

50376
1990
49

50376
n° d'ordre: 519
1990
49

THESE

présentée à

70878

l'Université des Sciences et Techniques
de Lille Flandres-Artois

pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences des Matériaux

par

Emmanuel DUBOIS

Ingénieur ISEN

SIMULATION BIDIMENSIONNELLE DE DISPOSITIF SILICIUM: CONTRIBUTION A L'ETUDE DE PHENOMENES PARASITES EN TECHNOLOGIES MOS ET BIPOLAIRE



Soutenue le 3 Mai 1990, devant la commission d'examen:

Président	:	G.	SALMER
Rapporteurs	:	R.	FAUQUEMBERGUE
		G.	MERCKEL
Examineurs	:	D.	COLLARD
		J.N.	DECARPIGNY
		H.C.	DE GRAAFF
		J.	GAUTHIER
		J.	LEBAILLY
		E.	PALM

à Isabelle

à toute ma famille

**Cette thèse a été préparée
à l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord
au sein du l'Unité de Recherche 253 Associée au CNRS.**

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur G. SALMER qui a accepté la présidence de ce jury.

Que Messieurs R. FAUQUEMBERGUE et G. MERCKEL soient remerciés pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant la lourde tâche de rapporteur.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Messieurs H.C. DE GRAAFF, J. GAUTHIER, J. LEBAILLY et E. PALM qui m'ont fait l'honneur de participer à ce jury de thèse.

Que Monsieur D. COLLARD, instigateur de ce travail, trouve en ces lignes ma plus profonde gratitude pour le soutien constant qu'il a su déployer tout au long de mon activité.

Je tiens à remercier Monsieur J.N. DECARPIGNY pour la disponibilité dont il a témoigné en prenant part au jury. C'est à lui que je suis redevable d'une grande partie de ma formation de base.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur M. LANNOO pour l'importance qu'il a réservé à cette activité au sein du Laboratoire de Physique des Solides.

Je remercie P. ASTIER et l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord qui ont supporté ce travail.

Que Monsieur J.L COPPEE trouve ici mes plus sincères remerciements pour la collaboration fructueuse que nous avons entretenue au cours de ses activités au Laboratoire de Microélectronique de Louvain-la-Neuve.

Je remercie l'équipe de développement de technologie de RTC-PHILIPS COMPOSANTS à Caen, pour l'intérêt qu'ils ont porté à nos activités de recherche.

Je tiens à témoigner mon amitié à Monsieur B. BACCUS qui a suivi ce travail avec beaucoup d'intérêt. Que nos activités complémentaires et notre collaboration restent très fructueuses.

SOMMAIRE

	Pages
<u>CHAPITRE I : INTRODUCTION</u>	2
Références bibliographiques du chapitre I	7
<u>CHAPITRE II : EQUATIONS DE TRANSPORT ET MODELES</u>	10
II-1 INTRODUCTION	10
II-2 LES EQUATIONS DE MAXWELL	10
II-3 LES EQUATIONS DE TRANSPORT	12
3.1 Généralités	12
3.2 L'approche hydrodynamique	13
3.3 Les équations classiques de transport	19
II-4 CONDITIONS LIMITES	24
II-5 MODELES	29
5.1 Modèles de mobilité	29
5.1.1 Mobilité de porteurs dans les dispositifs bipolaires	29
5.1.2 Mobilité de porteurs dans les dispositifs MOS	32
5.2 Modèles de génération-recombinaison	34
5.2.1 Introduction	34
5.2.2 Génération-recombinaison Shockley-Read-Hall	34
5.2.3 Génération-recombinaison Auger	37
5.2.4 Génération par impact	38
5.2.5 Génération-recombinaison de surface	40
5.2.6 Effets de fort dopage	44
Références bibliographiques du chapitre II	47

<u>CHAPITRE III : METHODES NUMERIQUES</u>	54
III-1 INTRODUCTION	54
III-2 CHOIX DE LA METHODE NUMERIQUE	55
III-3 NORMALISATION DES EQUATIONS	57
III-4 DISCRETISATION DES EQUATIONS	59
4.1 Généralités	59
4.2 Discrétisation de l'équation de Poisson	61
4.3 Discrétisation des équations de continuité de courant ...	62
4.3.1 Position du problème	62
4.3.2 Schéma de discrétisation	62
4.3.3 Traitement du problème bidimensionnel	64
4.4 Discrétisation des conditions limites	65
4.4.1 Les conditions de flux nul	66
4.4.2 Discrétisation de la loi de Gauss	67
4.4.3 Recombinaison d'interface	69
4.5 Généralisation	71
III-5 TRAITEMENT DU PROBLEME NON LINEAIRE COUPLE	75
III-6 METHODES DE RESOLUTION DES SYSTEMES LINEAIRES	78
6.1 Introduction	78
6.2 Traitement du problème symétrique	81
6.3 Traitement du problème non symétrique	84
III-7 STRATEGIE DE MAILLAGE	87
7.1 Introduction	87
7.2 Algorithme de maillage	88

III-8 PROBLEME ANNEXE DE DISCRETISATION : DETERMINATION DES LIGNES DE COURANT	95
8.1 Principe	95
8.2 Discrétisation du problème	96
Références bibliographiques du chapitre III	100
<u>CHAPITRE IV : ETUDE DES PROPRIETES ELECTRIQUES DE</u> <u>STRUCTURES D'ISOLATION</u>	105
IV-1 INTRODUCTION	105
1.1 Généralités	105
1.2 Objectifs de l'étude	109
IV-2 CALCUL DU COURANT PARASITE SOUS LE SEUIL : APPROCHE SEMI-ANALYTIQUE	110
IV-3 ANALYSE DE STRUCTURES IDEALES D'ISOLATION	115
3.1 Description de la structure	115
3.2 Effet de la courbure de l'oxyde	117
3.3 Influence de la quantité d'oxyde enterré	119
3.4 Modélisation et effet de la longueur effective de canal..	121
IV-4 APPLICATIONS A DES STRUCTURES REELLES DE TYPE LOCOS.....	125
4.1 Introduction	125
4.2 Stratégie de simulation	125
4.3 Description des étapes de fabrication	126
4.4 Comparaison des performances d'isolation	127
4.5 Sensibilité à la longueur du dispositif	131
4.6 Sensibilité à la polarisation de drain	133
IV-5 CONCLUSIONS	135
Références bibliographiques du chapitre IV	138

<u>CHAPITRE V : CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PHENOMENES DE PERCAGE EN</u>	
<u>TECHNOLOGIE BIPOLAIRE A EMETTEUR MURE</u>	143
V-1 INTRODUCTION	143
V-2 DESCRIPTION DE LA STRUCTURE A EMETTEUR MURE	145
V-3 ETUDE DE LA SENSIBILITE AU PHENOMENE DE PERCAGE	149
3.1 Influence du profil de couche enterré	149
3.2 Influence de la dose implantée d'émetteur	153
3.3 Influence de la dose implantée de base	155
3.4 Sensibilité à la surgravure de l'oxyde	158
V-4 CONCLUSIONS	161
Références bibliographiques du chapitre V	163

<u>CHAPITRE VI : CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PHENOMENES DE SURFACE</u>	
<u>DANS LES TRANSISTORS PNP LATERAUX</u>	166
VI-1 INTRODUCTION	166
VI-2 LIENS ENTRE MODELLISATIONS	
BIDIMENSIONNELLE ET TRIDIMENSIONNELLE.....	169
VI-3 ANALYSE DES PHENOMENES DE SURFACE	175
3.1 Introduction	175
3.2 Influence de la vitesse de recombinaison	177
3.3 Influence combinée de la recombinaison et	
de charges fixes d'interface	188
VI-4 CONCLUSIONS	192
Références bibliographiques du chapitre VI	194

<u>CHAPITRE VII : CONCLUSIONS</u>	196
Références bibliographiques du chapitre VII	200

CHAPITRE I

INTRODUCTION

Motivés par les formidables besoins de l'industrie électronique et informatique, les récents développements en matière de fabrication de circuits intégrés silicium ont permis d'atteindre l'échelle sub-micronique. La densité obtenue en intégration de mémoires dynamiques CMOS, qui représente un indice communément admis comme révélateur des progrès technologiques, est représenté en figure 1 [1].

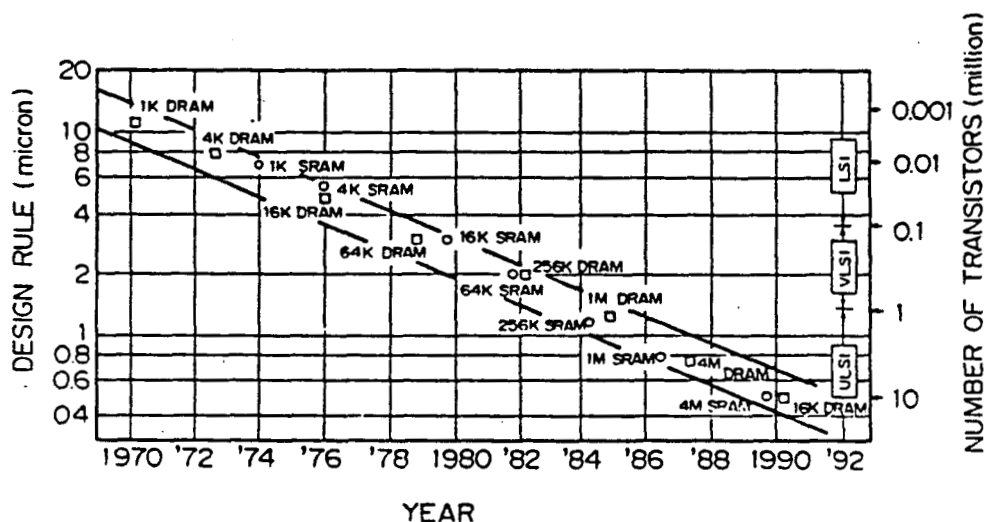


Figure 1: Evolution de la longueur de grille et de la densité d'intégration de mémoires dynamiques et statiques en technologie MOS

Les étapes nécessaires à la mise au point d'une technologie sont longues et coûteuses. Elles nécessitent, de plus, une compréhension approfondie du fonctionnement du dispositif dont la physique est complexe. Le comportement électrique des dispositifs semi-conducteurs a pu, dans la plupart des cas, être déduit de solutions analytiques approchées des équations de transport sur des structures simples et unidimensionnelles. Très rapidement, une telle approche est devenue tout-à-fait insatisfaisante puisqu'elle ne permettait pas la prise en

compte de modèles sophistiqués, des profils de dopage réels et surtout des effets bidimensionnels particulièrement importants dans les structures de petites dimensions. Par exemple, les dernières évolutions en technologie bipolaire se sont orientées vers des structures compactes, auto-alignées dont les caractéristiques du transistor intrinsèque sont très fortement conditionnées par les zones de base extrinsèque [2],[3] (figure 2).

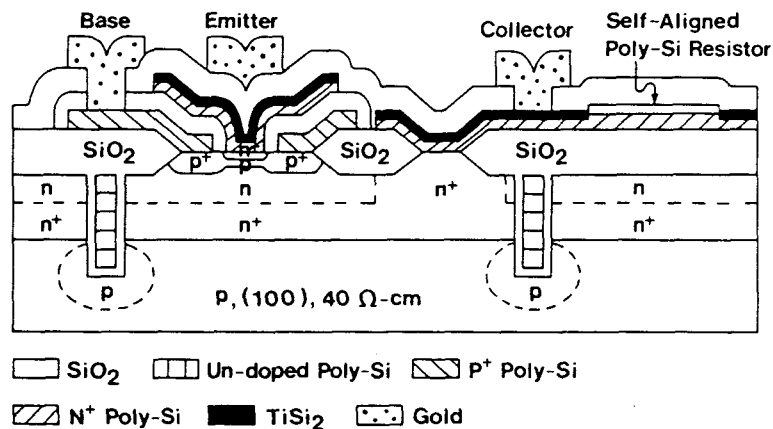


Figure 2: Section de coupe d'un transistor NPN réalisé en technologie bipolaire polysilicium auto-alignée

Un effort considérable a été poursuivi dans la dernière décennie afin de construire des outils de simulations de dispositifs permettant de répondre aux besoins pressants de la technologie. Initialement de nature unidimensionnelle et dédiés à la solution et l'interprétation physique des phénomènes de transport [4],[5],[6], ces simulateurs⁽¹⁾ se sont orientés très rapidement vers des approches bidimensionnelles [7],[8],[9] et même tridimensionnelles [10],[11],[12]. Des outils complémentaires des moyens de simulation de dispositifs ont été développés dans le même temps, et concernent:

- (1) On regroupera sous le terme 'Simulation de dispositif', les aspects de simulation électrique des mécanismes de transport.
- (2) Le Terme 'Simulation de technologie' concerne la simulation des étapes nécessaires à la fabrication d'un composant.

- la simulation des étapes de fabrication⁽²⁾ [13],[14],[15],[16] (dépôt, gravure, implantation ionique, diffusion) dont les résultats (profils de dopage, topologie de la structure) sont des données indispensables à l'étape ultérieure de simulation de dispositif.

- l'extraction de paramètres [17],[18] et la simulation de circuits, qui à partir de la modélisation de composants unitaires, permettent d'accéder au comportement électrique de sous-ensembles de circuits [19],[20].

La réduction des coûts et la puissance des nouveaux moyens de calculs [21],[22] ont largement contribué à l'explosion des outils de CAO (Conception Assistée par Ordinateur). C'est dans ce cadre que sont apparues les premières approches globales intégrant l'ensemble des outils précédents à des fins d'optimisation [23],[24].

La simulation de dispositif électrique couplée à la simulation de procédé constitue un moyen efficace d'investigation des phénomènes physiques [25] et reste, à ce titre, un outil orienté vers la recherche et la modélisation [26]. Cette approche permet, en outre, d'isoler l'influence respective des modèles et des étapes de fabrication. Une autre particularité très attractive de la simulation reste, bien sûr de pouvoir isoler des effets non accessibles par des méthodes expérimentales directes. De plus, étant donné le niveau de sophistication atteint en développement de technologie, le couplage entre la simulation de procédé et de dispositif représente l'alternative la plus fiable en vue d'obtenir des résultats quantitatifs.

La finalité de ce travail repose sur l'étude de problèmes originaux rencontrés dans les composants fortement influencés par les effets bidimensionnels induits par le microdimensionnement. Concernant les technologies MOS, l'efficacité d'isolation de structures LOCOS et LOCOS modifiée est étudiée et modélisée. Le second thème traite des phénomènes de perçage en technologie bipolaire à émetteur muré. Enfin, le troisième point s'intéresse aux limitations en gain de transistors PNP latéraux fortement influencés par les caractéristiques de

l'interface Si/SiO₂. Afin de pouvoir prendre en compte la spécificité de ces problèmes, un simulateur bidimensionnel de dispositif (IMPACT3.2) a été développé dans le souci constant de répondre aux exigences suivantes: (i) rapidité d'exécution, (ii) possibilité de traiter les structures non planes, (iii) adaptation aux technologies MOS et bipolaires et (iv) couplage automatique à la simulation de procédé [27],[28].

L'ensemble du travail est articulé autour de deux thèmes principaux: le premier concerne les moyens mis en oeuvre (physique et méthodes de résolution) et fait l'objet des chapitres II et III. Le second thème développe l'ensemble des points originaux rencontrés dans l'analyse des phénomènes critiques énumérés dans le paragraphe précédent (chapitres IV et V).

Le chapitre II expose et justifie l'ensemble des équations régissant les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs. Les conditions frontières au domaine (contacts, interface..) y sont également détaillées. Enfin, les modèles de mobilité, de génération/recombinaison et les effets de fort dopage sont discutés.

Le chapitre III décrit les méthodes numériques utilisées dans le cadre de la discrétisation des équations de base et de la résolution du système non linéaire couplé. Très attractive parce qu'elle permet la mise en oeuvre d'algorithmes de résolution de systèmes linéaires très efficaces, la méthode des différences finies est, cependant, fortement limitée dans la description de domaines quelconques. Une méthode de différences finies étendue, basée sur le partitionnement du volume associé à chaque point, a été utilisée afin de prendre en compte des limites de domaine quelconques et en particulier une interface Si/SiO₂ non plane. Un algorithme original de raffinement de maillage automatique a été mis au point afin de s'affranchir des contraintes de discrétisation spatiale.

Le chapitre IV propose une contribution à l'étude de structures d'isolation avancées. Le microdimensionnement des transistors actifs MOS permet la réalisation de canaux de longueur inférieure à 0.5 micron et contribue de manière significative à l'amélioration des performances intrinsèques. Néanmoins, l'augmentation de la densité d'intégration est également fortement conditionnée par les dimensions des structures d'isolation. Une comparaison des performances

électriques de structures d'isolation conventionnelle (LOCOS) et avancée (type LOCOS modifié) est proposée. Elle met en oeuvre une formulation analytique du courant sous le seuil du transistor parasite sur oxyde épais. Les rôles respectifs de la courbure de l'interface Si/SiO₂ et de la quantité d'oxyde enterré sont clairement mis en évidence et expliqués par des effets géométriques.

L'effet de perçage (punchthrough) représente l'une des limitations majeures rencontrées en technologie bipolaire. Son effet est étudié, au chapitre V, dans le cadre d'une technologie à émetteur muré. Sur la base de simulations couplées procédé/dispositif, le caractère local du phénomène de perçage est très précisément mis en évidence et interprété.

Une analyse des performances de transistors PNP latéraux est exposée au chapitre VI. L'effet combiné de la recombinaison et de charges fixes à l'interface Si/SiO₂ est étudié dans le détail afin d'expliquer la forte dégradation du gain en régime de faible injection.

CHAPITRE I

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] K. Hashimoto, T. Iizuka, 'Advances in processing', Proceedings of the special VLSI workshop, San Diego, pp 249-254, 1986.
- [2] M. Vora, Y.L. Ho, S. Bhamre, F. Chien, G. Bakker, H. Hingarh, C. Schmitz, 'A sub-100 picosecond bipolar ECL technology', IEDM Tech. Dig., pp 34-37, Decembre 1985.
- [3] T. Yamaguchi, Y.C. Simon Yu, E.E. Lane, J.S. Lee, E.E. Patton, R.D. Herman, D.R. Ahrendt, V.F. Drobny, T.H. Yuzuriha, V.E. Garuts, 'Process and device performance of high-speed double poly-Si bipolar technology using borosenic-poly process with coupling-base implant', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 35, n°8, pp 1247-1256, Août 1988.
- [4] A. De Mari, 'An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the PN junction', Solid State Electronics, vol. 11, pp 33-58, Novembre 1968.
- [5] B.V. Gokhale, 'Numerical solution for a one-dimensional silicon NPN transistor', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 17, n°8, pp 594-602, Août 1970.
- [6] D.L. Scharfetter, H.K. Gummel, 'Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 16, n°1, pp 64-77, Janvier 1969.
- [7] D. Vandorpe, 'Mathematical two-dimensional model of semiconductor devices', Electronics Letters, vol.7, n°2, pp 47-50, Février 1970.
- [8] H.H. Heimeier, 'A two-dimensional numerical analysis of a silicon NPN transistor', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 20, n°8, pp 708-714, Août 1973.

