

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Université de Jijel
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département d'Electronique

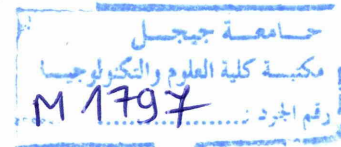
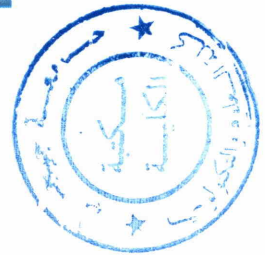
THEME

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de Master
Spécialité : Microélectronique

Présentée par :

BOULMEDAIS FOUZI

BELFRIEKH BRAHIM



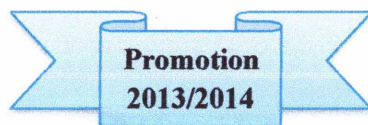
*Etude du phénomène de déplétion de la grille en poly(Si).
Analyse des caractéristiques C(V)*

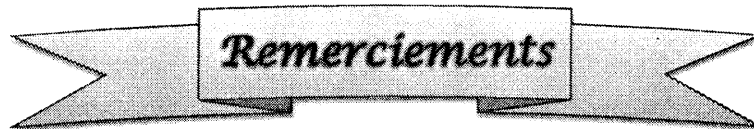
Devant le jury :

- *M^{me} S.Merabet*
- *M^{me} S.bouchekouf*

Encadré par :

- *M^{me} A. Merzougui*





Remerciements

Nos remerciements s'adressent avant tout au bon Dieu le tout puissant qui nous a donné le courage, la patience et la volonté durant toute cette période et nous accordé la chance d'accomplir ce travail.

On remercie tout particulièrement M^{me} A. Merzougui d'avoir bien voulu accepter de nous encadrer, pour nous avoir proposé et assuré la direction de ce passionnant mémoire.

On tient à remercier aussi les membres du jury de nous avoir honorés en acceptant de juger notre travail.

On remercie également tous les enseignant du département de l'électronique.

Nos vifs remerciements s'adressent aussi à tous nos amis et collègues de la promotion pour les bons moments et les souvenirs inoubliables que nous avons vécus ensemble et à toutes les personnes qui nous ont aidées de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Merci

Dédicace

*JE DÉDIE CE MODESTE TRAVAIL À CEUX QUI M'ONT
GUIDÉ VERS LE CHEMIN
DU SAVOIR, ET QUI M'ONT ENCOURAGÉ DURANT MES
ANNÉES D'ÉTUDE EN PARTICULIER :
MES CHERS PARENTS
MES FRÈRES ET MES SŒURS
TOUTE MA FAMILLE
MON ENCADREUR A. MERZOUGUI
TOUS MES AMIS
ET À TOUTE LA PROMOTION D'ÉLECTRONIQUE
2013 / 2014*

Sommaire

Liste des symboles et des abréviations.

Liste des figures.

Introduction générale.....1

Chapitre I: Etat de l'art et rappels théorique

<i>I.1) Introduction.....</i>	<i>3</i>
<i>I.2) Evolution de la micro-électronique</i>	<i>3</i>
<i>I.3) Intérêts de la miniaturisation.....</i>	<i>4</i>
<i>I.4) Problèmes liés à la miniaturisation.....</i>	<i>4</i>
<i>I.5) Choix de la capacité MOS comme structure d'étude.....</i>	<i>5</i>
<i>I.6) Description de la capacité MOS étudiée.....</i>	<i>6</i>
<i>I.7) La capacité MOS idéale.....</i>	<i>6</i>
<i>I.8) Principe et régimes de fonctionnement.....</i>	<i>7</i>
<i>I.8.1) régime d'accumulation.....</i>	<i>8</i>
<i>I.8.2) régime de déplétion.....</i>	<i>8</i>
<i>I.8.3) régime d'inversion.....</i>	<i>9</i>
<i>I.9) Conclusion.....</i>	<i>10</i>

Chapitre II: Modelés élaborés

II.1) Introduction.....	11
II.2) Influence des effets quantiques.....	11
II.2. a) En inversion.....	11
II.2. b) En accumulation.....	12
II.3) Passage de la mécanique classique vers la mécanique quantique.....	12
II.4) Quantification des niveaux d'énergies.....	14
II.5) Modélisation des caractéristiques C(V) de la structure.....	15
II.6) La grille poly-cristalline d'une capacité MOS.....	17
II.6.a) Description du silicium polycristallin.....	17
II.6.b) les avantages de polysilicium.....	17
II.6.c) Déplétion de la grille.....	18
II.7) Conclusion.....	19

Chapitre III: modélisation et simulation

III.1) Introduction.....	20
III.2) Intérêt de la simulation des caractéristiques d'une capacité.....	20
III.3) le principe de résolution du système couplé «Poisson-Schrödinger».....	21
III.4) Présentation du système couplé « Poisson-Schrödinger ».....	21
III.4.1) Condition aux contacts « Dirichlet ».....	22
III.4.2) Condition d'interface oxyde /semi-conducteur.....	23

III.5) Discrétisation du système couplé	23
III.5.1) Discrétisation de l'équation de « Poisson ».....	24
III.5.2) Discrétisation de l'équation de Schrödinger.....	25
III.6) Résolution de l'équation de « Poisson » par calcul itératif	26
III.7) Résolution de l'équation de Schrödinger.....	27
III.8) Organigramme de résolution du système considéré.....	27
III.9) calcul de la capacité de la structure.....	31
III.10) Conclusion.....	32

Chapitre IV : interprétations des résultats

IV.1) Introduction.....	33
IV.2) Présentation de la structure considérée pour l'obtention des C(V).....	33
IV.2.a) effet du dopage de la grille (poly-si).....	33
IV.2.b) effet de l'épaisseur d'oxyde.....	35
IV.2.c) effet de la température.....	35
IV.3) Conclusion.....	36
 Conclusion générale.....	 38

Références Bibliographiques.

Liste des symboles et des abréviations :

C_{poly} : Capacité de la grille.

C_{ox} : Capacité de L'oxyde.

C_{sc} : Capacité su semi-conducteur.

E_G : Energie du gap.

ϵ_{ox} : Permittivité de l'oxyde.

ϵ_{sc} : Permittivité du Semiconducteur.

E_{ox} : Champ électrique aux bornes de l'oxyde.

E_C : Energie du bas de la bande de conduction.

E_V : Energie du haut de la bande de valence.

E_F : Energie de Fermi.

E_{Fi} : Energie de Fermi intrinsèque.

ϵ_{ps} : Précision de la méthode de Newton-Raphson.

Φ_B : Barrière énergétique à l'interface.

Φ_{B^*} : Barrière énergétique effective à l'interface.

ϕ_t : Profondeur énergétique du défaut.

$[H]$: Hamiltonnien du système.

H : Constante de Planck

k : Vecteur d'onde.

k_B : Constante de Boltzmann.

L : Longueur d'étude.

L_p : Largeur du puit quantique.

λ : Longueur d'onde.

m_e : Masse effective de l'électron.

m_0 : Masse absolue.

n_i : La concentration intrinsèque.

N_0 : Concentration des électrons à l'équilibre.

N_s : Dopage du substrat.

N_{POLY} : Dopage de la grille.

P_0 : Concentration des trous à l'équilibre.

ψ : La fonction d'onde.

Q_{INV} : Charge d'inversion.

Q_{OX} : Charge présente dans l'oxyde.

Q_P : Charge totale dans le Poly.

Q_s : Charge totale dans le substrat.

q : La charge élémentaire.

T : Température.

U_T : Unité thermodynamique.

V_{TH} : Tension de seuil.

V_{FB} : Tension de bandes plates.

MIS : métal-isolant-Semiconducteur.

MOS: metal-oxyde –semiconducteur.

CMOS : Complementary Metal Oxide Semiconductor.

EEPROM : Electrically Erasable Programmable Read Only Memories.

EPROM : Electrically Programmable Read Only Memories.

MOSFET : Métal-Oxyde-Semiconducteur field effect transistor.

MDF : Méthode des Différences Finies.

MDF : Méthode des Différences Finies.

SiO₂ : La silice.

ZCE : Zone de Charge d'Espace.



Liste des figures

Fig.I.1 : <i>Illustration de la loi de Moore pour les processeurs Intel</i>	3
Fig.I.2 : <i>Schéma simplifié d'une capacité MOS</i>	6
Fig.I.3 : <i>La polarisation de la capacité MOS étudiée</i>	7
Fig.I.4 : <i>(a) Diagramme de bande en Accumulation. (b) Explication physique</i>	8
Fig.I.5 : <i>(a) Diagramme de bandes en déplétion. (b) Explication physique</i>	9
Fig.I.6 : <i>(a) Diagramme de bandes en Inversion. (b) Explication physique</i>	9
Fig. II.1 : <i>Influence des effets quantiques sur la densité $N_{inverse}$ par rapport au cas classique</i>	12
Fig. II.2 : <i>Comportement 3D des porteurs</i>	13
Fig. II.3 : <i>Illustration de la quantification des niveaux d'énergie dans le puits</i>	15
Fig. II.4 : <i>schéma électrique capacitif équivalent</i>	16
Fig. II .5 : <i>Courbures des bandes d'énergie de la structure MOS dans le cas d'une grille en polysilicium (a) et schéma électrique capacitif équivalent (b)</i>	18
Fig.III.1 : <i>Représentation de l'extension du puits sur la distance L_p à partir de l'interface : oxyde/semi-conducteur</i>	23
Fig. III.2 : <i>Organigramme de résolution des équations de Poisson et de Schrödinger dans les deux cas : classique et quantique</i>	28
Fig.III.3 : <i>Schématisation des différentes zones de calcul</i>	29
Fig.IV.1 : <i>Caractéristiques $C(V)$ pour différentes dopages de la grille (poly-si)</i>	33
Fig.IV.2 : <i>influence de la poly-déplétion de grille sur une capacité en fonction du dopage de la grille</i>	34
Fig.IV.3 : <i>Caractéristiques $C(V)$ pour différentes épaisseurs d'oxyde</i>	35
Fig.IV.4 : <i>Caractéristiques $C(V)$ pour différentes températures</i>	36

Introduction générale :

Le développement spectaculaire de l'industrie microélectronique ces quarante dernières années n'a pas cessé d'améliorer notre quotidien en l'enrichissant par des dispositifs sophistiqués, et omniprésents dans notre vie de tous les jours (transport, communication, médical et autres ...). Les progrès technologiques dans le domaine de la micro-électronique permettent de répondre à la demande croissante du marché en circuits intégrés rapides, consommant peu, et offrant la possibilité d'intégrer des fonctions électroniques de plus en plus complexes [1].

