50376 1984 275



THESE

présentée

à

l'Universite des Sciences et Techniques de Lille

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR INGENIEUR

par

Dominique VUILLAUME Ingenieur ISEN

CARACTERISATION DE DEFAUTS A L'INTERFACE

SILICIUM-OXYDE DE SILICIUM DANS LES STRUCTURES M.O.S.

PAR DES METHODES SPECTROSCOPIQUES

soutenue le 10 octobre 1984, devant la commission d'examen :

Président : M FOURET Rapporteur : M BOURGOIN Examinateurs : M FAUQUEMBERGUE M LANNOO M PINARD

M ROSENCHER

A mes grand-parents,

A mes parents, Inséparablement,

A ma famille,

A l'amitié

<< Aimer et agir >>

Victor Hugo (ses dernières paroles). J'ai rarement navigué en solitaire, et arrivé au port les soutes bien pleines, il m'est agréable de remercier ceux qui ont pris part à l'aventure.

Monsieur J. BOURGOIN fut l'investigateur de ce voyage d'exploration à travers les défauts dans les semiconducteurs. C'est sous sa direction et grâce à ses conseils avisés que l'expédition fut menée à son terme. En me rappelant souvent que louvoyer est la meilleure méthode pour remonter les vents contraires, il a notablement contribué à la réussite de ce voyage.

Monsieur M. LANNOO en m'accueillant au laboratoire L.A. 253 du C.N.R.S. et en ne négligeant pas sa peine lorsqu'il fallait faire le point, ou choisir une nouvelle route, a pris une part importante à ce voyage. C'est grâce à son aide précieuse au plan théorique que fut acquis l'un des résultats les plus intéressants, sans lui le butin eut été moins beau.

Je remercie Monsieur le Professeur R. FOURET d'avoir accepté la présidence du jury. J'exprime ma gratitude à Monsieur le Professeur P. PINARD, ainsi qu'à Monsieur R. FAUQUEMBERGUE, pour l'intérêt porté à ce récit en acceptant de participer au jury.

Je remercie l'I.S.E.N. (INSTITUT SUPERIEUR D'ELECTRONIQUE DU NORD) qui m'a fourni les moyens de mettre en chantier l'un des bâtiments sur lesquels j'ai navigué. Participer au développement d'une flottille fut pour moi une expérience très enrichissante. Une fois maîtrisées, les techniques de caractérisation des défauts ont permis une poursuite rapide et fructueuse du voyage. Lors des différentes découvertes, bonnes ou mauvaises, la participation de Monsieur D. STIEVENARD s'est révélée précieuse : tantôt à la barre, tantôt à la maneuvre il a aidé à maintenir le bâteau bien à plat, toutes voiles bordées, lorsque "l'électronique" ou "les échantillons" soufflaient de travers. Les discussions que nous avons eues pendant les nombreux quarts passés ensembles ont souvent empêché de se tromper de cap. Je le remercie amicalement de son soutien.

Messieurs M. LOBET et E. ROSENCHER ont une place particulière dans ces remerciements. C'est en me procurant des échantillons de qualité qu'ils m'ont fourni des mers pour naviguer. De plus, en me faisant profiter de son expérience, Monsieur E. ROSENCHER m'a permis de surmonter les tempêtes et les embûches du voyage. Je le remercie chaleureusement pour ses conseils et d'avoir accepté de faire partie de ceux qui vont juger ce récit.

Le meilleur marin ne peut être assuré de toucher terre sans un accastillage de qualité, Monsieur D. DERESMES y a veillé avec compétence et célérité. Le soutien moral et amical des gens restés à terre est important dans ce genre d'expédition. De nombreuses personnes et en particulier les membres du laboratoire y ont pourvu avec abondance.

La réalisation matérielle de ce récit est dû à Madame G. LANNOO. Je la remercie vivement pour la disponibilité et la sympathie dont elle fit preuve sans réserve. La qualité de ce document lui est entièrement redevable.

SOMMAIRE

INTRODUCTION

CHAPITRE 1 : PHYSIQUE DE LA CAPACITE M.O.S.	
1 INTRODUCTION	1
2 STRUCTURE DE LA CAPACITE M.O.S	3
2.1 Structure de bandes. Définitions des potentiels	3
2.2 Polarisation de la capacité M.O.S	4
3 CHARGE D'ESPACE	6
3.1 Equation de Poisson	6
3.2 L'approximation de déplétion	7
4 CAPACITE	9
4.1 Accumulation	10
4.2 Déplétion	10
4.3 Inversion	12
4.3.1 Faible inversion	12
4.3.2 Forte inversion	12
5 CONCLUSION	14
CHAPITRE II : L'INTERFACE SI-SIO ₂ : DESCRIPTION ET MODELES	
1 INTRODUCTION	15

2 DESCRIPTION DE LA STRUCTURE SI-SIO ₂	15
2.1 L'oxyde	16
2.1.1 Modèle théorique	16
2.1.2 Charges parasites	16
20102 Ghargeb parabileb forferentiet	
2.2 L'interface Si-SiO ₂	18
3 MODELES THEORIQUES DES ETATS D'INTERFACE	20
3.1 Liaisons pendantes	20
3.1.1 Modèles théoriques	20
3.1.2 Modèles structuraux	23
3.2 Liaisons distordues	26
3.3 Liaisons avec des impuretés	30
4 CONCLUSION	31
CHAPITRE III : METHODE DE MESURES DES DENSITES D'ETATS	
D INIEGRACE	
1 INTRODUCTION	33
2 DYNAMIOUE DES DEFAUTS	36
2. Diminiçul Dib Dimorb IIIIIIII	
2.1 Théorie générale pour un défaut de volume	36
2.2 Application aux défauts d'interface	40
3 SPECTROSCOPIE DE CONDUCTANCE	42
3.1 Principe de base	42
3.1.1 Description phénoménologique	42
3.1.2 Modèle pour un état unique	44
3.1.3 Modele pour une distribution d'états	47
a) modèle généralisé	47
b) déplétion	52
c) faible inversion	55
d) accumulation et forte inversion	59
v v	

3.2 Influence des inhomogénéités de la structure	62
3.2.1 Origines physiques	62
3.2.2 Modèle statistique discrétisé (patchwork)	
3.2.3 Modèle aléatoire	66
3.3 Extraction des paramètres	68
3.3.1 Relation admittance équivalente-mesurée	68
3.3.2 Relation ψ_s (V _g)	71
3.3.3 Extraction des caractéristiques à partir	
de G_p/ω	72
3.4 Limites de validité	79
3.5 Conclusions	80
4 SPECTROSCOPIE DE CAPACITE TRANSITOIRE	80
4.1 Création d'un transitoire de capacité	80
4.2 Analyse du transitoire de capacité	84
4.2.1 Evolution du taux d'occupation, fenê-	
tre d'énergie	85
4.2.2 Filtrage par détection synchrone double	
phase	88
4.3 Limitations et validités de la D.L.T.S	89
4.3.1 Limite du balayage en température	89
4.3.2 Validité de la densité mesurée et du	
positionnement en énergie	90
4.3.3 Mesure des sections de capture	90
4.3.4 Influence des fluctuations de potentiel	91
4.4 Conclusion	92
5 CONCLUSION	92
CHAPITRE IV : COMPARAISON DES METHODES EXPERIMENTALES DE CARACTERISATION	
1 INTRODUCTION	93

٠

. `

.

2 PRESENTATION DES ECHANTILLONS ET CARACTERISATION	
RAPIDE	93
3 RESULTATS OBTENUS PAR $G(\omega)$	97
3.1 Echantillon de type p : LV1.1	97
3.2 Echantillon de type n : CN1.2	102
3.3 Discussion des résultats par $G(\omega)$	103
3.3.1 Fluctuations du potentiel de surface.	
présence d'amas de charges	107
3 3 2 Comportament das courbes C /w et	107
p	
consequences sur les valeurs de section	100
de capture	109
4 RESULTATS OBTENUS PAR D.L.T.S	111
	111
4.1 Procedure et resultats	111
4.2 Discussion	112
5 COMPARAISON DLTS ET $G(\omega)$	115
6 CONCLUSION	116
CHAPITRE V : INFLUENCE DES PIEGES D'OXYDE PRES DE L'IN-	
TERMEDIAIRE SI-SIO2	
1 INTRODUCTION	117
2 MISE EN EVIDENCE EXPERIMENTALE	117
2 1 Procédure de require	118
	110
2.2 Resultats experimentaux	119
3 MODELES	120
3.1 Rappels sur l'effet tunnel	123
3.2 Influence de l'effet tunnel sur la réponse	
D. I. T. S.	125
3 3 Pécultate	128
J.J REBUILALS	120
4 DISCUSSION	131
4.1 Relation entre le champ électrique et la pro-	
	121

4.2 BITET Frenkel-Poole	132
4.3 Cinétique d'émission et de capture des pièges	
d'oxyde	133
4.3.1 Influence du champ électrique lors de	
l'émission	133
4.3.2 Influence du temps de remplissage -	
section de capture tunnel	133
4.3.3 Influence du champ électrique lors de	
la capture	135
4.3.4 Influence de la fréquence	136
5 CONCLUSION	136
CHAPITRE VI : DEFAUT PONCTUEL A L'INTERFACE	
	120
$1. ~ INTRODUCTION \dots$	129
2 RESULTATS EXPERIMENTAUX	139
3 DISCUSSION	142
3.1 Localisation du piège E _s : interface ou volume	142
3.1.1 Piège de volume	142
3.1.1 Piège de volume 3.1.2 Piège ponctuel d'interface	142 144
3.1.1 Piège de volume 3.1.2 Piège ponctuel d'interface 3.1.3 Remarques importantes sur la validité du	142 144
 3.1.1 Piège de volume 3.1.2 Piège ponctuel d'interface 3.1.3 Remarques importantes sur la validité du raisonnement 	142 144 145
 3.1.1 Piège de volume 3.1.2 Piège ponctuel d'interface 3.1.3 Remarques importantes sur la validité du raisonnement	142 144 145
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148 148
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148 148 151
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148 148 151 151
 3.1.1 Piège de volume	142 144 145 146 147 148 148 148 151 151 151 151

.

.

3 MODELES	154
3.1 Modèle théorique : Génération dans le volume	155
3.1.1 Charge d'inversion	156
3.1.2 Formation de la zone d'inversion	157
3 1 3 Variation du potentiel de surface	160
3 1 / Principe de calcul de la caractória-	100
bione ((T))	161
tique C(1)	101
3.2 Modèle théorique : génération par l'interface	162
3.2.1 Equation d'évolution de la zone d'in-	
version	162
3.2.2 Taux de génération	163
3.3 Résultats de simulation	166
3.3.1 Choix entre génération de volume ou	
d'interface	167
3.3.2 Validation du modèle de génération par	
l'interface	169
4 CONCLUSION	171
CONCLUSION	173
ANNEYE T . CATCHIT CIMDLE DII TEMDO DE DEDONCE DEC	
ANNELE I: CALCOL SIMPLE DO IEMPS DE REFONSE DES	1 7 7
PORTEURS MINORITAIRES	1//
1. Constante de temps de génération	177
2. Constante de temps de recombinaison	179
3. Fréquences limites	180
J. Frequences fimites	100
ANNEXE II : FORMULATION COMPLETE DU MODELE DISCRETISE	183
ANNEXE III : SURFACE CARACTERISTIQUE. AMAS DE CHARGES	187
ANNEXE IV : BANC DE MESURE D'ADMITTANCE	189
1. Descriptif du banc électronique	189
2. Etalonnage, limites électriques des mesures	190

ANNEXE V :	COMPARAISON DE PLUSIEURS FORMULATIONS	
	STATISTIQUES DES FLUCTUATIONS DU POTEN-	
	TIEL DE SURFACE	193
ANNEXE VI -	INFILIENCE DES PIEGES DE VOLJIME SUR LA	
ANNEAD VI .	MESURE DE CONDUCTANCE	197
	MESURE DE CONDUCTANCE	177
ANNEXE VII :	CALCUL DE LA REPONSE D.L.T.S. PAR UNE	
	DETECTION SYNCHRONE DOUBLE PHASE	201
1. Répons	e D.L.T.S	201
2. Résolu	tion énergétique	203
•		
ANNEXE VIII :	DISPOSITIF EXPERIMENTAL DE D.L.T.S	207
1. Montag	e électrique	207
2. Limite	et sensibilité	208
ANNEXE IX :	STATISTIQUE D'OCCUPATION DES DEFAUTS	
	HORS EQUILIBRE. INFLUENCE SUR LES MESURES	
	D'ADMITTANCE	211
1. Statis	tique hors d'équilibre	211
2. Influe	nce sur l'admittance	213
ANNEXE X :	PHENOMENE DE CUT-OFF SUR LES SPECTRES	
	D.L.T.S. D'ETATS D'INTERFACE	217
ANNEVE VI	MECHINE DEC CECTIONS DE CABITIDE	221
ANNEAE AI :	MESURE DES SECTIONS DE CAPIORE	221
ANNEXE XII :	DEFINITION DE LA CHARGE D'INVERSION	225
ANNEXE XIII :	CALCUL DU TAUX DE GENERATION	· 229
1	· ·	220
1. Defini		229
2. Statis	tiques d'occupation, neutralite du semi-	221
		231
	une faible concentration de delauts	200
4. Uas d' 14-14-	un centre de generation dans la zone de	23/
deplet	.LUIL	204
ANNEXE XIV :	EQUATION DE VARIATION DE LA CHARGE	
	D'INVERSION	237

1. Expression de (b-a)			
2. Expression de (E _{Fn} - E _{Fp})			
3. Variation de la charge d'inversion	239		
ANNEXE XV : RESOLUTION NUMERIQUE : SYNOPTIQUE DU PROGRAMME	241		
BIBLIOGRAPHIE	243		

.

•

•

INTRODUCTION

Le contrôle des propriétés électriques des systèmes M.O.S. (métal-oxyde-semiconducteur) a été, depuis le début de l'industrie des composants électroniques intégrés, un des facteurs majeurs permettant d'obtenir des circuits ayant des performances stables et de haut niveau. Au cours de ces dernières années, avec l'important développement des circuits V.L.S.I. (Very Large Scale Integration), l'étude des systèmes M.O.S. a pris une importance encore accrue.

En effet, avec la réduction des échelles dans les technologies M.O.S., les charges dans l'oxyde et à l'interface silicium-oxyde sont de plus en plus indésirables car elles dégradent fortement les performances des composants.

Quatre types de charges sont généralement distingués [1,2]:

- * Les états électroniques d'interface localisés à l'interface Si-SiO₂ ou très près de celle-ci, pouvant échanger des charges avec le semiconducteur. Ces états introduits dans la bande interdite du semiconducteur sont essentiellement dus aux défauts structuraux de l'interface (liaisons pendantes ou incomplètement satisfaites) [3].
- * Les charges fixes d'oxyde, ensemble des charges positives localisées sur une épaisseur de 200 Å dans l'oxyde à partir de l'interface. Elles se caractérisent par l'impossibilité d'échanger des charges avec le semiconducteur, et elles sont stables dans un champ électrique, même à haute température. Ces défauts sont dus à la présence d'ions silicium en excès dans l'oxyde résultant de la croissance du SiO₂ sur le substrat silicium.
- * Les ions mobiles (Na⁺, K⁺, Li⁺, H⁺) sont dus à la contamination extrinsèque à la structure de l'oxyde.

Leur caractéristique importante est une grande mobilité dans l'oxyde même à température ambiante.

* Enfin, des pièges ionisés créés dans l'ensemble de l'oxyde par irradiation (rayons X, faisceau d'électrons). On trouve deux types de charges. Les premières sont des charges positives (pièges à trous) assez semblables aux charges fixes d'oxyde. Les secondes sont du type états d'interface.

Charges mobiles ou fixes dans l'oxyde entraînant des instabilités de capacité, il est nécessaire de contrôler ces états de charge.

Les techniques de caractérisation de ces défauts utilisent une structure M.O.S. élémentaire : la capacité M.O.S.. Ce sont essentiellement des mesures électriques d'impédance : capacité ou conductance.

- * mesure de la capacité en fonction de la tension : C(V)
- * mesure de la capacité transitoire (en fonction du temps) après une excitation unique : C(t)
- * méthode transitoire et spectroscopique telle que la D.L.T.S. (Deep Level Transient Spectroscopy) [4].
- * Analyse harmonique de la capacité et de la conductance : G(ω) [5]. (En principe équivalente à l'analyse impulsionnelle par DLTS).

Cette dernière méthode, introduite en 1967 par NICOLLIAN et GOETZBERGER [5], a été développée pour obtenir la densité d'états électroniques à l'interface Si-SiO₂. Toutefois, elle est d'un emploi peu commode, nécessitant un nombre important de mesures, ainsi que des calculs très lourds. De plus elle nécessite l'utilisation de modèles complexes. La fiabilité et la précision des résultats sont fortement dépendantes du choix d'un modèle plus ou moins élaboré. Cette situation pose un problème important. Il n'y a pas, en fait, d'études comparatives entre un résultat "de référence" et les résultats fonction du modèle choisi.

Initialement introduite pour déterminer les défauts dans le volume d'un semiconducteur, la D.L.T.S. (D.V. LANG 1974, [4]) a été depuis, encore peu appliquée à la détermination des états d'interface. D'un emploi plus immédiat, elle donne, en principe, directement la densité d'états. Parce que c'est une méthode directe, elle a l'avantage sur la technique $G(\omega)$ de ne pas nécessiter de modèle à priori. Un des buts de ce travail est de comparer les résultats que donnent ces deux techniques, ce qui a peu été fait à ce jour.

Le but initial de ce travail était donc :

- * la compréhension des résultats obtenus par D.L.T.S.
- * la comparaison des techniques $G(\omega)$ et D.L.T.S. sur les mêmes échantillons de façon à tester les différents modèles utilisés en $G(\omega)$
- * l'analyse critique des deux méthodes.

En fait, au cours de ce travail, nous avons rencontré un certain nombre de phénomènes physiques à l'interface : l) effet tunnel 2) défauts localisés 3) formation de la zone d'inversion. Ceux-ci seront aussi étudiés à l'aide de ces techniques.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les caractéristiques principales de la structure M.O.S qui sont nécessaires tout au long de ce travail. Le chapitre II est une revue rapide de la structure microscopique de l'interface et des modèles théoriques qui la décrivent. Le chapitre III introduit les techniques de caractérisation. Après une introduction des propriétés dynamiques des défauts, nous présentons successivement la technique $G(\omega)$ puis la D.L.T.S en insistant sur l'aspect interface de cette dernière. La comparaison des résultats expérimentaux des deux méthodes est réalisée au chapitre IV. Utilisant ensuite la technique D.L.T.S., on étudie au chapitre V un effet tunnel des charges d'oxyde situées près de l'interface (moins de 20 Å). Le chapitre VI présente une description et discussion sur la présence d'un défaut ponctuel à l'interface. Finalement, le chapitre VII propose un modèle théorique expliquant particulièrement bien la génération des porteurs minoritaires par les états d'interface. Ce phénomène est également étudié expérimentalement par la technique D.L.T.S..

Nos résultats sont présentés sur quelques exemples types extraits de l'ensemble des résultats obtenus sur de nombreux échantillons de sources variées (CNET Centre Norbert Segard, IBM Corbeil, Laboratoire de Microélectronique de LOUVAIN-la-Neuve).

CHAPITRE I

PHYSIQUE DE LA CAPACITE M.O.S.

1. - INTRODUCTION

A cause de la présence d'une couche isolante d'oxyde de silicium entre la grille métallique et le semiconducteur, la capacité M.O.S. présente une plus grande gamme de situations que la diode Schottky. En plus de la déplétion, on distingue l'accumulation et l'inversion.

La possibilité d'accumuler des porteurs minoritaires près de l'interface Si-SiO₂ est un aspect important de l'étude d'une structure M.O.S.. Elle a conduit au transistor M.O.S. et par la même au développement des circuits V.L.S.I.

Nous rappelons ici, les principales caractéristiques physiques de la capacité M.O.S.. Pour une étude plus complète, on se reportera aux références [1] et [2].

L'étude théorique sera faite pour des substrats de type p.



$$\begin{split} \varphi_{M-ox} &: \text{barrière de potentiel metal-oxyde (3,2V pour Al)} \\ \varphi_{S-ox} &: \text{barrière de potentiel silicium-oxyde} \\ &: \text{trouvée expérimentalement à 3,25 V indépendant de l'orientation} \\ \psi_{B} &: \text{potentiel de volume} \\ &: \text{potentiel de volume} \\ &: \psi_{B} = E_{i} - E_{F} = kT \text{ Ln } \frac{N_{A}}{n_{i}} (> o) \text{ type } -p \\ &= kT \text{ Ln } \frac{n_{i}}{N_{D}} (< o) \text{ type } -n \\ \psi(x) &: \text{ courbure de bande e } \psi(x) = E_{i\infty} - E_{i}(x) \\ \psi_{s} &: \text{ potentiel de surface } e\psi_{s} = E_{i\infty} - E_{iS} \\ \text{Eg} &: \text{ bande interdite du silicium Eg = 1,1 eV} \end{split}$$

E'g : bande interdite de l'oxyde E'g = 8,8 eV

Figure 1.1 : Définitions des potentiels

2. - STRUCTURE DE LA CAPACITE M.O.S.

2.1 Structure de bandes. Définitions des potentiels

A l'équilibre thermodynamique et en l'absence de champ électrique dans le dispositif, il n'y a pas de flux de charges à travers l'oxyde. On peut donc considérer un niveau de Fermi unique dans le semiconducteur, aligné sur celui du métal (figure 1.1).

Il existe une courbure de bande. Elle est due à la différence entre les potentiels de sortie du métal et du semiconducteur.

A partir des grandeurs définies à la figure 1.1, on écrit :

$$\phi_{\rm MS} = \phi_{\rm M-\delta x} - \phi_{\rm S-ox} - \frac{E_g}{2e} - \psi_{\rm B}$$
(1.1)

Pour obtenir la condition dite de "bandes plates" on doit appliquer une tension $V_{FB} = \phi_{MS}$ sur la grille. Cette tension dépend donc de la nature de la grille (ϕ_{M-OX}) et de la concentration en impuretés dopantes du semiconducteur : ψ_B dépend du niveau de Fermi, c'est-à-dire du dopage N_A .

Pour une grille en aluminium, on obtient le résultat suivant (figure 1.2).



Figure 1.2 : Différence des potentiels de sortie en fonction du dopage (grille Al), (ref. [3]).

3

Connaître les potentiels $\psi(x)$ et ψ_s (potentiel de surface) est d'une importance capitale pour prévoir le comportement de la capacité M.O.S. Le potentiel $\psi(x)$ est défini comme étant la différence entre le niveau de Fermi intrinsèque à l'infini et le niveau de Fermi intrinsèque à la distance x de l'interface silicium-oxyde.

Les concentrations en porteurs se calculent à partir de $\psi(\mathbf{x}).$

$$n(x) = N_{c} \exp \frac{\sum_{F=E_{c}}^{E_{F}=E_{c}} = n_{\infty} \exp \frac{e\psi(x)}{kT}$$
(1.2)

$$p(x) = N_{v} \exp - \frac{E_{F} - E_{v}}{kT} = p_{\infty} \exp - \frac{e\psi(x)}{kT}$$
(1.3)

 E_F , E_C , E_V sont respectivement l'énergie du niveau de Fermi, du bas de la bande de conduction et du haut de la bande de valence. N_C et N_V représentent le "nombre de places" sur la bande de conduction et de valence. L'indice ∞ indique la zone dans le volume du semiconducteur où les bandes sont plates. En particulier, pour un substrat de type-p

$$p(x) = N_{A} \exp \frac{-e\psi(x)}{kT}$$
(1.4)

$$n(x) = \frac{n_{i}^{2}}{N_{A}} \exp \frac{e\psi(x)}{kT}$$
(1.5)

où n; est la concentration intrinsèque des porteurs.

Nous verrons comment calculer exactement $\psi(\mathbf{x})$ au §3 de ce chapitre.

2.2 Polarisation de la capacité M.O.S.

On distingue trois situations selon la tension appliquée sur la grille (figure 1.3) : l'accumulation, la déplétion et l'inversion.



Figure 1.3 : Trois possibilités de polarisation (a) accumulation $\psi_s < o$ (b) déplétion $o < \psi_S < \psi_B$ (c) inversion $\psi_S > \psi_B$

En accumulation, on accumule des porteurs majoritaires près de l'interface Si-SiO₂. Le potentiel de surface est négatif. L'équation (1.4) nous indique que la concentration de majoritaires en surface p_S est supérieure à p_{∞} .

En déplétion, Ψ_S est positif. Le potentiel positif repousse les trous. La concentration p_S devient faible, il y a création d'une zone vide de porteurs.Les accepteurs ionisés ne sont plus compensés. Cette zone de charge d'espace s'étend sur une profondeur W_d à partir de l'interface. W_d est la largeur de déplétion.

Quand ψ_S est supérieur à ψ_B , le niveau de Fermi intrinsèque E_i croise le niveau de Fermi extrinsèque E_F à la distance d_i de l'interface. Dans cette zone, on a maintenant le terme exp $(e\psi_S/kT)$ assez important dans (1.5) et $exp(-e\psi_S/kT)$ très faible pour que n(x) soit supérieur à p(x). Il y a accumulation de porteurs minoritaires près de l'interface créant une zone inversée d'épaisseur d_i . La séparation entre la déplétion et l'inversion est donc $\psi_S = \psi_B$.

Pour obtenir le comportement détaillé du système, il faut maintenant calculer le potentiel $\psi(x)$, ainsi que les charges présentes dans le semiconducteur pour les trois cas de polarisation.

3. - CHARGE D'ESPACE

De façon générale, le potentiel ψ est solution de l'équation de Poisson.

3.1 Equation de Poisson

L'équation de Poisson pour un système à une dimension se ramène à

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_S}$$
(1.6)

où $\rho(x)$ est la densité de charge et $\epsilon_{\rm S}$ la permitivité du semiconducteur.

On exprime la densité de charge en fonction de N_D^+ et N_A^- , les densités de donneurs et d'accepteurs ionisés

$$\rho(x) = e(N_D^+ - N_A^- + p(x) - n(x))$$
(1.7)

La neutralité électrique, à l'infini, dans le volume du semiconducteur impose la condition

$$N_{\rm D}^+ - N_{\rm A}^- = n_{\infty} - p_{\infty}$$
 (1.8)

qui permet de réécrire l'équation de Poisson sous la forme

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon_S} \left[p_{\infty}(e^{-\beta\psi} - 1) - n_{\infty} (e^{\beta\psi} - 1) \right]$$
(1.9)

L'intégration de (1.9) entre le volume et la surface, donne la relation liant le champ électrique ξ et le potentiel ψ

$$\xi^{2} = \left(\begin{array}{c} 2kT & 2 & ep_{\infty}\beta \\ e & \end{array}\right) \xrightarrow{2\epsilon_{S}} \left[\left(e^{-\beta\psi} + \beta\psi - 1\right) + \frac{n_{\infty}}{-(e^{\beta\psi} - \beta\psi - 1)}\right]$$
(1.10)

Par souci de simplification, on introduit la fonction $F(\beta\psi, n_{\varpi}/p_{\varpi})$

$$F(\beta\psi, \frac{n_{\infty}}{\mu_{\infty}}) = \left[(e^{-\beta\psi} + \beta\psi - 1) + \frac{n_{\infty}}{\mu_{\infty}} (e^{\beta\psi} - \beta\psi - 1) \right]^{1/2}$$
(1.11)
$$P_{\infty}$$

d'où

$$\xi = \frac{\sqrt{2} \text{ kT}}{eL_{\text{D}}} F(\beta \psi, \frac{n_{\infty}}{p_{\infty}})$$
(1.12)

(signe + pour ψ > o)

où L_D est la longueur de Debye extrinsèque pour les trous

$$L_{\rm D} = \left(\begin{array}{c} \varepsilon_{\rm S} & 1/2\\ \\ -e_{\rm p_{\infty} \ \beta} \end{array}\right)$$
(1.13)

La loi de Gauss donne ensuite la charge d'espace par unité de volume

$$Q_{sc} = -\epsilon_{s}\xi = \mp \frac{\sqrt{2}\epsilon_{skT}}{eL_{D}} F(\beta\psi, \underline{-})$$
(1.14)

La capacité différentielle de charge d'espace par unité de surface est alors

$$c_{sc} = \frac{\partial Q_{sc}}{\partial \psi_{S}} = \frac{\varepsilon_{S}}{\sqrt{2} L_{D}} \frac{(1 - \exp(-\beta \psi_{S})) + n_{\infty}/p_{\infty}(\exp(\beta \psi_{S}) - 1)}{F(\beta \psi_{S}, n_{\infty}/p_{\infty})}$$
(1.15)

.

3.2 L'approximation de déplétion

Les calculs précédents tiennent compte de la concentration des porteurs libres.

Toutefois en déplétion, une approximation consiste à dire, n=p=o tout au long de la zone de déplétion entre x=o et x=W_d \cdot

L'équation de Poisson est réduite à

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon_S} \begin{bmatrix} N_D^+(x) - N_A^-(x) \end{bmatrix}$$
(1.16)

Une double intégration donne la forme du potentiel [2]

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{e}{-} \int (\mathbf{x} - \mathbf{x}') [N_{A}^{-}(\mathbf{x}') - N_{D}^{+}(\mathbf{x}')] d\mathbf{x}'$$
(1.17)
$$\varepsilon_{S} W_{d}$$

Pour une distribution uniforme des impuretés, c'est-à-dire $(\rm N_A^-, \rm N_D^+)$ constant (figure 1.4), la solution de (1.17) est

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_{\rm S} \left(1 - \frac{\mathbf{x}}{M_{\rm d}}\right)^2$$
 (1.18)

où le potentiel de surface est

$$\Psi_{\rm S} = \frac{e}{2\epsilon_{\rm S}} \left(N_{\rm A}^{-} - N_{\rm D}^{+} \right) W_{\rm d}^2$$
(1.19)



Figure 1.4 : Charge d'espace dans l'approximation de déplétion.

La charge de la zone déplétée est alors :

 $Q_d = -e(N_A - N_D)W_d$

L'approximation de déplétion est à éviter quand on veut obtenir, par la méthode C(V), le profil de dopage dans le semiconducteur. La distribution de porteurs majoritaires, aussi bien que les dopantss ionisés, contribuent à la charge de celuici [4-6].

4. - CAPACITE

Les équations (1.14) et (1.15) donnent la charge d'espace et la capacité correspondante de manière générale. Nous devons maintenant distinguer les différents cas de polarisation.

La charge totale dans le semiconducteur est

$$Q_{\rm T} = Q_{\rm it} + Q_{\rm sc} \tag{1.21}$$

en tenant compte du terme Q_{it} qui représente la charge des états d'interface. Ce problème sera traité au chapitre IV. Dans ce qui suit nous considérons Q_{it} = 0.

La capacité totale de la structure M.O.S. est alors

$$C = \frac{dQ_{T}}{dV_{g}} = \frac{dQ_{sc}}{dV_{g}} \cdot \frac{d\psi_{S}}{dV_{g}} = C_{sc} \frac{d\psi_{S}}{dV_{g}}$$
(1.22)

La tension de polarisation sur la grille s'exprime en fonction du potentiel de surface par

$$V_{g} = V_{ox} + \psi_{S} \tag{1.23}$$

Vox la chute de potentiel aux bornes de l'oxyde est donnée par

$$V_{ox} = \frac{Q_{sc}}{C_{ox}}$$
(1.24)

et la capacité d'oxyde est

(1.20)

$$C_{ox} = \frac{\varepsilon_{ox}}{\frac{d_{ox}}{d_{ox}}}$$
(1.25)

En différentiant (1.23) par rapport à ψ_S on obtient

$$\frac{dV_g}{d\psi_S} = \frac{1}{c_{ox}} \cdot \frac{dQ_{sc}}{d\psi_S} + 1 = \frac{c_{sc}}{c_{ox}} + 1$$
(1.26)

Donc finalement, à partir de (1.22)

$$C = \frac{C_{ox} \cdot C_{sc}}{C_{ox} + C_{sc}}$$
(1.27)

4.1 Accumulation

En accumulation, ψ_S est négatif et le terme $\exp(-\beta\psi_S)$ est dominant dans l'expression de $F(\beta\psi_S, n_{\infty}/p_{\infty})$. L'expression (1.15) peut être approximée par

$$C_{sc} = \frac{\varepsilon_{S}}{\sqrt{2}} \frac{-\beta\psi_{S}/2}{L_{D}}$$
(1.28)

Cette valeur très supérieure à C_{ox} , correspond à la charge importante des porteurs majoritaires accumulés à l'interface.

La capacité totale est donc égale à la capacité d'oxyde $\rm C_{_{OX}}$ (figure 1.5).

4.2 Déplétion

Pour ψ_S nul, il n'y a pas de courbure des bandes. Cette valeur du potentiel de surface marque la frontière entre les zones d'accumulation et de déplétion. La capacité correspondante

$$C_{FB} = \frac{\varepsilon_{S}}{L_{D}}$$
(1.29)

est appelée capacité de bandes plates. Elle s'obtient en

développant les fonctions exponentielles de l'équation (1.15) en série.

Quand ψ_S devient légèrement positif, le terme $\beta\psi_S$ devient prépondérant et on écrit (avec n_∞ << $p_\infty)$

$$Q_{sc} = Q_{d} = - \frac{\sqrt{2} \varepsilon_{s kT}}{eL_{D}} \sqrt{\beta \psi_{s}}$$
(1.30)

$$C_{sc} = C_{d} = \frac{\varepsilon_{s}}{\sqrt{2} L_{D} \sqrt{\beta \psi_{s}}}$$
(1.31)

on obtient la largeur de la zone de déplétion W_d en comparant l'expression (1.20) de la charge de déplétion Q_d avec l'expression (1.30)

$$W_{d} = \left(\begin{array}{c} 2 \varepsilon_{S} \psi_{S} & 1/2 \\ \hline \\ e & N_{A} \end{array}\right)$$
(1.32)

ce qui permet de réécrire la capacité de déplétion

.

$$C_{d} = \frac{\varepsilon_{S}}{w_{d}}$$
(1.33)

Une approximation plus rigoureuse consiste à ne pas négliger l devant $\beta\psi_S$ dans les expressions (1.11), (1.14) et (1.15). Dans ce cas on obtient :

$$C_{d} = \frac{\varepsilon_{S}}{\sqrt{2} L_{D}} (\beta \psi_{S} - 1)$$
(1.34)

Dans les deux cas, C_d devient plus faible que la capacité en accumulation. La capacité totale de la structure M.O.S. va donc diminuer (figure 1.5).

4.3 Inversion

4.3.1 Faible inversion

Dès que ψ_S est supérieur à ψ_B , une zone d'inversion de largeur d_i commence à se former⁽¹⁾. Toutefois, la charge des minoritaires reste faible, et la charge totale dans le semiconducteur

 $Q_{sc} = Q_d + \dot{Q}_i \tag{1.35}$

constituée de la charge de déplétion Q_d et de cette charge d'inversion Q_i reste égale à Q_d . Le comportement du système est identique au cas de la déplétion.

Cette zone de faible inversion est valable jusqu'à ce que $\psi_{\rm S}$ = $2\psi_{\rm B}.$

4.3.2 Forte inversion

Les porteurs minoritaires, en concentration importante à l'interface, imposent la réponse de la structure M.O.S. aux perturbations du potentiel de grille.

Le temps de réponse des minoritaires (τ_m) est donné par NICOLLIAN et BREWS [2]. Ils modélisent les échanges de porteurs entre un centre de génération-recombinaison et la structure de bande par un schéma équivalent en admittance valable pour de faibles perturbations du potentiel de surface.

Nous déterminons plus simplement ce temps de réponse par une étude en régime transitoire (Annexe I).

A faible fréquence $(1/f \gg \tau_m)$, les porteurs minoritaires peuvent suivre les variations de potentiel imposées par le signal alternatif de mesure. Le terme $\exp(\beta\psi_S)$ domine dans les expressions de Q_{sc} et C_{sc} . On obtient :

(1) On montre que la largeur d_i est d'environ 20 à 40 Å [7].

$$Q_{sc} = - \frac{\sqrt{2} \varepsilon_{s} kT}{eL_{D}} \frac{n_{\infty}}{P_{\infty}} \qquad (1.36)$$

$$C_{sc} = \frac{\varepsilon_{S}}{\sqrt{2} L_{D}} \left(\frac{n_{\infty}}{\mu_{\infty}}\right) \exp\left(\beta\psi_{S}/2\right)$$
(1.37)

Cette valeur est de nouveau importante, la capacité totale est égale à C_{ox} comme en accumulation (figure 1.5).

