

ACADEMIE DE MONTPELLIER

UNIVERSITE MONTPELLIER II

--- SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC ---

THESE

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

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

TITRE

Simulation numérique de l'effet des charges induites par irradiation dans
les oxydes de structures MOS.

par

René ESCOFFIER

Soutenu le 12 Octobre 1995 devant le Jury composé de:

MM.

M. Jean Claude MANIFACIER, Professeur, Université Montpellier II	Président du Jury
M. Jean-Luc LERAY, Chef de section, CEA Bruyère le Châtel	Rapporteur
M. Georges PANANAKAKIS, Professeur, ENSERG Grenoble	Rapporteur
M. Alain MICHEZ, Maître de Conférences, Université Montpellier II	Examineur
M. Yves MOREAU, Maître de Conférences, Université Montpellier II	Examineur
M. Daniel PEYRE, Ingénieur, Nuclétude, Les Ulis	Examineur
M. Guy BORDURE, Professeur, Université Montpellier II	Directeur de thèse

Ce travail a été effectué au Centre d'Electronique de Montpellier de l'Université des Sciences et Techniques du Languedoc en collaboration avec le CEA de Bruyères-le-Châtel.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Monsieur le Professeur G.BORDURE qui m'a accueilli dans son équipe et m'a conseillé tout au long de ces trois ans de collaboration.

J'adresse mes remerciements à Messieurs J.L. LERAY et G. PANANAKAKIS d'avoir accepté d'être rapporteur de ce manuscrit.

Je remercie particulièrement Monsieur A.MICHEZ pour son soutien et son aide précieuse sans laquelle ce travail n'aurait pas pu se faire.

Je tiens à remercier particulièrement Messieurs J.C. MANIFACIER et Y.MOREAU d'avoir bien voulu faire parti du jury.

Ma gratitude va également à Monsieur C.CIRBA qui a mis son expérience et ses compétences en informatique dans la réalisation de ce projet.

J'ai par ailleurs bénéficié de l'aide compétente de nombreuses personnes du CEA comme Messieurs. P. PAILLET, O. MUSSEAU et Mademoiselle V. FERLET-CAVROIS que je tiens à remercier.

Enfin je voudrais exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur D.PEYRE pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences et pour les nombreuses discussions que nous avons eues sur l'approche physique des phénomènes ainsi que pour son soutien et son dévouement dans les dernières semaines de rédaction de ce mémoire.

INTRODUCTION

I Les RAYONNEMENTS IONISANTS et leurs EFFETS sur les STRUCTURES MOS

I.1 ORIGINE ET NATURE DES RAYONNEMENT

I.2 INTERACTION AVEC LA MATIERE

I.2.1 EFFETS DES RAYONNEMENTS IONISANTS SUR LES STRUCTURES MOS

I.2.2 EVOLUTION DES CARACTERISTIQUES D'UN TRANSISTOR MOS IRRADIE

I.2.3 PERTURBATION DES CIRCUITS MOS PAR CREATION ET PIEGEAGE DE CHARGES

I.2.4 OXYDE DE SILICIUM (PRESENCE ET CREATION DE DEFAUTS)

II EVOLUTION des CHARGES dans la SILICE

II.1 GENERATION DE CHARGES DANS SiO_2 PAR RAYONNEMENT

II.2 TRANSPORT DE CHARGES DANS SiO_2

II.3 INTERACTION DES PORTEURS LIBRES AVEC LES NIVEAUX PIEGES

II.3.1 SECTION EFFICACES DE PIEGEAGE

II.3.2 LES DENSITES DE PIEGES

II.3.3 EQUATIONS DE TRANSPORT ET DE PIEGEAGE

II.3.4 CALCUL APPROCHE DE LA VARIATION DE LA TENSION DE SEUIL

II.4 DEPIEGEAGE THERMIQUE ET ENERGIE D'ACTIVATION

II.5 ETUDE DE LA STRUCTURE POLYSILICIUM ISOLANT SEMICONDUCTEUR

II.5.1 SILICIUM INTRINSEQUE EN CONTACT AVEC SiO_2

II.5.2 CONTACT SILICIUM DOPE P AVEC SiO₂

II.5.3 CHARGES D'ESPACE DANS LE SILICIUM

II.5.4 CHARGES LOCALISEES DANS L'OXYDE

II.5.5 CONTACT METAL SEMICONDUCTEUR ET METAL ISOLANT

III MODELISATION

III.1 METHODOLOGIE DE RESOLUTION

III.1.1 DISCRETISATION SPATIALE DES EQUATIONS

A) Discrétisation de l'équation de Poisson

B) Discrétisation spatiale des équations de continuité

C) Discrétisation des équations de piègeage

D) Remarques

1°) Calcul de champ électrique dans un élément

2°) Restriction au cas des forts champs (SiO₂)

III.1.2 LINEARISATION DU SYSTEME D'EQUATIONS

III.1.3 DISCRETISATION TEMPORELLE DES EQUATIONS

III.1.4 CONSTRUCTION DU SYSTEME ASSEMBLE

III.1.5 APPLICATION DES CONDITIONS AUX LIMITES

III.1.6 RESOLUTION DU SYSTEME LINEAIRE

III.2 MODELISATION DES JONCTIONS et HETEROJONCTIONS

III.2.1 JONCTION PN

III.2.2 HETEROJONCTION Si-SiO₂

III.2.3 CONTACT SiO₂-METAL ou POLYSILICIUM

III.2.4 HETEROJONCTION Métal-SiO₂-Si ou polysilicium-SiO₂-Si

III.3 DIFFICULTES LIEES A LA RESOLUTION

III.3.1 MAILLAGE DE LA STRUCTURE

III.3.2 EFFETS DE POINTE

III.3.3 PROBLEMES DE CONVERGENCE

III.3.4 RECHERCHE DE L'ETAT D'EQUILIBRE

IV SIMULATIONS NUMERIQUES COMPARAISON avec les RESULTATS EXPERIMENTAUX

IV.1 SIMULATION DU PIEGEAGE DE CHARGES DANS DIFFERENT TYPE D'OXYDE :

IV.1.1 OXYDE A DENSITE DE PIEGES UNIFORME

IV.1.2 OXYDE A DENSITE DE PIEGES NON UNIFORME

IV.2 CAPACITE MOS ISSUES DE LA REALISATION D'UN BEC D'OISEAU :

IV.2.1 ETUDE ET COMPARAISON DES CAPACITES

IV.3 ANALYSE DU PROBLEME DU BEC D'OISEAU

CONCLUSION

INTRODUCTION

INTRODUCTION :

Dans leurs applications spatiales ou militaires, les composants à semiconducteurs sont soumis à des rayonnements ionisants capables de modifier leurs caractéristiques électriques. Lors de l'absorption d'une dose d'ionisation, ces composants constitués aussi bien de matériaux semiconducteurs que d'isolants (nécessaires à leur fabrication) voient leur population d'électrons et de trous augmenter dans les deux types de matériaux. Ces perturbations influencent fortement le fonctionnement du transistor MOS, constituant principal des circuits intégrés actuels.

L'évacuation de ces charges libres présentes dans les matériaux semiconducteurs engendre des courants transitoires. Il n'y a pas d'accumulation à long terme pouvant dégrader les caractéristiques de façon permanente.

Dans les isolants, il en est tout autrement; les charges créées ne peuvent s'évacuer aussi facilement que dans les semiconducteurs. Des perturbations permanentes ou semi-permanentes du fonctionnement sont observées.

L'étude que nous faisons ici est consacrée aux phénomènes engendrés par la présence de charges dans les isolants. Ces charges de faible mobilité sont susceptibles de se piéger et de créer des champs électriques perturbant les champs déjà existant. La forme, la qualité des oxydes et le champ électrique interne sont des facteurs déterminants de la densité et de la position des charges piégées. La passivation d'un circuit intégré fait apparaître des formes d'oxyde appelées "bec d'oiseau" qui sont présentes à la transition entre les oxydes de grille et les oxydes de passivation. Suivant la densité et la localisation de ces charges dans le bec d'oiseau, des canaux de conduction parasites se créent.

Le travail que nous présentons est une modélisation du piégeage des charges (électrons et trous) dans les oxydes de silicium (SiO_2). Cette étude s'articule autour de quatre chapitres.

Le premier chapitre présente des notions générales sur les rayonnements ainsi que certaines conséquences de leur interaction sur les semiconducteurs.

Une seconde partie est consacrée à la génération, au transport et au piégeage des charges dans la silice, ainsi qu'à certains phénomènes de recombinaisons et de dépiégeages thermiques. A l'issue de cette partie nous disposerons d'un modèle mathématique faisant intervenir tous ces phénomènes.

Dans le troisième chapitre, nous exposerons les méthodes employées permettant de faire un traitement numérique des équations.

Enfin, le dernier chapitre permettra de valider le modèle théorique par confrontation de nos simulations avec divers résultats expérimentaux fournis par le C.E.A de Bruyère le Châtel. Dans un premier temps nous étudierons les dérives de tension de seuil de transistors MOS sur un modèle à une dimension.

Dans un second temps, nous observerons les variations du courant de conduction consécutives à la présence de charges dans le bec d'oiseau (modélisation à deux dimensions).

Remarque : Dans tout le document, sauf avis contraire, les doses sont exprimées en rad(Si), c'est à dire en rad silicium.

CHAPITRE I

LES RAYONNEMENTS IONISANTS ET LEURS EFFETS SUR LES STRUCTURES MOS

I LES RAYONNEMENTS IONISANTS

I.1 ORIGINE ET NATURE DES RAYONNEMENTS :

Les sources de rayonnement nuisibles pour l'électronique sont d'origine très diverses. On peut les grouper en deux grandes parties :

- Les phénomènes naturels.
- Les phénomènes issus de l'activité de l'homme.

Les premiers proviennent essentiellement du milieu spatial, qui soustrait à la protection de l'atmosphère terrestre, est noyé dans des flux de particules et d'ondes électromagnétiques de diverses origines (solaire et cosmique). Le soleil est pour sa part responsable de la plus grande quantité de particules .

L'influence du soleil dans sa périphérie se traduit par trois types de manifestation :

-l'éruption solaire: Emission de rayonnement X suivi de protons (90% du rayonnement)

d'énergies comprises entre 10MeV et 1GeV accompagnée de quelques particules α ,..

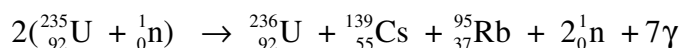
-le vent solaire : Composé en majorité de protons d'énergie < 100keV.

-ceinture de radiation (autour de la terre): Constituée de proton d'énergie < 300 MeV et d'électrons d'énergie pour la plupart < 7 MeV^[ANAPRO].

Les rayons cosmiques sont quant à eux constitués de tout type de particules mais avec une grande proportion de protons et de particules α d'énergie comprise entre 100 MeV et 10^{14} MeV. Il est à noter que les débits sont très faibles (environ 1 particules/(cm².s) à 100 MeV et moins de 10^{-4} particules/(cm².s) à 10^3 GeV).

Les phénomènes issus de l'activité humaine sont de même nature mais l'énergie et le débit des rayonnements sont supérieurs. On retrouve des émissions radiatives dans les applications civiles (centrales nucléaires) et le milieu militaire (explosion nucléaire, etc...)

Dans les centrales nucléaire, la fission engendre essentiellement des neutrons et des rayons γ dont la production suit la relation suivante : après "absorption" d'un neutron par le noyau il s'en suit une émission de noyaux de fission accompagnée de rayonnements γ , de photons et d'autres neutrons,...



D'autres réactions entre ensuite en jeu produisant différents éléments plus ou moins radioactifs comme par exemple pour les plus actifs Sr, Y, Zr, Nb, Cu, I, Ce, etc...

Tous ces phénomènes engendrent des émissions de particules et des rayonnements qui entrent en interaction avec la matière et introduisent des perturbations au niveau des structures atomiques et de l'équilibre électrique des matériaux.

I.2 INTERACTION AVEC LA MATIERE :

Dans le paragraphe précédent, nous avons énuméré brièvement divers types de particules et de rayonnements que nous pouvons classer en trois familles :

1. Les particules chargées (ions, électrons etc...).
2. Les neutrons.
3. Les photons.

1°) Les particules chargées :

La collision d'une particule chargée avec un atome du matériau cible produit, selon la violence du choc, l'arrachement d'un ou de plusieurs électrons des couches périphériques avec, dans les cas les plus extrêmes, un déplacement atomique ou l'arrachement d'électrons des couches profondes suivi de l'émission d'un photon secondaire X, ou bien encore le freinage de la particule incidente par le champ électrique du noyau (produisant un rayonnement de freinage sous forme de photons secondaires X).

2°) Les neutrons :

Ils produisent principalement des interactions avec le noyau. Pour des énergies faibles ($\approx 3\text{MeV}$), ils engendrent des déplacements d'atomes, pour des énergies plus fortes, il y a diffusion du noyau avec émission d'un photon secondaire.

3°) Les photons :

L'action des photons sur la matière se traduit par une génération d'électrons. Les électrons générés vont ioniser le milieu lors de leur ralentissement créant ainsi des paires "électron-ion". Les interactions des photons avec l'atome peuvent se faire au niveau du nuage électronique par:

- absorption du photon incident et arrachement d'un électron (effet photoélectrique : cas des électrons de faible énergie (≈ 1 à 50 keV)).
- diffusion d'un photon incident avec augmentation de la longueur d'onde du photon et éjection d'électron sans absorption d'énergie par l'atome (effet Compton : cas des photons de forte énergie (≈ 1 MeV)).
- citons aussi l'effet Auger qui après absorption d'un photon excite un électron d'une couche interne vers une couche externe et permet l'éjection d'électrons lorsque les couches se réarrangent.

1.2.1 EFFETS DU RAYONNEMENT IONISANT SUR LES STRUCTURES MOS :

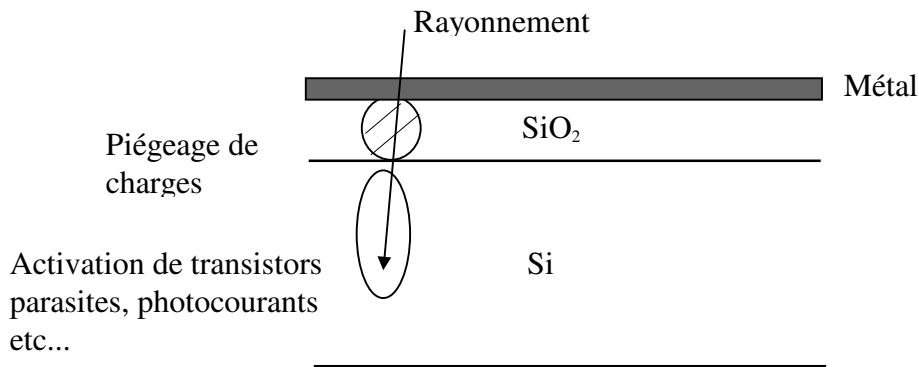


Figure I.1 :
Structure Métal-Oxyde-Semiconducteur de base.

- Effets de volume (associés au substrat silicium) :

Les effets de volume sont dus à des ions lourds (rayons cosmiques, protons, particules α) et à des photons d'énergie élevée provenant d'une explosion nucléaire. La création d'une paire électron-trou transportée par diffusion ou conduction est assimilable à une impulsion de courant dans la structure. Cette impulsion peut activer des transistors parasites par effet de latch-up^[MOREAU 93]. Le courant d'alimentation augmente et peut aller jusqu'à la destruction du circuit.

Par ailleurs, lorsque cette impulsion atteint une zone désertée comme le drain d'un transistor MOS bloqué (d'une structure CMOS), il se produit un changement d'état logique. La partie PMOS est plus sensible à ce type de phénomène que la partie NMOS^[ANAPRO].

- Effets de surface (associés aux oxydes de grille et d'isolement) :

Les rayonnements ionisants créent des perturbations dans le SiO₂ en générant des paires électron-trou. Par suite de recombinaison de ces paires sur des niveaux pièges, il se crée une zone de charge d'espace entre le Si et le SiO₂. Cette zone produit une variation de la tension de seuil des transistors MOS et entraîne donc des modifications des caractéristiques de ces transistors^[HENISCH 86].

I.2.2 EVOLUTION DES CARACTERISTIQUES D'UN TRANSISTOR MOS IRRADIE :

a) Décalage de la tension de seuil :

Dans une première partie, nous rappellerons pour les transistors MOS de type n et de type p, l'influence que peuvent avoir les charges piégées dans les oxydes sur leur fonctionnement.

Le paramètre le plus facilement mesurable et le plus important étant la tension de seuil d'un transistor MOS, on peut s'intéresser à la variation de cette tension de seuil (ΔV_t) en fonction de la dose reçue^[LERAY89].

ΔV_t s'écrit alors pour un transistor à canal n :

$$\Delta V_t = -\frac{\Delta Q_{ot}}{C_{ox}} + q \frac{\Delta N_{ss} \phi_f}{C_{ox}}$$

et pour un transistor à canal p :

$$\Delta V_t = -\frac{\Delta Q_{ot}}{C_{ox}} - q \frac{\Delta N_{ss} \phi_f}{C_{ox}}$$

avec : ΔN_{ss} : Densité d'états d'interface (oxyde semiconducteur) supposée constante entre 0 et ϕ_f .

(avec $\Delta N_{ss} = 0$ au midgap).

C_{ox} : Capacité de l'oxyde (non chargé)

Q_{ot} : Charges dans l'oxyde

ϕ_f : Ecart d'énergie entre le niveau de Fermi et le niveau intrinsèque.

Pour les oxydes fortement durcis, jusqu'à de relativement fortes doses d'irradiation (quelques krad à quelques centaines de krad selon le type de transistor et le procédé de fabrication) seule

la contribution des charges en volume est importante, on peut négliger les effets des densités d'états d'interface.

Pour les oxydes très épais (plusieurs centaines de nanomètres) l'influence des densités d'états d'interface devient négligeable devant celle des pièges en volume. L'évolution de la tension de seuil pour les deux types de transistors est présentée sur la figure I.2.

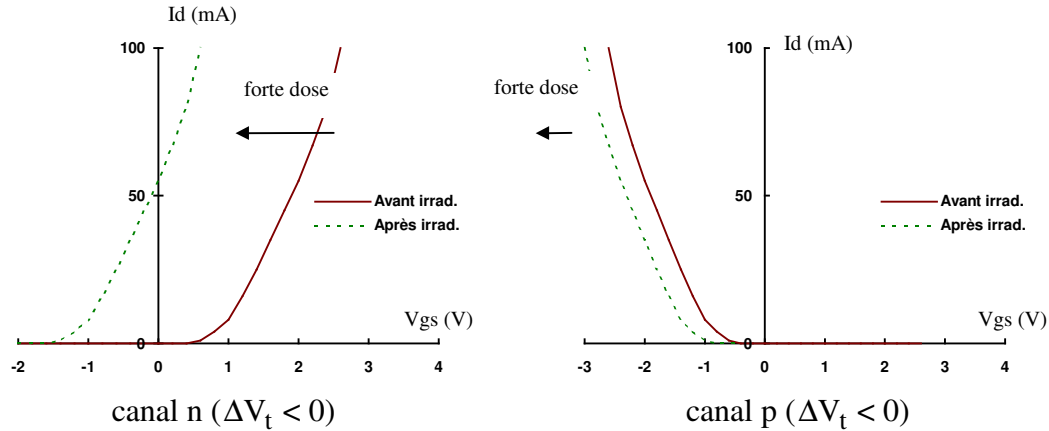


Figure I.2 :
Variation de la tension de seuil pour les transistors
à canal n et à canal p.

Lors d'une irradiation plus importante, les états d'interface jouent un rôle prédominant et engendrent dans le cas d'un canal n la formation de charges interfaciales négatives s'opposant aux charges en volume, la variation ΔV_t s'inverse alors.

Dans le cas d'un transistor à canal p, les charges interfaciales sont de même signe que les charges en volume et le décalage de la tension de seuil se fait dans le même sens.

Comme nous l'avons déjà souligné, notre étude ne portera pas sur les oxydes minces durcis ou les oxydes latéraux épais ce qui permettra de négliger les charges dues aux états d'interface.

On a alors :

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

qu'il s'agisse d'un transistor à canal n ou p on aura toujours $\Delta V_t < 0$

b) Modification des courbes $C=f(V)$:

Calcul de la capacité de la structure en négligeant l'influence des états d'interface.

1°) **On suppose qu'il n'y a pas de charge en volume dans l'oxyde :**

La charge Q_M sur la grille est en équilibre avec la charge dans le semiconducteur :

$$\Rightarrow Q_M = Q_{sc}$$

La tension appliquée entre la grille et le substrat V_G se répartit aux bornes du condensateur sous la forme d'une tension d'oxyde V_{ox} et d'une tension ψ_s à l'interface oxyde-semiconducteur.

$$V_G = \frac{Q_{sc}}{C_{ox}} + \psi_s$$

La capacité de la structure métal-isolant-semiconducteur est définie par :

$$C = \frac{dQ_{sc}}{dV_G}$$

$$\Rightarrow \frac{dV_G}{dQ_{sc}} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{d\psi_s}{dQ_{sc}} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{d\psi_s}{dQ_{sc}}$$

En posant $\frac{dQ_{sc}}{d\psi_s} = C_D$ capacité de la zone de charge d'espace (figure I.3), on a :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_D}$$

Toute augmentation de la charge sur la grille consécutive à une augmentation ΔV_G de la polarisation se répercutera sur la charge dans le semiconducteur ΔQ_{sc} .

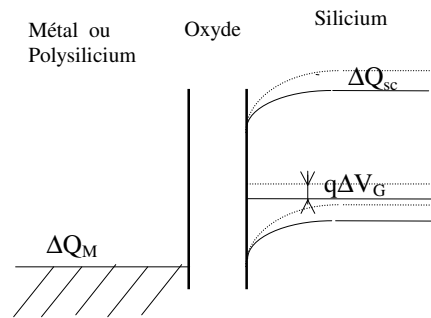


figure I.3 :

Schéma de bandes d'une capacité MOS
avec influence des charges libres dans le silicium.

2°) Supposons maintenant qu'il existe des charges dans l'oxyde :

La charge Q_{ox} piégée dans l'oxyde engendre une variation de potentiel sur les bornes du condensateur.

$$Q_{ox} = -C_{ox} \cdot (\Delta V_G - \Delta \psi_s)$$

Remarquons que le signe moins implique qu'une charge positive va engendrer une variation négative de la tension de polarisation.

La mesure de Q_{ox} peut donc se faire en ramenant le potentiel ψ_s à sa valeur avant l'irradiation (par exemple au potentiel de "bande plate") par polarisation de la grille et en mesurant le décalage entre cette nouvelle tension et celle obtenue avant irradiation. On aura alors :

$$Q_{ox} = -C_{ox} \cdot (V'_{G_{FB}} - V_{G_{FB}})$$

$V_{G_{FB}}$: Tension appliquée sur la grille pour obtenir le régime de bande plate avant irradiation.

$V'_{G_{FB}}$: Tension appliquée sur la grille pour obtenir le régime de bande plate après irradiation.

Les variations de C_{ox} lors d'une irradiation font apparaître une translation des caractéristiques C-V de la capacité MOS d'une quantité $(V'_{G_{FB}} - V_{G_{FB}})$ (figure I.4).

Un second phénomène apparaît pour les très fortes doses, (supérieures à 1Mrad) où se produit un étirement des caractéristiques dû à l'augmentation de la densité d'états d'interface (figure I.4). Pour une même variation du potentiel de surface $\Delta \psi_s$, la densité de charges échangée entre les bandes du silicium et les états d'interface est plus importante quand la dose augmente.

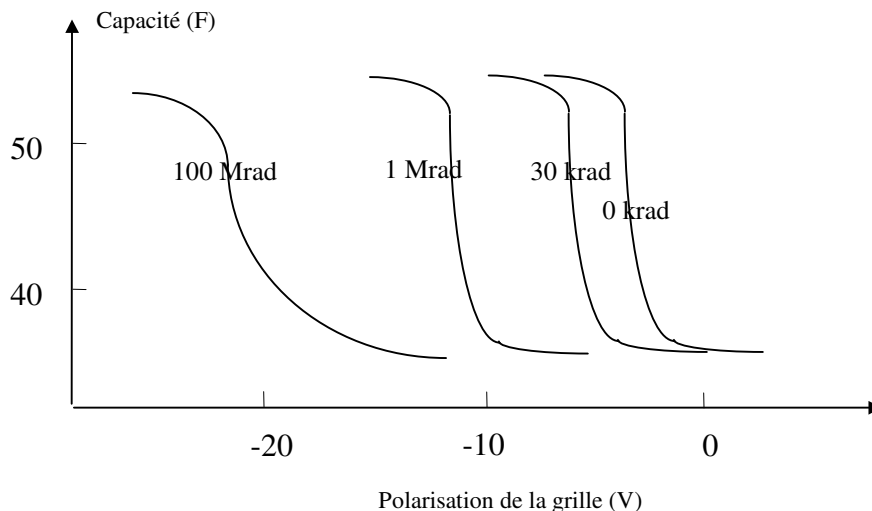


Figure I.4 : Evolution des caractéristiques C-V d'une capacité MOS à substrat p pour différentes doses (oxyde SIMOX (380 nm) durci) ^[HERVE 93].

I.2.3 PERTURBATION DES CIRCUITS MOS PAR CREATION ET PIEGEAGE DE CHARGES :

La sensibilité à la dose des circuits intégrés MOS est principalement contrôlée par les structures Métal-Oxyde-Semiconducteur parasites. Parmi celles-ci, on trouve deux types principaux de structures engendrant des transistors parasites (figure I.5) :

- Le transistor parasite latéral.
- Le transistor parasite entre deux transistors adjacents.

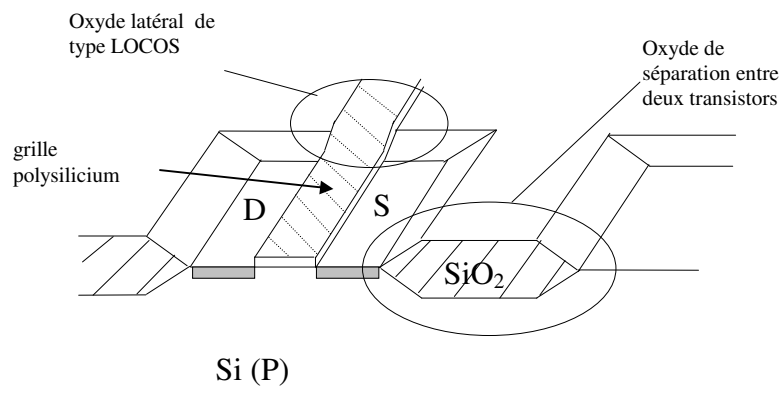


Figure I.5 :
Structures parasites sur NMOS
en technologie "Bulk".

On retrouve le même type de structure parasite pour les circuits PMOS (substrat n) ou NMOS (caisson p et substrat n) (figure I.6).

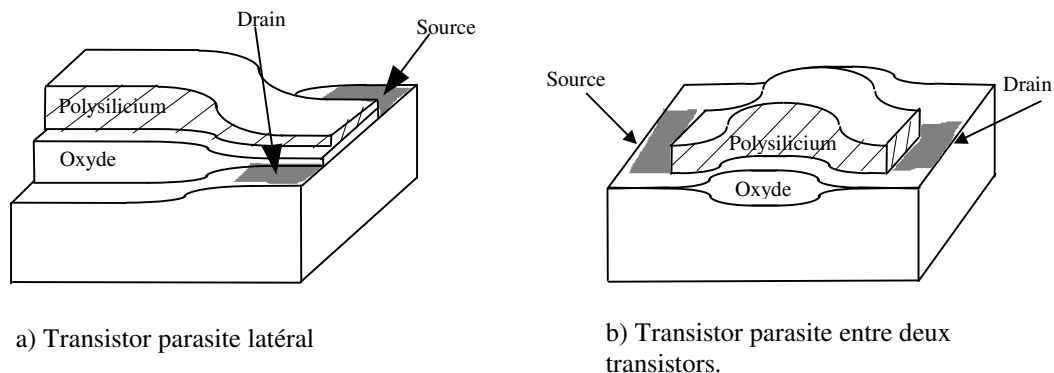


Figure I.6 :
Vue en coupe des transistors parasites (latéral et de séparation).

I.2.4 OXYDE DE SILICIUM :

La structure amorphe du SiO_2 ne peut être abordée de la même façon que la structure cristalline d'un semiconducteur. En effet, on appelle amorphe tout matériau dans lequel on peut constater la présence d'un ordre à courte distance, on retrouve localement une structure cristalline mais il n'est pas possible d'appliquer la théorie des semiconducteurs à ce genre de matériau. Malgré cela, quelques paramètres connus se retrouvent dans ces deux types de structures.

Dans les matériaux amorphes, il existe des bandes d'énergie électronique permises et des bandes interdites. La notion de gap peut donc être employée. Par contre les notions comme la surface de Fermi et la zone de Brillouin n'ont plus de sens. En effet, ces notions font intervenir des dimensions de l'espace réciproque. L'espace réel est décrit par une certaine périodicité de la structure inexistante en milieu amorphe.

Une notion importante que l'on utilisera plus loin est celle de densité d'états qui est applicable aux solides cristallins et non-cristallins. L'existence de défauts de structure peut produire un réarrangement local plus ou moins important des liaisons. Ces défauts tiennent au mauvais placement d'atomes et peuvent être ponctuels, en ligne (cas des dislocations) ou plans. Dans ce dernier cas ils correspondent à un mauvais placement des plans atomiques et sont appelés "fautes d'empilement". Seul le type de défaut dit ponctuel sera abordé ici.

a) Structure du SiO_2 :

On constate la présence de deux types de défauts ponctuels (figure I.7) :

- La lacune (défaut de Schottky)
- L'interstitiel (défaut de Frenkel)

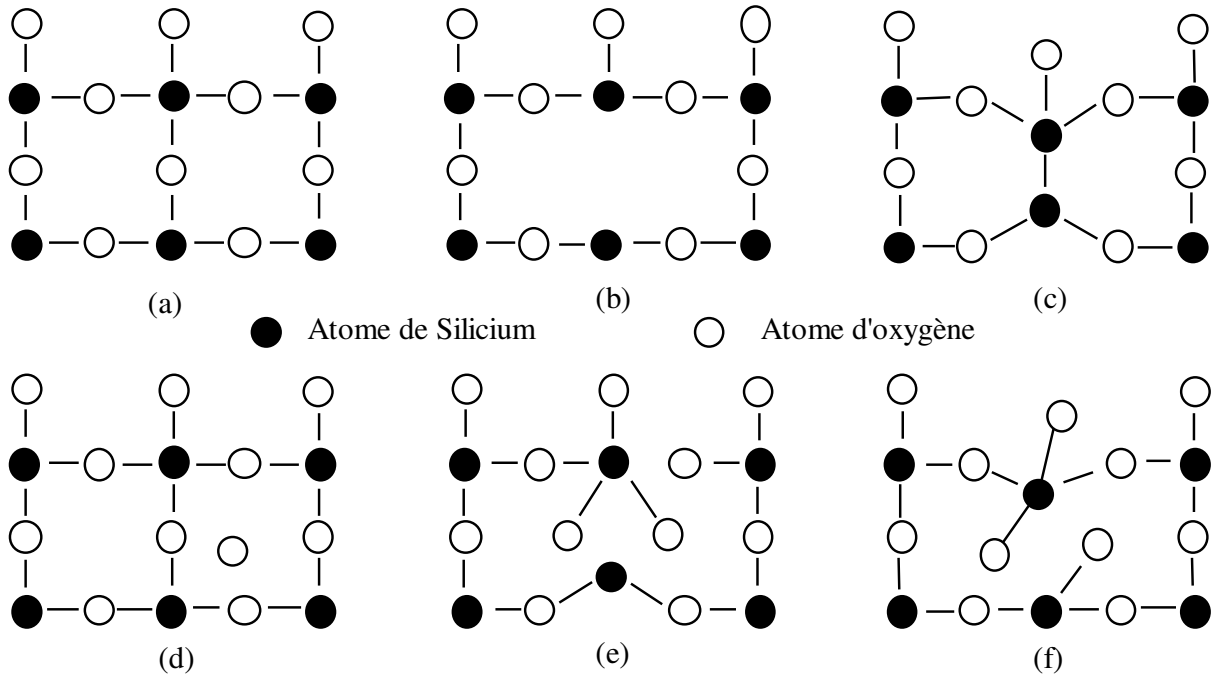


Figure I.7 :

Défauts présents dans le SiO_2 : (a) cristal parfait; (b) lacune parfaite; (c) lacune reconstruite; (d) interstitiel idéal; (e-f) interstitiel reconstruit.

b) Les impuretés :

Ces défauts sont dus à la présence d'atomes étrangers. Deux cas simples peuvent être retenus :

- l'impureté en position de substitution
- l'impureté en position interstitielle.

c) Les complexes :

Ils proviennent de l'association des défauts de structure associés à la présence d'atomes étrangers.

I.2.4.1 Présence et création de défauts dans le SiO_2 :

Lors de l'élaboration d'un oxyde de silicium, des défauts peuvent apparaître dans le matériau. Une irradiation par rayonnement ionisant provoque elle aussi des défauts de même type ou de type différent de ceux créés pendant la fabrication. En effet, dans le cas où l'énergie des particules (ou photons) incidentes est supérieure à l'énergie seuil de déplacement des atomes du réseau, des phénomènes de dislocation ou de création de lacunes apparaissent et engendrent des sources de piégeage pour les porteurs libres.

On peut dénombrer 5 principales sources de piégeage de charges positives et 2 de piégeage de charges négatives^[DEVINE 94]. Rappelons que le SiO₂ est composé de blocs tétraonaux (figure I.8) de SiO₄ liés entre eux par des liaisons Si-O-Si formant un angle θ (figure I.8). Le SiO₂ amorphe est lui constitué de la même façon mais voit sa valeur de θ varier spatialement de façon continue ($120^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$).

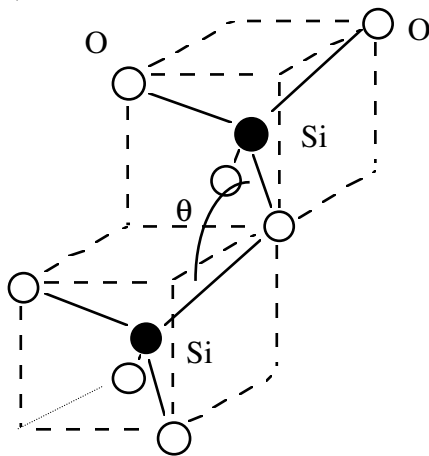
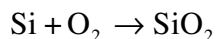


Figure I.8 :
Structure cristalline du SiO₂ (forme développée O₃ ≡ Si – O – Si ≡ O₃)

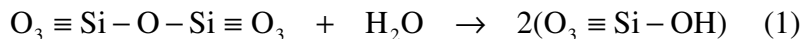
Fabrication d'un oxyde de Silicium :

Examinons le cas de la fabrication d'un oxyde de silicium en milieu humide et en milieu sec. L'oxydation du silicium se fait naturellement grâce aux molécules d'oxygène présentes dans le milieu selon l'équation de transformation suivante :

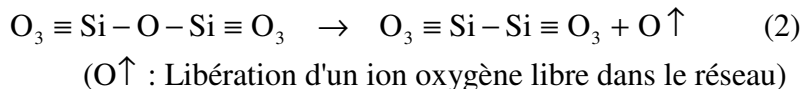


Le SiO₂ (O₃ ≡ Si – O – Si ≡ O₃ vu précédemment) est susceptible de réagir avec une molécule d'eau ou bien de se réarranger en perdant un ion oxygène.

Dans le premier cas, la modification de la structure est régie par le mécanisme suivant :



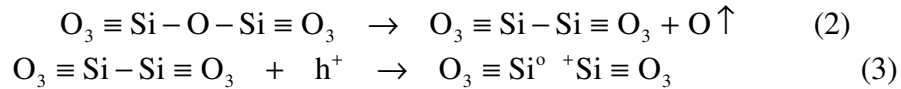
Dans le second cas, on a :



I.2.4.2 Défauts entraînant le piégeage des charges positives :

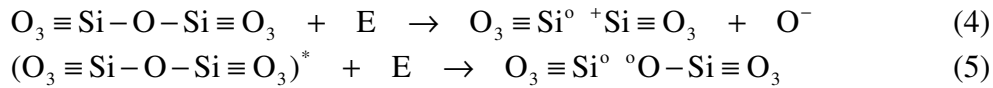
a) Le centre vacant en oxygène :

La structure $O_3 \equiv Si - O - Si \equiv O_3$ disparaît pour laisser place à la structure $O_3 \equiv Si^{\circ+} Si \equiv O_3$ [DEVINE 94]. Ce phénomène se produit dans le cas d'un oxyde créé par oxydation sèche dans lequel un trou libre présent dans le matériau est piégé par le centre vacant :



La charge résultante de ce piégeage est positive et reste fixe dans le réseau. Nous voyons ici l'intérêt d'une oxydation en milieu humide permettant d'éviter ce genre de piégeage.

En règle générale si le matériau est soumis à une source ionisante d'énergie suffisante, il s'en suivra une destruction des liaisons. Deux mécanismes de destruction sont présentés ici, le premier permettant de créer une charge positive fixe et le second ne perturbant pas la charge mais détruisant une liaison contrainte (représentée par le symbole*).



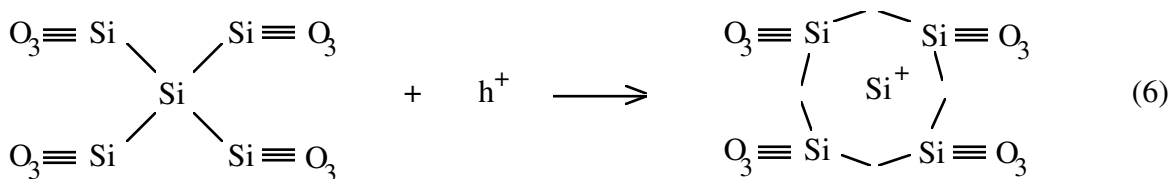
E représente la source d'énergie ionisante.

