

N° d'ordre : 1031

50376  
1983  
95

50376  
1983  
95

# THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE TROISIEME CYCLE**

par

Mohamed CHAREF

**ETUDE DES PHENOMENES DE TRANSPORT AU  
VOISINAGE D'UNE SURFACE OU D'UN INTERFACE  
APPLICATION AU TRANSISTOR MOS SILICIUM  
EN REGIME D'INVERSION**



Soutenue le 22 février 1983 devant la Commission d'Examen

MM.	E.	CONSTANT	Président
	R.	FAUQUEMBERGUE	Rapporteur
	J.	ZIMMERMANN	Rapporteur
	P.	ROSSEL	Examineur
	G.	SALMER	Examineur
		CHU HAO	Invité



à

*R. FAUQUEMBERGUE ET CHU-HAO*

*en témoignage d'amitié et de  
reconnaissance*

*Ce travail a été effectué au " Centre Hyperfréquences et Semi-conducteurs de l'Université des Sciences et Techniques de Lille" dirigé par Monsieur le professeur E.CONSTANT.*

*Je désire avant tout exprimer ma reconnaissance à Monsieur le professeur E.CONSTANT qui m'a accueilli dans son laboratoire et me fait l'honneur de présider le jury de cette thèse.*

*Je suis très profondément reconnaissant à Monsieur P.ROSSEL, maître de recherche au C.N.R.S., ainsi qu'à Monsieur G.SALMER, professeur à l'Université des Sciences et Techniques de Lille, de l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et de participer à ce jury.*

*Je suis très heureux que Monsieur R.FAUQUEMBERGUE, maître assistant à l'Université des Sciences et Techniques de Lille ait assuré la direction de ce travail et m'ait largement fait bénéficier de son aide et de ses conseils. Il m'est difficile de résumer en quelques mots la dose de compréhension et de sympathie qu'il m'a témoignée. Je désire simplement le remercier pour tout.*

*Monsieur J.ZIMMERMANN, chargé de recherches au C.N.R.S., m'a fait bénéficier de son expérience au cours de multiples discussions. Je tiens à le remercier pour sa précieuse contribution à cette étude.*

*Je remercie tout particulièrement Monsieur CHU HAO, maître assistant à l'institut polytechnique de Hanoï, pour l'aide qu'il m'a apportée et les conseils qu'il m'a prodigués au cours de la réalisation de ce travail durant son séjour au C.H.S. Sa collaboration scientifique*

a été pour moi un enrichissement inestimable. Sa clairvoyance et son sens physique ont été à l'origine du développement du troisième modèle. Il a bien voulu faire partie de mon jury, qu'il me soit permis de lui exprimer ma profonde reconnaissance.

La simulation numérique a été effectuée au Centre Inter-universitaire du Traitement de l'Information de Lille. J'y ai apprécié le soutien sympathique et efficace du personnel de ce centre et je l'en remercie.

J'adresse tous mes remerciements à tous les membres de l'équipe "Semi-conducteurs" pour la sympathie qu'ils m'ont témoignée.

Enfin, je ne saurais oublier ceux qui ont contribué à la réalisation de ce manuscrit, Madame VANBREMEERSCH qui a eu la tâche ingrate de dactylographier cette thèse, Monsieur PLUQUET et Madame LECHIEN pour les nombreux services qu'ils ont su me rendre, toujours avec chaleur et spontanéité.

# TABLE DES MATIERES

Page

1	INTRODUCTION GENERALE
7	BIBLIOGRAPHIE
	1 <sup>ÈRE</sup> PARTIE : SITUATION ACTUELLE DU SUJET ET ETUDE PRELIMINAIRE
13	I ANALYSE ET COMPARAISON DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA LITTERATURE
14	I.1 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE F.F.FANG et A.B.FOWLER
16	I.2 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE SAH et AL.
17	I.3 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE R.W.COEN et R.S.MULLER
18	I.4 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE D.F.NELSON et J.A.COOPER
20	I.5 METHODES ET RESULTATS EXPERIMENTAUX DE GAMBOA et AL.
21	I.6 COMPARAISON ET ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX
22	II THEORIES ACTUELLES DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS UNE COUCHE D'INVERSION
22	II.1 THEORIE D'UN GAZ D'ELECTRONS BIDIMENSIONNEL
	II.1.1 Formulation générale
	II.1.2 Solutions approximatives
	II.1.2.1 Potentiel triangulaire
	II.1.2.2 Calcul variationnel
	II.1.3 Quelques résultats utilisant l'approximation triangulaire
30	II.2 THEORIE CLASSIQUE
33	II.3 CONCLUSION

34	III	UTILISATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO
34	III.1	GENERALITES ET APPLICATION A L'ETUDE DU MATERIAU EN VOLUME
35	III.2	APPLICATION A L'ETUDE DE COMPOSANTS
37	III.3	STRUCTURE DE BANDE ET PARAMETRE DU SILICIUM
39	IV	APPLICATION DE LA METHODE A L'ETUDE DES EFFETS DE SURFACE : TRANSPORT DANS UN FILM
40	IV.1	GENERALITES SUR L'EFFET DE SURFACE
44	IV.2	MISE EN OEUVRE DE LA METHODE DE MONTE CARLO POUR L'ETUDE DES EFFETS DE SURFACE - TRANSPORT DANS UN FILM
47	IV.3	RESULTATS
51		CONCLUSION
52		BIBLIOGRAPHIE

## CHAPITRE 1 : MODELE D'UN GAZ D'ELECTRONS A DEUX DIMENSIONS

## INTRODUCTION

## I STRUCTURE DE BANDE INFLUENCE DE LA RUGOSITE DE SURFACE ET DES CHARGES D'OXYDE

## I.1 PARAMETRES ET BANDE DE CONDUCTION D'UN GAZ D'ELECTRON A DEUX DIMENSIONS

## I.2 INFLUENCE DE LA RUGOSITE DE SURFACE

## I.3 INFLUENCE DES CHARGES D'OXYDE

## II MODELE TENANT COMPTE D'UNE SEULE SOUS-BANDE E'o

## II.1 COLLISIONS ET PARAMETRES

## II.2 TRAITEMENT DES PROBABILITES

## II.2.1 Phonons acoustiques

## II.2.2 Phonons intervallées

## II.3 RESULTATS OBTENUS EN REGIME STATIONNAIRE DANS UN CANAL DE TYPE N PAR SIMULATION MONTE CARLO

## II.3.1 Mobilité en fonction de la température

## II.3.2 Vitesse de saturation en fonction de la température

## II.3.3 Caractéristique vitesse-champ en fonction de la densité de charge d'oxyde et de la rugosité de surface

- II.3.4 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde à basse température
- II.3.5 Mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs de la couche d'inversion
- II.3.6 Remarque : Phénomènes de transports en régime stationnaire dans un canal de type P
  - II.3.6.1 Caractéristiques vitesse-champ
- II.3.7 Conclusion

79 III MODELE TENANT COMPTE DES TROIS SOUS-BANDES :  $E_0$ ,  $E'_0$ ,  $E_1$

81 III.1 COLLISIONS ET PARAMETRES

84 III.2 PROBABILITES D'INTERACTIONS

III.2.1 Phonons acoustiques

III.2.2 Phonons intervallées

87 III.3 RESULTATS OBTENUS EN REGIME STATIONNAIRE DANS UN CANAL DE TYPE N PAR SIMULATION MONTE CARLO

III.3.1 Mobilité ohmique et vitesse de saturation en fonction de la température : Comparaison théorie-expérience

III.3.2 Evolution des populations des différentes sous-bandes en fonction du champ électrique de dérive

III.3.3 Evolution de la mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs

III.3.4 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde à basse température

III.3.5 Mobilité ohmique en fonction de la densité de la charge d'oxyde

III.3.6 Mobilité ohmique en fonction de la rugosité de surface

III.3.7 Mobilité ohmique en fonction du champ de surface

III.3.8 Conclusion

101 CONCLUSION

102 BIBLIOGRAPHIE

107	CHAPITRE 2 : MODELE A DEUX COUCHES
107	INTRODUCTION
106	I PRESENTATION DU MODELE
106	I.1 LE MODELE ET SES HYPOTHESES
109	I.2 MISE EN OEUVRE DE LA METHODE ET SIMULATION MICROSCOPIQUE
111	II ETUDE DU REGIME OHMIQUE
111	II.1 ETUDE DE LA MOBILITE OHMIQUE EN FONCTION DE LA TEMPERATURE : SURFACE (100)
114	II.2 ETUDE DU REGIME OHMIQUE EN FONCTION DU CHAMP DE SURFACE : SURFACE (100)
117	III PHENOMENES DE TRANSPORT DES PORTEURS CHAUDS EN REGIME D'INVERSION
117	III.1 RESULTATS DE LA SIMULATION. COMPARAISON AVEC LES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA LITTERATURE
	III.1.1 Interface S(100)
	III.1.2 Interface S(111)
123	III.2 ETUDE DETAILLEE DES QUANTITES CALCULEES EN FONCTION DE L'ELOIGNEMENT DE L'INTERFACE. ETUDE DE LA REPOPULATION DES VALLEES

	III.2.1	Profils de concentration, de l'énergie et de la vitesse de dérive des porteurs en fonction de la distance à la surface. Profil du champ électrique
	III.2.2	Phénomènes de repopulation des vallées
130	III.3	INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE FONCTIONNEMENT DU COMPOSANT SUR LA MOBILITE DES PORTEURS
	III.3.1	Caractéristique stationnaire vitesse-champ électrique en fonction de la température
	III.3.2	Vitesse limite des porteurs en fonction de la température
	III.3.3	Etude du paramètre $P_S$
139		CONCLUSION
141		BIBLIOGRAPHIE
143		CHAPITRE 3 : MODELE A TROIS COUCHES
143		INTRODUCTION
144	I	MORPHOLOGIE DE L'INTERFACE Si-SiO <sub>2</sub>
147	II	LE MODELE A TROIS COUCHES
147	II.1	CARACTERISTIQUES DU MODELE
149	II.2	INFLUENCE DE LA BARRIERE DE POTENTIEL
150	II.3	MECANISMES DE COLLISIONS ET PARAMETRES DE CONDUCTION
	II.3.1	Collisions sur charges d'oxyde
	II.3.2	Collisions liées à la rugosité de surface

151	III	MODE OPERATOIRE ET SIMULATION MICROSCOPIQUE
152	IV	ETUDE DE LA MOBILITE OHMIQUE EN REGIME D'INVERSION
152	IV.1	INFLUENCE DE L'EPAISSEUR DE LA ZONE NON STOECHIOMETRIQUE
155	IV.2	INFLUENCE DE LA DENSITE DE CHARGES D'OXYDE
155	IV.3	INFLUENCE DE LA RUGOSITE DE SURFACE
157	IV.4	MOBILITE OHMIQUE EN FONCTION DU CHAMP DE SURFACE
161	V	CARACTERISTIQUES DE TRANSPORT DANS UNE COUCHE D'INVERSION EN CHAMP FORT A LA TEMPERATURE AMBIANTE
161	V.1	CAS DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE COEN ET AL
	V.1.1	Orientation de surface S(100)
	V.1.2	Orientation de surface S(111)
166	V.2	CAS DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE NELSON ET AL
170	V.3	PROFILS DE L'ENERGIE ET DE LA VITESSE DE DERIVE DES PORTEURS EN FONCTION DE LA DISTANCE A L'INTERFACE- PROFIL DU CHAMP ELECTRIQUE
174	VI	INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE FONCTIONNEMENT DU COMPOSANT
174	VI.1	SUR LA MOBILITE OHMIQUE DES PORTEURS
176	VI.2	SUR LA VITESSE DE SATURATION
	VI.2.1	Orientation de surface S(100)
	VI.2.2	Orientation de surface S(111)
179	VII	REMARQUES

181 VII.1 EVOLUTION DE LA NATURE DU MOUVEMENT DES PORTEURS EN  
FONCTION DE LA TEMPERATURE

183 VII.2 EVOLUTION DE LA NATURE DU MOUVEMENT DES PORTEURS EN  
FONCTION DU CHAMP DE DERIVE

185 CONCLUSION

186 BIBLIOGRAPHIE

190 CONCLUSION GENERALE

ANNEXES

193 ANNEXE 1 DETERMINATION DE L'ETAT FINAL D'UN PORTEUR APRES  
COLLISION DIFFUSE

199 ANNEXE 2 EXPRESSION DE LA STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION  
DANS UN REPERE LIE A LA SURFACE S(111)

## INTRODUCTION

Une des tendances actuelles les plus significatives de l'électronique moderne est la miniaturisation à l'extrême des composants élémentaires permettant ainsi d'une part, la réalisation de circuits intégrés à haute densité et la diminution des puissances d'alimentation et d'autre part l'augmentation des fréquences de fonctionnement ou la diminution des temps de commutation .

On est ainsi amené à utiliser progressivement dans le domaine des circuits intégrés des composants MOS, de dimensions de plus en plus faibles fonctionnant à partir de couches d'inversion dont l'épaisseur devient de plus en plus submicronique.

Les phénomènes de transport électronique observés dans ce type de composant peuvent se présenter de façon fort différente de ceux obtenus dans le matériau en volume, non seulement parce que les dimensions longitudinales du composant deviennent de l'ordre de quelques libres parcours moyens des porteurs mais aussi et surtout parce que les porteurs se déplacent de plus en plus au voisinage d'une surface ou d'une interface. De ce fait, ils subissent, d'une part, des interactions fort différentes de celles présentées dans le volume du semi-conducteur; d'autre part, ils sont généralement soumis à un champ électrique perpendiculaire à la surface dont la

valeur peut-être importante. En conséquence les phénomènes de conduction observés peuvent être fondamentalement différents de ce qu'ils sont dans un matériau en volume.

Ces constatations n'ont pas échappé à un grand nombre de chercheurs qui s'efforcent depuis plus d'une dizaine d'années d'étudier ces phénomènes tant d'un point de vue théorique [1,17] qu'expérimental [18,28]. Si un accord relativement satisfaisant a pu être obtenu sur la mobilité en champ faible des porteurs d'un canal type N d'une couche d'inversion, il reste des divergences considérables lorsqu'on travaille avec des porteurs chauds: elles peuvent atteindre un facteur deux sur la vitesse limite [6, 18, 19]. Or, il est à craindre que ces divergences ne fassent que s'accroître lorsque, à la suite des progrès technologiques, il deviendra possible de travailler avec des canaux de plus en plus courts où les porteurs seront de plus en plus chauds.

La complexité du problème, le parti pris d'effectuer une résolution analytique simplifiée des équations de transport et donc de recourir à des approximations ( fonction de distribution de type Maxwell, structure de bande simplifiée ) peuvent, au moins en partie, expliquer le relatif insuccès des nombreuses études effectuées sur les phénomènes de transport intervenant au voisinage d'une surface ou dans les couches d'inversion. Il apparaît cependant que le puissant outil constitué par les méthodes de Monte Carlo n'a été que très peu utilisé dans ce domaine [9,10]. Or cette méthode nous semble particulièrement bien adaptée à la résolution de ce type de problème, en effet :

En premier lieu, elle permet sans difficulté majeure de tenir compte de la structure de bande exacte du semi-conducteur et de l'ensemble des interactions subies par le porteur.

En second lieu, la souplesse de la méthode permet, compte tenu de l'incertitude de nos connaissances sur les mécanismes d'interaction électron-surface, de tester plusieurs types d'interactions, de discuter de leur importance relative et d'évaluer la validité des résultats obtenus.

Utilisant l'expérience acquise depuis quelques années en ce qui concerne les méthodes de simulation par les techniques de Monte Carlo [29,30,31] nous avons entrepris l'étude des phénomènes de transport électronique dans une structure MOS en régime d'inversion, c'est à dire dans le cas où les mécanismes d'interaction avec la surface ou l'interface sont particulièrement importants. Nous nous sommes efforcés de séparer l'influence "directe" de la surface sur les phénomènes de transport, de celle plus "indirecte" du champ électrique, très intense et perpendiculaire à la surface, nécessaire à créer l'inversion.

Dans ce mémoire, nous présenterons notre travail en deux parties.

La première est consacrée à une description de l'ensemble des travaux expérimentaux et théoriques relatifs à l'Etude des phénomènes de transport électronique dans une couche d'inversion de type N.

Dans le premier chapitre, nous présentons, très brièvement, l'ensemble des résultats expérimentaux de la littérature en nous efforçant

de préciser les conditions dans lesquelles ils ont été obtenus.

Le second chapitre est consacré à la description des théories actuelles des phénomènes de transport au voisinage d'une surface ou d'une interface et dans une couche d'inversion.

Enfin dans le troisième chapitre, après avoir présenté, de façon succincte, la méthode de Monte Carlo et son utilisation à l'étude de composants, nous en donnons un exemple d'application, en présentant une étude des phénomènes de transport dans un film semi-conducteur et en insistant plus particulièrement sur l'influence de la surface sur le comportement des porteurs.

Dans la deuxième partie sont exposés les différents modèles que nous avons mis au point permettant de décrire les phénomènes de transport électronique dans une couche d'inversion et les résultats que l'on peut déduire de l'exploitation de ces modèles.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des phénomènes de transport électronique par la méthode de Monte Carlo lorsque, sous l'effet d'un champ électrique de surface très élevé, les bandes d'énergie sont fortement incurvées au voisinage de la surface. Les porteurs restent alors enfermés dans un puits de potentiel et il y a quantification de leur énergie dans la direction perpendiculaire à la surface. Le mouvement ne peut s'effectuer que dans un plan parallèle à la surface justifiant ainsi l'appellation de gaz électronique à deux dimensions. Dans ce contexte, on étudie essentiellement les évolutions des grandeurs physiques telles que la mobi-

lité ohmique, la vitesse moyenne des porteurs compte tenu de l'effet de la rugosité de surface et des interactions liées aux charges d'oxyde. Il est à signaler que ces effets de quantification sont d'autant plus importants que la température est faible. Lorsque la température du réseau est élevée, les porteurs deviennent plus énergétiques et leur mouvement redevient tridimensionnel.

Dans le deuxième chapitre, nous abordons le problème dans cette optique : nous supposons que les porteurs ont un mouvement tridimensionnel au voisinage d'une surface parfaite. Concernant l'interaction d'un porteur avec la surface, deux types de collisions sont considérés : spéculaire et diffus. Nous étudions l'évolution de la vitesse moyenne des porteurs et de l'énergie en fonction du champ électrique de dérive et également les paramètres de la dynamique des porteurs selon leur position par rapport à l'interface. Pour les deux types d'interaction porteur-interface envisagés, l'analyse de la variation de la mobilité avec le champ électrique de surface et de la température comparativement aux résultats expérimentaux permet de préciser le caractère de l'interaction avec la surface.

Enfin dans le dernier chapitre, nous considérons la structure de l'interface Si-SiO<sub>2</sub> de façon plus réaliste en tenant compte d'une région non stoechiométrique SiO<sub>x</sub> entre le silicium et l'oxyde de silicium. Dans ce cas les électrons de la couche d'inversion peuvent pénétrer dans cette couche de transition et subir l'effet d'une barrière de potentiel graduelle. De la même façon que dans le chapitre précédent, nous étudions l'évolution de l'énergie, de la vitesse moyenne des porteurs, de leur profondeur de pénétration dans la couche de transition SiO<sub>x</sub> en fonction du champ de dérive.

Pour le régime ohmique, nous étudions la mobilité des porteurs en fonction de la rugosité de l'état de surface, de la densité de charges d'oxyde, du champ électrique de surface. Nous nous intéressons aussi à l'influence de la température de réseau. La même étude est faite en régime de porteurs chauds.

Toutes les études ont été abordées en négligeant les interactions microscopiques electron-electron. Néanmoins il est tenu compte globalement de ces interactions en introduisant dans la détermination du mouvement des porteurs, l'effet du champ électrique macroscopique qu'ils produisent, champ obtenu par la résolution de l'équation de Poisson classique.

Une comparaison théorie-expérience est systématiquement effectuée pour tous les modèles présentés.

## BIBLIOGRAPHIE

- 1 J.R.SCHRIEFFER,  
Phys.Rev.,vol 97, p.641 (1955)
- 2 R.GREENE, FRANKL D. and ZEMEL,  
Phys.Rev., vol 118, p.967 (1960)
- 3 R.PIERRET,  
University of Illinois, Ph.D., (1966)
- 4 F.STERN and W.E.HOWARD,  
Phys.Rev., vol 163, p.816 (1967)
- 5 K.HESS, A.NEUGROSCHHELL, C.C.SHINE and C.T.SAH,  
J.A.P, Vol 46, p.1721 (1975)
- 6 D.K.FERRY,  
Phys.Rev.B, vol 14, p.5364 (1976)
- 7 D.K.FERRY,  
Solid State electronics, vol 20, p.355 (1977)
- 8 D.K.FERRY,  
Solid State electronics, vol 21, p.115 (1978)
- 9 P.K.BASU,  
J.A.P. vol 48, p.350 (1977)

- 10 P.K.BASU,  
Solid State communications, vol 27, p.657 (1978)
- 11 K.HESS and C.T.SAH,  
Phys.Rev.B, vol10,p.3375 (1974)
- 12 K.NAKAMURA,  
Surf.Sci,58, p.48 (1976)
- 13 K.HESS and C.T.SAH,  
J.A.P., vol 45, p.1254 (1974)
- 14 F.STERN,  
Phys.Rev.Letters, vol 44, p.1469(1980)
- 15 F.STERN,  
Phys.Rev.B, vol 5, p.4891 (1972)
- 16 Y.C.CHENG,  
J.A.P., vol 44, p.2425 (1973)
- 17 R.F.GREENE and R.W.O'DONNELL,  
Phys.Rev.vol 47, p.599 (1966)
- 18 R.W.COEN et R.S.MULLER,  
Solid State electronics, vol 23, p.35 (1980)

- 19 D.F.NELSON and J.A.COOPER, JR,  
"High field surface drift velocities in silicon" 2<sup>nd</sup> workshop on the  
Physics of submicron devices, Urbana, Illinois, Juin 1982
- 20 G.MERCKEL,  
Revue Phys.Appl, vol 15 p.879 (1980)
- 21 M.GAMBOA, G.SARRABAYROUSE, H.TRANDUC et P.ROSSEL,  
Revue Phys.Appl, vol 15 p.973 (1980)
- 22 C.T.SAH, J.H.NING and L.L.TSCHOPP,  
Surf.Sci. vol 32, p.561 (1972)
- 23 F.F.FANG and A.B.FOWLER,  
Phys.Rev., vol 169, p.619 (1968)
- 24 F.F.FANG and A.B.FOWLER,  
J.A.P., vol 41, p.1825 (1970)
- 25 T.SATO, Y.TAKEISHI, H.HARA and Y.OKAMOTO,  
Phys.Rev B, vol 4, p.1950 (1971)
- 26 W.MULLER and I.EISELE,  
Solid State Communications, vol 34, p.447 (1980)
- 27 K.HESS, G.DORDA and C.T.SAH,  
Solid State Communications, vol 19, p.471 (1976)

- 28 T.SATO, Y.TAKEISHI, H.TANGO, H.OHNUMA and Y.OKAMOTO,  
J.Phys.Soc. Japan, vol 31, p.1846 (1971)
- 29 J.ZIMMERMANN,  
Thèse de doctorat d'état, Lille (1980)
- 30 A.KASZYNSKI,  
Thèse de docteur ingénieur, Lille (1979)
- 31 M.DEBLOCK,  
D.E.A., Lille (1979)

# 1ÈRE PARTIE

## SITUATION ACTUELLE DU SUJET ET ETUDE PRELIMINAIRE

## INTRODUCTION

Les phénomènes de transport se produisant dans le canal d'un transistor MOS où les porteurs sont en régime d'inversion ont fait l'objet de nombreuses études tant théoriques qu'expérimentales et de nombreux résultats sont disponibles dans la littérature.

Nous présenterons tout d'abord certains résultats expérimentaux en précisant leurs conditions d'obtention, puis nous comparons l'ensemble de ces résultats et nous analysons les désaccords pouvant exister, en particulier lorsque les porteurs sont soumis à un fort champ de dérive.

Après avoir présenté les modèles actuels décrivant les phénomènes de transport dans une couche d'inversion, nous proposerons une méthode de simulation utilisant les techniques de Monte Carlo. Pour justifier l'adaptation de cette méthode à l'étude des effets de surface, nous l'appliquerons au transport électronique dans un film mince semi-conducteur.

# I ANALYSE ET COMPARAISON DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA LITTERATURE

Avant de présenter les résultats expérimentaux existant dans la littérature et afin de définir et d'uniformiser les notations utilisées, nous présenterons tout d'abord les différentes grandeurs caractéristiques d'une structure MOS.

La figure 1 représente la coupe longitudinale d'un transistor MOS conventionnel, obtenu par les processus de diffusion et d'oxydation standard utilisés en technologie planar. Entre les régions de source et drain qui définissent un canal de longueur  $L$  et de largeur  $W$ , on a fait croître une fine couche de  $\text{SiO}_2$  isolant, ou oxyde de grille, dont le rôle est d'isoler l'électrode de grille du canal semi-conducteur. Cet isolant, de permittivité  $\epsilon_{\text{ox}}$  et de capacité par unité de surface  $C_{\text{ox}}$  a généralement une épaisseur  $h_{\text{ox}}$  de l'ordre de  $1000 \text{ \AA}$ .

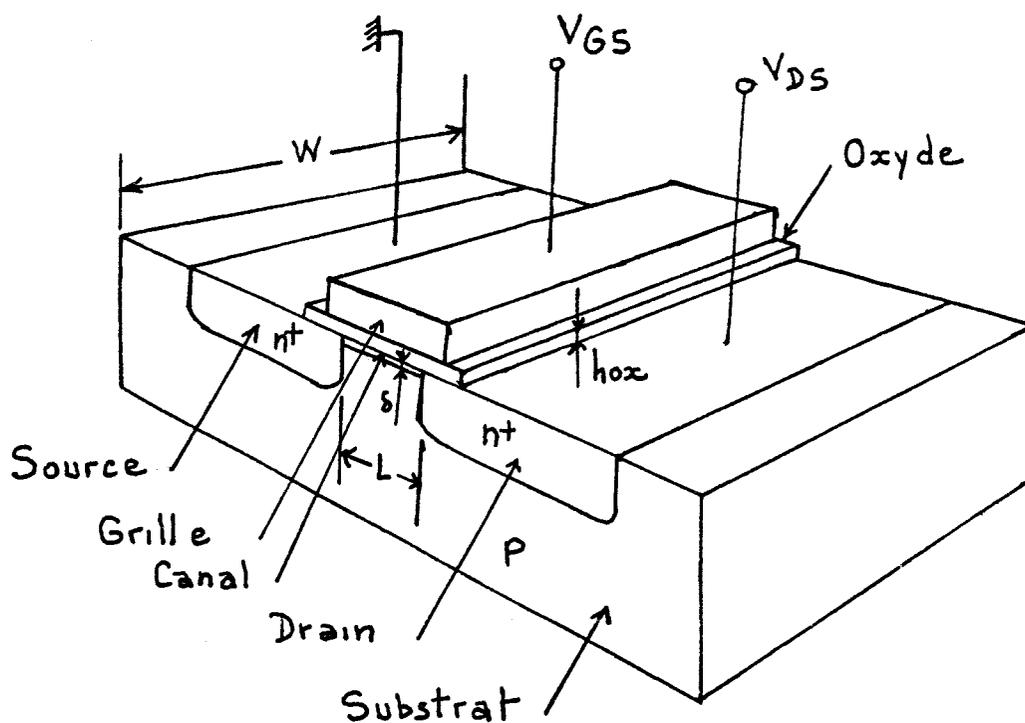


Figure 1 Coupe d'un dispositif MOS

Nous supposons que le substrat semi-conducteur est de type P. Quand on applique sur la grille une tension  $V_{GS}$ , positive par rapport à la source et au substrat, au champ créé dans l'oxyde correspond un champ dans le semi-conducteur, qui va repousser les trous vers l'intérieur du volume du semi-conducteur, par contre, les électrons mobiles vont s'accumuler à la surface du silicium entre la source et le drain. Lorsque la densité d'électrons  $N_S$  au voisinage de la surface est égale à la densité de trous, le potentiel appliqué à la grille est alors appelé potentiel de seuil d'inversion :  $V_T$ . Pour des tensions appliquées très supérieures à  $V_T$ , les électrons deviennent largement majoritaires en surface et créent une couche d'inversion. Le canal d'épaisseur  $\delta$  ainsi formé est alors de type N, de même nature donc que la source et le drain. Dans ces conditions si une différence de potentiel  $V_{DS}$  est appliquée entre source et drain, il y a apparition d'un courant drain  $I_D$  et cette conduction électrique peut être caractérisée par une conductance  $G$  définie par :

$$G = \left( \frac{\partial I_D}{\partial V_{DS}} \right)_{V_{GS}}$$

Les notations définies ici seront utilisées tout le long de ce chapitre.

## I.1 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE F.F.FANG et A.B.FOWLER

[1]

Les études expérimentales effectuées par F.F.FANG et A.B.FOWLER reposent sur la mesure de la conductance  $G$  d'un transistor MOS canal N dont

[1]

la longueur du canal  $L$  et l'épaisseur d'oxyde  $h_{ox}$  sont respectivement égales à  $10 \mu\text{m}$  et  $1 \mu\text{m}$ . Ces dimensions géométriques permettent d'atteindre des champs électriques de dérive  $E_x$  élevés ( de l'ordre de  $30 \text{ kV/cm}$  ) tout en évitant les effets de raccourcissement du canal. Pour obtenir un canal uniforme c'est à dire une charge par unité de surface et un champ électrique  $E_x$  constants le long du canal, il a été nécessaire de porter la grille à un potentiel élevé (  $300 \text{ volts}$  ) largement supérieur à la tension de drain; ce potentiel permet également de fixer la densité de porteurs désirée . Ainsi, le champ électrique  $E_y$  perpendiculaire à l'interface  $\text{Si-SiO}_2$  est élevé dans le canal.

La vitesse  $V$  des porteurs en fonction du champ électrique de dérive est obtenue par l'expression suivante :

$$V = \frac{G \cdot E_x \cdot L}{W \cdot q \cdot N_s}$$

et la mobilité effective peut être déduite des mesures de conductance par la relation :

$$\mu = \frac{L \cdot 4\pi \cdot \delta \cdot G}{W \cdot \epsilon_{ox} \cdot (V_{GS} - V_T)}$$

Les résultats de FANG et FOWLER sont reportés pour des densités de porteurs variant de  $10^{12}$  à  $9 \cdot 10^{13}/\text{cm}^2$  et pour une gamme de température comprise entre  $4^\circ\text{K}$  et  $300^\circ\text{K}$ .

L'une des caractéristiques essentielles des résultats obtenus est que la vitesse de dérive présente un phénomène de saturation lorsque le champ de dérive est supérieur à  $10 \text{ kV/cm}$ , et que la valeur de la vitesse

limite est inférieure à la vitesse limite obtenue pour le silicium en volume.

Remarques : La même méthode a été utilisée par T.SATO et al [2] pour déterminer la caractéristique vitesse-champ dans une couche d'inversion et également par MERCKEL [19] pour la mesure de la vitesse limite des porteurs.

## I.2 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE SAH et AL [3]

Sah et al [3] effectuent des mesures de conductance sur un transistor MOS canal N dont le drain est complètement enfermé par la grille afin de supprimer les courants de fuite de surface. La mobilité est reliée à la conductance par la relation :

$$\mu = \frac{L \cdot G}{W \cdot q \cdot N_s}$$

où  $qN_s$  est la densité de charge induite dans le canal :

$$q N_s = C_{ox} (V_{GS} - V_T)$$

Les résultats présentés sont relatifs à l'évolution de la mobilité des électrons d'une couche d'inversion faiblement inversée en fonction de la densité des charges d'oxyde entre 30 et 300°K. La charge d'oxyde est produite par traitement à chaud dans de l'oxygène entre 600° et 1000°C tandis que le contrôle est fait à 1000°C en présence d'argon. La densité de charges est obtenue par comparaison de la caractéristique expérimentale  $C_{GS}^{-V_{GS}}$

avec celle déterminée théoriquement sous la condition de bande plate. Les résultats sont interprétés en terme d'interaction des porteurs avec les charges d'oxyde, les phonons acoustiques et les phonons optiques dans une théorie d'un gaz bidimensionnel.

### I.3 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE R.W.COEN ET R.S.MULLER [4]

La structure utilisée est un transistor MOS à grille résistive en Nichrome, dans lequel le canal, a une longueur voisine de 8  $\mu\text{m}$ .

La densité de charge et le champ électrique dans ce canal sont maintenus uniformes par application de deux polarisations sur deux doigts de métallisation reliés à cette grille résistive respectivement du côté de la source et du côté du drain. Cette technique permet d'obtenir des champs constants le long du canal mais n'a été utilisée que pour de faibles valeurs des champs longitudinaux et de fortes valeurs des champs transversaux.

COEN et MULLER ont utilisé cette technique pour étudier des transistors MOS canal N ou canal P, avec un dopage de substrat de l'ordre de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  et dans une gamme de température variant de  $100^\circ\text{K}$  à  $350^\circ\text{K}$ .

Les caractéristiques vitesse fonction du champ électrique de dérive sont obtenues à partir des mesures de courant électrique dans le canal. En effet pour un canal uniforme le courant de drain est donné par :

$$I_D = - W \cdot Q_n(o) \cdot V$$

où la charge électrique, dans le canal, à la surface  $Q_n(o)$  a pour expression :

$$Q_n(o) = - C_{ox} (V_{GS}(o) - V_T)$$

où  $V_{GS}(o)$  est la tension grille du côté source.

Le champ électrique de dérive E dans le canal s'écrit :

$$E = - \frac{V_{DS}}{L}$$

et le champ de surface  $E_S$  a pour expression :

$$E_S = E_{y(0)} = \frac{C_{ox}}{\epsilon_{ox}} \cdot (V_{GS(0)} - V_{FB} - 2 \phi_F)$$

où  $V_{FB}$  est la tension de bande plate,  $\phi_F$  le potentiel de Fermi. Ainsi tout un réseau de caractéristiques vitesse-champ peut être déterminé pour diverses valeurs de champ transverses supposées fixes.

Pour les champs longitudinaux inférieur à 5 kV/cm, les courbes vitesse-champ présentent un comportement ohmique. Pour les champs forts, les courbes tendent vers une saturation indiquant une vitesse limite. Cette vitesse limite est obtenue en extrapolant les courbes expérimentales par une relation vitesse-champ phénoménologique. Les points expérimentaux limités à environ 17 kV/cm sont extrapolés jusqu'à des champs de 100 kV/cm. Il en résulte des vitesses de saturation qui sont environ la moitié de celle des électrons en volume.

#### I.4 RESULTATS EXPERIMENTAUX DE D.F.NELSON ET J.A.COOPER JR [ 5 ]

Une nouvelle technique de mesure des caractéristiques de transport dans une couche d'inversion est utilisée : c'est la technique de temps de vol.

Ces auteurs ont mesuré, à la température ambiante, les vitesses

de dérive des électrons et des trous pour des champs électriques de dérive dans le domaine de 5 à 30 kV/cm pour des valeurs de champs de surface dans le domaine de 75 à 750 kV/cm. La direction du champ de dérive est  $\langle 011 \rangle$  et la surface est orientée selon  $S(100)$ .

Dans cette technique, la vitesse est déterminée par une observation directe du déplacement d'un paquet d'électrons créée par éclairage optique le long du canal d'une structure MOS. Une grille résistive est utilisée et une chute linéaire de potentiel est maintenue selon sa longueur. Le substrat étant légèrement dopé, le potentiel de surface est pratiquement le même que le potentiel de grille le long du canal en absence d'électrons à la surface. La variation linéaire du potentiel le long de la surface engendre un champ électrique longitudinal constant. Les électrons ( et trous) sont injectés à proximité de l'extrémité du canal dont le potentiel est faible par absorption durant 100ps, durée des impulsions de longueur d'onde 532 nm obtenues par génération du second harmonique d'un laser. Les trous sont balayés dans le substrat par le potentiel positif de la grille. Les électrons dérivent le long de la surface sous l'influence du champ électrique longitudinal et sont détectés à leur arrivée au drain. La vitesse de dérive des électrons est obtenue par des mesures différentielles en éclairant en deux points différents le long du canal.

Les auteurs ont tracé l'évolution de la mobilité ohmique et de la vitesse de dérive en fonction du champ de surface. En extrapolant les courbes expérimentales par une relation vitesse-champ phénoménologique, ils montrent que la vitesse de saturation des porteurs est voisine de celle des porteurs en volume et ne dépend pas du champ de surface.

I.5 METHODES ET RESULTATS EXPERIMENTAUX DE GAMBOA ET AL 17

---

Ces auteurs ont proposé une méthode de détermination du mode d'évolution de la vitesse limite  $v_{sat}$  des porteurs avec la température dans une couche d'inversion d'un transistor MOS à canal court. Cette méthode est basée sur l'analyse de l'admittance de sortie du transistor et sur la contre réaction électrique-thermique apparaissant essentiellement en basses fréquences.

P.ROSSEL et Al. [18] ont montré que la partie imaginaire de l'admittance de sortie  $Y(\omega)$  d'un transistor MOS à canal court pouvait se mettre sous la forme :

$$\text{Im} [ Y(\omega) ] = \text{Im} [ Z_{th}(\omega) ] I_D \frac{\partial I_D}{\partial T}$$

où  $I_D$  représente le courant de drain,  $T$  la température du cristal de silicium,  $Z_{th}(\omega)$  l'impédance thermique de l'ensemble transistor-boitier et  $\omega$  la pulsation du signal.

Lorsqu'il s'agit d'un transistor MOS, il est possible de définir approximativement le courant  $I_D$  par :

$$I_D = W \cdot C_{ox} V_{sat} (V_{GS} - V_C)$$

où  $V_C$  est une tension voisine de la tension de seuil  $V_T$  du transistor ( $V_C - V_T$  diminue quand la longueur du canal diminue) .

A partir des deux relations précédentes, ces auteurs ont montré que la vitesse de saturation pouvait se mettre sous la forme :

$$V_{sat} = V_{sat_0} \exp [ - \beta (T - T_0) ]$$

où

$$\beta = \frac{\alpha}{\text{Im} [Z_{th}(\omega)]}$$

$\alpha$  étant la pente de la droite représentant l'évolution de  $\text{Im} Y(\omega)_{\max}$  en fonction de  $I_D$  ( $I_D - I'_C$ ) ; ( $I'_C$  est défini comme étant le courant qui annule  $\text{Im} [Y(\omega)]_{\max}$ , lorsque  $I_D$  est différent de zéro).

Des mesures ont été effectuées, dans la gamme de température 200°K à 300°K, sur des transistors V-MOS dans le canal, de type N et de longueur 2 $\mu$ m, est orienté <111>.

Il est à noter que cette méthode n'est valable que si la relaxation en basses fréquences est liée aux propriétés de l'impédance thermique et en particulier elle ne peut être appliquée lorsque la relaxation en basses fréquences est due à un phénomène de piégeage de porteurs.

## I.6 COMPARAISON ET ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

En régime ohmique, tous les résultats expérimentaux sont en concordance. Par contre il reste des divergences considérables lorsque les porteurs sont chauds, le désaccord pouvant atteindre un facteur deux pour la vitesse limite.

Les résultats expérimentaux [1] et [2] en champ fort sont obtenus en mesurant un courant électrique dans un transistor MOS en opérant à forte tension drain-source. Cette méthode présente l'inconvénient que le champ longitudinal et le champ transverse peuvent varier le long du canal,

ainsi les vitesses mesurées peuvent présenter certaines ambiguïtés dues à la non uniformité du champ dans le canal.

Afin de remédier à ce problème, COEN et MULLER [4] ont utilisé un transistor MOS à grille résistive. Cependant, ils n'ont pas pu effectuer des mesures au delà d'un champ longitudinal de 17kV/cm. Cette constatation reste valable pour NELSON et COOPER [5] qui, en utilisant la technique de temps de vol, n'ont pas fait de mesures au delà de 30 kV/cm.

## II THEORIES ACTUELLES DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS UNE COUCHE D'INVERSION

Il existe, actuellement, deux analyses théoriques fort différentes en ce qui concerne l'approche du mouvement des porteurs en régime d'inversion : l'une considère un mouvement purement bidimensionnel [3,20,21] , l'autre un mouvement tridimensionnel [6] . Nous envisageons l'examen des deux types de théories dans ce qui suit :

### II.1 THEORIE D'UN GAZ D'ELECTRONS BIDIMENSIONNEL

Si un champ électrique est appliqué perpendiculairement à une structure métal-oxyde-semi-conducteur (MOS); les bandes de conduction et de valence se courbent de telle manière qu'une couche d'inversion ou d'accumulation peut se former. Pour un semi-conducteur de type P, par exemple, il peut y avoir accumulation ou inversion selon le signe de polarisation du métal par rapport au semi-conducteur . ( figure 2 )

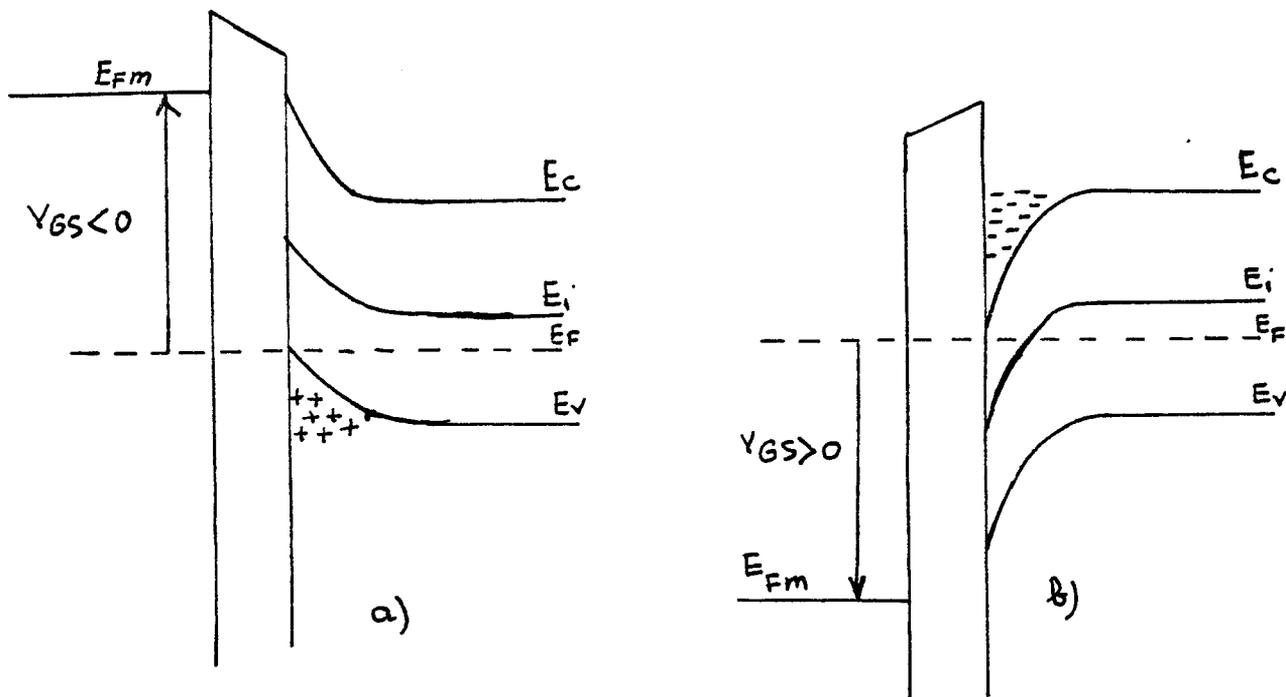


figure 2 Diagramme de bandes d'énergie d'une structure MOS

a) Accumulation

b) Inversion

Lorsque les bandes sont fortement inclinées, le puits de potentiel formé par la barrière de potentiel de l'interface et le potentiel électrostatique, peut devenir suffisamment étroit pour que les effets des mécanismes quantiques soient importants [20,21,25]. Ces effets empêchent le mouvement des électrons dans la direction perpendiculaire à la surface et conduisent à la formation de niveaux d'énergie discrets pour les électrons.

Ces niveaux d'énergie discrets sont groupés en sous bandes. Les électrons constituent alors un système à deux dimensions et sont confinés dans une région de quelques dizaines d'angströms d'épaisseur.

Le transport des électrons à l'intérieur des couches d'inversion est contrôlé principalement par les phonons optiques et acoustiques; cependant d'autres mécanismes restent importants tels que l'interaction des charges d'oxyde et l'influence de la rugosité de surface.

### II.1.1 Formulation générale

Le mouvement des électrons dans la couche d'inversion avec un potentiel  $V(z)$  au voisinage de l'interface semi-conducteur-isolant peut être caractérisé par une fonction enveloppe de la forme [25] :

$$\Psi(x, y, z) = \varphi_i(y) e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (1)$$

où  $\vec{r}(x, y)$  est un vecteur à deux dimensions dans le plan de l'interface;  $\vec{K}(k_x, k_z)$  est le vecteur d'onde à deux dimensions d'un mouvement parallèle à l'interface;  $\vec{z}$  est un vecteur perpendiculaire à l'interface et  $z$  est la distance à partir de l'interface vers le semi-conducteur.

La fonction d'onde  $\xi_i(y)$  doit satisfaire l'équation de SCHROEDINGER à une dimension :

$$\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2 \varphi_i}{dy^2} + \left\{ E_i - V(y) \right\} \varphi_i = 0 \quad (2)$$

et la structure de bande de conduction est donnée par :

$$E = E_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_2} \quad (3)$$

Ainsi les niveaux sont quantifiés selon la direction  $O\vec{y}$ . Cette propriété a été mise en évidence expérimentalement par A.B.FOWLER et al. [23,24] par des mesures de magnéto-conductance. Les masses effectives  $m_j$  dépendent de la structure de bande du volume et de l'orientation de la surface. Chaque valeur  $E_i$  de l'équation (2) définit le fond de la bande des niveaux de conduction décrit dans l'équation (3) et, est appelée sous bande. Ces sous bandes

peuvent être groupées en deux répartitions. La première, notée par 0,1,2,... dans la notation de STERN [26], est formée des sous bandes qui proviennent des vallées pour lesquelles la plus grande masse effective est  $m_3$  pour le mouvement perpendiculaire à l'interface. La deuxième répartition, notée 0',1',2' ..... est formée des sous bandes qui proviennent des vallées pour lesquelles  $m_3$  est la plus petite masse effective. Les surfaces S(100) et S(110) du silicium ont deux répartitions alors que la surface S(111) ne présente qu'une seule répartition.

La fonction  $\xi_i(y)$  doit aussi satisfaire les conditions aux limites suivantes :

$$\xi_i(y=0) = 0 \quad (\text{on suppose que la barrière semi-conducteur isolant est infinie})$$

$$\xi_i(y=\infty) = 0$$

Le potentiel électrostatique  $V(y)$  est donné par résolution de l'équation de POISSON :

$$\frac{d^2V}{dy^2} = - \left[ \rho_{\text{depl}}(y) - e \sum_i N_i \xi_i^2(y) \right] \frac{1}{\epsilon_{sc} \epsilon_0} \quad (4)$$

$$\text{ou } \rho_{\text{depl}}(y) = -e(N_A - N_D) \quad \text{si } 0 < y < y_d$$

$$\text{et } \rho_{\text{depl}}(y) = 0 \quad \text{si } y > y_d \quad \text{avec } y_d = \left[ \frac{2\epsilon_{sc}\epsilon_0\Phi_d}{e(N_A - N_D)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$\phi_d$  étant la différence de potentiel entre le volume et la surface.

$N_A$  étant la densité des impuretés accepteurs

$N_D$  étant la densité des impuretés donneurs

$y_d$  étant la largeur de la zone désertée

$N_i$  étant la concentration des porteurs dans la  $i^{\text{ème}}$  sous bande donnée par :

$$N_i = \frac{n_{vi} m_{di} K_b T}{\pi \hbar^2} \lg \left( 1 + e^{\frac{E_F - E_i}{K_b T}} \right)$$

$n_{vi}$  est le facteur de dégénérescence

$m_{di}$  est la masse effective de densité d'état.

## II.1.2 Solutions approximatives

### II.1.2.1 Potentiel triangulaire

Le potentiel électrostatique est alors défini par :

$$V(y) = e \cdot E_s \cdot y \quad y > 0$$

$$V(y) = \infty \quad y < 0$$

où  $E_s$  est la champ électrique de surface dans la couche d'inversion. Le profil du puits de potentiel est alors approximé par une droite, ce qui permet une résolution semi-analytique de l'équation de SCHROEDINGER qui conduit à des solutions de la forme [26]

$$\varphi_i(y) = A_i \left\{ \left( 2 m_3 e E_s / \hbar^2 \right)^{\frac{1}{3}} \left( y - \frac{E_i}{e E_s} \right) \right\}$$

$$E_i \approx \left( \frac{\hbar^2}{2m_3} \right)^{1/3} \left\{ \frac{3}{2} \pi e E_s \left( i + \frac{3}{4} \right) \right\}^{2/3}$$

où les  $A_i$  sont les fonctions d'Airy.

La position de la  $i^{\text{ème}}$  sous bande, selon la direction  $O\vec{y}$ , est donnée par :

$$y_i = \frac{\int_0^\infty y \cdot \varphi_i(y) dy}{\int_0^\infty \varphi_i^2(y) dy} \approx \frac{2}{3} \cdot \frac{E_i}{e E_s}$$

Cette approximation est valable dans le cas où il n'y a pas de charges ( ou très peu ) dans la couche d'inversion; elle n'est plus valable quand la densité de charge dans cette couche d'inversion est du même ordre ou plus grande que celle de la zone désertée. Dans ce cas, on utilise un calcul variationnel.

#### II.1.2.2 Calcul variationnel

On se place dans le cas où une seule sous bande est occupée. FANG et HOWARD [27] utilisent l'approximation de la fonction d'onde suivante :

$$\varphi(y) = \left( \frac{b^3}{2} \right)^{1/2} \cdot y \cdot e^{-\frac{by}{2}} \quad (5)$$

où  $b$  est le seul paramètre à déterminer. L'énergie potentielle d'un électron dont la fonction d'onde est donnée par l'équation (5), est obtenue en utilisant l'équation de POISSON (4) :

$$E_{\text{pot}} = \frac{3e^2}{b \epsilon_{\text{sc}}} \left[ N_{\text{depl}} + \frac{11}{16} N_s - \frac{2}{b} (N_A - N_D) \right]$$

$N_{\text{depl}}$  et  $N_{\text{inv}}$  sont respectivement les densités de charges fixes dans la zone désertée et de charge mobile dans la couche d'inversion.

On peut montrer que le dernier terme de l'énergie potentielle est négligeable car, en général, l'épaisseur de la couche d'inversion est très petite par rapport à celle de zone désertée. Dans ce cas, on peut montrer que l'énergie totale de l'électron est minimale pour :

$$b = \left[ 12 m_3 e^2 \left( N_{\text{depl}} + \frac{11}{32} N_s \right) / \epsilon_{\text{sc}} \hbar^2 \right]^{1/3}$$

et le fond de la sous bande du puits de potentiel de surface est donné par :

$$E_0 = \left( \frac{3}{2} \right)^{5/3} \left( \frac{e^2 \hbar}{\epsilon_{\text{sc}}} \right)^{2/3} \frac{N_{\text{depl}} + \frac{55}{96} N_s}{\left\{ m_3 \left( N_{\text{depl}} + \frac{11}{32} N_s \right) \right\}^{1/3}}$$

### II.1.3 Quelques résultats utilisant l'approximation triangulaire

Pour une couche d'inversion, le résultat dépend de l'orientation de la surface, de la concentration des impuretés, de la concentration des électrons par unité de surface et de la température.

Quelques résultats représentatifs sont donnés pour le silicium et une orientation de surface (100). La figure 3 représente l'énergie

potentielle des électrons en fonction de la distance ( l'interface étant prise comme origine ), à une température  $T = 150^\circ\text{K}$ , une concentration en impureté  $N_A = 1.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , une concentration en électrons  $N_S = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

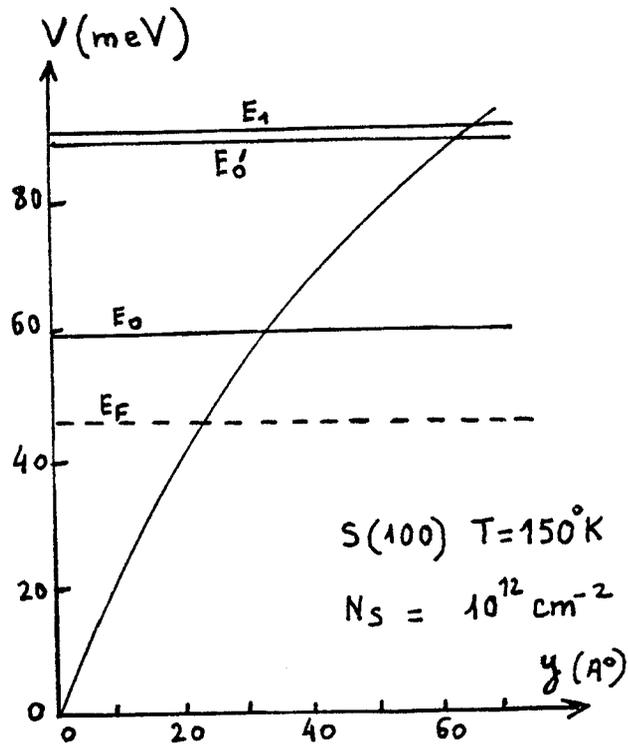


Figure 3 Energie potentielle dans une couche d'inversion en fonction de la distance à l'interface.

La figure 4 représente l'évolution des niveaux d'énergie des diverses sous bandes en fonction de la température pour un dopage  $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et une densité d'électrons  $N_S = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

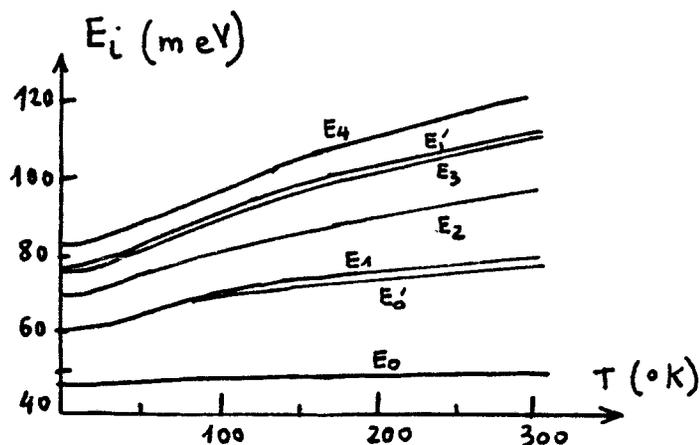


Figure 4 Evolution des niveaux d'énergie des sous bandes en fonction de la température



L'indice ' est relatif aux sous bandes correspondant aux vallées dont les masses effectives selon la direction parallèle à la surface sont légères, les autres sous bandes correspondent aux vallées dont les masses effectives, selon la direction  $Oy$ , sont lourdes.

## II.2 THEORIE CLASSIQUE

Dans cette seconde analyse, on suppose que le mouvement des porteurs est tridimensionnel, au voisinage de la surface du semi-conducteur. Les premiers calculs de mobilité ont été effectués par SCHIEFFER [6] et développés ensuite par GREENE et al [7]. On utilise une représentation en mécanique classique avec une structure de bande incurvée, ainsi qu'il est représenté sur la figure 5 et qui peut être caractérisée par un potentiel normalisé :

$$\mu(y) = \frac{E_i(0) - E_i(y)}{K_b T}$$

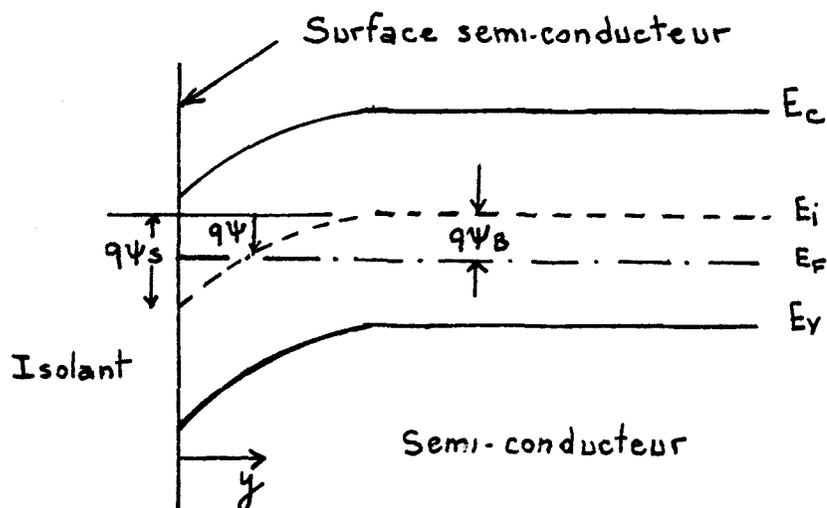


Figure 5 Diagramme des bandes d'énergie à la surface d'un semi-conducteur type P.

