République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur Et de la recherche scientifique



Université de Jijel Faculté des Sciences et de la technologie Département d'ELECTRONIQUE

Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du diplôme de master en électronique

Option : Micro-électronique

<u>Thème</u>

Modélisation de la distribution de la densité d'état des pièges dans le silicium polycristallin

<u>Encadré par :</u>

Mr. Riad Remmouche Mr . Rachid Fates <u>Présenté par :</u> HAMIDA MILAT MERIEM MENDER

Promotion : juillet 2019

Plus grand nous cherchons, plus grand est notre étonnement, plus grand est notre émerveillement pour ce que nous contemplons

Abdus Salam Prix Nobel de Physique 1979

Tous ceux qui sont sérieusement impliqués dans la science finiront par être convaincus qu'un Esprit se manifeste dans les lois de l'Univers, un Esprit immensément supérieur à celui de l'homme

> Albert Einstein Prix Nobel de Physique 1921

Remerciement

Tout d'abord et Avant tout, Nous remercions **DIEU** qui nous a donné la force, la volonté, la patience et le courage pour accomplir ce modeste travail, Merci de nous avoir éclairés le chemin de la réussite.

Nous remercions également nos familles pour les sacrifices Qu'elles ont faits pour que nous terminions nos études.

Nous tenons à remercier nos encadreurs **Riad Remmouche** Et **Rachid Fates** pour tous les efforts et patience qu'il a fourni pour nous faciliter et aider à accomplir notre travail de fin d'étude

Nous remercions également, les membres de jury qui ont accepté d'examiner et de juger notre travail.

Ainsi que tous les enseignants qui nous ont accompagnés activement le long de nos années d'étude à l'université.

Enfin nous exprimons notre profonde reconnaissance à tous les personnes qui ont participé de prés ou de loin à la réalisation de ce projet .

A, tous, un grand merci.

Dédicaces

Je dédie ce travail,

A ma mère qui m'a tout donnée sans rien à prendre, celle qui a vraiment octroyée la lumière pour un aveugle et la richesse pour un pauvre.

A l'âme de mon père, le phare qui éteint, mais sa flamme est toujours là,

A toute ma grande famille chacune de son nom et en particulier Mes chères fleurs : Amira, Malak, Selsabile, Siradj eldine, Ishak, Ghefrane, Aridj, Yasser, Ilife, Iline et diyaa eldine.

A tous mes collègues et mes amis,

À tous, qui m'aiment

Hamida

Hamida

Dédicaces

Mes parents qui me sont les plus chers au monde, dont l'amour et Les sacrifices n'ont pas cessé de combler ma vie ; Que Dieu les protège et les garde pour moi.

Mes frères et sœurs

Toute ma famille.

Mon fiancé Moussa.

Toutes les amies durant mes années d'études

Tous ceux que me sont chers

Nous dédions ce

travail...

MERIEM

Sommaire

Remerciement	.i
Dédicace	ii
Table des matières.	vi
Liste des acronymes.	X
Liste des figures	XV

Table des matières

Introduction Générale0	1
------------------------	---

Chapitre I : Etat de l'art sur le silicium nanocristallin

I.1 . Introduction	
I.2 . Silicium monocristallin	
I.3 . Types de défauts dans le silicium monocristallin	
I.3.1 . Défauts sans dimension (0D) : défauts ponctuels	
I.3.2. Défauts linéaires (1D) : Dislocations	
I.3.3 . Défauts surfaciques (2D) : Joints de grain	
I.3.4 . Défaut volumique (3D)	
I.4. Différentes formes du silicium	
I.4.1. Silicium monocristallin	
I.4.2 . Silicium amorphe	
I.5 . Différentes gammes du silicium	
I.5.1. Silicium multi-cristallin	
I.5.2 . Silicium microcristallin	
I.5.3. Silicium polycristallin	
I.5.4 . Silicium amorphe hydrogéné a-Si:H	
I.6 . Pièges dans un semi-conducteur	
I.6.1 . Pièges profonds	
I.6.2. Pièges d'interfaces	
I.6.3. Etude de Schrockley-Read-Hall	

)
)
)
ļ
,

Chapitre II : Transistor en couche mince à base de silicium nanocristallin

II.1 . Introduction
II.2. Définition des transistors en couches minces
II.3 . Technologie TFT en silicium poly et nanocristallin
II.4 . Descriptions physique et électrique des TFT à base de polysilicium
II.4.1 . Structure des TFT
II.4.2. Fonctionnement des TFT
II.4.3 . Tension de seuil
II.4.4. Pente sous le seuil
II.4.5. Différents substrats des TFT Poly-Si
II.5. Propriétés électriques du film poly silicium
II.5.1. Mécanisme de ségrégation des atomes dopants
II.5.2. Mécanisme de piégeage des porteurs de charges
II.5.3. Densité d'état
II.5.4. Influence de la densité des pièges sur la tension de seuil
II.6. Notion de masse effective
II.7. Equations fondamentales
II.7.1 . Equation de Poisson
II.7.2 . Equation de Schrödinger
II.7.3. Equation de continuité
II.8. Effet de la taille des grains sur les propriétés des nanostructures
II.9. Effets quantiques dans les structures MOS
II.9.1. Confinement quantique
II.9.2 . Confinement quantique dans les nanostructures semi-conductrices 41

II.9.3 . Confinement quantique à une dimension : Puits quantique	41
II.9.4 . Confinement quantique à deux dimensions : Fil quantique	42
II.9.5. Confinement quantique à trois dimensions : Point quantique	42
II.10. Conclusion	43

Chapitre III: Modélisation et Simulation du TFT

III.1. Introduction	
III.2 . Distribution de la densité des pièges dans le Silicium nanosilicium	44
III. 2.1. Densité d'états de pièges	44
III.2.2 . Résultats de simulation numérique	45
III.2.3 . Variation de la densité en fonction d'énergie	46
III.3. Potentiel de surface	47
III. 3.1 . Présentation théorique du potentiel de surface	47
III. 3.1.1 Equation de Poisson	47
III.3.1.2. Potentiel de fermi	48
III.3.1.3 Concentration intrinsèque des porteurs	48
III.3.1.3 .Expression analytique du potentiel de surface	50
III. 3.1.4 Effets quantiques	51
III.3.2 . Résultats et discussion	52
III.3.2.1. Potentiel de Surface	52
III. 3.2.2 Effets quantiques	54
III.4. Tension de seuil	55
III.4.1. Présentation théorique de la tension de seuil	55
III 4 2 Résultats de simulation numérique	57
	57
III.4.2.1. Tension de seuil	57
	57
111.4.2.2. Dependance de la tension de seuil à la densite des pieges	58
III.4.2.3. Dépendance de la tension de seuil à l'épaisseur de l'oxyde	59

III.4.2.4. Dépendance de la tension de seuil à la température	59
III.4.2.5. Dépendance de la tension de seuil à la densité des pièges	60
III.4.3.Structure granulaire	62
III.4.4.Potentiel électrostatique	63
III.4.5. Variation de la tension de seuil en fonction du dopage	63
III.4.6. Variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour	64
différentes valeurs de la densité du piège	
III.5. Modélisation compacte du transport	64
III.5.1.présentation théorique	64
III.5.1.1.modèle analytique compact du courant de drain	68
III.5.1.2. Tableau des paramètres	68
III.5.3. Caractéristique de sortie I _{DS} (V _{DS}) pour différentes valeurs de V _{GS}	68
III.5.4. Caractéristique de transfert I _{DS} (V _{GS}) pour différentes valeurs de V _{DS}	. 69
III.6. Conclusion	70
Conclusion générale	71

Α	
AFM	Microscope à force atomique
a-Si	Silicium amorphe
a-Si:H	Silicium amorphe hydrogéné
AMLCD	Active Matrix Liquid Crystal Displays

B

Bulk	Transistor sur silicium massif
С	
CMOS	Transistors Métal-Oxyde-Semi-conducteur complémentaires
Cox	Capacité de l'oxyde
C_{inv}	Capacité associée à la charge d'inversion
C_n	Coefficient de capture d'un électron
C_P	Coefficient de capture d'un trou
D	
d_{inv}	Désigne la largeur de couche d'inversion ou puit quantique
d_{dark}	Désigne la largeur de la région de confinement «darkspace».
DOS	Densité d'état
D (E)	Densité d'état en fonction d'énergie
D_n	Coefficient de diffusion des électrons
D_p	Coefficient de diffusion des trous
D	Vecteur de déplacement électrique
d	Taille moyenne de grain en nm.

E

E _F E _i E _g E _C	Niveau d'énergie de Fermi Niveau de Fermi intrinsèque Energie de la bande interdite du semi-conducteur Niveau d'énergie de la bande de conduction
E_{V}	Niveau d'énergie de la bande de valence
Е	Energie de l'état considéré.
$Eg\left(\infty ight)$	Bande interdite en volume
E_{cv}	Energie de la bande de conduction en volume

E_{cs}	Energie de la bande de conduction en surface
${\rm E}_{\rm Fi}$	Niveau de Fermi intrinsèque
e_n	Coefficient d'émission d'un électron
e_p	Coefficient d'émission d'un trou
G	
Gm	La transconductance
Ge	Le taux de génération,
g-r	Le centre de génération-recombinaison
Η	
h	Constante de Planck.
HTPS	High Temperature Polysilicon en anglais
ħ	Constante de planck réduite
Ŧ	
l	
ID	
I _{GD} I _{GS}	Courant entre la grille et le drain Courant entre la grille et la source
I _{Dsat}	Courant de drain de saturation
I _{DS}	Courant entre la source et le drain
I _{tr}	Courant pour le régime transitoire
I _{abv}	L'expression de courant pour le régime supérieur au seuil,
I _{leak}	Courant de fuite,
Isub	Courant sous le seuil.
•7	
K	
k	Constante de Boltzman
L	
LTPS	Low TemperaturePolysilicon en anglais
LPCVD	Dépôt chimique en phase vapeur à basse pression

Lacc	représente la profondeur d'accumulation dans le grains,
Μ	
M_{c}	Nombre de minima dans la bande de conduction
MEB	Microscope électronique a Balayage
MOSFET	Métal oxyde semi-conducteur a effet de champ
MOS	Métal oxyde semi-conducteur
m	Masse de l'électron
m _h	Masses effectives des trous
me	Masses effectives des électrons
Ν	
N _{it}	Densité de pièges d'interface
N _A	Concentration des dopants accepteurs
N(E)	Densité d'états des pièges
Nc	Densité d'états au bord de la bande de conduction
Nv	Densité d'états au bord de la bande de valence
$N_D^+(x,y)$	Concentration de dopant donneurs
$N_A^-(x,y)$	Concentration de dopant accepteurs
N_{ST}	Densité surfacique
$N_{\scriptscriptstyle T\!A}$	Densité de pièges accepteurs
N_{TD}	Densité de pièges donneurs
n _i	Concentration intrinsèque
nc-Si	Silicium nanocristalline
Q	
QBC	Queues de bandes de conduction
QBV	Queues de bandes de valence
q	Charge électrique élémentaire absolue
S	

SOI Silicon On Insulator

SRH	Schokley Read Hall
SCE	Short Channel Effects
S	Pente sous le seuil
SOS	Silicon-On-Sapphire
SiO ₂	Oxyde de Silicium.
Т	
TMOS	transistor MOS
T T _{si}	Température Epaisseur de silicium
T _{ox}	Epaisseur d'oxyde
Tc(Tv)	Température caractéristique de la QBC (QBV)
TFT	Transistors en couches minces (Thin Film Transistors en Anglais)
U	
U	Taux de recombinaison-génération
μ ₀	Mobilité à faible champ électrique
μ_p	mobilité des trous
	mabilitá das álastrons
μ_n	modifie des electrons
μ _n	mobilité des éléctrons
μ_n V V(y)	Potentiel électrostatique.
μ_n V V(y) V _T	Potentiel électrostatique. Tension de seuil
μ_n \mathbf{V} $\mathbf{V}(\mathbf{y})$ \mathbf{V}_T \mathbf{V}_D	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat}	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation
	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS}	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS} V_{GS}	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS} V_{GS} V_G	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille Polarisation de la grille normalisée
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS} V_{GS} V_G V_D	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille Polarisation de la grille normalisée Polarisation du drain normalisée
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS} V_{GS} V_G V_D V_G	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille Polarisation de la grille normalisée Polarisation du drain normalisée Tension de grille
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{DS} V_{GS} V_G V_D V_G W	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille Polarisation de la grille normalisée Polarisation du drain normalisée Tension de grille
μ_n V $V(y)$ V_T V_D V_{Dsat} V_{FB} V_{GS} V_G V_G V_D V_G W τ_0	Potentiel électrostatique. Tension de seuil Tension de drain Tension de drain de saturation Tension de bandes plates Tension entre le drain et la source Tension entre la source et la grille Polarisation de la grille normalisée Polarisation du drain normalisée Tension de grille Durée de vie des porteurs

- ε_{SC} Permittivité du semi-conducteuret
- ε_0 Permittivité du vide.
- ε_r Permittivité diélectrique du milieu.
- $\epsilon(x)$ Constante diélectrique
- $\psi(y)$ Fonction d'onde.
- $\varphi(x,y)$ Potentiel électrostatique
- φ_s Potentiel de surface du semi-conducteur
- ϵ_{ox} Permittivité d'oxyde
- ϵ_{Si} Permittivité relative du silicium

Liste des Figures

Figure	Description	Page
CHAPITRE 1 :		
Figure I.1	Structure cristalline du silicium, (a) structure 3D,	4
	(b) réseau cristallin.	-
Figure I.2	Microphotographie du réseau cristallin du silicium prise par TEM.	4
Figure I.3	Structure du cristal de silicium.	5
Figure I.4	Structure de bande du silicium massif cristallin.	5
Figure I.5	Première observation de dislocations individuelles dans un cristal de silicium par la technique de topographie par rayons X.	6
Figure I.6	Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle.	7
Figure I.7	Schématisation du vecteur de Burger pour : a) dislocation coin, et b) dislocation vis.	7
Figure I.8	Image MEB des Joints de grains	8
Figure I.9	Exemple de réseau de silicium: a) cristallin, b) amorphe.	9
Figure I.10	Structure cristallographique et structure de bandes du silicium monocristallin.	10
Figure I.11	Liaison pendante dans le silicium.	11
Figure I.12	Densité d'états en échelle logarithmique dans la bande interdite du silicium amorphe (EV : bande de valence, EC : bande de conduction).	11
Figure I.13	Classification des matériaux silicium.	12
Figure I.14	Structure de grains dans une plaquette de silicium multi-cristallin.	13

Figure I.15	Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin.	13
Figure I.16	Image AFM du silicium microcristallin.	14
Figure I.17	Structure granulaire d'un film de silicium polycristallin.	15
Figure I.18	Structure granulaire (a) et colonnaire(b) du poly silicium.	15
Figure I.19	Configurations structurales possibles de l'hydrogène dans a-Si: H.	16
Figure I.20	Effet des niveaux pièges sur le transfert des électrons entre les bandes de valence et de conduction. Le niveau piège sert de marche intermédiaire.	17
Figure I.21	Mécanismes de génération-recombinaison assistés par pièges.	
	La transition s'effectue via un piège qui échange un électron	18
	avec la bande de conduction ou avec la bande de valence.	
	Dans ce dernier cas l'électron se recombine avec un trou ou crée	
	un trou en quittant la bande de valence. Ces échanges sont	
	conditionnés par la statistique de Fermi-Dirac. Pour avoir une	
	probabilité importante de transfert, le niveau piège doit être	
	situé en milieu de bande interdite. Pour déterminer le taux	
	de recombinaison génération, il faut exprimer les quatre processus présentés, émissions et captures des trous et électrons.	
Figure 1.22	Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur ayant des pièges, avec C_n le coefficient de capture d'un électron, E_c le niveau d'énergie de la bande de conduction, C_p le coefficient de capture d'un trou E_c le niveau d'énergie de la bande de	20
	capture d'un trou, E_V le inveau d'energie de la bande de valence e le coefficient d'émission d'un électron E le niveau de	
	Fermi intrinsèque et e_n le coefficient d'émission d'un trou. Le cas	
	<i>nt</i> se produit quand le piège est occupé par un électron, et le cas <i>pt</i> lorsque le piège est occupé par un trou.	