L'expérience montre qu'il faut 18 eV pour créer une paire électron-trou dans le SiO₂ que pour des γ de 1 MeV [EAST 71], il faut créer environ 1500 paires pour voir apparaître un déplacement d'atome d'oxygène. Ce phénomène montre que pour les irradiations étudiées, le déplacement atomique est peu probable (environ un déplacement pour mille paires créées).

b) Autres sources de piégeage de charges positives :

1) La vacance complexe en oxygène :

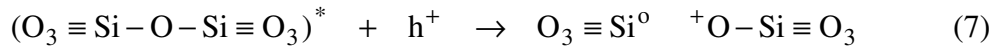
L'équation traduisant ce phénomène est la suivante :



Ce type de phénomène est courant dans les oxydes tels que les SIMOX ("Separation by IMplantation of OXYgen"). On peut remarquer que le trou piégé (partie droite de l'équation) possède une large section efficace et devient un piège à électrons très puissant.

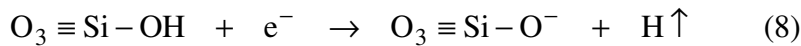
2) Liaisons contraintes apparentées à des centres :

Dans l'équation (5), nous avons vu qu'il existait des liaisons contraintes qui, sous l'influence d'un rayonnement ionisant, avaient tendance à se rompre en donnant deux liaisons non satisfaites. La présence d'un trou lors de cette rupture entraîne sa capture par l'atome d'oxygène.

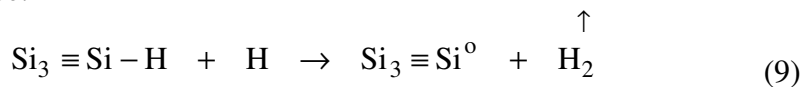


I.2.4.3 Défauts entraînant le piégeage des charges négatives :

Le modèle le plus connu du piégeage d'électrons est lié à la présence du groupe OH elle même consécutive à la présence de vapeur d'eau ou d'hydrogène dans l'air lors de la fabrication de l'oxyde.



La libération d'un ion hydrogène entraîne, après transport de celui-ci à travers l'oxyde, une réaction de celui-ci avec l'atome d'hydrogène présent à l'interface Si/SiO₂ (en effet, de l'hydrogène est utilisé pour la passivation de la couche principale de Si). Il y a donc création d'états d'interface.

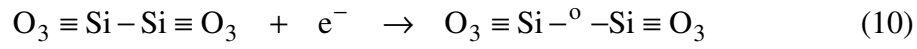


Remarque:

Notons que certains auteurs n'adoptent pas cette interprétation et estiment que seuls les trous piégés initialement sont à l'origine d'états d'interface^[KENKARE 89].

Pour éviter ce phénomène de création d'états d'interface on réduit donc le nombre de liaisons OH grâce à des techniques d'oxydation ultra sèche. Malheureusement, le problème resurgit au niveau des oxydes LOCOS ("LOCalized Oxidation of Silicon") qui, ayant une forte épaisseur, doivent croître en atmosphère humide pour des questions de rapidité d'oxydation.

Un second type de piège à électrons existe. Ce deuxième type de piège est une conséquence de la présence du groupe (O₃ ≡ Si – Si ≡ O₃). En effet un électron peut se piéger en suivant ce mécanisme:



Expérimentalement, ce type de défaut n'a pas encore été mis clairement en évidence.

En conclusion :

Nous pouvons déduire de ces quelques équations chimiques que :

- Les oxydes humides devraient être plus propices à la création de défauts et au piégeage de charges que les oxydes secs.
- Les oxydes de type SIMOX ayant piégé des trous libres génèrent des pièges à électrons de grande section efficace.
- Les oxydes de type LOCOS devraient avoir de fortes densités d'états d'interface.

CHAPITRE II

EVOLUTION DES CHARGES DANS LA SILICE

II.1 GENERATION DE CHARGES DANS SiO₂ PAR RAYONNEMENT :

Lors d'une irradiation, certaines liaisons entre les atomes silicium et oxygène sont rompues. Ceci peut entraîner la création de paires électron-trou. Lorsqu'une particule (photon) traverse le SiO₂, elle perd son énergie en la communiquant de la quantité de mouvement aux électrons de valence du matériau. Ces électrons qui subissent une excitation collective constituent le plasmon. Le plasmon se désintègre ensuite en paires électron-trou. La fréquence d'un plasmon^[EAST 71] est donnée par :

$$W_p = \left(\frac{4\pi nq^2}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$$

o^o q est la charge de l'électron
 m sa masse au repos
 n la densité d'électrons en cm⁻³ (dans la bande de valence).

En supposant que tous les électrons oscillent à la même fréquence, l'énergie du plasma est de 22,4 eV. La désintégration du plasmon produit assez d'énergie pour exciter un électron 2p jusqu'à la bande de conduction. L'électron peut à son tour exciter un autre électron de la même bande. En considérant que l'énergie du plasmon est de 22,4 eV et en tenant compte de la répartition des électrons sur l'orbitale 2p, on trouve que l'énergie moyenne de création de paire est de 16,8eV. Cette valeur est assez proche de celle de 18 eV déjà citée.

Le facteur de génération de paire est donné comme étant égal au rapport de la masse volumique du matériau sur l'énergie de création de paire.

$$g_0 = \frac{\rho}{W} \quad \begin{array}{l} \rho \text{ (g.cm}^{-3}\text{)} \\ W \text{ (eV)} \end{array}$$

L'énergie de création de paire est liée à l'énergie du photon incident venant exciter, lors de son parcours dans le matériau cible, plusieurs électrons en cédant une partie de son énergie. Si l'énergie incidente est suffisante ces électrons (primaires) sont susceptibles d'être propulsés dans le matériau et génèrent alors une cascade d'électrons (secondaires). Il y a création d'un grand nombre de paires électron-trou.

Le long de la trace, les particules déposent une certaine énergie dW par unité de longueur ds. On définit le Transfert Linéaire d'Énergie (L.E.T) par rapport à la masse volumique ρ du matériau.comme étant :

$$\text{LET} = \frac{1}{\rho} \frac{dW}{ds}$$

avec dW : énergie déposée dans l'élément de parcours ds

Un électron primaire crée un nombre N de paires proportionnel à son énergie initiale E_i , la relation liant ces deux quantités est donnée par l'équation suivante^[LERAY 89]:

$$N \cdot w = \int_{E_i}^0 -\text{LET}(W) \cdot \rho \cdot dW$$

LET : Transfert linéaire d'énergie ($\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mg}^{-1}$)

(100 erg/g = 1 rad)

ρ : masse volumique ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)

w : Energie nécessaire à la création d'une paire

La dose s'écrivant : $D = \text{LET} \cdot \phi$

ϕ : Flux des électrons primaires ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

D : Dose (rad)

Le débit de dose s'écrivant : $\dot{D} = \frac{dD}{dt}$

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

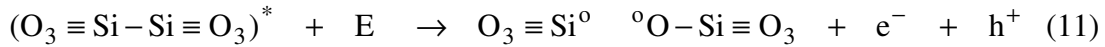
On en déduit immédiatement le nombre N de paires créées :

$$N = \frac{\rho \cdot D}{W}$$

	W(eV)	$g_0(\text{cm}^{-3} \cdot \text{rad}^{-1})$
Si	3.6	$4.0 \cdot 10^{13}$
SiO ₂	18	$7.6 \cdot 10^{12}$

Tableau II.1 :
Energie de création et facteur de génération de paire
pour la Silice et le Silicium.

Reprenons l'équation chimique n°5 et décrivons-la de manière plus précise en prenant en compte le type de charges créées :



La cassure de la liaison $\text{O}_3 \equiv \text{Si} - \text{Si} \equiv \text{O}_3$ entraîne la création d'une paire électron-trou.

D'après "DIMITRIJEV" [DIMITRIJEV 87] la paire électron-trou va se dissocier en libérant l'électron et en conservant le trou sur son site de création (figure II.1).

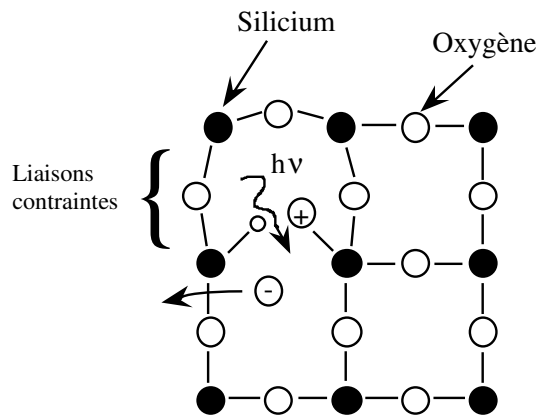


Figure II.1 :
Processus de création de paire.

Après la création d'une paire, il est possible que cette paire disparaisse immédiatement après sa création par recombinaison (l'électron se recombine avec le trou). Dans ce cas il est important de connaître le nombre de paires non recombinées. Oldham a montré que le champ électrique joue un grand rôle dans la séparation des paires. Les deux constatations précédentes sont modélisées en introduisant la fonction $Y(E)$ (figure II.2) qui donne la fraction de paires non recombinées en fonction du champ E .

$$Y(E) = Y_0 + \frac{\frac{|E|}{E_0}}{1 + \frac{|E|}{E_0}} (1 - Y_0) \quad Y_0 = 0.065 \text{ et } E_0 = 0,55 \text{ MV/cm}$$

(cas des irradiations γ de 1 MeV)

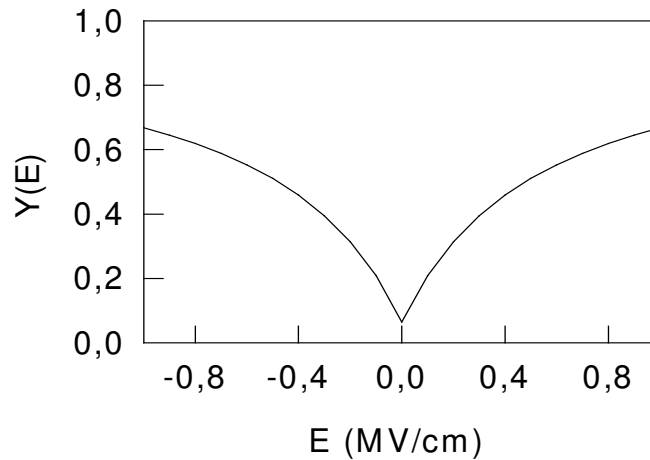


Figure II.2 :
Fonction rendement.

Y_0 et E_0 sont des paramètres spécifiques de la source utilisée. Ils varient selon le type et l'énergie des particules ionisantes utilisées. La recombinaison des paires est en effet fortement liée à la densité d'électrons secondaires générés qui elle dépend directement de la particule incidente.

Effets liés à l'irradiation :

L'expérience montre que selon la source de rayonnement employée la densité initiale de plasma et par conséquent la recombinaison de ces paires est différente. En effet, on peut démontrer qu'il existe trois types de recombinaisons que l'on classe par ordre croissant d'efficacité :

a) Recombinaison colonnaire dans laquelle, comme son nom l'indique, les paires sont déposées sur une colonne. La distance entre électrons et trous est inférieure à la distance de thermalisation et ceci entraîne une recombinaison rapide ($\approx 10^{-13}$ s) ^[OLDHAM 85] cas des particules α d'énergie 2 MeV et des protons d'énergie 0,7 MeV.

b) Recombinaison intermédiaire : Seulement une petite partie des paires générées auront, dans le cas de la recombinaison colonnaire il s'agit par exemple de photons X, une énergie comprise entre 10 keV et quelques centaines de keV.

c) Recombinaison préférentielle : Les paires sont suffisamment éloignées pour avoir une faible probabilité de recombinaison et sont susceptibles d'être décrites par le modèle "d'Onsager"^[ONSAGER 38]. C'est le cas pour un rayonnement issu d'une source ⁶⁰Co ainsi que pour des électrons incidents d'énergie environ 12 MeV.

Un modèle empirique^[FLAMENT 94] plus simple que le précédent et permettant de tenir compte aussi bien des effets du champ électrique que des effets du type de source employée pour l'irradiation peut être utilisé pour connaître la fraction de paires générées :

Pour le Cobalt 60 :
$$Y(E) = \left(\frac{0,65}{E+1} \right)^{-0,9}$$

Pour les photons X d'énergie moyenne 10 keV :
$$Y(E) = \left(\frac{1,35}{E+1} \right)^{-0,9}$$

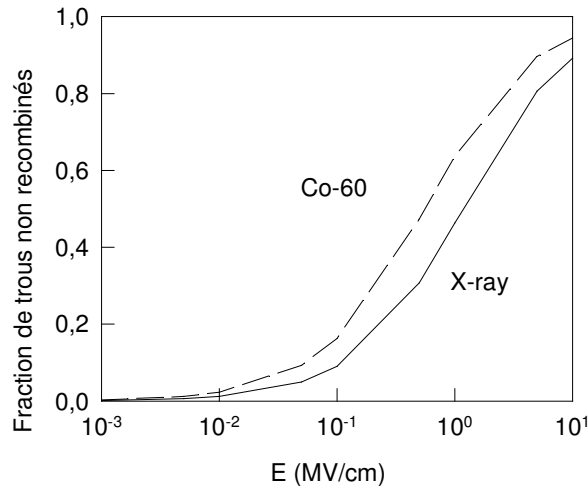


Figure II.3 :

Comparaison de la fraction de trous non recombines entre le Co-60 et les rayons X de 10 keV ^{[FLAMENT 94] [DOZIER 87]}.

D'autres mécanismes limitent le piégeage des charges dans les oxydes. Ces mécanismes ont été décrits par H.E. Boesh^[BOESCH 76] et sont :

- 1) La recombinaison des charges dans les régions à faible champ.
- 2) L'injection d'électrons à l'interface en présence de forts champs.
- 3) Le dépiégeage par champ d'activation thermique.
- 4) L'effondrement du champ interne ("field collapse") dû au transport des électrons.

5) Le claquage du diélectrique.

II.2 TRANSPORT DE CHARGES DANS LE SiO₂ :

Dans un matériau soumis à un champ électrique E la densité de courant (J_n et J_p) associée aux électrons et aux trous est proportionnelle au champ et elle est habituellement exprimée à l'aide du produit de la concentration de porteurs (n ou p) par leur mobilité (μ_n et μ_p). Pour les isolants comme le SiO₂, il n'est pas aisé de mesurer la mobilité des porteurs. Plusieurs auteurs ^{[HUGHES 77,78] [MOTT 77][CURTIS 74]} ont montré que le transport des électrons dans SiO₂ était peu influencé par la présence de pièges. Pour les trous par contre, la présence de pièges joue un rôle fondamental. Le piégeage et dépiégeage des trous diminuent considérablement leur mobilité apparente ($\mu_p < 10^{-5} \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$). Hughes et Emin ^[EMIN 75] ont proposé trois types de transports en fonction du temps après la création de porteurs.

1°) Dans un premier temps, immédiatement après sa création (10^{-12} à 10^{-13} s) temps inférieur à la création d'un polaron, le trou se déplace avec une mobilité relativement élevée (1 à $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) ^[LUCOSKY 79].

2°) Durant la seconde période (10^{-12} à 10^{-6} s) le petit polaron est formé (un petit polaron correspond à une déformation du milieu environnant, le porteur s'étendant à une distance de l'ordre du paramètre de maille). La mobilité du trou diminue fortement $10^{-5} \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ (à 300 K) ^[HUGHES 77]. La mobilité est donnée par ^[LERAY 89] :

$$\mu_{\text{petit polaron}} = \frac{qa_0\omega_0}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

3°) Enfin dans une troisième partie ($t > 10^{-6}$ s), le transport du trou se fait par saut d'un site de piégeage à un site voisin. Le modèle CRTW ("Continuous Time Random Walk") est une tentative pour rendre compte de ce modèle de transport ^[SCHER and MONTRILL 75]. C'est un modèle difficile à mettre en oeuvre mathématiquement.

Quatre auteurs Montroll, Weiss ^[MONT 65], Scher et Lax ^[SCHER 73] sont à l'origine d'une théorie plus récente faisant intervenir les densités d'états localisés de trous ($\mu_p=0$) dans la bande interdite (théorie MTD ("Multiple Trapping Detrapping")). Cette densité d'états liée au désordre des liaisons Si-O-Si prolonge la densité d'états délocalisés ($\mu_p \neq 0$) de la bande de valence.

De plus, ce modèle permet de tenir compte de la dépendance du piégeage au module du champ électrique. Cette théorie d'états localisés en queue de bande de valence introduit par

Cohen et Al.^[COHEN 69] et Davis Mott^[MOTT 77] fait une distinction entre les bandes d'états localisés (de mobilité nulle) et les bandes d'états délocalisés de mobilité ($\mu_p \neq 0$).

Dans le cas du SiO₂, les auteurs suggèrent que les densités d'états en queue de bande (figure II.4) suivent la loi :

$$N(E) = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{\alpha}\right)$$

avec N_0 : Densité d'états dans la bande de valence
et α (eV) : Facteur de profondeur ($0,1 < \alpha < 0,5$).

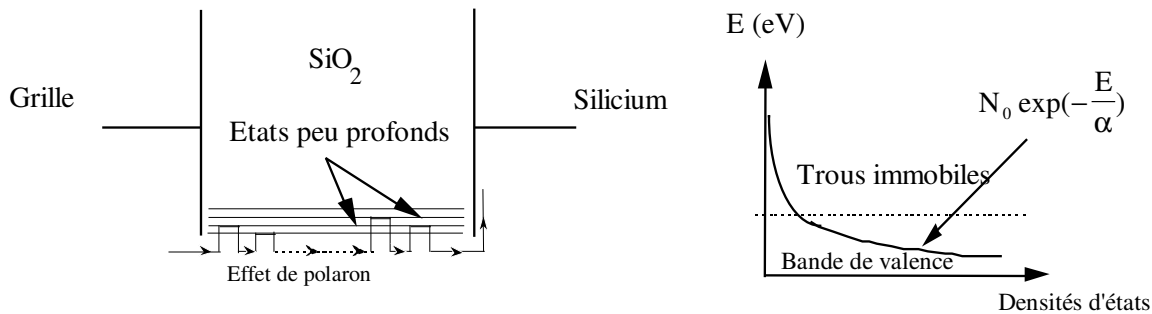


Figure II.4 :

Densités d'états dans la bande interdite du SiO₂.

Le trou occupe alternativement un état de la bande de conduction et un état de la queue de bande. Ce processus est associé à une énergie d'activation correspondant à l'énergie requise pour exciter le porteur de charges de la bande d'états localisés à la bande d'états non localisés.

Remarque sur la mobilité :

Dans le modèle "MTD", l'introduction de la mobilité permettra de traduire le transport du trou dans la bande de valence. Il ne s'agit pas d'une mobilité intégrant à la fois le temps de vol et le piégeage-dépiégeage successifs ($\mu_p = 2 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ à 300K^[HUGHES 78]) mais d'une mobilité efficace de bande liée à la formation de polarons (figure II.4). La valeur de cette mobilité est différente de celle utilisée typiquement pour les semiconducteurs amorphes (pour lesquels $\mu_p = 1$ à $10 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$).

En utilisant le modèle "MTD" les simulations^[LERAY 89] donnent une valeur de $\mu_p \approx 0,04 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Le phénomène de piégeage en bord de bande n'entre pas en ligne de compte pour les électrons car, à température ambiante, le dépiégeage est immédiat.

En effet, l'énergie d'activation des niveaux de queue de bande ($E_{\text{act.}} = 4,7 \text{ meV}$) est bien en dessous de kT (26meV à 300K).

Expression de la densité de courant :

Exprimer le courant suppose certaines hypothèses^[SCHOCKLEY 50] qui peuvent ne pas être nécessairement rencontrées dans un matériau tel que le SiO₂. Cependant, le seul paramètre expérimental de transport disponible pour ce matériau est la mobilité dont l'existence nécessite elle aussi des hypothèses restrictives.

Nous avons donc choisi l'expression du courant qui tient compte de la relation d'Einstein.

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{q}$$

Cette relation est valable lorsque la distribution des porteurs de charges est une distribution de Boltzman^[VAPAILLE 90] :

$$n(r) = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$$

n : Densité d'électrons

N_C : Densité d'états

Nous ferons ressortir autant que possible lors des simulations la contribution de chacun des termes de diffusion et de conduction.

Nous choisissons donc pour exprimer la densité de courant :

$$\vec{J}_p = -qD_p \vec{\text{grad}} p + q\mu_p p \vec{E} \quad \text{pour les trous}$$

avec $\mu_p = 0,04 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$

$$\vec{J}_n = qD_n \vec{\text{grad}} p + q\mu_n n \vec{E} \quad \text{pour les électrons}$$

avec $\mu_n = 20 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$
(valeur moyenne extraite de la littérature $2 < \mu_n < 40 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)

II.3 INTERACTION DES PORTEURS LIBRES AVEC LES NIVEAUX PIEGES :

Le tracé expérimental de ΔV_{FB} d'une capacité MOS en fonction de la dose reçue fait apparaître 2 régimes différents (figure II.5).

- Le régime linéaire (correspondant aux faibles doses)
- Le régime de saturation (pour les fortes doses)

Une première interprétation permet de dégager un modèle simple faisant intervenir la création de paires et le piégeage de trous en fonction du champ local E . Ce modèle permet de rendre compte du régime linéaire et de la saturation de ΔV_{FB} .

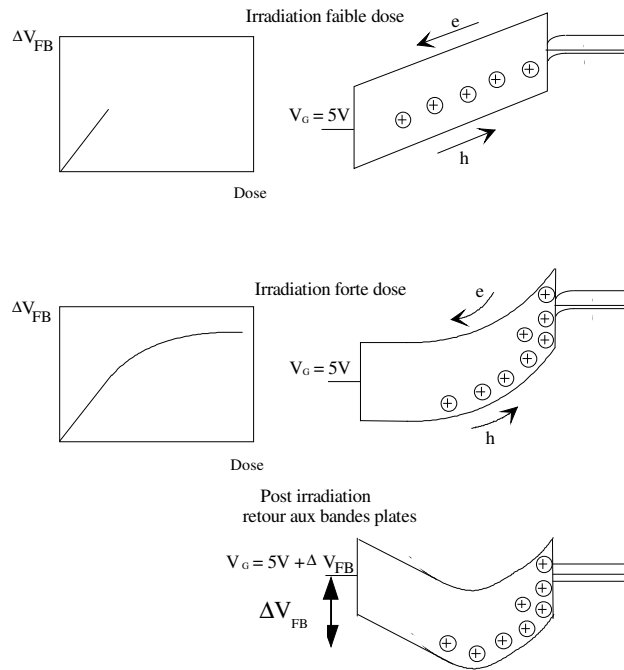


Figure II.5 :
Saturation de la variation de la tension de bande plate.

Une étude plus poussée de la perturbation du SiO_2 par les charges piégées^[BOESH 76] a permis d'améliorer le modèle. Le processus de piégeage peut se décomposer en plusieurs phénomènes comme l'influence du champ électrique sur le piégeage, la recombinaison de charges libres avec des charges piégées, le phénomène d'effondrement du champ appliqué ("field collapse")^[KRANTZ 87] etc...

Le phénomène le plus remarquable car présent dans tous les cas d'irradiation est la recombinaison d'électrons avec les trous piégés dans les régions à faible champ. En effet, si on se place dans le cas d'une faible dose, on constate la présence d'un piégeage uniforme de trous dans tout l'oxyde (figure II.6.A). En rajoutant une dose plus importante on augmente la densité de trous piégés en moyenne dans tout le volume mais on constate une diminution du nombre de trous piégés du côté de l'électrode positive (figure II.6.B). Dans cette région, les électrons, attirés par cette électrode, se sont recombinaisonnés avec les trous piégés. L'effet va en s'accroissant

quand on augmente la dose et il apparaît une région presque totalement dépourvue de charges piégées dans laquelle le champ électrique aura une valeur très faible (figure II.6.C).

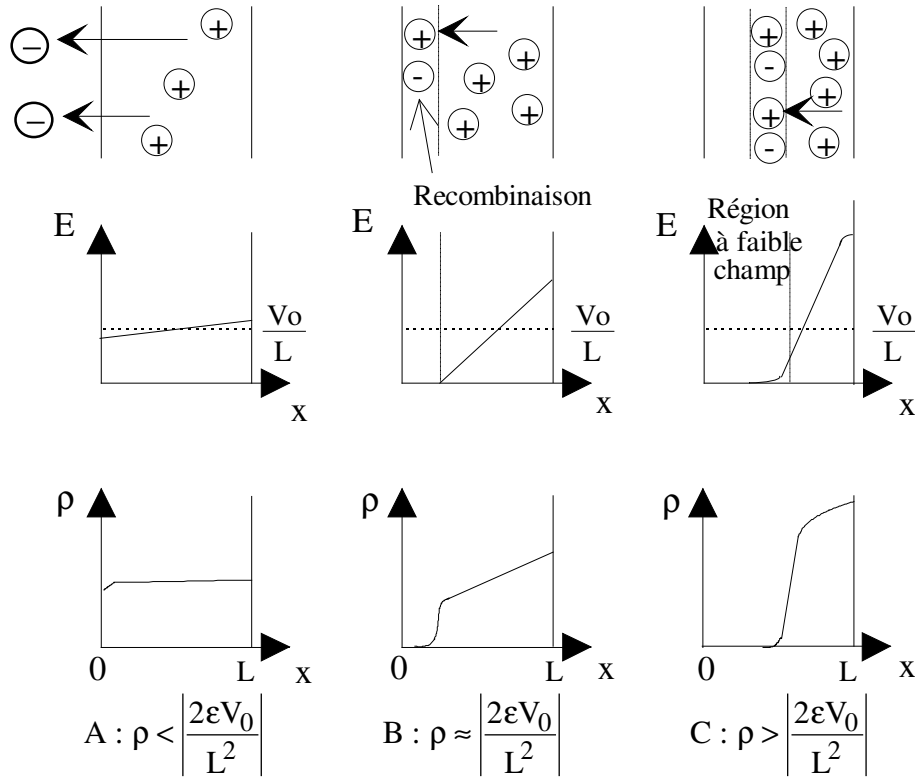


Figure II.6 :

Modèle de piégeage et limitation du piégeage des charges par

A : Evacuation des électrons et piégeage des trous (faible densité de paires)

B : Recombinaison de certains électrons avec des trous piégés

C : Recombinaison d'un grand nombre d'électrons avec des trous piégés (très forte densités de paires)

ρ : Densité de charges créées lors d'une irradiation

D'après "Boesch" le phénomène de recombinaison entre électrons et trous piégés apparaît lorsque $\rho > \left| \frac{2\epsilon V_0}{L^2} \right|$, V_0 étant la tension de polarisation de l'oxyde (SiO_2).

L : Epaisseur de l'oxyde

ϵ : Permittivité de l'oxyde

- pour un oxyde de 200 Å, si $V_0 = 5\text{V} \Rightarrow \frac{2\epsilon V_0}{L^2} = 0,863 \text{ C.cm}^{-3}$ la densité de charges est donc égale à $5,39 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

- pour un oxyde de 4000 Å, si $V_0 = 5V \Rightarrow \frac{2\varepsilon V_0}{L^2} = 2,16.10^{-3} \text{ C.cm}^{-3}$ la densité de charges est donc égale à $1,35.10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

De même qu'il existe un piégeage de trous dans SiO_2 , il existe aussi un piégeage d'électrons qui fut mis en évidence expérimentalement par la capture d'électrons injectés dans de la silice^[NING 74-76]. Certains auteurs^{[NING 76][KRANTZ 87]} supposent que le piégeage d'électrons est uniquement dû à une recombinaison sur un centre coulombien attractif (par exemple un trou initialement piégé) mais nous supposerons dans le cas général que le piégeage d'électrons se fait aussi sur site neutre. De la même manière que pour les trous, les électrons libres peuvent donc être piégés sur sites neutres ou se recombiner avec des trous déjà piégés.

L'ajout du piégeage dans les équations classiques de transport se fait habituellement par l'introduction des sections efficaces de piégeage et de recombinaison ($\sigma_{nt}, \sigma_{pt}, \sigma_{nr}, \sigma_{pr}$).

σ_{nt} : Section efficace de piégeage d'électrons sur site neutre.

σ_{pt} : Section efficace de piégeage de trous sur site neutre.

σ_{nr} : Section efficace de recombinaison d'un électron libre avec un trou piégé (piégeage par centre coulombien).

σ_{pr} : Section efficace de recombinaison d'un trou libre avec un trou piégé (piégeage par centre coulombien).

Soit dp le nombre de porteurs capturés par unité de volume et par unité de temps par un centre piège. On écrit :

$$\frac{dp}{dt} = C \cdot P_r \cdot P_c$$

C est le coefficient de capture

P_r le nombre de pièges vides par unité de volume

P_c le nombre de porteurs par unité de volume

Le coefficient de capture C a les dimensions ($\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$) (unité de volume = cm^3).

On peut écrire ce coefficient comme le produit d'une section efficace de capture σ (cm^2) par une vitesse des porteurs v (cm.s^{-1}). Dans les semiconducteurs, on utilise habituellement la vitesse d'agitation thermique $\langle v_{th} \rangle$.

$$C = \sigma \cdot \langle v_{th} \rangle$$

avec $\langle v_{th} \rangle = 1,5.10^7 \text{ cm/s}$ à $T = 300\text{K}$ pour une masse effective des porteurs $m = 0,6.m_0$ (m_0 masse de l'électron libre).

Dans les isolants, les mesures sont faites couramment sous fort champ électrique et il est préférable dans ce cas de tenir compte de la vitesse associée au flux de porteurs correspondant au transport de charges soit :

$$C = \sigma \cdot \frac{|J|}{q}$$

J étant la densité de courant associée au porteur

II.3.1 SECTIONS EFFICACES DE PIEGEAGE :

Nous considérons deux sortes de pièges :

- Les pièges neutres à électrons et à trous.
- Les pièges occupés par un électron ou par un trou.

On suppose qu'il existe dans le matériau une densité N_n de pièges à électrons et une densité N_p de pièges à trous. Notons que la présence de pièges est fortement liée à la méthode de fabrication des oxydes, les valeurs de N_n et N_p pourront varier de plusieurs ordres de grandeur en fonction des types d'oxydes.

Les sections efficaces de ces types de pièges sont de l'ordre de 10^{-18} et 10^{-14} cm^2 (données extraites de la littérature ^[NING 76]).

Pour un champ appliqué nul, le potentiel à la périphérie d'un piège à électron est donné par (modèle des pièges coulombiens ^[KRANTZ 87]) :

$$V(r) = \frac{-q}{4\pi\epsilon_{\text{SiO}_2} \cdot r}$$

Un électron est capturé lorsqu'il se trouve à une distance r_0 telle que $V(r) = \frac{-2kT}{q}$ on en déduit que la section efficace de capture d'un électron pour un champ appliqué nul est :

$$\sigma_{n0} = \pi^2 \cdot r_0^2$$

(à $T=300$ K , $\sigma_{n0} = 1,6 \cdot 10^{-12}$ cm^2)

Le calcul de la section efficace de piégeage d'un trou se fait de la même façon, à ceci près que le piège à trou est neutre (lorsque le champ extérieur est nul) et que ce piège est polarisé par le champ électrique du trou libre qui s'en approche.

Le potentiel induit par le dipôle ainsi créé est ^[KRANTZ 87]:

$$V(r) = \frac{-q \cdot R_0^3}{4\pi\epsilon_{\text{SiO}_2} r^4}$$

où R_0 représente la distance moyenne des rayons d'action des pièges (R_0 est de l'ordre de quelques Å à 300K).

Un trou est capturé lorsqu'il se trouve à une distance telle que $V(r) = \frac{-2kT}{q}$ on en déduit alors qu'à la température ambiante pour $R_0 = 3$ Å, on a $\sigma_{pto} = 1,4 \cdot 10^{-14}$ cm^2 .

La figure suivante fait apparaître les différentes valeurs des sections efficaces en fonction des charges en présence.

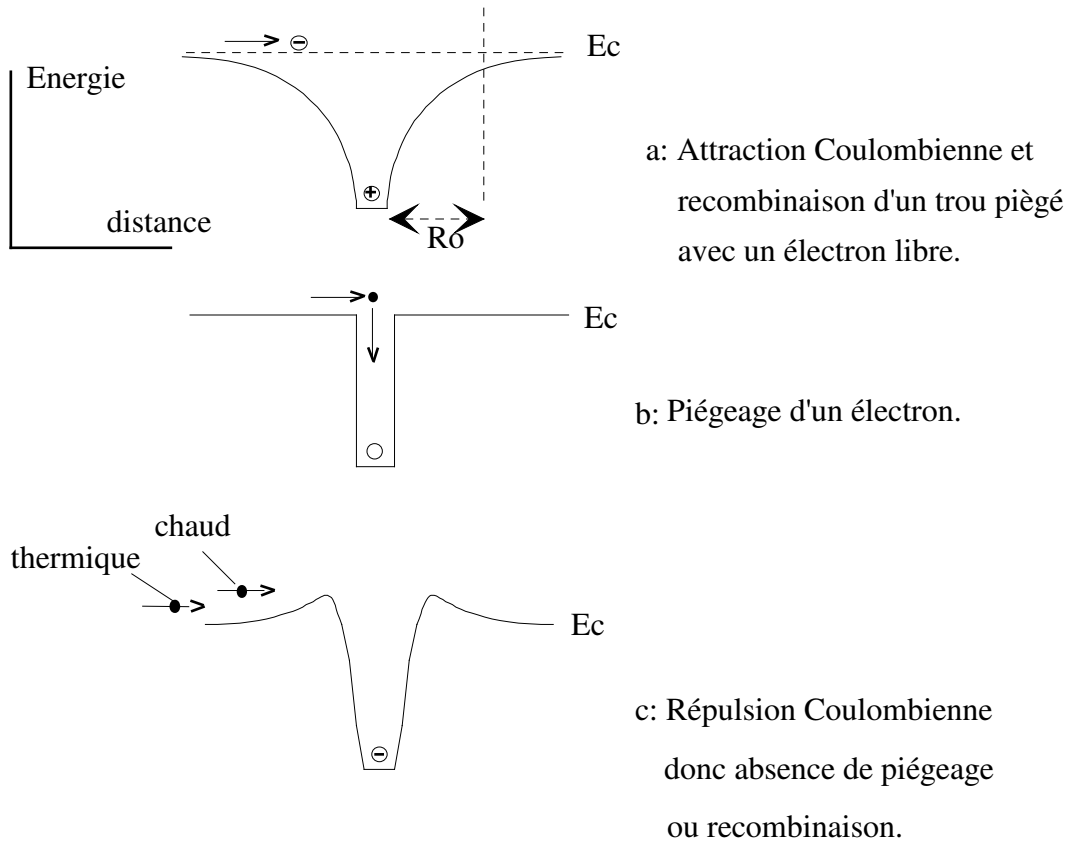


Figure II.7 :
Représentation schématique des différents types de pièges.

Les sections efficaces des pièges neutres peuvent être modifiées par la présence d'un champ électrique. Ning puis Krantz ont montré que le rapport $\frac{\sigma_{pt}}{\sigma_{pto}}$ était plus sensible au champ que $\frac{\sigma_{nt}}{\sigma_{nto}}$ et ceci particulièrement à champs faibles ($E < 2.10^5$ V/cm). Krantz propose l'approximation suivante :

$$\sigma_{pt} = \sigma_{pto} \cdot (1 + 1,9 \cdot 10^{-4} \cdot E^{0,55})^{-1}$$

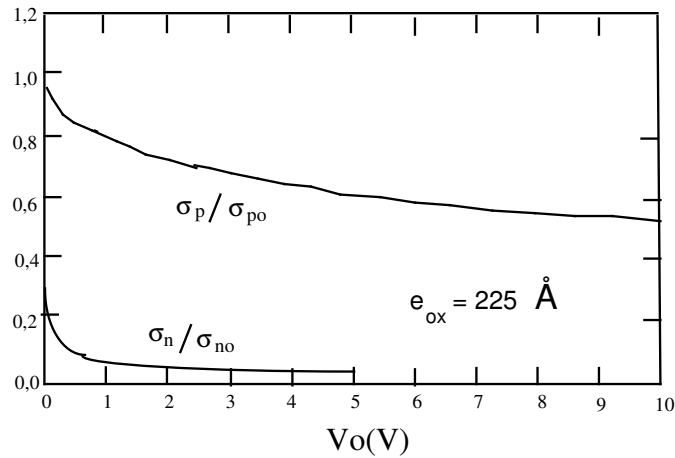


Figure II.8 :

Variation de $\frac{\sigma_{nt}}{\sigma_{nto}}$ en fonction du potentiel appliqué ^[KRANTZ 87].

Der Sun Lee ^[DER SUN LEE 91] fait l'hypothèse que :

$$\frac{\sigma_{nt}}{\sigma_{nto}} \approx \frac{\sigma_{pt}}{\sigma_{pto}} = (1 + 1,9 \cdot 10^{-4} \cdot E_o^{0,55})^{-1}$$

De manière plus précise, on pourrait écrire :

$$\frac{\sigma_{nt}}{\sigma_{nto}} \approx 0,3 \cdot \frac{\sigma_{pt}}{\sigma_{pto}} = 0,3 \cdot (1 + 1,9 \cdot 10^{-4} \cdot E_o^{0,55})^{-1}$$

Les pièges chargés créant, rappelons-le, un potentiel coulombien sont beaucoup plus sensibles au champ électrique. Ils ont été étudiés par Ning qui remarque une variation en $E^{-1,5}$ pour des champs compris entre $2 \cdot 10^4$ et 10^6 V/cm et en E^{-3} pour des champs compris entre 10^6 et $3 \cdot 10^6$ V/cm.