Le potentiel à la surface est défini par :

$$\mu_s = \mu (y = 0)$$

et le potentiel dans le matériau par :

$$\mu_f = \frac{E_i (\text{bulk}) - E_F}{K_b T}$$

Le semi-conducteur, avec sa structure de bande incurvée, est considéré comme un système à l'équilibre. Ce système est alors perturbé par un champ électrique faible parallèle à la surface. La grandeur physique à calculer est le courant circulant parallèlement à la surface, grandeur à partir de laquelle on obtient la mobilité effective.

Le point de départ est l'équation de BOLTZMANN classique avec les hypothèses suivantes :

- 1) le semi-conducteur est non dégénéré
- 2) la masse effective est isotrope et indépendante de l'énergie
- 3) le temps de relaxation est constant
- 4) le champ électrique de dérive est faible ( régime ohmique )

L'équation de BOLTZMANN s'écrit :

$$\vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

où  $\vec{v}$  et  $\vec{a}$  sont la vitesse et l'accélération du porteur,  $\tau$  le temps de relaxation et

$$f = f_0 + f_1$$

où  $f_0$  représente la distribution d'équilibre des électrons en absence de champ électrique de dérive et, est donnée par l'expression :

$$f_0 = \left[ n \left( \frac{m^*}{2\pi k_B T} \right) e^{-U_F} \right] e^{-\frac{m^*}{2k_B T} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}$$

dans laquelle  $n$  est la densité de porteurs.  $f_1$  représente la perturbation apportée à la fonction de distribution par la présence du champ électrique. En général, en champ électrique de dérive faible, c'est à dire en régime ohmique :

$$f_1 \ll f_0$$

En considérant un champ de dérive  $E_x$  parallèle à la surface et un champ de surface  $E_y$  perpendiculaire à la surface, si l'on néglige les termes du type  $E_x \frac{\partial f_1}{\partial x}$ , l'équation de BOLTZMANN peut s'écrire :

$$v_y \frac{\partial f_1}{\partial y} - \frac{q}{m^*} E_y \frac{\partial f_1}{\partial v_y} + \frac{f_1}{\tau} = - \frac{q}{k_B T} f_0 v_x E_x$$

Différentes conditions peuvent être imposées pour le terme de perturbation  $f_1$  au niveau de la surface ( $y=0$ ) selon le type de collisions auquel on s'intéresse :

- Pour une collision diffuse, on obtient une redistribution aléatoire des états du porteur après le choc, donc  $f_1(y=0, v_y < 0) = 0$
- Pour une collision spéculaire, on a seulement le changement de signe de la composante de vitesse perpendiculaire à la surface, d'où :

$$f_1(y=0, v_y) = f_1(y=0, -v_y)$$

- Pour une collision partiellement diffuse:

$$f_1(y=0, v_y) = P f_1(y=0, -v_y)$$

P représente la probabilité d'une collision spéculaire du vecteur vitesse du porteur. Si toutes les collisions sont parfaitement diffuses alors  $P = 0$  et on est ramené au cas précédent .

### II.3 CONCLUSION

Au niveau du composant, il est nécessaire de déterminer les caractéristiques dynamiques des porteurs en tenant compte à la fois de toutes les interactions possibles que subissent les porteurs.

En se déplaçant dans un canal, dont l'épaisseur est de l'ordre de  $100 \text{ \AA}$ , les porteurs sont en interactions avec la barrière de potentiel de l'interface, les charges d'oxyde, les états de surface et les phonons. De plus, ils sont soumis à l'action des deux composantes longitudinales et transversales du champ électrique. L'étude analytique, tenant compte de l'épaisseur du canal et de toutes les interactions, n'est pas très aisée sans recourir à des hypothèses simplificatrices. Ceci explique le relatif insuccès des études analytiques effectuées sur les phénomènes de transport intervenant au voisinage d'une surface ou dans les couches d'inversion.

La méthode de simulation de type Monte Carlo est particulièrement bien adaptée pour résoudre ce type de problème, car elle permet de décrire le comportement microscopique des porteurs se déplaçant dans une couche d'inversion, en tenant compte de l'ensemble de leurs interactions.

Nous allons maintenant décrire, d'une part la méthode de Monte Carlo et d'autre part les procédures numériques permettant de tenir compte des conditions aux limites sur la surface et l'effet de la charge d'espace.

### III UTILISATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO

Après avoir rappelé le principe de la méthode de Monte Carlo pour l'étude des propriétés électroniques d'un matériau semi-conducteur en volume, nous verrons comment étendre cette méthode à l'étude des effets de surface et au composant.

#### III.1 RAPPELS GENERAUX SUR LA METHODE DE MONTE CARLO

La résolution analytique de l'équation de BOLTZMANN est très complexe dans le cas général. Pour obtenir une solution analytique simple, il est nécessaire de faire des hypothèses simplificatrices en particulier sur le terme relatif aux interactions. C'est pourquoi on lui substitue de plus en plus des méthodes de simulations numériques utilisant, en particulier, les techniques de Monte Carlo.

Le principe de la méthode consiste à suivre le mouvement stochastique du point représentatif d'un porteur dans l'espace  $\vec{K}$  des vecteurs d'onde en tenant compte à chaque instant de l'effet déterministe du champ électrique et également de l'effet des différents mécanismes d'interactions électron-réseau cristallin avec leurs probabilités respectives.

Connaissant la position dans l'espace  $\vec{K}$  et la structure de bande  $\varepsilon(\vec{K})$  du matériau semi-conducteur, on peut déterminer à chaque instant, la vitesse du porteur par la relation :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{K}}$$

puis, par intégration, la position dans l'espace géométrique

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}(t') dt'$$

Ce principe est schématisé sur la figure 6.

Puisque, à tout instant, l'énergie et la vitesse sont connues, les valeurs moyennes  $\langle \varepsilon \rangle$  et  $\langle v \rangle$  peuvent être obtenues :

- i) soit par une moyenne d'ensemble en étudiant le mouvement d'un grand nombre de points représentatifs
- ii) soit par une moyenne temporelle, en étudiant le mouvement d'un point représentatif sur une grande durée d'observation.

La méthode que nous utiliserons dans ce mémoire, est basée sur une discrétisation régulière du temps en pas de durée  $\delta t$  choisie de façon convenable. C'est en cela qu'elle diffère de la méthode classique utilisée par FAWCETT [29]. Cette méthode a été présentée en détail par A.KASZYNSKI [9] et J.ZIMMERMANN [8] et c'est la raison pour laquelle nous n'insisterons pas sur sa présentation.

### III.2 APPLICATION A L'ETUDE DE COMPOSANTS

La méthode utilisée opère à l'échelle de la particule qui peut être soumise à un champ électrique quelconque variant aussi bien dans

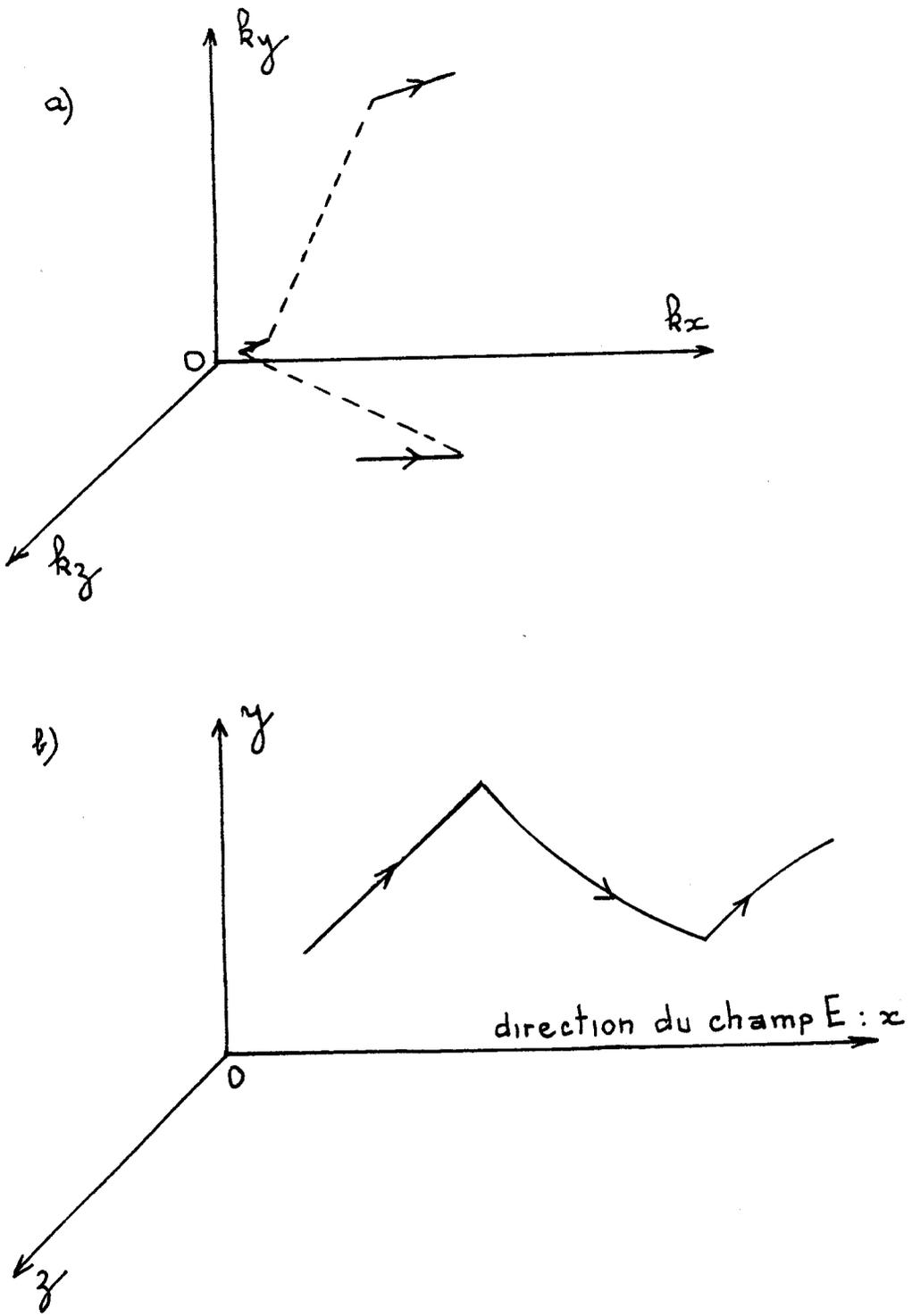


Figure 6 Evolution du porteur simulé  
a) dans l'espace  $\vec{K}$   
b) dans l'espace géométrique



l'espace que dans le temps. Il est donc tout à fait possible de l'appliquer à la simulation de composants [8,30]. Les équations de continuité (résultant du fait que, dans toute région les charges ne peuvent ni se créer, ni disparaître spontanément) sont prises en compte automatiquement. Il en résulte que pour simuler la dynamique électronique dans un composant il suffit de déterminer le champ électrique agissant sur les porteurs en tout point de la structure. Pour cela, connaissant, à chaque instant la position des différents porteurs simulés, on peut en déduire la densité volumique de charge en tout point de la structure et, par la suite, déterminer la carte de champ électrique dans le composant par résolution de l'équation de POISSON.

Bien entendu, il est nécessaire de tenir compte de l'aspect limité du composant, et en particulier de définir les conditions imposées au porteur lorsqu'il est situé au voisinage d'une des limites de la structure. Il faudra également tenir compte des conditions aux limites nécessaires à la résolution de l'équation de POISSON.

La mise en oeuvre de cette méthode, aussi bien pour l'étude des effets de volume, que pour l'étude des composants, nécessite la connaissance de la structure de bande du matériau et des diverses interactions électrons-réseau cristallin auxquels sont soumis les porteurs et c'est ce que nous allons maintenant présenter.

### III.3 RAPPEL DE LA STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION DU SILICIUM

La bande de conduction du silicium est formée de six ellipsoïdes ou vallées dont les minimums indirects relatifs sont à 1.12 eV au dessus de la bande de valence. Les centres des vallées sont situés dans les

six directions  $\langle 100 \rangle$  à  $K_m = 0,85 K_0$  du centre de la zone de BRILLOUIN, chacun des axes  $\langle 100 \rangle$  formant l'axe de révolution de chacun des ellipsoïdes [15]. Dans l'hypothèse où ces vallées sont également non paraboliques, on aura pour la vallée centrée en  $(0,85; 0; 0)$  :

$$\varepsilon (1 + \alpha \varepsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(K_x - K_m)^2}{m_l} + \frac{K_y^2 + K_z^2}{m_t} \right]$$

tenant compte des masses effectives longitudinales et transversales. Il y a cinq autres relations du même type pour les cinq autres vallées, que l'on obtient par permutation sur  $K_x, K_y, K_z$ .

Parmi les modèles décrivant les mécanismes de collisions nous avons choisi celui présenté par CANALI et al. [16] dont la validité a été testée dans notre laboratoire [8]. Etabli initialement dans l'hypothèse de bandes d'énergie paraboliques, ce modèle comporte six transitions différentes (trois étant du type f et trois étant du type g) et tient compte des collisions acoustiques.

Dans le tableau 1 sont résumés les paramètres et les différentes températures  $T$  de phonon ainsi que les amplitudes des potentiels de déformation  $W$  associés. Le module du potentiel de déformation acoustique  $E_1$  a été pris égal à 9eV comme dans le modèle de CANALI [16].

	$\theta_{f1}$	$\theta_{f2}$	$\theta_{f3}$	$\theta_{g1}$	$\theta_{g2}$	$\theta_{g3}$
$T(^{\circ}K)$	210	500	630	140	210	700
$W$ (eV/cm)	$1,5 \cdot 10^7$	$3,4 \cdot 10^8$	$4 \cdot 10^8$	$5 \cdot 10^7$	$8 \cdot 10^7$	$3 \cdot 10^8$

Tableau 1

#### IV APPLICATION DE LA METHODE A L'ETUDE DES EFFETS DE SURFACE : TRANSPORT DANS UN FILM

Des porteurs se déplaçant au voisinage d'une surface subissent, en plus des interactions propres au volume, l'influence des conditions aux limites dues à la surface. Ces nouvelles interactions peuvent devenir importantes quand les porteurs se déplacent très près de la surface. Toutefois il est entendu que dans ce travail, les porteurs que l'on considère, sont trop peu énergétiques pour vaincre le travail de sortie du matériau dans lequel ils se déplacent. Dans leur mouvement, les porteurs sont réfléchis à l'intérieur du volume du semi-conducteur en subissant de temps à autre des collisions avec la surface qui tendent à redistribuer aléatoirement leur vitesse. En principe leur mobilité se trouve réduite à des valeurs plus petites que celles des porteurs en volume.

Les premiers calculs de mobilité de surface dans les semi-conducteurs sont dus à SCHRIEFFER [6] qui a développé le traitement de FUCHS [10] et de SONDHEIMER [11] sur les films métalliques. Il a introduit dans son traitement l'effet de la barrière de potentiel pouvant exister à la surface. Ceci correspond au cas des couches d'inversion ou d'accumulation pour un semi-conducteur non dégénéré pour lequel on admet :

- une bande d'énergie sphérique
- un temps de relaxation constant

Au cours de cette partie nous admettons que les bandes de conduction du matériau restent identiques à celles du matériau en volume

malgré la rupture géométrique et électrostatique que représente l'existence de la surface. Par contre, dans le dernier chapitre de la deuxième partie du mémoire, nous examinons les effets propres liés, entre autres, à la modification des bandes d'énergie au voisinage de la surface ou de l'interface.

#### IV.1 GENERALITES SUR L'EFFET DE SURFACE

Historiquement, un premier modèle a été présenté par FUCHS [10]. Il décrit le mécanisme de collision des porteurs sur la surface de manière quantitative en envisageant deux cas limites : collision spéculaire et collision diffuse.

i) La collision est spéculaire : la surface se comporte comme un miroir parfait vis à vis des vecteurs vitesses des porteurs. La collision, considérée comme élastique, provoque uniquement le changement de signe de la composante de vitesse perpendiculaire à la surface, les composantes parallèles à la surface restent les mêmes. Ce qui se traduit par la condition aux limites aux surfaces du film :

$$f_1(v_y) = f_1(-v_y)$$

$v_y$  composante de la vitesse selon la direction perpendiculaire à la surface.

et, dans ces conditions, il n'est pas évident que la mobilité des porteurs soit réduite.

ii) La collision est diffuse : au moment de la collision, considérée comme élastique, le vecteur vitesse du porteur est réfléchi à l'intérieur du volume du semi-conducteur de façon aléatoire. Ce type de collision

implique une isotropie de la distribution de vitesses des porteurs après interaction avec la surface car l'orientation de la vitesse du porteur après collision est totalement indépendante de ce qu'elle était avant collision. Ce qui au niveau des surfaces se traduit par :

$$f_1(v_y) = 0$$

Il est clair que ce type de collision conduit à une réduction de mobilité des porteurs.

FUCHS décrit le comportement des porteurs à la surface comme intermédiaire entre les deux cas limites .

$$f_1(v_y) = (1 - P_0) f_1(-v_y) \quad \text{où} \quad 0 < P_0 < 1$$

Le cas  $P_0 = 0$  correspond à une collision spéculaire, alors que le cas  $P_0 = 1$  correspond à une collision diffuse. Dans la théorie de FUCHS,  $P_0$  est un paramètre ajustable choisi de telle sorte qu'il y ait le meilleur accord possible entre la théorie et l'expérience.

Le second modèle plus réaliste, proposé par PARROTT [4], est basé sur l'idée suivante :

L'éventualité qu'une collision avec la surface soit spéculaire ou diffuse dépend de la façon dont se présente la vitesse du porteur par rapport à la surface. Un porteur dont la trajectoire arrive à la surface avec une incidence rasante, est probablement réfléchi d'une façon spéculaire. Par contre, un porteur arrivant avec une incidence très voisine de la normale est vraisemblablement réfléchi de façon diffuse. Compte tenu de ceci, PARROTT a

proposé, pour améliorer le modèle de FUCHS, le modèle suivant :

- La collision de surface est parfaitement spéculaire si la condition :

$$\cos \theta_1 < P_S$$

est satisfaite  $\theta_1$  est l'angle du vecteur d'onde du porteur avec la normale à la surface. Le paramètre  $P_S$  dans ce cas est la probabilité d'une réflexion spéculaire quand la distribution de l'angle d'incidence est parfaitement isotrope. Nous étudions le paramètre  $P_S$  dans le chapitre II, partie 2.

- Si cette condition n'est pas remplie, la collision de surface est parfaitement diffuse.

Remarquons que, pour  $P_S = 0$  ou  $P_S = 1$ , les deux modèles sont équivalents. Il en résulte, dans ces deux cas, que PARROTT et FUCHS trouvent les mêmes résultats. Par contre, pour les valeurs de  $P_S$  telles que :  $0 < P_S < 1$  les résultats sont fort différents, surtout quand le champ électrique transversal est élevé [28] :

Les valeurs de la vitesse dérive obtenues par le modèle de PARROTT sont plus élevées que données par celui de FUCHS dans les mêmes conditions.

Afin de calculer la mobilité de surface dans le cas d'un film l'équation de BOLTZMANN a été résolue en considérant une structure de bande d'énergie sphérique, un temps de relaxation constant et une collision de surface supposée diffuse [12] .

Le même résultat a été obtenu par A.MANY et al [14] , par un autre approche très simple :

Ces auteurs considèrent que :

- le potentiel de surface est nul
- les deux processus de collisions de collision de surface et de volume sont indépendants
- l'effet de surface est caractérisé par un temps de relaxation  $\tau_S$  défini par :

$$\tau_s = \frac{d}{\bar{v}_y}$$

où  $\bar{v}_y$  représente la composante de la vitesse selon  $\vec{o}_y$  dont l'expression est :

$$\bar{v}_y = \frac{\lambda}{\tau_B} \quad \text{avec} \quad \lambda = \mu_B \left( \frac{m^* k_B T}{2\pi q^2} \right)^{1/2}$$

$\lambda$  étant le libre parcours moyen unilatéral

$\tau_B$  étant le temps de relaxation du volume

$\mu_B$  étant la mobilité en volume

$m^*$  étant la masse effective

Ils montrent alors que la mobilité  $\mu$  des porteurs dans un film peut se mettre sous la forme :

$$\mu = \frac{\mu_B}{1 + \lambda/d} \quad (6)$$

En principe, l'interaction avec la surface n'est pas complètement diffuse, en particulier quand les porteurs se trouvent confinés dans un puits de potentiel. Dans ce cas, l'aspect spéculaire de la collision doit également être considéré, néanmoins il ne domine jamais les mécanismes d'interaction de surface. Quelles sont les causes physiques qui empêchent les collisions spéculaires à la surface ? Il est raisonnable de supposer que la surface tend à se comporter comme un miroir parfait quand la température tend vers 0°K et dans ce cas le mouvement des porteurs ne subit pas de perturbation [13]. Par contre, lorsque la température est élevée, en plus des phonons dans le volume, il apparaît principalement, sur la couche superficielle

des charges fixes ionisées à la surface, appelées charges d'état de surface [14] et un grand nombre de charges localisées dues aux différentes perturbations du champ cristallin par les liaisons de valence libres. Toutes constituent des centres d'interactions et détruisent la nature spéculaire de la collision des porteurs avec la surface.

Une étude analytique des phénomènes de transport n'est pas aisée, surtout lorsqu'il s'agit de porteurs d'une couche d'inversion qui se déplacent dans un canal sous l'influence simultanée du champ longitudinal de dérive et du champ transversal nécessaire à créer l'inversion, par contre, la méthode de Monte Carlo ne présente aucune difficulté à être mise en oeuvre quand le type de collision avec la surface est connu.

C'est cette méthode que nous utiliserons dans la suite de ce chapitre, pour estimer la mobilité moyenne des porteurs dans un film d'épaisseur donnée et étudier ensuite la distribution des vitesses et des énergies selon la profondeur de pénétration dans le semi-conducteur. Enfin, nous nous intéressons à l'influence de la surface sur le phénomène de survitesse quand le semi-conducteur est soumis à un échelon de champ électrique. Les résultats obtenus sont comparés à ceux déduits de la résolution de l'équation de BOLTZMANN effectuée dans les mêmes conditions [12] .

#### IV.2 MISE EN OEUVRE DE LA METHODE DE MONTE CARLO POUR L'ETUDE DES EFFETS DE SURFACE - TRANSPORT DANS UN FILM

Nous considérons un film d'épaisseur  $2d$ , représenté sur la figure 7, constitué par du silicium-N. Les faces du film sont supposées

parfaites, ont une direction ( 010 ) et un potentiel nul ( bandes plates ). Nous supposons que le champ électrique  $\vec{E}$  auquel sont soumis les électrons est appliqué parallèlement aux faces du film selon la direction  $\langle 100 \rangle$  repérée par  $\vec{o}_x$ . Le champ  $\vec{E}$  qui est le seul à être appliqué dans ce cas est supposé homogène dans tout le film. La direction  $\vec{o}_y$  est perpendiculaire aux faces du film et nous considérerons que les bandes de conduction ne subissent aucune modification au niveau des deux faces qui sont à un potentiel nul. De plus, le film et le champ électrique sont supposés parfaitement homogènes suivant la direction  $\vec{o}_z$  perpendiculaire à  $\vec{o}_x$  et  $\vec{o}_y$ .

Dans le cas du silicium - N, nous avons vu que la structure de bande de conduction se présente sous la forme :

$$\mathcal{E} ( 1 + \alpha \mathcal{E} ) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right)$$

Il faut remarquer que les bandes décrites ainsi ne sont pas sphériques. Néanmoins, il est facile de traiter les collisions de surface dans les deux cas extrêmes et dans les conditions citées précédemment puisque cette expression algébrique ne contient que des termes quadratiques  $K_x$ ,  $K_y$ ,  $K_z$  (  $K_x, K_y, K_z$  étant le repère lié à la surface ). Nous verrons par la suite qu'il n'est pas ainsi pour une orientation de surface  $S(111)$ . Le champ électrique de dérive  $E$  est le seul à être appliqué dans le cas présent. Pour mettre en oeuvre la simulation, nous divisons le film en tranches d'égale épaisseur  $\Delta y$  parallèles aux faces du film ( figure 7 )

Ainsi il est possible de connaître à chaque pas sur le temps le nombre de porteurs dans chacune des tranches  $\Delta y$ , leur vitesse et leur énergie, dont nous déduisons les valeurs moyennes de la vitesse de dérive et de l'énergie en fonction de la position des porteurs dans le film. Loin des deux faces, les porteurs sont soumis aux interactions de volume [8]. Lorsqu'un porteur atteint l'une ou l'autre des deux faces on suppose qu'il est réfléchi de façon spéculaire ou diffuse (voir annexe 1) vers l'intérieur du film.

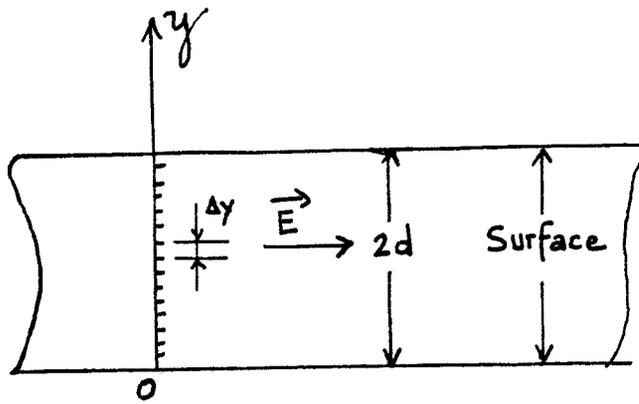


Figure 7 Principe de modélisation

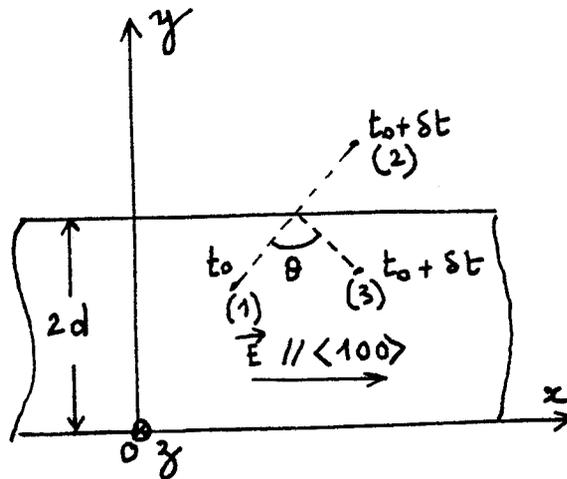


Figure 8 Principe de modélisation de la collision de surface

Supposons qu'à un instant  $t_0$ , le porteur atteigne la position (1) et qu'à l'instant  $t_0 + \delta t$ , librement entraîné par le champ appliqué  $\vec{E}$ , il soit parvenu à une position extérieure au film ( position (2) ), autrement dit, entre  $t_0$  et  $t_0 + \delta t$  la surface a été traversée. En réalité le porteur a été réfléchi par celle-ci entre  $t_0$  et  $t_0 + \delta t$  et se trouve en fait à la position (3). Nous rappelons que la collision subie par le porteur est supposée élastique, et qu'à l'instant où a lieu la réflexion, la vitesse instantanée du porteur a été réfléchi à l'intérieur du film de telle sorte que sa trajectoire a tourné d'un angle  $\theta$  qui dépend du type de collision considérée : spéculaire ou diffuse.

### IV.3 RESULTATS

#### a) Régime stationnaire

Dans le cas présent, nous considérons uniquement l'aspect diffus de la collision de surface. Nous avons donné les raisons physiques qui justifient cette hypothèse, cependant nous la vérifierons dans le deuxième chapitre de la deuxième partie de ce mémoire.

Nous présentons sur la figure 9, la mobilité réduite à 300°K, en fonction de  $\lambda/d$  ( $\lambda$  étant le libre parcours moyen latéral, dans un film d'épaisseur  $2d$ ) calculée par l'équation (6) ainsi que les résultats obtenus par notre simulation Monte Carlo. Notons le bon accord existant entre les résultats fournis par chacune des deux méthodes. De cette figure deux observations peuvent être faites :

- i) L'effet de la réduction de la mobilité moyenne des porteurs n'est appréciable que si l'épaisseur du film est de l'ordre du libre parcours moyen des porteurs.
- ii) Lorsque l'épaisseur du film croît, la mobilité tend vers celle des porteurs en volume. L'interaction de surface se manifeste avec moins d'importance et les porteurs ont un comportement proche de celui qu'ils ont en volume.

Nous avons représenté sur les figures 10 et 11 les évolutions de la vitesse et de l'énergie des porteurs en fonction de la profondeur dans le semi-conducteur. Ainsi, nous pouvons juger en particulier de l'importance relative de la surface selon les différentes positions prises par les porteurs dans le film semi-conducteur. Les porteurs se trouvant à proximité de la surface voient leur mobilité et leur énergie réduite par rapport à celle du volume. Par contre, les porteurs qui se trouvent loin de la surface, voient leur énergie et leur mobilité tendrent vers celles du volume.

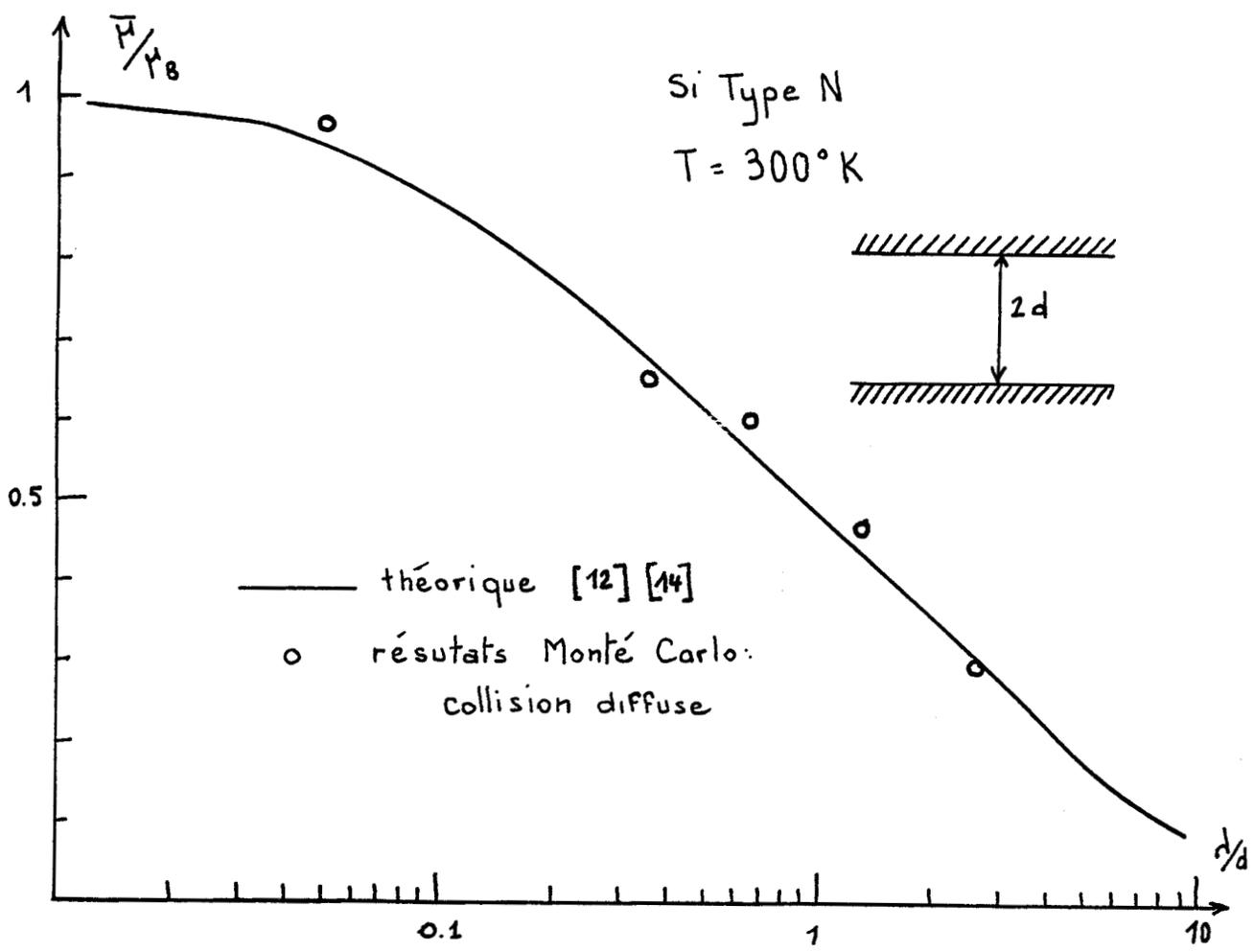


Figure 9 Mobilité ohmique calculée dans le cas des bandes plates



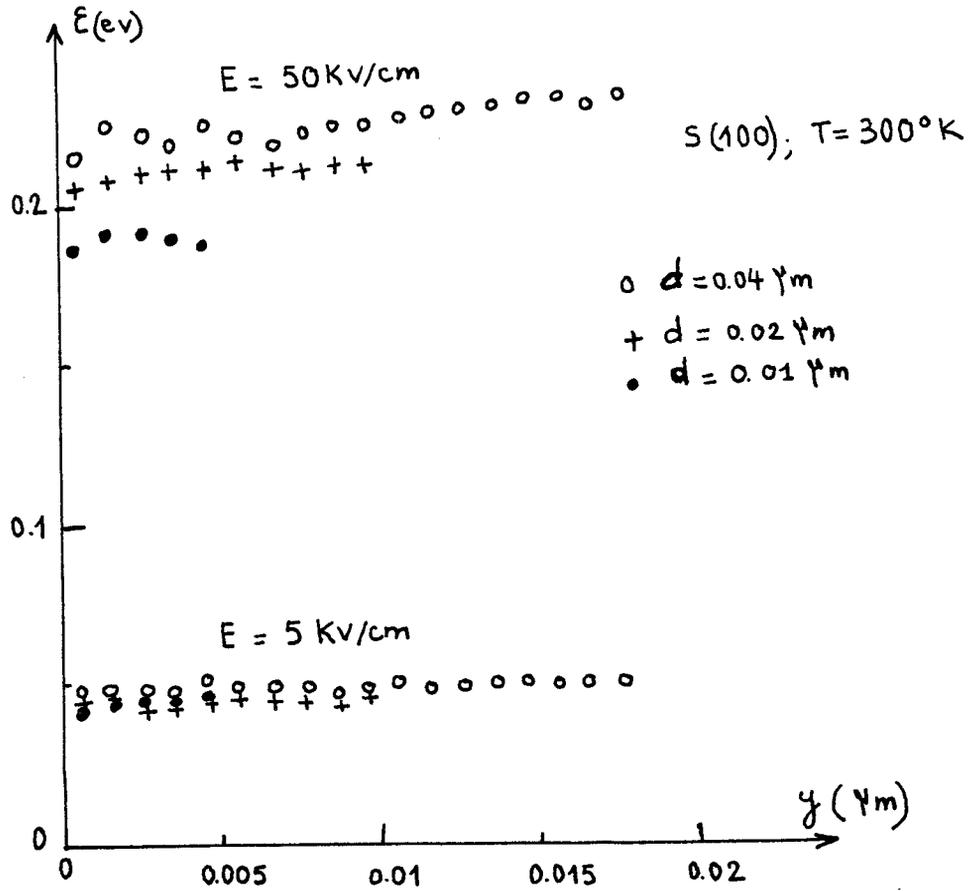


Figure 10 Evolution spatiale de l'énergie moyenne

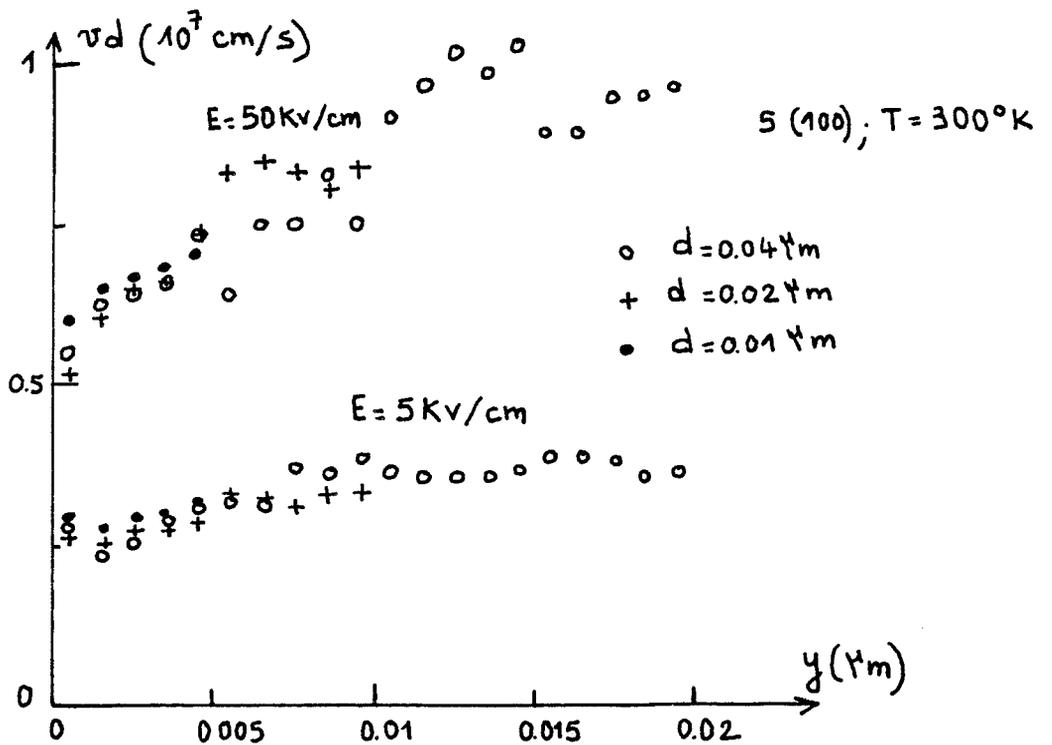


Figure 11 Evolution spatiale de la vitesse moyenne de dérive



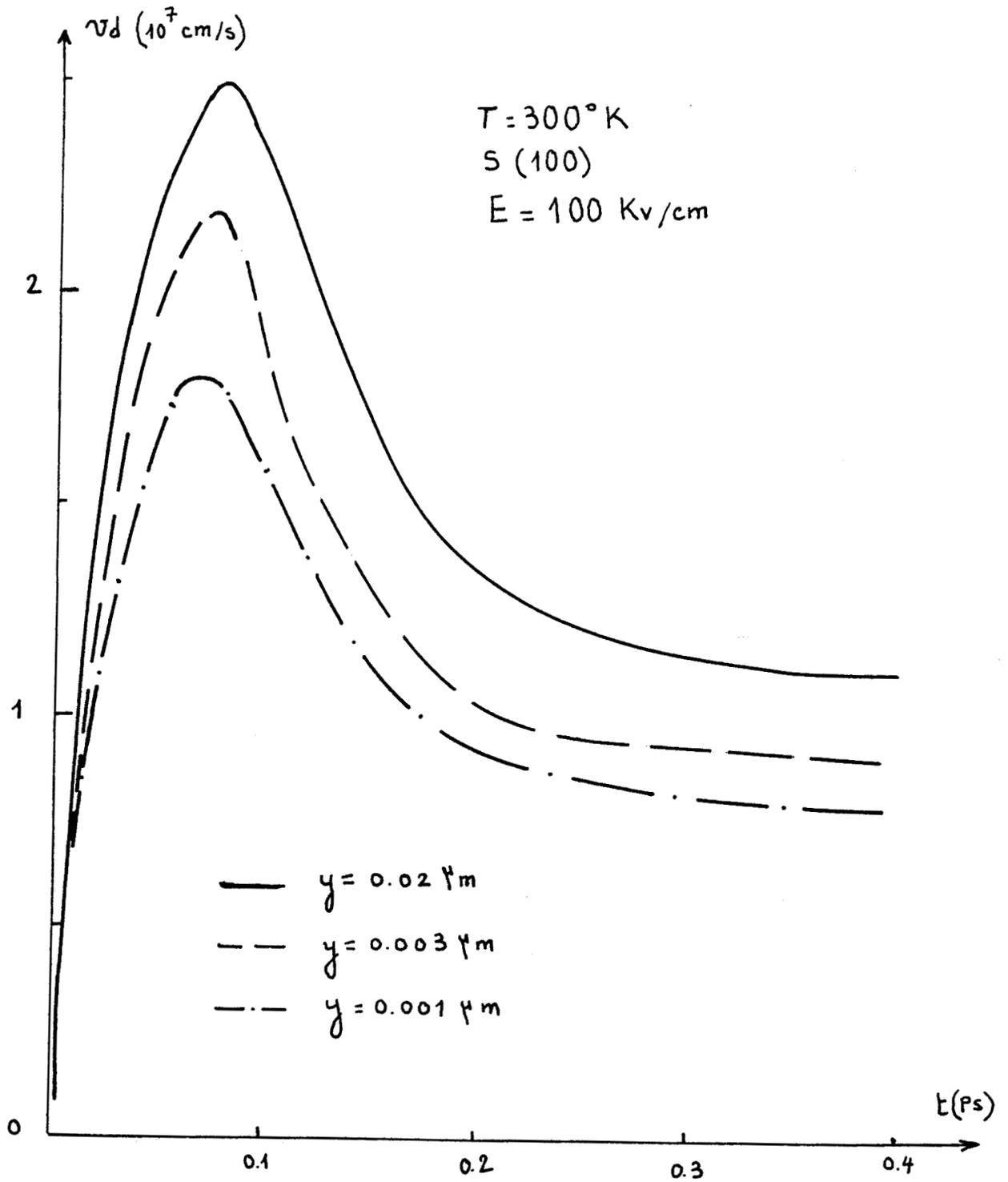


Figure 12 Evolution de l'effet de survitesse avec  $y$ ,  
proximité de la surface



b) Régime non stationnaire

La figure 12 représente l'évolution de la vitesse de dérive des porteurs en fonction de leur éloignement de la surface dans le film quand celui-ci est soumis à un échelon de champ électrique parallèle aux faces du film. Nous constatons, qu'il peut exister un phénomène de survitesse si l'amplitude du champ électrique est suffisamment grande, mais que les valeurs de vitesses de dérive à chaque instant subissent une dégradation d'autant plus marquée que l'on s'intéresse aux porteurs qui se déplacent plus près des surfaces.

## VI CONCLUSION

Nous avons étudié les phénomènes de transport électronique dans un film d'épaisseur donnée à l'aide d'une simulation Monte Carlo à la température ambiante. En ce qui concerne la mobilité moyenne des porteurs en régime stationnaire, nous avons noté le bon accord des résultats Monte Carlo avec ceux obtenus par la résolution de l'équation de BOLTZMANN à champ faible trouvée dans la littérature [12]. Nous nous sommes aussi intéressé à l'évolution spatiale de l'énergie moyenne et de la vitesse moyenne des porteurs. Ainsi nous avons mis, en évidence la réduction de la mobilité des porteurs se déplaçant au voisinage de la surface. Pour les régimes transitoires, nous avons montré les conditions dans lesquelles le phénomène de survitesse des porteurs peut exister et remarquer l'influence de la proximité de la surface.

## BIBLIOGRAPHIE

- 1 F.F.FONG, A.B.FOWLER,  
J.A.P., vol.41, P.1825 ( 1970)
  
- 2 T.SATO, Y.TAKEISHI, H.TANGO, H.OHNUMA and Y.OKAMOTO,  
J.Phys.Soc.Japan, vol.31, p.1846 (1971)
  
- 3 C.T.SAH, T.H.NING and L.L.TSCHOPP,  
Surf.sci., vol.32, P.561 (1972)
  
- 4 R.W.COEN and R.S.MULLER,  
Solid State elect, vol.23, p.35 (1980)
  
- 5 High Field surface drift velocities in silicon by D.F.NELSON and  
J.A.COOPER J.r, Urbana Illinois, Juin 1982
  
- 6 J.R.SCHRIEFFER,  
Phys.Rev.Vol.97, p.641 (1955)
  
- 7 R.GREENE, FRANKL D. and ZEMEL J.,  
Phys.Rev. vol.118, p.967 (1960)
  
- 8 J.ZIMMERMANN,  
Doctorat d'Etat, Lille (1980)
  
- 9 A.KASZYNSKI,  
Thèse de Docteur Ingénieur, Lille (1979)

- 10 K.FUCHS,  
Proc.Cambridge phil.Soc., vol.34, p.100 (1938)
  
- 11 E.H.SONDHEIMER,  
Phys.Rev, vol.80, p.401 (1950)
  
- 12 H.FLIETNER,  
Physica status solidi, vol.1, p.483 ( 1961)
  
- 13 A.MANY, Y.GOLDSTEIN et N.B.GROVER,  
Semi-conducteur surface, North Holland Pub.Amsterdam, p.308 (1965)
  
- 14 A.MANY, Y.GOLDSTEIN et N.B.GROVER,  
Semi-conducteur surface, North Holland Pub.Amsterdam, p.165 (1965)
  
- 15 A.VAPAILLE,  
Physique des dispositifs à semi-conducteur, Tome 1 (1970)
  
- 16 C.CANALI, C.JACOBONI, G.OTTAVIANI, A.ALBERIGI  
Quaranta, Phys.Rev.B, vol.12, p.3318 (1975)
  
- 17 M.GAMBOA, G.SARRABAYROUSE, H.TRANDUC et P.ROSSEL,  
Revue Phys.Appl., vol.15, p.973 (1980)
  
- 18 P.ROSSEL, M.GAMBOA, H.TRANDUC and H.MARTINOT,  
Revue Phys.Appl., vol.14, p.911 (1979)

- 19 G.MERCKEL,  
Rev.Phys.Appl., vol.15, p.879 (1980)
- 20 STERN,F. et HOWARD, W.E.,  
Phys.Rev, vol.163,p.816 (1967)
- 21 STERN,F.,  
Crit.Rev.Solid state sci, vol.4, p.499 (1974)
- 22 voir par exemple, Handbook of Mathematical Functions,ABRAMOWITZ,M.  
and STEGUN, I.A., U.S. Gout.Printing Office, Washington, chap.10 (1964)
- 23 A.B.FOWLER, F.F.FANG, W.E.HOWARD and P.J.STILES,  
Phy,Rev, letters, vol.16,p.901 (1966)
- 24 A.B.FOWLER, F.F.FANG, W.E.HOWARD and P.J.STILES,  
J.Phys.soc Japan Suppl., vol.21,p.331 (1966)
- 25 HESS,K. et SAH,C.T.,  
J.Appl.phy.,vol.45,p.1254 (1974)
- 26 STERN,F.,  
Phys.Rev.B5, vol.5,p.481 (1972)
- 27 FANG,F.F. et HOWARD,W.E.,  
Phys.Rev.lett., vol.16, p.797 (1966)
- 28 R.K.WILLARDSON, ALBERT C. BEER  
Semi-conductors and semimétals,vol.14, Academic Press,p.289 (1979)

29 W.FAWCETT, A.D.ROARDMAN, S.SWAIN,

J.of Phys.and Chemistry of solids, vol.31, p.1963 (1970)

30 M.DEBLOCK,

D.E.A. Lille (1979)

## 2<sup>ÈME</sup> PARTIE : MODELISATION

### CHAPITRE I :

#### MODELE D'UN GAZ D'ELECTRONS A DEUX DIMENSIONS

## INTRODUCTION

Dans une structure MOS, sous l'influence d'un champ de surface élevé, l'énergie des porteurs dans la couche d'inversion peut être quantifiée dans la direction perpendiculaire à la surface, en donnant naissance à des niveaux d'énergie qui se regroupent en sous-bandes discrètes. Le mouvement des porteurs devient alors bidimensionnel et de nouveaux mécanismes d'interaction se manifestent au niveau de l'interface semi-conducteur isolant. A basse température, la largeur de la fonction de distribution de l'énergie cinétique des porteurs d'une sous-bande est faible et les effets quantiques sont importants. Lorsque la température s'élève, les fonctions de distribution de l'énergie cinétique de chaque sous-bande s'élargissent et les effets quantiques s'atténuent. Mais, si les profondeurs effectives des différentes sous-bandes sont très peu sensibles à la température, elles sont cependant dépendantes de la valeur du champ électrique de surface et il est possible, pour des champs de surface élevés, d'avoir une séparation d'énergie entre les premières sous-bandes qui peut atteindre  $6 k_B T$  [1] à la température ambiante et les effets quantiques peuvent également être importants.

Plusieurs travaux récents [2][3,4] [5,11] font état d'un bon accord entre la théorie quantique et des résultats expérimentaux relatifs à la mobilité des électrons et des trous dans une couche d'inversion [12, 13]. Dans certains travaux [2,5,6], une seule sous-bande est considérée. NAKAMURA [8] prend dix sous-bandes en considération. HESS et al. [11] considèrent quelques niveaux pour un champ source-drain de l'ordre de  $10 \text{ kV/cm}$ . BASU [4], par la méthode de Monte Carlo, tient compte des trois premières

sous-bandes en ajustant certains paramètres. Pour deux couples de paramètres, il obtient, d'une part, une mobilité élevée comparativement à celle obtenue expérimentalement [12], d'autre part, une mobilité différentielle négative, ce qui n'est pas constaté expérimentalement.

Dans ce chapitre, nous présenterons les mécanismes de collisions ainsi que la structure de bande de conduction d'un gaz d'électrons à deux dimensions. A partir de ces données, nous développerons ensuite, un modèle utilisant la méthode de Monte Carlo et tenant compte à la fois: de l'aspect bidimensionnel du mouvement, de plusieurs niveaux de sous-bandes, des charges stockées dans l'oxyde et de la rugosité de l'interface Si - SiO<sub>2</sub>. Ces deux derniers points seront pris en compte par l'introduction de deux interactions dont les probabilités ont été définies par D.K.FERRY [3,12]. Dans un premier temps, il ne sera tenu compte que d'une seule sous-bande, puis nous considérons que les trois premières sous-bandes sont susceptibles d'être occupées. Il est à noter que notre modèle constitue l'extension d'un modèle équivalent basé également sur la méthode de Monte Carlo, développé par P.K.BASU [2].

# I STRUCTURE ET BANDE DE CONDUCTION D'UN GAZ D'ELECTRONS A DEUX DIMENSIONS

## I.1 PARAMETRES ET BANDE DE CONDUCTION D'UN GAZ D'ELECTRON A DEUX DIMENSIONS

L'énergie des porteurs étant quantifiée, dans la direction perpendiculaire à l'interface, le mouvement ne peut alors s'effectuer que dans un plan parallèle à l'interface justifiant ainsi l'appellation de gaz électronique à deux dimensions. L'énergie d'un électron pour une sous-bande quelconque s'écrit :

$$E = E_i + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2 m_1} + \frac{\hbar^2 K_z^2}{2 m_2}$$

où  $E_i$  est le niveau de la sous-bande

$K_x, K_z$  sont les composantes du vecteur d'onde parallèle à la surface.

$m_1, m_2$  sont les masses effectives de l'électron en mouvement parallèlement à la surface.

Il faut noter que l'aspect des bandes de conduction dépend de l'orientation de la surface, et détermine par conséquent les masses  $m_1$  et  $m_2$ . Cette orientation détermine aussi la valeur de  $E_i$  [13]. Pour un gaz à deux dimensions correspondant à une orientation de surface donnée, la bande de conduction est obtenue par projection [14], sur la surface considérée, de la bande de conduction du volume. Ainsi, pour une surface S(100), on obtient la configuration présentée sur la figure 13, pour laquelle on a :

- D'une part, les quatre vallées dont l'axe principal est parallèle à la surface qui donnent naissance à des sous-bandes notées  $E_i^1$  comprenant quatre vallées elliptiques.

- D'autre part, les deux vallées perpendiculaires à la surface qui engendrent des sous-bandes notées  $E_i^2$  avec une vallée circulaire.

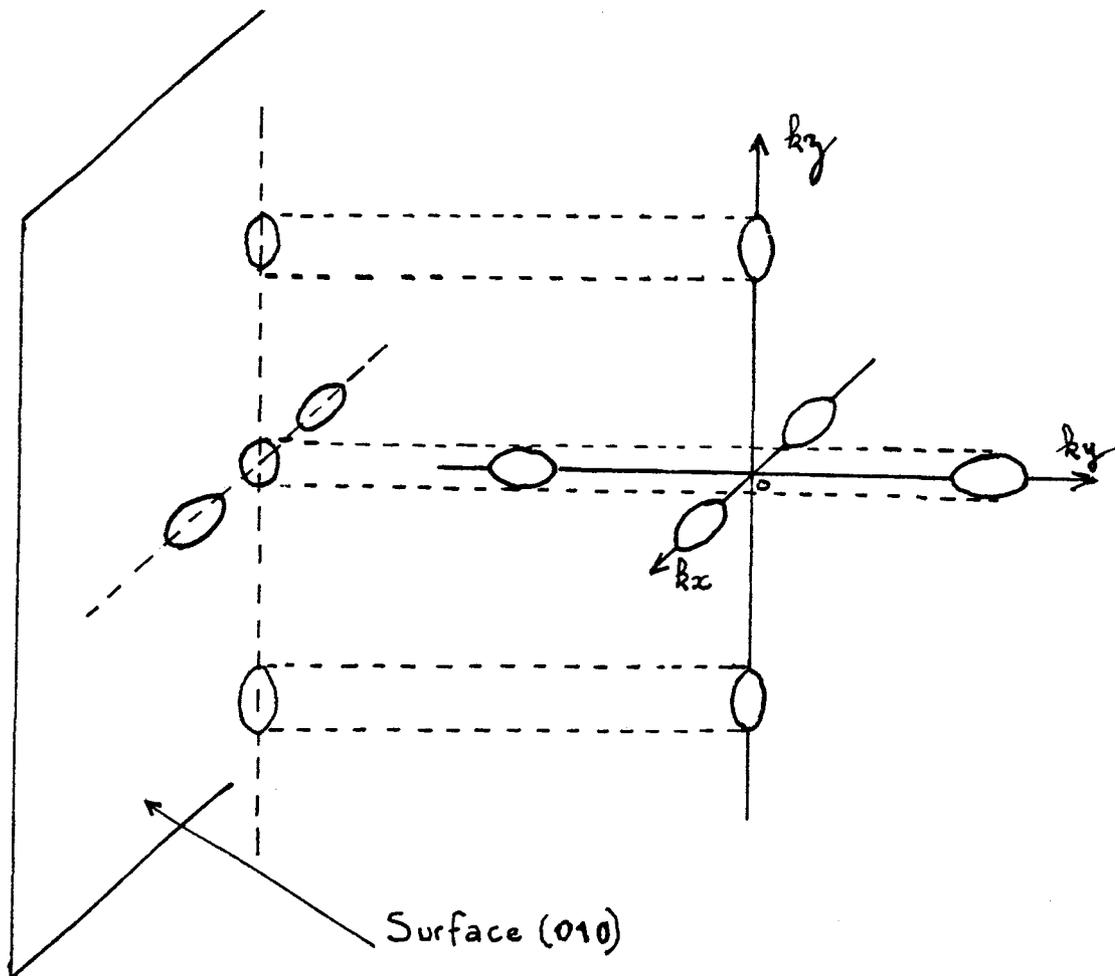


Figure 13 Illustration de la structure de bande de conduction d'une couche d'inversion

En principe toutes les sous-bandes sont susceptibles d'être occupées sauf à très basses températures. Cependant, supposer pratiquement que seules les sous-bandes  $E_0$ ,  $E_0'$ ,  $E_1$  sont occupées, constitue une bonne approximation [3].

