et de recombinaison sont communes à tous les niveaux ($\sigma_{nt} = 1.10^{-14} \text{ cm}^2$ et $\sigma_{pr} = 4,8.10^{-12} \text{ cm}^2$).

Nous avons déterminé les paramètres de piégeage des électrons par la même méthode. La distribution énergétique des pièges à électrons est déterminée à partir de l'échantillonnage en 7 points de la courbe figure I - -27 (CTS à +30V page 72) et est représentée figure I - -30 (page 74).

La répartition spatiale est représentée par une distribution gaussienne, identique pour tous les niveaux. La densité totale $N_n = 1,5.10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et la largeur $L_n = 33 \text{ nm}$.

Protocole simulé

Le dispositif est soumis à une irradiation de 20 krad sous une polarisation de 30V. Nous effectuons ensuite des simulations de CTS sous différentes tensions de polarisation, 30V, -30V, -60V et -100V. La rampe de température est dans tous les cas de 0,1 °C/s. La température de mesure du CTS varie entre 25 °C et 350 °C.

Par contrainte numérique, nous avons bloqué les mécanismes de piégeage pendant les phases d'inversion de polarisation.

3 - Présentation des résultats**a - L'irradiation**

Nous simulons une irradiation par rayon X délivrant une dose de 20krad(SiO_2) avec un débit de 10000 rad/s. Ce débit n'a aucune influence, dans la simulation, sur les résultats obtenus. Nous avons procédé par tests successifs pour déterminer la distribution spatiale des pièges. Notre critère de sélection étant la charge piégée en fin d'irradiation. Nous avons aussi tenu compte de la dérive de tension de midgap. Nous obtenons les distributions spatiales de porteurs piégés présentées sur les figures I - -31 et I - -33 à partir des paramètres de piégeage donnés précédemment.

On remarque que la largeur de la gaussienne a plus d'importance que la densité maximale choisie pour la distribution spatiale. La répartition des trous piégés explique les valeurs importantes de densité de pièges que nous avons choisie en plaçant le maximum de la distribution à l'interface. Cette distribution présente l'avantage de cantonner le piégeage dans une zone proche de l'interface (par la largeur de gaussienne), sans limiter la quantité de porteurs piégés à l'interface (car la densité de pièges disponible est alors très importante).

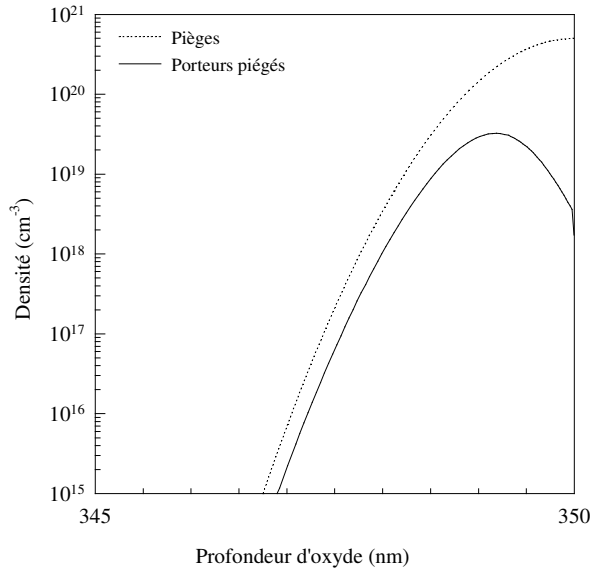


Figure I - -31 : Distribution spatiale des trous piégés dans les **50 Å** proches de l'interface.

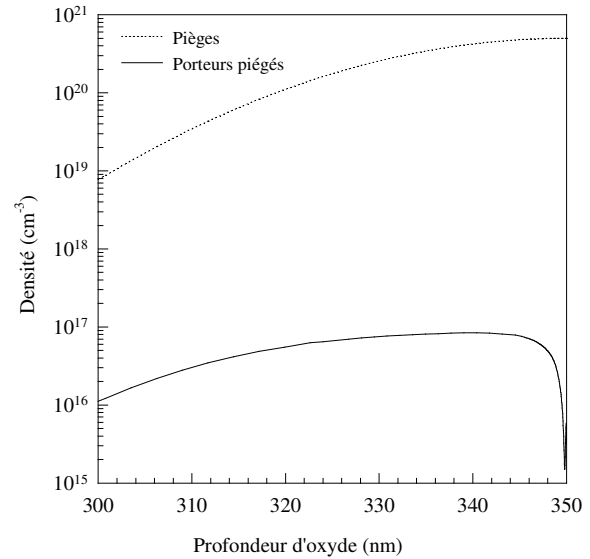


Figure I - -33 : Distribution spatiale des électrons piégés dans les **500 Å** proches de l'interface.

Nous obtenons à la fin de l'irradiation une quantité de charge positive $Q_h = 18,3$ nC et une charge négative $Q_e = 1,6$ nC. La dérive de la tension de midgap est $\Delta V_{mg} = -47,1$ V.

a - Effet de la polarisation - champ interne

Les porteurs piégés induisent une charge d'espace qui modifie le champ interne du dispositif. La figure I - -35 montre la répartition du champ électrique dans la zone proche de l'interface pour les quatre polarisations sous lesquelles nous effectuons les simulations de CTS, 30V, -30V, -60V et -100V.

Nous pouvons remarquer qu'il n'y a pas de superposition du champ électrique d'une polarisation à l'autre, ce qui nous conforte dans l'hypothèse que les pièges peu profonds sont insensibles à l'effet Poole-Frenkel. Quelque soit la position spatiale des charges piégées sur les niveaux peu profonds, ils sont soumis à des champs locaux différents selon la polarisation appliquée. En tenant compte de l'effet Poole-Frenkel, ces niveaux devraient être caractérisés à des température différentes.

On note aussi, dans le cas de la polarisation de -30V, l'inversion du champ électrique à proximité de l'interface. Ceci est en accord avec l'analyse que fait l'auteur de l'article de référence pour la mesure du CTS sous cette même polarisation. Les trous réemis à proximité de l'interface sont alors entraînés vers le silicium où ils se recombinaient avec les électrons de la couche d'inversion. Ils échappent alors à la collection au niveau de la grille. Ce déplacement ne produit pas de courant mesurable, le courant de déplacement qu'il occasionne n'est pas discernable.