Figure I.23	Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur ayant des centres g-r, avec C_n le coefficient de capture d'un électron, E_c le niveau d'énergie de la bande de conduction, C_p le coefficient de capture d'un trou, E_v le niveau d'énergie de la bande de valence, e_n le coefficient d'émission d'un électron, E_i le niveau de Fermi intrinsèque et e_p le coefficient d'émission d'un trou. Le cas nt se produit quand le centre g-r est occupé par un électron, et le cas pt se produit quand il est occupé par un trou.	21
Figure I-24	 Evolution de la courbure des bandes d'un semi-conducteur de type n avec la densité d'états accepteurs de surface. E_{Fi} représente le niveau de Fermi intrinsèque. (a) pas d'états de surface, (b) peu d'états de surface, (c) beaucoup d'états de surface 	23
Figure I-25	Diagramme de bande du silicium cristallin et du silicium amorphe hydrogéné. D+, D0 et D- représentent les liaisons pendantes respectivement positives, neutres et négatives.[1]Etude par simulation numérique des propriétés électriques d'une cellule solaire en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) elm3	25
Figure I-26	Exemple de densité d'états N(E) dans le gap d'une couche de silicium amorphe hydrogéné non dopé	26
Figure I-27	Mécanisme de conduction des électrons dans l'a-Si :H : conduction dans les états délocalisés (conduction à travers les états étendus), conduction de piégeage dans les états localisés et le piégeage multiple des porteurs dans les états localisés.	26
CHAPITRE 2 :		
Figure II.1	Schéma général d'un TFT	28
Figure II.2	Structures du TFT : (à gauche) à grille inférieure et (à droite) à grille supérieure	30
Figure II.3	Matrice active réalisée sur acier pour écran OLED flexible	32
Figure II.4	Comparaison du modèle quantique et modèle classique	40

Figure II.5	Quantification de niveaux d'énergie à l'interface du confinement des porteurs	40
Figure II.6	Image MEB des points quantiques dans le nano-silicium	43
	CHAPITRE 3 :	
Figure III.1	(a) Modèle de densité d'états proposé par Mott et Davis.(b) Modèle de densité d'états de CFO	45
Figure III.2	Densité d'états des pièges en fonction de l'énergie (a) Echelle linéaire. (b) Echelle semi-logarithmique	45
Figure III.3	Variation de densité d'états en fonction de l'énergie : (a) variation de la position des niveaux d'énergie, (b) variation de la densité des états dans le gap, (c) variation de l'écart-type	46
Figure III.4	Section transversale d'un TFT en poly-Si en forte inversion.	48
Figure III.5	Potentiel de Surface en fonction de la taille des grains.	53
Figure III.6	Potentiel de surface avec et sans effets quantiques	53
Figure III.7	Variation de la constante diélectrique du nc-Si en fonction de la taille des grains.	54
Figure III.8	Energie de gap en fonction de la taille des grains du nc-Si.	55
Figure III.9	Tension de seuil en fonction de la taille des grains.	57
Figure III.10	Variation de la tension du seuil en fonction de la taille des grains pour différentes valeur de densité des pièges	58
Figure III.11	Variation de la tension du seuil en fonction de la densité des pièges pour différentes valeurs de T_{ox} .	58

Figure III.12	Tension de seuil en fonction de la densité des pièges sous	
	effet de la température.	59
Figure III.13	Tension de seuil en fonction de l'épaisseur de l'oxyde pour	60
	différentes valeur de la densité des pièges.	
Figure. III.14	Vue en coupe du canal d'un TFT en nc-Si	61
Figure III.15	Variation de la tension de seuil en fonction du dopage pour	
	différentes valeurs d'épaisseur d'oxyde de grille: (a) d= 5 nm	63
	et (b) $d = 20 \text{ nm}.$	
Figure. III.16	Variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur	
	d'oxyde pour différentes valeurs de densité des pièges :	64
	(a) $d = 5 \text{ nm et}$ (b) $Lg = 20 \text{ nm}$.	
Figure III.17	Caractéristique I _{DS} (V _{DS}) pour différentes valeurs de V _{GS}	68
Figure III.18	Caractéristique I _{DS} (V _{Gs}) pour différentes valeurs de V _{DS}	69
	LISTE DES TABLEAU	
	Tableau des paramètres	68

INTRODUCTION

Introduction générale

La densité d'états dans le gap des semiconducteurs amorphes est une propriété très importante pour comprendre la physique ainsi que les propriétés électroniques de ces matériaux. Plusieurs études théoriques et expérimentales ont été faites durant ces dernières années pour déterminer la densité d'états des semiconducteurs amorphes tels que le silicium amorphe et ses dérivés[1].

Le développement de la microélectronique est la base de l'industrie électronique de nos jours. Elle est soutenue par une forte activité de recherche & développement et de production, essentiellement localisée en Asie de l'Est (Japon, Corée, Taiwan...). Aujourd'hui, la principale application d'électronique grande surface concerne l'affichage (écrans plats), mais elle s'étend aussi au domaine des imageurs, comme par exemple les imageurs à rayons X ou les capteurs d'empreintes.

Contrairement aux transistors en silicium monocristallin, la technologie transistors en couches minces, désignés par l'acronyme anglais TFT (Thin Film Transistor), est parfaitement compatible avec ce type d'applications pour des raisons technologiques et économiques. En effet, non seulement il est impossible d'intégrer ces applications sur une tranche de silicium monocristallin (limitation actuelle des tranches à des diamètres de 300 mm) mais aussi le coût de fabrication est prohibitif pour des applications de type grand public. Or aujourd'hui, il est courant d'utiliser des substrats TFT de plus de 2 m pour les écrans plats. De plus, le processus de fabrication des transistors en silicium monocristallin atteint des températures élevées (1000°C environ) alors que celle des TFTs n'est que de quelques centaines de °C, donc compatible avec les substrats en verre de faible coût voire avec certains substrats plastiques. Parmi les TFTs, la technologie transistors à couches minces en silicium amorphe (a-Si: Amorphous Silicon en anglais) est aujourd'hui la plus mature et la plus répandue dans la fabrication industrielle de produits d'électronique grande surface. Elle est utilisée principalement pour des applications ne nécessitant pas des transistors rapides (commutateurs pour l'adressage des pixels dans les écrans plats). Elle présente des étapes technologiques bien définies et un faible coût de production. Mais, en contrepartie, les transistors en silicium amorphe ont une mobilité d'effet de champ très faible (de l'ordre de quelques 10^{-1} cm²/V.S) et une stabilité de la tension de seuil insuffisante dans le temps [2].

Pour pallier à ces problèmes, les transistors à couches minces en silicium polycristallin ou poly silicium (Poly-Si : Poly Silicon en anglais) ont été développés et sont venus concurrencer le silicium amorphe. L'essor de cette technologie s'explique par ce matériau polycristallin, intermédiaire entre le silicium amorphe et le silicium monocristallin. En effet, dans les technologies TFT en silicium amorphe, on observe au sein du réseau cristallin de nombreuses discontinuités qui empêchent les électrons d'emprunter un chemin direct. L'évolution des techniques de fabrication vers l'utilisation de technologie en silicium polycristallin permet d'améliorer la mobilité des électrons et, par conséquent, la performance des transistors TFT individuels en réduisant les joints de grains. Leur mobilité a été ainsi multipliée par un facteur dix à cent suivant la technologie de cristallisation utilisée (mobilité de l'ordre d'une centaine de cm²/Vs). Les TFT Poly-Si assurent de nouvelles perspectives d'applications où la vitesse et la densité d'intégration sont des paramètres importants.

L'objectif principal de ce mémoire réside dans la modélisation analytique des caractéristiques électriques d'un transistor en couche mince. Ce modèle tient compte de la structure des cristallites du silicium formant le canal en termes de morphologie et de taille des grains.

Notre étude commence par un état de l'art sur les différentes formes du silicium : polycristalline, nanocristalline, multicristalline et amorphe. Par ailleurs, nous avons présenté les différents défauts de structure dans les matériaux du silicium.

Dans le second chapitre, nous avons présenterons les aspects technologiques et morphologiques du TFT. Nous donnerons par la suite un aperçu clair sur les équations utilisées dans le programme de simulation.

Dans le dernier chapitre, nous présenterons résultats des simulations obtenues ainsi que leur analyse.

Nous terminerons notre manuscrit par une conclusion générale et quelques perspectives.

Chapitre I

Etat de l'art sur le silicium nanocristallin

Au sommaire de ce chapitre

- 1. Introduction
- 2. Silicium monocristallin
- 3. Types de défauts dans le silicium monocristallin
- 4. Différentes formes du silicium
- 5. Différentes gammes du silicium
- 6. Pièges dans un semi-conducteur
- 7. Centres de piégeage
- 8. Etat rapide et état lent
- 9. différents types de recombinaisons
- 10. Centres de génération-recombinaison
- 11. Etats de surface et d'interface
- 12. Densité d'états dans le silicium amorphe hydrogéné
- 13. Conclusion

I.1. Introduction

Les semi-conducteurs ont une importance à la fois technologique et économique. A l'origine, le germanium a été le premier semi-conducteur étudié et utilisé en électronique, mais il a été peu à peu abandonné en raison de sa densité d'état électronique élevée dans le gap et de ses faibles propriétés conductrices. Actuellement, le silicium est le matériau semi-conducteur prédominant en microélectronique. D'un point de vue physique, le silicium possède par rapport au germanium des propriétés électroniques plus performantes et une stabilité à des températures élevées. Du côté exploitation, il est le deuxième élément le plus abondant de l'écorce terrestre (environs 28% sous forme de composés : silicates, silice) [1].

Le silicium est le matériau semi-conducteur le plus utilisé pour la fabrication de dispositifs microélectroniques ainsi que des cellules photovoltaïques. Il se présente sous différentes structures selon la méthode utilisée pour sa production, les états extrêmes étant l'état amorphe et l'état cristallin. Ses propriétés physiques et électriques dépendent de la structure du matériau et des défauts structuraux et/ou chimiques.

Le cristal de silicium va représenter dans le cadre de ce cours un élément privilégié puisqu'une écrasante majorité des dispositifs microélectronique fabriqués à ce jour sont à base de ce matériau semi-conducteur. L'aspect semi-conducteur sera justifié plus loin. Le cristal de silicium est composé de liaisons entre les atomes qui constituent un tétraèdre régulier. La structure du cristal est identique à celle du diamant, que l'on appelle aussi zinc-blende, comme le montre la figure I.1.



Figure I.1. Structure cristalline du silicium, (a) structure 3D, (b) réseau cristallin.

I.2. Silicium cristallin

Le silicium cristallin se cristallise dans une structure de type diamant. Chaque atome du réseau est entouré par quatre proches voisins équidistants, formant un tétraèdre, avec lesquels il échange ses quatre électrons de valence.



Figure I.2. Microphotographie du réseau cristallin du silicium prise par TEM [2].

Dans ce réseau, les atomes occupent des positions bien définies et périodiques avec une distance interatomique de l'ordre de 2.37A°. La liaison entre les plus proches voisins est de type SP3 (angle de liaison 109°), ce qui donne des états électroniques conduisant à des bandes d'énergies permises et interdites.



Figure I.3.Structure du cristal de silicium [3].

La largeur des bandes interdites (gap) est un paramètre physique important dans la détermination des propriétés électroniques du semi-conducteur. A température ambiante, le gap du silicium est de l'ordre de 1.12 eV, comme le montre la figure I.4.



Figure I.4. Structure de bande du silicium massif cristallin [4].

I.3. Types de défauts dans le silicium cristallin

Il existe plusieurs types de défauts cristallins (défauts d'arrangement des atomes) dans les matériaux cristallins réels. Cette rupture de l'ordonnancement a un effet sur les propriétés d'usage du matériau. Certains de ces défauts sont liés à la mise en œuvre du procédé de solidification et l'on peut tenter de les éliminer en contrôlant

les conditions expérimentales de solidification. Les défauts cristallins sont généralement classés en fonction de leurs dimensions comme suit :

- Défauts sans dimension (0D) : comme les défauts ponctuels (atomes interstitiels ou auto-interstitiels, lacunes...).
- Défauts à une dimension (1D : linéaires) : les dislocations.
- Défauts à deux dimensions (2D : surfaciques) : les joints de grain.
- Défauts à trois dimensions (3D : volumiques) : les précipités ou inclusions.



Figure I.5. Première observation de dislocations individuelles dans un cristal de silicium par la technique de topographie par rayons X [5].

I.3.1. Défauts sans dimension (0D) : défauts ponctuels

Les défauts ponctuels se traduisent par une perturbation de l'ordre cristallin sur des dimensions limitées à une maille cristallographique :

- Les lacunes correspondent à un vide laissé dans la structure sur un site normalement occupé par un atome, comme le montre la figure 1.6 (a).
- Les atomes interstitiels sont des atomes en surnombre dans une structure ou bien des impuretés placées sur des sites normalement vides, comme le montre la figure 1.6 (b).
- Dans le cas où un atome occupe un site normalement occupé par un atome de nature chimique différente, on parle d'impureté substitutionnelle, comme le montre la figure 1.6 (c).



Figure I.6. Exemples de défauts ponctuels simples : (a) lacune, (b) atome en position interstitielle et (c) atome en position substitutionnelle.

I.3.2. Défauts linéaires (1D) : Dislocations

La déformation d'un cristal au-delà de son domaine d'élasticité induit l'apparition de lignes à la surface qui sont en réalité des traces de glissement des plans cristallins des uns par rapport aux autres. Sous l'effet des efforts mécaniques, ces traces sont les témoins de l'existence de défauts cristallins linéaires appelés dislocations.

Il existe deux types de dislocations : la dislocation vis et la dislocation coin. Chaque dislocation est définie par son vecteur de burger (b) qui est perpendiculaire à la ligne de dislocation dans le cas d'une dislocation coin, et parallèle à la ligne de dislocation dans le cas d'une dislocation vis, les deux types de dislocations sont illustrées sur la figure I.7. Dans le cas de la dislocation mixte, le vecteur de burger fait un angle aléatoire avec la ligne de dislocation.



Figure I.7. Schématisation du vecteur de Burger pour : a) dislocation coin et b) dislocation vis.

I.3.3. Défauts surfaciques (2D) : Joints de grain

Les joints de grains représentent des régions désordonnées qui délimitent les grains d'orientations différentes. Ils constituent des zones désordonnées, souvent assimilées à du silicium amorphe. Dans ce dernier, les joints de grains contiennent une forte densité de liaisons pendantes. Ces défauts introduisent des niveaux localisés dans la bande interdite qui ont pour effet de piéger les porteurs de charges minoritaires. En effet, les liaisons pendantes attirent les porteurs majoritaires. Il s'ensuit une zone de charge d'espace qui agit comme un puits de potentiel à l'égard des porteurs minoritaires, ces liaisons constituent donc des centres de recombinaison. Cela entraîne une atténuation de la densité de porteurs minoritaires, conduisant à une dégradation des propriétés électriques du semi-conducteur poly-cristallin dans sa globalité.

Les joints de grains sont aussi le siège d'une ségrégation des éléments dopants qui deviennent inactif. Cet effet est plus important, d'un côté, si le rayon atomique du dopant est important par rapport au rayon atomique du silicium, ou d'un autre côté, lorsque la densité en éléments dopants élevée. La figure I.8 illustre les joints de grains dans le silicium.



Figure I.8.Image MEB des Joints de grains [6].

I.3.4. Défaut volumique (3D)

Un défaut volumique est un défaut à trois dimensions. Quand une partie du cristal est remplacée par un volume d'un composé différent, la différence est de nature chimique et peut ou non être accompagnée de différences cristallographiques.

I.4. Différentes formes du silicium

En fonction de sa structure cristalline, le silicium peut se présenter sous deux différentes formes : le silicium monocristallin et le silicium amorphe, comme le montre la figure I.9.



Etat parfait ordonné Etat désordonne

Figure I.9. Exemple de réseau de silicium: a) cristallin, b) amorphe.

I.4.1. Silicium monocristallin

Le silicium mono-cristallin est le matériau qui présente les meilleures propriétés électroniques grâce à sa grande pureté et à sa structure composée d'un seul grain. Il est élaboré à partir du procédé Czochraski ou par la purification par fusion de zone. Ces procédés sont réalisés à très haute température en phase liquide.

La structure cristallographique du silicium monocristallin est une structure cubique diamant dans laquelle deux réseaux cubiques à faces centrées s'interpénètrent. Chaque atome d'un des réseaux est entouré par 4 atomes voisins équidistants formant un tétraèdre. Les liaisons entre les atomes sont des liaisons covalentes avec une distance interatomique de 2.35 Å et un paramètre de maille a=5.43 Å. La bande interdite (gap), séparant la bande de valence de la bande de conduction est égale à Eg=1.12 eV à température ambiante. Ce gap correspond à un gap indirect puisque le minimum de la bande de conduction est repéré en un point autre que le maximum de la bande de valence dans la zone de Brillouin, comme le montre la figure I.10.



Figure I.10. Structure cristallographique et structure de bandes du silicium monocristallin.

I.4.2. Silicium amorphe

Généralement abrégé a-Si, est la variété allotropique non cristallisée du silicium, c'est-à-dire dans lequel les atomes sont désordonnés et ne sont pas rangés de façon régulière définissant une structure cristalline. Le silicium amorphe peut être déposé en couches minces à basse température sur un grand nombre de substrats, permettant d'envisager une grande variété d'applications en microélectronique. Ce matériau semi-conducteur est couramment utilisé pour réaliser certains panneaux solaires photovoltaïques.

L'atome de silicium est tétravalent, il forme donc quatre liaisons covalentes avec ses voisins. Dans sa forme cristalline, le silicium adopte la structure diamant, comme le carbone et le germanium, formant ainsi un cristal ordonné.

Le silicium amorphe se caractérise par l'absence d'ordre sur de longues distances. Les atomes forment un réseau aléatoire continu dans lequel certaines liaisons ne sont pas assurées, on parle alors de liaisons "pendantes", comme le montre la figure I.11. Dans un réseau aléatoire continu, la distance interatomique, les angles entre les liaisons covalentes ainsi que les angles dièdres ne sont pas fixes mais suivent plutôt une distribution.