Le modèle que nous avons utilisé est directement déduit de la courbe présentée figure II.9.

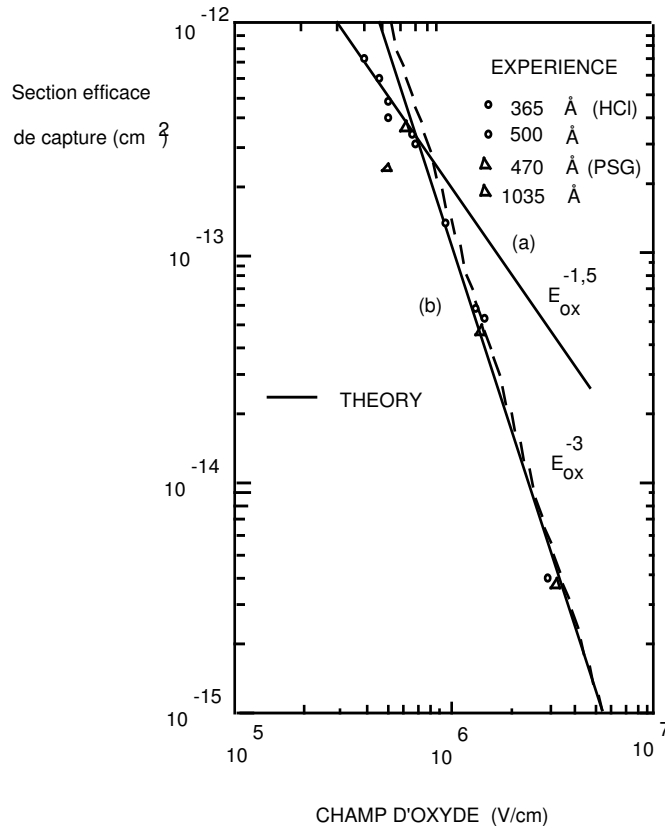


Figure II.9 :

Variation de la section efficace en fonction du champ électrique ^[NING 76].

Le modèle de σ (cm²) comprend trois domaines :

1°) $2 \cdot 10^4 \leq E \leq 10^6$ V/cm

$$\begin{aligned} \sigma_{nr} &= \sigma_{nro} \cdot 10^9 \cdot E^{-1,5} \\ \sigma_{pr} &= \sigma_{pro} \cdot 10^9 \cdot E^{-1,5} \end{aligned} \quad \sigma \text{ en cm}^2$$

2°) $10^6 \leq E \leq 3 \cdot 10^6$ V/cm

$$\begin{aligned} \sigma_{nr} &= \sigma_{nro} \cdot 10^{18} \cdot E^{-3} \\ \sigma_{pr} &= \sigma_{pro} \cdot 10^{18} \cdot E^{-3} \end{aligned}$$

3°) $E \geq 3 \cdot 10^6$ V/cm : Nous considérons que le champ n'a plus d'influence sur la section efficace et nous posons que :

$$\begin{aligned} \sigma_{nr} &= \sigma_{nro} \cdot 3,7 \cdot 10^{-5} \\ \sigma_{pr} &= \sigma_{pro} \cdot 3,7 \cdot 10^{-5} \end{aligned}$$

4°) $E \leq 2.10^4$ V/cm : N'ayant pas de valeurs expérimentales disponibles, nous utilisons une loi en $E^{-\alpha}$ ou plus exactement en $(E+1)^{-\alpha}$ pour éviter tout problème de convergence en $E=0$. On a alors en $E = 0$, $\sigma_{nr} = \sigma_{nro}$. Pour respecter la continuité en $E = 2.10^4$ V/cm, α sera pris égal à 0,087.

$$\begin{aligned}\sigma_{nr} &= \sigma_{nro} \cdot (E+1)^{-0,087} \\ \sigma_{pr} &= \sigma_{pro} \cdot (E+1)^{-0,087}\end{aligned}$$

II.3.2 LES DENSITES DE PIEGES :

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 Si/SiO₂. Des couches à forte densité de pièges alternent avec des couches à densité de pièges relativement faible. Notre étude ne portant pas sur ce type d'oxyde, nous ne décrirons pas plus en détail cet oxyde.

- les oxydes thermiques

Les oxydes obtenus par oxydation classique en atmosphère humide à 950°C d'un substrat Si (dopé p dans notre étude) sont présents dans la plupart des technologies CMOS. Il s'agit des oxydes de grille et des oxydes de débordement latéraux de part et d'autre de la grille (figure II.10).

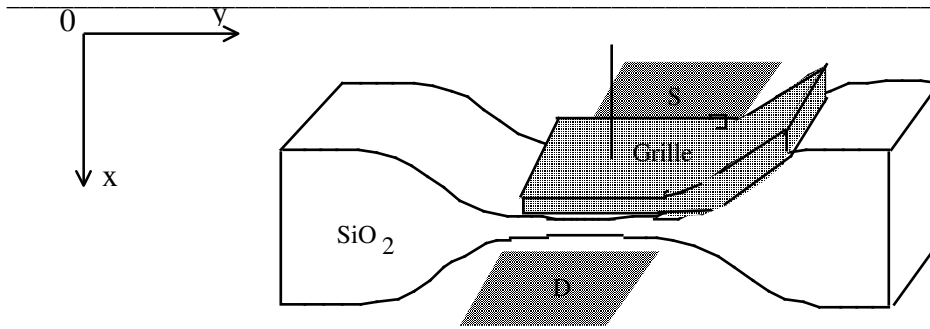


Figure II.10 :
Vue en coupe de l'oxyde épais "LOCOS".

On considère généralement ^[LERAY 89] que les densités de pièges sont plus élevées à l'interface Si/SiO₂ que dans le reste de l'oxyde. Cette couche interfaciale s'étend sur une distance comprise entre quelques dizaines et quelques centaines d'Angström.

Nous supposons ^[NICOLLIAN 82] que N_p et N_n suivent une loi exponentielle :

$$N_n(x) = N_{no} \cdot \exp\left(\frac{-x}{\lambda}\right)$$

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

x représentant la distance à l'interface

λ : constante (100Å)

$$N_{po} \approx N_{no} \approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

La forme du bec d'oiseau de l'oxyde, aussi appelé oxyde de champ, est d'une grande importance vis-à-vis de la densité de charges piégées. Nous avons utilisé une photographie faite au microscope électronique à balayage fournie par un constructeur pour approcher le plus possible la forme réelle des oxydes.

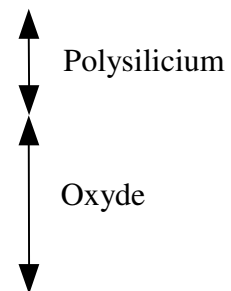


Figure II.11 :

Photographie d'un oxyde latéral au microscope à balayage ("bec d'oiseau").

II.3.3 EQUATIONS DE TRANSPORT ET PIEGEAGE : ^[VASUDEVAN 91]

$$\begin{cases} q \frac{\partial n}{\partial t} = \text{div } \vec{J}_n + g_0 \dot{D} Y(E) - \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t - \sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| (N_n - n_t) \\ q \frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div } \vec{J}_p + g_0 \dot{D} Y(E) - \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| n_t - \sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| (N_p - p_t) \end{cases}$$

où

N_n et N_p sont respectivement les densités volumiques de pièges à électrons et à trous (cm^{-3}).

\dot{D} : Le débit de dose (rad.s^{-1}).

g_0 : Le facteur de génération de paire ($\text{rad}^{-1}.\text{cm}^{-3}$).

n_t et p_t sont respectivement les densités d'électrons et de trous piégés.

σ_{nt} , σ_{pt} sections efficace de piégeage d'électrons et de trous.

σ_{nr} , σ_{pr} sections efficace de recombinaison d'électrons et de trous

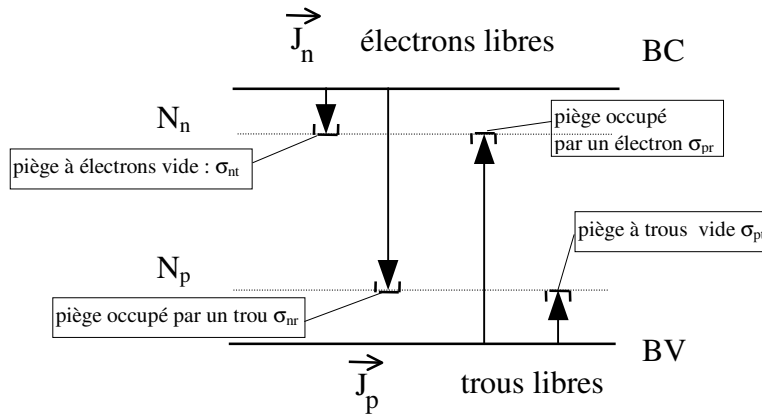


Figure II.12 :

Représentation par le schéma de bande du modèle de piégeage.

Ce qui entraîne la formulation suivante pour les équations d'évolution des charges piégées.

$$\begin{cases} q \frac{\partial n_t}{\partial t} = \sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| (N_n - n_t) - \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| n_t \\ q \frac{\partial p_t}{\partial t} = \sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| (N_p - p_t) - \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t \end{cases}$$

$$\text{En prenant } \begin{cases} \vec{J}_n = q \cdot n \cdot \mu_n \vec{E} + q D_n \vec{\nabla} n \\ \vec{J}_p = q \cdot p \cdot \mu_p \vec{E} - q D_p \vec{\nabla} p \end{cases}$$

Nous pouvons maintenant donner une expression littérale simplifiée de ΔV_{FB} [LERAY 89]. Pour cela, on suppose que les électrons et les trous ont migré vers les interfaces sous l'influence du champ \vec{E} , et que l'on peut négliger la charge d'espace en volume devant la charge résultant du piégeage aux interfaces. De plus, on suppose négligeable l'influence du champ électrique sur les valeurs des sections efficaces de piégeage.

II.3.4 CALCUL APPROCHE DE LA DERIVE DE LA TENSION DE SEUIL :

a) Influence des trous piégés sur ΔV_{FB} :

On peut négliger le piégeage des électrons sur site initialement neutre (σ_{nt} faible).

Soit N_p la densité de pièges neutres et p_t la densité de trous piégés, on a (voir [LERAY 89] pour développement) :

$$\Delta V_{FB_t} = -\frac{qe_{ox}}{\epsilon_{SiO_2}} \frac{N_p}{\left(1 + \frac{\sigma_{nr} \cdot f_e(E)}{\sigma_{pt} \cdot f_t(E)}\right)} \left[1 - \exp(-\sigma_{pt} \cdot f_t(E) \cdot g_0 \cdot e_{ox} \cdot Y(E) \cdot \left(1 + \frac{\sigma_{nr} \cdot f_e(E)}{\sigma_{pt} \cdot f_t(E)}\right) \cdot D) \right]$$

ce qui donne :

- pour les faibles doses : $\Delta V_{FB_t} = -q \cdot N_p \cdot \sigma_{pt} \cdot f_t(E) \cdot Y(E) \cdot g_0 \cdot \frac{e_{ox}^2 \cdot D}{\epsilon_{SiO_2}}$
- pour les fortes doses : $\Delta V_{FB_t} = -\frac{q \cdot N_p \cdot e_{ox}}{\left(1 + \frac{\sigma_{nr} \cdot f_e(E)}{\sigma_{pt} \cdot f_t(E)}\right) \cdot \epsilon_{SiO_2}}$

avec $f_e(E)$ et $f_t(E)$ fractions des électrons et des trous collectés à l'interface Si/ SiO₂, g_0 : Taux de génération de paire, D : Dose reçue, e_{ox} : Epaisseur d'oxyde et $Y(E)$: Fonction rendement.

b) Influence des électrons piégés sur ΔV_{FB} :

On suppose qu'on peut négliger le piégeage des trous sur site initialement neutre (σ_{pt} faible)

Soit N_n la densité de pièges neutres et p_t la densité de trous piégés, on a :

$$\Delta V_{FB_e} = \frac{qe_{ox}}{\epsilon_{SiO_2}} \frac{N_n}{\left(1 + \frac{\sigma_{pr} \cdot f_e(E)}{\sigma_{nt} \cdot f_t(E)}\right)} \left[1 - \exp(\sigma_{nt} \cdot f_t(E) \cdot g_0 \cdot e_{ox} \cdot Y(E) \cdot \left(1 + \frac{\sigma_{pr} \cdot f_e(E)}{\sigma_{nt} \cdot f_t(E)}\right) \cdot D) \right]$$

avec les mêmes définitions que précédemment pour les variables.

La variation totale de la tension de bande plate sera alors donnée par :

$$\Delta V_{FB} = \Delta V_{FB_e} + \Delta V_{FB_t}$$

En posant $\sigma_{nt} \cdot f_t(E) \gg \sigma_{pr} \cdot f_e(E)$ et $\sigma_{pt} \cdot f_t(E) \gg \sigma_{nr} \cdot f_e(E)$, on obtient :

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

En prenant $N_n = 1,1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, $N_p = 1,3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, $\sigma_{nt} = 2 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^{-2}$, $\sigma_{pt} = 1,7 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$, $g_0 = 7,6 \cdot 10^{18} \text{ rad}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$.

on a donc $\sigma_{nt} \cdot N_n = 0,022$, $\sigma_{pt} \cdot N_p = 0,221$ et $\sigma_{nt} \cdot N_n = \frac{\sigma_{pt} \cdot N_p}{10}$, de plus on a une polarisation de grille = -32V ce qui correspond à un champ de -0,75 MV/cm).

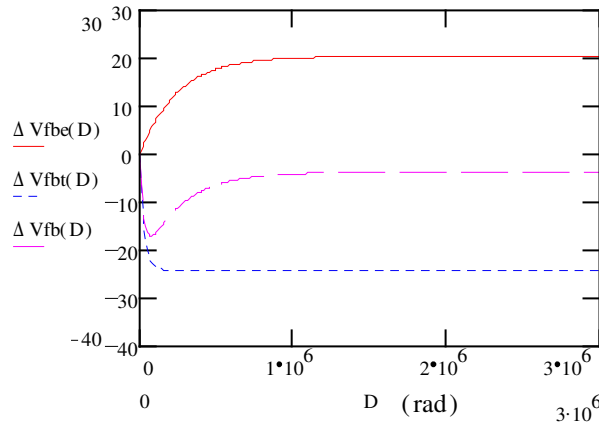
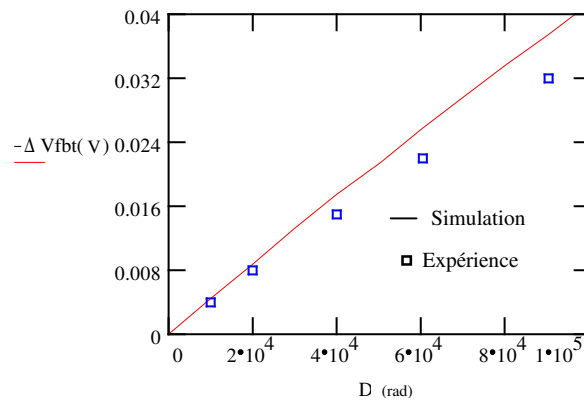
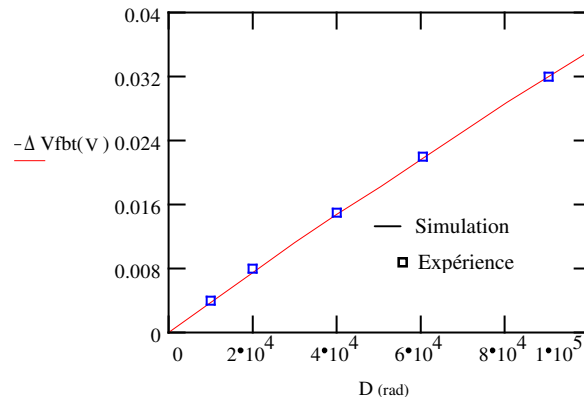


Figure II.13^[PAILLET 93] : (D en rad et ΔV_{fb} en V)
Influence du piégeage des trous et des électrons
sur le décalage de la tension de bande plate pour
un oxyde SIMOX d'épaisseur $e_{ox} = 4000 \text{ \AA}$.

En appliquant le même modèle au cas d'un oxyde thermique (figure II.14.a et b) on trouve une bonne corrélation avec l'expérience; ici $\Delta V_{FB} \approx \Delta V_{FBh}$ car la densité de pièges est concentrée à l'interface Si/SiO₂, le piégeage des électrons vers le métal est nul. L'épaisseur d'oxyde est ici de 175 Å, la densité de piège à trou ramenée à la surface est $N_p = 3,29 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ et la section efficace de piégeage est $\sigma_{pt} = 1,27 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$ ces données sont issues de l'expérience sous une polarisation de 5V sur la grille et sont directement utilisées dans ce modèle simple.

Figure II.14.a : (D en rad et ΔV_{fb} en V)

Variation de la tension de bande plate en fonction du piégeage de trous pour un oxyde thermique.

Figure II.14.b : (D en rad et ΔV_{fb} en V)

Variation de la tension de bande plate en fonction du piégeage de trous pour un oxyde thermique avec correction de la valeur expérimentale $\sigma_{pt} = 1,07 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$.

II.4 DEPIEGEAGE THERMIQUE ET ENERGIE D'ACTIVATION :

Une des méthodes les plus employées pour étudier la récupération d'un transistor MOS après irradiation est basée sur le dépiégeage par émission thermique. En effet, on constate expérimentalement que le dépiégeage est fonction de la température et que la charge prisonnière de l'oxyde décroît selon une loi en $\log(t)$ avec une vitesse proportionnelle au module du champ appliqué. On en déduit donc que le dépiégeage est activé thermiquement et que les charges alors libérées sont susceptibles ou bien de se recombiner avec des charges de signe opposé encore piégées ou bien d'être à nouveau piégées avant d'être à nouveau émises, ce processus de transport par piégeage-dépiégeage prenant fin lors de l'évacuation complète des charges.

Deux modèles sont couramment employés : Le modèle issu de la théorie MTD ("Multiple Trapping Detrapping") et le modèle CTRW ("Continuous Time Random Walk"). Le schéma ci-dessous illustre de manière très explicite les différences entre ces deux théories (pour les pièges à trous uniquement).

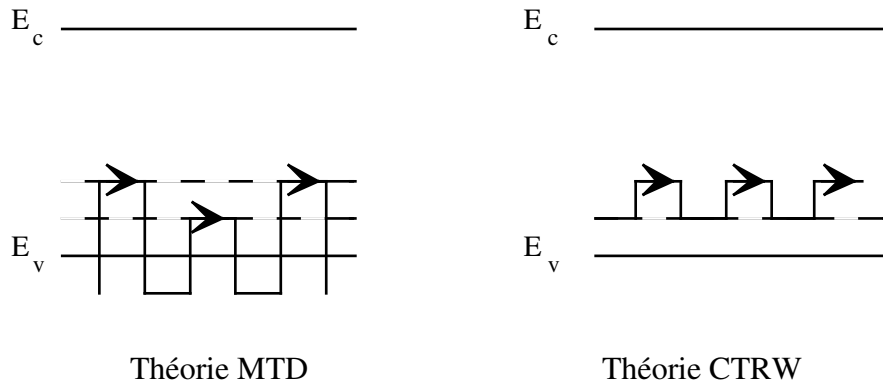


Figure II.15 :
Comparaison entre la théorie MTD et la théorie CTRW.

D'après certains auteurs^[LERAY 89], il semblerait que la combinaison d'un effet de piégeage-dépiégeage multiple associé à un transport de trous par effet polaron serait une bonne description du phénomène. L'étude du transport par effet polaron sort du cadre de ce travail et nous nous restreindrons à la modélisation du modèle MTD

Le modèle exposé jusqu'à présent ne nécessite que très peu de modifications pour rendre compte du dépiégeage thermique et de l'évacuation des charges. En effet, l'introduction d'un terme de dépiégeage fonction de l'énergie et de la température dans les équations d'évolution de n_t et p_t permet de modéliser facilement la théorie MTD.

Dans un premier temps, nous allons considérer qu'il n'existe qu'un niveau piège pour les trous et les électrons. Cette hypothèse bien-que s'éloignant assez fortement de la description faite ci-dessus sera discutée dans les prochains paragraphes.

Notons respectivement E_{tn} et E_{tp} l'énergie de ces niveaux pièges par rapport aux bandes de conduction et de valence. Les coefficients d'émission e_n et e_p s'écrivent alors en fonction de E_{tn} et E_{tp} :

$$e_n = \omega_{depn} \exp\left(\frac{-q E_{tn}}{kT}\right)$$

$$e_p = \omega_{depp} \exp\left(\frac{-q E_{tp}}{kT}\right)$$

avec ω_{depn} et ω_{depp} les fréquences d'émission des électrons et des trous piégés

$$(\omega_{depp} = \sigma \cdot V_{thp} \cdot N_v = 10^{12} \text{ à } 10^{14} \text{ s}^{-1} \text{ [LERAY 89]})$$

$$(\omega_{depn} = \sigma \cdot V_{thn} \cdot N_c = 10^{12} \text{ s}^{-1} \text{ environ})$$

Il est important de connaître les valeurs de E_{tn} et E_{tp} qui représentent la profondeur des pièges dans la bande interdite. Les natures chimiques des pièges entraînent la présence de nombreux niveaux pour E_{tn} et E_{tp} . Une cartographie des pièges à électrons a été établie par R.E. STAHLBUSCH and Al.^[STÄHLBUSH 92] suivant deux méthodes. La première, la plus classique, par utilisation de l'excitation thermique (chauffage à 450°C) et la seconde par effet tunnel (présence d'un fort champ d'ionisation). La figure suivante fait apparaître les différents niveaux d'énergie des pièges à électrons pour un oxyde de 0,2 μm de type SIMOX (avec une épaisseur d'oxyde plus faible, les niveaux d'énergie seront les mêmes mais les quantités diminueront).

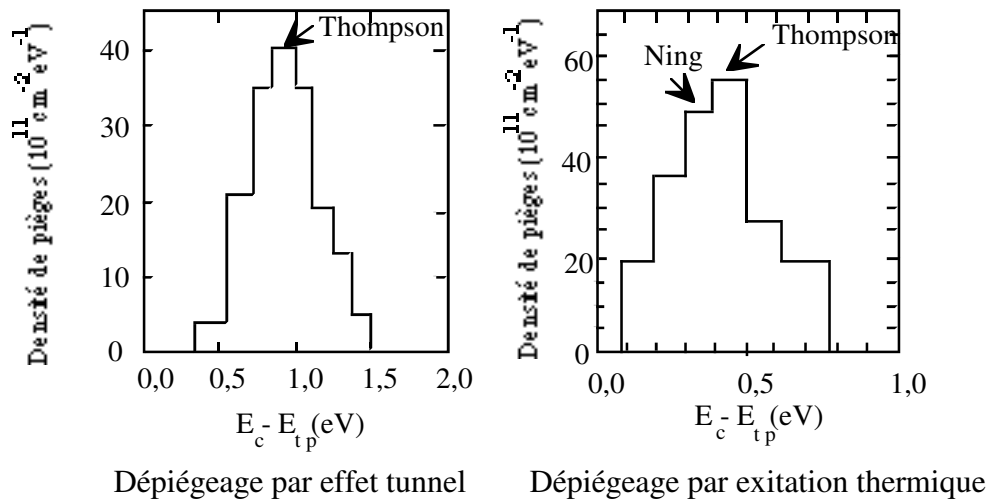


Figure II.16 :
Répartition des niveaux d'énergie des pièges à trous
proches de la bande de conduction.

La différence entre ces deux méthodes est due au fait que dans le cas du dépiégeage par excitation thermique, il y a relaxation des différents niveaux pièges alors que dans le cas d'un dépiégeage par effet tunnel le procédé est instantané sans relaxation.

Un calcul simple permet de connaître le temps de relaxation des pièges en fonction de leur niveau d'énergie :

$$E_{tn} = kT \text{Log} (\nu t) \text{ [NING 78]}$$

$$\text{Avec } \nu = A \left(\frac{T}{300} \right)^2, A = 10^{10} \text{ s}^{-1}, T \text{ en Kelvin et } k : \text{ constante de Boltzmann}$$

Pour le niveau piège situé à 0,4 eV de E_C (correspondant à la plus forte densité) :

$$E_{tn} = kT \text{Log} (10^{10} t) \text{ à } 300\text{K}$$

$$\Rightarrow t = \frac{e^{\left(\frac{0,4}{26 \cdot 10^{-3}}\right)}}{10^{10}} = 0,48 \text{ ms}$$

Tous les pièges d'énergie inférieure à 0,4 eV seront vidés en 0,48 ms à 300K.

En prenant le niveau piège situé à 1 eV (2° extrémum), on obtient :

$$t = 5,05 \cdot 10^6 = 58 \text{ jours}$$

En ce qui concerne les pièges à trous, il faut faire la distinction entre le piège profond modélisé jusqu'à présent et les différents pièges à trous peu profonds étudiés par CURTIS [CURTIS 77] qui montre qu'il est possible de modéliser la dynamique d'évolution des densités de trous piégés à l'aide d'une distribution quasi continue de pièges à trous dont les énergies s'étalent de 0,21 à 0,57 eV. Le modèle de "Curtis" permet de décrire l'existence d'états localisés en queue de bande (figure II.17) dont la densité varie exponentiellement avec la profondeur des ces états localisés dans la bande interdite.

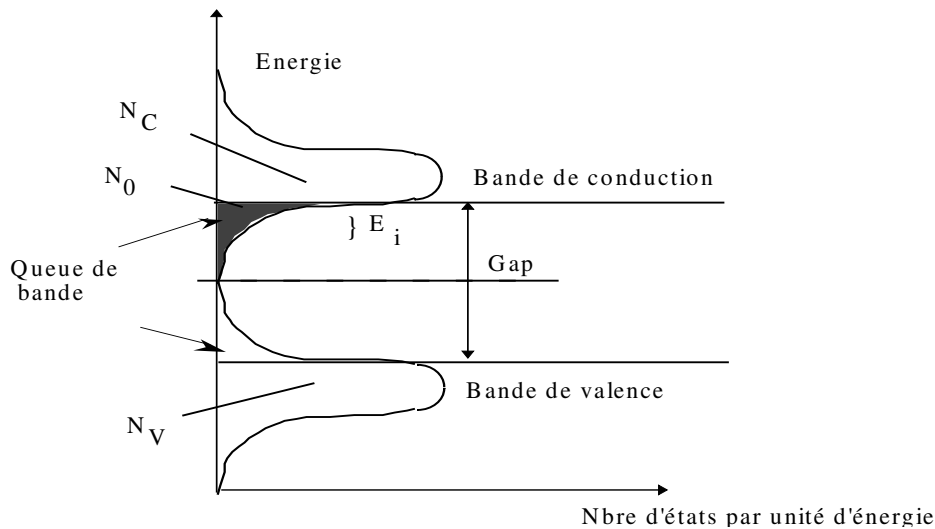


Figure II.17 :
Modèle de Cohen Fritzsche Ovshinsky [COHEN69]
pour les densités d'états des semiconducteurs amorphes covalents.

Tous ces niveaux d'énergie sont situés près de la bande de valence et ont une fréquence de relaxation déterminée. Ils perturbent la mobilité des trous (cf § II.2) mais ne participent pas aux phénomènes de variations de charges piégées lors de la récupération du matériau (par chauffage par exemple).

II.5 ETUDE DE LA STRUCTURE POLYSILICIUM-ISOLANT-SEMICONDUCTEUR :

II.5.1 Silicium intrinsèque en contact avec SiO_2 :

Considérons le cas d'une capacité MOS construite à partir du substrat silicium oxydé. Le diagramme énergétique peut être représenté suivant la figure II.18 ^[MATHIEU 87].

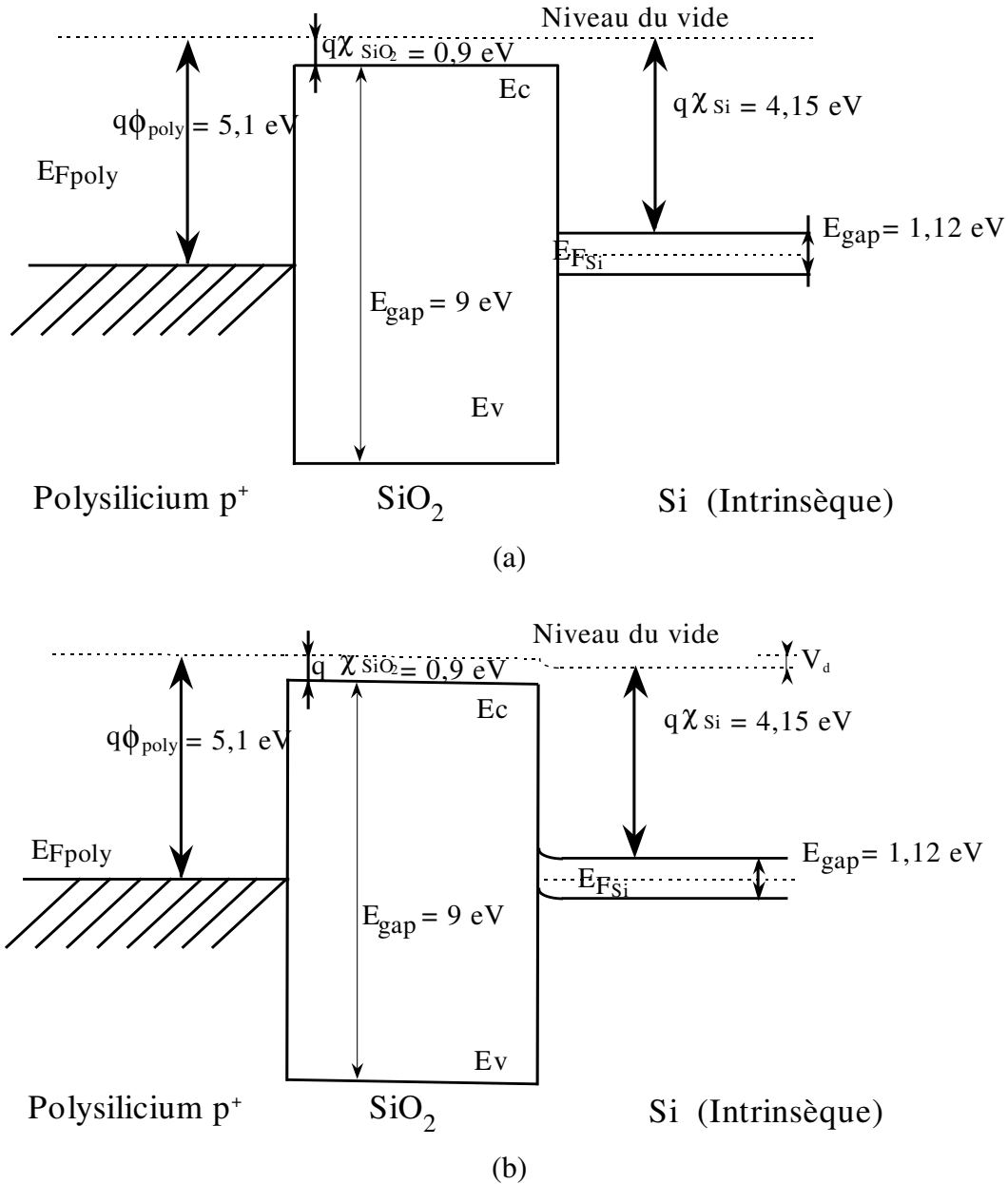


Figure II.18 :

Structure Poly- SiO_2 -Si

a) Polysilium et semiconducteur isolés

b) Polysilium et semiconducteur reliés électriquement

La valeur de la hauteur de la bande interdite de SiO₂ est donnée par Barr^[BARR 85]. Le travail de sortie du silicium intrinsèque est donné par la relation :

$$\phi_{si} = q\chi_{si} + \frac{E_{gap}}{2} = 4,71 \text{ V}$$

Au contact (figure II.18.b) il s'établit une différence de potentiel Vd :

$$Vd = \phi_{Poly} - \phi_{is} = 0,39 \text{ V}$$

A cette tension sont associés un champ électrique et une charge d'espace dans le silicium et un champ électrique dans SiO₂.

Outre la différence des travaux de sortie, la présence de charges interfaciales localisées à l'interface Si/SiO₂ agit elle aussi sur la courbure des bandes. L'expérience montre que quelque soit le type de silicium et la technique d'oxydation utilisée, la densité d'états à l'interface est de l'ordre de 10¹¹ cm⁻². Les charges piégées en surface créent une différence de potentiel :

$$\Delta V = \frac{-Q_{ss}}{C_i}$$

avec Q_{ss} : Densité de charges d'interface par unité de surface

C_i : Capacité de l'isolant par unité de surface : $C_i = \frac{\epsilon_i}{d}$

d : Epaisseur de l'oxyde

d (Å)	-Q _{ss} (C/cm ²)	C _i (F/cm ²)	ΔV (V)
500	8.10 ⁻⁸	69.10 ⁻⁹	-1,16
5000	8.10 ⁻⁸	6,9.10 ⁻⁹	-11,6
10 000	8.10 ⁻⁸	3,5.10 ⁻⁹	-22,9

Tableau II.2 :

Influence des charges d'interface sur la tension de bande plate.

La tension de bande plate V_{FB} ("Flat Band") s'écrit alors pour le silicium intrinsèque pour d=500 Å :

$$V_{FB} = - [(\phi_{Poly} - \phi_{si}) - \frac{Q_{ss}}{C_i}] = -0,77 \text{ V}$$

Dans ce travail, nous ne tiendrons pas compte des états d'interface (V_{FB} = V_d).

II.5.2 Contact Silicium dopé p avec SiO₂ :

Le diagramme énergétique de la figure II.19 rend compte des phénomènes engendrés par le contact du Si dopé P et de isolant SiO₂.

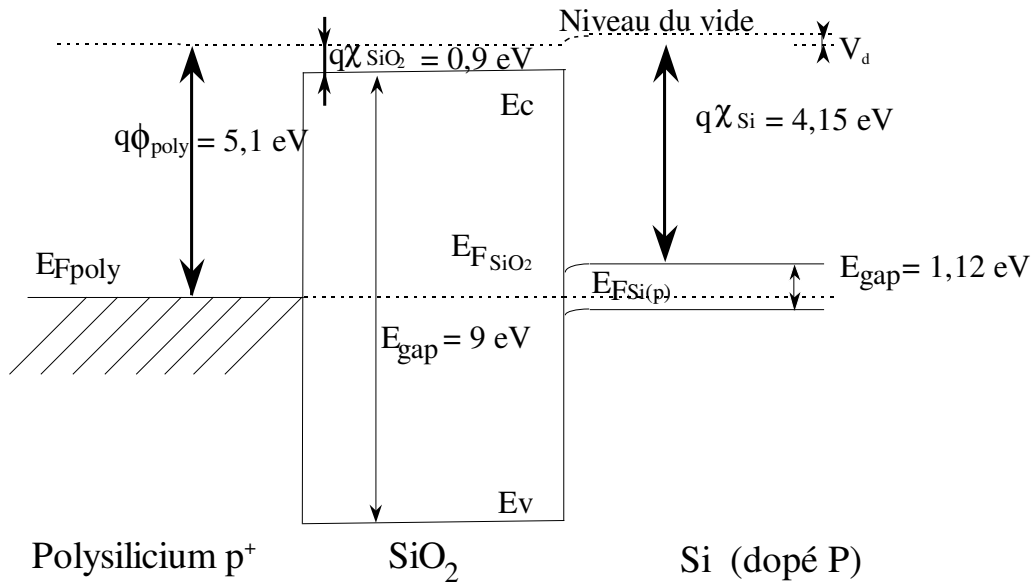


Figure II.19 :
Structure Poly-SiO₂-Si(p)

Le silicium est dopé p à 10^{18} cm^{-3} .

$$E_{\text{FSi}} - E_{\text{FSi(p)}} = kT \cdot \text{Log}\left(\frac{N_a}{n_i}\right) \approx 0,46 \text{ eV} \text{ potentiel de diffusion dû au dopage.}$$

$$\text{d'où } \phi_{\text{Si}} = \chi_{\text{Si}} + \frac{E_{\text{gap}}}{2} + (E_{\text{FSiO}_2} - E_{\text{FSi(p)}}) \approx 5,17 \text{ eV}$$

avec $\chi_{\text{Si}} + \frac{E_{\text{gap}}}{2}$ potentiel de diffusion dû à la différence des travaux de sortie entre polysilicium et silicium intrinsèque.

Pour obtenir un diagramme de bandes plates, il faut donc appliquer une tension V_{FB} telle que :

$$\phi_{\text{Poly}} + qV_{\text{FB}} = \chi_{\text{Si}} + (E_{\text{C}} - E_{\text{FSi(p)}})$$

$$(E_{\text{C}} - E_{\text{FSi(p)}}) = 0,56 + 0,46 \approx 1,02 \text{ eV} \quad \Rightarrow \quad V_{\text{FB}} = \frac{4,15 + 1,02 - 5,1}{q} \approx 0,07 \text{ V}$$

II.5.3 Charges d'espace dans le Silicium :

Soit V_G une tension appliquée entre la grille en polysilicium et le substrat silicium.
 Dans le silicium, la déplétion est supposée totale sur W et le dopage uniforme (figure II.20).
 On a :

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_{Si}} = \frac{qNa}{\epsilon_{Si}}$$

En $x = W \Rightarrow E=0$ $-E = \frac{dV}{dx} = \frac{qNa}{\epsilon_{Si}}(x - W) \quad \Rightarrow \quad V = \frac{qNa}{2\epsilon_{Si}}(x - W)^2$

en $x = 0$ $V = V_s = \frac{qNa}{2\epsilon_{Si}}W^2 \quad \Rightarrow \quad W = \sqrt{\frac{2\epsilon_{Si}}{qNa}V_s}$

V_s : Potentiel de surface du silicium.