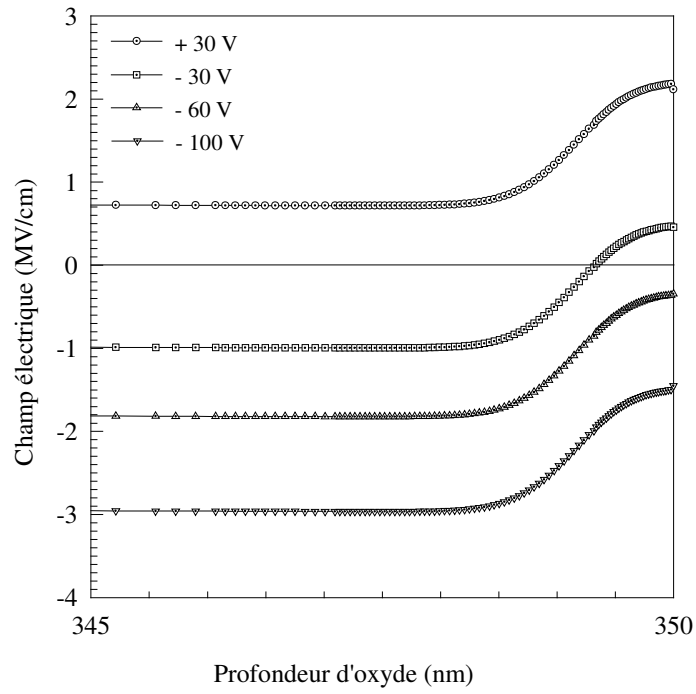


Figure I - -35 : Répartition du champ électrique interne dans la zone proche de l'interface.

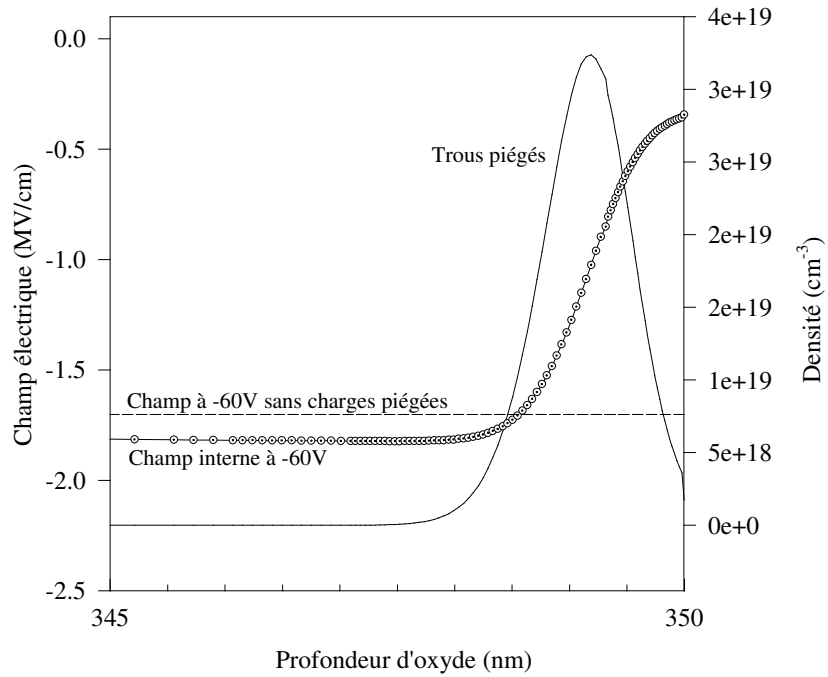


Figure I - -37 : Superposition de la densité normalisée de trous piégés, du champ interne normalisé à -60V et du champ appliqué à -60V.

Nous avons superposé sur la figure I - -37 la distribution normalisée des trous piégés, la répartition normalisée du champ interne à 60V ainsi que la valeur du champ induit par la polarisation de -60V seule. Nous pouvons remarquer que la majorité des trous piégés se trouvent sous l'influence d'un champ interne inférieur, en module, au champ dû à la polarisation avec lequel nous avons calculé l'échelle d'énergie de la figure I - -28 (page 74). Nous avons, lors de ce calcul, surestimé le champ réel et, par conséquent, les valeurs des énergies d'activation de l'échelle.

Cette erreur ne peut, cependant, pas expliquer le phénomène noté pour les niveaux peu profonds. Nous verrons l'incidence de cette erreur lors de l'analyse des différents résultats de simulation de mesure du CTS.

b - Résultats de CTS à 30V

Remarque sur l'adéquation du modèle à l'expérience

Nous précisons ici que l'interprétation que nous faisons des résultats de CTS sous polarisation positive n'est pas issue de l'article de référence. Nous présentons les résultats correspondant à l'hypothèse que nous avons admise (mesure des électrons sous polarisation positive) et à partir de laquelle nous avons construit notre dispositif "virtuel".

Les électrons piégés dans le composant proviennent vraisemblablement de l'injection par effet tunnel à partir du silicium. On admet que ces électrons sont piégés sur des sites associés à des pièges à trous chargés. La modélisation que nous avons faite du piégeage des électrons, a été imposée par l'absence de description de l'effet tunnel dans notre modèle. Ceci nous a conduit à une description en désaccord avec celle de l'expérience ; les paramètres que nous avons dû introduire dans le simulateur sont les seuls qui ont permis d'obtenir la charge d'électrons mesurée expérimentalement.

La quantité d'électrons générés par l'irradiation, quand bien même elle serait totalement piégée, ne suffit pas, avec une distribution gaussienne des pièges à électron de largeur égale à celle des trous, pour expliquer la charge mesurée expérimentalement.

Analyse des résultats

Le courant obtenu par simulation est proche de celui issu de l'expérience sur l'échelle des températures. Le décalage peut être en relation avec la remarque que nous avons faite concernant l'insensibilité apparente des pièges peu profonds à l'effet Poole-Frenkel.

L'amplitude du pic de courant simulé est plus importante. En tenant compte de la remarque précédente sur le dispositif simulé, nous pouvons supposer que les électrons du composant traversent une zone où la densité de trous piégés est importante, ce qui entraîne une recombinaison plus importante que celle de la simulation.

Nous observons de plus un très faible courant de déplacement dû au dépiégeage des trous. Ce courant de déplacement serait d'autant plus important que les trous piégés seraient éloignés de l'interface.

La figure I - -38 montre la comparaison du CTS expérimental et du résultat de la simulation pour une polarisation de 30V sur la grille.