- [9] J.W. Slotboom, 'Iterative scheme for 1- and 2-Dimensional D.C. transistor simulation', *Electronics Letters*, n°5, pp 677-678, Juin 1969.
- [10] T. Toyabe, H. Masuda, Y. Aoki, H. Shukuri, T. Hagiwara, 'Three-dimensional device simulator CADDETH with highly convergent matrix solution algorithms', *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 32, n°10, pp 2038-2044, Octobre 1985.
- [11] N. Shigyo, S. Fukuda, T. Wada, K. Hieda, T. Hamamoto, H. Watanabe, K. Sunouchi, H. Tango, 'Three-dimensional analysis of subthreshold swing and transconductance for fully recessed oxide (trench) isolated 1/4- μ m-width mosfet's', *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 35, n°7, pp 945-951, Juillet 1988.
- [12] P. Ciampolini, A. Pierantoni, M. Melanotte, C. Cecchetti, C. Lombardi, G. Baccarani, 'Realistic device simulation in three dimensions', *IEDM Tech. Digest*, pp 131-134, Décembre 1989.
- [13] L. Borucki, H.H. Hansen, K. Varahramyan, 'FEDSS-a 2D semiconductor fabrication process simulator', *IBM J. Res. Develop.*, vol. 29, n°3, 263-276, 1985.
- [14] C.P. Ho, J.D. Plummer, S.E. Hanton, R.W. Dutton, 'VLSI process modeling - SUPREM III', *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 30, pp 1438-1453, 1983.
- [15] S. Martin, A. Gerodolle, D. Mathiot, '2D diffusion models and nonequilibrium point defects', *Proc. of NASECODE V Conf.*, pp 282-288, 1987.
- [16] B. Baccus, E. Dubois, D. Collard, D. Morel, 'Efficient two-dimensional multilayer process simulation of advanced bipolar devices', *Solid-State Electronics*, vol. 32, N°11, pp 1013-1023, Novembre 1989.
- [17] K. Garwacki, 'Extraction of BJT model parameters using optimization method', *IEEE Transaction on Computer-Aided Design*, vol. 7, n°8, pp 850-854, Août 1988.
- [18] F.Y. Chang, L.F. Wagner, 'The generation of three-dimensional bipolar transistor models for circuit analysis', *IBM J. Res. Develop.*, vol. 29, n°3, Mai 1985.

- [19] L.W. Nagel, 'SPICE2: A computer program to simulate semiconductor circuits', Memorandum ERL-M520, Electronics Research Laboratory, University of California, Berkeley, Mai 1975.
- [20] W.L. Engl, R. Laur, H.K. Dirks, 'Medusa - A simulator for modular circuits', IEEE Trans. on Computer-Aided Design, vol. 1, n°2, pp 85-93, Avril 1982.
- [21] E. Anderheggen, P. Bartelt, P. Durisch, J. Korvink, H. Schwarzenbach, H. Ungricht, 'Parallelized and vectorized element-by-element solution procedures for semiconductor device simulation', Proc. of NASECODE VI Conf., pp 99-106, Juillet 1989.
- [22] G. Abe, K. Hane, 'The kernel of a device simulation code on a hypercube computer', Proc. of the NASECODE VI Conf., pp 285-290, Juillet 1989.
- [23] E.J. Prendergast, 'An integrated approach to modeling', Proc. of NASECODE IV Conf., pp 83-97, Juin 1985.
- [24] P. Lloyd, H.K. Dirks, E.J. Prendergast, K. Singhal, 'Technology CAD for competitive products', Proc. of the SISDEP-88 Conf., pp 111-126, Septembre 1988.
- [25] C.T. Chuang, D. Duan-Lee Tang, G.P. Li, E. Hackbarth, 'On the punchthrough characteristics of advanced self-aligned bipolar transistors', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 34, n°7, pp 1519-1524, Juillet 1987.
- [26] R.W. Knepper, S.P. Gaur, F.Y. Chang, G.R. Srinivasan, 'Advanced bipolar modeling: process and device simulation tools for today's technology', IBM J. Res. Develop., vol. 29, n°3, Mai 1985.
- [27] D. Collard, B. Baccus, E. Dubois, D. Morel, 'IMPACT 1-2-3, An integrated 2D process/device simulator for MOS technology', Lecture notes of the NASECODE VI Conf. short course, pp 16-31, Juillet 1989.
- [28] E. Dubois, J.L. Coppée, B. Baccus, D. Collard, 'Electrical performances evaluation of isolation structures by coupled process and device simulations', Proc. of SISDEP-88 Conf., pp 151-161, Septembre 1988.

CHAPITRE II

EQUATIONS DE TRANSPORT ET MODELES

II-1 INTRODUCTION

Ce chapitre aborde les diverses modélisations mathématiques nécessaires à la description des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs. Les équations de base mises en oeuvre dans notre approche de simulation font appel à une description macroscopique du mouvement des porteurs. Elles ne restent valables que dans la mesure où les plus petites dimensions considérées sont grandes par rapport à la distance inter-atomique. Les équations de Maxwell sont à la base du problème mathématique. Elles mettent en oeuvre, cependant, des notions fondamentales de physique des solides en ce qui concerne la dérivation des équations de transport. Une justification des équations usuellement adoptées en simulation de dispositif est d'abord proposée dans ce chapitre. Les conditions aux limites du problème complètent cette présentation. Les modèles physiques de génération/recombinaison, mobilités et effets de fort dopage sont discutés en fonction de leur application à des dispositifs MOS ou bipolaires.

II-2 LES EQUATIONS DE MAXWELL

Une partie de la modélisation mathématique de base est incluse dans la formulation des équations de Maxwell:

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (4)$$

\vec{E} et \vec{D} représentent respectivement le champ électrique et le déplacement électrique. \vec{H} et \vec{B} sont relatifs au champ magnétique et à l'induction magnétique. Enfin, \vec{J} et ρ décrivent la densité de courant et la densité volumique de charge. Si l'on néglige l'influence de tout champ magnétique, l'équation de Poisson (équation 3) et la divergence de la première équation de Maxwell mènent aux relations suivantes, dans le cadre de leur application aux semi-conducteurs:

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon \cdot \vec{\nabla} \psi) = -q \cdot (p - n + N_d - N_a) \quad (5)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{J}_n + \vec{J}_p) + q \cdot \frac{\partial (p - n)}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

où la signification des différents symboles est donnée ci-après:

- ϵ : constante diélectrique du matériau
- ψ : potentiel électrostatique
- q : charge électronique (positive)
- p : densité volumique de trous
- n : densité volumique d'électrons
- N_a : densité volumique accepteurs d'électrons
- N_d : densité volumique en donneurs d'électrons
- \vec{J}_n : densité de courant d'électrons
- \vec{J}_p : densité de courant de trous

La relation (6) qui exprime la conservation du courant total ne permet pas de prendre en compte les mécanismes de génération/recombinaison de porteurs. En ce sens, elle doit encore être divisée en deux relations de conservations de courant, l'une pour les électrons, l'autre pour les trous. Cette étape permet de faire apparaître formellement un terme de génération/recombinaison (G-R) sans justification physique de son contenu à priori.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} = -q \cdot (G-R) \quad (7)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = q \cdot (G-R) \quad (8)$$

Bien que la dérivation des deux dernières équations reste assez générale, l'expression détaillée des densités de courant en fonction des concentrations en porteurs et du champ électrique exige une connaissance approfondie des mécanismes de transport dans les semi-conducteurs. Ce dernier point fait l'objet du paragraphe suivant.

II-3 LES EQUATIONS DE TRANSPORT

II-3.1 Généralités

Le niveau de sophistication le plus élevé fait appel aux lois fondamentales de la mécanique quantique. Il est alors possible, au prix d'approximations dont la justification détaillée dépasse largement le cadre de ce travail, de déduire pour chaque porteur une équation générale de transport (équation de Boltzmann). Cette équation représente une simplification du théorème de Liouville utilisé en théorie cinétique des fluides [1]. Elle n'est applicable que dans le cas de gaz dilués caractérisés par des forces d'interaction à courte portée. Cette théorie est dite 'semi-classique' dans la mesure où le déplacement des charges entre deux collisions obéit aux lois de la mécanique classique [2]. Par contre, les collisions avec le réseau cristallin sont traitées selon une approche de mécanique quantique.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}_r f \mp \frac{q}{\hbar} \cdot \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (9)$$

La fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ est telle que $f(\vec{r}, \vec{k}, t) \cdot d^3k \cdot d^3r$ représente le nombre de porteurs (électrons ou trous) dans le volume élémentaire $d^3k \cdot d^3r$ de l'espace des phases et de l'espace réel au temps t . \vec{u} est la vitesse de groupe ($d\vec{r}/dt$). \vec{E} représente le champ électrique au travers de la force extérieure (\vec{F}_{ext}) appliquée au système:

$$\left(\frac{d\vec{k}}{dt} \right)_{ext} = \vec{F}_{ext} / \hbar \mp q \cdot \vec{E} / \hbar \quad (10)$$

Le signe \mp se réfère au type de porteur: (-) pour les électrons, (+) pour les trous. Le membre de droite de l'équation (9) donne les variations de la fonction de distribution causées les forces internes au cristal (collisions avec les impuretés, lacunes, vibrations du réseau ...). Il se développe sous la forme:

$$\begin{aligned}
-\left(\frac{d\vec{k}}{dt}\right)_{\text{interne}} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f &= -\left(\frac{F_{\text{int}}}{\hbar}\right) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}} - \\
\int & (f(\vec{r}, \vec{k}, t) \cdot (1-f(\vec{r}, \vec{k}, t)) \cdot S(\vec{k}', \vec{k}) - \\
& (f(\vec{r}, \vec{k}', t) \cdot (1-f(\vec{r}, \vec{k}', t)) \cdot S(\vec{k}, \vec{k}')) \cdot d^3k \quad (11)
\end{aligned}$$

$S(\vec{k}, \vec{k}') \cdot d^3k'$ représente la probabilité de passage d'un porteur de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' contenu dans le volume d^3k' [3][4]. La dernière relation montre que l'équation de Boltzmann se met sous une forme intégral-différentielle à 7 variables indépendantes (\vec{r}, \vec{k}, t) [3][5] dont la résolution représente une tâche extraordinairement difficile. Outre les techniques analytiques très utilisées dès les premières études portant sur les phénomènes d'électrons chauds [6], d'autres alternatives de résolution ont été développées grâce à l'évolution rapide des moyens de calcul. Parmi les techniques de résolution dites exactes, les méthodes itératives [7] et Monté-Carlo [8][9][10] ont démontré leur efficacité durant la dernière décennie. En particulier, la méthode de Monté-Carlo permet d'étudier le mouvement des porteurs au niveau microscopique. Celui-ci consiste en une séquence de vols libres sous l'effet du champ électrique appliqué, suivis d'événements de collisions. Chacun des modèles et phénomènes complexes (collisions, interactions..) peut être décomposé en processus élémentaires et être traités dans le détail sans difficultés majeures [11]. Cependant, cette méthode nécessite des ressources de calcul importantes qui ne permettent pas une utilisation intensive dans le cadre d'opérations d'optimisation, par exemple.

II-3.2 L'approche hydrodynamique.

En régime de fluide quasi continu, l'évolution des porteurs peut être décrit par un ensemble d'équations macroscopiques. Le procédé de dérivation de ces équations est basé sur une méthode de moments: elle consiste à multiplier l'équation de Boltzmann par la puissance d'ordre 'm' de la vitesse de groupe des porteurs, et d'intégrer dans l'espace réciproque sur la première zone de Brillouin [12]. Ainsi le moment d'ordre 0 exprime la conservation du nombre de charges:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \vec{\nabla}(v \cdot \vec{v}_v) = \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (12)$$

La relation (12) permet de retrouver les équations de continuité de courants (7) et (8) en posant :

$$\begin{aligned} & \text{(i) } \nu=n \text{ et } \nu=p \text{ respectivement pour les concentrations en électrons} \\ & \text{et en trous ainsi que pour les vitesses de dérive } \vec{v}_n \text{ et } \vec{v}_p \\ & \text{(ii) } \vec{J}_n = -q \cdot n \cdot \vec{v}_n \quad \vec{J}_p = q \cdot p \cdot \vec{v}_p \quad \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = G-R \end{aligned}$$

Le moment d'ordre 1 permet d'obtenir l'équation de conservation du moment. Elle est obtenue en multipliant l'équation (9) par la vitesse de groupe ou par le moment $\hbar \cdot \vec{k} = m_v^* \cdot \vec{u}$ avant d'intégrer sur la première zone de Brillouin. m_v^* représente la masse effective dans le cas d'une structure de bande parabolique et isotrope. Par souci de clarté, nous nous limiterons dans ce qui suit au seul cas des électrons pour lequel l'indice correspondant ' $\nu=n$ ' sera ignoré. Cette relation de conservation s'écrit donc:

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \vec{\nabla}(n\vec{v}) \cdot \frac{\vec{P}}{n} + (n\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \cdot \frac{\vec{P}}{n} + qn\vec{E} + \vec{\nabla}(\overline{\Phi}) = \left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (13)$$

Le moment d'ordre 2 est obtenu par la même méthode, en multipliant l'équation de Boltzmann par u^2 ou de manière équivalente par l'énergie $\hbar^2 k^2 / 2m^*$. La relation suivante exprime alors une loi de conservation de l'énergie:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \vec{\nabla}(Q) + \vec{\nabla}(\overline{\Phi} \cdot \vec{v}) + qn\vec{E} \cdot \vec{v} + \vec{\nabla}(W\vec{v}) = \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (14)$$

où les différents termes sont explicités ci-dessous:

$$\text{Concentration en électrons} \quad n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (15)$$

$$\text{Densité de moment} \quad \vec{P}(\vec{r}, t) = \int \hbar \vec{k} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (16)$$

$\overline{\Phi}$ désigne le tenseur de pression tel que:

$$\Phi_{ij} = m^* \int (u_i - v_i)(u_j - v_j) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (17)$$

où 'i' et 'j' spécifient les trois composantes possibles selon (k_x, k_y, k_z) . Ce dernier est relié au tenseur généralisé des températures [13] par la relation 18 (k_b représente la constante de Boltzmann).

$$\bar{\Phi} = nk_b \bar{T} \quad (18)$$

$$\text{Vitesse de dérive } \vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int \vec{u} f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (19)$$

$$\text{Densité d'énergie } W(\vec{r}, t) = \frac{m^*}{2} \int \vec{u}^2 f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (20)$$

$$\text{Flux de chaleur } \vec{Q}(\vec{r}, t) = \frac{m^*}{2} \int (\vec{u} - \vec{v}) |\vec{u} - \vec{v}|^2 f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3k \quad (21)$$

$\left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ et $\left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$ représentent les variations des densités de moment et d'énergie sous l'effet des collisions et des mécanismes de génération/recombinaison. Ce sont des intégrales complexes que l'on ne peut expliciter que dans un nombre limité de mécanismes d'interactions avec le cristal. En pratique, ces deux termes de collisions sont décomposés afin de faire apparaître les contributions des collisions intra-bandes et de la génération/recombinaison [13][14]:

$$\left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial t}\right)_{\text{intra-bandes}} + \frac{\vec{P}}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{\text{coll}} \quad (22)$$

$$\left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)_{\text{intra-bandes}} + \frac{W}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{\text{coll}} \quad (23)$$

Jusqu'à présent, aucune simplification n'a été utilisée dans la dérivation des équations de conservation. Elles retiennent donc le même degré de généralité que l'équation de transport de Boltzmann. Néanmoins deux problèmes essentiels se posent:

(a) Le premier consiste en un problème de fermeture. C'est en effet l'une des caractéristiques remarquables liée à l'application d'une

méthode de moments: le nombre d'inconnues (à savoir: $n, \vec{v}, \vec{T}, \vec{Q}$) contenues dans les relations (12), (13) et (14) dépassent le nombre d'équations à résoudre.

- (b) Le second réside dans l'expression des intégrales de collisions intra-bandes qui passent par une connaissance complète des mécanismes de collisions et de leur modélisation.

Afin de répondre au point (a), il convient d'établir une approximation du moment d'ordre 3 non pris en compte dans les calculs précédents. Celle-ci amène deux simplifications supplémentaires:

- (i) la température est considérée comme une quantité scalaire [13]:

$$\vec{T} = \vec{I} T \quad (24)$$

où \vec{I} représente l'identité

- (ii) l'opération de fermeture des équations est alors réalisée en exprimant le flux de chaleur sous la forme [14][15]:

$$\vec{Q} = -\kappa \vec{\nabla} T \quad (25)$$

où κ représente la conductivité thermique des porteurs. Cette approximation, bien que valable uniquement en régime d'équilibre, est néanmoins adoptée. Une alternative plus abrupte eût été de considérer un système adiabatique ($\vec{Q}=0$).

Le point (b) est généralement résolu dans l'approximation du temps de relaxation. On considère alors que le temps τ caractérise le retour à l'équilibre de la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ à son état d'équilibre $f_0(\vec{r}, \vec{k}, t)$, dès que les forces extérieures ne sont plus appliquées [16]. Dans ce cas, les termes de collisions intra-bandes s'écrivent:

- (iii) concernant le temps de relaxation du moment:

$$\left(\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right)_{\text{intra-bandes}} = - \int \vec{k} \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau} d^3 k = - \int \frac{m^* \vec{u}}{\tau} f(\vec{r}, \vec{k}, t) = - n \langle m^* \vec{u} \tau^{-1} \rangle = - \frac{n \vec{p}}{\tau_p} \quad (26)$$

(iv) concernant le temps de relaxation en énergie:

$$\left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)_{\text{intra-bandes}} = - \int \epsilon \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\tau} d^3 k =$$

$$- n \langle \epsilon \tau^{-1} \rangle + n \langle \epsilon_0 \tau^{-1} \rangle \simeq - n \frac{W - W_0}{\tau_w} \quad (27)$$

Les relations 26 et 27 mettent en évidence les temps de relaxation en moment et en énergie, sous la forme:

$$\tau_p^{-1} = \frac{\langle \tau^{-1} \vec{u} \rangle}{\vec{v}} \quad (28)$$

$$\tau_w^{-1} = \frac{\langle \tau^{-1} \epsilon \rangle}{w} \quad (29)$$

Afin de pouvoir formuler les deux dernières équations, les quantités suivantes ont été utilisées:

l'énergie de bandes paraboliques: $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*}$

le moment moyen: $\vec{p} = \frac{\vec{P}}{n}$

l'énergie moyenne: $w = \frac{W}{n}$

la notation 'valeur moyenne': $\langle \blacksquare \rangle = \frac{\int \blacksquare f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 k}{\int f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3 k} =$

Compte tenu des approximations définies précédemment, les équations de conservation (12), (13), (14) peuvent s'écrire sous la forme [13] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n \vec{v}) = G - R \quad (30)$$

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{p} + q \vec{E} + \frac{1}{n} \vec{\nabla} \cdot (n k_b T) = - \frac{\vec{p}}{\tau_p} \quad (31)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{1}{n} \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) + \frac{1}{n} \vec{\nabla} \cdot (k_b T n \vec{v}) + q \vec{E} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} w = - \frac{w - w_0}{\tau_w} \quad (32)$$

Dans le cas de bandes paraboliques et isotropes, ces dernières expressions sont complétées par une relation généralisée entre la densité moyenne du moment et la vitesse moyenne de dérive. D'autre part, la densité moyenne d'énergie est décomposée en une contribution liée à l'énergie cinétique d'origine thermique et en une composante d'énergie cinétique de déplacement:

$$\vec{p} = m^* \vec{v} \quad (33)$$

$$w = \frac{3}{2} k_b T + \frac{m^* v^2}{2} \quad (34)$$

Les équations (32), (33), (34), conjointement avec l'équation de Poisson, représentent ainsi un système de quatre équations couplées non linéaires dont les inconnues sont le potentiel électrostatique (ψ), la densité de porteur (n), la vitesse de dérive (\vec{v}) et la température du porteur (T). L'interprétation physique de ces équations n'est pas triviale. On peut cependant en extraire quelques informations par analogie avec la théorie cinétique des fluides. Par exemple, outre le premier terme de l'équation 31 qui représente une variation temporelle, le second terme est un terme de convection de la quantité de mouvement, tandis que le quatrième terme est relié à l'effet de la pression généralisée. Le terme $q \vec{E} \cdot \vec{v}$ constitue la force exercée par le champ électrique et, enfin, $-\vec{p} / \tau_p$ donne la variation de la densité de moment relative aux forces internes. D'autre part, l'équation de conservation de l'énergie établit un bilan relatif:

- au transfert d'énergie lié à la divergence du flux de chaleur (second terme)
- au transport d'énergie lié au mouvement des porteurs (troisième et quatrième terme)
- à l'énergie fournie par le champ électrique ($q \vec{E} \cdot \vec{v}$) ou perdue lors des collisions (membre de droite)

Il existe plusieurs variantes des équations de conservation telles qu'elles ont été développées dans ce qui précède. Les premières

applications de la méthode des moments furent dédiées à l'analyse de transistors à effet de champ fabriqués sur substrat homogène d'arséniure de gallium. L'analyse se limitait donc aux phénomènes de transport non stationnaires liés à une variation temporelle rapide du champ électrique [17][18][19][20]. C'est en ce sens que leur formulation était incomplète et ne permettait pas, en outre, de prendre en compte la non stationnarité induite par de fortes variations spatiales du champ électrique dans un dispositif non uniformément dopé. Par exemple, les courants de diffusion, les flux d'énergie, les courants thermo-électroniques induits respectivement par la non uniformité de la densité en porteur (n), de la densité d'énergie (w) et du carré de la vitesse de dérive (\vec{v}^2) étaient implicitement négligés [4].