Ce développement a été assuré par une réduction très poussée de toutes les dimensions selon le concept de la « miniaturisation » conformément à l'incontournable loi de Moore [2,3]. La réduction des dimensions des composants microélectroniques a donc pour effet de diminuer leur coût et d'améliorer leurs performances.

Cependant, cette réduction s'est accompagnée d'une multitude d'effets indésirables, assez nuisibles et perturbant considérablement, le fonctionnement optimal des composants, parmi ceux-ci, nous citons quelques effets qui prennent place dans le transistor MOSFET tels que l'effet de canal court, l'effet de canal étroit, les phénomènes quantiques, des effets liés à la grille en l'occurrence, le phénomène de déplétion de la grille lorsqu'elle est en silicium poly-cristallin, auquel nous nous intéressons en particulier.

Au cours de ces avancées technologiques se trouve la capacité MOS (Métal-Oxyde-Semi-conducteur) qui est la brique élémentaire de tous les dispositifs de technologie MOS (transistor MOSFET, dispositifs CMOS, mémoire non volatiles EPEOM et EEPROM,...) et qui a été, à son tour touché par les phénomènes cités plus haut.

Il est important de souligner que notre structure d'étude est justement une simple capacité MOS à oxyde tunnel de 2 à 5 nm d'épaisseur et à grille en (Si) poly-cristallin fortement dopé (N), le substrat est par contre, modérément dopé (P).

Cette capacité étant la structure de base de tous les composants de technologie MOS, son étude facilite donc grandement la compréhension du comportement des composants de plus en plus complexes.

Notre travail consiste donc à l'analyse des caractéristiques capacité-tension $C(V)$ de cette structure, à partir desquelles, nous étudierons le phénomène de déplétion de la grille poly-cristalline.

L'obtention de ces caractéristiques nécessitera la résolution unidimensionnelle des équations couplées de « Poisson » et de « Schrödinger ». C'est cette dernière qui permet de prendre en considération l'influence des phénomènes quantiques qui se manifestent à cette échelle de dimension.

Notre mémoire est structurée par quatre chapitres :

Le premier chapitre contiendra un bref rappel du principe de la miniaturisation des composants, qui a été à la base du développement de l'industrie microélectronique malgré les problèmes technologiques et physiques engendrés et qui y sont directement liés. On y présentera également le principe et les différents régimes de fonctionnement de la capacité étudiée.

Le second chapitre contiendra les modèles élaborés et qui nous ont permis de prendre en considération les phénomènes quantiques et donc interpréter fidèlement le phénomène de déplétion de la grille.

Le troisième chapitre contiendra une présentation détaillée de l'outil informatique utilisé pour la résolution couplée des équations « **Poisson** » et « **Schrödinger** », après les avoir discrétisées par la méthode des différences finies, pour les adapter à un calcul numérique souple assuré par la méthode itérative de Newton-Raphson.

Le dernier chapitre contiendra les différents résultats obtenus en les comparant à d'autres résultats simulés et même expérimentaux.

Une conclusion générale récapitulera l'essentiel de ce travail.

Chapitre I

Etat de l'art et rappels théoriques

I.1) Introduction :

L'objectif de ce chapitre est de présenter quelques notions de base sur la théorie de la capacité MOS (métal - oxyde - semi-conducteur), qui est la base d'une multitude de composants (MOSFET, CMOS, EPROM, EEPROM...). Ses performances décident alors du développement de tous les composants de technologie MOS.

I.2) Evolution de la micro-électronique :

Le développement spectaculaire de la microélectronique pour les trois dernières décennies, a été rendu possible par les avancées dans les procédés de traitement des matériaux semi-conducteurs, notamment du silicium.

Cette évolution caractérisée par l'augmentation du nombre de composants à volume constant, conjugue une baisse des prix des systèmes avec l'augmentation régulière des performances. Ainsi, le microprocesseur, élément essentiel des ordinateurs, a vu ses capacités augmenter d'année en année grâce à l'intégration sur une surface de plus en plus petite de son composant principal, le transistor.

En 2006, les industriels de la microélectronique intègrent plusieurs millions de composants élémentaires sur une surface de quelques millimètres carrés. Il est remarquable que la célèbre « loi de Moore » (à volume égal, le nombre de transistors double tous les trois ans) soit vérifiée depuis quarante ans. La (Fig.1) rend compte du nombre de transistors intégrés en fonction du temps, pour les processeurs Intel, depuis 1970 [INTEL2006] [4].

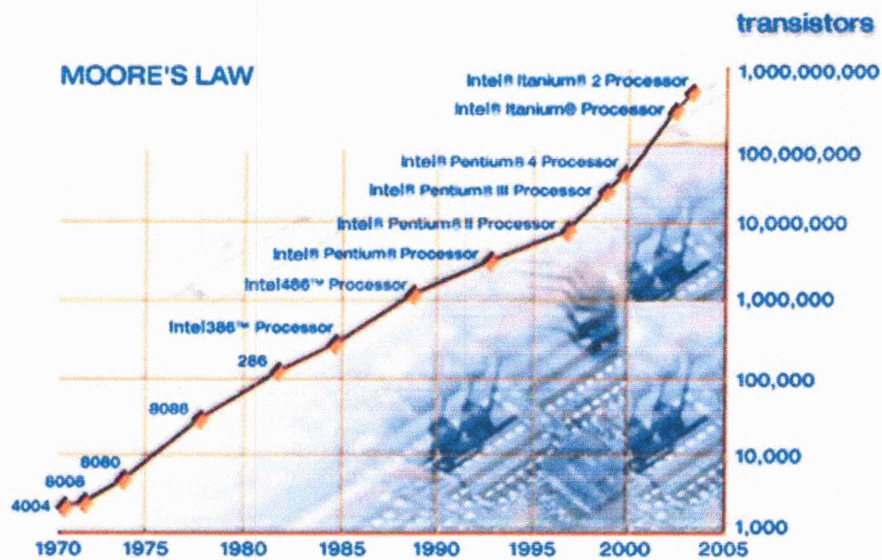


Fig.I.1 : Illustration de la loi de Moore pour les processeurs Intel

En effet, la réduction des dimensions attendue pour les technologies MOS du futur devrait permettre d'atteindre des longueurs de canal de quelques dizaines de nanomètre et des épaisseurs d'oxyde inférieures à 2 nanomètres. C'est le concept de la miniaturisation des composants obéissant strictement à la célèbre loi de MOORE.

I.3) Intérêts de la miniaturisation :

Les avantages de cette miniaturisation sont simples. Elles sont [5].

- **Financières :**

- ✓ Réduction du coût par fonction.
- ✓ Augmentation de la productivité des usines.
- ✓ microélectroniques.

- **Technologiques :**

- ✓ Augmentation de la densité de composants par « wafer ».
- ✓ Réduction de la consommation électrique.
- ✓ Vitesse des circuits.

Cette miniaturisation assez poussée même actuellement, est déjà accompagnée d'une multitude d'effets indésirables qui nuisent et modifient fortement le comportement des dispositifs. La miniaturisation a donc des limites à respecter, ceci étant à cause des différents problèmes qui y sont directement liés et que nous allons résumer dans ce qui suit.

I.4) Problèmes liés à la miniaturisation:

Les problèmes intervenant lors de la miniaturisation ultimes des transistors MOSFET et donc de tous les dispositifs micro-électroniques, sont surtout d'ordre économiques, technologique et physiques.

- **Problèmes économiques :**

L'essor économique de l'industrie micro-électronique n'est atteint que par une production à grande échelle et à bas coût des technologies actuelles et futures.

Cependant, la mise en œuvre des nouvelles générations nécessite primordialement la construction des salles blanches sophistiquées qui sont extrêmement coûteuses. A savoir qu'une salle blanche coûtait 200 millions de dollars dans les années 80, alors qu'après quelques années, elle a atteint 2 à 3 milliard de dollars.

De plus, la rentabilité toujours accrue n'est assurée que par une production en masse, obtenue par l'intégration d'un maximum de composants sur une même plaquette de (Si) dans le but de diminuer le nombre de procédure de fabrication, or ce nombre est toujours en augmentation.

- **Problèmes technologiques:**

La miniaturisation toujours plus poussée est assurée par des procédés technologiques plus pointus et donc plus complexes pour qu'ils puissent prendre en considération et avec plus de précision et de fiabilité, certains paramètres tels que l'amélioration de la pureté des substrats et des interfaces, l'optimisation du dessin des différentes connexions plus complexes ainsi que l'amélioration de la résolution de l'appareillage mis en œuvre.

- **Problèmes physiques :**

Comme nous l'avons signalé plus haut, la réduction accélérée des dimensions, engendre une multitude d'effets parasites qui perturbent le bon fonctionnement des composants. Parmi ces problèmes physiques, il y en a certains liés aux forts niveaux de dopages et d'autres, à la réduction de l'épaisseur de l'oxyde de grille ainsi que la longueur du canal.

Dans le cas du transistor MOSFET par exemple, la réduction des dimensions du canal entraîne plusieurs effets parasites tels que les effets de canal court et les effets de canal étroit, et le phénomène *déplétion de la grille* qui perturbent suffisamment le fonctionnement du transistor [6].

I.5) Choix de la capacité MOS comme structure d'étude:

Comme nous l'avons indiqué dans l'introduction de ce chapitre, la capacité MOS constitue l'élément de base de tous les composants de technologie MOS. Pour cela, nous l'avons choisi comme structure d'étude puisque la prise en considération des différents phénomènes qui y prennent place, nous renseignera fidèlement sur le comportement de tous les autres composants de la même technologie.

Dans le domaine expérimental, la capacité MOS est fréquemment utilisée comme structure de test dont l'étude permet l'extraction des paramètres déterminants le comportement des composants tels que : le type d'oxyde, son épaisseur, la densité de défauts à l'interface oxyde /semi-conducteur.....

I.6) Description de la capacité MOS étudiée :

La capacité MOS est formée par la mise en sandwich d'un matériau isolant qui est le plus souvent du dioxyde de silicium (SiO₂), entre deux couches, l'une appelée : Substrat ou bulk, constituée d'un semi-conducteur monocristallin de type (N) ou (P) qui est le plus souvent du Silicium (ou Germanium), l'autre appelée : Grille, constituée d'un métal ou de (Si) poly-cristallin dégénéré. La dénomination capacité MOS résulte de la nature de l'isolant qui est alors un oxyde.