Les liaisons pendantes sont des défauts cristallins qui sont notamment responsables de l'altération des propriétés électroniques du matériau. Il est possible de réduire la densité de ces défauts de plusieurs ordres de grandeur en traitant le silicium amorphe à l'hydrogène pour former du silicium amorphe hydrogéné, généralement abrégé a-Si:H, présentant suffisamment peu de défauts résiduels pour pouvoir être utilisé dans des composants électroniques. L'hydrogène est cependant une impureté associée à la photo dégradation du silicium par effet Staebler–Wronski.



Figure I.11. Liaison pendante dans le silicium [6].

L'hydrogène participe à la saturation des liaisons pendantes et rend le silicium amorphe utilisable. Sans hydrogène, la densité des liaisons pendantes serait de l'ordre de 10¹⁹cm⁻³, le gap optique est d'environ 1.2 eV et il est impossible de le doper. En effet, le niveau de Fermi reste inchangé lors du dopage et les atomes dopants sont inactifs. L'hydrogène permet donc de réduire les liaisons pendantes de 99.99 %.La figure I.12 montre la distribution des pièges dans le silicium amorphe.



Figure I.12. Densité d'états en échelle logarithmique dans la bande interdite du silicium amorphe, avec E_V la bande de valence et E_C la bande de conduction [6].

I.5. Différentes gammes du silicium

En fonction de la taille des grains, le silicium peut se présenter sous différentes formes : silicium multicristallin , silicium microcristallin, silicium polycristallin et silicium nanocristallin ou amorphe, comme le montre la figure I.13.



Figure I.13. Classification des matériaux silicium [7].

I.5.1. Silicium multi-cristallin

Cette structure est constituée de monocristaux séparés les uns des autres par des régions désordonnées et riches en défauts que l'on appelle joints de grain. Le silicium multi-cristallin est fabriqué à partir des résidus provenant de la fabrication du silicium monocristallin. Le procédé de cristallisation consiste en la refonte de ces résidus suivie d'une solidification unidirectionnelle sous forme de structure colonnaire multi-cristalline à gros grains, dont la taille est comprise entre 1nm et 10 cm. La structure des grains du silicium multi-cristallin est illustrée sur la figure I.14.





I.5.2. Silicium microcristallin

Le silicium microcristallin est un matériau hétérogène, constitué de cristallites de différentes tailles et orientations parfois incluses dans des colonnes, avec souvent une phase amorphe, du vide et de l'hydrogène faiblement lié dans les joints de grains. La figure I.15 illustre quelques distributions des défauts dans le silicium microcristallin.



Figure I.15. Schématisation de la distribution des défauts dans le silicium microcristallin.

Le silicium microcristallin est un matériau anisotrope et inhomogène en volume. Ceci est étroitement lié à la taille des grains. L'appellation silicium microcristallin est un abus de langage, puisqu'en fait, une quantité importante des cristallites est de taille nanométrique. Aussi certains auteur l'appelle silicium nanocristallin en réservant le terme silicium microcristallin au matériau obtenu à partir du recuit thermique du silicium amorphe, d'autres l'appellent silicium polycristallin en précisant que sa structure n'a pas été modifiée par un recuit postérieur au dépôt. La structure des grains du silicium microcristallin est illustrée sur la figure I.16.



Figure I.16. Image AFM du silicium microcristallin [8].

I.5.3. Silicium polycristallin

La structure du silicium polycristallin se situe entre celle du silicium monocristallin et celle du silicium amorphe. Elle est constituée de grains dont la taille varie de quelques centaines de nanomètres à quelques millimètres suivant les conditions d'élaboration, sépares entre eux par des joints de grains. La structure des grains du silicium polycristallin est illustrée sur la figure I.17.

Les joints de grains délimitant les grains d'orientations différentes constituent des zones désordonnées, souvent assimilées a du silicium amorphe. Le silicium poly cristallin est notamment utilisé pour fabriquer du silicium monocristallin (quasi inexistant à l'état naturel, et utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs (puces, cellules photovoltaïques).



Figure I.17. Structure granulaire d'un film de silicium polycristallin [9].

Le poly silicium est un matériau clé dans les circuits intégrés et les processeurs AMD et Intel. Ce matériau est en effet utilisé dans la grille des transistors MOSFET et CMOS. Pour ces technologies, le poly silicium est déposé par dépôt chimique en phase vapeur à basse pression (LPCVD), il est habituellement fortement dopé (P ou N).

En fonction de la géométrie des grains, le polysilicium peut se présenter sous deux formes différentes : forme granulaire et la forme colonnaire, comme le montre la figure I.18.



Figure I.18. Structure granulaire (a) et colonnaire(b) du poly silicium.

I.5.4. Silicium amorphe hydrogéné a-Si:H

L'étude de l'hydrogène dans les semi-conducteurs a toujours été étroitement liée au développement de la technologie des dispositifs électroniques et photovoltaïques. Ainsi, les effets de l'hydrogène sur le silicium cristallin (passivation de défauts profonds, formation de complexes avec les dopants,...) ont fait l'objet de
nombreuses études dans les vingt dernières années. Par ailleurs, l'hydrogène a joué un rôle clé dans le développement du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H).La structure du silicium amorphe hydrogéné est illustrée sur la figure I.19.



Figure I.19. Configurations structurales possibles de l'hydrogène dans a-Si:H.

En effet, depuis qu'il a été compris que l'incorporation de l'hydrogène dans la matrice de silicium amorphe permettait de réduire considérablement la densité de défauts dans la bande interdite et rendait possible son dopage, scientifiques et industriels ont manifesté un grand intérêt pour ce matériau, ainsi que pour ses dérivés (microcristallin, polymorphe, et alliages...). Cet intérêt est dû principalement à son utilisation dans la conversion photovoltaïque du rayonnement solaire. Parmi les autres applications industrielles, nous citerons les transistors à effet de champ, les transistors en couches minces pour l'adressage des pixels dans les écrans plats, la xérographie, et les capteurs.

I.6. Pièges dans un semi-conducteur

Dans un cristal parfait, il n'existe aucun état électronique dans le gap (bande interdite). Cependant, tout cristal perd son aspect idéal dès que l'on y introduit des impuretés, qu'elles soient dopantes ou non dopantes, ou dès que le matériau présente des défauts cristallographiques (dislocations, macles).

Ces perturbations détruisent la périodicité parfaite du cristal et entraînent la création d'états énergétiques dans le gap qui vont pouvoir être électriquement actifs, c'est-à-dire permettre des échanges entre les bandes de valence et de conduction

et ces états. La figure I.20montre que les états énergétiques dans le gap peuvent servir d'intermédiaires entre la bande de valence et la bande de conduction et modifier en particulier la cinétique de ces échanges.



Figure I.20. Effet des niveaux pièges sur le transfert des électrons entre les bandes de valence et de conduction. Le niveau piège sert de marcheinter médiaire [7].

I.6.1. Pièges profonds

Les niveaux profonds dans les semi-conducteurs ont des énergies d'ionisation très supérieure à K_BT . Ces niveaux jouent le rôle des centres de piégeage. Ils peuvent augmenter considérablement le taux de recombinaison des porteurs libres s'ils sont situés près du milieu du gap, ceux-ci sont des centres de génération- recombinaison puisque à cette position les taux de piégeage des électrons et des trous sont comparables. Si les défauts sont plus proches de la bande de conduction ou à la bande de valence, leurs interactions avec les deux bandes ne sont plus de la même nature. Donc, un niveau profond peut agir comme un centre g r ou un centre de piégeage selon sa position dans le gap.

I.6.2. Pièges d'interfaces

La présence de l'interface silicium–SiO2 induit une perturbation à la structure cristalline périodique du semi-conducteur, et certaines liaisons Si–Si peuvent être inaccomplies. En conséquence il y aurait des états d'énergie dans le gap à la surface du silicium. Ces états s'appellent les « états d'interface » ou les « pièges d'interface ». Ils peuvent être chargés positivement ou négativement, selon leur nature et ainsi, ces états affecteront le potentiel à la surface.

(1.1)

Pour une densité de pièges d'interface notée $N_{it}(cm^{-2}eV^{-1})$, une charge $qN_{it}(\Phi s)$ est présente à la surface du semi-conducteur. La charge est souvent négative dans un transistor à canal n et elle est due aux piégeages des électrons dans les états d'interface. Si le potentiel de surface croit de Φ s à Φ s+ $\Delta \Phi$ s, la charge piégée augmente d'une quantité égale à $qN_{it}(\Delta \Phi s)$. Quand une couche d'inversion se forme, le potentiel de surface est égal à $2\Phi_F$. Pour compenser ces charges, une tension doit être appliquée à la grille, dont la valeur est :



Figure I.21. Mécanismes de génération-recombinaison assistés par pièges. La transition s'effectue via un piège qui échange un électron avec la bande de conduction ou avec la bande de valence, dans ce dernier cas l'électron se recombine avec un trou ou crée un trou en quittant la bande de valence. Ces échanges sont conditionnés par la statistique de Fermi-Dirac. Pour avoir une probabilité importante de transfert, le niveau du piège doit être situé en milieu de bande interdite. Pour déterminer le taux de recombinaison génération, il faut exprimer les quatre processus présentés, émissions

et captures des trous et électrons [7].

La figure I.21 montre de façon détaillée les différents mécanismes de piégeage. D'un côté, un piège peut capturer un électron de la bande de conduction ou émettre un électron vers cette bande. D'un autre côté, un piège peut capturer un trou en envoyant un électron vers la bande de valence ou émettre un trou en récupérant un électron de valence qui laisse un trou derrière lui. Ces échanges se font suivant la statistique de Fermi-Dirac. Le processus complet de génération met en jeu une émission d'un trou et une émission d'un électron (transit de la bande de valence vers la bande de conduction) alors que la recombinaison met en jeu la capture d'un électron puis d'un trou (transit de la bande de conduction vers la bande de valence).

I.6.3. Etude de Schrockley-Read-Hall

Comme le montre la figure I.21, les niveaux associés aux pièges vont servir d'étapes intermédiaires pour les phénomènes de génération-recombinaison. La statistique des porteurs obéit à une loi exponentielle de probabilité de transfert entre deux niveaux d'énergie. Pour avoir une transition complète entre les bandes de valence et de conduction, le trajet se fera par les niveaux des pièges puisque la probabilité de transfert entre les bandes et les pièges est sans commune mesure supérieure à la transition directe bande à bande. Les niveaux des pièges vont donc servir de marchepied aux porteurs. La position la plus efficace pour les pièges qui permet cette transition sera située en milieu de bande interdite. Pour comprendre simplement ceci, deux marches de moyenne hauteur sont plus faciles à gravir par un être humain qu'une très petite et une très grande, cette dernière représentant la difficulté !

Ainsi, en ne considérant que les pièges situés en milieu de bande interdite, qui seront les plus efficaces, on peut déterminer le taux de recombinaison-génération résultant, U, qui traduit la variation de la concentration de porteurs (électrons ou trous) par unité de temps. Il faut pour cela exprimer les quatre processus présentés, émissions et captures des trous et électrons. Nous ne donnons ici que les résultats de ce calcul relativement long qui suppose des simplifications supplémentaires et qui aboutit à :

$$U = \frac{1}{\tau_0} \frac{p.n - ni^2}{p + n + 2ni}$$
(I.2)

Avec τ_0 est la durée de vie des porteurs, p est la concentration des trous, n est la concentration des électrons, n_i est la concentration intrinsèque.

I.7. Centres de piégeage

Les centres de piégeage sont des défauts profonds pouvant être ionisés à l'équilibre. Dans les régions de déplétion, ces centres contribuent à la charge d'espace et donc à la tension nécessaire pour une déplétion totale. Un centre de piégeage a tendance à émettre sa charge vers la bande appropriée que de la maintenir jusqu'à l'annulation par la capture d'une charge opposée. Donc le piégeage est une capture avec une émission lente. Ce processus est montré sur la figure I.22.



Figure I.22. Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur ayant des pièges, avec C_n le coefficient de capture d'un électron, E_c le niveau d'énergie de la bande de conduction, C_p le coefficient de capture d'un trou, E_v le niveau d'énergie de la bande de valence, e_n le coefficient d'émission d'un électron, E_i le niveau de Fermi intrinsèque et e_p le coefficient d'émission d'un trou. Le cas *nt* se produit quand le piège est occupé par un électron, et le cas *pt* lorsque le piège est occupé par un trou.

I.8. Etat rapide et état lent

La notion d'état rapide ou lent est liée au temps de réponse des pièges à l'application d'une sollicitation électrique. On appelle états lents, par opposition aux états rapides situés à l'interface, les états situés dans l'oxyde, à une certaine distance de l'interface et qui communiquent avec le semi-conducteur par effet tunnel. Quant aux pièges de l'oxyde qui n'ont pas le temps d'interagir avec le semi-conducteur pendant la mesure, ils sont qualifiés par Fleetwood et al.d'états fixes.

I.9. différents types de recombinaisons

D'une façon très générale, on distingue deux types de recombinaisons dans un semi-conducteur :

- La recombinaison dite directe bande à bande où un électron de la bande de conduction franchit la bande interdite vers un état inoccupé de la bande de valence.
- Et la recombinaison indirecte où l'électron de la bande de conduction transite par un niveau profond dans la bande interdite avant de se recombiner avec un trou de la bande de valence.

Lors de la recombinaison, une énergie égale à l'énergie de la paire électron-trou est réémise dans le réseau cristallin, soit sous forme de radiation par émission d'un ou plusieurs photons, soit sous forme de chaleur par émission de phonons.

Ces types de recombinaisons se manifestent selon plusieurs mécanismes :

- La recombinaison radiative ;
- La recombinaison Auger ;
- La recombination Schokley Read Hall (SRH).

I.10. Centres de génération-recombinaison

Les centres de génération-recombinaison (g-r) sont des défauts profonds génèrent ou recombinent facilement les paires électron-trou. Un centre g-r peut être occupé par un électron comme il peut être occupé par un trou. Si un électron est capturé par un centre g-r, il peut être suivi par une recombinaison ou une réémission. Le processus de g-r est représenté sur la figure I.23.



Figure I.23. Diagramme de bande d'énergie

Sur la figure I.23, le semi-conducteur possède des centres g-r, avec C_n le coefficient de capture d'un électron, E_c le niveau d'énergie de la bande de conduction, C_p le coefficient de capture d'un trou, E_v le niveau d'énergie de la bande de valence, e_n le coefficient d'émission d'un électron, E_i le niveau de Fermi intrinsèque et e_p le coefficient d'émission d'un trou. Le cas nt se produit quand le centre g-r est occupé par un électron, et le cas pt se produit quand il est occupé par un trou.

I.11. Etats de surface et d'interface

Les états électroniques dans le volume du semi-conducteur sont d'une part les bandes de valence et de conduction résultant de la périodicité du réseau cristallin, et d'autre part les états discrets associés aux donneurs et accepteurs ou aux centres profonds. A la surface du semi-conducteur les états électroniques sont modifiés en raison d'une part d'un phénomène intrinsèque et d'autre part de phénomènes extrinsèques. Le phénomène intrinsèque résulte de la rupture de périodicité du réseau. Dans le volume, chaque atome établit des liaisons avec chacun de ses voisins, en surface l'atome n'établit de liaison que dans un demi-plan, il reste côté vide ce que l'on a coutume d'appeler des liaisons pendantes. Cette rupture de périodicité entraîne l'existence d'états électroniques différents de ceux existant dans le volume.

A ce phénomène intrinsèque il faut ajouter des phénomènes extrinsèques résultant de l'adsorption à la surface d'atomes étrangers dont les plus courants sont les atomes d'oxygène qui entraînent une oxydation de la surface du semi-conducteur.

La présence d'une part d'atomes étrangers et d'autre part de distorsions du réseau, résultant de la différence de maille entre le semi-conducteur et son oxyde, entraîne l'existence d'états de surface extrinsèques.

Enfin, si on considère l'interface entre deux matériaux au niveau d'une hétérostructure, le réseau passe sur une distance de quelques angströms de la périodicité d'un matériau à celle de l'autre. Il en résulte des états électroniques différents de ceux de chacun des matériaux, ce sont des états d'interface. Ces états jouent des rôles différents suivant que les niveaux d'énergie qui leur sont associés sont situés dans le gap du semi-conducteur ou dans une bande permise. Dans le fonctionnement des hétéro-structures, les états jouant un rôle important sont ceux qui introduisent des niveaux d'énergie permis dans le gap, car ils piègent des porteurs libres et par conséquent modifient les populations des bandes permises. Il en résulte qu'au voisinage de la surface, la distance du niveau de Fermi aux bandes permises est modifiée. Cependant, le niveau de Fermi étant horizontal à l'équilibre thermodynamique, les bandes se courbent vers le bas ou le haut suivant que la population électronique augmente ou diminue. Cette courbure traduit l'existence d'une différence de potentiel entre la surface du semi-conducteur et son volume. Si l'énergie du bas de la bande de conduction en le volume est E_{cv} et E_{cs} à la surface , la différence de potentiel entre la surface et le volume est donnée par :

$$\varphi_s = -\frac{E_{CS} - E_{CV}}{e} \tag{I.3}$$

 φ_s est appelée potentiel de surface. C'est la barrière que doit franchir un électron du volume du semi-conducteur pour atteindre la surface. Cette quantité s'ajoute à l'affinité électronique pour extraire du semi-conducteur un électron du volume, situé dans la bande de conduction.