Parmi les approches récentes développées ou utilisées dans la littérature, certaines approximations supplémentaires sont formulées. L'une d'elle consiste par exemple à considérer la contribution de l'énergie cinétique de déplacement négligeable par rapport à l'énergie cinétique thermique des porteurs [21][22], à savoir:

$$\frac{1}{2} m \vec{v}^2 \ll \frac{3}{2} k_b T \quad (35)$$

Cette approximation conduit donc à identifier w et $\frac{3}{2} k_b T$ et à pouvoir négliger le terme de convection de la quantité de mouvement: $(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{p}$. Les effets de convection sont généralement peu importants sous condition quasi-statique. Cependant, le rôle significatif de cette contribution a été démontré [13] en régime de sur-vitesse.

II-3.3 Les équations classiques de transport: dérive-diffusion

Les équations généralisées de transport incluant les trois premiers moments de l'équation de Boltzmann ont démontré leur efficacité dans l'analyse de dispositifs caractérisés par de fortes non uniformités spatiales ou temporelles du champ électrique. Elles permettent donc d'étudier la physique de composants opérant à de très hautes fréquences et/ou caractérisés par de très petites dimensions dans la limite de validité de l'équation de Boltzmann. Par exemple

sous condition statique, la dimension typique en deçà de laquelle ces équations deviennent indispensables peut être fixée à $0.5 \mu\text{m}$ de longueur effective de canal en technologie MOS. De même, le champ électrique développé dans la jonction base/collecteur de structures bipolaires réduites induit des effets non stationnaires: plusieurs auteurs ont cependant démontré que, dans ce cas, l'approche classique de dérive-diffusion donnait des résultats remarquables par comparaison avec une méthode de Monté-Carlo [23] [24]. Ces dernières remarques démontrent qu'un modèle classique de transport n'utilisant que les deux premiers moments de l'équation de Boltzmann permet encore d'appréhender la physique de dispositifs avancés.

La dérivation des équations 'classiques' de transport peut être entreprise de manière assez directe en connaissant à priori la fonction de distribution dans une forme de quasi-équilibre. Une démarche alternative est ici adoptée en démarrant des équations décrites dans le paragraphe précédent pour aboutir au modèle de déplacement-diffusion. Par souci de simplification, les développements seront limités au cas des électrons, mais le résultat final sera donné pour les deux types de porteurs.

La première étape consiste à considérer que l'énergie des porteurs est uniforme sur l'ensemble du dispositif. Cette approximation permet de s'affranchir du moment d'ordre 3 de l'équation de Boltzmann. L'équation de conservation du moment (31) peut être reformulée en tenant compte des relations suivantes exprimant explicitement:

$$(i) \quad \text{la densité de courant} \quad \vec{J} = -q n \vec{v} \quad (36)$$

$$(ii) \quad \text{la mobilité} \quad \mu = \frac{q \tau_p}{m^*} \quad (37)$$

$$(iii) \quad \text{le coefficient de diffusion} \quad D = \frac{k_b T}{q} \mu \quad (38)$$

via une relation d'Einstein généralisée.

Moyennant quelques réarrangements, la relation (31) s'écrit donc:

$$n \tau_p \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) - \frac{\tau_p}{q} (\vec{J} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) - q n \mu \vec{E} - q n \mu \vec{\nabla} \left(\frac{k_b T}{q} \right) - q D \vec{\nabla} n = \vec{J} \quad (39)$$

L'examen des deux premiers termes de (39) montrent qu'ils sont proportionnels à la dérivée totale de \vec{v} [25], à savoir:

$$n\tau_p \frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) = n\tau_p \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) - \frac{\tau_p}{q} (\vec{J} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) \quad (40)$$

La forme finale de l'équation de conservation du moment a donc pour expression la relation (41) où aucune simplification supplémentaire n'a été introduite.

$$\left(\frac{\vec{J}}{n} \right) + \tau_p \frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{J}}{n} \right) = q\mu\vec{E} + q\mu\vec{\nabla} \left(\frac{k_b T}{q} \right) + qD \frac{\vec{\nabla} n}{n} \quad (41)$$

La forme de l'équation 41 suggère les deux approximations suivantes:

- (i) La température électronique est constante et égale à celle du réseau cristallin ($T = T_L$). Cette condition réalise la condition de fermeture du second moment de l'équation de Boltzmann et se situe en parfaite cohérence avec la condition d'énergie constante exprimée auparavant.
- (ii) Le temps de relaxation τ_p étant petit (typiquement quelques dizaines de picosecondes), la relation (41) peut être traitée en perturbation par rapport à τ_p [26]:

$$\vec{J}(\tau_p) = \sum_{i=0}^{\infty} \vec{J}_i \cdot (\tau_p)^i \quad (42)$$

Ces deux approximations ont les conséquences suivantes:

- (i) la composante de diffusion devient indépendante du gradient de température.
- (ii) la vitesse de dérive \vec{v} (proportionnelle à \vec{J}/n) devient une fonction locale du champ électrique alors qu'elle était une fonction non locale du champ électrique et du gradient de température.

En se limitant au terme d'ordre 0 du développement, et sous l'hypothèse d'une température constante, l'équation de conservation du

moment se réduit donc au modèle classique faisant apparaître une composante de dérive sous l'effet du champ électrique et une composante de diffusion proportionnelle au gradient de concentration en porteurs, soit:

$$\vec{J} = \vec{J}_0 = qn\mu\vec{E} + qD\vec{\nabla}n \quad (43)$$

De manière plus générale, pour chaque type de porteur, les équations constitutives qui expriment les densités de courant sont données sous deux formes équivalentes par [27]:

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}_n &= qn\mu_n\vec{E} + qD_n\vec{\nabla}n \\ \vec{J}_p &= qp\mu_p\vec{E} - qD_p\vec{\nabla}p \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}_n &= -qn\mu_n\vec{\nabla}\varphi_n \\ \vec{J}_p &= -qp\mu_p\vec{\nabla}\varphi_p \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

Les indices 'n' et 'p' sont donnés en référence aux électrons et aux trous, respectivement. φ_n et φ_p représentent les pseudo-potentiels de Fermi qui permettent de décrire l'écart à l'équilibre des fonctions de distributions respectives lorsque le dispositif est soumis à une force extérieure. Enfin, l'équivalence mathématique des deux jeux d'équations peut être retrouvée en explicitant l'expression des concentrations en porteurs dans l'approximation de Boltzmann:

$$n = n_i \exp\left(\frac{\psi - \varphi_n}{\varphi_t}\right) \quad (46)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{\varphi_p - \psi}{\varphi_t}\right) \quad (47)$$

n_i représente la concentration du semi-conducteur intrinsèque à l'équilibre et φ_t est la tension thermique: kT/q .

Les développements précédents ont été réalisés dans l'hypothèse de minima de bandes de conduction et de valence rigides, c'est-à-dire ne prenant pas en compte les modifications induites par l'effet de fort dopage [28][29]. La modélisation de cet effet sera discutée plus en détail dans un des paragraphes suivants. Afin de compléter l'étude des modèles mathématiques des phénomènes de transport, il est

cependant nécessaire d'introduire brièvement un tel modèle. Celui-ci permet de relier les effets électriques induits par fort dopage à une réduction de largeur de bande interdite, sous la forme d'une concentration intrinsèque effective:

$$n_{ie}^2 = n_{i0}^2 \exp \left(\frac{qV_g}{kT} \right) \quad (48)$$

où n_{i0} est la concentration intrinsèque à bas niveau de dopage. D'autre part, qV_g représente la réduction de bande interdite ΔE_g fonction de la concentration locale et donc spatialement dépendante. Sous cette condition, les équations (44) font apparaître, de manière explicite, un terme supplémentaire proportionnel au gradient de V_g , et permettent d'introduire naturellement la notion de champ électrique effectif (\vec{E}_n, \vec{E}_p) dont l'action est différente pour chaque porteur.

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}_n &= qn\mu_n \vec{E} + qD_n \vec{\nabla}n - \frac{1}{2}qn\mu_n \vec{\nabla}V_g \\ \vec{J}_p &= qp\mu_p \vec{E} - qD_p \vec{\nabla}p + \frac{1}{2}qp\mu_p \vec{\nabla}V_g \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}_n &= \vec{E} - \frac{1}{2}\vec{\nabla}V_g \\ \vec{E}_p &= \vec{E} + \frac{1}{2}\vec{\nabla}V_g \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

Les équations constitutives données par (49) couplées aux équations de continuité de courants (51) et à l'équation de Poisson forment la base mathématique de ce travail en se limitant à une analyse statique.

$$\left. \begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n &= -q(G-R) \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p &= q(G-R) \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

Un certain nombre de restrictions limite la validité de ces équations à l'étude de dispositifs ne mettant pas en jeu des phénomènes non stationnaires. C'est en ce sens qu'elles sont tout-à-fait adaptées à l'étude de structures d'isolation, par exemple, caractérisées par de grandes dimensions. Leur utilisation dans le cadre de dispositifs bipolaires avancés est beaucoup plus discutable. Elle est néanmoins justifiée par les faibles écarts observés par rapport à des modèles de transport plus complets [23][24].

II-4 CONDITIONS LIMITES

L'ensemble des équations précédemment décrites est résolu sur un domaine fini bidimensionnel représentant la géométrie du dispositif étudié. Des conditions limites aux contacts, surfaces extérieures ou de (dis)continuités aux interfaces viennent donc compléter la définition mathématique du problème à résoudre. L'énumération de ces conditions sera faite en référence à la structure idéale de transistor MOS illustrée par la figure 1. Notons au passage qu'en l'absence de charge d'espace, seule l'équation de Laplace est résolue dans l'oxyde.

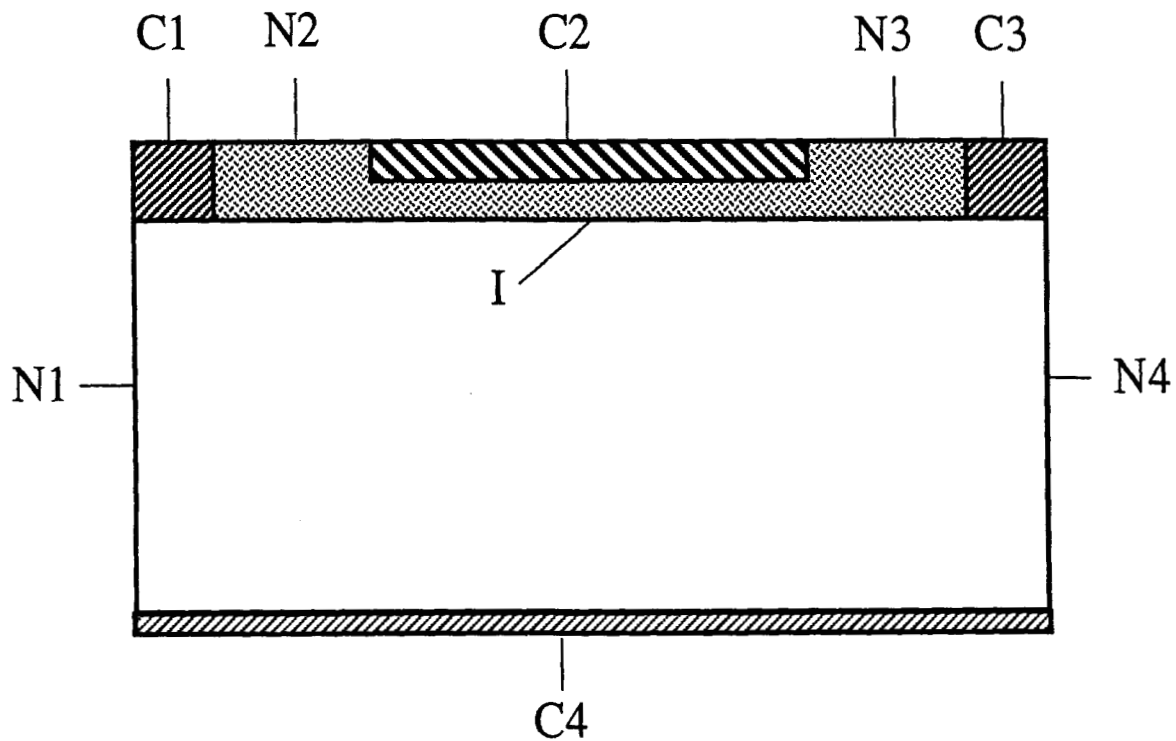


Figure 1: Définition de l'emplacement des conditions limites sur une structure schématique de transistor MOS.

Deux types de conditions frontières peuvent être répertoriées selon qu'elles répondent à une condition physique ou à une nécessité de limiter l'extension du domaine d'étude. Ainsi, les frontières {C1,C2,C3} d'une part et {I} d'autre part correspondent respectivement aux contacts et à l'interface Si/SiO₂. En revanche, le contact {C4} est pris non pas sur la face arrière du substrat mais à une distance raisonnable de la zone active du transistor. De même, les frontières {N1,N2,N3,N4} correspondent à des conditions artificielles qui ne sont généralement pas introduites de façon arbitraire: connaissant à priori la physique du dispositif, il est possible de les conditionner afin de ne pas perturber le fonctionnement intrinsèque du transistor. Des conditions de réflexion sont donc appliquées sur {N1,N4} situés suffisamment loin de la zone active, et également sur {N2,N3} qui correspondent aux couches de passivation dont l'effet est négligeable.

Les surfaces extérieures {N1,N2,N3,N4} sont donc caractérisées par une condition de Neumann sur le champ électrique et sur les densités de courant par les relations synthétisées en (52) où \vec{n}_{si} représente un vecteur normal à la surface pointant vers l'extérieur du domaine silicium.

$$\left. \begin{array}{l} \vec{E} \cdot \vec{n}_{si} = 0 \\ \vec{J}_n \cdot \vec{n}_{si} = 0 \\ \vec{J}_p \cdot \vec{n}_{si} = 0 \end{array} \right\} \quad (52)$$

L'interface Si/SiO₂ {I} obéit à la loi de Gauss spécifiant la continuité de la composante normale du vecteur déplacement électrique:

$$\epsilon_{si} \vec{E}_{si} \cdot \vec{n}_{si} - \epsilon_{ox} \vec{E}_{ox} \cdot \vec{n}_{si} + Q_s = 0 \quad (53)$$

où ϵ_{si} ou ϵ_{ox} sont les constantes diélectriques relatives au silicium et à l'oxyde respectivement tandis que Q_s représente la densité surfacique de charge. Liée à la présence d'états d'interface, la recombinaison/génération de surface donne une condition limite sur les flux de courant sous la forme:

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}_n \cdot \vec{n}_{si} &= -q (R-G)_s \\ \vec{J}_p \cdot \vec{n}_{si} &= q (R-G)_s \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

Les contacts (C1,C3,C4) sont pris comme ohmiques et idéaux. Ils sont donc considérés comme infiniment absorbants, ce qui conduit à une condition d'équilibre à l'interface métal/semi-conducteur. En se référant aux notations du paragraphe II-2, les conditions d'équilibre s'écrivent:

$$\left. \begin{aligned} pn &= n_{ie}^2 \\ \rho &= p-n+N_d-N_a = 0 \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

Les relations (55) peuvent être réarrangées afin de faire apparaître des conditions de Dirichlet sur le potentiel et les concentrations en porteurs:

$$n = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\frac{(N_d - N_a)^2}{4} + n_{ie}^2} \quad (56)$$

$$p = -\frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\frac{(N_d - N_a)^2}{4} + n_{ie}^2} \quad (57)$$

$$\psi = V_{appl} + \frac{k_b T}{q} \sinh^{-1} \left(\frac{N_d - N_a}{2 n_{ie}} \right) \quad (58)$$

où V_{appl} est le potentiel extérieur appliqué au contact. En pratique, les contacts sont appliqués dans des régions où un type d'impureté domine très largement l'autre. Ceci conduit à remplacer (56), (57) et (58) par:

$$\left. \begin{aligned} n &= N_d \\ p &= n_{ie}^2 / N_d \\ \psi &= V_{appl} + k_b T / q \ln(N_d / n_{ie}) \end{aligned} \right\} \text{ si } N_d \gg N_a \quad (59)$$

$$\left. \begin{aligned} n &= n_{ie}^2 / N_a \\ p &= N_a \\ \psi &= V_{appl} - k_b T / q \ln(N_a / n_{ie}) \end{aligned} \right\} \text{ si } N_a \gg N_d \quad (60)$$

La physique liée à la modélisation des interfaces métal/semiconducteur est souvent complexe [31] et les paramètres nécessaires à leur modélisation restent sujet à discussion [32]. Les conditions limites énumérées ci-dessus découlent, en fait, d'une idéalisation d'un tel contact. En réalité, la zone de déplétion développée au voisinage du contact Schottky ne permet pas de vérifier la condition d'équilibre. Cependant, les contacts sont généralement pris dans des régions très fortement dopées qui limitent à quelques angströms l'extension de zone déplétée. Ceci permet de considérer une chute de potentiel linéaire au contact dont la résistance associée est négligeable.