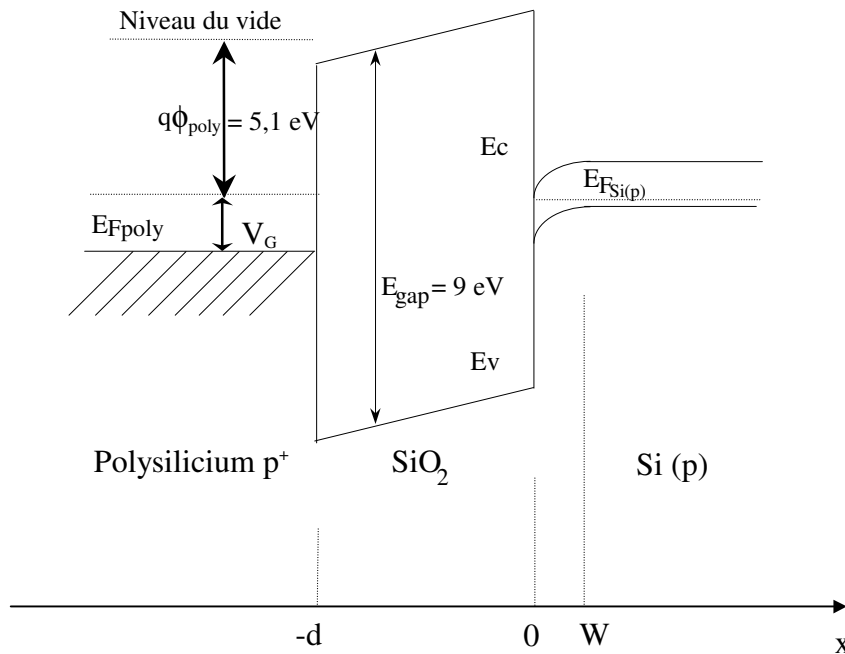


Figure II.20 :
 Visualisation de la zone de charge d'espace W sur le diagramme d'énergie.

Le potentiel V_G appliqué sur l'électrode de grille se répartit (figure II.21) en une chute de tension V_{isolant} dans SiO_2 et une tension de surface V_s au contact SiO_2/Si .

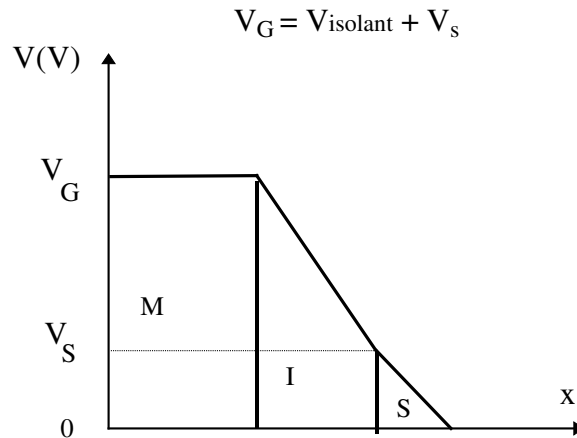


Figure II.21 :
Variation du potentiel dans les différents matériaux.

Prenons par exemple $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$:

$$\text{Si } V_s = 1 \text{ V} \Rightarrow W = 0,036 \mu\text{m}$$

$$N_a = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad V_s = 1 \text{ V} \quad \Rightarrow W = 0,115 \mu\text{m}$$

$$N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad V_s = 1 \text{ V} \quad \Rightarrow W = 0,364 \mu\text{m}$$

Lors des simulations, il faudra des épaisseurs de silicium suffisantes pour que la zone de charge d'espace W ne soit pas tronquée.

II.5.4 Charges localisées dans l'oxyde :

Les charges localisées dans l'oxyde entraînent un décalage de la tension de bande plate que l'on notera ΔV_{FB} . On considère que la tension de bande plate préalablement calculée subit une variation due aux charges présentes dans l'oxyde.

Considérons l'équation de Poisson dans l'oxyde :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{Q_{\text{SiO}_2}(x)}{\epsilon_{\text{SiO}_2}}$$

$Q_{\text{SiO}_2}(x)$ représente la densité de charges piégées dans l'oxyde

Multiplions par x les deux membres de l'équation et intégrons par parties le premier membre sur l'épaisseur e_{ox} de l'oxyde de l'électrode au semiconducteur (de $x = 0$ à $x = e_{ox}$) :

$$\int_0^{e_{ox}} x \frac{d^2V}{dx^2} dx = - \int_0^{e_{ox}} x \frac{Q_{SiO_2}}{\epsilon_{SiO_2}} dx$$

$$\Leftrightarrow \left[x \frac{dV}{dx} \right]_0^{e_{ox}} - \int_0^{e_{ox}} dV = - \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_0^{e_{ox}} x \cdot Q_{SiO_2}(x) dx$$

$$\Leftrightarrow V(0) - V(e_{ox}) + \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_0^{e_{ox}} x \cdot Q_{SiO_2}(x) dx = e_{ox} \cdot E_{SiO_2}(e_{ox})$$

En régime de bande plate le champ superficiel est nul :

$$\Delta V_{FB} = V(0) - V(e_{ox}) = \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_0^{e_{ox}} x \cdot Q_{SiO_2}(x) dx$$

Avec $Q_{SiO_2}(x) = q \cdot (p_t(x) - n_t(x))$

II.5.5 Contact métal-semiconducteur et métal-isolant :

Lors de la résolution des équations, les conditions limites sont appliquées au niveau des électrodes de contact.

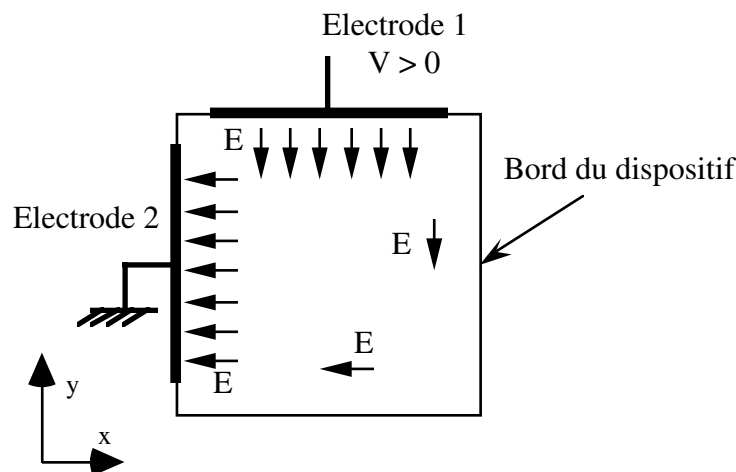


Figure II.22 :
Allure du champ électrique dans un dispositif.

- Pour le potentiel, les conditions aux limites sont de type Dirichlet et une valeur de V est fixée sur chaque électrode.

Ceci entraîne par exemple sur l'électrode 1 :

$$\begin{cases} E_x = -\frac{dV}{dx} = 0 \\ E_y \neq 0 \Rightarrow E \perp \text{électrode} \end{cases}$$

- Le contact métal-semiconducteur est fait par un surdopage du silicium ($>10^{18} \text{ cm}^{-3}$) suivi d'un dépôt de métal permettant ainsi d'obtenir un contact dit ohmique. Les densités de porteurs n et p sont, dans le semiconducteur au voisinage immédiat de la zone de surdopage, égales aux densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique. Le contact est parfaitement recombinant.

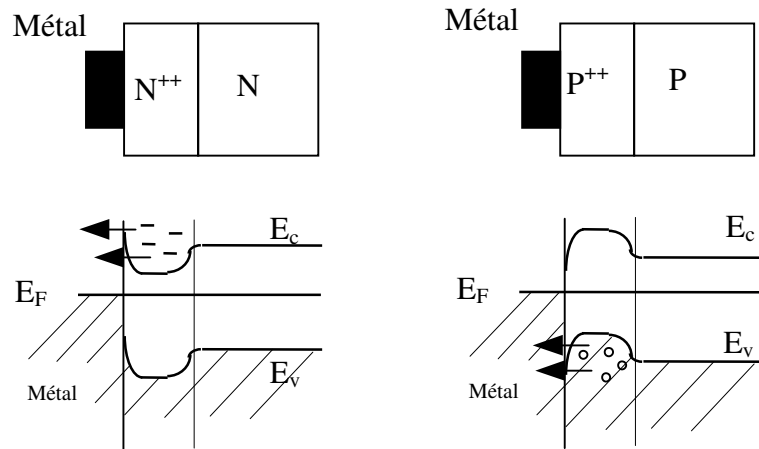


Figure II.23 :
Caractéristique d'un contact ohmique.

Chaque électron ou trou en excès par rapport au pseudo-niveau de Fermi sera évacué immédiatement par courant tunnel dans le métal. De même, lors d'un déficit de charges, le métal compensera par injection d'électrons ou de trous selon le cas.

Dans le cas d'un contact métal-isolant, la métallisation a lieu par évaporation sous vide ou pulvérisation cathodique et le métal est directement déposé sur l'oxyde.

Nous utilisons dans ce cas un modèle simple à vitesse de recombinaison au contact permettant de tenir compte de l'efficacité du contact^[MATHIEU 87]. Les densités de courant J_n et J_p s'écrivent alors :

$$J_n = q V_{\text{recomb. élect.}}(n-n_0)$$

$$J_p = q V_{\text{recomb. trou}}(p-p_0)$$

n_0 : Densité d'électrons à l'équilibre

p_0 : Densité de trous à l'équilibre

Ce formalisme permet de rendre compte de l'évacuation des charges excédentaires par les électrodes même si le champ électrique au voisinage de l'électrode est nul (on suppose qu'aucun courant n'est injecté du métal vers l'isolant). Le contact ohmique est équivalent à un contact pour lequel $V_{\text{recomb.}}$ est infinie.

CHAPITRE III

MODELISATION

Les équations de Poisson, de transport et de piégeage qui modélisent le comportement des dispositifs à semiconducteur sont des équations différentielles non linéaires couplées. Elles n'ont pas de solution analytique connue et le calcul numérique s'avère nécessaire pour les résoudre. L'équation de Poisson est modifiée afin de tenir compte des charges piégées.

Dans une première partie nous donnons la démarche générale suivie pour résoudre ces systèmes d'équations suivant, et dans une seconde partie nous détaillons les différentes étapes.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \epsilon \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon \psi}{\partial y^2} = -(N_d - N_a + p - n + p_t - n_t) \\ q \frac{\partial n}{\partial t} = \text{div } \vec{J}_n + g_0 \dot{D} Y(E) - \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t - \sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| (N_n - n_t) \\ q \frac{\partial p}{\partial t} = -\text{div } \vec{J}_p + g_0 \dot{D} Y(E) - \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| n_t - \sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| (N_p - p_t) \\ q \frac{\partial n_t}{\partial t} = \sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| (N_n - n_t) - \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| \cdot n_t \\ q \frac{\partial p_t}{\partial t} = \sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| (N_p - p_t) - \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t \end{array} \right.$$

III.1 METHODOLOGIE DE RESOLUTION :

La résolution du problème passe par une mise en forme des équations. Il faut effectuer deux traitements dont les détails seront donnés plus loin :

- 1°) La discrétisation des équations.
- 2°) La linéarisation du système d'équations (construction des matrices élémentaires).

Un fois construite la matrice associée au système linéaire, on introduit les différents termes de la matrice dans le logiciel. Le traitement numérique proprement dit peut alors commencer. Il comprend quatre étapes :

- 1°) Calcul numérique de tous les termes de la matrice pour chaque élément.
- 2°) Assemblage des matrices élémentaires en un système linéaire global.
- 3°) Application des conditions limites.
- 4°) Résolution du système linéaire global.

III.1 1 DISCRETISATION SPATIALE DES EQUATIONS ^[COTTREL 79] :

La méthode employée pour résoudre le système est la "méthode des éléments finis". Son principe consiste à décomposer en petits éléments le dispositif à traiter et à approcher les équations différentielles par des fonctions (le plus souvent polynomiales) à l'intérieur de chaque élément [cf *Annexe I*]. Cette étape permet de transformer les équations différentielles en équations algébriques. Après discrétisation par cette méthode, on obtient un système d'équations algébriques non linéaires pour chaque élément.

A) Discrétisation de l'équation de Poisson ^[DHATT 89] :

La méthode des éléments finis nous entraîne à faire quelques approximations :

- Le potentiel varie linéairement à l'intérieur d'un élément.
- Les densités de courant constantes dans l'élément.
- La densité des porteurs libres ou piégés est constante à l'intérieur du volume associé à chaque noeuds dans un élément (figure III.1).

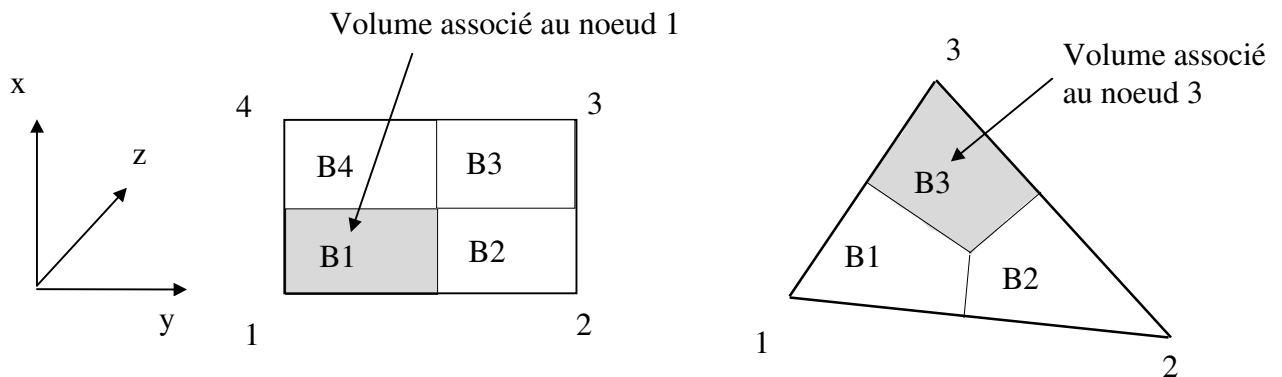


Figure III.1 :
Eléments de base utilisés dans le maillage.

Remarque :

Nous utilisons le terme de volume et non de surface car on considère que le matériau s'étend suivant la troisième dimension z sur une distance que nous prendrons égale à $1 \mu\text{m}$.

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\text{div}(\varepsilon(\text{grad } \psi)) + \rho = 0$$

Après discrétisation par la méthode des éléments finis [cf Annexe I] :

$$\{E_{\psi}\} = [K_{\psi}] \begin{Bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{Bmatrix} - \{F_{\psi_{2D}}\} = 0$$

$\{F_{\psi_{2D}}\}$ est le vecteur second membre faisant intervenir la densité de charges ρ en chaque noeud de l'élément.

pour un élément triangulaire : $\{F_{\psi_{2D}}\} =$

$$\frac{q}{\varepsilon} \begin{Bmatrix} B_1 \cdot (p_1 - n_1 + N_{D_1} - N_{A_1} + p_{t_1} - n_{t_1}) \\ B_2 \cdot (p_2 - n_2 + N_{D_2} - N_{A_2} + p_{t_2} - n_{t_2}) \\ B_3 \cdot (p_3 - n_3 + N_{D_3} - N_{A_3} + p_{t_3} - n_{t_3}) \end{Bmatrix}$$

pour un élément rectangulaire :

$$\{F_{\psi_{2D}}\} = \frac{q}{\varepsilon} \begin{Bmatrix} B_1 \cdot (p_1 - n_1 + N_{D_1} - N_{A_1} + p_{t_1} - n_{t_1}) \\ B_2 \cdot (p_2 - n_2 + N_{D_2} - N_{A_2} + p_{t_2} - n_{t_2}) \\ B_3 \cdot (p_3 - n_3 + N_{D_3} - N_{A_3} + p_{t_3} - n_{t_3}) \\ B_4 \cdot (p_4 - n_4 + N_{D_4} - N_{A_4} + p_{t_4} - n_{t_4}) \end{Bmatrix}$$

où :

p_t : Densité de trous piégés.

n_t : Densité d'électrons piégés.

p : Densité de trous libres.

n : Densité d'électrons libres.

K_{ψ} est la matrice de raideur du système. Pour l'élément triangle on a :

$$[K_{\psi}] = \frac{1}{4.A_{2D}} \begin{bmatrix} (x_3 - x_2)^2 & (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) & (x_2 - x_1)(x_3 - x_2) \\ + (y_3 - y_2)^2 & + (y_3 - y_2)(y_1 - y_3) & + (y_2 - y_1)(y_3 - y_2) \\ & (x_3 - x_1)^2 & (x_1 - x_3)(x_2 - x_1) \\ & + (y_3 - y_1)^2 & + (y_1 - y_3)(y_1 - y_3) \\ & & (x_3 - x_2)^2 \\ & & + (y_3 - y_2)^2 \end{bmatrix}$$

Symétrique

avec $2.A_{2D} = (x_1 - x_3)(y_2 - y_1) - (x_2 - x_1)(y_1 - y_3)$

Pour les trois noeuds du triangle, on a donc :

$$E_{\psi_1} = \frac{1}{4A_{2D}} [((x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2) \cdot \psi_1 + ((x_3 - x_2)(x_1 - x_3) + (y_3 - y_2)(y_1 - y_3)) \cdot \psi_2 + ((x_2 - x_1)(x_3 - x_2) + (y_2 - y_1)(y_3 - y_2)) \cdot \psi_3] - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_1(p_1 - n_1 + p_{t1} - n_{t1} + N_{D1} - N_{A1})] = 0$$

$$E_{\psi_2} = \frac{1}{4A_{2D}} [((x_3 - x_2)(x_1 - x_3) + (y_3 - y_2)(y_1 - y_3)) \cdot \psi_1 + ((x_3 - x_1)^2 + (y_3 - y_1)^2) \cdot \psi_2 + ((x_1 - x_3)(x_2 - x_1) + (y_1 - y_3)(y_2 - y_1)) \cdot \psi_3] - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_2(p_2 - n_2 + p_{t2} - n_{t2} + N_{D2} - N_{A2})] = 0$$

$$E_{\psi_3} = \frac{1}{4A_{2D}} [((x_2 - x_1)(x_3 - x_2) + (y_2 - y_1)(y_3 - y_2)) \cdot \psi_1 + ((x_1 - x_3)(x_2 - x_1) + (y_1 - y_3)(y_2 - y_1)) \cdot \psi_2 + ((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2) \cdot \psi_3] - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_3(p_3 - n_3 + p_{t3} - n_{t3} + N_{D3} - N_{A3})] = 0$$

Avec au point i :

- N_{Di} : Densité de donneurs
- N_{Ai} : Densité d'accepteurs
- n_i : Densité d'électrons libres
- p_i : Densité de trous libres
- n_{ti} : Densité d'électrons piégés
- p_{ti} : Densité de trous piégés
- ψ_i : Potentiel thermodynamique

Pour obtenir la matrice de raideur dans le cas d'un élément rectangulaire on assemble les matrices associées aux triangles A et B (figure III.2) :

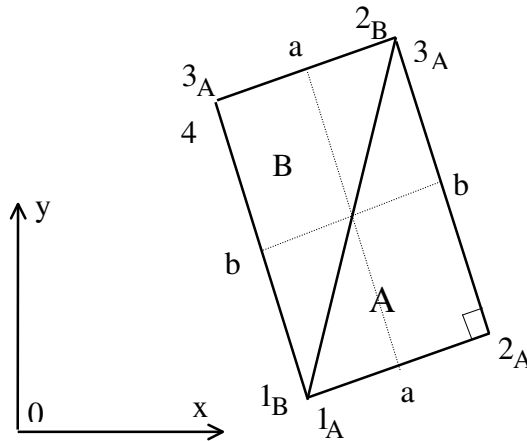


Figure III.2 :
Assemblage de 2 triangles.

$$[K_\psi] = \frac{2}{4.A_{2D}} \begin{bmatrix} a^2 + b^2 & (b_x c_x + b_y c_y) & (a_x b_x + a_y b_y + a_x b_y + a_y b_x) & c_x a_x + c_y a_y \\ & c^2 & (c_x a_x + c_y a_y + b_x c_y + b_y c_x) & 0 \\ & \text{Symétrique} & c^2 & (b_x c_x + b_y c_y) \\ & & & c^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{avec } c^2 &= a^2 + b^2 \\ a^2 &= (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 \\ b^2 &= (x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2 \\ a_x &= (x_2 - x_1) & a_y &= (y_2 - y_1) \\ b_x &= (x_3 - x_2) & b_y &= (y_3 - y_2) \end{aligned}$$

On obtient ainsi l'équation de Poisson discrétisée pour chaque noeud du rectangle :

$$\begin{aligned} E_{\psi_1} &= \frac{1}{2A_{2D}} [(a^2 + b^2) \cdot \psi_1 + (a_x b_x + a_y b_y + a_x b_y + a_y b_x) \cdot \psi_2 + (c_x a_x + c_y a_y) \cdot \psi_3] \\ &\quad - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_1(p_1 - n_1 + p_{t1} - n_{t1} + N_{D1} - N_{A1})] = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{\psi_2} &= \frac{1}{2A_{2D}} [(b_x c_x + b_y c_y) \cdot \psi_1 + (c_x a_x + c_y a_y + b_x c_y + b_y c_x) \cdot \psi_2] \\ &\quad - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_2(p_2 - n_2 + p_{t2} - n_{t2} + N_{D2} - N_{A2})] = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{\psi_3} &= \frac{1}{2A_{2D}} [(a_x b_x + a_y b_y + a_x b_y + a_y b_x) \cdot \psi_1 + (c_x a_x + c_y a_y + b_x c_y + b_y c_x) \cdot \psi_2 + c^2 \cdot \psi_3 \\ &\quad (b_x c_x + b_y c_y) \cdot \psi_4] - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_3(p_3 - n_3 + p_{t3} - n_{t3} + N_{D3} - N_{A3})] = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{\psi_4} &= \frac{1}{2A_{2D}} [(a_x b_x + a_y b_y + a_x b_y + a_y b_x) \cdot \psi_1 + (c_x a_x + c_y a_y + b_x c_y + b_y c_x) \cdot \psi_2 + c^2 \cdot \psi_3 \\ &\quad c^2 \cdot \psi_4] - \frac{q}{\epsilon} \cdot [B_3(p_3 - n_3 + p_{t3} - n_{t3} + N_{D3} - N_{A3})] = 0 \end{aligned}$$

B) Discrétisation spatiale des équations de continuité :

On utilise une méthode mixte "éléments finis différences finies" proposée par "COTTRELL et BUTURLA" en 1979 [COTTRELL 79] c'est la "Box Method".

Les approximations faites sont les suivantes :

- Le potentiel varie linéairement à l'intérieur d'un élément.
- La densité de porteurs libres ou piégés est constante à l'intérieur des volumes associés aux noeuds dans un élément.
- Les vecteurs densités de courant d'électrons et de trous sont constants à l'intérieur de l'élément.

A partir des équations introduites au chapitre précédent :

$$\begin{cases} -\operatorname{div} \vec{J}_n - q \cdot g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y(E) + \sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| \cdot (Nn - n_t) + \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t + q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \\ \operatorname{div} \vec{J}_p - q \cdot g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y(E) + \sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| \cdot (Np - p_t) + \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| p_t + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\sigma_{nt} \left| \vec{J}_n \right| \cdot (Nn - n_t) + \sigma_{pr} \left| \vec{J}_p \right| n_t + q \cdot \frac{\partial n_t}{\partial t} = 0 \\ -\sigma_{pt} \left| \vec{J}_p \right| \cdot (Np - p_t) + \sigma_{nr} \left| \vec{J}_n \right| p_t + q \cdot \frac{\partial p_t}{\partial t} = 0 \end{cases}$$

On intègre sur le volume associé à chaque noeud en utilisant les approximations précédentes. Après développement des calculs [cf Annexe II], on obtient dans l'élément triangulaire ci-dessous (figure III.3) :

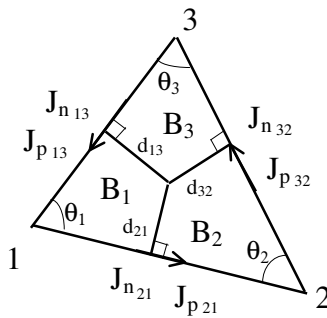


Figure III.3 :
Élément triangulaire de base.

L'équation de transport des électrons donne :

Au noeud 1 :

$$E_{n_1} = J_{n_{21}} \cdot d_{21} - J_{n_{13}} \cdot d_{13} - q \cdot B_1 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E) - (\sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} + \sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{21}}| \cdot |J_{n_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - \frac{\partial n_1}{\partial t} \right]$$

Au noeud 2 :

$$E_{n_2} = J_{n_{32}} \cdot d_{32} - J_{n_{21}} \cdot d_{21} - q \cdot B_2 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_2(E) - (\sigma_{nr_2} \cdot p_{t_2} + \sigma_{nt_2} \cdot (N_{n_2} - n_{t_2})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{32}}^2 + J_{n_{21}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{32}}| \cdot |J_{n_{21}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]$$

Au noeud 3 :

$$E_{n_3} = J_{n_{13}} \cdot d_{13} - J_{n_{32}} \cdot d_{32} - q \cdot B_3 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_3(E) - (\sigma_{nr_3} \cdot p_{t_3} + \sigma_{nt_3} \cdot (N_{n_3} - n_{t_3})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{13}}^2 + J_{n_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{13}}| \cdot |J_{n_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - \frac{\partial n_3}{\partial t} \right]$$

avec [cf Annexe III] :

$$\begin{aligned} J_{n_{21}} &= q\mu_{n_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[n_2 \cdot Z(\Delta_{n_{21}}) - n_1 \cdot (\Delta_{n_{21}} + Z(\Delta_{n_{21}})) \right] \\ J_{n_{32}} &= q\mu_{n_{32}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{32}} \left[n_3 \cdot Z(\Delta_{n_{32}}) - n_2 \cdot (\Delta_{n_{32}} + Z(\Delta_{n_{32}})) \right] \\ J_{n_{13}} &= q\mu_{n_{13}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{13}} \left[n_1 \cdot Z(\Delta_{n_{13}}) - n_3 \cdot (\Delta_{n_{13}} + Z(\Delta_{n_{13}})) \right] \end{aligned}$$

L'équation de transport des trous donne :

Au noeud 1 :

$$E_{p_1} = J_{p_{21}} \cdot d_{21} - J_{p_{13}} \cdot d_{13} + q \cdot B_1 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E) - (\sigma_{pr_1} \cdot n_{t_1} + \sigma_{pt_1} \cdot (N_{p_1} - p_{t_1})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{21}}| \cdot |J_{p_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - \frac{\partial p_1}{\partial t} \right]$$

Au noeud 2 :

$$E_{p_2} = J_{p_{32}} \cdot d_{32} - J_{p_{21}} \cdot d_{21} + q \cdot B_2 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_2(E) - (\sigma_{pr_2} \cdot n_{t_2} + \sigma_{pt_2} \cdot (N_{p_2} - p_{t_2})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{32}}^2 + J_{p_{21}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{32}}| \cdot |J_{p_{21}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - \frac{\partial p_2}{\partial t} \right]$$

Au noeud 3 :

$$E_{p_3} = J_{p_{13}} \cdot d_{13} - J_{p_{32}} \cdot d_{32} + q \cdot B_3 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_3(E) - (\sigma_{pr_3} \cdot n_{t_3} + \sigma_{pt_3} \cdot (N_{p_3} - p_{t_3})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{13}}^2 + J_{p_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{13}}| \cdot |J_{p_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - \frac{\partial p_3}{\partial t} \right]$$

avec

$$\begin{aligned} J_{p_{21}} &= q\mu_{p_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[p_2 \cdot Z(\Delta_{p_{21}}) - p_1 \cdot (\Delta_{p_{21}} + Z(\Delta_{p_{21}})) \right] \\ J_{p_{32}} &= q\mu_{p_{32}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{32}} \left[p_3 \cdot Z(\Delta_{p_{32}}) - p_2 \cdot (\Delta_{p_{32}} + Z(\Delta_{p_{32}})) \right] \\ J_{p_{13}} &= q\mu_{p_{13}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{13}} \left[p_1 \cdot Z(\Delta_{p_{13}}) - p_3 \cdot (\Delta_{p_{13}} + Z(\Delta_{p_{13}})) \right] \end{aligned}$$

Pour l'élément rectangulaire :

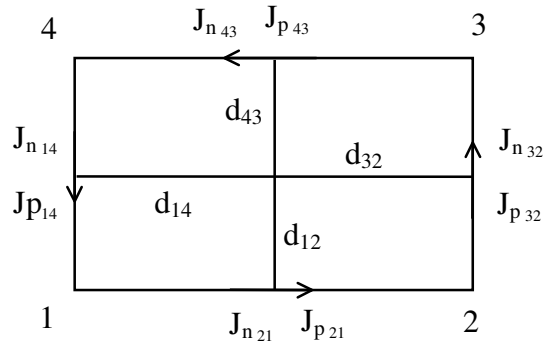


Figure III.4 :
Elément rectangulaire de base.

l'équation de transport des électrons donne :

Au noeud 1 :

$$E_{n_1} = J_{n_{21}} \cdot d_{21} - J_{n_{14}} \cdot d_{14} - q \cdot B_1 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E) - (\sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} + \sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{14}}^2} - \frac{\partial n_1}{\partial t} \right]$$

Au noeud 2 :

$$E_{n_2} = J_{n_{21}} \cdot d_{21} - J_{n_{32}} \cdot d_{32} - q \cdot B_2 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_2(E) - (\sigma_{nr_2} \cdot p_{t_2} + \sigma_{nt_2} \cdot (N_{n_2} - n_{t_2})) \cdot \sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{32}}^2} - \frac{\partial n_2}{\partial t} \right]$$

Au noeud 3 :

$$E_{n_3} = J_{n_{32}} \cdot d_{32} - J_{n_{43}} \cdot d_{43} - q \cdot B_3 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_3(E) - (\sigma_{nr_3} \cdot p_{t_3} + \sigma_{nt_3} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{n_{32}}^2 + J_{n_{43}}^2} - \frac{\partial n_3}{\partial t} \right]$$

Au noeud 4 :

$$E_{n_4} = J_{n_{43}} \cdot d_{43} - J_{n_{14}} \cdot d_{14} - q \cdot B_4 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_4(E) - (\sigma_{nr_4} \cdot p_{t_4} + \sigma_{nt_4} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{n_{43}}^2 + J_{n_{14}}^2} - \frac{\partial n_4}{\partial t} \right]$$

L'équation de transport des trous donne :

Au noeud 1 :

$$E_{p_1} = J_{p_{21}} \cdot d_{21} - J_{p_{14}} \cdot d_{14} + q \cdot B_1 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E) - (\sigma_{pr_1} \cdot n_{t_1} + \sigma_{pt_1} \cdot (N_{p_1} - p_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{14}}^2} - \frac{\partial p_1}{\partial t} \right]$$

Au noeud 2 :

$$E_{p_2} = J_{p_{21}} \cdot d_{21} - J_{p_{32}} \cdot d_{32} + q \cdot B_2 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_2(E) - (\sigma_{pr_2} \cdot n_{t_2} + \sigma_{pt_2} \cdot (N_{p_2} - p_{t_2})) \cdot \sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{32}}^2} - \frac{\partial p_2}{\partial t} \right]$$

Au noeud 3 :

$$E_{p_3} = J_{p_{32}} \cdot d_{32} - J_{p_{43}} \cdot d_{43} + q \cdot B_3 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_3(E) - (\sigma_{pr_3} \cdot n_{t_3} + \sigma_{pt_3} \cdot (N_{p_3} - p_{t_3})) \cdot \sqrt{J_{p_{32}}^2 + J_{p_{43}}^2} - \frac{\partial p_3}{\partial t} \right]$$

Au noeud 4 :

$$E_{p_4} = J_{p_{43}} \cdot d_{43} - J_{p_{14}} \cdot d_{14} + q \cdot B_4 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_4(E) - (\sigma_{pr_4} \cdot n_{t_4} + \sigma_{pt_4} \cdot (N_{p_4} - p_{t_4})) \cdot \sqrt{J_{p_{43}}^2 + J_{p_{14}}^2} - \frac{\partial p_4}{\partial t} \right]$$

C) Discrétisation des équations de piégeage :

La discrétisation spatiale des équations de piégeage ne pose aucun problème particulier car ce sont des équations algébriques linéaires dans le domaine spatial (aucun terme dérivé de n_t et p_t par rapport à x ou à y).

Pour l'élément triangulaire, l'équation de piégeage des électrons donne :

Au noeud 1 :

$$E_{n_1} = (\sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{21}}| \cdot |J_{n_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - \sigma_{pr_1} \cdot n_{t_1} \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{21}}| \cdot |J_{p_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - q \frac{\partial n_1}{\partial t}$$

Au noeud 2 :

$$E_{n_2} = (\sigma_{nt_2} \cdot (N_{n_2} - n_{t_2})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{12}}^2 + J_{n_{23}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{12}}| \cdot |J_{n_{23}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - \sigma_{pr_2} \cdot n_{t_2} \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{12}}^2 + J_{p_{23}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{12}}| \cdot |J_{p_{23}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - q \frac{\partial n_2}{\partial t}$$

Au noeud 3 :

$$E_{n_3} = (\sigma_{nt_3} \cdot (N_{n_3} - n_{t_3})) \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{13}}^2 + J_{n_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{13}}| \cdot |J_{n_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - \sigma_{pr_3} \cdot n_{t_3} \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{13}}^2 + J_{p_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{13}}| \cdot |J_{p_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - q \frac{\partial n_3}{\partial t}$$

Pour l'équation de piégeage de trous on a :

Au noeud 1 :

$$E_{p_1} = (\sigma_{pt_1} \cdot (N_{p_1} - p_{t_1})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{21}}| \cdot |J_{p_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - \sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{13}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{21}}| \cdot |J_{n_{13}}| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1} - q \frac{\partial p_1}{\partial t}$$

Au noeud 2 :

$$E_{p_2} = (\sigma_{pt_2} \cdot (N_{p_2} - p_{t_2})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{12}}^2 + J_{p_{23}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{12}}| \cdot |J_{p_{23}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - \sigma_{nr_2} \cdot p_{t_2} \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{12}}^2 + J_{n_{23}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{12}}| \cdot |J_{n_{23}}| \cdot \cos \theta_2}}{\sin \theta_2} - q \frac{\partial p_2}{\partial t}$$

Au noeud 3 :

$$E_{p_3} = (\sigma_{pt_3} \cdot (N_{p_3} - p_{t_3})) \cdot \frac{\sqrt{J_{p_{13}}^2 + J_{p_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{p_{13}}| \cdot |J_{p_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - \sigma_{nr_3} \cdot p_{t_3} \cdot \frac{\sqrt{J_{n_{13}}^2 + J_{n_{32}}^2 - 2 \cdot |J_{n_{13}}| \cdot |J_{n_{32}}| \cdot \cos \theta_3}}{\sin \theta_3} - q \frac{\partial p_3}{\partial t}$$

Pour l'élément rectangulaire, l'équation de piégeage des électrons donne :

Au noeud 1 :

$$E_{n_1} = (\sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{14}}^2} - \sigma_{pr_1} \cdot n_{t_1} \cdot \sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{14}}^2} - q \frac{\partial n_1}{\partial t}$$

Au noeud 2 :

$$E_{n_2} = (\sigma_{nt_2} \cdot (N_{n_2} - n_{t_2})) \cdot \sqrt{J_{n_{12}}^2 + J_{n_{23}}^2} - \sigma_{pr_2} \cdot n_{t_2} \cdot \sqrt{J_{p_{12}}^2 + J_{p_{23}}^2} - q \frac{\partial n_2}{\partial t}$$

Au noeud 3 :

$$E_{n_3} = (\sigma_{nt_3} \cdot (N_{n_3} - n_{t_3})) \cdot \sqrt{J_{n_{13}}^2 + J_{n_{32}}^2} - \sigma_{pr_3} \cdot n_{t_3} \cdot \sqrt{J_{p_{13}}^2 + J_{p_{32}}^2} - q \frac{\partial n_3}{\partial t}$$

Au noeud 4 :

$$E_{n_4} = (\sigma_{nt_4} \cdot (N_{n_4} - n_{t_4})) \cdot \sqrt{J_{n_{14}}^2 + J_{n_{43}}^2} - \sigma_{pr_4} \cdot n_{t_4} \cdot \sqrt{J_{p_{14}}^2 + J_{p_{43}}^2} - q \frac{\partial n_4}{\partial t}$$

L'équation de piégeage des trous donne :

Au noeud 1 :

$$E_{p_1} = (\sigma_{pt_1} \cdot (N_{p_1} - p_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{p_{21}}^2 + J_{p_{14}}^2} - \sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} \cdot \sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{14}}^2} - q \frac{\partial p_1}{\partial t}$$

Au noeud 2 :

$$E_{p_2} = (\sigma_{pt_2} \cdot (N_{p_2} - p_{t_2})) \cdot \sqrt{J_{n_{12}}^2 + J_{n_{23}}^2} - \sigma_{nr_2} \cdot p_{t_2} \cdot \sqrt{J_{p_{12}}^2 + J_{p_{23}}^2} - q \frac{\partial p_2}{\partial t}$$

Au noeud 3 :

$$E_{p_3} = (\sigma_{pt_3} \cdot (N_{p_3} - p_{t_3})) \cdot \sqrt{J_{p_{13}}^2 + J_{p_{32}}^2} - \sigma_{nr_3} \cdot p_{t_3} \cdot \sqrt{J_{n_{13}}^2 + J_{n_{32}}^2} - q \frac{\partial p_3}{\partial t}$$

Au noeud 4 :

$$E_{p_4} = (\sigma_{pt_4} \cdot (N_{p_4} - p_{t_4})) \cdot \sqrt{J_{p_{14}}^2 + J_{p_{43}}^2} - \sigma_{nr_4} \cdot p_{t_4} \cdot \sqrt{J_{n_{14}}^2 + J_{n_{43}}^2} - q \frac{\partial p_4}{\partial t}$$

D) Remarques :

1°) Calcul du champ électrique associé à un noeud :

Le champ électrique est calculé dans chaque élément. Dans un élément triangulaire on a vu que l'on peut écrire le potentiel en un point quelconque sous la forme :

$$\psi = A \cdot x + B \cdot y + C$$

dans le plan (0xy) A, B et C sont des constantes

Le calcul du champ en un noeud de l'élément se fait simplement en dérivant le potentiel par rapport à x et à y.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= A = -E_x \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} &= B = -E_y \end{aligned}$$

Nous calculons alors le module du champ électrique $\left| \vec{E} \right| = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$ dont nous avons besoin dans le calcul de la fonction rendement Y(E) ainsi que dans celui des sections efficaces de piégeage.