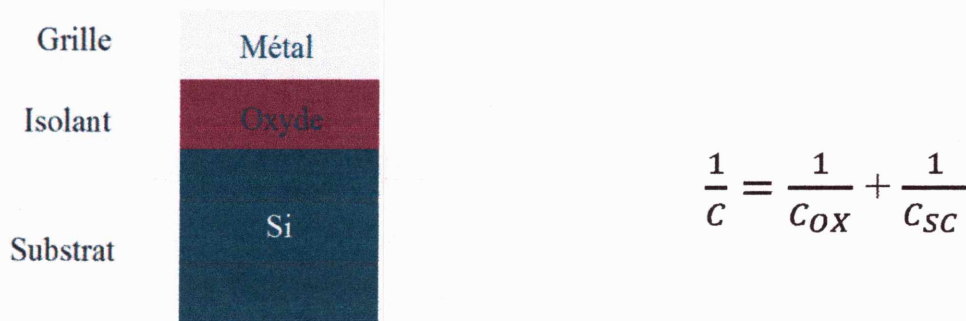


Fig.I.2 : Schéma simplifié d'une capacité MOS

I.7) La capacité MOS idéale :

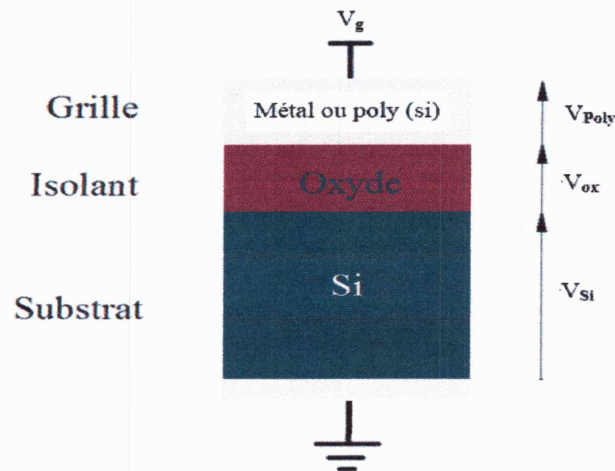
La capacité MOS idéale est très loin de la structure réelle, nous pouvons la qualifier de théorique et est considérée en posant certaines hypothèses parmi celles, nous citons : [7]:

- L'oxyde de grille est supposé parfait et de permittivité infinie, il n'y a donc lieu à aucun courant de fuite.
- L'oxyde ainsi que les interfaces : (oxyde / substrat) et (oxyde / grille) sont dépourvus de défauts et de liaisons pendantes.

- Les travaux de sortie du métal et du semi-conducteur sont supposés identiques, la tension de diffusion est donc nulle et la condition de bandes plates est censée être vérifiée.

I.8) Principe et régimes de fonctionnement :

Le fonctionnement de la capacité MOS est basé sur l'application d'une tension (V_g) entre la grille et le substrat qui se répartit sur les différentes couches. Cette tension implique l'apparition d'une charge (Q_g) dans la grille et une autre dans le substrat de même valeur et de type opposé (charge image).



$$V_g = V_{Poly} + V_{ox} + V_{Si} + V_{Fb}$$

Fig.I.3 : La polarisation de la capacité MOS étudiée

De ce fait, cette charge est modulée par la tension de grille qui en balayant une gamme de tensions positives et négatives permet de définir les différents régimes de fonctionnement de la capacité, que nous rappelons ci-après en considérant une capacité MOS avec un substrat de type (P), le raisonnement est analogue lorsque le substrat est de type (N) [6]. Métal ou poly (si)

I.8.1) régime d'accumulation :

Lorsque la tension appliquée sur la grille V_g est négative, des charges positives se développent dans le semi-conducteur et négatives dans la grille (aux niveaux des interfaces).

Les charges positives dans le semi-conducteur résultent de l'accumulation des porteurs majoritaires (les trous dans ce cas) en surface, les bandes de conduction et de valence se courbent alors vers le haut. Le semi-conducteur est dit : « *en régime d'accumulation* ».

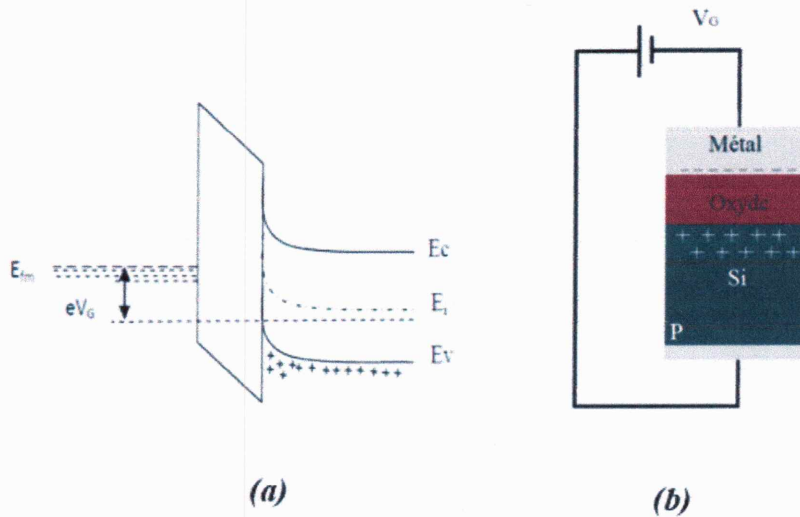


Fig.I.4 : (a) Diagramme de bande en Accumulation. (b) Explication physique.

I.8.2) régime de déplétion :

La tension appliquée dans ce cas est positive mais est relativement faible, elle permet l'accumulation d'électrons libres dans la grille tandis qu'elle repousse les trous libres de la surface du substrat, les charges négatives qui s'y développent dans ce cas résultent de la présence d'ions accepteurs non compensés, cette charge provoque une courbure de bande vers le bas et le semi-conducteur est dit : « *en régime de déplétion* »

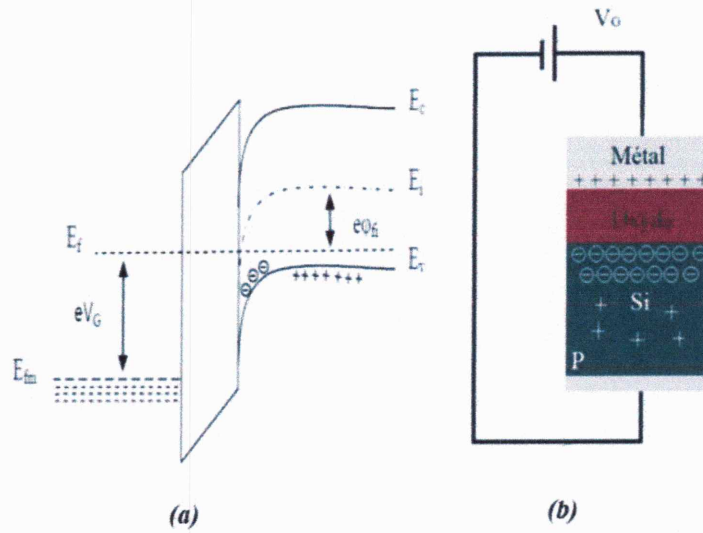


Fig.1.5 : (a) Diagramme de bandes en déplétion. (b) Explication physique.

I.8.3) régime d'inversion:

Lorsque la tension appliquée est plus importante, le déficit de trous et par suite, la densité d'électrons minoritaires augmentent. Si cette densité d'électrons libres devient supérieure à la concentration intrinsèque (n_i) mais tout en restant inférieure à la densité d'accepteurs ($n_i < n < N_A^-$), l'essentiel de la charge d'espace revient alors aux ions accepteurs et le semi-conducteur est dit dans ce cas : « *en régime d'inversion* »

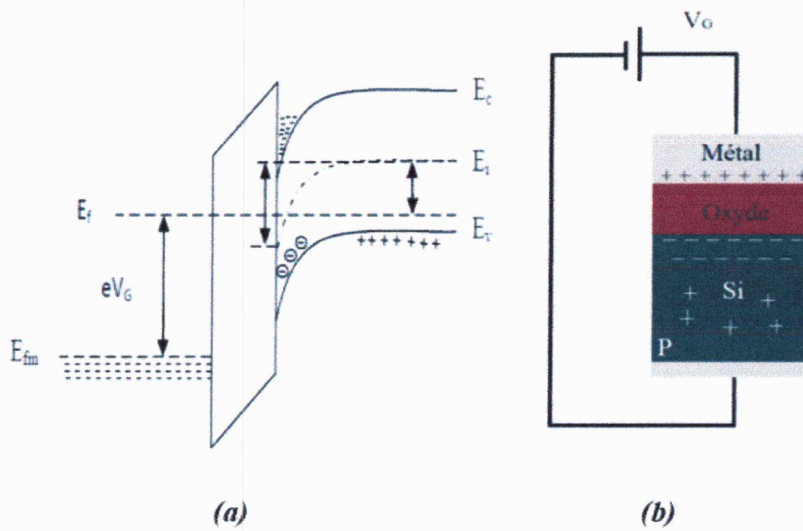


Fig.1.6 : (a) Diagramme de bandes en Inversion. (b) Explication physique.

I.9) Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons rappelé que le développement spectaculaire de l'industrie micro-électronique, a été grandement assuré par le concept de la « **miniaturisation** » obéissant à la célèbre loi « Moore » qui a autant d'avantages que d'inconvénients.

Ces inconvénients qui deviennent de plus en plus nuisibles, doivent impérativement être pris en considération par la simulation des différents composants miniatures.

Dans notre cas, nous nous sommes intéressés à la structure de base de tous les composants de technologie MOS, en l'occurrence, la capacité MOS, qui fait l'objet de l'étude du phénomène de déplétion de la grille qui est directement lié à la grille en polysilicium et qui se manifeste en régime d'inversion.

Chapitre II

Modèles élaborés



II.1) Introduction :

La miniaturisation des composants est souvent accompagnée d'effets parasites, qui perturbent le bon fonctionnement des composants. Parmi ces effets, nous nous intéressons en particulier au phénomène de déplétion de la grille en poly(Si) en prenant en considération les phénomènes quantiques vu que les dimensions de la structure étudiée sont assez faibles.

En effet, la physique classique est totalement inadéquate pour décrire les phénomènes observés à l'échelle atomique, il est nécessaire d'élaborer un nouveau cadre conceptuel de la physique. Cette nouvelle théorie de l'univers physique est conventionnellement appelée la "mécanique quantique".