La figure I.24 représente le diagramme énergétique d'un semi-conducteur de type n, en l'absence (a) et en présence (b) et (c) d'états de surface. La figure I.24(b) représente le cas d'un semi-conducteur dans lequel les états de surface créent des niveaux accepteurs en densité relativement faible devant la densité de donneurs, c'està-dire devant la densité de porteurs majoritaires à la température ambiante. Il en résulte que ces états de surface, qui piègent les électrons, sont saturés sans trop affecter la densité de porteurs majoritaires, c'est-à-dire la nature du semi-conducteur.

Au voisinage de la surface le semi-conducteur présente une légère courbure de bandes mais reste de type n. Sur la figure I.24(c), les états de surface créent des niveaux accepteurs en densité surfacique importante, il en résulte qu'au voisinage de la surface le semi-conducteur devient de type p. Il existe une couche d'inversion à la surface du semi-conducteur. La densité d'états de surface entraîne un ancrage du niveau de Fermi.



Figure I.24. Evolution de la courbure des bandes d'un semi-conducteur de type n avec la densité d'états accepteurs de surface. E_{Fi} représente le niveau de Fermi intrinsèque.
(a) pas d'états de surface, (b) peu d'états de surface, (a) beaucoup d'états de surface

[11].

I.12. Densité d'états dans le silicium amorphe hydrogéné

La description énergétique du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est plus compliquée à déterminer que celle du silicium monocristallin. La représentation du gap est faite à l'aide d'une densité d'états (DOS), notée N(E). L'a-Si:H est caractérisé par des faibles mobilités des porteurs libres et la présence d'états localisés dans le gap près des bandes de valence et de conduction (queues de bandes) et près du niveau de Fermi (états profonds).La définition la plus utilisée pour la densité d'états correspond au modèle introduit par Davis et Mott [7].

Le diagramme de bande du silicium amorphe est représenté dans la figure 1.25 Ce diagramme découle du modèle de Davis et Mott [7]. Dans les bandes, les états sont étendus (les porteurs participent à la conduction) et une queue de bande se prolonge dans la bande interdite. Les états dans ces queues sont localisés et ils participent à l'absorption. Pour cela, le gap optique est légèrement inférieur au gap de mobilité. Toutefois, la différence n'est que de l'ordre de 0.1 eV.

Les queues de bandes sont modélisées par une fonction exponentielle. La largeur de la queue de bande de valence est plus importante que celle de la queue de bande de conduction, ce qui explique le fait que le dopage de type p est plus difficile dans le a-Si:H (il y'a plus d'états localisés dans lesquels les trous libérés par les atomes trivalents sont piégés). Les défauts profonds dus aux liaisons pendantes peuvent être modélisés par deux gaussiennes (l'une pour les défauts accepteurs $D^{0/-}$ et l'autre pour les défauts donneurs $D^{+/0}$). Il existe un autre modèle

appelée : defect pool, qui a été développé par Winer et al [7].Ce modèle n'impose pas un seul type de défaut à un niveau d'énergie donné, mais considère que les défauts peuvent être chargés +,- ou être neutre sur toute une gamme d'énergie.



Figure I.25.Diagramme de bande du silicium cristallin et du silicium amorphe hydrogéné .D⁺, D⁰ et D⁻ représentent les liaisons pendantes respectivement positives, neutres et négatives [7].

Dans ce modèle, la DOS est constituée de deux distributions exponentielles respectivement pour les queues de bandes de conduction (QBC) et de valence (QBV), et des distributions gaussiennes pour les états profonds. Les premières sont liées au désordre dans le matériau (angles et longueurs des liaisons interatomiques) tandis que les secondes dépendent de la coordination (liaisons pendantes notamment). En se limitant à deux gaussiennes d'états profonds en plus des deux queues de bandes, N(E) peut s'écrire sous la forme :

$$N(E) = N_{C}e^{-\frac{E_{C}-E}{KT_{C}}} + N_{m1}e^{-\frac{(E_{m1}-E)^{2}}{2\sigma_{1}^{2}}} + N_{m2}e^{-\frac{(E_{m2}-E)^{2}}{2\sigma_{2}^{2}}} + N_{V}e^{-\frac{E-E_{V}}{KT_{C}}} + \dots$$
(I.4)

Où Nc (Nv) est la densité d'états au bord de la bande de conduction (valence), Tc (Tv) la température caractéristique de la QBC (QBV), Nm1 et Nm2 les densités d'états aux sommets des gaussiennes, Em1 et Em2 leurs positions dans le gap par

rapport à *Ec*et σ 1 et σ 2 les écarts-type. Un exemple de densité d'états constituée de deux distributions de types donneurs (QBV et Gauss-Donneur) et deux autres de types accepteurs (QBC et Gauss-Accepteur) modélisée d'après l'équation (1.4) est illustrée sur la figure I.26.



Figure I.26.Exemple de densité d'états N(E) dans le gap d'une couche de silicium amorphe hydrogéné non dopé [13].

Lorsque les états localisés sont considérés comme états monovalents, on distingue les états donneurs des états accepteurs, qui peuvent prendre respectivement la charge +q/0 et -q/0 qu'ils soient libres ou occupés par un électron. Ou on peut les définir comme des états amphotères ou corrélés, dans ce cas ils peuvent prendre la charge +q/0/-q quand ils sont libres ou occupés par 1 ou par 2 électrons.

N(E) est constituée de deux queues de bandes exponentielles (QBV et QBC) et deux gaussiennes pour les états profonds. On distingue les états donneurs et accepteurs. Le niveau de Fermi est indiqué sur la figure I.27.



Figure I.27.Mécanisme de conduction des électrons dans l'a-Si:H [14].

I.13. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une vue du silicium. D'un côté, le silicium est classé suivant la structure cristalline en deux catégories : monocristallin et amorphe. D'un autre côté, le silicium est classé suivant la taille des grains en plusieurs catégories : nanocristallin, polycristallin ,.... Nous avons également abordé les notions de piège dans le silicium amorphe, leurs distributions dans le gap optique du silicium et leurs types.

Chapitre II

Transistor en couche mince à base de silicium nanocristallin

Au sommaire de ce chapitre

- 1. Introduction
- 2. Définition des transistors en couches minces
- 3. Technologie TFT en silicium poly et nanocristallin
- 4. Descriptions physique et électrique des TFT à base de polysilicium
- 5. Propriétés électriques du film poly silicium
- 6. Notion de masse effective
- 7. Equations fondamentales
- 8. Effet de la taille des grains sur les propriétés des nanostructures
- 9. Effets quantiques dans les structures MOS
- 10. Conclusion

II.1. Introduction

La miniaturisation des dimensions des transistors MOS (TMOS) fait apparaître des phénomènes complexes. Pour des épaisseurs d'oxyde de 10 nm, les effets quantiques deviennent inévitables. Dans ce cas, les calculs des concentrations des porteurs, par les modèles classiques d'entrainement-diffusion ne sont plus valables. Il est donc nécessaire de faire appel à des calculs quantiques (Modèle Schrödinger-Poisson).

Dans ce chapitre, nous commençons par présenter un rappel théorique sur la modélisation physique du silicium, et nous considérons les équations relatives à ces phénomènes. Par la suite, Leur discrétisation par la méthode des différences finies sera présentée. Enfin, nous terminons le chapitre par l'exposé de l'organigramme général du programme de résolution des équations de Poisson et Schrödinger.

II.2. Définition des transistors en couches minces

Le transistor en couche mince (TFT : Thin Film Transistors) est un transistor métal oxyde semi-conducteur sur isolant (SOI : Silicon On Insulator) à effet de champ constitué d'une couche ultra mince d'un semi-conducteur non monocristallin déposée sur un substrat isolant. La figure II.1 montre la structure générale d'un TFT.

De par son type de substrat, il est possible de réaliser des transistors TFT sur des surfaces beaucoup plus grandes que pour les transistors MOS en mono-silicium. Cela justifie l'utilisation des TFT pour des applications d'électronique grande surface.

Les matériaux utilisés pour réaliser la couche active dans des TFT se divisent En deux grandes familles: les matériaux inorganiques (majoritaires) et organiques (en développement)[1]





II.3. Technologie TFT en silicium poly et nanocristallin

Les transistors en couches minces à base de poly-silicium sont de nos jours établis comme faisant partie d'un développement de technologies à coût peu élevé pour de larges applications dans le domaine de la microélectronique. Différentes applications sont apparues suite aux possibilités qu'offre la combinaison entre le savoir-faire accumulé dans la microélectronique et les nouveaux horizons ouverts par l'utilisation de substrats de dimensions élevées. L'une des principales applications qui a trouvé un grand essor se situe dans les écrans plats à cristaux liquides et à matrice active (AMLCD) (Active Matrix Liquid Crystal Displays), et il se trouve que les transistors en couche mince à base de poly silicium sont parfaitement adaptés à une telle utilisation. En effet, ces transistors sont des dispositifs de première importance, lorsqu'il s'agit de piloter des matrices d'écrans plats où ils sont appelés à remplacer les TFT en silicium amorphe, en raison d'une durée de vie des porteurs plus importante [3,4].

Or, l'intérêt de l'utilisation du silicium poly-cristallin dans ce type de composants permet de fabriquer des écrans de grande taille. En plus, les divers TFT en poly-Si peuvent être intégrés directement sur le substrat en verre grâce à la facilité de dépôt du poly silicium en donnant de meilleures performances électriques par rapport au Silicium amorphe (a-Si). Le choix du poly silicium pour la réalisation du canal de ce type de transistors est lié de façon directe à leurs performances électriques, vu que dans la majorité des modèles de conduction, les propriétés de ce matériau tiennent compte d'une structure particulière à base de grains et de joints de grains [5-7].

Le développement et les applications de ce matériau dépendent de l'amélioration de ses performances, essentiellement électriques. Ces performances dépendent de l'influence directe des conditions initiales d'obtention et d'un éventuel traitement ultérieur du film. Un large domaine de recherche s'est ouvert allant de l'effet des méthodes et conditions de dépôt sur la structure finale des films, en passant également par le comportement électrique de ce matériau qui diffère dans un grand nombre de points du silicium monocristallin. Le choix du poly silicium pour la réalisation du canal du TFT affecte de façon directe ses performances électriques, vu que dans la majorité des modèles de conduction, il est représenté comme une succession de grains parfaits séparés par des joints de grains où différents pièges sont réunis.

II.4. Descriptions physique et électrique des TFT à base de polysilicium

Le TFT est un transistor à effet de champ composé d'une ou plusieurs couches semiconductrices non-monocristallines déposées sur un substrat isolant. De par le type du substrat, il est possible d'intégrer des transistors TFT sur des surfaces beaucoup plus grandes contrairement aux transistors MOS, ce qui explique leur utilisation pour des applications en grande surface. La technologie TFT sur substrat en verre est différente de celle à transistor MOS en mono-silicium fabriqué en volume (ou transistor Bulk). De plus, elle possède certains avantages par rapport à d'autres technologies telle que la technologie SOI (Silicon On Isulator) où le phénomène de latch-up est incontournable [8].

II.4.1. Structure des TFT

Les transistors en couche mince sont bidirectionnels (à structure symétrique) possédant trois terminaux, source, drain et grille [9].Ces transistors unanimement utilisés par l'industrie des écrans plats sont soit à grille en dessus (Top gate), soit dessous (Bottomgate) comme indiqué sur la figure II.2. Chaque configuration présente ses avantages et ses inconvénients dont la différence reste minime [10-13].



Figure II.2. Structures du TFT : (à gauche) à grille inférieure et (à droite) à grille supérieure.

II.4.2. Fonctionnement des TFT

Les TFT Poly-Si n'ont pas de terminal substrat comme les transistors bulk classiques, ce qui explique l'absence d'effet substrat. Leur principe de fonctionnement est similaire aux transistors MOS avec la conduction par effets de champ dans le canal (N ou P), formé entre le drain et la source et modulé par la tension de grille.

Toutefois, tandis que les transistors bulk fonctionnent en régime d'inversion, les transistors TFT Poly-Si fonctionnent en régime d'accumulation. En effet, pour un transistor de type N, une tension de grille positive ($V_G>0$) provoque une accumulation d'électrons au niveau du canal du transistor. Lorsque la tension appliquée sur la grille atteint la tension de seuil ($V_G>V_t$), des porteurs libres (des électrons) sont créés. Dans un premier temps les charges libres générées sont piégées par les états localisés se trouvant dans la bande interdite. Ensuite, en augmentant la tension de grille, le nombre de charges libres augmente jusqu'à saturation de tous les pièges : on atteint alors le régime ON du transistor ($V_{GS}=V_{on}$). La transconductance G_m , définie comme l'augmentation de courant de drain provoquée par une augmentation de la tension de grille, est donc plus faible que dans le cas du transistor bulk. Lorsqu'une tension drain V_D est appliquée, le courant entre la source et le drain (I_{DS}) circule.

II.4.3. Tension de seuil

Rappelons que la tension de seuil dans le transistor MOS est évaluée entre la source et le drain pour laquelle la zone d'inversion apparaît dans le composant. Or, la transition entre les régimes OFF à ON étant très rapide, les valeurs des tensions de seuil sont pratiquement faibles (inférieures à 1V). Contrairement au transistor monocristallin, un TFT en poly-Si dont la commutation du régime OFF à ON se produit plus lentement, en raison de la structure granulaire de la couche active. Effectivement, les porteurs libres par la polarisation de la grille se font plus rapidement capturés par les états pièges présents aux joints de grains. Ce qui induit à une concentration en porteurs libres de plus en plus réduite dans le canal d'où une conduction plus lente.

II.4.4. Pente sous le seuil

La pente sous le seuil est un paramètre qui définit la vitesse de commutation du régime OFF à ON du transistor. Elle dépend de la densité d'états des pièges dans la bande interdite du poly silicium. En effet, lorsque la tension V_{GS} augmente, les états pièges continuent à se remplir, ralentissant la mise en conduction du transistor. La transition du mode OFF à ON étant beaucoup plus lente dans le TFT en poly-Si où la pente sous le seuil est estimée entre 0.1 à 1 V/décade comparée à celle du transistor en bulk (50 à 100 mV/décade) qui est 10 fois plus faible. Par conséquent, ce paramètre doit être aussi faible que possible afin d'assurer un faible courant de fuite et une vitesse de commutation élevée [14]. On peut, ainsi, classer les

pentes sous le seuil en fonction de la taille des cristaux du matériau silicium (monosilicium, poly silicium et silicium amorphe).

La pente sous le seuil S doit être faible pour assurer une transition rapide entre l'état OFF et l'état ON du transistor. Elle dépend de la densité d'états des pièges dans la bande interdite. Elle est définie par la relation suivante :

$$S = \frac{dV_{gs}}{d\log(Ids)} \tag{II.1}$$

II.4.5. Différents substrats des TFT Poly-Si

Les transistors à couches minces en silicium poly cristallin ont subi une forte évolution durant ces vingt dernières années. On peut y distinguer deux familles : les TFT fabriqués à haute température (ou HTPS : High Temperature Polysilicon en anglais) et à basse température (ou LTPS : Low Temperature Polysilicon en anglais):

- Pour les filières HTPS, le quartz est le substrat principalement utilisé. Mais, l'inconvénient majeur de cette filière reste le coût très élevé du substrat ; son utilisation se limite à des applications requérant de petites surfaces. Il présente néanmoins l'avantage d'avoir des caractéristiques électriques statiques peu dispersées et une bonne qualité d'oxyde déposée. Aujourd'hui, les TFT HTPS sont très peu utilisés dans l'industrie.
- Pour les filières LTPS, il est possible d'utiliser des substrats faibles coûts comme le verre, des substrats souples comme l'acier [15] ou le plastique [16].

Un exemple de substrat souple est illustré sur la figure II.3.



Figure II.3. Matrice active réalisée sur acier pour écran OLED flexible [15].

II.5. Propriétés électriques du film poly silicium

Les propriétés électriques du poly silicium sont différentes de celles du silicium monocristallin, car sa conduction électrique est limitée par le transport à travers les joints de grains. Ce transport peut être engendré par deux mécanismes possibles :

II.5.1. Mécanisme de ségrégation des atomes dopants

Ce mécanisme décrit la tendance des joints de grains à se comporter comme puits visà-vis des impuretés. Aux faibles concentrations d'impuretés, les atomes dopants se localisent aux joints de grains ; par la suite les cristallites se trouvent dépeuplées, la conduction induite est alors faible. Par contre, aux concentrations d'impuretés supérieures, une saturation des joints de grains se produit, accompagnée d'une migration des atomes en excès vers l'intérieur des cristallites, ce qui induit une nette amélioration de la conduction électrique [17].

II.5.2. Mécanisme de piégeage des porteurs de charges sur des états pièges

Le modèle basé sur ce mécanisme tient compte du nombre important de défauts présents aux joints de grains, ce qui limite le passage des porteurs d'un grain à l'autre, réduisant ainsi leur mobilité. Ce modèle a été introduit par Kamins [18] puis développé par d'autres auteurs. Par conséquent, le comportement électrique du poly silicium est directement lié à son profil de densité d'états de charge.