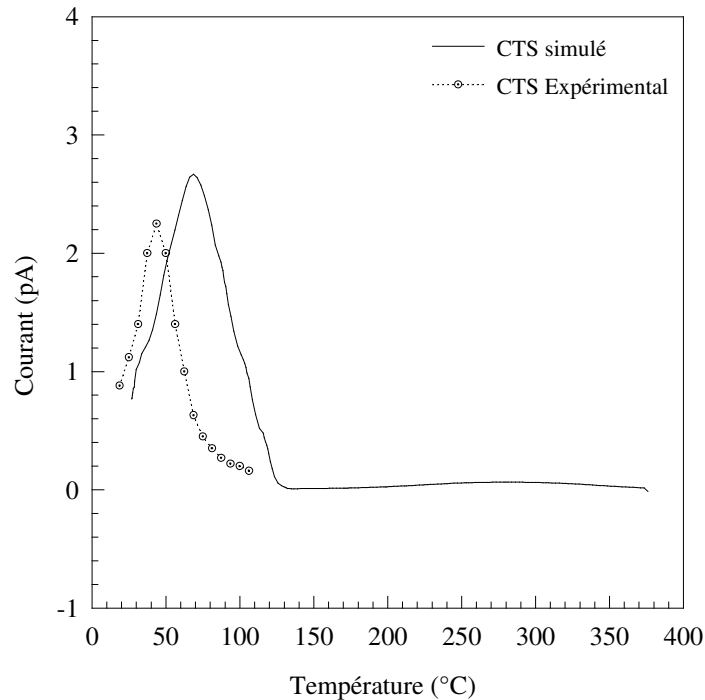


Figure I - -38 : CTS expérimental et simulé sous une polarisation de 30V.

c - Résultats de CTS à -30V

Les quantités de charge mesurées par les CTS expérimental et de simulation sont $Q_{\text{exp}} = 12,9\text{nC}$ et $Q_{\text{sim}} = 11\text{nC}$. Une partie de la charge piégée échappe à la mesure du CTS du fait de la répartition du champ électrique dans l'oxyde. La figure I - -40 présente le détail de la répartition du champ électrique à proximité de l'interface (50 Å). L'inversion du champ électrique se produit dans le premier tiers de la distribution des trous piégés.

Les trous non collectés lors de la simulation du CTS correspondent à 29,5 % des trous piégés au début de la simulation du CTS. L'analyse des simulations de CTS effectuées aux polarisations plus élevées révèle que ce taux se réduit à 25% des trous effectivement collectables par le CTS. Nous verrons que les trous collectés à -100V représentent 95% des trous piégés à la fin de l'irradiation.

La figure I - -42 représente la comparaison entre la mesure de CTS expérimentale et la mesure simulée à -30V. La courbe issue de la simulation montre deux régimes de mesure dont la séparation correspond à la compensation de la charge d'espace par la polarisation, c'est à dire à la suppression de l'inversion de champ interne due à la charge d'espace.

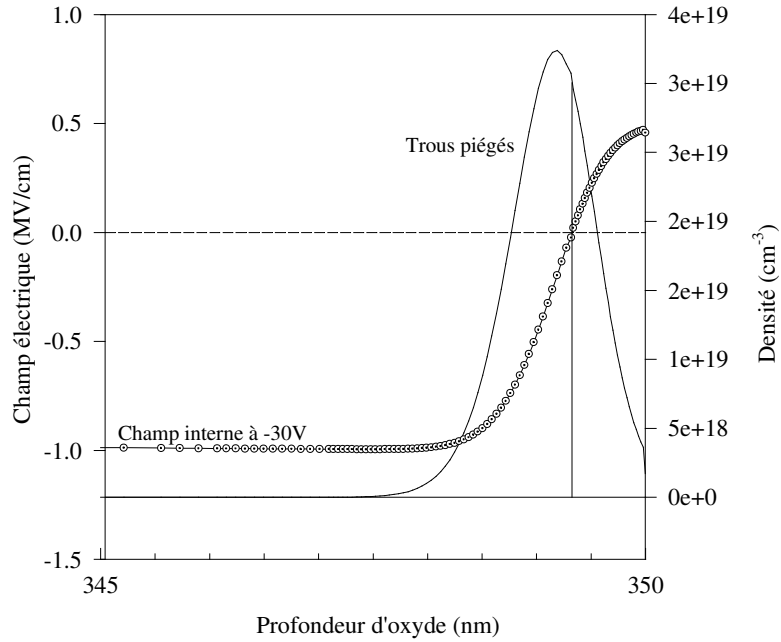


Figure I - 40 : Distribution des trous piégés et répartition du champ électrique dans les 50 Å proches de l'interface - Repérage de l'inversion du champ électrique.

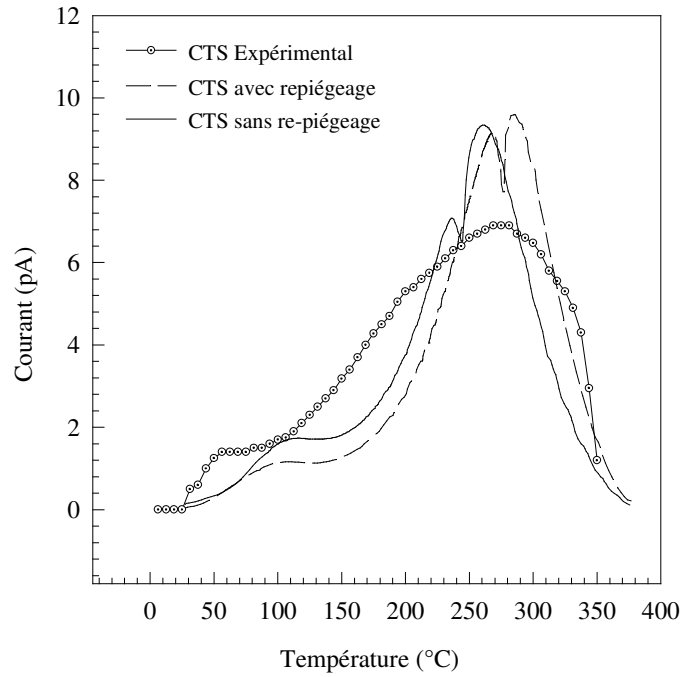


Figure I - 42 : CTS expérimental, CTS simulé et CTS simulé sans re-piégeage sous une polarisation de -30V.

En début de simulation, la charge d'espace n'est pas totalement compensée par la polarisation (figure I - -40), elle induit une accumulation d'électrons à l'interface coté silicium. Dans la première phase du dépiégeage, la charge d'espace diminue progressivement et une partie des trous réémis se recombinent avec les électrons accumulés à l'interface coté silicium. Ce fonctionnement continue jusqu'à la compensation de la charge d'espace par la polarisation qui est marquée par la séparation sur les courbes de simulation entre les deux régimes. Il n'y a plus d'électrons coté silicium, on observe, dans la deuxième phase de la mesure, un courant de conduction des trous de l'oxyde vers le silicium en régime d'accumulation, par le fil de connexion.