A haute fréquence, les minoritaires ne répondent pas aux variations rapides du potentiel $(1/f << \tau_m)$, et seul la charge de déplétion Q_d contribue à la mesure de capacité.

Si la tension de polarisation évolue lentement vers une inversion plus forte, la concentration de porteurs minoritaires varie en exponentiel du potentiel de surface (éq. l.3), tandis que Q_d suit en racine carrée (éq. l.30). La forte augmentation de la charge d'inversion domine la charge de déplétion. Ainsi, la neutralité de charge est entièrement satisfaite par la variation de la charge d'inversion et la zone de déplétion atteint le maximum de sa valeur (phénomène d'écrantage).

$$W_{\rm M} = \begin{pmatrix} 4\varepsilon_{\rm S} \psi_{\rm B} \\ - \\ eN_{\rm A} \end{pmatrix}$$
(1.38)

La capacité mesurée présente un plateau de valeur C_{\min} (figure 1.5) tel que :

1	1	W _M	
	= +	⊦	(1.39)
C _{min}	COX	εs	





Pour une rampe rapide de polarisation, la charge d'inversion ne varie pas. Seule la charge de déplétion satisfait la neutralité électrique par une forte augmentation de la largeur W_d . On obtient sur la caractéristique C(V) (figure 1.5) la courbe de "déplétion profonde" analogue à une diode Schottky.

Une courbe analogue est obtenue à basse température. La formation de la zone d'inversion par les mécanismes thermiques de génération n'ayant lieu que très faiblement.

5. CONCLUSION

Ce chapitre introductif à l'étude des structures M.O.S. a permis de dégager leurs principales caractéristiques physiques dans les différentes zones de fonctionnement. En particulier, notons l'importance des phénomènes liés aux porteurs minoritaires dont une étude plus développée sera donnée au chapitre VII.

Par rapport à la capacité M.O.S. décrite ci-dessus notre travail porte maintenant sur les propriétés de l'interface silicium-oxyde et sur plusieurs méthodes électriques de caractérisation.

CHAPITRE II

L'INTERFACE SI-SIO₂ : DESCRIPTION ET MODELES

1. - INTRODUCTION

L'interface entre le silicium et son oxyde est actuellement un sujet très étudié, non seulement par des mesures électriques (comme celles que l'on présente dans ce travail) directement corrélables avec les caractéristiques des composants, mais aussi par des techniques destinées à mettre en lumière la composition chimique de l'interface, ainsi que sa structure atomique (Retrodiffusion Rutherford, Retrodiffusion d'ions basse energie, spectroscopie d'électrons Auger, spectroscopie photoélectronique de rayons X, résonance paramagnétique électronique).

Il n'existe pas aujourd'hui de représentation claire et précise de l'interface Si-SiO₂, et l'utilisation conjointe de ces techniques devrait aboutir à une plus grande connaissance des phénomènes mis en jeu aussi bien lors de l'oxydation du silicium, que lors des traitements que subissent ces interfaces au cours des différents processus de technologie (irradiations et recuit thermique par exemple).

Dans ce chapitre, nous présentons les différents modèles théoriques et structuraux actuellement susceptibles d'expliquer les résultats obtenus avec ces méthodes.

2. - DESCRIPTION DE LA STRUCTURE Si-SiO₂

L'interface est arbitrairement dite composée de deux zones :

- i) l'une "éloignée" de plus de 100 Å environ où l'on est sûr de la structure correcte de l'oxyde,
- ii) l'autre étant la couche de transition ou de passage du volume de SiO $_2$ au silicium.

Cette décomposition s'explique, entre autre, par le fait que, à priori, il y a deux sortes d'états : ceux interagissants avec les porteurs dans le volume du silicium, et ceux, plus éloignés dans l'oxyde, qui n'interragissent pas.

2.1 L'oxyde

L'oxyde formé par oxydation thermique du silicium présente en volume une structure amorphe et contient un certain nombre d'impuretés et de défauts résiduels. Par exemple, des ions mobiles Na⁺ en concentration inférieure à 10^{10} cm⁻² à l'interface (< 10^{15} cm⁻³ en volume) peuvent être obtenus avec les technologies standards de fabrication.

2.1.1 Modèle théorique

Les calculs de structure de bandes dans l'oxyde de silicium ont d'abord été réalisés avec une structure cristalline sous l'une des deux formes allotropiques α - quartz ou β - cristobalite, qui se prêtaient le mieux à l'application des méthodes de calcul telles que : liaisons fortes, pseudopotentiel auto-cohérent entre autres [1].

On utilise souvent un réseau de Bethe (figure 2.1) pour représenter la structure amorphe du SiO₂. Il est construit en associant des tétraèdres SiO₄ par les sommets. L'angle Si-O-Si normal dans le cristal est de 144°, mais il varie dans l'amorphe de 120 à 180°. Les structures électroniques du SiO₂ cristallin et amorphe sont trouvées très similaires par des mesures d'absorption optique [2]. Cela suggère fortement que c'est l'ordre à courte distance qui importe le plus pour déterminer la structure électronique et le réseau de Bethe est alors une bonne approximation de départ pour représenter le SiO₂ amorphe. Le calcul de la structure de bandes est principalement basé sur la méthode des liaisons fortes [1,3,4] et sur les fonctions de Green [3,4].

2.1.2 Charges parasites

On distingue deux types de charges dans le volume de l'oxyde : les mobiles et les fixes.

Les charges mobiles ont été historiquement les plus étudiées depuis le développement des technologies MOS vers les années



Figure 2.1 : Réseau de Bethe du SiO_2 amorphe.

1960. Ces charges positives sont dues à des ions alcalins (Na⁺ principalement) introduits dans l'oxyde lors des étapes d'oxydation à haute température. Ces ions très mobiles sont, en forte concentration, responsables d'un nombre important d'instabilités des structures MOS (décalage du C(V), augmentation des états d'interface...).

L'oxyde n'est pas exempt de défauts structuraux qui peuvent présenter différents états de charge et dans certains cas, capturer les porteurs du semiconducteur [5]. D'autres défauts sont introduits, entre autre, par irradiation ce qui crée des problèmes, particulièrement pour les composants destinés aux applications spatiales ainsi que pour l'emploi des techniques de fabrication faisant intervenir : radiations ionisantes, bombardement d'ions, nettoyage et déposition par plasma, lithographie aux rayons X et par faisceau d'électrons. Aussi, cet aspect est-il aujourd'hui largement étudié théoriquement et expérimentalement [6].

2.2 L'interface Si-SiO,

Par interface nous entendons la zone transitoire comprise entre le SiO₂ amorphe et le Si cristallin. Si on admet aujourd'hui qu'il existe une couche non stochiométrique SiO_x, le problème majeur reste de connaître son épaisseur et sa structure. L'état actuel des recherches sur la composition chimique, la morphologie de la couche de transition et la localisation des centres électriquement actifs, permet de situer cette zone de transition sur une épaisseur d'environ 20 Å.

Deux types de charge sont communément distinguées (figure 2.2).

- i) les états électroniques d'interface qui peuvent échanger des charges avec le semiconducteur. En conséquence leur état d'occupation est fortement dépendant du potentiel appliqué sur la structure MOS. Ce sont eux qui nous intéresseront par la suite et une étude plus complète est faite au paragraphe suivant (§ 3).
- ii) les charges fixes d'oxyde qui sont localisées un peu plus en volume que les précédentes (< 200 Å). Elles se caractérisent par l'impossibilité d'échanger des



Figure 2.2 : Nature et localisation des charges dans l'oxyde.

.



Figure 2.3 : Exemple de structure microscopique pour les charges fixes d'oxyde (Ref. [7]).

charges avec le silicium d'où le nom de charge fixe. Un modèle microscopique a été proposé par G. LUCOVSKY et D.J. CHADI [7] sous forme d'un atome d'oxygène lié avec trois silicium dans une structure pyramidale (figure 2.3). Dans cette configuration l'oxygène est sous forme ionique avec cinq électrons de valence, ce qui représente une charge positive. Deux d'entre eux sont sur une orbitale non liée, tandis que chacun des trois autres est engagé dans une liaison σ avec les atomes de silicium voisins. La charge dans ces liaisons σ est déplacée vers l'atome d'oxygène. Il en résulte que la charge positive est distribuée à l'ensemble Si₃O. Ces défauts sont étroitement liés aux conditions d'oxydation du silicium et sont généralement attribués à la présence de Si en excès dans l'oxyde.

3. - MODELES THEORIQUES DES ETATS D'INTERFACE

Un nombre important de modèles ont été élaborés pour rendre compte des propriétés des états d'interface. Nous ne retiendrons ici que les plus prometteurs. Pour une revue chronologique et exhaustive, nous renvoyons le lecteur à la référence [8].

Actuellement, l'ensemble des modèles prennent pour base, les différents types de liaisons pouvant exister à l'interface : des liaisons pendantes, des liaisons plus ou moins distordues, ou des défauts extrinsèques (liaisons ou interactions avec des impuretés).

3.1 Liaisons pendantes

3.1.1 Modèles théoriques

Les liaisons pendantes (figure 2.4) présentes dans une structure plus ou moins désordonnée (amorphe, interface), ont été les premiers candidats pour justifier l'existence de niveaux d'énergie dans la bande interdite (lacune dans Si, silicium amorphe, états électroniques à l'interface Si-SiO₂).

20



Figure 2.4 : Liaisons pendantes pour la lacune dans Si

Dans un modèle simple (de type moléculaire), il est bien connu que la liaison pendante introduit un niveau d'énergie localisé au milieu de la bande interdite (figure 2.5.b). On ne considère que les interactions β des orbites hydrides sp³ entre premiers voisins.


Figure 2.5 : Densité d'état pour les liaisons pendantes (lacune dans Si)

- a) interactions entre orbitales dans un modèle moléculaire
- b) résultat simple (B uniquement)
- c) effet des interactions \triangle et γ .

Un résultat plus réaliste est obtenu en prenant en compte :

- i) les interactions ∆ entre deux orbitales du même site, responsable de l'élargissement des bandes,
- ii) les interactions γ entre deux orbitales pendantes premières voisines, qui lèvent partiellement la dégénérescence des états localisés dans la bande interdite. A cause du décalage des niveaux d'énergie, l'état A₁ devient résonant, alors que T₂ reste un état localisé.
 (Une étude plus approfondie de la lacune est donnée en

[9]).

Un calcul de la structure de bandes à l'interface Si-SiO₂ est réalisé, par LAUGHLIN et al. [10] pour différentes structures (interface idéale, distorsion des angles des liaisons, liaisons pendantes). En employant la méthode C.B.L. (Cluster Bethe Lattice, ou amas de réseaux de Bethe) et le formalisme des liaisons fortes, ils montrent que, seule la liaison pendante de silicium introduit des états localisés dans la bande interdite (figure 2.6).



Figure 2.6 : Structure de bandes pour les liaisons pendantes à l'interface Si-SiO₂ (réf. [10]).

Ensuite, la corrélation avec l'expérience est nécessaire pour valider les prévisions théoriques et obtenir de façon rigoureuse la structure atomique de l'interface.

3.1.2 Modèles structuraux

Les expériences de résonance paramagnétique électronique (R.P.E.) permettent une détection fine de la structure atomique. Les premiers résultats ont été reportés par NISHI [11]. L'un des centres observés, le centre P_b , a été correctement identifié par CAPLAN et al.[12,13] comme un centre trivalent (.Si \equiv Si₃) i.e. un atome de Si lié à trois autre silicium, avec une liaison pendante directement orientée vers une lacune du réseau (figure 2.7).



Figure 2.7 : Représentation du centre trivalent .Si \equiv Si₃

L'étude de l'anisotropie du tenseur g (facteur de Landé) donne l'orientation de l'orbitale pendante. La localisation du centre trivalent à l'interface Si-SiO_2 est obtenue par un raisonnement indirect [13]. Récemment, BROWER [14] a obtenu la structure hyperfine du centre P_b pour une surface (111). Permettant une identification plus précise du site atomique sur lequel est localisé la liaison pendante, ce travail valide les résultats précédents. De plus il donne la composition de l'orbital hybride comme étant 12% de type s et 88% de type p. Finalement, la figure 2.8 donne les modèles structuraux déduit des mesures R.P.E.



Figure 2.8 : Modèles structuraux pour le centre P_b en fonction de l'orientation de la surface (réf. [13]).

De nombreuses corrélations existent entre le comportement du centre P_b et les mesures électriques de densité d'états d'interface [13] suivant les différentes étapes des processus technologiques de fabrication (orientation de la surface, dopage, oxydation en atmosphère sèche ou humide, recuit en ambiance N₂ ou Ar, recuit H₂ et régénération N₂, épaisseur d'oxyde...).

Des mesures expérimentales récentes [15] mettent en évidence un comportement de type centre à U positif pour les états d'interface (figure 2.9)



Figure 2.9 : Centre à U > o avec trois états de charge. L'énergie coulombienne effective est U_{eff} = 0.55 eV (valeurs numériques d'après réf.[15]).

Tous ces résultats confirment que la liaison pendante est l'origine principale des états électroniques à l'interface Si-SiO₂.

3.2 Liaisons distordues

Un modèle basé sur les distorsions des liaisons à l'interface a été introduit en premier par LAUGHLIN et al. [10] puis repris par SUKARAI et SUGANO [3].

Partant d'une interface parfaite, ces derniers introduisent, outre les liaisons pendantes, des liaisons distendues ou liaisons faibles de divers types pour exprimer la forme expérimentale en U de la densité d'états. La figure 2.10 donne l'ensemble des liaisons prises en compte.

En utilisant un modèle semi-empirique de liaisons fortes et une formulation par fonctions de Green, ils calculent la densité d'Etats pour chaque cas, en faisant varier les paramètres longueur et angles des liaisons (figure 2.11).













Figure 2.10 : Liaisons et interactions à l'interface Si-SiO2

a) interface parfaite
b) liaison pendante d'oxygène
c) lacune d'oxygène (ou liaison faible Si-Si)
d) liaison faible Si-O
e) faible interaction Si-Si
f) faible interaction Si-O
Si
O



Figure 2.11 : Paramètres variables employés dans les calculs (réf. [3]).

Pour une interface parfaite et une interface ne comprenant que des liaisons pendantes d'oxygène, les niveaux d'énergies sont des niveaux résonants dans les bandes de valence et conduction.

Les lacunes d'oxygène ainsi que les faibles interactions Si-Si donnent un état liant dans la bande interdite et un état antiliant dans la bande de conduction. La figure 2.12 montre la variation de l'énergie en fonction de la distance entre les deux Si. La dépendance en fonctions des angles θ et ϕ est beaucoup plus faible.



Figure 2.12 : Evolution de l'énergie des niveaux liant et antiliant pour une liaison ou interaction faible Si-Si.

Contrairement au cas précédent, les liaisons et interactions du type Si-O évoluent dans la partie supérieure de la bande interdite (figure 2.13).



Figure 2.13 : Evolution du niveau d'énergie pour une liaison ou interaction faible Si-O.

Si on admet maintenant que le nombre de liaisons ou d'interaction diminue quand la distance Si-Si ou Si-O augmente (figure 2.14.a) on peut expliquer la forme en U de la densité d'état d'interface (figure 2.14.b).



Figure 2.14 : Forme en U de la densité d'états.

nombre de liaisons fortement distordues soit faible, ainsi que le nombre de liaisons pendantes, ces dernières ayant tendance à interagir avec des atomes voisins ou des impuretés extrinsèques.

Le modèle de SUKARAI et SUGANO n'est pas complètement satisfaisant. Il ne donne pas de résultats fiables pour les sections de capture, de plus la décroissance de la densité près des bandes est beaucoup plus rapide que les variations relevées expérimentalement (voir chapitre IV). Toutefois ce modèle reste un modèle simple qui ne tient pas compte des amas de liaisons distendues et de leurs interactions [16].

3.3 Liaisons avec des impuretés

Différents atomes peuvent se fixer sur les liaisons pendantes à l'interface :

- des silicium ou oxygène en excès qui résultent des processus d'oxydation,
- des impuretés extrinsèques (H, OH, Cl, F...) introduites pendant les étapes technologiques.

En ce qui concerne ces dernières, SUKARAI et SUGANO [3] montre que les niveaux d'énergie d'une liaison Si-Impureté (figure 2.15) se trouvent à au moins 0,5 eV des bandes du semiconducteur. Ce résultat explique la diminution de la densité d'états d'interface lors des recuits en atmosphère H₂ ou lors d'une oxydation HC1.



Figure 2.15 : Liaison Si-impureté à l'interface Si-SiO,

4. - CONCLUSION

Nous avons au niveau théorique des modèles relativement simples susceptibles d'expliquer les principales caractéristiques électriques liées aux états d'interface d'une capacité M.O.S.

Ces modèles sont essentiellement basés sur les différents types de liaisons pouvant exister à l'interface : liaisons pendantes, liaisons plus ou moins distordues avec des atomes de silicium, d'oxygène ou des impuretés extrinsèques. Les paramètres (longueur, angles) sont variables pour prendre en compte le désordre inhérent à l'interface et à la structure amorphe de l'oxyde de silicium.

Les prévisions de ces modèles seront, par la suite, confrontées aux résultats expérimentaux.

• •

CHAPITRE III

METHODE DE MESURES DES

DENSITES D'ETATS D'INTERFACE

1. - INTRODUCTION

La détection des états d'interface, et plus généralement des défauts d'un dispositif à semiconducteur, par les méthodes électriques utilise les variations de l'état d'occupation de ces défauts par les porteurs libres du semiconducteur.

Les méthodes les plus simples à mettre en oeuvre utilisent les déformations induites par les états d'interface sur la caractéristique capacité-tension C(V) idéale décrite au chapitre I. Les premières mesures obtenues avec la caractéristique C(V)haute fréquence (méthode TERMAN) [1] datent de 1962. D'autres méthodes ont été proposées ensuite :

- la méthode GRAY-BROWN [2] utilisant la comparaison entre deux caractéristiques C(V) à températures différentes. A partir du décalage entre les tensions de bandes plates et connaissant l'évolution du niveau de Fermi avec la température, on en déduit la densité d'états.
- la méthode dite quasi-statique [3,4] qui utilise la caractéristique C(V) à très basse fréquence. La réponse des états d'interface est immédiate ce qui induit un terme capacitif supplémentaire directement proportionnel à la densité d'états. Connaissant la capacité d'oxyde et celle du semiconducteur, on a accès à la capacité d'états d'interface.
- une méthode mixte [5] comparant les caractéristiques haute et basse fréquence. La capacité d'états d'interface, donc la densité d'états, s'obtient

directement par combinaison des capacités haute et basse fréquences.

Toutes ces méthodes sont imprécises. Les valeurs de densité d'états sont essentiellement faussées par deux phénomènes.

> i) une admittance parasite Y_{it} (figure 3.1) qui résulte de la réponse des états d'interface au signal de mesure haute fréquence des capacimètres standards.

Il y aura toujours un état d'énergie E tel que le temps de réponse $\tau(E_T)$ de celui-ci vérifie $\tau(E_T) \geq 1/2\pi f_m$, où f_m est la fréquence de modulation (1MHz) [6]. Cette admittance parasite est diminuée lorsque f_m est supérieure à 200 MHz. Autrement, elle introduit un pic artificiel dans la distribution d'état (figure 3.2)[6,7].

ii) Des fluctuations du potentiel de surface $\psi_{\rm S}$ résultant :

- de l'inhomogénéité des charges dans l'oxyde près de l'interface
- des fluctuations du dopage et de l'épaisseur d'oxyde.

L'influence de ces fluctuations rend très difficile l'obtention d'une mesure spectroscopique par l'ensemble des méthodes C(V).

Enfin la limitation de la sensibilité (densité d'états $N_{it} > 10^{10}$ cm⁻² eV⁻¹) confine ces méthodes dans un rôle de contrôle de qualité (rapide et simple de mise en oeuvre) des interfaces Si-SiO₂.

Le tableau III.1 résume les limitations de ces techniques.

Deux techniques basées sur les propriétés dynamiques des défauts sont plus précises : la méthode de conductance $(G(\omega))$ introduite par GOETZBERGER et NICOLLIAN [8], et la spectroscopie de capacités transitoires (D.L.T.S.) initialement mise au point par LANG [9] pour étudier les défauts de volume. Nous commençons par quelques généralités indispensables sur le comportement dynamique des défauts.



Figure 3.2 : Interprétation de la déformation due à ${\tt Y}_{it}$ en terme d'états d'interface (Ref. [6]).

Perturbation C(V)	Y _{it}	Fluct. ψ_s
TERMAN 1MHz	oui	oui
TERMAN 200MHz	non	oui
GRAY - BROWN	oui	oui
Quasi-statique	non	oui
Mixte	oui	oui

Tableau 3.I : Limitations propres aux méthodes C(V)

2. - DYNAMIQUE DES DEFAUTS

2.1 Théorie générale pour un défaut de volume

Un défaut se caractérise par un niveau d'énergie localisé dans la bande interdite. Soit E_T ce niveau, σ_n et σ_p ses sections de captures pour les électrons et les trous (figure 3.3).

Il existe quatre processus modifiant l'état d'occupation du niveau :

- l'émission d'un électron vers la bande de conduction, avec un taux

$$e_n = \sigma_n v_n g N_c exp - \frac{E_c - E_T}{kT}$$
(3.1)

(relation de Schockley-Read [10])

- l'émission d'un trou vers la bande de valence

$$e_{p} = \sigma_{p} v_{p} (g)^{-1} N_{v} \exp \frac{E_{v}^{-E}T}{kT}$$
 (3.2)

- la capture d'un électron de la bande de conduction, avec un taux

$$\mathbf{c}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n} = \sigma_{\mathbf{n}} \mathbf{v}_{\mathbf{n}} \mathbf{n} \tag{3.3}$$

- la capture d'un trou de la bande de valence

$$c_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p} = \sigma_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} p \tag{3.4}$$

Le terme g, facteur de dégénérescence, sera par la suite pris égal à un.



Figure 3.3 : Processus d'émission et de capture entre un niveau piège E_T et les bandes de conduction et de valence. La flèche indique le sens pour un électron.

Les différentes d'énergie $\Delta E = E_c - E_T$ pour les électrons, ou $E_v - E_T$ pour les trous sont en fait les énergies libres d'ionization du défaut.

Suivant le processus qui domine la cinétique d'occupation, un même défaut peut avoir l'un des quatre comportements présentés à la figure 3.4.



a) piège à électrons : $e_n >> c_p p$ et $c_n n >> e_p$ b) piège à trous : $e_p >> c_n n$ et $c_p p >> e_n$ c) centre de génération : $e_n >> c_p p$ et $e_p >> c_n n$ d) centre de recombinaison : $c_n n >> e_p$ et $c_p p >> e_n$

Figure 3.4: classification du comportement despièges (ref. [11])

Les conditions mathématiques qui déterminent le comportement du défaut sont données par BOURGOIN et LANNOO [11]. En tenant compte des pseudo-niveaux de Fermi, elles s'écrivent :

 $\frac{E_{T} + E_{Fp}}{2} >> E_{1}$ (3.5)

ii) $c_n^n \gg e_p^n$ lorsque

$$\frac{E_{T} + E_{Fn}}{2} \gg E_{1}$$
(3.6)



soit : a tel que
$$\frac{E_T + E_{Fn}}{2} = E_1$$

b tel que
$$\frac{E_T + E_F p}{2} = E_1$$

c tel que $E_T = E_{Fn}$

Figure 3.5 : Diagramme de bandes d'une structure MOS-p en forte inversion mettant en évidence les différents comportements d'un défaut (Cas $E_T < E_1$).

$$E_1 = E_1 + \frac{kT}{2} Ln \frac{C_p}{C_n}$$

dépend fortement du rapport des sections de capture.

Une application de ces résultats met en évidence la variation du comportement d'un défaut suivant la profondeur dans le substrat (figure 3.5)

Pour x \langle a, les inégalités (3.5) et (3.6) sont toutes deux satisfaites. Le défaut se comporte donc comme un piège à électrons.

Entre a et b, l'inégalité (3.5) est satisfaite mais (3.6) est inversée, on a un centre de génération. Enfin, pour x > b les inégalités (3.5) et (3.6) ne sont pas satisfaites et le défaut est un piège à trous.

Les autres cas, en particulier quand $E_T > E_1$, ainsi que pour une polarisation en accumulation, sont détaillés à la référence [12].

2.2 Application aux défauts d'interface

Mis à part les effets liés à l'extension spatiale, tous ce qui précède est valable pour un défaut à l'interface Si-SiO_2 . L'interface présentant un pseudocontinuum d'états localisés dans la bande interdite, le modèle de Schockley-Read { éq.(3.1) à (3.4)} reste applicable à condition que les états n'interagissent pas entre eux. Cette hypothèse semble toujours vérifiée. Comparée à l'extension de la fonction d'onde (environ 10 Å), la distance moyenne entre deux défauts est grande (100 Å pour une densité aussi élevée que 10^{12} cm⁻² eV⁻¹).

Avec une extension spatiale limité à l'interface (< 20 A), on applique également les différents types de comportement décrits précédemment à la distribution d'état d'interface (figure 3.6). Il faut pour cela émettre deux hypothèses :

i) Le pseudo-niveau de Fermi dans le volume doit se prolonger jusqu'à l'interface ($E_{\rm Fp}$ dans le cas de la figure 3.6).

40

(3.7)

ii) Le niveau d'énergie E_1 à la surface (E_{1s}) n'est défini de manière commune à l'ensemble de la densité d'états, que si σ_n et σ_p sont indépendantes de l'énergie E_T . Cette deuxième hypothèse n'est pas vérifiée près des bords de bandes, et elle est fortement discutée pour les niveaux situés près du milieu de la bande interdite. Bien que fortement limité par ces hypothèses, on prévoit alors que les états situés près de la bande de conduction $(E_T > E_a)$ sont des pièges à électrons. Ce sont des niveaux accepteurs, pouvant recevoir un électron selon la réaction

 $D^{\circ} + e^{-} \rightarrow D^{-}$

(3.8)

Au contraire, les états situés près de la bande de valence $(E_T < E_b)$ se comportent en pièges à trous. Ce sont des niveaux donneurs pouvant émettre un électron (i.e. recevoir un trou)



Figure 3.6 : Comportement des défauts d'interface en fonction de leurs niveaux d'énergie dans la bande interdite (structure MOS-p, polarisée en déplétion).

Une telle classification est en accord avec les résultats des expériences effectuées en résonance paramagnétique électronique (chap. II, § 3.1.2) donnant un comportement de type U positif malgré des effets de relaxation de réseau (Jahn-Teller) qui peuvent être plus importants à l'interface que dans le volume, du fait du caractère ionique de SiO₂ [13].

Signalons cependant, les résultats récents de COPPARD et ROSENCHER [14], qui trouvent un caractère donneur pour des états d'interface situés près de la bande de conduction. Ces résultats obtenus à partir d'une nouvelle extension des mesures capacitives, la F.R.D.L.T.S. (Field Resolved D.L.T.S.), corroborent des résultats similaires plus anciens [15,16].

En conclusion, si la prudence s'impose pour juger du caractère donneur ou accepteur des états d'interface, aussi bien pour ces résultats expérimentaux que pour les jusitifications théoriques, l'utilisation des phénomènes d'émission et de capture en terme du modèle de Schockley-Read est suffisant pour décrire les dispositifs expérimentaux utilisés durant ce travail.

3. - SPECTROSCOPIE DE CONDUCTANCE

Cette méthode permet d'obtenir les propriétés des états d'interface par des mesures d'admittance (capacité et conductance en fonction de la tension de polarisation) à différentes fréquences. La mesure n'est pas directe, elle nécessite l'élaboration d'un schéma équivalent. Différentes hypothèses seront nécessaires pour établir un schéma équivalent de la structure M.O.S. prenant en compte l'émission et la capture des porteurs libres par les états d'interface.

3.1 Principe de base

3.1.1 Description phénoménologique

On crée une faible perturbation sinusöidale $\delta \psi_{\rm s}(t)$ du potentiel de surface autour de sa valeur de repos. Pendant une alternance, il y aura tendance au remplissage des états vides autour du niveau de Fermi (figure 3.7a), d'où l'existence d'un courant $\delta i_{\rm c}(t)$ correspondant à la capture des électrons. Le phénomène inverse se produit pour l'autre alternance (figure 3.7.b), il donnera naissance à un courant $\delta i_{\rm e}(t)$ correspondant à l'émission des électrons.

42



Figure 3.7 : Effet d'une petite variation du potentiel de surface sur les états d'interface.

En terme de circuit électrique, on modélise ce phénomène par l'existence d'une admittance

$$\delta i_{c}(t) = (G_{c} + j\omega C_{c}) \delta \psi_{c}(t) \qquad (3.10)$$

Idéalement, la conductance de la structure est nulle pour un oxyde parfait. Le terme G_s représente donc les pertes dues aux états d'interface. A cause de l'existence, pour les porteurs piégés, d'une constante de temps $\tau(E_T) = 1/(e_n + c_n)$, il y a un stockage de charge sur les états d'interface. L'existence du terme C_s résulte de ce phénomène. Comme cette capacité n'est qu'une partie de la capacité totale de la structure, la sensibilité aux états d'interface est meilleure pour la conductance, ce qui justifie son emploi préférentiel.

Pour une pulsation ω inférieure à $\omega_T = 1/\tau(E_T)$, la réponse des états d'interface est quasi instantanée : on est toujours à l'équilibre et la conductance G_s est nulle (figure 3.8). Pour une pulsation très grande, les états ne répondent pas et on a encore G_s nulle. La conductance passe donc par un maximum pour $\omega = \omega_T$. Ce maximum est directement reliéà la densité d'états d'interface autour du niveau de Fermi en surface.

43



Figure 3.8 : Variation de la conductance avec la fréquence à polarisation fixe.

En répétant les mesures de conductances pour différentes polarisations de repos, on obtient un balayage de la bande interdite par la variation de la courbure de bandes, et en conséquence une analyse spectroscopique de la densité d'états d'interface.

3.1.2 Modèle pour un état unique

La modélisation du comportement des états d'interface a été donnée initialement par LEHOVEC et SLOBODSKOY [17]. De nombreux auteurs ont ensuite contribués à son amélioration. Une synthèse récente des modèles et des résultats est faite par NICOLLIAN et BREWS [18].

On peut facilement imaginer un schéma équivalent simple dans le.cas où l'on étudie un état discret d'énergie E_T . Les échanges d'électrons entre E_T et la bande de conduction sont modélisés par une conductance G_e . On introduit G_h de façon similaire pour les trous en équilibre avec la bande de valence. Une capacité C_T modélise les effets de stockage de charges sur le piège. Il ne reste plus qu'à introduire les éléments de la structure M.O.S. idéale décrite au chapitre I : C_{OX} la capacité d'oxyde, C_{SC} celle du semiconducteur et C_I celle de la zone d'inversion quand elle existe. On obtient le schéma général de la figure 3.9 pour un substrat p.



Figure 3.9 : Schéma équivalent complet pour 1 état d'interface unique (substrat de type -p).

La généralisation à un substrat-n est immédiate.

A partir de la théorie Schockley-Read-Hall (S.H.R.), on relie facilement les conductances caractéristiques de l'état d'interface avec les taux d'émission et de capture [8,17].

$$G_e = \beta e N_T c_n n_{so} (1 - f_o)$$
 (3.11)

$$G_{h} = \beta e N_{T} c_{p} p_{so} f_{o}$$
(3.12)

La capacité est donnée par LEHOVEC et SLOBODSKOY [17]

$$C_{T} = \beta e N_{T} f_{0} (1 - f_{0})$$
 (3.13)

 N_T est la densité de pièges par unité de surface, n_{so} et p_{so} les densités, par unité de volume, d'électrons et de trous à l'interface au repos, et f_o la fonction de Fermi à l'équilibre thermodynamique (ce qui n'est correct que pour de faibles perturbations).

L'admittance résultante est la combinaison en série de $j\omega C_{\mbox{ox}}$ et de l'admittance du semiconducteur [18] :

$$y_{sc} = j\omega C_{sc} + \frac{G_{h}[j\omega (C_{I} + C_{T})G_{e} - \omega^{2}C_{I}C_{T}]}{j\omega (C_{I} + C_{T})G_{e} + j\omega C_{I}G_{h} + G_{e}G_{h} - \omega^{2}C_{I}C_{T}}$$
(3.14)

La situation la plus simple est obtenue en déplétion, où les échanges avec les minoritaires sont négligeables, ainsi que la capacité d'inversion ($C_{\rm I}$ << $C_{\rm T}$). On obtient alors le schéma équivalent des figures 3.10 a et b à partir de l'expression simplifiée



Figure 3.10 : En déplétion. Schémas équivalents et comportement de l'admittance propre aux états d'interface

- a) Schéma équivalent
- b) Schéma équivalent parallèle
- c)Comportement des termes dus aux états d'interface.

La conductance et la capacité parallèle (G_p , C_p) sont données par

$$G_{p} = \frac{C_{T} \omega \tau}{1 + \omega^{2} \tau^{2}}$$
(3.16)

et

$$C_{p} = \frac{C_{T}}{1 + \omega^{2} \tau^{2}} + C_{sc}$$
(3.17)

où la constante de temps caractéristique est

$$\tau = \frac{C_T}{G_h} = \frac{f_o}{c_p p_{so}}$$
(3.18)

La variation de G_p (figure 3.10.c) illustre clairement le principe de base de la méthode.

3.1.3 Modèle pour une distribution d'états

Expérimentalement, on n'observe pas un état unique mais une distribution continue (ou continuum) d'états d'interface : l'écart entre deux niveaux successifs est absolument inaccessible à la mesure (de l'ordre de 10^{-7} eV pour une densité de 10^{9} cm⁻² eV⁻¹ et une surface de 10^{-2} cm²). Il faut donc étendre le modèle précédent à une telle distribution en supposant qu'il n'y a aucune interaction entre les niveaux (§ 2.2).

a) Modèle généralisé

Le schéma équivalent de la figure 3.9 se généralise facilement en introduisant en parallèle autant de cellules $\{G_e, G_h, C_T\}$ qu'il y a de niveaux d'énergie distincts [18,19]. On obtient le schéma équivalent présenté à la figure 3.11 où l'indice l indique le l^{ième} état du continuum.



Figure 3.11 : Schéma équivalent pour un continuum d'états d'interface (substrat de type-p).

Pour calculer plus facilement, l'admittance complète il est préférable de réarranger les éléments caractéristiques d'un état d'interface de façon à faire apparaître tous les éléments correspondants en parallèle. Cela est réalisé par une transformation $Y - \Delta$ (figure 3.12)



Figure 3.12 : Transformation Y-∆ du schéma équivalent pour un état d'interface : a) réseau Y b) réseau ∆

Pour l'ensemble de la structure, on écrit alors :

$$Y_{eh} = \sum_{l} \frac{G_{el} G_{hl}}{D_{l}}$$
(3.19)

$$Y_{Th} = j\omega \sum_{l} \frac{G_{hl} C_{Tl}}{D_{e}} = j\omega C_{Th}$$
(3.20)

$$Y_{Te} = j\omega \sum_{l} \frac{G_{el} C_{Tl}}{D_{l}} = j\omega C_{Te}$$
(3.21)

avec

$$D_{1} = G_{e1} + G_{h1} + j\omega C_{T1}$$
(3.22)

Dans le cas général d'une fréquence quelconque, les trois éléments du réseau Δ possèdent une conductance et une susceptance. Par analogie d'écriture dans les équations (3.19) à (3.21), on représentera dans les schémas Y_{eh} par une conductance et Y_{Th} et Y_{Te} par des capacités C_{Th} et C_{Te}

Le schéma équivalent pour l'ensemble de la structure est donné figure 3.13. On obtient pour l'admittance du semiconducteur

$$Y_{sc} = j\omega (C_{sc} + C_{Th}) + \frac{j\omega (C_{I} + C_{Te}) Y_{eh}}{j\omega (C_{I} + C_{Te}) + Y_{eh}}$$
(3.23)



Figure 3.13 : Schéma équivalent déduit de la figure 3.11 par la transformation Y-A. (Substrat de type -p). (* Ces éléments sont à prendre comme des admittances).