Au préalable, il nous faut signaler qu'aux basses températures les effets des interactions liés à la rugosité de surface et aux charges d'oxyde (interactions coulombiennes) sont importants et doivent être pris en considération.

## I.2 INFLUENCE DE LA RUGOSITE DE SURFACE

Les porteurs de la couche d'inversion sont confinés dans une région de quelques Angströms. Si l'interface n'est pas parfaitement plane ( ce qui est toujours le cas ), les porteurs subiront une fluctuation significative du potentiel dont l'étude est présentée dans ce qui suit :

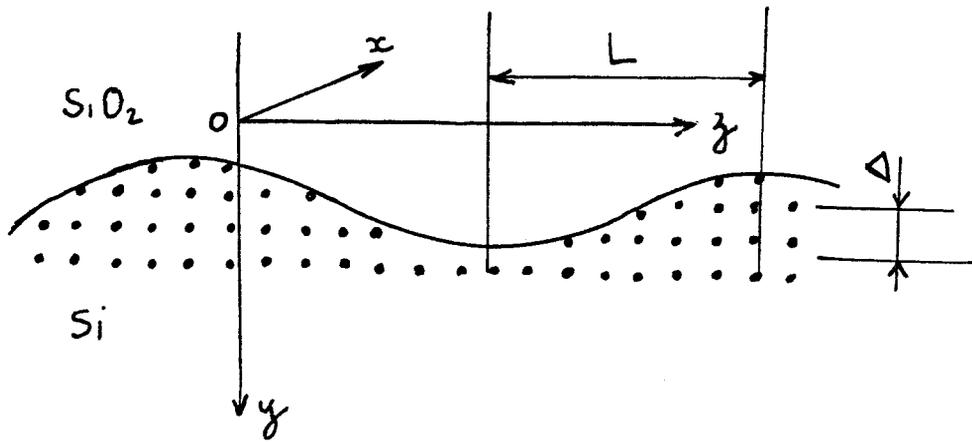


Figure 14 Représentation de la rugosité de surface

soit  $y = r(x, z)$  l'équation de l'interface dans le repère  $(0, x, y, z)$ .

Le potentiel électrique au voisinage de la surface peut alors s'écrire [12] :

$$V [y - r(x, z)] = V(y) + r(x, z) E_s + \dots$$

où  $E_s$  est le champ électrique de surface.

Le terme  $r(x, z) E_s$  caractérise ainsi les fluctuations du premier ordre du potentiel de surface et engendre alors une interaction dont l'élément de matrice du premier ordre est donné par :

$$\langle \vec{k}' | H' | \vec{k} \rangle = \frac{e}{A} \int \psi_{\vec{k}'}^* \psi_{\vec{k}} r(x, z) E_s ds$$

où A est l'aire de la portion de surface considérée et H' l'hamiltonien de perturbation.

En supposant que la fonction  $r(x, z)$  est une fonction aléatoire de x et de z et qu'elle peut s'exprimer en fonction des deux grandeurs  $\Delta$  et L caractérisant respectivement la profondeur et la longueur de corrélation de la rugosité ( voir figure 14 ), on montre [12] que la probabilité de transition par unité de temps  $\lambda_{SR}$ , d'un porteur d'un état  $\vec{K}$  à un autre état  $\vec{K}'$  quelconque est de la forme :

$$\lambda_{SR} = \frac{m^* \Delta^2 L^2}{2 \hbar^3} \left( \frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \right)^2 \left( N_s + N_{depl} \right)^2 \beta(KL)$$

où  $\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_{ox} + \epsilon_{si}}{2}$  représente la constante diélectrique moyenne de l'interface.

$\epsilon_{ox}$  est la permittivité de l'oxyde de silicium

$\epsilon_{si}$  est la permittivité de l'oxyde du silicium

$N_s$  est la densité de porteurs par unités de surface dans la couche d'inversion.

$N_{depl}$  est la densité de charges dans la zone désertée

et 
$$\beta(KL) = \pi \exp\left(-\frac{K^2 L^2}{2}\right) \left\{ I_0\left(\frac{K^2 L^2}{2}\right) - I_1\left(\frac{K^2 L^2}{2}\right) \right\}$$

$I_0, I_1$  sont les fonctions de Bessel modifiées de 1<sup>ère</sup> espèce

Cette interaction est élastique et son effet est de redistribuer au hasard la position du vecteur d'ordre dans le plan parallèle à l'interface.

### I.3 INFLUENCE DES CHARGES D'OXYDE

En pratique dans une structure MOS, et ainsi qu'il est schématisé sur la figure 15, l'oxyde est le siège de défauts donnant naissance à des "charges d'oxyde" [15] dont nous allons maintenant examiner l'influence sur le comportement des porteurs dans la couche d'inversion.

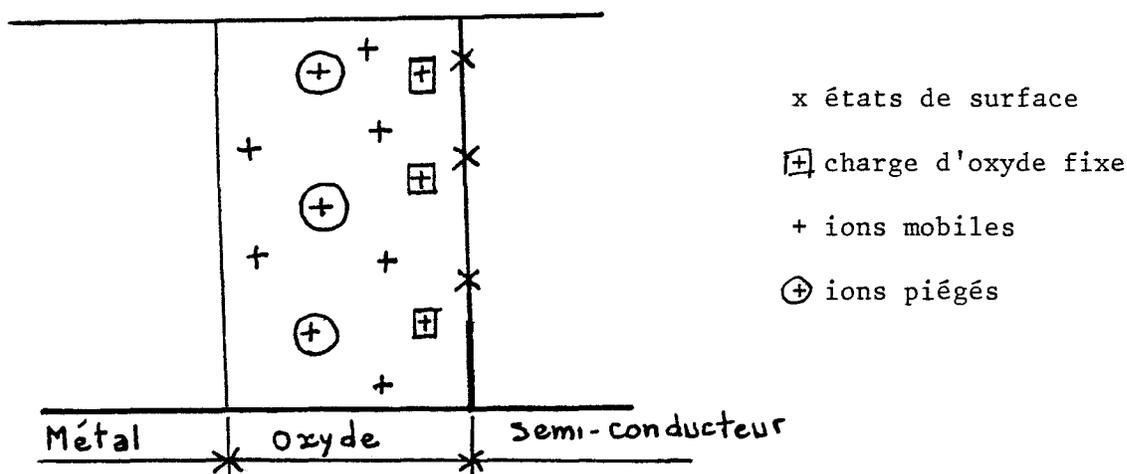
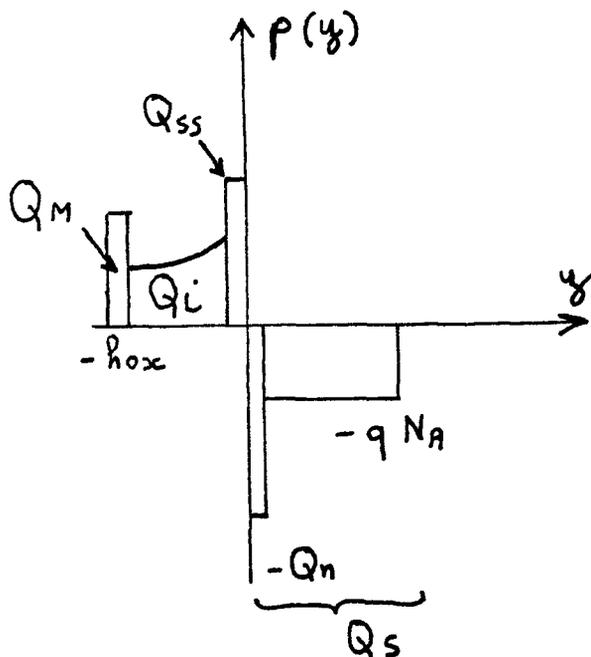


Figure 15 Charges et états associés au système Si/SiO<sub>2</sub>

La charge d'oxyde est formée par les charges fixes, les ions mobiles et les ions piégés qui se trouvent localisés près de l'interface semi-conducteur-oxyde. Les charges fixes de surface sont localisées à une distance de l'ordre de quelques Å de l'interface et leur concentration ne dépend pratiquement pas de l'épaisseur de l'isolant, de la concentration des impuretés dans le semi-conducteur, du type de cette impureté, par contre, elle dépend de l'orientation de l'interface et des conditions technologiques de formation de l'oxyde. Par exemple, dans le cas où l'on applique une tension positive à la partie métallique ( cas d'un transistor MOS ), on a le diagramme suivant ( figure 16 ) :



- $Q_M$  est la concentration de charges du métal
- $Q_S$  est la concentration de charges du semi-conducteur
- $Q_i$  concentration de charges de l'oxyde
- $Q_{SS}$  concentration de charges des états de surface

Figure 16 Distribution des charges dans une structure MOS

Ainsi les porteurs se trouvent en interaction avec les charges de l'oxyde de silicium.

Pour étudier l'influence des charges d'oxyde sur le mouvement des porteurs, on détermine les expressions des fluctuations du potentiel électrostatique au voisinage de la surface du semi-conducteur et, par suite, la perturbation correspondante de l'Hamiltonien [16] :

$$H'(r) = - \frac{e}{\epsilon} \sum_i \Delta V_i \delta p(\vec{R}_i) / |\vec{r} - \vec{R}_i|$$

où  $\vec{r}(x,y,z)$  représente la position d'un porteur et  $\Delta V_i$  est le volume élémentaire au voisinage de la charge de densité  $\delta p$  localisée au point  $\vec{R}_i(x,y,z)$

$$\delta p(\vec{r}) = e \left[ n_I(\vec{r}) - N_I(y) \right]$$

où  $n_I(\vec{r})$  est la charge locale de surface de l'oxyde et des états de surface;

$N_I(y)$  est la valeur moyenne sur le plan x-z de  $n_I(y)$  pour un  $y$  donné.

On peut montrer [16], alors que l'élément de matrice de transition entre deux états  $\vec{K}$  et  $\vec{K}'$  est donné par :

$$\langle \vec{K}' | H | \vec{K} \rangle = - \frac{e}{\epsilon} \frac{2\pi}{Aq} \sum_i \Delta Q_i e^{(-q|y_i| + i\vec{p}_i \cdot \vec{q})}$$

avec  $\vec{q} = \vec{K}' - \vec{K}$

$$\Delta Q_i = \Delta V_i \delta p(\vec{R}_i)$$

En utilisant la définition de la probabilité  $\lambda_I$  de transition C.T.SAH et al [16] obtiennent pour les interactions avec les charges d'oxyde :

$$\lambda_I = \frac{e^4 N_I}{16^2 \hbar \epsilon^2} \frac{1}{\epsilon}$$

où  $\epsilon$  est l'énergie du porteur

$N_I$  est la concentration de charges d'oxyde.

Comme précédemment, cette interaction est élastique et son effet est de redistribuer au hasard la position du vecteur d'onde dans le plan parallèle à l'interface.

D'une façon plus générale, T.H.NING et al. [17] montrent qu'il est possible de tenir compte également de la corrélation des positions des charges d'oxyde parallèlement à la surface et de la distribution des porteurs selon la direction perpendiculaire à la surface en multipliant la probabilité  $\lambda_I$  par un coefficient  $G$  convenablement choisi.

## II MODELE TENANT COMPTE D'UNE SEULE SOUS-BANDE $E_0'$

Si la température est basse et le champ électrique de dérive

pas trop élevé, on peut se contenter d'un modèle qui ne considère qu'un seul niveau. Dans ces conditions, il convient de choisir le niveau dont la densité d'état est la plus grande c'est à dire la sous-bande  $E'o$ . C'est ce qu'on fait HESS et al. [5,6] et BASU [2].

Nous avons utilisé ce modèle en y incluant l'influence de la rugosité de surface et l'influence des charges d'oxyde et c'est ce modèle que nous allons maintenant présenter.

## II.1 COLLISIONS ET PARAMETRES

Pour le niveau  $E'o$ , parmi les mécanismes de collisions que les porteurs sont susceptibles de subir, on distingue les collisions intravallées et les collisions intervallées. Les collisions intravallées provoquent des transitions du vecteur d'onde des porteurs à l'intérieur de la vallée même. Elles peuvent être d'un seul type :

- collisions sur phonons acoustiques.

De même, les collisions intervallées sont d'un seul type :

- collisions sur phonons optiques.

Les valeurs des constantes de couplage utilisées par BASU [2] sont :

	$Z_R$ (eV)	$Z_A$ (eV)	$\theta_{inv}$ (°K)	$\rho$ (g cm <sup>-2</sup> )	$m_L$	$m_U$
Canal N	17,3	7,65	650	$6,99 \cdot 10^{-7}$	0,19 $m_0$	0,91 $m_0$

Tableau 2

où  $Z_R$  est le potentiel de couplage des phonons optiques

$Z_A$  est le module du potentiel de déformation acoustique

$\theta_{inv}$  est la température des phonons optiques

$\rho$  est la densité de surface.

## II.2 TRAITEMENT DES PROBABILITES

### II.2.1 Phonons acoustiques

Les collisions acoustiques sont supposées intravallées non élastiques et la densité de probabilité par unité de temps  $\lambda_{ac}^{\pm}$  pour qu'un porteur effectue une transition l'amenant de l'état  $\vec{K}$  vers un autre état quelconque est donnée par [2]

$$\lambda_{ac}^{\pm} = \frac{(m_e m_t)^{\frac{1}{2}} Z_A K_B T}{\rho \hbar^3 u_l^2} \left[ \frac{1}{2} \pm \frac{1}{\pi} \sin^{-1} \left( \frac{m_0 u_l}{\hbar K} \right) \right]$$

où  $u_l$  est la vitesse du son,  $K$  le module du vecteur d'onde du porteur.

Le signe  $^{\pm}$  indique l'absorption (+) où l'émission (-) d'un phonon acoustique dont le module du vecteur d'onde associé  $q^{\pm}$  est donné par [4]

$$q^{\pm} = 2K \left\{ \sin \left[ r \frac{\pi}{2} \pm (r-1) \sin^{-1} \left( \frac{m_0 u_l}{\hbar K} \right) \right] \pm \left( \frac{m_0 u_l}{\hbar K} \right) \right\}$$

$r$  est un nombre aléatoire compris entre  $[0,1]$ .

L'énergie finale  $\epsilon_f$  du porteur après interaction est déterminée par :

$$\epsilon_f = \epsilon_i \pm \hbar u_l q$$

où  $\epsilon_i$  est l'énergie initiale du porteur.

### II.2.2 Phonons intervallées

Les collisions intervallées sont des interactions dues aux phonons optiques. Ce type de collision provoque un changement de vallée et une

réorientation de la direction du vecteur d'onde  $\vec{k}$  du porteur. La probabilité par unité de temps  $\lambda_{inv}$  pour qu'un porteur effectue une transition d'état  $\vec{k}$  à un autre état  $\vec{k}'$  à la suite d'une interaction sur phonon optique peut être obtenue de la même façon que celle décrite précédemment [2] :

$$\lambda_{inv} = \sum_R \frac{m e m t}{2 \hbar^3 \rho \vec{u} e} Z_R^2 K_B \Theta_{inv} \left[ N_R + (N_R + 1) u (\varepsilon - K_B \Theta_{inv}) \right]$$

où  $N_R$  est la distribution des phonons intervallés à la température  $\Theta_{inv}$ ,  $u$  une fonction échelon unité.

La somme  $\sum_R$  porte sur tous les phonons intervallés

Lors d'une interaction sur phonons intervallés la variation de l'énergie du porteur est de  $\pm K_B \Theta_{inv}$ , selon qu'il s'agit d'une absorption (+) ou d'une émission (-).

Pour les interactions sur phonons optiques ou phonons acoustiques, une fois l'énergie finale déterminée, on calcule le module du vecteur d'onde correspondant à l'aide de l'expression de la structure de bande. De plus, parmi les expressions des diverses interactions que peut subir un porteur, aucune ne dépend de la direction du vecteur d'onde du porteur. Par conséquent, l'angle de déviation  $\beta$  entre la direction du vecteur d'onde initial  $\vec{k}$  et celle du vecteur d'onde final  $\vec{k}'$  est uniformément distribué entre  $[0, 2\pi]$  dans un plan parallèle à l'interface [11,12].

### II.3 RESULTATS OBTENUS EN REGIME STATIONNAIRE DANS UN CANAL DE TYPE N PAR SIMULATION MONTE CARLO

Ce paragraphe est consacré à l'analyse des résultats obtenus concernant la vitesse de dérive et la mobilité ohmique des porteurs dans le cas d'une couche d'inversion de type N. Ces résultats sont obtenus en

appliquant un champ électrique de dérive dans la direction  $\langle 110 \rangle$ . Dans cette polarisation, les quatre vallées de la sous-bande  $E'_0$  présentent une symétrie par rapport à la direction du champ électrique. Par conséquent les porteurs seront "chauffés" de la même façon par le champ électrique quelle que soit la vallée dans laquelle ils se trouvent.

### II.3.1 Mobilité ohmique en fonction de la température

Nous avons reporté sur la figure 17, l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la température obtenue expérimentalement par FANG et al. [18] pour une densité de porteurs  $N_S = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . De la même façon, nous avons reporté les résultats calculés pour la même densité de porteurs, en plus tenant compte de l'existence de densité de charge d'oxyde  $N_I = 1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (valeur classique) et d'une rugosité de surface dont les coefficients  $\Delta$  et  $L$  valent respectivement  $3\text{\AA}$  et  $6\text{\AA}$  [19].

Pour cette densité de porteurs, la séparation des niveaux d'énergie des deux premières sous-bandes est de l'ordre  $2k_B T$  dans la gamme de température comprise entre 200-300°K.

Dans ces conditions, les porteurs préfèrent occuper la sous-bande dont la densité d'état est la plus grande ( c'est à dire la sous-bande  $E'_0$  ). De ce fait, il existe un accord satisfaisant entre les résultats expérimentaux et ceux obtenus par simulation. La dépendance en température est voisine de  $\sim T^{-1,5}$  montrant ainsi la dominance des interactions liées aux phonons. Par contre pour les températures basses, les deux résultats diffèrent notablement : la mobilité calculée est faible par rapport à celle correspondant à l'expérience. Ceci peut être dû au fait, qu'en réalité, la population de la sous-bande  $E_0$ , dont nous n'avons pas tenu compte, n'est peut être pas tout à fait négligeable devant la population de la sous-bande  $E'_0$ .

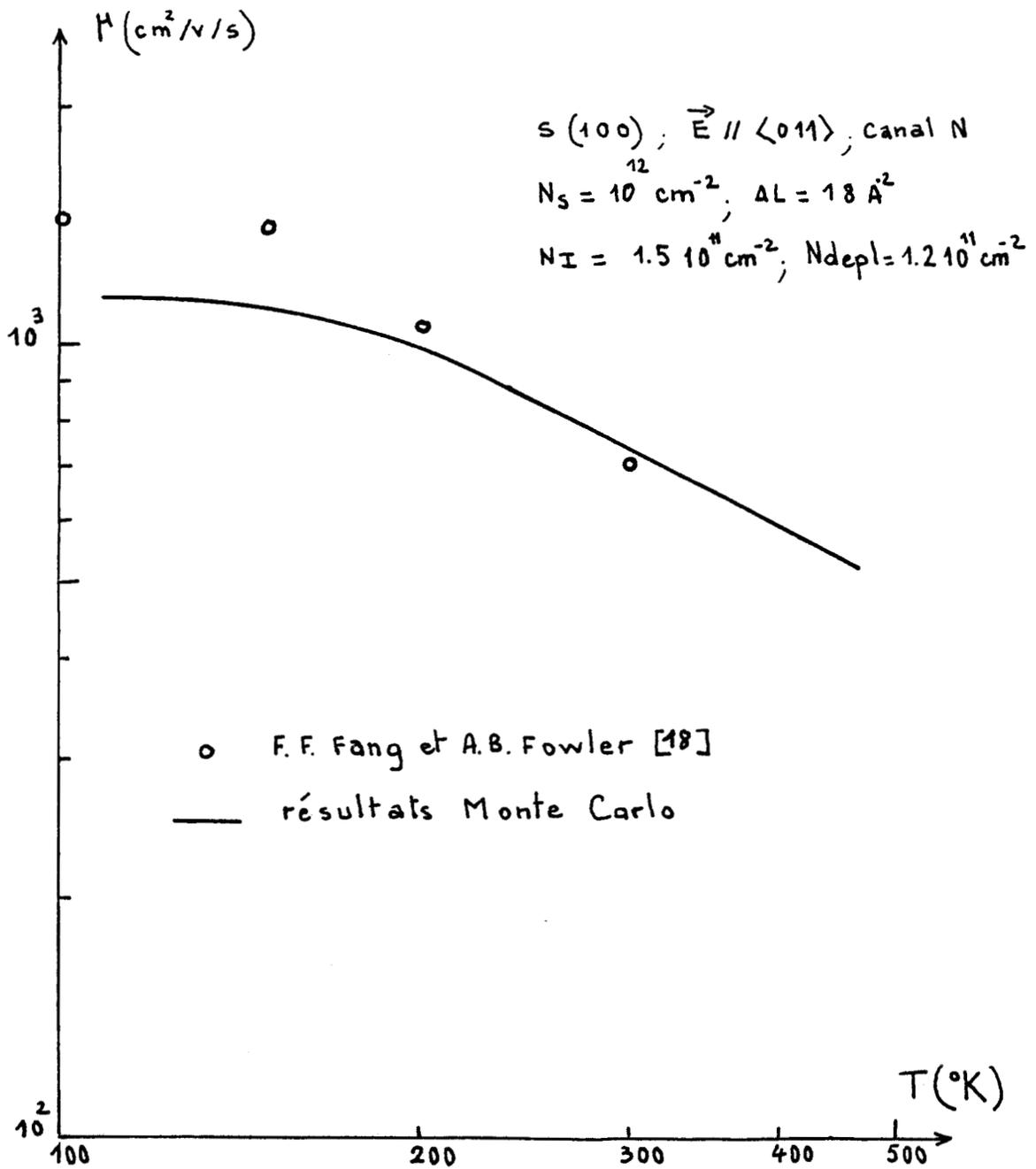


Figure 17 Mobilité ohmique en fonction de la température



### II.3.2 Vitesse de saturation des porteurs en fonction de la température

Sur la figure 18, nous avons représenté l'évolution de la vitesse de saturation des porteurs en fonction de la température dans les conditions suivantes :  $\Delta L = 18 \text{ \AA}^2$  ;  $N_I = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ;  $N_S = 7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Il est à noter que le phénomène de transport électronique en champ fort est essentiellement dominé par les phonons acoustiques et les phonons intervallées. Ainsi la vitesse de saturation des porteurs se trouve indépendante des paramètres  $\Delta$ ,  $L$ ,  $N_I$  et  $N_S$  (voir figures 19,20). Nous avons aussi représenté les résultats expérimentaux de FANG [12] et de COEN [20]. Nous constatons, d'une part, qu'il existe une divergence entre la théorie et l'expérience, d'autre part, que la vitesse limite calculée est voisine de celle obtenue dans le matériau en volume.

### II.3.3 Caractéristique vitesse-champ en fonction de la densité de charge d'oxyde et de la rugosité de surface

Sur les figures 19 et 20, sont reportées les caractéristiques vitesse-champ  $v_d(E)$  paramétrées respectivement par le produit des coefficients de rugosité de surface et par la densité de charges d'oxyde et ceci pour une même densité de porteurs ( $N_S = 3.06 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) correspondant à un champ de surface  $E_S = 470 \text{ Kv/cm}$  (condition expérimentale). Si en régime de mobilité ohmique, nous observons un accord satisfaisant, il n'en est pas de même en champ fort : l'effet de saturation de la vitesse de dérive obtenue par COEN et al. [20] par extrapolation n'est pas constaté.

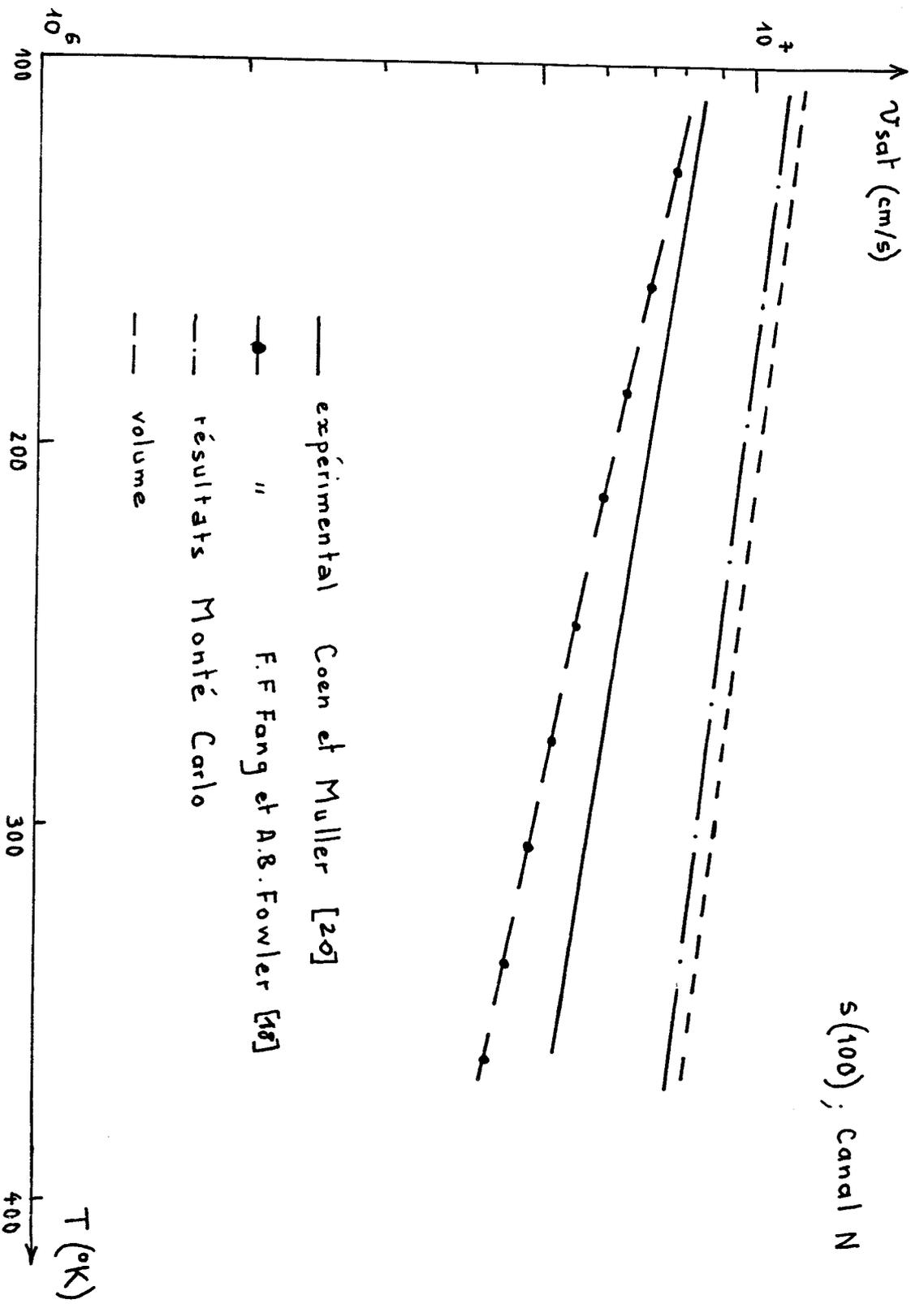


Figure 18 Vitesse limite des porteurs en fonction de la température



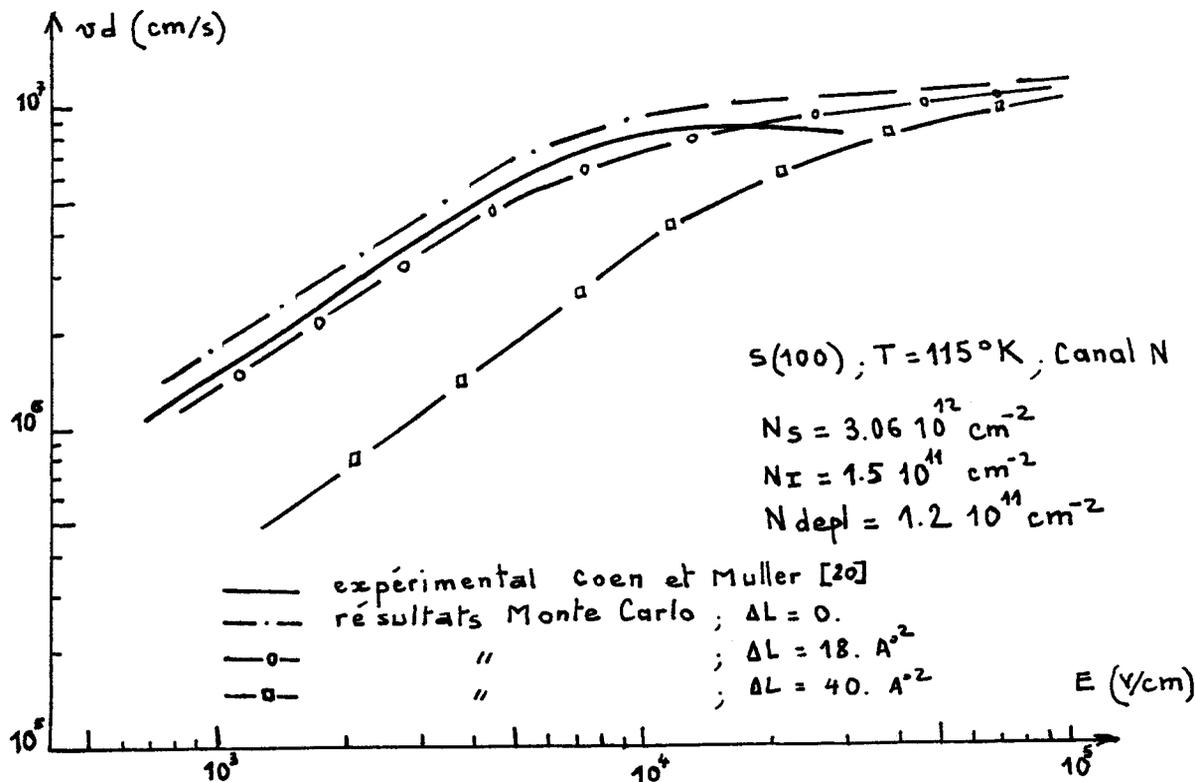


Figure 19 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique paramétrée par le coefficient de rugosité de surface

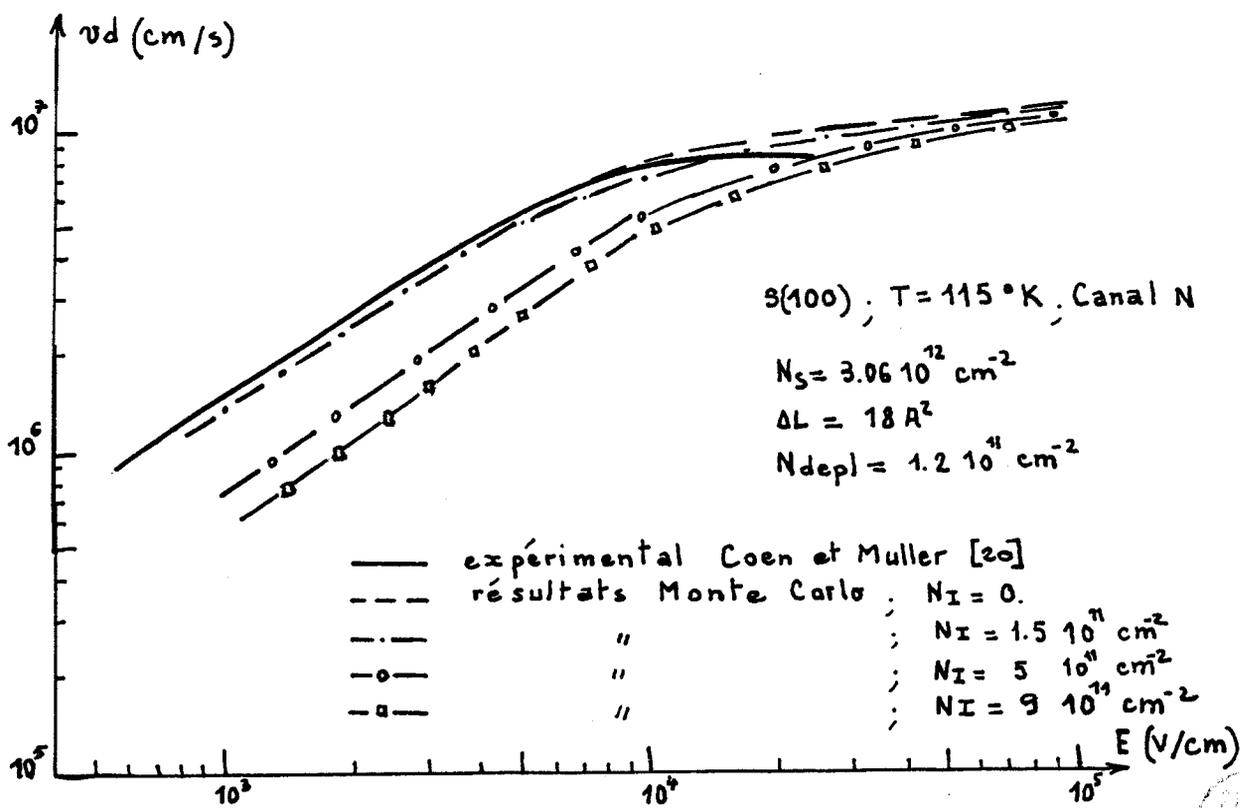


Figure 20 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique paramétrée par la densité de charges d'oxyde



### II.3.4 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde à basse température

L'importance des charges d'oxyde sur les phénomènes de transport électronique des structures MOS, nous amène à étudier l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la densité de ces charges. Pour cela, nous avons représenté sur la figure 21 à la fois la mobilité ohmique en régime de faible inversion, calculée par simulation Monte Carlo et la mobilité ohmique expérimentale obtenue par C.T.SAH et al. [16] dans les mêmes conditions. Nous constatons pour les densités de charges d'oxyde supérieures à  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , une concordance entre théorie et expérience, par contre, lorsque cette densité est inférieure à  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , il existe un écart notable. Il est fort probable que ce phénomène soit dû au fait que l'on a tenu compte uniquement de la sous-bande E'o.

### II.3.5 Mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs de la couche d'inversion

La figure 22 montre l'évolution, à la température ambiante, de la mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs comparative-ment à celle obtenue expérimentalement par FANG et al. [18]. Il est à noter que dans notre simulation nous tenons compte globalement de l'effet de la charge d'espace créée par les porteurs (les interactions coulombiennes ne sont pas prises en compte). Nous constatons que la théorie et l'expérience sont en accord pour les faibles densités de porteurs, autrement dit, pour les faibles inversions. Supposer que seulement la sous-bande E'o est susceptible d'être occupée ne constitue plus une bonne approximation lorsqu'il

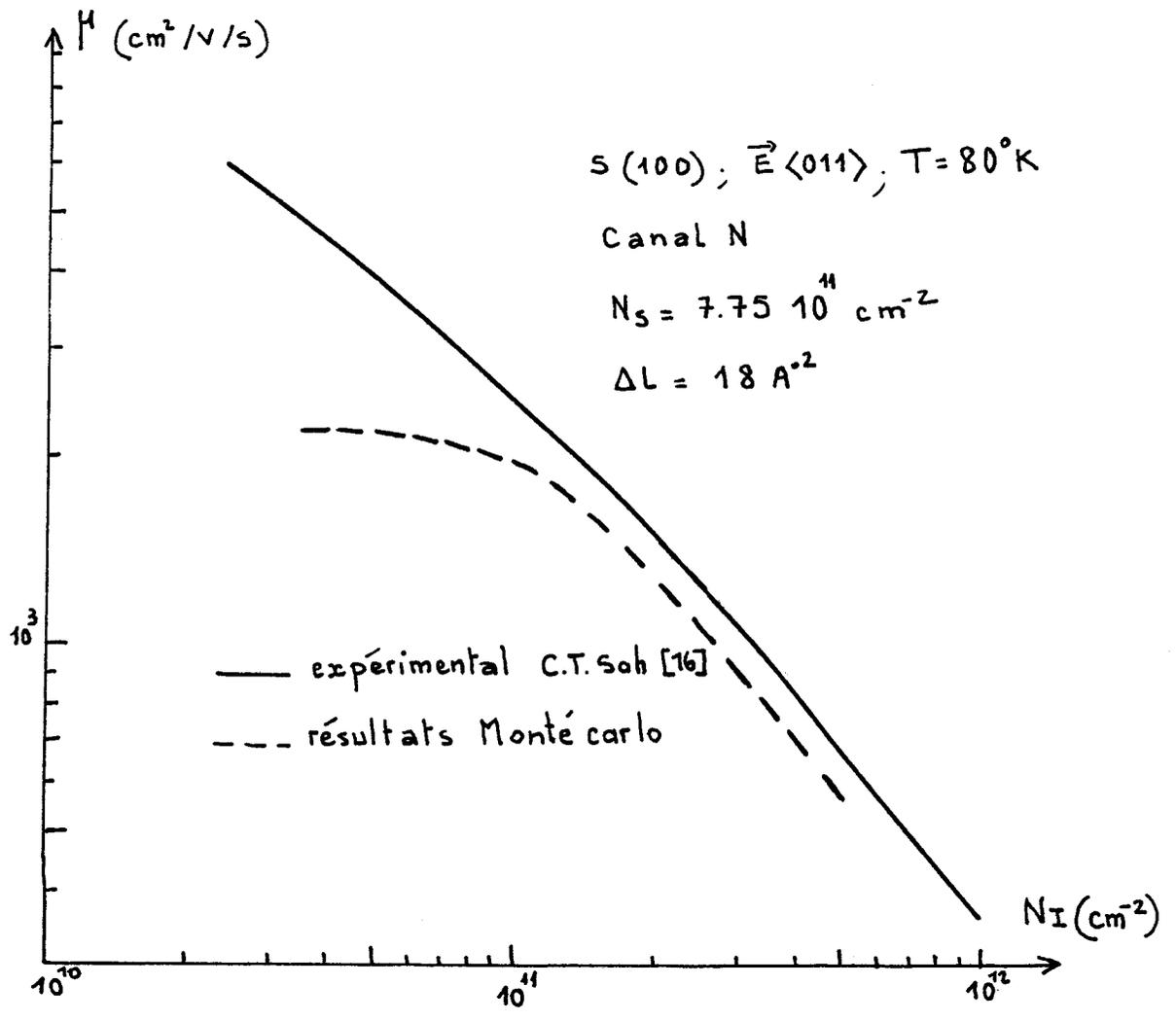


Figure 21 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde

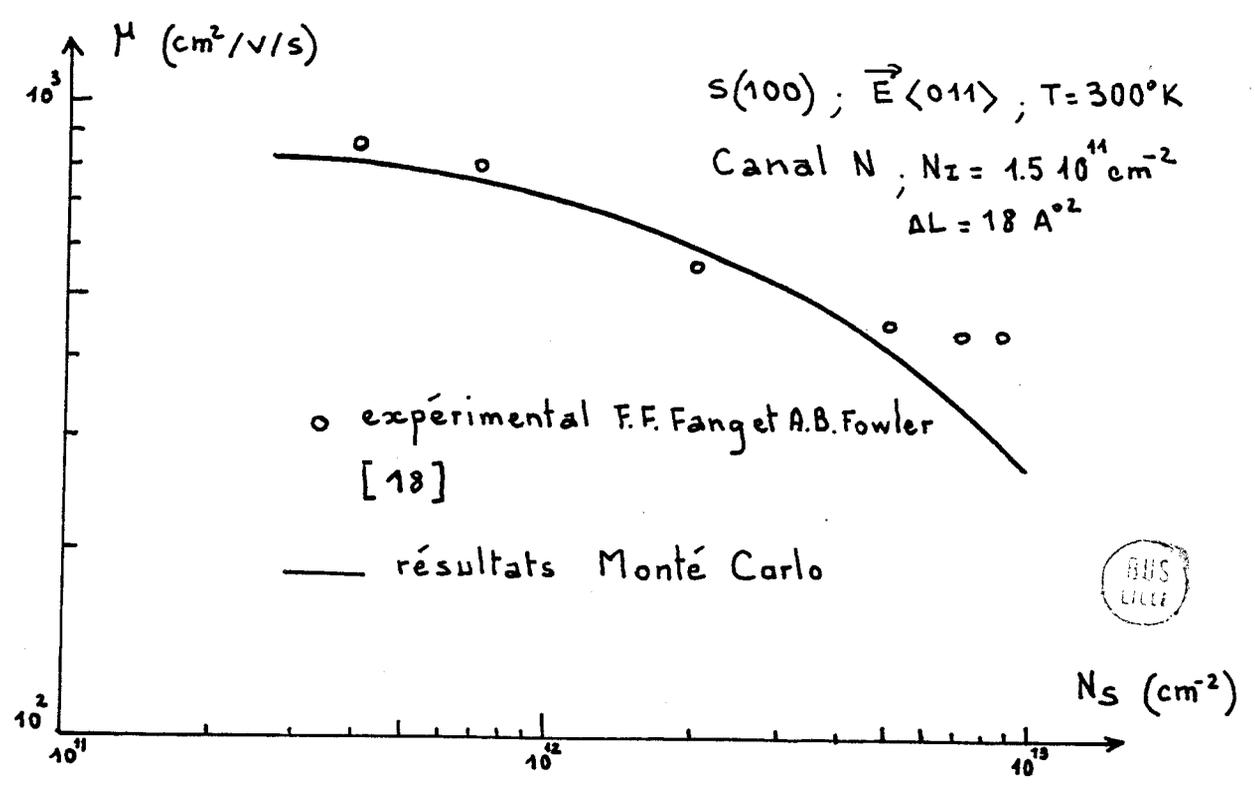


Figure 22 Mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs

s'agit d'une forte inversion (densité de porteurs élevée) et il apparaît un désaccord entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux.

### II.3.6 Remarque : Phénomènes de transports en régime stationnaire dans un canal de type P

Afin d'étudier les phénomènes de transport dans une couche d'inversion dont le canal est de type P orienté (100), BASU [2] considère le même modèle de collisions que pour un canal de type N mais utilise les valeurs des différents paramètres rassemblés dans le tableau 3

$Z_R$ (eV)	$Z_A$ (eV)	$\theta_{inv}$ (°K)	$\rho$ ( $g\text{ cm}^{-2}$ )	$m_t$	$m_l$
19,6	14	650	$6,99 \cdot 10^{-7}$	$0,5 m_0$	$0,5 m_0$

Tableau 3

Nous avons également développé ce modèle, en utilisant une simulation Monte Carlo, en tenant compte en plus de l'influence des charges d'oxyde et de la rugosité de surface.

#### II.3.6.1 Caractéristique vitesse-champ

Nous avons calculé, la vitesse de dérive des porteurs à la température  $T = 106^\circ\text{K}$  et pour une densité de porteurs  $N_S = 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

correspondant à un champ de surface  $E_S = 440 \text{ Kv/cm}$ , valeurs qui correspondent aux conditions expérimentales de COEN et MULLER [20].

Les résultats sont reportés sur la figure 23 où nous avons paramétré les caractéristiques vitesse-champ électrique par le produit des coefficients de rugosité de surface  $\Delta$  et  $L$ , en prenant comme densité de charge d'oxyde  $1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et une densité de charges déplétées  $N_{\text{depl}} = 1.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Nous constatons, qu'en champ faible, la caractéristique vitesse-champ calculée pour une valeur de  $\Delta L = 18 \text{ \AA}^2$  coïncide avec celle obtenue expérimentalement. Par contre en champ fort, en aucun cas nous n'obtenons la vitesse de saturation donnée par COEN et al. [20] et la vitesse limite calculée est indépendante des valeurs des coefficients de rugosité de surface.

De la même façon, nous avons reporté sur la figure 24 la caractéristique  $v_d(E)$  pour un canal P, mais cette fois-ci paramétrée par la densité de charges d'oxyde, pour un produit des coefficients de rugosité de surface  $\Delta L = 18 \text{ \AA}^2$ , et une densité de charge déplétée  $N_{\text{depl}} = 1.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Nous vérifions que pour une densité de charge  $N_I = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , nous obtenons un bon accord théorie expérience en champ faible. Par contre, en champ fort, la vitesse de saturation calculée est, non seulement différente de celle obtenue expérimentalement mais elle est également indépendante de la densité de charges  $N_I$ .

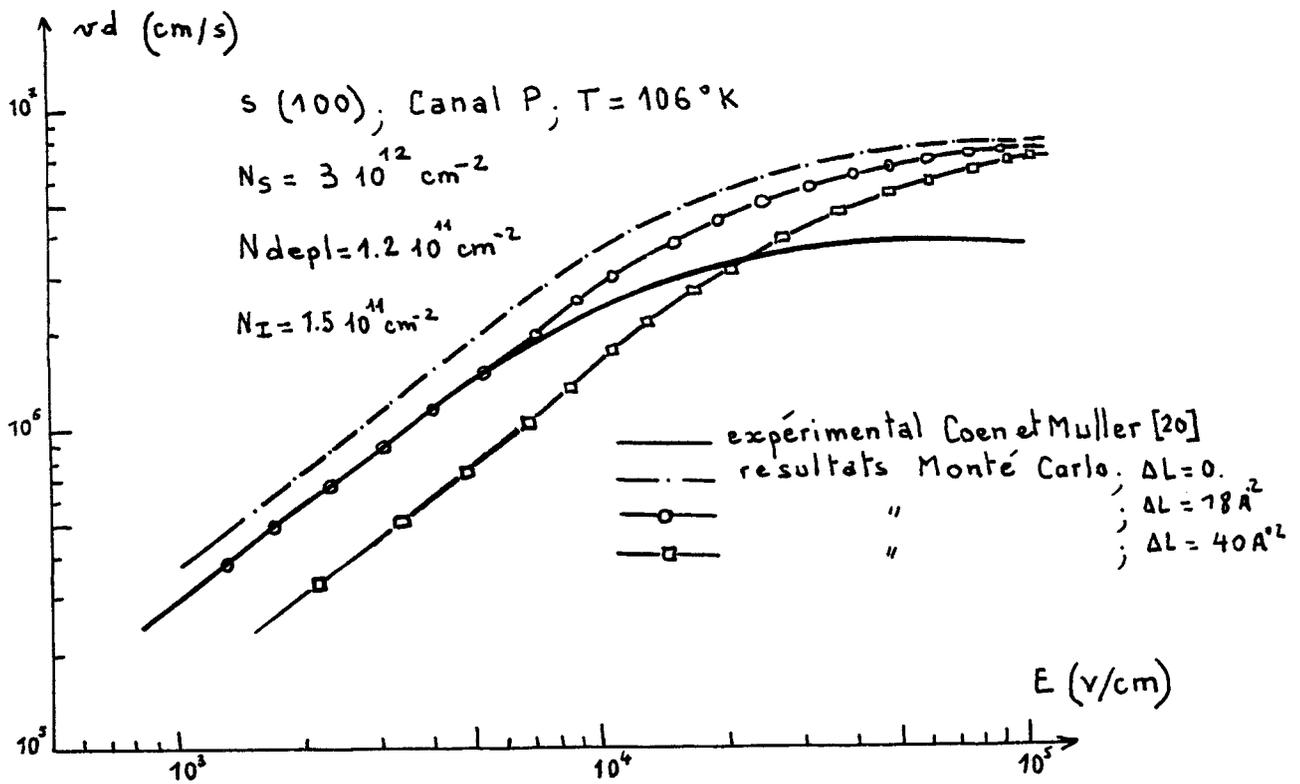


Figure 23 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique;  
paramètre : rugosité de surface

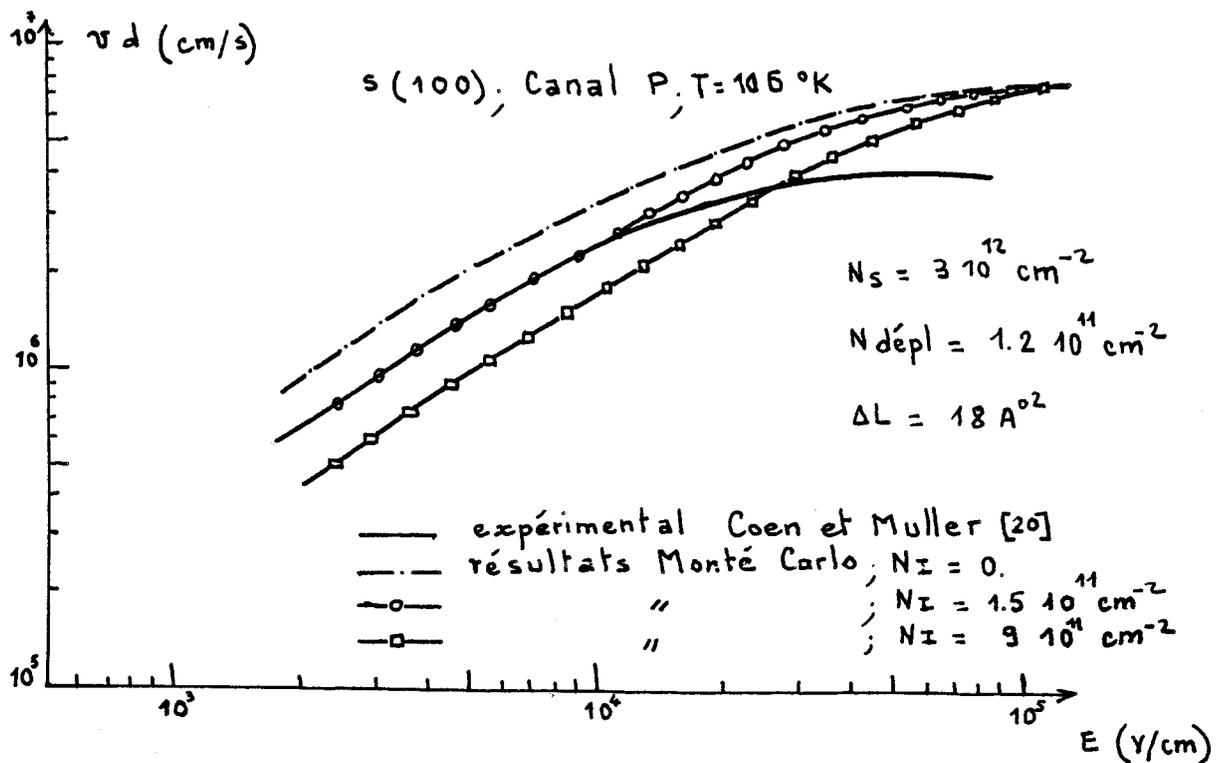


Figure 24 Vitesse de dérive en fonction du champ électrique,  
paramètre : densité de charges d'oxyde.

### II.3.7 Conclusion

Nous avons tenu compte des effets de quantification de l'énergie des porteurs en supposant qu'ils occupent uniquement la sous-bande  $E_0$  et subissent l'influence de la rugosité de surface et de la charge d'oxyde. Cette modélisation s'est avérée correcte pour des inversions moyennes à température moyenne lorsque les porteurs sont en régime de mobilité ohmique : un accord relativement satisfaisant est observé entre les résultats numériques et ceux obtenus expérimentalement. Il n'en est pas de même lorsque le champ électrique de dérive devient important : d'une façon générale les vitesses limites calculées sont très voisines de celles observées dans le matériau en volume et différent notablement de celles trouvées expérimentalement. Par contre lorsque la température est basse ou lorsqu'il s'agit d'une forte inversion, supposer que seulement la sous-bande  $E_0$  est occupée ne constitue plus une bonne approximation. Dans ces conditions, les populations des autres sous-bandes ne sont pas négligeables et il faut en tenir compte; c'est ce que nous allons considérer par la suite en développant un modèle qui prend en compte plusieurs niveaux.

### III MODELE TENANT COMPTE DES TROIS SOUS-BANDES $E_0$ , $E_0'$ , $E_1$

La solution de l'équation de transport, en général, l'échauffement des porteurs par le champ électrique, en particulier, peut être traité analytiquement si la distribution des porteurs est supposée à une température caractéristique, définie d'une manière phénoménologique. En champ fort, la température électronique monte à plusieurs centaines de degrés et la statis-

tique d'un gaz d'électrons peut être correctement traitée par une distribution maxwellienne déplacée. Cette hypothèse est d'autant meilleure qu'il s'agit d'une forte inversion [21,22] quand la forme de distribution est connue, le problème de transport peut être résolu entièrement en écrivant un ensemble d'équations d'équilibre de l'énergie, du moment et des populations de chaque sous-bandes. Si l'on suppose que chaque sous-bande est caractérisée par sa température électronique, alors les différentes sous-bandes sont découplées et il en résulte que ces équations peuvent être résolues pour chacune d'elle séparément pour déterminer ses paramètres (vitesse, énergie etc...). Ces équations d'équilibre à l'intérieur d'une seule sous-bande sont, pour l'énergie et le moment :

$$e \vec{E} = \left\langle \frac{d\vec{P}}{dt} \right\rangle = m_c v_d \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle$$

$$e v_d E = \left\langle \frac{d\mathcal{E}}{dt} \right\rangle$$

où E est le champ électrique de dérive

P est le moment du porteur

$\tau$  est le temps de relaxation du moment

$\mathcal{E}$  est l'énergie du porteur

$m_c$  est la masse de conductivité

$v_d$  est la vitesse de dérive

Par ailleurs, en ce qui concerne les populations de chaque sous-bande, on a :

$$\frac{dn_i}{dt} = - \sum_j \left( \frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{i \rightarrow j} + \sum_j \left( \frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{j \rightarrow i}$$

où le membre de droite représente les transitions entre les sous-bandes à la suite de collisions des porteurs et où la somme est étendue à tous les niveaux d'énergie  $j \neq i$ .

A partir des expressions des probabilités des diverses collisions que les porteurs peuvent subir, FERRY [3] résoud analytiquement les trois équations d'équilibre précédentes en supposant que, seulement les trois premières sous-bandes sont susceptibles d'être occupées et montre que l'influence des autres sous-bandes n'affecte pratiquement pas le résultat. La valeur moyenne d'une grandeur physique quelconque (vitesse, énergie, etc...) est obtenue par l'intermédiaire des valeurs moyennes calculées dans chaque sous-bande, pondérée par la fraction de population correspondante.

Il faut signaler que les équations d'équilibre précédentes de l'énergie et du moment sont des équations de relaxation et par conséquent ne constituent que des approximations [23].

Dans ce qui suit, nous allons généraliser le modèle à une sous-bande  $E_0'$  à un modèle tenant compte des trois premières sous-bandes  $E_0$ ,  $E_0'$ ,  $E_1$ . Dans ce modèle, basé sur la méthode Monte Carlo, nous utiliserons les mécanismes microscopiques de transport électroniques dans une couche d'inversion utilisés par FERRY [3] et dont nous allons maintenant présenter les différents paramètres.

### III.1 COLLISIONS ET PARAMETRES

Les interactions que peut subir un porteur sont les phonons optiques intervallées, les phonons acoustiques, les charges d'oxyde et la rugosité de surface.