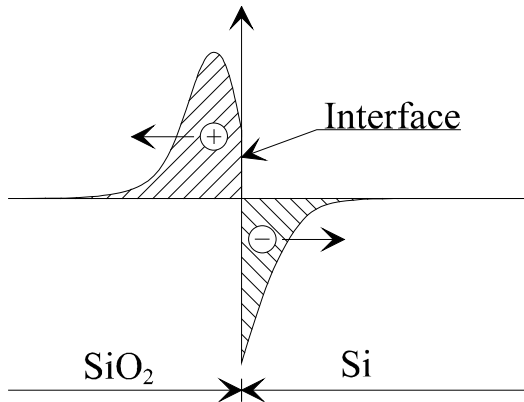


Figure I - -44 : Première phase de la mesure du CTS à -30V, régime d'inversion.

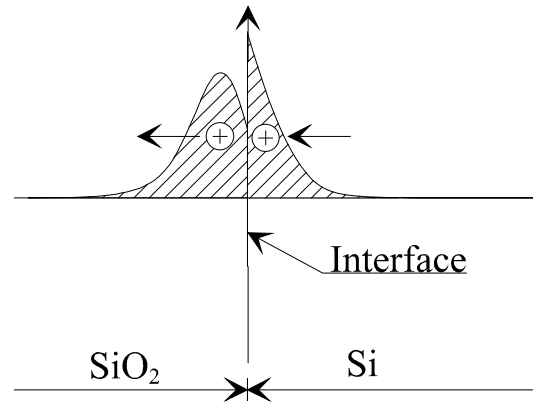


Figure I - -45 : Seconde phase de la mesure du CTS à -30V, régime d'accumulation.

La séparation de ces deux modes de conduction se traduit par un courant de déplacement.

Nous observons le décalage des niveaux peu profonds. L'élargissement de la réponse simulée par rapport à la mesure expérimentale peut s'expliquer par une reformulation de l'effet Poole-Frenkel. Les seconds pics des mesures simulée et expérimentale coïncident sur l'échelle des températures.

Nous avons représenté l'effet du re-piégeage en pointillé sur la figure de la mesure du CTS, nous reviendrons sur l'explication de ce phénomène dans l'analyse des simulations aux polarisations -60V et -100V.

a - Résultats de CTS à -60V

Nous comparerons les CTS expérimental et de simulation, ainsi que le CTS issu de la simulation effectuée sans re-piégeage en phase de chauffe. Nous nous sommes assurés que le courant de trous est identique au courant total (peu du courant de déplacement).

Mesure de la charge caractérisée

La charge positive caractérisée par la mesure simulée est $Q_{\text{CTS-sim}} = 17 \text{ nC}$. Or en fin d'irradiation nous avons une charge totale piégée $Q_{\text{tr.}} = 18,3 \text{ nC}$. Une partie (7%) de la charge piégée échappe à la collection. L'observation de la densité de courant à proximité de l'interface montre qu'une partie des trous réémis se dirigent vers l'interface, ceci malgré le champ électrique antagoniste. Le courant de diffusion est alors supérieur au courant de conduction. La figure I - 46 détaille la répartition de la densité de courant de trous à proximité de l'interface (50 \AA), pour différentes températures. Ce phénomène se produit principalement au taux maximum de réémission ($150^\circ\text{C} - 250^\circ\text{C}$), il est négligeable à d'autres températures.

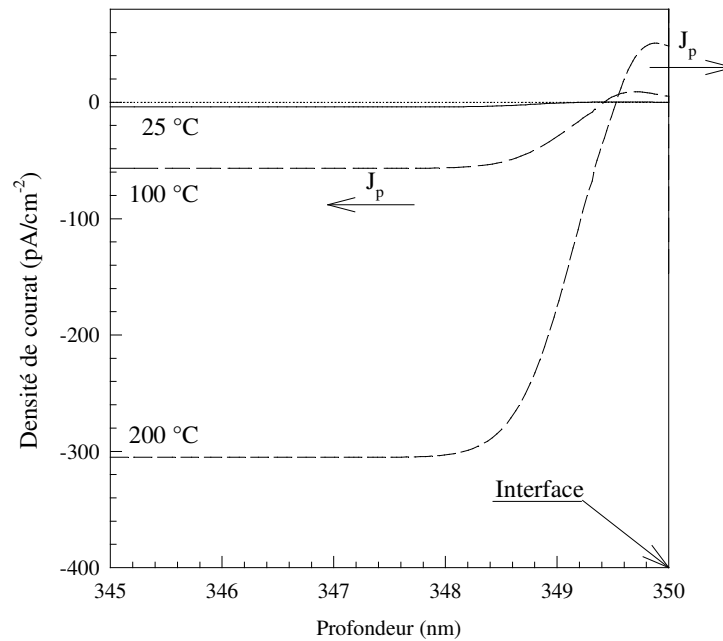


Figure I - 46 : Distribution spatiale de la densité de courant de trous dans les 50 \AA proches de l'interface aux températures 25, 100 et 200 °C.

Cette fuite interfaciale des trous traduit le décalage d'amplitude du deuxième pic de la mesure simulée par rapport à celui de la mesure expérimentale (figure I - 49).

Effet du re-piégeage

La comparaison de la mesure de CTS simulée effectuée sans re-piégeage (CTS en pointillé sur la figure I - 49) avec celle avec re-piégeage (CTS en trait plein figure I - 49) nous permet de constater que malgré la faible extension de la distribution spatiale des trous piégés, le re-piégeage des trous conduit à une surévaluation de la distribution énergétique des trous. Cela se traduit sur l'échelle de température par une translation du second pic de la mesure avec re-piégeage, d'environ 25 °C. L'amplitude de ce pic est aussi légèrement plus importante. Cet effet provoque une modification importante de la caractérisation du premier pic ($\sim 50\%$ sur l'échelle des densités).

L'effet du re-piégeage dépend de la distribution spatiale (extension vers la grille), mais aussi de la densité de pièges vides susceptibles de capturer les porteurs libres.