L'écart entre deux niveaux successifs étant indiscernable expérimentalement, on remplace la sommation sur l par une intégration à travers la bande interdite, suivant le principe

$$\sum_{1}^{\Sigma} N_{T1} = \int_{\psi_{s}(Bv)}^{\psi_{s}(Bc)} N_{it}(\psi_{s}) d\psi_{s}$$
(3.24)

où $N_{it}(\psi_s) d\psi_s$ représente le nombre d'états par unité de surface compris entre ψ_s et $\psi_s + d\psi_s$. $N_{it}(\psi_s)$ est la densité d'états d'interface par unité de surface et par électron-volt. Les bornes d'intégration se définissent aisément sur la figure 1.1

 $\psi_{s(Bv)} = \frac{Eg}{2e} - \psi_{B}$ (3.25.a)

$$\psi_{s(Bc)} = \frac{Eg}{2e} + \psi_{B}$$
 (3.25.b)

50

A partir des équations (3.19) à (3.21), et en reprenant les définitions (3.11) à (3.13), on obtient les nouvelles expressions du réseau Δ [18]. Le terme d'admittance entre bandes devient

$$Y_{eh} = \beta e \int_{\psi_{s}(Bv)}^{\psi_{s}(Bc)} \frac{N_{it}(\psi_{s})f_{o}(1-f_{o}) d\psi_{s}}{\tau_{o}\tau_{p}[j\omega f_{o}(1-f_{o})+f_{o}/\tau_{p}+(1-f_{o})/\tau_{n}]}$$
(3.26)

où τ_n et τ_p sont respectivement les constantes de temps pour les électrons et les trous

$$\tau_{n} = \frac{1}{\underset{n}{c_{n}} \underset{so}{n}} = \left[\sigma_{n} V_{n} n_{\infty} \exp \frac{e\psi_{s}}{kT}\right]$$
(3.27.a)

$$\tau_{p} = \frac{1}{c_{p} p_{so}} = [\sigma_{p} V_{p} p_{\infty} \exp \frac{-e\psi_{s}}{kT}]$$
(3.27.b)

Expérimentalement, on sait que $D_{it}(\psi_s)$, c_n et c_p varient lentement avec l'énergie (sauf en bord de bande). La fonction $f_0(1-f_0)$ n'est différente de zéro que pour quelque kT autour du niveau de Fermi (figure 3.14). Les trois valeurs précédentes seront donc évaluées pour les états situés face au niveau de Fermi. Soit $\phi_s = \psi_B - \psi_s$ l'écart par rapport au niveau de Fermi intrinsèque, on réécrit (3.26) sous la forme

$$Y_{eh} = \frac{e N_{it} (\phi_s)}{\tau_n(\phi_s)\tau_p(\phi_s)} \int_{1}^{o} \frac{df}{j\omega f(1-f) + f/\tau_p + (1-f)/\tau_n}$$
(3.28)

suivant la même procédure, on obtient

$$Y_{Th} = \frac{e N_{it}(\phi_s)}{\tau_p(\phi_s)} \int_{0}^{1} \frac{f}{j\omega f(1-f) + f/\tau_p + (1-f)/\tau_n} df \qquad (3.29)$$

et

$$Y_{Te} = \frac{e N_{it}(\phi_s)}{\tau_n(\phi_s)} \int_{0}^{1} \frac{(1-f)}{j\omega f(1-f) + f/\tau_p + (1-f)\tau_n} df$$
(3.30)



Figure 3.14: variation de la fonction f(1-f).

Les trois intégrales sont évaluées à l'annexe II de la ref. [18]. Le résultat est fortement dépendant de la polarisation de la structure M.O.S., ce qui permet une discussion cas par cas.

b) Déplétion

Physiquement, on peut négliger l'interaction entre les états d'interface et les porteurs minoritaires (i.e. $\tau_p < \langle \tau_n \rangle$). On modifie le schéma équivalent de la figure 3.11 pour obtenir le schéma classique de GOETZBERGER et NICOLLIAN [8] (figure 3.15a).



Figure 3.15 : Schéma équivalent pour un continuum d'états d'interface. Substrat de type -p en déplétion a) Schéma équivalent b) Schéma équivalent parallèle.

Suivant la démarche du paragraphe 3.1.2, on met ce schéma sous la forme d'un schéma parallèle plus simple à utiliser. Le résultat des intégrales (3.28) à (3.30) en déplétion [18] est introduit dans l'admittance du semiconducteur donnée par (3.23) qui devient simplement

$$Y_{sc} = G_{p} + j\omega G_{p}$$
(3.31)

avec une conductance parallèle \boldsymbol{G}_{p} (w) tel que

$$\frac{G_{p}(\omega)}{\omega} = \frac{eN_{it}(\phi_{s})}{2\omega\tau_{p}} Ln [1 + (\omega\tau_{p})^{2}]$$
(3.32)

et une capacité parallèle

 $C_{p}(\omega) = C_{sc} + C_{it}(\omega)$ (3.33)

où la capacité propre aux états d'interface est

$$C_{it}(\omega) = \frac{eN_{it}(\phi_s)}{\omega\tau_p} \arctan(\omega\tau_p)$$
(3.34)

Il est intéressant de comparer ces résultats avec ceux du § 3.1.2 obtenus pour un état unique. La figure 3.16 donne les courbes G_p/ω calculées par (3.16) et (3.32), et les courbes C_p obtenues à partir de (3.17) et (3.34).



____ continuum d'états d'interface --- état unique

Figure 3.16 : Comparaison des conductances et capacités parallèles en déplétion pour un état unique et un continuum (ref. [17]).

On obtient un décalage du maximum ($\omega \tau_p = 1,98$) et un affaiblissement de l'amplitude maximale ($G_p/\omega = 0.4 \text{ eN}_{it}$). Ces modifications seront prises en compte lors de l'extraction des paramètres (N_{it} , σ_p) au § 3.3. La courbe est légèrement élargie à cause d'une distribution des constantes de temps propre à chaque

état. En effet, chaque constante de temps $\tau_1 = C_{Te}/G_{h1}$ dépend de la position énergétique E_T par l'intermédiaire de f_o.

c) Faible inversion

On comprend facilement, le comportement des états d'interface en faible inversion, en partant des définitions (3.11) et (3.12) des conductances de capture pour les électrons et les trous. Nous comparons les résistances correspondantes

$$R_{e} = G_{e}^{-1} = \frac{kT}{c^{2}} [c_{n} n_{s} N_{T} (1 - f_{o})]$$
(3.35)

$$R_{h} = G_{h}^{-1} = \frac{kT}{e^{2}} \left[c_{p} p_{s} N_{T} f_{o} \right]^{-1}$$
(3.36)

en remplaçant n_s et p_s par leurs expressions en fonction de ψ_s {éq. (1.4) et (1.5)} et la fonction de Fermi f_o en fonction de $E_T - E_F$. Pour un potentiel de surface donné, on trace R_e et R_h en fonction de $E_T - E_F$ (figure 3.17).

Pour les états situés au dessus d'un niveau limite E_L tel que $R_h = R_e$, les échanges avec les porteurs minoritaires sont dominants ($R_e < R_h$). Cette fraction de la densité d'états est la plus importante et on peut prévoir physiquement qu'elle dominera l'ensemble de la réponse puisqu'il existe un "couloir" de conduction (la zone d'inversion) pour les minoritaires (i.e. τ_n << τ_p).

Afin de modéliser simplement le comportement de l'ensemble du continuum d'états d'interface, on établit une approximation draconienne sur les minoritaires [8,19]

 $R_{p} = 0$ pour $E_{T} > E_{L}$

 $R_{e} = \infty$ pour $E_{T} < E_{L}$

55







Figure 3.17 : Comportement en faible inversion

Pour $E_T > E_L$, le schéma équivalent de la figure 3.11 devient celui présenté à la figure 3.17.b. Les capacités C_{T1} sont directement connectées avec la bande de conduction. Au contraire, pour $E_T < E_L$, on obtient le schéma de la figure 3.17.c. Dans le premier cas, l'analogie avec le modèle à constante de temps unique (figure 3.10) est évidente. Le deuxième cas est identique au modèle à constantes de temps dispersées proposé en déplétion (figure 3.15). A priori, la constante de temps $\tau = C_T R_h$ sera plus importante pour les états au-dessus de E_T puisque R_h augmente (figure 3.17.a). En conséquence, le comportement équivalent à celui correspondant à une constante de temps unique dominera à basse fréquence, alors que les états près de la bande de valence répondront à haute fréquence.

Pour affiner l'étude, il faut repartir de l'expression (3.23) donnant l'admittance du semiconducteur dans le cas général. A fréquence élevée, tel que $\omega(C_I + C_{Te}) >> Y_{eh}$ on a simplement

$$Y_{sc} = j\omega C_{sc} + Y_{Th} + Y_{eh}$$
(3.37)

L'évaluation de Y_{Th} et Y_{eh} [18] conduit aux résultats suivants

$$Y_{sc} = j\omega C_{sc} + \frac{e^{N}it}{\tau_{p}} Ln \frac{\tau_{p}}{\tau_{n}} + j\omega \frac{\tau_{n}}{\tau_{p}} C_{it} (\omega) + \frac{\tau_{n}}{\tau_{p}} G_{p} (\omega)$$
(3.38)

où

$$\frac{G_{p}}{\omega} = \frac{eN_{it}}{2\omega\tau_{n}} \ln \left(1 + \omega^{2}\tau_{n}^{2}\right)$$
(3.39.a)

$$C_{it}(\omega) = \frac{eN_{it}}{\omega\tau_{n}} \arctan(\omega\tau_{n})$$
(3.39.b)

Ces expressions correspondent au cas $E_T \leq E_L$ (figure 3.17.c). Elles sont analogues à celles obtenues en déplétion [éq. (3.32) et (3.34)] en remplaçant τ_p par τ_n puisque les minoritaires dominent à l'interface. De plus, en comparant (3.38) et (3.31) l'admittance des états d'interface est globalement multipliée par un facteur $\tau_n/\tau_p \leq 1$. La réponse en haute fréquence sera donc
faible et le plus souvent négligeable.

Pour des fréquences telles que $\omega \tau_n \ll 1$, c'est la figure 3.17.b qui est valable. On obtient [18] pour les admittances

$$Y_{eh} = \frac{eN_{it}}{\tau_p} Ln \frac{\tau_p}{\tau_n}$$
(3.40)

$$C_{\text{Te}} = eN_{\text{it}}$$
(3.41)

Avec C_{Th} qui est négligeable, le schéma de la figure 3.13 redonne bien celui de la figure 3.17 et l'admittance du semiconducteur s'écrit comme en (3.15) en remplaçant C_T par $C_I + C_{Te}$ et G_h par Y_{eh}

$$Y_{sc} = j\omega C_{sc} + \frac{j\omega (C_{I} + C_{Te})Y_{eh}}{j\omega (C_{I} + C_{Te}) + Y_{eh}}$$
(3.42)

La même analyse permet de passer au schéma parallèle (G_p, C_p) mais la constante de temps est maintenant

$$\tau = \tau_{p} \frac{C_{I} + C_{Te}}{C_{Te} Ln(\tau_{p}/\tau_{n})}$$
(3.43)

Il n'y a pas de schéma équivalent simple pour les fréquences intermédiaires. De même, la polarisation $\psi_s = \psi_B$, frontière entre la déplétion et la faible inversion, ne permet pas l'extraction d'un modèle facilement exploitable. Pour les états autour du milieu de la bande interdite, R_e et R_h sont du même ordre de grandeur, en conséquence les phénomènes de générationrecombinaison dominent l'expression de l'admittance du semiconducteur, dans laquelle le terme Y_{eh} est prédominant [18].

Les résultats de COOPER et SCHWARTZ [19] illustre clairement l'ensemble des résultats précédents (figure 3.18).



Figure 3.18 : Comportement de G_p pour différentes polarisations (ref. [19]).

d) Accumulation et forte inversion

Aucune information ne peut être obtenue en accumulation, puisque le schéma équivalent est réduit à la capacité d'oxyde à cause de l'écrantage dû à l'accumulation de porteurs à l'interface (chap. I, § 4.1).

En forte inversion, la capacité de la couche d'inversion est telle que C_I >> C_{Te} ce qui réduit (3.42) à

$$Y_{sc} = j\omega C_{sc} + eN_{it} c_p N_A (L_n \frac{\tau}{\tau}) exp \frac{-e\psi_s}{kT}$$
(3.44)

en explicitant τ_p en fonction du potentiel de surface. Le deuxième terme est négligeable puisque la valeur de ψ_s , positive, est importante.

e) Synthèse

La méthode $G(\omega)$ n'est utilisable que pour des courbures de bandes modérées (déplétion, faible inversion).



L'élaboration des schémas équivalents permettant l'extraction des paramètres est résumé dans la figure 3.19. Un modèle physique de base est établi à partir de la théorie de Schockley-Read (figure 3.11). Une transformation judicieuse des réseaux, suivi par une intégration de la réponse des états d'interface sur l'ensemble de la bande interdite, permet d'obtenir un schéma équivalent généralisé (figure 3.13, équations (3.23) et (3.28) à (3.30)). Deux cas sont intéressants : déplétion et faible inversion pour deux raisons. D'abord, un raisonnement physique permet d'aboutir facilement à la topologie du schéma équivalent valable pour chaque cas (figure (3.15) en déplétion et (3.17) en faible inversion). Ensuite, l'évaluation mathématique rigoureuse des admittances du schéma général (éq. (3.28) à (3.30)) donne les expressions de la conductance parallèle G_D contenant les informations à extraire des variations de cette dernière avec la fréquence ω de la mesure (figure 3.18). Les méthodes d'extraction sont décrites au § 3.3.

Ce type de modèle n'est toutefois pas suffisant pour expliquer l'élargissement observé expérimentalement sur la courbe G_p/ω (figure 3.20) en déplétion qui est beaucoup plus important que prévu. Pour cela, il faut rajouter un autre paramètre dans le modèle. C'est l'objet du § suivant.



Figure 3.20 : Comparaison des modèles avec l'expérience (réf. [8])

- a) Résultats expérimentaux
- b) Modèle avec un continuum d'états
- c) Modèle avec un état unique.

3.2 Influence des inhomogénéités de la structure

3.2.1 Origines physiques

Le modèle idéal décrit précédemment suppose que les charges à l'interface sont distribuées uniformément sur toute la surface de l'échantillon.

En réalité, la structure M.O.S. présente des inhomogénéités dans la répartition

- des charges fixes d'oxyde, principalement près de l'interface
- des états d'interface
- de l'épaisseur d'oxyde
- du dopage du semiconducteur
- des impuretés (ions Na⁺ par exemple).

Ces inhomogénéités induisent des fluctuations du potentiel de surface, produisant une dispersion importante des constantes de temps de la distribution d'états d'interface, ce qui élargit fortement le pic de la courbe G_p/ω en déplétion. En inversion, la couche d'inversion écrante ces fluctuations du potentiel de surface, et le modèle à constante de temps unique s'appliquera comme précédemment (§ 3.1.3.c).

L'inhomogénéité des charges d'oxyde près de l'interface est le principal responsable des effets les plus importants. On ne traite que celui-ci.

3.2.2 Modèle statistique discrétisé (patchwork).

Un modèle simple introduit par NICOLLIAN et GOETZBERGER [8], consiste à diviser la capacité en microcapacités de surface caractéristique α . Chaque microcapacité "n" est indépendante et sa charge d'oxyde $Q_{\rm fn}$ est uniforme. On admet une distribution de Poisson des charges approximée par une Gaussienne. La probabilité $P(Q_{\rm fn})$ que la capacité "n" ait une charge $Q_{\rm fn}$ s'écrit

$$P(Q_{fn}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_q^2}} \exp \frac{-(Q_{fn} - \overline{Q}_f)^2}{2\sigma_q^2}$$
(3.45)

où la variance est reliée à la moyenne par

$$\sigma_{q}^{2} = \frac{e\overline{Q}_{f}}{\alpha}$$
(3.46)

Il existe une relation non linéaire entre les fluctuations de charge dQ_f et les fluctuations résultantes du potentiel de surface [8]

$$dQ_{f} = [C_{ox} + C_{sc}(\overline{\psi}_{s}) + C_{it}(\overline{\psi}_{s})] d\psi_{s}$$
(3.47)

Pour des faibles variations, la linéarisation donne une distribution également Gaussienne pour le potentiel de surface $(u_s = \beta \psi_s)$

$$P(u_{s}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{s}^{2}}} \exp \frac{-(u_{s} - \overline{u_{s}})^{2}}{2\sigma_{s}^{2}}$$
(3.48)

où

$$\sigma_{s} = \frac{\beta}{C_{ox} + C_{sc}(\overline{u}_{s}) + C_{it}(\overline{u}_{s})} \sigma_{q}$$
(3.49)

L'étape finale, consiste à multiplier la conductance parallèle en déplétion (eq. 3.32) par cette probabilité et d'intégrer.

$$\frac{\langle G_{p} \rangle}{\omega} = \frac{eN_{it}(\overline{u}_{s})}{2\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\ln[1+\omega^{2}\tau^{2}]}{\tau_{p}} P(u_{s})du_{s}$$
(3.50)

On peut sortir $N_{it}(\bar{u}_s)$ de l'intégrale puisque σ_s vaut typiquement moins de 5kT/e (figure 3.21) et que dans cette gamme de potentiel, la densité et les sections de capture varient, lentement (figure 3.21).





Figure 3.21 : Vérifications expérimentales

- a) fluctuation du potentiel de surface (ref. [20]
- b) Densité d'états
- c) Sections de capture {(ref. [19])

Le même type de résultat s'applique pour la capacité parallèle

$$= C_{sc}(\overline{u}_{s}) + \frac{eN_{it}(\overline{u}_{s})}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{arctg}(\omega\tau_{p})}{\tau_{p}} P(u_{s})du_{s}$$
(3.51)

chaque microcapacité est régie par les équations (3.32) et (3.34), on en déduit donc le schéma équivalent de la figure 3.22.





a) modèle statistique discrétisé

b) schéma équivalent global sur l'ensemble de la structure.

L'équivalence entre les schémas 3.22.a et 3.22.b conjointement à l'utilisation des expressions (3.50) et (3.51) n'est qu'une approximation [21]. Elle est justifiée pour les faibles densités d'états ($eN_{it} \ll C_{sc}$)^{*} et les faibles variations de potentiel de surface ($\sigma_s < 5 \text{ kT/e}$) pour lesquelles la linéarisation de (3.47) reste valable [22]. L'annexe II développe une formulation généralisée rigoureuse pour le schéma 3.22.a.

* Numériquement, cela impose $N_{it} < 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ avec $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

3.2.3 Modèle aléatoire.

BREWS [23] critique le modèle précédent qui n'est pas valable pour les courtes variations spatiales du potentiel de surface. Considérer que chaque microcapacité est indépendante, revient à négliger les effets de bords et les interactions entre microcapacités. Il faut donc que la surface caractéristique α soit supérieure à la longueur d'écran du problème (c'est-à-dire la profondeur de déplétion) :

 $\alpha > \pi W_d^2 \tag{3.52}$

Typiquement, $\alpha > 10^{7}$ cm² (la variation expérimentale de cette condition pose un problème discuté à l'annexe III).

La profondeur de déplétion W_d , est sensible à la valeur globale des charges fixes dans l'oxyde. Pour des distances caractéristiques de variations supérieures à W_d (figure 3.23.a), la profondeur de déplétion est modulée par les fluctuations de charges. En conséquence chaque microcapacité est différente et le modèle discrétisé s'applique parfaitement.



Figure 3.23 : Structure MOS inhomogène (ref. [24]) a) grande variation spatiale b) faible variation spatiale.

Par contre, les faibles distances caractéristiques λ sont moyennées (figure 3.23.b) rendant caduque le modèle initial. Pour

prendre en compte l'effet de ces fluctuations, BREWS a développé un modèle où il suppose une distribution aléatoire de charges ponctuelles sur l'ensemble de la surface.

Résolvant l'équation de Poisson à trois dimensions sur la structure complète, il aboutit à une nouvelle expression de la variance remplaçant l'équation (3.49)

$$\sigma_{s}^{2} = \beta^{2} \frac{e\overline{Q}_{f}}{4\pi (\varepsilon_{s} + \varepsilon_{ox})^{2}} \operatorname{Ln} \left\{ 1 + \left(\frac{C_{\lambda}}{C_{ox} + C_{sc} + C_{it}} \right)^{2} \right\}$$
(3.53)

Le terme C_{λ} est lié à une limite inférieure de λ telle que

$$C_{\lambda} = \frac{\varepsilon_s + \varepsilon_{ox}}{\lambda}$$
(3.54)

En effet, la réponse des états d'interface est nulle pour des fluctuations trop rapides du potentiel de surface. Le paramètre λ dépend de la structure atomique des pièges d'interface. Trop d'incertitudes au niveau de cette structure (chap. II) font que λ est considéré comme un paramètre d'ajustement sur les valeurs expérimentales. Les résultats [15,16] suggèrent $\lambda \sim 75$ Å, ce qui est du même ordre de grandeur que la distance entre deux défauts à l'interface (§ 2.2).

Pour

 $\lambda > \frac{\varepsilon_{s} + \varepsilon_{ox}}{C_{ox} + C_{sc} + C_{it}}$ (3.55)

l'équation (3.53) se réduit à (3.49) avec

$$\alpha = 4 \pi \lambda^2 \tag{3.56}$$

La condition (3.55) n'est satisfaite que pour des oxydes minces, un dopage important ou une forte densité d'états. Alors le modèle discrétisé reste valable pour des faibles valeurs de λ . Ce cas est toutefois extrêmement limité. Finalement, le schéma 3.22.b est utilisé avec les équations (3.50) et (3.51) pour $\langle G_p \rangle$ et $\langle C_p \rangle$, mais avec σ_s donné par (3.53) ce qui assure un meilleur ajustement avec l'expérience.

Nous disposons maintenant, de modèles suffisamment complets qui vont nous permettre d'extraire les paramètres physiques du continuum des états d'interface.

3.3 Extraction des paramètres

3.3.1 Relation entre admittances équivalente et mesurée

L'admittance équivalente parallèle $(\langle G_p \rangle, \langle C_p \rangle)^*$ est obtenue à partir des valeurs G_m et C_m mesurées par le dispositif décrit à l'annexe IV (figure 3.24)



Figure 3.24 : Equivalence entre les mesures et le schéma équivalent

La résistance série R_s peut ne pas être négligeable et elle introduit alors une erreur sérieuse dans l'extraction des paramètres. Elle est principalement due à :

- un mauvais contact sur la face arrière du silicium (surface non dégénérée, comportement des produits de contact tel que laques à l'argent, GaIn)

* Dans la suite, les crochets <> de moyennage sur les microcapacités seront sous-entendus.

- la résistance volumique du silicium (faible dopage).

Cette résistance peut être minimisée, toutefois nous avons fait systématiquement une correction sur les données brutes de la mesure de la façon suivante. En forte accumulation et à haute fréquence, le schéma équivalent se réduit à C_{ox} en série avec R_{s} (en effet $C_{sc} >> C_{ox}$ et $\omega C_{sc} >> Y_{it}$). Alors

$$R_{s} = \frac{G_{ma}}{G_{ma}^{2} + \omega^{2} C_{ma}^{2}}$$
(3.57)

où G_{ma} et C_{ma} sont les valeurs mesurées en accumulation, et

$$C_{ox} = C_{ma} \left[1 + \left(\frac{G_{ma}}{\omega C_{ma}} \right)^2 \right]$$
 (3.58)

Les valeurs corrigées représentant l'admittance réelle de la structure M.O.S. sont alors

$$G_{c} = \frac{(G_{m}^{2} + \omega^{2}C_{m}^{2})\Delta}{\Delta^{2} + \omega^{2}C_{m}^{2}}$$
(3.59.a)
$$C_{c} = \frac{(G_{m}^{2} + \omega^{2}C_{m}^{2})C_{m}}{\Delta^{2} + \omega^{2}C_{m}^{2}}$$
(3.59.b)

où

$$\Delta = G_{m} - (G_{m}^{2} + \omega^{2}C_{m}^{2})R_{s}$$
 (3.59.c)

Finalement, l'admittance parallèle (G_p , C_p) s'obtient par

$$\frac{G_{p}}{\omega} = \frac{\omega C_{ox}^{2} G_{c}}{G_{c}^{2} + \omega^{2} (C_{ox} - C_{c})^{2}}$$
(3.60.a)

$$C_{p} = \frac{\omega^{2} C_{ox} C_{c} (C_{ox} - C_{c}) - C_{ox} G_{c}^{2}}{G_{c}^{2} + \omega^{2} (C_{ox} - C_{c})^{2}} = C_{it} + C_{sc}$$
(3.60.b)

La figure 3.25 illustre l'effet important de R_s qui peut masquer en tout ou partie la contribution des états d'interface à la conductance à haute fréquence^{*}, particulièrement pour de faible densité.





* Quand ω est très faible, l'équation (3.59) montre que $G_c \simeq G_m = C_c \simeq C_m$.

L'équation (3.60) permet de tracer les courbes Gp/ω avec la polarisation comme paramètre. Il est donc nécessaire de connaître la relation $\psi_s(V_g)$ où V_g est la tension sur la grille afin de positionner les états d'interface en énergie et d'obtenir ultérieurement les sections de capture.

3.3.2 Relation
$$\psi_s$$
 (V_g)

Le potentiel de surface est obtenu en comparant la valeur théorique de la capacité du semiconducteur C_{sc} (éq. 1.15) avec la mesure déduite d'un C(V) haute fréquencee par l'équation (1.27). Ceci impose que la réponse des états d'interface au signal de la modulation haute fréquence soit négligeable (figure 3.1), ce qui est vérifié pour une faible densité d'états (avec N_{it} = 10^{12} cm⁻² eV⁻¹ l'erreur sur la relation $\psi(V_g)$ est d'environ 10% [24]).

L'équation (1.15) peut se simplifier lorsqu'on néglige les porteurs minoritaires. En accumulation et déplétion, la densité des porteurs minoritaires est faible, en inversion à haute fréquence ils ne peuvent répondre à une variation rapide (chap.I). On réduit donc (1.15) à

$$C_{sc} = \sqrt{\varepsilon_{s}} e_{A} \frac{\beta}{2} \frac{1 - e_{xp} (-\beta \psi_{s})}{[e_{xp}(-\beta \psi_{s}) + \beta \psi_{s} - 1]}$$
(3.61)

La valeur de N_A est calculée par (1.38) à partir du C(V) haute fréquence en forte inversion. Implicitement, cela suppose N_A uniforme. Dans le cas contraire, l'erreur sur la capacité théorique ne devient importante que pour N_A > 10¹⁶ cm⁻³ [25].

L'équation (3.61) résolue numériquement, donne la valeur de ψ_s pour chaque polarisation V_g (figure 3.26). La tension de bandes plates s'obtient directement pour $\psi_s = 0$.



Figure 3.26 : Courbe $\psi_s(V_g)$ à partir d'un C(V) haute fréquence (M.O.S. type -p)

3.3.3 Extraction des caractéristiques à partir de Gp/ω

Pour une énergie donnée par

$$E_{T} - E_{V} = e \left(\frac{Eg}{2e} + \psi_{s} - \psi_{B}\right)$$
 (3.62)

trois grandeurs physiques sont extraites de la courbe Gp/ω :

- la densité d'états N_{it}
- la section de capture σ_p ou σ_n
- les fluctuations du potentiel de surface σ_s .

En déplétion

La technique la plus précise (figure (3.27) consiste à faire un ajustement de l'expression théorique (3.50) sur la courbe expérimentale, avec les trois grandeurs précédentes comme paramètres ajustables [19-22]. Suivant le modèle utilisé [22], les résultats diffèrent de 4% pour N_{it} , 6% pour σ_s , et de plus de 50% pour σ_p (voir annexe V). La technique G(ω) ne permet pas une mesure précise des sections de capture, à moins de valider l'un ou l'autre des modèles par comparaison avec une autre technique plus efficace, ce qui n'a pas été fait à ce jour. Nous verrons au § 4, le comportement de la D.L.T.S. sur ce point.



Figure 3.27 : Ajustement de la courbe G_p/ω théorique (ref. [22]).

Au cours de ce travail, nous avons employé une évaluation graphique [26] plus simple de mise en oeuvre.

Nous développons ici le principe guidant cette méthode. La théorie détaillée est donnée dans les références [18,26].

La largeur du pic G_p/ω est évaluée à une hauteur $f_W(G_p/\omega)_p$ arbitraire (figure 3.28). Cette largeur ne dépend que de σ_s qui est alors donné par l'abaque de la figure 3.29.a. On injecte ensuite σ_s dans l'équation (3.50) pour déterminer l'amplitude maximum de G_p/ω (figure 3.29.b) et obtenir la valeur de la densité N_{it} .

$$N_{it} = \frac{\left(\frac{G_{p}}{\mu}\right)_{p}}{eSf_{D}}$$
(3.63)



Figure 3.28 : Méthode d'évaluation graphique des caractéristiques de la densité d'états.

où S est la surface de l'échantillon et f_D la valeur de l'intégrale de l'équation (3.50). Finalement, la section de capture s'obtient en appliquant la condition

$$\frac{d}{d\omega} \left(\frac{G}{P} \right) = 0$$
(3.64)

à l'équation (3.50). La résolution numérique donne la relation entre $\sigma_{\rm p}$ et $\sigma_{\rm s}$ (figure 3.29.c), et on écrit à partir de l'équation (3.27.b)

$$\sigma_{p} = \frac{2\pi f}{N_{A} \xi_{p} V_{p}} \exp\left(\frac{e\psi_{s}}{kT}\right)$$
(3.65)

où f_p est la fréquence du maximum et

 $\xi_{\rm p} = 2 \pi f_{\rm p} \cdot \tau_{\rm p}$ (3.66)



Figure 3.28 : Abaques en déplétion pour obtenir : (ref. [26]) a) les fluctuations de potentiel de surface σ_s b) la densité d'états N: c) la section de capture σ_p .

Remarque : Pour $\sigma_s = 0$, on retrouve les valeurs du modèle de NICOLLIAN et GOETZBERGER pour une distribution d'états sans fluctuations du potentiel de surface (§ 3.1.3.b) soit : $f_D = 0.4$ et $\xi_D = 1,98$.

Nous comparons au tableau 3.II, les résultats obtenus sur les mesures présentées à la figure 3.27 par la méthode d'ajustement en employant le modèle discrétisé [22] d'une part et l'évaluation graphique d'autre part.

	Ajustement	Evaluatior f _w = 0,8	n graphique f _w = 0,9		Ecart max %
^N it	5,54 10 ¹⁰	5,6 10 ¹⁰	5,72 10 ¹⁰	$cm^{-2} eV^{-1}$	3,2 %
σ _p	1,42 10 ⁻¹⁶	0,98 10 ⁻¹⁶	0,98 10 ⁻¹⁶	cm ²	44,8 %
σ s	2,7	2,74	2,8	kT/e	3,7 %

Tableau 3.II : Validation de la méthode graphique

L'évaluation graphique est donc validée, les écarts entre les valeurs extrêmes redonnent les résultats prévus précédemment.

En inversion

Le comportement est plus critique à cause de la présence des minoritaires, toutefois le modèle de COOPER et SCHWARTZ [19] s'ajuste correctement sur les résultats expérimentaux (figure 3.18). Plus simplement nous utilisons une extraction graphique fondée sur le modèle à constante de temps unique (§ 3.1.2), qui incorpore les résultats de COOPER et SCHWARTZ (Eq. (3.40) à (3.43)), (figure 3.30).



Figure 3.30 : Extraction des paramètres en faible inversion.

Le maximum de la courbe dépend aussi de C_I , la capacité d'inversion agit en parallèle avec les états d'interface (voir figure 3.17).

A quelles conditions peut-on négliger C_I devant eN_{it} ? Dans la limite où la charge d'inversion reste faible devant la charge d'espace on a (voir chapitre VII)

$$C_{I} = \frac{k\varepsilon_{s} T n_{i}^{2} [exp (\beta \psi_{s}) -1]}{N_{A} \psi_{s} \sqrt{2e \varepsilon_{s} N_{A} \psi_{s}}}$$
(3.67)

ce qui permet de tracer un abaque donnant la zone de validité des valeurs (ψ_s , N_{it}) pour avoir moins de 3%, 10% ou 20% d'erreur sur N_{it} en négligeant C_I (figure 3.31). Dans cette zone, on écrit

$$\frac{\binom{G}{p}}{\omega p} = \frac{e_{N_{it}}}{2}$$
(3.68.a)



Figure 3.30 : Erreur sur la densité ${\rm N}_{it}$ en négligeant la capacité d'inversion ${\rm C}_{I}.$

$$-$$
 N_A = 10¹⁵ cm⁻³
-- 10¹⁶ cm⁻³

(3.68.b)

$$\omega \tau_p \operatorname{Ln} (\tau_n / \tau_p) = 1$$

L'évaluation des sections de capture est encore très imprécise à cause de la présence du terme minoritaire (τ_n) . L'application de la relation (3.68.a) conduit à surestimer la densité d'états d'interface, cette relation ne tenant pas compte de C_{τ} .

3.4 Limites de validité

Après avoir décrit la technique $G(\omega)$, il est bon de garder à l'esprit les limitations imposées soit par le système physique, soit par le choix d'approximations dans les modèles utilisés.

Rappelons brièvement que la technique $G(\omega)$ ne s'applique que pour de faibles perturbations du potentiel de surface autour d'une polarisation en déplétion ou en faible inversion.

La densité d'états d'interface (N_{it} doit être faible (< 10^{11} cm⁻² eV⁻¹), elle doit varier lentement avec l'énergie, sur une gamme de l'ordre de grandeur des fluctuations σ_s du potentiel de surface. Le non respect de cette limite, en particulier près des bords de bandes, entraine une déformation importante de la courbe G_p/ω [19].

De même les sections de capture (σ_n, σ_p) doivent être faiblement dépendantes de l'énergie. Un traitement rigoureux a été fait [21] dans le cas où $\sigma(E)$ a une variation exponentielle. Ce calcul met en évidence la déformation de Gp/ ω , mais ne permet pas d'améliorer les mesures de section de capture.

L'approximation d'un dopage uniforme dans le semiconducteur introduit une erreur non négligeable sur la relation $\psi_s(Vg)$ que pour des concentrations supérieures à 10^{16} cm⁻³.

Finalement, il convient de mentionner l'effet des pièges de volume, même en très faible concentration, qui limitent la détection des faibles densités à l'interface lorsque la

79

structure MOS est en inversion (voir annexe VI). En pratique, la limite inférieure est autour de $10^9 \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ et même de $10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ dans les cas défavorables. Il faudra donc souvent se contenter de résultats uniquement en déplétion comme le montrera le chapitre IV.

3.5 Conclusions

Nous avons cerné les principes et les limites de la caractérisation des états d'interface par la spectroscopie de conductance $G(\omega)$. Bien que nécessitant l'utilisation de modèles électriques contenant des approximations importantes et d'une mise en oeuvre lourde et délicate, cette technique permet d'obtenir des résultats fiables sur une gamme de 10^9 à 10^{11} cm⁻² eV⁻¹ en déplétion et de 10^{10} à 10^{11} cm⁻² eV⁻¹ en faible inversion dans les meilleurs cas.

Par contre nous n'obtiendrons que des ordres de grandeurs pour les sections de capture.

Récemment, des améliorations [27] (mesures sous illumination entre autres), ainsi que des développements originaux [28] (emploi d'un transistor MOS permettant une étude hors équilibre) ont été proposés pour étendre le champ d'application de cette technique.

4. - SPECTROSCOPIE DE CAPACITES TRANSITOIRES

Au lieu d'étudier les états d'interface par une analyse harmonique comme en $G(\omega)$, on analyse le régime transitoire du retour à l'équilibre de la structure après l'application d'une brusque perturbation. Mathématiquement les deux analyses sont équivalentes.

4.1 Création d'un transitoire de capacité

Polarisons brutalement une structure MOS en accumulation (figure 3.32), les états d'interface captent rapidement les trous en excès à l'interface $(1/c_p p varie typiquement de quelques ns à 70°K à moins de l ns à température ambiante). Ensuite, on revient en déplétion ou déplétion profonde. Les porteurs majoritaires sont alors émis avec une constante de temps <math>e_p^{-1}$ qui est fortement dépendante de la température.



Figure 3.32 : Création du transitoire de capacité a) remplissage b) émission

A la fin de l'impulsion de remplissage les trous piégés représentent une charge positive en excès à l'interface qui est compensée par une augmentation de la charge négative des accepteurs ionisés de la zone de déplétion ($W_1 > W_0$). Au cours de l'émission, la charge diminue entrainant un retour vers la valeur d'équilibre C_0 de la capacité (figure 3.33).