Considérons premièrement les phonons optiques intervallées. L'interaction entre deux vallées équivalentes dans la sous-bande  $E_0$  ou  $E_1$

engage des phonons de type g. Deux phonons sont en jeu : un phonon de forte énergie couplé à l'ordre zéro et dont la température est de  $750^{\circ}\text{K}$  et un phonon d'énergie faible couplé au premier ordre et dont la température est de  $134^{\circ}\text{K}$ . ( voir figure 25 )

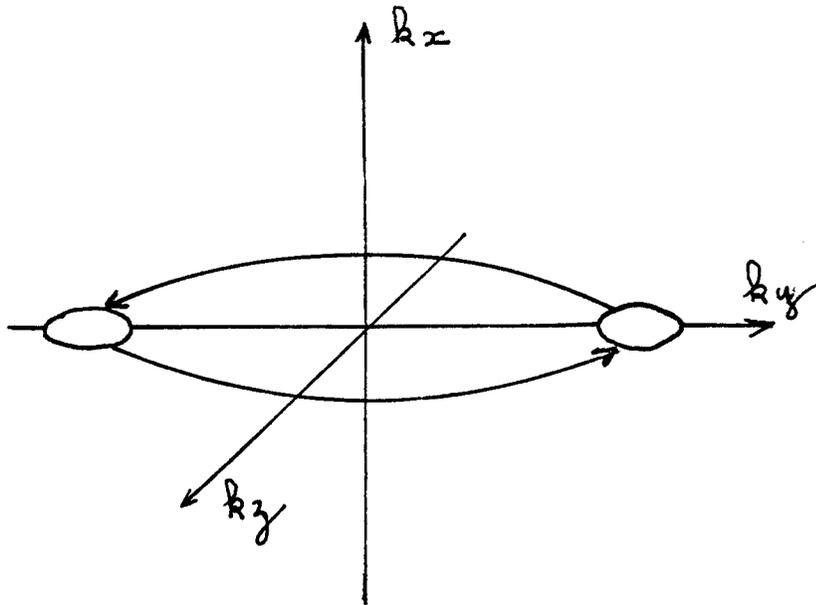


Figure 25 Phonon intervallé équivalente type g dans la sous-bande  $E_0$  ou  $E_1$

L'interaction entre les quatre vallées de la sous-bande  $E_0$  fait intervenir deux phonons de type g et deux phonons de type f. Ceux, dont l'énergie est élevée, ont une température identique  $T = 630^{\circ}\text{K}$  et sont couplés à l'ordre zéro, alors que ceux, dont l'énergie est faible ont une température commune de  $T = 190^{\circ}\text{K}$  et sont couplés au premier ordre ( voir figure 26 )

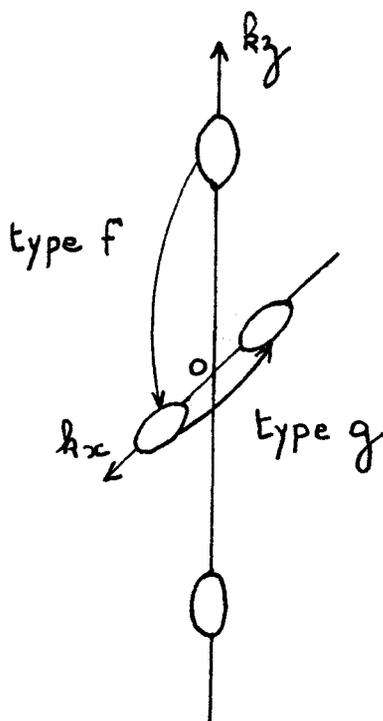


Figure 26 Phonon intervallée type g et type f dans la sous-bande E'0

Enfin, les interactions entre deux vallées de la sous-bande  $E_0$  ou  $E_1$  et les quatre vallées de la sous-bande  $E'0$  engagent des phonons de type f. Le phonon d'énergie élevée est couplé à l'ordre zéro et à une température de  $630^\circ\text{K}$  et le phonon dont l'énergie est faible est couplé au premier ordre et à une température de  $230^\circ\text{K}$ .

En addition aux interactions des phonons intervallées, s'ajoutent les interactions sur phonons acoustiques, qui sont importantes dans la couche d'inversion spécialement dans la gamme de température  $20-200^\circ\text{K}$  [24].

Les valeurs des diverses constantes de couplage et des potentiels de déformation, sont estimées à partir de celles du volume [25]. De plus, on tient compte des effets des interactions dues aux charges d'oxyde [26] et à la rugosité de surface [13].

La structure de bande de conduction présentée au paragraphe I.1 est mise sous sa forme générale puis est utilisée pour toutes les sous-bandes. En particulier, l'énergie d'un porteur de la sous-bande  $E_0$  (ou  $E_1$ ) (formée de deux vallées circulaires équivalentes) s'exprime par :

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_t} + E_0 \text{ (ou } E_1)$$

Par contre, l'énergie d'un porteur de la sous-bande  $E'_0$  (formée de quatre vallées elliptiques) s'écrit :

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_1} + \frac{k_z^2}{m_2} \right) + E'_0$$

où  $m_1$  est la masse effective selon la direction  $ox$ ,  $m_2$  selon l'axe  $oz$ .  $E_0$ ,  $E'_0$ ,  $E_1$  constituent alors les fonds de vallées et leurs valeurs sont données par les expressions présentées dans la première partie de ce mémoire.

### III.2 PROBABILITES D'INTERACTIONS

#### III.2.1 Phonons acoustiques

Les collisions des porteurs sur les phonons acoustiques sont considérées comme élastiques et la densité de probabilité par unité de temps  $\lambda_{ac}$  pour qu'un porteur effectue une transition d'un état  $\vec{k}$  vers un autre état quelconque  $\vec{k}'$  est donnée par [3] :

$$\lambda_{ac} = \frac{(m_1 m_2)^{\frac{1}{2}} Z_1 k_b T}{\hbar^3 \rho_m y_j v_s^2}$$

où  $Z_1$  est le module du potentiel de déformation acoustique,  $v_s$  la vitesse du son,  $T$  est la température de réseau,  $y_j$  est la profondeur effective de  $j^{\text{ième}}$  sous-bande,  $\rho_m$  est la densité de masse.

### III.2.2 Phonons intervallés

C'est au cours de ces interactions, qu'ont lieu les transferts de porteurs entre vallées. Elles sont accompagnées d'une absorption ou d'une émission de phonon dont la température dépend de la collision considérée. Un transfert de porteur ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie du fond de la vallée finale. L'expression générale de la densité de probabilité de passage de l'état  $\vec{k}$  à un état  $\vec{k}'$ , en transférant de la vallée  $i$  à une vallée  $j$  s'écrit [27]:

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D^2 \hbar}{2V \rho_m \omega_0} I_{ij} \left( N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) [1 - f_0(\epsilon')] \times \delta(\epsilon' - \epsilon \pm \hbar\omega_0)$$

où 
$$N = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_b T}} - 1}$$

Dans ces expressions,  $\hbar\omega_0$  représente l'énergie du phonon échangé,  $V$  est le volume d'interaction,  $D$  est le potentiel des phonons optiques,  $I_{ij}$  un facteur de transfert de la vallée  $i$  à la vallée  $j$ ,  $f_0$  est la fonction de distribution

des porteurs et le terme  $1 - f_0(\epsilon')$  permet de tenir compte de la possibilité d'occupation de l'état final  $\vec{K}'$ . En intégrant sur tous les états  $\vec{K}'$ , FERRY [27], montre que, la probabilité  $\alpha_{ij}$  par unité de temps qu'un porteur qui se trouve dans un état  $\vec{K}$  transite à un autre état quelconque, est de la forme :

$$\lambda_{ij} = \frac{D^2}{\rho_m \hbar^2 \omega_0} \sum_{j, b} I_{ij} \frac{m_{1b} m_{2b}}{y_j} \times \begin{cases} N u_0(\epsilon - E_j + \hbar\omega_0)(1 - f_0(\epsilon + \hbar\omega_0)) \\ (N+1) u_0(\epsilon - E_j - \hbar\omega_0)(1 - f_0(\epsilon - \hbar\omega_0)) \end{cases}$$

où  $E_j$  est l'énergie relative au fond de vallée,  $u_0$  est la fonction échelon unité,  $m_{1b}$  et  $m_{2b}$  sont respectivement les masses effectives des porteurs dans la vallée finale  $b$  selon la direction  $\vec{ox}$  et  $\vec{oz}$ .

Ce traitement des collisions intervallées est à l'ordre zéro puisque l'expression de  $S_{ij}(\vec{K}, \vec{K}')$  est associée au processus d'interaction sur phonons intervallées à l'ordre zéro. Toutefois, il est possible [27], par une démarche analogue, de traiter les collisions intervallées au premier ordre en choisissant l'expression de  $S_{ij}(\vec{K}, \vec{K}')$  qui est associée au processus d'interaction sur phonons intervallés au premier ordre. Mais HARRISON [28], a montré que, par rapport aux interactions sur phonons acoustiques, seules les interactions sur phonon optique non polaire d'ordre zéro contribuent d'une façon significative aux phénomènes de transport. C'est la raison pour laquelle nous ne tiendrons compte dans la suite que des collisions sur phonons optiques d'ordre zéro.

Pour les interactions sur phonons intervallées, lorsque l'énergie finale est déterminée, on calcule le module du vecteur d'onde correspondant en utilisant l'expression de la structure de bande qui convient.

Une fois de plus, les expressions des différentes interactions que peut subir un porteur, ne dépendent pas de la direction du vecteur d'onde de ce porteur. Dans ces conditions l'angle de déviation  $\beta$  entre la direction du vecteur d'onde initial  $\vec{K}$  et celle du vecteur d'onde final  $\vec{K}'$  est uniformément distribuée entre  $[0, 2\pi]$  dans un plan parallèle à la surface.

### III.3 RESULTATS OBTENUS EN REGIME STATIONNAIRE DANS UN CANAL DE TYPE N PAR SIMULATION MONTE CARLO

Dans ce paragraphe, nous étudions les phénomènes de transport dans une couche d'inversion de type N en analysant les évolutions des grandeurs physiques fondamentales (vitesse moyenne, mobilité) obtenues par simulation Monte Carlo en tenant compte de trois sous-bandes. Nous pouvons alors, préciser de façon quantitative l'évolution de la mobilité en fonction :

- de la température de réseau
- de la densité de porteurs ( ou champ de surface )
- de la densité des charges d'oxyde
- de la rugosité de surface

Cette analyse est faite dans le cas où la surface est orientée (100) et la direction du champ de dérive est selon  $\langle 011 \rangle$  .

#### III.3.1 Mobilité ohmique et vitesse de saturation en fonction de la température

Nous avons représenté sur la figure 27, l'évolution de la mobilité ohmique obtenue expérimentalement par FANG et al [18] pour une

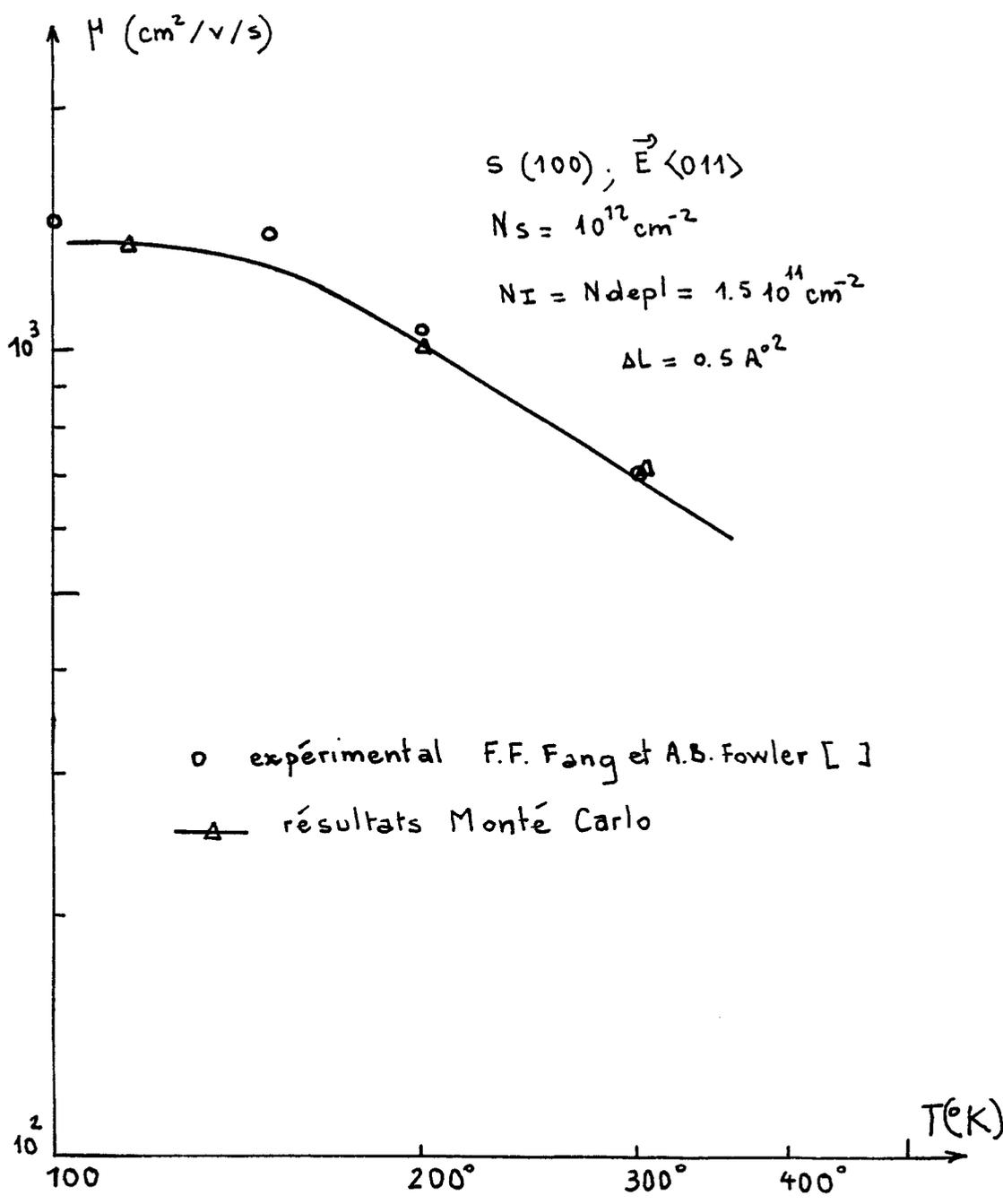


Figure 27 Mobilité ohmique en fonction de la température.



densité de porteurs de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , ainsi que celle obtenue par la méthode de Monte Carlo pour la même densité de porteurs. Toutefois, dans notre simulation, nous avons tenu compte de l'effet des charges d'oxyde et la rugosité. Pour cela, la densité de charges d'oxyde est fixée à  $1,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (valeur estimée par FANG et al. [18] dans leur expérimentation) et la rugosité de surface est telle que le produit  $\Delta L$  des coefficients de rugosité est de  $0,5 \text{ \AA}^2$  (valeur estimée par FERRY [3]).

### III.3.1.1 Mobilité ohmique

Compte tenu des possibilités des porteurs d'occuper trois sous-bandes différentes, nous avons remarqué, en particulier à basse température, que la population de la première sous-bande  $E_0$  est de l'ordre de 40% de la population totale, celle de la deuxième sous-bande  $E'_0$  est d'environ 60% et celle de la sous-bande  $E_1$  est pratiquement négligeable.

Les porteurs qui se trouvent dans la sous-bande  $E_0$ , ont une masse effective plus petite que celle des porteurs de la sous-bande  $E'_0$  et voient alors, leur mobilité augmenter. Il en résulte que la mobilité ohmique moyenne augmente et se rapproche de celle observée expérimentalement (voir figure 27). En ce qui concerne les températures voisines de  $300^\circ\text{K}$ , les porteurs étant plus énergétiques vont peupler la sous-bande dont la densité d'état est la plus grande c'est à dire la sous-bande  $E'_0$  dont la population devient alors, environ 80% de la population totale. En définitive, on peut considérer que c'est pratiquement la seule sous-bande qui soit susceptible d'être occupée. Ainsi que nous l'avons signalé dans le paragraphe précédent, nous observons la dominance des interactions liées aux phonons, pour les températures élevées.

### III.3.1.2 Vitesse de saturation

Sous l'effet d'un champ de dérive élevé, les porteurs acquièrent de l'énergie et il leur devient alors possible de transférer vers les sous-bandes hautes. Mais à cause de la faible valeur de la densité d'états de la sous-bande  $E_1$  et du faible coefficient de couplage  $I_{10}$ , ( $\sim 0,12$ ), la majeure partie des porteurs reste dans la sous-bande  $E'o$  (voir figure 28 et 30). Il en résulte que, la vitesse limite des porteurs est essentiellement dominée par les mécanismes de transport électronique de la sous-bande  $E'o$  et nous observons une évolution de la vitesse de saturation en fonction de la température identique à celle représentée sur la figure 18.

### III.3.2 Evolution des populations des différentes sous-bandes en fonction du champ électrique de dérive

Les deux vallées équivalentes de la sous-bande  $E_o$  (ou  $E_1$ ) présentent une masse effective plus faible que celle des quatre vallées de la sous-bande  $E'o$ , selon la direction du champ électrique de dérive. Par conséquent un porteur de la sous-bande  $E_o$  ou ( $E_1$ ) sera plus "échauffé" qu'un porteur de la sous-bande  $E'o$  à champ égal. On peut donc s'attendre à ce que, sous l'effet d'un champ électrique élevé les porteurs chauds de la sous-bande  $E_o$  (ou  $E_1$ ) aient tendance à effectuer un grand nombre d'interactions les amenant à la sous-bande la moins chaude c'est à dire  $E'o$  et un phénomène de repopulation des vallées froides peut alors se produire. C'est ce qui apparaît sur la figure 28 où nous avons reporté l'évolution des populations des sous-bandes  $E_o$  et  $E'o$  en fonction du champ électrique de

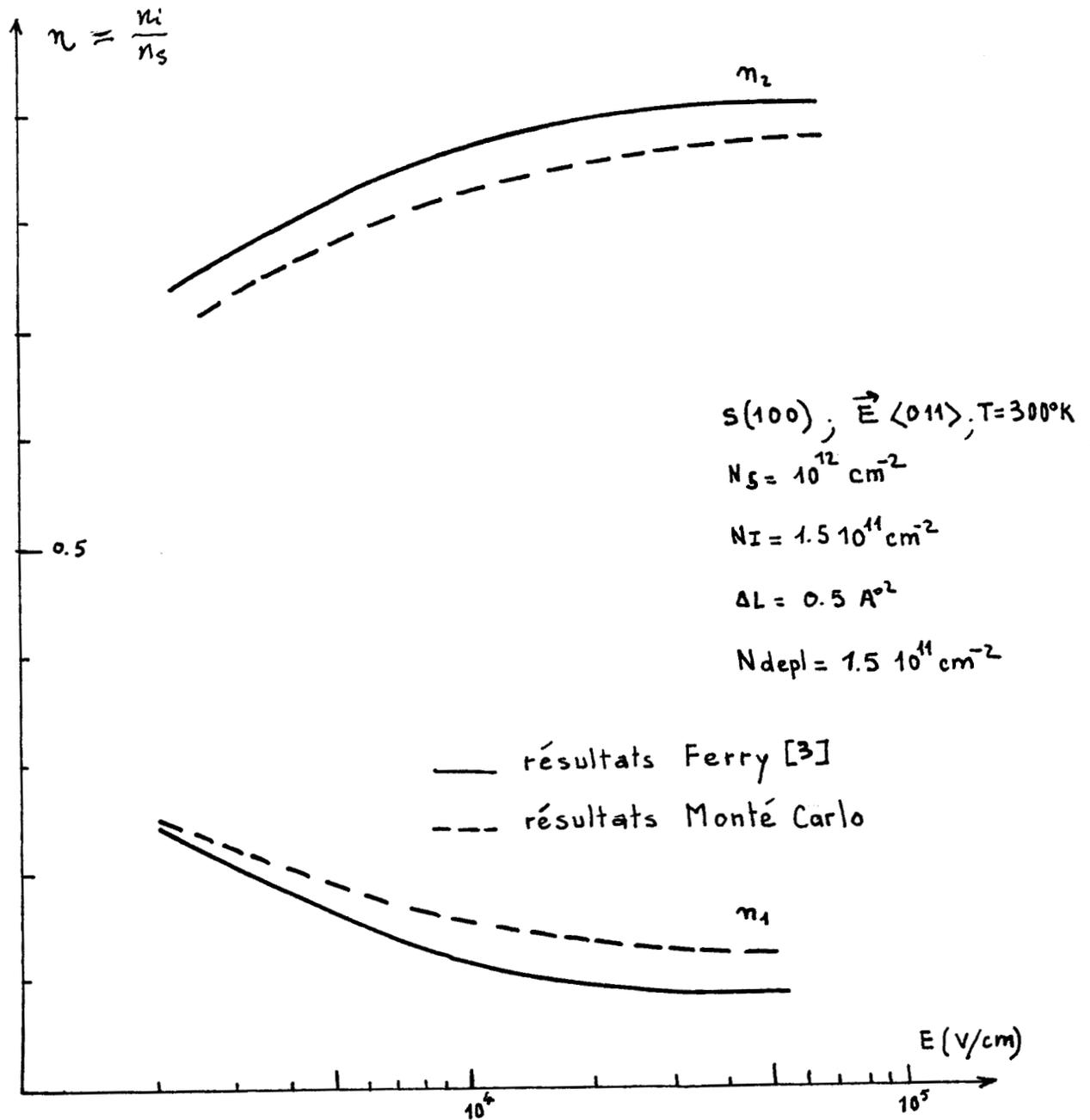


Figure 28 Evolution des populations  $n_2$  et  $n_1$  des sous-bandes  $E'_0$  et  $E_0$  respectivement en fonction du champ électrique de dérive.



dérive à la température ambiante pour une densité de porteurs de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , une densité de charges d'oxyde  $1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et un produit des coefficients de rugosité de surface valant  $0.5 \text{ \AA}^2$ . De la même façon nous avons reporté les résultats analytiques obtenus par FERRY [3] dans les mêmes conditions et on constate qu'il y a concordance entre les deux types de résultats.

### III.3.3 Evolution de la mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs

Nous avons reporté sur la figure 29, à la fois, l'évolution de la mobilité ohmique expérimentale [18] et celle obtenue par simulation numérique à la température ambiante pour une densité de charges d'oxyde de  $1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et un produit de rugosité de surface de  $0.5 \text{ \AA}^2$ .

Il convient de noter le bon accord théorie-expérience dans toute la gamme de mesure, et particulièrement pour les densités de porteurs importantes; ce qui n'était pas observé dans le cas où seule la sous-bande  $E'o$  était considérée. Ce résultat confirme l'importance de la contribution de la sous-bande  $E_o$  aux phénomènes de transport électronique. En effet, toute augmentation de la densité de porteurs nécessite une augmentation du champ électrique de surface et entraîne par conséquent une augmentation de la séparation d'énergie des deux premières sous-bandes. Dans ces conditions, il est possible d'atteindre une séparation d'énergie de sous-bande telle que le transfert des porteurs de la sous-bande  $E_o$  à la sous-bande  $E'o$  est difficile en régime ohmique. On peut également remarquer, en comparant les figures 28 et 30, que, lorsque la densité des porteurs augmente, on peuple de façon préférentielle la première sous-bande ce qui a pour effet d'augmenter la mobilité de l'ensemble des porteurs.

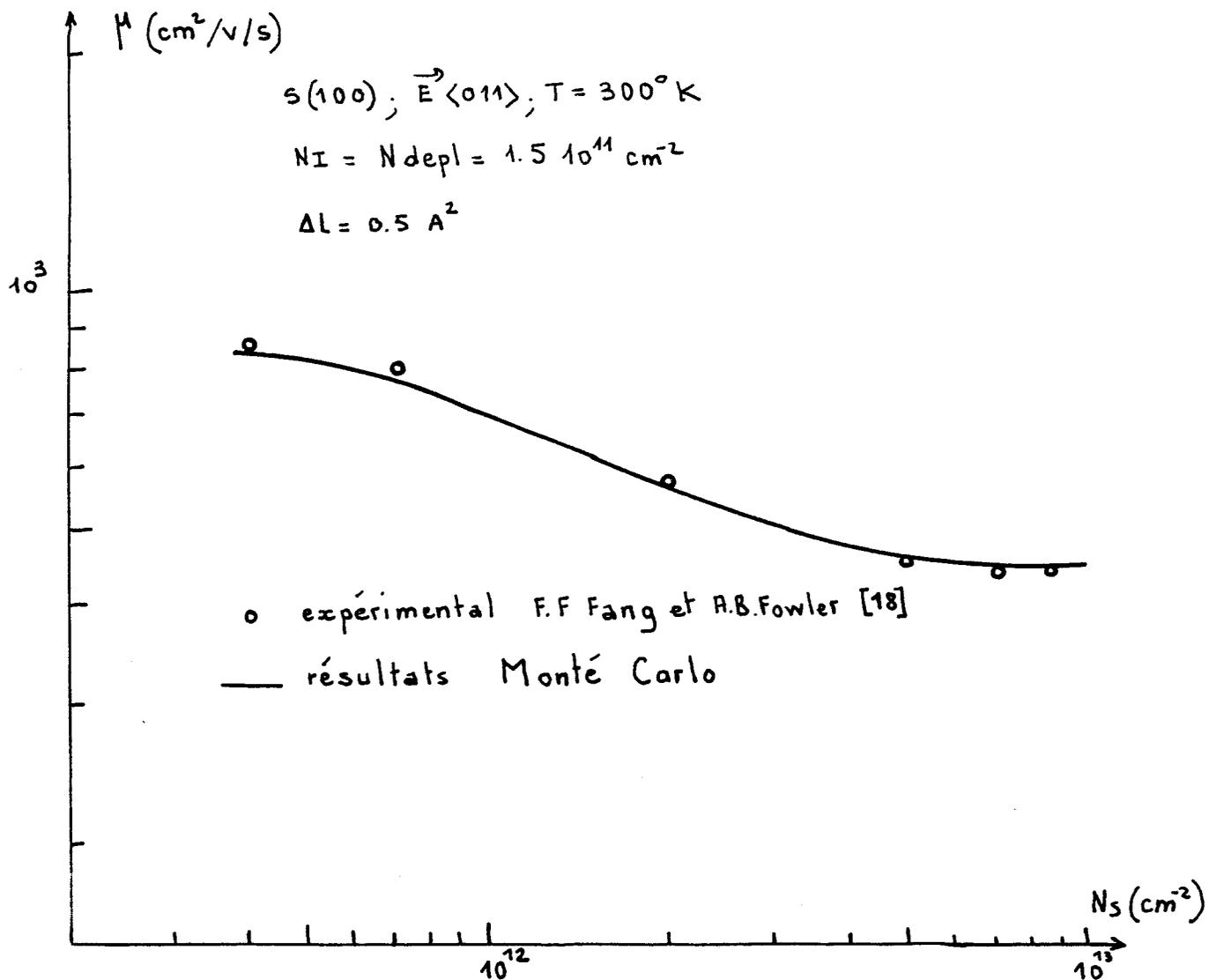


Figure 29 Mobilité ohmique en fonction de la densité des porteurs.



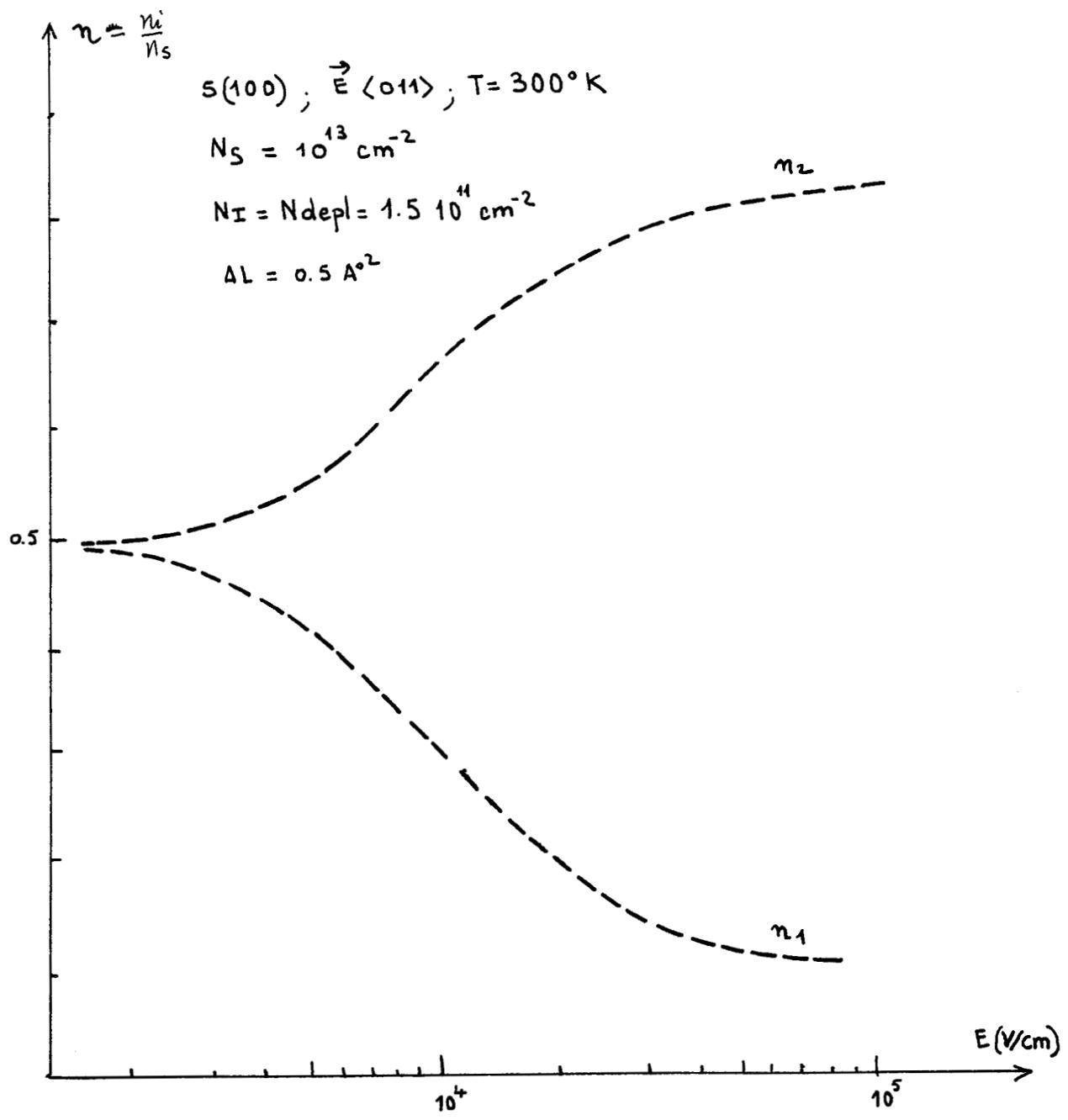


Figure 30 Evolution des populations  $n_2$  et  $n_1$  des sous-bandes  $E'0, E_0$  respectivement en fonction du champ électrique de dérive.



### III.3.4 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde

#### III.3.4.1 Basses températures

Nous avons représenté sur la figure 31, l'évolution de mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde à basse température  $T = 80^{\circ}\text{K}$ , dans les mêmes conditions que dans le paragraphe II.3.4 précédent. Nous remarquons que, pour les faibles densités de charges d'oxyde, la mobilité calculée en tenant compte des trois premières sous-bandes est plus proche de l'expérience que celle calculée en tenant compte d'une seule sous-bande  $E'_0$ . Ainsi qu'il a été observé précédemment, à cette température, la population de la sous-bande  $E_0$  est environ 40% de la population totale et la mobilité moyenne se trouve être plus élevée que la mobilité obtenue en tenant compte d'une seule sous-bande  $E'_0$ . Par contre, lorsque la densité de charges d'oxyde est élevée les collisions correspondantes deviennent alors prépondérantes et déterminent la mobilité des porteurs et on observe un accord entre la théorie et l'expérience.

#### III.3.4.2 Température ambiante

Nous nous sommes aussi intéressés à l'influence de la densité de charges d'oxyde sur la mobilité des porteurs à la température ambiante. Pour ce faire, nous avons représenté, sur la figure 32, l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde à la température ambiante, pour une densité de porteurs  $N_S = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , et sans effet de la rugosité de surface.



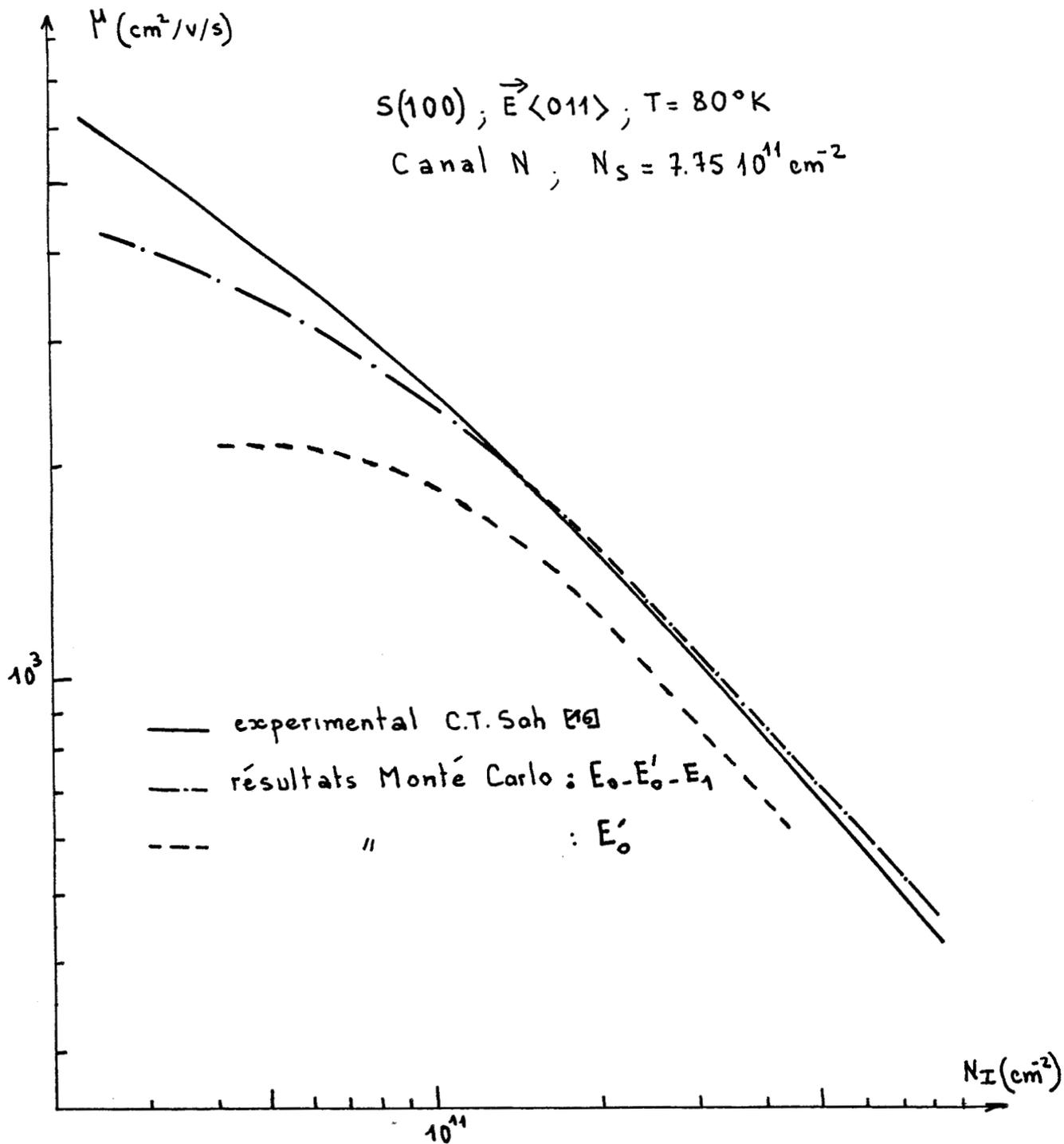


Figure 31 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde.

Nous vérifions que l'effet des charges d'oxyde est moins important à la température ambiante qu'à basse température, puisque les interactions coulombiennes sont plus importantes à température basse.

### III.3.6 Mobilité ohmique en fonction de la rugosité de surface

De la même façon que précédemment, nous nous sommes intéressés à l'influence de la rugosité de surface sur la mobilité ohmique des porteurs selon la température de réseau.

Pour cela, nous avons reporté sur la figure 33, l'évolution de la mobilité calculée par simulation Monte Carlo en fonction du produit  $\Delta \times L$  des coefficients caractérisant la rugosité de surface et sans tenir compte de l'effet de la charge d'oxyde, pour deux températures de réseau différentes .

D'une façon générale, la mobilité diminue lorsque le produit  $\Delta \times L$  augmente, et cet effet est d'autant plus important que la température est basse (voir figure 33). Il apparaît que la mobilité est pratiquement indépendante du produit  $\Delta L$  lorsque celui-ci est inférieur à  $10 \text{ \AA}^2$ .

### III.3.7 Mobilité ohmique en fonction du champ de surface

Le champ électrique de surface  $E_s$ , à l'intérieur du semi-conducteur est crée par la charge d'espace formée par la densité de porteurs et par les charges de la zone désertée . Alors, ce champ est donné



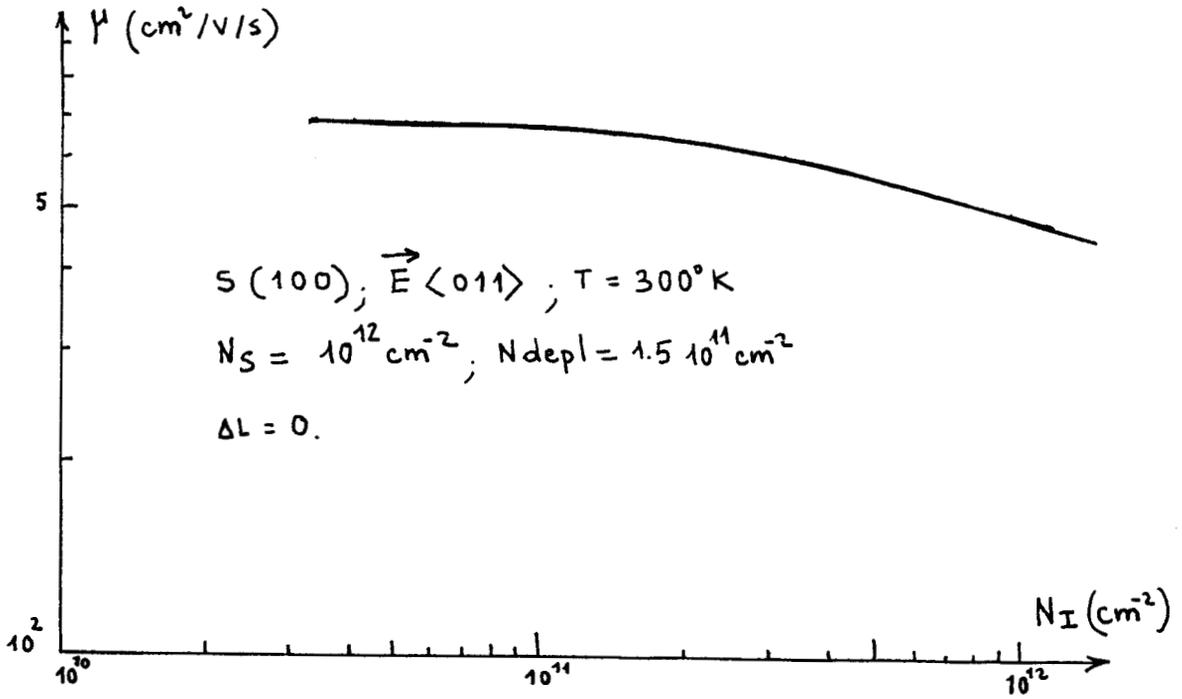


Figure 32 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde.

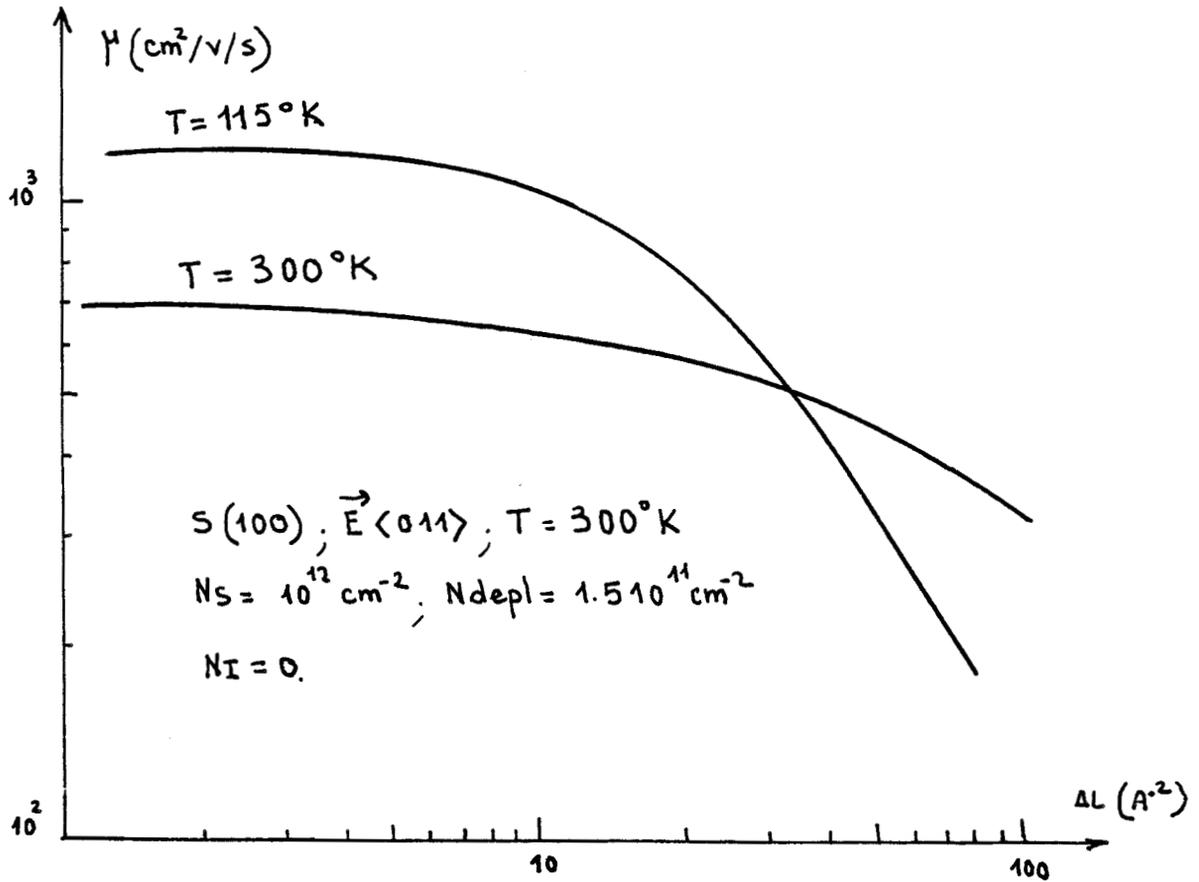


Figure 33 Mobilité ohmique en fonction de la rugosité de surface.

par la relation suivante [13] :

$$E_s = e \left( \frac{N_s + N_{depl.}}{\epsilon_{si}} \right)$$

Ainsi, nous sommes en mesure d'étudier la mobilité des porteurs en fonction du champ de surface.

Nous avons représenté sur la figure 34 l'évolution de la mobilité ohmique expérimentale obtenue par NELSON et al. [29] en fonction du champ de surface, pour une densité de charges de  $3,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . De la même manière, nous avons reporté l'évolution de la mobilité ohmique calculée par simulation pour la même densité de charges d'oxyde. Notons la bonne concordance entre la théorie et l'expérience.

### III.3.8 Conclusion

Dans ce paragraphe, nous avons étudié les phénomènes de transport électronique dans une couche d'inversion, en tenant compte, des trois premières sous-bandes  $E_0$ ,  $E'_0$ ,  $E_1$  caractérisées chacune par une température électronique donnée.

Les mécanismes d'interactions des porteurs avec le réseau ont été décrits en utilisant les constantes de couplage du volume et en tenant compte de la nature bidimensionnelle du mouvement des porteurs.

En champ faible, la mobilité ohmique calculée par simulation Monte Carlo correspond à celle trouvée expérimentalement et ceci pour une gamme de température s'étendant de  $80^\circ\text{K}$  à  $300^\circ\text{K}$ . Un phénomène de repopulation résulte du transfert des porteurs des sous-bandes  $E_0$  et  $E_1$  dans la sous-bande  $E'_0$  lorsque le champ de dérive augmente.

En champ fort, comme dans le cas où seule la sous-bande  $E'_0$  est occupée, la vitesse de saturation des porteurs calculée est voisine de celle qu'ils auraient en volume.



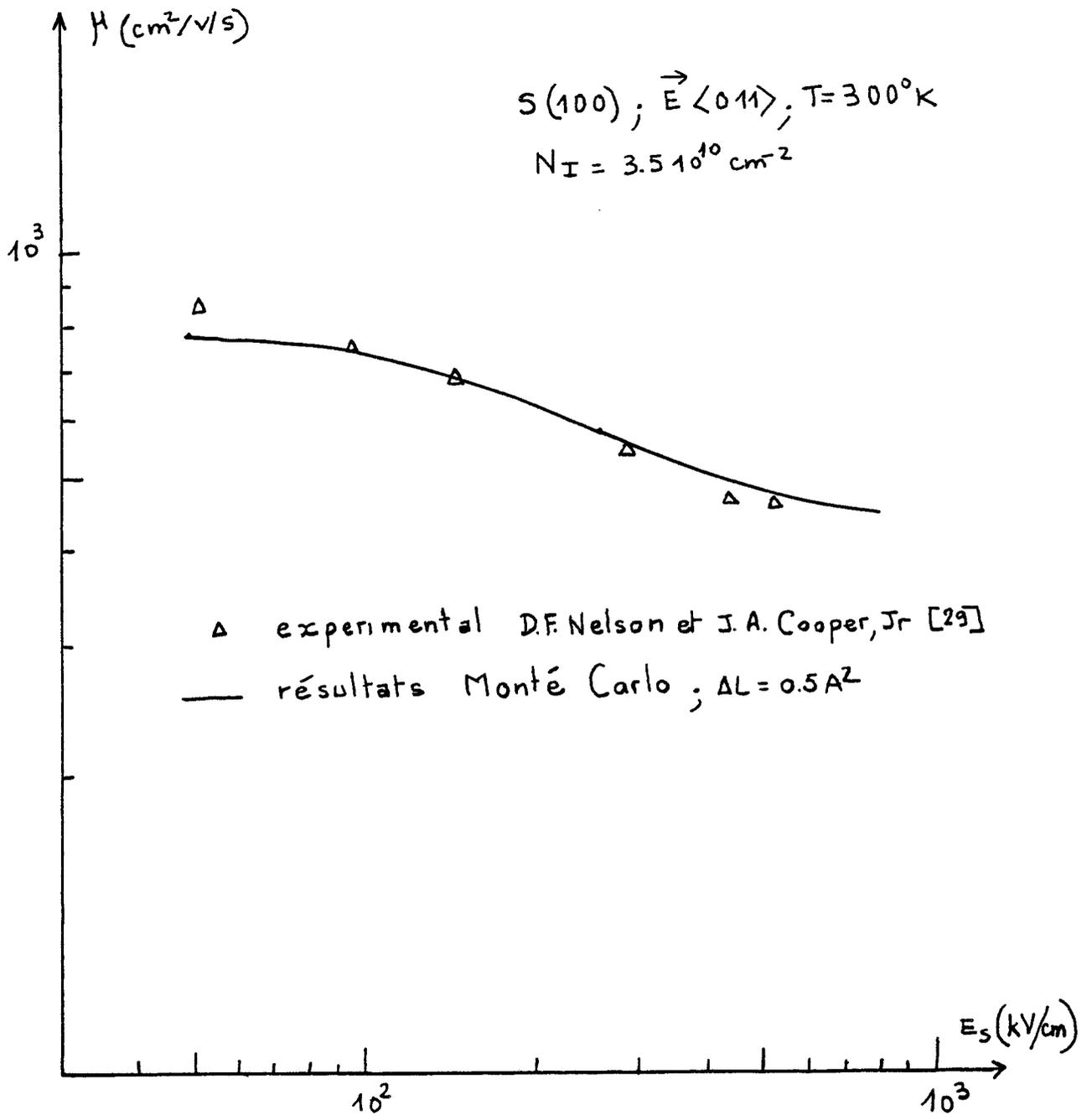


Figure 34 Evolution de la mobilité ohmique en fonction du champ de surface.



## CONCLUSION

Dans une couche d'inversion, la mobilité ohmique est plus faible que celle obtenue pour le matériau en volume. Cette réduction de mobilité est produite par l'addition des mécanismes d'interactions qui se manifestent au niveau de la surface. Ce sont essentiellement les interactions avec les charges d'oxyde et les interactions avec la rugosité de surface. La prise en compte de ces interactions ainsi que la nature bidimensionnelle du mouvement des porteurs et des trois premières sous-bandes permet de rendre compte de façon satisfaisante de l'ensemble des résultats expérimentaux donnant la mobilité ohmique et ceci dans une gamme de température  $80^{\circ}\text{K} - 300^{\circ}\text{K}$ . En champ fort, la vitesse de saturation calculée est proche de celle du volume et en cela diffère de celle obtenue expérimentalement pour les couches d'inversion.



## BIBLIOGRAPHIE

- 1 D.K.FERRY, K.HESS et P.VOGL,  
VLSI Electronics: microstructure science, vol 2.
- 2 P.K.BASU,  
J.Appl.Phys., vol.48, p.350 (1977)
- 3 D.K.FERRY,  
Phy.Rev.B, vol.14, p.5364 (1976)
- 4 P.K.BASU,  
Solid state Communications, vol.27, p.657 (1978)
- 5 K.HESS et C.T.SAH,  
J.Appl.Phys., vol.45, p.1254 (1974)
- 6 K.HESS et C.T.SAH,  
Phys.Rev.B, vol 10, p.3375 (1974)
- 7 F.STERN,  
Phy.Rev.B, vol.5, p.4891 (1972)
- 8 K.NAKAMURA,  
Surf.sci., vol.58, P.48 (1976)
- 9 P.DAS, D.K.FERRY et A.H.BARR,  
Surf.sci., vol.73, p.147 (1978)

- 10 K.HESS, A.NEUGROSCHER, C.C.SHINE et C.T.SAH,  
J.Appl.Phys., vol.46, p.1721 (1975)
- 11 K.HESS, G.DORDA et C.T.SAH,  
Solid state Communications, vol.19, p.471 (1976)
- 12 D.K.FERRY,  
Thin Solid Films, vol.56, p.243 (1979)
- 13 F.STERN,  
Crit.Rev.Solid State sci., vol.4, p.499 (1974)
- 14 C.M.KROWNE et J.W.HOHN-KENNEDY,  
Surf,sci., vol.46, p.232 (1974)
- 15 S.M.SZE,  
Physics of semiconductor Devices, Ed.John Wiley et Sons,p.394 (1981)
- 16 C.T.SAH, T.H.NING et L.L.TSCHOPP,  
Surf.sci., vol.32, p.561 (1972)
- 17 T.H.NING et C.T.SAH,  
Phys.Rev., vol.6, p.4605 (1972)
- 18 F.F.FANG et A.B.FOWLER,  
Phys.Rev., vol.169, P.619 (1968)
- 19 A.HARTSTEIN, T.H.NING et A.B.FLOWER  
Surf.sci., vol.58, p.178 (1976)

- 20 R.W.COEN et R.S.MULLER,  
Solid State Electronics, vol.21, p.35 (1980)
- 21 B.R.NAG,  
Theory of electrical transport in semiconductors Pergamon Press  
p;195 (1972)
- 22 P.P.DEBYE, E.M.CONWELL,  
Phy.Rev., vol.93, pp.693 (1954)
- 23 J.P.NONGIER, J.C.VAISSIERE, D.GASQUET, J.ZIMMERMANN and E.CONSTANT,  
J.Appl.Phy., vol.52, p.825 (1981)
- 24 D.K.FERRY,  
Solid State electronics, vol.21, p.115 (1978)
- 25 D.LONG,  
Phys.Rev., vol.120, p.2024 (1960)
- 26 F.STERN et W.E.HOWARD,  
Phys.Rev., vol.163, p.816 (1967)
- 27 D.K.FERRY,  
Surf.sci, vol.57, p.218 (1976)
- 28 W.A.HARRISON,  
Phy.Rev.B, vol.104, p.1281 (1956)
- 29 High Field surface drift velocities in silicon by  
D.F.NELSON and J.A.COOPER J.r, Urbana Illinois, Juin(1982)

## 2<sup>ÈME</sup> PARTIE

### CHAPITRE II :

#### MODELE A DEUX COUCHES

## INTRODUCTION

La description rigoureuse du fonctionnement des transistors MOS nécessite une simulation tenant compte du caractère bidimensionnel du dispositif [1]. Cette résolution conduit à des temps de calcul considérables. L'idée de base du modèle décrit dans ce chapitre est de diviser l'espace source-drain en tranches de largeur  $\Delta x$  ( figure 35 ) et de calculer les paramètres de transport électronique dans une seule tranche. Le problème bidimen-

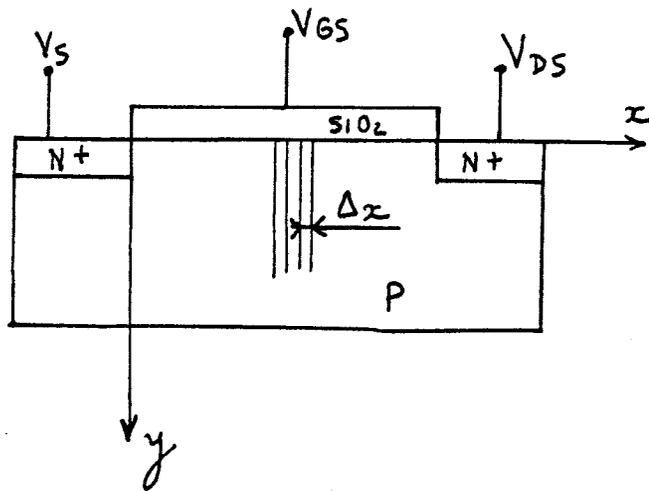


figure 35 : Structure du transistor MOS conventionnel

sionnel est alors remplacé par un problème unidimensionnel. Cette façon de procéder revient à admettre que le champ de dérive est uniforme dans le canal.

Deux orientations d'interface seront considérées : S(100) et S(111). Nous exposerons quelques aspects caractéristiques du transport dans le cas d'une orientation de surface S(100) et nous montrerons la validité du modèle que nous allons présenter en régime ohmique pour cette orientation de l'interface. Par contre, nous montrerons l'insuffisance de ce modèle dans le cas d'une orientation de l'interface selon S(111).

## I PRESENTATION DU MODELE

### I.1 LE MODELE ET SES HYPOTHESES

Dans le modèle de composant que nous envisageons, nous supposons que les hypothèses suivantes sont satisfaites :

- L'interface Si - SiO<sub>2</sub> est supposée parfaitement plane
- Le canal de type N en régime d'inversion est bien formé et le champ de dérive  $y$  est uniforme
- La collision des porteurs avec la surface ou l'interface Si - SiO<sub>2</sub> est de type spéculaire ou diffus, comme nous l'avons vu lors de la simulation d'un film ( Partie 1 )
- Les charges d'état de surface, les charges ioniques dans l'oxyde ne sont pas prises en compte
- Les phénomènes de génération-recombinaison dans la charge d'espace superficielle sont négligés
- Loin de l'interface Si - SiO<sub>2</sub>, les phénomènes de transport électronique sont identiques à ceux du volume [2] .

Une façon d'élaborer ce modèle est de considérer une structure théorique très simple; qui est représentée sur la figure 36 , et pour laquelle nous considérons que l'interface Si-SiO<sub>2</sub> est une surface plane parfaite et que la structure de bande de conduction au voisinage de la surface est identique à celle du volume.