Enfin, le dernier type de condition limite concerne le contact (C2) qui nécessite un traitement légèrement différent afin de prendre en compte le système métal/oxyde/semi-conducteur. Dans ce cas, le potentiel appliqué est modifié par la différence des travaux d'extraction Φ_{ms} entre le métal et le semi-conducteur exprimé par:

$$\Phi_{ms} = \Phi_m - \left(\chi + \frac{E_g}{2q} - \varphi_b \right) \quad (61)$$

où Φ_m est le travail d'extraction du métal, χ est l'affinité électronique du semi-conducteur. $\left(\frac{E_g}{2} - q\varphi_b \right)$ représente l'intervalle d'énergie entre la bande de valence et le niveau de Fermi du semi-conducteur tel que:

$$\varphi_b = \frac{k_b T}{q} \ln \left(\frac{N_d}{n_{ie}} \right) > 0 \text{ pour une semi-conducteur de type n} \quad (62)$$

$$\varphi_b = - \frac{k_b T}{q} \ln \left(\frac{N_a}{n_{ie}} \right) < 0 \text{ pour une semi-conducteur de type p} \quad (63)$$

Afin de ne pas introduire de redondance sur le potentiel interne ϕ_b , le potentiel effectif appliqué à la grille est alors donné par:

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{appl}} - (\phi_{\text{ms}} - \phi_b) \quad (64)$$

L'évolution de la différence des travaux de sortie (ϕ_{ms}) est représentée en figure 2. L'ensemble des courbes est paramétré en fonction du niveau de dopage pour différents types de matériaux de grille et les deux types de dopages.

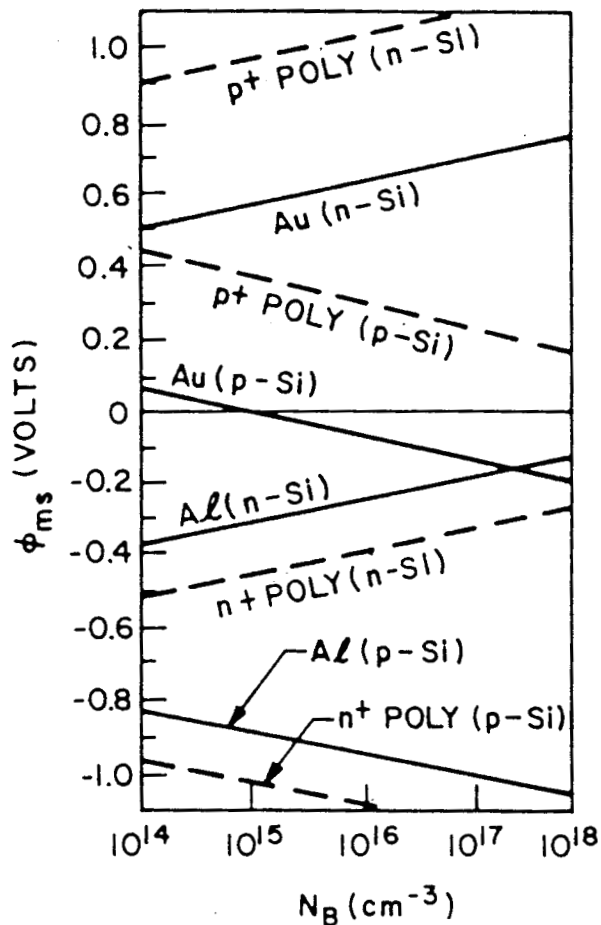


Figure 2: Variations de la différence de travaux de sortie entre la grille et le semi-conducteur.

II-5 MODELES

II-5.1 Modèles de mobilité

Les lois de mobilité peuvent être déduites théoriquement de la définition donnée par la relation (37). Elles font donc appel à la notion de temps de relaxation qui détermine le temps moyen entre les événements de collisions. En particulier, les porteurs peuvent être dispersés par les vibrations du réseau (phonons), les impuretés neutres ou ionisées, être influencés par la rugosité des interfaces et peuvent même, sous condition de forte injection, interagir entre-eux [33]. Cependant les calculs fondamentaux relatifs aux modèles de mobilité sont généralement limités [34] ou nécessite l'emploi de paramètres d'ajustement [35]. Ce dernier point explique l'importance des approches expérimentales [26] et des lois phénoménologiques qui en découlent. L'analyse, qui sera conduite dans les paragraphes suivants de dispositifs MOS et bipolaire, a motivé l'emploi de deux modèles de mobilité différents.

II-5.1.1 Mobilité des porteurs dans les dispositifs bipolaires

Ce modèle est basé sur le travail original de Scharfetter et Gummel [36] revisité ensuite par Thornber [37]. Son expression est donnée par:

$$\mu_{LIE} = \frac{\mu_{LI}}{\sqrt{1 + (\mu_{LI})^2 \cdot \left\{ \frac{\left(\frac{E^*}{\mu_L \cdot A} \right)^2}{\left(\frac{\mu_{LI} \cdot E^*}{\mu_L \cdot A} \right) + G} + \left(\frac{E^*}{\mu_L \cdot B} \right)^2 \right\}}} \quad (65)$$

La notation adoptée dans la formule précédente fait apparaître les divers termes $\mu_L, \mu_{LI}, \mu_{LIE}$ qui se réfèrent respectivement aux mobilités prenant en compte:

- (i) les vibrations du réseau
- (ii) (i) et la diffusion par les impuretés ionisées
- (iii) (ii) et l'effet de saturation par le champ électrique

Selon Thornber [37], le terme $\mu_L \cdot B$ peut être interprété comme une vitesse de saturation liée aux phonons optiques (V_s). $\mu_L \cdot A$ est identifiable à une vitesse de phonons acoustiques (V_c). G est un paramètre ajustable sans justification physique évidente. L'expression de μ_{LI} est donnée par la formule (66) où μ_L est constante à température fixée.

$$\mu_{LI} = \frac{\mu_L}{\sqrt{1 + \frac{N}{N_r + \frac{N}{S}}}} \quad (66)$$

N_r et S sont des deux paramètres et N représente la densité volumique d'impuretés sous la forme d'une somme de donneurs et d'accepteurs en valeur absolue ($N = |N_d| + |N_a|$). L'ensemble des variables intervenant dans les lois de mobilité décrite ci-dessus doivent être indexées suivant chaque type de porteur (n : électrons, p : trous). E^* est proportionnel à l'amplitude de la force d'entraînement pour chaque porteur. Il existe deux choix possibles quant à son expression. Le premier considère la composante du champ électrique parallèle à la densité de courant:

$$E^* = \frac{\vec{E} \cdot \vec{J}_n}{\left| \vec{J}_n \right|} = E_{//} \quad (67)$$

La seconde consiste à adopter le gradient du pseudo-potentiel de Fermi en accord avec le développement au premier ordre donné par la relation 45:

$$E^* = \left| \vec{\nabla}_{\rho_n} \right| \quad (68)$$

Les deux formulations atteignent l'une comme l'autre une limite de validité lorsque la diffusion est le mécanisme de transport dominant [13]. Dans le cadre pratique de nos applications, la différence entre les deux approches n'est pas significative et nous a conduit à adopter la première solution.

Finalement, le modèle de mobilité adopté en simulation de dispositifs bipolaires est résumé par la relation (69), l'équation auxiliaire (70) et le tableau I:

$$\mu(E_{//}, N) = \frac{\mu'(N)}{\sqrt{1 + \frac{\left(\frac{\mu'(N) \cdot E_{//}}{V_c}\right)^2}{\left(\frac{\mu'(N) \cdot E_{//}}{V_c}\right)^{+G}} + \left(\frac{\mu'(N) \cdot E_{//}}{V_s}\right)^2}} \quad (69)$$

$$\mu'(N) = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 + \frac{N}{N_r + \frac{N}{S}}}} \quad (70)$$

TABLE I

PARAMETRE	UNITE	ELECTRON	TROU
μ_0	$\text{cm}^2 \text{v}^{-1} \text{s}^{-1}$	1400	480
S	-	350	81
N_r	cm^{-3}	$3 \cdot 10^{16}$	$4 \cdot 10^{16}$
V_c	cm s^{-1}	$4.9 \cdot 10^6$	$2.928 \cdot 10^6$
V_s	cm s^{-1}	$1.036 \cdot 10^7$	$1.2 \cdot 10^7$
G	-	8.8	1.6

II-5.1.2 Mobilité des porteurs dans les dispositifs MOS

Le modèle de mobilité précédemment décrit ne tient pas compte des phénomènes de dispersion des porteurs par l'interface. Les perturbations que celui-ci introduit sont d'origines diverses: rugosité, diffusion par les charges ou les phonons de surface, effets quantiques. Il apparaît donc particulièrement important de pouvoir prendre en compte ces facteurs de réduction de mobilité dans les structures de type MOS où le courant est confiné à l'interface Si/SiO₂. Paradoxalement, les problèmes de conduction de surface ont été relativement peu abordés sur le plan de la physique. Les modèles existants utilisent une approche phénoménologique qui traite les effets de surface sous la forme d'une dépendance par rapport au champ électrique développé par la grille du transistor [38]. Le modèle utilisé dans le cadre de ce travail est issu d'une seconde version proposée par Yamaguchi [39] où sont répercutées les règles élaborées par Thornber [37]. Son expression est constituée des trois équations suivantes:

$$\mu(N, E_{\parallel}, E_{\perp}) = \mu''(N, E_{\perp}) \cdot f(N, E_{\perp}, E_{\parallel}) \quad (71)$$

$$\mu''(N, E_{\perp}) = \frac{\mu_0}{\sqrt{1 + \frac{N}{N_r + N/S}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha \cdot E_{\perp}}} \quad (72)$$

$$f(N, E_{\perp}, E_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\left(\frac{\mu''(N, E_{\perp}) \cdot E_{\parallel}}{V_c}\right)^2}{\left(\frac{\mu''(N, E_{\perp}) \cdot E_{\parallel}}{V_c}\right)^2 + G} + \left(\frac{\mu''(N, E_{\perp}) \cdot E_{\parallel}}{V_s}\right)^2}} \quad (73)$$

où E_{\perp} représente la composante du champ électrique perpendiculaire au vecteur densité de courant. La dernière relation reproduit les effets de saturation de vitesse des porteurs: elle est dérivée de l'équation (69). D'autre part, la formule (72) combine les effets de réduction de mobilité induits par le champ de grille et le dopage. L'ensemble des paramètres compilés dans le tableau I restent applicables à ce modèle mais doivent être complétés par les valeurs de α_n et α_p :

TABLE II

PARAMETRE	UNITE	ELECTRON	TROU
α	cm v ⁻¹	1.54 10 ⁻⁵	5.35 10 ⁻⁵

Ce modèle largement utilisé dans les applications dédiées à la simulation [40][41] a l'avantage de rester relativement simple et d'être d'implémentation aisée. D'autres modèles ont cependant été proposés et représentent un enrichissement de ce dernier [42] sur la base d'approches plus théoriques [43][44].

II-5.2 Modèles de génération-recombinaison

II-5.2.1 Introduction

Le silicium étant un matériau à gap non direct, les transitions indirectes, par l'intermédiaire de niveaux d'énergie localisés dans la bande interdite, peuvent être considérées comme dominantes. Deux types de mécanismes de base sont pris en compte. Ils font intervenir un processus de génération (recombinaison) de paires électron-trou,

- (i) soit assisté par les vibrations du réseau avec absorption (émission) de phonons

- (ii) soit assisté par un troisième porteur non affecté par une transition de bande, accompagné d'une perte (gain) de son énergie.

Le premier type de mécanisme est décrit par le modèle établi par Shockley et Read d'une part et Hall d'autre part [45][46]. Le second met en jeu les modèles de génération-recombinaison Auger [47] et de génération par impact [48]. La présente section propose une description succincte de ces différents modèles pour les mécanismes de volume. L'analyse sera complétée par l'analyse des phénomènes de génération-recombinaison de surface.

5.2.2 Génération-recombinaison Shockley-Read-Hall

Les quatre mécanismes élémentaires mettant en jeu un seul niveau dans la bande interdite sont décrits par la figure 3.

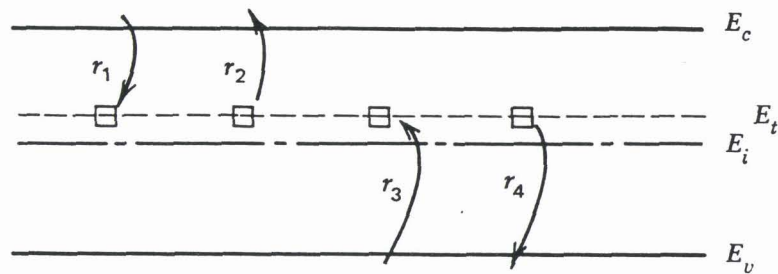


Figure 3: Interaction des porteurs libres avec un état localisé à une énergie E_t dans la bande interdite. Cet exemple montre un état de type accepteur [72].

- (i) r_1 correspond à la capture d'un électron de bande de conduction au niveau vide localisé à une énergie E_t dans la bande interdite. Le taux de capture est proportionnel au nombre d'électrons dans la bande de conduction, à la densité d'état N_t associé au piège et à la probabilité $(1-f(E_t))$ que l'état soit inoccupé. D'autre part, la probabilité de piégage d'un électron est donnée par le produit de sa vitesse thermique et de la section de capture du piège: $v_{thn} \cdot \sigma_n$. Soit finalement:

$$r_1 = n \cdot (N_t \cdot (1-f(E_t))) \cdot [v_{thn} \cdot \sigma_n] \quad (74)$$

- (ii) r_2 est le mécanisme dual de r_1 . Le taux d'émission d'un électron initialement piégé est donnée par le produit de la densité d'état effectivement occupée et de la probabilité de transition de l'électron, soit:

$$r_2 = (N_t \cdot f(E_t)) \cdot e_n \quad (75)$$

- (iii) r_3 est relatif à la capture d'un trou initialement en bande de valence par un piège occupé par un électron. Une analyse similaire à celle développée en (i) permet d'aboutir à l'expression:

$$r_3 = p \cdot (N_t \cdot f(E_t)) \cdot [v_{thp} \cdot \sigma_p] \quad (76)$$

(iv) r_4 décrit l'excitation d'un électron de bande de valence dans un état inoccupé (émission d'un trou):

$$r_4 = (N_t \cdot (1-f(E_t))) \cdot e_p \quad (77)$$

A l'équilibre, la compensation des mécanismes d'émission et de capture permet de déduire les expressions des probabilités e_n et e_p puisque $r_1 = r_2$, $r_3 = r_4$ et la fonction $f(E_t)$ n'est autre que la distribution de Fermi.

$$e_n = v_{thn} \sigma_n n_{ie} \exp \left(\frac{E_t - E_i}{k_b T} \right) \quad (78)$$

$$e_p = v_{thp} \sigma_p n_{ie} \exp \left(\frac{E_i - E_t}{k_b T} \right) \quad (79)$$

La conservation des charges émises et capturées exprimée par $r_1 - r_2 = r_3 - r_4$ permet d'écrire le taux de recombinaison sous la forme:

$$(R-G)_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_n \left[p + n_{ie} \exp \left(\frac{E_i - E_t}{k_b T} \right) \right] + \tau_p \left[n + n_{ie} \exp \left(\frac{E_t - E_i}{k_b T} \right) \right]} \quad (80)$$

où les temps de vie des porteurs sont donnés par:

$$\tau_n = \frac{1}{N_t v_{thn} \sigma_n} \quad \tau_p = \frac{1}{N_t v_{thp} \sigma_p} \quad (81)$$

Les temps de vie sont, à priori, indépendants du niveau de dopage si la densité de piège l'est également. En pratique, les forts niveaux de dopage introduisent des défauts supplémentaires (dislocations..) souvent très intimement liés aux conditions technologiques. La variation des temps de vie est alors prise en compte sous la forme d'une dépendance apparente en fonction du niveau de dopage ($N_a + N_d$). Selon Fossum [49], cette dépendance est modélisée par les expressions empiriques données par la relation (82). Les paramètres associés sont résumés dans le tableau III.

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{1 + \frac{N_a + N_d}{C_n}} \quad \tau_p = \frac{\tau_{p0}}{1 + \frac{N_a + N_d}{C_p}} \quad (82)$$

Table III

PARAMETRE	UNITE	ELECTRON	TROU
τ_0	s	$3.95 \cdot 10^{-4}$	$3.52 \cdot 10^{-5}$
C	cm^{-3}	$7.1 \cdot 10^{15}$	$7.1 \cdot 10^{15}$

5.2.3 Génération-recombinaison Auger

La génération-recombinaison Auger est particulièrement importante dans les semi-conducteurs fortement dopés. Par exemple, elle affecte très fortement les performances de dispositifs bipolaires en contribuant au courant de base de manière significative. Les mécanismes de transitions sont complexes et encore sujets à discussions [50]. Le modèle, ici présenté, se limite à des transitions bande à bande en ignorant les mécanismes assistés par niveaux intermédiaires et le couplage avec le modèle SRH qui en découlerait. D'une manière assez proche au cas précédent, les mécanismes élémentaires de transition sont au nombre de quatre:

- (i) recombinaison d'un électron initialement en bande de conduction avec transfert d'énergie à un électron de conduction:

$$R_n = A_{cn} \cdot n^2 \cdot p \quad (83)$$

- (ii) recombinaison d'un électron initialement en bande conduction avec transfert d'énergie à un trou en bande de valence:

$$R_p = A_{cp} \cdot n \cdot p^2 \quad (84)$$

- (iii) émission d'un électron initialement en bande de valence en consommant l'énergie d'un électron en bande de valence:

$$G_n = A_{en} \cdot n \quad (85)$$

- (iv) émission d'un électron initialement en bande de valence en consommant l'énergie d'un trou en bande de valence:

$$G_p = A_{ep} \cdot p \quad (86)$$

La condition d'équilibre permet d'exprimer les taux d'émission en fonction des taux de capture, à savoir:

$$A_{en} = A_{cn} \cdot n_{ie}^2 \quad A_{ep} = A_{cp} \cdot n_{ie}^2 \quad (87)$$

Finalement, le bilan des transferts de bande à bande permet de synthétiser le terme de recombinaison-génération Auger sous la forme:

$$(R-G)_{Aug} = R_n - G_n + R_p - G_p = (A_{cn} \cdot n + A_{cp} \cdot p) \cdot (n \cdot p - n_{ie}^2) \quad (88)$$

Les valeurs des coefficients Auger issus de [51], largement utilisés par ailleurs [52][53][54] sont répertoriées dans le tableau ci-dessous.