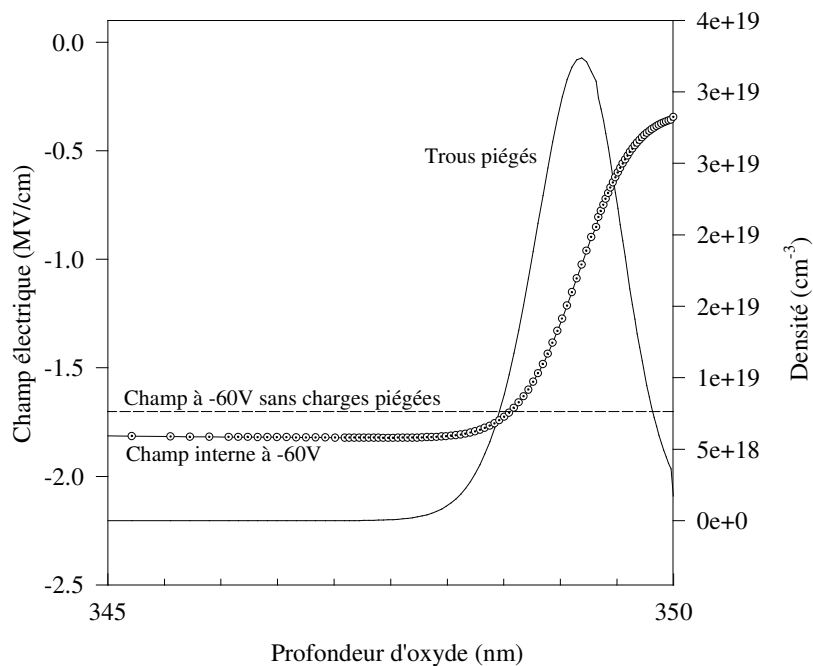


Figure I - 30 : Distribution spatiale du champ interne avec et sans la charge d'espace induite par les trous piégés et de la densité de trous piégés à la fin de l'irradiation.

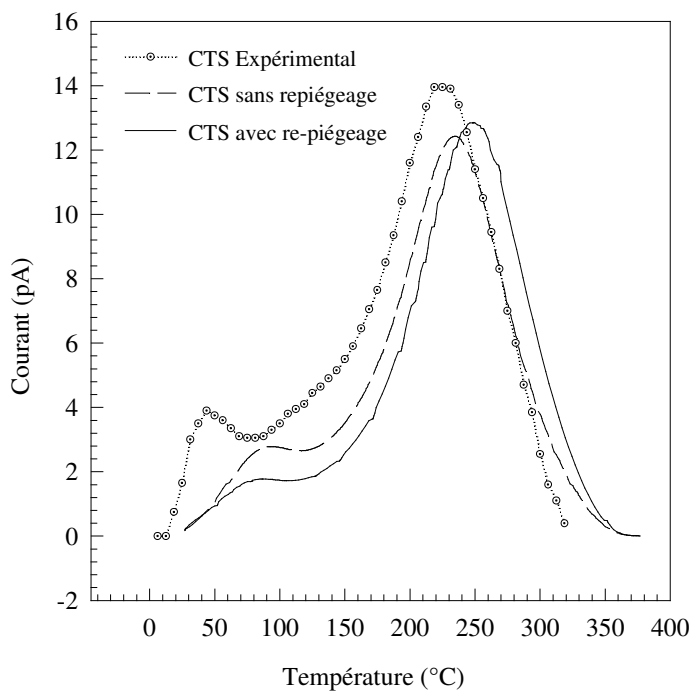


Figure I - 49 : CTS expérimental, simulé et de trous pour une polarisation en phase de recuit de - 60V.

Effet de l'évolution de la distribution spatiale du champ électrique

La description du dispositif de simulation ayant été faite à partir des résultats expérimentaux en ne tenant pas compte de l'effet du re-piégeage, nous comparerons dans ce qui suit l'expérience au résultat de la simulation effectuée sans re-piégeage (en pointillé sur la figure I - -49).

Cette comparaison (figure I - -49) montre un décalage en température dans les deux premiers tiers de la mesure. Ce décalage se résorbe progressivement avec l'augmentation de la température.

Nous avons déduit la distribution énergétique des pièges à partir de la mesure de CTS expérimentale à -100V. L'influence de l'effet Poole-Frenkel a été pris en compte en considérant un champ constant dans l'oxyde. Or les porteurs piégés induisent une charge d'espace qui modifie le champ initial. Sur la figure I - -30 nous constatons que la majorité des charges piégées sont sous l'influence d'un champ inférieur à celui dû à la polarisation. Nous avons donc surévalué la valeur de l'énergie d'activation de certains niveaux. Ils sont alors réémis pour des températures plus importantes lors de la mesure simulée.

Cependant, au cours de la mesure, la charge d'espace se résorbe progressivement, le champ interne se reconstitue. Les derniers niveaux, lors de leur réémission, se retrouvent soumis à un champ proche de celui dû à la polarisation. La courbe de CTS simulé coïncide alors avec la courbe de CTS expérimental.

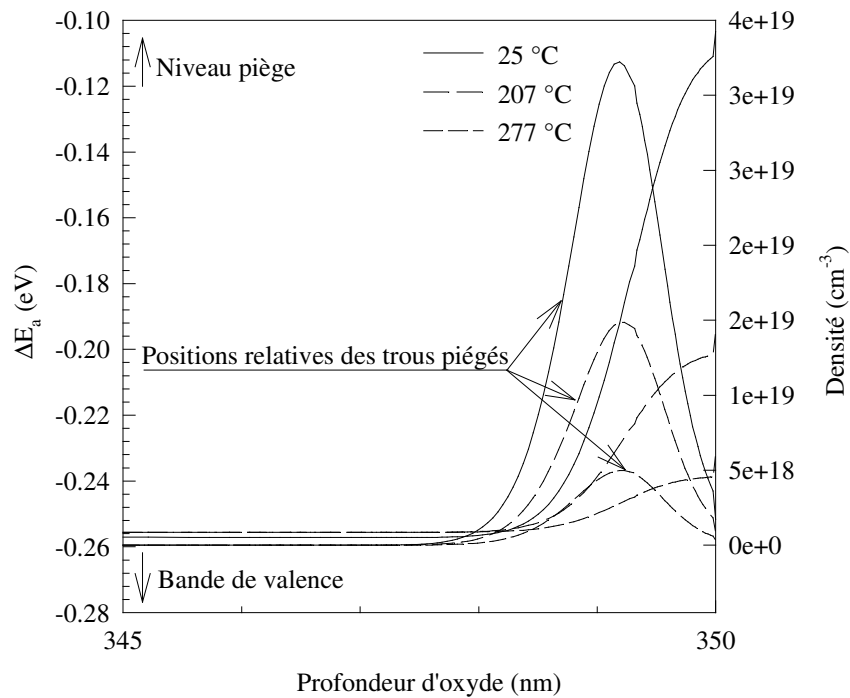


Figure I - -32 : Evolution de l'atténuation de l'effet Poole-Frenkel, induite par la charge d'espace, avec la température (25 °C, 207 °C et 277 °C). $\Delta E_a = E_a(0V) - E_a(E_{interne})$. Distribution spatiale associée..