2°) Restriction au cas des forts champs (dans le SiO₂) :

Reprenons l'équation de la densité du courant d'électrons :

$$\begin{array}{c} \psi_1 \quad \xrightarrow{I_{12}} \quad \psi_2 \\ \bullet \quad \quad \quad \bullet \end{array} \quad J_{n_{21}} = q\mu_{n_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[n_2 \cdot Z(\Delta_{n_{21}}) - n_1 \cdot (\Delta_{n_{21}} + Z(\Delta_{n_{21}})) \right]$$

Supposons que le champ électrique appliqué soit grand, deux cas sont alors possibles :

$$\begin{array}{l} 1^\circ) \psi_2 \gg \psi_1 \Rightarrow \Delta \rightarrow +\infty \text{ et } Z(\Delta) \rightarrow 0 \\ 2^\circ) \psi_1 \gg \psi_2 \Rightarrow \Delta \rightarrow -\infty \text{ et } Z(\Delta) \rightarrow -\Delta \end{array}$$

1° cas :

$$\begin{array}{l} J_{n_{21}} \approx q\mu_{n_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[-n_1 \cdot \Delta_{n_{21}} \right] = -q\mu_{n_{21}} n_1 \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{l_{21}} \right) \\ J_{n_{21}} = -q\mu_{n_{21}} n_1 E \quad n_1 : \text{Concentration d'électrons au noeud 1} \end{array}$$

2° cas :

$$\begin{array}{l} J_{n_{21}} \approx q\mu_{n_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[-n_2 \cdot \Delta_{n_{21}} \right] = -q\mu_{n_{21}} n_2 \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{l_{21}} \right) \\ J_{n_{21}} = -q\mu_{n_{21}} n_2 E \quad n_2 : \text{Concentration d'électrons au noeud 2} \end{array}$$

De même si on prend l'équation de la densité du courant de trous :

$$J_{p_{21}} = q\mu_{p_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[p_1 \cdot Z(\Delta_{p_{21}}) - p_2 \cdot (\Delta_{p_{21}} + Z(\Delta_{p_{21}})) \right]$$

1° cas :

$$J_{p_{21}} \approx q\mu_{p_{21}} p_2 E \quad p_2 : \text{Concentration de trous au noeud 2}$$

2° cas :

$$J_{p_{21}} \approx q\mu_{p_{21}} p_1 E \quad p_1 : \text{Concentration de trous au noeud 1}$$

Conclusion :

Dans le cas de forts champs, les densités de courant d'électrons et de trous ne sont fonction que du courant de conduction. La contribution du courant de diffusion étant nulle, l'hypothèse selon laquelle les porteurs obéissent à la loi statistique de Boltzmann n'est plus nécessaire.

Cette remarque est importante car dans un matériau amorphe comme la silice, la statistique de Boltzmann n'est pas respectée, notre modèle sera donc d'autant plus valable que le champ électrique dans l'oxyde sera important.

III.1.2 LINEARISATION DU SYSTEME D'EQUATIONS ALGEBRIQUES :

Le système étant non linéaire, il n'est pas possible de le résoudre tel quel. Pour le transformer en système linéaire, il existe différentes méthodes :

- méthode de Jacobi
- méthode de Raphson-Newton
- méthode de la sécante etc...

Nous avons utilisé la méthode de Raphson-Newton car elle est simple à mettre en oeuvre et est une de celles qui converge le mieux. Dans un premier temps, nous décrivons la méthode pour une équation non linéaire à une inconnue, puis nous la généralisons au cas de N équations à N inconnues.

Méthode de Raphson-Newton :

A partir d'un exemple simple, nous allons décrire la démarche faite lors de la linéarisation d'une équation à une variable.

Soit l'équation non linéaire $f(x)$, on cherche la valeur de x tel que $f(x) = 0$.

$$f(x) = e^{-x} - 3 = 0$$

La solution analytique donne : $x = -1,098...$

Soit le développement de Taylor autour du point x_0 on obtient :

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0).f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}.f''(x_0) + \dots$$

supposons négligeables les termes à partir de l'ordre 2, on a alors :

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0).f'(x_0)$$

posons $\Delta x = x-x_0$, ce qui donne dans notre exemple :

$$f(x) = e^{-x_0} - 3 - \Delta x . e^{-x_0} = 0$$

d'où :

$$\Delta x = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = \frac{e^{-x_0} - 3}{e^{-x_0}}$$

Choisissons arbitrairement une solution approchée $x_0 = -0,5$. On peut alors déterminer la valeur de x que l'on note x_1 telle que :

$$x_1 = \Delta x + x_0$$

$$\Delta x = -0,82 \quad x_1 = -1,32$$

On recommence l'opération :

$$\Delta x = 0,198 \quad x_2 = -1,12$$

$$\Delta x = 0,023 \quad x_3 = -1,097$$

ainsi de suite jusqu'à ce que Δx soit suffisamment petit (précision définie par l'utilisateur). Graphiquement, on constate que cette méthode consiste à prendre la tangente au point considéré et à rechercher la variation pour obtenir $f(x) = 0$ (figure III.5).

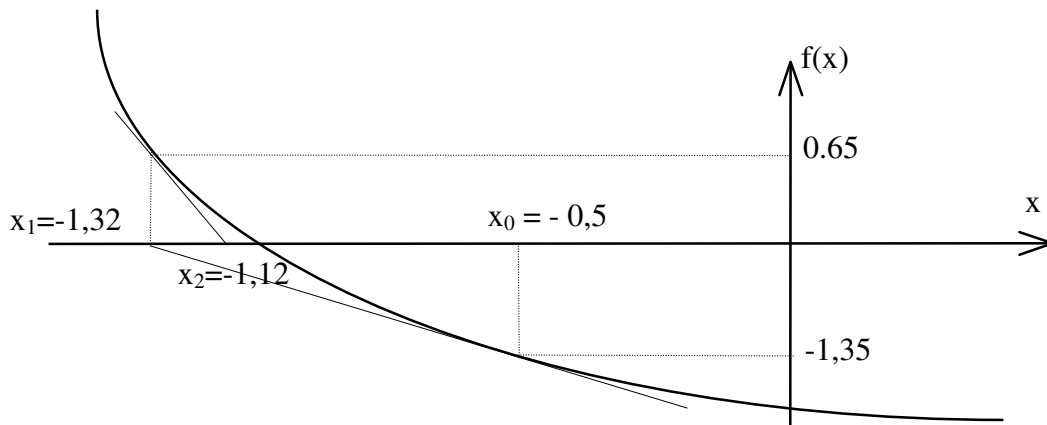


Figure III.5 :
Principe de la méthode de Raphson-Newton.

Généralisation au cas de N équations à N inconnues :

Soit l'ensemble des fonctions f à N variables :

$$f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

...

$$f_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

Que l'on note sous forme matricielle :

$$F(X) = 0$$

F : Représente l'ensemble des fonctions discrétisées sur l'élément.

X : Représente l'ensemble des inconnues du système dans l'élément.

Soit le développement limité à l'ordre 1 de chacune des fonctions que l'on écrit, si on connaît

une solution approchée $X_0 = \begin{Bmatrix} X_{1_0} \\ X_{2_0} \\ \dots \\ X_{n_0} \end{Bmatrix}$:

$$f_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = f_i(x_{1_0}, x_{2_0}, x_{3_0}, \dots, x_{n_0}) + \Delta x_1 \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x_1} + \Delta x_2 \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x_2} + \dots + \Delta x_n \cdot \frac{\partial f_i}{\partial x_n}$$

$$i = 1, 2, 3, \dots, n$$

Sous forme matricielle, il s'écrit de la façon suivante :

$$F(X) = F(X_0 + \Delta X) = F(X_0) + [J(X_0)] \cdot \{\Delta X\} = 0$$

$$\text{en posant } \{\Delta X\} = \{X\} - \{X_0\} = \begin{Bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \dots \\ \Delta x_n \end{Bmatrix}$$

$$[J(X_0)] = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

le système est maintenant linéaire par rapport à ΔX et on l'écrit sous la forme :

$$[J(X_0)].\{\Delta X\} = -F(X_0)$$

$[J(X_0)]$ est la matrice Jacobienne du système.

Il faut choisir une solution approchée puis réitérer la méthode jusqu'à obtenir des variations de ΔX suffisamment petites. Plus la solution approchée X_0 sera proche de la solution exacte, plus la convergence sera rapide. Nous verrons au paragraphe suivant la méthode utilisée pour obtenir une bonne solution approchée.

III.1.3 DISCRETISATION TEMPORELLE DES EQUATIONS :

La discrétisation dans l'espace (x,y) des équations de transport et de piégeage conduit à un système d'équations différentielles du premier ordre en temps t. Pour transformer ces équations différentielles on utilise la méthode de GEAR ^[GEAR 71] [MICHEZ 91].

Considérons par exemple l'équation de transport des électrons au noeud 1 [cf Annexe II] :

$$E_{n_1} = J_{n_{21}} \cdot d_{21} - J_{n_{14}} \cdot d_{14} - q \cdot B_1 \cdot \left[g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E) - (\sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} + \sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{14}}^2} - \frac{\partial n_1}{\partial t} \right]$$

Pour discrétiser le terme différentiel $\frac{\partial n_1}{\partial t}$, on utilise une méthode aux différences finies. Supposons connus N résultats précédents, et soit t_0 l'instant où l'on effectue le calcul (figure III.6).

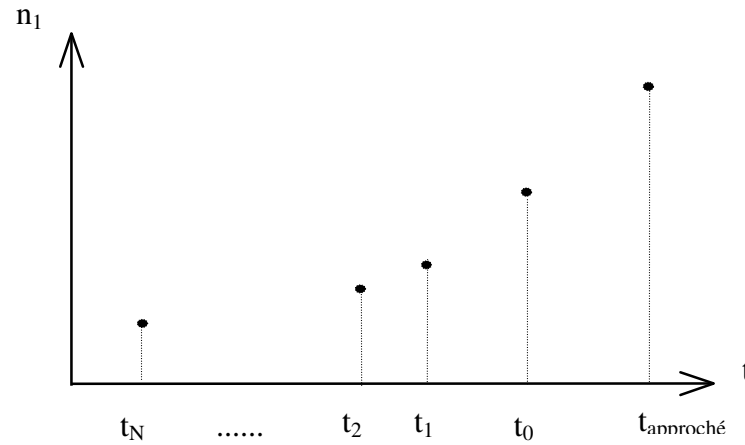


Figure III.6 :
Interpolation polynomiale.

On suppose que $n_1(t)$ est une fonction polynomiale. En utilisant les polynômes de Lagrange^[NOUGIER 87] on exprime $n_1(t)$ sous la forme :

$$n_1(t) = \sum_{i=0}^N [L_i \cdot n_1(t_i)]$$

avec L_i polynôme de Lagrange à l'instant t_i :

$$L_i = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N \frac{t - t_j}{t_i - t_j}$$

Remarque :

$$\begin{aligned} \text{en } t = t_i & \Rightarrow L_i = 1 \\ \text{en } t \neq t_i & \Rightarrow L_i = 0 \end{aligned}$$

On remplace dans l'équation E_{n1} le terme $\frac{\partial n_1}{\partial t}$ par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1(t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=0}^N [L_i \cdot n_1(t_i)] \right] \\ &= \sum_{i=0}^N \left[\frac{\partial L_i}{\partial t} n_1(t_i) \right] \end{aligned}$$

$$\text{avec } \frac{\partial L_i}{\partial t} = \frac{\frac{\partial}{\partial t} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N (t - t_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N (t_i - t_j)}$$

d'où :

$$\frac{\partial L_i}{\partial t} = \frac{\sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i \\ k \neq j}}^N (t - t_k)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^N (t_i - t_j)}$$

La méthode est identique pour les densités d'électrons aux autres noeuds de l'élément ainsi que pour les densités de trous et les densités de porteurs piégés.

Recherche d'une solution approchée :

Après avoir calculé la solution à l'instant t_0 , on connaît $(N+1)$ résultats. On exprime $n_1(t)$ sous la forme du polynôme:

$$n_1(t) = \sum_{i=0}^N [L_i(t) \cdot n_1(t_i)]$$

Soit l'instant suivant $t_{\text{approché}}$, où l'on souhaite connaître la solution approchée, on écrit alors :

$$n_1(t_{\text{approché}}) = \sum_{i=0}^N [L_i(t_{\text{approché}}) \cdot n_1(t_i)]$$

On effectue donc une extrapolation de la valeur de n_1 . Cette méthode s'applique à tous les noeuds du maillage pour le potentiel et les densités de porteurs libres et piégés.

Cette estimation de la solution permet de diviser par deux^[MICHEZ 91b] le nombre d'itérations de Raphson-Newton lors de la résolution.

III.1.4 CONSTRUCTION DU SYSTEME ASSEMBLE :

Donnons sur un exemple simple le principe de construction du système linéaire global. Considérons le dispositif suivant (figure III.7) constitué de seulement deux éléments rectangulaires. Afin de simplifier le problème, nous ne traiterons dans cet exemple que l'équation du potentiel, la technique étant identique pour les densités de charges libres ou piégées.

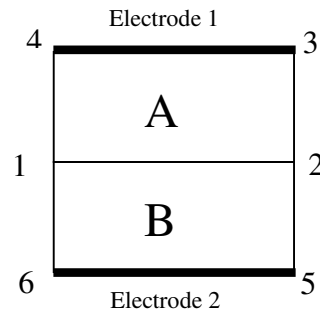


Figure III.7 :

Dispositif formé de 2 éléments rectangulaires.

Après discrétisation et linéarisation du système d'équations, on obtient dans chaque élément le système d'équations suivant :

$$\text{élément A : } \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_2 \\ \Delta\psi_3 \\ \Delta\psi_4 \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{Bmatrix}$$

$$\text{élément B : } \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_6 \\ \Delta\psi_5 \\ \Delta\psi_2 \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} B_1 \\ B_6 \\ B_5 \\ B_2 \end{Bmatrix}$$

Chaque équation élémentaire représente une partie de l'équation globale en un noeud. L'assemblage se fait en additionnant les deux systèmes d'équations, on obtient ainsi un système global permettant de calculer les valeurs des $\Delta\psi_i$ par résolution du système global.

$$\begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{14} & a_{13} & a_{14} & b_{13} & b_{12} \\ a_{21} + b_{41} & a_{22} + b_{44} & a_{23} & a_{24} & b_{43} & b_{42} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{34} & 0 & 0 & b_{33} & b_{32} \\ b_{21} & b_{24} & 0 & 0 & b_{23} & b_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_2 \\ \Delta\psi_3 \\ \Delta\psi_4 \\ \Delta\psi_5 \\ \Delta\psi_6 \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} A_1 + B_1 \\ A_2 + B_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{Bmatrix}$$

Dans le cas général, on assemble entre eux tous les éléments constituant le dispositif à partir du système d'équations de chaque élément ^[DHATT 81] :

$$[J(X_0)].\{\Delta X\} = -F(X_0)$$

On effectue l'assemblage en ajoutant la contribution de tous les éléments autour de chaque noeud et on obtient un système d'équations décrivant le dispositif complet :

$$[J_a(X_{0a})].\{\Delta X_a\} = -F_a(X_{0a})$$

a : signifie système assemblé.

III.1.5 APPLICATION DES CONDITIONS AUX LIMITES :

Les potentiels aux électrodes ne sont pas des inconnues du système car ils sont imposés par l'utilisateur (il en est de même pour les densités d'électrons et de trous). Il faut donc transformer le système matriciel global pour bloquer ces valeurs aux limites.

Deux types de conditions peuvent être appliquées aux limites :

- Conditions de Neuman (blocage du potentiel ou des densités de porteurs)
- Conditions de Dirichlet (blocage du champ électrique ou des courants)

Dans la plupart des simulations, nous imposerons des conditions de type Neuman sur les potentiels et les densités de porteurs aux contacts.

Méthode utilisée pour l'application des conditions limites :

Considérons à nouveau le dispositif constitué de deux éléments (figure III.7), le système matriciel global s'écrit :

$$\begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{14} & a_{13} & a_{14} & b_{13} & b_{12} \\ a_{21} + b_{41} & a_{22} + b_{44} & a_{23} & a_{24} & b_{43} & b_{42} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{34} & 0 & 0 & b_{33} & b_{32} \\ b_{21} & b_{24} & 0 & 0 & b_{23} & b_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_2 \\ \Delta\psi_3 \\ \Delta\psi_4 \\ \Delta\psi_5 \\ \Delta\psi_6 \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} A_1 + B_1 \\ A_2 + B_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{Bmatrix}$$

On souhaite bloquer le potentiel sur l'électrode 1 à la valeur V_1 et sur l'électrode 2 à la valeur V_2 [DHATT 81]. Lors du calcul de la solution approchée X_0 on fixera les potentiels $\psi_3 = \psi_4 = V_1$ et $\psi_5 = \psi_6 = V_2$. Il faut ensuite obtenir $\Delta\psi_3 = \Delta\psi_4 = \Delta\psi_5 = \Delta\psi_6 = 0$ comme solution du système global. Pour cela on choisit une constante arbitraire C grande devant les coefficients de la matrice et on transforme le système de la façon suivante :

$$\begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{14} & a_{13} & a_{14} & b_{13} & b_{12} \\ a_{21} + b_{41} & a_{22} + b_{44} & a_{23} & a_{24} & b_{43} & b_{42} \\ a_{31} & a_{32} & (C + a_{33}) & a_{34} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & (C + a_{44}) & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{34} & 0 & 0 & (C + b_{33}) & b_{32} \\ b_{21} & b_{24} & 0 & 0 & b_{23} & (C + b_{22}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\psi_1 \\ \Delta\psi_2 \\ \Delta\psi_3 \\ \Delta\psi_4 \\ \Delta\psi_5 \\ \Delta\psi_6 \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} A_1 + B_1 \\ A_2 + B_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

III.1.6 RESOLUTION DU SYSTEME LINEAIRE ASSEMBLE :

Plusieurs méthodes peuvent permettre de résoudre le système linéaire suivant :

$$[J_a(X_{0_a})] \cdot \{\Delta X_a\} = -F_a(X_{0_a})$$

Citons les méthodes directes comme :

- Gauss
- Crout

qui permettent de résoudre un système de ce type de manière sûre mais avec des temps de calcul et un encombrement mémoire importants.

Il existe également des méthodes itératives telles que celles du gradient conjugué [NOUGIER 87] ou du gradient conjugué carré qui sont rapides et utilisent peu de mémoire mais peuvent ne pas converger dans certains cas.

Pour notre problème, étant donné le nombre élevé de noeuds (> 500) nous utiliserons la méthode du gradient conjugué carré [SONNEVELD 89].

III.2 MODELISATION DE JONCTIONS ET HETEROJONCTIONS :

L'équation de Poisson ne donne que le potentiel électrostatique et ne tient donc pas compte de la nature des matériaux utilisés (différence des travaux de sortie et de dopage).

Les porteurs voient une composante supplémentaire de potentiel due aux différences des travaux de sortie .

III.2.1 JONCTION PN :

L'équation de Poisson ne prend pas en compte la tension de diffusion due à une différence de dopage. Il faut donc l'introduire sous forme d'une tension supplémentaire appliquée aux électrodes.

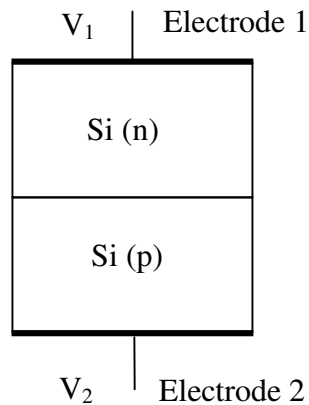


Figure III.8 :
Modélisation de la jonction PN.

$$V_1 = V_{\text{appliquée}} + V_{d1}$$

$$V_2 = V_{\text{appliquée}} + V_{d2}$$

avec $V_{d1} = \frac{kT}{q} \text{Log}\left(\frac{N_D}{n_i}\right)$ composante du potentiel de diffusion
appliquée à l'électrode 1

et $V_{d2} = - \frac{kT}{q} \text{Log}\left(\frac{N_A}{n_i}\right)$ composante du potentiel de
diffusion
appliquée à l'électrode 2

III.2.2 HETEROJONCTION Si/SiO₂ :

De la même façon, l'équation de Poisson ne tient pas compte de la barrière de potentiel qui apparaît à l'interface entre deux matériaux différents. Considérons le cas de l'hétérojonction SiO₂-Si (figure III.9).

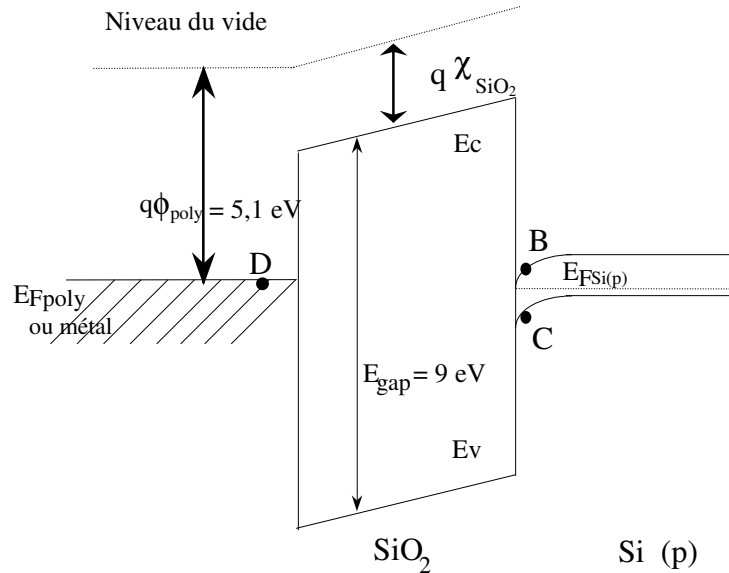


Figure III.9 :
Schéma de bandes de l'hétérojonction SiO₂-Si

Dans le cas d'un contact Si/SiO₂ l'énergie moyenne nécessaire à un électron situé dans la bande de conduction pour passer au niveau du vide est :

$$E_{\text{SiO}_2} = q\chi_{\text{SiO}_2}$$

Sur l'électrode au contact avec le SiO₂ on applique donc $q(\phi_{\text{poly}} - \chi_{\text{SiO}_2})$.

Au contact Si/SiO₂ l'électron situé en B dans la bande de conduction (figure III.9) voit une barrière de hauteur :

$$\Delta E_{\text{barrière électron}} = q\chi_{\text{SiO}_2} - q\chi_{\text{Si}}$$

le trou situé en C dans la bande de valence (figure III.9) voit lui la barrière :

$$\Delta E_{\text{barrière trou}} = q(\chi_{\text{SiO}_2} + E_{\text{gap SiO}_2}) - q(\chi_{\text{Si}} + E_{\text{gap Si}})$$

Donc à l'interface la différence de potentiel vue par les électrons est uniquement due à la différence des affinités électroniques.

En pratique on prend lors du calcul de la densité de courant , la différence de potentiel due à la structure de bandes :

pour les électrons :

$$\Delta\psi = -\chi_{\text{SiO}_2} - (-\chi_{\text{Si}})$$

pour les trous :

$$\Delta\psi = -\left(\chi_{\text{SiO}_2} + \frac{E_{\text{gapSiO}_2}}{q}\right) - \left(-\chi_{\text{Si}} - \frac{E_{\text{gapSi}}}{q}\right)$$

(cf chapitre II)

III.2.3 CONTACT SiO₂-METAL ou POLYSILICIUM :

L'électron du métal (ou polysilicium) situé en D (figure III.9) a une énergie par rapport au niveau du vide $E_F = q \cdot \phi_{\text{métal}}$. Pour passer dans la bande de conduction du SiO₂, il voit une barrière de hauteur :

$$\Delta E = q \cdot \chi_{\text{SiO}_2} - E_{F\text{métal}}$$

En pratique on prendra lors du calcul de la densité de courant :

$$\Delta\psi = -\chi_{\text{SiO}_2} - \left(-\frac{E_{F\text{métal}}}{q}\right)$$

III.2.4 HETEROJONCTION METAL-SiO₂-Si ou POLYSILICIUM-SiO₂-Si :

Pour tenir compte des différences des travaux de sortie entre le métal (ou le polysilicium) et le silicium, il faut appliquer une tension positive $V = -\phi_{\text{métal}}$ sur l'électrode du métal et une tension $V = -\chi_{\text{Si}} - \frac{E_{\text{gapSi}}}{2 \cdot q} - \frac{kT}{q} \text{Log}\left(\frac{N_a}{n_i}\right)$ sur l'électrode du silicium (dans le cas d'un silicium dopé P).

La tension de diffusion V_d obtenue entre ces deux électrodes s'écrit alors :

$$V_d = -\chi_{\text{Si}} - \frac{E_{\text{gapSi}}}{2 \cdot q} - \frac{kT}{q} \text{Log}\left(\frac{N_a}{n_i}\right) + \phi_{\text{métal}}$$

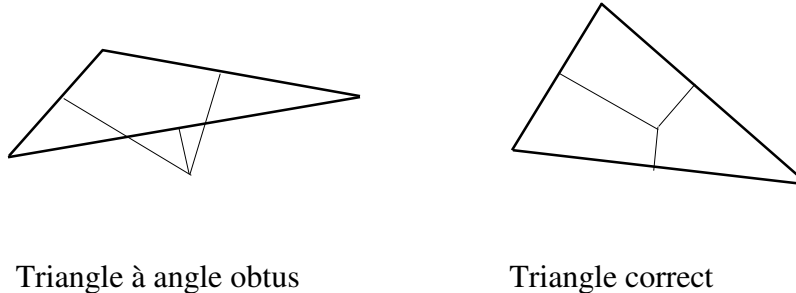
III.3 DIFFICULTES LIEES A LA RESOLUTION :

III.3.1 MAILLAGE DE LA STRUCTURE :

Les approximations sont d'autant meilleures que la solution varie peu à l'intérieur de l'élément. Pour obtenir une solution acceptable, les éléments devront donc être choisis suffisamment petits dans les zones à forte variation de potentiel ou de densité de charges.

Le maillage est le point délicat rencontré lors de toute simulation. Les contraintes sont de trois types :

- Adapter le maillage de manière à décrire toutes les variations (plus ou moins) brutales des grandeurs.
- Avoir un minimum de noeuds de façon à réduire les temps de calcul.
- Eviter la présence d'éléments à angle obtus qui posent des problèmes de convergence. En présence d'un triangle ayant un angle obtus, il est impossible d'associer une surface à ce noeud au sens où nous l'avons défini (figure 3.8).



Triangle à angle obtus

Triangle correct

Figure III.10 :
Différence entre un élément triangle correct et un
élément triangle incorrect.

La contrainte la plus difficile à satisfaire est l'adaptation du maillage aux variations des grandeurs dans la totalité du dispositif.

Pour serrer le maillage dans les zones à forte variation et le laisser lâche dans les zones à faible variation on utilise la procédure suivante :

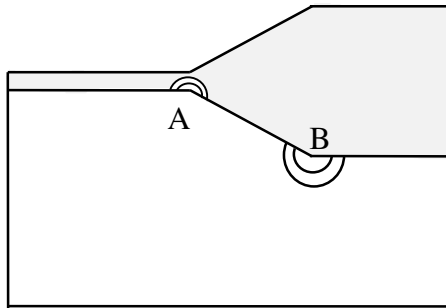
- création d'un maillage grossier.
- résolution du système d'équations (on obtient alors une solution très peu précise).
- calcul des variations des grandeurs dans chaque élément.
- correction du maillage par ajout de noeuds dans les éléments à forte variation.
- réitération des trois étapes précédentes jusqu'à obtention d'une précision acceptable sur le maillage.

Le logiciel raffine automatiquement le maillage de manière à obtenir des gradients convenables en tous noeuds du dispositif. Il est de plus capable de détecter tout élément à triangle obtus et de le transformer en élément correct sans intervention extérieure.

Lors de l'association de deux matériaux différents (deux sous-domaines), le maillage s'effectue d'un sous-domaine à l'autre sans discontinuité.

III.3.2 EFFETS DE POINTE :

La modélisation d'un dispositif à deux dimensions par des segments de droite entraîne la présence d'angles importants (points A et B figure III.11) susceptibles de créer un phénomène d'effet de pointe.



Les valeurs importantes des champs électriques calculés aux points A et B entraînent un fort piégeage ponctuel. Ce résultat n'étant évidemment pas correct, on cherche à modifier la géométrie du dispositif de façon à éviter les angles trop prononcés.

Figure III.11 :

Mise en évidence des effets de pointe aux points A et B

La solution adoptée passe par la création de points supplémentaires afin de minimiser l'angle entre deux segments, l'idéal étant de décrire un arc de cercle. La jonction entre les deux segments (S_1 et S_2 figure III.12) a donc été automatisée de façon à décrire un arc de cercle passant par A et B dont le centre O est calculé à partir des perpendiculaires à S_1 et S_2 et de la bissectrice de l'angle formé par les segments. L'utilisateur place les noeuds A et P (et définit les segments S_1 et S_2). Le logiciel calcule la perpendiculaire au segment S_1 passant le point A point le plus proche de l'intersection I (figure III.12). L'intersection de la médiatrice de l'angle formé par les deux segments et de la perpendiculaire donne alors le centre O du cercle. Le logiciel prolonge alors le segment S_2 de façon à obtenir le point B appartenant au cercle. Il ne reste plus qu'à diviser l'arc de cercle AOB en n segments par ajout de (n-1) noeuds.

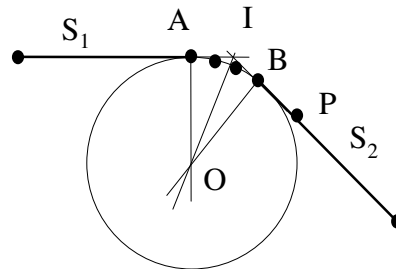


Figure III.12 :

Modification d'un angle afin de supprimer l'effet de pointe.

III.3.3 PROBLEMES DE CONVERGENCE :

Quelque soit la méthode de résolution utilisée, un mauvais conditionnement du système empêche la convergence vers la solution. Un système est mal conditionné si une infime variation sur le second membre entraîne une grande variation sur les inconnues, le système ne peut plus converger^[NOUGIER 87].

Ce cas s'est présenté dans diverses simulations faisant intervenir des zones à forte densité de charges (sous la grille d'un MOS en régime d'accumulation par exemple).

Le problème étant lié à la précision de la machine, la solution utilisée est le passage de la double précision (16 chiffres significatifs) à la quadruple précision (32 chiffres significatifs). D'autres méthodes comme la méthode du gradient conjugué issue de la méthode de la descente ont été programmées dans le logiciel et se sont avérées plus rapides lorsque le nombre de noeuds est important (>600). Dans la nouvelle version du logiciel (en cours de développement), l'utilisateur peut choisir la méthode de résolution à utiliser.

III.3.4 RECHERCHE DE L'ETAT D'EQUILIBRE :

Du fait de la très faible densité de porteurs libres dans le SiO₂, nous prenons comme hypothèse que la densité n_i dans le SiO₂ est négligeable devant d'une part la densité n_i dans le silicium et d'autre part devant le nombre de porteurs créés lors d'une irradiation.

Par ailleurs, lorsqu'on souhaite simuler un composant MOS (avec les équations utilisées) polarisé soumis à une irradiation, il est indispensable d'appliquer ces différentes contraintes (polarisation et irradiation) de manière successive et non simultanée. En effet, une perturbation trop importante du système entraînerait une forte divergence qui rendrait impossible le retour à la solution d'équilibre.

La mise en contact d'un matériau à base de silicium dopé et d'un oxyde supportant un contact en polysilicium crée un phénomène de déplacement de charges dans le silicium permettant de compenser les différences des travaux de sortie. Ce déplacement de charges induit alors un courant dans le silicium. Différentes conséquences apparaissent lors de la résolution numérique du système.

La perturbation due au déplacement des charges fait osciller fortement la solution du système avant qu'il atteigne son équilibre. L'obtention de l'équilibre passe par le piégeage de charges dans SiO₂, en effet :

1) Lors de l'oscillation, on enregistre de très fortes variations des densités de porteurs autour de leur position d'équilibre. C'est ainsi que les densités d'électrons et de trous varient autour de la valeur $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ (pour le silicium intrinsèque) et autour de $n_i=0$ pour l'oxyde. Les densités n et p peuvent donc devenir négatives dans l'oxyde (lors d'itérations intermédiaires permettant d'atteindre la solution).

2) Ces variations de densité de porteurs induisent un courant dans l'oxyde qui engendre évidemment un piégeage (car d'après notre modèle le piégeage est proportionnel au courant). Ce piégeage étant irréversible, l'oxyde reste chargé lorsqu'on atteint l'état d'équilibre.

La conséquence en est que l'on constate la présence de charges piégées dans le SiO_2 alors que les densités de porteurs libres étaient nulles avant et sont nulles après avoir atteint l'état stationnaire.

La recherche d'un état stationnaire se fait par l'application de petits pas de temps (à partir de l'état d'origine) de plus en plus importants jusqu'à ce que la variation de la densité de charges devienne négligeable sur tous les noeuds. On applique ensuite un pas de temps infini (grand devant les constantes de temps du système) pour obtenir l'état stationnaire.

Cette méthode a pour conséquence que s'il existe un courant (même très faible) dans l'oxyde, il entraînera un piégeage de charges pendant la recherche de l'équilibre.

Solution retenue :

La solution adoptée pour éviter le piégeage lors de la recherche de l'équilibre est la suppression des équations de piégeage pendant cette étape.

Le système peut alors osciller librement sans entraîner de piégeage intempestif. Une fois atteint l'état stationnaire, on résoud le système complet avec les 5 équations dont 2 de piégeage et on applique l'irradiation. L'irradiation se fera en régime dynamique en générant une petite dose à chaque pas de temps, dose suffisamment faible pour ne pas trop perturber le système et lui permettre de converger.

Remarque : Si la dose est trop importante, il suffira de réduire le pas de temps pour la diminuer.

CHAPITRE IV

**SIMULATIONS NUMERIQUES,
COMPARAISONS AVEC LES
RESULTATS EXPERIMENTAUX**

IV SIMULATIONS et EXPERIENCES :

Dans ce chapitre, nous abordons le cas concret de différents composants à structure MOS ayant subi une ou plusieurs irradiations.

Dans un premier temps, nous étudions l'irradiation d'une simple capacité construite par oxydation d'un substrat de type P, et dans un deuxième temps, nous étudions l'influence des charges piégées dans les structures parasites des transistors MOS.

IV.1 SIMULATION DU PIEGEAGE DE CHARGES DANS DIFFERENTS TYPES D'OXYDES :

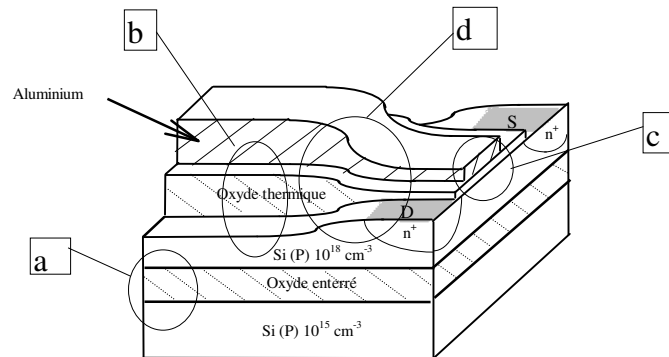


Figure IV.1 :

Structures utilisées pour la mesure de la charge piégée dans

- (a) l'oxyde enterré SIMOX.
- (b) l'oxyde thermique de grille (épais).
- (c) l'oxyde de grille (fin).
- (d) l'oxyde latéral parasite (bec d'oiseau).

Les caractéristiques physiques des matériaux utilisés sont données dans le tableau suivant.

<i>Oxyde de Silicium</i>	<i>Silicium</i>
Densité intrinsèque $n_i = 0 \text{ cm}^{-3}$	Densité intrinsèque $n_i = 1,45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
$E_{\text{gap}} = 9 \text{ eV}$	$E_{\text{gap}} = 1,12 \text{ eV}$
Affinité électronique = 1,12 eV	Affinité électronique = 4,05 eV
$\epsilon_{\text{SiO}_2} = \epsilon_r \cdot \epsilon_0 = 3,45 \cdot 10^{-11} \text{ F.m}^{-1}$	$\epsilon_{\text{SiO}_2} = \epsilon_r \cdot \epsilon_0 = 1,05 \cdot 10^{-10} \text{ F.m}^{-1}$
$\mu_n = 20 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\mu_n = 1500 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
$\mu_p = 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\mu_p = 450 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Facteur de génération $g_0 = 7,6 \cdot 10^{18} \text{ rad}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$	Facteur de génération $g_0 = 4 \cdot 10^{19} \text{ rad}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$

Tableau IV.1 :

Paramètres physiques utilisés pour les simulations.