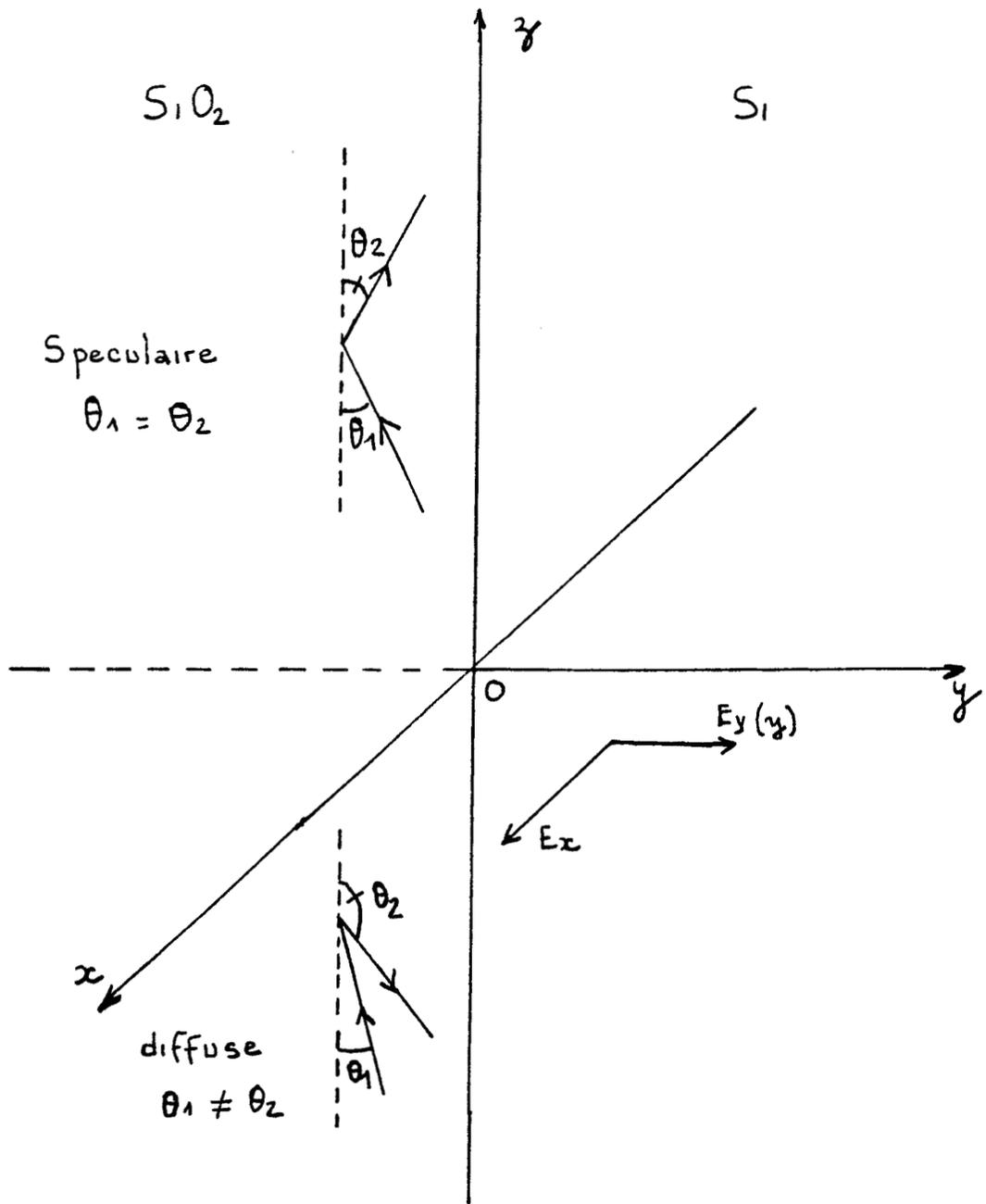


Figure 36 Caractéristiques des "collisions" à l'interface  $Si-SiO_2$



Pour étudier cette situation, nous traiterons le cas présenté sur la figure 37 qui est très voisin de celui rencontré dans le MOSFET.

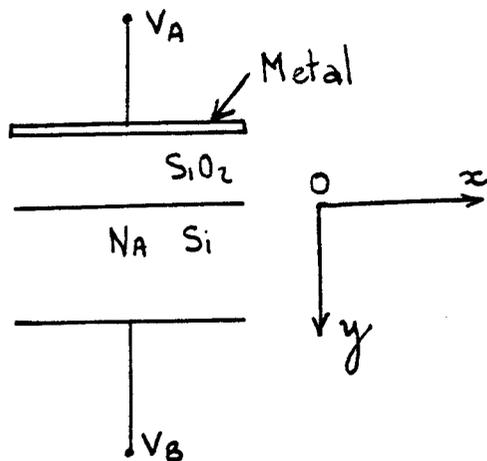


Figure 37 Schéma d'une structure MOS

L'intensité du champ électrique perpendiculaire à l'interface Si-SiO<sub>2</sub> pourra être commandée par la tension  $V_A - V_B$ .

La simulation Monte Carlo du composant sera effectuée en présence d'un champ électrique de dérive  $E_x$  dû à la polarisation source-drain, uniforme et parallèle à l'interface et d'un champ perpendiculaire  $E_y$  qui tient compte globalement des effets de charges d'espace à l'interface. Pour cela on introduit dans la détermination du mouvement des porteurs, l'effet du champ électrique macroscopique  $E_y$ , produit par les électrons et les impuretés qui, en pratique, est calculé à partir de l'équation de POISSON à une dimension. Ceci se fait facilement connaissant à chaque instant et en tout point de la structure la densité volumique des porteurs et des impuretés, selon la direction perpendiculaire à la surface. Nous imposerons la valeur du champ électrique à la surface  $E_y(o) = E_s$  par l'intermédiaire de la tension appliquée sur la grille du dispositif. Nous calculons ainsi, en fonction



du champ électrique de dérive  $E_x$ ,  $E_s$  jouant le rôle de paramètre, l'évolution de la vitesse longitudinale  $v_x$ , l'influence du champ électrique  $E_y$  et de la surface sur la mobilité des porteurs ainsi que le profil de concentration électronique  $n(y)$  perpendiculairement à la surface. Nous déterminons également la variation de la vitesse de dérive  $v_x(y)$  en fonction de la profondeur  $y$  dans le semi-conducteur pour un champ  $E_x$  donné.

## I.2 MISE EN OEUVRE DE LA METHODE ET SIMULATION MICROSCOPIQUE

D'abord, nous supposons que le processus de surface est entièrement spéculaire, puis parfaitement diffus. Les résultats sont comparés à ceux obtenus expérimentalement par COEN et MULLER [5] et ceux de NELSON et COOPER [21].

Nous considérons la structure MOS présentée en figure 37. Le composant est divisé, parallèlement à l'axe  $\vec{ox}$ , en tranches dont l'épaisseur  $\Delta y_j$  ( $j = 0, 20$ ) diminue au voisinage de la surface (ces épaisseurs varient de  $0,1 \mu\text{m}$  à  $10 \text{ \AA}$ ). Ceci permet d'augmenter la précision du calcul des diverses valeurs moyennes, car la quasi totalité des porteurs se trouvent accumulés à la surface. Les données de structure du canal sont les suivantes :

- Il s'agit d'un canal de type N, de dimensions géométriques  $(S, \delta)$  ( $S$  étant l'aire de la surface et  $\delta$  l'épaisseur du canal).
- Sa carte de dopage en atomes accepteurs  $N_A$  est supposée uniforme selon les directions  $\vec{oy}$  et  $\vec{ox}$ .

Nous y ajoutons le nombre total d'électrons  $N_E$ , utilisés pour la simulation. A l'aide du principe de neutralité électrique, nous déterminons l'aire de la surface du canal:

$$S = \frac{N_E}{\epsilon_{si} E_S - N_A \times \delta}$$

où  $\epsilon_{si}$  est la permittivité diélectrique du matériau.

En ce qui concerne le traitement des collisions de surface, nous conservons le même traitement que celui utilisé dans le cas du film. La structure de bande de conduction au voisinage de la surface est celle du silicium en volume. En plus des diverses collisions que les porteurs peuvent subir dans le volume [2], s'ajoutent, les collisions de surface qui sont considérées parfaitement élastiques, intravallées et sont, soit parfaitement diffuses, soit parfaitement spéculaires.

Selon la direction  $\vec{ox}$ , un porteur est soumis au champ électrique de dérive  $E_x$  supposé indépendant de la position suivant l'axe  $\vec{oy}$  et subit l'influence d'un champ électrique  $E_{yj}$  calculé à l'aide de l'équation de POISSON d'après sa position spatiale dans le composant. Ce champ électrique est relié à la permittivité  $\epsilon$  du matériau et à la densité volumique de charge  $\rho$  par :

$$\text{div} (\epsilon_{si} \vec{E}) = \rho$$

ce qui s'écrit dans notre cas :

$$\left( \frac{dE}{dy} \right)_{y_j} = \frac{\rho}{\epsilon_{si}} = \frac{q}{\epsilon_{si}} (n(y_j) + N_A)$$

puisque la composante du champ  $E_x$  est supposée indépendante de  $x$ ,  $n(y_j)$  représente la densité volumique des électrons libres dans la  $j^{\text{ième}}$  case et où l'électron porte la charge  $q$ . La discrétisation spatiale de l'échantillon donne alors les relations suivantes :

$$\left(\frac{dE}{dy}\right)_{y_j} = \frac{q}{\epsilon_{si}} \left( \frac{NBE(y_j)}{S \cdot \Delta y_j} + N_A \right)$$

où  $NBE(y_j)$  est le nombre d'électrons dans la  $j^{\text{ième}}$  case. On en déduit :

$$E_y(j+1) = E_{y_j} - \frac{q}{\epsilon_{si}} \Delta y_j \left( \frac{NBE(y_j)}{S \cdot \Delta y_j} + N_A \right)$$

où  $E_y(j+1)$  est le champ électrique dans la case  $j+1$

Pour la première case, c'est à dire en  $j = 0$ , nous imposons  $E_y(0) = E_G$ .

Le champ électrique  $E_y$  variant sur des distances très courtes dans des proportions très importantes, nous affinons sa variation avec  $y$  en effectuant une interpolation linéaire entre deux valeurs successives.

## II ETUDE DU REGIME OHMIQUE

Il nous a semblé intéressant d'étudier dans quelles conditions les mécanismes de collisions de surface se manifestent avec une prédominance spéculaire ou diffuse. Pour cela, nous allons étudier tout d'abord l'évolution de la mobilité des porteurs en fonction de la température, puis en fonction du champ de surface, dans le cas des électrons en inversion le long de la surface  $S(100)$  et comparer les résultats obtenus aux données expérimentales.

### II.1 ETUDE DE LA MOBILITE OHMIQUE EN FONCTION DE LA TEMPERATURE: SURFACE S(100)

D'abord nous nous intéressons à l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la température pour des champs de surface relativement faibles.

Sur la figure 38, nous montrons les résultats obtenus par la simulation Monte Carlo dans le cas où le champ électrique de surface a pour valeur  $E_S = 160 \text{ KV/cm}$ , pour un dopage  $NA = 7.110^{14} \text{ cm}^{-3}$  et pour les deux types de collisions des porteurs.

Nous avons aussi reporté sur la même figure les résultats expérimentaux obtenus par COEN et MULLER [5].

Cette figure montre nettement trois régions distinctes ( notées I, II, III ) suivant la gamme de température.

Dans la région I : c'est à dire en basse température, nous observons que les résultats de notre modèle sont en bon accord avec l'expérience dans le cas où la collision de surface est considérée comme purement spéculaire. Par contre, il existe un écart important entre théorie et expérience dans le cas où la collision de surface est supposée parfaitement diffuse.

Dans la région III : c'est à dire à température élevée, à l'inverse de la région I, nous remarquons un bon accord entre théorie-expérience dans le cas où les collisions de surface sont supposées purement diffuses. Par contre, il y a divergence dans le cas où la collision est supposée spéculaire.

Dans la région II : c'est à dire à température moyenne, nous constatons un écart entre théorie et expérience dans les deux cas d'interaction avec la surface. Néanmoins on notera que les résultats expérimentaux sont encadrés par les deux types de résultats théoriques. Il est donc raisonnable de considérer que, dans cette région le mécanisme de collision de surface est une combinaison appropriée de collisions spéculaires et diffuses.

Ce changement de mécanisme de collision de surface a été suggéré par A.MANY et al [6], et nos simulations semblent être en accord avec cette idée.

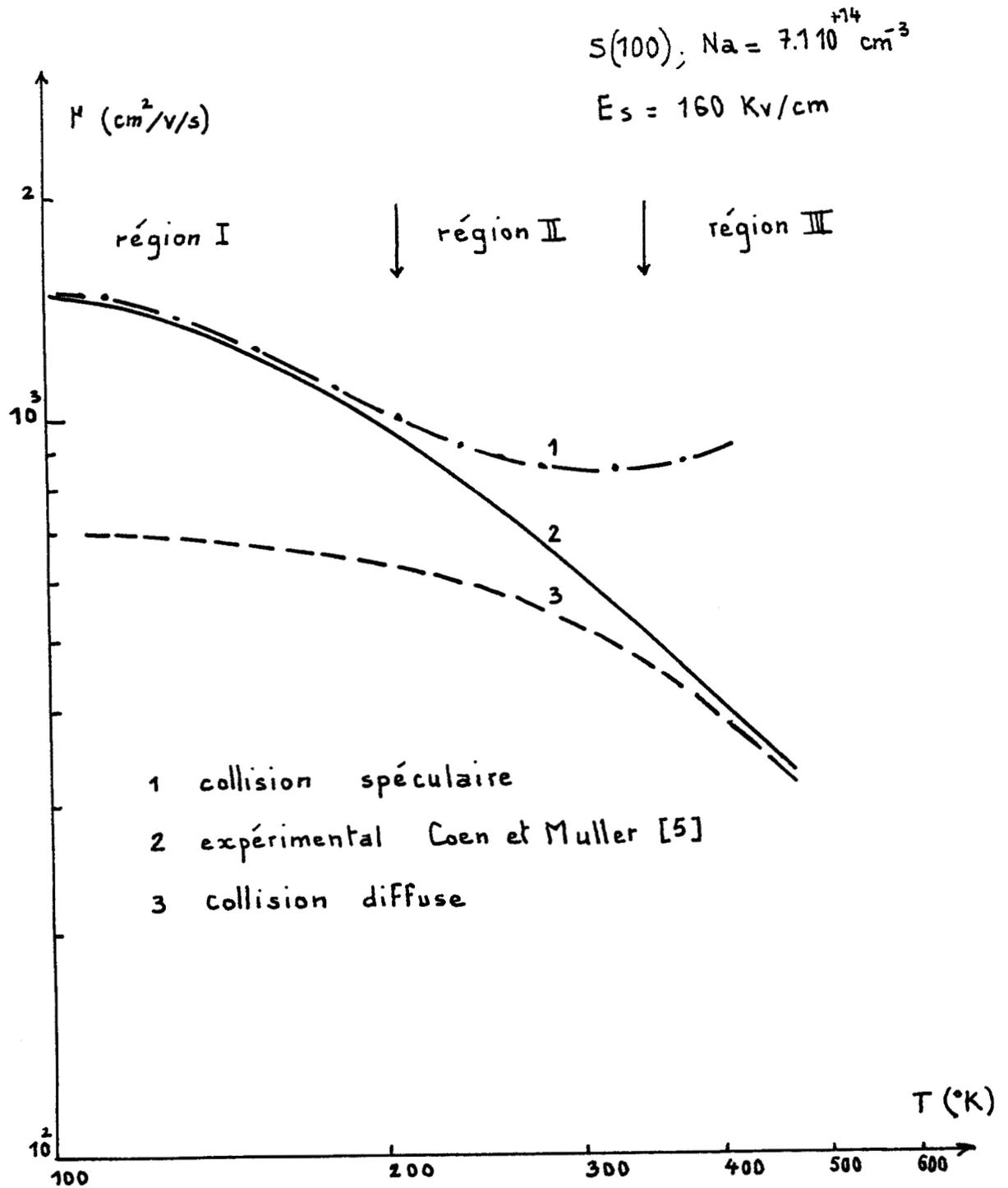


Figure 38. Mobilité ohmique en fonction de la température.



A basse température, au niveau de la surface, le mouvement des porteurs ne subit pratiquement pas d'obstacle car alors la surface se comporte comme un miroir parfait vis à vis de la trajectoire des porteurs. Par contre à température élevée, l'apparition des phonons de surface, des états de surface etc... détruit le caractère spéculaire de la surface. Il en résulte que la collision devient complètement diffuse. Enfin, aux températures intermédiaires, le type de collision n'est ni entièrement spéculaire ni entièrement diffus.

De même que précédemment, nous avons étudié l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la température pour un champ de surface  $E_S = 470 \text{ Kv/cm}$  et un dopage  $NA = 7.110^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Le résultat est représenté sur la figure 39, comparé aux résultats expérimentaux de COEN et MULLER [5] obtenus dans les mêmes conditions. Nous observons un comportement avec la température analogue au précédent : il existe également trois régions (notées I, II, III) où le mécanisme de collision de surface intervient de façon différente. Cependant, nous remarquons qu'il y a un glissement des trois régions vers les températures élevées, l'interaction avec la surface conserve alors un caractère spéculaire à des températures plus élevées que dans le cas précédent. Dans ces conditions, une étude en fonction du champ de surface  $E_S$  s'impose.

## II.2 ETUDE DU REGIME OHMIQUE EN FONCTION DU CHAMP DE SURFACE : SURFACE S(100)

Afin d'interpréter le glissement de régions observé dans le paragraphe précédent, nous avons étudié l'évolution de la mobilité ohmique en fonction du champ de surface, à la température ambiante. Le résultat est reporté sur la figure 40 avec les résultats expérimentaux de

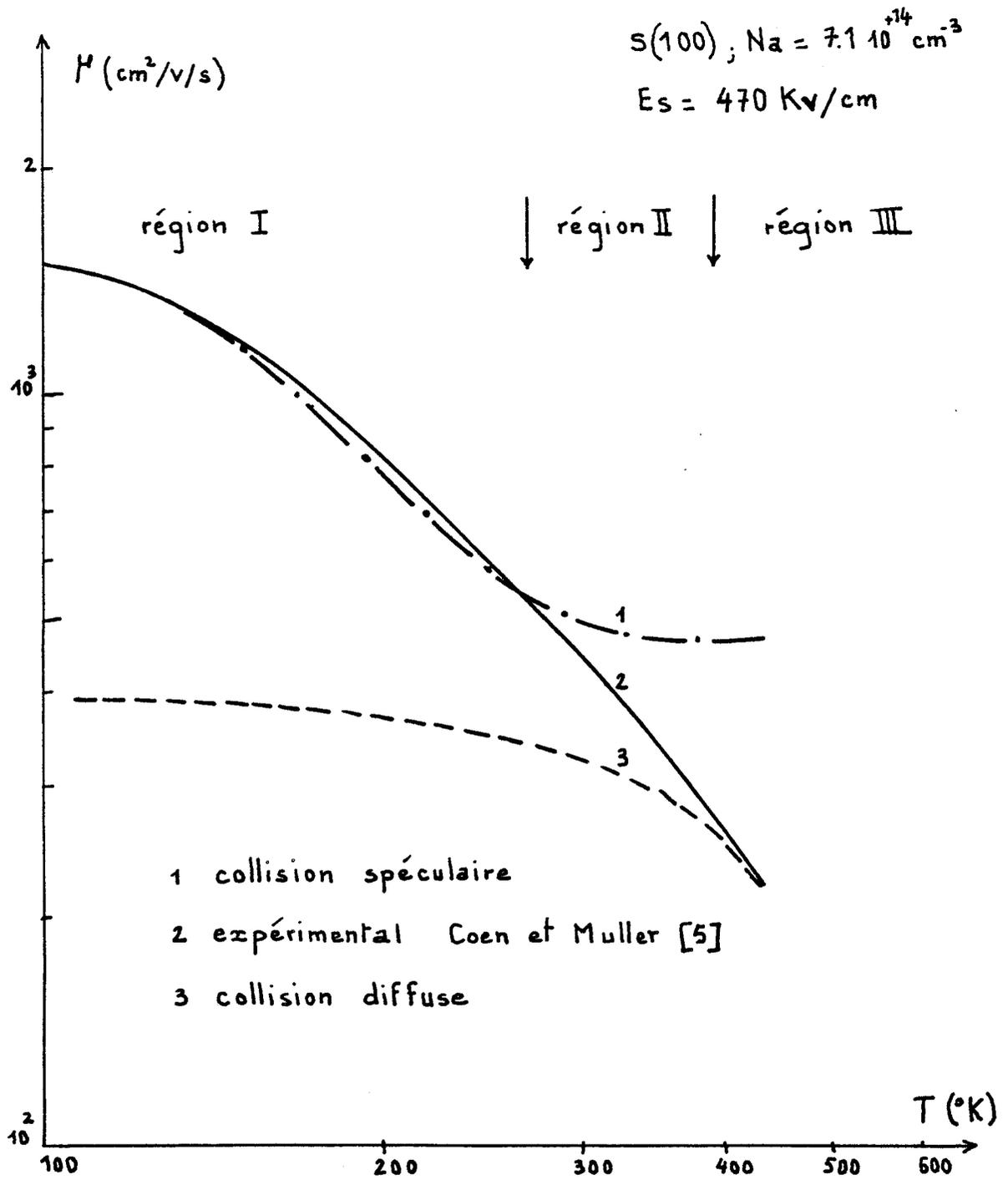


Figure 39 Mobilité ohmique en fonction de la température.



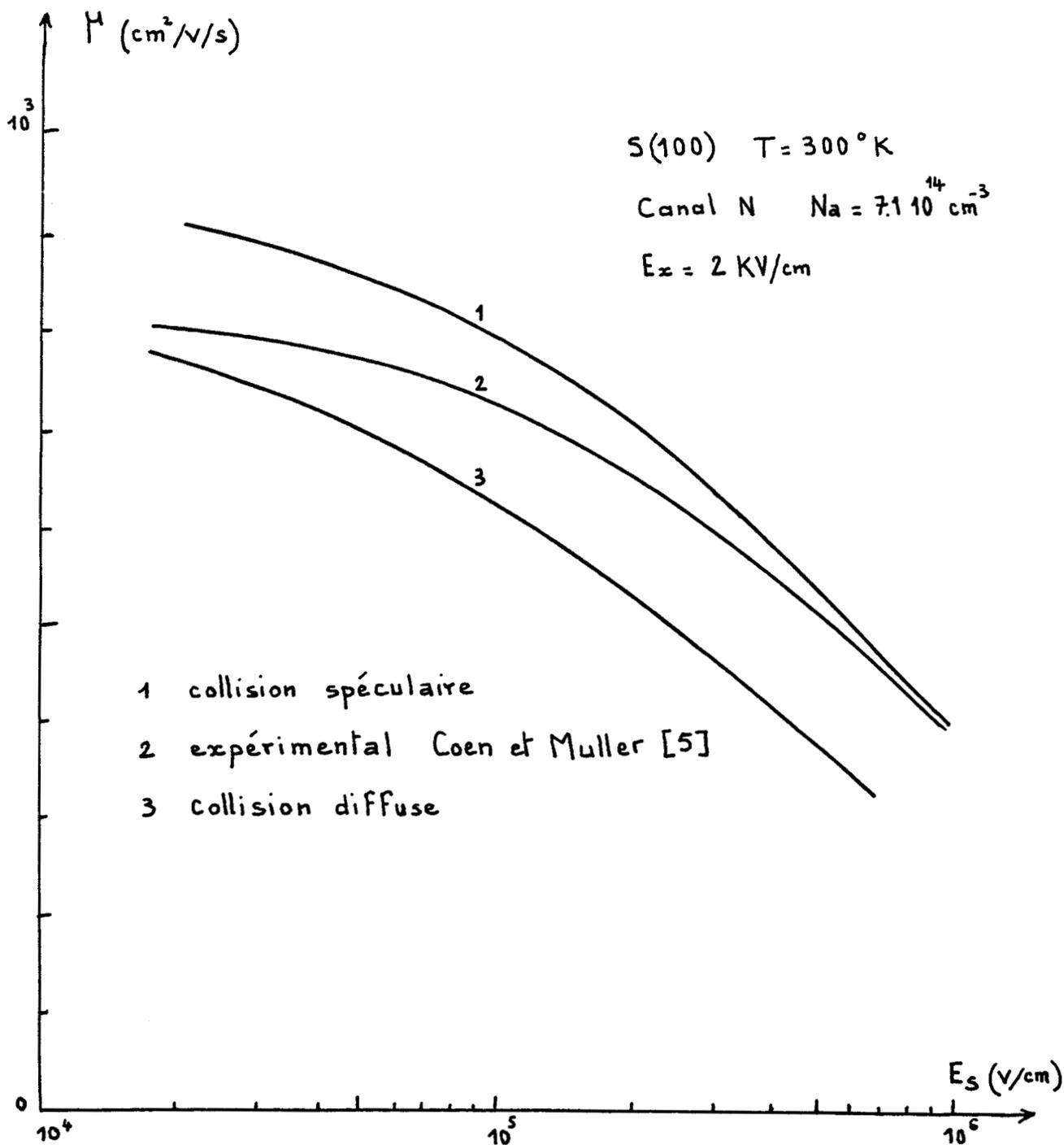


Figure 40 Mobilité ohmique en fonction du champ de surface.



COEN et MULLER [5]. Nous devons noter l'existence de trois régions où le mécanisme de collision est différent selon la valeur du champ  $E_S$ .

- Lorsque le champ  $E_S$  est relativement faible, le caractère diffus des collisions de surface est prépondérant.

- Pour les champs  $E_S$  moyens, les collisions de surface présentent à la fois un comportement spéculaire et diffus.

- Enfin pour les champs  $E_S$  très élevés, la collision tend à être parfaitement spéculaire.

Il en résulte que, le fait qu'une collision d'un porteur avec la surface soit diffuse ou spéculaire pourrait dépendre essentiellement de l'énergie de ce porteur et de la température de réseau.

Ceci, nous conduit à étudier séparément les deux comportements extrêmes de la surface d'une structure MOS, sachant qu'en réalité, ces deux comportements peuvent se manifester simultanément dans des proportions déterminées, selon la température et le champ de surface.

### III PHENOMENES DE TRANSPORT DES PORTEURS CHAUDS EN REGIME D'INVERSION

Nous considérons successivement les deux cas d'orientation de l'interface : surface S(100) et S(111)

#### III.1 RESULTATS DE LA SIMULATION. COMPARAISON AVEC LES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA LITTERATURE.

##### III.1.1 Interface S(100)

Les résultats obtenus par simulation apparaissent sur la figure 41. Nous avons tracé respectivement les caractéristiques stationnaires : vitesse-champ électrique et énergie-champ électrique pour un champ  $E_S = 160 \text{Kv/cm}$ , un dopage  $N_A = 7.110^{+14} \text{cm}^{-3}$  à la température ambiante. Le champ de dérive est là dans la direction  $\langle 100 \rangle$

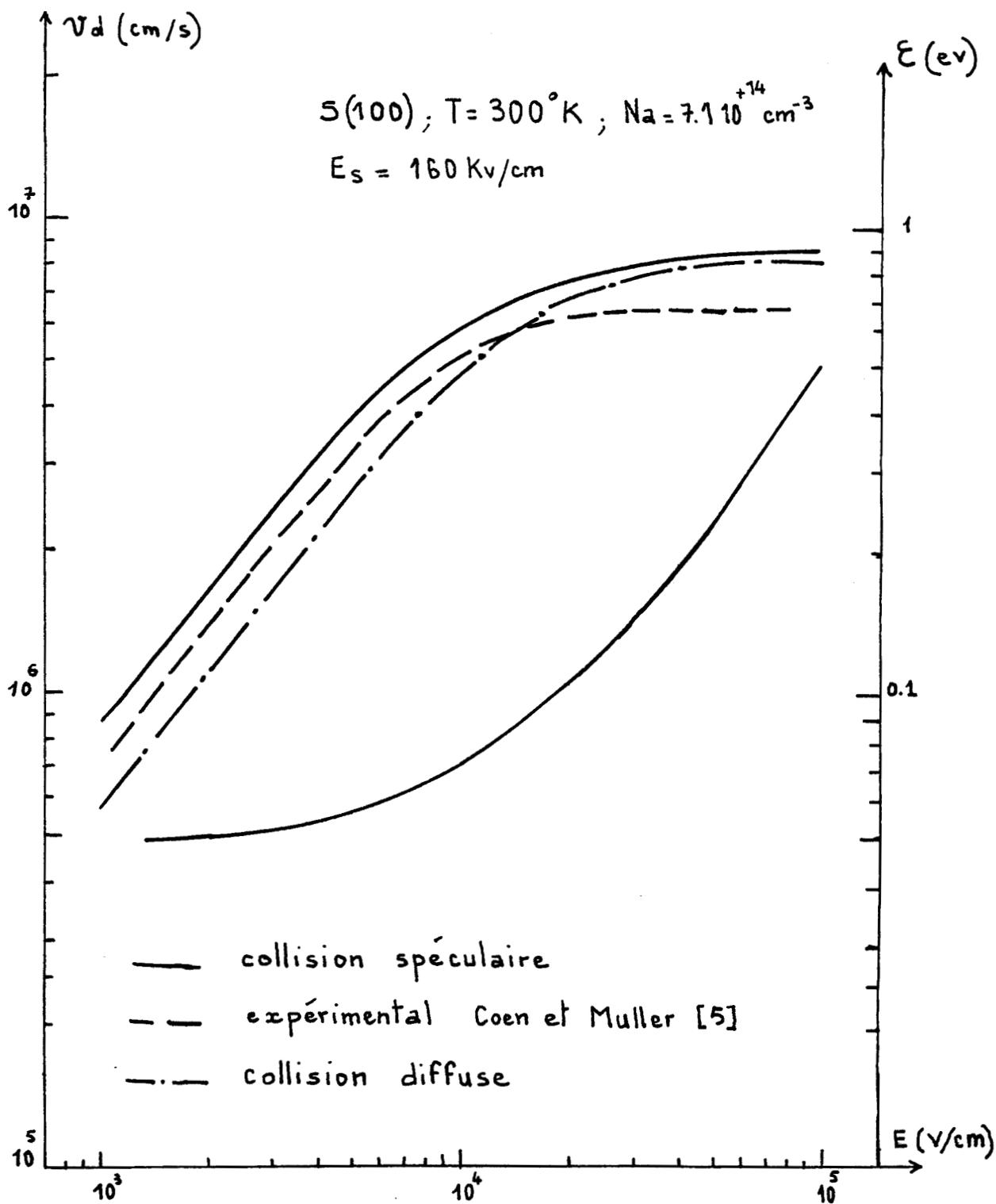


Figure 41 Evolution de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne en fonction du champ électrique.



Nous avons reporté sur la figure 41, les caractéristiques vitesse-champ électrique obtenues expérimentalement dans les mêmes conditions par COEN et MULLER [5]. Nous observons que dans un large domaine de champ électrique de dérive les résultats théoriques obtenus sur les deux comportements extrêmes de la collision de surface encadrent ceux obtenus expérimentalement.

Ainsi, à cette température on peut dire que les collisions réelles de surface s'effectuent à la fois comme des collisions spéculaires et des collisions diffuses. On peut dire aussi que le modèle à deux couches est en accord avec l'expérience, en régime ohmique et à champ moyen. Par contre, en champ fort, nous obtenons une vitesse de saturation calculée beaucoup plus élevée que celle de l'expérience.

D'autres caractéristiques peuvent être tracées sous diverses conditions. Par exemple, nous avons reporté sur la figure 42, l'évolution de la vitesse moyenne en fonction du champ électrique de dérive, pour un champ de surface  $E_G = 470$  KV/cm, un dopage  $7.10^{+14} \text{ cm}^{-3}$  et à la température ambiante. Nous avons aussi reporté la caractéristique vitesse-champ électrique expérimentale correspondante.

Dans ce cas également, nous constatons qu'en régime ohmique, il y a un bon accord entre théorie et expérience dans le cas où les collisions sont considérées comme spéculaires. Il en résulte, qu'en réalité toutes les collisions de surface s'effectuent d'une façon parfaitement spéculaire à champ de dérive pas trop élevé. Par contre, au voisinage de la saturation, la vitesse calculée a une valeur nettement plus élevée que celle donnée par l'expérience.

Il nous semble important de rappeler que les caractéristiques expérimentales mesurées par COEN et MULLER [5] sont entièrement extrapolées pour les champs de dérive supérieurs à 17 Kv/cm et que par conséquent

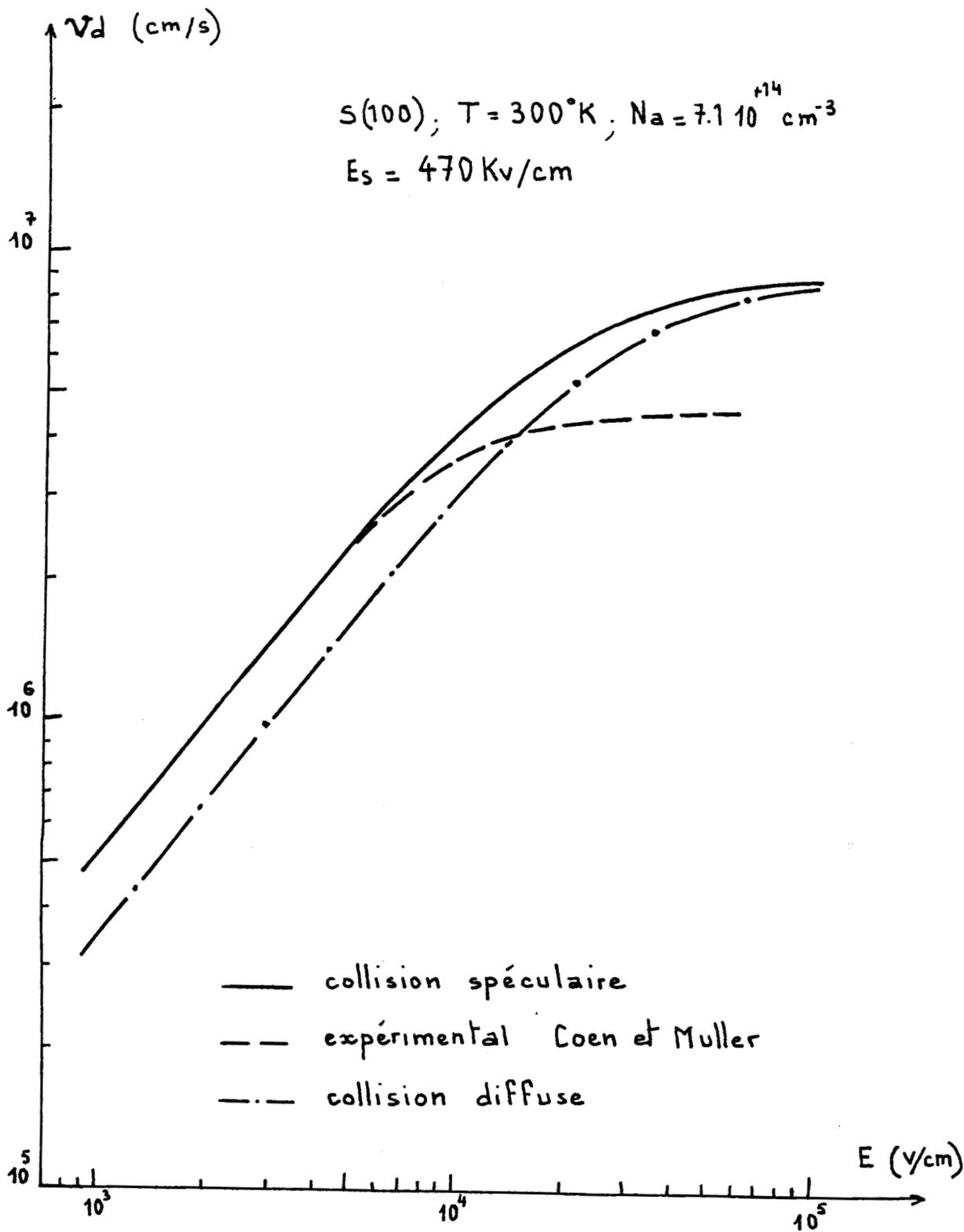


Figure 42 Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique.



l'existence d'une vitesse de saturation en champ élevé pourrait être mise en doute. Cependant, il convient de signaler que ce phénomène de saturation a été mis en évidence expérimentalement par FANG et FOWLER [8], puis par GAMBOA et al [9], mais la valeur de la vitesse limite des porteurs reste très variable suivant les auteurs. Par contre NELSON et COOPER [11] et MERKEL [10] ont montré expérimentalement, qu'en champ fort, cette vitesse limite est respectivement de l'ordre de  $9 \cdot 10^6$  cm/S et  $8 \cdot 10^6$  cm/S; et les valeurs de vitesse limite fournies par notre modèle seraient en bon accord avec l'expérimentation dans tout le domaine de champ électrique étudié.

### III.1.2 Interface S(111)

L'application du concept "spéculaire" ou "diffus" ne pose aucun problème pour une orientation de surface S(100) dans le modèle à deux couches puisque la structure de bande  $\epsilon(\vec{k})$  présente une symétrie par rapport à la direction normale à la surface. Ceci n'est pas le cas pour une orientation de surface S(111) et le concept "spéculaire" ou "diffus" devient plus difficile à cerner.

Il est nécessaire d'établir l'expression de la structure de bande de conduction dans un repère lié à la surface S(111) afin de pouvoir connaître la composante normale de la vitesse et de satisfaire la condition de conservation de l'énergie au cours de la collision.

En effet, pour appliquer le concept de collision spéculaire ou diffuse il faut :

i) choisir un repère tel que : l'un des trois axes  $o'\vec{u}$  soit perpendiculaire à la surface S(111) et les deux autres  $o'\vec{v}$  et  $o'\vec{w}$  soient parallèles au plan S(111) de manière à déterminer à la fois le déplacement et la vitesse de chaque porteur dans la direction perpendiculaire au plan S(111) ( voir figure 43 ) :

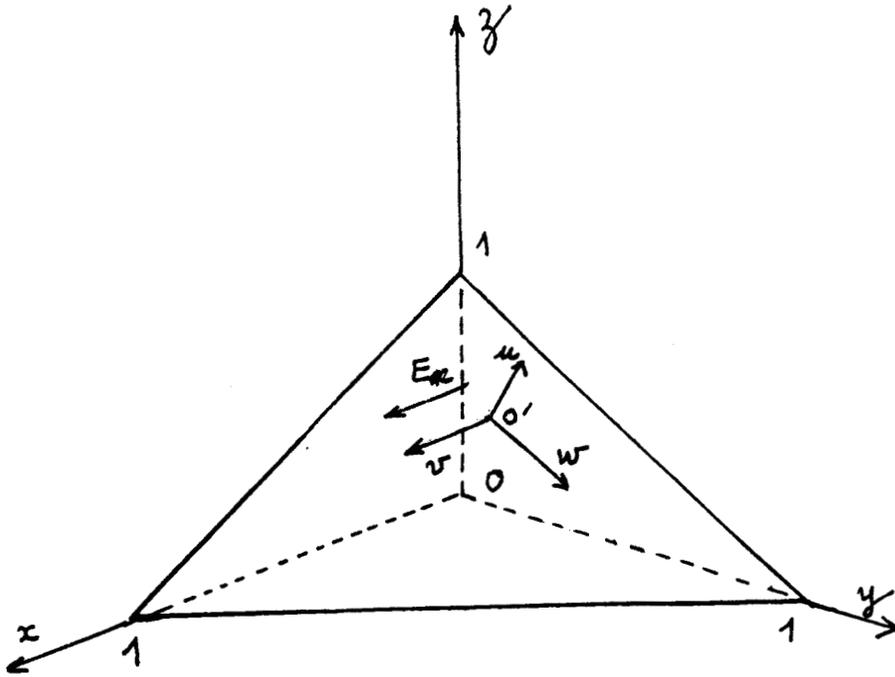


Figure 43 Orientation cristallographique d'une surface S(111)

L'axe  $o'\vec{v}$  est supposé selon la direction du champ électrique de dérive.

ii) Trouver la nouvelle expression de la structure de bande de conduction dans ce nouveau repère.

Ceci étant fait, on peut montrer que cette nouvelle forme de la structure de bande présente des termes non diagonaux ( voir annexe 2 )

$$\begin{aligned} \mathcal{E} (1 + \alpha \mathcal{E}) = \frac{\hbar^2}{2} & \left( W_{uu} k_u^2 + W_{vv} k_v^2 + W_{ww} k_w^2 + 2 W_{uv} k_u k_v \right. \\ & + 2 W_{uw} k_u k_w \\ & \left. + 2 W_{vw} k_v k_w \right) \end{aligned}$$

En supposant que la collision de surface est intravallée, il est facile de constater que tout changement de signe de la composante perpendiculaire à la surface du vecteur d'onde du porteur implique la modification des deux autres composantes du vecteur d'onde  $K_v$  et  $K_w$ , afin que la collision soit élastique.

L'application, pour une orientation de surface  $S(111)$ , de la même procédure de traitement d'une collision diffuse que pour une surface  $S(100)$  ( réorientation aléatoire à distribution uniforme sur l'hémisphère des directions possibles (voir annexe 1) ), nous permet de simuler les phénomènes de transport électronique dans une couche d'inversion canal  $(111)$  type N. Les résultats apparaissant, sur la figure 44, montrent l'évolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique et il est à noter en particulier que la mobilité expérimentale est environ deux fois plus élevée que celle obtenue par simulation.

Il semble, alors, que le concept "diffus" ou "spéculaire" nécessite une généralisation aux expressions des structures de bande présentant des termes non diagonaux.

Nous verrons dans la suite de ce mémoire, qu'avec un modèle plus réaliste, il est possible de rendre compte de façon satisfaisante des résultats expérimentaux obtenus à la fois pour les deux orientations de surface :  $S(100)$  et  $S(111)$

### III.2 ETUDE DETAILLEE DES QUANTITES CALCULEES EN FONCTION DE L'ELOIGNEMENT DE L'INTERFACE. ETUDE DE LA REPOPULATION DES VALLEES.

Nous ne nous intéressons dans ce paragraphe qu'à l'orientation de l'interface selon la direction  $S(100)$ .

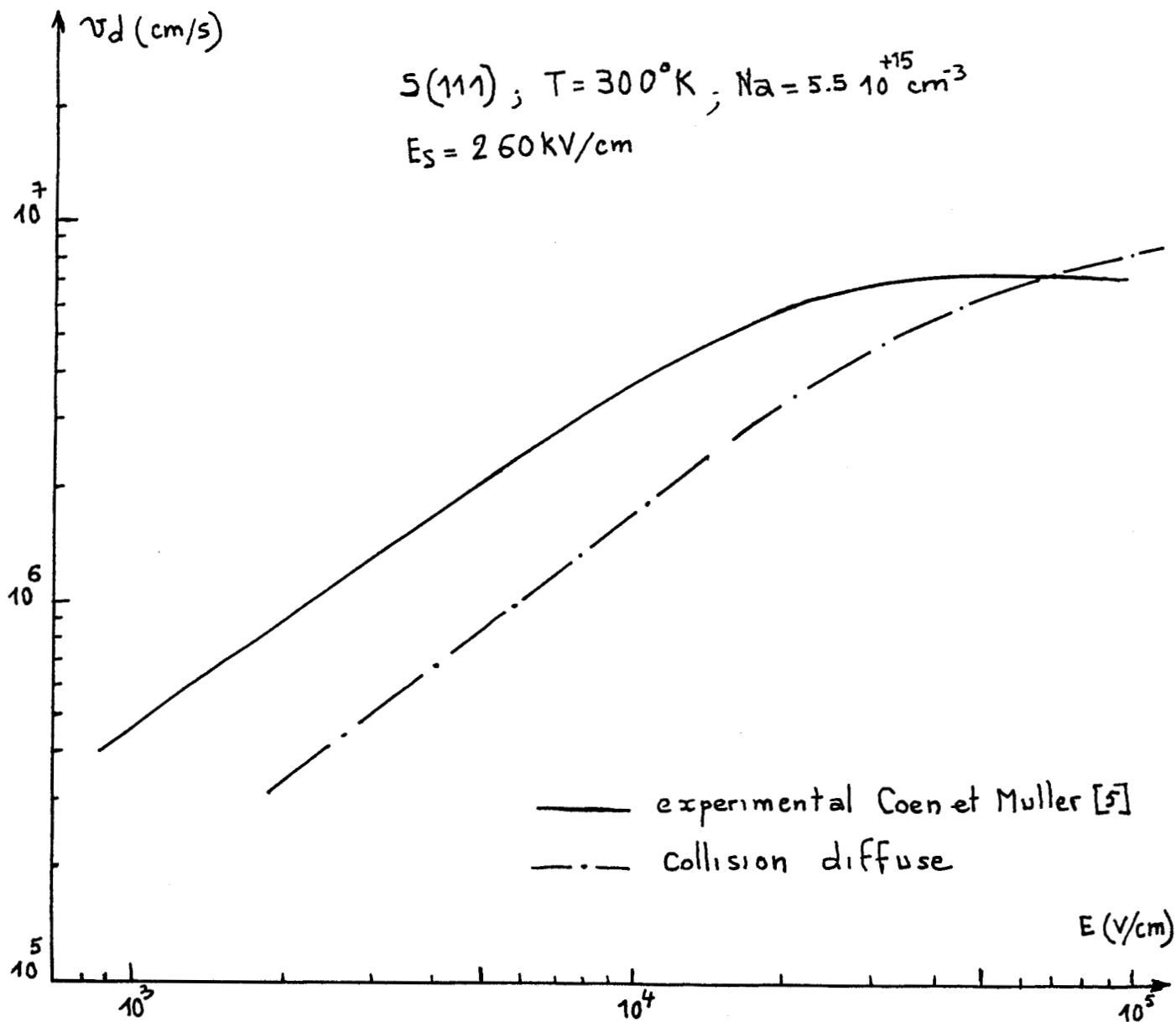


Figure 44 Evolution de la vitesse de d rive en fonction du champ  lectrique.



III.2.1 Profils de concentration, de l'énergie et de la vitesse de dérive des porteurs en fonction de la distance à la surface. Profil du champ électrique.

Des exemples de résultats obtenus sont représentés sur la figure 45 en considérant la collision de surface comme étant parfaitement spéculaire pour un champ  $E_S = 470 \text{ Kv/cm}$ , un dopage  $NA = 7.1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , à la température ambiante.

Sur la figure 45 a, nous donnons les profils de concentration des porteurs en fonction de la distance  $y$  à l'interface pour deux valeurs du champ électrique de dérive  $E_x = 5 \text{ Kv/cm}$  et  $E_x = 100 \text{ Kv/cm}$  correspondant respectivement au régime ohmique et au régime de saturation. Nous remarquons que pour la valeur la plus élevée du champ  $E_x$ , les fluctuations de vitesse sont plus importantes, les porteurs s'étalent vers l'intérieur du semi-conducteur et leur concentration à l'interface diminue notablement. L'interaction avec la surface est alors moins importante et les porteurs ont un comportement voisin de celui qu'ils auraient dans le semi-conducteur en volume. Ceci explique les grandes valeurs des vitesses limites des porteurs obtenues par le modèle à deux couches.

L'évolution correspondante du champ transversal  $E_y$  est représenté sur la figure 45b. De part l'importance des fluctuations de vitesse lorsque le champ électrique de dérive est élevé, le profil du champ électrique selon la direction  $\vec{oy}$  subit une profonde modification par rapport à ce qu'il est à champ moyen.

Nous avons reporté également sur la figure 45c, les profils de l'énergie moyenne et de la vitesse moyenne de dérive des porteurs en fonction de la profondeur  $y$  dans les mêmes conditions que précédemment. Nous remarquons que les porteurs qui se trouvent au voisinage immédiat de la



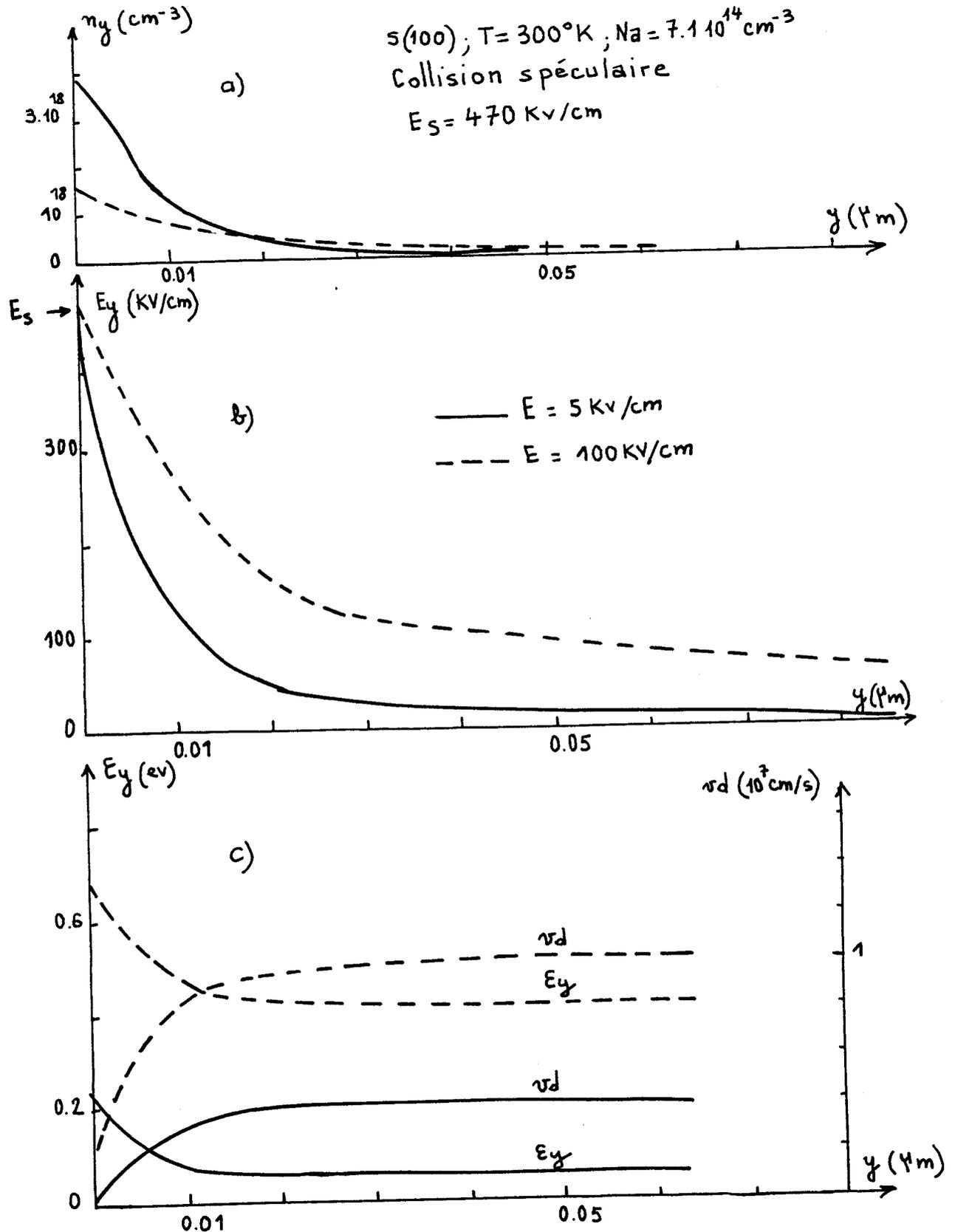


Figure 45 Evolution spatiale de la densité des porteurs (a), du champ électrique transversal (b), de l'énergie et de la vitesse de dérive des porteurs (c).



surface, sont relativement chauds et en même temps moins rapides que les porteurs qui se trouvent très loin de la surface.

### III.2.2 Phénomènes de repopulation des vallées

Nous pouvons également étudier le phénomène de repopulation des vallées en fonction du champ de dérive. Pour cela, appelons vallées froides "c" les vallées dont l'axe principal est parallèle à la direction du champ  $E_y$  et les vallées chaudes "h" les vallées dont l'axe principal est perpendiculaire à la direction du champ  $E_y$  (figure 46). Du fait de l'anisotropie de la masse effective, un porteur situé dans une vallée h ne subira pas l'influence du champ  $E_y$  de la même façon qu'un porteur situé dans une vallée c. Les porteurs des vallées h présentent une masse mt faible dans la direction du champ  $E_y$ , par contre ceux des vallées c ont une masse ml élevée dans la même direction. Il en résulte que pour un champ  $E_y$  donnée, les porteurs des vallées c seront plus "froids" que les porteurs se trouvant dans les vallées h.

En absence de champ électrique de dérive  $E_x$ , les vallées "c" seront plus peuplées que les vallées h. En appliquant un champ de dérive  $E_x$  dans la direction  $\langle 100 \rangle$ , il est possible de provoquer un phénomène de repopulation : c'est à dire une diminution de la population des vallées c quand le champ  $E_x$  augmente, et le déséquilibre maximum est obtenu pour les plus grandes valeurs de  $E_x$ . Cet effet est représenté sur la figure 47 à la température ambiante, pour un champ de surface  $E_s = 470 \text{ Kv/cm}$  et un dopage  $N_A = 7.1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Le mécanisme de surface étant supposé parfaitement spéculaire.

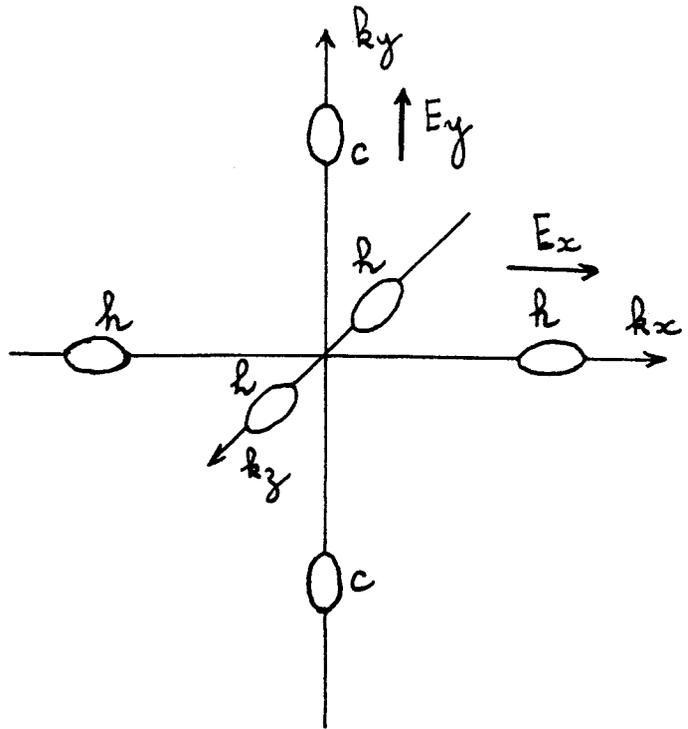


Figure 46 Positions des vallées chaudes "h" et des vallées froides "c" quand le champ électrique de surface  $E_y$  est appliqué suivant la direction  $\langle 010 \rangle$



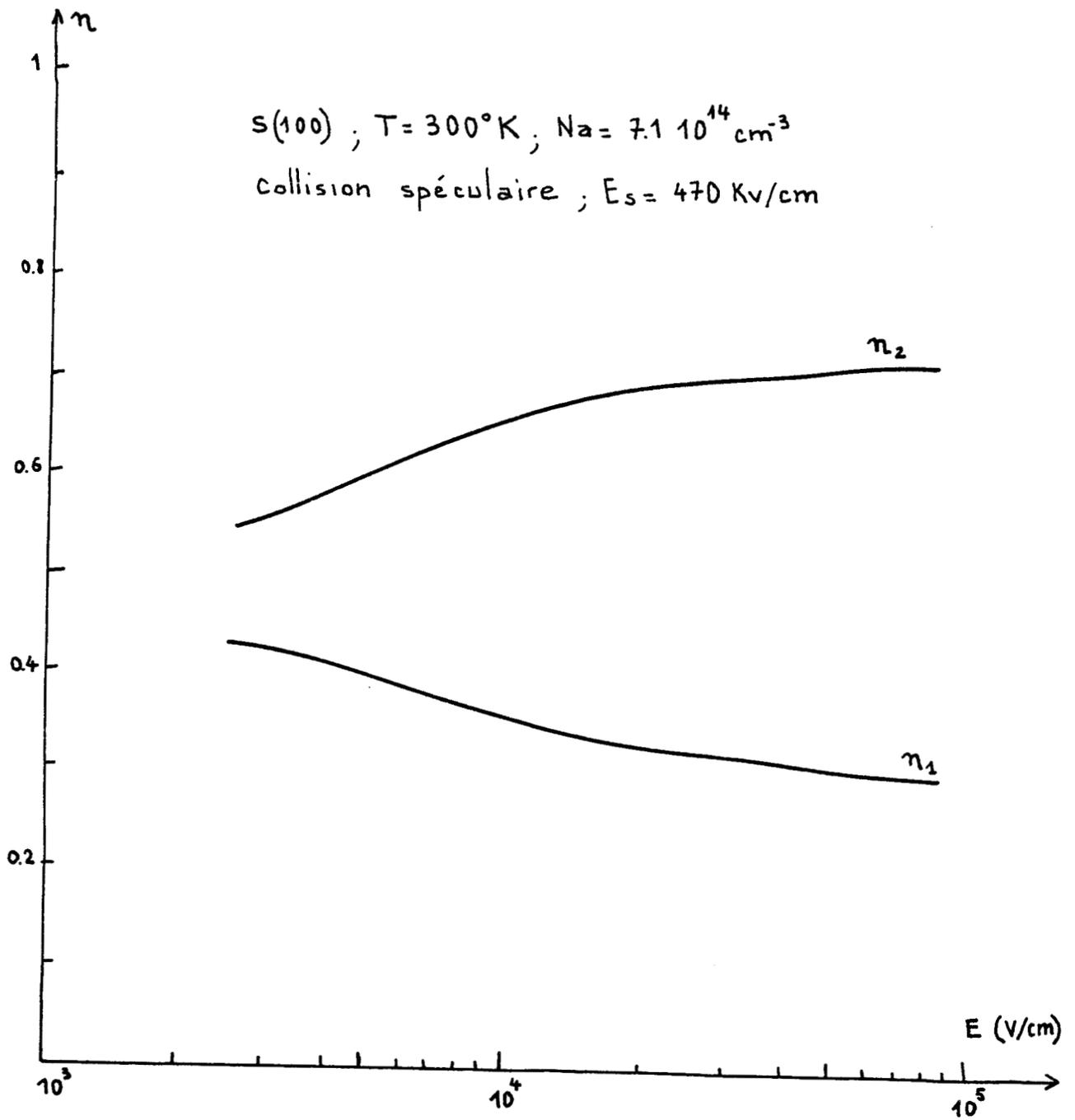


Figure 47 Evolution des populations  $n_2$  et  $n_1$  , des vallées 'h' et 'c' respectivement en fonction du champ électrique de dérive.