II.2) Influence des effets quantiques :

Les effets quantiques jouent un rôle très important dans le comportement électrique des capacités MOS. Leur présence perturbe le fonctionnement conventionnel de la capacité MOS, ce qui entraîne des écarts significatifs entre les caractéristiques électriquement mesurées (I-V), (C-V) et les valeurs attendues selon les prévisions (modèles) classiques. Les effets quantiques affectent aussi les grandeurs non immédiatement mesurables de la capacité MOS, telles que la densité de charge d'inversion, le potentiel de surface, la tension de seuil. Une approche commode consistant à étudier leur influence comme une fonction du régime de fonctionnement de la capacité, nous allons s'éparer le fonctionnement de la capacité MOS en deux modes [7].

II.2. a) En inversion :

La tension de seuil est un paramètre dont l'infection par les effets quantiques est la plus originellement discutée dans la littérature.

En effet, plusieurs travaux, en particulier, ceux de VAN DORT [8], ont montré que l'influence des effets quantiques se traduit par une augmentation de la tension de seuil (V_{TH}) par rapport au cas classique [6].

En effet, d'après :

$$V_{TH}(quantique) = V_{TH}(classique) + \frac{E_{ox}}{q}$$

L'inversion, quant à elle, est obtenue pour une tension de grille plus importante dans le cas quantique. En réalité, c'est la densité de charge d'inversion Q_{INV} qui est modifiée lorsque les effets quantiques sont pris en compte, sans oublier la diminution de la capacité de l'oxyde C_{OX} . La figure suivante illustre l'impact des effets quantiques sur les grandeurs discutées :

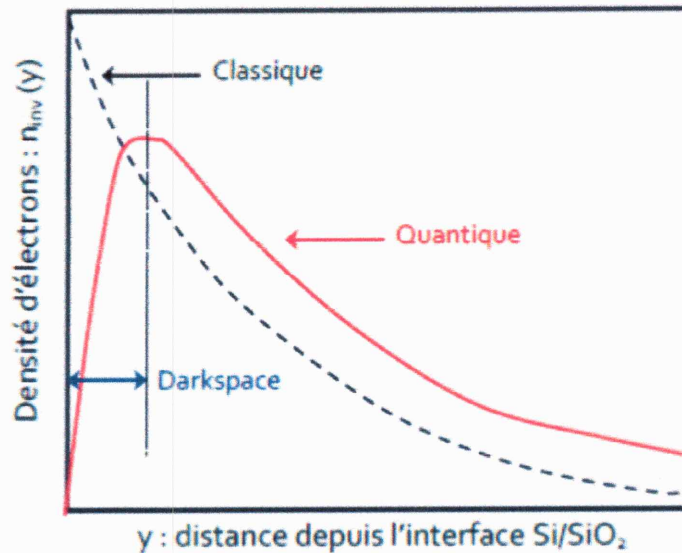


Fig. II.1 : Influence des effets quantiques sur la densité $N_{inverse}$ par rapport au cas classique.

II.2. b) En accumulation:

L'influence des effets quantiques est peu frappante en ce régime puisque la capacité MOS est dans ce cas bloquée et leur modélisation est nettement plus compliquée qu'en inversion. Notons cependant que ces effets se manifestent par une diminution significative du potentiel de surface par rapport au cas classique, ce qui provoque une diminution de la densité de charge de la grille d'où la diminution de la capacité C_{poly} . [6]

II.3) Passage de la mécanique classique vers la mécanique quantique:

Dans le cas classique, on met en évidence la nature corpusculaire des porteurs dans le semi-conducteur, ces porteurs sont considérés comme des particules de masse

effective m_e , animés d'un mouvement brownien caractérisé par un libre parcours moyen donné par l'expression :

$$L = V_{th} * \tau_c$$

Avec V_{th} est la vitesse thermique, τ_c est le temps de collision. A la température ambiante, ce libre parcours est de l'ordre de 100 à 1000Å° (Assez grand), ce qui confirme que les porteurs sont libres et peuvent se déplacer dans toutes les directions du cristal.

En effet, les particules auxquelles nous nous intéressons ici sont des particules effectives donc réelles et sont libres dès que leurs énergies se situent dans l'une des bandes permises (Conduction ou Valence), cette énergie leur permet de se déplacer sans être entravés et ce dans toutes les directions. On parle dans ce cas du comportement 3D des porteurs.

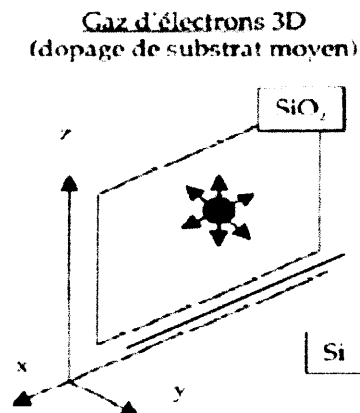


Fig. II.2 : Comportement 3D des porteurs.

L'étude des hétéro-structures a montré que la région voisine de l'interface entre deux matériaux pouvait être le siège d'une grande densité de porteurs libres, fonction de la nature des matériaux et de la polarisation de la structure.

Dans les structures MIS en particulier, l'obtention de la densité de ces porteurs libres en fonction de la polarisation de la structure ainsi que leur distribution spatiale

est assurée par la simple résolution de l'équation de POISSON et ce en considérant les deux hypothèses suivantes [9] :

- Toutes les impuretés dopantes sont ionisées.
- Les porteurs libres obéissent à la statistique de Boltzmann.

Hors, ces deux hypothèses ne sont pas toujours valides. En effet, la première hypothèse est peu justifiée en régime d'accumulation et à basse température car les impuretés sont en partie neutralisées par les porteurs libres. Tandis que la deuxième, elle est mise en défaut dans les régimes d'accumulation et d'inversion puisque le semi-conducteur est dans ce cas dégénéré et n'obéit plus à la statistique de Boltzmann. Dans ce cas, la densité des porteurs libres, leur répartition ainsi que leur comportement ne peuvent plus être décrit que par le biais de : « *la mécanique quantique* ».

En effet, la mécanique classique qui considérait les porteurs libres comme un gaz à trois dimensions, trouve ses limites lorsque les dimensions des composants sont de plus en plus petites, en particulier, l'épaisseur d'oxyde dans les structures MOS et la longueur du canal. La physique à cette dimension change d'aspect avec l'apparition de certains effets liés à cet ordre de grandeur d'où l'aspect quantique ne peut plus être négligé.

II.4) Quantification des niveaux d'énergies :

Dans les technologies MOS à faible épaisseur d'oxyde de grille T_{ox} , il règne un champ électrique très élevé à l'interface Si/SiO₂. Les bandes énergétiques de conduction et de valence se courbent près de cette interface, confinant les porteurs dans un puits de potentiel, perpendiculaire au plan de l'interface. Ce confinement quantique impose un phénomène de quantification de l'énergie des porteurs sur des niveaux discrets et la distribution des porteurs à la surface du substrat est modifiée.

Ces porteurs ne peuvent plus être considérés comme un gaz à trois dimensions (3D), mais plutôt comme un gaz à deux dimensions (2D), ils sont donc libres dans le plan de la structure alors que leurs énergies sont quantifiées dans la direction perpendiculaire à l'interface. [10]

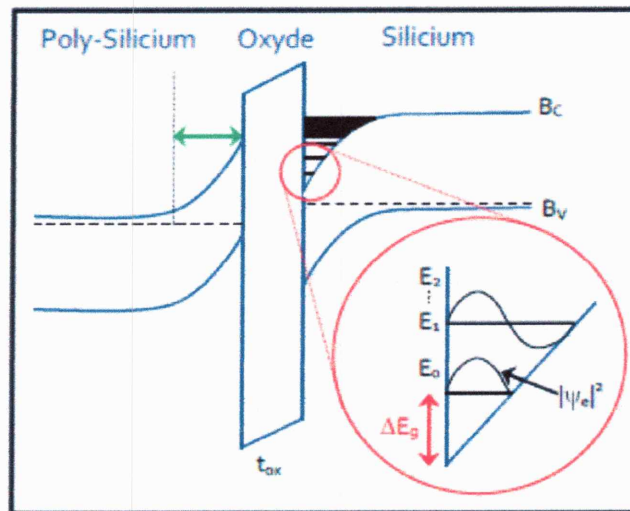


Fig. II.3 : Illustration de la quantification des niveaux d'énergie dans le puits.

Les porteurs dans le puits subissent des collisions sur ses parois durant leur mouvement ondulatoire décrit par des fonctions d'ondes obtenues suite à la résolution de l'équation unidimensionnelle de « SCHRODINGER » donnée dans le cas général par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta \psi_j(\vec{r}, t) + qV(\vec{r}, t) \times \psi_j(\vec{r}, t)$$

Où (j) est l'indice correspondant au type de porteur considéré, Δ est l'opérateur laplacien.

II.5) Modélisation des caractéristiques C(V) de la structure :

L'obtention des caractéristiques capacité-tension de la structure étudiée nécessite le calcul de la valeur de sa capacité pour chaque valeur de tension appliquée.

En effet, et comme nous l'avons souligné dans le chapitre précédent, la capacité de la structure est obtenue en différentiant les variations de la charge totale du semi-conducteur et les variations des tensions appliquées à la structure. Nous rappelons que (ΔQ_s) étant la variation de la charge causée par une variation (ΔV_g) de

la tension appliquée à la structure, la capacité de la structure est obtenue selon l'expression :

$$C = \frac{\Delta Q_s}{\Delta V_g}$$

La tension (V_g) appliquée à toute la structure MOS est calculée analytiquement, nécessitant le calcul préalable du potentiel aux bornes de l'oxyde noté : V_{OX} et celui aux bornes de la grille en poly (Si) noté : V_{POLY} . Quant à la tension aux bornes du substrat semi-conducteur, elle fait intervenir l'équation de « *Poisson* ».

On est donc confronté à un système couplé formé par les équations de « *Poisson et Schrödinger* » en une dimension, qui correspond à la direction perpendiculaire à l'interface OX/SC.

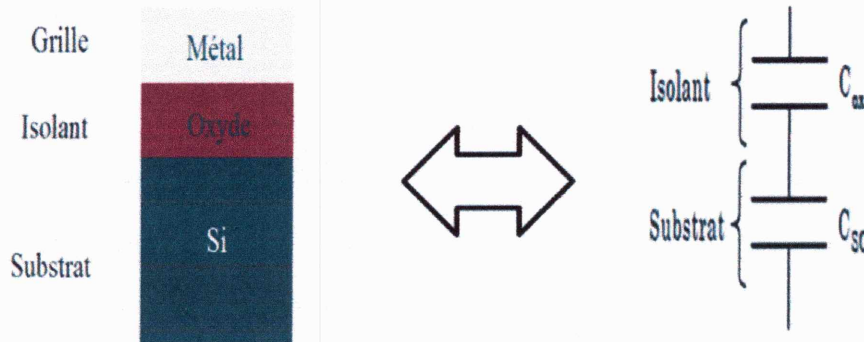


Fig. II.4 : schéma électrique capacitif équivalent.