IV.1.1 OXYDES A DENSITE DE PIEGES UNIFORME :

Dans certains types d'oxydes comme les oxydes enterrés SIMOX, les densités de pièges sont considérées comme uniformes dans tout l'oxyde. Les courbes expérimentales dont nous disposons ainsi que les données issue de la bibliographie^[PEYRE 91], nous ont permis d'affiner les paramètres de simulation tels que les densités de pièges et les sections efficaces de piégeage et de recombinaison.

La capacité MOS utilisée est contruite à partir d'un substrat P (10^{15} cm^{-3}) oxydé sur une épaisseur d'environ 4000 \AA . La couche de silicium a une épaisseur de $1 \mu\text{m}$. L'oxyde est recouvert par une couche d'aluminium de travail de sortie ϕ_{fAl} (paramètre que nous introduisons dans nos équations (cf Chapitre II)). On soumet cette structure à un champ électrique de $0,8 \text{ MV/cm}$ (ce qui correspond à une polarisation de 32 V). L'étude physique faite au chapitre II nous ayant permis de mettre en évidence l'influence du sens et de l'intensité du champ électrique sur le piégeage, nous appliquons lors de l'irradiation une polarisation positive puis nous recommençons la simulation en appliquant cette fois une polarisation négative et enfin une dernière simulation sera faite avec une polarisation nulle.

Pour chaque simulation, le volume de l'oxyde est discrétisé avec 40 noeuds selon l'axe y (figure IV.2).

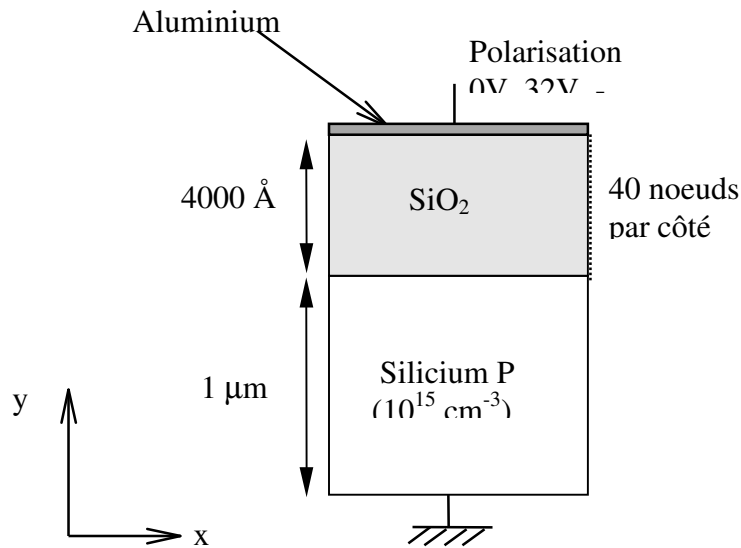


Figure IV.2 :

Capacité MOS utilisée pour la simulation.

$$\begin{aligned} \text{Avec } N_n &= 3.10^{17} \text{ cm}^{-3}, N_p = 10^{18} \text{ cm}^{-3}, N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \\ \sigma_{nt} &= 10^{-14} \text{ cm}^2, \sigma_{pt} = 3.10^{-14} \text{ cm}^2, \sigma_{nr} = 1,6.10^{-12} \text{ cm}^2, \\ \sigma_{pr} &= 4,8.10^{-12} \text{ cm}^2, \phi_{\text{fAl}} = 4,1 \text{ eV}. \end{aligned}$$

Le calcul de la tension de bande plate permet de comparer le résultat de la simulation avec les données expérimentales (figure IV.3).

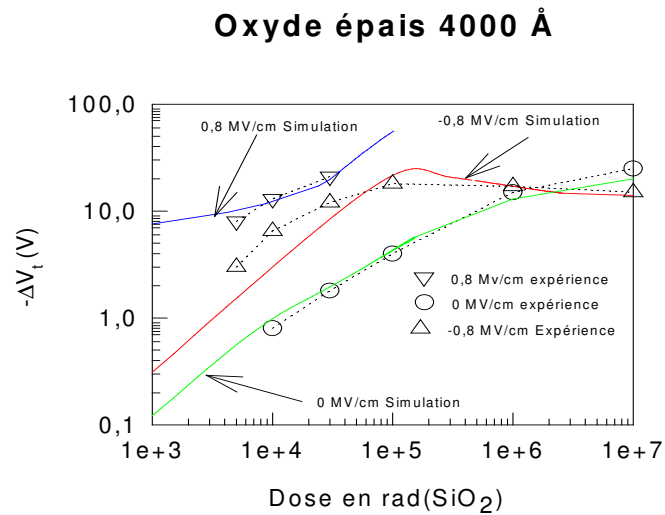


Figure IV.3 :

Dérive de la tension de bande plate avec la dose dans l'oxyde enterré.
Comparaison entre l'expérience et la simulation.

Ces résultats montrent une très bonne corrélation entre le calcul numérique et les valeurs expérimentales^[HERVE 93 a, b]. On voit apparaître une saturation pour la polarisation négative (-32 V) de la dérive vers 100 krad de dose.

Il est intéressant de connaître le profil des charges piégées dans l'oxyde lors de la saturation afin d'analyser ce phénomène. Pour cela nous utilisons les figures IV.4.a, b et c qui donnent les densités de charges piégées pour différentes doses (1 krad, 60 krad, 1Mrad).

Interprétation de la courbe obtenue pour E=-0,8 MV/cm :

Pour les "faibles" doses (jusqu'à 60 krad), la densité d'électrons piégés décroît linéairement avec la distance à l'interface et la densité de trous piégés décroît avec la distance à la grille (figures IV.4.a et IV.4.b).

L'augmentation de la dose jusqu'à 60 krad fait croître les maximums des densités de charges piégées (jusqu'à 10^{17} cm⁻³ pour les électrons) sans modifier la forme de leur distribution spatiale.

La variation de la tension de bande plate est exponentielle. Nous sommes dans le cas d'un piégeage concentré à l'interface SiO₂/Si (cf chapitre II).

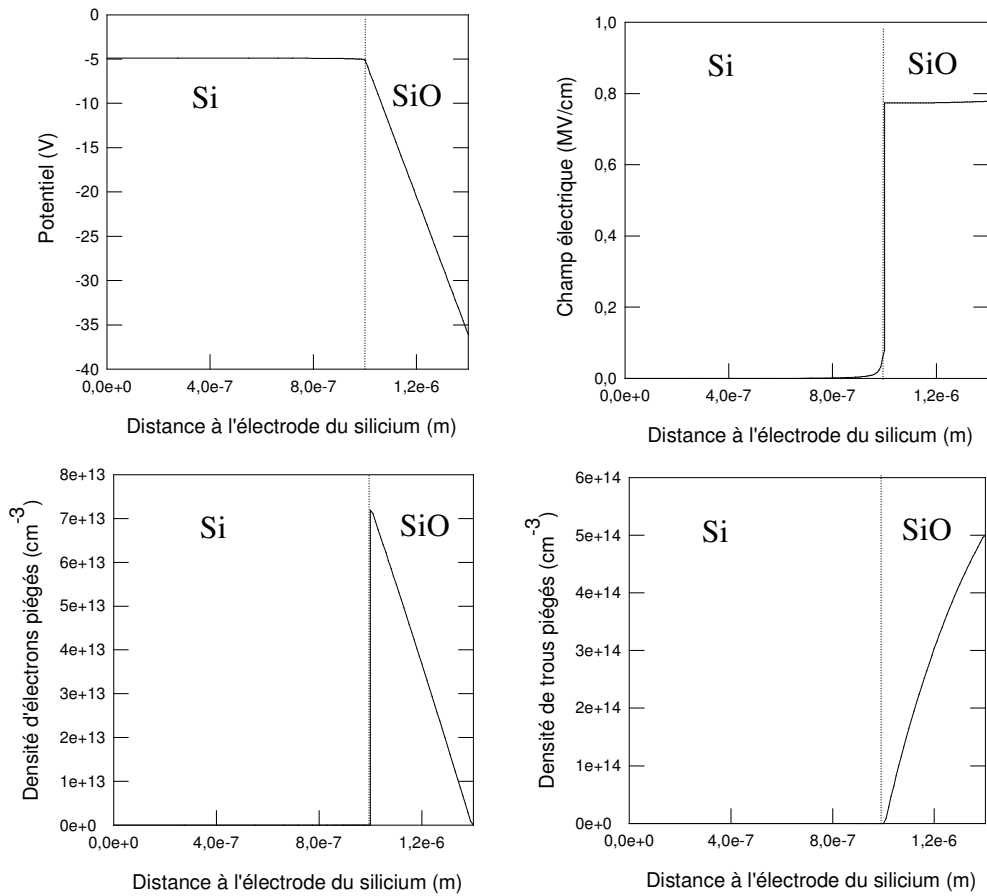


Figure IV.4.a :
Oxyde SIMOX, polarisation -32 V
Dose 1krad.

La densité maximale de trous piégés est plus importante ($5.10^{14} \text{ cm}^{-3}$) que la densité d'électrons ($7.10^{13} \text{ cm}^{-3}$) car le produit $N_p \cdot \sigma_{pt} = 3.10^4 \text{ cm}^{-1}$ est supérieur au produit $N_n \cdot \sigma_{nt} = 3.10^3 \text{ cm}^{-1}$ d'où $\frac{N_p \cdot \sigma_{pt}}{N_n \cdot \sigma_{nt}} \approx 8$. On retrouve le facteur 8 à 10 obtenu entre les densités d'électrons et de trous piégés.

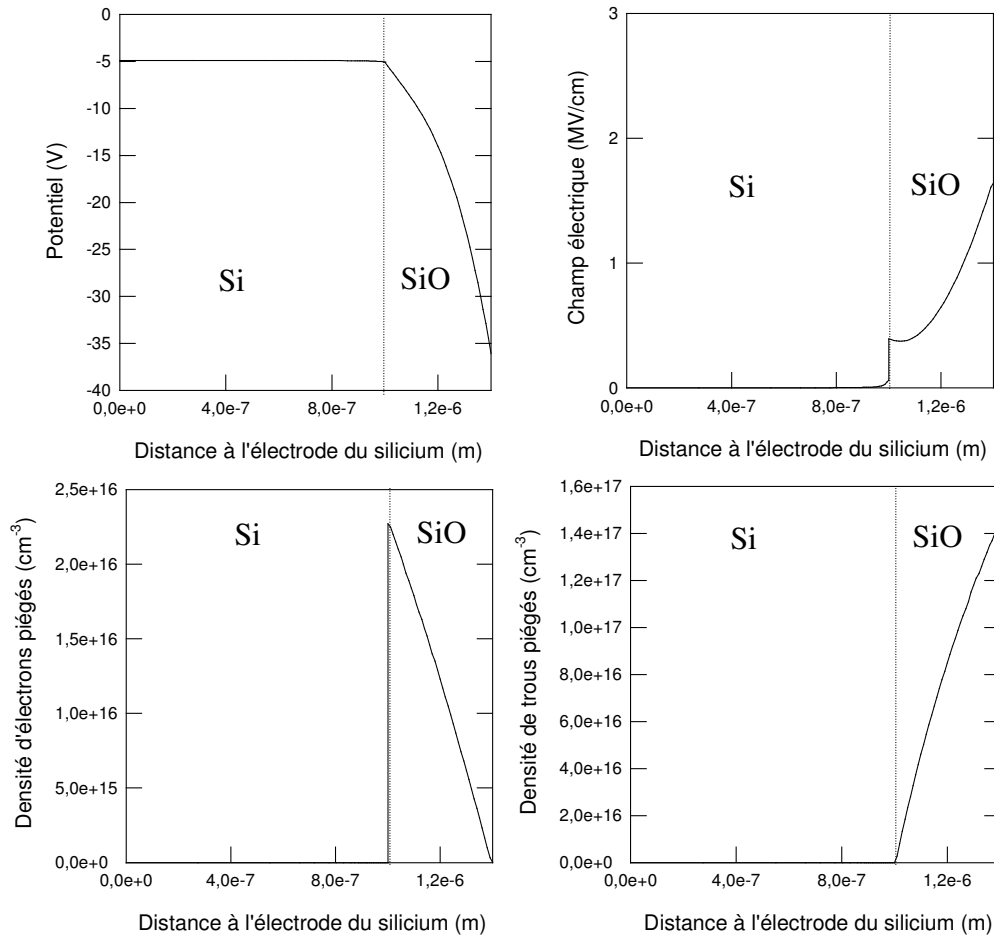


Figure IV.4.b :
Oxyde SIMOX, polarisation -32 V
Dose 60 krad.

Au dessus de 60 krad de dose (figure IV.4.c) on voit apparaître un second extrémum sur les courbes de densités d'électrons et de trous piégés. On remarque de plus que le deuxième extrémum associé aux électrons piégés est du même ordre de grandeur que le premier (contrairement à celui associé aux trous piégés).

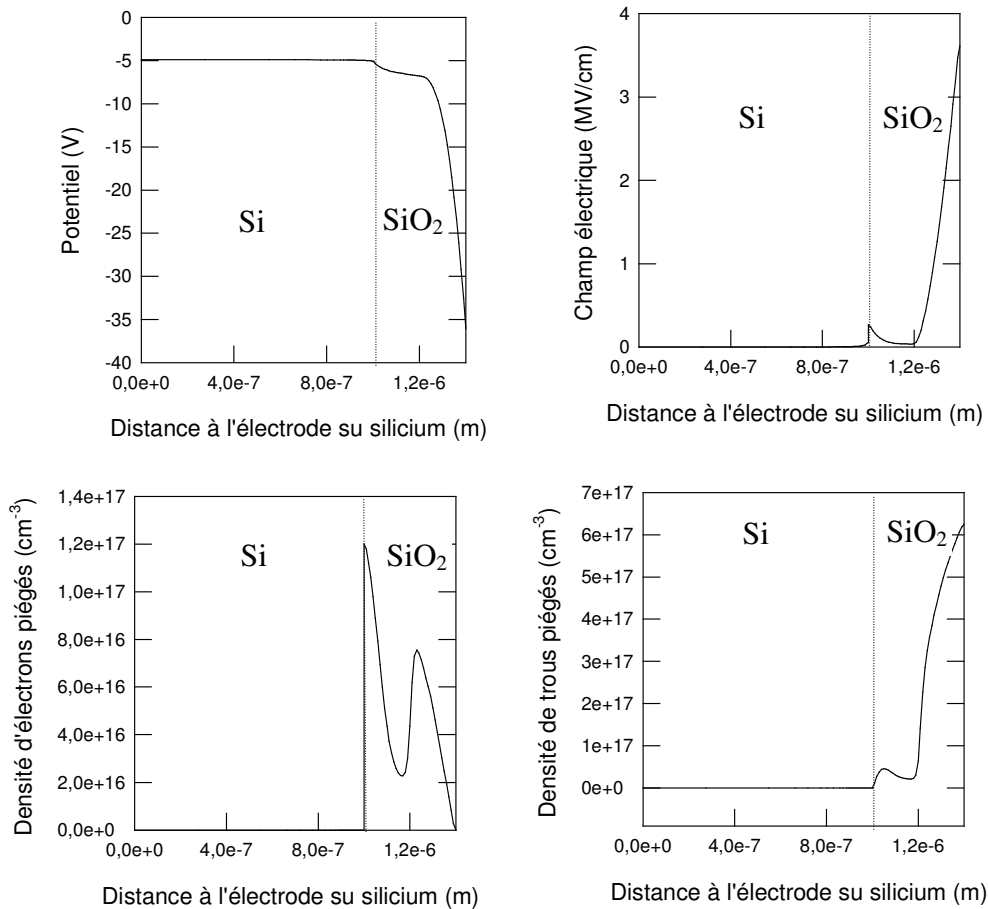


Figure IV.4.c :
Oxyde SIMOX, polarisation -32V
Dose 1 Mrad.

L'explication de l'apparition d'un second extrémum est donnée par l'étude du champ électrique interne de l'oxyde. Lors de l'absorption de "faibles" doses (< 60 krad), le champ électrique constant ($E = -0,8$ Mv/cm) au départ tant à augmenter côté grille et à diminuer côté interface (figure IV.5).

Pour des doses plus importantes (> 100 krad), le champ électrique présente un minimum à une distance de $0,4 \mu\text{m}$ de l'interface (phénomène d'effondrement du champ : "Field Collapse" (cf chapitre II)).

Le piégeage se fait alors de part et d'autre de ce minimum. La forte valeur du champ électrique côté grille entraîne une accélération et un piégeage important des électrons. Un second extrémum apparaît alors pour les densités d'électrons piégés.

On constate un phénomène semblable pour les trous mais beaucoup moins prononcé car le champ électrique côté interface est moins important.

Enfin, pour des doses plus importantes, le champ électrique devient minimum (presque nul) sur une distance importante favorisant la recombinaison des paires plutôt que le piégeage, il y a saturation du piégeage.

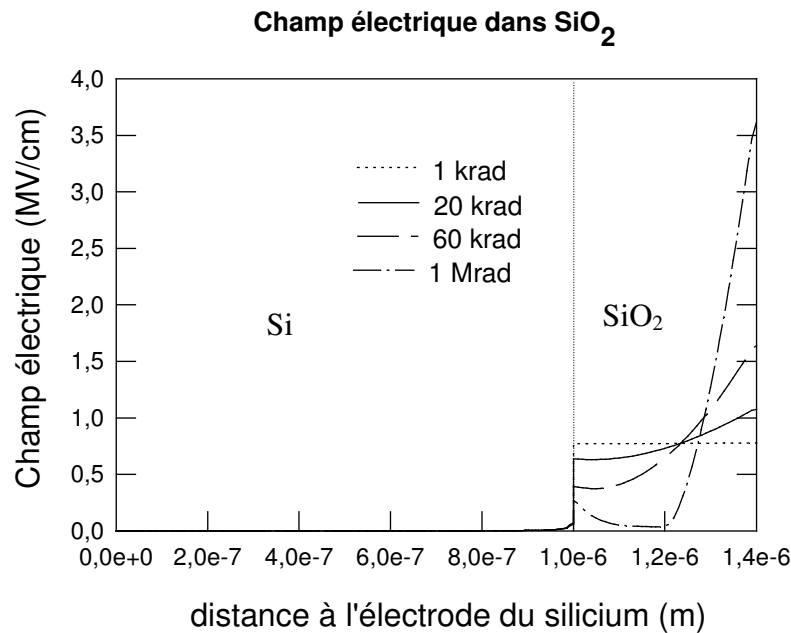


Figure IV.5 :
Modification du champ électrique interne pour
différentes doses.

IV.1.2 OXYDES A DENSITE DE PIEGES NON UNIFORME :

C'est le cas des oxydes thermiques qui, de par leur nature et la méthode de fabrication, ont des densités de pièges importantes à l'interface Si/SiO₂ diminuant de manière exponentielle lorsqu'on s'éloigne de l'interface. L'étude de ces oxydes sera abordée dans le paragraphe suivant lors de la simulation de capacités issues de la réalisation d'un bec d'oiseau.

IV.2 CAPACITES MOS ISSUES DE LA REALISATION D'UN BEC D'OISEAU :

Les données expérimentales fournies par le C.E.A de Bruyère-le-Châtel, nous ont permis, dans un premier temps, de valider notre modèle à une dimension à partir de résultats expérimentaux sur différentes structures MOS à canal n irradiées par un générateur X (Générateur Générax 50 keV) sous une tension de grille de 5V maintenue durant l'irradiation. Le maintien d'une tension positive sur la grille permet d'évacuer rapidement les électrons libres présents dans l'oxyde et d'éviter la recombinaison avec les trous libres. C'est le cas le plus défavorable que l'on peut rencontrer lors du fonctionnement.

IV.2.1 ETUDE ET COMPARAISON DES CAPACITES :

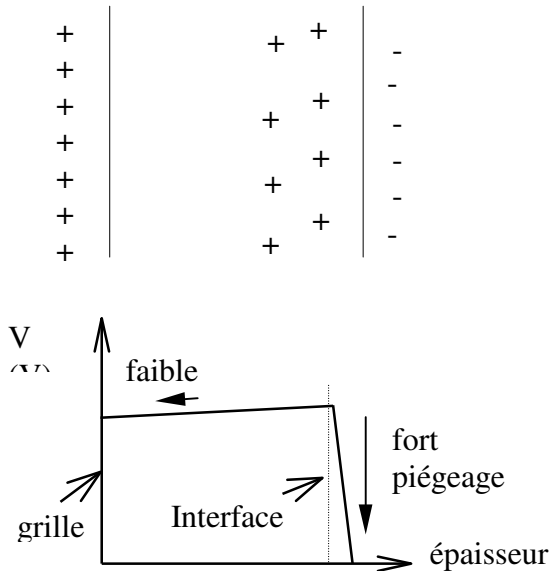
L'oxyde étudié est de type "oxyde thermique" et nous avons vu dans le chapitre II que la dérive de la tension de bande plate présente un phénomène de saturation pour les fortes doses (>1Mrad).

Une étude plus poussée nous permet de constater qu'à cette polarisation (5V) l'influence du piégeage des électrons peut être négligée. En effet, la polarisation positive entraîne les trous vers l'interface et évacue les électrons par la grille. Les électrons se piègent en partie lors de leur parcours dans l'oxyde et les trous sont poussés à l'interface sans qu'aucun d'eux ne puisse être évacué par la grille (il faut rappeler de plus que la densité de pièges est beaucoup plus importante à l'interface que dans le reste de l'oxyde, ce qui engendre un fort piégeage interfacial). Le piégeage de trous est donc plus important à l'interface que le piégeage d'électrons et d'après l'étude du chapitre II (cf § II.2.3), le fait que la dérive de la tension de bande plate soit négative et ne présente pas de maximum marqué nous permet de conclure que l'influence des trous doit être seule prise en compte.

Une fois éliminé le terme de piégeage des électrons, il est maintenant inutile de conserver le terme de recombinaison d'un trou libre avec un électron piégé car il n'y a plus d'électrons piégés, on prend donc $\sigma_{nt} = \sigma_{nr} = 0$.

Le phénomène de saturation de ΔV_{FB} avec la dose peut être abordé de la manière suivante :

La densité de pièges n'étant pas uniforme sur tout l'oxyde, le piégeage des charges se fait préférentiellement dans une zone déterminée proche de l'interface. Cette accumulation de charges entraîne la création d'un fort champ électrique interne qui s'oppose au déplacement des charges positives et interdit leur piégeage.



Comme nous l'avons souligné dans le chapitre II, l'oxyde thermique présente une densité de pièges plus importante à l'interface SiO_2/Si que dans le reste de l'oxyde.

Figure IV.6 :
Position des pièges dans l'oxyde.

En utilisant le modèle de décroissance exponentielle de la densité de pièges^[PAILLET 95] en fonction de la distance à l'interface, on retrouve par simulation numérique la variation de la tension de bande plate expérimentale.

$$N_p(x) = N_{p0} \cdot \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)$$

En prenant :

N_{p0} = densité de pièges à trous à l'interface

$\lambda = 20 \text{ \AA}$ en supposant que les pièges s'étendent sur quelques dizaines d'Angströms.

Une étude quantitative permet de valider l'hypothèse d'un piégeage interfacial et de connaître précisément la densité N_p . Si on suppose que la densité de charges proches de l'interface et piégées en volume peut s'exprimer sous la forme d'une densité surfacique, on pourra utiliser la formulation simplifiée du chapitre II. On rappelle que cette formulation donne rapidement et sans avoir recours à la simulation la variation ΔV_{FB} en fonction de la dose.

C'est dans le cadre de cette hypothèse qu'il a été possible de déterminer la densité de pièges surfaciques à partir des mesures expérimentales de ΔV_t . Nous utilisons ce résultat pour déterminer la densité volumique N_{p0} .

Soit N_{pSurf} la densité surfacique équivalente de pièges, on écrit alors :

$$\int_0^{e_{ox}} N_{p0} \cdot \exp\left(\frac{x - e_{ox}}{\lambda}\right) dx = \int_0^{e_{ox}} N_{pSurf} \delta(x - e_{ox}) \cdot dx$$

$\delta(x)$: Fonction de Dirac.

e_{ox} : Epaisseur de l'oxyde.

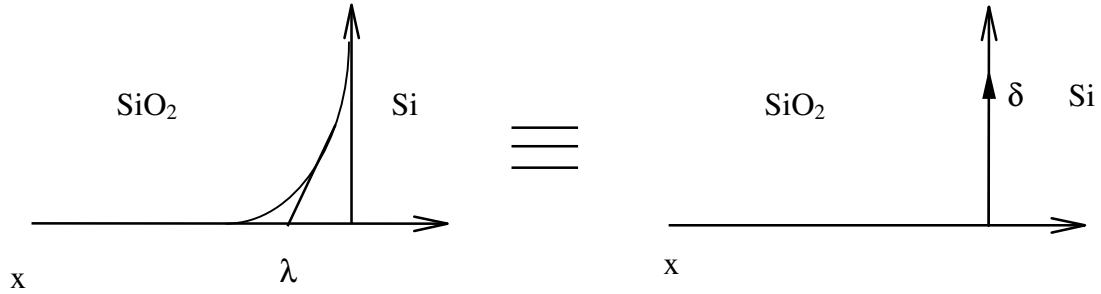


Figure IV.7 :

Equivalence entre les charges distribuées près de l'interface et le modèle de la distribution surfacique (fonction de Dirac).

$$\text{Ce qui donne : } N_{pSurf}(x = e_{ox}) = N_{p0} \cdot \lambda \cdot \left[\exp\left(\frac{x - e_{ox}}{\lambda}\right) \right]_0^{e_{ox}} = N_{p0} \cdot \lambda \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{e_{ox}}{\lambda}\right) \right)$$

En utilisant l'équation donnée dans la chapitre II :

$$\Delta V_{FB_{trou}}(D) = -q \cdot \frac{e_{ox}}{\epsilon_{SiO_2}} \cdot \left(N_{pSurf} \cdot \left(1 - \exp\left(-\sigma_{pt} \cdot g_0 \cdot Y(E) \cdot D \cdot e_{ox}\right) \right) \right)$$

on déduit à partir des valeurs expérimentales de σ_{pt} et N_{pSurf} la valeur de N_{p0} .

Pour l'oxyde thermique de 4000 Å l'expérience donne :

$$N_{pSurf} = 8,4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ et } \sigma_{pt} = 1,8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2.$$

$$\text{d'où : } N_{p0} = \frac{N_{pSurf}}{\lambda \left(1 - \exp\left(-\frac{e_{ox}}{\lambda}\right) \right)} \approx \frac{N_{pSurf}}{\lambda}$$

approximation vraie si $e_{ox} \gg \lambda$.

$$N_{p0} = 4,2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3} \text{ (pour 4000 Å avec } \lambda = 20 \text{ Å)}$$

De même pour un oxyde fin (175 Å), on trouve expérimentalement une densité surfacique de charges $N_{p\text{Surf}} = 3,29 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ce qui donne :

$$N_{p0} = 1,65 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ (pour 175 Å avec } \lambda = 20 \text{ Å)}$$

$$\text{ici : } \sigma_{pt} = 1,27 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 \text{ (donné par l'expérience)}$$

Remarques :

L'oxyde de grille (oxyde fin) est traité ici, pour simplifier le modèle, comme un oxyde thermique de même type que l'oxyde épais. Il faudra donc faire un compromis pour le choix des valeurs de λ et N_{p0} . La solution retenue consiste à prendre pour les deux épaisseurs la même valeur de λ (donné dans la littérature) et à ajuster N_{p0} . Le fait de prendre une valeur identique de λ pour les deux épaisseurs d'oxyde permet de maintenir une continuité dans la distribution des pièges dans l'oxyde pour la simulation (figure IV.8).

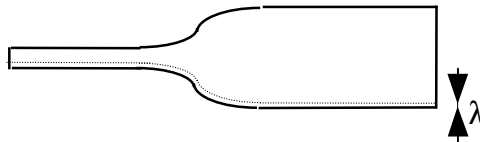


Figure IV.8 :

Distance λ à l'interface.

Afin de rendre le piégeage maximum (cas le plus défavorable), on prendra, pour commencer, la plus forte valeur de la densité de pièges ($N_{p0} = 4,2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) puis nous ajusterons cette valeur en fonction des résultats obtenus. Les sections efficaces de piégeage ayant des valeurs semblables pour les deux épaisseurs, nous utiliserons arbitrairement la section efficace de l'oxyde épais (en prenant la section efficace de l'oxyde fin, nous constatons que les variations sont négligeables sur les résultats de la simulation).

L'oxyde épais (4000 Å) :

Les données expérimentales dont nous disposons pour l'oxyde épais (4000 Å) ont été effectuées sur l'oxyde de grille d'un transistor MOS fabriqué à partir d'un substrat de silicium dopé p (10^{18} cm^{-3}). La représentation des variations du courant ($I_d = f(V_{gs})$) en conduction sous le seuil pour différentes doses permet de connaître la variation de la tension de seuil (et donc de la tension de bande plate).

Nous rappelons que la conduction sous le seuil est issue d'un courant de diffusion entre le drain et la source lorsque le transistor est en régime de faible inversion^[SZE 71].

Pour obtenir ces conditions, il faut polariser faiblement la grille (typiquement $< 2V$ ici), et garder une tension V_{ds} entre drain et source telle que $\exp(\frac{q}{kT} V_{ds}) \ll 1$ [Annexe V].

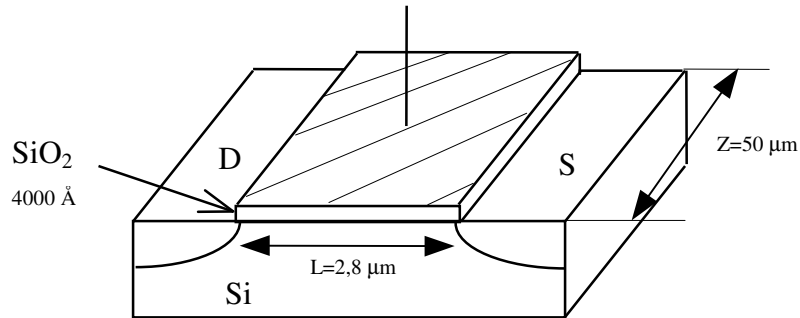


Figure IV.9 :
Transistor MOS utilisé pour l'étude de l'oxyde épais.

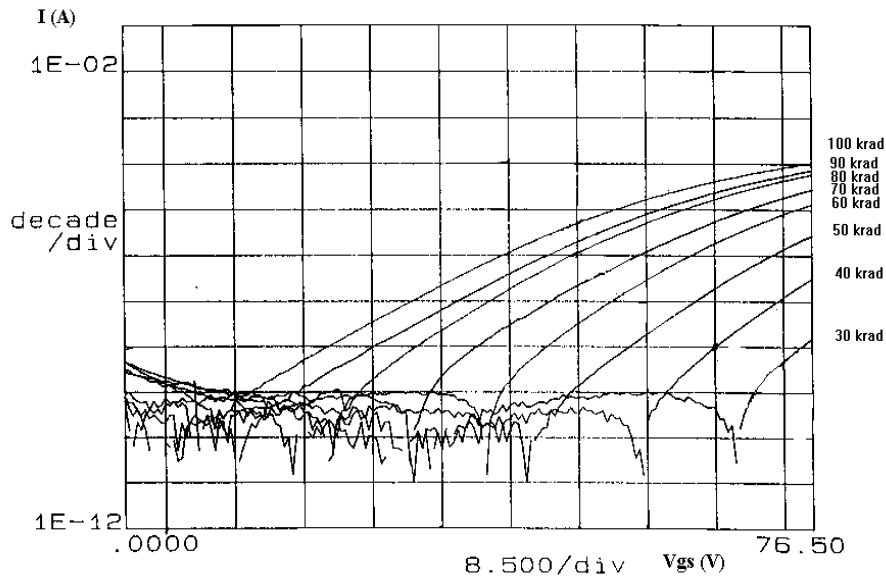


Figure IV.10 :
Courbe de courant (oxyde épais)^[FERLET-CAVROIS 93].

On considère le transistor passant lorsque $I > I_{bruit}$. La tension de seuil mesurée pour une dose donnée n'est pas égale à la tension de bande plate, mais les variations des tensions de seuil et de bande plate sont identiques en fonction de la dose (pour des doses inférieures à 1Mrad)^[HERVE 91].

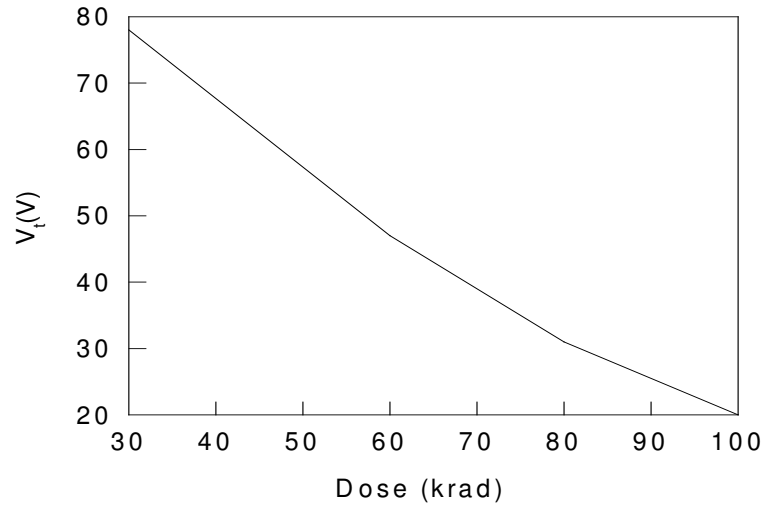


Figure IV.11 :

Dérive de la tension V_t avec la dose. La tension V_t est rapportée des courbes $I_d(V_g)$ à $V_d = 1V$ et $I_d = 10\text{ nA}$.

($V_{\text{grille}} = 5\text{ V}$ lors de l'irradiation).

En utilisant la relation entre la dose et la dérive de la tension de seuil :

$$\Delta V_{t_{\text{trou}}}(D) = -q \cdot \frac{e_{\text{ox}}}{\epsilon_{\text{SiO}_2}} \cdot \left(N_{\text{pSurf}} \cdot \left(1 - \exp\left(-\sigma_{\text{pt}} \cdot g_0 \cdot Y(E) \cdot D \cdot e_{\text{ox}} \right) \right) \right)$$

que l'on écrit sous la forme :

$$\ln\left(\frac{d\Delta V_{t_{\text{trou}}}(D)}{dD}\right) = \ln\left(\frac{q \cdot \sigma_{\text{pt}} \cdot g_0 \cdot Y(E) \cdot e_{\text{ox}}^2}{\epsilon_{\text{SiO}_2}} \cdot N_{\text{pSurf}}\right) - \sigma_{\text{pt}} \cdot g_0 \cdot Y(E) \cdot D \cdot e_{\text{ox}}$$

C'est l'équation d'une droite en coordonnées semi-logarithmiques.

La représentation des variations de $\ln\left(-\frac{d\Delta V_t}{dD}\right)$ en fonction de la dose (figure IV.12) permet de déterminer les constantes a et b et d'en déduire σ_{pt} et N_{pSurf} .

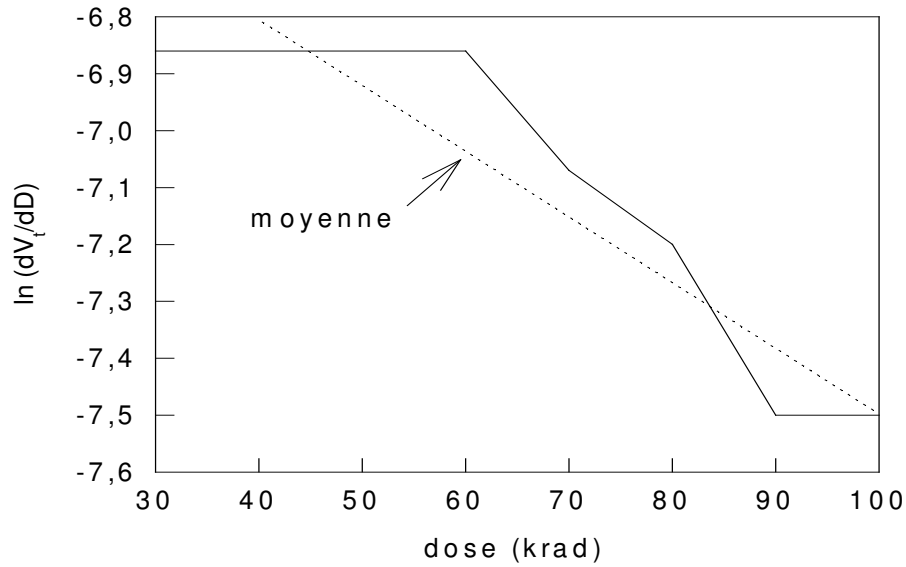


Figure IV.12 :
Variations de $\ln(dV_t/dD)$ en fonction de la dose.

On en déduit :

$$\sigma_{pt} = 1,8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$$

$$N_{p\text{Surf}} = 8,4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2} \Rightarrow N_{p0} = 4,2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Les valeurs de la section efficace et de la densité volumique de pièges trouvées expérimentalement sont utilisées directement dans la simulation.

Le tracé en fonction de la dose de ΔV_t pour l'expérience et ΔV_{FB} pour la simulation permet, après recentrage de V_t , de faire apparaître une très bonne corrélation entre la simulation et l'expérience (figure IV.13).