### III.3. INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE FONCTIONNEMENT DU COMPOSANT SUR LA MOBILITE DES PORTEURS

#### III.3.1 Caractéristique stationnaire vitesse-champ électrique

Nous avons déjà souligné le rôle important de la température dans le comportement de la collision des porteurs avec la surface en régime ohmique. Toutefois, on peut se demander, quelle sera l'influence de la température sur la vitesse de dérive des porteurs en champ élevé.

Ceci nous a conduit à étudier l'évolution des caractéristiques vitesse-champ électrique à des températures différentes de l'ambiante.

Sur la figure 48, nous avons représenté la vitesse de dérive pour une température de 353°K, pour les deux types de collisions à la surface et pour deux valeurs du champ de surface :  $E_S = 470$  Kv/cm (figure 48 a) et  $E_S = 160$  Kv/cm (figure 50 b). La même étude est faite à une température de 115°K dans les mêmes conditions. Les résultats sont représentés sur la figure 49. Ce sont des températures pour lesquelles COEN et MULLER [5] ont donné des résultats expérimentaux. On peut noter qu'à la température  $T = 353^\circ\text{K}$ , nous retrouvons que le caractère diffus de la collision de surface est dominant pour les deux valeurs du champ de surface, ce qui est cohérent avec les résultats présentés dans le paragraphe II. Par contre, au voisinage de la saturation de vitesse les courbes expérimentales et théoriques s'écartent largement et en particulier les vitesses limites sont très différentes.

A  $T = 115^\circ\text{K}$ , nous vérifions que pour les deux valeurs du champ  $E_S$ , le comportement de la collision de surface est pratiquement spé-  
culaire en régime ohmique. Ce qui est aussi cohérent avec les résultats  
présentés dans le paragraphe II. Néanmoins, il reste toujours un écart entre  
les valeurs des vitesses de dérive théoriques et expérimentales en champ fort.

a)

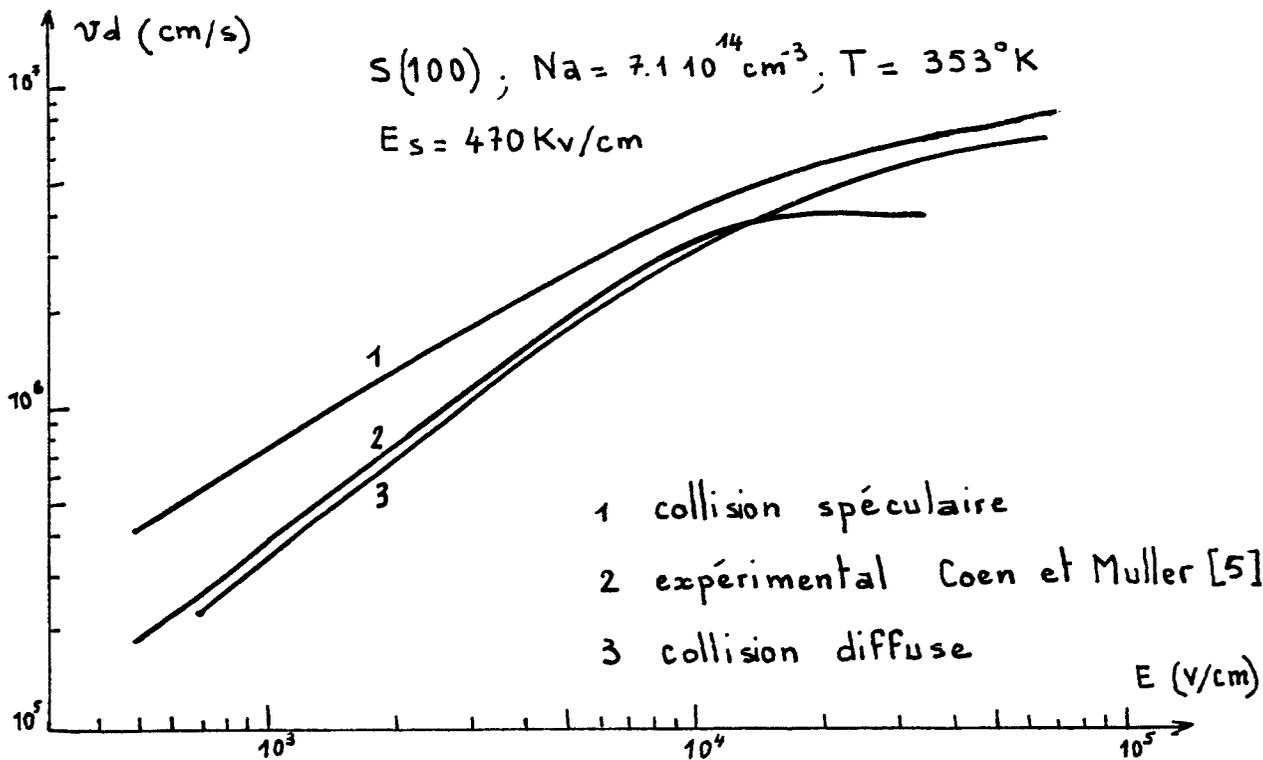
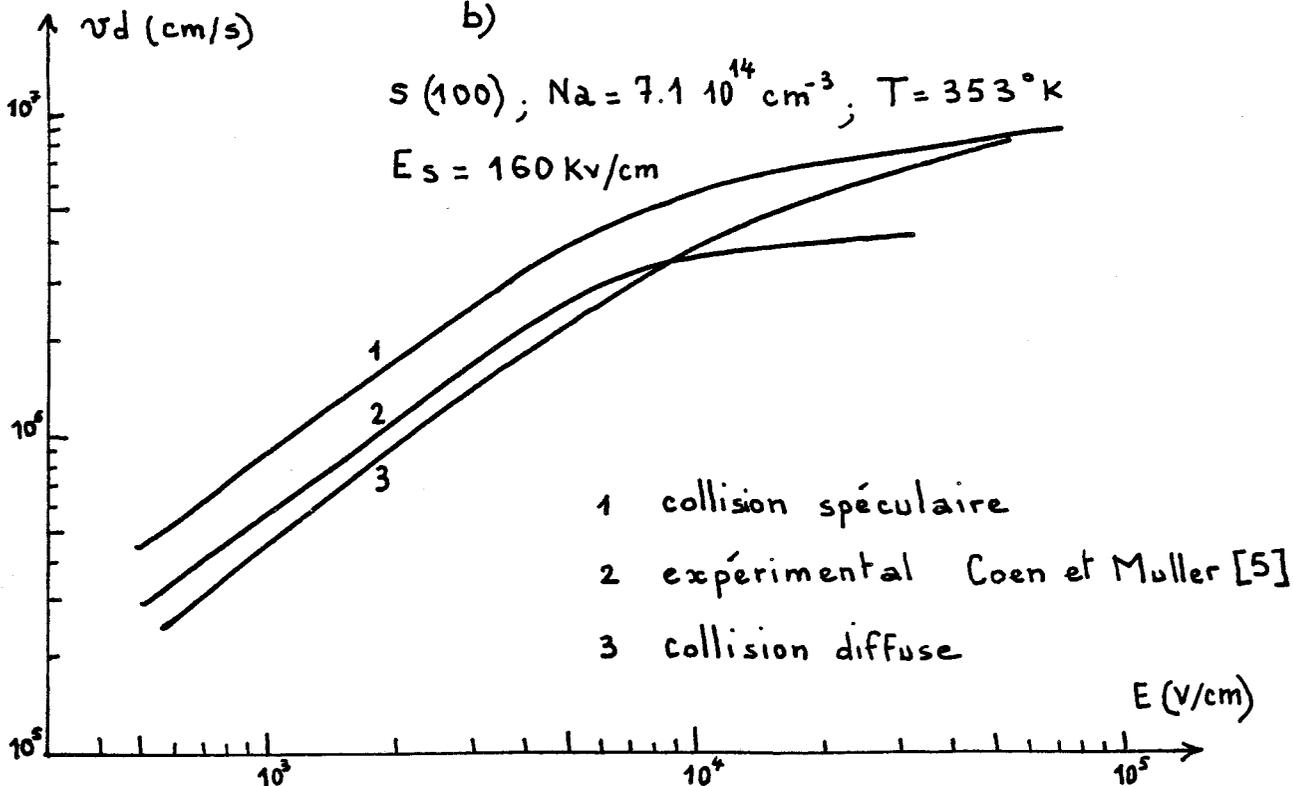


Figure 48 Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique.

a)  $E_s = 470 \text{ Kv/cm}$

b)  $E_s = 160 \text{ Kv/cm}$

b)



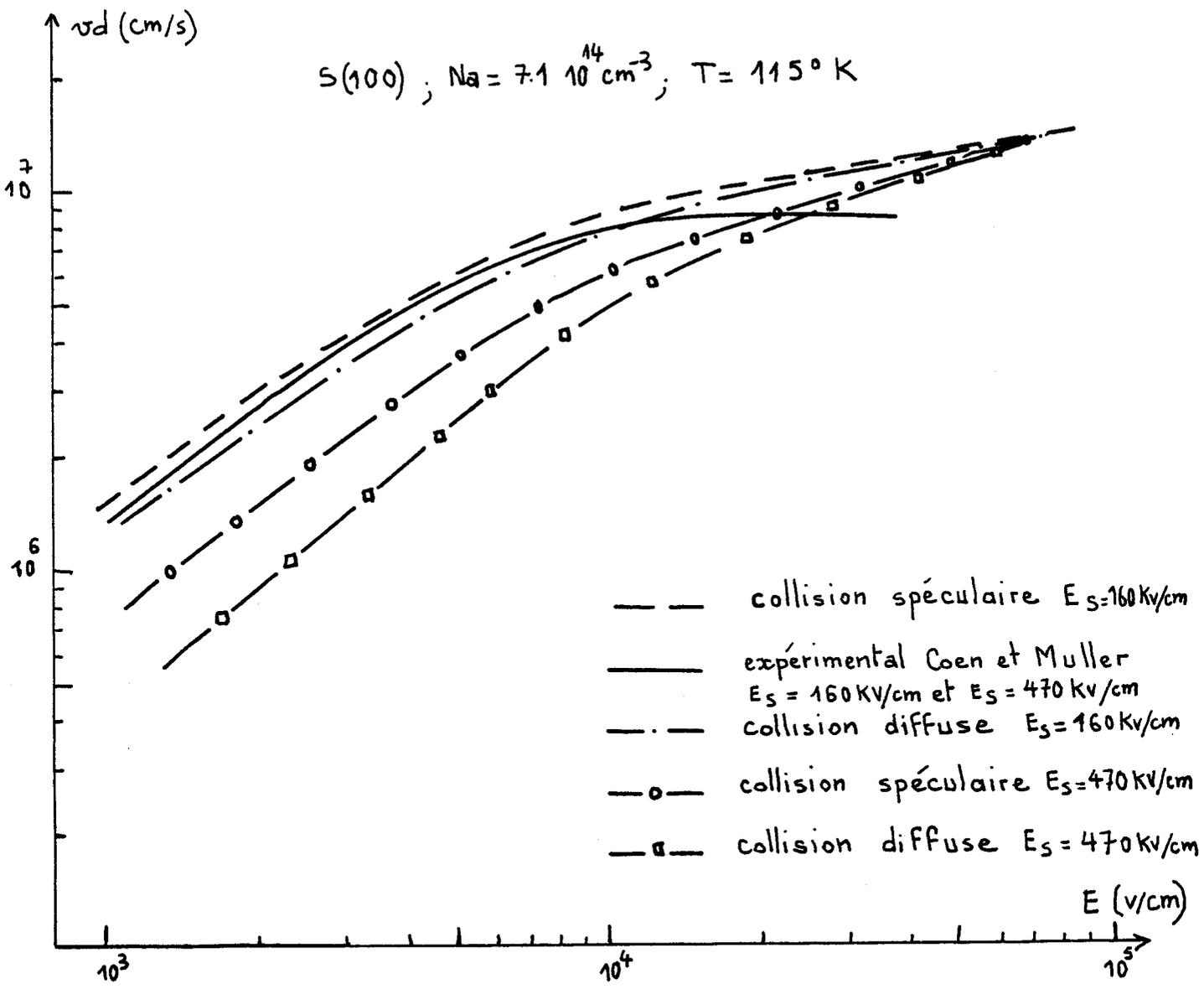


Figure 49 Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique.



### III .3.2 Vitesse limite des porteurs en fonction de la température

La simulation Monte Carlo nous a permis également l'obtention de la vitesse de dérive des porteurs lorsque ces derniers sont soumis à un champ fort. Pour une orientation de surface S(100), le résultat est représenté sur la figure 50, où sont aussi représentés les résultats expérimentaux trouvés dans la littérature.

On constate, comme nous l'avons déjà fait pour quelques températures particulières, qu'il existe une divergence notable entre la théorie et l'expérience.

### III.3.3 Etude du paramètre $P_S$

Pour les températures voisines de la température ambiante, il faut remarquer que si l'on définit une nouvelle caractéristique vitesse-champ électrique par une combinaison linéaire des caractéristiques obtenues en considérant que le comportement de la surface est soit spéculaire soit diffus pour un champ de surface donné, il est possible d'obtenir à la fois, un bon accord entre théorie et expérience pour la mobilité et la vitesse de dérive en régime ohmique. Ceci implique qu'il existe des porteurs pour lesquels la collision de surface est spéculaire et d'autres pour lesquels la collision de surface est diffuse. Or, nous avons vu que, dans le modèle proposé par PARROTT, il semble que, l'éventualité d'un type de comportement de surface vis à vis de la trajectoire des porteurs dépend de l'incidence de leur vitesse par rapport à cette surface [4]:

Cela peut être caractérisé par un paramètre  $P_S$  fixe qui détermine un angle limite  $\theta_0$  de changement de comportement de la surface par la relation :

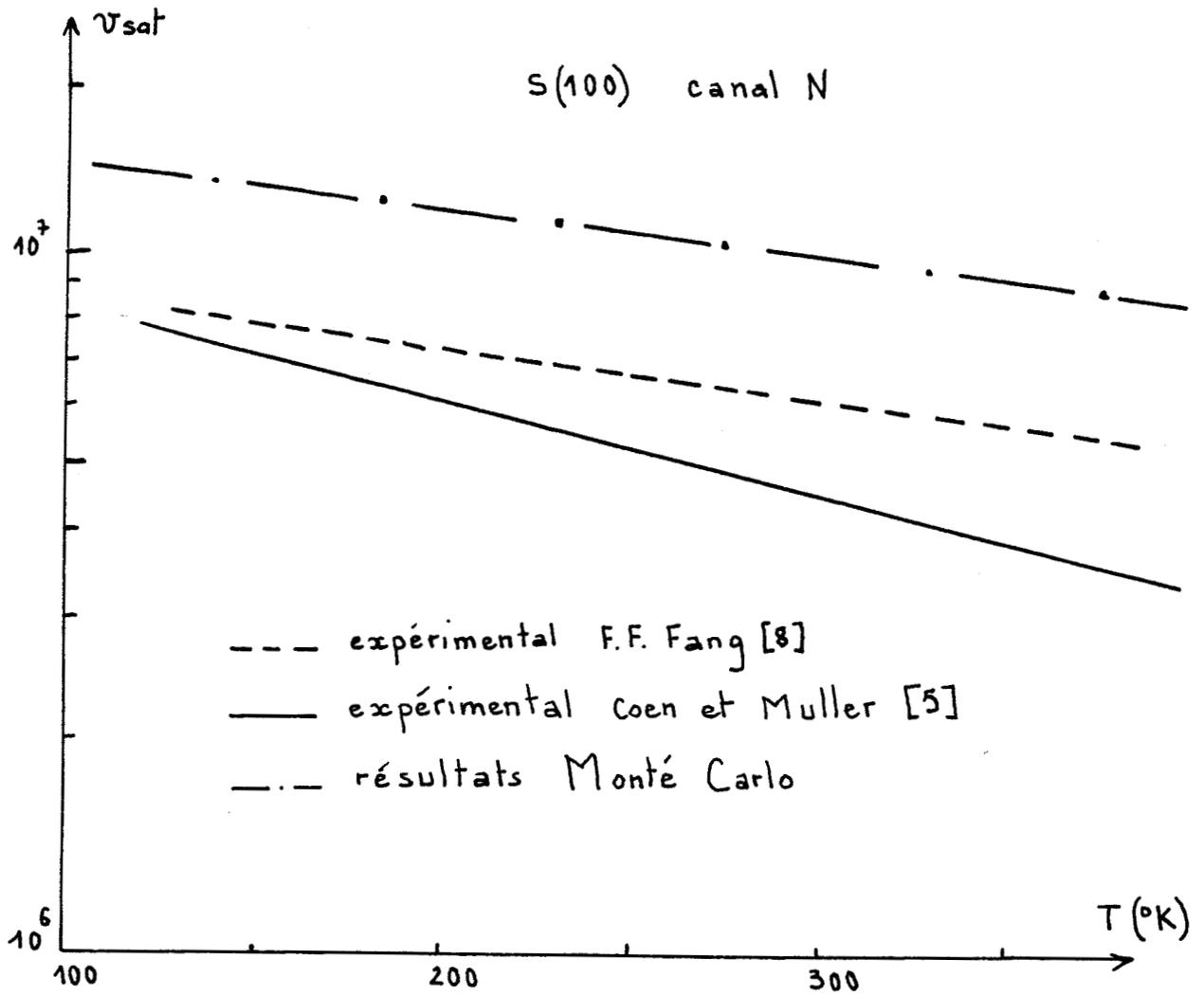


Figure 50 Evolution de la vitesse limite des porteurs en fonction de la température.



$$\cos \theta_0 = P_s$$

Le processus est entièrement spéculaire si la relation

$$\cos \theta_1 < P_s$$

est satisfaite.  $\theta_1$  représente l'angle entre la normale à la surface et le vecteur vitesse d'onde incident.

En effet la densité de probabilité  $p(\theta)$  pour qu'un porteur arrive à la surface avec une trajectoire faisant un angle  $\theta$  avec la normale ( $\theta$  étant défini sur la figure 53) est donné par :

$$p(\theta) = \sin \theta$$

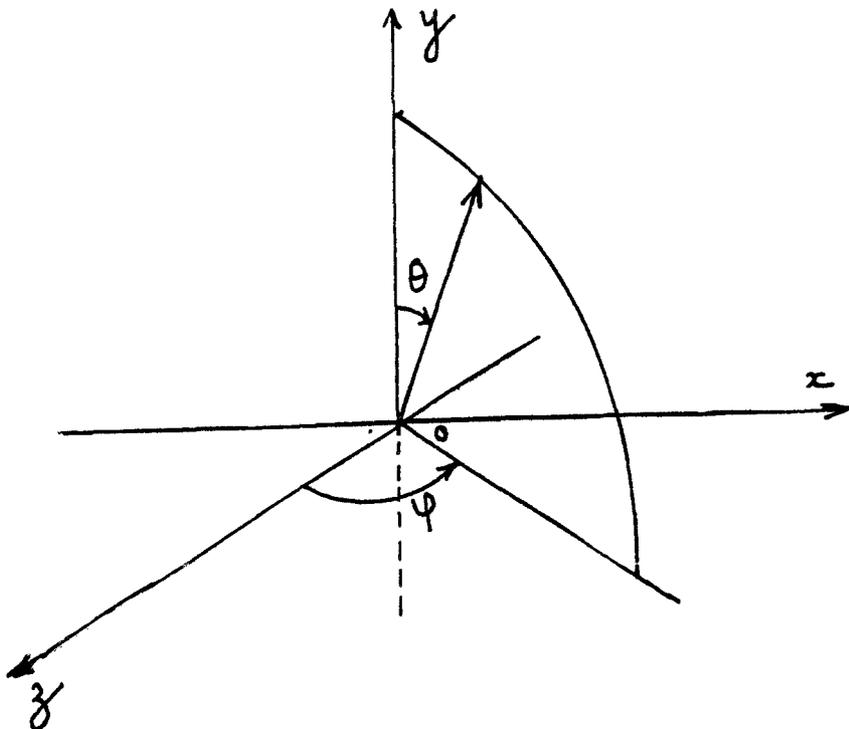


Figure 51 Repérage de la trajectoire incidente d'un porteur.

Dans ces conditions la probabilité  $P_{dif}$  pour que la trajectoire soit dans l'angle  $\theta_0$  est donnée par :

$$P_{dif} = \int_{\theta_0}^0 \mu(\theta) d\theta = 1 - \cos \theta_0$$

qui représente alors la probabilité pour qu'une collision soit diffuse. Il en résulte que la probabilité pour qu'une collision soit spéculaire  $P_{spec}$  est donnée

$$P_{spec} = \cos \theta_0$$

La collision de surface est donc aussi partiellement spéculaire et le comportement moyen de la collision de surface est une combinaison de collisions spéculaires et de collisions diffuses. Ainsi, la valeur moyenne d'une grandeur physique  $A$  peut s'écrire :

$$\bar{A} = P_{spec} \bar{A}_{spec} + P_{dif} \bar{A}_{dif}$$

où

$\bar{A}_{dif}$  est la valeur moyenne de  $A$ , la collision de surface étant diffuse

$\bar{A}_{spec}$  est la valeur moyenne de  $A$ , la collision de surface étant spéculaire

En particulier, si nous nous intéressons à la mobilité des porteurs, nous pourrions écrire :

$$\bar{\mu} = P_{dif} \bar{\mu}_{dif} + P_{spec} \bar{\mu}_{spec}$$

En remplaçant  $P_{spec}$  et  $P_{dif}$  par leurs expressions respectives en fonction de  $\theta_0$ , on obtient :

$$\bar{\mu} = (1 - \cos \theta_0) \bar{\mu}_{dif} + \cos \theta_0 \bar{\mu}_{spec}$$

et l'expression de l'angle limite  $\theta_0$  sera donné par :

$$\theta_0 = \text{Arccos} \frac{\mu_{exp} - \bar{\mu}_{dif}}{\bar{\mu}_{spec} - \bar{\mu}_{dif}}$$

où  $\mu_{exp}$  est la mobilité expérimentale.

Il est à noter que l'expression de  $\theta_0$  ci-dessus ne sera utilisée qu'en régime ohmique et à champ moyen, car en champ fort, nous avons vu que la vitesse de dérive des porteurs est identique pour les deux types de collisions de surface. Il nous a semblé intéressant de connaître l'évolution de  $\theta_0$  en fonction de la température. Cette évolution est représentée sur la figure 52 pour deux valeurs de champs de surface  $E_S = 160 \text{ Kv/cm}$  et  $E_S = 470 \text{ Kv/cm}$ .

Nous constatons que lorsque la température est basse,  $\theta_0$  est nul c'est à dire la collision de surface est parfaitement spéculaire quelque soit le champ  $E_S$ . Par contre, quand la température est élevée,  $\theta_0$  tend vers la valeur de  $\pi/2$ , ce qui signifie que la collision de surface est parfaitement diffuse quelque soit la valeur du champ  $E_S$ . Par ailleurs, nous notons que ce changement de comportement est beaucoup plus brutal pour  $E_S = 470 \text{ Kv/cm}$  que pour  $E_S = 160 \text{ Kv/cm}$ .

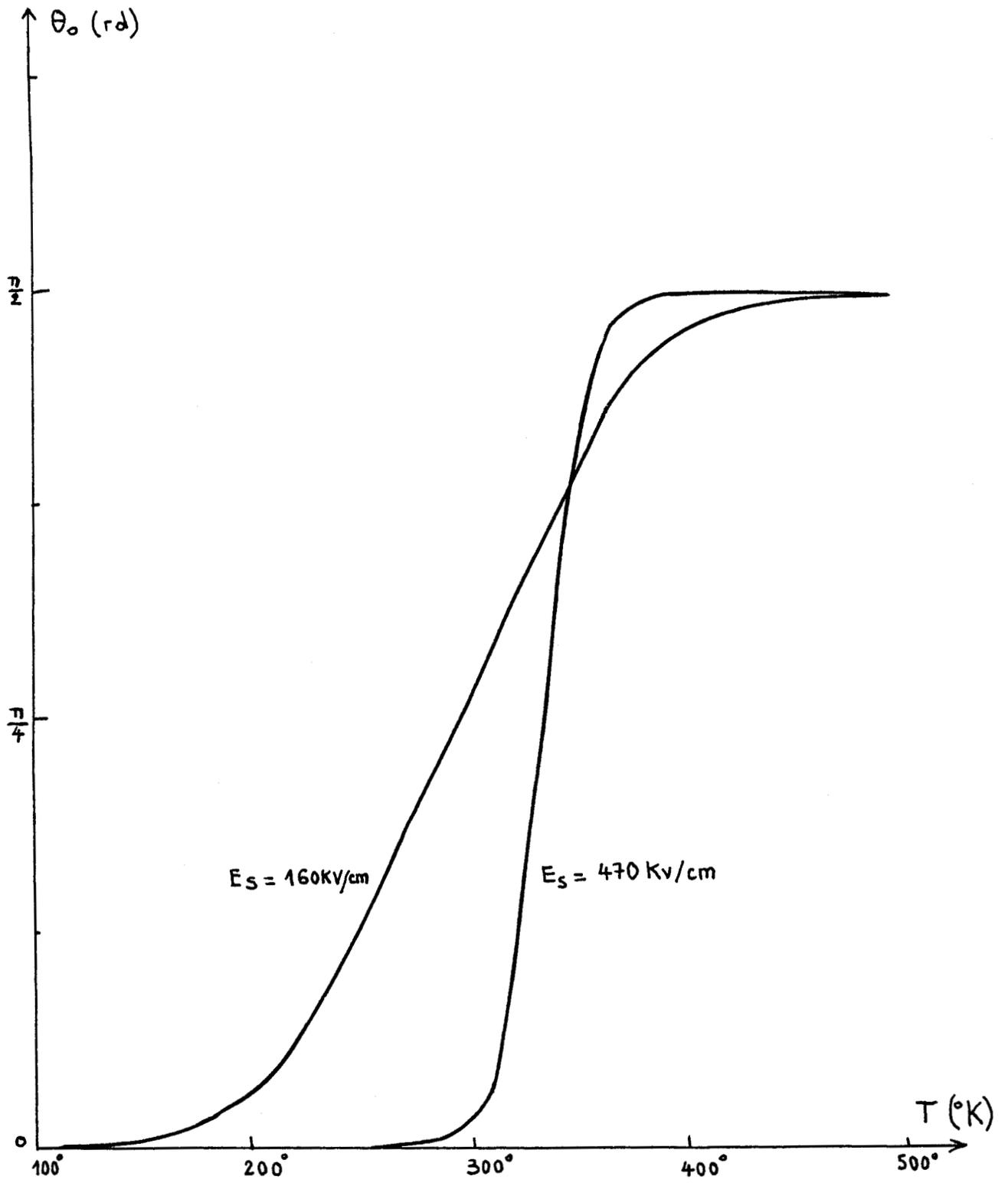


Figure 52 Evolution de l'angle limite  $\theta_0$  en fonction de la température.



## CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons étudié les effets de surface dans une structure MOS en considérant que l'interface Si - SiO<sub>2</sub> est parfaite.

Tout d'abord, nous avons analysé l'évolution de la mobilité ohmique pour une orientation cristallographique de surface S(100), en fonction de la température pour les deux types de collisions de surface :

- spéculaires
- diffuses.

Les résultats obtenus ont été comparés aux résultats expérimentaux. Nous avons montré qu'il existe trois comportements de surface qui diffèrent selon la température :

- collisions spéculaires pour les basses températures,
- collisions diffuses pour les hautes températures,
- collisions partiellement spéculaires pour les températures moyennes.

Ensuite, avec les deux types de collisions de surface, nous nous sommes intéressés aussi à l'évolution de la mobilité ohmique en fonction du champ électrique de surface. De la comparaison des résultats calculés à ceux expérimentaux trouvés dans la littérature, il découle que les collisions de surface en fonction du champ de surface évoluent de la façon suivante :

- collisions diffuses pour les champs faibles,
- collisions spéculaires pour les champs forts,
- collisions partiellement spéculaires et diffuses pour les champs moyens.

Partant de cela, nous avons étudié les phénomènes de transport électronique dans une structure MOS. Nous avons simulé, un canal de type -N parallèle à la surface S(100).

Nous avons montré quelques caractéristiques intéressantes du mouvement des porteurs au voisinage de la surface :

- évolution de la vitesse de dérive et de l'énergie des porteurs, en fonction du champ  $E_x$  développé par la tension source-drain,
- du profil de concentration des porteurs, du champ perpendiculaire  $E_y$ , les vitesses moyennes de dérive et l'énergie moyenne, en fonction de la distance à la surface.

Après une analyse du modèle de collision de surface proposé par PARROTT, nous avons montré que le paramètre  $P_S$  de ce modèle n'est pas fixe, mais dépend à la fois de la température de réseau et du champ de surface.

Bien que nous ayons observé un bon accord entre théorie et expérience en régime de mobilité ohmique et en champ moyen, il apparaît un désaccord important pour les champs de dérive forts. En particulier, le modèle à deux couches ne permet pas de retrouver les vitesses de saturation obtenues expérimentalement.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés aux phénomènes de transport dans un canal de type -N orienté selon la surface S(111). Ceci nous a permis de mettre en évidence la nécessité de généraliser le concept "diffus" ou "spéculaire" au cas de structure de bande dont l'expression présente des termes non-diagonaux.

## BIBLIOGRAPHIE

- 1 P.ROSSEL,  
Doctorat d'état, Toulouse (1973)
  
- 2 J.ZIMMERMANN,  
Doctorat d'état, Lille (1980)
  
- 3 K.FUCHS,  
Proceedings of the Cambridge physical society, vol.34,p.100 (1938)
  
- 4 J.E.PARROTT,  
Proceedings of the Cambridge physical society, vol.85,p.816 (1967)
  
- 5 R.W.COEN, R.S.MULLER,  
Solid state Electronics, vol.23,p.35 (1980)
  
- 6 A.MANY, Y.GOLDSTEIN and N.B.GROVER,  
Semiconducteur surface , North Holland Amsterdam (1965)
  
- 7 J.ZIMMERMANN, R.FAUQUEMBERGUE, M.CHAREF, E.CONSTANT,  
Electronics Letters, vol.16, p.664 (1980)
  
- 8 F.F.FANG and A.B.FOWLER,  
J.Appl.Physics, vol.41, p.1825 (1970)

- 9 M.GAMBOA, G.SARRABAYROUSE, H.TRANDUC et P.ROSSEL,  
Revue Phys.Appl., vol.15, p.973 (1980)
- 10 G.MERKEL,  
Revue Phys.Appl., vol.15, p.879 (1980)
- 11 D.F.NELSON et J.A.COOPER, J.r  
2<sup>nd</sup> Workshop on the physics of submicron devices, Urbana Illinois,  
Juin (1982)

## 2<sup>ÈME</sup> PARTIE

### CHAPITRE III :

#### MODELE A TROIS COUCHES

## INTRODUCTION

Pour décrire l'interaction des électrons avec la surface ou l'interface dans une couche d'inversion ou dans un film constitué d'un matériau semi-conducteur limité par une interface Si-SiO<sub>2</sub>, nous avons supposé, dans le modèle à deux couches, qu'elle était du type collision spéculaire ou diffuse. Tous les porteurs se déplacent uniquement dans le silicium en subissant à la fois les collisions de surface et les interactions de volume. Autrement dit, nous avons considéré d'une part que l'interface Si-SiO<sub>2</sub> était parfaitement plane, d'autre part que sa barrière de potentiel était infinie. Or, ces hypothèses peuvent apparaître comme trop simplistes, compte tenu de la hauteur finie de la barrière de potentiel ( environ 3,5 eV ), et de l'épaisseur moyenne de la couche d'inversion ( les électrons sont situés pour la plupart à moins de 100 Å de l'interface. Il convient donc de tenir compte de façon plus réaliste de la structure de l'interface Si-SiO<sub>2</sub>.

Dans ce dernier chapitre, nous allons proposer un modèle prenant en compte, non seulement l'influence des charges d'oxyde et la rugosité de surface, mais aussi l'existence d'une couche de transition entre le silicium et l'oxyde de silicium.

## I MORPHOLOGIE DE L'INTERFACE Si - SiO<sub>2</sub>

A cause de l'importance du rôle des interfaces Si-SiO<sub>2</sub> dans la technologie moderne des semi-conducteurs, un effort théorique et expérimental considérable a été consacré à l'étude de cette interface [1, 2,3,4,5,6 ] .

L'oxydation d'une surface de silicium produit une couche d'oxyde amorphe dont l'arrangement atomique n'est, jusqu'à présent, pas bien connu. Plusieurs auteurs ont suggéré l'existence d'une couche de transition non-stoechiométrique, souvent notée SiO<sub>x</sub> ( x est compris entre 0 et 2 ) séparant le substrat du silicium de la couche stoechiométrique SiO<sub>2</sub> [7,8,9] . La structure atomique détaillée de la couche de transition, comprenant son désordre structurel, son affinité pour les atomes d'impuretés etc... Continue d'être un sujet de débat. Presque tous les modèles proposés pour décrire les arrangements atomiques à l'interface supposent des types particuliers de liaisons entre le silicium et l'oxyde de silicium basés sur un raisonnement simple de physique et de chimie. Les autres propositions ont tendances à être descriptives, invoquant les disjonctions, les divers degrés de stoechiométrie etc... Néanmoins, il semble que pour décrire convenablement l'interface réel Si-SiO<sub>2</sub>, il soit nécessaire de considérer jusqu'à cinq régions séparées: le silicium en volume, le silicium désordonné près de l'interface, l'oxyde de silicium non stoechiométrique à l'interface, l'oxyde de silicium sous tension moléculaire près de l'interface et finalement l'oxyde de silicium en volume [10,11] ( voir figure 53 )

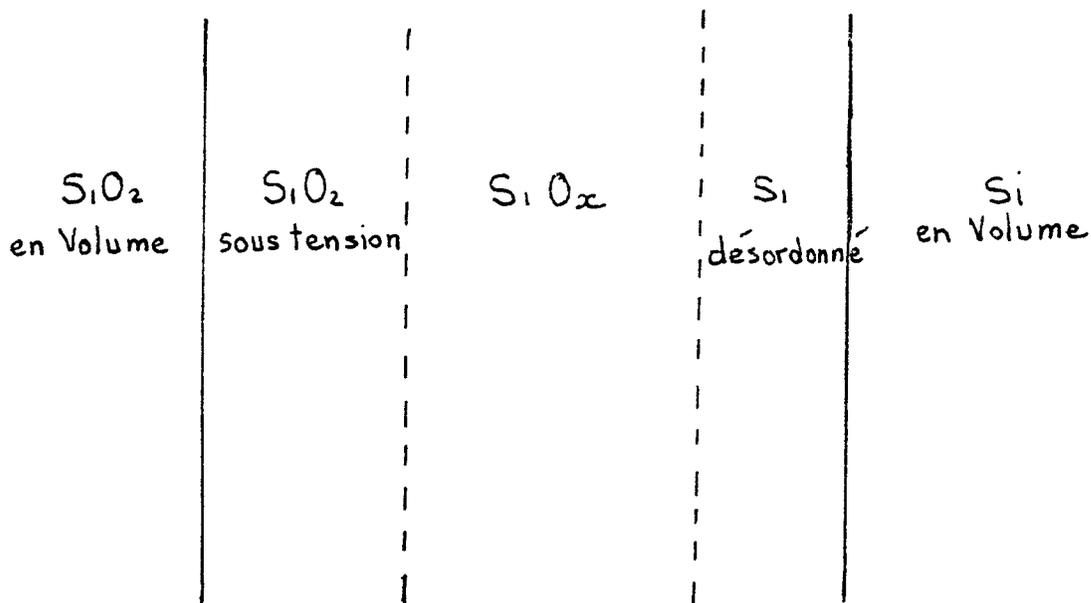


Figure 53 Schéma de l'interface Si-SiO<sub>2</sub>

Parmi les techniques classiques d'analyse, la résonance paramagnétique électronique s'avère la mieux adaptée pour étudier la structure atomique et la disposition des défauts dans le système Si-SiO<sub>2</sub>. Ainsi POINDEXTER et al [12] ont mis en évidence l'existence de deux liaisons pendantes de natures différentes selon la direction cristallographique de la surface au voisinage du silicium en volume : l'orbitale de la liaison Si SiO<sub>2</sub> (notée P<sub>b0</sub>) sur les orientations S(100) et S(111) puis l'orbitale de la liaison Si Si<sub>2</sub>O uniquement sur l'orientation S(100) (notée P<sub>b1</sub>), comme le montre la figure 54

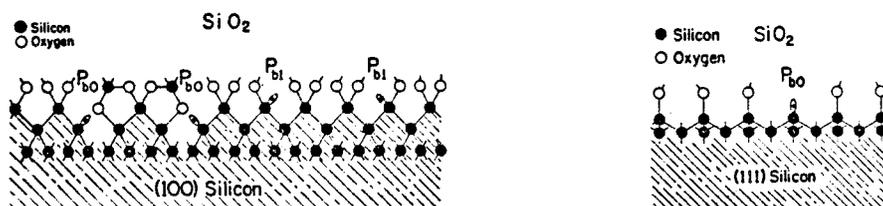


Figure 54 Structure et défaut de l'interface Si-SiO<sub>2</sub>

En plus, parmi les propriétés de ces défauts observés par POINDEXTER et al [12], figure une propriété électrique qui lie la densité de ces défauts à l'orientation cristallographique de la surface : la densité de ces défauts est d'autant plus grande que l'on considère les orientations d'interface : (100), (110), (111).

Par la théorie, TAMM et SHOCKLEY [13,14] ont prédit que, du fait de l'interruption de la périodicité du réseau à la surface d'un semi-conducteur, une forte densité d'état serait introduite dans la bande interdite. On pense que ces états, appelés états de surface, correspondent aux liaisons pendantes [14]. La théorie fait penser qu'il doit y avoir environ un état de surface par atome, ce qui se traduit par une densité de l'ordre  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . En fait, des résultats expérimentaux portant sur des surfaces obtenues par clivage sous vide poussé confirment cette prédiction [15]. A l'opposé, des surfaces de germanium et de silicium décapées, qui sont toujours recouvertes d'une très mince couche d'oxyde, présentent des densités d'états de surface de l'ordre de  $10^{11}$  à  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  [14]. Il apparaît que les états de surfaces présentent des énergies distribuées plus ou moins uniformément dans la partie centrale de la bande interdite [16]. Les centres qui ont une énergie distincte de quelques  $k_B T$  en plus de l'énergie du milieu de la bande interdite, contribuent effectivement à la génération et à la recombinaison en surface. Il est possible aussi d'observer des états de surface légèrement au-dessous de la bande de conduction et légèrement au-dessus de la limite de la bande de Valence [17]. Du fait de leur position, ces derniers types d'états de surface n'affectent pas de façon appréciable les caractéristiques des structures MOS.

Des expériences portant sur les structures MOS montrent l'existence d'une charge fixe située près de l'interface [15]. Cette charge entraîne une translation des caractéristiques statiques de la struc-

ture ( capacité, conductance ) et elle est appelée charge d'état de surface ( $Q_{SS}$ ). Cette charge possède les propriétés suivantes :

- sa densité n'est pas influencée de façon importante par l'épaisseur d'oxyde, ni par le type et la concentration des impuretés dans le silicium.

- elle dépend étroitement des conditions d'oxydation et de l'orientation cristalline du silicium : les valeurs classiques dans des conditions d'oxydations données sont le rapport 3,2,1 pour le silicium orienté suivant les directions S(111), S(110) et S(100) respectivement [15] .

Il a été observé [10] que la densité des orbitales pendantes possédaient les mêmes propriétés. Cela nous fait penser, une fois de plus, que les orbitales pendantes sont les origines physiques des états de surface.

Dans la région non stoechiométrique, il peut y avoir également des charges dues à des ions d'impuretés mobiles ( provenant par exemple d'une contamination par des ions sodium ), ou dues à des pièges ionisés par irradiation.

## II LE MODELE A TROIS COUCHES

### II.1 CARACTERISTIQUES DU MODELE

Ces considérations sur la morphologie et les caractéristiques de l'interface Si-SiO<sub>2</sub> nous ont amené à définir un modèle tenant compte de ces différents aspects et dont les caractéristiques sont les suivantes :

- Les couches Si et SiO<sub>2</sub> sont séparées par une "zone de transition" notée SiO<sub>x</sub>, de composition stoechiométrique intermédiaire entre Si et SiO<sub>2</sub>, et dont l'épaisseur varie de quelques Angstroms à quelques dizaines d'Angstroms [ 7,8,9,10,11,26 ] .

- L'interface Si-SiO<sub>x</sub> est rugueux et est le siège de charges électriques dont la répartition est uniforme.

- Nous admettons, pour cet ensemble à trois couches, une structure de bande "idéalisée" ( figure 55 ) pour laquelle, dans la zone de transition, la largeur de la bande interdite varie de façon monotone entre celle du silicium ( 1,1 eV ) et celle de l'oxyde de silicium ( 8,4 eV ) [ 18,19 ] .

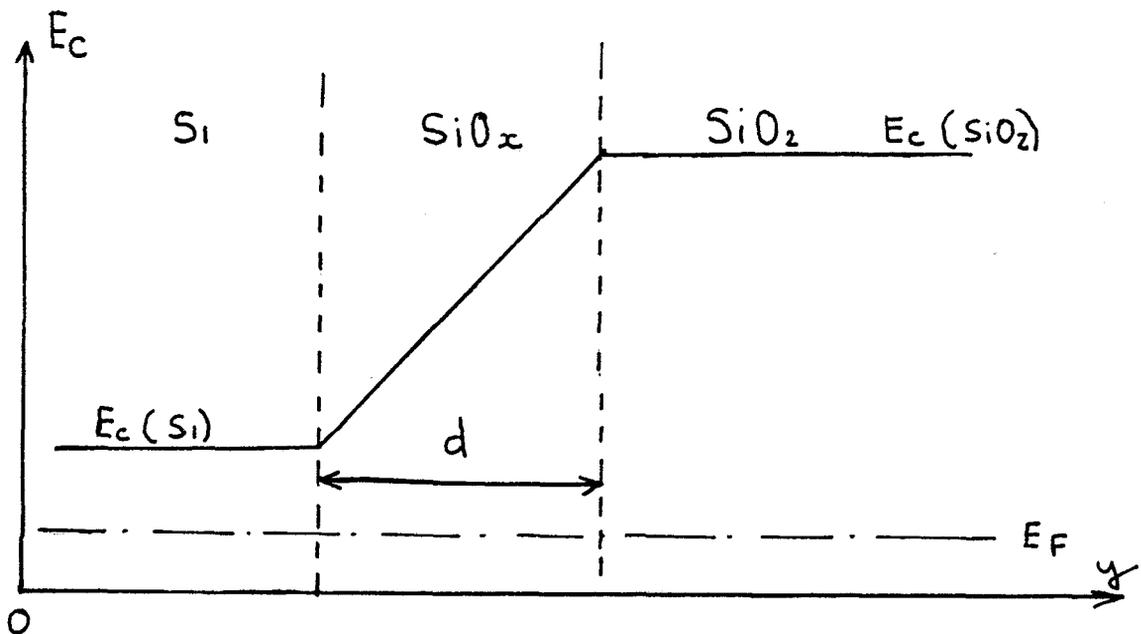


Figure 55 Approximation de la structure de bande du modèle Si / SiO<sub>x</sub> / SiO<sub>2</sub>.

Ainsi les porteurs de la couche d'inversion peuvent pénétrer dans la région de transition SiO<sub>x</sub> où ils subissent l'effet d'une barrière de potentiel graduelle qui s'oppose à leur déplacement dans la direction  $oy$ , perpendiculaire à l'interface,

## II.2 INFLUENCE DE LA BARRIÈRE DE POTENTIEL

Sous l'action de la composante  $E_y$  du champ électrique perpendiculaire à l'interface, un porteur pénètre dans la région non-stoechiométrique où il voit une partie de son énergie cinétique se transformer en énergie potentielle. Cette transformation est due à l'élévation du bord de la bande de conduction de cette région. En atteignant la barrière de potentiel, l'électron a perdu totalement l'énergie cinétique relative à la composante  $K_y$  du vecteur d'onde selon l'axe  $\vec{oy}$  et, en conséquence, ne peut plus se déplacer dans la direction  $\vec{oy}$ . L'électron est alors animé d'un mouvement bidimensionnel dans un plan parallèle à l'interface jusqu'au moment, où il subit une collision avec le réseau cristallin. L'effet de cette collision est de renvoyer le porteur vers le semi-conducteur et correspond, dans notre cas, à une composante  $K_y$  négative du vecteur d'onde du porteur ( voir figure 56 ). Ensuite le processus se répète de façon identique.

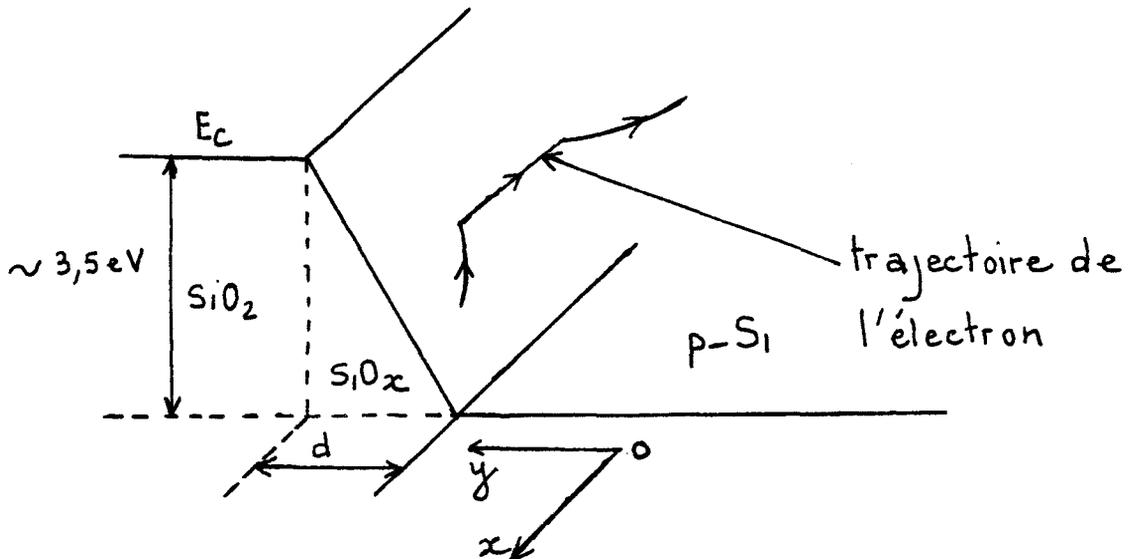


Figure 56 Représentation schématique de l'interface.

## II.3 MECANISMES DE COLLISIONS ET PARAMETRES DE CONDUCTION

En pénétrant dans la zone non stoechiométrique de l'oxyde, les porteurs subissent des interactions supplémentaires par rapport aux porteurs en volume : l'interaction sur charges d'oxyde et l'interaction liée à la rugosité de surface.

### II.3.1 Collisions sur charges d'oxyde

Le potentiel d'interaction entre un porteur et une charge d'oxyde est celui dû à une interaction coulombienne entre ce porteur et une impureté ionisée. Il en résulte que l'on peut traiter les collisions sur charges d'oxyde exactement comme des collisions sur impuretés. C'est ce que nous avons fait dans ce modèle particulier. Ainsi le traitement donné à ce type d'interaction est analogue au traitement décrit par CONWELL-WEISSKOPF [20] ou par BROOKS-HERRING [21] .

### II.3.2 Collisions liées à la rugosité de surface

L'application d'un champ électrique de surface intense provoque la pénétration des porteurs dans l'interface  $\text{SiO}_2$ -Si où règne une fluctuation de potentiel microscopique engendré par les défauts ( voir figure 54 ). Les porteurs se trouvent, alors en présence d'une nouvelle interaction dont le traitement a été présenté au chapitre I de la partie 2, que nous utilisons encore dans le cas présent.

### III MODE OPERATOIRE ET SIMULATION MICROSCOPIQUE

Nous considérons le schéma de la structure MOS présenté sur la figure 57 :

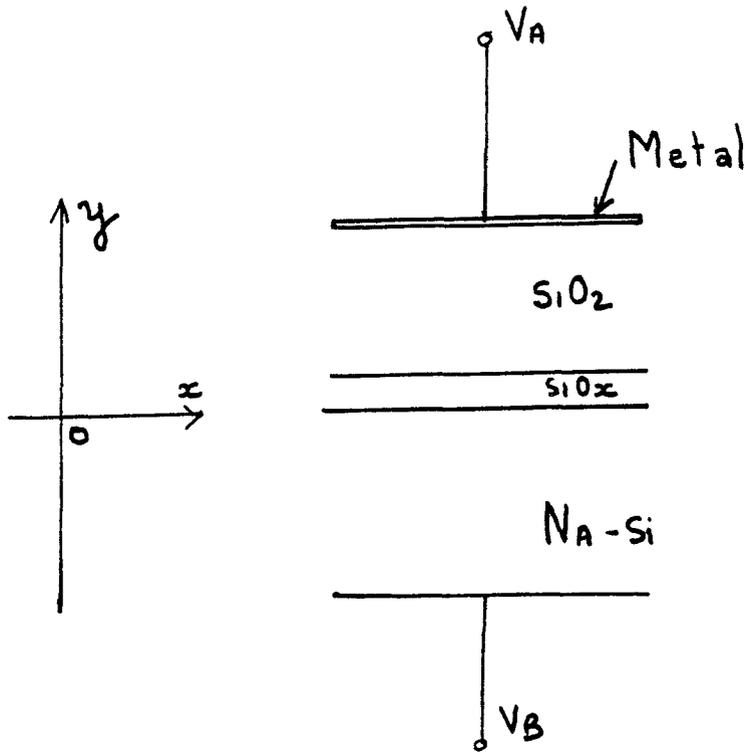


Figure 57 Schéma de la structure étudiée

La simulation Monte Carlo de ce composant sera effectuée en présence d'un champ électrique de dérive  $E_x$  dû à la polarisation source-drain, uniforme et parallèle à l'interface  $SiO_2-Si$  et d'un champ  $E_y$  qui tient compte globalement des effets de charge d'espace.

La procédure numérique est similaire à celle décrite au chapitre II de la partie 2, avec quelques modifications :

a) La première case ( correspondant à  $j=0$  ), se trouve au niveau de l'interface  $SiO_2-SiO_x$  et c'est à ce niveau que nous imposons

les conditions aux limites du champ électrique  $E_y(o) = E_S$ , où  $E_S$  est le champ de surface.

b) Dans la région non stoechiométrique, nous introduisons la carte de densité de charges d'oxyde uniforme selon la direction  $\vec{oy}$ .

De la même façon que dans le chapitre précédent nous conservons les hypothèses suivantes :

- Le canal de type N en régime d'inversion est bien formé.
- Les phénomènes de génération recombinaison sont négligés.

## IV ETUDE DE LA MOBILITE OHMIQUE EN REGIME D'INVERSION

### IV.1 INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR DE LA ZONE NON STOECHIMÉTRIQUE

Etant donné que l'épaisseur de la couche de transition  $SiO_x$  n'est pas parfaitement déterminée, nous avons tout d'abord étudié son influence sur les caractéristiques du transport électronique dans une structure MOS.

Pour cela nous avons représenté sur la figure 58, l'évolution de la mobilité ohmique, pour les deux orientations S(100) et S(111), en fonction de l'épaisseur de la couche de transition. Les valeurs des densités de charges d'oxyde et des champs de surface correspondent aux conditions expérimentales de certains travaux de la littérature [15,22]. L'effet de la rugosité de surface est supposé nul ( $\Delta, L = 0$ ).

Lorsque l'épaisseur de l'interface est grande, d'une part les porteurs pénètrent davantage dans la zone de transition, d'autre part

la densité de charges d'oxyde devient très faible. Le transport électronique sera alors, essentiellement dominé par les collisions de réseau et la mobilité tend vers celle des porteurs en volume.

La diminution de l'épaisseur de l'interface provoque une élévation de la pente de la barrière de potentiel et modifie l'énergie cinétique des porteurs de la région  $\text{SiO}_x$  et par là, les mécanismes de transport électronique. En effet, les porteurs de la zone  $\text{SiO}_x$ , voient brutalement toute la partie de la composante énergétique selon la direction  $oy$  se transformer en énergie potentielle. L'énergie cinétique se trouve alors, diminuée et par conséquent les collisions des porteurs sur le réseau deviennent moins nombreuses. Dans ces conditions, les phénomènes de transport ne dépendent pratiquement que des charges d'oxyde. Deux situations fort différentes peuvent se présenter, lorsque l'épaisseur  $d$  de l'interface est très faible :

a) Pour les faibles densités de charges d'oxyde, on assiste à une forte accumulation des porteurs dans la région  $\text{SiO}_x$  et, comme nous le verrons par la suite, l'énergie cinétique moyenne est notablement réduite. Les collisions deviennent moins nombreuses et la mobilité ohmique est plus élevée. Ainsi par exemple, pour  $E_S = 500 \text{ kV/cm}$ ,  $d = 5 \text{ \AA}$  et  $Q_{SS} = 3.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , la densité des porteurs est de l'ordre de  $7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  et la mobilité est de  $700 \text{ cm}^2/\text{V/S}$ .

b) Par contre pour les densités de charges d'oxyde élevées, les porteurs de la zone  $\text{SiO}_x$  subissent énormément de collisions sur les charges de l'oxyde et diffusent alors dans le semi-conducteur. Par conséquent, la densité des porteurs dans la région  $\text{SiO}_x$  diminue et la mobilité des porteurs diminue également. Par exemple, pour  $E_S = 500 \text{ kV/cm}$ ,  $d = 5 \text{ \AA}$  et  $Q_{SS} = 3.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , on obtient une densité de porteurs de l'ordre de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  et la mobilité est de  $380 \text{ cm}^2/\text{V/S}$ .