Figure 3.33 : Polarisation et variation de la capacité associée à l'émission des porteurs majoritaires.

Etablissons l'expression analytique de la variation de capacité. Pour simplifier nous considérons d'abord un état unique d'énergie E_T. L'équation dynamique donnant le taux d'occupation du défaut en considérant une interaction dominante avec les porteurs majoritaires, s'écrit :

$$\frac{\partial f_{T}}{\partial t} = c_{p} p (1 - f_{T}) - e_{p} f_{T}$$
(3.69)

où $f_T = n_T / N_T$ exprime le rapport du nombre de porteurs majoritaires piégés sur le nombre de places disponibles. A la fin de l'impulsion de remplissage, la solution est $f_T = 1$. Au cours de l'émission, la solution est approximée par [29]

$$f_{T}(E_{T},t) = \exp[-e_{p}(E_{T}).t]$$
 (3.70)

La variation de charge à l'interface s'écrit alors comme suit :

$$\Delta Q_{it} = e N_T f_T (E_T, t)$$
(3.71)

La variation de capacité $\Delta C(t)$ est reliée aux variations de charge par l'intermédiaire de la capacité du semiconducteur. A partir de l'équation (1.27) : $C = C_{ox}C_{sc}/(C_{ox} + C_{sc})$ et de (1.33) $C_{sc} = \varepsilon_s/W$ on obtient

$$\Delta C(t) = -\frac{c^2}{\varepsilon_s} \Delta W(t) \qquad (3.72)$$

Cette variation s'observe avec une tension ${\rm V}_{\rm g}$ constante, donc en différenciant

$$V_{g} = \psi_{s} + \frac{Q_{sc} + Q_{it}}{C_{ox}}$$
 (3.73)

on obtient

$$0 = \Delta \psi_{s}(t) + \frac{1}{C_{ox}} (eN_{A} \Delta W(t) + eN_{T} f_{T} (E_{T}, t))$$
(3.74)

En déplétion, on connaît la relation liant W et ψ_s (éq. 1.32), donc (3.74) se met sous la forme

$$eN_{A} \left[\frac{1}{C_{sc}} + \frac{1}{C_{ox}} \right] \Delta W(t) = - \frac{eN_{T} f_{T} (E_{T}, t)}{C_{ox}}$$
(3.75)

En reportant $\Delta W(t)$ obtenu ci-dessus dans l'expression de $\Delta C(t)$, on obtient

$$\Delta C(t) = \frac{C^3}{\varepsilon_s C_{ox} N_A} N_T f_T (E_T, t)$$
(3.76)

Pour un continuum d'états, on a maintenant à intégrer sur l'ensemble du continuum

$$\Delta C(t) = A \int_{e_v}^{E_c} N_{it}(E) f(E,t) dE \qquad (3.77.a)$$

où
A =
$$\frac{c^3}{\varepsilon_s c_{ox} N_A}$$

La technique DLTS consiste alors à analyser ce transitoire capacitif avec des méthodes usuelles en traitement de signal.

4.2 Analyse du transitoire par DLTS

Nous rappelons, en premier lieu, que la DLTS est essentiellement une opération de filtrage. On fixe une fenêtre telle que la réponse en sortie du filtre soit maximale lorsque le taux d'émission $e_p(T)$ tombe dans cette fenêtre e_{po} et, idéalement, nulle partout ailleurs. La figure 3.34 illustre un filtrage par double échantillonnage [9] (Box-car) pour un niveau unique dont la variation de capacité est de la forme $\Delta C(t) = \Delta C_o$ exp (- e_p (T).t) (éq. 3.76)

Il y a donc une relation bi-univoque entre le choix de la fenêtre e_{po} et la température T_o où la réponse est maximale. A partir d'une famille de points { e_{poi} , T_{oi} } on construit la



Figure 3.34 : Filtrage par double échantillonnage

84

(3.77.Ъ)

signature du défaut en inversant l'équation (3.2)

Ln
$$\left(\frac{T^2}{e_p}\right) = \frac{E_T - E_v}{kT} - Ln (\sigma_p \gamma_p)$$
 (3.78)

En fonction de T⁻¹, cette droite donne l'énergie d'activation (par la pente) et la section de capture (ordonnée à l'origine). Les constantes γ sont caractéristiques du silicium : γ_p = 1,91 10²¹ cm⁻² s⁻¹ K⁻² (et γ_n = 6.33 10²¹ cm⁻² s⁻¹ K⁻² pour les électrons).

Pour un continuum, la situation est plus compliquée. A toute température, il existe un piège qui émet dans la fenêtre d'émission e_{po}. Le spectre DLTS ne présentera plus des pics distincts, mais également un continuum (figure 3.35)



Figure 3.35 : Spectres typiques - états discrets - continuum d'états

Pour se sortir de cette situation, il faut étudier l'évolution du taux d'occupation f(E,t) des états du continuum, en fonction du temps et à différentes températures.

4.2.1 Evolution du taux d'occupation, fenêtre d'énergie

On comprend facilement le principe de la DLTS appliquée à un

continuum d'états à partir de la figure 3.36. En (a) on a représenté le taux d'occupation f(E,t) à 77 et 250°K et à 3 instants différents (l'origine des temps est prise à la fin de l'impulsion de remplissage). Ce taux d'occupation ressemble à une fonction de Fermi avec un "niveau de Fermi" qui évolue au cours du dépiégeage vers le milieu de la bande interdite. Il est évident à partir de l'équation (3.2) que les pièges situés près du bord de bande émettent plus vite que ceux situés à une énergie plus profonde.

Avec la technique "Box-car", la réponse au filtre DLTS est

$$R(T) = \Delta C(t_1) - \Delta C(t_2) = A \int_{E_v}^{E_c} N_{it}(E) \{f(E,t_1) - f(E,t_2)\} dE$$
(2.70)







Le changement d'état d'occupation dans l'intervalle (t_1, t_2) définit une fenêtre en énergie E_W (figure 3.36.b). Cette énergie qui est l'énergie du maximum de la fonction $F(E, t_1, t_2) = f(E, t_1)$ $f(E, t_2)$, correspond à un taux d'occupation de 0,5 à l'instant t_1 . Pour chaque température, on connaît la fraction du continuum qui contribue à la réponse du filtre. On accède donc à une analyse spectroscopique de la densité d'états d'interface. On a [29,30]

$$E_{w} - E_{v} = kT \ln \frac{\sigma V N}{e_{po}}$$
(3.80.a)

où e_{no} est la fenêtre propre du filtre "Box car" [9]

$$e_{po} = \frac{Ln t_2/t_1}{t_2 - t_1}$$
 (3.80.b)

et dans la limite où N_{it}(E) varie lentement sur la largeur de la fenêtre d'énergie, la réponse s'écrit

$$R(T) = AN_{;+} (E_{,}) \int f(E,t_1) - f(E,t_2) dE \qquad (3.81.a)$$

donnant après intégration

$$R(T) = A N_{it} (E_{u}) kT Ln t_2/t_1$$
 (3.81.b)

Le spectre DLTS est donc directement une image de la densité d'états d'interface, l'extraction de la valeur N_{it} est immédiate.

Trois remarques s'imposent :

- i) L'ensemble des résultats précédents a été obtenu en supposant une section de capture constante
- ii) La fenêtre d'énergie $F(E,t_1,t_2)$ ne dépend ni du choix de t_1 , ni du paramètre $\sigma_p V_p N_v$. Elle est fonction du rapport t_2/t_1 .
- iii) Pour $t_2 = 2t_1$ (pratique courante), le maximum de $F(E,t_1,t_2)$ est à 0,25 quelque soit la température. De même la résolution en énergie (largeur à mi-hauteur) est de 2,4-2,5 kT sur toute la gamme de température.

4.2.2 Filtrage par détection synchrone_double phase

Nous n'avons pas utilisé la technique "Box car" présentée ci-dessus, mais un filtrage par détection synchrone double phase [31] qui présente une bien meilleure immunité aux bruits tout en conservant une bonne sélectivité (contrairement à l'emploi d'une détection simple phase qui dégrade la sélectivité). La technique double phase représente donc un bon compromis (bonne sensibilité et bonne sélectivité) entre les techniques "Box car" et "détection simple phase".

La différence entre les composantes en phase et en quadrature du signal transitoire, disponibles en sortie d'une détection synchrone double phase, nous donne le filtre représenté à la figure 3.37. La réponse DLTS est alors la convolution du transitoire $\Delta C(t)$ avec la fonction de filtrage F(t).

$$R(T) = A \int_{0}^{T_{m}} F(t) \int_{0}^{E_{c}} N_{it}(E)f(E,t)dE.dt \qquad (3.82)$$

où F(t) est la fonction de filtrage, T_m la période des impulsions de remplissage.



Figure 3.37 : Filtrage par double détection synchrone.

Le calcul complet (annexe VII) donne finalement

$$R(T) = AN_{it} (E_W) kT 0,432$$
 (3.83)

La fenêtre d'énergie E_W est toujours définit par

$$E_{w} - E_{v} = kT \ln \frac{\sigma V N_{v}}{e_{po}}$$
(3.84.a)

mais la fenêtre de constante de temps est maintenant [31]

$$e_{po} = 1,72 f_m$$
 (3.84.b)

où f_m est la fréquence de répétition des impulsions de remplissage.

La sensibilité est légèrement inférieure à celle obtenue en "Box car", la sélectivité est pratiquement identique : 2,55 kT à toutes températures (voir annexe VII).

4.3 Limitations et validité de la DLTS

La simplicité de la DLTS ne doit pas cacher les limites et les problèmes importants inhérents à cette technique.

4.3.1 Balayage en température

Les limites du balayage en température vont fixer la gamme énergétique accessible.

La constante de temps d'observation est de l'ordre de la période T_m des pulses de remplissage (typiquement 0,1 à lms). Le phénomène observé (i.e. le transitoire de capacité) à l'aide de cet outil, est limité à basse température, par le temps de formation de la zone de déplétion (v lµs à 40K) [32]; à haute température, par la génération des porteurs minoritaires (v l ms à 300°K).

De plus, la résistance série associée au substrat devient importante à basse température à cause du gel des porteurs majoritaires sur les impuretés dopantes. Cette résistance a comme conséquence de déformer le spectre DLTS, allant jusqu'à inverser le sens du transitoire de capacité [33]. En conséquence, on a normalement accès à une plage de 40 à 250K.

4.3.2 <u>Validité de la densité mesurée et du positionne-</u> ment en énergie

La limite supérieure pour les mesures de densités d'états est fixée par le développement au ler ordre sur lequel repose l'obtention de la relation (3.76) liant le transitoire de capacité à la densité d'états d'interface (en pratique $N_{it} < 10^{12}$ cm⁻² eV⁻¹).

De même, en cas d'émission par effet tunnel (contribution éventuelle de pièges dans l'oxyde, près de l'interface) le taux d'émission $e_p(T)$ est très différent de la relation de Schokley-Read (éq. 3.2) [34], et le calcul de l'intégrale (3.82) doit être redéfini. Dans ce cas l'application de la formule (3.83) aboutit à des valeurs erronnées pour N_{it} [14] (voir chapitre IV).

La limite inférieure est fixée par l'appareillage décrit dans l'annexe VIII. On l'estime à quelques 10^8 cm⁻² eV⁻¹.

Notons également que N_{it} doit varier lentement sur une zone de 2,5 kT correspondant à la résolution énergétique de la DLTS. On considère, de même qu'en G(ω), un dopage constant; une erreur sur le terme A (eq. 3.77) intervenant, dans le cas contraire, pour déterminer N_{it} .

Pour déterminer la position en énergie du piège, le calcul de la fenêtre d'énergie E_W (éq. 3.84) repose également sur l'équation de Schokley-Read. On doit donc faire la même limitation en cas d'émission non purement thermique (émission assistée par effet tunnel ou par effet Frenkel-Poole dû à la présence d'un champ électrique important). De plus, elle impose à priori de connaître la section de capture et sa dépendance en énergie et en température. Cela pose le problème de la mesure des sections de capture en DLTS.

4.3.3 Mesure des sections de capture

L'emploi d'une courbe d'Arrhenius, comme pour les défauts de volume (éq. 3.78), est quasiment impossible pour les états d'interface car on ne peut pas repérer avec précision, un niveau piège particulier sur un spectre large, ni suivre le décalage du spectre qui résulte du changement de la fenêtre d'émission e_{po}.

D'autres méthodes ont donc été proposées [35,36,37]. Leur principe consiste à déterminer séparément la position en énergie et la mesure de section de capture. Pour cette dernière, on recherche à faire émettre une très faible fraction du continuum (par une faible impulsion de remplissage [35] ou par l'emploi d'une technique à deux impulsions d'amplitude légèrement différente [36]) qui est alors traitée comme un état discret (courbe d'Arrhenius). La position en énergie est déterminée par la valeur du potentiel de surface correspondant à la polarisation au repos. Cette mesure de l'énergie peut aussi s'appliquer à une technique DLTS plus classique [37].

L'inconvénient majeur de ces techniques est de réintroduire ces fluctuations du potentiel de surface. De plus elles peuvent être invalidées par une éventuelle dépendance de la section de capture avec la température.

Faute de mieux, on prendra donc σ constant sur toute la bande interdite et de l'ordre de 10⁻¹⁵ cm², ce qui représente une valeur moyenne issue des données connues à ce jour. La variation de σ d'un facteur 10 induit un changement des énergies dans un rapport 1,1 à prendre éventuellement en compte lors de mesures comparatives entre différentes méthodes de caractérisation.

4.3.4 Influence des fluctuations de potentiel

Au premier ordre, la DLTS est insensible aux fluctuations du potentiel de surface (figure 3.38) puisque le processus



Figure 3.37 : Influence des fluctuations de potentiel de surface (vue de plan).

d'émission n'est pas relié au niveau de Fermi en surface. Au

deuxième ordre, ces fluctuations induisant des fluctuations du champ électrique, celles-ci peuvent éventuellement entrainer un brouillage des énergies si l'effet d'abaissement de l'énergie d'ionisation est non négligeable. De plus, la relation entre le transitoire capacitif et la densité d'états d'interface peut être modifiée par l'existence de fluctuations du potentiel de surface [14].

4.4 Conclusion

Cette présentation de la DLTS permet d'énoncer quelques avantages attendus par rapport à la méthode $G(\omega)$.

Le premier avantage en faveur de la DLTS est d'être une technique directe, donnant une image de la densité d'états d'interface sans avoir recours à une modélisation électrique complexe des phénomènes physiques.

Le deuxième est d'être insensible, au premier ordre, aux fluctuations du potentiel de surface, ce qui permet une analyse spectroscopique plus fine qu'en $G(\omega)$.

La DLTS, outre sa mise en oeuvre simple et rapide, permet un choix indépendant des paramètres de mesure (polarisation, constante de temps du système d'analyse du transitoire, température), ce qui en fait un outil important pour l'étude des phénomènes physiques liés aux défauts (effet de champ électrique, effet tunnel...). Toutefois, une amélioration importante reste à faire pour mesurer précisément les sections de capture ce qui serait d'un intérêt primordial pour l'aspect fondamental de la physique des états d'interface.

5. - CONCLUSION

Nous disposons de deux techniques de caractérisation d'états localisés à l'interface Si-SiO₂. Les résultats expérimentaux que nous présenterons auront entre autres but, celui de comparer ces deux techniques (chapitre IV). Les chapitres suivants (chapitres V,VI) présentent des résultats strictement limités à l'interface (influence d'états d'oxyde par effet tunnel, aggrégats métalliques à l'interface). Le chapitre VII présente un modèle de génération de la zone d'inversion par les états d'interface qui explique particulièrement bien certains des résultats expérimentaux obtenus.

92

CHAPITRE IV

COMPARAISON DES METHODES EXPERIMENTALES DE CARACTERISATION

1. - INTRODUCTION

Nous commençons par une présentation des échantillons du point de vue de leurs caractéristiques technologiques et des paramètres issus de mesures C(V) haute fréquence. Tous les résultats expérimentaux présentés par la suite, ont été obtenus à partir de ces échantillons.

La comparaison des méthodes $G(\omega)$ et DLTS est faite sur les mêmes échantillons de type p et n. On va voir que les mesures $G(\omega)$ mettent en évidence un comportement hors équilibre pour les deux types de substrat. Ceci induit un artéfact au niveau des mesures de section de capture. Les faibles fluctuations du potentiel de surface, observées sur les échantillons de type p, supposent fortement l'existence d'amas de charges à l'interface.

Les résultats DLTS sont en bon accord avec la littérature. On retrouve, en particulier, sur les échantillons p, la présence d'un faible pic situé à 0,29 eV au dessus de la bande de valence qui semble intrinsèque à l'interface et qui pourrait être lié à l'existence de liaisons pendantes.

On finit par une discussion des avantages et des inconvénients d'une méthode par rapport à l'autre.

2. - PRESENTATION DES ECHANTILLONS ET CARACTERISATION RAPIDE

Nous disposons de trois séries d'échantillons, issues de filières technologiques différentes.

- une série (LV1, Louvain-la-Neuve) de type p avec une grille en polysilicium (dopé n) et un contact direct de l'aluminium sur le polysilicium
- une série (CN1, C.N.E.T. Grenoble) de type n avec une grille en aluminiumm
- une série (IB1, IBM Corbeil) de type p avec grille en aluminium.

Le Tableau IV.1 regroupe les principales caractéristiques technologiques de chaque série.

	LV1	CN1	IB1
Substrat	P, <100>, FZ	N, <100>	P, <100>
Dopage	Bore : 10^{15} cm^{-3}	Phosphore : 5 10 ¹⁴ cm ⁻³	Bore : 1 10 ¹⁵ cm ⁻³
Oxydation (MOS)	0 ₂ sec+C ₃₃ 950°C,90' Recuit N ₂ 20' Degazage oxyde N ₂ 15' d _{ox} = 535 Å	0 ₂ humide 950°C 20' Recuit 950°C 2h d _{ox} = 1200 Å	$\begin{array}{l} U_{2} & \sec 1000^{\circ} C 20' \\ 0_{2} & \text{humide} & 90' \\ 0_{2} & \sec & 30' \\ N_{2} & 50' \\ d_{\text{ox}} &= 5500 \text{ Å} \end{array}$
Oxyde de champ (3500 Å)	0 ₂ sec/H ₂ 0/0 ₂ sec 1000°C, 20' Recuit N ₂ 10'		
Face arrière	Implantation Phosphore	Implantation Phosphore	GaIn
Surface	1,166 10^{-2} cm ²	7,8 10^{-3} cm ²	$1,824 \ 10^{-2} \ \mathrm{cm}^2$

Tableau IV.1 : Caractéristique des échantillons

Avant toute autre mesure, les capacités MOS sont caractérisées par des mesures C(V) haute fréquence. Le tableau IV.2 résume les résultats pour les cinq échantillons utilisés et la figure 4.1 donne les caractéristiques C(V) et $\psi_s(V)$ pour l'un d'entre eux (CN1.5). La dispersion des valeurs entre les échantillons d'une même série ne dépasse pas 20%.

	N _A ou N _D	d ox X	C ox	V _{FB} V	R _S Ω
	Cm	A	pr	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
LV1.1	1,03 10 ¹⁵	588	684,5	-1,24	28,7
LV1.3	1,06 10 ¹⁵	577	697,5	-1,2	30,7 Ω
Données de technologie	10 ¹⁵	535	_	_	_
CN1.2	6,8 10 ¹⁴	1343	200,5	-0,15	8
CN1.3	8,64 10 ¹⁴	1210	222,5	-0,11	0,53
CN1.5	5,29 10 ¹⁴	1332	202,1	-0,17	0,76
Données de technologie	5.10 ¹⁴	1200	_	_	_
IB1.1	7.10 ¹⁴	5420	116	-2,6	_
Données de technologie	10 ¹⁵	5500	-	-	-

Tableau IV.2 : Caractéristiques des échantillons obtenues par C(V) haute fréquence.







3. - RESULTATS OBTENUS PAR $G(\omega)$.

Trois techniques différentes (Terman, $G(\omega)$ et DLTS) sont utilisées pour la caractérisation de l'interface sur la capacité LV1.1. La méthode TERMAN n'est inclue qu'à titre de "curiosité" puisque obtenue directement à partir du C(V) haute fréquence. Son imprécison est bien connue [1,2].

3.1 Echantillon de type p : LV1.1

Les mesures sont effectuées de 50 Hz à 100 kHz. Les courbes $C_m(V_g)$ et $G_m(V_g)$ sont données à la figure 4.2. La correction de la résistance série non négligeable (28,7 Ω) est prise en compte dans ces résultats. Afin d'illustrer l'influence de cette résistance (voir Chap. III, § 3.3) nous donnons à la figure 4.3 les courbes à 100 kHz avec et sans correction. Les courbes G_{p}/ω en fonction de ω qui vont permettre d'extraire les paramètres N_{it} , σ_p , σ_s sont obtenues pour différents potentiels de surface (en régime de déplétion et de faible inversion) par la méthode décrite au chap. III § 3.3.3. Elles sont présentées à la figure 4.4. Notons que la courbe en trait plein ne représente pas un ajustement de l'expression théorique (3.50) mais simplement une interpolation à partir des points expérimentaux (par des fonctions dites "spline"). Le comportement diffère notablement des résultats attendus à la suite de l'étude théorique (chap. III § 3.1.3 fig. 3.18). Deux aspects sont marquants :

- i) le faible décalage en fréquence du maximum des courbes
- ii) la décroissance importante de ce maximum avec la polarisation même en faible inversion. De plus, on n'observe pas un comportement de type constante de temps unique. Ces résultats seront discutés au § 3.3.

L'extraction des paramètres caractéristiques par la méthode graphique (chap. III, chap. 3.3.3) donne les résultats rassemblés dans le tableau IV.3.





Figure 4.2 : Mesures $G(\omega)$ de 50 Hz à 100 kHz : LV1.1 a) courbes $C_m(V_g)$ b) courbes $G_m(V_g)$



Figure 4.3 : Influence de la résistance série R_s sur les mesures hautes fréquences.



Figure 4.4 : Conductance parallèle équivalente.



déplétion

Faible inversion

ψ	s mV)	E-E (e (éq. 3.62)	V) ^N it (cm ⁻² eV ⁻¹)	σ _p (cm ²)	σ _s (kT/e)	f _{max} (Hz)	(wt) max	τ _p (s)
10	6	0,247	1,97 10 ⁺¹¹	1,43 10 ⁻¹⁹	0,52	600,9	2,08	$5,5 10^{-4}$
	47	0,288	8,93 10 ¹⁰	8,55 10 ⁻¹⁷	0,25	660,7	1,98	$4,77 10^{-4}$
	97	0,338	5,78 10 ¹⁰	5,04 10 ⁻¹⁸	0,6	562,3	2,11	$5,97 10^{-4}$
	67	0,408	4,36 10 ¹⁰	5,4 10 ⁻¹⁷	0,88	380,2	2,19	$9,17 10^{-4}$
	68	0,509	2,8 10 ¹⁰	3,57 10 ⁻¹⁵	0,6	426,6	2,11	$7,87 10^{-4}$
3	89	0,63	2,2 10 ¹⁰	3,16 10 ⁻¹³	0,72	302	2,14	1,13 10 ⁻³
	19	0,757	1,79 10 ¹⁰	5,1 10 ⁻¹¹	0,9	275,4	2,19	1,267 10 ⁻³

Tableau IV.3 : Concentration N_{it} et caractéristiques des états d'interface. Echantillon p : LV1.1

Suite aux remarques précédentes, nous avons utilisé la méthode graphique (normalement valable en déplétion) en faible inversion au lieu du modèle à constante de temps unique.

Les fluctuations de potentiel de surface sont faibles $(\langle kT/e \rangle)$ et sans corrélation avec la position énergétique (figure 4.5).

La dépendance en énergie de la section de capture est donnée à la figure 4.6. On n'observe pas de plateau (voir figure 3.20), ce résultat inhabituel sera discuté au § 3.3

La courbe de densité d'états N_{it} est donnée plus loin (figure 4.10).

Enfin, de façon à illustrer la sensibilité de la méthode $G(\omega)$ aux pièges de volume près du milieu de bande interdite (annexe VI), nous donnons figure 4.7 la courbe de conductance mesurée à basse fréquence pour l'échantillon LV1.1 où cet effet est le plus sensible (figure 4.7). L'explication de cette courbe est donnée à l'annexe VI.







Figure 4.6 : Distribution en énergie de la section de capture.

101



Figure 4.7 : Influence des pièges de volume sur la conductance.

Le même type de résultat a été obtenu par CONTI et al. [4] qui ont montrés la possibilité de caractériser ces défauts de volume (énergie d'activation, section de capture) par $G(\omega)$.

3.2 Echantillon de type n : CN1.2

Nous n'avons obtenu des mesures valables que sur une gamme restreinte de fréquences(500 Hz à 5 kHz). En déplétion, le maximum de la courbe G_p/ω tombe dans cette fenêtre (figure 4.8); mais il en sort en faible inversion; nous n'aurons donc pas de résultat dans la région correspondante de la bande interdite. Le tableau ci-après donne les caractéristiques des états d'interface.

ψ _s	E _c -E	Nit	σ_{n} (cm ²)	σ <mark>*</mark>	f _{max}	(ωτ)	. [⊤] n
(mV)	(eV)	(cm ⁻² eV ⁻¹)		(kT/e)	(kHz)	max	(s)
-11 -48 -96 -156 -224	0,267 0,304 0,352 0,412 0,480	$\begin{array}{r} 6,06 \ 10^{10} \\ 3,28 \ 10^{10} \\ 2 \ 10 \ 10 \\ 2,34 \ 10^{10} \\ 1,85 \ 10^{10} \end{array}$	$8,12 \ 10^{-19} \\ 3,57 \ 10^{-18} \\ 2,67 \ 10^{-17} \\ 2,85 \ 15^{16} \\ 3,98 \ 10^{-15} $	0,66 0,96 0,96 2,68 2,44	2,4 2,51 2,75 3,02 2,75	2,125 2,215 2,215 2,51 2,485	$1,47 10^{-4}$ $1,4 10^{-4}$ $1,28 10^{-4}$ $1,32 10^{-4}$ $1,44 10^{-4}$

Tableau IV.4 : Caractéristiques des états d'interface Echantillon n : CN1.2

* σ_s est obtenu par extrapolation des courbes Gp/ ω (ω) au delà de 5 kHz. Ce sont donc des valeurs très approximatives qui sont données dans le tableau.

Pour les sections de capture, nous avons le même type de comportement que pour l'échantillon p (LV1.1), c'est-à-dire une croissance exponentielle avec la valeur de l'énergie référencée aux bords de bande (figure 4.9). Ce résultat est bien sûr lié au comportement particulier, déjà remarqué pour LV1.1, des courbes G_p/ω .

La distribution des états d'interface est donnée sur la figure 4.10.

3.3 Discussion des résultats par $G(\omega)$.

Trois points sont abordés :

i) la discussion des faibles valeurs de σ_s qui suggèrent l'existence d'amas de charges à l'interface Si-SiO₂

ii) le comportement des courbes G_p/ω que l'on peut expliquer par un ancrage (pinning) de la fonction d'occupation des défauts, caractéristique d'un comportement hors équilibre









Figure 4.9 : Comportement des sections de capture des porteurs majoriaires en fonction de l'énergie.

	—–– – nos résultats	1252
ο	d'après SINGH et SIMMONS [5]	Lung
Δ	d'après AGARWAL et al. [6]	
	résultat classique (d'après DEULING et al	
	[7]).	



Figure 4.10 : Densité d'états d'interface par $G(\omega)$ pour LV1.1 et CN1.2.

iii) la dépendance des sections de capture avec l'énergie qui résulte du comportement précédent.

3.3.1 <u>Fluctuations du potentiel de surface, présence</u> d'amas de charges ?

Le modèle aléatoire de BREWS (voir chap. III § 3.2.3) conduit à une expression de σ_s qui fait apparaître, par le paramètre λ , la longueur caractéristique de la variation spatiale du potentiel de surface et donc des charges à l'interface Si-SiO₂ (éq. 3.53). Nous la rappelons ci-dessous

$$\sigma_{s}^{2} = \beta^{2} \frac{e\bar{Q}}{4\pi(\varepsilon_{s}+\varepsilon_{ox})^{2}} \operatorname{Ln} \left\{ 1 + \left(\frac{C_{\lambda}}{C_{ox}+C_{it}+C_{sc}} \right)^{2} \right\}$$
(4.1)

avec

$$C_{\lambda} = \frac{\varepsilon_{s} + \varepsilon_{ox}}{\lambda} \quad \text{et} \quad \bar{Q} = \bar{Q}_{f} + \bar{Q}_{it} + \bar{Q}_{m}$$
(4.2)

On obtient facilement la valeur moyenne $\bar{Q}_{\mbox{f}}$ par la tension de bandes plates $V_{\mbox{FB}}$

$$V_{FB} = \phi_{MS} - \frac{\bar{Q}}{C_{ox}}$$
(4.3)

dans la mesure où les charges mobiles (Q_m) et d'interface (Q_{it}) sont faibles devant les charges fixes d'oxyde (Q_f) . On peut alors calculer la valeur de λ qui ajuste l'expression théorique (4.1) sur les valeurs expérimentales. En déplétion (pour calculer facilement C_{sc}) on obtient pour LV1.1 les résultats du tableau IV.5 (Nous n'avons pas fait la même analyse pour CN1.2 en raison du manque évident de fiabilité sur les valeurs de σ_s).

LV 1.	l V _{FB}	= - 1,24 V	$\nabla \phi_{MS}^{\star} = -0,826 \ \nabla \overline{Q}_{f} = 2,43 \ 10^{-8} \text{Cb/cm}^{2}$				
Ψs	σ s	λ	$\lambda_{\texttt{lim}}$	Q _{it}			
(mV)	(kT/e)	(Å)	(Å)	(Cb/cm ²)	Qit ^{<< Q} f		
6	0,52	668	924	3,46 10 ⁻⁸	non		
47	0,25	4572	2428	1,57 10 ⁻⁸			
97	0,6	1998	3532	1,10 ⁻⁸			
167	0,88	1042	4620	7,67 10 ⁻⁹	oui		
268	0,6	3438	6080	4,93 10 ⁻⁹			
 D'après les valeurs expérimentales de HICKMOTT [8] pour un poly-n dopé Phosphore. Valeur théorique pour 10²⁰ cm⁻³: 0,881V. La valeur est influencée par la densité de charges à l'interface poly-Si/Si0₂. 							

Tableau IV.5 : Longueur caractéristique de la variation spatiale des charges d'interface Si-SiO₂.

Y figurent également : i) la longueur caractéristique limite λ_{1im} au delà de laquelle le modèle discrétisé peut s'appliquer (i.e. pour les grandes longueurs caractéristiques). Cette limite est donnée par l'équation (3.55); ii) la limite de validité pour la détermination de \bar{Q}_f à partir de la tension V_{FB} . Pour les faibles potentiels de surface, le non respect est dû à l'augmentation artificielle de la densité d'étatsprès des bords de bande (voir chap. III § I) inhérente aux techniques C(V). De manière plus globale, l'expression (4.1) montre que σ_s dépend de l'énergie par l'intermédiaire de Q_{it} (également par C_{sc} , mais son influence est tempérée par le logarithme). On observe donc que σ_s est relativement indépendant de l'énergie pour des densités N_{it} faibles (< 10¹¹ cm⁻² eV⁻¹ (figure 4.5) et fortement dépendant dans le cas contraire [9]. En conséquence, nous ne considèrerons que les trois dernières lignes du tableau IV.5.

On constate alors que le modèle aléatoire s'impose puisque λ est toujours inférieur à la limite entre les deux modèles. Cela justifie à posteriori l'emploi du schéma équivalent de la figure 3.21.b pour interpréter les mesures.

La deuxième constatation concerne la valeur élevée obtenue ici, comparée à l'estimation courante $\lambda \geq 75$ Å faite à partir d'autres travaux [10,11]. Pour obtenir cette dernière valeur, les auteurs font l'hypothèse d'une compensation pour ajuster l'amplitude de σ_s . En plus des charges fixes d'oxyde normalement positives ils introduisent une densité de charges fixes négatives. L'ajustement de λ devient donc dépendant de la valeur retenue pour cette densité de compensation. En fait cette valeur reste faible [10] et dans notre cas son absence ne peut expliquer la différence importante que nous obtenons pour λ .

Par contre, une valeur élevée de λ suggère fortement la présence d'amas de charges à l'interface ainsi que l'illustre qualitativement la figure 4.11. Cette interprétation n'est pas une preuve directe de l'existence d'amas de charges mais d'autres résultats expérimentaux [12,13,14] (par photoémission et mesures de claquage d'oxyde notamment) obtenus aussi bien sur des échantillons contaminés au sodium [12] que sur des échantillons plus proches des nôtres (faible dopage 7 10^{14} cm⁻³, sans contamination intentionnelle) [13] ne s'expliquent qu'en émettant la même hypothèse.

Cette interprétation plausible reste donc à confirmer, en particulier, un modèle précis doit être élaboré pour expliquer l'existence de tels centres de nucléation.

3.3.2 Comportement des courbes G_p/ω et conséquences sur les valeurs des sections de capture.

Le faible décalage en fréquence et l'atténuation de l'amplitude des courbes G_p/ω (figure 4.4 et 4.8) avec l'augmentation (en valeur absolue) du potentiel de surface ont été récemment attribués par AGARWAL [6] à un ancrage de la fonction d'occupation des défauts sur un niveau proche du milieu de bande interdite. Ce phénomène d'ancrage apparaît quand la structure MOS est hors équilibre. AGARWAL crée ce déséquilibre en attirant les porteurs minoritaires par une diffusion de type source (ou drain) judicieusement polarisée, en utilisant la structure d'un demi-transistor MOS. Cette structure élimine le



Figure 4.11 : Longueur d'onde des variations spatiales du potentiel de surface

- a) distribution aléatoire de charges ponctuelles
- b) distribution d'amas de charges.

processus de capture des porteurs minoritaires et permet la domination près du milieu du gap des processus d'émission. Cet effet conduit à un ancrage de la fonction d'occupation près du milieu du gap alors, qu'en équilibre, elle suit la distribution de Fermi-Dirac. L'annexe IX donne une explication détaillée de ce phénomène.

Dans ce cas, il est clair que la dépendance énergétique des sections de capture (figure 4.9) est un artefact dû à la faible variation en fréquence du maximum de G_p/ω . L'emploi de l'équation (3.65), non valable hors équilibre, impose une valeur pratiquement constante pour les temps de réponse τ_n et τ_p (voir tableaux IV.3 et IV.4). Ils sont reliés aux sections de capture par

$$\tau_{p,n} = \frac{1}{\sigma_{p,n} V_{p,n} N_{A,D}} \exp \frac{|\psi_s|}{kT}$$
(4.4)

(équation 3.27) ce qui implique une croissance exponentielle avec le potentiel de surface pour les valeurs apparentes des sections de capture.

Pour nos mesures, avec une simple structure MOS, plusieurs contradictions apparaissent. AGARWAL observe ce comportement uniquement en bandes plates et en faible inversion [6]. Il faudrait que nous le justifions également en déplétion. D'autres auteurs (SINGH et SIMMONS [5]) ont obtenu un résultat identique au nôtre (figure 4.9) sur des structures MNOS (Metal-Nitride-Oxyde-Semiconducteur) sans en donner d'explication.

4. - RESULTATS OBTENUS PAR DLTS

4.1 Procédure et résultats

Les expériences DLTS sont réalisées avec la méthode classique (amplitude des impulsions saturant les centres) utilisant une impulsion de remplissage en forte accumulation d'une durée de 100 μ s (chap. III § 4). Nous avons respecté les points suivants :

- la polarisation de base est choisie à la limite entre

faible et forte inversion de façon à minimiser l'influence des porteurs minoritaires au-dessus de 250K. Nous avons vérifié que nous n'introduisons pas de phénomène de "cut-off" (voir annexe X) dans la gamme 100K-250K.

- la descente en température est effectuée sous polarisation nulle afin d'éviter toute possibilité d'instabilité dans l'oxyde.

Les spectres obtenus pour LV1.1 et CN1.2 sont donnés dans les figures 4.11 et 4.12, ainsi que la variation de la capacité d'équilibre avec la température (essentiellement due à la variation de la tension de bandes plates). La limite de validité est 250K, à température plus élevée la génération des porteurs minoritaires devient prédominante. Les densités d'états correspondantes sont représentées sur la figure 4.13 ainsi que les résultats obtenus par les méthodes $G(\omega)$ et Terman.