Tableau IV

PARAMETRE	UNITE	ELECTRON	TROU
A_c	$\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-31}$	$9.9 \cdot 10^{-32}$

5.2.4 Génération par impact

Ce mécanisme est du point de vue microscopique semblable à la composante de génération Auger. Il comprend donc deux composantes, lié au fait qu'une paire électron-trou peut être créée soit par un électron soit par un trou hautement énergétique. Le gain en énergie de ces porteurs est réalisé sous l'action du champ électrique. Les probabilités d'émission sont généralement exprimées sous la forme de coefficient d'ionisation α_n et α_p qui correspondent à l'inverse de libres parcours moyens entre deux ionisations:

$$G_{\text{impact}} = \alpha_n \cdot \frac{|\vec{J}_n|}{q} + \alpha_p \cdot \frac{|\vec{J}_p|}{q} \quad (89)$$

La détermination de ces coefficients a fait l'objet de nombreuses investigations [55] et a permis de mettre en évidence une dépendance exponentielle en fonction du champ électrique qui s'exprime sous la forme:

$$\alpha_{\frac{n}{p}} = \alpha_{\frac{n}{p}}^0 \exp \left(- \left(\frac{E_{\frac{n}{p}}^{crit}}{E_{\frac{n}{p}}} \right)^{\beta_{\frac{n}{p}}} \right) \quad (90)$$

où $E_{\frac{n}{p}}$ est la composante du champ électrique parallèle à la densité de courant $\vec{J}_{\frac{n}{p}}$ et $E_{\frac{n}{p}}^{crit}$ représente un champ critique. Les indices n et p rendent compte de la différence entre électrons et trous. La littérature reporte différentes valeurs de $\beta_{\frac{n}{p}}$ incluses dans l'intervalle $\langle 1,2 \rangle$ [56][57]. Une approche empirique alternative [58] faisant intervenir deux champs critiques et deux exposants ($\beta_{\frac{n}{p}}' = 1$ et $\beta_{\frac{n}{p}}'' = 2$) a d'autre part démontré son efficacité pour des structures MOS sub-microniques. D'autres modèles plus évolués, dont les références [59][60][61][62] ne présentent qu'un faible échantillon, ont été développés selon le concept d'électron chanceux. Leur emploi a essentiellement été motivé par les besoins pressants en analyse de phénomènes d'injection et de vieillissement particulièrement critiques en technologie MOS avancée. Nous nous limiterons cependant au modèle simple décrit par la relation (90) dans le cadre de nos applications où les effets d'ionisation par impact ne s'avèrent pas être critiques. Les valeurs des paramètres associés sont résumés dans le tableau V [63].

Tableau V

PARAMETRE	UNITE	ELECTRON	HOLE
α^0	cm^{-1}	$7.03 \cdot 10^5$	$6.71 \cdot 10^5$
E^{crit}	v cm^{-1}	$1.231 \cdot 10^6$	$1.693 \cdot 10^6$
β	-	1	1

5.2.5 Génération-recombinaison de surface

Certains dispositifs tels que les transistors bipolaires sont très fortement affectés par les effets de recombinaison-génération de surface. En particulier, ces phénomènes de surface sont plus importants que ceux de volume en ce qui concerne des structures I²L et PNP latérales. Electrons et trous peuvent être donc capturés et émis par des centres localisés dans la couche interfaciale selon des mécanismes similaires à ceux de volume. Les évidences expérimentales [64][65] ont démontré qu'il existe en général une distribution continue en énergie des centres recombinants. Ce dernier point conduirait donc à prendre en compte d'éventuelles transitions inter-centres (figure 4-a). Cependant, ce type de transitions est supposé comme très peu probable dans la mesure où les centres d'énergies voisines sont généralement spatialement isolés. Les mécanismes de génération-recombinaison assistées par un seul piège sont donc considérés comme dominants (figure 4-b).

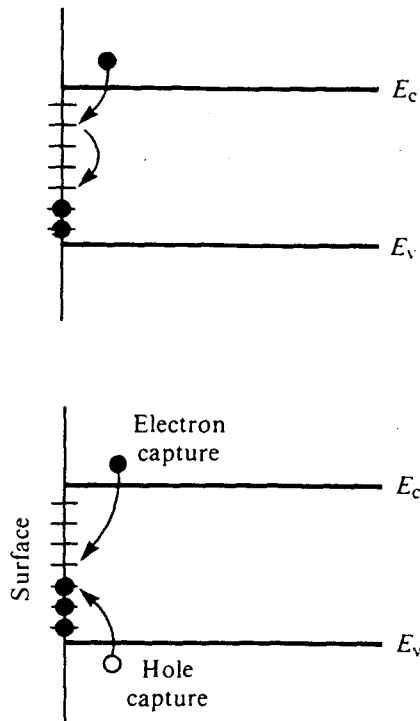


Figure 4: Mécanisme de recombinaison-génération d'interface [47]

(a): Transitions inter-centre peu probables

(b): Recombinaison aidée par un seul piège

Les effets de génération-recombinaison de surface sont généralement décrits par la théorie de Shockley-Read-Hall transposée aux mécanismes de surface. En référence au paragraphe 5.2.2, le modèle est donc donné par la relation (91) dans le cas d'états d'interface monovalents.

$$(R-G)_s = \frac{\frac{n_s p_s - n_{ie}^2}{(n_s + n_{1s})} + \frac{s_p}{s_n}}{s_p} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_{Si/SiO_2}) \quad (91)$$

Dans cette expression, δ désigne la fonction de Dirac et \vec{r}_{Si/SiO_2} donne la position de l'interface. s_n (resp. s_p) est homogène à une vitesse qui s'exprime en fonction de la section de capture σ_n (resp. σ_p) de la vitesse thermique v_{thn} (resp. v_{thp}) et de la densité surfacique de pièges N_{ts} associée à l'énergie E_{ts} .

$$s_n = \sigma_n v_{thn} N_{ts} \quad s_p = \sigma_p v_{thp} N_{ts} \quad (92)$$

n_s et p_s désignent les concentrations en électrons et trous au niveau de la surface, tandis que n_{1s} et p_{1s} sont donnés par:

$$n_{1s} = n_{ie} \exp\left(\frac{E_{ts} - E_i}{k_b T}\right) \quad p_{1s} = n_{ie} \exp\left(\frac{E_i - E_{ts}}{k_b T}\right) \quad (93)$$

La densité surfacique de charge associée est exprimée par les équations (94) ou (95) selon le cas d'états donneurs ou accepteurs respectivement. Les charges fixes d'interface viennent bien sûr s'ajouter à la contribution précédente.

$$Q_{it} = + q N_{ts} \frac{s_n n_{1s} + s_p p_s}{s_n (n_s + n_{1s}) + s_p (p_s + p_{1s})} \quad (94)$$

$$Q_{it} = - q N_{ts} \frac{s_n n_s + s_p p_{1s}}{s_n (n_s + n_{1s}) + s_p (p_s + p_{1s})} \quad (95)$$

Lorsque les pièges répartis dans la bande interdite forment un continuum, la densité surfacique d'état N_{ts} répartie entre E et $E+dE$ peut être exprimée sous forme incrémentale par $D_{it}(E).dE$, où $D_{it}(E)$ est exprimé en $cm^{-2}.eV^{-1}$. Le taux de recombinaison-génération est alors exprimé sous la forme d'une intégrale s'étendant sur la bande interdite ($E_c - E_v$):

$$(R-G)_s = \int_{E_v}^{E_c} \frac{\frac{n_s p_s - n_i^2}{(n_s + n_{1s})} + \frac{n_i^2}{(p_s + p_{1s})}}{\sigma_p(E) v_{thp} + \sigma_n(E) v_{thp}} . D_{it}(E) . dE \times \delta(\vec{r} - \vec{r}_{Si/SiO_2}) \quad (96)$$

Dans ce cas la densité de charge s'exprime par:

$$Q_{it} = q \int_{E_v}^{E_i} \frac{s_n n_{1s} + s_p p_s}{s_n (n_s + n_{1s}) + s_p (p_s + p_{1s})} D_{it}(E) . dE \\ - q \int_{E_i}^{E_c} \frac{s_n n_s + s_p p_{1s}}{s_n (n_s + n_{1s}) + s_p (p_s + p_{1s})} D_{it}(E) . dE \quad (97)$$

La relation (96) montre que le taux de recombinaison-génération est une fonction complexe dont trois paramètres doivent être déterminés expérimentalement. Ceux-ci sont très fortement liés aux conditions technologiques, à savoir essentiellement, aux étapes d'oxydation et de recuits. L'application de ce modèle à une technologie déterminée requiert donc une caractérisation expérimentale préalable du système Si/SiO₂. En guise d'illustration, les sections de captures σ_n et σ_p sont représentées en figures 5 et 6 pour différentes variantes technologiques concernant l'oxydation d'une capacité MOS sur substrat (100) [66]. La figure 7 donne la distribution énergétique correspondante des états d'interface.

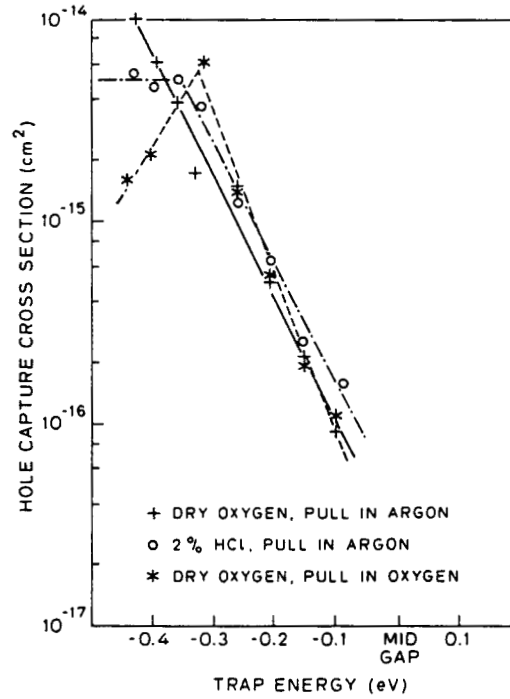


Figure 5: Variations de la section de capture des trous relative au pièges répartis dans la demi bande interdite inférieure. Différents types d'oxydation sont donnés en exemple [66].

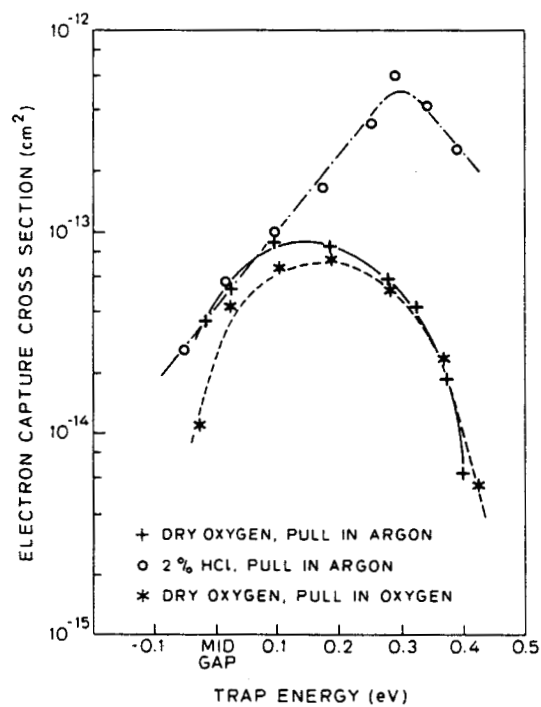


Figure 6: Variations de la section de capture des électrons relative au pièges répartis dans la demi bande interdite supérieure. Différents types d'oxydation sont donnés en exemple [66].

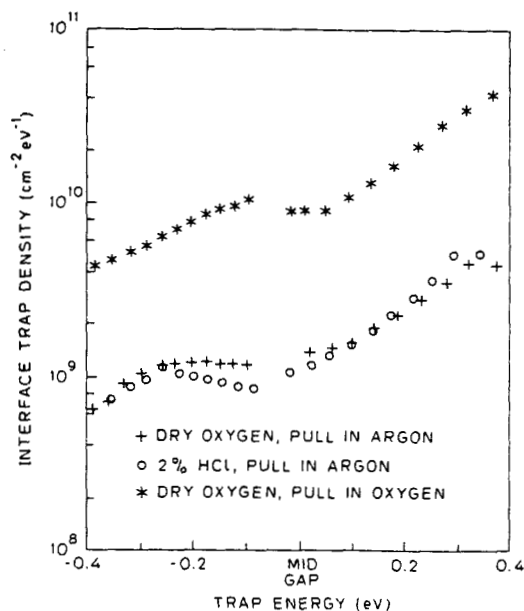


Figure 7: Variation de la densité de piège dans la bande interdite suivant quelques types d'oxydation [66].

5.2.6 Effets de fort dopage

La plupart des dispositifs contiennent des régions fortement dopées dont la composition influe sur les mécanismes de transport. Ce dernier point est particulièrement vrai pour les caractéristiques de gain en courant de composants bipolaires [67]. Lorsque le niveau de dopage est suffisamment élevé (typiquement 10^{18} cm^{-3}), les densités d'états relatives aux bandes de conduction et de valence sont affectées par deux types de phénomènes. Le premier concerne les interactions possibles entre porteurs d'une part, et entre porteurs et impuretés ionisées d'autre part. Le second concerne la perturbation du potentiel périodique du cristal lié au grand nombre de charges libres introduites. Ces deux effets contribuent à un déplacement rigide des extrêmes de bandes et à une déformation de celles-ci. Les niveaux discrets d'énergie liés à la présence d'impuretés tendent à former une distribution (quasi-continuum) d'énergies permises dans la bande interdite qui entre alors en recouvrement avec les queues de distribution des bandes de conduction ou de valence. Ce point est illustré en figure 8 par la structure de bande associée à un dopage de type donneurs de l'ordre de 10^{18} cm^{-3} .

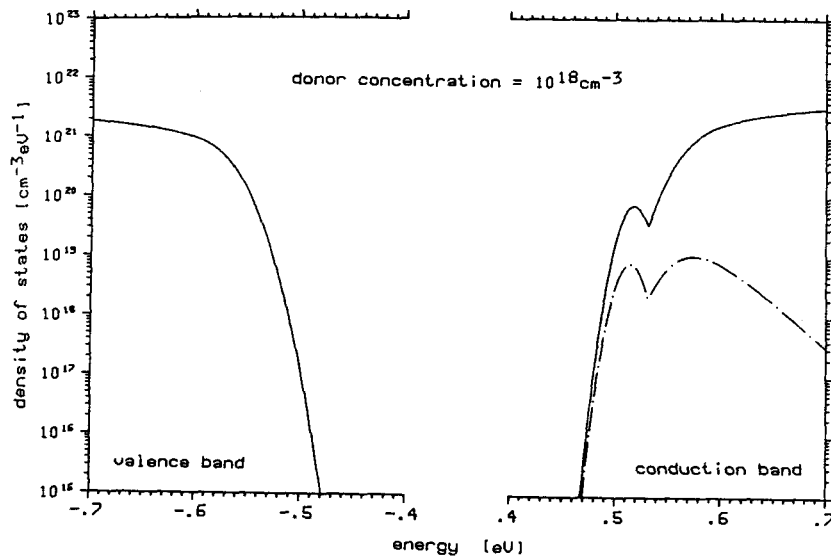


Figure 8: Déformation des minima de bandes et rétrécissement de bande interdite. Concentration nulle d'accepteurs et de 10^{18} cm^{-3} en donneurs [26].

En théorie, la prise en compte des effets de fort dopage requiert l'utilisation de la statistique de Fermi et l'usage d'une densité d'état réaliste [68]. Les modèles décrivant les concentrations en porteurs deviennent alors complexes. Une approche beaucoup plus simple est généralement préférée: elle consiste à introduire l'ensemble des déformations et décalages de bandes dans l'expression d'une densité intrinsèque effective qui tient compte du rétrécissement de la bande interdite ($\Delta E_g = q\Delta V_g$):

$$n_{ie} = n_i \cdot \exp\left(\frac{q\Delta V_g}{2k_b T}\right) \quad (98)$$

avec

$$\Delta V_g = V_1 \cdot \left\{ \ln\left(\frac{N_a + N_d}{N_0}\right) + \sqrt{\ln^2\left(\frac{N_d + N_a}{N_0}\right) + C} \right\} \quad (99)$$

où V_1 , N_0 et C sont des constantes. Une des principales limitation de ce modèle est de considérer des déplacements symétriques des bandes ($\Delta E_c = \Delta E_v = \Delta E_g/2$). Il est issu du travail expérimental de Slotboom et De Graaff [69] justifié à posteriori par une approche théorique [70]. Les

paramètres utilisés sont synthétisés dans le tableau VI.

TABLEAU VI

PARAMETRE	UNITE	VALEUR
V_1	v	$9 \cdot 10^{-3}$
N_0	cm^{-3}	10^{17}
C	-	0.5

Les variations de la densité intrinsèque effective en fonction du dopage sont reportées en figure 9 où les points de mesures sont également reportés. D'autres modèles sont également disponibles dans la littérature [68][71]: ils peuvent être considérés comme pratiquement équivalents pour des concentrations inférieures à 10^{20} cm^{-3} .

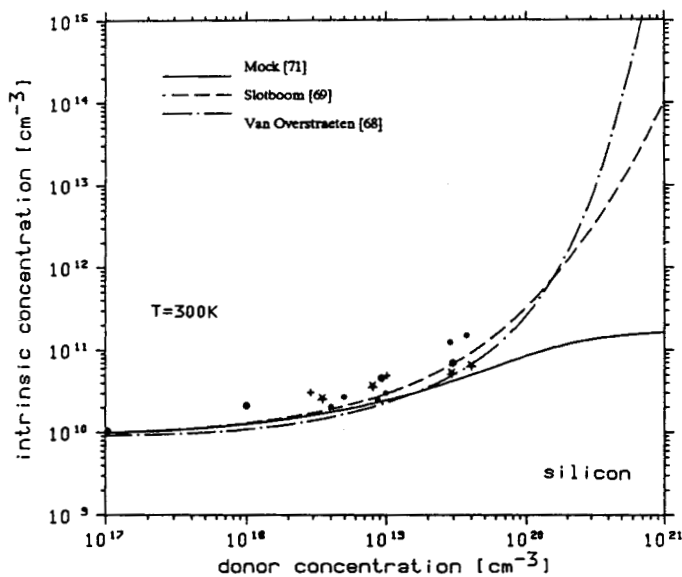


Figure 9: Variations de la densité intrinsèque effective en fonction du niveau de dopage [26].

CHAPITRE II

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] L. Landau, E. Lifchitz, 'Physique statistique', Ed. MIR, 1967.
- [2] P. Kiréev, 'La physique des semiconducteurs', Ed. MIR, 1975.
- [3] G. Baccarani, 'Physics of submicron devices', Proc. VLSI Process and Device Modeling, K.U.L. Summer Course, pp 1-23, 1983.
- [4] E. Constant, 'Non steady state carrier transport in semiconductor in perspective with submicron devices', Topics in applied physics: Hot electron transport in semiconductor, vol. 58, Ed. L. Reggiani, Springer-Verlag.
- [5] A. Zylbersztejn, 'Contribution à l'étude des phénomènes d'électrons chauds dans les semi-conducteurs à très basse température', note technique N.T. 158, Publications Scientifiques et Techniques du Ministère de L'Air, 1967.
- [6] E.M. Conwell, 'High field transport in semiconductors', Solid State Physics, Suppl. 9, Academic Press, 1967.
- [7] T. Iizuka, M. Fukuma, 'Carrier transport simulator for silicon based on carrier distribution function evolutions', Solid-State Electronics, vol. 33, n°1, pp 27-34, Janvier 1990.
- [8] C. Moglestue, 'A self-consistent Monte-Carlo particle model to analyze semiconductor microcomponents of any geometry', IEEE Trans. Computer-Aided Design, vol. 5, n°2, pp 326-345, Avril 1986.
- [9] J. Zimmermann, Y. Leroy, E. Constant, 'Monte Carlo calculation of microwave and far-infrared hot-carrier in n-Si: efficiency of millimeter transit-time oscillators', J. Appl. Phys., vol. 49, n°6, pp 3378-3383, Juin 1978.
- [10] F. Venturi, E. Sangiorgi, R. Brunetti, C. Jacoboni, B. Ricco, 'Monte-Carlo

simulation of electron heating in scaled deep submicron mosfets', IEDM Tech. Dig., pp 485-488, Décembre 1989.