La figure I - -32 illustre ce processus. Nous avons représenté l'abaissement d'un niveau d'énergie dû à l'effet Poole-Frenkel dans les 50 Å proches de l'interface pour différentes températures. Nous avons aussi représenté les distributions spatiales de la charge piégée associée.

La fuite des trous réémis vers le silicium qui, selon notre interprétation, explique les différences d'amplitude entre la simulation et l'expérience, devient négligeable en fin de mesure. Ceci explique que nous puissions faire coïncider la courbe de simulation avec la référence expérimentale.

Nous pouvons remarquer que les derniers niveaux, pour lesquels nous avons observé précédemment une insensibilité à l'effet Poole-Frenkel, sont réémis plus tardivement (ils ont été calculés à partir de résultat à -100V). Cela se traduit par un décalage sur les courbes de mesure de CTS.

b - Résultats de CTS à -100V

Nous étudions ici les résultats issus de la simulation effectuée à -100V. Le courant de déplacement est négligeable.

La charge caractérisée est $Q_{\text{CTS-sim}} = 17,4 \text{ nC}$. L'effet de fuite à l'interface, bien que légèrement atténué reste présent. Nous avons représenté sur la figure la densité de courant dans les 50 Å proches de l'interface.

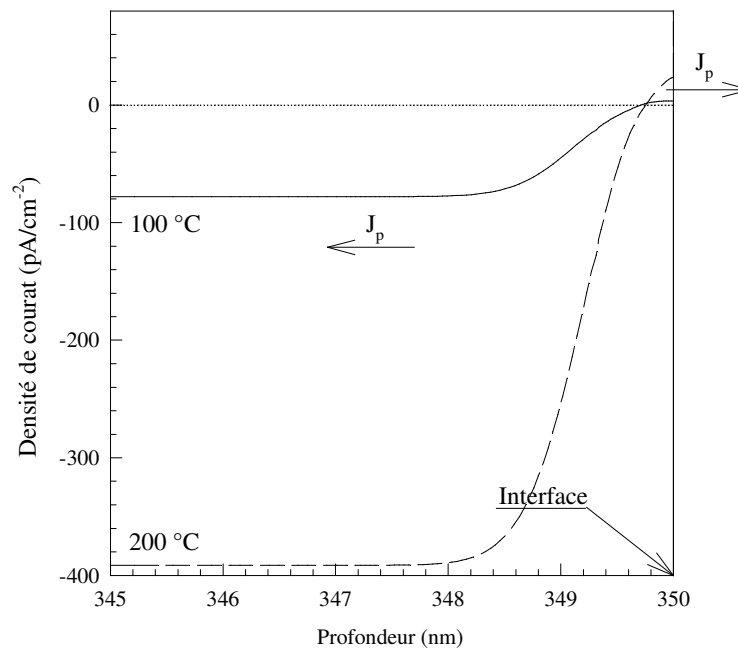


Figure I - -33 : Densité de courant dans les 50 Å proches de l'interface - Effet de fuite interfaciale sous polarisation de -100V.

Les courbes précédentes nous permettent de visualiser le phénomène de fuite de courant à l'interface. Les températures pour lesquelles nous avons dessiné ces courbes sont arbitraires, identiques à celles dessinées dans le cas de la simulation à -60V. Il faut noter que les réponses en température sous ces deux polarisations sont décalées l'une par rapport à l'autre. Les courbes ne peuvent pas être comparées, elles montrent le phénomène de façon qualitative. La charge caractérisée par CTS sous -100V est de 2% supérieure à celle obtenue sous -60V. La fuite interfaciale se produit donc avec la même intensité dans les deux cas et ceci dans la plage précédant le recollement des courbes de CTS expérimentale et simulée sans re-piégeage (figure I - -49 et I - -34).

Effet du re-piégeage et du champ interne

Sur la figure I - -34 nous pouvons constater le même type de translation entre la réponse du CTS simulé sans re-piégeage (courbe en tiret) et la réponse avec re-piégeage. Nous pouvons en déduire que la polarisation à une influence très limitée sur ce phénomène. La conduction par sauts de piège à piège prédomine sur la conduction dans la bande de mobilité.

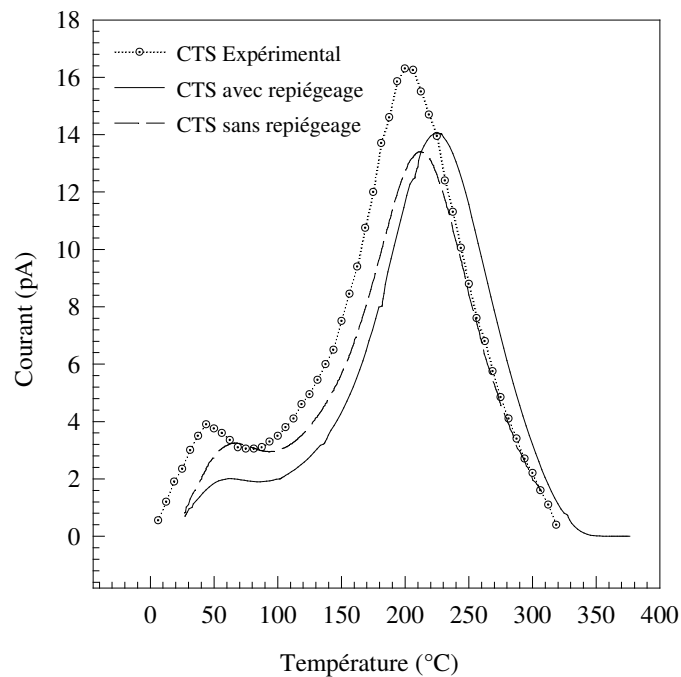


Figure I - -34 : CTS expérimental et simulé pour une polarisation de -100V. La charge collectée par le CTS simulé est de 17,4 nC et par le CTS expérimental de 19 nC - CTS simulé sans re-piégeage en trait plein.

La distribution énergétique et la quantité de charge ont été déduites de la courbe expérimentale à -100V. L'insensibilité des premiers niveaux, ainsi que des derniers, est

éliminée. Nous pouvons ainsi observer les effets du re-piégeage et de la déformation du champ interne.

4 - Conclusion

Nous avons montré l'effet du re-piégeage sur la mesure de CTS. Il est dépendant de la quantité de pièges vides susceptibles de piéger les trous réémis. Il est aussi dépendant de la section efficace de capture de ces pièges.

Dans le cadre de nos simulations et du fait des limitations du simulateur, nous avons considéré la distribution de pièges préexistante à l'irradiation. Cette distribution de pièges n'a pas été le critère de calibrage de la simulation, les résultats montrant l'effet de re-piégeage doivent être considérés comme qualitatifs. La distribution des pièges, et nous l'avons vu, l'existence même de ces pièges reste une donnée difficile à obtenir. Nous avons pu montrer que ce phénomène reste peu sensible à la polarisation appliquée durant la mesure.