4.2 Discussion

Nos spectres DLTS sur des échantillons de type p sont similaires aux résultats publiés par JOHNSON et al. [16,17] sur des structures MOS de technologie identique. Nous retrouvons, en particulier, un léger pic dans la distribution d'états autour de $E_v + 0,29 \text{ eV}$ (figure 4.14). Ce pic apparaît de manière dominante sur des échantillons n'ayant pas subi de recuit après oxydation. Des mesures conjointes par DLTS et RPE (sur des échantillons non recuit) suggèrent [19] que le centre P_b (identifié par RPE comme le centre trivalent .Si \equiv Si₃ i.e. un atome de Si lié à trois autres silicium, plus une liaison pendante (voir chap. II § 3.1) soit responsable de ce pic DLTS. En effet les cinétiques de recuit sont semblables et des mesures RPE de dépendance de spin du centre P_b avec la polarisation semblent cohérentes avec les niveaux d'énergie obtenus par DLTS.

Les spectres DLTS sur des échantillons de type n sont également comparables aux résultats obtenus par ailleurs [17,20]. Nous avons tracé le diagramme d'Arrhénius sur le maximum de la distribution d'états pour un échantillon de la même série (CN1.3). La signature obtenue est en accord pour l'énergie (0,245 eV et 0,23 eV par DLTS), elle donne un bon ordre de grandeur pour la section de capture : 3,9 10^{-15} cm².







Figure 4.12 : Spectre DLTS CN1.2.



Figure 4.13 : Densité d'états pour différentes méthodes de caractérisation.



Figure 4.14 : Pic associé aux liaisons pendantes.

5. - COMPARAISON DLTS ET $G(\omega)$.

Dans une fenêtre de \pm 0,25 eV autour du milieu de la bande interdite, la DLTS donne des valeurs de N_{it} quatre fois inférieure à celles en G(ω). Au delà la méthode G(ω) diverge fortement à cause de l'artefact propre aux méthodes C(V) (chap. III § I). En particulier TREDWELL et al. obtiennent cette divergence dans leur emploi particulier de la DLTS lorsqu'ils réintroduisent le potentiel de surface (déterminé par C(V)) dans le calcul de la densité d'états. La densité d'états en G(ω) est faussée par l'influence des fluctuations du potentiel de surface (la valeur σ_s sert de base pour déterminer N_{it}, voir chap. III § 3.3). Entre autre, le pic près du milieu de bande interdite visible en G(ω) sur l'échantillon CN1.2, et absent en DLTS, s'explique par la brusque variation de σ_s (voir tableau IV.4).

L'observation, par DLTS sur LV1.1 du pic à $E_v + 0,29 eV$ (figure 4.14), non visible en $G(\omega)$, met en évidence la meilleure résolution énergétique de cette méthode. Nous l'avons calculée à environ 2,5 kT à l'annexe VII. Elle est évaluée à 0,1 eV (à température ambiante) pour la méthode de C(V) [21] sans tenir compte des fluctuations du potentiel de surface qui vont dégrader cette estimation.

La position en énergie obtenue en $G(\omega)$ et analyse C(V)correspond à une énergie libre $\Delta G[22,23]$. En DLTS, à cause de la variation en température, on mesure une enthalpie libre ΔH [21,22]

$$\Delta H = \Delta G - T.\Delta S \tag{4.5}$$

La fenêtre en énergie (éq. 3.84) s'écrit alors (pour le type n)

$$\Delta H_{w} = kT \ln \left(\sigma_{n}^{\star} v_{n} N_{c} / e_{no}\right)$$
(4.6)

où la section de capture apparente est reliée à la valeur exacte par

$$\sigma_n^* = \sigma_n \exp \frac{\Delta S}{k}$$
(4.7)

Pour le silicium, on peut raisonablement considérer ∆H indépendant de la température au-dessus de 100K [22]. Le facteur d'entropie exp $(\Delta S/k)$ peut être aussi élevé que 50 ce qui, à température ambiante, introduit un écart d'environ 0,1 eV entre ΔG et ΔH . En cas de comparaison des énergies, cet écart sera à prendre en compte en plus de celui qui résulte du choix arbitraire de 10^{-15} cm² comme section de capture en DLTS et de l'imprécision de la détermination du potentiel de surface en $G(\omega)$. Ce facteur d'entropie peut également expliquer en partie la dispersion des mesures de section de capture en $G(\omega)$ et en DLTS dans sa variante E.R.D.L.T.S. (voir chap. III § 4.3.3). N'ayant pas utilisé cette variante nous ne ferons aucune comparaison sur les sections de capture ; cependant, afin de situer l'état actuel du problème nous donnons à l'annexe XI une compilation des principaux résultats de la littérature.

6. - CONCLUSION

L'utilisation de la DLTS pour étudier les défauts d'interface Si-SiO₂ semble donc préférable aux techniques C(V) et G(ω). Nous avons mis en évidence sur nos échantillons des caractéristiques déjà mentionnées par d'autres auteurs (pic de liaisons pendantes à E_v + 0,29 eV). Toutefois, un champ d'investigation important reste ouvert afin de déterminer proprement les sections de capture des états électroniques d'interface. Récemment, PAUTRAT a proposé [24] une mesure des sections de capture par une méthode d'admittance transitoire (G et C) qui essaye de combiner les avantages des techniques DLTS et G(ω). Il serait intéressant d'appliquer cette méthode aux états d'interface.

CHAPITRE V

INFLUENCE DES PIEGES D'OXYDE

PRES DE L'INTERFACE SI-SiO₂

1. - INTRODUCTION

Dans l'emploi classique de la DLTS appliquée aux états d'interface c'est-à-dire en régime de saturation où la largeur et l'amplitude de l'impulsion de remplissage sont telles que tous les pièges d'interface sont remplis, la réponse DLTS doit saturer (voir chap. III § 4.1). Pratiquement, on observe ce phénomène de saturation dès que l'impulsion amène la capacité MOS en accumulation (Nous avons observé ce comportement sur les échantillons de la série LV). En fait, sur la série des échantillons CN nous n'avons pas observé cette saturation. De plus, en faisant varier les autres paramètres de mesure (largeur de l'impulsion, tension de repos, fréquence des impulsions) on observe que les résultats présentent un comportement inhabituel.

De façon à expliquer celui-ci nous avons été conduits à considérer l'influence des pièges d'oxyde très près de l'interface (< 20 Å) qui peuvent échanger des porteurs avec le silicium par effet tunnel.

2. - MISE EN EVIDENCE EXPERIMENTALE

La figure 5.1 donne la densité d'états pour les échantillons CN1.3 et CN1.2 (chap. IV § 4.1). Ces résultats donnent une idée de la dispersion faible entre les échantillons de la série CN. A partir de ces densités, qui seront prises comme référence (voir § 2.1), nous faisons varier les conditions de mesures pour mettre en évidence un effet tunnel à l'interface.

117



Figure 5.1 : Comparaison des densités d'états pour les échantillons CN1.2 et CN1.3.

2.1 Procédure de mesure

Nous définissons dans la figure 5.2, les paramètres de mesure nécessaires pour fixer avec précision les conditions expérimentales.



Figure 5.2 : Paramètres de mesure

118

La réponse DLTS (amplitude du spectre) sera mise sous la forme

$$R(V_{b}, V_{p}, t_{p}, T_{m}) = N_{it} \cdot C^{3}T$$
 (5.1)

identique à (3.83) mais où le terme R inclu maintenant le gain de l'appareillage et le coefficient $k/\epsilon_s C_{ox} N_D S$ (éq. 3.77.b) propre à l'échantillon. Quand nous ferons des comparaisons à C et T constants, le rapport des valeurs de R sera directement celui des densités. Dans le cas contraire le rapport des densités sera explicité.

Le spectre de référence est défini par :

- i) les considérations du § 4.1
- ii) la volonté de comparer nos résultats à d'autres mesures[1] effectuées sur les mêmes échantillons.

Les paramètres de mesure (voir figure 5.1) sont :

$$V_{\rm b} = -1V$$
; $V_{\rm p} = 2,5$ V; $t_{\rm p} = 100 \ \mu {\rm s}$; $T_{\rm m} = 0,1$ s

Le temps de blocage à la sortie de capacimètre est de lms (temps de réponse du capacimètre). Ces conditions sont celles utilisées au chapitre IV pour la comparaison entre les techniques $G(\omega)$ et DLTS.

On ne changera qu'un seul paramètre à la fois de manière à isoler le mieux possible la cause des phénomènes observés.

2.2 Résultats expérimentaux

La figure 5.3 illustre la non saturation du spectre DLTS quand on augmente l'amplitude de l'impulsion en accumulation (V_p) .

La variation de l'amplitude relative $R(V_p)/R(Référence)$ en fonction de V_p à différentes températuresest donnée dans la figure 5.4. Cette même variation est aussi donnée pour d'autres valeurs de la largeur de l'impulsion t_p, de la fréquence T_m^{-1} et de la polarisation de base V_b dans les figures 5.5, 5.6 et 5.7. Dans chaque cas, les paramètres qui restent fixes ont les valeurs



Figure 5.3 : Evolution du spectre DLTS avec l'amplitude de l'impulsion de remplissage (V_n).

de ceux du spectre de référence.

3. - MODELES

Afin d'expliquer ce phénomène de non saturation plusieurs hypothèses peuvent être émises. D'abord, on ne remplit pas totalement la densité d'états pour une amplitude d'impulsion $V_p =$ 2,5 V (ceci est vérifié en comparant la courbure de bande et la position du niveau de Fermi à la surface) mais dès $V_p =$ 4,5 V cette hypothèse n'est plus vérifiée et ce spectre devrait saturer, ce qui n'est pas observé expérimentalement (figure 5.4). De même, l'augmentation de la densité apparente avec la fréquence pourrait éventuellement s'expliquer avec l'augmentation du rapport t_p/T_m [2]. Toutefois cette augmentation est de 27% c'est à dire beaucoup plus importante que sur les abaques de BLOSSE [2] qui donnent la correction correspondante à 2%. De toute façon, aucune de ces deux explications ne justifie l'ensemble des phénomènes observés.



Figure 5.5 : Amplitude relative $R(t_p)/R(ref.)$ du spectre DLTS en fonction de la longueur d'impulsion t_p

Figure 5.6 : Amplitude relative $R(T^{-1})/R(réf.)$ du spectre DLTS en fonction de la fréquence pour l'énergie $E_c - E =$ 0,23 eV

$$V_b = -1V$$
$$V_p = 2,5 V$$
$$t_p = 100 \mu s$$





Figure 5.7 : Amplitude relative $N_{it}(V_b)/N_{it}(réf.)$ pour la densité d'états apparente en fonction de la polarisation au repos (inversion)

$$V_{p} = 2,5 V$$
$$T_{m}^{1} = 10 Hz$$
$$t_{p} = 100 \mu s$$

Nous proposons donc une explication qui prend en compte l'influence de pièges dans l'oxyde très près (< 20 Å) de l'interface. Ces pièges pouvant échanger des porteurs (électrons dans notre cas) avec le silicium par effet tunnel.

3.1 Rappels sur l'effet tunnel

Dans un effet tunnel pur, l'application d'un champ électrique F permet l'émission d'un électron d'un défaut vers la bande de conduction sans changer d'énergie. Le taux d'émisson à travers une barrière triangulaire (figure 5.8) de hauteur E_i et donc ayant une largeur de base égale à E_i/eF (F est supposé constant) s'écrit dans l'approximation W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brilloin)

$$e_t = \alpha \exp \left(-\frac{4}{3} - \frac{\sqrt{2m^*}}{e\hbar} \frac{E_i^{3/2}}{F}\right)$$
 (5.2)

où m^{*} est la masse effective de l'électron dans l'oxyde π la constante de Planck réduite, et α une constante qui dépend aussi bien des conditions d'intégration à l'origine que de la forme exacte du potentiel de liaison de l'électron sur le défaut



Figure 5.8 : Transition par effet tunnel pur.

Un calcul plus complet de KOROL [3] donne une expression

$$e_{t} = \frac{eF}{4\sqrt{2m^{*}E_{i}}} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m^{*}E_{i}^{3/2}}}{3eF}\right)$$
(5.3)

où le facteur préexponentiel qui vaut environ 10^{12} s⁻¹ pour F = $10V/\mu m$ et E_i \sim 3 eV est mieux spécifié.

L'application de ces résultats à l'émission tunnel d'un électron par un piège dans l'oxyde situé à une énergie E_i sous la bande de conduction du SiO₂ et à une distance d de l'interface (figure 5.9) donne alors

 $e_t (E_i, F, d) = \alpha \exp \left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{eE} \times \frac{E_i^{3/2} - (E_i - eEd)^{3/2}}{F}\right)$ (5.4)



Figure 5.9 : Transition tunnel pour un piège d'oxyde à travers une barrière trapézoïdale.

Remarque : Par souci de simplification, on considère uniquement un niveau situé vis-à-vis de la bande de conduction en surface du silicium (échange sans changement d'énergie). On prendra donc $E_i \sim 3,25$ eV dans les applications numériques. Pour la capture, par effet tunnel, on utilise la même formule la situation se présentant de manière symétrique (figure 5.10)



Figure 5.10 : Processus de capture par effet tunnel.

3.2 Influence de l'effet tunnel sur la réponse DLTS

Lors de la phase d'émission, on considère que l'émission des états d'interface et celle des pièges d'oxyde sont indépendants. Le signal de sortie de l'appareillage de DLTS est alors la somme de deux termes

$$R(T) = R_{int} (T) + A \int_{0}^{T_{m}} F(t) N_{ot} \exp(-e_{t}t) dt$$
 (5.5)

 $R_{int}(T)$ est la contribution des états d'interface donnée par l'équation (3.82-3.83) et le deuxième terme exprime la contribution d'un niveau unique dans l'oxyde de concentration N_{ot} . F(t) est la fonction de filtrage DLTS.

Pour une détection synchrone double phase le résultat de l'intégration donne facilement

$$R(T) = R_{int}(T) + 0,131 \text{ A } N_{ot}$$
 (5.6)

On considère pour aboutir à ce résultat que la seule contribution des pièges d'oxyde est telle que le taux d'émission tombe dans la fenêtre e_n^0 du filtrage donc

 $e_t(E_i, F, d) \cdot T_m = 1,72$

L'effet des pièges d'oxyde est donc de rajouter une composante constante (i.e. ne dépendant pas de la température) au spectre DLTS initial.

A fréquence de mesure fixée, si le champ électrique augmente (accumulation ou inversion plus forte), le taux d'émission augmente. Ceci implique que l'on observe des pièges plus éloignés de l'interface, l'augmentation de d entrainant une diminution de e_t afin de maintenir l'égalité $e_t(E_i,d) = e_n^0$. Pour un champ électrique donné, si on diminue T_m c'est-à-dire le temps pendant lequel on observe l'émission, la profondeur d va décroitre puisque $e_t(E_i,d).T_m$ est une constante. On a donc, a priori, la possibilité de faire un profil des défauts dans l'oxyde sur une faible épaisseur à partir de la surface.

Remarques : a) L'équation (5.6) n'attribue pas de dépendance de la contribution des pièges d'oxyde à la température contrairement à ce qui est observé expérimentalement (figures 5.4 à 5.7). Il serait sans doute préférable de tenir compte d'un effet tunnel assisté par phonons (figure 5.11) qui incluerait cet effet de la température.

Toutefois, ce serait au détriment de la simplicité du calcul de la réponse DLTS permettant d'obtenir N_{ot} .



Figure 5.11 : Effet tunnel assisté par phonons.

(5.7)

En effet, dans ce cas le taux d'émission s'écrit [4]

$$e_{t} = e'_{t} \left\{ 1 - \frac{1}{kT} \int_{0}^{E_{i}} exp \left[\frac{E_{i} - n\hbar\omega}{kT} - \frac{2}{3} \left(\frac{E_{i} - n\hbar\omega}{E_{tu}} \right) \right] dE \right\}$$
(5.8)

où e' est le taux d'émission thermique en l'absence de champ et E_{tu} une énergie fonction du champ électrique

$$E_{tu} = \left(\frac{eFF}{2\sqrt{2m^*}}\right)$$
 (5.9)

b) on peut aussi imaginer un processus tunnel plus complexe via les états d'interface [5] (figure 5.12). L'équation (5.5) ne s'applique plus, il faut prendre un taux d'émission équivalent à la mise en parallèle des deux taux de manière similaire au cas de génération par un état localisé dans la bande interdite



Figure 5.12 : Effet tunnel via les états d'interface.

3.3 Résultats

Nous examinons en premier lieu la densité N_{ot} en fonction du champ électrique d'émission F_e (fixé par V_b) et du champ électrique de remplissage F_r (fixé par V_p). A partir des résultats des figures 5.7 et 5.4, on utilise l'équation (5.6) pour obtenir la densité N_{ot} . Nous prenons pour valeur R_{int} , contribution spécifique des états d'interface, les résultats de notre spectre de référence (figure 5.1 et § 2.1 du présent chapitre). Ce choix, bien qu'apparemment arbitraire, résulte des considérations suivantes :

- a) Pour V_p < 2,5 V, la structure MOS n'est pas en accumulation profonde et on ne remplit pas la totalité des états d'interface. Pour V_p > 2,5 V on est en accumulation profonde (à quelque meV près tous le continuum d'états d'interface est rempli) et l'augmentation du spectre est à imputer aux pièges d'oxyde.
- b) Le choix de $V_b = -1V$ résulte du même type de compromis. Pour $V_b > -1 V$, on est en déplétion ou faible inversion et pour $V_b < -1 V$ en inversion profonde où l'effet du champ électrique devient prépondérant lors de l'émission des porteurs.
- c) La durée du remplissage t_p doit être :
 - assez courte pour ne pas remplir les pièges d'oxyde
 - suffisamment grande devant la constante de temps de capture des électrons par les états d'interface (voir chap. III § 4.1).

Le choix de t_p = 100 μ s est un bon compromis.

d) La fréquence de répétition est faible (10 Hz) pour minimiser le rapport t_p/T_m .

Alors le champ électrique est obtenu par la relation

$$F = \frac{|v_g - \psi_s|}{d_{ox}}$$
(5.11)

dans la mesure où ψ_{s} a été déterminé pour toutes tensions et températures.

Les résultats obtenus sont représentés dans les figures 5.13 pour l'émission et 5.14 pour la capture en supposant donc un effet tunnel pur. Dans le cas d'un champ électrique constant où l'on augmente le temps de remplissage t_p on obtient les résultats de la figure 5.15. Ce dernier résultat correspond aux données de la figure 5.5.

Nous n'avons pas exploité la variation du spectre DLTS avec la fréquence (figure 5.6) car elle pose un problème d'interprétation. En effet, vu le sens des variations du taux d'émission tunnel (éq. 5.4) tel que nous le présentons au § 3.2, nous devons conclure à partir des observations des figures 5.6 et 5.13/5.14 que la concentration N_{ot} augmente quand d diminue dans le premier cas (variation avec la fréquence) et l'inverse dans le second (variation avec le champ électrique). Ce dilemme sera discuté au § suivant.


Figure 5.13 : Concentration des pièges d'oxyde en fonction de champ électrique à l'émission.



Figure 5.14 : Concentration des pièges d'oxyde en fonction du champ électrique lors de la capture.



Figure 5.15 : Evolution de la concentration des pièges d'oxyde avec la durée de l'impulsion de remplissage.

4. - DISCUSSION

4.1 Relation entre le champ électrique et la profondeur dans l'oxyde.

La condition $e_t (E_i, F, d)$. $T_m = 1,72$ donne une relation entre le champ électrique appliqué dans l'oxyde et la localisation des défauts d'oxyde qui émettent dans la fenêtre de constante de temps. Pour une augmentation du champ de $10V/\mu m$ à $80V/\mu m$ l'augmentation relative en distance n'est que de $\Delta = 5,5 \ 10^{-3} d_o$, soit 0,055 Å pour une valeur typique $d_o = 10$ Å. Cette variation extrêmement faible conduit à un profil très abrupt. En fait ce résultat est obtenu en prenant une hauteur de barrière $E_i = 3,25$ eV ce qui situe les centres actifs par effet tunnel à hauteur de la bande de conduction du silicium. Δ dépend fortement de la valeur choisie pour E_i , si on considère des niveaux peu profonds de SiO₂ à E \sim 150 meV, on obtient alors une variation $\Delta = 2$ Å pour $d_o = 10$ Å. Les deux types de défaut ont été mis en évidence par de nombreux travaux et pour différentes technologies de croissance d'oxyde [6]. Par exemple, le "piège à 2,4 eV" situé à 2,4 eV sous la bande de conduction du SiO₂ [6], serait probablement lié aux ions Na⁺ en configuration immobile dans le réseau de l'oxyde. Pour les niveaux peu profonds, les mesures du décalage de la tension de bandes plates [7] ou de la caractéristique I-V sous excitation lumineuse [8] après injection de porteurs (par avalanche à partir du substrat ou photoémission interne) ainsi qu'au cours du dépiégeage donne des énergies variant de 20 meV [9] à 300 meV [10].

Dans nos mesures, nous ne sommes pas en régime d'avalanche lors du remplissage des états d'interface et d'oxyde. Il semble donc très peu probable que les pièges peu profonds soient responsables de l'effet tunnel.

4.2 Effet Frenkel-Poole

On pourrait aussi envisager l'hypothèse d'une émission des pièges d'oxyde par effet Frenkel-Poole. Celui-ci augmente le taux d'émission par abaissement de la barrière énergétique (figure 5.16) dû au champ électrique. En fait les résultats ne s'explique pas de façon plus satisfaisante, la profondeur est cette fois-ci trop importante ($\Delta \sim 10 \, d_0$) et les valeurs de densité sont incohérentes entre elles.



Figure 5.16 : Abaissement de la barrière d'énergie par effet Frenkel-Poole et effet tunnel assisté par phonons.

Un mélange, l'effet tunnel assistée en présence d'un effet Frenkel-Poole (figure 5.16) pourrait donner des résultats plus raisonnables mais de nombreux paramètres restent inconnus.

4.3 Cinétique d'émission et de capture des piéges d'oxyde

4.3.1 Influence du champ électrique lors de l'émission.

Nous ferons donc abstraction de la détermination précise de la position des défauts dans l'oxyde. Si on admet alors un positionnement variant assez peu dans la gamme de champ électrique 10-80 V/µm, les variations de la concentration N_{ot} s'explique par des remplissages et vidages partiels des pièges d'oxyde. A l'émission (figure 5.13), on vide complètement les états d'oxyde pour un champ supérieur à environ 24 V/µm. Leur densité est de 8,7 10⁸ cm⁻², mais elle correspond à une densité partielle puisque pour t_p = 100 µs et V_p = 2,5 V (valeurs des autres paramètres utilisés pour les mesures de la figure 5.13) le remplissage n'est pas complet (figures 5.14 et 5.15).

4.3.2 <u>Influence du temps de remplissage.</u> <u>Section de</u> capture tunnel.

On constate (figure 5.15) que l'évolution de la densité des pièges en fonction de la durée d'impulsion suit la cinétique classique de remplissage

$$N_{ot} = N_{ot}^{s} \left[1 - exp \left(-\frac{t_{p}}{T} \right) \right]$$
 (5.12)

Les valeurs N_{ot}^{s} (valeur asymptotique de N_{ot}) et τ (constante de temps de capture) sont obtenues par ajustement de l'équation (5.12) sur les points expérimentaux. Le tableau V.1 regroupe les résultats obtenus. Les cinétiques de capture tendent vers $N_{ot}^{s} \sim 1-1,5 \ 10^{9} \ cm^{-2}$ valeur proche de celle observée précédemment à l'émission (8,7 $10^{8} \ cm^{-2}$).

133

Т (°К)	$\frac{N_{ot}^{S}}{(cm^{-2})}$	τ (µs)	^σ nt (cm ²)
125	1,3 10 ⁹	20,8	3,4 10 ⁻²²
150	6 10 ⁹	47,6	1,4 10 ⁻²²
200	1,26 10 ⁹	17,2	3,2 10 ⁻²²
233,5	1,44 10 ⁹	22,3	2,3 10 ⁻²²

Tableau V.1 : Paramètres de l'évolution de la concentration avec la durée de remplissage.

Remarque : Cette valeur est également une densité partielle puisque la mesure est effectuée lors de l'émission avec $V_b = -1V$ ($F_e \sim 21V/\mu$ m) donc dans une région où l'on ne vide pas complètement les pièges (voir discussion des résultats de la figure 5.13). Une comparaison plus valable doit être obtenue en fixant une valeur F_e supérieure à 25 V/µm (i.e. V_b = - 4V).

On déduit la section de capture par effet tunnel de la constante de temps par la relation classique

$$\tau = (\sigma_{nt} V_n n_s)^{-1}$$
(5.13)

Nous avons pris, pour calculer la vitesse thermique des électrons dans l'oxyde, une masse effective égale à 0,64 m_o [11] et n_s = N_D exp 10 (Structure MOS en accumulation, V_p = 2,5 V). Dans ces conditions on obtient les valeurs du tableau V.1. Cette section de capture est peu dépendante de la température. On peut admettre de façon plausible que les pièges d'oxyde et les pièges d'interface sont de nature assez similaire vu la très faible épaisseur de la couche d'oxyde considérée. La valeur typique de 10 Å déjà mentionnée (§ 4.1) est confirmée par la comparaison de σ_{nt} et de la section de capture pour les états d'interface, moyennant trois approximations.

- i) Dans l'équation (5.4) pour d = 0, on écrit $\alpha = e_n$ taux d'émission sans effet tunnel. En particulier pour un état très proche de la bande de conduction du silicium (i.e. E-E_c \sim 0) $e_n \sim \sigma_n V_n N_c$ soit 5,7 10^{11} s^{-1} pour σ_n = 10^{-15} cm^2 ce qui est en bon accord avec $\alpha = 10^{+12} \text{ s}^{-1}$ déduit du calcul de KOROL [3] (voir § 3.1).
- ii) On considère $e_n = c_n n$
- iii) On prendra la même vitesse thermique dans Si et SiO₂ (i.e. la même masse effective).

Alors il existe une relation analogue à (5.4) pour les sections de capture

$$\sigma_{\rm nt} = \sigma_{\rm n} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^{\star}}}{e\hbar} \times \frac{E_i^{3/2} - (E_i - eFd)^{3/2}}{F}\right)$$
(5.14)

Avec $\sigma_n \simeq 10^{-15}$ cm² et $\sigma_{nt} \simeq 10^{-22}$ cm² et pour $E_i = 3,25$ eV; F = 20V/µm (V_p = 2,5 V), la solution de (5.14) est d = 10,85 Å.

Vu les approximations utilisées cette estimation ne saurait prétendre être une analyse quantitative. Elle permet cependant de fixer un bon ordre de grandeur.

4.3.3 Influence de champ électrique lors de la capture

Pour une largeur d'impulsion fixe, la densité apparente N_{ot} augmente également avec le champ électrique permettant le remplissage des états d'oxyde par effet tunnel (figure 5.14). Contrairement au cas précédent, l'évolution n'est pas exponentielle. On peut évaluer l'asymptote horizontale à quelques 10^8 cm⁻², valeur cohérente avec les résultats précédents.

La remarque concernant le caractère partiel de N_{ot} est bien entendu encore valable pour ces mesures. A l'avenir, un couplage avec les variations de t_p en traçant un réseau de courbes $N_{ot} = f(t_p)$ avec F comme paramètre permettra d'étudier la dépendance de la section de capture par effet tunnel avec le champ électrique et de comparer les résultats expérimentaux à l'équation théorique (5.14).

4.3.4 Influence de la fréquence.

Nous avons vu au § 3.3 que l'augmentation des spectres DLTS avec la fréquence pose un problème. Un raisonnement analogue à celui développé au § 4.2.2 pour les variations de N_{ot} avec le temps de remplissage, donne un résultat contraire à celui observé. En effet, quand on diminue la période pendant laquelle il y a émission des électrons piègés par les défauts d'oxyde, on s'attend à observer une diminution de la densité partielle N_{ot} et non une augmentation. On suppose donc à ce stade de nos travaux, que c'est la réponse DLTS propre aux états d'interface qui augmente quand le rapport t_p/T_m diminue. Cependant, comme nous l'avons déjà noté au début du § 3, les résultats de BLOSSE [2] ne s'applique pas directement et il faudra les recalculer pour un pseudo continuum d'états en remplaçant l'expression du transitoire de capacité $\Delta C(t) = C_0 \exp(-e_n t)$ par $\Delta C(t) = C_0 \int \exp(-e_n(E)t)dE$ pour calculer la réponse DLTS.

Cette augmentation de l'amplitude des spectres DLTS avec la fréquence a été également observée en étudiant des défauts de volume dans les structures MOS [12]. Dans ce cas nous n'avons pas non plus d'explication. Cela suggère que ce problème est lié à l'application de la DLTS sur les structures MOS.

5. - CONCLUSION

Il semble donc probable que l'effet de non saturation observé sur les spectres DLTS soit dû à un phénomène d'émission tunnel par des défauts situés dans la couche non stochiométrique SiO_{X} (voir chap. II § 2.2) à environ 10 Å du silicium et à une énergie de 3 à 4 eV sous la bande de conduction du SiO₂ c'est-àdire à hauteur de la bande de conduction du silicium. Il est vraisemblable qu'avec les faibles champs électriques présents dans la structure M.O.S., l'effet tunnel soit assisté par phonons.

L'étude des cinétiques de capture et d'émission doit être poursuivie afin de permettre la détermination des densités réelles de ces défauts (et non partielles comme nous l'avons fait ici). De plus, une étude de la dépendance des sections de capture en fonction du champ électrique, donnera une vérification qualitative de l'effet tunnel.

La nature exacte des défauts d'oxyde mis en jeu n'est pas connue à ce jour. Toutefois il est fort probable, vu le faible éloignement de l'interface, qu'ils sont de nature proche des états électroniques d'interface décrit au chapitre II § 3. De même que dans les études des défauts d'oxyde (injection, photo injection [6]), on n'observe pas leur présence dans les échantillons de type p (série LV). Cela s'explique facilement puisque l'effet tunnel pour les trous est peu probable à cause de l'importante barrière énergétique comparativement aux électrons.

On peut finalement se demander si cet effet tunnel influence également les mesures en $G(\omega)$. Initialement, le modèle tunnel avait été proposé par HEIMAN et WARFIELD [13] puis par PRIER [14] pour expliquer la dispersion des constantes de temps observées dans les mesures de conductance. Récemment KHAN et al [14] ont conduit des expériences sur des M.I.S., où l'isolant est un carbone amorphe. Les résultats ne s'explique bien qu'en considérant une extension spatiale des états d'interface à l'intérieur de l'isolant. Dans notre cas, il n'y a pas d'effet sur les mesures de conductances (chap. IV § 3), la distance est plus importante (10 Å contre moins de 5 Å dans la réf. [15]) et la densité plus faible d'un facteur 10^2 par rapport à la référence [14]. La DLTS devrait donc être un outil performant pour étudier les phénomènes tunnel à l'interface Si-SiO₂.



CHAPITRE VI

DEFAUT PONCTUEL A L'INTERFACE

1. - INTRODUCTION

Revenons quelques pas en arrière pour observer sur le spectre de densité de l'échantillon CN1.3 (figure 5.1) un petit pic près du milieu de bande interdite. Ce pic qui apparaît juste avant le pic artificiel liés aux porteurs minoritaires (voir chap. IV) existe sur tous les échantillons de la série CN étudiés, mais il peut facilement être marqué par ce dernier si la ligne de base n'est pas correctement ajustée (c'est-à-dire, si la polarisation est ajustée trop vers l'inversion, (figure 6.1), ou trop en déplétion (figure 6.2) ce qui fait intervenir le phénomène de "cut-off"). Un pic très analogue a déjà été observé expérimentalement par DLTS [1], mais aussi par la technique $G(\omega)$ dans des conditions différentes [2] lorsque les densités d'états sont plus importantes. Ce pic n'est pas observé sur les échantillons de type p.

Dans ce chapitre nous décrivons en détail les observations expérimentales qui se rapportent à ce pic et nous proposons une interprétation possible pour celui-ci.

2. - RESULTATS EXPERIMENTAUX

L'échantillon CN1.5 a été utilisé pour cette série de mesures. Dans les conditions du spectre de référence (voir chap. V, § 2) on voit un pic noté E_s juste avant le pic des minoritaires. Nous cherchons en premier lieu, à savoir si le pic E_s au milieu de bande interdite correspond à un défaut de volume ou d'interface [3]. Pour cela, la polarisation a été choisie à la valeur $V_b = 0.9$ V afin d'éliminer le pic minoritaire grâce à l'effet de "cut-off". A partir des conditions définies pour le spectre de référence (chap. V, § 2.1) l'amplitude de l'impulsion

139



Figure 6.1 : Masquage du pic E_s par le "pic minoritaire" en forte inversion (génération de la zone d'inversion).

- Notes : Les origines de l'axe y sont décalés entre les 2 spectres.
 - les autres paramètres de mesure sont ceux du spectre de référence.



Figure 6.2 : Influence du phénomène de "cut-off" pour une ligne de base en déplétion.

de remplissage est abaissée graduellement de $V_p = 2,5$ V à $V_p = -0,4$ V (figure 6.3).

En dessous de 200K, les spectres présentent un comportement typiquement d'interface mais il n'en est pas de même pour le piège E_s . Nous discuterons de ce problème au § 3.

Pour l'ensemble des spectres de la figure 6.3, on obtient pour E_s une énergie d'activation (en supposant toujours $\sigma_n = 10^{-15}$ cm² pour calculer la correspondance température-énergie)

$$E_{c} - E_{s} = 0,5 \text{ eV} \pm 0,05 \text{ eV}$$

(Une valeur très proche : 0,51 eV est obtenue pour CN1.3 à partir de la figure 5.1).



Figure 6.3 : Evolution du spectre DLTS avec la diminution de l'ampliude de l'impulsion.

Nous avons tracé sur la figure 6.4 l'évolution de l'amplitude du pic E_s en fonction de V_p . Elle présente un changement de pente à $V_p = 0,5$ V que nous expliquerons ci-dessous.



l'amplitude de l'impulsion.

3. - DISCUSSION

3.1 Localisation du piège E.

Puisqu'il n'y a pas de critère direct pour déterminer la nature du piège E_s (volume ou interface), nous allons simplement montrer qu'il est plus plausible d'interpréter les courbes 6.3 et 6.4 en terme de défaut d'interface que de défaut de volume.

Pour cela nous allons d'abord montrer que le comportement de ce piège ne s'explique pas s'il est situé dans le volume.

3.1.1 Piège de volume

Si on suppose que E_s correspond à un piège de volume situé à 0,5 eV de la bande de conduction, le niveau piège sera entièrement sous le niveau de Fermi pendant l'impulsion tant que V_p est supérieur à V_{p1} . La limite V_{p1} s'obtient pour la courbure

de bandesreprésentée à la figure 6.5.

Une deuxième condition à vérifier pour que le remplissage



Figure 6.5 : Courbure de bande pour la limite de remplissage totale du niveau E_s .

soit total est

$$(c_n n)^{-1} << t_p$$
 (6.1)

On fait une évaluation numérique approximative en prenant $E_c-E_s = 0,5 \text{ eV}, \sigma_n = 10^{-15} \text{ cm}^2, N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}, t_p = 100 \text{ } \mu \text{s} \text{ et } T = 240 \text{ K}$ ce qui correspond aux données du piège E_s sur les spectres DLTS de la figure 6.3. La condition sur la courbure de bandes(figure 6.5) s'écrit

$$|\psi_{s}| = (E_{c} - E_{T}) - (E_{c} - E_{F})_{volume}$$
 (6.2)

La solution est $\psi_s = -235 \text{ mV}$, ce qui correspond à une tension limite $V_{p1} \sim -0,65 \text{ V}$. La correspondance $\psi_s(V)$ est obtenue à partir de la caractéristique C(V) à 240 K. Quant à la condition (6.1), la concentration d'électrons n variant avec la distance, $c_n n$ n'est pas constant sur toute la zone de capture. On obtient une solution simple, en remplaçant n(x) par la concentration d'électrons en surface

 $n_{s} = N_{D} \exp \frac{e\psi_{s}}{kT}$ (6.3)

qui est le cas le plus défavorable à envisager ici. Le calcul donne ψ_s = - 170 mV, soit une tension V_p \sim - 0,55 V.

Le remplissage du niveau E_T est donc complet lorsque V_p est supérieur à environ -0,6 V. Dans ce cas l'amplitude de la réponse DLTS du piège doit saturer et la courbe d'amplitude du spectre en fonction de V_p devra avoir l'allure de la courbe 6.6.