II.5.3. Densité d'état

La définition de la "densité d'états" est une fonction de l'énergie, notée D (E) telle que pour toute fonction f ne dépendant que de l'énergie, on a $\langle f \rangle = \int f(E)D(E)dE$ [19].

Ainsi, la concentration des porteurs libres (par unité de volume) possédant une énergie E est donnée par le produit de la densité d'états et de la fonction de distribution comme suit :

Pour les électrons

$$dn = D_n(E) f_n(E) dE \tag{II.2}$$

Pour les trous

$$dp = D_p(E) f_p(E) dE$$
(II.3)

La concentration totale des électrons dans la bande de conduction est obtenue en intégrant l'énergie E sur toute cette bande.

$$n = \int_{EC}^{\infty} D_n(E) f_n(E.T) dE \qquad [(II.4)]$$

De la même façon que pour les électrons, on trouve dans la bande de valence une concentration des trous dont l'expression est :

$$P = \int_{\infty}^{E_{\nu}} Dp(E) f_p(E.T) dE$$
 (II.5)

D(E): représente le nombre maximum de particules de masses m_e^* ou m_h^* pouvant être comprises entre les niveaux d'énergies E et E+dE.

F(E, T): fonction de distribution (probabilité d'occupation de l'état d'énergie E). Cette dernière obéit à la statistique de FERMI–DIRAC, et est donnée par l'expression suivante:

Pour les électrons

$$f_n(E.T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{K_B T}\right)}$$
(II.6)

Pour les trous

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) \tag{II.7}$$

En remplaçant $f_n(E)$ par son expression on obtient :

$$f_{P}(E) = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{K_{B}T}\right)}$$
(II.8)

Où K_B est la constante de Boltzmann et μ le potentiel chimique du cristal.

II.5.4. Influence de la densité des pièges sur la tension de seuil

Les transistors en couche mince à base de poly silicium présentent généralement des valeurs de tensions de seuil plus élevées que dans le cas du transistor monosilicium (VT < 1V). Ces tensions de seuil dépendent fortement de la structure du film de polysilicium (densité des pièges aux joints de grains, taille des grains...). Nous nous sommes intéressés à relever les variations de la tension de seuil V_T avec la densité des pièges présente aux joints de grains variant de 100 à 500 nm.

II.6. Notion de masse effective

Les propriétés électroniques du silicium sont connues dans la littérature. Un électron dans la bande de conduction subit un potentiel électrostatique. Dans le silicium il y a la périodicité du réseau cristallin, donc il est possible d'après la théorie de Bloch, de trouver les fonctions d'ondes décrivant l'état d'une particule dans un potentiel périodique [20].

Dans la bande de conduction, un électron peut exister à l'état lié, quasi-libre ou libre. Dans le cas du silicium, l'électron est dans un état quasi-libre, à cause de la périodicité du silicium, et sa masse est alors donnée par :

$$m = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \frac{E}{\partial K^2}}$$
(II.9)

Le potentiel cristallin n'étant pas isotrope ce qui fait varier la masse des porteurs au sein du réseau cristallin. Dans ce cas, on parle de masse effective [21-23].

II.7. Equations fondamentales

II.7.1.Equation de Poisson

Afin modéliser les effets 'canaux courts', nous allons résoudre l'équation de Poisson suivant la dimension transversale au canal et la dimension longitudinale à celui-ci [24].

L'équation de Poisson à deux dimensions s'écrit comme suit :

$$\frac{d^2 V(x, y)}{dx^2} + \frac{d^2 V(x, y)}{dy^2} = \frac{-\rho(x, y)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}$$
(II.10)

 $O\dot{u}$ V (x, y) : est le potentiel électrostatique.

 $\rho(x, y)$: est la densité de charge.

 ε_0 : est la permittivité du vide.

 ε_r : est la permittivité diélectrique du milieu.

La densité de charge totale d'un Semi-conducteur de type P est donnée par :

$$\rho(x, y) = -q \Big[p(x, y) - n(x, y) + N_D^+(x, y) - N_A^-(x, y) \Big]$$
(II.11)

Où

 $N_D^+(x, y)$ et $N_A^-(x, y)$ sont les concentrations des dopants accepteurs et donneurs, n(x, y) et p(x, y) sont les densités d'électrons et de trous. Dans le cas d'un transistor NMOS, le semi-conducteur est de type P et l'équation (II.11) se réduit alors à :

$$\rho(x, y) = -q \left[p(x, y) - n(x, y) - N_A^-(x, y) \right]$$
(II.12)

II.7.2. Equation de Schrödinger

La résolution de l'équation de Schrödinger nous permet d'obtenir les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes dans la direction du confinement quantique. On considère une particule de masse effective m*, dans un puits de potentiel à une dimension V(x). On 'oublie' les autres directions. Nous aurons affaire à une résolution pseudo-2D.

Donc l'équation de Schrödinger à résoudre est donnée par :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(y) + qV(y)\psi(y) = E\psi(y)$$
(II.13)

Où $\psi(y)$: est la fonction d'onde.

E : est l'énergie quantifiée.

h : est la constante de Planck.

V(y) : est le potentiel électrostatique.

Les fonctions d'ondes sont égales à zéro à l'interface oxyde / Si dans le cas où la pénétration des électrons dans l'oxyde est négligeable.

II.7.3. Equation de continuité

L'évolution temporelle et spatiale des concentrations de porteurs est exprimée par les équations de continuité, celle-ci est donnée comme suit :

Pour les électrons

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_n(x,t) + \frac{1}{q} \vec{\nabla} \vec{J}_n(x,t)$$
(II.14)

Pour les trous

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = G_e(x,t) - U_p(x,t) - \frac{1}{q} \vec{\nabla} \vec{J}_p(x,t)$$
(II.15)

Le taux de génération G_e , et les taux de recombinaison U_n et U_p représentent la variation du nombre de porteurs par unité de volume et par unité de temps.

La densité de courant des électrons et la densité de courant des trous sont données respectivement par les expressions suivantes :

$$\vec{J}_n(x,t) = qn(x,t)\mu_n \vec{E}(x,t) + qD_n \vec{\nabla}_n(x,t)$$
(II.16)

$$\vec{J}_{p}(x,t) = qp(x,t)\mu_{p}\vec{E}(x,t) - qD_{p}\vec{\nabla}_{n}(x,t)$$
(II.17)

Ou μ_p et μ_n sont les mobilités des trous et des électrons respectivement. Les grandeurs D_n et D_p sont le coefficient de diffusion des électrons et des trous donnés par les relations d'Einstein :

$$D_{n} = \frac{K_{B}T\mu_{n}}{q}$$

$$D_{p} = \frac{K_{B}T\mu_{p}}{q}$$
(II.18)

A ces deux composantes de densité de courant on rajoute la densité de courant de déplacement due à la variation du potentiel au cours du temps, elle est donnée comme suit :

$$\vec{J}_{d}(x) = \frac{\partial \vec{D}(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon_{sc} \vec{E}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial \varepsilon_{sc} \nabla \vec{V}(x,t)}{\partial t}$$
(II.19)

Ou ε_{sc} est la permittivité du semi-conducteur et D est le vecteur de déplacement électrique.

La densité de courant total est alors donnée par :

$$\vec{J}_{t}(x,t) = \vec{J}_{n}(x,t) + \vec{J}_{P}(x,t) + \vec{J}_{d}(x,t)$$
(II.20)

II.8. Effet de la taille des grains sur les propriétés des nanostructures

Actuellement, la quasi-totalité des circuits intégrés sont en silicium, le transistor en étant la brique de base. La microélectronique comme l'optoélectronique se caractérise par une évolution vers la miniaturisation constante des composants et ceux-ci pour deux raisons. Une raison économique visant à intégrer le maximum de composants sur une seule puce et une raison fondamentale puisque les propriétés de la matière et donc du composant vont être complètement modifiées pour des dimensions inférieures à la longueur d'onde de De Broglie définie par :

$$\lambda = \frac{2\pi h}{\sqrt{2m_{eff}E}}$$
(II.21)

Pour de telles dimensions (quelques nanomètres), la notion de trajectoire doit alors être remplacée par celle d'état quantique et de fonction d'onde. Le modèle de la masse effective donne une idée rapide des effets du confinement quantique.

Pour représenter le système, nous considérons un électron de fonction d'onde confiné dans un puits de potentiel infini de largeur L à une dimension. La largeur L du puits représente la dimension finie du silicium. La fonction d'onde de l'électron vérifie l'équation de Schrödinger :

$$H\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E\varphi(x)$$
(II.22)

Où m est la masse de l'électron, \hbar la constante de Planck normalisée et E l'énergie de l'état considéré. En prenant comme conditions aux limites l'annulation de la fonction d'onde sur les parois, nous obtenons la relation :

$$E = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2}$$
(II.23)

Avec n entier strictement positif. L'énergie des états augmente donc lorsque la taille du système diminue. Cet effet se produisant également avec les trous, l'écart énergétique entre les états de la bande de valence et ceux de la bande de conduction, c'est à dire le gap du système, s'écrit finalement :

$$E = 1.1 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) \frac{1}{L^2}$$
(II.24)

Où m_e et m_h représentent les masses effectives des électrons et des trous. Ce modèle simple montre qualitativement que confiner les porteurs dans des structures de silicium de dimension finie provoque une augmentation du gap inversement proportionnelle au carré de la dimension latérale [25].

II.9. Effets quantiques dans les structures MOS

La réduction des dimensions des dispositifs jusqu'à des tailles nanométriques fait apparaître des phénomènes de nature quantique, jusqu'alors considérés comme inexistants ou en grande partie négligeables.

La mécanique quantique est prise en compte lorsque les dimensions de la structure considérée sont nanométriques. Il s'ensuit que la largeur caractéristique de la couche d'inversion devient comparable à la longueur d'onde associée aux porteurs de charge de la couche, ce qui conduit à l'émergence des effets quantiques. Ces effets quantiques jouent un rôle très important dans le comportement électrique du transistor MOS nanométrique, leur présence perturbe le fonctionnement conventionnel du transistor MOS.



Figure II.4. Comparaison du modèle quantique avec le modèle classique [26].

II.9.1. Confinement quantique

Pour des composants MOS de dimensions classiques $L_G > 50nm$, $T_{OX} > 20nm$, la couche d'inversion se situe directement sous l'interface Oxyde/Semi-conducteur. Par contre, si les dimensions diminuent (longueur de grille et épaisseur d'oxyde), des phénomènes quantiques apparaissent. Ceux-ci se traduisent par le déplacement du maximum du profil d'électrons de l'interface vers le substrat d'une distance de l'ordre du nanomètre. Ce phénomène est appelée confinement des porteurs. La quantification des niveaux d'énergie est illustrée sur la figure II.5.



Figure II.5. Quantification de niveaux d'énergie à l'interface du confinement des porteurs [26]. Avec d_{inv} désigne la largeur de couche d'inversion ou puits quantique, et d_{dark} désigne la largeur de la région de confinement «darkspace».

Les porteurs qui sont confinés dans un puits de potentiel peuvent être considérés comme un gaz bidimensionnel. La statistique classique de Fermi-Dirac pour un gaz tridimensionnel d'électrons n'est plus valable pour modéliser ce phénomène. Il est nécessaire de faire appel à des équations issues de la mécanique quantique [27]. L'approche la plus rigoureuse consiste à résoudre simultanément les équations de Poisson et de Schrödinger, afin de prendre en compte les phénomènes quantiques.

II.9.2. Confinement quantique dans les nanostructures semi-conductrices

Dans un semi-conducteur massif, le mouvement des porteurs est libre le long des trois directions spatiales. Cependant, une nanostructure a une ou plusieurs de ses dimensions réduites à une échelle nanométrique et ceci produit une quantification de l'énergie des porteurs correspondant au mouvement le long de ces directions [28].

Quand un électron est confiné dans un espace de dimensions Lx, Ly, Lz, si la longueur caractéristique est λ , on peut avoir les situations suivantes [29] :

i) $\lambda \ll Lx$, Ly, Lz. Dans ce cas l'électron se comporte comme dans un semi-conducteur massif (3D).

ii) $\lambda > Lx$ et $Lx \ll Ly$. Dans cette situation, on a un semi-conducteur 2D perpendiculaire à l'axe x. Ce système est appelé : puits quantique.

iii) $\lambda > Lx$, et $Lx, Ly \ll Lz$. Ceci correspond à un semi-conducteur 1D ou un fil (fibre) quantique.

iv) $\lambda \gg Lx$, Ceci correspond à un semi-conducteur 0D ou un point quantique.

II.9.3. Confinement quantique à une dimension : Puits quantique

Dans une couche mince de semi-conducteur d'épaisseur connue, le mouvement des porteurs est libre le long des deux directions orthogonales dans le plan de la couche, mais quantifié perpendiculaire au plan, formant un puits quantique unidimensionnel. Les résultantes des niveaux d'énergie quantifiée sont déterminées en résolvant la forme unidimensionnelle de l'équation de Schrödinger [28, 30].

II.9.4. Confinement quantique à une dimension : Fil quantique

Un fil (fibre) quantique est une bande d'un semi-conducteur confinée dans un second, de plus large barrière de bande interdite. La liberté de mouvement des porteurs est possible seulement le long de la longueur du fil et est quantifiée le long des deux directions orthogonales restantes.

Pour des formes simples du fil (Sections transversales carrée ou rectangulaire), il est possible de calculer l'énergie quantifiée pour les deux directions indépendamment. Ces deux quantifications d'énergie sont ajoutées à l'énergie résultante du mouvement libre le long du fil [28].

II.9.5. Confinement quantique à une dimension : Point quantique

Un point quantique est une petite région d'un semi-conducteur totalement entourée par un second, de plus large barrière de bande interdite. Le mouvement des porteurs est quantifié le long des trois directions spatiales et il ne reste plus de mouvement libre des porteurs [28].

Un point quantique (nano-point) est un cristal semi-conducteur, où les électrons sont confinés en trois dimensions, dont la taille globale est inférieure ou égale à 10 nm . (Figure II.6). Il présente des caractéristiques très différentes des structures massives conventionnelles [31].

Des progrès récents dans la technologie de fabrication des nanostructures de silicium ont fait des observations éventuelles de nouvelles propriétés électriques et optiques des points quantiques de silicium, à savoir, le transport balistique et l'émission d'électrons [11, 32, 33].

Les points quantiques confinent les électrons aux dimensions négligeables, par rapport aux fils quantiques (ligne) aux puits quantiques (plan) qui ont une superficie d'environ la même que la longueur d'onde de Broglie [34].



Figure II.6. Image MEB des points quantiques dans le nano-silicium [35].

II.10. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté dans un premier temps les aspects technologiques et morphologiques du transistor en couche mince. Nous avons par la suite essayé de donner un aperçu clair sur les équations utilisées pour l'extraction des relations qui régissent le fonctionnement TFT.

Enfin, nous avons décrit les propriétés des nanostructures de silicium, le confinement quantique et le transport des porteurs dans ces structures.

Chapitre 3

Modélisation et Simulation du TFT

Au sommaire de ce chapitre

- 1. Introduction
- 2. Distribution de la densité des pièges dans le Silicium nano silicium
- 3. Potentiel de surface
- 4. Tension de seuil
- 5. Modélisation compacte du transport
- 6. Conclusion

III.1.Introduction

Dans ce chapitre, Nous nous intéressons à la modélisation analytique de la tension de seuil d'un TFT canal N, en tenant en compte de la morphologie du canal. Nous exposons, ensuite, nos résultats de simulation numérique relatifs au transport électronique dans les TMOS en utilisant le logiciel MATLAB. Nous commencerons par une brève présentation du potentiel de surface dans les transistors MOS TFT en poly-silicium et les résultats de simulation que nous avons obtenus prennent en considération les différents effets influants sur les caractéristiques courant-tension ainsi que sur le potentiel de surface et la tension de seuil, tel que l'effet du dopage, de l'épaisseur de l'oxyde de grille et de l'oxyde enterré, ainsi que de la tension de polarisation de la grille.

III.2.Distribution de la densité des pièges dans le Silicium nano silicium

III.2.1.Densité d'états des pièges

Plusieurs modèles ont été proposés pour décrire la densité d'états dans le cas d'un matériau amorphe. Le premier modèle a été proposé par Mott et Davis [1] en se basant sur les travaux d'Anderson [2] (voir figure I.1(a)). Ensuite Cohen, Fritzsche et Ovshinsky [3]ont proposé un modèle (appelé CFO) qui tient compte de celui de Mott et Davis en supposant que la densité d'états est constante au voisinage du niveau de Fermi (voir figure I.1(b)).

La densité d'état des pièges est donnée par la solution suivante :

$$N(E) = N_{c}e^{-\frac{E_{c}-E}{KT_{c}}} + N_{m1}e^{-\frac{(E_{m1}-E)^{2}}{2\sigma_{1}^{2}}} + N_{m2}e^{-\frac{(E_{m2}-E)^{2}}{2\sigma_{2}^{2}}} + N_{m3}e^{-\frac{(E_{m3}-E)^{2}}{2\sigma_{3}^{2}}} + N_{v}e^{-\frac{E-E_{v}}{KT_{c}}}$$
(III.1)

 N_c représente la densité d'états au bord de la bande de conduction

$$N_{\rm C} = 2 \left(\frac{KT m_c^*}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$
(III.2)

Et N_v celle des états au bord de la bande de valence

$$N_{V} = 2 \left(\frac{KTm_{v}^{*}}{2\pi\hbar^{2}} \right)^{3/2}$$
(III.3)



Figure III.1. (a) Modèle de densité d'états proposé par Mott et Davis. (b) Modèle de densité d'états de CFO.