- [11] C. Jacoboni, P. Lugli, 'The Monte Carlo method for semiconductor device simulation', Computational Microelectronics, Ed. S. Selberherr, Springer-Verlag, 1989.
- [12] K. Blotekjaer, 'High-frequency conductivity, carrier waves and acoustic amplification in drifted semiconductor plasmas', Ericsson Technics, vol. 22, pp 125-183, Octobre 1966.
- [13] G. Baccarani, M.R. Wordeman, 'An investigation of steady-state velocity overshoot in silicon', Solid-State Electronics, vol. 28, n°4, pp 407-416, Avril 1985.
- [14] K. Blotekjaer, 'Transport equations for electrons in two-valley semiconductors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 17, n°1, pp 38-47, Janvier 1970.
- [15] R. Stratton, 'Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers', Phys. Rev., vol. 126, pp 2002-2014, 1962.
- [16] J.P. Nougier, J.C. Vaissiere, D. Gasquet, J. Zimmermann, E. Constant, 'Determination of transient regime of hot carriers in semiconductors, using the relaxation time approximations', J. Appl. Phys., vol.52, n°2, pp 825-832, Février 1981.
- [17] M. Shur, 'Influence of nonuniform field distribution on frequency limits of GaAs field-effect transistors', Electronics Letters, vol. 12, n° 23, pp 615-616, Novembre 1976.
- [18] B. Carnez, A. Cappy, A. Kaszynski, E. Constant, G. Salmer, ' Modeling of a submicrometer gate field-effect transistor including effects of nonstationary electron dynamics', J. Appl. Phys., vol. 51, n°1, pp 784-790, Janvier 1980.
- [19] A. Cappy, B. Carnez, R. Fauquembergues, G. Salmer, E. Constant, 'Comparative potential performance of Si, GaAs, GaInAs, InAs submicrometer-gate FET's', IEEE Trans. Electron. Devices, vol. 27, n°11, pp 2158-2160, Novembre 1980.

- [20] P.A. Rolland, G. Salmer, E. Constant, R. Fauquembergue, 'Comparative frequency behaviour of GaAs, InP, GaInAs, transferred electron devices - Derivation of a simple comparative criterion', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 28, n°3, pp 341-343, Mars 1981.
- [21] B. Meinerzhagen, 'Two-dimensional numerical substrate current modeling for n-channel MOS', Proc. NASECODE V Conf., Ed. J.J.H. Miller, pp 42-59, 1987.
- [22] I. Kamohara, K. Matzuya, T. Wada, K. Natori, 'Impacts of modified characteristics on 0.1 μm mosfet speed based on energy transport and parasitic effects', IEDM Tech. Digest, 1990.
- [23] Y.J. Park, D.H. Navon, T.W. Tang, 'Monte-Carlo simulation of bipolar transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 31, n°12, pp 1724-1730, Décembre 1984.
- [24] G. Baccarani, C. Jacobini, A.M. Mazzone, 'Current transport in narrow-base transistors', Solid-State Electronics, vol. 20, pp 5-10, 1977.
- [25] F. Odeh, L. Reyna, J. White, M. Rudan, 'A highlight in large scale circuit and device computations', Lecture notes Short Course, NASECODE V Conf., pp 71-82, Juin 1987.
- [26] S. Selberherr, 'Analysis and simulation of semiconductor devices', Springer-Verlag, 1984.
- [27] K.M. Van Vliet, A.H. Marshak, 'The Schokley-like equations for carrier densities and the current flows in material with nonuniform composition', Solid-State Electronics, vol. 23, pp 49-53, 1980.
- [28] R.J. Van Overstraeten, H.J. De Man, R.P. Mertens, 'Transport equations in heavy doped silicon', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 20, n°3, pp 290-298, Mars 1973.
- [29] J.A. Del Alamo, R.M. Swanson, 'The physics and modeling of heavily doped emitters', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 31, n°12, pp 1878-1888, Décembre 1984.
- [30] J.W. Slotboom, H.C. De Graaff, 'Measurements of bandgap narrowing in Si bipolar transistors', Solid-State Electronics, vol. 19, pp 857-862, 1976.

- [31] S.M. Sze, 'Physics of semiconductor devices', 2nd edition, Wiley, 1981.
- [32] J.O. Nylander, F. Masszi, S. Selberherr, S. Berg, 'Computer simulations of Schottky contacts with a non-constant recombination velocity', Solid-State Electronics, vol. 32, n°5, pp 363-367, Mai 1989.
- [33] W.L. Engl, O. Manck, A.W. Wieder, 'Modeling of bipolar devices', Process and device modeling for integrated circuit design, Eds. F. Van De Wiele, W.L. Engl, P.G. Jespers, pp 377-418, 1977.
- [34] E.M. Conwell, 'High field transport in semiconductors', Solid State Physics, Suppl. 9, Academic Press, 1967.
- [35] J.M. Dorkel, P. Leturcq, 'Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level', Solid-State Electronics, vol. 24, pp 821-825, 1981.
- [36] D.L. Scharfetter, H.K. Gummel, 'Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 16, n°1, pp 64-77, Janvier 1969.
- [37] K.K. Thornber, 'Relation of drift velocity to low-field mobility and high-field saturation velocity', J. Appl. Phys., vol. 21, n°4, pp 2127-2136, Avril 1980.
- [38] K. Yamaguchi, 'Field-dependent mobility model for two-dimensional numerical analysis of MOSFET's', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 26, pp 1068-1074, 1979.
- [39] K. Yamaguchi, 'A mobility model for carriers in the MOS inversion layer', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 30, n°6, pp 658-663, Juin 1983.
- [40] T. Toyabe, H. Masuda, Y. Aoki, H. Shukuri, T. Hagiwara, 'Three-dimensional device simulator CADDETH with highly convergent matrix solution algorithms, IEEE Trans. on Computer-Aided Design, vol. 4, n°4, pp 482-488, Octobre 1985.
- [41] G. Baccarani, R. Guerrieri, P. Ciampolini, M. Rudan, 'HFIELD: a highly flexible 2-D semiconductor-device analysis program', Proc. NASECODE IV conf., pp 3-12, 1985.

- [42] A. Hiroki, S. Odanaka, K. Ohe, H. Esaki, 'A mobility model for submicrometer MOSFET device simulations', IEEE Electron device letters, vol. 8, n°5, pp 231-233, Mai 1987.
- [43] S.A. Schwarz, S.E. Russek, 'Semi-empirical equations for electron velocity in silicon: Part I-Bulk', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 30, n°12, pp 1629-1633, Décembre 1983.
- [44] S.A. Schwarz, S.E. Russek, 'Semi-empirical equations for electron velocity in silicon: Part II-MOS inversion layer', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 30, n°12, pp 1634-1639, Décembre 1983.
- [45] W. Shockley, W.T. Read, 'Statistics of the recombination of hole and electrons', Phys. Rev 87, n°5, 835-842, 1952.
- [46] R.N. Hall, 'Electron-hole recombination in germanium', Phys. Rev. 87, p 387, 1952.
- [47] R.F. Pierret, 'Advanced semiconductor fundamentals', Modular series on solid state devices, Addison-Wesley, 1987.
- [48] A.G. Chynoweth, 'Ionization rates for electrons and holes in silicon', Phys. Rev. 109, pp 1537-1540, 1958.
- [49] J.G. Fossum, 'Computer aided numerical analysis of silicon solar cells', Solid-State Electronics, vol. 19, pp 269-277, 1976.
- [50] J.G. Fossum, D.S. Lee, 'A physical model for the dependence of carrier lifetime on doping density in nondegenerate silicon', Solid-State Electronics, vol. 25, n°8, 741-747, Août 1982.
- [51] J. Dziewior, W. Schmid, 'Auger coefficients for highly doped and highly excited silicon', Appl. Phys. Lett., vol. 31, pp 346-348, 1977.
- [52] T. Hamasaki, T. Wada, N. Shigyo, M. Yoshimi, 'Lateral scaling effects on high-current transients in submicrometer bipolar transistors', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 35, n°10, pp 1620-1626, Octobre 1988.
- [53] H.S. Bennett, D.E. Fuoss, 'Improved physics for simulating submicron bipolar devices', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 32, n°10, pp 2069-2074, Octobre 1985.

- [54] C.T. Chuang, D. Duan-Lee Tang, G.P. Li, E. Hackbarth, 'On the punchthrough characteristics of advanced self-aligned bipolar transistors', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 34, n°7, pp 1519-1524, Juillet 1987.
- [55] C. Basanava Goud, K.N. Bhat, 'On the choice of appropriate ionization coefficients for breakdown voltage calculations', Solid-State Electronics, vol. 30, n°8, pp 787-792, Août 1987.
- [56] W. Shockley, 'Problems related to P-N junctions in silicon', Solid-State Electronics, vol. 2, n°1, pp 35-67, Janvier 1961.
- [57] P.A. Wolff, 'Theory of multiplication in silicon and germanium', Phys. Rev. 95, pp 1415-1420, 1954.
- [58] T. Wada, R. Dang, 'Development and application of a high-speed two-dimensional time dependent device simulator (MOS2C)', Proc. NASECODE IV conf., 1985.
- [59] B.K. Ridley, 'Lucky-drift mechanism for impact ionisation in semiconductors', Solid State Phys., vol. 16, pp 3373-3388, 1983.
- [60] S. Mc Kenzie, M.G. Burt, 'A test of the lucky-drift theory of the impact ionisation coefficient using Monte Carlo simulation', Solid State Phys., vol. 19, pp 1959-1973, 1986.
- [61] C. Hu, S.C. Tam, F.C. Hsu, P.K. Ko, T.Y. Chan, K.W. Terrill, 'Hot-electron induced MOSFET degradation model, monitor and improvement', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 32, n°2, pp 375-385, Février 1985.
- [62] J.Y. Tang, K. Hess, 'Impact ionization of electrons in silicon (steady-state)', J. Appl. Phys., vol. 54, n°9, pp 5139-5144, Septembre 1983.
- [63] R. Van Overstraeten, H. De Man, 'Measurement of the ionization rates in diffused silicon P-N junctions', Solid-State Electronics, vol. 13, pp 583-608, 1970.
- [64] R.R. Razouk, B.E. Deal, 'Dependence of interface states density on silicon thermal oxidation process variables', J. of Electrochemical Soc., vol. 126, p 1573, Septembre 1979.

- [65] T.J. Tredwell, C.R. Viswanathan, 'Interface-state parameter determination by deep-level transient spectroscopy', Appl. Phys. Letters, vol. 36, p 462, Mars 1980.
- [66] W.D. Eades, R.M. Swanson, 'Calculation of surface generation and recombination velocities at the Si-SiO₂ interface', J. Appl. Phys., vol. 58, pp 4267-4276, Décembre 1985.
- [67] J.A. Del Alamo, R.M. Swanson, 'The physics and modeling of heavily doped emitters', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 31, n°12, pp 1878-1888, Décembre 1984.
- [68] R.J. Van Overstraeten, H.J. De Man, R.P. Mertens, 'Transport equations in heavy doped silicon', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 20, n°3, pp 290-298, Mars 1973.
- [69] J.W. Slotboom, H.C. De Graaff, 'Measurements of bandgap narrowing in Si bipolar transistors', Solid-State Electronics, vol. 19, pp 857-862, 1976.
- [70] J.W. Slotboom, 'The PN-product in silicon', Solid-State Electronics, vol. 20, pp 279-283, 1977.
- [71] M.S. Mock, 'Transport equation in heavily doped silicon, and the current gain of a bipolar transistor', Solid-State Electronics, vol. 16, pp 1251-1259, 1973.
- [72] R.S. Muller, T.I. Kamins, 'Device electronics for integrated circuits', Wiley, 1977.

CHAPITRE III

METHODES NUMERIQUES

III-1 INTRODUCTION

L'équation de Poisson et les équations de continuité en courant forment la base du problème mathématique nécessaire à l'analyse des phénomènes de transport dans les semi-conducteurs. Ces équations sont rappelées brièvement en (1), (2) et (3).

$$\vec{\nabla}(\epsilon \vec{\nabla}\psi) = -q(p-n+N_d-N_a) \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \left(-qn\mu_n \vec{\nabla}\psi + qD_n \vec{\nabla}n - \frac{1}{2}qn\mu_n \vec{\nabla}V_g \right) = -q(G-R) \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \left(-qp\mu_p \vec{\nabla}\psi - qD_p \vec{\nabla}p + \frac{1}{2}qp\mu_p \vec{\nabla}V_g \right) = q(G-R) \quad (3)$$

Elles forment un système couplé non linéaire ne pouvant être résolu que par des méthodes numériques de discrétisation spatiale. Une telle approche met en oeuvre trois phases essentielles qui ont un effet direct sur la précision des résultats obtenus. La première consiste en la discrétisation du domaine (géométrie du dispositif) en un nombre fini d'éléments ou de points où sera calculée une solution approximée du système d'équations. La seconde phase concerne le schéma de discrétisation des équations aux points de maillage et le choix des fonctions d'interpolation qui permettent d'approximer l'ensemble des variables dans chaque sous-domaine: cette étape transforme un système d'équations continues en un système d'équations algébriques dont la dimension est fixée par le nombre de points de discrétisation et le nombre de variables de base. Enfin, la résolution du système ainsi obtenu constitue la troisième phase: linéarisation et solution du problème linéaire.

L'ensemble des étapes évoquées précédemment fait l'objet d'une analyse détaillée dans ce chapitre. Dans un premier temps, l'examen des approches numériques existantes permettront de justifier le choix effectué dans le cadre de ce travail. Les points suivants aborderont plus particulièrement les schémas de discrétisation (normalisation et discrétisation des équations constitutives) et le traitement des conditions frontières. La solution du problème non linéaire couplé sera ensuite décrite et les méthodes de résolution des systèmes linéaires résultants seront explicitées. La stratégie générale de maillage sera ensuite illustrée sur quelques exemples pratiques. Enfin, une méthode annexe de discrétisation dédiée au calcul des lignes de courant sera développée dans un dernier temps.

III-2 CHOIX DE LA METHODE NUMERIQUE

Les méthodes d'éléments finis et de différences finies permettent toutes deux d'adresser le type de problème posé par les équations (1), (2) et (3). Historiquement, la méthode des différences finies fut appliquée à un domaine unidimensionnel dans les travaux de Gummel et Scharfetter [1][2] qui sont considérés comme des pionniers dans le domaine de la simulation de dispositif. La méthode fut ensuite étendue au problème bidimensionnel sur la base d'un maillage rectangulaire [3][4][5]. Ces méthodes, telles qu'elles avaient été développées, présentaient l'énorme désavantage de ne pouvoir traiter que des structures rectangulaires. Le manque de flexibilité de ces outils de simulation et les besoins en traitement de géométries non planes ont alors motivé l'application de méthodes des éléments finis [6][7][8] dont le principal avantage réside dans le choix des éléments (rectangulaires, triangulaires) et les possibilités de raffinements de maillage.

De manière synthétique, la méthode des éléments finis recherche une approximation de la solution exacte pour chacun des éléments définis par la discrétisation spatiale. Dans un élément donné, la solution partielle est telle que sa contribution à l'extérieur de l'élément est nulle. La solution sur l'ensemble du domaine est alors une somme des solutions partielles liées à chaque élément [9]. Appliquée aux semi-conducteurs, la méthode des éléments finis repose sur une formulation intégrale faible du jeu d'équations (1)-(3) [6] qui nécessite la définition d'une famille de fonctions de pondération

indépendantes. La méthode de Galerkin consiste à adopter comme fonction de pondération une union des fonctions de forme liées à un noeud particulier. Enfin, la fonction de forme d'un élément permet d'exprimer la solution en un point quelconque de cet élément à partir de ses valeurs nodales. La fonction de forme est généralement exprimée par un polynôme dont le degré dépend du nombre de noeuds de l'élément. Une analyse détaillée de l'erreur de discrétisation introduite par ce développement polynomial dépasse largement le cadre de ce travail. Une estimation donnée en [10] permet de démontrer que cette erreur devient acceptable seulement dans la limite de très petits éléments. Ceci peut être expliqué intuitivement par le fait qu'un polynôme représente une description assez pauvre des variations de type exponentielles des concentrations en porteurs entre deux points de discrétisation. C'est uniquement en ce sens que la méthode des éléments finis peut être considérée comme inférieure à une méthode de différences finies utilisant le schéma de discrétisation introduit par Scharfetter et Gummel [2]. La littérature reporte quelques expériences visant la mise au point et la justification mathématique d'une méthode d'éléments finis prenant en compte une description exponentielle des profils en porteurs, avec toutefois un succès limité [11]. La recherche dans ce domaine se poursuit et laisse apparaître quelques solutions prometteuses [12].

Les problèmes de géométries non planes furent résolus par une approche alternative [13] utilisant une méthode hybride alliant la souplesse de discrétisation spatiale fournie la méthode des éléments finis (éléments triangulaires, par exemple) et la robustesse du schéma de discrétisation [2] utilisé dans la méthode des différences finies. Rigoureusement, cette approche représente une méthode de différences finies généralisée au type d'élément triangulaire. Ceci est principalement dû au fait que la méthode hybride ne supporte pas de règle d'interpolation sur l'ensemble d'un élément, mais exclusivement sur ses côtés.

La méthode, mise en oeuvre dans le cadre de ce travail, est une méthode de différences finies identique à celle développée par Selberherr [14] utilisant des mailles rectangulaires à pas variable. Son choix a été essentiellement guidé par les principales caractéristiques suivantes:

- (i) facilité d'implémentation
- (ii) stabilité numérique dans le traitement du problème couplé
- (iii) intégration de méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires, particulièrement efficaces dans le traitement de matrices bandes

L'inconvénient majeur de cette méthode, à savoir l'impossibilité de traiter des géométries quelconques, a été en parti levé pour permettre la prise en compte d'interfaces Si/SiO₂ non plans dans un nombre limité de cas.

III-3 NORMALISATION DES EQUATIONS

Le choix des variables indépendantes sur lequel repose la discrétisation des équations est particulièrement important car il conditionne en partie les propriétés de convergence des méthodes numériques. Par exemple, l'emploi du jeu de variables $(\psi, e^{-\varphi_n/\varphi_t}, e^{\varphi_p/\varphi_t})$ est particulièrement attractif: en effet, la linéarisation des équations résultant d'une approche découplée conduit à des matrices symétriques diagonales dominantes inversées efficacement par une méthode itérative standard. Cependant, les variables de Slotboom $(e^{-\varphi_n/\varphi_t}, e^{\varphi_p/\varphi_t})$ nécessitent une dynamique numérique importante énorme souvent limitative du point de vue informatique. Une liste quasi exhaustive des jeux d'inconnues et une discussion de leurs propriétés est donnée par Polak [15]. Les variables (ψ, n, p) ont été adoptées dans notre approche car elles représentent un compromis acceptable dans les caractéristiques de stabilité numérique et de dynamique qui en découlent.

Le potentiel et les concentrations en porteurs représentent des ordres de grandeur très différents dont la dynamique peut être recentrée par une étape de normalisation des variables. Les facteurs de normalisation des principales variables sont résumés dans le tableau ci-dessous.