Figure 6.6 : Evolution théorique de l'amplitude maximum du pic DLTS en fonction de l'impulsion de remplissage.

Le résultat expérimental étant fortement éloigné de la courbe théorique, comme le montre la courbe 6.4, il est raisonnable de penser à un état à l'interface.

3.1.2 Piège ponctuel d'interface

En principe pour des valeurs importantes de l'impulsion (V_p entre 0,5 et 2,5 V) le remplissage des états en milieu de bande interdite n'est pas affecté. Alors la variation de l'amplitude du pic avec V_p peut s'expliquer de la même façon qu'au chapitre V, c'est-à-dire par le vidage des pièges d'oxyde par effet tunnel ce qui, comme on l'a vu, ajoute une composante pratiquement constante sur l'ensemble du spectre.

On comprend alors l'écart important qu'on observe entre les spectres correspondant à $V_p = 2,5 V$; l,5 et 0,5 V de la figure 6.3. Enfin, on peut admettre que la diminution du spectre pour les plus faibles valeurs de V_p , est due au moindre remplissage de la distribution d'états d'interface.

On remarque que le maximum du pic E_s reste à température constante lorsque V_p diminue d'amplitude. Ce comportement est révélateur d'un état discret [3], le taux d'émission étant indépendant de la polarisation.

On peut donc conclure raisonnablement que le piège E_s est dû à un défaut ponctuel localisé à l'interface (ou extrêmement proche de celle-ci).

3.1.3 Remarques importantes sur la validité du raisonnement

Les conclusions précédentes sont en fait ambigues puisqu'un raisonnement contradictoire ne possède pas la vigueur d'une preuve directe. Plusieurs remarques sont à faire sur la technique de mesure par elle-même.

Si la distinction entre piège de volume et d'interface est relativement nette pour la partie du spectre inférieure à 200K-220K (voir en particulier ref. [3]), il n'en est pas de même autour de 250 K où la sensibilité de la réponse DLTS aux variations d'impulsion $(\Delta R/\Delta V_p)$ est beaucoup plus faible et où le "pic minoritaire" masque très facilement le piège E_s . De plus nos mesures sont compliquées par l'existence d'un effet tunnel déjà sensible au-dessus de 0,5 V.

Afin de lever cette ambiguité des mesures complémentaires seront nécessaires. Un spectre DLTS pour un cycle de polarisation constamment en déplétion profonde (figure 6.7) pourrait peut-être permettre cette détermination. En effet, dans ces conditions, les états d'interface ne répondent pas et seul un défaut de volume peut donner un signal DLTS. On risque toutefois d'être gêné par le pic de génération des minoritaires dominant la réponse DLTS au-dessus de 250 K (voir des résultats antérieurs en réf. [4]). Une faible amplitude de l'impulsion est susceptible de réduire cet effet en induisant une faible variation de la charge d'inversion.



Figure 6.17 : Structure MOS en déplétion profonde.

3.2 Energie d'activation du piège E_s.

Le spectre DLTS donne directement une énergie d'activation de 0,5 eV. Dans l'hypothèse d'un défaut ponctuel à l'interface, une autre estimation est possible en extrapolant la droite de la figure 6.4. La valeur de V_p qui annule la réponse DLTS correspond à un potentiel de surface tel que le niveau E_s reste constamment au-dessus du niveau de Fermi (figure 6.8).



Figure 6.8 : Courbure des bandes pour une tension de remplissage égale au seuil d'extinction du pic DLTS E_s .

L'énergie d'activation est approximativement donnée par

$$E_{c}-E_{s} = e|\psi_{s}| + (E_{c}-E_{F})_{volume}$$
(6.4)

avec

$$(E_{c}-E_{F})_{volume} = kTLn \frac{N_{C}}{N_{D}}$$
(6.5)

Nous avons une tension de seuil V_{po} = - 0,68 V (voir figure 6.4) correspondant à un potentiel de surface $\psi_s \simeq -260$ mV ce qui donne

$$E_{c} - E_{s} = 0,47 \text{ eV}$$

Cette valeur est en bon accord avec l'énergie directement déduite du spectre DLTS.

3.3 Nature microscopique du défaut E_s

Les techniques actuelles ne permettent pas d'obtenir une détermination de la nature microscopique de ce défaut. Nous ne pouvons que formuler des hypothèses par recoupement avec les résultats de la littérature.

Un niveau d'énergie en milieu de bande interdite peut suggérer l'existence de liaisonspendantes à l'interface Si-SiO₂. En effet :

- i) les liaisons pendantes sont intrinsèques à l'interface.
 Si le pic E_s n'est pas toujours observé [5], cela peut être dû au fait que suivant la nature de l'interface il peut y avoir reconstruction des liaisons pendantes entre elles ou par liaison avec des impuretés. Entre autre, ce défaut n'est pas observé sur des échantillons de type p.
- ii) D'autres travaux et résultats par DLTS et R.P.E. (voir chap. IV, § 4.2) situent le niveau d'énergie des liaisons pendantes pour la transition $(+/_0)$ à environ 0,3 eV de la bande de valence dans un matériau de type p. Le niveau à 0,5 eV serait celui correspondant à la transition (0/-) de la liaison pendante (voir chap.

II, § 3.1.2).

Une autre explication possible est celle de la présence d'impuretés métalliques à l'interface. Ces impuretés génèrent des niveaux d'énergie proches de leurs niveaux en volume [6,7] et donc proches du milieu de bande interdite pour beaucoup d'entre eux. Les métaux s'agglomèrent à l'interface et peuvent donner une concentration susceptible d'apparaître dans le pseudocontinuum habituel des états d'interface, se manifestant par un pic DLTS.

3.4 Détection du piège E_s par la technique G(ω).

Nous avons signalé dans l'introduction, le travail de SINGH et SRIVASTAVA [2] qui ont observé un pic à 0,37 eV de la bande de conduction en utilisant la technique $G(\omega)$. Nous avons également observé un pic à E_c - 0,43 eV sur l'échantillon CN1.2 (voir chap. IV, § 3.2, figure 4.10). Nous ne pensons pas que ce pic soit lié au piège E_s observé en DLTS pour deux raisons :

- i) le pic sur CN1.2 observé en G(ω) s'explique par la brutale variation du potentiel de surface (chap. IV, § 5) qui résulte de l'imprécision des mesures par G(ω) sur cet échantillon (voir la discussion des résultats G(ω) au chap. IV).
- ii) le pic observé par SINGH et al. est lié à la présence d'un double maximum sur les courbes G_p/ω (ω) [2] ce qui n'est absolument pas le cas de nos mesures sur CN1.2.

De plus SINGH et al. travaillent avec une densité d'états de l'ordre de 10^{12} cm⁻² eV⁻¹ alors que nous n'avons que 10^9 cm⁻²eV⁻¹. On ne détecte donc pas le défaut E_s par la méthode G(ω). Ceci constitue un argument supplémentaire en faveur de la DLTS comme un outil plus performant pour l'analyse de l'interface Si-SiO₂.

4. - CONCLUSION

La présence d'un pic situé au milieu de la bande interdite dans la distribution d'états d'interface a fait l'objet d'une étude par DLTS et $G(\omega)$. Ce niveau serait associé à la présence d'impuretés métalliques agrégées à l'interface. La nature chimique des impuretés n'étant pas directement déterminée par DLTS et beaucoup d'atomes métalliques donnant des niveaux d'énergie proche du milieu de bande interdite, il n'est pas possible par comparaisons avec des travaux antérieurs [6,7] de vérifier cette hypothèse. Pour cela il faudrait corréler la présence de ce défaut avec le processus technologique de fabrication des échantillons.

CHAPITRE VII

GENERATION DES PORTEURS

MINORITAIRES PAR LES ETATS D'INTERFACE

1. - INTRODUCTION

Dans les chapitres précédents nous n'avons pas discuté du pic qui apparaissait à environ 250 K sur les spectres DLTS. Nous allons montrer ici que la position de ce pic dépend fortement de la polarisation de base (V_b) et qu'il est associé à une "marche" dans la caractéristique C(T). Nous allons démontrer que cette marche résulte de la génération de la zone d'inversion par les états d'interface. Un modèle théorique de cet effet a été élaboré, qui est en bon accord avec les résultats expérimentaux.

2. - RESULTATS EXPERIMENTAUX

2.1 Evolution du pic minoritaire

A partir du spectre de référence défini pour l'échantillon LV1.3 par : $V_b = -0,5V$, $V_p = -4V$, $t_p = 100 \ \mu s$, $T_m = 0,1$ S afin de satisfaire les critères définis au chap. IV § 4.1, nous amenons la polarisation de repos (V_b) en inversion de plus en plus profonde. La figure 7.1 donne les spectres obtenus. On observe une évolution du pic minoritaire : il se décale vers les températures plus basses et son amplitude augmente fortement lorsque V_b augmente vers l'inversion plus forte. On verra que cette évolution s'explique facilement lorsqu'on aura attribué ce pic à la génération de porteurs minoritaires puisque celle-ci doit être plus importante lorsque la polarisation est en inversion plus forte.

Nous constatons également qu'il existe une marche dans la

caractéristique C(T) dès que l'échantillon est franchement en inversion et que la position de celle-ci coïncide avec la position du "pic minoritaire".



Figure 7.1 : Spectre en forte inversion pour l'échantillon LV1.3 et caractéristique C(T). a) Spectre de référence $V_b = -0,5V$ b) $V_b = -0,3V$ c) $V_b = -0,2V$ d) $V_b = +0,5V$

Note : x25 signifie que l'amplitude sur la figure doit être multipliée par 25.

Ce comportement semble quasi général, en effet nous avons observé le même phénomène sur un autre échantillon de type p issu d'une série différente (IB1.1) ainsi que sur les échantillons de type n de la série CN.

2.2 Caractéristiques C(T).

Nous avons, dans un premier temps, justifié l'existence de la marche dans la caractéristique C(T) puisqu'elle est directement liée à l'existence du pic minoritaire.

La mesure C(T) est faite au cours de la manipulation DLTS et nous avons vérifié que le régime transitoire propre aux mesures DLTS à un effet négligeable sur la caractéristique C(T) (i.e. $\Delta C/C \ll 1$). Ceci est vrai uniquement si on regarde les valeurs extrêmes (basse et haute températures) de la caractéristique C(T). En fait, la position de la marche est différente entre un relevé C(T) au cours d'une expérience DLTS et un relevé avec une tension constante appliquée sur la structure. Cette différence dépend à la fois de l'amplitude et de la durée de l'impulsion de remplissage. Ceci, de nouveau, s'explique si cette marche est liée à la génération de porteurs minoritaires puisqu'il y a possibilité d'une recombinaison plus ou moins importante des porteurs minoritaires pendant l'impulsion. Plus la recombinaison est importante et plus la zone d'inversion finale se forme difficilement. Cela se traduit par un décalage de la marche vers les températures plus importantes quand on trace la caractéristique C(T) en même temps que le spectre DLTS. On fera donc un relevé séparé (sans impulsion) quand on voudra comparer les caractéristiques C(T) expérimentale et théorique.

Le tableau 7.1 présente une comparaison entre les valeurs des caractéristiques C(V) (figure 7.2) et les valeurs directement mesurées sur la caractéristique C(T). Cette comparaison est faite sur l'échantillon IB1.1.

T	C _{min} (p	F)
(°C)	C(V)	C(T)
30°C	85	84
-70°C	80	81
-140°C	62,5	62,7

Tableau 7.I : Comparaisons des caractéristiques C(V) et C(T) pour IB1.1.



Figure 7.2 : Caractéristique C(V) à différentes températures a) - 140°C b) - 70° C c) 30° C

Le mécanisme qui permet la génération des porteurs minoritaires peut se faire soit par des défauts de volume soit par ceux d'interface. De façon à déterminer les défauts qui sont ici responsables de la génération, on a confronté divers modèles théoriques aux résultats expérimentaux.

3. - MODELES

Nous avons pensé que cette marche était liée à la génération de la couche d'inversion.

En effet, aux basses températures, la génération thermique des porteurs minoritaires est très faible, typiquement 10^{-3} cm⁻³ S⁻¹ pour un état situé autour du milieu de la bande interdite (0,44 eV), ayant des sections de capture $\sigma_p = \sigma_n = 10^{-16}$ cm² et de concentration usuelle N_T = 10^{12} cm⁻³. Il n'y a pas possibilité de formation de la zone inversée et la caractéristique C(V) est du type déplétion profonde (figure 7.2.a). Par contre la zone d'inversion peut se former quand la température augmente; alors la caractéristique C(V) prend sa forme habituelle (figure 7.2 b et c). Une fois la zone d'inversion complètement formée, la pente de la caractéristique C(T) correspond à la variation du potentiel de volume ψ_B , et donc de C_{min} avec la température (voir chap. I équations (1.38) et (1.39)).

La génération des porteurs minoritaires dans une structure M.O.S. hors d'équilibre a été étudiée par de nombreux auteurs. Citons les travaux de SAH et FU [1], COLLINS et CHURCHILL [2] et plus récemment ceux de KELBERLAU et KASSING [3].

Les travaux expérimentaux étudiant la génération lors d'un changement de polarisation amenant la capacité M.O.S. en inversion soit par une variation brutale (technique dite de ZERBST et caractéristique C(t)), soit par une rampe de tension linéaire plus ou moins rapide (C(V)), sont généralement faits de -50°C à la température ambiante, rarement plus bas [3-5].

Dans notre cas la situation est différente. Nous étudions la formation de la zone d'inversion, à polarisation constante, au cours d'une variation de la température. Il faut donc voir comment elle se forme dans ce cas là. On envisagera les deux mécanismes de génération classiques : par les défauts de volume et par les états d'interface.

On expose d'abord les modèles théoriques mis au point puis on donnera la comparaison des simulations avec les résultats expérimentaux.

3.1 Modèle théorique de la génération dans le volume

Nous prenons comme hypothèse, une génération par un niveau unique de volume caractérisé par : son énergie E_T , ses sections de capture σ_n et σ_p et sa concentration N_T . On cherche à calculer la caractéristique C(T) pendant que la génération se produit.

Au cours de la génération, la variation dq_i/dT de la charge d'inversion q_i va modifier le potentiel de surface ψ_s . Nous allons successivement déterminer :

- i) la relation exacte qui lie la charge q_i à ψ_s
- ii) puis la variation de q_i avec la température
- iii) et enfin, la relation entre la variation $d\psi_{\rm e}/dT~du$
 - potentiel de surface et dq_i/dT qui en est responsable.

Résolvant l'équation différentielle d ψ_s /dT, la relation ψ_s (T) nous donnera alors la caractéristique C(T).

3.1.1 Charge d'inversion

Nous partons de l'équation (1.14) solution de l'équation de Poisson qui donne la charge totale dans le semiconducteur. En explicitant complètement la fonction $F(\beta \psi_s, n_{\infty}/p_{\infty})$ nous avons dans le cas d'un semiconducteur de type p

$$q_{sc} = q_{i} + q_{d} = -\sqrt{2k\varepsilon_{s}T} \left\{ p_{\infty}e^{-\beta\psi}s_{-1} \right\} + n_{\infty}(e^{\beta\psi}s_{-1}) + \beta\psi_{s}N_{A} \right\} (7.1)$$

où q_i et q_d sont respectivement les charges d'inversion et de déplétion.

L'expression de q_d est parfaitement connue (éq. 1.30)

$$q_{d} = -\sqrt{2e\varepsilon} \frac{N_{A}\psi}{s}$$
(7.2)

et on peut écrire

$$q_{sc} = - \{ 2k\varepsilon_s Tn_{\infty} (e^{\beta\psi}s_{-1}) + q_d^2 \}^{1/2} = q_i + q_d$$
 (7.3)

Dans la limite où q $_i$ << q $_d$ on obtient

$$q_{i} = -\frac{kT\varepsilon_{s} n_{\infty}(e^{\beta\Psi}s-1)}{|q_{d}|}$$
(7.4)

Une autre méthode, qui consiste à partir de la définition d'une quantité de charge

 $q = -e \int \rho(x) dx$

redonne le même résultat (voir Annexe XII).

Nous devons ensuite calculer l'évolution de la zone d'inversion en fonction de la température.

3.1.2 Formation de la zone d'inversion

Procédons à ψ_s fixé pour déterminer l'équation différentielle $(dq_i/dT)_{\psi s}$ qui modélise la variation de la charge d'inversion. Ensuite nous déterminerons la variation correspondante du potentiel de surface.

Nous considérons un niveau piège d'énergie E_T , de concentration N_T (voir figure 7.3). Un tel défaut se comporte comme un centre de génération entre les points a et b [6]. En effet, il faut que l'émission d'électrons et de trous soient les processus dominant pour avoir une génération. Pour cela il faut que soient vérifiées les deux inéquations suivantes

$$(E_{T} + E_{F_{D}})/2 \gg E_{1}$$
 (7.5.a)

$$(E_{T} + E_{Fn})/2 \ll E_{1}$$
 (7.5.b)

où

$$E_{1} = E_{i} + \frac{kT}{2} L_{n} \frac{C_{p}}{C_{n}}$$
(7.6)

Le point b est défini par l'égalité de (7.5.a) et a par l'égalité de (7.5.b)

Dans ce cas la variation de charge au cours du temps est

$$\frac{dq_i}{dt} = eG (b-a)$$
(7.7)

où G est le taux de génération (voir annexe XIII) défini par

$$G = \frac{{}^{n_{i}}}{(1/c_{p}N_{T})\exp \frac{E_{T}-E_{i}}{kT} + (1/c_{n}N_{T})\exp \frac{E_{i}-E_{T}}{kT}}}$$
(7.8)



Figure 7.3 : Génération par un piège de volume

- a) état initial
- b) au cours de la génération
- c) état final.

Le problème consiste à exprimer (b-a) en fonction des pseudoniveaux de Fermi. Tant que l'on a pas atteint le régime final à l'équilibre thermodynamique, il y a génération des minoritaires. Donc $E_{Fn} \leq E_{Fp}$. La génération est terminée lorsque $E_{Fn} = E_{Fp}$ soit a = b.

Si a et b sont suffisamment proches, on obtient (annexe XIV)

$$b-a = \frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{e \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{s}}$$
(7.9)

On peut réécrire (7.7), en introduisant la vitesse de variation de la température : v = dT/dt

$$\left(\frac{dq_{i}}{dT}\right)_{\psi_{s}} = \frac{G}{v} \cdot \frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{s}}$$
(7.10)

Or, la différence $E_{Fn} - E_{Fp}$ varie en fonction de la formation de la zone d'inversion. Intuitivement plus la charge d'inversion q_i est importante, plus la génération devient faible et E_{fn} va tendre vers E_{Fp} . On montre à l'annexe XIV que

$$E_{Fn} - E_{Fp} = kTLn \frac{|q_i|}{|q_{io}|}$$
(7.11)

La charge q_{io} représente la charge d'inversion en régime final

$$|\mathbf{q}_{i0}| = \frac{\varepsilon_{s} kT}{\left| \mathbf{q}_{d} \right|} \frac{\mathbf{n}_{i}^{2}}{\mathbf{N}_{A}} \quad (e^{\beta \psi_{s}} - 1)$$
(7.12)

Finalement, on obtient

$$\left(\frac{d|q_{i}|}{dT}\right) = \frac{G \varepsilon_{s}}{\psi_{s} v |q_{d}|} kT Ln \frac{q_{i}}{|q_{io}|}$$
(7.13)

Cette équation, une fois résolue, va permettre de calculer la caractéristique $q_i(T)$.

3.1.3 Variation du potentiel de surface

L'augmentation de la charge d'inversion q_i va diminuer le potentiel de surface. Celui-ci tend vers la valeur $2\psi_B$ quand le régime final est atteint.

Nous connaissons la relation entre le potentiel de surface et la tension continue appliquée sur la grille

$$V_{g} = \psi_{s} + \frac{|q_{sc}(\psi_{s})|}{C_{ox}}$$
 (7.14)

q_{sc} est la charge totale dans le semiconducteur. On dérive (7.12) par rapport à la température

$$o = \frac{d\psi_s}{dT} + \frac{1}{C_{ox}} \left[\frac{d|q_i|}{dT} + \frac{d|q_d|}{d\psi_s} \cdot \frac{d\psi_s}{dT} \right]$$
(7.15)

en décomposant la charge totale en ses deux composantes $|q_{sc}| = |q_d| + |q_i|$. La charge q_i est une fonction de ψ_s et T : $q_i(\psi_s, T)$ donc

$$\frac{d|q_i|}{dT} = \frac{d|q_i|}{d\psi_s} \cdot \frac{d\psi_s}{dT} + \left(\frac{d|q_i|}{dT}\right)_{\psi_s = cste}$$
(7.16)

Nous définissons alors les capacités

i) du semiconducteur

$$C_{sc} = \frac{d|q_{sc}|}{d\psi_s} = \frac{d|q_d|}{d\psi_s}$$
(7.17)

puisque les charges minoritaires ne suivent pas les variations hautes fréquences imposées pour la mesure de C et de plus on a $q_i \ll q_d$ pour les variations lentes de ψ_s

ii) de la zone inversée

$$C_{i} = \frac{d|q_{i}|}{d\psi_{s}}$$

uniquement pour les variations lentes de ψ_s imposées par le phénomène de génération.

(7.18)

Ceci permet de réécrire (7.13) sous la forme

$$0 = \frac{d\psi_{s}}{dT} \left[1 + \frac{1}{C_{ox}} (C_{sc} + C_{i}) \right] + \frac{1}{C_{ox}} \left(\frac{d|q_{i}|}{dT} \right)_{\psi_{s}}$$
(7.19)

On en tire la relation différentielle donnant la variation du potentiel de surface avec celle de la charge d'inversion

$$\frac{d\psi_{s}}{dT} = -(C_{ox} + C_{sc} + C_{i})^{-1} (\frac{d|q_{i}|}{dT})_{\psi_{s}}$$
(7.20)

où $(d|q_i|/dT)_{\psi s}$ est donnée par l'équation (7.13).

3.1.4 Principe de calcul de la caractéristique C(T)

Pour une valeur ψ_s fixée, la résolution de l'équation (7.13) nous donne la charge $q_i(\psi_s)$ et la variation $(d|q_i|/dT)_{\psi_s}$. Nous pouvons alors calculer $d\psi_s/dT$ par l'équation (7.20). Sa solution est la nouvelle valeur de ψ_s résultant d'une variation de charge δq_i au cours d'un incrément δT de température.

Des équations (7.17) et (7.2) donnant la capacité du semiconducteur et la charge de déplétion, on tire

$$C_{sc} = \left\{ \frac{e \varepsilon_s N_A}{2 \psi_s} \right\}^{1/2}$$
(7.21)

On calcule ainsi la valeur de C_{sc} qui correspond à la solution de l'équation (7.20). Ensuite, on reboucle le système, en prenant

cette nouvelle valeur comme point de départ pour résoudre (7.13).

La méthode numérique employée pour solver ce système d'équations est détaillée à l'annexe XV.

3.2 Modèle théorique de la génération par l'interface

Un calcul pratiquement similaire est mené dans le cas où la génération se fait par l'intermédiaire des défauts localisés à l'interface.

En fait le calcul se simplifie parce qu'il n'y a pas à tenir compte de l'extension en profondeur (b-a), intervalle où le défaut est un centre de génération. Par contre, on ne sait pas à priori quel est le comportement du défaut, et il faudra utiliser la formulation complète pour le taux de génération (annexe XIII).

3.2.1 Equation d'évolution de la zone d'inversion.

Dans un premier temps, considérons un état d'interface unique à l'intérieur de la bande interdite.

L'équation de variation de la charge d'inversion est

$$\frac{\mathrm{dq}_{\mathrm{i}}}{\mathrm{dT}} = \mathrm{e} \mathrm{g}_{\mathrm{s}} \tag{7.22}$$

où g_s représente le taux de génération en surface. Alors l'équation (7.13) devient simplement

$$\left(\frac{d|q_{i}|}{dT}\right)_{\psi_{s}} = \frac{e g_{s}}{v}$$
(7.23)

Ici, l'expression de g_s va être fortement modifiée par rapport à celle donnée par (7.8) qui n'est valable que pour un défaut de volume dans la zone de déplétion.

Par ailleurs, l'équation (7.4) qui relie la charge d'inversion q_i au potentiel de surface reste parfaitement valable. Elle a été établie, indépendemment du mécanisme de génération.

3.2.2 Taux de génération.

On ne connaît pas, à priori, le comportement d'un défaut à l'interface. Il peut aussi bien être centre de recombinaison, piège à électrons ou à trous, que centre de génération.

La seule expression qui nous donne le nombre de porteurs minoritaires en excès dans un système hors d'équilibre est l'équation (XIII.20.a) établie à l'annexe XIII

$$g_{s} = \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{\tau_{nos}} \left\{ \frac{(n_{1s} + n_{s})(\Delta p_{s} - \Delta n_{s})}{N_{s}} - \frac{n_{1s}\Delta n_{s}}{n_{os}+n_{1s}} \right\}$$
(7.24)

où les indices s indiquent les valeurs à l'interface. On a

- $-\tau_{nos} = (c_{n}N_{s})^{-1}$
- n_{os}, p_{os} les concentrations en porteurs à l'équilibre thermodynamique
- $n_s = n_{OS} + \Delta n_s$, $p_s = p_{OS} + \Delta p_s$ les concentrations hors d'équilibre

- n_{1s} , p_{1s} les concentrations pour $E_F = E_T$

$$n_{1s} = n_{i} \exp \frac{(E_{T} - E_{i})_{s}}{kT}$$
 (7.25.a)

$$p_{1s} = n_i \exp \frac{(E_i - E_T)_s}{kT}$$
 (7.25.b)

Eventuellement, on utilise (XIII.22.b) dans le cas d'une faible concentration de défauts

$$g_{s} = \frac{n_{1}^{2} - n_{s}p_{s}}{\tau_{nos}(p_{1s}+p_{s}) + \tau_{pos}(n_{1s}+n_{s})}$$
(7.26)

En fait, il n'existe pas un niveau unique à l'interface, mais une distribution d'états dont la densité N_{it} est une fonction de l'énergie dans la bande interdite. En conséquence, il faut remplacer dans l'équation (7.23), le taux de génération g_s par

$$G_{s} = \int_{v}^{E_{c}} g_{s}(E) dE$$
(7.27)
$$E_{v}$$

où $g_s(E)$ est donnée par (7.24). Pour une faible densité d'états d'interface, on a alors

$$G_{s} = \int_{v}^{E_{c}} \frac{n_{i}^{2} - n_{s}p_{s}}{\frac{1}{c_{n}N_{it}(E)}(p_{1s}+p_{s}) + \frac{1}{c_{p}N_{it}(E)}(n_{1s}+n_{s})} dE \quad (7.28)$$

Nous pouvons modéliser la densité d'états en prenant une forme en U exprimée par

$$N_{it}(E) = N_{it}^{c} \exp \{ -\beta_{c}(E_{c}-E) \} + N_{it}^{v} \exp \{ -\beta_{v}(E-E_{v}) \} + N_{it}^{o}$$
(7.29)

Les deux premiers termes représentent l'augmentation de la densité près des bandes de valence et de conduction. N_{it}^{o} est la concentration au milieu de la bande interdite (figure 7.4) [3]



Figure 7.4 : Forme de la densité d'états d'interface utilisée dans le calcul.

Donc pour une génération par les états d'interface, la variation de la charge d'inversion est donnée par les équations (7.23) et (7.28).

Ensuite, l'équation différentielle donnant le potentiel de surface (7.20) reste applicable.

En résumé, on utilise les expressions (7.4), (7.8), (7.20) et (7.21) comme système d'équations dans le cas d'une génération par un piège de volume et (7.4), (7.23), (7.28), (7.20) et (7.21) pour une génération par l'interface (Tableau 7.II)

	GENERATION PAR LE VOLUME	GENERATION PAR L'INTERFACE
Charge d'inversion	$q_i = -\frac{kT\varepsilon_s}{s}$	$\frac{\beta \Psi_{\mathbf{s}}}{ \mathbf{q}_{\mathbf{d}} } $ (7.4)
Evolution de q _i	$\left(\frac{d q_{i} }{dT}\right) = \frac{G \varepsilon_{s}}{v q_{d} } kT \ln \frac{q_{i}}{ q_{io} } (7.13)$	$\left(\frac{d q_i }{dT}\right)_{\psi_s} = \frac{e_{s_s}}{v} $ (7.23)
Taux de generation	$G = \frac{{n_i}}{{{(1/c_pN_T)exp} \frac{{E_T}^{-E_i} + (1/c_nN_T)exp}{kT} + \frac{{E_i}^{-E_T}}{kT}}}$ (1/c_pN_T)exp (7.8)	$G_{s} = \int_{c}^{E_{c}} \frac{n_{i}^{2} - n_{s}p_{s}}{\frac{1}{c_{n}N_{it}(E)}(p_{1s}+p_{s}) + \frac{1}{c_{p}N_{it}(E)}(n_{1s}+n_{s})} dE$ (7.28)
Evolution de Ψ_s	$\frac{d\psi_{s}}{dT} = - (C_{ox} + C_{sc} + C_{sc})$	$C_{i}^{-1} \left(\frac{d q_{i} }{dT}\right)_{\psi_{s}}$ (7.20)
, Valeur de la capacité	$C_{sc} = \left\{ \frac{e\varepsilon N_A}{2\psi_s} \right\}^{1/2}$	(7.21)

Tableau 7.II : Système d'équations pour les deux mécanismes de génération.
3.3 Résultats des simulations

Le modèle théorique étant établi dans l'approximation $q_i \ll q_d$, on vérifiera la justesse de cette approximation à postériori, mais on peut avoir une idée du rapport q_i/q_d maximum.

Appliquons l'équation (7.14)

$$V_{G} = \psi_{s} + \frac{|q_{sc}|}{C_{ox}}$$

quand la zone d'inversion est complètement formée, par exemple à température ambiante. Le potentiel de surface pour IB1.1 (figure 7.5) est calculé à partir de la caractéristique C(V) haute fréquence. Pour V_g = +4V, on obtient ψ_s = 0,67V qui est comparable à la valeur théorique

$$\psi_{\rm s} = 2\psi_{\rm B} = 2 \frac{\rm kT}{\rm e} \ln \frac{\rm N_{\rm A}}{\rm n_{\rm i}} = 0,63 \text{ V}$$

avec
$$N_A = 1,5 \ 10^{15} \text{cm}^{-3}$$
 et $n_i = 3,39 \ 10^{15} \text{T}^{3/2} \text{ exp} - \text{E}_g/2kT = 5 \ 10^9 \text{cm}^{-3}$

Ces valeurs donnent la charge totale dans le semiconducteur

$$|q_{sc}| = |q_{i}| + |q_{d}| = 2,3 \ 10^{-8} \text{C.cm}^{-2}$$
 avec $C_{ox} = 126 \text{ pF. Or } |q_{d}|$

est connue par (7.2) qui donne 1,8 10^{-8} C.cm⁻² d'où le rapport

$$q_i/q_d = 0,27$$

qui est une valeur maximale, la zone d'inversion étant complètement formée. En fait, la simulation montre que ce rapport est beaucoup plus faible $(10^{-4} \ge 10^{-1})$ dans une large gamme de températures.



Figure 7.5 : Potentiel de surface à température ambiante pour l'échantillon IB1.1.

3.3.1 Choix entre génération de volume ou d'interface

Nous comparons successivement les deux modèles aux caractéristiques C(T) de l'échantillon IB1.1 obtenus pour V_g = +4V. La figure 7.6 montre le résultat pour le modèle de génération par le volume. Il faut pendre les paramètres suivants $N_T = 10^{15}$ cm⁻³, $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-13}$ cm²) si on veut que la courbe théorique approche les valeurs expérimentales. Le choix de l'énergie $E_T = 0,55$ eV implique un taux de génération maximum (éq. 7.8). La valeur $N_T = 10^{15}$ cm⁻³ est innaceptable puisque aucun défaut de cette importance n'est détecté par D.L.T.S. à cette énergie (figure 7.7), ni ailleurs.

Si les défauts de volume dominent le processus de génération autour de la température ambiante [3-5], ils ne peuvent expliquer la formation de la zone inversée à basse température. Cela suggère donc fortement que la génération se fait par les états d'interface.

La figure 7.8 donne la simulation obtenue avec le modèle de génération par les états d'interface. Le calcul est fait en prenant $N_{it}^{C} = N_{it}^{V} = 10^{3} \times N_{it}^{O}$ et $\beta_{c} = \beta_{v} = 30 \text{ eV}^{-1}$ [3] dans l'équation (7.29). Le meilleur ajustement est obtenu pour $N_{A} =$



Figure 7.6 : Simulation numérique de la génération par les défauts de volume.

* valeurs expérimentales - courbe théorique



Figure 7.7 : Spectre D.L.T.S. de IB1.1 ($V_b = +4V$, $V_p = -4V$).

1,4 10^{15} cm⁻³, N_{it}^{o} = 3,8 10^{11} cm⁻² eV⁻¹ et $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-13}$ cm². Un résultat pratiquement similaire est obtenu avec une densité constante égale à 3,8 10^{-11} cm⁻² eV⁻¹ dans toute la bande interdite. Ce n'est pas surprenant puisque ce sont les états autour du milieu de bande interdite qui dominent le processus de génération.

Nous n'avons pas pu vérifier expérimentalement ces valeurs de densité d'états. En effet la mesure D.L.T.S. des états d'interface est génée par la présence d'un défaut de volume (figure 7.7) et la méthode TERMAN est trop imprécise. Toutefois les valeurs obtenues par la simulation sont vraisemblables. Cette vérification est faite sur un autre échantillon comme on le verra au § suivant.



Figure 7.8 : Simulation numérique de la génération par les défauts d'interface

* valeurs expérimentales — courbe théorique

3.3.2 <u>Validation du modèle de génération par</u> <u>l'interface</u>.

Nous avons réalisé des simulations sur l'échantillon CN13

dont la densité d'états a été déterminé par D.L.T.S. (voir chap. V, fig. 5.1). La figure 7.9 donne le réseau de caractéristique C(T) pour différentes polarisations de repos V_b , ainsi que les simulations numériques. Mis à part une variation plus rapide pour le modèle théorique, l'agrément est correct pour l'ensemble des courbes. Le tableau 7.III compare les résultats expérimentaux (D.L.T.S. et $G(\omega)$) et numériques. L'ajustement est réalisé à mieux que 30%.



Figure 7.9 : Simulation et résultats expérimentaux pour CN1.3 à différentes polarisations.

	(cm ⁻³) (N [*] cm ² eV ⁻¹)	σ _n (cm ²)
Modèle théorique	3,9 10 ¹⁴	7 10 ⁹	5 10 ⁻¹⁵
DLTS	5,5 10 ^{14**}	5 10 ⁹	3,910 ⁻¹⁵
G(ω)	5,5 10 ^{14**}	9 10 ⁹	_
Ecart maximum	29 %	28,5%	22 %

★ densité au milieu de la bande interdite

** obtenu par la
 caractéristique C(V)

Tableau 7.III : Comparaison mesures-modèle théorique sur CN1.3.

Cet accord entre les mesures et les résultats du modèle de génération par l'interface permet de valider ce dernier.

4. - CONCLUSION

Nous avons observé le comportement du pic de génération des porteurs minoritaires sur les spectres D.L.T.S. d'états d'interface. Ce pic est étroitement lié à la génération de la zone d'inversion. Pour cela nous avons élaboré un modèle précis expliquant la formation de la zone d'inversion à basse température. Ce modèle calcule la caractéristique C(T) pour une tension de polarisation constante de la structure M.O.S.. Nous donnons une expression exacte de la charge d'inversion et ce modèle est validé par son accord avec les résultats expérimentaux.

CONCLUSION

A partir de la comparaison entre les techniques $G(\omega)$ et D.L.T.S., nous avons utilisé cette dernière pour étudier quelques propriétés de l'interface Si-SiO₂.

En effet, la technique D.L.T.S. se révèle plus performante (meilleure sensibilité, meilleure résolution énergétique, simplicité,...) bien que la mesure des sections de capture soit très difficile à faire correctement. Nous avons retrouvé par D.L.T.S. des caractéristiques déjà mentionnées dans la littérature (pic de liaisons pendantes à E_v + 0,29 eV par exemple) qui ne sont pas détectable en G(ω) pour des densités aussi faibles que celles présentées par nos échantillons. En couplant la technique G(ω) à des moyens informatiques plus puissants, et en se servant des résultats D.L.T.S. comme référence, nous pourrons valider différents modèles employés dans les mesures G(ω).