Tc (Tv) la température caractéristique de la QBC (QBV),

Nm1, Nm2 et Nm3 : les densités d'états aux sommets des gaussiennes,

 E_{m1} , E_{m2} et E_{m3} : leurs positions dans le gap par rapport à Ec.

 σ_1, σ_2 et σ_3 : leur écart-type.

III.2.2.Résultats de simulation numérique

Nous avons simulé, sous Matlab, la densité des pièges N en fonction de leur position dans le gap du semi-conducteur. Les résultats de simulation sont illustrés dans la figure III.2,



Figure III.2.Densité d'états des pièges en fonction de l'énergie (a) Echelle linéaire.

(b) Echelle semi-logarithmique

La figure montre que la densité d'états est constituée de deux distributions de types donneurs (QBV et Gauss-Donn) et deux autres de types accepteurs (QBC et Gauss-Acc) modélisée d'après l'équation (III.1).

III.2.3.Variation de la densité en fonction d'énergie

Sur la figure III.3, nous présentons plusieurs distributions de la densité d'état en fonction de l'énergie. Dans ces distributions, nous avons tenu compte de la variation de trois paramètres : la densité d'état maximale (N_m) à la limite de la bande considérée, le niveau d'énergie maximal (E_m) associé à N_m et l'écart type (σ_m) .



Figure III.3. Variation de densité d'états en fonction de l'énergie : (a) variation de la position des niveaux d'énergie, (b) variation de la densité des états dans le gap, (c) variation de l'écart-

type.

Sur la figure III.3(a), la variation de E_m contrôle la position de la distribution des pièges, aussi bien les pièges profonds que les pièges en queux de bande.

Sur la figure III.3(b), la variation de N_m contrôle la hauteur de la distribution des pièges (aussi bien les pièges profonds que les pièges en queux de bande), c'est-à-dire, la densité de piège augmente ou diminue selon la position de la distribution.

Sur la figure III.3(c), la variation de σ_m contrôle la largeur de la distribution des pièges (aussi bien les pièges profonds que les pièges en queux de bande), celle-ci est également dépendante de la position de la distribution.

III.3.Potentiel de surface

III.3.1. Présentation théorique du potentiel de surface

III.3.1.1. Equation de Poisson

En général, l'équation de Poisson à une dimension (1D) le long de la direction (Ox) perpendiculaire à l'interface substrat/oxyde de la grille du TFT peut être écrite sous la forme[4] :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] = -q \left[N_D^+(x) - N_A^-(x) + P(x) - n(x) + N_{TD}^+(x) - N_{TA}^-(x) \right]$$
(III.4)

Où $\varphi(x,y)$ est le potentiel électrostatique, $\varepsilon(x)$ est la constante diélectrique dépendante de l'espace, N_{TD}^+ et N_{TA}^- sont les concentrations des donneurs et d'accepteurs ionisés, respectivement, n (x) et p (x) sont les densités d'électrons et de trous dans le nc-Si, respectivement, $N_{TD}^+(x)$ est la concentration de pièges donneurs (positifs) au niveau du joint de grain et $N_A^-(x)$ est la concentration des pièges accepteurs (négatifs) dans le joint de grain. N_{TD} possède un niveau mono-énergétique E_{TD} et N_{TA} un niveau mono énergétique E_{TA} .



Figure III.4.Section transversale d'un TFT en poly-Si en forte inversion.

III.3.1.2.Potentiel de Fermi

Lorsque la somme des charges est nulle dans le film de silicium nanocristallin, le potentiel de Fermi est donné par l'équation suivante :

$$q\varphi = E_F - E_i + q\phi_{F0} \tag{III.5}$$

Avec

$$\phi_{F0} = \frac{K T}{q} \ln\left(\frac{P_0}{n_i}\right) \tag{III.6}$$

 E_F est le niveau de Fermi, E_i le niveau intrinsèque, K la constante de Boltzmann et T la Température.

III.3.1.3. Concentration intrinsèque des porteurs

La concentration intrinsèque des porteurs peut être écrite sous la forme [5] :

$$n_{i} = \frac{2(2\pi k)^{\frac{3}{2}}}{h^{3}} (m_{e}m_{h})^{\frac{3}{4}} M_{c}^{\frac{1}{2}} T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_{g}}{2KT}\right)$$
(III.7)

Où

$$m_h = \left(m_{lh}^{3/2} + m_{hh}^{3/2}\right)^{2/3}$$
(III.8)

 m_{lh} et m_{hh} sont les masses légères et lourdes du trou, E_g la largeur de la bande d'énergie interdite qui vaut 1.12eV à température ambiante, M_c est le nombre de minima dans la bande de conduction (MC = 6 pour le silicium)[6].

Au niveau des joints de grain, les densités de pièges N_{TA} et N_{TD} sont données par les équations suivantes :

$$N_{TD}^{+} = \frac{N_{TD}}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{TD}}{KT}\right)} = \frac{N_{TD}}{1 + \exp\left(\frac{q\varphi - q\varphi_{F0} + (E_i - E_{TD})}{KT}\right)}$$
(III.9)

et

$$N_{TA}^{-} = \frac{N_{TA}}{1 + \exp\left(\frac{E_{TA} - E_{F}}{KT}\right)} = \frac{N_{TA}}{1 + \exp\left(\frac{q\varphi - q\varphi_{F0} + (E_{i} - E_{TA})}{KT}\right)}$$
(III.10)

Avec p, n et N_{TA} sont données comme suit :

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{KT}\right) = P_0 \exp\left(-\frac{q\varphi}{KT}\right)$$
(III.11)

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{KT}\right) = n_0 \exp\left(\frac{q\varphi}{KT}\right)$$
(III.12)

$$N_{TA} = \frac{N_{ST}}{d}, \qquad (\text{III.13})$$

D'un autre coté, N_{TA} et N_{TD} sont liées à la densité surfacique N_{ST} par :

$$N_T = \frac{2N_{ST}}{d} \tag{III.14}$$

Où d est la taille moyenne des grains [7].

Par ailleurs, la concentration des dopants actifs est définie comme suit :

$$N_{Aa}^{-} = N_{A}^{-} - N_{TD}^{+}$$
(III.15)
III.3.1.4.Expression analytique du potentiel de surface

Pour la modélisation analytique du potentiel de surface en fonction de champ électrique d'un transistor TFT nc-Si à canal N (substrat de type P), la concentration de trous Peut-être négligée. Donc, l'équation (III.4) de vient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] = q \left[N_{Aa}^{-}(x) + n(x) + N_{TA}^{-}(x) \right]$$
(III.16)

En substituant les équations (III.10), (III.12)et (III.13) dans l'équation (III.16), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] = q \left[N_{Aa}^{-}(x) + n_0 \exp\left(\frac{q\varphi}{KT}\right) + \frac{N_{ST}}{\frac{d}{d}} + \frac{N_{ST}}{1 + \exp\left(-\frac{q\varphi + (E_i - E_{TA} - q\varphi_{F0})}{KT}\right)} \right]$$
(III.17)

En utilisant la relation :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right]^2 = 2 \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$$
(III.18)

Puis en intégrant de 0 à φ_s , on obtient finalement l'équation :

$$E(\varphi_{s}) = \sqrt{\frac{2q}{\varepsilon_{nc-si}}}$$

$$\left[\left(N_{Aa}^{-} + \frac{N_{ST}}{d} \right) \varphi_{s} + n_{0} KT \left(\exp\left(\frac{q\varphi_{s}}{KT}\right) - 1 \right) + \frac{N_{ST} KT}{d} \ln \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{q\varphi_{s} + \left(E_{i} - E_{TA} - q\phi_{F0}\right)}{KT}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E_{i} - E_{TA} - q\phi_{F0}}{KT}\right)} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$
(III.19)

Si le facteur de dégénérescence 0,5 est pris en compte dans les pièges de type donneur au niveau des joints de grains, l'équation (III.19) peut être réécrite comme suit:

$$E(\varphi_{s}) = \sqrt{\frac{2q}{\varepsilon_{nc-si}}}$$

$$\begin{bmatrix} \left(N_{Aa}^{-} + \frac{N_{ST}}{d}\right)\varphi_{s} + n_{0}KT\left(\exp\left(\frac{q\varphi_{s}}{KT}\right) - 1\right) + \\ \frac{N_{ST}KT}{d}\ln\left(\frac{1 + 0.5\exp\left(-\frac{q\varphi_{s} + (E_{i} - E_{TA} - q\phi_{F0})}{KT}\right)}{1 + 0.5\exp\left(-\frac{E_{i} - E_{TA} - q\phi_{F0}}{KT}\right)}\right) + \varphi_{s} \end{bmatrix}^{\frac{1}{2}}$$
(III.20)

50

Pour les nc-Si de type P, on a $P_0 = N_{Aa}^-$ et donc :

$$n_{0} = \frac{n_{i}^{2}}{N_{Aa}^{-}} = \frac{1}{N_{Aa}^{-}} \frac{4(2\pi KT)^{3} (m_{e}m_{h})^{3/2}}{h^{6}} \exp\left(-\frac{E_{g}}{KT}\right)$$
(III.21)

Ou P_0 est la densité des trous dans le nc-si, n_0 est la densité des d'électrons dans le nc-si.

III.3.1.5.Effets quantiques

Dans le cas d'un canal formé à base de cristallites nanométriques de silicium, la constante diélectrique et la bande interdite sont fortement influencées par les effets quantiques [8].

En effet, les effets quantiques sur la constante diélectrique sont causés principalement par les points quantiques présents dans la structure. Ces effets interviennent pour des échelles de l'ordre de quelques nanomètres. La constante diélectrique est donnée dans ce cas par l'équation suivante :

$$\varepsilon_{nc-Si}(d) = 1 + \frac{10.4}{1 + \left(\frac{1.38}{10^9 d}\right)^{1.37}}$$
 (III.22)

Les effets quantiques sur la bande interdite sont causés principalement par les puits quantiques. Ces effets interviennent à des échelles de l'ordre de plusieurs dizaines de nanomètres. L'énergie de gap est donnée par l'équation suivante :

$$\Delta E_g(d) = Eg(d) - Eg(\infty) = \frac{3.4382}{10^9 d} + \frac{1.1483}{(10^9 d)^2}$$
(III.23)

Ou d est taille moyenne des grains, Eg est la bande interdite et Eg (∞) est la bande interdite

en volume, si le haut de la bande de valence est défini comme origine.

En remplaçant, les équations (III.22) et (III.23) dans l'équation(III.20), on obtient :

 $(E(\varphi_S))^2 =$

$$\frac{2q}{\varepsilon_{nc-Si}\varepsilon_0} \left(N_{Aa}^- + \frac{N_{ST}}{d} \right) \varphi_S +$$

$$\frac{4KT(2\pi KT)^{3}(m_{e}m_{h})^{\frac{3}{2}}}{N_{Aa}^{-}h^{6}}\exp\left(-\frac{E_{g}+q\left(\frac{3.4382}{10^{9}d}+\frac{1.1483}{(10^{9}d)^{2}}\right)}{KT}\right)KT\left(\exp\left(\frac{q\varphi_{S}}{KT}\right)-1\right)$$

$$+\frac{N_{ST}KT}{d}\left(\frac{1+\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{q\varphi_{S}+\frac{1}{2}E_{g}(\infty)+\frac{1}{2}q\left(\frac{3.4382}{10^{9}d}+\frac{1.1483}{(10^{9}d)^{2}}\right)-E_{TA}-q\phi_{F0}}{KT}\right)}{1+\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{\frac{1}{2}E_{g}(\infty)+\frac{1}{2}q\varphi_{S}+\frac{1}{2}E_{g}(\infty)+\frac{1}{2}q\left(\frac{3.4382}{10^{9}d}+\frac{1.1483}{(10^{9}d)^{2}}\right)-E_{TA}-q\phi_{F0}}{KT}\right)}\right)$$
(III.24)

La tension de grille est égale à la somme de la tension dans la bande libre, de la chute de tension aux bornes de l'oxyde et du potentiel de surface:

$$V_G = V_{FB} + \varphi_S + \frac{\varepsilon_{Si}}{\varepsilon_{ox}} T_{ox} E(\varphi_S)$$
(III.25)

III.3.2.Résultats et discussion

III.3.2.1.Potentiel de surface

Le potentiel de surface défini par l'équation (III.24) est tracé sur la figure (III.5) pour les données suivantes : Tox=7nm, V_{fb} =-0.8V, T=300K, N_A =10¹⁵cm⁻³, V_G =10 V (la tension de polarisation de la grille).



Figure III.5. Potentiel de Surface en fonction de la taille des grains.

La figure III.5 représente la variation du potentiel de surface en fonction de la taille des grains. On remarque que φ_s augmente avec l'augmentation de la taille des grains, de jusqu'à atteindre un maximum de φ_s =2V pour une taille de d=4 nm . A partir de cette taille, le potentiel de surface a tendance à diminuer en fonction de d et cela s'explique par l'apparition des effets quantiques pour cette gamme de tailles. La variation des valeurs de φ_s , au-delà d'une taille de grains de 20 nm, se stabilise à une valeur proche de 1.65 V.



Figure III.6 . Potentiel de surface avec et sans effets quantiques

La figure III.6 montre clairement que le potentiel de surface d'un nc-Si TFT est largement affecté quand la taille des nanocristaux est inferieure à 7 nm, cela est causé par le fait que la constante diélectrique du nc-Si correspondante varie fortement avec d. Dans le même intervalle, on peut constater que le potentiel de surface est peu affecté par la bande interdite pour des diamètres de grains inferieurs à 6 nm. Ceci signifie que l'effet des pièges inter-granulaires sur le potentiel de surface d'un nc-Si TFT devient de plus en plus important lors de l'accroissement de la surface inter-granulaire. Ainsi la variation du potentiel de surface due à la bande interdite peut être négligée devant la variation causée par les pièges intergranulaires.

III.3.2.2. Effets quantiques

Les variations de la constante diélectrique donnée par l'équation (III.22) et de l'énergie du gap donnée par l'équation (III.23) en fonction des tailles des cristallites formant le canal, sont représentées dans les figures (III.7) et (III.8) respectivement.



Figure III.7. Variation de la constante diélectrique du nc-Si en fonction de la taille des grains.

La Figure III.7 représente la variation de la constante diélectrique du nc-Si en fonction de la taille des grains. Nous remarquons sur la figure que la constante diélectrique croit avec la taille des grains puis tend à se stabiliser. En effet, la variation de la constante diélectrique est très importante pour des tailles de grain inférieures à 8 nm. Pour des tailles de grains supérieures à 8 nm, la variation de la permittivité est nettement plus faible, voire constante à partir de d = 30 nm.($\varepsilon_{nc-Si} = 11.4$). Ce résultat montre l'impact des effets des points quantiques sur la constante diélectrique.



Figure III.8. Energie de gap en fonction de la taille des grains du nc-Si.

Sur la figure III.8, nous observons que l'énergie de gap décroit avec l'augmentation de la taille des grains. Une décroissance rapide est observée pour les tailles inférieures à 10 nm, alors qu'une décroissance lente est attribuée aux tailles supérieures à 10 nm mettant en évidence l'impact des puits quantiques sur l'énergie de la bande interdite.