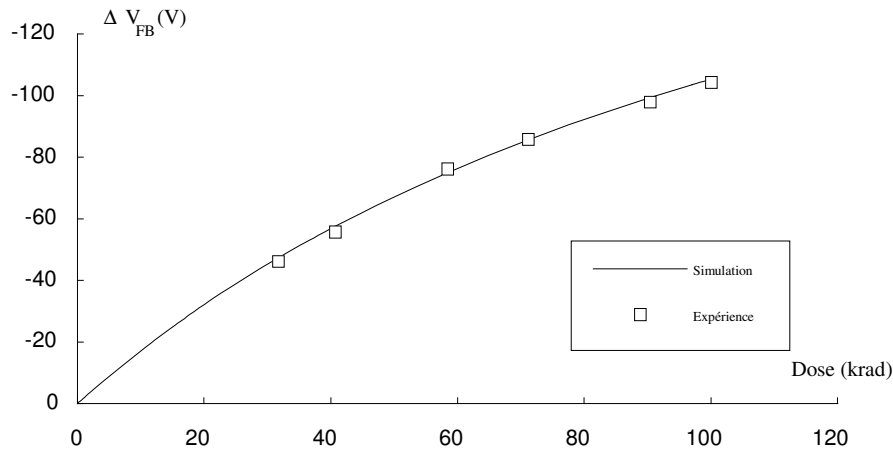


Figure IV.13 :

Evolution de ΔV_{FB} en fonction de la dose pour l'oxyde épais. La simulation est effectuée avec $N_{p0} = 4,22 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $\sigma_{pt} = 1,8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$.

L'oxyde fin (175 Å) :

Les données expérimentales disponibles sont celles d'un transistor NMOS fermé (figure IV.14) polarisé à $V_{ds} = 0,1 \text{ V}$ et dont on a tracé la variation du courant I_d par rapport à V_{gs} pour différentes doses. En faisant le même traitement que pour l'oxyde épais, on obtient :

$$\begin{aligned} \sigma_{pt} &= 1,27 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 \\ N_{p\text{Surf}} &= 3,29 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \quad \Rightarrow \quad N_{p0} = 1,65 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \end{aligned}$$

Dans un transistor fermé, le piégeage des charges dans l'oxyde épais ne perturbe pas la conduction du canal. En effet, seul l'oxyde de grille a une interface commune avec le canal, ce dernier ne pourra donc être perturbé que par les charges piégées dans l'oxyde de grille. On peut donc étudier dans un tel transistor la contribution unique des charges piégées dans l'oxyde de grille (oxyde fin de 175 Å).

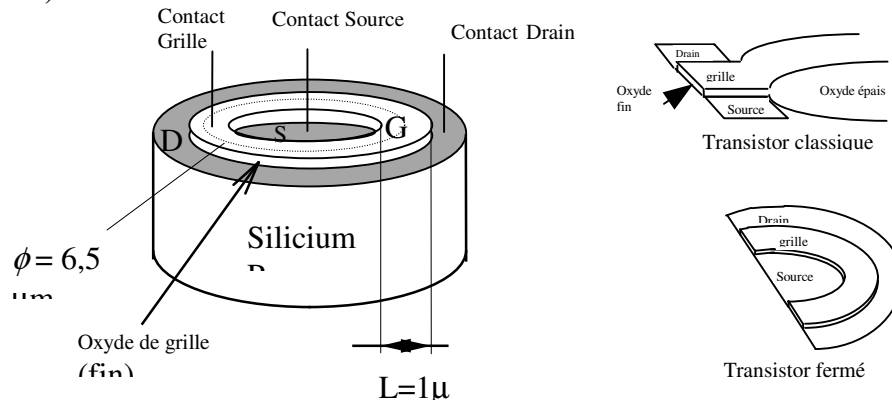


Figure IV.14 :

Vue du transistor fermé.

De même que pour l'oxyde épais, nous traçons la variation de la tension de seuil en fonction de la dose à partir des courbes expérimentales $I_d=f(V_{gs})$ pour différentes doses et nous effectuons un recentrage de la courbe obtenue par simulation numérique $\Delta V_{FB}= f(\text{Dose})$.

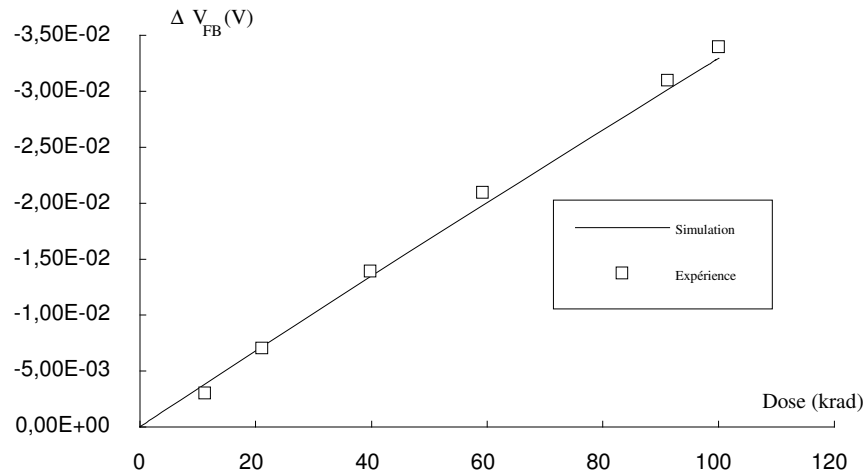


Figure IV.15 :

Evolution de ΔV_{FB} en fonction de la dose pour l'oxyde fin. La simulation est effectuée avec : $N_{p0} = 3.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $\sigma_{pt} = 1,27.10^{-13} \text{ cm}^2$.

On obtient là aussi une bonne corrélation avec l'expérience en utilisant la valeur de la section efficace trouvée expérimentalement et en agissant uniquement sur la densité de pièges à trous (pour la simulation nous prenons $N_{p0} = 3.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ alors que l'expérience donne $N_{p0} = 1,65.10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

Le nombre de charges générées étant proportionnel au volume du matériau irradié, le nombre de charges susceptibles d'être piégées est faible et la dérive de la tension de seuil n'est ici que de quelques dizaines de millivolts. La dérive de la tension est linéaire en fonction de la dose, nous sommes dans le cas d'une très faible dose (voir chapitre II).

IV.3 ANALYSE DU PROBLEME DU BEC D'OISEAU :

Dans le cas d'une structure à deux dimensions (bec d'oiseau), la simulation numérique ne permet pas de calculer la tension de seuil globale sur une épaisseur d'oxyde variable. Seul le calcul de la tension de seuil en chaque point de l'interface est possible. Il sera alors possible à partir des valeurs de V_t de déterminer les zones sensibles du bec d'oiseau.

Calcul de la tension ΔV_{FB} en un point de l'interface ($\Delta V_{FB(local)}$):

A partir du maillage du dispositif, il est possible de calculer la variation de la tension de bande plate à partir du premier moment de la charge. Nous avons vu au chapitre II qu'il est défini par la relation :

$$\Delta V_{FB(local)} = \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_0^e q_{ox}(y) \cdot y \, dy$$

Cette relation étant vraie pour une capacité (MOS) c'est-à-dire un dispositif à une dimension.

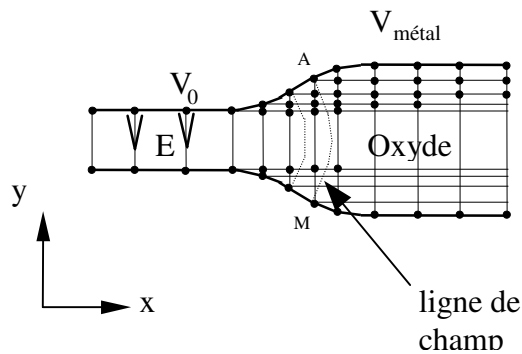


Figure IV.16 :
Maillage et lignes de champ.

La généralisation à deux dimensions est faite en évaluant l'intégrale curviligne $\frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_s q_{ox}(s) \cdot s \, ds$ suivant une ligne de champ dans l'oxyde partant de l'électrode et arrivant à l'interface Si-SiO₂.

Considérons un élément courant triangulaire. Si l'élément courant est rectangulaire on le décompose en deux éléments triangulaires. Soit A le point de l'élément appartenant à la ligne de champ déterminée dans l'élément précédent. A partir du point A, on détermine dans l'élément courant l'équipotentielle qui est une droite AC (approximation linéaire du potentiel dans l'élément). On en déduit la ligne de champ AB perpendiculairement à AC. On détermine par interpolation la charge $q_{ox}(s)$ associée au point courant sur AB et on calcule l'intégrale [Annexe IV] suivante à partir de l'abscisse curviligne s_0 du point A. On réitère l'opération sur chacun des éléments rencontrés jusqu'à l'interface Si/SiO₂ (figure IV.17 a, b).

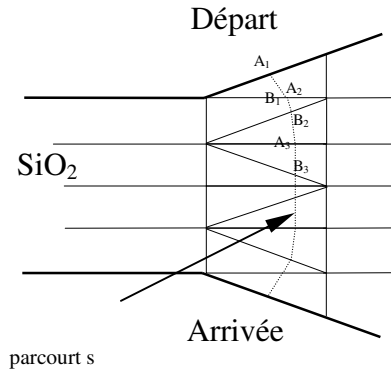


Figure IV.17.a :
Décomposition de la ligne de champ
sur plusieurs éléments.

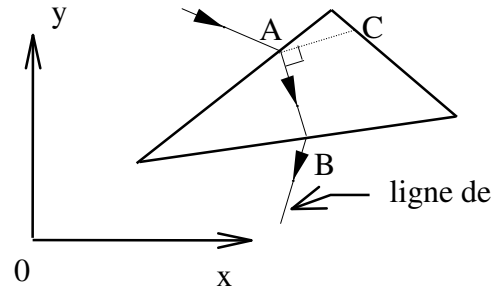


Figure IV.17.b :
Ligne de champ traversant
un élément.

$$\Delta V_{FB(\text{local})} = \frac{1}{\epsilon} \int_{\text{grille}}^{\text{interface}} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds = \frac{1}{\epsilon} \int_{A_1}^{B_1} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds + \frac{1}{\epsilon} \int_{A_2}^{B_1} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds + \dots + \frac{1}{\epsilon} \int_{A_n}^{B_n} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds$$

On définit θ comme l'angle que fait la portion de ligne de champ AB avec l'axe Oy (figure IV.17.b). Selon que l'angle est supérieur ou inférieur à 45° , on projette la droite AB sur l'axe Ox ou sur l'axe Oy.

Les grandeurs a, b, et c sont définies en annexe [Annexe IV].

Si $\text{tg}\theta > 1$:

$$\frac{1}{\epsilon} \int_{A_1}^{B_1} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds = \frac{1}{2\Delta \cos^2 \theta} \left[x^2 \left\{ \left(\frac{a_i}{2} + \left(\frac{b_i + c_i \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) \cdot x \right) \cdot q_i + \left(\frac{a_j}{2} + \left(\frac{b_j + c_j \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) \cdot x \right) \cdot q_j + \left(\frac{a_k}{2} + \left(\frac{b_k + c_k \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) \cdot x \right) \cdot q_k \right\} \right]_A^B$$

Si $\text{tg}\theta < 1$:

$$\frac{1}{\epsilon} \int_{A_1}^{B_1} q_{\text{ox}}(s) \cdot s \cdot ds = \frac{1}{2\Delta \sin^2 \theta} \left[y^2 \left\{ \left(\frac{a_i}{2} + \left(\frac{b_i \cdot \cot \theta + c_i}{3} \right) \cdot y \right) \cdot q_i + \left(\frac{a_j}{2} + \left(\frac{b_j \cdot \cot \theta + c_j}{3} \right) \cdot y \right) \cdot q_j + \left(\frac{a_k}{2} + \left(\frac{b_k \cdot \cot \theta + c_k}{3} \right) \cdot y \right) \cdot q_k \right\} \right]_A^B$$

Avec Δ : Aire du triangle

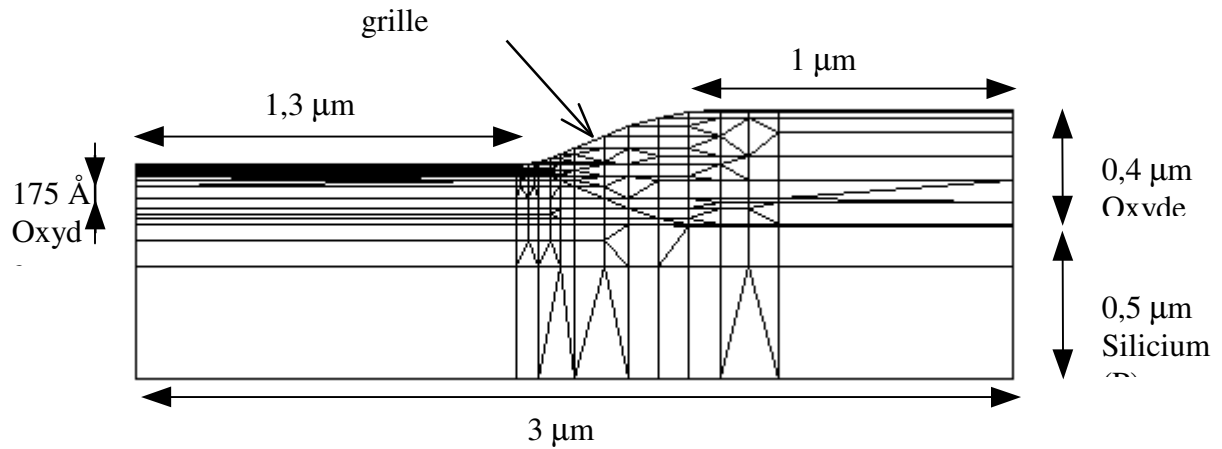


Figure IV.18 :

Maillage utilisé pour la simulation (environ 400 noeuds)
 Avec $N_p = 4,22 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma_{pt} = 1,54 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$, $\lambda = 20 \text{ \AA}$, $\chi_{\text{Poly}} = 5,1 \text{ eV}$.

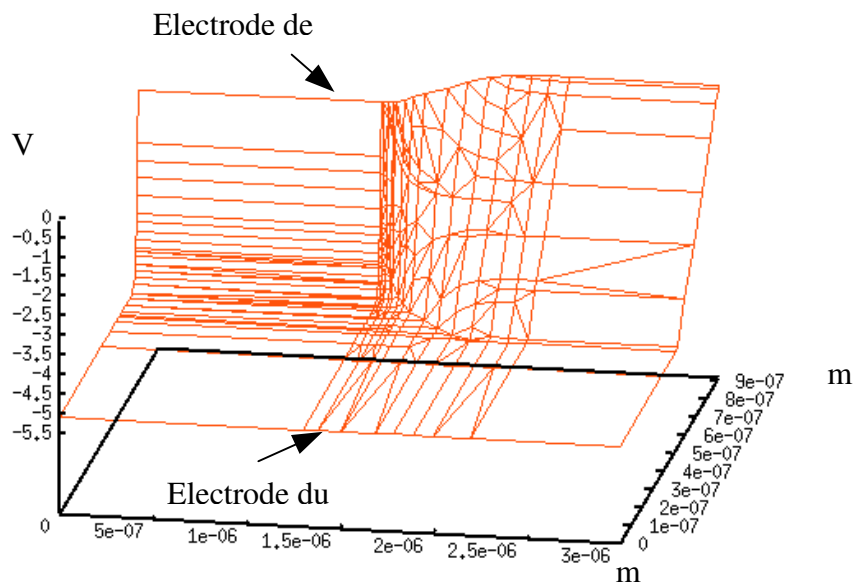


Figure IV.19 :

Profil du potentiel dans le bec d'oiseau avant irradiation.
 Polarisation de 5V sur la grille.

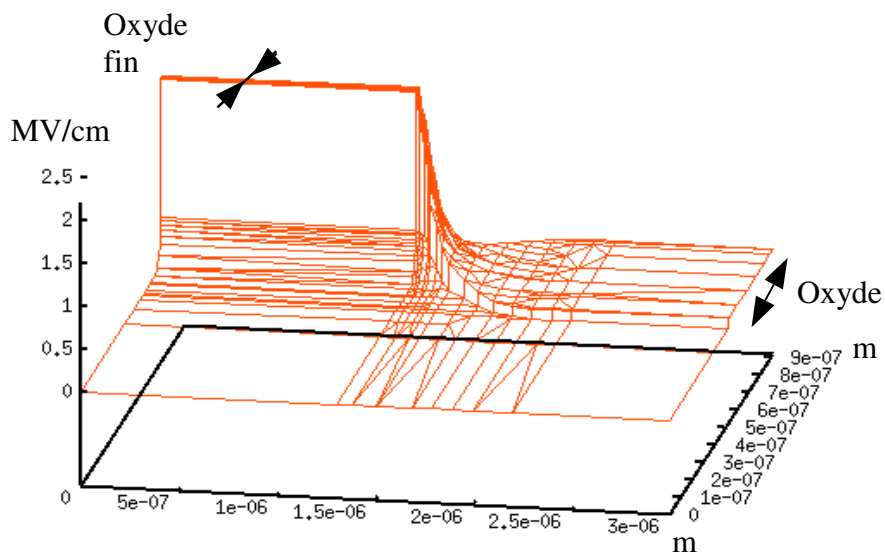


Figure IV.20 :
 Profil du champ électrique dans le bec d'oiseau avant irradiation
 Polarisation de 5V sur la grille.

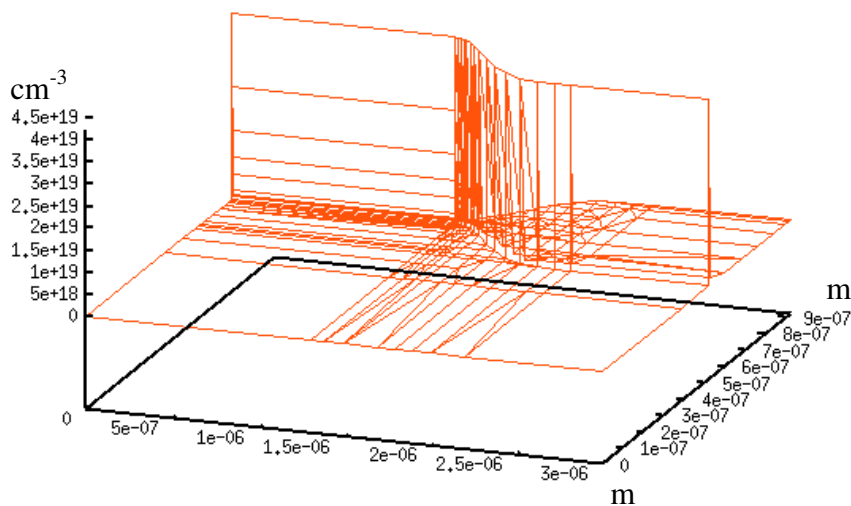


Figure IV.21 :
 Profil exponentiel (utilisé dans la simulation)
 de la densité de pièges à trous dans SiO₂.

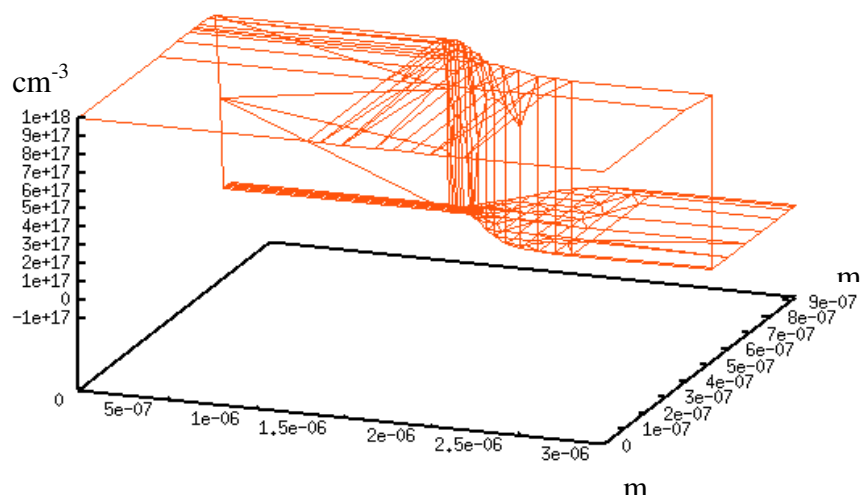


Figure IV.22 :
Densité de trous libres dans le silicium
pour une polarisation de 5V sur la grille.

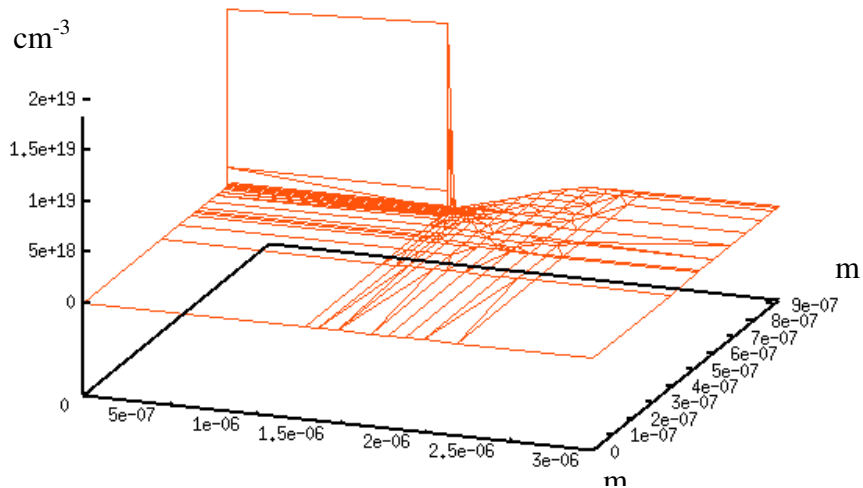


Figure IV.23 :
Densité d'électrons libres dans le silicium
pour une polarisation de 5V sur la grille.

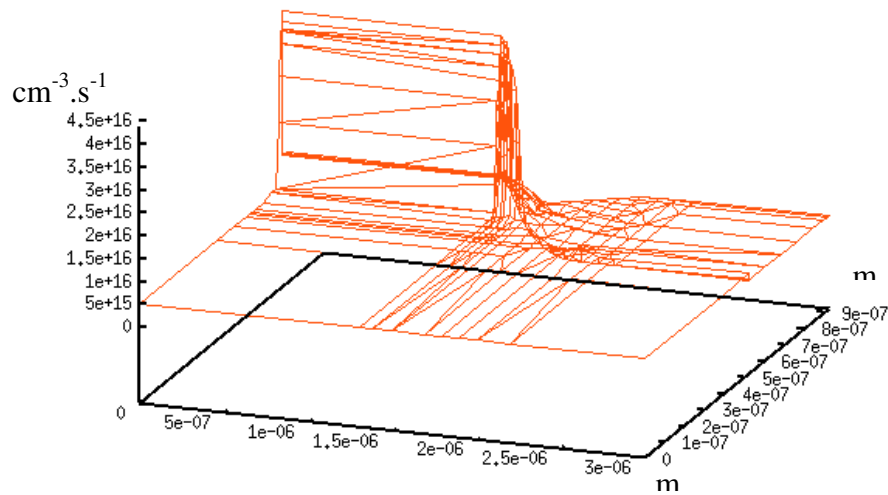


Figure IV.24 :

Répartition de la génération de charges dans le dispositif au début de l'irradiation pour un incrément de dose de 200 rad et une polarisation de 5V sur la grille.

Après absorption d'une dose de 60 krad, la densité de trous piégés a augmenté considérablement dans l'oxyde épais (figure IV.26). Ces trous piégés à proximité de l'interface attirent les électrons libres du silicium. La densité d'électrons libres augmente à l'interface SiO₂/Si côté silicium et la zone d'inversion s'étend vers l'oxyde épais (figure IV.28 et IV.29).

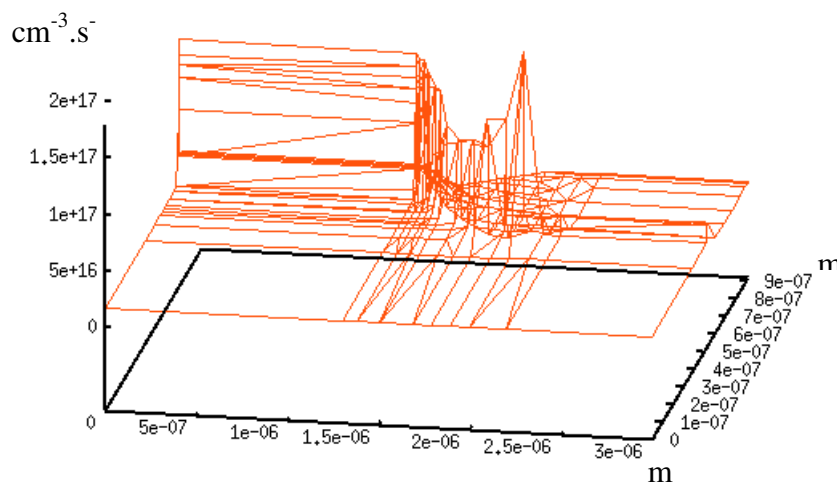


Figure IV.25 :

Répartition de la génération de charges dans le dispositif à la fin de l'irradiation pour une dose de 60 krad et une polarisation de 5V sur la grille.

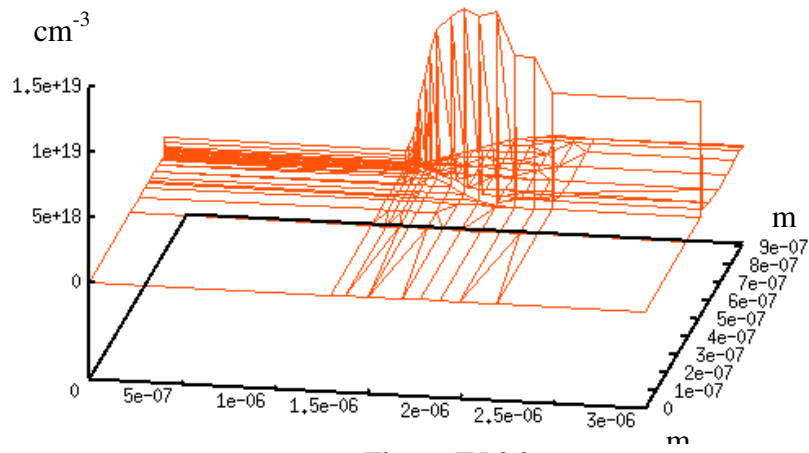


Figure IV.26 :

Densité de trous piégés pour une dose de 60 krad sous une polarisation de 5V sur la grille.

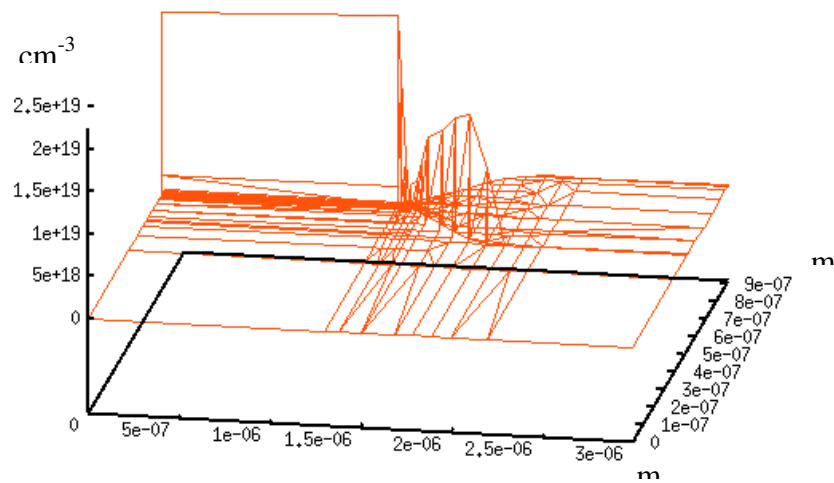


Figure IV.27 :

Densité d'électrons libres dans le silicium pour une dose de 60 krad sous une polarisation de 5V sur la grille.

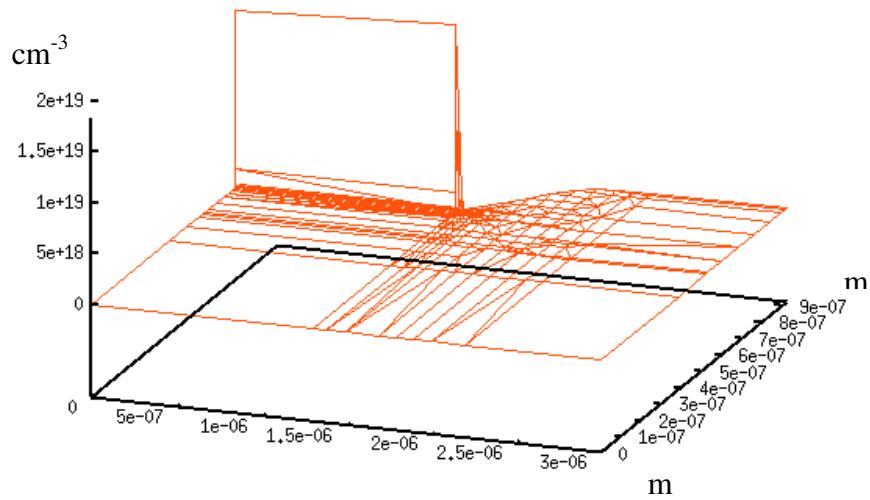


Figure IV.28 :
Densité d'électrons libres dans le silicium avant l'irradiation
sous une polarisation de 5V sur la grille.

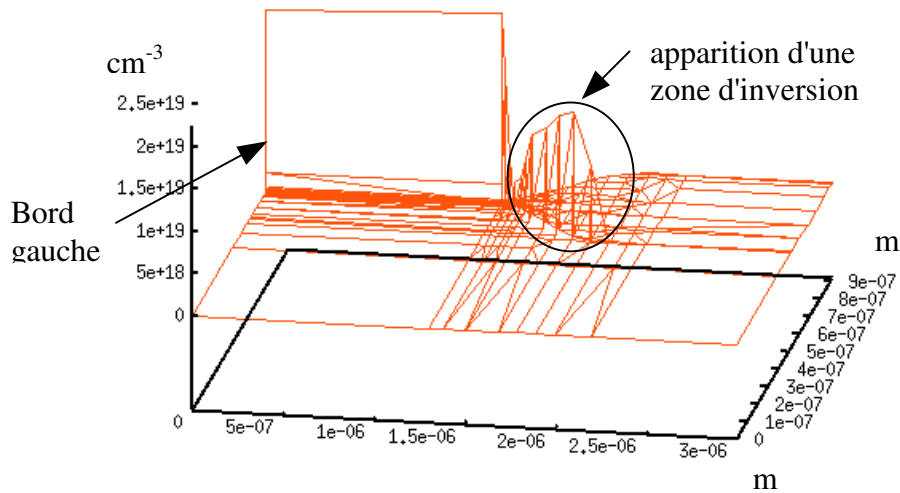


Figure IV.29 :
Densité d'électrons libres dans le silicium pour une dose de 60 krad
sous une polarisation de 5V sur la grille.

La zone d'inversion créée lors de l'irradiation reste présente lorsque l'on dépolarise de dispositif (Figure IV.30). Cette zone d'inversion crée un canal de conduction du transistor alors que ce dernier n'est pas polarisé. Il faut appliquer une forte polarisation négative (quelques volts) pour faire disparaître l'inversion.

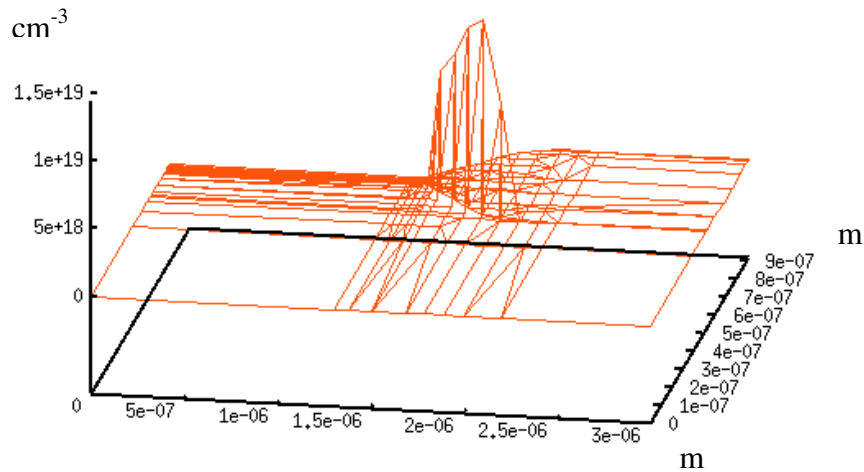


Figure IV.30 :
Densité d'électrons libres dans le silicium pour une dose de 60 krad
sous une polarisation de 0V sur la grille.

Le canal créé (sous l'oxyde fin) par la polarisation de 5V sur la grille a disparu mais le canal parasite créé par les charges piégées dans l'oxyde reste ouvert alors que la polarisation est nulle. Les charges piégées perturbent aussi le potentiel dans l'oxyde (figure IV.31).

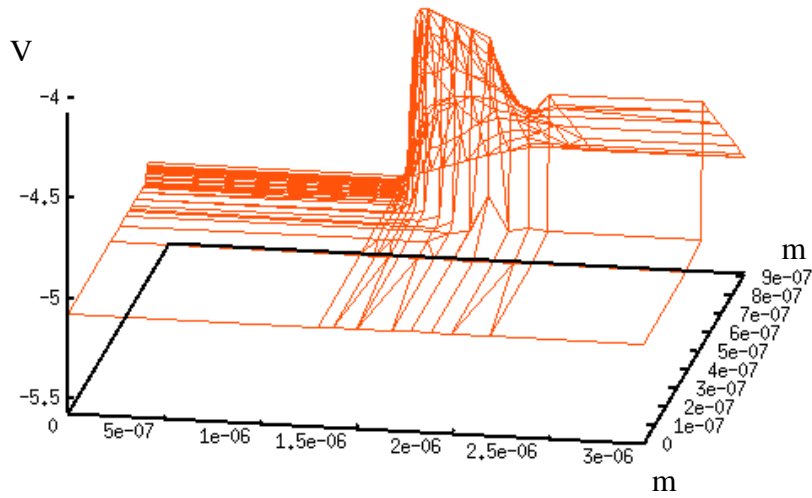


Figure IV.31 :
 Forme du potentiel dans le dispositif après une dose de 60 krad
 sous une polarisation de 0V sur la grille.

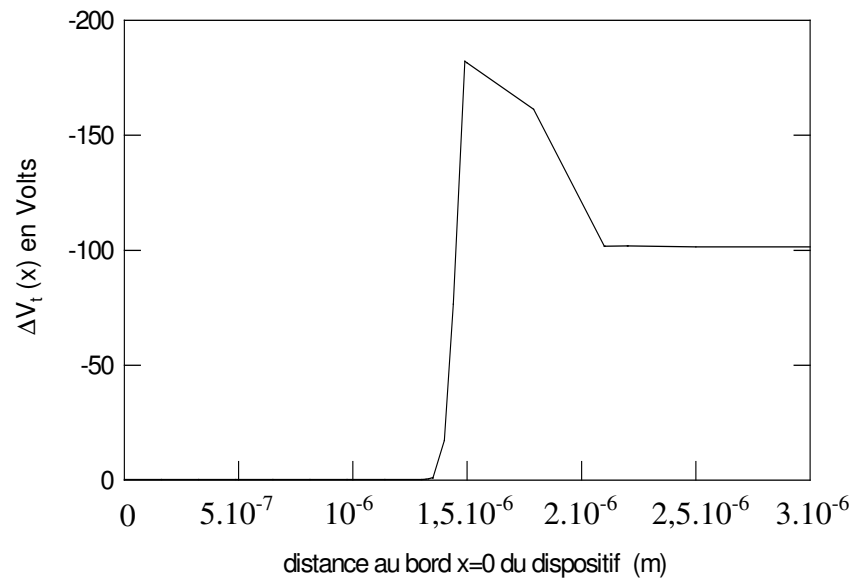


Figure IV.32 :
 Variation de la tension de seuil le long de l'interface Si/SiO₂
 pour une dose de 100 krad.

Le tracé de la variation de la tension de seuil le long de l'interface Si/SiO₂ (figure IV.32) permet de retrouver les résultats obtenus lors de l'étude de l'oxyde épais seul et de l'oxyde fin seul. Rappelons que pour l'oxyde fin on avait $\Delta V_t = -0,035V$ (donc très faible) à 60 krad et pour l'oxyde épais $\Delta V_t = -100V$ variations que l'on retrouve dans les parties gauche et droite de la courbe ci-dessus.

De plus, on constate que ΔV_t a une plus grande valeur dans la zone de transition entre l'oxyde fin et l'oxyde épais que dans l'oxyde épais. Ce phénomène est dû au fait que les trous piégés dans la zone de transition sont bien sûr piégés à l'interface mais aussi à une distance éloignée de l'interface, alors que dans l'oxyde épais, le piégeage est confiné à la périphérie de l'interface.

La densité de trous piégés est plus importante dans l'oxyde épais que dans la zone de transition, mais le piégeage s'étend moins loin dans l'oxyde épais (figure IV.29).

Le pic constaté sur la courbe ΔV_t pour $x = 1,5 \mu m$ entraîne une accumulation d'électrons et donc crée une zone d'inversion (figure IV.32). Un canal de conduction parasite s'est formé et restera ouvert même lorsque la polarisation de la grille deviendra nulle (figure IV.33)

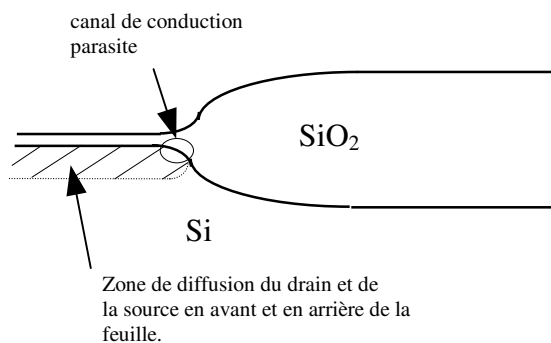


Figure IV.33 :
Canal parasite créé lors de l'irradiation.

Conclusion :

A partir des données expérimentales disponibles, nous avons pu retrouver par la simulation numérique les variations de la tension de seuil pour deux types d'oxydes de fabrication différente.