La répartition du champ interne dans l'oxyde induit un resserrement des réponses de mesure de CTS du fait de l'effet Poole-Frenkel. Cette influence doit être prise en compte lors de la déduction de la distribution énergétique.

L'information obtenue par mesure de CTS pour la caractérisation des pièges dans l'oxyde, est entachée d'une marge d'erreur qui peut-être relativement importante.

Le point le moins certain de cette analyse concerne les niveaux peu profonds. L'observation des résultats des mesures expérimentales indique un comportement très différent des niveaux du premier pic et des niveaux du second pic. Le premier pic est insensible à l'effet Poole-Frenkel, les simulations à -60V et -100V montrent une différence d'amplitude qui n'apparaît pas dans les résultats expérimentaux.

Ceci nous amène à penser que la réponse expérimentale pourrait être la superposition des réponses CTS de deux types de pièges différents.

L'hypothèse que nous avons faite sur le piégeage des électrons se révèle satisfaisante compte-tenu du modèle peu réaliste considéré (pas d'injection d'électron par effet tunnel). Les mesures expérimentales laissent cependant envisager d'autres configurations possibles que la simulation permettrait de valider, telles que le piégeage de trous sous la grille.

CONCLUSION

Dans ce travail nous avons étudié le transport, le piégeage des porteurs dans l'oxyde SiO_2 des structures MOS soumises à un rayonnement ionisant et leur dépiégeage thermique. La distribution énergétique des pièges dans la bande interdite du SiO_2 a été modélisée par une suite de niveaux discrets dont nous observons l'évolution de la charge piégée. La cinétique de peuplement de ces niveaux est couplée à celle des porteurs libres par le biais des sections efficaces de capture et de recombinaison et de l'énergie d'activation de chaque niveau. Nous avons présenté dans le premier chapitre les modèles utilisés dans le simulateur en précisant, en particulier, le domaine de prépondérance du dépiégeage thermique par rapport au dépiégeage par effet tunnel que nous ne traitons pas.

La traduction numérique des modèles décrits a été détaillée au second chapitre. Les équations présentées constituent le coeur du simulateur. Leur implantation a constitué un travail long et minutieux, facilité par l'emploi de techniques de programmation moderne telle que l'utilisation du langage C++. Autour de ce noyau que constituent les équations, nous avons développé outre les techniques de résolution, un outil de maillage automatique de structure qui facilite la description des dispositifs simulés et assure une bonne précision des résultats de simulation.

Nous avons ensuite présenté une série de simulations associées à des méthodes de caractérisation classiques comme la méthode des courants thermo-stimulés et la méthode du recuit isochrone. Ces simulations nous ont permis, notamment, de montrer qualitativement l'influence des phénomènes de piégeages-dépiégeages sur le résultat de ces expériences. L'interprétation des résultats expérimentaux est alors faussée dans le cas d'un re-piégeage important des porteurs dépiégés.

Nous avons aussi souligné les cas pour lesquels le courant de déplacement est de l'ordre de grandeur du courant mesuré. Ce courant est indissociable des autres courants lors de la mesure et entraîne alors une mauvaise interprétation des résultats.

A partir de ces conclusions, nous avons simulé un ensemble d'expérience de caractérisation de composant par la méthode du courant thermo-stimulé en nous

appuyant sur des résultats expérimentaux. La simulation nous a permis de dégager l'influence des différentes conditions de mesure.

L'utilisation du simulateur apporte une méthode d'évaluation, simple et rapide, des phénomènes difficilement ou non discernables par l'analyse directe des résultats expérimentaux. Elle permet la validation des modèles de description du piégeage dans SiO₂ irradiés, aussi bien spatiale qu'énergétique. Elle offre une prédiction du comportement de la charge piégée en fonction du temps et de la température.

L'amélioration du simulateur sera la prise en compte de l'injection et du piégeage de porteurs par effet tunnel à partir des électrodes ainsi que leur dépiégeage. L'absence de la description de ce phénomène qui semble bien établi a parfois limité notre tentative de description des résultats expérimentaux.

BIBLIOGRAPHIE

- [AUSMAN 75] "Electron-hole pair creation energy in SiO₂",
G. A. Ausman, F. B. McLean,
Appl. Phys. Lett., vol. 26, 4, 173, 1975.
- [BANK 85] "Transient simulation of silicon devices and circuits.",
R. E. Bank, W. M. Coughran, Jr. W. Fichner, E. H. Grosse, D. J. Rose, R.
K. Smith,
IEEE Trans. ED-32, 10, 1992, 1985.
- [COHEN 69] "Simple band model for amorphous semiconducting alloys",
M. H. Cohen, H. Fritzsche, S. R. Ovishinsky,
Phys. Rev. Lett., 22, 20, p. 1065, 1969.
- [COHEN-TANNOUDJI 73]
Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë,
Mécanique quantique II, p. 1287, Ed. Hermann, 1973.
- [COTTRELL 79] "Two-dimensional static and transient simulation of mobile carrier
transport in a semiconductor",
P. E. Cottrell, E. M. Buturla,
Proceedings of NASECODE I Conference, Boole Press, Dublin, Ireland,
31-64, 1979.
- [DHAT 81] "Une présentation de la méthode des éléments finis",
G. Dhat, G. Touzot,
Ed. Maloine, 1981.
- [DOZIER 87] "An evaluation of low-energy X-ray and cobalt-60 irradiations of MOS
transistors",
C. M. Dozier, D. M. Fleetwood, D. B. Brown, and P. S. Winokur,
IEEE Trans. on Nucl. Sci., Vol. NS-34, No. 6, 1987.