La mise en évidence uniquement sur des échantillons de type n, d'un effet tunnel à l'interface doit être approfondie. En particulier, le modèle simple d'un effet tunnel pur n'explique pas toutes les observations expérimentales (augmentation de l'amplitude du spectre avec la fréquence). L'étude des cinétiques de capture et d'émission doit être poursuivie afin de permettre la détermination des densités réelles de ces défauts (et non partielles comme nous l'avons fait jusqu'à présent). De plus, une étude de la dépendance des sections de capture en fonction du champ électrique, donnera une vérification qualitative de l'effet tunnel. S'il est fort probable, vu le faible éloignement de l'interface, que ces défauts ont une structure proche de celle des états électroniques d'interface, leur nature encore inconnue, pourrait être déterminée en corrélant leur présence avec le processus technologique.

173

La présence d'un faible pic situé près du milieu de la bande interdite ($\sim E_c$ -0,5eV) nous a intriguée. Ce pic n'apparaît sur aucun échantillon de type p. Si son énergie est correctement déterminée, par deux méthodes différentes, il faudra poursuivre les mesures avec d'autres conditions expérimentales pour valider l'hypothèse d'un défaut ponctuel à l'interface. La nature chimique de ce défaut pourrait-être un agrégat d'impuretés métalliques à l'interface. En effet beaucoup d'atomes métalliques (Au, Al...) donnent des niveaux d'énergie proche du milieu de bande interdite.

Finalement, nous avons étudié la génération de la zone d'inversion (génération des porteurs minoritaires) au cours de la remontée en température effectuée lors des mesures D.L.T.S.. En effet, cette génération est responsable d'un pic artificiel de forte amplitude qui gène les mesures D.L.T.S. lorsque la structure M.O.S. est polarisée en inversion (ou déplétion profonde). Cette génération est également responsable d'une marche dans la caractéristique C(T). Nous avons élaboré un modèle théorique qui simule cette caractéristique. Nous avons calculé l'expression exacte de la charge d'inversion, ainsi que son évolution avec la température sous polarisation fixe. La démonstration est faite que ce sont les états d'interface qui interviennent comme centre de génération. Cela donne un moyen simple d'étudier cette formation de la zone d'inversion et de mesurer la densité d'états d'interface responsables.

Le modèle est en agrément correct (écart inférieur à 30%) avec les résultats expérimentaux. Il importe maintenant d'améliorer la résolution numérique du modèle à l'aide de moyens informatiques plus performants si on souhaite un meilleur ajustage avec les résultats expérimentaux.

Finalement, nous disposons maintenant de deux techniques de caractérisation complémentaires des états d'interface. Même si la technique $G(\omega)$ est moins performante et moins pratique d'usage elle permet, dans certains cas, d'obtenir des informations complémentaires (importance des fluctuations du potentiel de surface par exemple). La D.L.T.S. est un outil performant pour l'étude des défauts à l'interface Si-SiO₂ et des phénomènes physiques qui en résultent.

A l'avenir on envisage d'étendre les possibilités de ces deux techniques vers les mesures optiques : D.L.O.S. appliquée à l'interface et mesure $G(\omega)$ sous éclairement qui donneront des informations supplémentaires sur les défauts d'interface. Un couplage avec des expériences de résonance paramagnétique électronique (R.P.E.) est également envisagé.

176

•

ANNEXE I

CALCUL SIMPLE DU TEMPS DE REPONSE DES PORTEURS MINORITAIRES

Nous cherchons à déterminer, le plus simplement possible, le temps mis par les porteurs minoritaires pour suivre les variations du potentiel de surface.

Plutôt que de travailler en régime harmonique avec un modèle et un schéma équivalent en terme d'admittance [1], nous allons calculer la constante de temps en régime transitoire lors d'une variation du potentiel en créneau d'amplitude $\delta \psi_{\rm S}$.

1. - CONSTANTE DE TEMPS DE GENERATION

Soit une variation $\delta \psi_S$ du potentiel de surface dans le sens d'une inversion plus forte (figure I.1). L'augmentation de la charge d'inversion ne peut avoir lieu que par la génération de porteurs minoritaires.

Nous considérons que cette génération se produit par l'intermédiaire d'un niveau d'énergie E_T dans la bande interdite du semiconducteur



Figure I.1 : Génération des porteurs minoritaires

177

Un tel défaut se comporte comme un centre de génération sur une profondeur comprise entre les points a et b [2]. En effet il faut que l'émission d'électrons (avec un taux d'émission e_n) et de trous (avec un taux e_p) soient les processus dominants. Cela impose que le pseudo-niveau de Fermi pour les électrons (E_{Fn}) soit inférieur à celui des trous (E_{Fp}).

Le taux de génération des porteurs minoritaires est simplement

$$G = e_n \cdot n_T \tag{I.1}$$

où n_T est le nombre d'électrons sur le niveau E_T . Le taux d'émission e_n est une caractéristique du défaut. Pour un centre de génération, il n'y a pas d'accumulation de charge sur le niveau, le nombre d'électrons émis est égale au nombre de trous émis

$$\mathbf{e}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{T}} = \mathbf{e}_{\mathbf{p}} \left(\mathbf{N}_{\mathbf{T}} - \mathbf{n}_{\mathbf{T}} \right) \tag{1.2}$$

 ${\rm N}_{\rm T}$ étant la concentration du niveau ${\rm E}_{\rm T}.$ En tirant ${\rm n}_{\rm T}$ de cette équation, on obtient

$$G = \frac{e_n e_p}{e_n + e_p} N_T$$
(I.3)

On réécrit ce taux de génération connaissant les expressions de \mathbf{e}_{n} et \mathbf{e}_{p} :

$$e_{n} = \sigma_{n} V_{n} N_{c} \exp - \frac{E_{c} - E_{T}}{kT}$$
(I.4.a)

$$e_{p} = \sigma V_{p} N_{v} \exp \frac{E_{v} - E_{T}}{kT}$$
(I.4.b)

où, σ_n , σ_p sont respectivement les sections de capture pour les électrons et les trous et V_n et V_p les vitesses thermiques pour les deux types de porteurs. Soit finalement

$$G = \frac{n_i}{\tau_g} = \frac{n_i}{\frac{1}{\sigma_n V_n N_T} \exp \frac{E_i - E_T}{kT} + \frac{1}{\sigma_p V_p N_T} \exp \frac{E_T - E_i}{kT}}$$
(I.5)

Soucieux de simplicité, afin d'obtenir facilement un bon ordre de grandeur, nous renvoyons le lecteur au chapitre VII pour une description détaillée de la génération.

Dans le cas particulier où le niveau d'énergie E_T est situé au milieu de la bande interdite ($E_T = E_i$), l'expression (I.5) est réduite à

$$G = \frac{\sigma^{VN} T^{n} i}{2}$$
(1.6)

avec l'hypothèse simplificative $\sigma_p = \sigma_n = \sigma$ et $V_n = V_p = V$. La constante de temps de génération est donc

$$\tau_{g} = \frac{2}{\sigma V N_{T}}$$
(I.7)

2. - CONSTANTE DE TEMPS DE RECOMBINAISON

Nous appliquons maintenant une variation $\delta \psi_{S}$ du potentiel de surface dans le sens d'une inversion moins forte (figure I.2). La diminution de la charge d'inversion résulte de la recombinaison des porteurs minoritaires par le niveau d'énergie E_{T} .



Figure 1.2 : Recombinaison des porteurs minoritaires.

De manière similaire, cela implique que le pseudo-niveau de Fermi des électrons E_{Fn} soit supérieur à celui destrous E_{Fp} . Le piège se comporte en centre recombinant entre a et b [2].

On caractérise les recombinaisons par le taux de recombinaison $c_n n$ pour les électrons et $c_p p$ pour les trous. Les probabilités de capture c_n et c_p sont simplement

$$c_{n} = \sigma V$$
(I.8.a)
$$c_{p} = \sigma V$$

Pour $E_T = E_i$, en comparant (1.8) à (1.4) on a alors

$$e_n = c_n \quad \text{et} \quad e_p = c_p \cdot p \tag{I.9}$$

et par analogie avec (I.3) et (I.5) on écrit le taux de recombinaison

$$R = \frac{\binom{(c_n n)(c_p p)}{r_n r_p}}{\binom{(c_n n + c_p p)}{r_p}} N_T = \frac{n_i}{\tau_r}$$
(I.10)

soit directement dans ce cas particulier

$$\tau_{\rm r} = \tau_{\rm g} = \frac{2}{\sigma_{\rm V N_{\rm T}}} \tag{I.11}$$

3. - FREQUENCES LIMITES

La constante de temps réellement mesurée est reliée aux temps de génération et de recombinaison par [3]

$$\tau_{\rm m} = \tau \, \frac{{}^{\rm N}_{\rm A}}{{}^{\rm n}_{\rm i}} \tag{I.12}$$

où $\tau = \tau_g$ ou τ_r suivant le sens des variations $\delta \psi_S$ du potentiel

de surface. Donc

$$\tau_{\rm m} = \frac{2}{\sigma V N_{\rm T}} \cdot \frac{N_{\rm A}}{n_{\rm i}}$$
(1.13)

A titre de comparaison, NICOLLIAN et BREWS [1] donne comme résultat avec un modèle plus complexe

$$\tau_{\rm m} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sigma V N_{\rm T}} \cdot \frac{N_{\rm A}}{n_{\rm i}}$$
(I.14)

Il y a un bon accord entre les deux méthodes. En prenant $\sigma = 10^{-14} \text{ cm}^2$

 $V = 10^{7} \text{ cm/s} \text{ (à température ambiante)} \\ N_{T} = 10^{13} \text{ cm}^{-3} \\ N_{A} = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \\ n_{i} = 10^{10} \text{ cm}^{-3} \\ \end{cases}$

on obtient avec (I.13)

 $\tau_m = 0, 2 S$

ce qui correspond à une fréquence limite basse de quelques Hz. Ceci est mis en évidence à la figure I.3 où la capacité s'écarte déjà notablement de la caractéristique C(V)statique (méthode de KUHN [4]) pour une fréquence de 50Hz.

La fréquence limite pour laquelle la capacité en inversion atteint la valeur théorique donnée par les équations (1.38) et (1.39) n'est pas aussi facilement estimable par une méthode simple. Elle est au minimum de l'ordre de 100 kHz [1] (figure I.3).





Figure I.3 : Caractéristique C(V) à basse et haute fréquences.

ANNEXE II

FORMULATION COMPLETE DU MODELE DISCRETISE [1]

Pour chaque microcapacité (figure II.1), on écrit



$$C_{m} = C_{ox} - \frac{\Delta}{\Delta}$$
(II.1.b)

avec

$$\Delta = (G_p/\omega C_{ox})^2 + (1+C_{sc}/C_{ox}+C_{it}/C_{ox})$$
(II.2)





Les expressions de G_p et C_p sont celles obtenues pour un continuum d'états sans fluctuation du potentiel de surface.

$$\frac{G_{p}}{\omega} = \frac{e^{N}it}{2\omega\tau_{p}} \ln \left[1 + (\omega\tau_{p})^{2}\right]$$
(II.3.a)
$$C_{it} = \frac{e^{N}it}{\omega\tau_{p}} \arctan(\omega\tau_{p})$$
(II.3.b)

Avec une distribution Gaussienne pour les fluctuations de potentiel

$$P(u_{s}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{s}^{2}}} \exp \frac{-(u_{s} - \overline{u}_{s})^{2}}{2\sigma_{s}^{2}}$$
(II.4)

le résultat global pour la structure complète est alors

ωτ

$$< G_{\rm m} > = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_{\rm p}}{\Delta \sqrt{2\pi\sigma_{\rm s}^2}} \exp \frac{-(u_{\rm s} - \overline{u}_{\rm s})^2}{2 \sigma_{\rm s}^2} du_{\rm s}$$
(II.5.a)

$$< C_{\rm m} > = C_{\rm ox} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{C_{\rm ox} + C_{\rm sc} + C_{\rm it}}{\Delta \sqrt{2\pi\sigma_{\rm s}^2}} \exp \frac{-(u_{\rm s} - \overline{u}_{\rm s})^2}{2\sigma_{\rm s}^2} du_{\rm s} \qquad (II.5.b)$$

Dans ce cas l'ajustement du modèle théorique est réalisé directement sur la courbe G_m/ω (figure II.2).



Figure II.2 : Ajustement avec la formulation complète du modèle discrétisé (réf. [1]).

· · ·

.

ANNEXE III

SURFACE CARACTERISTIQUE - AMAS DE CHARGES

On peut estimer la valeur de la surface caractéristique α par comparaison entre les caractéristiques C(V) expérimentales et théoriques [1,2]. On obtient des valeurs de α de l'ordre de 10⁻¹² cm² alors qu'une valeur sensée serait de 10⁻⁷ à 10⁻⁸ cm².

Un modèle (processus de Poisson composé) dans lequel des amas de Z charges, considérés comme pontuels, sont distribués selon une loi Gaussienne [3] permet d'ajuster Z pour avoir le résultat souhaité.

La charge élémentaire d'un amas est Ze, alors par analogie avec l'équation (3.46) on écrit

	Ze Q	
$\sigma^2 =$	·	(III.l)
q	α	

En ajustant Z pour avoir $\alpha = 10^{-7}$ cm², on trouve que le nombre de charge par amas est

2000 < z < 6000

(111.2)

Ce raisonnement n'est pas une preuve de l'existence d'amas de charge à l'interface. D'autres observations expérimentales (photoémission par exemple [4]) vont dans le même sens, sans apporter pour autant une preuve directe. Ce problème est donc actuellement très ouvert.

.

ANNEXE IV

BANC DE MESURE D'ADMITTANCE

1. - DESCRIPTION

Le banc de mesure est bâti autour d'une détection synchrone double phase (EGG 5206) qui mesure directement la composante en phase (G_m) et en quadrature (ωC_m) du signal d'entrée (figure IV.1).

Ce banc est entièrement automatisé par un calculateur HP 9826 associé à un multiprogrammeur HP 6940.

Un convertisseur digital-analogique fourni la tension de polarisation, sur laquelle est superposé le signal alternatif de fréquence variable issue d'un synthétiseur de fréquence (Phillips PM 5142). Un voltmètre (AOIP 5121) mesure en permanence l'amplitude de la composante alternative (20 à 25 mV_{eff} pour vérifier l'approximation petit signal). Le signal composite est appliqué sur la face arrière de la structure MOS, et le courant à travers la structure est recueilli par un convertisseur couranttension très sensible (P.A.R. 181; 10^{-9} A/V au maximum) afin de mesurer des conductances très faibles (10^{-9} Ω^{-1} à 10^{-10} Ω^{-1}). Cette configuration (grille de la structure MOS à l'entrée du convertisseur) réduit sensiblement le bruit en accroissant l'effet de blindage de la masse effective présente à l'entrée du convertisseur.

Pour obtenir la caractéristique C(V) à haute fréquence, le banc de mesure comporte également un capacimètre à 1 MHz (P.A.R. 410) dont la sortie est analysée par un convertisseur A/D.

Dans la configuration C(V), le calculateur donne les paramètres physiques suivants : dopage, épaisseur d'oxyde, potentiel de volume (ψ_B), résistance série, tension de bandes plates, et il extrait la relation $\psi_s(V_g)$. Dans la configuration $G(\omega)$, on édite les résultats $G_m(V_g)$ et $C_m(V_g)$ pour chaque fréquence ainsi que les courbes G_p/ω (ω) pour différents potentiels de surface. L'édition existe simultanément sous formes de tableaux et de courbes.

2. - ETALONNAGE, LIMITES ELECTRIQUES DES MESURES.

Des déphasages parasites (sommateur, convertisseur couranttension) sont introduits entre le signal de référence sur la détection synchrone et la tension réellement présente aux bornes de l'échantillon (particulièrement à haute fréquence). Il est donc nécessaire d'étalonner le système à chaque fréquence. Une cellule parallèle R-C, dont les valeurs sont connues à toutes fréquences avec une précision de 1%, est branché à la place de l'échantillon. Les erreurs de phase sont alors directement compensées en réglant l'origine des phases sur la détection synchrone (par pas de 0,025°) afin d'obtenir les valeurs étalons.

La précision attendue sur la courbe $G_p/\omega(\omega)$ s'obtient en calculant l'erreur sur la mesure (G_m et C_m) et l'erreur faite lors de l'extraction de la conductance parallèle [1]. L'erreur de mesure sur le capacimètre PAR 410 est de 2%. Avec la détection synchrone l'erreur sur la capacité est estimée également à 2% et de 3 à 5% sur la conductance. L'erreur sur la fréquence est négligeable (la précision du synthétiseur est de 5 10^{-5}). Finalement, on obtient une erreur sur G_p/ω donc sur la mesure de la densité d'états, comprise entre 5 et 10%.

La gamme de fréquence s'étend de 100 Hz à 100kHz. La limite supérieure est fixée par le convertisseur courant-tension PAR 181. A basse fréquence, la conductance G_m d'une structure MOS diminue fortement pour devenir inférieure au bruit. On peut réduire la bande effective de bruit en augmentant la constante de temps en sortie de la détection synchrone et en augmentant le nombre de moyennage effectué sur les mesures. Toutefois 100 Hz semble une limite difficilement dépassable.

L'appareillage actuel permet la mesure d'admittance avec un angle de perte (tg $\delta = G/C\omega$) aussi faible que 10^{-4} . La sensibilité pour la mesure de conductance est de $10^{-10} \Omega^{-1}$ et de l pF pour la capacité. De tous cela, il ressort que nous pouvons détecter des densités d'états aussi faible que $10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$. Le système de mesure est donc intrinsèquement performant. En fait une limitation plus sévère ($10^9 \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) interviendra, due aux phénomènes physiques mis en jeu dans la structure MOS sous test (voir § 3.4 du chap. III).



Figure IV.1 : Banc de mesure de la technique $G(\omega)$.

ANNEXE V

COMPARAISON DE PLUSIEURS FORMULATIONS STATISTIQUES

DES FLUCTUATIONS DU POTENTIEL DE SURFACE

Le but de cette annexe est de comparer les résultats obtenus avec trois modèles différents des fluctuations de potentiel de surface [1]. Une telle comparaison donnera des écarts relatifs entre ces modèles mais ne permettra évidemment pas de valider l'un d'entre eux au détriment des autres.

Le premier modèle (A) est celui introduit par NICOLLIAN et GOETZBERGER (éq. 3.50) dans lequel la conductance parallèle s'écrit

$$\frac{G_{p}}{\omega} = \frac{e N_{it}}{2\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\ln(1+\omega^{2}\tau_{p}^{2})}{\tau_{p}\sqrt{2\pi\sigma^{2}}s} exp \frac{-(u_{s}-\overline{u}_{s})^{2}}{2\sigma_{s}^{2}} du_{s} \qquad (V.1)$$

Le second (B), reprend le même schéma équivalent (figure 3.21.b) mais sans linéarisation de la relation ψ_s (Q_f) (éq. 3.47), ce qui revient à ne pas considérer une distribution Gaussienne pour le potentiel de surface. On écrit alors

$$\frac{G_{p}}{\omega} = \frac{eN_{it}}{2\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\ln(1+\omega^{2}\tau_{p}^{2})}{\tau_{p}\sqrt{2\pi\sigma_{q}^{2}}} \exp \frac{-(Q_{f} - \overline{Q}_{f})^{2}}{2\sigma_{q}^{2}} dq_{s} \qquad (V.2)$$

Enfin le troisième modèle (C) tient compte du traitement complet du modèle discrétisé comme on le présente dans l'annexe II.

La figure V.1 présente les courbes simulées pour chacun des

modèles (N_A = 2,24 10^{15} cm⁻³; N_{it} = 5,54 10^{10} eV^lcm⁻²; $\sigma_p = 1,42$ 10^{-16} cm²; $\bar{Q}_f = 5,6 10^{-8}$ C cm⁻²). L'écart sur l'amplitude du maximum est faible mais, il est beaucoup plus critique pour la position de ce maximum, i.e. la fréquence, et donc pour la section de capture.



Figure V.1 : Courbes calculées pour trois modèles différents (réf. [1]) pour différentes valeurs de σ_s .

Le tableau ci-dessous donne les paramètres obtenus par ajustement successif des trois modèles sur la même courbe expérimentale.

	Modèle A	Modèle B	Modèle C		écart maximum
^N it	5,54 10 ¹⁰	5,63 10 ¹⁰	3,39 10 ¹⁰	$cm^{-2} eV^{-1}$	4,2 %
o p	1,42 10 ⁻¹⁶	0,78 10-16	2,49 10 ⁻¹⁶	cm ²	68,6 %

L'écart relatif entre les valeurs extrêmes confirme les indiquations théoriques de la figure V.1. Nous ne pourrons donc avoir qu'une estimation grossière pour les sections de capture.



ANNEXE VI

INFLUENCE DES PIEGES DE VOLUME SUR

LA MESURE DE CONDUCTANCE [1]

Le silicium le plus pur issu de la technologie actuelle, présente toujours des défauts en faible concentration. Quand les densités d'états d'interface sont également faibles (< 10^{10} cm⁻² eV⁻¹), ces défauts de volume agissent sur la conductance en faible inversion et à basse fréquence.

Une faible valeur de la fréquence (100 Hz, typiquement) est requise pour que l'excitation corresponde au temps de réponse (e_p^{-1}) pour des pièges à trous) des défauts. Pour un niveau d'énergie proche du milieu de la bande interdite et au point de croisement avec le niveau de Fermi (figure VI.1) on a typiquement $e_n \sim e_p \sim c_n n \sim c_p p \sim 10 à 100 s^{-1}$.



Figure VI.1 : Phénomène d'émission et de capture simultanément à l'interface et en volume.

Autour de ce point de croisement, un niveau d'énergie E_T proche de E_i agit comme un centre de génération-recombinaison. La conductance de l'échantillon est donc la résultante d'une contribution des états d'interface et des défauts de volume. On distingue alors deux types de comportement de la courbe G(V) suivant le processus dominant.

Pour les états d'interface, la constante de temps augmente exponentiellement avec le potentiel de surface (éq. 3.27.b). En forte inversion la conductance va donc s'annuler à cause de la réponse quasi instantanée des états d'interface. La courbe G(V) présentera un pic en faible inversion (figure VI.1.a).



Figure VI.1 : Comportement de la courbe G(V) à faible fréquence (typiquement 100 Hz) pour

a) les états d'interfaceb) les pièges de volume.

Au contraire, puisque les concentrations d'électrons et de trous au point de croisement de E_T et E_F sont indépendantes de la polarisation, il n'y a pas de variation de la constante de temps des pièges de volume. Les échanges de porteurs entre les bandes et le niveau piège auront toujours bien lieu avec une constante de temps uniforme et la conductance présentera alors un plateau en forte inversion (figure VI.1.b).

Dès que E_T s'écarte de plus d'un dixième d'électron-volt,

les temps de réponse ne sont plus comparables avec la fréquence de mesure. Par exemple pour $E_T - E_v = 0,45$ eV on a $e_p = c_p \cdot p = 152 s^{-1}$ et $e_n = c_n n = 0,05 s^{-1}$. Comme la constante de temps globale est imposée par le phénomène le plus lent (ici, les échanges avec la bande de conduction), la réponse de ces niveaux pièges n'intervient pas. Seuls les niveaux près du milieu de la bande interdite agissent sur la conductance.

En déplétion, ces niveaux ne croisent pas le niveau de Fermi, la conductance n'est donc pas affectée par les pièges de volume.

ANNEXE VII

CALCUL DE LA REPONSE DLTS PAR DETECTION SYNCHRONE

DOUBLE PHASE

1. - REPONSE DLTS

.

Nous devons calculer l'intégrale suivante

$$R(T) = A \int_{0}^{T} F(t) \int_{E} N_{it}(E) f(E,t) dE dt \qquad (VII.1)$$

avec, une fonction de filtrage F(t) tel que

$$F(t) = 0 \quad \text{pour } 0 < t < T_m/4$$

$$= \frac{2}{T_m} \qquad T_m/4 < t < T_{m/2}$$

$$= 0 \qquad T_m/2 < t < 3T_m/4$$

$$= -\frac{2}{T_m} \qquad 3T_m/4 < t < T_m$$
(VII.2)

et une fonction d'occupation f(E,t) définie par

$$f(E,t) = \exp(-e_p(E).t)$$
(VII.3)

le taux d'émission e_p (E) s'écrit quant à lui
$$e_{p}(E) = e_{p}^{\star} \exp\left(-\frac{E - E_{v}}{kT}\right)$$
(VII.4)

Pour cela on écrit (VII.1) sous la forme

$$R(T) = \frac{2A}{T_m} \begin{cases} T_m/2 & +\infty \\ f_m & T_m/4 & -\infty \end{cases} R(E) \exp(-e_p^{\bigstar} \cdot t e^{-ax}) dx dt$$

$$T_{m} \rightarrow \infty$$

$$-\int \int N_{it}(E) \exp(-e^{\frac{1}{2}}t e^{-ax}) dx dt \} (VII.5)$$

$$3T_{m}/4 -\infty$$

où x = E-E_v et a = 1/kT. L'intégration sur l'énergie peut être étendue de $-\infty$ à $+\infty$ en imposant comme condition aux limites, N_{it} = O en dehors de la bande interdite.

En posant t' = t-T_m/2 l'intégrale de $3T_m/4$ à T_m est ramenée dans l'intervalle T_m/4, T_m/2 et (VII.5) se réduit à

$$R(T) = \frac{2A}{T_m} \int_m^{T_m/2} \int_m^{+\infty} N_{it}(E) \{ \exp(-e_p^{\ddagger} t e^{-ax}) - \exp(-e_p^{\ddagger}(t + \frac{T_m}{2}) e^{-ax}) \} dx dt \quad (VII.6)$$

Posons alors $y = e^{-ax}$, on transforme l'équation précédente en

$$R(T) = \frac{2A}{T_{m}} \int_{m}^{T_{m}/2} \int_{m}^{\infty} \int_{m}^{\infty} \int_{m}^{\infty} \frac{\exp(-e_{p}^{*}t y) - \exp(-e_{p}^{*}(t+T_{m}/2)y)}{y} dy.dt$$

$$I(t) \qquad (VII.7)$$

L'intégrale I(t)en y représente physiquement l'intégration sur le domaine énergétique. Si la densité $N_{it}(E)$ varie peu dans une gamme d'énergie comparable à résolution du filtrage, on peut sortir N_{it} de l'intégration. Alors l'intégration sur y a pour résultat [1]

$$t + T_m/2$$

$$I(t) = Ln - t$$
(VII.8)

et R(T) se réduit à

$$R(T) = \frac{2 A N_{it}}{T_{m} a} \int_{T_{m}/4}^{T_{m}/2} Ln \frac{t + T_{m}/2}{t} dt \qquad (VII.9)$$

dont la primitive est facilement calculable

$$R(T) = \frac{2 A N_{it}}{T_{m} \cdot a} \left[t \ln \frac{t + T_{m}/2}{t} + \frac{T_{m}}{2} \ln \left(t + \frac{T_{m}}{2}\right) \right]$$
(VII.10)

On obtient finalement

$$R(T) = 2 A N_{it} kT \left[\frac{1}{2} Ln 2 - \frac{1}{4} Ln 3 + \frac{1}{2} Ln - \frac{1}{3} \right]$$
(VII.11)

Soit

$$R(T) = A N_{it} kT x 0,432$$
 (VII.12)

2. - RESOLUTION ENERGETIQUE

Pour mettre en évidence la fenêtre d'énergie on écrit la réponse DLTS sous une autre forme identique à celle de l'équation (VII.1)

L'intégrale temporelle est alors une fonction de l'énergie qui s'écrit

$$I(E) = \frac{2}{T_{m}} \begin{cases} \int exp(-e_{p}t)dt - \int exp(-e_{p}t)dt \end{cases}$$
(VII.14)
$$T_{m} T_{m}/4 \qquad 3T_{m}/4 \qquad (VII.14)$$

Le résultat est immédiat

$$I(E) = \frac{2}{T_{m}e_{p}} \left\{ \exp(-e_{p}T_{m}) - \exp(-\frac{3e_{p}T_{m}}{4}) - \exp(-\frac{e_{p}T_{m}}{2}) + \exp(-\frac{e_{p}T_{m}}{4}) \right\}$$
(VII.15)

La simulation numérique est donné à la figure VII.l pour deux températures (77K et 250K). Les paramètres choisis sont indiqués sur la figure.

La résolution (largeur à mi-hauteur) donne 17meV à 77K et 55meV à 250°K ce qui correspond à 2,55 kT. L'amplitude maximum 0,152 est indépendante de la température.

On peut également vérifier la validité de l'équation (3.84) donnant l'énergie E_w du maximum. On a E_w = 0,135 eV à 77°K et 0,488 à 250 K.



Figure VII.1 : Fenêtre d'énergie pour une détection double phase.

. .

· · · · ·

.

. .

ſ

ANNEXE VIII

DISPOSITIF EXPERIMENTAL DE DLTS

1. - MONTAGE ELECTRIQUE

Le banc de mesure employé est très classique (Figure VIII.1). L'ensemble est bâti autour de l'association d'un capacimètre haute fréquence (1MHz) (PAR 410) et d'une détection synchrone double phase (TEKELEC 9602). Un échantillonneurbloqueur empêche la saturation des amplificateurs de la détection par la brusque augmentation de capacité lors du remplissage des pièges (accumulation). On évite la saturation du capacimètre (temps de désaturation pouvant perturber le transitoire) en travaillant avec une ligne de base (capacité au repos) située à moins de 60% du calibre pleine échelle.

La polarisation (ligne de base et impulsion) est fournie par un générateur rapide (PHILLIPS 5770; temps de montée \sim 4 ns). La différence entre les deux voies de la détection est directement faite sur la table traçante (KIPP et ZONEN BD91). On enregistre également la capacité moyenne (peu différente de la capacité au repos) sur la deuxième voie de la table traçante (le filtre d'entrée de la table (5Hz) effectue le moyennage).

Le système cryogénique utilise l'azote liquide. La sonde est constituée par une résistance de platine montée sous l'échantillon.



Figure VIII.1 : Base de mesure DLTS.

2. - LIMITE ET SENSIBILITE

Ce système permet d'observer de manière fiable des variations de capacité aussi faibles que 0,5 fF. Bien que des valeurs théoriquement plus basses soient possible au vu des calibres minima des appareils, le signal devient de l'ordre de grandeur du bruit et des mesures précises ne sont plus possibles. Cette sensibilité $\Delta C/C$ de l'ordre de 10^{-5} permet de mesurer des densités d'états à partir de 2,5 10^{8} (250/T)cm⁻² eV⁻¹ environ. On obtient cette valeur en estimant les valeurs minimales mesurables des paramètres de l'équation (3.83).

Pour finir, signalons la possibilité d'utiliser une DLTS asservie (CC-DLTS) [1] où la capacité est gardée constante par une boucle de contre réaction qui fait varier la polarisation exactement en sens contraire du transitoire de capacité. Dans ce cas, il n'y a aucune influence des inhomogénéités éventuelles du dopage du substrat et la linéarité de la relation $\Delta V_g(\Delta Q_{it})$ semble être meilleure, pour les fortes densités d'états d'interface, que celle de la relation $\Delta C(\Delta Q_{it})$ en DLTS classique [1].

210

.

ANNEXE IX

STATISTIQUE D'OCCUPATION DES DEFAUTS HORS EQUILIBRE

INFLUENCE SUR LES MESURES D'ADMITTANCE

1. - STATISTIQUE HORS D'EQUILIBRE

L'idée originelle d'AGARWAL [1] consiste à utiliser un demi transistor MOS afin de refouler en permanence les porteurs minoritaires hors du canal (figure IX.1). On crée alors une situation hors d'équilibre ($E_{Fp} > E_{Fn}$ pour un substrat n). Il y aura en permanence une génération de porteurs minoritaires. Ce sont alors les taux d'émission e_n et e_p qui dominent les échanges à l'interface.



Figure IX.1 : Structure MOS hors équilibre

Dans cette configuration, on peut représenter les constantes de temps des quatre transitions défaut-bandes sur un même diagramme (figure IX.2). Le point de croissement $e_n = e_p$ définit le niveau d'énergie E_1 déjà défini au chapitre III § 2.1 (équation 3.7)

$$E_{1} = E_{1} + \frac{kT}{2} - Ln \frac{c_{p}}{c_{n}}$$
 (IX.1)

Si on considère les sections de capture σ_n et σ_p constantes sur toute la bande interdite, les constantes de temps $(c_n n)^{-1}$ et $(c_p p)^{-1}$ sont représentées par des droites et l'égalité $c_n n = e_n$ est vérifiée pour le pseudo niveau de Fermi des électrons : E_{Fn} (et de manière similaire pour les trous avec E_{Fn})



Figure IX.2 : Diagramme des constantes de temps et fonction d'occupation des défauts. a) hors équilibre b) à l'équilibre.

On peut très simplement définir à quelles conditions un défaut est plein (f=1) on vide (f=0) d'électrons. Il est plein d'électrons quand c_n n ou e_p sont les processus dominants.

Hors équilibre, on comprend alors facilement l'ancrage de la fonction d'occupation sur le niveau E_1 quelque soit la position de $E_{\rm Fn}$ inférieure à E_1 (polarisation en inversion). Autrement (en déplétion) la fonction d'occupation suit le niveau de Fermi des électrons de la même manière qu'en situation d'équilibre.

2. - INFLUENCE SUR L'ADMITTANCE

A l'équilibre, le terme d'admittance propre à un défaut unique s'écrit sous la forme [2]

$$Y_{it} = \frac{e^2}{kT} - \frac{j\omega N_{it} f_o (1 - f_o)}{1 + j\omega f_o / \sigma_n V_n n_{so}}$$
(IX.2)

où f_o est la fonction de Fermi-Dirac. Hors équilibre, la solution est dans le cas présent

$$Y_{it} = \frac{e^2}{kT} \frac{j\omega N_{it} f (1 - f)}{1 + (e_p / \sigma_n V_n n_{so}) + (j\omega f / \sigma_n V_n n_{so})}$$
(IX.3)

Elle diffère de la solution en équilibre par deux points

- i) f n'est plus la fonction de Fermi-Dirac, elle s'en écarte notablement
- ii) le nouveau terme $(e_p/\sigma_n v_n n_{so})$ devient rapidement grand devant l quand la capacité MOS est en déplétion profonde (voir figure IX.2). Son augmentation quand on polarise plus fortement en déplétion profonde explique l'importante diminution de l'amplitude observée sur les courbes G_p/ω et C_p (figure IX.3). En d'autres termes, puisque l'émission de trous devient "compétitive" vis-à-vis des processus de porteurs majoritaires, le bilan global d'électrons échangés au cours des perturbations imposées par le signal de mesure diminue ce qui entraine une diminution de l'admittance (chap. III § 3.3.1).



Figure IX.3 : Influence du phénomène d'ancrage de la fonction d'occupation sur les mesures d'admittance (réf. [1])

- a) conductance équivalente G_p b) capacité équivalente C_p.

Avec le phénomène d'ancrage, la constante de temps caractéristique observée par $G(\omega)$ est

 $\tau = e_n^{-1} = e_p^{-1} \tag{IX.4}$

évaluée au niveau d'énergie E_1 . Contrairement à ce qui se passe à l'équilibre (éq. 3.27) elle ne dépend plus du potentiel de surface. Cela explique le faible décalage en fréquence des courbes G_n/ω (ω) avec la polarisation (figure IX.3).

Ce comportement (décroissance importante du maximum de la courbe G_p/ω (ω) et faible décalage en fréquence) est donc une indication expérimentale d'une action d'ancrage de la fonction d'occupation des défauts causé par un fonctionnement hors équilibre de la structure MOS.



ANNEXE X

PHENOMENE DE CUT-OFF SUR LES SPECTRES D.L.T.S.