TABLEAU I

VARIABLE	UNITE	FACTEUR DE NORMALISATION	ORDRE DE GRANDEUR
x, y	cm	$x_0 = \sqrt{\frac{\epsilon_s k_b T}{q^2 n_i}}$	$33.4 \cdot 10^{-4}$
$\psi, \phi_n, \phi_p, V_g$	v	$\psi_t = \frac{k_b T}{q}$	0.0258
n, p, N_a, N_d	cm^{-3}	n_i	$1.48 \cdot 10^{10}$
μ_n, μ_p	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{v}^{-1}$	$\mu_0 = 1$	1
D_n, D_p	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	$D_0 = \mu_0 \psi_t$	0.0258
$(G-R)$	$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$	$\frac{D_0 n_i}{x_0^2}$	$3.42 \cdot 10^{13}$
$(G-R)_s$	$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$	$\frac{D_0 n_i}{x_0}$	$1.14 \cdot 10^{11}$
\vec{J}_n, \vec{J}_p	$\text{cb s}^{-1} \text{cm}^{-2}$	$\frac{q D_0 n_i}{x_0}$	$1.82 \cdot 10^{-8}$

Le jeu d'équations (1),(2),(3) s'écrit alors sous la forme sans dimension suivante:

$$\vec{\nabla}(\tilde{\epsilon} \vec{\nabla} \psi) = -(p-n+N_d-N_a) \quad (4)$$

$$\vec{\nabla} \vec{J}_n = \vec{\nabla} \left(-n \mu_n \vec{\nabla} \left(\psi + \frac{V_g}{2} \right) + D_n \vec{\nabla} n \right) = -(G-R) \quad (5)$$

$$\vec{\nabla} \vec{J}_p = \vec{\nabla} \left(-p \mu_p \vec{\nabla} \left(\psi - \frac{V_g}{2} \right) - D_p \vec{\nabla} p \right) = (G-R) \quad (6)$$

L'équation de Poisson laisse apparaître explicitement la permittivité adimensionnelle dont la valeur dépend du matériau:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\epsilon} &= \tilde{\epsilon}_{si} = 1 \text{ dans le silicium} \\ \tilde{\epsilon} &= \tilde{\epsilon}_{ox} = \frac{\epsilon_{ox}}{\epsilon_{si}} \text{ dans l'oxyde} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

III-4 DISCRETISATION DES EQUATIONS

III-4.1 Généralités

La méthode des différences finies utilise un partitionnement du domaine en un nombre fini de cellules rectangulaires dont les côtés sont parallèles au système d'axes orthogonal. Un exemple typique de maillage est donné par la figure 1 dans le cas d'un transistor MOS plan.

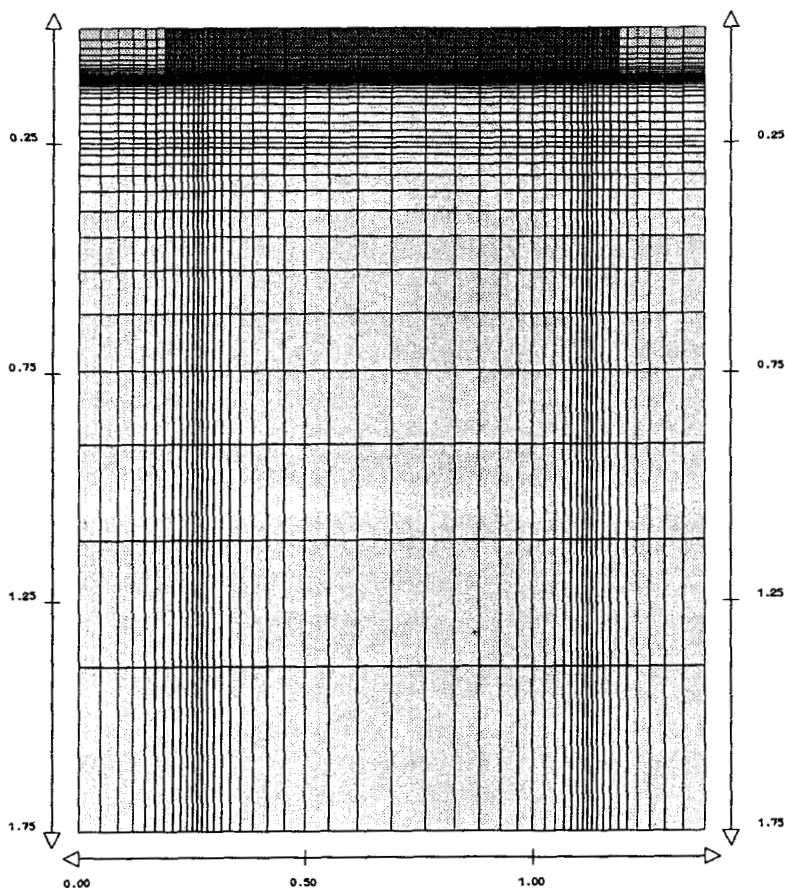


Figure 1: Maillage différences finies typique de la discrétisation d'un transistor MOS.

La méthode consiste à remplacer l'expression continue de chaque équation différentielle par un ensemble d'équations aux différences faisant intervenir les inconnues du point considéré et de ses quatre premiers voisins (figure 2).

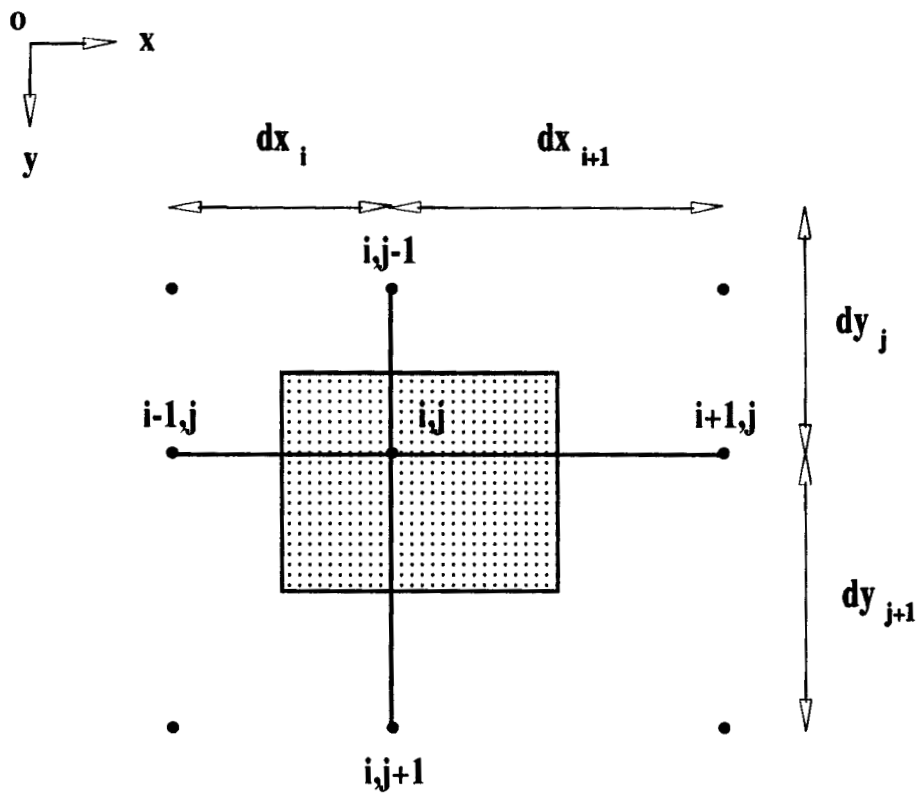


Figure 2: Détail d'une partie du maillage différences finies montrant l'environnement du point (i,j) et le volume associé à ce point.

L'ensemble des équations à résoudre peuvent se mettre sous la forme:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} = f \quad (8)$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur à 2, un développement limité faisant apparaître chaque dérivée partielle est donné par:

$$F_x|_{i+\frac{1}{2},j} = F_x|_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{\partial F_x}{\partial x} \Big|_{i,j} \frac{dx_{i+1}+dx_i}{2} \quad (9)$$

$$F_y|_{i,j+\frac{1}{2}} = F_y|_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{\partial F_y}{\partial y} \Big|_{i,j} \frac{dy_{j+1}+dy_j}{2} \quad (10)$$

Les relations (9) et (10) permettent d'exprimer les équations de base (4)-(5) en chacun des points du domaine:

$$\frac{\{F_x|_{i+\frac{1}{2},j} - F_x|_{i-\frac{1}{2},j}\}}{\frac{dx_{i+1}+dx_i}{2}} + \frac{\{F_y|_{i,j+\frac{1}{2}} - F_y|_{i,j-\frac{1}{2}}\}}{\frac{dy_{j+1}+dy_j}{2}} = f_{i,j} \quad (11)$$

L'étape suivante consiste à exprimer les composantes du vecteur \vec{F} au milieu des segments reliant le point (i,j) à ses quatre premiers voisins. L'hypothèse fondamentale qui est utilisée dans ce qui suit consiste à considérer F_x et F_y constants sur ces segments. Il convient maintenant de distinguer les cas relatifs à l'équation de Poisson (\vec{F} désigne alors le champ électrique) ou aux équations de continuités de courants (\vec{F} désigne une densité de courant).

III-4.2 Discrétisation de l'équation de Poisson

Dans ce cas, \vec{F} se rapporte au vecteur déplacement électrique $-\epsilon \vec{\nabla} \psi$. Dans une étape préliminaire, les équations discrétisées seront exprimées uniquement à l'intérieur du domaine silicium. Leurs modifications résultant des conditions limites ou liées à un matériau non homogène seront traitées plus en avant dans ce chapitre. Dans le cas présent $\tilde{\epsilon}$ est égal à 1, ce qui permet de travailler avec le champ électrique \vec{E} . Sous l'hypothèse annoncée d'un champ constant, le potentiel est décrit linéairement sur chaque segment:

$$E_x |_{i+\frac{1}{2}, j} = - \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2}, j} = - \frac{\psi_{i+1, j} - \psi_{i, j}}{dx_{i+1}} \quad (12)$$

$$E_y |_{i, j+\frac{1}{2}} = - \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{i, j+\frac{1}{2}} = - \frac{\psi_{i, j+1} - \psi_{i, j}}{dy_{j+1}} \quad (13)$$

En tenant compte de (12) et (13) et après quelques réarrangements, l'équation de Poisson discrétisée au point (i,j) s'écrit:

$$g\psi_{i, j-1} + f\psi_{i-1, j} + b\psi_{i+1, j} + c\psi_{i, j+1} - a\psi_{i, j} - (n-p+N_a - N_d) |_{i, j} \cdot s = 0 \quad (14)$$

avec

$$g = \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_j} \quad f = \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_i} \quad b = \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_{i+1}} \quad c = \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_{j+1}} \quad (15.a)$$

$$a = -(g+f+b+c) \quad s = \frac{dx_i + dx_{i+1}}{2} \cdot \frac{dy_j + dy_{j+1}}{2} \quad (15.b)$$

III-4.3 Discrétisation des équations de continuité de courant

III-4.3.1 Position du problème

Afin de simplifier l'exposé, les développements qui suivent se limiteront à la continuité du courant d'électrons. Le résultat final sera cependant donné pour les deux types de porteurs. Dans ce cas particulier, les expressions de \vec{F} et f sont explicitement données par la densité de courant et le taux de recombinaison-génération, soit en travaillant toujours sur des quantités normalisées:

$$\vec{F} = \vec{J}_n = \begin{cases} \mu_n (n E_{nx} + \frac{\partial n}{\partial x}) \\ \mu_n (n E_{ny} + \frac{\partial n}{\partial y}) \end{cases} \quad f = -(G-R) \quad (16)$$

La relation d'Einstein ($\mu_n = D_n$ d'après la normalisation adoptée) et le champ électrique effectif ont été utilisés afin d'obtenir cette relation. L'évaluation de la densité de courant au milieu de chaque segment issu du point (i,j) est beaucoup plus délicate. Par exemple, la composante $\vec{J}_{nx} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}$ définie sur le segment reliant (i,j) et $(i+1,j)$ peut être simplement décrite par la relation (17), selon une approche assez directe.

$$\vec{J}_{nx} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \mu_n \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \left(n_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{dx_{i+1}} + \frac{n_{i+1,j} - n_{i,j}}{dx_{i+1}} \right) \quad (17)$$

Cependant cette formulation mène à des erreurs de discrétisation assez flagrantes dès que la différence de potentiel entre les deux points atteint quelques $\psi_t (=k_b T/q)$ [16][17]: la faiblesse de ce schéma s'explique par les variations linéaires imposées sur ψ , n et p alors, qu'en réalité, les concentrations en porteurs sont reliées au potentiel par une relation de type exponentielle.

III-4.3.2 Schéma de discrétisation

La dérivation d'un schéma de discrétisation plus réaliste peut être entreprise sur la base d'une analyse unidimensionnelle simple:

soit A et B deux points distants de Δx , entre lesquels le champ électrique, la densité de courant et la mobilité sont constants (figure 3).

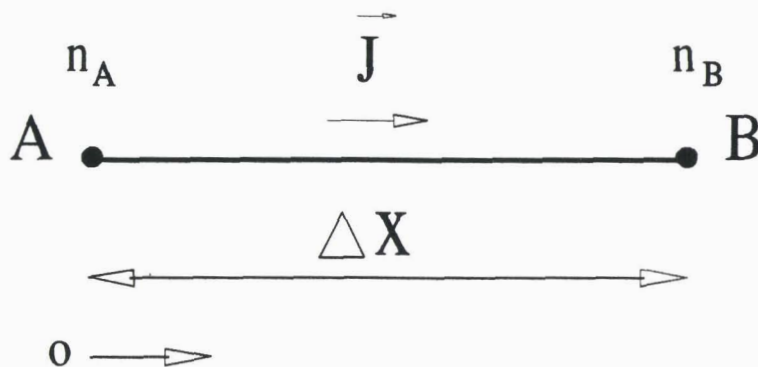


Figure 3: Dérivation unidimensionnelle du schéma de discrétisation de la densité de courant.

Dans ce cas, la relation (18) exprimant une densité unidimensionnelle peut être considérée comme une équation différentielle dont l'inconnue est la densité d'électrons.

$$\frac{dn}{dx} + E_n n = \frac{J_n}{\mu_n} \quad (18)$$

La solution de cette équation est donnée par :

$$n = C \exp(-E_n \cdot x) + \frac{J_n}{\mu E_n} \quad (19)$$

Par application des conditions limites en A et B, J_n met en évidence une fonction complexe des concentrations et des potentiels aux deux points:

$$J_n = \frac{\mu_n}{\Delta x} (n_B \cdot \mathcal{B}(\xi_{nB} - \xi_{nA}) - n_A \cdot \mathcal{B}(\xi_{nA} - \xi_{nB})) \quad (20)$$

où $\mathcal{B}(\xi)$ désigne la fonction de Bernoulli: $\frac{\xi}{e^\xi - 1}$. ξ_n tient compte du potentiel électrostatique modifié par les effets de fort dopage:

$$\xi_n = \psi + \frac{V_g}{2} \quad (21)$$

Ce schéma, suggéré en premier lieu par Scharfetter et Gummel [2], tient compte d'une description réaliste des variations de concentrations en porteurs. Il est à noter que la relation (20) constitue une solution exacte du problème tel qu'il a été posé.

III-4.3.3 Traitement du problème bidimensionnel

L'extension au problème bidimensionnel est analogue à celle décrite par Price [17]. Cette formulation ne permet pas d'exprimer la solution sur l'ensemble d'un élément mais considère plutôt que:

- (i) la composante de la densité de courant orientée dans le sens du segment est constante
- (ii) la mobilité et le coefficient de diffusion sont constants
- (iii) la variation du potentiel V_g est suffisamment douce pour être considérée comme linéaire entre deux points de discrétisation.

Sur la base des développements précédents, le calcul de chacune des composantes $\vec{J}_n \Big|_{i+\frac{1}{2}, j}$, $\vec{J}_n \Big|_{i-\frac{1}{2}, j}$, $\vec{J}_n \Big|_{i, j+\frac{1}{2}}$, $\vec{J}_n \Big|_{i, j-\frac{1}{2}}$ est trivial.

Leur injection dans l'équation (11) permet d'établir la formulation discrète de la loi de conservation du courant d'électrons:

$$\begin{aligned}
& n_{i,j-1} \mu_{n,i,j-\frac{1}{2}} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j-1} - \xi_{n,i,j}) \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_j} \\
& + n_{i-1,j} \mu_{n,i-\frac{1}{2},j} \mathcal{B}(\xi_{n,i-1,j} - \xi_{n,i,j}) \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_i} \\
& - n_{i,j} \left\{ \mu_{n,i,j-\frac{1}{2}} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j} - \xi_{n,i,j-1}) \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_j} \right. \\
& \quad + \mu_{n,i-\frac{1}{2},j} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j} - \xi_{n,i-1,j}) \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_i} \\
& \quad + \mu_{n,i+\frac{1}{2},j} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j} - \xi_{n,i+1,j}) \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_{i+1}} \\
& \quad \left. + \mu_{n,i,j+\frac{1}{2}} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j} - \xi_{n,i,j+1}) \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_{j+1}} \right\} \\
& + n_{i+1,j} \mu_{n,i+\frac{1}{2},j} \mathcal{B}(\xi_{n,i+1,j} - \xi_{n,i,j}) \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2 dx_{i+1}} \\
& + n_{i,j+1} \mu_{n,i,j+\frac{1}{2}} \mathcal{B}(\xi_{n,i,j+1} - \xi_{n,i,j}) \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2 dy_{j+1}} \\
& + (G-R)_{i,j} \frac{dx_{i+1} + dx_i}{2} \frac{dy_{j+1} + dy_j}{2} = 0 \tag{22}
\end{aligned}$$

Une telle relation peut être déduite pour la conservation du courant de trous, en inversant les indices 'n' en 'p', le signe de l'argument de chaque fonction de Bernoulli, et en posant:

$$\xi_p = \psi - \frac{V_g}{2} \tag{23}$$

III-4.4 Dicitéisation des conditions limites

Une description de la discrétisation des conditions de flux appliquées aux surfaces extérieures et à l'interface Si/SiO₂ fait l'objet de ce qui suit. Les conditions de Dirichlet, fixant le potentiel et les densités de porteurs aux contacts, ne seront pas évoquées de par la simplicité de leur traitement.

III-4.4.1 Les conditions de flux nul

Cette condition concerne le champ électrique et les densités de courant sur les surfaces extérieures désignées par (N1,N2,N3,N4) (cf. figure 1, paragraphe II-2). Elle sera illustrée dans le cas d'une frontière verticale illustrée en figure 4.