III.4.Tension de seuil

III.4.1. Présentation théorique de la tension de seuil

La modélisation analytique de la tension de seuil peut être écrite comme suit [6] :

$$V_T = V_{FB} + 2\phi_P + \frac{\varepsilon_{nc-sc}}{\varepsilon_{ox}} T_{ox} \cdot E(\varphi_S)$$
(III.26)

Avec $\varphi_s = 2\phi_P$, en replaçant $E(\varphi_s)$ par l'expression (II.24)[6], on obtient :

$$V_T = V_{FB} + 2\phi_P + \frac{\varepsilon_{nc-sc}}{\varepsilon_{ox}} T_{ox} \times A$$
(III.27)

55

A=

$$\begin{split} & \overline{\left(1 + \frac{10.4}{1 + \left(\frac{1.38}{10^9 d}\right)^{1.37}}\right)} \varepsilon_0 \\ & \overline{\left(N_{Aa}^- + \frac{N_{ST}}{d}\right)} \varphi_s + \frac{4KT(2\pi KT)^3 (m_e m_h)^{\frac{3}{2}}}{N_{Aa}^- h^6} \\ & \times \exp\left[-\frac{E_g + q\left(\frac{3.4382}{10^9 d} + \frac{1.1483}{(10^9 d)^2}\right)}{KT}\right] \exp KT\left(\exp\left(q\frac{q\varphi_s}{KT}\right) - 1\right) + \frac{N_{ST}KT}{d} \\ & \ln\left(1 + \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{q\varphi_s + \frac{1}{2}E_g(\infty) + \frac{1}{2}q\left(\frac{3.4382}{10^9 d} + \frac{1.1483}{(10^9 d)^2}\right) - E_{TA} - q\phi_{F0}}{KT}\right)\right) \\ & -\left(1 + \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{\frac{1}{2}E_g(\infty) + \frac{1}{2}q\left(\frac{3.4382}{10^9 d} + \frac{1.1483}{(10^9 d)^2}\right) - E_{TA} - q\phi_{F0}}{KT}\right)\right) \\ & \right] \end{split}$$

En utilisant la condition de la forte inversion et les hypothéses que $q\varphi_s$ et $E_i - E_{TA} - q\phi_{F0}$ sont beaucoup plus importantes que *KT*, le champ électrique de l'équation (III.26)se simplifie à :

$$(E(\varphi_{s}))^{2} = \frac{2q}{\varepsilon_{nc-si}} \left(\left(N_{Aa}^{-} + \frac{N_{ST}}{d} \right) \phi_{s} + n_{0} KT \exp\left(\frac{q\varphi_{s}}{KT}\right) \right)$$

$$= \frac{2q}{\left(1 + \frac{10.4}{1 + \left(\frac{1.38}{10^{9}d}\right)^{1.37}} \right)} \left(N_{Aa}^{-} + \frac{N_{ST}}{d} \right) \varphi_{s} + \frac{1}{N_{Aa}^{-}} \frac{4KT(2\pi KT)^{3} (m_{e}m_{h})^{\frac{3}{2}}}{h^{6}} \right)$$

$$(III.28)$$

$$\exp\left(-\frac{E_{g}(\infty) + q \left(\frac{3.4382}{10^{9}d} + \frac{1.1483}{(10^{9}d)^{2}}\right)}{KT} \right) KT \exp\left(\frac{q\varphi_{s}}{KT}\right)$$

56

L'expression de la tension de seuil peut être obtenue comme suit :

$$V_{T} = V_{FB} + 2\phi_{P} + \frac{\varepsilon_{nc-sc}}{\varepsilon_{ox}} T_{ox} \times \left(\frac{2q}{\varepsilon_{nc-sc}} \left(\left(N_{Aa}^{-} + \frac{N_{ST}}{d} \right) (2\phi_{P}) + n_{0} KT \exp\left(\frac{q(2\phi_{P})}{KT}\right) \right) \right)^{\frac{1}{2}}$$
(III.29)

III.4.2.Résultats de simulation numérique

III.4.2.1. Tension de seuil

La figure III.9 montre l'évolution de la tension de seuil en fonction de la taille des grains. On remarque que la tension de seuil croit pour des faibles tailles des cristallites jusqu'à atteindre une valeur maximale de1.2V pour d=4 nm. A partir de cette taille, la tension de seuil décroit lentement et tend à se stabiliser à partir de d=30 nm.



Figure III.9. Tension de seuil en fonction de la taille des grains.

III.4.2.2. Dépendance de la tension de seuil à la densité des pièges

Sur la figure III.10, nous traçons la variation de la tension de seuil en fonction de la taille des grains pour plusieurs valeurs de la densité des pièges. On observe une augmentation de la tension de seuil au fur et à mesure que la densité de pièges augmente.





III.4.2.3. Dépendance de la tension de seuil à l'épaisseur de l'oxyde

Sur la figure (III.11), nous montrons la variation de la tension de seuil en fonction de la densité des pièges pour différentes valeurs de T_{ox} . Il est clair que la diminution de l'épaisseur de l'oxyde entraine la diminution de la tension de seuil, ceci est causé essentiellement par la diminution de la concentration des défauts d'origine technologique présents dans l'oxyde. Mathématiquement, la diminution de T_{ox} implique l'augmentation de C_{ox} , ceci résulte en une diminution du potentiel de surface et donc la tension de seuil.



Figure III.11. Variation de la tension du seuil en fonction de la densité des pièges pour différentes valeurs de *T*_{ox}.

III.4.2.4. Dépendance de la tension de seuil à la température

La figure III.12montre la variation de la tension de seuil en fonction de la densité des pièges sous effet de la température et pour deux valeurs de l'épaisseur de l'oxyde (30nm et 100nm). Nous remarquons que la variation de la tension de seuil décroit lorsque l'épaisseur de l'oxyde de grille diminue de 100 à 30nm pour la même température de fonctionnement. Nous remarquons aussi que pour les deux valeurs de l'épaisseur d'oxyde, la tension de seuil augmente en fonction de la température qu'on attribue à l'augmentation du nombre de porteurs libres qui contribuent à la formation du canal pour de faibles valeurs de la tension appliquée à la grille. Cependant, l'effet de la température pour un oxyde de 100nm d'épaisseur est moins prédominant que pour un oxyde de 30nm [9].



Figure III.12. Tension de seuil en fonction de la densité des pièges sous effet de la température.

III.4.2.5.Dépendance de la tension de seuil à la densité des pièges

La figure III.13illustre la variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur de l'oxyde pour différentes valeurs de la densité des pièges. Nous remarquons que la tension de seuil évolue d'une manière monotone avec la densité des pièges. Cela est du au nombre de porteurs libres (de conduction) disponibles au niveau du canal.



Figure III.13. Tension de seuil en fonction de l'épaisseur de l'oxyde pour différentes valeur de la densité des pièges.

D'une manière générale, la courbe de la figure III.13 illustre l'augmentation de la tension de seuil avec l'augmentation de l'épaisseur de l'oxyde, cela est attribué au fait que lorsque l'épaisseur d'oxyde croit, le composant (TFT) a besoin d'une plus grande tension appliquée au niveau de la grille pour atteindre la condition de la forte inversion. Par ailleurs, la tension de seuil décroit d'une valeur de 3.5V à une valeur inférieure à 1V lorsque l'épaisseur de l'oxyde décroit 100nm à 30nm. Ceci dit, nous observons que l'effet de la densité des pièges devient moins important pour des valeurs très faibles de l'épaisseur d'oxyde [9].

III.4.3.Structure granulaire

La figure III.14 montre une vue schématique de la structure du dispositif que nous avons utilisé pour la modélisation. Il décrit le canal du TFT à base de nc-Si en trois dimensions avec une morphologie granulaire caractérisé par une taille nanométrique des cristallites. Nous considérons les nanocristallites de silicium comme un ensemble de grains de taille nanométrique et de géométrie sphérique, séparés les uns des autres par une région amorphe (joint de grain) [10]. Dans la couche d'inversion, les électrons adjacents au niveau de l'interface canal/oxyde de grille induits par l'application d'une valeur positive de tension sur la grille et qui seront piégés dans le joint de grain, ce qui provoque la formation d'une région d'appauvrissement à l'intérieur des grains. Ensuite, en appliquant le théorème de Gauss dans les directions x et y [11], l'équation suivante peut être déduite :

$$\varepsilon_{snc-i} \int_{0}^{\frac{Laac}{2}} \int \left(\frac{\partial \psi(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial \psi(x, y)}{\partial y} \right) dx dy + C_{ox} \int_{0}^{y} \int_{0}^{x} (V_{gs} - V_{fb} - \psi(x, 0) - \psi(0, y)) dx dy$$

$$= q N_a L_{acc} xy$$
(III.30)



Figure III.14. Vue en coupe du canal d'un TFT en nc-Si [10].

Lace représente la profondeur d'accumulation dans le grain,

 ψ (x, y) est le potentiel électrostatique,

V_{GS} est la tension grille-source,

V_{fb} est la tension de bandes plates,

N_a est la concentration de dopage du substrat de type p,

Cox est la capacité d'oxyde de grille par unité de surface (ɛox / tox),

Tox est l'épaisseur de l'oxyde de grille,

d est la taille moyenne des grains en nm.

 ε_{ox} et ε_{nc-si} sont la permittivité de la couche d'oxyde de silicium et du nc-Si pouvant être calculée théoriquement à partir de l'équation(III.22) [12].

III.4.4.Potentiel électrostatique

Nous supposons que le potentiel électrostatique a une distribution circulaire avec les axes x et y. Donc [10,11]:

$$\psi(x,y) = \left(\psi(x,0) + \psi(0,y)\right) \left(\left(\frac{x}{\frac{L_{acc}}{2}}\right)^2 + \left(\frac{y}{\frac{L_{acc}}{2}}\right)^2 - 1 \right)$$
(III.31)

En substituant équation(III.30) dans équation(III.29), en différenciant les deux côtés par rapport à x et y, et après quelques manipulations algébriques, on obtient l'expression du potentiel de surface en cas de forte inversion en fonction du diamètre du grain (pour $y_d = d/2$) qui peut être exprimé par [10]:

$$\varphi_{s} = 2 \left(V_{GS} - V_{fb} - \frac{qN_{a}L_{acc}}{C_{OX}} \right) + 2 \left| \frac{\frac{KT}{2q} \ln \left(\frac{N_{a}}{n_{i}} \right) - V_{gs} + V_{fb} + \frac{qN_{a}L_{aac}}{C_{OX}} + \frac{1}{2q} \left(\frac{E_{g}}{2} + \frac{3.4382}{2.10^{9}d} + \frac{1.1483}{(2.10^{9}d)^{2} - \chi_{0}} \right) \right]$$

$$\times \cosh \left[\left(\frac{\frac{C_{OX}}{2\varepsilon_{0}L_{aa}}}{1 + \frac{10.4}{16} \left[1 + \left(\frac{1.38}{10^{9}d} \right)^{1.37} \right]} d \right]^{\frac{1}{2}} \right]$$
(III.32)

En remplaçant l'équation (III.32) dans l'équation (III.7), avec quelques réarrangements, on obtient :

$$V_{th} = V_{fb} + \frac{\left(2\varepsilon_{si}qN_{a}\varphi_{s}\right)^{\frac{1}{2}}}{C_{ox}} + \varphi_{s}$$

$$+ \frac{\varphi_{s}}{\varepsilon_{si}\left(\frac{2C_{ox}}{\varepsilon_{si}L_{acc}}\right)^{\frac{1}{2}}} \sinh\left(\left(\frac{2C_{ox}}{\varepsilon_{si}L_{acc}}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{d}{2}\right) - 1$$
(III.33)

62

III.4.5.Variation de la tension de seuil en fonction du dopage

La figure III.15 montre la variation de la tension de seuil avec la concentration du dopage du film pour différentes valeurs de l'épaisseur de l'oxyde de grille, en considérant deux différentes tailles des grains (5–20 nm). Nous remarquons, que la tension de seuil augmente avec l'augmentation de la concentration du dopage pour une valeur donnée de l'épaisseur d'oxyde de grille. En outre, Nous observons que la différence de tension de seuil est plus élevée pour les grandes valeurs de la densité de dopage, et moins importante pour des concentrations de dopage inférieures. Ceci est attribué au fait que la densité de pièges devient importante en cas de concentration de dopage élevée, il en résulte que, ces états de pièges font augmenter la barrière de potentiel à travers le canal et dégradent ainsi les performances du dispositif.



Figure III.15. Variation de la tension de seuil en fonction du dopage pour différentes valeurs d'épaisseur d'oxyde de grille : (a) d = 5 nm et (b) d= 20nm.

III.4.6.Variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour différentes valeurs de la densité du piège

La figure III.16 montre la variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour différentes valeurs de la densité des pièges et pour deux tailles de grain différentes (5 à 20 nm). Nous remarquons que la tension de seuil augmente avec l'augmentation de la densité des pièges pour une valeur donnée de l'épaisseur de l'oxyde de grille. Ceci est attribué au fait que le nombre de porteurs libres disponibles pour la conduction dans le canal du dispositif diminue avec l'augmentation de la densité de pièges. Nous observons également que, lorsque l'épaisseur de l'oxyde de grille augmente, la tension de seuil augmente également pour toutes les valeurs de la densité des pièges. Ceci est en accord avec les résultats obtenus dans les figures (III.11) et (III.13).Cela est dû au fait qu'à mesure que l'épaisseur d'oxyde de grille augmente, le dispositif a besoin de plus de tension de grille pour atteindre le régime de forte inversion dans la couche de canal nc-Si qui constitue le canal du dispositif. L'effet de la densité de pièges devient moins important pour les faibles valeurs de l'épaisseur de l'oxyde de grille.

La figure (III.16) montre que la diminution de la taille des grains de 20 à 5 nm engendre des effets canaux courts. En effet, la diminution de la taille des grains augmente le nombre de joints de grains et les centres de piégeage , par conséquent, les charges piégées dans ces joints de grain nécessitent une tension de grille supplémentaire pour les ioniser, augmentant ainsi la tension de seuil.



Fig. III.16. Variation de la tension de seuil en fonction de l'épaisseur d'oxyde pour différentes valeurs de densité des pièges : (a) d= 5 nm et (b) d= 20 nm.

III.5. Modélisation compacte du transport

III.5.1.présentation théorique

III.5.1.1.modèle analytique compact du courant de drain

Le courant de drain pour une modélisation compacte (qui couvre les différentes régions de fonctionnement) dans un TFT est donné par [13]:

$$I_{DS} = I_{leak} + \left(\frac{1}{I_{sub}} + \frac{1}{I_{abv} + I_{tr}}\right)^{-1}$$
(III.34)

Ou :

Iabv : L'expression de courant pour le régime au dessus du seuil,

Ileak : le courant de fuite,

Isub : le courant sous le seuil.

L'équation du courant pour le régime transition est donnée par :

$$I_{tr} = \frac{1}{2} \mu_n C_i \frac{W}{L} V_{DSe} (1 + \lambda V_{DS}) M V_{Gire}^{2+D}$$
(III.35)

$$V_{Gtre} = V_{th} \left[1 + \frac{V_{Gtr}}{2V_{th}} + \sqrt{\delta^2 + \left(\frac{V_{Gtr}}{2V_{th}} - 1\right)^2} \right]$$
(III.36)

$$V_{Gtr} = V_{GS} - V_{tr} V_{DSe} = \frac{V_{DS}}{\left[1 + \left(\frac{V_{DS}}{Vsate}\right)^{m_{Sat}}\right]^{\frac{1}{m_{Sat}}}}$$
(III.37)

$$V_{Sate} = \alpha_{sate} V_{GTe} \tag{III.38}$$

$$C_i = \epsilon_i \epsilon_0 / d_i \tag{III.39}$$

- C_i représente la capacité par unité de surface de l'oxyde. En règle générale, le dioxyde de silicium est utilisé pour la grille supérieure et le nitrure de silicium est utilisé pour la grille inférieure dans le cas d'un TFT à double grille.
- μ_n est la mobilité de bande. C'est la mobilité maximale des électrons du dispositif. Pour les dispositifs nc-Si, sa valeur serait comprise entre 1 cm²V⁻¹s⁻¹ et 40 cm²V⁻¹s⁻¹. Cependant, les dispositifs avec des mobilités allant jusqu'à 40 cm² V⁻¹ s⁻¹ seraient probablement inadéquats pour ce modèle, car ils seraient plutôt proches des dispositifs poly-Si.
- 3. V_{DSe} est une tension drain-source efficace qui modélise la réduction de l'efficacité de la tension drain source dans le canal.
- 4. α détermine la valeur de la tension de drain à laquelle la saturation se produit.
- 5. V_{sate} représente la tension effective de saturation du drain.