Avec :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{OX}} + \frac{1}{C_{SC}}$$

II.6) La grille poly-cristalline d'une capacité MOS :

Nous allons rappeler les propriétés mécaniques et électriques intrinsèques de ce matériau ainsi que les principales.

II.6.a) Description du silicium polycristallin:

Le **silicium polycristallin**, aussi couramment appelé **polysilicium** ou **poly-Si** est une forme particulière du silicium, qui se différencie du silicium monocristallin et du silicium amorphe. Contrairement au premier (composé d'un seul cristal) et au second (n'ayant aucune ou une très faible cohérence cristallographique), le silicium polycristallin est constitué de multiples petits cristaux de tailles et de formes variées, qui lui confèrent des propriétés différentes des deux autres formes [11].

Le polysilicium est un matériau fortement flexible pour les applications microsystemes. Développé pour les interconnexions électriques, grilles de transistors, capacités, il est, depuis les années 80, très largement utilisé pour les structures micromécaniques dans les applications capteurs et actionneurs. En micro-usinage, il est également adapté pour les couches mécaniques.

II.6.b) les avantages de polysilicium :

Le Poly-silicium a l'avantage de pouvoir être compatible avec la fabrication des circuits intégrés conventionnels, ce qui permet l'intégration des capteurs avec les circuits électroniques de commande et de traitement du signal [12].

D'autre part, l'utilisation du poly(Si) est plus avantageuse par rapport à celle de l'Aluminium pour plusieurs raisons, parmi celles, nous citons :

- ✓ la tension de seuil des capacités MOS dont la grille est en silicium polycristallin est diminuée par rapport à une grille en aluminium.
- ✓ le silicium polycristallin accepte des températures assez élevées, environ 900°C contre 450°C pour l'aluminium [13].

II.6.c) Déplétion de la grille :

La déplétion de grille correspond à la formation d'une zone de charge d'espace dans le poly-silicium de grille à l'interface : Oxyde /Grille. En effet, la grille n'est pas

complètement dégénérée à son interface avec l'oxyde, il existe donc une courbure de bande d'énergie suite à une polarisation extérieure.

Cette désertion en porteurs correspond à l'existence d'une charge image positive liée à la déplétion du matériau de grille en régime d'inversion. Cette charge positive compense donc la charge négative côté substrat (cas Poly_{n+} et sub_P).

La zone de désertion est d'autant plus grande que le dopage de la grille est faible. Cette zone est équivalente à une capacité qui vient s'ajouter en série à la capacité surfacique de l'oxyde de grille C_{ox} , réduisant ainsi la capacité équivalente totale C [10] :

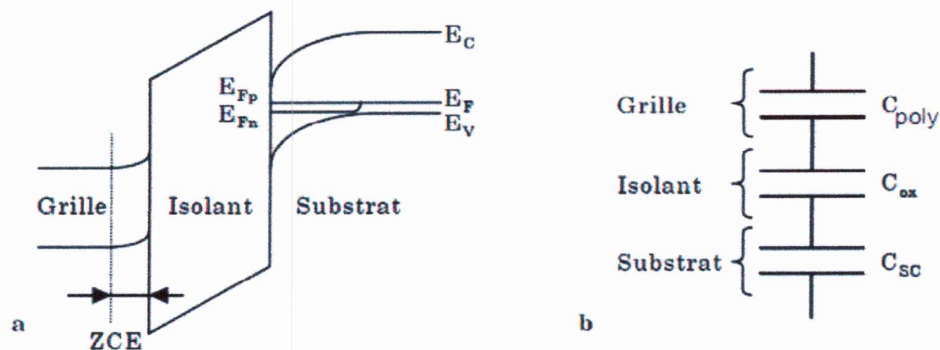


Fig. II .5 : Courbures des bandes d'énergie de la structure MOS dans le cas d'une grille en polysilicium (a) et schéma électrique capacitif équivalent (b)[14].

Pour des épaisseurs d'oxyde de grille suffisamment grandes (> 5 nm), la zone de déplétion de grille est négligeable contrairement au cas des faibles épaisseurs où l'épaisseur de la couche de déplétion devient du même ordre de grandeur que l'épaisseur de l'oxyde de grille [10].

II.7) Conclusion :

Nous avons présenté dans ce chapitre les deux phénomènes qui ont fait l'objet d'étude de ce mémoire, en l'occurrence, la déplétion de la grille en poly-silicium et automatiquement les phénomènes quantiques présents sous l'oxyde de grille.

En effet, aucune simulation ne peut être précise et fiable sans la prise en considération de ces phénomènes quantiques lorsque les oxydes atteignent des épaisseurs inférieures à 10 nm.

Nous avons montré le phénomène de déplétion de la grille. Ainsi que le polysilicium de la grille, nous avons présenté ses caractéristiques et ses avantages.

Chapitre III

Modélisation et simulation

III.1) Introduction :

Ce chapitre est consacré à la description de la mise en œuvre informatique permettant la résolution auto-cohérente des équations de « *Schrödinger* » et de « *Poisson* ».

Nous présenterons également le traitement nécessaire pour préparer leur résolution ainsi que la méthode de calcul utilisée.

Le code de simulation utilisé permet de décrire le fonctionnement de la capacité MOS et prend en considération les phénomènes liés aux variations des paramètres clefs de la capacité.

La résolution de système couplé « *Schrödinger-Poisson* » nécessite une méthode numérique de calcul précise et rapide tel que la méthode de « *Newton-Raphson* ».

III.2) Intérêt de la simulation des caractéristiques d'une capacité :

Dans le domaine de la caractérisation électrique des composants MOS, l'exploitation des caractéristiques capacité-tension $C(V)$ constitue le principal outil pour réaliser l'extraction des paramètres électriques les plus déterminants dans le fonctionnement des dispositifs élaborés.

Les procédures d'extraction de paramètres se sont avérées suffisamment précises et fiables tant que les épaisseurs d'oxyde de grille sont restées supérieures à 5 nm [6]. En revanche, lorsque les épaisseurs sont de plus en plus faibles, l'utilisation des tests sur des dispositifs réels devient rédhibitoire, aussi bien par rapport à leur réalisation qu'à leur prix. L'orientation vers la simulation des dispositifs s'avère donc de plus en plus évidente.

La simulation numérique est devenue de ce fait, une activité primordiale pour développer les différentes technologies, elle facilite le choix de nouveaux matériaux et des nouvelles architectures et permet aussi de comprendre plusieurs phénomènes qui prennent place dans les composants micro et nano-électroniques.

III.3) le principe de résolution du système couplé «Poisson-Schrödinger» :

A l'équilibre thermodynamique, les concentrations des porteurs de charges « électron et trous » d'un semi-conducteur obéissent à la statistique de Boltzmann donc le calcul de leurs densités ainsi que le potentiel électrostatique s'obtient par la résolution de l'équation de «*Poisson* » uniquement, et ce en chaque point de la structure considérée.

A partir de 10nm d'épaisseur d'oxyde, les effets quantiques deviennent inévitables. Dans ce cas, le calcul classique des concentrations des porteurs (utilisant l'équation de «*poisson* »seule) n'est plus valable.

Il est donc nécessaire de faire appel au calcul quantique caractérisé par le couplage de l'équation de «*Schrödinger* » à celle de «*Poisson* ».

III.4) Présentation du système couplé « Poisson-Schrödinger » :

Pour simuler les caractéristiques C(V) de la capacité MOS étudiée, nous avons donc besoin de résoudre le système couplé « Poisson-Schrödinger » défini par :

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(\varepsilon_0 \varepsilon_{si} \frac{d}{dx} \right) V(x) = -q[p(x) - n(x) + N_s] \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m_e(x)} \frac{d\psi_i(x)}{dx} \right) + qV(x)\psi_i(x) = E_i\psi_i(x) \end{cases} \quad (\text{III-1})$$

Avec :

$V(x)$: Le potentiel électrostatique, tel que $V(x) = -q(\Psi)$

$p(x)$ et $n(x)$: sont les densités des électrons et trous.

ε_0 : Permittivité du vide

ε_{si} : Permittivité diélectrique

N_s : concentrations des dopants

Et

$\Psi(x)$: la fonction d'onde

E : l'énergie quantifiée

m_e : La masse effective

La résolution de ce système nécessite la prise en considération des conditions aux limites qui sont principalement de deux types :

III.4.1) Condition aux contacts « Dirichlet » :

Les conditions de Dirichlet sont appliquées sur les contacts ohmiques à l'interface : (oxyde /semi-conducteur).

Elle portant sur le potentiel électrique et les densités de porteurs libres comme suit [6]:

Sur le potentiel :

Le potentiel électrostatique dans le semi-conducteur est relié à la polarisation extérieure V_g selon l'expression suivant :

$$\begin{cases} V = V_g + U_T * \ln(N) \rightarrow \text{Pour une région dopée N} \\ V = V_g + U_T * \ln(P) \rightarrow \text{Pour une région dopée P} \end{cases} \quad (\text{III-2})$$

Ou N et P sont les densités de porteurs normalistes par rapport à la concentration intrinsèque n_i .

Sur les densités des porteurs :

Puisque les contacts sont considérés du type ohmique, ils satisfont donc à la fois la condition de neutralité électrique et celle de l'équilibre thermodynamique, les densités des porteurs obéissant de ce fait au système d'équation suivant :

$$\begin{cases} P_0 - N_0 - N_S = 0 \\ P_0 * N_0 = n_i^2 \end{cases} \quad (\text{III-3})$$

Par conséquent, les densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique sont décrites par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} N_0 = \frac{N_S + \sqrt{N_S^2 + 4n_i^2}}{2} \\ P_0 = \frac{n_i^2}{N_0} \end{cases} \quad (\text{III-4})$$

III.4.2) Condition d'interface oxyde /semi-conducteur :

A l'interface : oxyde –semi-conducteur, nous considérons que la condition de continuité de vecteur de déplacement est vérifiée, elle est exprimée par :

$$\varepsilon_{\text{ox}} * E_{\text{ox}} = \varepsilon_{\text{si}} * E_{\text{si}} \quad (\text{III-5})$$

Nous considérons la condition portant sur la fonction d'onde suivante :

$$\psi(0) = \psi(L_p) = 0 \quad (\text{III-6})$$

(L_p) Étant la largeur du puits quantique.