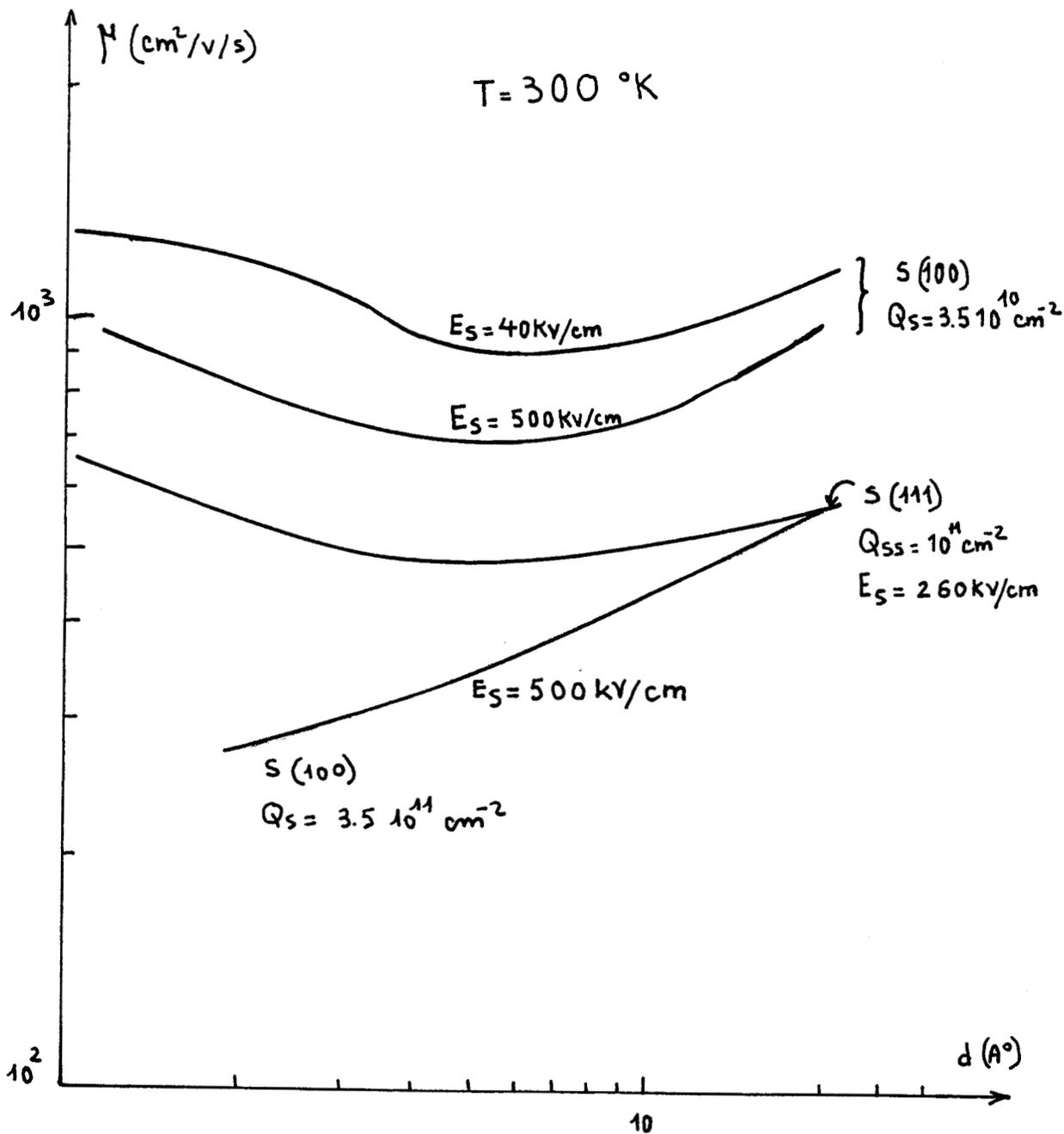


Figure 58 Mobilité ohmique en fonction de l'épaisseur de l'interface obtenue par simulation Monte Carlo.



## IV.2 INFLUENCE DE LA DENSITE DE CHARGES D'OXYDE

Pour une orientation de canal S(100), nous avons représenté sur la figure 59, l'évolution de la mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde pour deux épaisseurs de la zone de transition :  $5\text{\AA}$  et  $30\text{\AA}$ . Nous supposons que le champ de surface a une valeur de 500 kV/cm et que l'effet de la rugosité de surface est négligeable.

Pour les faibles densités de charges d'oxyde, la mobilité diminue légèrement, par contre lorsque les densités sont élevées la mobilité diminue rapidement, approximativement suivant une loi en  $Q_{SS}^{-1/2}$ , mettant en évidence l'importance des collisions sur charges d'oxyde en particulier pour les densités supérieures à  $10^{11}\text{ cm}^{-2}$ .

## IV.3 INFLUENCE DE LA RUGOSITE DE SURFACE

Nous avons représenté sur la figure 60, l'évolution de la mobilité ohmique en fonction du produit des coefficients de rugosité  $\Delta$  et  $L$ , pour une densité moyenne de charges d'oxyde de  $3.5 \cdot 10^{10}\text{ cm}^{-2}$  et un champ de surface de 500 kV/cm, valeurs correspondant aux conditions expérimentales de NELSON et al [22]. Ces résultats ont été tracés, pour deux valeurs de l'épaisseur de la couche de transition  $d = 5\text{\AA}$  et  $30\text{\AA}$ . Le champ électrique de dérive est supposé selon la direction  $\langle 011 \rangle$ .

Nous remarquons que, l'allure de la couche présente tout d'abord un palier et ensuite une décroissance en  $(\Delta L)^{-2}$ , montrant l'im-

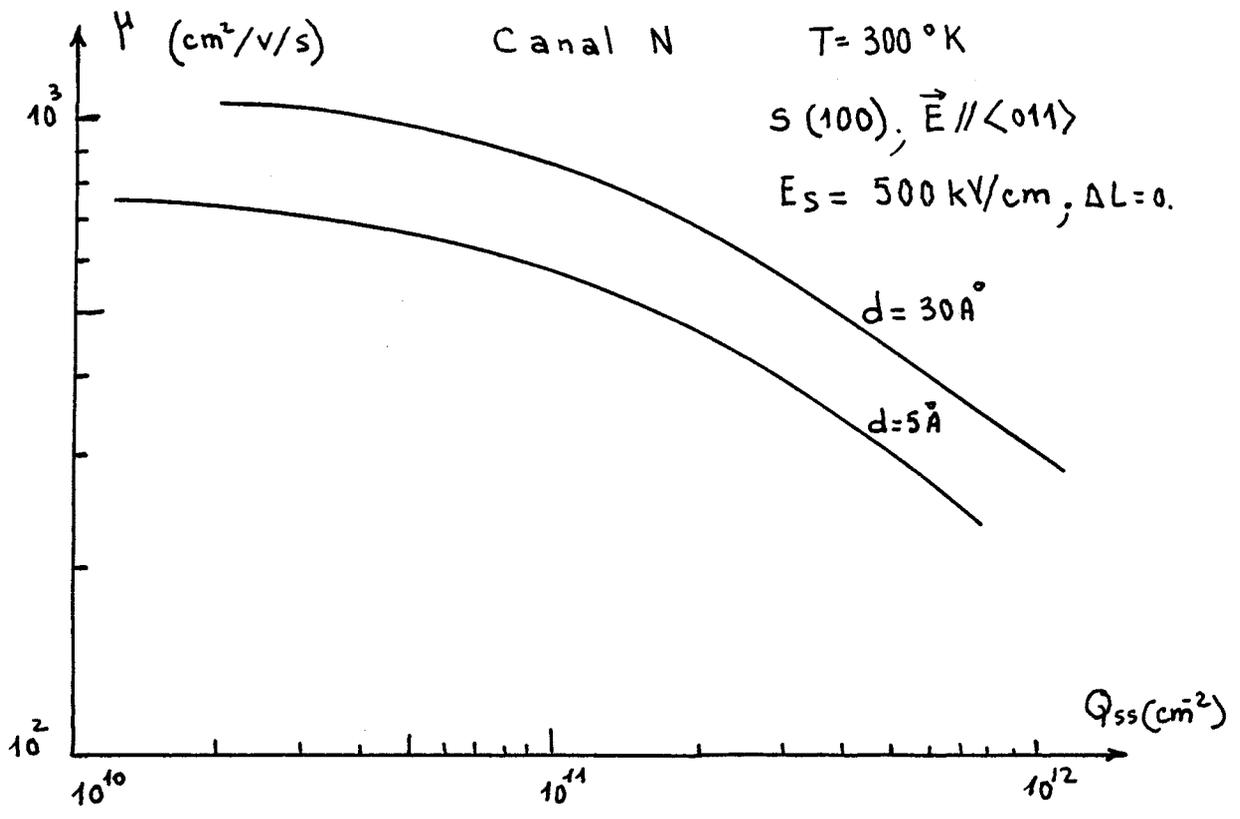


Figure 59 Mobilité ohmique en fonction de la densité de charges d'oxyde obtenue par simulation Monte Carlo

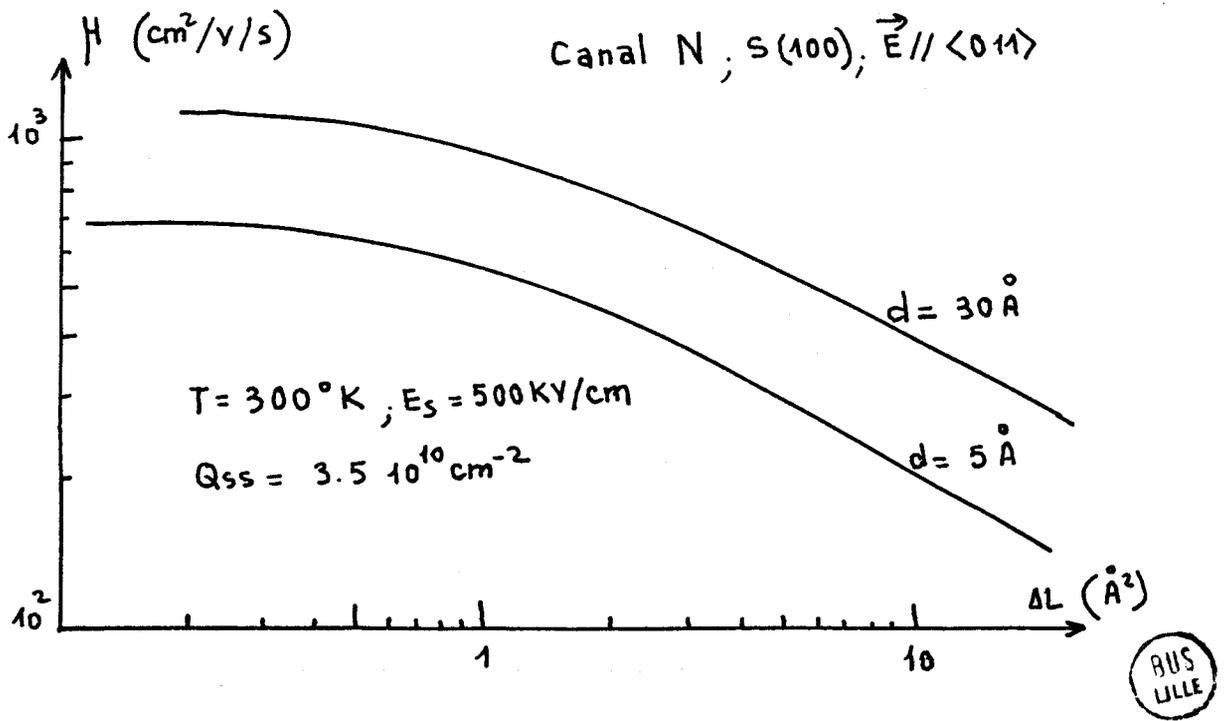


Figure 60 Mobilité ohmique en fonction du produit  $\Delta L$  des coefficients de rugosité de surface

portance des collisions sur la rugosité de surface.

La mobilité expérimentale obtenue aussi bien par NELSON et al [22] que COEN et al [23] est de  $450 \text{ cm}^2/\text{V/S}$  à la température ambiante pour un champ de surface  $E_S$  de l'ordre de  $500 \text{ kV/cm}$ . La figure 60 nous permet de déterminer les couples de paramètres géométriques ( $\Delta, L$ ) qu'il faut utiliser dans la simulation numérique pour obtenir la bonne mobilité. Ainsi pour deux valeurs de l'épaisseur de la zone de transition :  $d = 5\text{Å}$  et  $30\text{Å}$  on obtient respectivement les produits des coefficients de rugosité de surface de l'ordre de  $2\text{Å}^2$  et  $10\text{Å}^2$  pour une densité de charges d'oxyde de  $3.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  et un champ de surface de  $500 \text{ kV/cm}$ .

Par ailleurs, on peut constater sur la figure 61, que pour les deux jeux de paramètres considérés, les profils de concentration de porteurs sont très voisins, ce qui justifie l'obtention de mobilités égales.

Les différents éléments caractéristiques de la configuration géométrique de la zone  $\text{SiO}_x$  sont alors déterminés pour un champ électrique de surface. En principe, ces caractéristiques ne dépendent en aucune façon de la polarisation de grille mais il nous semble important de le vérifier en étudiant l'évolution de mobilité des porteurs en régime ohmique en fonction du champ de surface.

#### IV.4 MOBILITE OHMIQUE EN FONCTION DU CHAMP DE SURFACE

Sur la figure 62, nous avons reporté l'évolution de la mobilité ohmique obtenue expérimentalement par COEN et al [23] et NELSON et al [22], en utilisant deux techniques de mesures différentes.

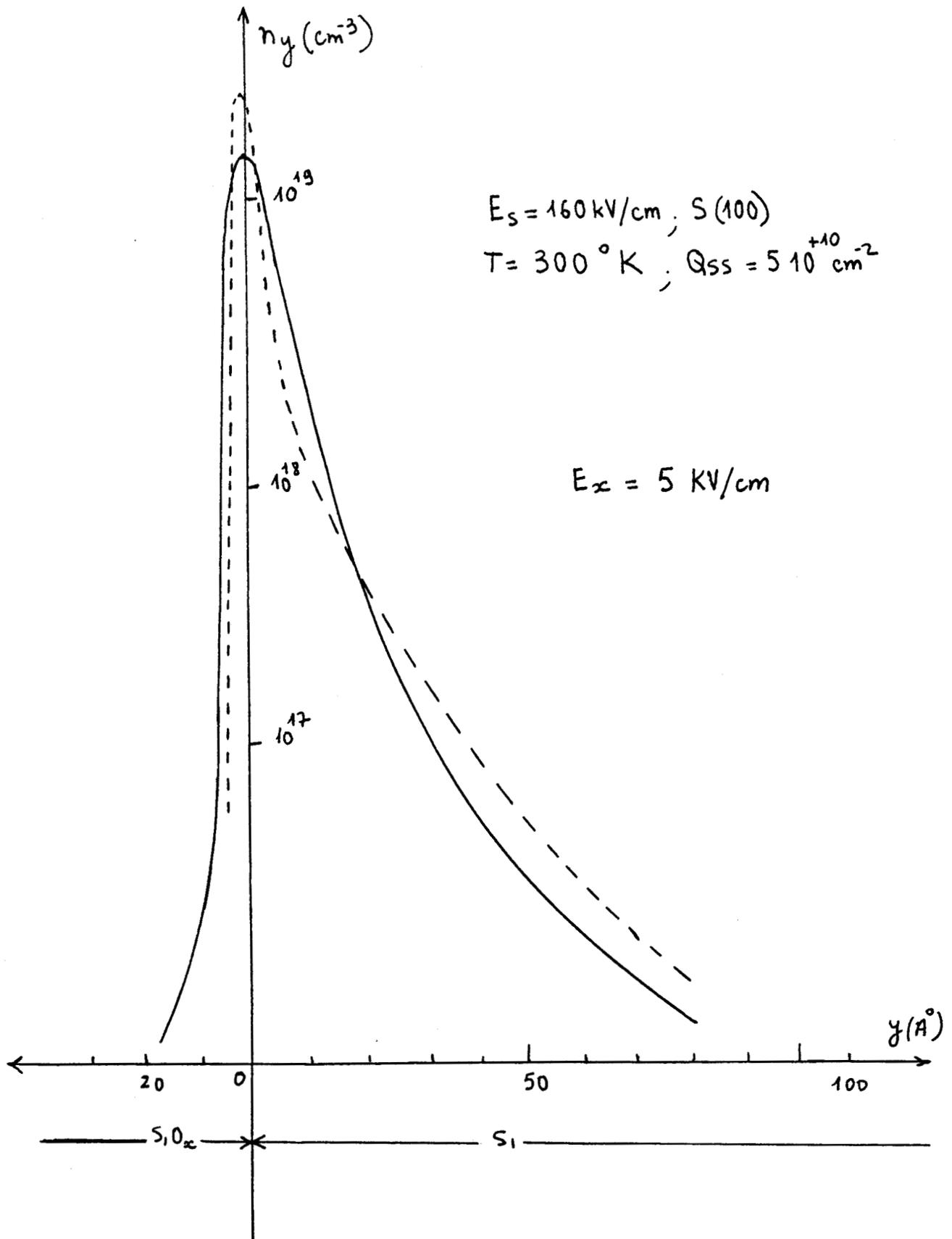


Figure 61 Evolution de la répartition des porteurs en régime ohmique en fonction des caractéristiques de

la région  $\text{SiO}_x$  :

- :  $d = 30 \text{ Å}$  ;  $\Delta L = 10 \text{ Å}^2$
- - - :  $d = 5 \text{ Å}$  ;  $\Delta L = 2 \text{ Å}^2$



Nous avons également reporté les résultats obtenus par simulation Monte Carlo en considérant que l'épaisseur de la zone  $\text{SiO}_x$  est de  $5\text{\AA}$  et des densités de charges d'oxyde classiques [22,15] .

Deux orientations de surface sont supposées : S(100) et S(111) .

- En ce qui concerne l'orientation S(100), il y a lieu de noter d'une part la concordance entre les deux résultats expérimentaux et d'autre part que, la prise en compte d'une zone de transition d'épaisseur  $5\text{\AA}$  et de paramètre de rugosité  $2\text{\AA}^2$ , nous permet d'obtenir un bon accord avec les résultats expérimentaux dans toute la gamme de champ de surface : 40 à 500 kV/cm.

- Pour une orientation de surface S(111), il apparaît que l'effet de rugosité est négligeable lorsque la densité de charges d'oxyde  $Q_{SS}$  est de l'ordre de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Pour les valeurs élevées du champ de surface on constate qu'il y a un accord satisfaisant. Par contre, il existe une divergence entre théorie et expérience pour les champs de surface inférieurs à 100 kV/cm : la mobilité calculée semble être plus élevée que celle obtenue expérimentalement.

Il est important de noter que la mobilité ohmique obtenue pour une orientation de surface S(100) est plus élevée que celle obtenue pour une orientation de surface S(111) et ceci est dû à une plus forte densité de charges d'oxyde pour la dernière orientation. M.GAMBOA [24] confirme ce point en montrant expérimentalement que la mobilité ohmique des porteurs dans une couche d'inversion dans un canal est orienté  $\langle 111 \rangle$  diminue lorsque l'on crée des charges ionisées par irradiation.



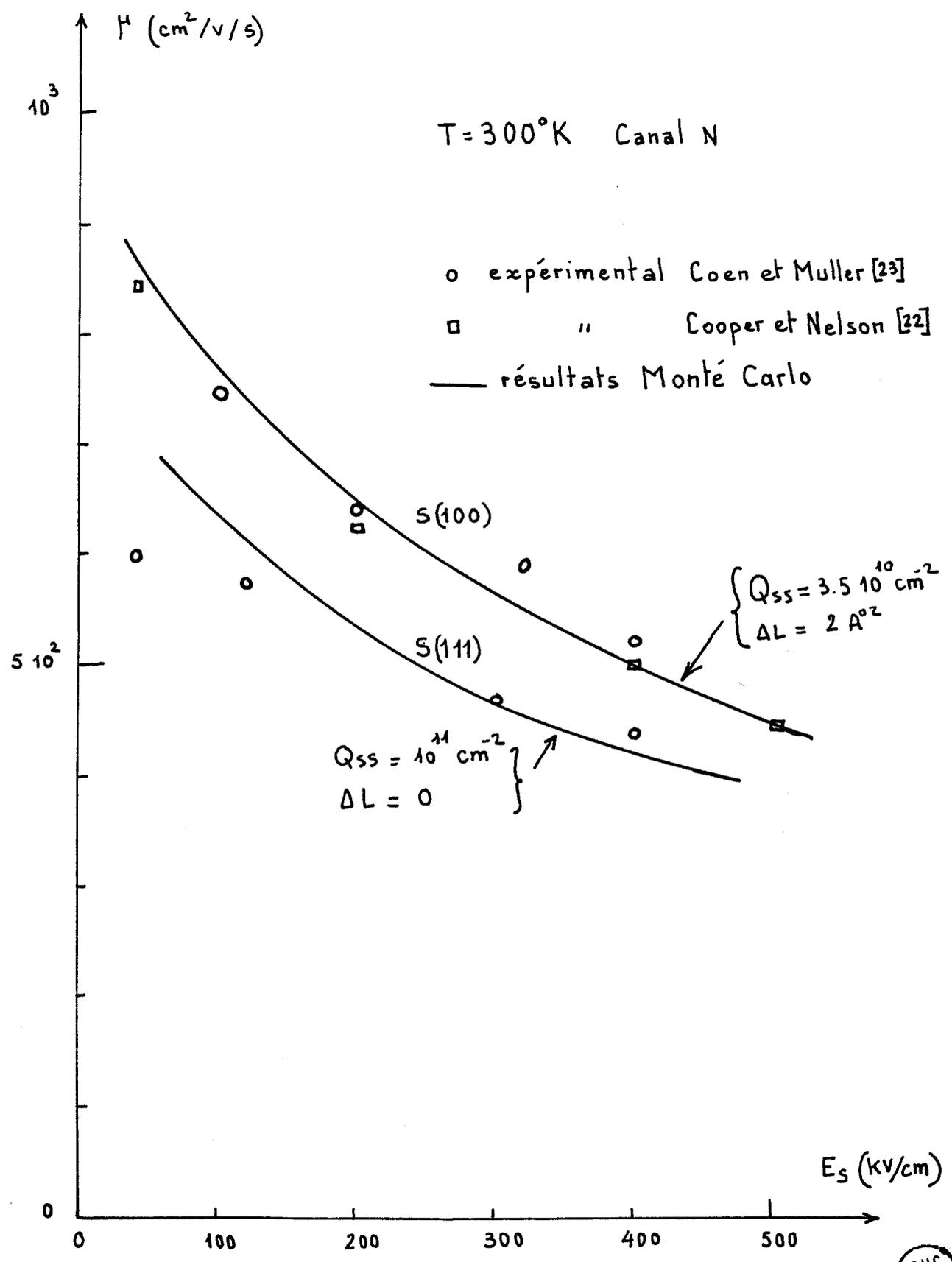


Figure 62 Mobilité ohmique en fonction du champ de surface.

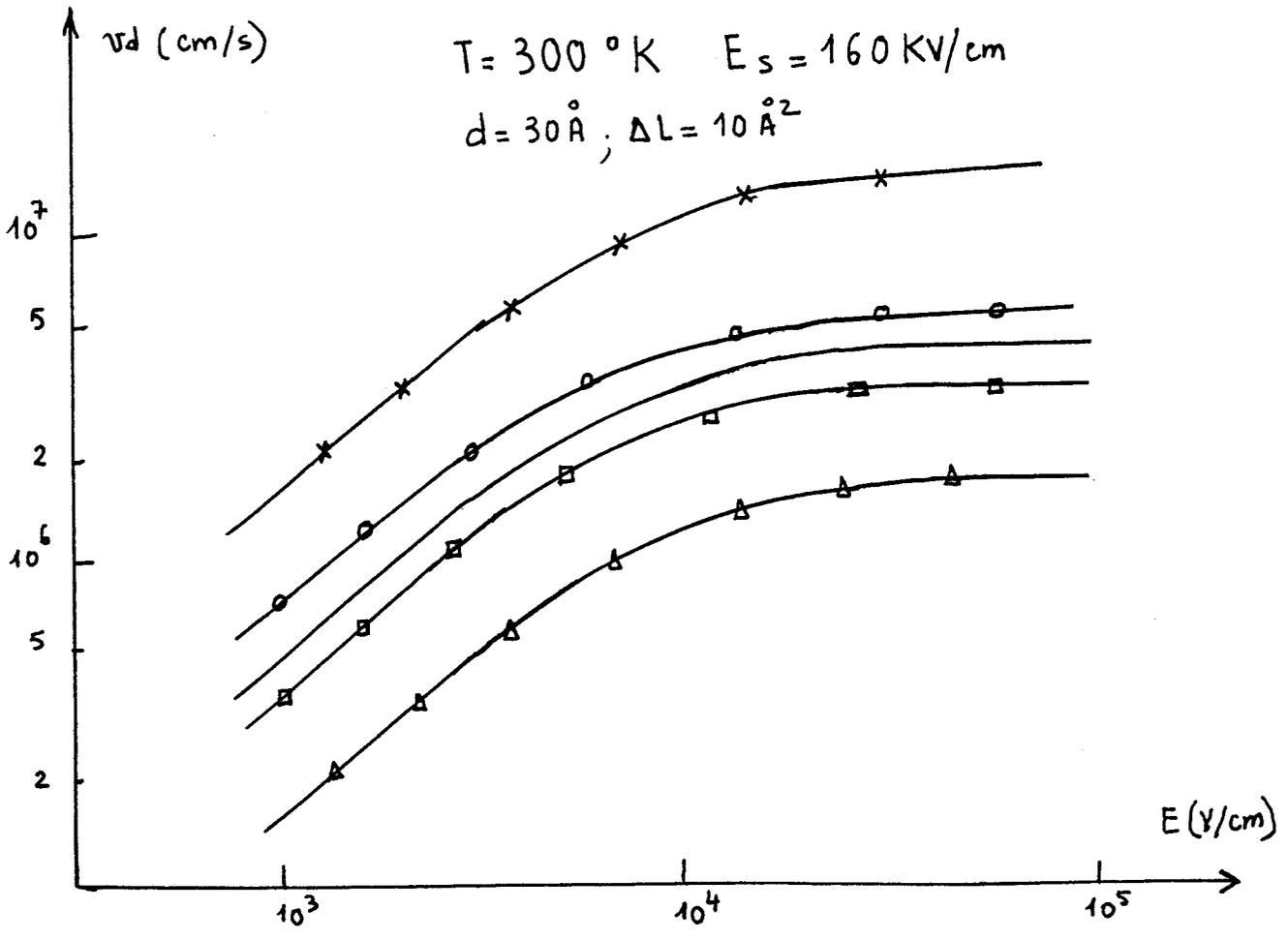
## V CARACTERISTIQUES DE TRANSPORT DANS UNE COUCHE D'INVERSION EN CHAMP FORT A LA TEMPERATURE AMBIANTE

Nous venons d'étudier la mobilité ohmique des porteurs pour des structures avec des caractéristiques d'interface différentes. Nous allons maintenant poursuivre cette étude en régime de champ de dérive élevé et nous allons comparer les résultats obtenus par simulation numérique aux résultats expérimentaux de la littérature.

### V.1 CAS DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE COEN ET AL [23]

#### V.1.1 Orientation de surface (100)

La figure 63 représente la caractéristique expérimentale de vitesse de dérive en fonction du champ longitudinal à la température ambiante et pour un champ de surface de 160 kV/cm. Nous avons représenté également sur la même figure les résultats numériques obtenus pour une structure dont l'épaisseur de la zone de transition est de 30Å et le paramètre de rugosité de  $\Delta L = 10\text{Å}^2$ , pour différentes valeurs de la densité de charge  $Q_{SS}$  stockées dans la couche de transition [25]. On peut constater que si la courbe obtenue pour  $Q_{SS} = 0$  ne présente pas d'effet de saturation marquée comme c'était le cas pour les modèles précédents, il n'en est plus de même lorsque la densité  $Q_{SS}$  n'est plus nulle. Dans ce cas, le phénomène de saturation de la vitesse est obtenu et les caractéristiques théoriques et expérimentales présentent des formes tout à fait analogues, un accord très satisfaisant pouvant être obtenu pour une densité de charge  $Q_{SS}$  de l'ordre de  $3 \cdot 10^{10} \text{cm}^{-2}$  (valeur comparable aux ordres de



- résultats expérimentaux COEN et MULLER
- x — Simulation Monte Carlo :  $Q_{SS} = 0$
- o — :  $Q_{SS} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$
- □ — :  $Q_{SS} = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$
- Δ — :  $Q_{SS} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$



Figure 63 Caractéristiques vitesse-champ électrique pour différentes valeurs de charges stockées dans la couche de transition,

grandeurs expérimentaux :  $10^{10}$  à  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ). Afin d'interpréter ce phénomène de saturation, il nous a paru intéressant d'étudier l'évolution spatiale de la concentration des porteurs selon la direction perpendiculaire à l'interface. Pour cela, nous avons représenté, sur la figure 64, la répartition de la densité des porteurs au voisinage de l'interface pour deux valeurs du champ longitudinal correspondant respectivement au régime ohmique ( $E_x = 5 \text{ kV/cm}$ ) et au régime de saturation ( $E_x = 100 \text{ kV/cm}$ ). On peut remarquer que la densité des porteurs à l'interface est toujours très élevée (supérieure à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) et qu'une proportion importante de porteurs (20 à 25 %) pénètrent dans la couche de transition. La profondeur de pénétration est d'autant plus grande que le champ longitudinal est élevé et les mécanismes de collisions des porteurs se trouvent alors très modifiés : une partie importante des porteurs subit l'influence de la barrière de potentiel et les collisions dues aux charges d'oxyde et à la rugosité de surface. Il en résulte que la vitesse limite des porteurs, en champ fort, se trouve notablement réduite.

On obtient des caractéristiques vitesse-champ de dérive analogues lorsque le champ de surface est élevé : c'est ce que l'on observe sur la figure 65 pour un champ de surface  $E_S = 470 \text{ kV/cm}$  et une structure identique à la précédente (épaisseur de la zone de transition de  $30 \text{ \AA}$  et un paramètre de rugosité de surface de  $10 \text{ \AA}^2$ ).

La pénétration des porteurs dans la zone de transition, pour la gamme de champ de surface  $160 - 470 \text{ kV/cm}$ , ne dépend essentiellement que du champ de dérive. Il en résulte que la vitesse de saturation des porteurs est pratiquement indépendante de la valeur du champ de surface.



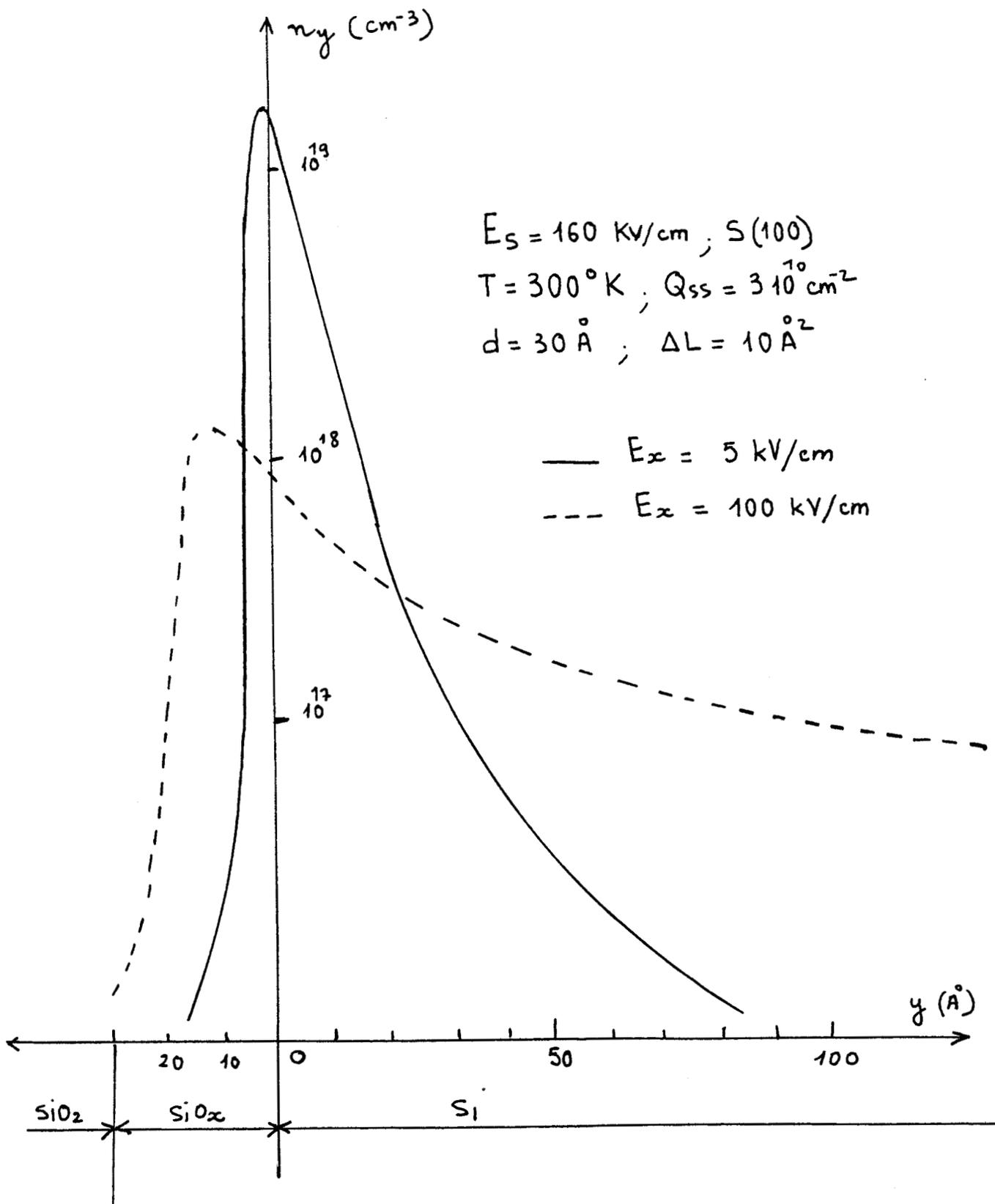


Figure 64 Répartition spatiale des porteurs



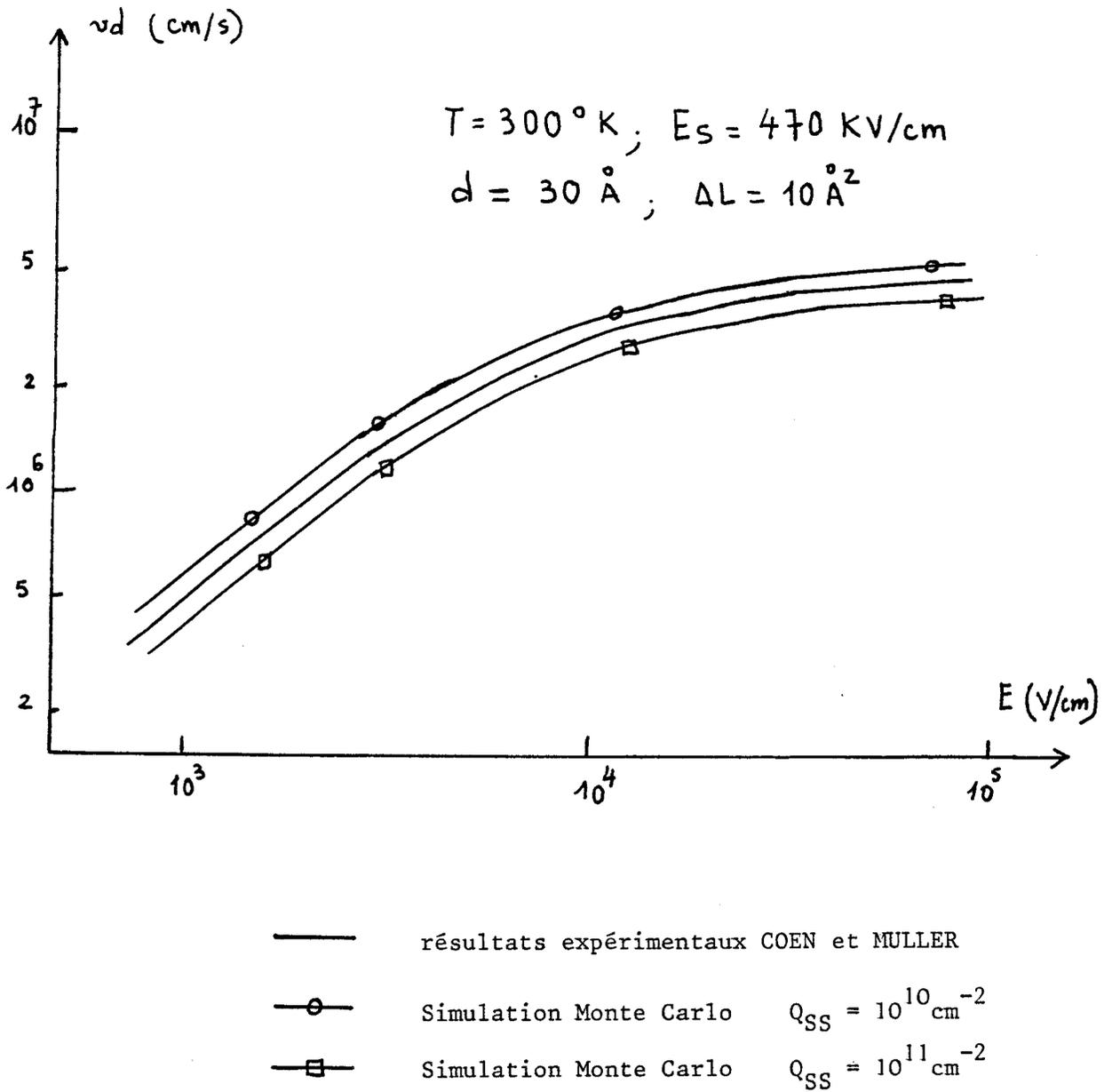


Figure 65 Caractéristiques vitesse-champ électrique pour différentes valeurs de charges stockées dans la couche de transition



### V.1.2 Orientation de surface (111)

Nous observons également le même phénomène de saturation lorsque la surface est orientée S(111). La figure 66 représente l'évolution de la vitesse moyenne en fonction du champ de dérive pour une orientation (111), dans les conditions de simulation suivantes :  $d = 5\text{Å}$  ;  $Q_{SS} = 10^{11} \text{cm}^{-2}$  et  $\Delta L = 0$ . La température est de  $300^\circ\text{K}$  et le champ de surface a pour valeur  $260 \text{kV/cm}$ . On constate cette fois encore, un accord satisfaisant sur l'ensemble de la caractéristique vitesse-champ électrique.

### V.2 CAS DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DE NELSON ET AL [22]

Nous allons appliqué la procédure d'analyse utilisée précédemment aux résultats expérimentaux de NELSON et al [22] en tenant compte que dans ce cas la densité de charges d'oxyde est connue et vaut  $Q_{SS} = 3.5 \cdot 10^{10} \text{cm}^{-2}$ , valeur donnée par les auteurs.

Comme le montre la figure 67, l'utilisation d'une structure dont les caractéristiques d'interface sont  $d = 5\text{Å}$  et  $\Delta L = 2\text{Å}^2$  permet de rendre compte à la fois du régime ohmique et du régime des porteurs chauds et ceci pour toute la gamme de champ de surface 40 à 500 kV/cm.

Dans ces conditions, quelle que soit la valeur du champ de surface, les porteurs pénètrent peu dans la zone de transition ( voir figure 68 ) et les phénomènes de transport en champ fort dans la couche d'inversion sont voisins de ceux des porteurs en volume. Il en résulte que le régime des porteurs chauds n'est pratiquement pas modifié et la vitesse de saturation est indépendante du champ de surface.

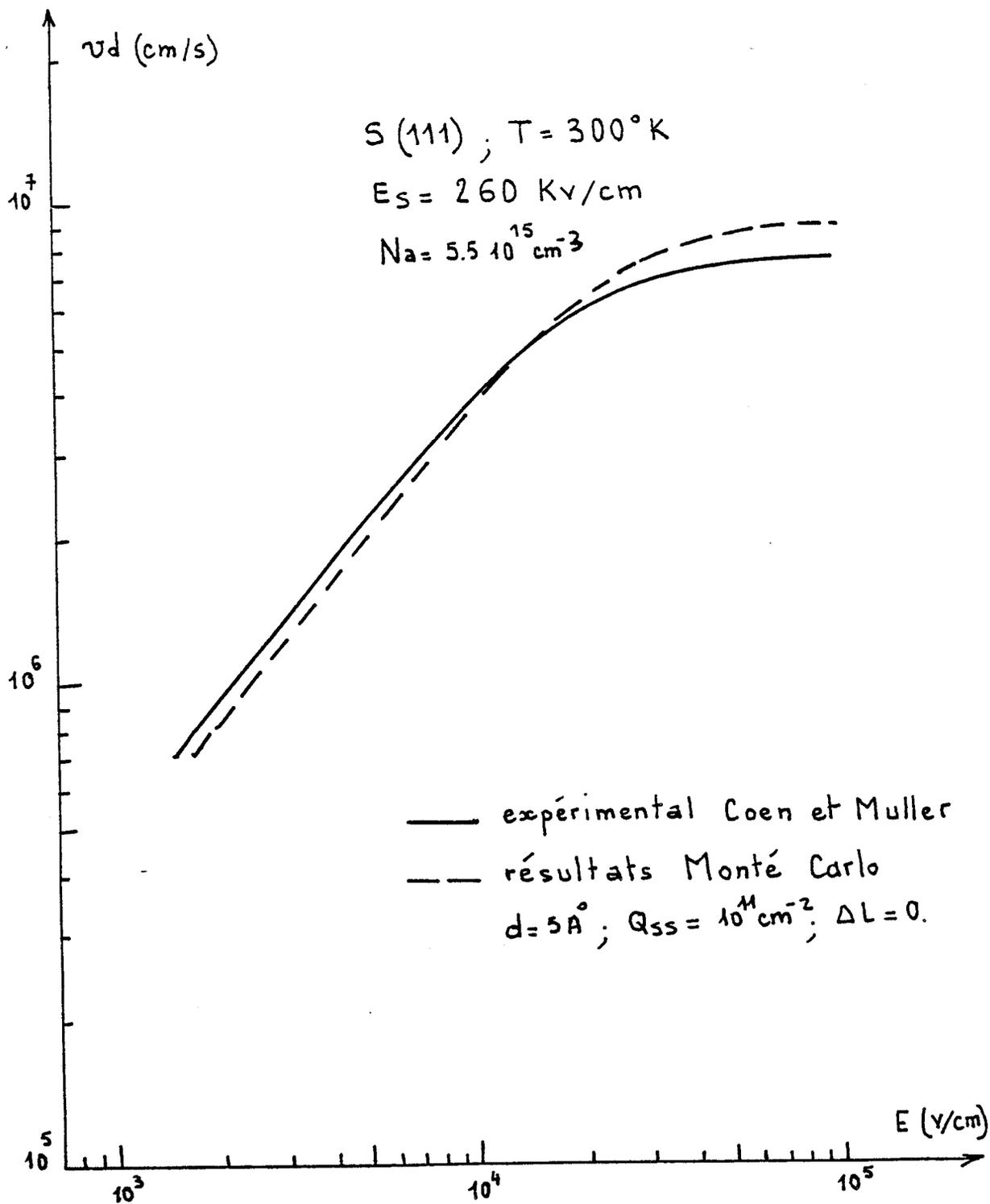


Figure 66 Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique

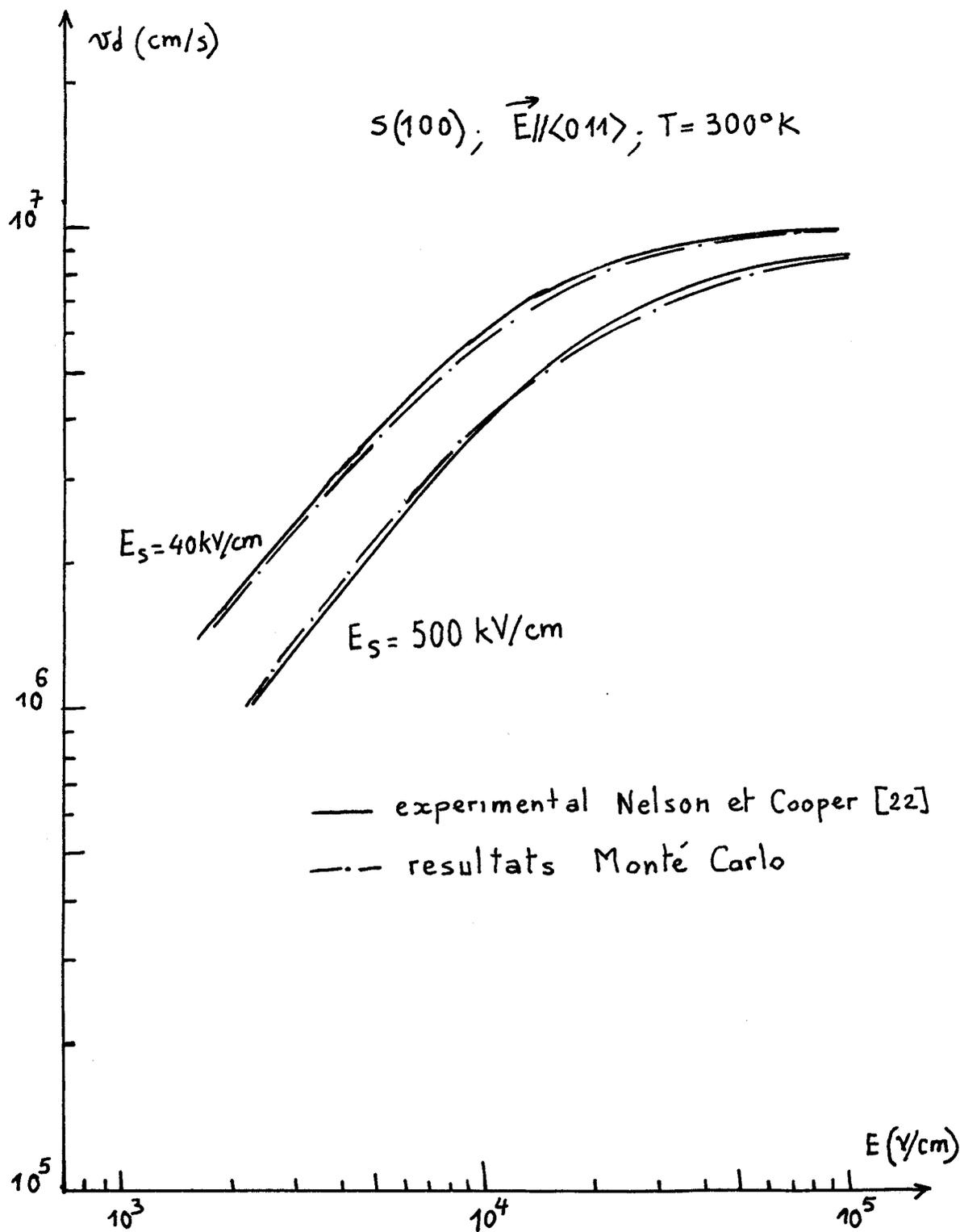
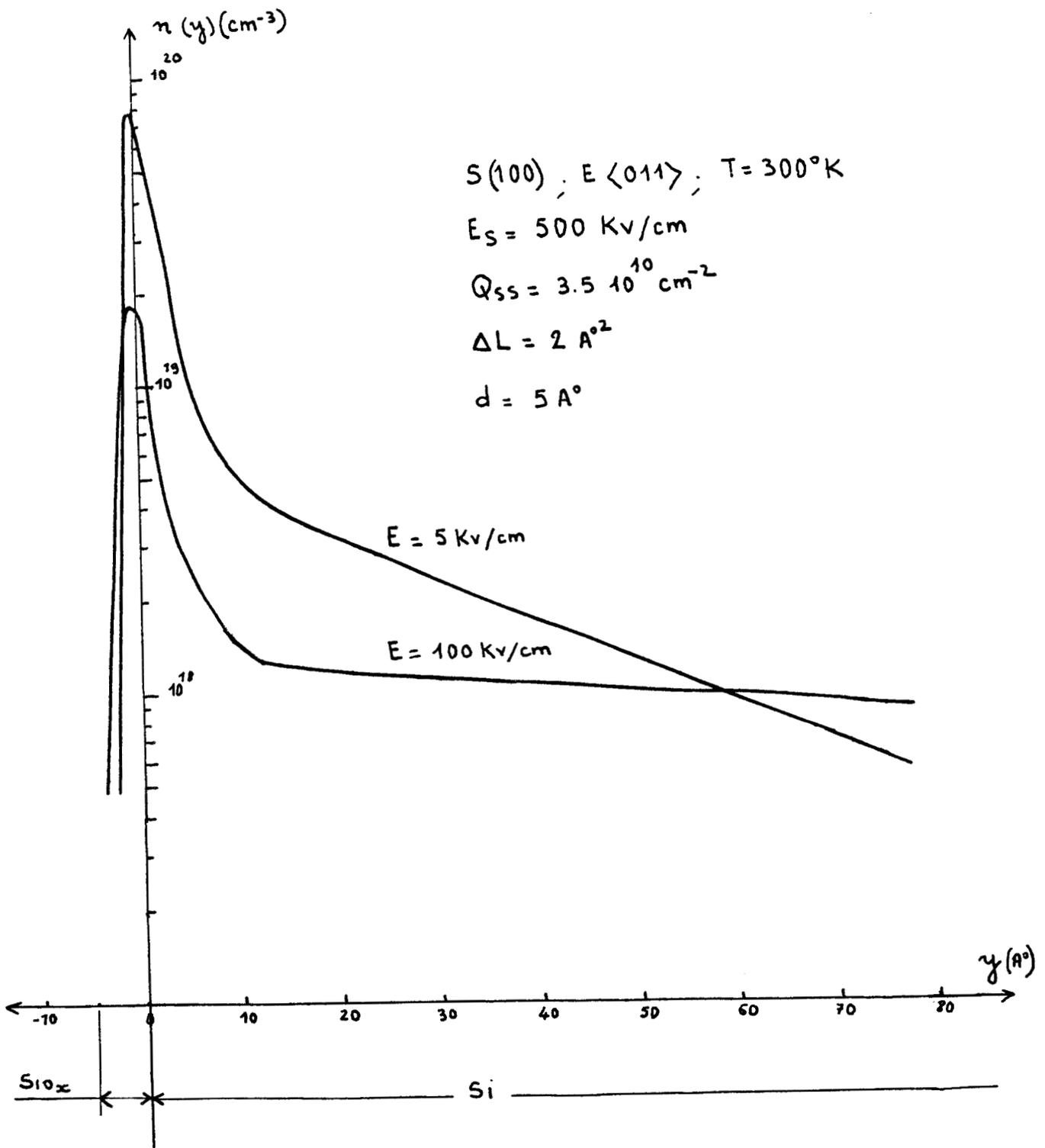


Figure 67 Vitesse de d rive en fonction du champ  lectrique





$S(100)$ ,  $E \langle 011 \rangle$ ;  $T = 300^\circ\text{K}$

$E_S = 500 \text{ Kv/cm}$

$Q_{SS} = 3.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$

$\Delta L = 2 \text{ \AA}^2$

$d = 5 \text{ \AA}$



Figure 68 Représentation spatiale de la concentration des porteurs obtenue par Monte Carlo

V.3 PROFILS DE L'ENERGIE ET DE LA VITESSE DE DERIVE DES PORTEURS  
EN FONCTION DE LA DISTANCE A L'INTERFACE.  
PROFIL DU CHAMP ELECTRIQUE TRANSVERSAL.

Dans ce paragraphe, nous allons étudier l'évolution de quelques grandeurs physiques ( énergie, vitesse ) en fonction de la distance à l'interface. Nous considérons la structure MOS dont les caractéristiques de la zone de transition ont été déterminées précédemment par comparaison aux résultats de NELSON et al [22] (  $d = 5\text{Å}$ ,  $\Delta L = 2\text{Å}^2$  et  $Q_{SS} = 3.5 \cdot 10^{10} \text{cm}^{-2}$  ). L'interface est orientée (100) et le champ de surface est supposé égal à 500 kV/cm.