- 6. m sat est un paramètre utilisé pour l'amorce du régime de saturation.
- 7. λ est le paramètre de modulation de longueur du canal.
- 8. V_{GTe} est la tension de grille effective.
- 9. δ est le paramètre de largeur de transition. Déterminé de manière empirique, il décrit la largeur du régime de transition ; lorsque $\delta = 0$, $\delta = 0$, $V_{GTe} = V_{GTr} = V_{GS} Vtr$
- 10. V_{th} est la tension de seuil.
- 11. M le coefficient de la variation linéaire de la mobilité par rapport à la tension V_{GS} .
- 12. D un paramètre empirique.
- 13. V_{tr} la tension de transition entre le régime linéaire et le régime quadratique.
- ✓ Courant au-dessus du seuil

$$I_{abv} = \mu_{FET} C_i \frac{W}{L} V_{DSe} (1 + \lambda V_{DS}) V_{CTe}$$
(III.40)

$$V_{GTe} = V_{th} \left[1 + \frac{V_{GT}}{2V_{th}} + \sqrt{\delta^2 + \left(\frac{V_{GT}}{2V_{th}} - 1\right)^2} \right]$$
(III.41)

$$V_{GT} = V_{Gs} - V_{T0} \tag{III.42}$$

$$\mu_{FET} = \mu_n \left(\frac{V_{CTe}}{V_{AA}}\right)^{r}$$
(III.43)

$$V_{Gtr} = \frac{V_{DS}}{\left[1 + \left(\frac{V_{DS}}{Vsate}\right)^{m_{Sat}}\right]^{\frac{1}{m_{Sat}}}}$$
(III.44)

$$V_{Sate} = \alpha_{sate} V_{GTe}, \qquad C_i = \epsilon_i \epsilon_0 / d_i \qquad (III.45)$$

66

✓ Régime transitoire

$$I_{tr} = \frac{1}{2} \mu_n C_i \frac{W}{L} V_{DSe} (1 + \lambda V_{DS}) M V_{Gtre}^{2+D}$$
(III.46)

$$V_{Gtre} = V_{th} \left[1 + \frac{V_{GTr}}{2V_{th}} + \sqrt{\delta^2 + \left(\frac{V_{GTr}}{2V_{th}} - 1\right)^2} \right]$$
(III.47)

$$V_{GTr} = V_{Gs} - V_{Tr} \tag{III.48}$$

✓ Régime sous-seuil

$$I_{sub} = q\mu_n \frac{W}{L} V_{DSe} n_{s0} \left[\left(\frac{t_m}{d_i} \right) \left(\frac{V_{GFBe}}{V_2} \right) \left(\frac{\epsilon_i}{\epsilon_s} \right) \right]^{\frac{2V_2}{V_e}}$$
(III.49)

$$n_{s0} = N_C t_m \left(\frac{V_e}{d_i}\right) \exp\left(\frac{-dE_{F0}}{V_{th}}\right)$$
(III.50)

$$V_{GFBe} = V_{th} \left[1 + \frac{V_{GFB}}{2V_{th}} + \sqrt{\delta^2 + \left(\frac{V_{GTr}}{2V_{th}} - 1\right)^2} \right]$$
(III.51)

$$V_{GFB} = V_{Gs} - V_{FB}, \qquad t_m = \sqrt{\frac{\epsilon_s \epsilon_0}{2q \cdot g_{\min}}}$$
(III.52)

$$V_{e} = \frac{2V_{2}V_{th0}}{2V_{2} - V_{th}}$$
(III.53)

✓ Courant de fuite

$$I_{leak} = I_{0L} \left[\exp\left(\frac{V_{DS}}{V_{dsL}}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{-V_{GS}}{V_{GL}}\right) + \sigma V_{DS}$$
(III.56)

III.5.1.2. Tableau des paramètres

Symbole	Description	Valeur par défaut
V _{T0}	Tension de seuil	Varie
V _{tr}	Tension de transition	Varie
М	Paramètre de régime transitoire	0,25
D	Paramètre de correction de loi quadratique	-0,07
γ	Paramètre de mobilité	0,16
VAA	Tension caractéristique pour les µFET	370000
α	Paramètre de saturation	0.23
λ	Paramètre de modulation de longueur de canal	5*10 ⁻⁵
δ	Paramètre de largeur de transition	2
m _{sat}	Paramètre de forme	1.5
V _{FB}	Tension de bande plate	Varie
V ₂	Tension caractéristique pour les états profonds	0.18
V _{th}	Tension thermique	0.02
V _{th0}	Tension thermique à température ambiante	0.02

III.5.3. Caractéristique de sortie IDS (VDS) pour différentes valeurs de VGS



Figure III.17. Caractéristique I_{DS} (V_{DS}) pour différentes valeurs de V_{GS}.

La figure III.17 représente la variation du courant de drain en fonction de la tension V_{DS} sous effet de la tension de grille. D'un TFT poly –silicium dans cette figure, nous remarquons que plus la tension V_{DS} augmente plus le courant de drain augmente pour les trois valeurs de la polarisation de grille. Pour de faibles valeurs de V_{DS} , la variation du courant I_{DS} est linaire. Le courant I_{DS} augmente avec l'augmentation de V_{DS} jusqu'à une valeur de V_{DS} de 2Vcette variation linaire résulte de la faculté des porteurs à pouvoir se déplacer librement dans le canal à cause du faible nombre d'interactions dans le canal, et le TFT se comporte donc comme une résistance de faible valeur. A un certain intervalle de la tension de drain, le courant se prépare à se saturer, c'est ce qu'on appelle « la zone transitoire », ensuite, le courant se stabilise à une valeur constante attribuée à la saturation de la vitesse des porteurs.

III.5.4. Caractéristique de transfert I_{DS} (V_{GS}) pour différentes valeurs de V_{DS}

La Figure III.18 montre la Caractéristique I_{DS} (V_{GS}) pour différentes valeurs de V_{DS} , Nous pouvons connaitre le seuil de fonctionnement de notre transistor. On remarque aussi que le courant de drain augmente avec l'augmentation de la tension de polarisation V_{DS} . Nous pouvons remarquer qu'à $V_{GS}=V_{DS}=5v$, la valeur du courant est plus importante.



Figure III.18.Caractéristique IDS(VGs) pour différentes valeurs de VDS

III.6.Conclusion

Dans ce chapitre de notre manuscrit, nous avons présenté les résultats de simulation numérique pour un modèle compact du courant de drain dans le transistor TFT. Les résultats de la modélisation ont montré que la tension de seuil d'un TFT dépend, selon la morphologie des grains cristallins, essentiellement des paramètres technologiques et physiques suivants : taille des grains, dopages du canal, les effets quantiques, potentiel de surface, épaisseur de l'oxyde de grille, densité d'état de pièges.

Les résultats de la modélisation de la tension de seuil d'un canal à structure cristalline nanométrique du silicium ont montré aussi bien pour une morphologie granulaire que pour une morphologie colonnaire, que les effets quantiques sur la constante diélectrique et sur la bande interdite du silicium interviennent dans le contrôle de la tension de seuil dans une gamme de tailles des grains nanométriques bien définie. Ceci montre que la tension de seuil peut être ajustée en fonction de la structure nanométrique du silicium selon les caractéristiques électriques considérées du transistor.



Conclusion générale

La technologie des transistors en couches minces à base de silicium polycristallin (TFT Poly-Si) est en pleine essor. Cette technologie est utilisée aujourd'hui pour des applications d'électronique grande surface telles que les écrans plats à matrices actives LCD ou OLED, les imageurs à rayons X ou les capteurs d'empreintes. Son essor s'explique par le gain en mobilité des transistors en Poly-Si par rapport à la technologie amorphe (TFT a-Si), qui permet l'intégration directement le substrat en verre de fonctions jusque-là réalisées en mono-silicium puis hybridées sur un substrat de silicium amorphe.

Les différentes approches analytiques concernant la modélisation de la tension de seuil d'un TFT dépend, selon la morphologie des grains cristallins, essentiellement des paramètres technologiques et physiques : taille des grains, dopages du canal, potentiel de surface, épaisseur de l'oxyde de grille et densité d'état de pièges.

Pour une structure micrométrique, la taille des grains est le paramètre le plus influant et avantageux. En effet, un canal à large grain induit des tensions de seuil contrôlables ne nécessitant pas un fort dopage du canal.

Pour une structure nanométrique, aussi bien pour une morphologie granulaire que pour une morphologie colonnaire, les effets quantiques sur la constante diélectrique et sur la bande interdite du silicium interviennent dans le contrôle de la tension de seuil dans une gamme de tailles des grains bien définie. Ceci montre que la tension de seuil peut être ajustée en fonction de la structure nanométrique du silicium selon les caractéristiques électriques visées du transistor.

Nous avons commencé par le rappel des propriétés physiques du silicium. Celles-ci jouent un rôle important dans les composants microélectroniques. Nous avons vu que le silicium est un matériaux multivallés (6 vallée), et contient dans la bande de valence des trous légers et des trous lourds. Nous avons utilisé, ce concept pour la résolution des équations considérées dans ce type de composants, en l'occurrence l'équation de Poisson et Schrödinger. Celles-ci ont été résolues de manière auto-cohérente.

Les résultats de simulation de la tension de seuil d'un canal à structure cristalline nanométrique du silicium ont montré que les effets quantiques sont à considérer pour des tailles de cristallites de silicium bien définies. En effet, l'ensemble des résultats a montré que les propriétés structurales et physico-chimiques du silicium nanocristallin contrôlent la variation de la tension de seuil selon la taille nanométrique des cristallites.



Introduction générale

[1] S. Hassab, « Etude des propriétés optoélectroniques du silicium polymorphe hydrogéné (pm-Si :H) », thèse de magister, université d'Oran ES Senia .

[2] C. Rechatin, « Caractérisation, modélisation, conception pour des applications analogiques grande surface dans la technologie transistors en couches minces en silicium polycristallin (TFT Poly-Si) », thèse de doctorat, L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon,2007.

Chapitre I

 [1] D. Benelhadj, « étude par ellipso métrique de la structure du silicium nanocristallin dépose par pulvérisation cathodique radiofréquence magnétron », thèse de magister, université d'Oran ES Senia .

[2] R. Zellagui , « Réalisation et étude des propriétés électroniques des couches de Silicium poreux », thèse de magister, université D'Oran Mohamed Boudiaf,2012.

[3] B. Zaidi, « Etude de l'activité électronique des joints de grains dans le silicium poly cristalline destiné à des applications photovoltaïques », thèse de doctorat, université Badji Mokhtar,2014.

[4] D. Béchir, « Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules

photovoltaïques à haut rendement », thèse de doctorat, école doctorale Matériaux de Lyon ,2010.

[5] A.R. Lang, «Studies of Individual Dislocations in Crystals by X-Ray Diffraction Microradiography », Journal d'application Physique, 30 (1959) 1748.

[6] C. Rechatin, « Caractérisation, modélisation, conception pour des applications analogiques grande surface dans la technologie transistors en couches minces en silicium polycristallin (TFT Poly-Si) », thèse de doctorat, L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon,2007.

[7] O. Bonnaud, « Physique des solides », p8 , juin 2003.

[8] V. Diep BUI, « Conception et modélisation de transistors TFTs en silicium microcristallin pour des écrans AMOLED », thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, France ,2006.

[9] N. Touidjen, « Modélisation du Transistor à Effet de Champ (TEC) en Couches Minces à base de Silicium Polycristallin Si-L.P.C.V.D », thèse de doctorat , université de Constantine , 2010.

[11] H. Mathieu, H. Fanet, « Physique des Semi-conducteurs et des Composants Électroniques : Cours et Exercices Corrigés », Dunod, 2009.

[12] R. A. Street, « Hydrogenated amorphous silicon », Cambridge, Série scientifique sur l'état solide,1991.

[13] Spear, W. E., and Cloude, S. C. Phil. Mag. B 58, 467, 1988.

Chapitre II

[1] C. D. Dimitrakopoulos, R. L. Malenfant, « Organic Thin Film Transistors for large area electronics, Advanced Materials», Vol 14, No 2, p 99-117, 2002.

[2] R. Fates, « Modélisation analytique de la tension de seuil d'un transistor en couche mince TFT », thèse de master, université de Jijel,2012.

[3] J.Andrew, S.BradHerner, Tanmay.Kumar, et En-Hsing Chen, « On conduction

Mechanism in polycrystalline Silicon Thin-Film Transistor », IEEE Trans sur Electron de dispositifs, vol.51, N ° 11, pp1856-1866, 2004.

[4] M.Valdinoci, L. Colalongo et G. Baccarino, «Analysis of electrical characteristics of polycrystalline silicon thin-film transistors under static and dynamic conditions », Electronique à l'état solide, vol.41,9, pp1363-1369, 1997. [5] C. Cheng, J.Singh, M.C. Poon, et C.A. Mansun. « Statistical model to predict the performance variation of polysilicon TFTs formed by grain-enhanced technolog », IEEE Trans sur Electron de dispositive, vol.51, pp12, 2061-2067, 2004.

[6] J.Levinson, F.R.Shephered, P.J.Scanlon, W.D.Westwood. « Conductivity behaviour in polycrystalline semi-conductor thin film transistors », Journal application Physique (53), (2), 1982.

[7] G.Baccarani, B.Ricco, et G.Spadini. « Transport properties polycrystalline silicon Films », Journal d'application Physique (49), (2), 1978.

[8] S. E. Naimi, « Optimisation et compréhension des performances électriques de nouvelles technologies de transistors MOS en couche mince », Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France 1996.

[9] N. Szydlo, « Écrans à cristal liquide : Technologies de fabrication », Techniques de l'ingénieur, E2520, 1997.

[10] M. Grundmann, «The Physics of Semiconductors - An Introduction Including Nanophysics and Applications», deuxième edition, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

[11] M. Grundmann, «The Physics of Semiconductors - An Introduction Including Devices and Nanophysics», Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2006.

[12] Y. W. Lee et al, « Comparison of Electrical Properties and Bias Stability of Double-Gate a-HIZO TFTs According to TFT Structure», Lettres IEEE Electron Device, Vol 33, Iss 6, p 821-823, 2012.

[13] A. Risteska et al, «Electrical Stability of High-Mobility Microcrystalline Silicon Thin-Film Transistors», Journal IEEE de la technologie d'affichage, Vol 8, No 1, p 27-34, 2012.

[14] Y.H. Byun, M. Shur, M. Hack, et K. Lee, « New analytical polycrystalline silicon

thin film transistor model for Computer Aided Design and parameter extraction», Electronique à l'état solide, vol. 35, N ° 5, p. 655 à 663, 1992.

[15] F.Templier, B. Aventurier et al. « LTPS Process on Metal Foil for Flexible Active Matrix OLED Displays » Eurodisplay, Edinburgh, Scotland, 2005.

[16] T-J King, « Poly-Si TFTs for Plastic Substrates », Affichage d'information, p 24-26, 2001.

[17] J.Y. Seto, «The electrical properties of polycrystalline silicon films», Journal d'application Physique, Vol.46, p. 5247-5254, 1975.

[18] J. Levinson et al, «Conductivity behavior in polycrystalline semiconductor thin film transistor », Journal d'application Physique, Vol. 53, p. 1193-1202, 1982.

[19] J.Cibert, « Nanophysique et semiconducteurs», Laboratoire Louis Néel et Equipe ,septembre 2004.

[20] O.Simonetti. « Influence de la quantification en énergie des porteurs sur la modélisation et la caractérisation électronique des structures MOS à oxyde de grille ultra mince (<3nm) », laboratoire d'automatique et de microélectronique, France.

[21] H.Mathieu, «Physique des semi-conducteurs et des composants électronique », Paris, 1998.

[22] csidoc.insa-lyon.fr/these/2006/nychyporuk/04_chapitre_1.pdf.

[23] docinsa.insa-lyon.fr/these/2006/nychyporuk/04_chapitre_1.pdf.

[24] B.Diagne ,« Etude et modélisation compacte d'un transistor MOS SOI double grille dédié à La conception», thèse de doctorat, université Louis Pasteur – Strasbourg I, novembre 2007.

[25] D. Béchir, « Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules photovoltaïques à haut rendement », thèse de doctorat, école doctorale Matériaux de Lyon ,2010.

[26] M. Bella « Influence des effets quantiques sur les caractéristiques de transistors DGMOS nanométrique, mémoire de magister, université Mentouri de Constantine, 2009.

[27] C.Choi, «Modeling of nanoscale MOSFETS», thèse de doctorat, Université Stanford, Avril ,2002.

- [28]. D. Mowbray, « Nanoscale Science and Technology», John Wiley & Sons, p 130-201, 2005.
- [29]. J. M. Martínez-Duart, R. J. Martín-Palma, F. Agulló-Rueda, «Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectronics», Elsevier B.V, 2006.
- [30]. M. Grundmann, « The Physics of Semiconductors An Introduction Including Nanophysics and Applications», Deuxième édition, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2010.
- [31]. L. Williams, W. Adams, « Nanotechnology Demystified», McGraw-Hill, 2007.
- [32]. S. Oda, « Silicon Quantum Dot Devices », IEEE Procédure MIEL, p 31-34, 2008.
- [33]. S. Oda et al, «Nanocrystalline Silicon Quantum Dot Devices», IEEE Conference Publications, ICSICT, p 1045-1048, 2006.
- [34]. L. Williams, W. Adams, « Nanotechnology Demystified», McGraw-Hill, 2007.
- [35]. S. Oda, « Silicon Quantum Dot Devices », Procédures IEEE MIEL, p 31-34, 2008.

Chapitre III

[1] N.F. Mott, Phil. Mag. 19, 835, 1969.

[2] P.W. Anderson, Phys, Rev, 109, 1492, 1958.

[3] M.H. Cohen, H. Fritszche, S.R. Ovishinsky, Phys, Rev, Lett. 22, 1065, 1969.

[4] A. Ortiz-Conde, J.G. Fossum, IEEE Trans, Dispositifs électroniques ,33, 1986.

[5] S M Zse,N. Kwok, « Physics of Semiconductors devices»,3ème édition, John Wiley &Sons, New Jersey,2007.

[6] L-F.Mao, « Quantum size impacts on the threshold voltage in nanocrystalline silicon thin film transistors», Fiabilité de la microélectronique, Vol 53pp 1886–1890, 2013.

[7] J.G. Fossum, A. Ortiz-Conde, H. Shichijo, S.K. Banerjee, IEEE Trans, Dispositifs électroniques, 32, 1878.

[8] L. F. Mao, « The quantum size effects on the surface potential of nanocrystalline silicon thin film transistors», Thin Solid Films, Vol 518, Iss 12, p 3396–3401, 2010.

[9] N. Gupta, «therchold voltage modelling and gate oxide thickness effect on polycrystalline silicon thin-film transistors», Physica Scripta, vol.76, N°6,2007.

[10] R, Fates, H, Bouridah et R, Remmouche, «Theoretical determination of the impact of channel morphology and quantum size effects on the surface potential of nanocrystalline silicon thin film transistors», Materials Science in Semiconductor Processing, 24 ,278–281, 2014.

[11] Wu W, Yao R, Zheng X, «A new analytical threshold voltage model for the doped polysilicon thin-film transistors», Electronique à d'état solide, 53:607, 2009.

[12] L.W. Wang, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. 73, 1039, 1994.

[13] D. J. Grant, «Physics and Modelling of Nanocrystalline Silicon Thin-Film Transistors», université de Waterloo, 2003.