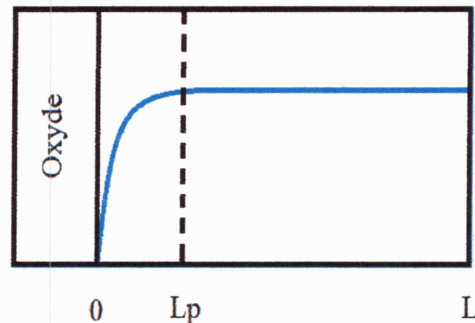


Fig.III.1: Représentation de l'extension du puits sur la distance L_p à partir de l'interface : oxyde/semi-conducteur

Cette dernière condition considérée qu'il n'y pas de pénétration de la fonction d'onde dans la couche d'oxyde, elle reste plutôt enfermée dans le puits.

III.5) Discrétisation du système couplé :

Pour résoudre le système d'équations que nous venons d'établir, plusieurs méthodes de discrétisation sont disponibles.

Les plus utilisées restent : Les différences finies, les boîtes finies et les éléments finis. Historiquement, la méthode des différences finies fut appliquée à un domaine unidimensionnel dans les travaux de Scharfetter et Gummel et qui sont considérés comme des pionniers dans la simulation des composants.

Cette méthode fut ensuite étendue au cas bidimensionnel. Elle consiste à diviser la structure en lignes parallèles généralement non espacées régulièrement et ceci dans la direction x si l'étude est unidimensionnelle ou bien dans les deux directions x, y si celle-ci est bidimensionnelle.

La méthode utilisée dans notre cas est celle des différences finies qui permet l'obtention de solutions approchées des problèmes aux dérivées partielles (Equations aux dérivées partielles avec conditions aux limites), en chaque nœud du maillage appelés : Points discrets [6].

III.5.1) Discrétisation de l'équation de « Poisson »:

Lorsque l'équation discrétisée est une équation de « Poisson » la fonction recherchée est le potentiel électrostatique ($U=V$), et la fonction « f » n'est autre que la densité de charge (second membre de l'équation de Poisson), puisque notre étude est menée en une dimension, les variations de la fonction recherchée ne se font que dans la direction (x) seulement.

De ce fait, l'équation discrète de Poisson se présente sous la forme :

$$D_i V_{i+1} + G_i V_{i-1} - C_i V_i = f(V_i, x_i)$$

Les coefficients : D_i , G_i et C_i sont donnés par :

$$\begin{cases} G_i = \frac{2}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ D_i = \frac{2}{(x_{i+1} + x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} \\ C_i = G_i + D_i \end{cases} \quad (\text{III-8})$$

Si nous considérons les (n) Equations discrètes dans les (n) points de maillage, nous obtiendrons tout un système qui peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$[A]^* [X] = [S] \quad (\text{III-9})$$

Pour l'ensemble des (n) points de discrétisation, nous obtenons un système linéaire, homogène qui peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$[H] * \psi_i = 0 \quad (\text{III-14})$$

Où : H est l'Hamiltonien du système, chacun de ses termes est défini par la somme des deux Energies cinétique et potentielle du porteur dans point déterminé (x_i).

La matrice H est tridiagonale et symétrique dont les valeurs sont les coefficients de l'équation discrétisée soit :

$$H = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_n \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \quad (\text{III-15})$$

III.6) Résolution de l'équation de « Poisson » par calcul itératif :

Dans le cas de l'équation de «Poisson», nous avons à résoudre un système de (n) équations dont les inconnues sont les valeurs du potentiel électrostatique et les densités de porteurs en chaque point du maillage.

Par conséquent, plus le maillage est dense ($n \gg$), plus la capacité de stockage et le temps de calcul sont importants.

Il va de soi que la résolution d'un tel système ne peut être que numérique nécessitant évidemment un calcul itératif qui est très utile pour ce genre d'applications.

Les méthodes itératives sont le plus souvent utilisée pour résoudre les systèmes contenant un grand nombre de variables, où les méthodes directes seraient trop coûteuses ou même inapplicables.

Il existe une multitude de méthodes itératives, chacune d'entre elles à ses propres propriétés qui la distinguent des autres en particulier : la rapidité, la convergence...

Le principe du calcul itératif en analyse numérique repose sur l'utilisation d'une valeur initiale, puis la raffiner par une succession d'approximations qui lui

permettent de se rapprocher graduellement de la solution finale, le choix de cette valeur initiale décide donc de l'exactitude de la solution finale.

Dans notre cas, nous avons opté pour la méthode itérative de « Newton-Raphson », celle-ci était plus rapide et dépend moins du potentiel de départ et aussi de la taille de la matrice considérée.

La résolution itérative de l'équation de Poisson par la méthode de « Newton-Raphson » donne facilement une solution du gradient de potentiel électrostatique A dans toute la structure à chaque itération, de sorte que le potentiel (V_i), solution de l'équation de « Poisson », s'écrive sous la forme :

$$V_{i+1} = V_i + \Delta V_i \quad (\text{III-16})$$

Lorsqu'il y a une convergence, la quantité ΔV_i tend à diminuer d'une itération à l'autre, le critère d'arrêt choisi est tel que :

$$\text{Max}(\Delta V_i) < \text{eps} \quad (\text{III-17})$$

(*eps*) est la précision fixée par l'utilisateur, elle est de 10^{-12} dans notre cas.

III.7) Résolution de l'équation de Schrödinger :

La résolution de l'équation de Schrödinger se ramène donc à la détermination des valeurs E_i et vecteurs propres ψ_i de la matrice H . Elle se réalise avec la fonction EIG de MATLAB qui prend en compte les conditions initiales qui nous avons posé, c'est-à-dire que la fonction d'onde s'annule en $z=0$ et $z=L_P$, et qui vérifie la relation de normalisation de la fonction d'onde [15]:

III.8) Organigramme de résolution du système considéré :

La résolution des équations couplées « Poisson-Schrödinger » résumée selon l'organigramme global suivant, qui explique quand et comment le couplage des équations est –il assurée [15].

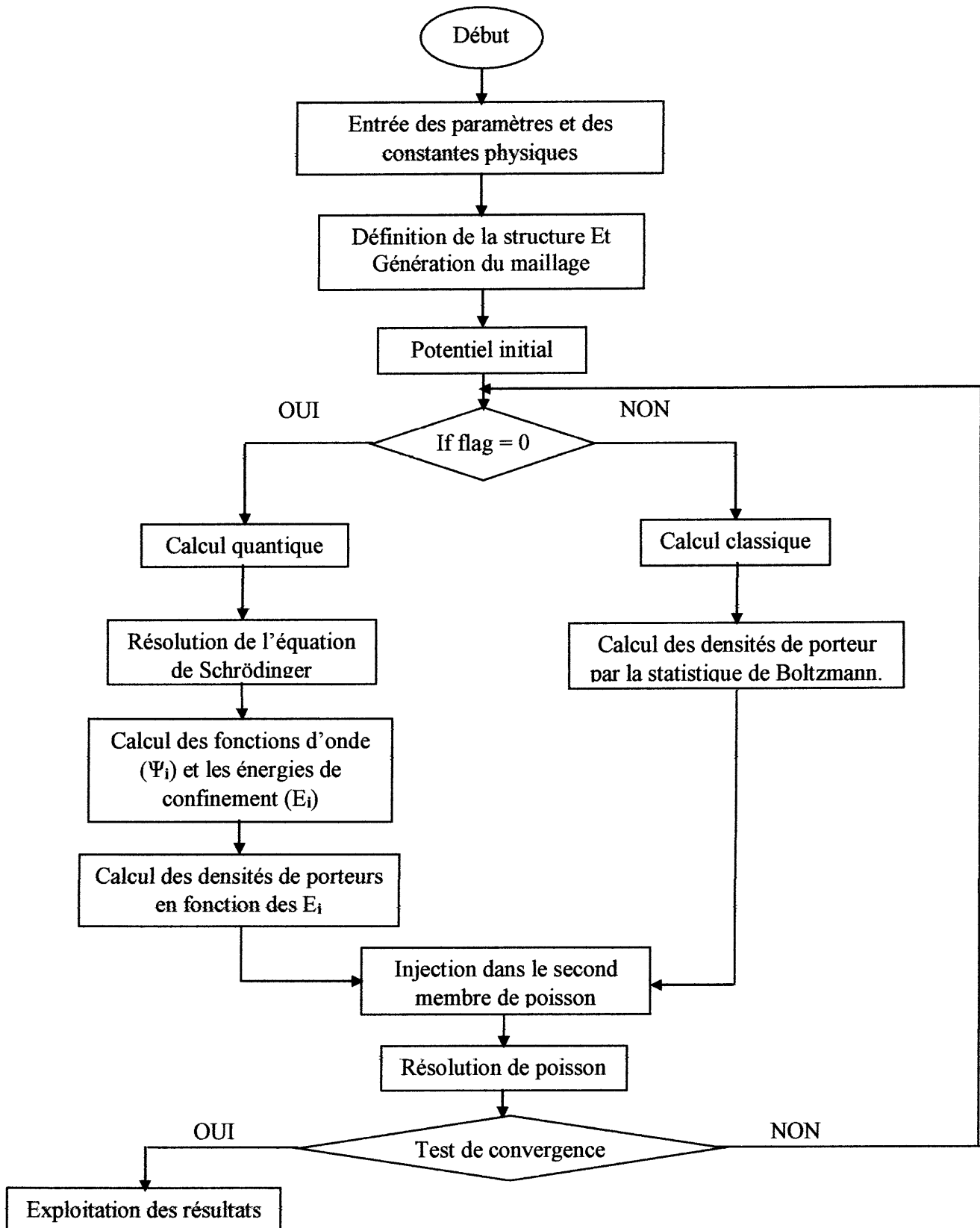


Fig. III.2 : Organigramme de résolution des équations de Poisson et de Schrödinger dans les deux cas : classique et quantique.

1-Introduction des constantes physiques nécessaires telles que : T_{OX} , N_S , N_{poly} , K_B , , , h , T_c , N_C , N_V , m_0 , m_1 , n_i ,ainsi que les paramètres de la structure essentiels pour la simulation tels que :profil de dopage , polarisation extérieure , dimensions, maillage

2-Nous allons considérer deux régions déférents : classique et quantique dans la structure considérée.

✓ **Une région quantique :**

Cette zone est très étroite et s'étend sur quelques 80 sous l'oxyde. Elle est la seule concernée par la résolution couplée des équations de « Poisson » et « Schrödinger » car elle est le siège des phénomènes quantiques étudiés.

✓ **Une région classique :**

Elle est plus large que la région quantique, sa largeur est d'environ 1 et constitue le volume du semi- conducteur. Dans cette région, nous ne résolvons que l'équation de « poisson » pour obtenir le potentiel électrostatique.