Comme on pouvait le remarquer antérieurement sur l'allure du profil de concentration des porteurs, pour une valeur élevée de champ de dérive, les porteurs diffusent vers l'intérieur du semi-conducteur ( voir figures 64 et 67 ) provoquant ainsi une diminution de la densité des porteurs dans la zone  $\text{SiO}_x$ . Il en résulte une modification importante du profil du champ électrique selon la direction  $\vec{oy}$  ( figure 69 ). En pénétrant dans la région  $\text{SiO}_x$ , les porteurs subissent l'influence de la barrière de potentiel en transformant une partie de leur énergie cinétique en énergie potentielle. L'énergie moyenne des porteurs diminue alors en fonction de la profondeur dans la zone  $\text{SiO}_x$ . Etant donné que l'effet de rugosité de surface et de la charge d'oxyde se trouvent réduits ( faibles coefficients de rugosité et faible densité de charges d'oxyde ), les collisions des porteurs deviennent moins importantes permettant l'obtention des vitesses relativement élevées. En quittant cette région, les porteurs récupèrent leur énergie cinétique et se trouvent chauffés par rapport à l'énergie moyenne. Dans ces conditions, les collisions deviennent importantes et la vitesse moyenne des porteurs se trouve réduite. Loin de l'interface,

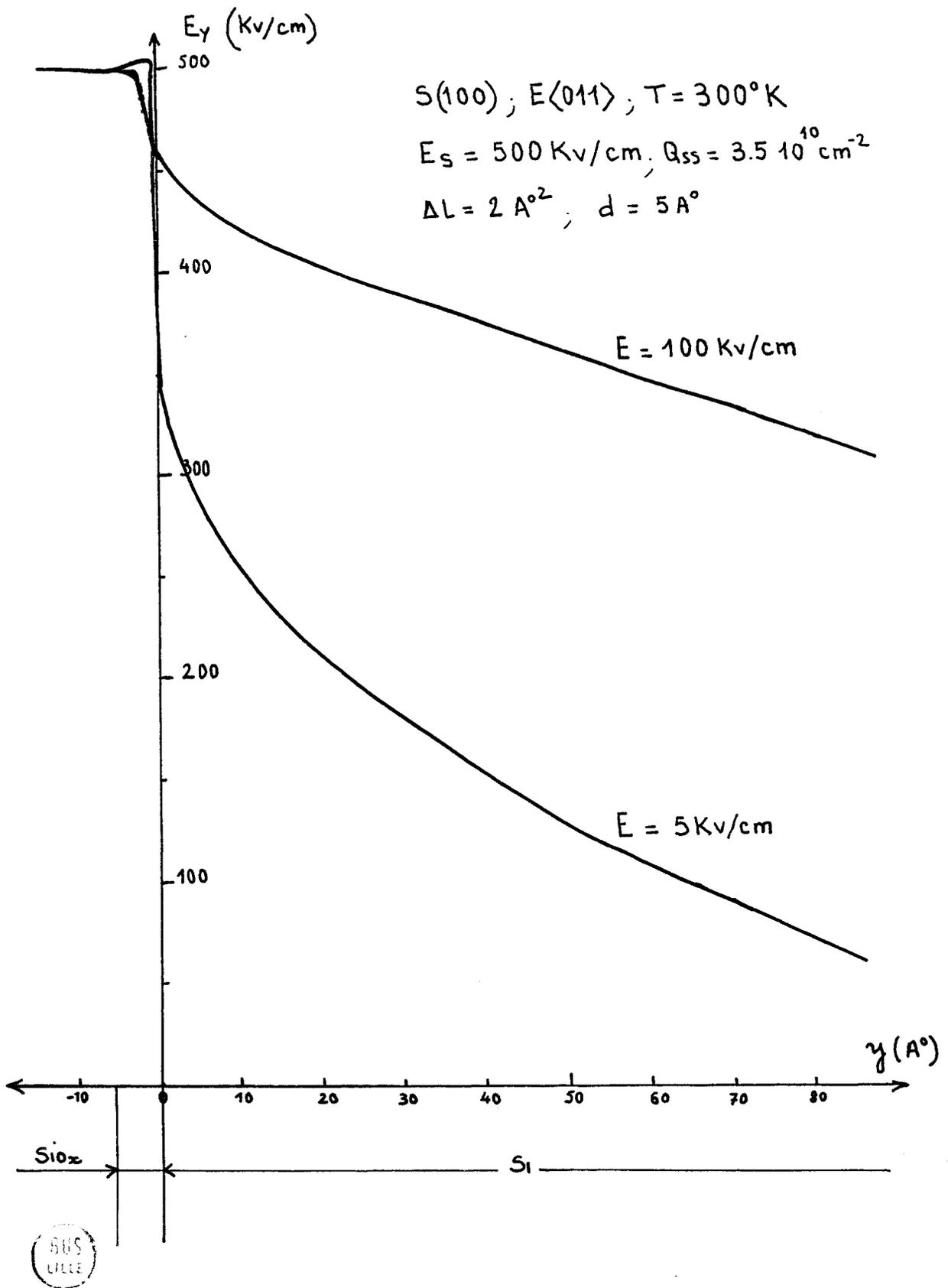


Figure 69 Représentation spatiale du champ transversal  
obtenue par simulation Monte Carlo

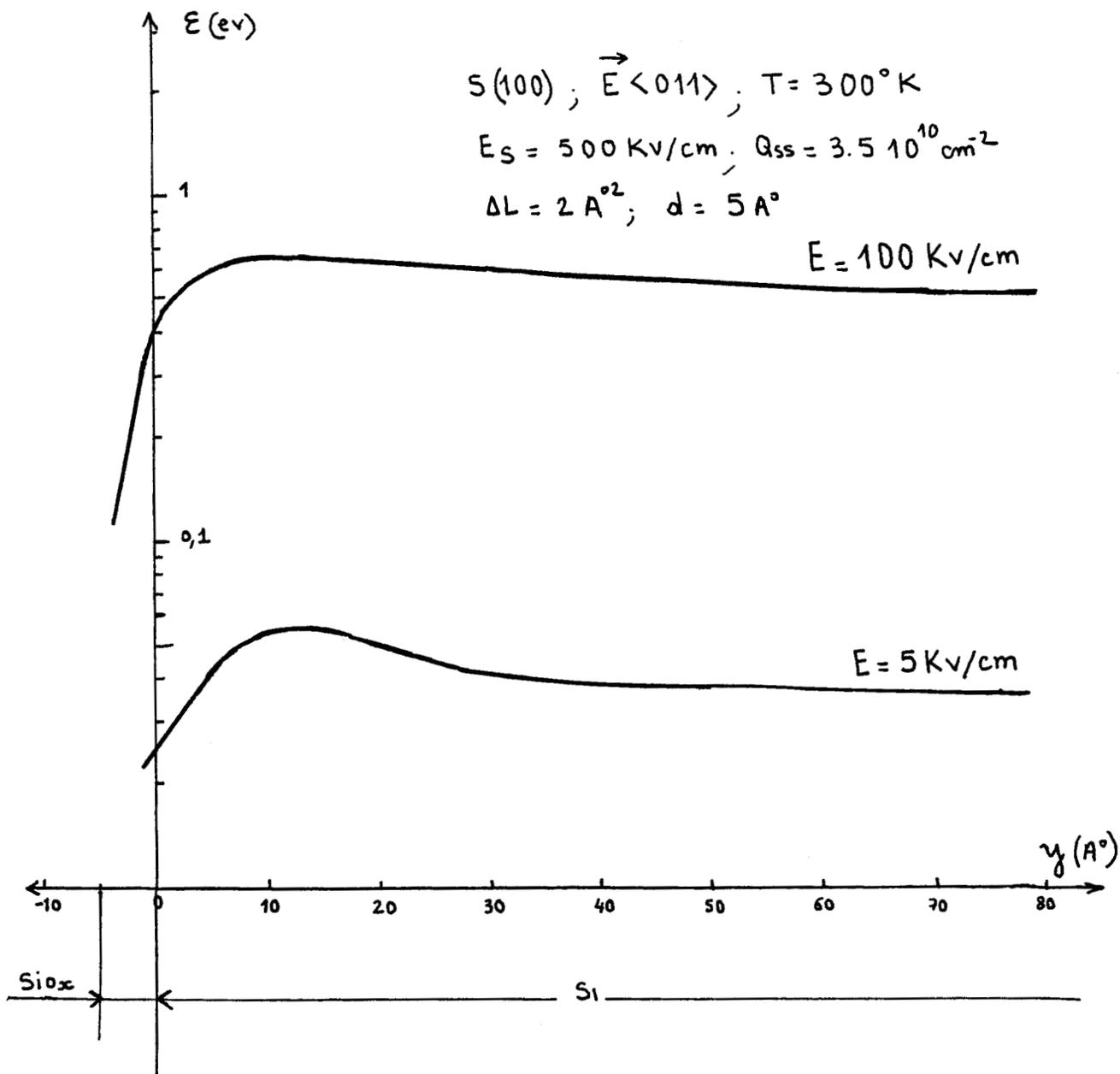


Figure 70 Représentation spatiale de l'énergie moyenne des porteurs obtenue par simulation Monte Carlo



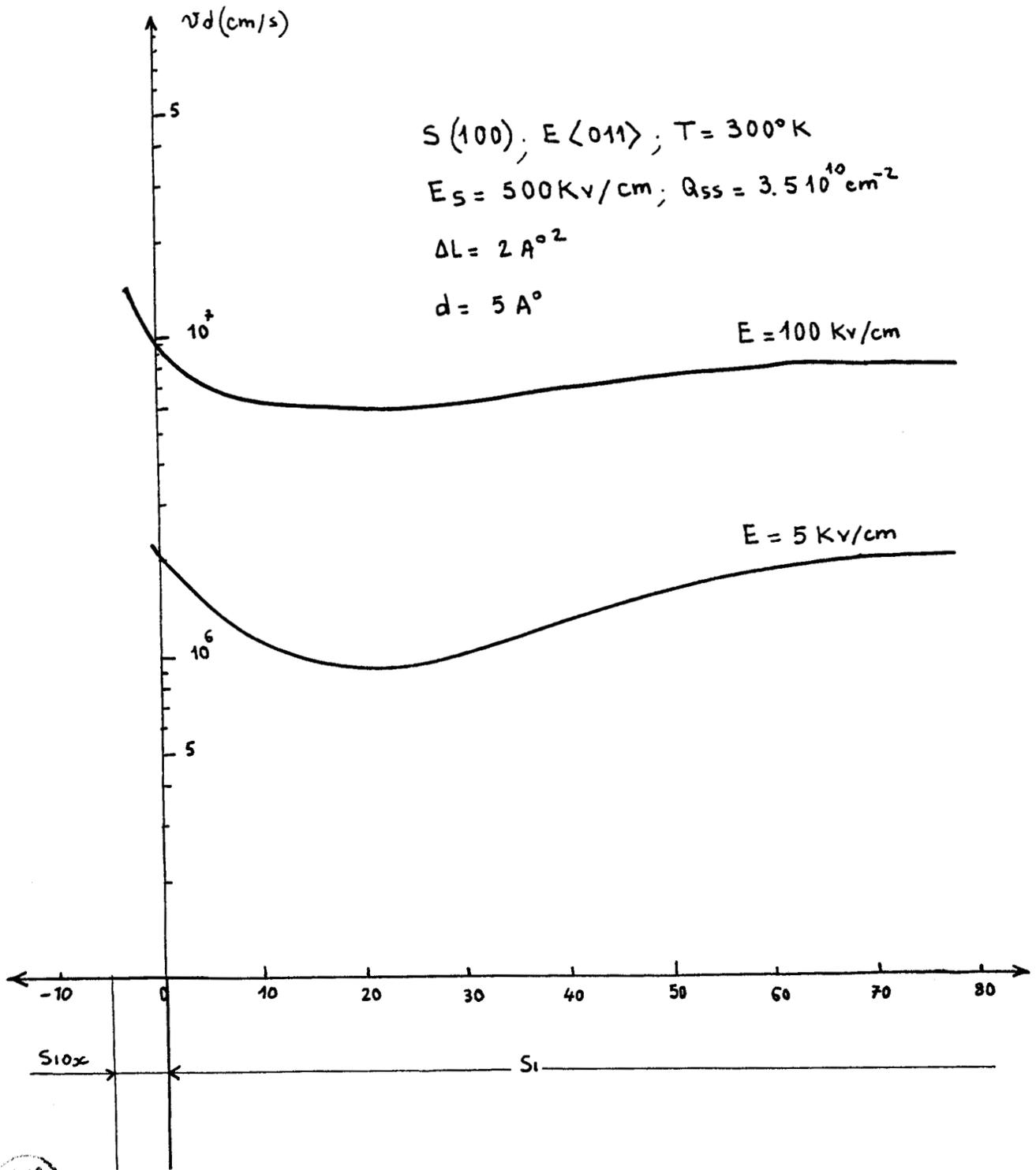


Figure 71 Représentation spatiale de la vitesse moyenne de dérive obtenue par simulation Monte Carlo

on constate, comme on pouvait le prévoir, que les porteurs ont un comportement proche du comportement en volume.

Ceci est illustré dans les figures 70 et 71, où nous avons représenté respectivement l'évolution de l'énergie moyenne et de la vitesse moyenne de dérive des porteurs en fonction de la distance à l'interface pour deux valeurs du champ de dérive :  $E_x = 5 \text{ kV/cm}$  ( régime ohmique ) et  $E_x = 100 \text{ kV/cm}$  ( régime de saturation ).

Il est à noter que, les porteurs qui se trouvent dans la zone  $\text{SiO}_x$  ont une énergie moyenne de l'ordre de  $kT$ , ceci montre l'aspect bidimensionnel du mouvement de ces derniers et ceci sera étudié ultérieurement.

Il est à noter également que les phénomènes de repopulation des vallées en fonction du champ électrique de dérive est le même que celui qui se manifeste dans le modèle à deux couches pour une orientation de surface (100) ( voir paragraphe III 2.2, chapitre II, partie 2 )

## VI INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE FONCTIONNEMENT DU COMPOSANT

Ce paragraphe est consacré à l'étude des phénomènes de transport en fonction de la température de réseau. Nous considérons, d'abord l'évolution de la mobilité des porteurs en régime ohmique puis, nous aborderons l'étude de la vitesse de saturation.

### VI.1 SUR LA MOBILITE OHMIQUE DES PORTEURS

Nous avons représenté, sur la figure 72, pour les orientations de surface S(100) et S(111), l'évolution de la mobilité ohmique



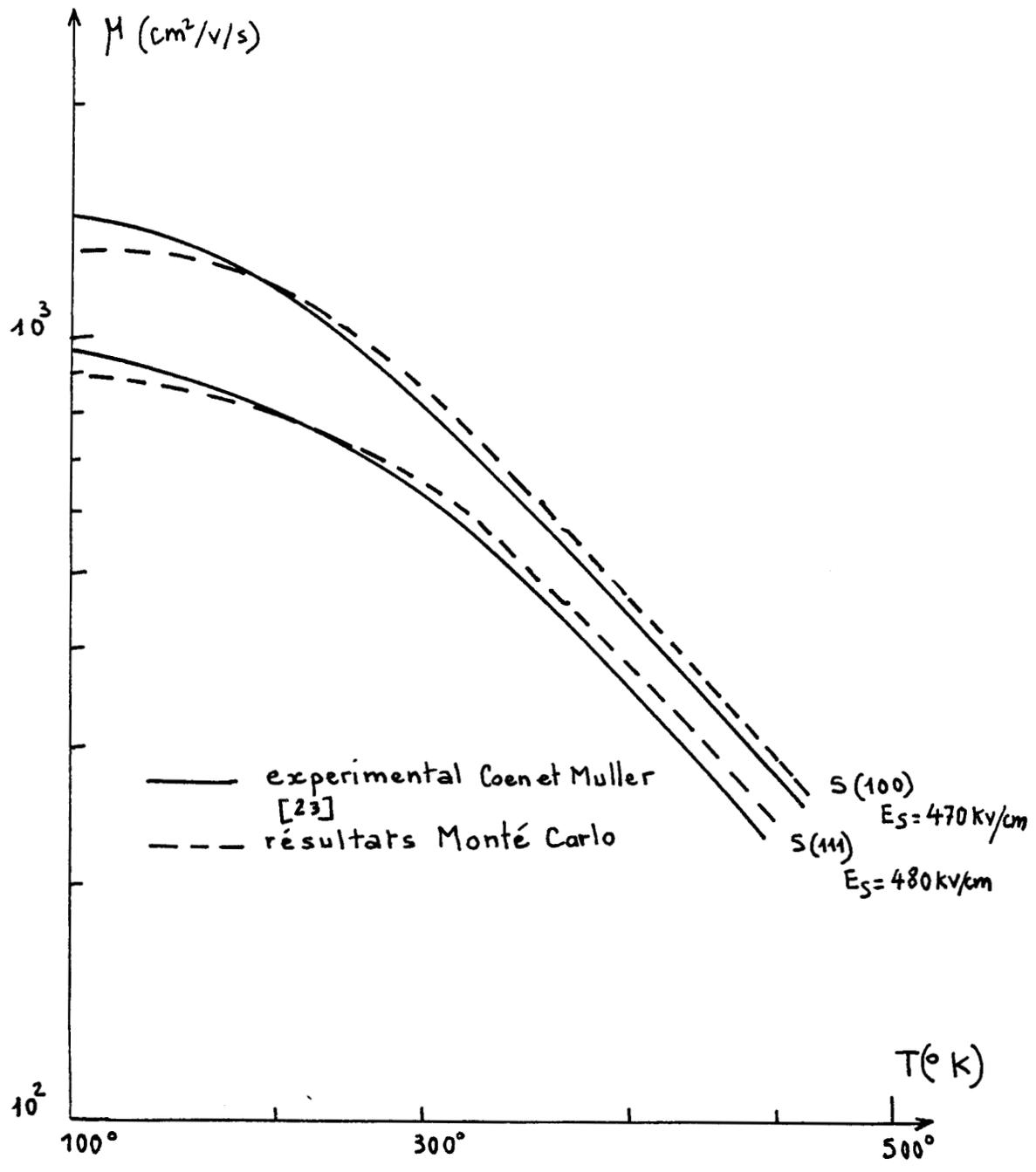


Figure 72 Mobilité ohmique en fonction de la température de réseau



obtenue expérimentalement par COEN et al [23] en fonction de la température de réseau. De la même façon, nous avons reporté les résultats obtenus par simulation Monte Carlo, pour chaque orientation de surface pour la même valeur expérimentale du champ de surface et dans les conditions suivantes :

Pour l'orientation S(100) :

- l'épaisseur de la région  $\text{SiO}_x$  est de  $30\text{\AA}$
- la densité de charges d'oxyde est de  $3 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$
- le coefficient de rugosité de l'état de surface est de  $10\text{\AA}^2$

Pour l'orientation S(111)

- l'épaisseur de la région  $\text{SiO}_x$  est de  $5\text{\AA}$
- la densité de charges d'oxyde est de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$
- le coefficient de rugosité de surface est nul

La concordance entre les résultats théoriques et expérimentaux s'avère très satisfaisante sur une large gamme de température.

## VI.2 SUR LA VITESSE DE SATURATION

Dans ce qui suit, nous nous intéressons à l'évolution de la vitesse de saturation des porteurs en fonction de la température de réseau.

### VI.2.1 Orientation de surface S(100)

Nous avons reporté sur la figure 73, les résultats expérimentaux de la littérature correspondant à l'orientation S(100) [22, 23,]

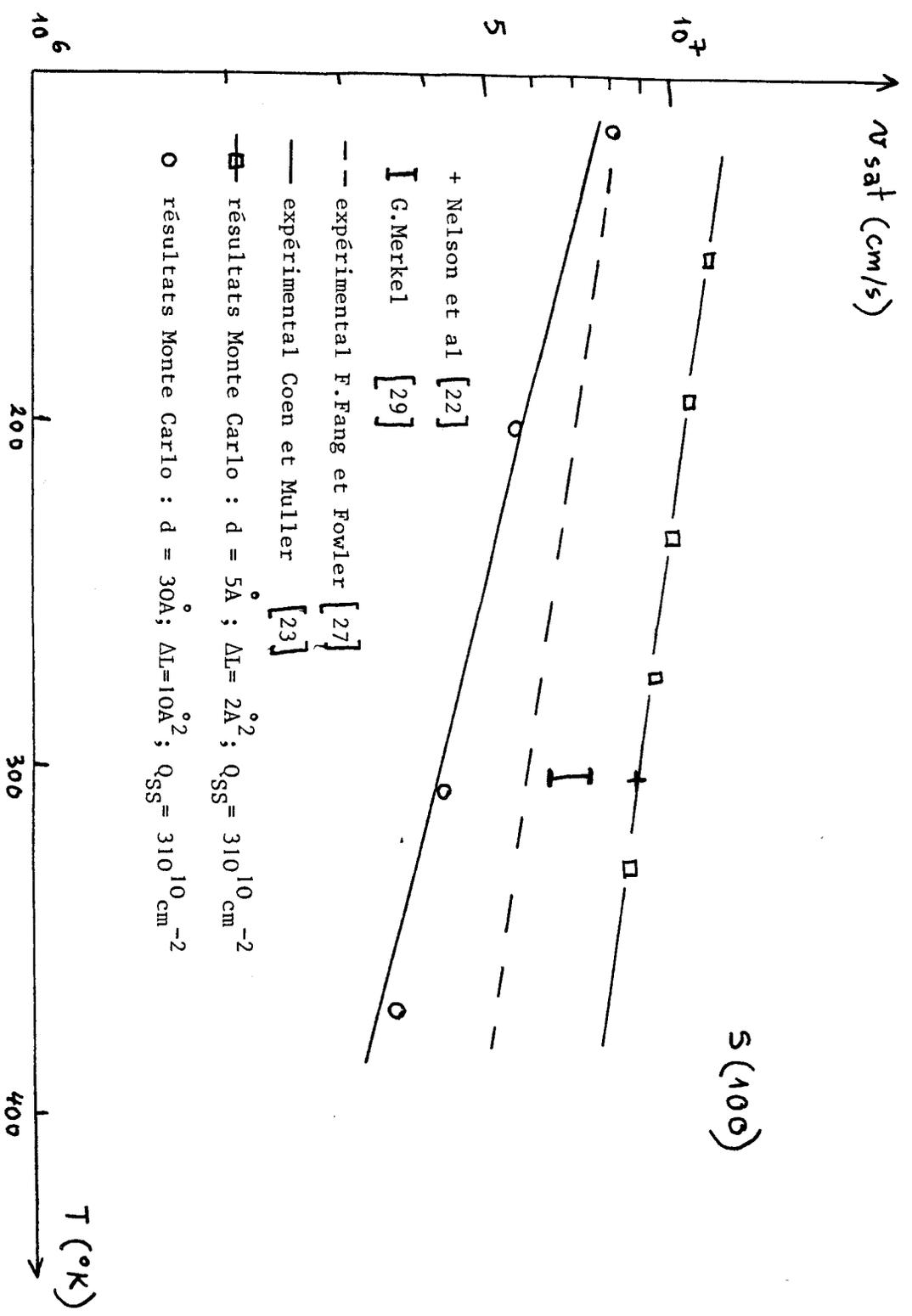


Figure 73 Evolution de la vitesse limite des porteurs en fonction de la température-orientation de surface S(100)



[27,29] et les résultats obtenus par simulation Monte Carlo pour les deux types d'interfaces suivants :

- Le premier interface présente une épaisseur de la zone  $\text{SiO}_x$  de  $5\text{\AA}$ , un produit des coefficients de rugosité de surface de  $2\text{\AA}$  et une densité de charges d'oxyde de  $310^{10}\text{ cm}^{-2}$ . Ceci correspond aux paramètres de simulation nécessaires pour obtenir une bonne concordance avec les résultats expérimentaux de NELSON à la température ambiante.

- Le second interface a une épaisseur de la couche de transition de  $30\text{\AA}$ , un produit des coefficients de rugosité de surface de  $10\text{\AA}^2$  et une densité de charge de  $310^{10}\text{ cm}^{-2}$ ; et correspond à la structure définie précédemment par comparaison aux résultats de COEN.

On peut alors observer les faits suivants :

- La vitesse limite des porteurs calculée présente une dépendance exponentielle en fonction de la température.

- Les résultats théoriques pour le second type d'interface sont très concordants avec l'ensemble des résultats expérimentaux de COEN dans toute la gamme de température

- Les résultats expérimentaux obtenus par FANG, NELSON et MERKEL sont encadrés par les résultats de la simulation numérique pour les deux cas limites de l'interface.

## VI.2.2 Orientation de surface S(111)

Par ailleurs, nous avons effectué une étude analogue lorsque la surface est orientée S(111) et nous avons considéré également deux

types d'interfaces :

- Le premier a une épaisseur de transition de  $5\text{\AA}$ , un produit des coefficients de rugosité nul et une densité de charges d'oxyde de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

- Le second présente une épaisseur de la zone  $\text{SiO}_x$  de  $30\text{\AA}$ , un produit des coefficients de rugosité  $8\text{\AA}^2$  et une densité de charges d'oxyde de  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Les résultats sont représentés sur la figure 74 où nous avons également reporté les résultats obtenus expérimentalement 23,27,28 .

Comme précédemment, nous observons une évolution exponentielle de la vitesse limite des porteurs en fonction de la température et nous pouvons constater que l'ensemble des résultats expérimentaux de la littérature est pratiquement compris entre les résultats obtenus par simulation, pour les deux types limites d'interfaces.

## VII REMARQUES

Compte tenu de la particularité des mécanismes de collisions des porteurs avec la barrière de potentiel dans le modèle à trois couches, il nous a semblé intéressant d'étudier la nature du mouvement de l'ensemble des porteurs en fonction de la température et du champ de dérive.

Pour effectuer cette étude, nous avons défini la probabilité  $P_b$  pour qu'un porteur de la région  $\text{SiO}_x$  ait un mouvement bidimensionnel parallèlement à l'interface par la relation :

$$P_b = \frac{t_b}{T}$$

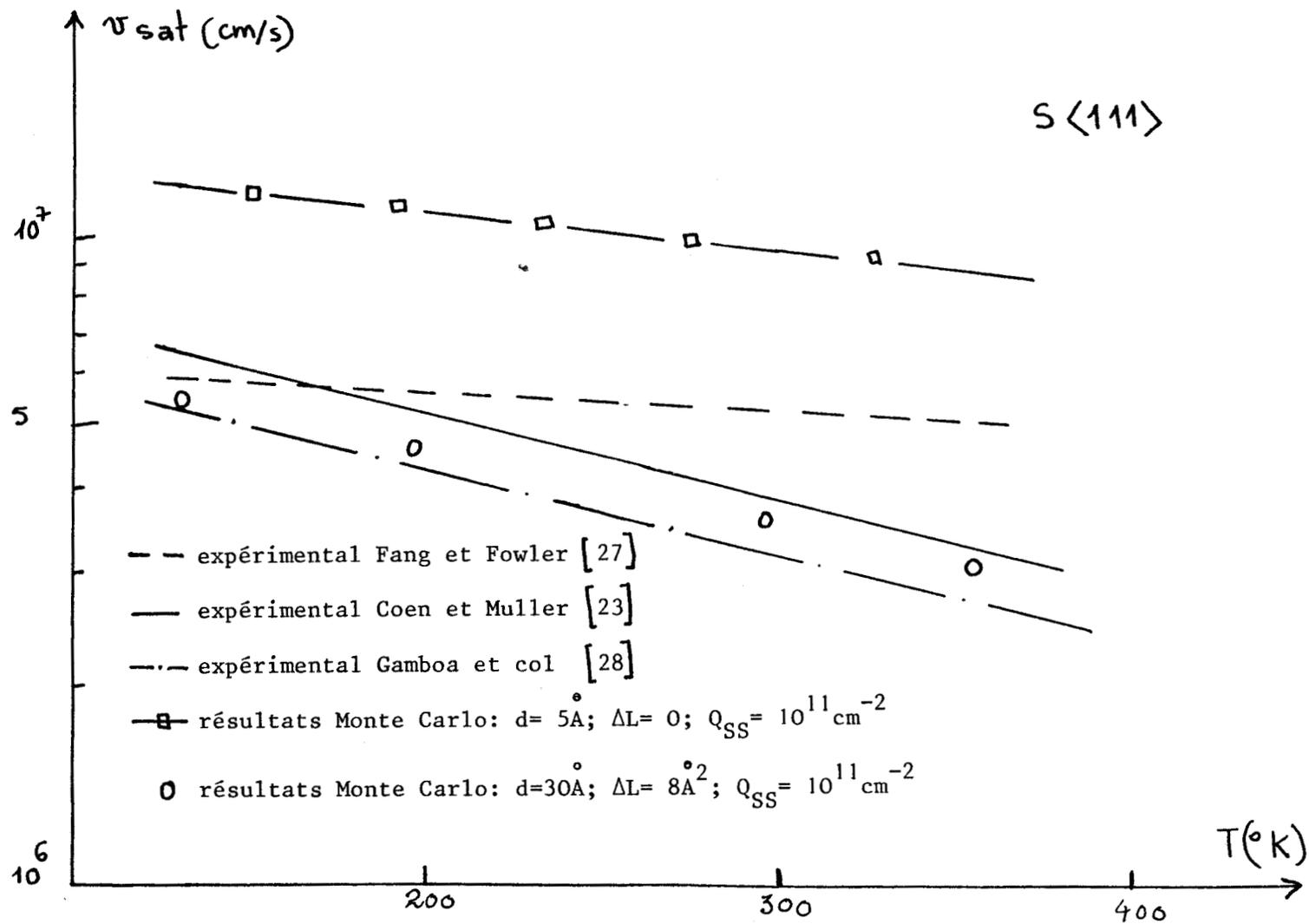


Figure 74 Evolution de la vitesse limite des porteurs en fonction de la température-orientation de surface S(111)



ou T est la durée d'observation et  $t_b$  représente le temps durant lequel le porteur se trouve sur la barrière de potentiel et a donc un mouvement parallèle à l'interface (  $K_y=0$  ).

## VII.1 EVOLUTION DE LA NATURE DU MOUVEMENT DES PORTEURS EN FONCTION DE LA TEMPERATURE

La figure 75 représente les évolutions de la probabilité  $P_b$ , selon la valeur du champ de surface, en fonction de la température de réseau pour une structure MOS dont l'interface présente les caractéristiques suivantes :  $d = 5\text{Å}$  ;  $\Delta L = 2\text{Å}^2$  et  $Q_{SS} = 310^{10}\text{cm}^{-2}$ . Le champ de dérive est supposé égal à 5kV/cm. Il apparaît que :

- Aux basses températures, les collisions des porteurs de la région  $\text{SiO}_x$  sont moins importantes et la probabilité  $P_b$  est élevée, montrant la prédominance de la nature bidimensionnelle du mouvement des porteurs. Nous obtenons ainsi, un gaz d'électrons quasi-bidimensionnel.

- Aux températures élevées, les porteurs de la région  $\text{SiO}_x$  subissent beaucoup plus de collisions et la probabilité  $P_b$  se trouve notablement réduite, le mouvement des porteurs redevient alors tridimensionnel.

Par ailleurs, il y a lieu de noter, qu'à une température donnée, la probabilité  $P_b$  est d'autant plus importante que le champ transversal est élevé ( voir figure 75 ).

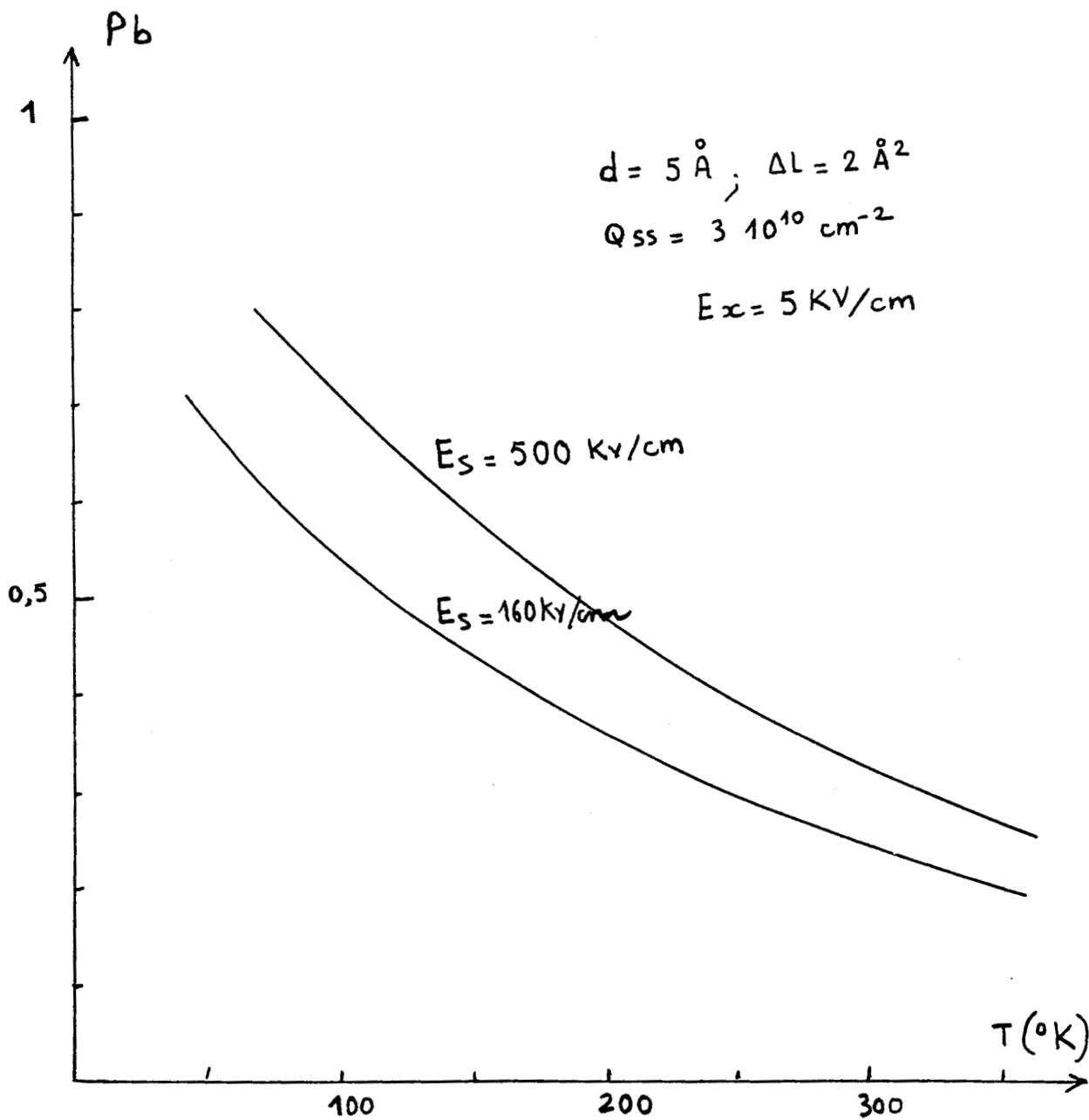


Figure 75 Evolution de la probabilité du mouvement bidimensionnel des porteurs en fonction de la température de réseau.



## VII.2 EVOLUTION DE LA NATURE DU MOUVEMENT DES PORTEURS EN FONCTION DU CHAMP DE DERIVE

La figure 76 montre les évolutions de la probabilité  $P_b$ , selon les valeurs du champ de surface, en fonction du champ de dérive  $E_x$  pour une structure identique à la précédente. La température est supposée égale à 115°K.

On constate sur ces courbes que la probabilité  $P_b$  est une fonction décroissante du champ de dérive:

- En régime de mobilité ohmique, les porteurs de la région  $SiO_x$  sont froids et leurs collisions ne sont pas importantes. Il en résulte que la probabilité  $P_b$  est importante et ceci d'autant plus que le champ de surface est grand, on a alors un gaz d'électrons à deux dimensions.

- En champ fort, les porteurs sont chauds et leurs collisions deviennent importantes, le paramètre  $P_b$  est faible et l'on retrouve la nature tridimensionnelle du mouvement.

Le modèle à trois couches peut alors apparaître, en quelque sorte, comme la généralisation des modèles quantique et à deux couches présentés dans les chapitres précédents.

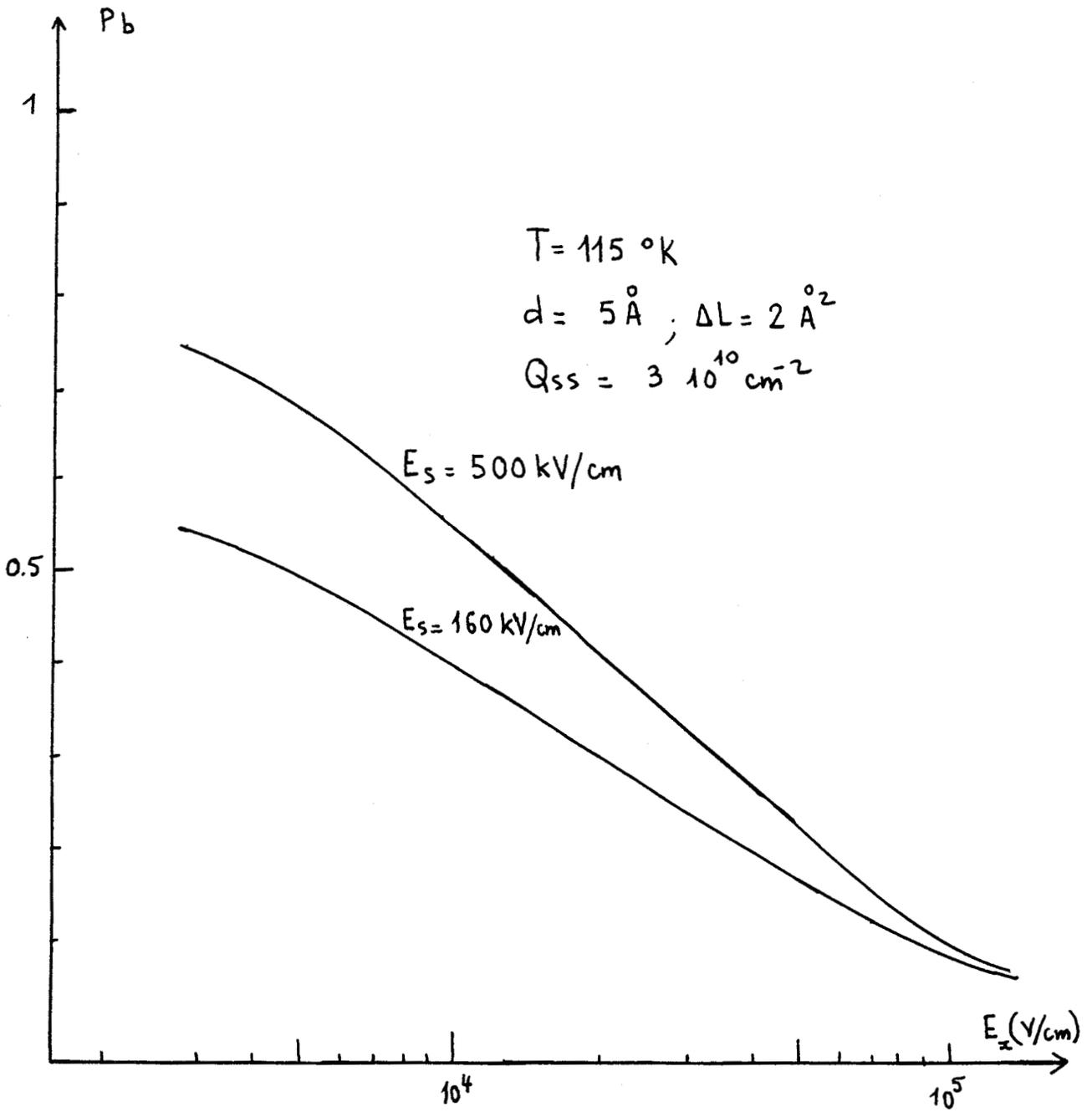


Figure 76 Evolution de probabilité du mouvement bidimensionnel des porteurs en fonction en champ électrique de dérive.



## CONCLUSION

Par une analyse précise de la morphologie de l'interface  $\text{SiO}_2$ -Si d'une structure MOS, nous avons proposé un modèle de cette structure. Ce modèle tient compte à la fois, de l'existence d'une couche de transition  $\text{SiO}_x$  et des effets des charges d'oxyde et de la rugosité de l'état de surface.

Le modèle proposé nous a permis de simuler l'ensemble de régimes des phénomènes de transport des porteurs. En particulier l'étude du régime de porteurs chauds a permis de montrer l'importance des caractéristiques de la zone  $\text{SiO}_x$  sur la valeur de la vitesse de saturation des porteurs. La concordance entre résultats théoriques et expérimentaux s'avère satisfaisante, tant en fonction de la température de fonctionnement que des conditions de polarisation de la grille. Ces résultats obtenus pour les deux orientations de surface S(100) et S(111), constituent une amélioration notable par rapport aux deux modèles précédents.

## BIBLIOGRAPHIE

- 1 C.T.SAH, T.H.NING et L.L.TSCHOPP,  
Surf Sci., vol.32, p.561 (1972)
- 2 T.H.NING et C.T.SAH,  
Phys.Rev., vol.6, p.4605 (1972)
- 3 F.STERN,  
Surf.Sci., vol.58, p.122 (1976)
- 4 A.HARTSTEIN, T.H.NING et A.B.FOWLER,  
Surf.Sci., vol.58,p.178 (1976)
- 5 A.HARTSTEIN, J.C.TSANG, D.T.DIMARIA et D.W.DONG,  
Appl.Phys.Lett., vol.36, p.836 (1980)
- 6 T.W.SIGMON, W.K.CHU, E.LUGUJJO et J.W.MAYER,  
Appl.Phys.Lett., vol.24, p.105 (1974)
- 7 J.S.JOHANNESSEN, W.E.SPICER et Y.E.STRAUSER,  
J.A.P, vol.47, p.3028 (1976)
- 8 C.R.HELMS,  
J.vac.Sci.Technol., vol.16, p.608 (1979)

- 9 J.F.WAGER et C.W.WILMSEN,  
J.Appl.Phys., vol.50, p.874 (1979)
  
- 10 C.R.HELMS,  
Insulating films on semiconductors, M.SCHULZ et G.PENSL,vol.7,p.19(1981)
  
- 11 E.CONSTANT,  
Compte rendu d'un voyage aux U.S.A (1980)
  
- 12 E.H.POINDEXTER et P.J.CAPLAN,  
Insulating films on semiconductors, M.SCHULZ et G.PENSL,vol.7,p.150(1981)
  
- 13 W.SHOCKLEY,  
Phys.Rev.vol.56, p.317 (1939)
  
- 14 A.MANY, Y.GOLDSTEIN et N.B.GROVER,  
Semiconductors surfaces, N.H.C. chapitres 5 et 9 (1965)
  
- 15 A.S.GROVE,  
Physics and technology of semiconductors devices, J.WILEY, chapitre 12  
(1967)
  
- 16 E.H.NICOLLIAN et A.GOETZBERGER,  
Appl.Phys.Lett., vol.7, p.216 (1965)
  
- 17 P.V.GRAY et D.M.BROWN,  
Appl.Phys.Lett., vol.8, p.31 (1966)

- 18 Z.A.WEINBERG, G.W.RUBLOFF et E.BASSOUS,  
Phy.Rev., vol.B19, p.3107 (1979)
- 19 K.HUBNER,  
Physica Statu solidi(b), vol.94, p.K35 (1979)
- 20 E.M.CONWELL et W.F.WEISSKOPF,  
Phys.Rev., vol.77, p.388 (1950)
- 21 H.BROOKS,  
Advances in Electronics and Electron Physics, vol.7, p.85 (1955)
- 22 High field surface drift velocities in silicon, 2<sup>nd</sup> Workshop on the  
physics of submicron devices, Urbana Illinois, Juin 1982, par  
D.F.NELSON et J.A.COOPER
- 23 R.W.COEN et R.S.MULLER,  
Solid State Electronics, vol.21, p.35 (1980)
- 24 M.GAMBOA ZUNIGA,  
Thèse de Docteur Ingénieur, Toulouse (1980)
- 25 Monte Carlo simulation of electron dynamics in MOS inversion channels,  
2<sup>nd</sup> Workshop on the physics of submicron devices, Urbana Illinois,  
Juin 1982  
CHU HAO, M.CHAREF, J.ZIMMERMANN, R.FAUQUEMBERGUE et E.CONSTANT

- 26 N.W.CHEUNG, L.C.FELDMAN, P.J.SILVERMAN et I.STENSGAARD,  
Appl.Phys.Lett., vol.35, p.859 (1979)
- 27 F.F.FANG et A.B.FOWLER,  
J.A.P. vol.41, p.1825 (1970)
- 28 M.GAMBOA, G.SARRABAYROUSE, H.TRANDUC et P.ROSSEL,  
Revue Phys.Appl., vol.15, p.973 (1980)
- 29 G.MERKEL,  
Revue Phys.Appl., vol.15, p.879 (1980)

## CONCLUSION GENERALE

Sans revenir sur les conclusions spécifiques de chaque chapitre de notre mémoire, il convient cependant de rappeler l'essentiel des résultats obtenus.

Tout d'abord, nous nous sommes intéressés à l'influence d'une surface seule sur le comportement de porteurs soumis à un champ électrique parallèle à cette surface. La simulation de type Monte Carlo est tout à fait adaptée à l'étude des phénomènes de transport au voisinage d'une surface et les résultats obtenus sont en parfait accord avec ceux obtenus par la résolution de l'équation de BOLTZMANN en champ faible.

Ensuite, nous avons étudié les phénomènes de transport électronique dans une structure MOS en régime d'inversion en considérant l'influence d'un champ électrique transversal dû à la polarisation de la grille. Dans ce cas nous avons développé et étudié successivement :

- 1) Un modèle de gaz électronique à deux dimensions, qui tient compte de la nature quantifiée de l'énergie des porteurs de la couche d'inversion, et dans lequel est introduit l'effet des charges stockées à l'interface ainsi que la rugosité de l'interface.
- 2) Un modèle à " deux couches Si-SiO<sub>2</sub> " dans lequel l'interface est supposé parfaitement plan .

3) Un modèle à " trois couches "  $\text{Si-SiO}_x\text{-SiO}_2$  où l'interface est remplacé par une couche de transition  $\text{SiO}_x$  d'épaisseur faible dans laquelle sont localisées les charges d'oxyde et qui introduit une barrière de potentiel graduelle.

Si les modèles de gaz électronique à deux dimensions et le modèle à deux couches permettent de rendre compte de façon satisfaisante des résultats obtenus pour les caractéristiques vitesse de dérive en fonction du champ électrique, à champ électrique moyen et faible, ils ne permettent cependant pas d'obtenir, aux champs électriques élevés, le phénomène de saturation de vitesse obtenu expérimentalement. Le modèle à trois couches, permet au contraire de rendre compte de façon satisfaisante de l'ensemble des résultats expérimentaux, ceci dans une large gamme de température et de champs de surface, et pour toute amplitude du champ électrique de dérive.

L'étude que nous avons développée peut avoir divers prolongements :

- En premier lieu, compte tenu des valeurs importantes des concentrations de porteurs à l'interface, un phénomène physique intervient probablement: il s'agit de l'interaction coulombienne entre porteurs dont il faudrait tenir compte. C'est l'interaction électron-électron.

- En second lieu, compte tenu des dimensions des composants électroniques réalisés à l'heure actuelle, les évolutions du champ électrique sont bidimensionnelles et une analyse rigoureuse des propriétés d'une structure MOS nécessite une simulation Monte Carlo bidimensionnelle.

- Enfin, la modélisation par la méthode de Monte Carlo devrait permettre l'élaboration d'un modèle théorique simple basé sur les équations macroscopiques de conservation de l'énergie et du moment qui pourrait être utilisé sur des mini-calculateurs. Ainsi l'étude, que nous avons effectuée pourrait être complétée par une analyse des transistors en régime dynamique, étude qui, compte tenu des temps de calculs importants, semble pour l'instant difficilement réalisable directement avec la méthode de Monte Carlo.

Pour terminer, il faut indiquer que les méthodes utilisées dans notre étude sont assez générale et peuvent aussi bien s'appliquer à d'autres types de composants et d'autres types d'interface . En particulier on peut entreprendre l'étude des hétérojonctions entre semi-conducteur de compositions différentes, grâce à l'utilisation de modèles similaires à ceux présentés ici.

# ANNEXE 1

## DETERMINATION DE L'ETAT FINAL D'UN PORTEUR APRES COLLISION DIFFUSE

### 1) SURFACE ORIENTEE ( 100)

Le vecteur vitesse final d'un porteur subissant une collision de surface est caractérisé, dans le repère (  $x,y,z$  ), par son module  $V$ , un angle azimutal  $\alpha$  et un angle de réflexion  $\theta$  ( voir figure 1 ) respectivement distribués uniformément entre  $[0, 2\pi]$  et  $[0, \pi]$  .

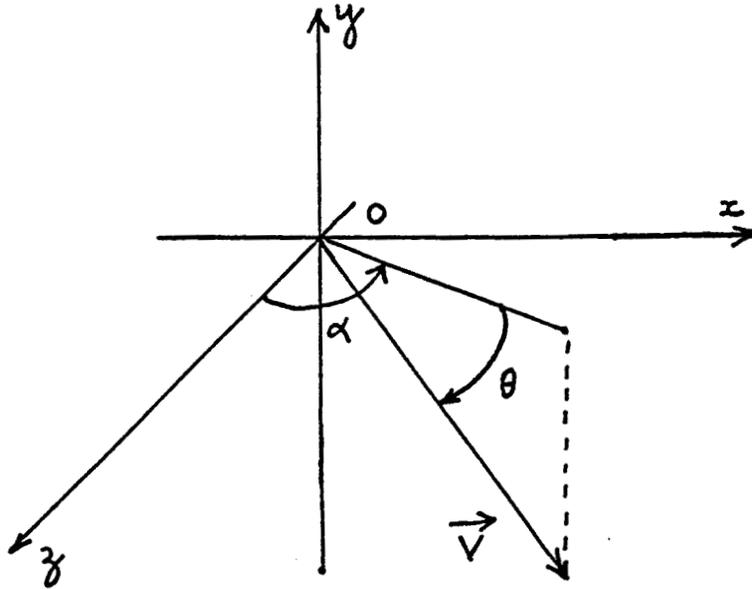


Figure 1

Le module  $V$  du vecteur vitesse est déterminé par la conservation de l'énergie. En effet, les composantes du vecteur vitesse final peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} v'_x &= V \cos \theta \sin \alpha \\ v'_y &= -V \sin \theta \\ v'_z &= V \cos \theta \cos \alpha \end{aligned} \quad (1)$$

Nous en déduisons les composantes du vecteur d'onde :

$$\begin{aligned} k'_x &= \frac{V \cos \theta \sin \alpha M_x (1 + 2\alpha \mathcal{E})}{\hbar} \\ k'_y &= - \frac{V \sin \theta M_y (1 + 2\alpha \mathcal{E})}{\hbar} \\ k'_z &= \frac{V \cos \theta \cos \alpha M_z (1 + 2\alpha \mathcal{E})}{\hbar} \end{aligned} \quad (2)$$

où  $M_x, M_y, M_z$  sont les masses effectives selon les axes  $\vec{o}_x, \vec{o}_y, \vec{o}_z$  respectivement et  $\mathcal{E}$  est l'énergie du porteur.

En utilisant l'expression de la structure de bande de conduction et le système d'équations (2), on obtient l'expression suivante du module de la vitesse finale :

$$V = \left[ \frac{\frac{2\mathcal{E}(1+\alpha\mathcal{E})}{(1+2\alpha\mathcal{E})^2}}{M_x (\cos \theta \sin \alpha)^2 + M_y \sin^2 \theta + M_z (\cos \theta \cos \alpha)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

En supposant que la collision est élastique, il est possible de déterminer la valeur du module de la vitesse finale et calculer enfin les composantes du vecteur vitesse à l'aide du système d'équations (1).

2) SURFACE ORIENTEE ( 111 )

De la même façon que dans le cas d'une surface S(100), nous caractérisons l'état final du porteur dans un repère ( v, w, u ) lié à S(111), par son module V, un angle azimutal  $\alpha$  et un angle de réflexion  $\theta$  ( voir figure 2 ) respectivement distribués uniformément entre  $[0, 2\Pi]$  et  $[0, \Pi]$  .

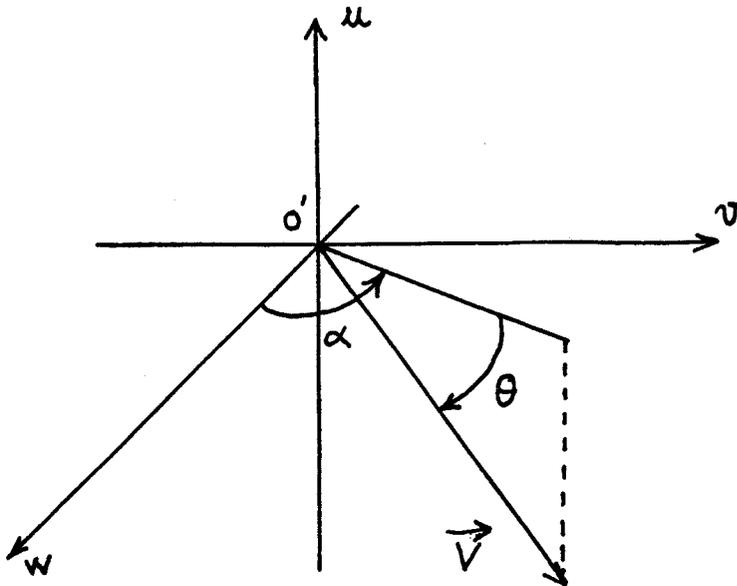


Figure 2

Alors les composantes du vecteur vitesse peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} v'_v &= V \cos \theta \sin \alpha \\ v'_u &= - V \sin \theta \\ v'_w &= V \cos \theta \cos \alpha \end{aligned} \quad (4)$$

Par ailleurs, il est possible de calculer la nouvelle expression de la structure de bande de conduction dans le repère ( v, w, u ) ( voir annexe 2 ) et d'en déduire les expressions des composantes du vecteur vitesse :

$$\begin{aligned} v_v &= \hbar ( W_{vv} K_v + W_{vu} K_u + W_{vw} K_w ) / ( 1 + 2\alpha \mathcal{E} ) \\ v_u &= \hbar ( W_{uu} K_u + W_{uv} K_v + W_{uw} K_w ) / ( 1 + 2\alpha \mathcal{E} ) \\ v_w &= \hbar ( W_{ww} K_w + W_{wv} K_v + W_{wu} K_u ) / ( 1 + 2\alpha \mathcal{E} ) \end{aligned} \quad (5)$$

A partir du système d'équation (5), on peut déduire les composantes du vecteur  $K_v, K_u, K_w$  en fonction de  $v_v, v_u, v_w$  :

$$\begin{aligned} K_v &= A [ a_1 v_v + a_2 v_u + a_3 v_w ] \\ K_u &= A [ b_1 v_v + b_2 v_u + b_3 v_w ] \\ K_w &= A [ c_1 v_v + c_2 v_u + c_3 v_w ] \end{aligned} \quad (6)$$

où A est le déterminant du système d'équations (5) et les coefficients  $a_i, b_i, c_i$  sont donnés par :

$$\begin{aligned}
 a_1 &= W_{ww} W_{uu} - W_{uw} W_{uw} \\
 a_2 &= W_{vw} W_{uw} - W_{uv} W_{ww} \\
 a_3 &= W_{uw} W_{uv} - W_{vw} W_{uu} \\
 b_1 &= W_{vw} W_{uu} - W_{ww} W_{uv} \\
 b_2 &= W_{vv} W_{ww} - W_{vw} W_{vw} \\
 b_3 &= W_{vw} W_{uv} - W_{vv} W_{uw} \\
 c_1 &= W_{uw} W_{uv} - W_{vv} W_{uw} \\
 c_2 &= W_{vw} W_{uv} - W_{uw} \\
 c_3 &= W_{vv} W_{uu} - W_{uv} W_{uv}
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

Finalement, en utilisant les systèmes d'équations (4), (6) et l'expression de la structure de bande dans le repère  $(k_v, k_u, k_w)$ , on obtient l'expression suivante du module  $V$  de la vitesse finale :

$$V = \frac{2E(1 + \alpha E)}{\hbar^2} \frac{1}{W_{uu}M^2 + W_{vv}P^2 + W_{ww}N^2 + 2W_{uv}PM + 2W_{vw}NM + 2W_{vw}NP}$$

où 
$$M = b_1 \cos \theta \sin \alpha - b_2 \sin \theta + b_3 \cos \theta \cos \alpha$$

$$N = c_1 \cos \theta \sin \alpha - c_2 \sin \theta + c_3 \cos \theta \cos \alpha$$

$$P = a_1 \cos \theta \sin \alpha - a_2 \sin \theta + a_3 \cos \theta \cos \alpha$$

En supposant que la collision est élastique, il est possible de calculer le module  $V$  et d'en déduire les composantes du vecteur vitesse final par le système d'équations (4).

## ANNEXE 2

### EXPRESSION DE LA STRUCTURE DE BANDE DE CONDUCTION DANS UN REPERE LIE A LA SURFACE S(111)

D'une façon générale, l'opérateur de l'énergie cinétique peut s'écrire :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{ij} W_{ij} P_i P_j$$

où  $P_i = \hbar K_i$  ( $K_i$  est la composante du vecteur d'onde selon l'axe  $i$ )

$$W_{ij} = \frac{1}{m_{ij}} = \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial P_i \partial P_j}$$



Pour traiter l'effet de surface S(111), on choisit un nouveau repère ( $v, w, u$ ) lié à celle-ci et une matrice de passage de la forme :

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Les quantités  $P'_i$  ( v, w, u ) et  $W'_{ij}$  ( v, w, u ) sont liées à  $P_i$  ( x, y, z ) et  $W_{ij}$  ( x, y, z ) par :

$$P'_i = \sum_k a_{ik} P_k$$

$$W'_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{jk} W_{kk}$$

où  $P_K$  et  $W_{KK}$  sont respectivement la composante de l'impulsion et l'inverse de la masse effective principale selon la direction K dans le repère ( x, y, z ).

Il en résulte :

$$P_v = (P_y - P_x) / \sqrt{2}$$

$$P_w = P_x + P_y - 2 P_z$$

$$P_u = (P_x + P_y + P_z) / \sqrt{3}$$

$$W_{vr} = (W_{yy} + W_{xx}) / 2$$

$$W_{ww} = (W_{xx} + W_{yy} + 4 W_{zz}) / 6$$

$$W_{uu} = (W_{xx} + W_{yy} + W_{zz}) / 3$$

$$W_{vu} = W_{ur} = (W_{yy} - W_{xx}) / \sqrt{6}$$

$$W_{wu} = W_{uw} = (W_{xx} + W_{yy} - 2 W_{zz}) / \sqrt{18}$$

$$W_{wr} = W_{rw} = (W_{yy} - W_{xx}) / \sqrt{12}$$

Ainsi dans le repère ( v, w, u ), l'expression de la structure de bande présente des termes non diagonaux et peut s'écrire sous la forme :

$$\mathcal{E} (1 + \alpha \mathcal{E}) = \frac{1}{2} \left[ W_{vv} P_v^2 + W_{ww} P_w^2 + W_{uu} P_u^2 + 2 W_{uv} P_u P_v \right. \\ \left. + 2 W_{uw} P_u P_w \right. \\ \left. + 2 W_{vw} P_v P_w \right]$$