D'ETATS D'INTERFACE

Lors du retour à l'équilibre, les états d'interface situés au-dessus du niveau de Fermi à la surface émettent les électrons piégés (pour une capacité MOS de type n). Ces états participent donc au signal transitoire détecté par la D.L.T.S.. Au cours de la remontée en température la fenêtre d'énergie évolue de la bande de conduction vers le milieu de la bande interdite (chap. III, § 4.2.1, figure 3.35) suivant la relation (3.84) que nous redonnons ci-dessous

 $E_{c} - E_{w} = kT Ln \frac{\sigma_{n} \gamma_{n} T^{2}}{e_{no}}$ (X.1)

En même temps, le niveau de Fermi s'éloigne de la bande de conduction puisque

$$(E_c - E_F)_{surf} = e |\psi_s| + (E_c - E_F)_{volume}$$
 (X.2)

où

$$(E_{c} - E_{F})_{volume} = kT Ln \frac{N_{c}}{N_{D}}$$
(X.3)

Tant que $E_c^{-E_w}$ est inférieur à $(E_c^{-E_F})_{surf}$ les électrons piégés sont normalement émis vers la bande de conduction (figure X.1.a). Mais dès que $E_c^{-E_w}$ est supérieur à $(E_c^{-E_F})_s$ les pièges

détectables par la technique DLTS n'émettent plus d'électrons (figure X.1.b), ce qui se traduit par une décroissance brutale du spectre D.L.T.S., caractéristique du phénomène de "cut off". La figure X.l.c illustre les variations $E_c - E_w$ et de $(E_c - E_F)_S$ pour deux valeurs du potentiel de surface en déplétion. L'égalité E_c- $E_w = (E_c - E_F)_S$ défini la température de cut-off T_{co} .





200



a) situation avant la température de cut-off ${\it T}_{_{CO}}$ b) situation après la température de cut-off ${\rm T}_{\rm CO}$ c) Evolution du niveau de Fermi à la surface et de

300

la fenêtre d'énergie.

Quand le potentiel de surface est bien défini, le phénomène de cut-off fourni des informations supplémentaires sur les pièges d'interface [1]. En cas de fluctuations importantes du potentiel de surface, ψ_s est difficilement contrôlable, de plus si ψ_s varie fortement et de façon non linéaire en température on peut observer un phénomène de double cut-off [2] qui laisse un "trou" dans le spectre D.L.T.S. entre deux températures.

ANNEXE XI

MESURE DES SECTIONS DE CAPTURE

Nous avons compilé sur la figure XI.l les principaux résultats obtenus par $G(\omega)$ et D.L.T.S.. Nous y avons également reporté nos mesures en $G(\omega)$ une fois effectuée la correction résultant du phénomène d'ancrage.

La dispersion des résultats est importante. Elle s'explique par l'imprécision des méthodes employées (influence ou non des fluctuations du potentiel de surface). Un exemple typique : le comportement de σ_p obtenu par TREDWELL [3] sur des échantillons de type p qui est certainement un artefact dû au potentiel de surface.

La dépendance en température n'est pas mieux définie. Toutes les situations ont été observées :

i) σ indépendant de la température (ou très faiblement dépendant). C'est le cas en G(ω) [4] de façon assez unanime, mais aussi en D.L.T.S. (SCHULZ-JOHNSON [7], YAMASAKI et al. [5])

ii) σ augmente avec la température (TREDWELL [3])

iii) σ diminue quand la température augmente (KATSUBE et al.[2], TREDWELL [3] sur du type p).



Figure X.1 : Compilation des mesures de sections de capture

Туре п

□ d'après EADES-SWANSON [1] (ER.DLTS) $\triangle d'après KATSUBE et al. [2] (DLTS)$ ▲ d'après TREDWELL et al. [3] (ER.DLTS) - d'après DEULING et al. [4] $(G(\omega))$ $- - d'après YAMASAKI et al. [5] (G(\omega))$ Od'après YAMASAKI et al [5] (DLTS) \Rightarrow nos résultats (CN 1.2) (G(ω)) Туре р ▼d'après TREDWELL et al. [3] (ER.DLTS) • d'après JOHNSON et al. [6] (ER.CC DLTS) + nos résultats (LV 1.1) (G(ω)).

222

Ces résultats ne permettent pas de valider clairement les différents modèles théoriques proposés à ce jour : modèle multiphonon [8] de cascade de phonons [9], effet Schottky interne [2].

ANNEXE XII

DEFINITION DE LA CHARGE D'INVERSION

La définition rigoureuse de la charge d'inversion, liée à la présence des porteurs minoritaires près de l'interface est

$$q_{i} = -e \int_{0}^{\infty} n(x) dx \qquad (XII.1)$$

ou en terme de potentiel

$$q_{i} = -e \int_{0}^{0} n(\psi) \left(\frac{dx}{d\psi}\right) d\psi \qquad (XII.2)$$

Dans la mesure où toute la charge se trouve concentrée près de la surface (figure XII.1), on peut approximer $dx/d\psi$ par la pente à l'origine $(dx/d\psi)_S$ (i.e. à la surface).



Figure XII.1 : Concentration des minoritaires et potentiel de surface Dans ce cas

$$q_{i} # -e \left(\frac{dx}{d\psi}\right) \int_{s}^{0} n(\psi) d\psi \qquad (XII.3)$$

or

$$n(x) = n_{\infty} \exp \frac{e\psi(x)}{kT}$$
(XII.4)

et dans l'approximation de déplétion c'est-à-dire, dans la limite ou q_i est faible devant q_d pour ne pas distordre fortement le potentiel près de la surface, on a (voir § 3.2 du chapitre I).

$$\psi(x) = \psi_{s} \left(1 - \frac{x}{w_{d}}\right)^{2}$$
 (XII.5)

donc

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{s} = -\frac{2\psi_{s}}{W_{d}}$$
 (XII.6)

Le calcul de l'intégrale (I.3) donne dans ce cas

$$q_{i} = \frac{eW_{d} n_{\infty}}{2\beta\psi_{s}} (1 - e^{\beta\psi_{s}})$$
(XII.7)

On obtient facilement le terme $W^{}_{\rm d}/2\psi^{}_{\rm S}$ à partir de la capacité de déplétion

$$C_{d} = \frac{|q_{d}|}{\psi_{s}} = \frac{\varepsilon_{s}}{W_{d}/2}$$
(XII.8)

dans laquelle la largeur $W_d/2$ résulte de notre approximation (voir figure I.1).

Finalement

.

$$q_i = -\frac{\varepsilon_s kT}{|q_d|} n_\infty (e^{\beta \psi_s} -1)$$

(XII.9)

227

. .

.

. .

.

ANNEXE XIII

CALCUL DU TAUX DE GENERATION

Dans cette annexe nous exprimons de la manière la plus générale possible, le taux de génération pour un niveau unique dans la bande interdite.

1. - DEFINITIONS

Considérons un niveau d'énergie E_T , en concentration N_T (figure XIII.1). Les sections de captures pour les électrons et les trous sont respectivement σ_n et σ_p .



Figure XIII.1 : Mécanisme de capture-émission

Les taux d'émission et de capture sont définis par

- l'émission d'un électron

$$g = e_n N_T^{\dagger} f$$

(XIII.1)

- l'émission d'un trou

 $g' = e_p N_T (1-f) \qquad (XIII.2)$ $- la capture d'un électron \qquad (XIII.3)$ - la capture d'un trou $r' = c_p p N_T f \qquad (XIII.4)$

$$f = n_{\rm T}/N_{\rm T}$$
(XIII.5)

est la fonction d'occupation du défaut.

L'état d'occupation des bandes de valence et de conduction, est à l'équilibre thermodynamique

$$n_{o} = N_{c} \exp \frac{E_{F} - E_{c}}{kT} = n_{i} \exp \frac{E_{F} - E_{i}}{kT}$$
 (XIII.6)

$$p_{o} = N_{v} \exp \frac{E_{v} - E_{F}}{kT} = n_{i} \exp \frac{E_{i} - E_{F}}{kT}$$
(XIII.7)

et hors d'équilibre

$$n = n_{o} + \Delta n = N_{c} \exp \frac{E_{Fn} - E_{c}}{kT}$$
(XIII.8)

$$p = p_{o} + \Delta p = N_{v} \exp \frac{\frac{E_{v} - E_{Fp}}{kT}}{kT}$$
(XIII.9)

Il est commode de définir la quantité ${\bf n}_1$: densité d'électrons quand le niveau de Fermi coı̈ncide avec ${\bf E}_{\rm T}.$

$$n_1 = n_0 \exp \frac{E_T - E_F}{kT} = n_i \exp \frac{E_T - E_i}{kT}$$
 (XIII.10)

et de même

$$p_{1} = p_{0} \exp \frac{E_{F} - E_{T}}{kT} = n_{1} \exp \frac{E_{1} - E_{T}}{kT}$$
 (XIII.11)

2. - STATISTIQUES D'OCCUPATION, NEUTRALITE DU SEMICONDUCTEUR

Les équations de continuité, gouvernent l'état d'occupation des bandes de valence et conduction hors d'équilibre. Dans la limite où i) il n'y a pas de génération par stimulation extérieure (excitation lumineuse par exemple) $g_E = 0,ii$) il n'y a pas de courant de diffusion div $J_n = 0$. Les équations de continuité sont alors

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{t}} = (\mathbf{g} - \mathbf{r}) \tag{XIII.12.a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (g' - r') \qquad (XIII.12.b)$$

Dans notre cas, seule l'équation pour les électrons nous intéresse puisque le taux de génération des minoritaires s'écrit simplement

$$G = \frac{\partial n}{\partial t}$$
(XIII.13)

A partir de (XIII.1) et (XIII.3) et en explicitant l'expression de e_n , on obtient

$$G = \frac{1}{\tau_{no}} [n_1 f - n(1 - f)]$$
(XIII.14)

avec

$$\tau_{no} = (c_n N_T)$$
 (XIII.15.a)
 $\tau_{po} = (c_p N_T)$ (XIII.15.b)

A l'équilibre thermodynamique, la fonction d'occupation f est égale à la fonction de Fermi-Dirac $f_{\rm FD}$

$$f_{FD} = \frac{1}{1 + \exp \frac{E_T - E_F}{kT}}$$
(XIII.16)

qui s'écrit aussi

 $f_{FD} = \frac{n_o}{n_o + n_1} = \frac{p_1}{p_1 + p_o}$ (XIII.17)

quand on utilise les définitions du paragraphe 1.

Hors d'équilibre, la neutralité électrique est globalement gardée dans le semiconducteur. L'excès de charge sur le défaut est égale, au signe près, à l'excès de charge sur les bandes de valence et conduction

$$e [n_{T} - f_{FD} N_{T}] = -e (\Delta n - \Delta p)$$
(XIII.18)

On obtient, à partir de cette condition, l'expression suivante pour la fonction d'occupation du défaut

$$f = f_{FD} + \frac{\Delta p - \Delta n}{N_T}$$
(XIII.19)

Dans ces conditions, l'équation (XIII.14) donnant le taux de génération devient

$$G = \frac{d\Delta n}{dt} = \frac{1}{\tau_{no}} \left\{ \frac{(n_1+n)(\Delta p - \Delta n)}{N_T} - \frac{n_1 \Delta n}{n_0 + n_1} \right\}$$
(XIII.20)

De façon similaire

$$\frac{d\Delta p}{dt} = \frac{1}{\tau_{po}} \left\{ \frac{(p_1 + p)(\Delta n - \Delta p)}{N_T} - \frac{p_1 \Delta p}{p_0 + p_1} \right\}$$
(XIII.20.b)

3. - CAS D'UNE FAIBLE CONCENTRATION DE DEFAUT

Si N_T est faible, l'excès de charges piégées sur le défaut est négligeable et $\Delta n \# \Delta p$. L'égalité entre les équations (XIII.20.a et b) permet d'éliminer N_T en injectant l'une des équations dans l'autre. Ce qui donne

$$G = -\frac{1}{\tau_{no}(p_{1}+p)+\tau_{po}(n_{1}+n)} \left\{ \frac{(n_{1}+n)p_{1}\Delta p}{p_{o}+p_{1}} + \frac{(p_{1}+p)n_{1}\Delta n}{n_{o}+n_{1}} \right\} (XIII.21)$$

Le terme entre crochets se simplifie en tenant compte de l'égalité (XIII.17) et de la relation $n_0 p_0 = n_1 p_1$.

$$G = -\frac{\Delta n \ (n_{0} + p_{0} + \Delta n)}{\tau_{n0}(p_{1} + p) + \tau_{p0} \ (n_{1} + n)}$$
(XIII.22.a)

Expression qui s'écrit également sous la forme plus connue

$$G = \frac{n_{i}^{2} - np}{\tau_{no}(p_{i}+p) + \tau_{po}(n_{i}+n)}$$
(XIII.22.b)

La limite de validité de cette approximation est donnée par BLAKEMORE [1]. Elle s'énonce

$$N_{\rm T} \ll p_0 \bar{N}$$
 (XIII.23)

pour un semiconducteur de type $p.\bar{N}$ est une quantité sans dimension qui vaut c_p/c_n au milieu de la bande interdite et dont la variation en fonction de l'énergie est donnée figure XIII.2.



Figure XIII.2 : Limite de validité du modèle à faible concentration de défauts.(ref. [1]).

4. - CAS D'UN CENTRE DE GENERATION DANS LA ZONE DE DEPLETION

Pour un défaut de volume, tel que la génération ait lieu sur une distance b-a [2] comprise dans la zone de déplétion W_d (figure XIII.3), on peut négliger les concentrations de porteurs libres n et p.



Figure XIII.3 : Génération intrinsèque dans la zone de déplétion.

L'équation (XIII.22.b) se réduit alors à

$$G = \frac{r_{i}}{\tau_{po} \exp \frac{E_{T} - E_{i}}{kT} + \tau_{no} \exp \frac{E_{i} - E_{T}}{kT}}$$

(XIII.24)

On trouve directement ce résultat en écrivant

$$G = e_n n_T$$
(XIII.25)

Le défaut est uniquement un centre de génération, il n'y a donc pas rétention de charges sur le niveau. Le nombre d'électrons émis est égal au nombre de trous émis

$$\mathbf{e}_{\mathbf{n}}\mathbf{n}_{\mathbf{T}} = \mathbf{e}_{\mathbf{p}} \left(\mathbf{N}_{\mathbf{T}} - \mathbf{n}_{\mathbf{T}}\right) \tag{XIII.26}$$

En tirant $n_{\rm T}$ de cette équation, on obtient

$$G = \frac{e_n \cdot e_p}{e_n + e_p} N_T$$
(XIII.27)

qui redonne (XIII.24) en remplaçant e_n et e_p par les expressions en fonction de l'énergie E_T du défaut.

$$e_n = c_n n_i \exp \frac{E_T - E_i}{kT}$$
(XIII.28.a)

 $e_{p} = c_{p}n_{i} \exp \frac{E_{i}-E_{T}}{kT}$ (XIII.28.b)

Nous avons décrit ici les différentes formulations du taux de génération des porteurs minoritaires du cas le plus général au plus restrictif.



ANNEXE XIV

EQUATION DE VARIATION DE LA CHARGE D'INVERSION

Le point de départ est l'équation (7.7) du chapitre VII dans laquelle nous introduisons la vitesse de variation de la température V = dT/dt

$$\left(\begin{array}{c} \frac{d|q_{i}|}{dT} \\ \frac{dT}{\psi} \\ s \end{array}\right) = \frac{eG}{v} (b-a)$$
(XIV.1)

1. - EXPRESSION DE (b-a)

La distance b est définie comme la distance du point vérifiant

$$\frac{E_T + E_F p}{2} = E_1 \tag{XIV.2}$$

et pour a, de manière similaire

$$\frac{E_{T}+E_{Fn}}{2} = E_{1}$$
(XIV.3)

Donc, on peut exprimer la courbure de bandes en a et b

 $e\psi$ (b) = E_1 (∞) - E_1 (b) (XIV.4)

on a également
$$e\psi$$
 (b) = E_T (∞) - E_T (b) (XIV.5)

En combinant (XIV.5) et (XIV.2) on écrit (XIV.4) sous la forme

$$e\psi$$
 (b)/2 = E_1 (∞) - ($\frac{E_T + E_F p}{2}$) (XIV.6)

De même

$$\frac{e\psi(a)}{2} = E_1 (\infty) - (\frac{E_T + E_{Fn}}{2})_{\infty}$$
(XIV.7)

Par différence de ces deux équations

$$e \{ \psi (b) - \psi (a) \} = E_{Fn} - E_{Fp}$$
 (XIV.8)

Si a et b sont suffisamment proches de l'interface, $\psi(b)$ - $\psi(a)$ est approximé par (b-a) $(d\psi/dx)_S$, où la dérivé de ψ_S est calculée à la surface.

Ainsi

$$b - a \sim \frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{e(\frac{d\psi}{dx})_{s}}$$
(XIV.9)

Il n'y a plus de génération quand $E_{Fn} = E_{Fp}$.

2. - EXPRESSION DE (E_{Fn}-E_{Fp})

La différence entre les pseudo-niveaux de Fermi dépends de la charge d'inversion.

A partir de l'équation (7.4), on a

$$|q_{i}| = \frac{k\varepsilon_{s}T n_{\infty} (e^{\beta \psi_{s}} - 1)}{|q_{d}|}$$
(XIV.10)

Dans cette équation n_{∞} , la concentration en porteurs minoritaires à l'infini dans le semiconducteur s'écrit

$$n_{\infty} = n_{i} \exp \frac{E_{Fn} - E_{i}}{kT} = n_{o^{\infty}} \exp \frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{kT}$$
(XIV.11)

où $n_{o\infty} = n_i^2/N_A$ représente la valeur finale quand la zone d'inversion est complètement formée.

L'équation (XIV.10) devient alors

$$|q_{i}| = \frac{\varepsilon_{s} kT}{|q_{d}|} \frac{n_{i}^{2}}{N_{A}} (e^{\beta \psi_{s}} - 1) \exp \frac{\varepsilon_{Fn} - \varepsilon_{Fp}}{kT}$$
(XIV.12)

où

$$|q_{io}| = \frac{\varepsilon_s kT}{|q_d|} n_{o^{\infty}} (e^{\beta \psi_s} - 1)$$
 (XIV.13)

représente, par analogie avec (XIV.10) la charge finale d'inversion. Donc, la différence des pseudo-níveaux de Fermi est

$$E_{Fn} - E_{Fp} = kT \ln \frac{|q_i|}{|q_{io}|}$$
 (XIV.14)

3. - VARIATION DE LA CHARGE D'INVERSION

En regroupant les équations (XIV.1), (XIV.9) et (XIV.14) on obtient l'équation différentielle en q_i

$$\left(\frac{d|q_{i}|}{dT}\right)_{\psi_{s}} = \frac{G \varepsilon_{s}}{v|q_{d}|} kT Ln \frac{|q_{i}|}{|q_{io}|}$$
(XIV.15)

qui gouverne la variation de la charge d'inversion en fontion du taux de génération G, de la température T, et du potentiel de surface.

240

•

ANNEXE XV

RESOLUTION NUMERIQUE : SYNOPTIQUE DU PROGRAMME

Nous donnons ci-après le schéma synoptique du programme permettant la résolution du système d'équations défini au tableau 7.II du chapitre VII.

Le programme est écrit en Basic sur un HP 9826. Nous utilisons 100 points en température entre T_i et T_f , ce qui donne 200 points avec les calculs des points intermédiaires nécessaires pour résoudre les équations différentielles par la méthode Runge-Kutta.

L'intégration par Simpson pour le taux de génération est également réalisée sur 100 points.

L'erreur maximum des méthodes numériques est de 0,95 %. Elle est mise en évidence en faisant un passage de $T_i a T_f$ puis de T_f à T_i et en comparant les valeurs de capacité à la température T_i . On a $C_{ini} = 62,8$ pF et on obtient après l'aller et retour $C_{ini} = 63,4$ pF pour l'échantillon IB1.1.





BIBLIOGRAPHIE

INTRODUCTION

Y.C. CHENG 1. Progress in Surface Science 8,181 (1971). 2. J.D. PLUMMER et B.E. DEAL Progress and device simulation for MOS-VLSI circuits, Sogesta-Urbino (Italie), Juillet 1982. 3. T. SUKARAI et T. SUGANO J. Appl. Phys. 52, 2889 (1981). 4. D.V. LANG J. Appl. Phys. 45, 3023 (1974). E.H. NICOLLIAN et A. GOETZBERGER 5. Bell Syst. Tech. J. 46, 1055 (1967). CHAPITRE I : 1. S.M. SZE Physics of semiconductor Devices, Wiley, 2nd edition (1981). 2. E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS MOS physics and technology, Wiley, (1982). 3. A.B. GLASER et G.E. SUBAK-SHARPE Integrated circuits ingeneering, Addison-Wesley (1979). D.P. KENNEDY, P.C. MURLEY et W. KLEINFELDER 4. IBM J. Res. Develop. 12, 399 (1968) et 13, 212 (1969). J.R. BREWS 5. IEEE Trans. Electron Devices ED-26, 1696 (1979). 6. D.J. BARTELINK Appl. Phys. Lett. 38 (6), 461 (1981). 7. F. STERN CRC Critical Review in Solid States Sciences 5, 499 (1974).

CHAPITRE II

1.	Voir par exemple le chapitre 2 p. 55 à 74 dans The Physics of SiO ₂ and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES,
2.	H.R. PHILLIP
	Solid State Commun. 4, 73 (1966).
	J. Phys. Chem. Sol. 32, 1935 (1971).
3.	T. SUKARAI et T. SUGANO
	J. Appl. Phys. 52, 2889 (1981).
4.	M. LANNOO et G. ALLAN
	Solid State Comm. 28, 733 (1978).
5.	Voir pour une synthèse
	D.J. MARIA
	The physics of SiO $_2$ and its interfaces, 160 (1978).
	Ed. par S.T. PANTELIDES.
6.	Un grand nombre de résultats sont donnés dans The Physics of
	SiO $_2$ and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES Chapitre 4
	(1978).
	The Physics of MOS insulators, Ed. par G. LUCOVSKY et al.
	Chapitre 3 (1980).
7.	G. LUCOVSKI et D.J. CHADI
	The physics of MOS insulators, Ed. par Lucovsky et al., 301
0	(1980).
ð.	Y.C. CHENG
0	M LANNOO at L POUDCOIN
7.	Point defects in somiconductors I. Springer Verleg (1981)
10	R B LAUCHIIN I D TOANNOPOULOS of D I CHADI
10.	The Physics of SiO ₂ and its interfaces. Ed. par S.T.
	PANTELIDES. 321 . (1978).
11.	Y. NISHI
	Jap. J. Appl. Phys. 10, 52 (1971).
12.	P.J. CAPLAN, E.H. POINDEXTER, B.E. DEAL et R.R. RAZOUK
	J. Appl. Phys. 50, 5847 (1979).
13.	E.H. POINDEXTER et D.J. CAPLAN
	Progress in Surface Science 14, 201 (1983).
14.	K.L. BROWER
	Appl. Phys. Lett. 43, 1111 (1983).
15.	N.M. JOHNSON et al.
	Appl. Phys. Lett. 43, 563 (1983).
16.	E.H. NOCOLLIAN et J.R. BREWS
	MOS Physics and Technology, Wiley (1982).

CHAPITRE III

1.	L.M. TERMAN
	Solid State Electron. 5, 285 (1962).
2.	P.V. GRAY et D.M. BROWN
	App1. Phys. Lett. 8, 31 (1966).
3.	C.N. BERGLUND
	IEEE Trans. Electron. Devices ED-13, 701 (1966).
4.	M. KUHN
	Solid State Electron. 13, 873 (1970).
5.	R. CASTAGNE et A. VAPAILLE
	Surf. Sci. 28, 557 (1971).
	Electron. Lett. 6, 691 (1970).
6.	E. ROSENCHER et D. BOIS
	Electron. Lett. 18, 545 (1982).
7.	M.R. BOUDRY
	Appl. Phys. Lett. 22, 530 (1973).
8.	E.H. NICOLLIAN et A. GOETZBERGER
	Bell Syst. Tech. J. 46, 1055 (1967).
9.	D.V. LANG
	J. Appl. Phys. 45, 3023 (1974).
10.	W. SHOCKLEY et W.T. READ
	Phys. Rev. 87, 835 (1952).
11.	J. BOURGOIN et M. LANNOO
	Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag, 159
	(1983).
12.	M.H. GALLATI
	Thèse de Docteur-Ingénieur, Lille (1982).
13.	E. KAMIENECKI
	Appl. Phys. Lett. 35, 807 (1979).
14.	R. COPPARD
	Thèse de Docteur-Ingénieur, Paris (1984).
15.	K. ZIEGLER et E. KLAUSMANN
	Appl. Phys. Lett. 28, 678 (1976).
16.	K. ZIEGLER
	Appl. Phys. Lett. 32, 249 (1978).
17.	K. LEHOVEC et A. SLOBODSKOY
• •	Solid State Electron. 7, 59 (1964).
18.	E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS
	MOS Physics and technology, Wiley (1982).
19.	J.A. COOPER et R.J. SCHWARTZ
~~	Solid State Electron. 17, 641 (1974).
20.	G. DECLERCK, R. VAN OVERSTRAETEN et G. BROUX
	Solid State Electron. 16, 1451 (1973).

H. DEULING, E. KLAUSMANN et A. GOETZBERGER 21. Solid State Electron. 15, 559 (1972). P.A. MULS, G. DECLERCK et R. VAN OVERSTRAETEN 22. Solid State Electron. 20, 911 (1971). 23. J.R. BREWS J. Appl. Phys. 43, 2306 (1972). 24. A. SINGH et J.G. SIMMONS Solid State Electron. 25, 219 (1982). 25. G. BACCARANI et al. Alta Frequenza 40, 310E (1971). 26. J.R. BREWS Solid State Electron. 26, 711 (1983). 27: A. SHER et al. J. Appl. Phys. 54, 5183 (1983). 28. A.K. AGARWAL et al. Appl. Phys. Lett. 43, 465 (1983). A.K. AGARWAL et M.H. WHITE J. Appl. Phys. 55, 3682 (1984). 29. K. YAMASAKI et al. Jap. J. Appl. Phys. 18, 113 (1979). 30. M. SCHULZ et N.M. JOHNSON Solid State Comm. 25, 481 (1978). 31. D. PONS Thèse de Docteur-Ingénieur, Paris (1979). 32. E. ROSENCHER, V. MOSSER et G. VINCENT Solid State Comm. 45, 629 (1983). 33. A. BLOSSE Thèse de Docteur Ingénieur, Lille (1981). A. BRONIATOVSKI et al. J. Appl. Phys. 54, 2907 (1983). 34. G. VINCENT Thèse de Doctorat d'Etat, Lyon (1978). 35. T. KATSUBE et al. J. Appl. Phys. 52, 3504 (1981). 36. N.M. JOHNSON Appl. Phys. Lett. 34, 802 (1979). T.J. TREDWELL 37. Solid State Electron. 23, 1171 (1980). CHAPITRE IV

,

 E. ROSENCHER et D. BOIS Electron. Lett. 18, 545 (1982).

2. M.R. BOUDRY Appl. Phys. Lett. 22, 530 (1973). 3. G. DECLERCK, R. VAN OVERSTRAETEN et G. BROUX Solid State Electron, 16, 1451 (1973). 4. M. CONTI, M.V. FISCHETTI et R. GASTALDI Solid State Electron. 25, 5 (1982). 5. A. SINGH et J.G. SIMMONS Solid State Electron, 25, 219 (1982). 6. A.K. AGARWAL et M.H. WHITE J. Appl. Phys. 55, 3682 (1984). 7. H. DEULING, E. KLAUSMANN et A. GOETZBERGER Solid State Electron. 15, 559 (1972). T.W. HICKMOTT et R.D. ISSAC 8. J. Appl. Phys. 52, 3464 (1981). 9. W. FAHRNER et A. GOETZBERGER Appl. Phys. Lett. 17, 16 (1970). 10. K. ZIEGLER et E. KLAUSMANN Appl. Phys. Lett. 28, 678 (1976). K. ZIEGLER 11. Appl. Phys. Lett. 32, 249 (1978). 12. T.H. DISTEPHANO Appl. Phys. Lett. 19, 280 (1971). J. Appl. Phys. 44, 527 (1973). 13. R. WILLIAMS et M.H. WOODS J. Appl. Phys. 43, 4142 (1977). 14. W.R. BOTTOMS, P. ROITMAN et D.C. GUTERMAN CRC Crit. Rev. Solid State Phys. 297-311 (Oct. 1975). E.H. NICOLLIAN et A. GOETZBERGER 15. IEEE Trans. Elect. Devices ED-12, 108 (1965). M. SCHULZ et N.M. JOHNSON 16. Appl. Phys. Lett. 31, 622 (1977). 17. N.M. JOHNSON, D.J. BARTELINK et M. SCHULZ The Physics of SiO₂ and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES (1978). 18. T.J. TREDWELL et C.R. VISWANATHAN Solid State Electron. 23, 1171 (1980). 19. N.M. JOHNSON et al. Appl. Phys. Lett. 43, 563 (1983). 20. R. COPPARD et E. ROSENCHER Communication privée. 21. O. ENGSTROM et A. ALM J. Appl. Phys. 54, 5240 (1983). J. BOURGOIN et M. LANNOO 22. Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag (1983).

 J.A.. VAN VECHTEN et C.D. THURMOND Phys. Rev. B 14, 3539 (1976).
J.L. PAUTRAT J. Appl. Phys. 56, 352 (1984).

CHAPITRE V

1. E. ROSENCHER Communication privée. 2. A. BLOSSE et J.C. BOURGOIN Appl. Phys. A, 34, 1 (1984). 3. E.N. KOROL Sov. Phys. Sol. Stat. 19, 1327 (1977). 4. G. VINCENT Thèse de Doctorat d'Etat, Lyon (1978). 5. W.E. DAHLKE et D.W. GREVE The Physics of MOS insulators, Ed. par G. Lucovsky et al., 232 (1980). 6. Voir par exemple une synthèse dans D.J. DIMARIA The physics of SiO2 and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES, 160 (1978). 7. E.H. NICOLLIAN, C.N. BERGLUND, P.F. SCHMIDT et J.M. ANDREWS J. Appl. Phys. 42, 5654 (1971). R.F. DEKEERSMAECKER, D.J. DIMARIA et S.T. PANTELIDES 8. The physics of SiO₂ and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES, 189 (1978). 9. M. ITSUMI J. Appl. Phys. 54, 1930 (1983). 10. J.H. NING J. Appl. Phys. 49, 5997 (1978). 11. M. AV-RON et al. The Physics of SiO₂ and its interface, Ed. par S.T. PANTELIDES, 46 (1978). 12. M.H. GALLATI Thèse de Docteur-Ingénieur, Lille (1982). 13. F.P. HEIMAN et G.WARFIELD IEEE Trans. Electron. Devices ED-12, 167 (1965). 14. H. PREIER Appl. Phys. Lett. 10, 361 (1967). 15. A.A. KHAN, J.A. WOOLLAM et Y. CHUNG J. Appl. Phys. 55, 4299 (1984).

CHAPITRE VI

- N.M. JOHNSON et al. The physics of SiO₂ and its interfaces, Ed. par S.T. PANTELIDES (1978).
- R.J. SINGH et R.S. SRIVASTAVA Solid State Electron. 25, 227 (1982).
- K. YAMASAKI et al. Jap. J. Appl. Phys. 18, 113 (1979).
- M.H. GALLATI Thèse de Docteur Ingénieur, Lille (1982).
- 5. E. ROSENCHER Communication privée.
- W. FAHRNER et A. GOETZBERGER Appl. Phys. Lett. 21, 329 (1972).
- N. WILL, K. HOFMANN et M. SCHULZ Insulating films on semiconductors INFOS 83 Ed. par J.F. VERWEIJ et D.R. WOLTERS, EINDHOVEN (1983).

CHAPITRE VII

- C.T. SAH et H.S. FU Phys. Stat. Sol. (a) 11, 297 (1972). Phys. Stat. Sol. (a) 14, 59 (1972).
- T.W. COLLINS et J.N. CHURCHILL IEEE Trans. Electron. Devices 22, 90 (1975).
- U. KEBERLAU et R. KASSING Solid State Electron. 22, 37 (1979). Solid State Electron. 24, 321 (1981).
- J. MULLER et B. SCHIECK Solid State Electron. 13, 1319 (1970).
- P.D. TONNER et J.G. SIMMONS Solid State Electron. 25, 733 (1982).
- J. BOURGOIN et M. LANNOO Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag (1983).

ANNEXE I

1.	E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS
	MOS Physics and Technology, Wiley, 104-139 (1982).
2.	J. BOURGOIN et M. LANNOO
	Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag (1983).
3.	F.P. HEIMAN
3.	Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag (1983 F.P. HEIMAN

IEEE Trans. Elect. Devices ED-14 (1967).

 M. KUHN Solid State Electron., 13, 873 (1970).

ANNEXE II

 H. DEULING et al. Solid State Electron. 15, 559 (1972).

ANNEXE III

- R. CASTAGNE et A. VAPAILLE Surf. Sci. 28, 557 (1971). Electron. Lett. 6, 691 (1970).
- G. BACCARANI et al. Appl. Phys. Lett. 23, 265 (1973).
 E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS
- MOS Physics and Technology, Wiley (1982).
- 4. T.M. DISTEPHANOJ. Appl. Phys. 44, 527 (1973).

ANNEXE IV

 E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS MOS Physics and Technology, Wiley, 228 (1982).

ANNEXE V

 P.A. MULS, G. DECLERCK et R. VAN OVERSTRAETEN Solid State Electron. 20, 911 (1971).

ANNEXE VI

 E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS MOS Physics and Technology, Wiley (1982).

ANNEXE VII

 J.S. GRADSHTEYN et I.W. RYZHIK Table of integrals series and products, Academic Press, 334 (1965).

ANNEXE VIII

1. N.M. JOHNSON et al. The Physics of SiO_2 and its interfaces, Edité par S.T. PANTELIDES, 421 (1978).

ANNEXE IX

- A.K. AGARWAL et M.H. WHITE J. Appl. Phys. 55, 3682 (1984).
- E.H. NICOLLIAN et A. GOETZBERGER Bell Syst. Tech. J. 46, 1055 (1967).

ANNEXE X

- T.J. TREDWELL et C.R. VISWANATHAN Solid States Electron., 23, 1171 (1980).
- M.H. GALLATI Thèse de Docteur-Ingénieur, Lille (1982).

ANNEXE XI

1.	W.D. EADES et R.M. SWANSON
	Appl. Phys. Lett., 44, 988 (1984).
2.	T. KATSUBE et al.
	J. Appl. Phys. 52, 3504 (1981).
3.	T.J. TREDWELL
	Solid State Electron., 23, 1171 (1980).
4.	H. DEULING et al.
	Solid State Electron. 15, 559 (1972).
5.	K. YAMASAKI et al.
	Jap. J. Appl. Phys. 18, 113 (1979).
6.	N.M. JOHNSON
	J. of Vac. Sci. and Tech. (1979).
7.	M. SCHULZ et N.M. JOHNSON
	Appl. Phys. Lett. 31, 622 (1977).
8.	C.H. HENRY et D.V. LANG
	Phys. Rev. B, 593 (1976).
9.	M. LAX
	Phys. Rev. 119, 1502 (1960).

ANNEXE XIII

1. J.S. BLAKEMORE

Semiconductor Statistics, Pergamon (1962).

 J. BOURGOIN et M. LANNOO Point Defects in Semiconductors II, Springer Verlag (1983).



RESUME

Les défauts à l'interface silicium-oxyde sont étudiés sur des capacités M.O.S. (Metal-oxyde-semiconducteur) par deux techniques complémentaires de caractérisation : une technique harmonique de mesure de conductance, $G(\omega)$ et une méthode spectroscopique transitoire, D.L.T.S. (Deep Level Transient Spectroscopy). La comparaison entre les deux techniques désigne la D.L.T.S. comme étant la plus performante.

Deux phénomènes physiques à l'interface sont ensuite étudiés par DLTS. L'échange de porteurs, par effet tunnel, entre le substrat et les pièges d'oxyde près de l'interface (< 20 Å) est détecté uniquement sur des échantillons de type n. De même un défaut ponctuel à l'interface est observé par DLTS sur des échantillons de type-n. L'origine de ce défaut semble être un aggrégat d'impuretés métalliques à l'interface.

La génération de la zone d'inversion au cours des mesures DLTS se caractérise par un pic artificiel et une marche typique sur la caractéristique C(T). Un modèle théorique est développé qui montre, par son bon accord avec l'expérience, que ce sont ces états d'interface qui génèrent la zone d'inversion à basse température. Ce modèle inclu un calcul exact de la charge d'inversion et de son évolution.

La DLTS est donc un outil performant pour caractériser un grand nombre de phénomènes physiques à l'interface entre deux matériaux (semiconducteur-isolant, semiconducteur-électrolyte).

MOTS CLES

Interface Semiconducteur-Oxyde (Oxide-Semiconductor Interface)

Défaut ponctuel (Point defect)

Generation (Generation) Capacité M.O.S. (M.O.S. capacitance)

Etats d'interface (Interface states)

Porteur minoritaire (Minority carrier)

(M.O.S. capacitance