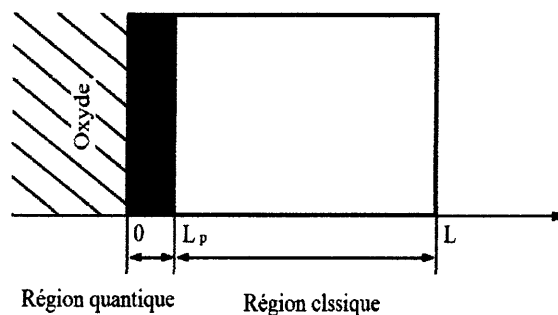


Fig.III.3 : Schématisation des différentes zones de calcul

3- Calcul des concentrations des porteurs « électron et trou » à l'équilibre thermodynamique et la tension de bande plates V_{FB} .

4- Introduction de la gamme de la tension V_{sc} appliquées à la surface du substrat.

5- Calcul des coefficients de la matrice A.

Si l'épaisseur de l'oxyde utilisée est faible (<10nm), nous devons prendre en compte les effets quantiques qui en résultants en adoptant un calcul quantique nécessitant la résolution de l'équation de « Schrödinger » alors que si l'oxyde est relativement épais (>10nm), le calcul classique suffira pour remonter au potentiel électrostatique par la seule résolution de l'équation de « poisson ».

a) Calcul classique :

1- calcul des concentrations des porteurs majoritaires (trou dans le cas d'un substrat de type p), selon la statistique de Boltzmann soit :

$$P(x) = P_0 * \exp(-\beta * V_0) \quad (\text{III-18})$$

Avec :

P_0 et V_0 sont respectivement le vecteur des concentrations à l'équilibre et le vecteur de potentiels initiaux.

2- calcul la concentration des porteurs minoritaires (électrons dans notre cas) en appliquant la loi d'action de masse, soit :

$$n(x) = \frac{n_i^2}{P(x)} \quad (\text{III-19})$$

3- Evaluation de la densité de charge formant le second membre de l'équation de poisson en utilisant les deux grandeurs précédentes.

4- calcul de la variation du potentiel notée ΔV_0 : calcul de la nouvelle valeur du potentiel :

$$V'_0 = V_0 + \Delta V_0 \quad (\text{III-20})$$

5- Test de convergence : nous arrêtons le calcul lorsque l'erreur maximale sera inférieure à 10^{-12} , sinon le processus itératif est relancé.

b) calcul quantique :

Le calcul quantique est distingué du calcul classique par la procédure de remontre aux concentrations des porteurs libers. En effet les étapes sont suivies :

- 1- Entrée des données.
- 2- Calcul de potentiel V dans la région quantique.
- 3- Calcul les coefficients de l'opérateur Hmiltonien (H).
- 4- Le calcul des valeurs et vecteurs propres de (H) les valeurs propres correspondent aux niveaux d'énergie discrets alors que les vecteurs propres correspondent aux fonctions d'ondes équivalentes.
- 5- Le calcul des concentrations des électrons à partir des valeurs des énergies de confinement (E_i).
6. En ayant les concentrations des porteurs libers, on continuera le calcul e adoptant la même démarche que celle du calcul classique.

La partie restante correspond à une région classique et donc on n'y résous que l'équation de poisson. Nous voyons bien que la relation de ces équations, aussi bien l'équation de « Poisson » dans le domaine classique que la relation couplée de « Poisson et Schrödinger ».

Dans le domaine quantique, s'avère particulièrement délicate d'où la nécessites de disposer d'un outil informatique puissant, stable et performant pour accomplir cette tâche.

III.9) calcul de la capacité de la structure :

La capacité de la structure est calculée à partir des variations de la charge totale du semi-conducteur divisée par les variations des tensions appliquées à la structure [16] selon l'expression :

$$C = \frac{\Delta Q_s}{\Delta V_g} \quad (\text{III.21})$$

La tension globale (V_g) appliquée sur la grille de la capacité MOS est calculée analytiquement, nécessitant le calcul préalable du potentiel aux bornes de l'oxyde

noté : V_{OX} et celui aux bornes de la grille en poly (Si) noté : V_{POLY} . En effet, la tension totale est la somme des tensions calculées précédemment selon l'expression :

$$V_g = V_{Poly} + V_{ox} + V_{Si} + V_{Fb} \quad (III.20)$$

Le substrat et la grille étant tous les deux constitués de (Si) à l'équilibre thermodynamique, leurs travaux de sortie sont égaux et la tension de bandes plates est par conséquent prise égale à zéro.

III.10) Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons essayé de donner un aperçu clair sur les équations utilisées dans le programme de simulation. Celui-ci est basé sur la résolution auto-cohérente des équations de «Poisson et Schrödinger » discrétisées par la méthode des différences finies.

Le couplage de l'équation de «Schrödinger» est nécessaire lorsque l'épaisseur de l'oxyde est de plus en plus mince car elle permet de prendre en considération les phénomènes quantiques qui se manifestent à cette échelle.

Vu la taille du système matriciel obtenu, nous avons opté pour la méthode itérative « Newton-Raphson » pour la résolution de l'équation de « Poisson » caractérisée par sa rapidité, sa bonne convergence et son indépendance de la valeur initiale. Elle est basée sur le calcul de l'erreur effectuée sur le potentiel à chaque itération.

Quant à la résolution de l'équation de « Schrödinger », elle se limite à l'obtention des valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur Hamiltonien.

Chapitre IV

Interprétation des résultats



IV.1) Introduction :

Dans ce chapitre, Nous allons présenter les résultats obtenus lors de la simulation des caractéristiques capacité-tension de la capacité MOS étudiée, ces résultats ont été obtenus suite à la résolution couplée des équations de « Poisson » et de « Schrödinger » assurée par le logiciel présenté dans le chapitre précédent.

Dans ce qui suit, nous allons étudier en particulier, l'influence du dopage de la grille poly-cristalline, de l'épaisseur de l'oxyde, et de la température sur le phénomène de déplétion.

IV.2) Présentation de la structure considérée pour l'obtention des C(V) :

Comme nous l'avons souligné dans les chapitres précédents, la structure considérée pour l'obtention des caractéristiques capacité-tension $C(V)$, est une simple capacité MOS dont le substrat est constitué de (Si) monocristallin de type (P), la grille est également constituée de (Si) mais poly-cristallin de type (N), et ayant le dioxyde de Silicium comme oxyde de grille.

IV.2.a) Effet du dopage de la grille (poly-si) :

A la température ambiante $T=300K$, on fixe le dopage du substrat à : $N_s=2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, l'épaisseur d'oxyde à : $T_{ox} = 2 \text{ nm}$, et fait varier le dopage de la grille pour voir son influence. En effet, nous allons considérer les dopages de grille suivants :

$N_{poly}=-1E 20 \text{ cm}^{-3}$, $N_{poly}=-5E 19 \text{ cm}^{-3}$, $N_{poly}=-1E 19 \text{ cm}^{-3}$, $N_{poly}=-5E 18 \text{ cm}^{-3}$.

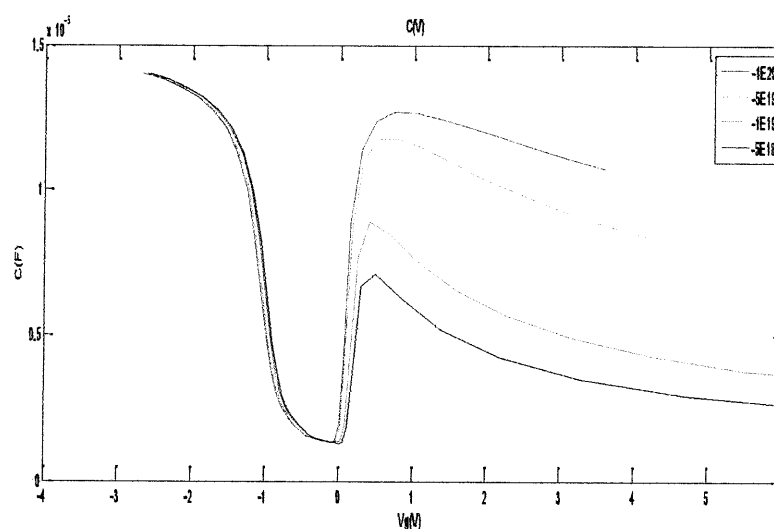


Fig.IV.1 : Caractéristiques $C(V)$ pour différentes dopages de la grille (poly-si)

La figure (IV.1) montre clairement que le phénomène de déplétion de la grille apparaît en régime d'inversion, où on remarque nettement une réduction de la capacité totale de la structure.

En effet, l'extension de la zone de charge d'espace (ZCE) du côté de la grille (poly-si) est augmentée quand le dopage de la grille diminue et elle provoque par conséquent, la diminution de la capacité de la grille (C_{poly}) ainsi que celle de la capacité totale.

La figure (IV.2) montre aussi, des courbes expérimentales et simulées par [10] d'une capacité pour différentes dopages de la grille. Nous y remarquons une proportionnalité quasiment identique que la nôtre et nous montre qu'un dopage modéré de la grille ($-5e^{18}$) permet d'observer le phénomène de déplétion la grille plus clairement.

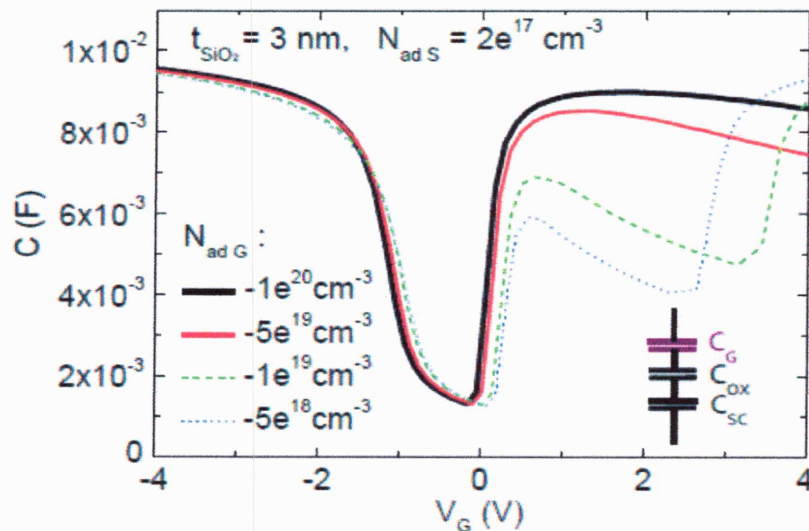


Fig.IV.2 : influence de la poly-déplétion de grille sur une capacité en fonction du dopage de la grille. [10]

IV.2.b) effet du l'épaisseur d'oxyde :

A la température ambiante $T=300\text{K}$, on fixe le dopage du substrat à : $N_s=2 \cdot 10^{17}\text{cm}^{-3}$, le dopage de la grille à : $N_{\text{poly}} = -1 \cdot 10^{20}\text{cm}^{-3}$, et fait varier l'épaisseur d'oxyde pour voir son influence. En effet, nous allons considérer les différentes épaisseurs d'oxydes suivants :

$T_{\text{ox}} = 2 \text{ nm}$, $T_{\text{ox}} = 2.5 \text{ nm}$, $T_{\text{ox}} = 3 \text{ nm}$, $T_{\text{ox}} = 4 \text{ nm}$, $T_{\text{ox}} = 5 \text{ nm}$.