Pour le premier, à densité de pièges uniforme, nous avons obtenu de manière précise le profil des charges piégées pour une dose de 100 krad et nous avons donné grâce à cela une interprétation sur la variation de ΔV_t .

Pour le second type d'oxyde à densité de pièges concentrés à l'interface, deux épaisseurs d'oxyde ont été étudiées pour lesquelles nous avons obtenu une bonne corrélation avec les résultats expérimentaux.

Dans la dernière partie, la simulation 2D a permis de visualiser le profil et la densité des charges piégées dans un bec d'oiseau.

CONCLUSION :

Dans ce travail nous avons étudié le transport et le piégeage des charges dans la silice. Pour cela nous avons utilisé un modèle simple faisant intervenir les équations classiques de transport dans les semiconducteurs auquel nous avons ajouté une équation de piégeage pour chaque type de porteurs. Diverses lois ont été introduites permettant de tenir compte des phénomènes constatés expérimentalement (fonction rendement, modification de la section efficace de piégeage avec le champ électrique, etc ...). Nous avons utilisé de manière classique la méthode de Raphson-Newton pour linéariser les équations et pour la résolution du système linéaire nous avons employé la méthode "moderne" du gradient conjugué carré, économique en mémoire et très efficace pour les maillages complexes.

La modélisation de capacité MOS a nécessité la prise en compte de la différence des travaux de sortie entre les matériaux ainsi que l'introduction d'une barrière de potentiel à l'interface. Une importante difficulté a été rencontrée lors de la modélisation de la zone d'inversion forte dans laquelle d'énormes densités de courants de diffusion s'opposent à des densités de courants de conduction tout aussi importantes. Ces deux courants devant s'annuler parfaitement et la précision de la machine (10^{-32}) étant directement en cause, la solution que nous avons adoptée pour des raisons de rapidité de mise en oeuvre a été d'augmenter la précision en travaillant en quadruple précision.

La simulation d'un oxyde ayant une densité uniforme de pièges a permis de mettre en évidence la présence d'un piégeage complexe faisant intervenir les effets d'effondrement du champ électrique interne et de recombinaison des charges libres avec des pièges occupés. Ceci a été rendu possible grâce à la présence d'un grand nombre de noeuds dans l'oxyde et à la périphérie de l'interface dans le silicium. Le calcul de la variation de la tension de seuil a permis de valider les résultats issus de la simulation par comparaison avec les résultats expérimentaux.

La modélisation de dispositifs à deux dimensions (bec d'oiseau) a nécessité le développement d'un module d'assistance pour l'utilisateur lors de la création de dispositif afin de minimiser les effets de pointes dus à la géométrie. L'évaluation de la tension de seuil en chaque point de l'interface SiO_2/Si a permis de mettre en évidence de l'influence des charges piégées sur la création d'un canal parasite dans le silicium.

Le logiciel développé dans le laboratoire permet de simuler en deux dimensions la génération et le piégeage des charges aussi bien dans les structures SiO_2/Si que dans tout autre type de structures et hétérojonctions.

Les améliorations en cours de développement permettront de modéliser la cinétique de piégeage sur plusieurs niveaux pièges ainsi que la simulation en trois dimensions nécessaire pour l'étude complète d'un transistor MOS (complet avec ses oxydes latéraux, LOCOS, etc ...) soumis à une irradiation.

Bibliographie :

[ANAPRO]

ANAPRO,
Tenue aux radiations,
Tome 1, Anapro S.A.R.L.

[BARR 85]

T.L. BARR, B. KRAMER, S.I. SHAH, M. RAY, J.E. GREENE,
Esca Studies of the Valence band and loss spectre of semiconductors films,
Mat. Res. Soc. Symp. ,47, 1985.

[BOESCH 76]

H.E. BOESCH, Jr. and J.M. McGARRITY,
"Charge yield and dose effects in MOS capacitors at 80 K"
IEEE Trans. Nucl. Sci. ,NS-23,6,p. 1520-1525,1976.

[COHEN 69]

M.H. COHEN, H. FRITZSCHE, S.R. OVSHINSKY,
"Simple band model for amorphous semiconducting alloys"
Phys. Rev. Lett.,22,20, p. 1065, 1969.

[COTTREL 79]

P.E. COTRELL; E.M. BUTURLA,
"Two dimensionnal static and Transient Simulation of mobile carrier transport in a semiconductor"
proceeding of NASECODE I conférence, Boole Press, Dublin, Ireland, 31-64 (1979).

[CURTIS 77]

O.L. CURTIS, Jr. and J.R. SROUR,
"The multiple trapping model and hole transport in SiO₂",
J. Appl. Phys, 48, 9, p.3819-3828, 1977.

[DATT 81]

G. DATT; G. TOUZOT,
"Une présentation de la méthode des éléments finis"
Edition MALOINES S.A., Les presses de l'Université Laval Québec 1981.

[Der-SUN LEE]

Der-SUN LEE and CHUNG-YU CHAN,
"Oxide charge accumulation in metal oxide semiconductor devices during radiation",
J.Appl.Phys. **69**, 10, 1991.

[DEVINE 94]

R. A. B. DEVINE,
"The structure of SiO₂, its defects and radiation hardness"
IEEE Tran. Nucl. Sci., **NS-41**,3,1994.

[DIMITRIJEV 88]

S.DIMITRIJEV, S.GOLUBOVIC, D.ZUPAC, M.PEJOVIC and N.STOJADINOVIC,
"Analysis of gamma-radiation induced instability mechanisms in CMOS transistors".
Solid State Electronics Vol.32, **5**, pp.349-353, 1989.

[DOZIER 87]

C.M. DOZIER, D.M. FLEETWOOD, D.B.BROWN and P.S. WINOKUR,
"An evaluation of low energie X.Ray and Cobalt 60 Irradiations of MOS Transistors",
IEEE Trans. Nucl. Sci., **NS 34**, p.1535, 1987.

[FERLET-CAVROIS 93]

V. FERLET-CAVROIS, O.MUSSEAU, J.L. LERAY, Y.M. COÏC,
"Heavy Ion Sensitivity of a SRAM in SOI Bulk like Technology",
Second European Conference in Radiation and its effects on Components and Systems,
RADECS, 1993.

[FLAMENT 94]

O. FLAMENT,
"Utilisation des sources X pour l'évaluation du durcissement, le contrôle et la mise au
point de process"
Journée d'étude RADECS, 1994.

[HENISCH 87]

H.K. HENISCH and J.C. MANIFACIER,
"Space charge conduction and relaxation in diélectric films"
J. Appl. Phys. **61**, 10, 1987.

[HERVE 93 a]

D. HERVE, Ph. PAILLET, J.L. LERAY,
"Space charge effects in SIMOX Buried Oxides"
Second European Conference in Radiation and its effects on Components and Systems,
RADECS, 1993.

[HERVE 93 b]

D. HERVE,
"Effets a long terme des rayonnements dans les structures Métal-Oxyde-Semiconducteur. Application aux dispositifs atransfert de charge."
Thèse de l'Université de PARIS XI (ORSAY),1993.

[HUGHES 78]

R.C. HUGHES,
"Time resolved hole transport in a-SiO₂"
Solid State Electronics, **21**,p.251,1978.

[KENKARE 89]

P.U. KENKARE and S.A.LYON,
"Relationship between trapped holes, positive ions and interface strates in irradiated Si-SiO₂ Structure"
App. Phys . Lett.,**55**, 2, p.2328 1989.

[KRANTZ 87]

R.J. KRANTZ, Lee WAUKERMAN, and T.C. ZIETLOW
"Applied field and total dose dependence of trapped charge builup",
IEEE Trans. Nucl. Sci. , **NS-34**, 6, 1987.

[LERAY 89]

J.L. LERAY
Thèse "Contribution à l'étude des phénomènes induits par les rayonnements ionisants dans les structures à effet de champ au silicium ou à l'arseniure de gallium utilisées en microélectronique".
Université de Paris-Sud Centre d'Orsay, 1989.

[LUCOVSKY 79]

G. LUCOVSKY,
"Defect controlled carrier transport in amorphous SiO₂"
Philos. Mag. B, **39**, 6, p.531-540, 1979.

[MATHIEU 87]

H. MATHIEU,
"Physique des semiconducteurs et des composants électroniques"
Ed. MASSON, 1987.

[MICHEZ 91]

A. MICHEZ,
"Simulation numérique de la collection des charges induites par ion lourd dans une diode silicium."
Thèse Université de Montpellier II, 1991.

[MICHEZ 91]

A. MICHEZ, G. BORDURE,
"Transient simulation of silicon devices under high carrier injection. Comparaison of various stepping schemes."
Nascode VII conference, Compel, 1991.

[MOREAU 93]

Y. MOREAU, F. PELANCHON et Al.,
Paper 1-6, 30th annual
IEEE Nuclear and Space Radiation Effects Conference, Snow Bird, UTHH, 1993.

[MOTT 77]

N.F. MOTT, A.M. STONEHAM,
"The Lifetime of electrons, holes and excitons before self-trapping"
J. Phys. C Solid State Phys., **10**, p.3391, 1977.

[MOTT 65]

N.F. MOTT and H.S.W. MASSEY,
"The Theory of atomic collisions"
Oxford University Press, London, 1965.

[NICOLLIAN 82]

E.H. NICOLLIAN and J.R. BREWS,
"MOS Physics and Technology",
Wiley Interscience, New York, 1982.

[NING 74]

T.H. and H.N. YU,
"Optically induced injection of hot electrons into SiO₂",
J. Appl. Phys., **45**, 12, 1974.

[NING 76]

T.H. NING,

"High-field capture of electrons by coulomb-attraction centers in silicon dioxide"

J. Appl. Phys., **45**, 7, 1976.

[NING 78]

T.H. NING,

"Thermal reemission of trapped electrons in SiO₂",

J. Appl. Phys., **49**, 12, 1978.

[NOUGIER 87]

J.P. NOUGIER,

"Méthode de calcul numérique"

Edition MASSON, 3^o édition 1987.

[OLDHAM 83]

T.R. OLDHAM, J.M. Mc GARRITY,

"Comparison of ⁶⁰Co response and 10 keV X-ray response in MOS capacitors",

IEEE Transaction on Nuclear Science, **30**, 4377, 1983.

[ONSAGER 38]

L. ONSAGER,

"Initial Recombinations of Ions"

Phys. Rev., **54**, 554, 1938.

[PAILLET 93]

P.PAILLET, D. HERVE, J.L. LERAY, R.A.B. DEVINE,

"Evidence of negative charge trapping in high temperature annealed thermal oxide"

RADECS 93, Septembre 13-16, 1993.

[PAILLET 95]

P.PAILLET,

"Effet du procédé de fabrication des isolants sur la charge d'espace créée par rayonnement X: Application aux technologies silicium sur isolant",

Thèse Université de Montpellier II, 1995.

[PEYRE 91]

D. PEYRE,

"Contribution à l'étude des effets semipermanents induits par les rayonnements ionisant dans les transistors MOS"

Thèse Université de Montpellier II, 1991.

[SCHER 73]

H. SCHER, M.LAX,
"Stochastic transport in a disordered Solid"
Phys. Rev. B, **7**,10, p. 4491, 1973.

[SHOCKLEY 50]

W. SHOCKLEY,
"Electrons and holes in semiconductors"
Ed. D. VAN NOSTRAND Company, 1950.

[SONNEVELD 89]

P. SONNEVELD,
"CGS: Fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems"
SIAM J. Sci. Statist. Comput., **10**, p 36-52, 1989.

[SNOW 65]

E.H. SNOW, A.S. GROVE, B.E. DEAL and C.T. SAH,
"Ion transport phenomena in insulating films"
Journal of Applied Physics, **36**, 5, 1965.

[STAHLBUSCH 92]

R.E. STAHLBUSCH, G.J.CAMPISI, and Al.,
"Electron and hole trapping in irradiated SIMOX, ZMR and BESOI buried Oxides"
IEEE Trans. Nucl. Sci., **39**,6, 1992.

[SZE 71]

S.M. SZE
"Physics of Semiconductor Devices"
Ed. Wiley-Interscience, 1971.

[VAPAILLE 90]

A. VAPAILLE et R.CASTAGNE
"Dispositifs et circuits intégrés semiconducteurs"
Ed. Bordas, Paris, 1990.

[VASUDEVAN 91]

V. VASUDEVAN and J.VASI,
"A numerical simulation of hole and electron trapping due to radiation in silicon dioxide",
J.Appl.Phys **70**, 8, 1991.

[VASUDEVAN 94]

V. VASUDEVAN and J.VASI,

"A two dimensional numerical simulation of oxide charge buildup in MOS transistors due to radiation",

IEEE Transaction on electronics devices **41**, 3, 1994.

Annexe I:*Discrétisation spatiale de l'équation de Poisson^[DATT 91].*

La méthode de discrétisation utilisée consiste à approcher une fonction inconnue W (non intégrable) par une fonction polynomiale intégrable.

Soit l'équation :

$$\vec{\text{div}}(\epsilon \mathbf{E}) = \rho \Rightarrow \vec{\text{div}}(\epsilon(\text{grad}V)) + \rho = 0$$

que l'on écrit :

$$L(\epsilon \text{grad}V) + \rho = 0$$

Appelons résidus la quantité :

$$R(\psi) = L(\psi) + \frac{\rho}{\epsilon}$$

La méthode des résidus pondérés consiste à chercher les fonctions ψ telles que :

$$W(\psi) = \int_D P.R(\psi)dV = 0$$

D : domaine intégrable.

P : fonction de pondération.

ψ : fonctions satisfaisant aux conditions limites et dérivables à l'ordre 2.

La méthode de "Galerkine" consiste à choisir $P=\delta\psi$ où $\delta\psi$ est une fonction approchée de ψ . $W(\psi)$ s'écrit alors :

$$W(\psi) = \int_D \delta\psi.R(\psi)dV = \int_D \delta\psi(L(\psi) + \frac{\rho}{\epsilon})dV = 0$$

A deux dimensions $L(\Psi)$ s'écrit : $L = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ et la forme intégrable devient :

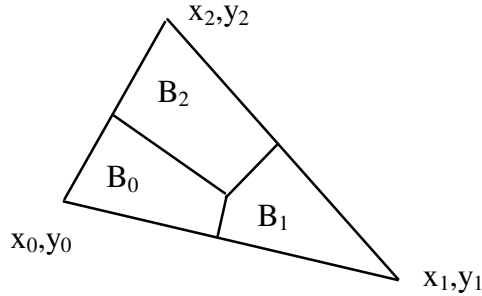
$$W = \int_D \delta\psi \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \rho \right] dx.dy = 0$$

ce qui donne après intégration par parties

$$W = \int_D \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \delta\psi \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \delta\psi \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \delta\psi \cdot \rho \right] dx.dy + \int_{S_{\text{flux}}} \epsilon \delta\psi \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.dy + \int_{S_{\psi}} \epsilon \delta\psi \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.dy = 0$$

En prenant $\delta\psi = 0$ sur S_ψ , on élimine le terme sur le contour S_ψ (S_ψ représente les électrodes du dispositif). Si on impose un flux tangent à la frontière S_{flux} on élimine le terme sur S_{flux} (S_{flux} représente les frontières sans électrodes du dispositif).

en décomposant en N éléments triangles :



$$W = \sum_e^N W_e(\psi) = \sum_e^N \left(- \int_{V_e} \left(\frac{\partial \delta \psi}{\partial x} \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \delta \psi}{\partial y} \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial y} - \delta \psi \rho \right) dx \cdot dy \right) = 0$$

V_e : volume de l'élément e.

$\langle \rangle$ ligne vectorielle.

$\{ \}$ colonne vectorielle.

que l'on écrit pour chaque élément :

$$-W_e(\psi) = \int_{V_e} \left(\left\langle \frac{\partial \delta \psi}{\partial x} \quad \frac{\partial \delta \psi}{\partial y} \right\rangle \epsilon \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} \end{array} \right\} - \delta \psi \rho \right) dx \cdot dy$$

Déterminons les valeurs ψ, ϵ et $\delta\psi$ en un point quelconque (x, y) de l'élément, en utilisant les polynômes de Lagrange aux noeuds 0,1,2 on a alors :

$$\begin{cases} \psi = N_0 \cdot \psi_0 + N_1 \cdot \psi_1 + N_2 \cdot \psi_2 \\ \epsilon = N_0 \cdot \epsilon_0 + N_1 \cdot \epsilon_1 + N_2 \cdot \epsilon_2 \\ \delta\psi = N_0 \cdot \delta\psi_0 + N_1 \cdot \delta\psi_1 + N_2 \cdot \delta\psi_2 \end{cases}$$

Avec

$$N_0 = \frac{1}{2A} [(y_2 - y_1) \cdot (x_1 - x_2) - (x_2 - x_1) \cdot (y_1 - y_2)]$$

N_1 et N_2 sont obtenus par permutation des indices.

$$2 \cdot A = (x_2 - x_1)(y_0 - y_2) - (x_0 - x_1)(y_2 - y_1)$$

On peut exprimer alors les quantités :

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_0}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} \\ \frac{\partial N_0}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{Bmatrix}$$

et

$$\left\langle \frac{\partial(\partial\psi)}{\partial x} \quad \frac{\partial(\partial\psi)}{\partial y} \right\rangle = \left\langle \partial\psi_0 \quad \partial\psi_1 \quad \partial\psi_2 \right\rangle \begin{bmatrix} \frac{\partial N_0}{\partial x} & \frac{\partial N_0}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} \\ \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} \end{bmatrix}$$

En posant : $[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_0}{\partial x} & \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial z} \\ \frac{\partial N_0}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial z} \end{bmatrix}$

We(ψ) s'écrit :

$$We(\psi) = \int_{ve} [B]^T \langle N_0, N_1, N_2 \rangle \begin{Bmatrix} \epsilon_0 \\ \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{Bmatrix} [B] \begin{Bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \end{Bmatrix} dx dy - \int_{ve} \begin{Bmatrix} N_0 \\ N_1 \\ N_2 \end{Bmatrix} \rho dx dy$$

Calcul du second membre :

La charge est supposée concentrée au noeud, la charge est constante dans la surface associée au noeud.

$$\text{Second membre} = \int_{ve} \begin{Bmatrix} N_0 \\ N_1 \\ N_2 \end{Bmatrix} \rho dx dy = \begin{Bmatrix} B_0 \rho_0 \\ B_1 \rho_1 \\ B_2 \rho_2 \end{Bmatrix}$$

Le passage dans l'espace réel $\begin{pmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \\ x_3 & y_3 \end{pmatrix}$ à partir de l'espace de référence $((0,0) (1,0) (0,1))$ permet d'écrire^[MICHEZ 93] :

$$\text{We}(\psi) = \frac{\varepsilon}{12A} \left[\begin{array}{ccc} (x_2 - x_1)^2 & (x_2 - x_1)(x_0 - x_2) & (x_2 - x_1)(x_1 - x_0) \\ +(y_2 - y_1)^2 & +(y_2 - y_1)(y_0 - y_2) & +(y_2 - y_1)(y_1 - y_0) \\ & (x_0 - x_2)^2 & (x_0 - x_2)(x_1 - x_0) \\ & +(y_0 - y_2)^2 & +(y_0 - y_2)(y_1 - y_0) \\ & & (x_1 - x_0)^2 \\ & & +(y_1 - y_0)^2 \end{array} \right] + \begin{Bmatrix} B_0 \rho_0 \\ B_1 \rho_1 \\ B_2 \rho_2 \end{Bmatrix}$$

$$\text{avec } A = \frac{(x_1 - x_3)(y_2 - y_1) - (x_2 - x_1)(y_1 - y_3)}{2}$$

Annexe II :*Discretisation spatiale des équations de courant :*

Soit l'équation de conservation des électrons:

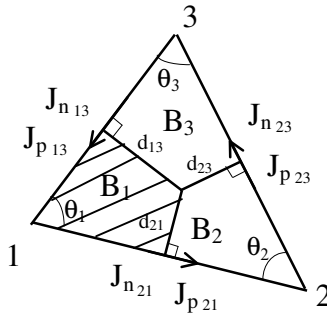
$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n = -q(G - R - \frac{\partial n}{\partial t})$$

G : génération de charges.

R: recombinaison de charges.

$\frac{\partial n}{\partial t}$: variation du nombre de charges pendant dt.

et l'élément triangulaire suivant :



B_1 représentant le volume associé au noeud 1, on peut intégrer l'équation dans ce volume :

$$\int_{B_1} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n dV = -q \int_{B_1} (G_1 - R_1 - \frac{\partial n_1}{\partial t}) dV$$

Le théorème de Gauss permet d'écrire en tenant compte de l'assemblage ultérieur (on évalue uniquement le flux à travers d_{21} et d_{13} , les portions de médiatrices):

$$\int_{S_{B_1}} \vec{J}_n \cdot d\vec{S} = -q \int_{B_1} (G_1 - R_1 - \frac{\partial n_1}{\partial t}) dV$$

avec S_{B_1} surface entourant le volume B_1 (médiatrices d_{21} et d_{13}).

G_1 , R_1 et n_1 sont supposés constant à l'intérieur du volume et n_1 est associée à la charge concentrée au noeud 1 :

on obtient alors après intégration:

$$\boxed{J_{n_{21}} \cdot d_{21} - J_{n_{13}} \cdot d_{13} - q \cdot B_1 \cdot \left(G_1 - R_1 - \frac{\partial n_1}{\partial t} \right) = 0}$$

pour le noeud 1.

où :

$$G_1 = g_0 \cdot \dot{D} \cdot Y_1(E)$$

\dot{D} : débit de dose

$Y_1(E)$: rendement

g_0 : facteur de génération.

$$R_1 = (\sigma_{nr_1} \cdot p_{t_1} + \sigma_{nt_1} \cdot (N_{n_1} - n_{t_1})) \cdot \left| \vec{J}_{n_1} \right|$$

σ_{nr_1} : section efficace de recombinaison au noeud 1

σ_{nt_1} : section efficace de piégeage au noeud 1

N_{n_1} : densité de pièges à électron au noeud 1

n_{t_1} : densité d'électrons piégés au noeud 1.

$\left| \vec{J}_{n_1} \right|$: densité de courant au noeud 1 est calculé à partir de la composante de la densité de courant sur l'arête [1,2] et de la composante de la densité de courant sur l'arête [1,3].

$$\left| \vec{J}_{n_1} \right| = \frac{\sqrt{J_{n_{21}}^2 + J_{n_{13}}^2 - 2 \left| J_{n_{21}} \right| \cdot \left| J_{n_{13}} \right| \cdot \cos \theta_1}}{\sin \theta_1}$$

Pour les trous on a :

$$\boxed{J_{p_{21}} \cdot d_{21} - J_{p_{13}} \cdot d_{13} + q \cdot B_1 \cdot \left(G_1 - R_1 - \frac{\partial p_1}{\partial t} \right) = 0}$$

De même, les équations aux noeuds 2 et 3 seront obtenus par permutation des indices.

Annexe III :

Calcul des densités de courant :

Les termes de densité de courant sont calculés en utilisant la statistique de "Boltzmann" qui permet de relier les densités n et p de charges à l'énergie du niveau de Fermi par les relations suivantes :

$$\begin{cases} n = N_c \cdot \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right) \\ p = N_v \cdot \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right) \end{cases}$$

Avec :

N_c = concentration effective d'électrons dans la bande de conduction

N_v = concentration effective de trous dans la bande de conduction

que l'on écrit si les niveaux de Fermi des électrons et des trous sont différents :

$$\begin{cases} n = N_c \exp\left(-\frac{E_C}{kT}\right) \cdot \exp\left(\frac{q\phi_{Fn}}{kT}\right) \\ p = N_v \exp\left(\frac{E_V}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_{Fp}}{kT}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} n = \theta_c \cdot \exp\left(\frac{q\phi_{Fn}}{kT}\right) \\ p = \theta_v \cdot \exp\left(\frac{q\phi_{Fp}}{kT}\right) \end{cases}$$

$$\text{en posant } \begin{cases} \theta_c = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_C}{kT}\right) \\ \theta_v = N_v \cdot \exp\left(-\frac{E_V}{kT}\right) \end{cases}$$

$$\text{avec } \phi_{n1} = \psi_1 + \chi_1$$

$$\phi_{n2} = \psi_2 + \chi_2$$

$$\phi_{p1} = \psi_1 + \chi_1 + E_{g1}$$

$$\phi_{p2} = \psi_2 + \chi_2 + E_{g2}$$

χ_1, χ_2 : affinités électroniques aux noeuds 1 et 2

ψ_1 et ψ_2 : potentiels aux noeuds 1 et 2

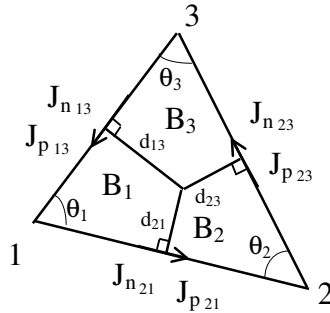
E_{g1}, E_{g2} : valeurs du gap au noeuds 1 et 2

En écrivant les équations de courant d'électrons et de trous :

$$\begin{cases} \vec{J}_n = -qn\mu_n \vec{\nabla} \phi_{Fn} + qD_n \vec{\nabla}_n \\ \vec{J}_p = qp\mu_p \vec{\nabla} \phi_{Fp} + qD_p \vec{\nabla}_p \end{cases}$$

et en utilisant la relation d'Einstein : $\frac{kT}{q} = \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p}$

on obtient les relations suivantes utilisées pour le calcul numérique des densités de courants sur une arête en supposant celles-ci constantes le long de l'arête (arête [2,1] par exemple) :



$$\begin{cases} J_{n_{21}} = q\mu_{n_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[n_2 \cdot Z(\Delta_{n_{21}}) - n_1 \cdot (\Delta_{n_{21}} + Z(\Delta_{n_{21}})) \right] \\ J_{p_{21}} = q\mu_{p_{21}} \frac{kT}{q} \frac{1}{l_{21}} \left[p_1 \cdot Z(\Delta_{p_{21}}) - p_2 \cdot (\Delta_{p_{21}} + Z(\Delta_{p_{21}})) \right] \end{cases}$$

avec : l_{21} : longueur de l'arête [2,1]

$$Z(\Delta) = \frac{\Delta}{e^{\Delta} + 1}$$

$$\Delta_{n_{21}} = \frac{q(\phi_{n_2} - \phi_{n_1})}{kT}$$

$$\Delta_{p_{21}} = \frac{q(\phi_{p_2} - \phi_{p_1})}{kT}$$

De même pour les arêtes [3,1] et [2,3] par permutation circulaire des indices.

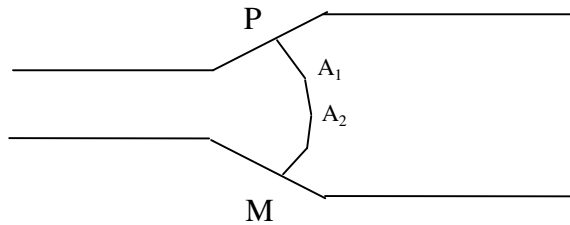
Annexe IV :

Calcul de la variation de la tension de bande plate :

Soit à calculer l'intégrale :

$$\Delta V_{FB} = \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \int_P^M q(s) \cdot s \, ds$$

s : parcourt le long de la ligne de champ entre P et M



L'intégrale s'écrit :

$$\Delta V_{FB} = \frac{1}{\epsilon_{SiO_2}} \left\{ \int_P^{A_1} q(s) \cdot s \, ds + \int_{A_1}^{A_2} q(s) \cdot s \, ds + \int_{A_2}^{A_3} q(s) \cdot s \, ds + \dots \right\}$$

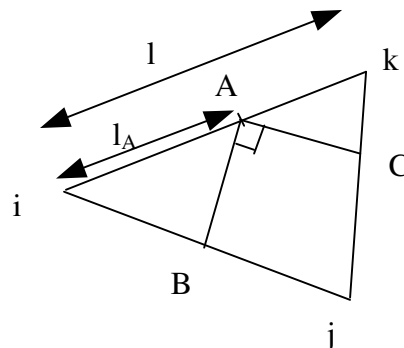
$$\text{avec } B_1 = A_2$$

$$B_2 = A_3$$

$$\dots$$

$$B_i = A_{i+1}$$

Soit le point A sur une arête d'un élément triangulaire, on cherche le potentiel de A connaissant les potentiels ψ_i et ψ_k (figure ci-dessous) :



en utilisant le fait que le potentiel varie linéairement le long d'une arête on écrit :

$$\frac{\psi_A - \psi_i}{l_A} = \frac{\psi_k - \psi_i}{l}$$

on obtient la valeur du potentiel en A : $\psi_A = \frac{1_A}{1}(\psi_k - \psi_i) + \psi_i$

On cherche alors le point C de même potentiel que A situé sur une des deux autres arêtes de l'élément.

C est tel que $\psi_k < \psi_C < \psi_j$ ou bien $\psi_i < \psi_C < \psi_j$. Supposons que C soit sur l'arête [j,k], alors:

$$\frac{x_A - x_k}{x_i - x_k} = \frac{x_C - x_k}{x_j - x_k} \Rightarrow x_C = x_k - (x_j - x_k) \cdot \frac{(x_A - x_k)}{(x_i - x_k)}$$

$$\frac{y_A - y_k}{y_i - y_k} = \frac{y_C - y_k}{y_j - y_k} \Rightarrow y_C = y_k - (y_j - y_k) \cdot \frac{(y_A - y_k)}{(y_i - y_k)}$$

Le point B est donné alors par l'intersection de la perpendiculaire à [A,C] passant par A et de l'arête [i,j].

Une fois déterminé les coordonnées (x_A, y_A) et (x_B, y_B) on détermine la valeur de la charge q en un point de l'élément par interpolation triangulaire sur les valeurs de q en i,j et k.

$$q = N_i \cdot q_i + N_j \cdot q_j + N_k \cdot q_k$$

avec

$$N_i = \frac{a_i + b_i \cdot x + c_i \cdot y}{2\Delta}$$

$$N_j = \frac{a_j + b_j \cdot x + c_j \cdot y}{2\Delta}$$

$$N_k = \frac{a_k + b_k \cdot x + c_k \cdot y}{2\Delta}$$

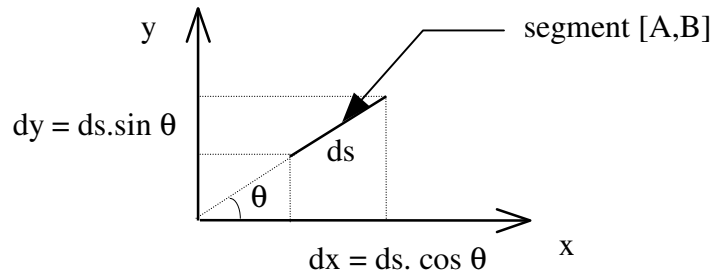
Δ : surface du triangle.

$$\begin{cases} a_i = x_j \cdot x_k - x_k \cdot y_j \\ b_i = y_j - y_k \\ c_i = x_k - x_j \end{cases} \text{ plus permutation sur d'indices}$$

d'où sur un élément on a :

$$\int_A^B q(s) \cdot s \, ds = \int_A^B (N_i \cdot q_i + N_j \cdot q_j + N_k \cdot q_k) \cdot s \, ds$$

Selon l'orientation du segment [A,B] on projète celui-ci suivant l'axe 0x ou l'axe 0y.



$$\text{avec } \frac{y}{x} = \text{tg}\theta$$

en projetant l'arête sur l'axe 0x ($\Rightarrow \text{tg}\theta > 1$) on obtient :

$$\begin{aligned} \int_A^B q(s) \cdot s ds &= \int_A^B (N_i \cdot q_i + N_j \cdot q_j + N_k \cdot q_k) \cdot \frac{x}{\cos^2 \theta} dx \\ &= \frac{1}{\cos^2 \theta} \int_A^B \left(\left(\frac{a_i + b_i x + c_i y}{2\Delta} \right) \cdot q_i + \left(\frac{a_j + b_j x + c_j y}{2\Delta} \right) \cdot q_j + \left(\frac{a_k + b_k x + c_k y}{2\Delta} \right) \cdot q_k \right) \cdot x dx \\ &= \frac{1}{2\Delta \cos^2 \theta} \left[\left(\frac{a_i}{2} x^2 + \frac{b_i}{3} x^3 + \frac{c_i}{3} x^3 \text{tg}\theta \right) \cdot q_i + \left(\frac{a_j}{2} x^2 + \frac{b_j}{3} x^3 + \frac{c_j}{3} x^3 \text{tg}\theta \right) \cdot q_j + \left(\frac{a_k}{2} x^2 + \frac{b_k}{3} x^3 + \frac{c_k}{3} x^3 \text{tg}\theta \right) \cdot q_k \right]_A^B \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\int_A^B q(s) \cdot s ds = \frac{1}{2\Delta \cos^2 \theta} \left[x^2 \left\{ \left(\frac{a_i}{2} + \left(\frac{b_i + c_i \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) x \right) q_i + \left(\frac{a_j}{2} + \left(\frac{b_j + c_j \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) x \right) q_j + \left(\frac{a_k}{2} + \left(\frac{b_k + c_k \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) x \right) q_k \right\} \right]_A^B$$

dans le cas ou $\text{tg}\theta < 1$:

$$\int_A^B q(s) \cdot s ds = \frac{1}{2\Delta \sin^2 \theta} \left[y^2 \left\{ \left(\frac{a_i}{2} + \left(\frac{b_i + c_i \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) y \right) q_i + \left(\frac{a_j}{2} + \left(\frac{b_j + c_j \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) y \right) q_j + \left(\frac{a_k}{2} + \left(\frac{b_k + c_k \cdot \text{tg}\theta}{3} \right) y \right) q_k \right\} \right]_A^B$$

Annexe V :*Démonstration du calcul du courant sous le seuil :*

En faible injection, le courant de drain est dominé par la diffusion et il peut s'assimiler au courant collecteur d'un transistor bipolaire ayant une base dopée uniformément. Considérons donc le MOS comme un transistor bipolaire NPN.

$$\text{Le courant est de la forme : } I_d = -q \cdot A \cdot D_n \cdot \frac{\partial n}{\partial y} = q \cdot A \cdot D_n \cdot \frac{n(0) - n(L)}{L}$$

Avec :

D_n : constante de diffusion.

L : Longueur du canal dirigé suivant y .

Z : Largeur du canal.

A : Surface traversée par le courant = Z multiplié par l'épaisseur effective du canal.

$$n(0) = n_{p0} \cdot \exp\left(\frac{q}{kT} \cdot \varphi_s\right)$$

$$n(L) = n_{p0} \cdot \exp\left(\frac{q}{kT} \cdot (\varphi_s - V_d)\right)$$

φ_s = potentiel de surface à la source tel que $\frac{kT}{q} \cdot \log\left(\frac{N_a}{n_i}\right) \leq \varphi_s \leq 2 \cdot \frac{kT}{q} \cdot \log\left(\frac{N_a}{n_i}\right)$ (faible inversion)

L'épaisseur effective du canal x_d correspond à la distance pour laquelle le potentiel de surface (du Silicium) décroît de la quantité $\frac{kT}{q}$.

Soit E_s le champ électrique associé à φ_s :

$$E_s = -\frac{Q_{Si}}{\epsilon_{Si}} \Rightarrow x_d \cdot E_s = \frac{kT}{q}$$

$$\text{avec } \epsilon_{Si} = \epsilon_{rSi} \cdot \epsilon_0$$

En utilisant l'équation de Poisson :

$$\text{div}E = \frac{\rho}{\epsilon_{Si}} = \frac{q \cdot N_a}{\epsilon_{Si}}$$

On en déduit l'extension ω de la zone de charge d'espace :

$$\omega = \sqrt{\frac{2\epsilon_{Si} \cdot \varphi_s}{q \cdot N_a}}$$

ainsi que le champ à la surface du silicium :

$$E_s = -\frac{Q_{Si}}{\epsilon_{Si}} = -\frac{q \cdot Na \cdot \omega}{\epsilon_{Si}} = -\frac{q \cdot Na}{\epsilon_{Si}} \sqrt{\frac{2 \cdot \epsilon_{Si} \cdot \phi_s}{q \cdot Na}}$$

L'épaisseur effective du canal x_d est donc :

$$x_d = \sqrt{\frac{\epsilon_{Si}}{2 \cdot q \cdot Na \cdot \phi_s}}$$

Id s'écrit alors :

$$I_d = \mu_n \frac{Z}{L} \frac{(kT)^2}{q} \frac{n_i^2}{Na} \sqrt{\frac{\epsilon_{Si}}{2 \cdot q \cdot Na \cdot \phi_s}} e^{\left(\frac{q}{kT} \phi_s\right)} (1 - e^{\left(-\frac{q}{kT} V_d\right)})$$

En posant $a = 2 \frac{\epsilon_{Si}}{L_d} \frac{1}{C_{ox}}$ avec $C_{ox} = \frac{\epsilon_{SiO_2}}{e_{ox}}$ et $L_d = \sqrt{\frac{2 \cdot \epsilon_{Si}}{q \cdot Na} \left(\frac{kT}{q}\right)}$

on obtient :

$$I_d = \mu_n \frac{a \cdot C_{ox}}{2} \frac{Z}{L} \left(\frac{kT \cdot n_i}{q \cdot Na}\right)^2 e^{\left(\frac{q}{kT} \phi_s\right)} (1 - e^{\left(-\frac{q}{kT} V_d\right)}) \cdot \left(\frac{q}{kT} \phi_s\right)^{-1/2}$$

ou encore en faisant disparaître la capacité d'oxyde :

$$I_d = \mu_n \frac{\epsilon_{Si}}{L_d} \frac{Z}{L} \left(\frac{kT \cdot n_i}{q \cdot Na}\right)^2 e^{\left(\frac{q}{kT} \phi_s\right)} (1 - e^{\left(-\frac{q}{kT} V_d\right)}) \cdot \left(\frac{q}{kT} \phi_s\right)^{-1/2}$$