- [DUSSEL 70] G. A. Dussel and K. W. Boer,
Phys. Status Solidi 39, 375, 1970.
- [ESCOFFIER 95] "Simulation numérique de l'effet des charges induites par irradiation dans les oxydes de structures MOS",
R. Escoffier,
Thèse, Université de Montpellier II, 1995.
- [FLAMENT 94] "Utilisation des sources X pour l'évaluation du durcissement, le contrôle et la mise au point de process",
O. Flament,
Journée d'étude RADECS, 1994.
- [FLEETWOOD 91] "Effect of bias on thermally-stimulated current (TSC) in irradiated MOS devices",
D. M. Fleetwood, R. A. Reber, Jr., and P. S. Winokur,
IEEE Trans. Nucl. Sci., Vol. 38, No 6, December 1991.
- [FLEETWOOD 92] "New insights into radiation-induced oxide-trap charge through thermally-stimulated current measurement and analysis",
D.M. Fleetwood, S. L. Miller, , R.A. Reber, Jr., P. J. McWhorter, P.S. Winokur, M.R. Shaneyfelt, J.R. Schwank,
IEEE Trans. Nucl. Sci., Vol. 39, p. 2192, 1992.
- [FLEETWOOD 93] D.M. Fleetwood, P.S. Winokur, R.A. Reber, Jr., TL Meisenheimer, J.R. Schwank, M.R. Shaneyfelt, and L.C. Riewe,
J. Appl. Phys., 73, 10, 1993.
- [FRENKEL 38] J. Frenkel,
Tech. Phys. U.S.S.R. 5, 685 (1938); Phys.Rev. 54, 647, 1938.
- [GIBBS 76] "An algorithm for reducing the bandwidth and profile of a sparse matrix",

N. E. Gibbs, W. G. Poole, Jr. and P. K. Stockmeyer,
SIAM J., Num. Anal., Vol 13, No. 2, 1976.
- [HUGHES 78] "Time resolved hole transport in a-SiO₂",
R. C. Hughes,
Solid State Electronics, 21, p. 251, 1978.

- [KRANTZ 87] "Applied field and total dose dependence of trapped charge buildup",
R. J. Krantz, L. W. Aukerman, and T. C. Zietlow,
IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-34, 6, 1987.
- [LERAY 89] "Contribution à l'étude des phénomènes induits par les rayonnements
ionisants dans les structures à effet de champ au silicium ou à l'arséniure
de gallium utilisées en micro-électronique",
J-L. Leray,
Thèse, Université de Paris-sud Centre d'Orsay, Décembre 1989.
- [MATHIEU 87] Physique des semiconducteurs et des composants électroniques,
H. Mathieu,
Ed. Masson, 1987.
- [MESSIAH 65] A. Messiah,
Mécanique quantique 1, p. 195, Ed. Dunod, 1965.
- [MICHEZ 91A] "Transient simulation of silicon devices under high carrier injection.
Comparison of various time stepping schemes",
A. Michez, G. Bordure,
NASECODE VII Conference, Compel, 1991.
- [MICHEZ 91B] "Simulation numérique de la collection des charges induites par un ion
lourd dans une diode silicium",
A. Michez,
Thèse, Université Montpellier II, 1991.
- [MILLER 91A] "A practical predictive formalism to describe generalized activated
physical processes",
S. L. Miller, P. J. McWhorter, W. M. Miller, and P. V. Dressendorfer,
J. Appl. Phys., 70 (8), p. 4555, 15 October 1991.
- [MILLER 91B] "A predictive model of electron and hole decay in silicon-nitride-oxide-
silicon nonvolatile memory transistors experiencing arbitrary thermal
environnements",
S. L. Miller and P. J. McWhorter,
J. Appl. Phys, 70 (8), p. 4589 15 October 1991.

- [MILLER 92] "Determining the energy distribution of traps in insulating thin films using the Thermally Stimulated Current technique",
S. L. Miller, D. M. Fleetwood, and P. J. McWhorter,
Phys. Rev. Lett., August 1992.
- [MONTROLL 65] "Random walks on lattices",
E.W. Montroll and G.H. Weiss,
J. Math. Phys., p. 167, 1965.
- [MOTT 77] "The lifetime of electrons, holes and excitons before self-trapping",
N. F. Mott, A. M. Stoneham,
J. Phys. C Solid State Phys., 10, p. 3391, 1977.
- [MOTT 78] "Electronic properties of vitreous silicon dioxide",
N. F. Mott,
The physics of SiO₂ and its interface, Ed. S. T. Pantelides, Pergamon Press, 1978.
- [NING 76] "High-field capture of electrons by Coulomb-attractive centers in silicon dioxide",
T. H. Ning,
J. Appl. Phys., Vol. 47, No. 7 1976.
- [O'DWYER 73] J. J. O'Dwyer,
The theory of electrical conduction and breakdown in solid dielectrics,
Clarendon Press, Oxford, 1973.
- [OLDHAM 85] "Recombinaison along the tracks of heavy charged particules in SiO₂",
T. R. Oldham,
J. Appl. Phys., Vol. 57, p. 2695, 1985.
- [ONSAGER 38] "Initial recombinaison of ions",
L. Onsager,
Phys. Rev., Vol. 54, p. 554, 1938.
- [PAILLET 94] "Effet du procédé de fabrication des isolants sur la charge d'espace créée par rayonnement X : Application aux technologies silicium sur isolant",
P. Paillet,
Thèse, Université de Montpellier II, Mars 1995.

- [PAILLET 95] "Trapping-detrapping properties of irradiated ultra-thin Simox Buried Oxides",
P. Paillet, J-L. Autran, J-L. Leray,
IEEE Trans. Nucl. Sci., Vol. 42, No 6, December 1995.
- [PAULING 60] L. Pauling,
The nature of chemical bond, p. 449, Cornel University Press, 1960.
- [PEYRE 91] "Contribution à l'étude des effets semi-permanents induits par les rayonnements ionisants dans les transistors MOS",
D. Peyre,
Thèse, Université Montpellier II, 1991.
- [SAH 85] C .T. Sah, S. S. C. Pan and C. H. Hau,
J. Appl. Phys., 57, 5148, 1985.
- [SAH 90] C.T. Sah,
Solid-St. Electron. 33, 2, 147-167,1990.
- [SCHER 73] "Stochastic transport in a disordered solid",
M. H. Scher, M. Lax,
Phys. Rev. B, 7, 10, P. 4491, 1973.
- [SIMMONS 67] J. G. Simmons,
Physical Review 155, 657, 1967.
- [SONNEVELD 89] "CGS : a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems",
P. Sonneveld,
SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10, PP. 36-52, 1989.
- [TZOU 83] "Field dependence of two large hole capture cross sections in thermal oxide on silicon",
J. J. Tzou, J. Y.-C. Sun, and C.-T. Sah,
Appl. Phys. Lett., 43 (9), P. 861, 1983.

- [van der ZIEL 76] A. van der Ziel,
Solid State Physical Electronics, Prentice-Hall, 1976.
- [VASUDEVAN 94] "A two-dimensional numerical simulation of oxide charge buildup in
MOS transistors due to radiation",
V. Vasudevan and J. Vasi,
IEEE Trans. Elec. Dev., Vol. 41, 3, 1994.
- [VORST 92] "Bi-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the
solution of nonsymmetric linear systems",
H. A. Van Der Vorst,
SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 13, no. 2, pp. 631-644, 1992.