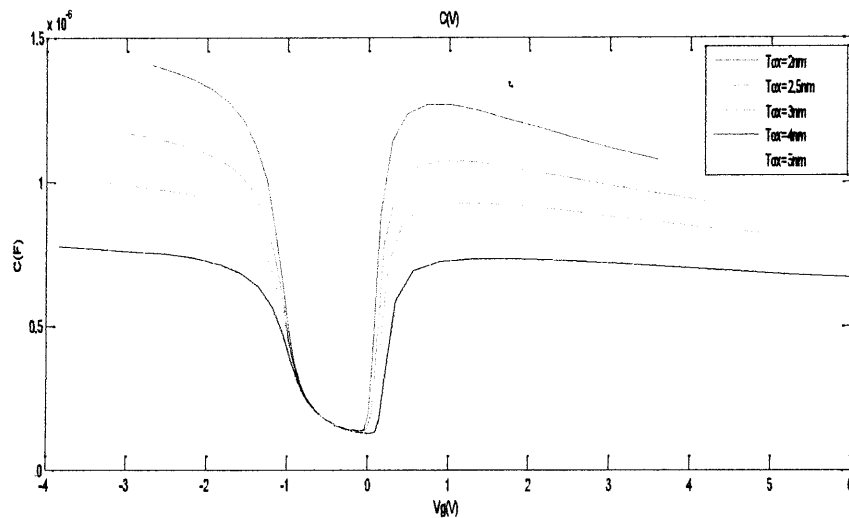


Fig.IV.3 : Caractéristiques $C(V)$ pour différentes épaisseurs d'oxyde

La figure (IV.3) montre que le phénomène de déplétion de la grille n'est visible que si l'épaisseur d'oxyde est ultra mince (2 à 3nm).

En effet, la diminution de l'épaisseur d'oxyde fait augmenter sa capacité (C_{ox}), celle-ci étant mise en série avec celle de la grille et celle du substrat, elle fait donc chuter la capacité totale de la structure.

IV.2.c) effet de la température :

Dans le cadre de la validation de notre code de simulation, nous avons pensé à étudier également, l'influence de la température sur ce même phénomène de déplétion de la grille.

Nous avons donc fixé le dopage du substrat (p) à : $N_s=2 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$, le dopage de la grille(N) à : $N_{\text{poly}}=-1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$, et l'épaisseur d'oxyde à : $T_{\text{ox}} = 2 \text{ nm}$. Nous avons par contre considéré différentes valeurs de la température, soient :

$T=100\text{k}$, $T=200\text{k}$, $T=300\text{k}$, $T=400\text{k}$.

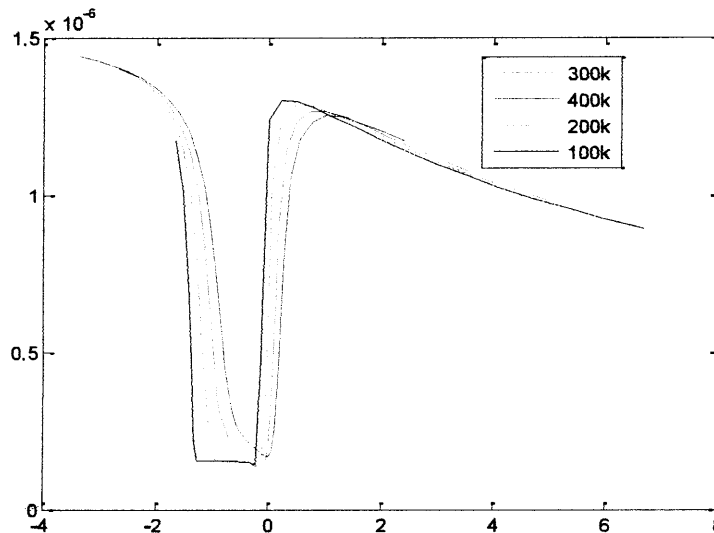


Fig.IV.4 : Caractéristiques $C(V)$ pour différentes températures

La figure (IV.4) présente des $C(V)$ qui montrent clairement que la capacité de la structure en régime d'inversion, reste constante pour toutes les températures considérées, confirmant ainsi que la déplétion de la grille est un phénomène indépendant de la température.

IV.3) Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différents résultats obtenus suite à nos simulations des caractéristiques $C(V)$ de la structure étudiée.

Nous avons pu confirmer que le phénomène de déplétion de la grille est directement lié au dopage de la grille et aussi, à l'épaisseur d'oxyde, mais pas à la température.

En effet, en régime d'inversion, la déplétion de la grille est d'autant plus nette que son dopage est faible, et que l'oxyde est plus fin. Ces deux paramètres font que la capacité de la

grille devienne du même ordre de grandeur que celle de l'oxyde. Son association en série avec celle de l'oxyde et celle du substrat font baisser la capacité totale de la structure.

Ce même phénomène de déplétion de la grille reste par contre indépendant de la température.

Les résultats que nous avons obtenus sont en parfait accord avec d'autres résultats simulés et expérimentaux [5].

Conclusion générale :

Le travail que nous avons effectué pendant ce mémoire, nous a grandement permis d'acquérir une meilleure connaissance du phénomène de la déplétion de la grille poly-cristalline en régime d'inversion ainsi que les paramètres qui l'influencent.

Notre structure d'étude est une simple capacité MOS à grille en (Si) poly-cristallin, c'est un empilement que l'on trouve dans la majorité des composants de technologie MOS, la maîtrise donc de son comportement, facilite grandement la compréhension et la maîtrise de composants plus complexes.

Nous étions donc menés dans cette étude à obtenir les caractéristiques capacité-tension $C(V)$ de la capacité MOS étudiée, ceci nous a nécessité le calcul du potentiel électrostatique ainsi que les densités de porteurs (électrons et trous). Ces quantités sont obtenues suite à la résolution des équations couplées de « **Poisson** » et « **Schrödinger** » à une dimension.

La résolution de ce système sous son aspect différentiel et avec conditions aux limites, n'est pas du tout facile, nous l'avons changé en équations aux différences en les discrétisant par la méthode des différences finies, cette représentation les prépare pour une résolution numérique adéquate après les avoir écrites sous la forme matricielle.

En effet, l'équation de « **Poisson** » a été résolue par la méthode itérative de Newton Raphson, tandis que celle de « **Schrödinger** » revient just à calculer les valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur Hamiltonien.

A partir des différentes simulations des caractéristiques $C(V)$, nous avons pu confirmer que le phénomène de déplétion de la grille poly-cristalline et qui se manifeste par une réduction de la capacité totale de la structure, est directement lié à l'épaisseur de l'oxyde et aussi au dopage de la grille, alors qu'il est totalement indépendant de la température.

En effet, plus l'oxyde est fin et la grille est faiblement dopée, ce phénomène est de plus en plus visible et apparent sur les $C(V)$ en régime d'inversion. Alors que la température n'a guère influencé ces caractéristiques.

Il est à noter que les résultats obtenue sont en très bon accord avec d'autres résultats simulés et même expérimentaux réalisés par d'autres auteurs.

Références Bibliographiques :

- [1] : Laurent JALABERT, « Ingénierie de grille pour application à la micro-électronique MOS sub-micronique. », Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2001.
- [2] www.elec.ucl.ac.be/enseignement/ELEC2550/SET.pdf
- [3] Johann Sée, « théorie du blocage de coulomb appliquée aux nanostructures semi-conductrices : modélisation des dispositifs à nanocristaux de silicium », Thèse de doctorat, Université d'Orsay, 2003.
- [4] : Olivier FRUCHIER, « Étude du comportement de la charge d'espace dans les structures MOS : Vers une analyse du champ électrique interne par la méthode de l'onde thermique », Thèse de doctorat, Université Montpellier II, 2007.
- [5] A. Bouziane « Etude des phénomènes de transport à travers des oxydes ultra-minces Promotion » mémoire de master, université de Jijel, 2013.
- [6] : A. Merzougui, « Etude des courants de fuite de type SILC dans les cellules EEPROM », Thèse de doctorat, Université Mentouri, Constantine, Algérie, 2010.
- [7] : A. Boukhemela « Etude des phénomènes quantiques dans une capacité MOS à oxyde ultra mince » mémoire de master, université de Jijel, 2012.
- [8] Fabien prégaliny, « Etude et modélisation du comportement électrique des transistors MOS fortement submicroniques », Thèse de doctorat, université Louis Pasteur, 2003.
- [9] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 3^{eme} édition refondue et augmentée.

[10] : Théodore NGUYEN, « Caractérisation, modélisation et fiabilité des diélectriques de grille à base de HfO₂ pour les futures technologies CMOS », Thèse de doctorat, L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.

[11] : http://fr.wikipedia.org/wiki/Silicium_polycristallin

[12] : Bertrand MARTY, « Conception, réalisation et mise en œuvre d'une plateforme d'instrumentation thermique pour des applications microfluidiques », Thèse de doctorat, l'université Toulouse III – Paul Sabatier, 2009.

[13] : D. Constantin, « réalisation de circuits intégrés MOSTEC », TP MOSTEC, 2009.

[14] : S. BERNARDINI, « modélisation des structures métal-oxyde-Semi-conducteur (MOS): applications aux dispositifs mémoires », Thèse de doctorat, Université D'AIX-MARSELLEI ,2004 .

[15] E.JORDANA, « Conception, réalisation et caractérisation de grilles en silicium polycristallin déposé amorphe à basse température et dopé bore in situ», thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, 2005.

[16] Eric M. Vogel, Curt A. Richter, Brian G. Rennex, "A capacitance–voltage model for polysilicon-gated MOS devices including substrate quantization effects based on modification of the total semiconductor charge", Solid-State Electronics, Vol. 47, P.1589–1596, 2003.