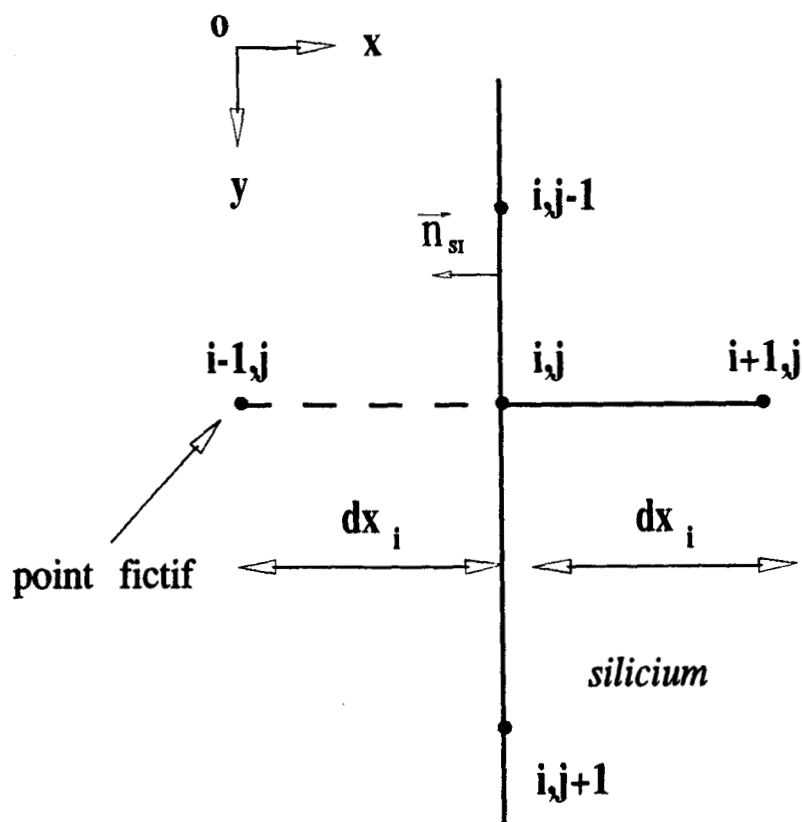


Figure 4: Illustration du procédé utilisé afin d'obtenir la forme discrète d'une condition de flux nul sur une surface verticale.

L'expression de ces conditions est synthétisée par la relation (24) où \vec{F} désigne soit une densité de courant (\vec{J}_n, \vec{J}_p), soit le champ électrique \vec{E} . Le vecteur \vec{n}_{si} désigne la normale à la surface orientée vers l'extérieur du domaine.

$$\vec{F} \cdot \vec{n}_{si} = 0 \quad (24)$$

Cette condition de Neumann correspond à une condition de miroir qui, au point (i,j) est exprimée en introduisant le point fictif $(i-1,j)$.

Elle s'exprime par:

$$\vec{F}_x \Big|_{i,j} = \left(\frac{\vec{F}_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j} + \vec{F}_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}}{2} \right) = 0 \quad (25)$$

soit

$$\vec{F}_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j} = -\vec{F}_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \quad (26)$$

En introduisant cette artifice de calcul dans la relation générale (11), une nouvelle forme des équations discrétisées peut être déterminée. Par exemple, dans le cas de l'équation de Poisson (14), les coefficients g, f, b, c et s sont corrigés de la manière suivante:

$$g = \frac{dx_{i+1}}{2 dy_j} \quad f=0 \quad b = \frac{dy_{j+1}+dy_j}{2 dx_{i+1}} \quad c = \frac{dx_{i+1}}{2 dy_{j+1}} \quad (27.a)$$

$$a = -(g+f+b+c) \quad s = \frac{dx_{i+1}}{2} \cdot \frac{dy_j+dy_{j+1}}{2} \quad (27.b)$$

III-4.4.2 Discrétisation de la loi de Gauss

La prise en compte de la loi de Gauss à l'interface Si/SiO₂ est légèrement plus complexe que dans le cas précédent. Sa formulation est ici rappelée par commodité sous sa forme normalisée:

$$\tilde{\epsilon}_{si} \frac{\partial \psi}{\partial n_{si}} \Big|_{si} \cdot \vec{n}_{si} - \tilde{\epsilon}_{ox} \frac{\partial \psi}{\partial n_{si}} \Big|_{ox} \cdot \vec{n}_{si} - Q_s = 0 \quad (28)$$

Un nouveau cas particulier relatif à un interface plan est illustré en figure 5.

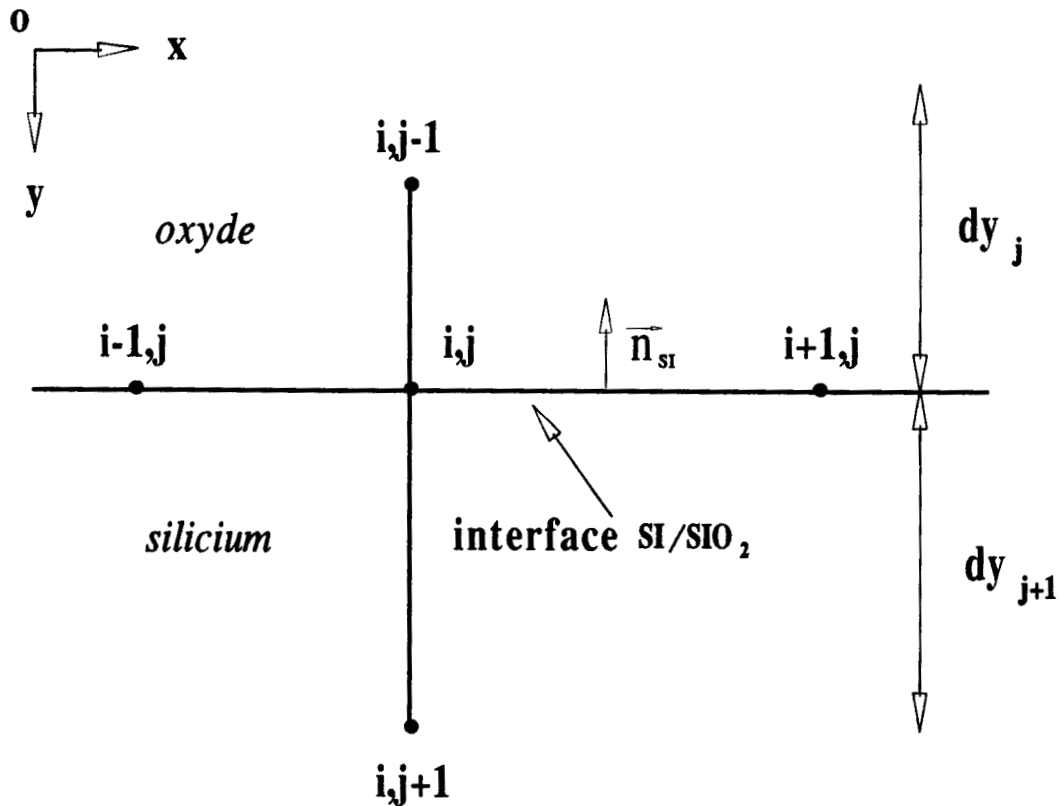


Figure 5: Discrétisation de la loi de Gauss au niveau d'un interface oxyde/silicium plan horizontal.

Les composantes normales du champ électrique dans l'oxyde et dans le silicium sont respectivement données par des développements limités au second ordre:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{\text{ox}} = \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{dy_j} + \frac{dy_j}{2} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{\text{ox}} \quad (29)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{\text{si}} = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{dy_{j+1}} - \frac{dy_{j+1}}{2} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{\text{si}} \quad (30)$$

Les dérivés secondes intervenant dans les relations (29) et (30) peuvent être alors exprimées sous leurs formes discrétisées:

$$\left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right|_{\text{ox}} = - \left\{ \frac{\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{dx_{i+1}} - \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{dx_i}}{\frac{dx_i + dx_{i+1}}{2}} \right\} \quad (31)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \Big|_{Si}^{i,j} = - \left\{ \frac{\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{dx_{i+1}} - \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{dx_i}}{\frac{dx_i + dx_{i+1}}{2}} \right\} + (n-p+N_a - N_d) l_{i,j} \quad (32)$$

Par substitution, des formes discrètes complètes de (29) et (30) dans l'équation de conservation (28), la formulation finale aboutit aux coefficients modifiés suivants:

$$g = \frac{\tilde{\epsilon}_{ox} dx_{i+1} + \tilde{\epsilon}_{ox} dx_i}{2 dy_j} \quad f = \frac{\tilde{\epsilon}_{si} dy_{j+1} + \tilde{\epsilon}_{ox} dy_j}{2 dx_i} \quad (33.a)$$

$$b = \frac{\tilde{\epsilon}_{si} dy_{j+1} + \tilde{\epsilon}_{ox} dy_j}{2 dx_{i+1}} \quad c = \frac{\tilde{\epsilon}_{si} dx_{i+1} + \tilde{\epsilon}_{si} dx_i}{2 dy_{j+1}} \quad (33.b)$$

$$a = -(g+f+b+c) \quad s = \tilde{\epsilon}_{si} \frac{dx_i + dx_{i+1}}{2} \cdot \frac{dy_{j+1}}{2} \quad (33.c)$$

Par ailleurs, le terme de charge présent dans l'équation de Poisson discrétisée (14) fait maintenant intervenir la charge d'interface:

$$-(n-p+N_a - N_d) l_{i,j} \cdot s \text{ devient } -(n-p+N_a - N_d) l_{i,j} \cdot s + \frac{dx_i + dx_{i+1}}{2} \cdot Q_s l_{i,j} \quad (34)$$

III-4.4.3 Recombinaison d'interface

La discrétisation de la condition de recombinaison à l'interface Si/SiO₂ est illustrée pour les mêmes conditions définies par la figure 5. Sous une forme normalisée, ces conditions s'écrivent:

$$\left. \begin{aligned} \vec{J}_n \cdot \vec{n}_{si} &= -(R-G)_s \\ \vec{J}_p \cdot \vec{n}_{si} &= (R-G)_s \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Soit, compte tenu de l'interface plan horizontal et de l'orientation des axes:

$$\left. \begin{aligned} J_{ny} \Big|_{i,j} &= (R-G)_s l_{i,j} \\ J_{py} l_{i,j} &= -(R-G)_s l_{i,j} \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

De nouveau, les calculs qui suivent se limiteront au cas des électrons. En se basant sur le schéma d'interpolation définie en (25), la quantité $J_{ny} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}}$, qui représente une quantité fictive, est exprimée par:

$$J_{ny} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} = J_{ny} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + 2 \cdot (R-G)_s l_{i,j} \quad (37)$$

En utilisant la même démarche qu'au paragraphe III-4.3.4, et en adoptant la nouvelle formule définie en (37), la forme discrète de l'équation de continuité de courant d'électrons à l'interface s'écrit:

$$\begin{aligned} &+ n_{i-1,j} \mu_{n \ i-\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i-1,j} - \xi_{n \ i,j}) \frac{dy_{j+1}}{2 \ dx_i} \\ &- n_{i,j} \left\{ \mu_{n \ i-\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i,j} - \xi_{n \ i-1,j}) \frac{dy_{j+1}}{2 \ dx_i} \right. \\ &\quad + \mu_{n \ i+\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i,j} - \xi_{n \ i+1,j}) \frac{dy_{j+1}}{2 \ dx_{i+1}} \\ &\quad \left. + \mu_{n \ i,j+\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i,j} - \xi_{n \ i,j+1}) \frac{dx_{i+1}+dx_i}{2 \ dy_{j+1}} \right\} \\ &+ n_{i+1,j} \mu_{n \ i+\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i+1,j} - \xi_{n \ i,j}) \frac{dy_{j+1}}{2 \ dx_{i+1}} \\ &+ n_{i,j+1} \mu_{n \ i,j+\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n \ i,j+1} - \xi_{n \ i,j}) \frac{dx_{i+1}+dx_i}{2 \ dy_{j+1}} \\ &- (R-G) l_{i,j} \frac{dx_{i+1}+dx_i}{2} \frac{dy_{j+1}}{2} - (R-G)_s l_{i,j} \frac{dx_{i+1}+dx_i}{2} = 0 \quad (38) \end{aligned}$$

L'analyse de cette expression montre que les coefficients de $n_{i,j-1}$, $n_{i-1,j}$, $n_{i+1,j}$, $n_{i,j+1}$ et $n_{i,j}$ sont modifiés de la même manière que dans le cas d'une condition de flux nul. D'autre part, le terme

intégré de recombinaison-génération fait maintenant apparaître la contribution de la surface.

III-4.5 Généralisation

L'ensemble des développements concernant la discrétisation des équations du semi-conducteur a été effectué pour des cas particuliers:

- point (i,j) intérieur
- point (i,j) en frontière verticale
- point (i,j) à un interface horizontal

Ce paragraphe propose une expression généralisée de chacune des trois équations de base incluant de manière implicite les conditions frontières. Cette formulation repose sur la "technique d'intégration de volume" largement décrite par Greenfield et Dutton [18] dans le cas de l'équation de Poisson seule, puis généralisée aux trois équations de base par Shigyo et Dang [19][20], dans le cadre d'une approche tridimensionnelle. Cette méthode permet, en outre, de prendre en compte des interfaces non plans dont la courbure peut être décrite par les segments diagonaux reliant deux points de discrétisation. L'idée de base consiste à subdiviser le volume associé au point (i,j) en huit sous-régions dont chacune peut être caractérisée par des propriétés différentes en fonction du matériau ou d'une condition frontière (figure 6).

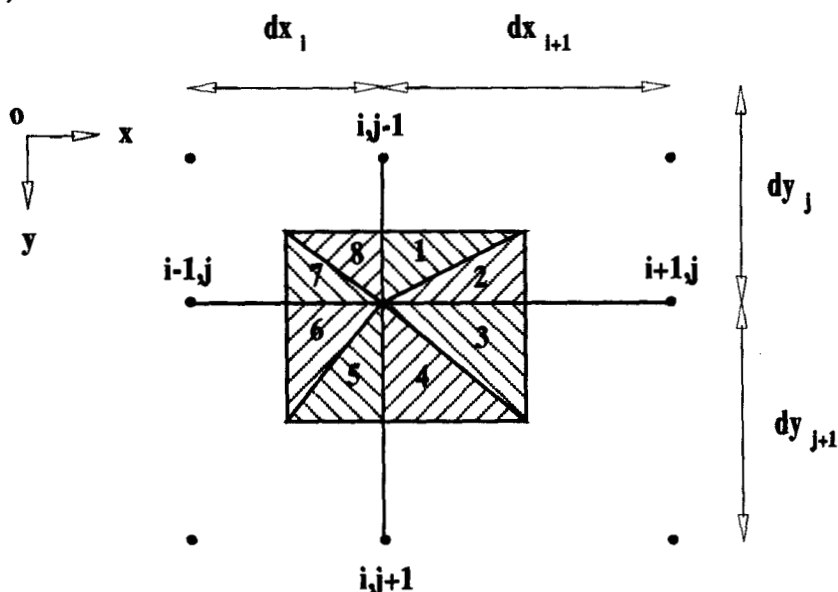


Figure 6: Partitionnement du volume associé à un point de discrétisation.

Par exemple, un tel partitionnement du volume contrôlé par le point (i,j) permet de prendre en compte le changement de pente de l'interface oxyde/semi-conducteur illustré en figure 7.

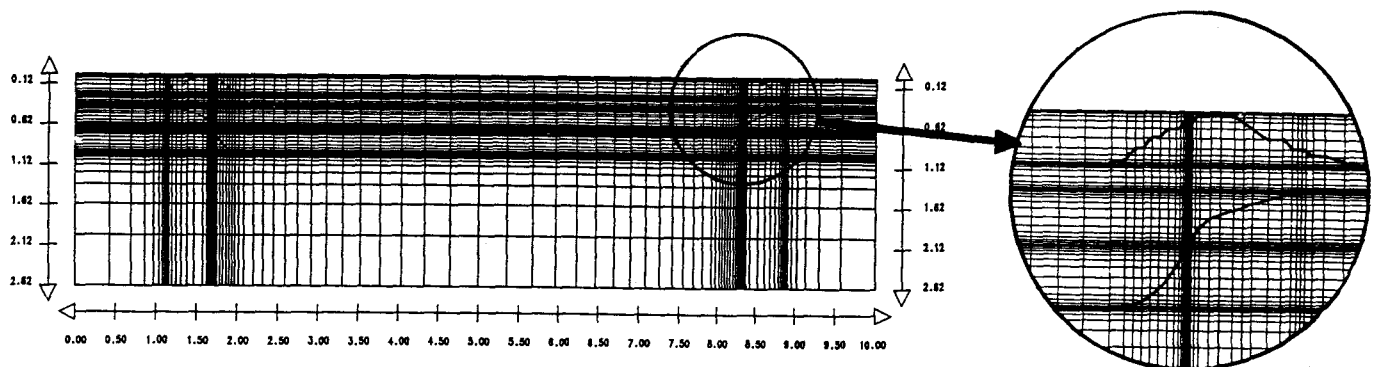


Figure 7: Maillage typique obtenu lors de la discrétisation d'un interface non plan. Cet exemple particulier correspond au cas d'une structure d'isolation.

La formule générale de la forme discrète de l'équation de Poisson (14) utilise alors les coefficients suivants :

$$g = \frac{\tilde{\epsilon}_1 dx_{i+1} + \tilde{\epsilon}_8 dx_i}{2 dy_j} \quad f = \frac{\tilde{\epsilon}_6 dy_{j+1} + \tilde{\epsilon}_7 dy_j}{2 dx_i} \quad (39.a)$$

$$b = \frac{\tilde{\epsilon}_3 dy_{j+1} + \tilde{\epsilon}_2 dy_j}{2 dx_{i+1}} \quad c = \frac{\tilde{\epsilon}_4 dx_{i+1} + \tilde{\epsilon}_5 dx_i}{2 dy_{j+1}} \quad (39.b)$$

$$a = -(g+f+b+c) \quad (39.c)$$

$$s = \frac{1}{2} \left\{ (\lambda_1 + \lambda_2) \frac{dx_{i+1} \cdot dy_j}{4} + (\lambda_3 + \lambda_4) \frac{dx_{i+1} \cdot dy_{j+1}}{4} \right. \\ \left. + (\lambda_5 + \lambda_6) \frac{dx_i \cdot dy_{j+1}}{4} + (\lambda_7 + \lambda_8) \frac{dx_i \cdot dy_j}{4} \right\} \quad (39.d)$$

où

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{\epsilon}_m = 0 \quad \lambda_m = 0 \text{ en dehors du domaine} \\ \tilde{\epsilon}_m = \tilde{\epsilon}_{ox} \quad \lambda_m = 0 \text{ dans l'oxyde} \\ \tilde{\epsilon}_m = \tilde{\epsilon}_{si} \quad \lambda_m = 1 \text{ dans le silicium} \end{array} \right\} m \in [1,8] \quad (39.e)$$

La charge totale (contribution volumique et surfacique) est exprimée par:

$$\{ -(n-p+N_a-N_d) l_{i,j} \cdot s \} + \{ Q_s l_{i,j} \cdot l \} \cdot \delta_{int} \quad (40)$$

La fonction δ_{int} est égale à l'unité si le point (i,j) est situé sur l'interface et s'annule ailleurs. La quantité 'l' désigne la longueur de l'interface impliquée dans le calcul de la charge surfacique. Cette quantité est donnée par:

$$l = \frac{1}{2} \left\{ |\lambda_2 - \lambda_3| \cdot dx_{i+1} + |\lambda_6 - \lambda_7| \cdot dx_i + |\lambda_4 - \lambda_5| \cdot dy_{j+1} + |\lambda_1 - \lambda_8| \cdot dy_j \right. \\ \left. + |\lambda_1 - \lambda_2| \cdot \sqrt{dx_{i+1}^2 + dy_j^2} + |\lambda_3 - \lambda_4| \cdot \sqrt{dx_{i+1}^2 + dy_{j+1}^2} \right. \\ \left. + |\lambda_5 - \lambda_6| \cdot \sqrt{dx_i^2 + dy_{j+1}^2} + |\lambda_7 - \lambda_8| \cdot \sqrt{dx_i^2 + dy_j^2} \right\} \quad (41)$$

Selon un développement tout-à-fait analogue au précédent, une formulation généralisée de l'équation discrète de continuité en courant d'électrons s'écrit:

$$\begin{aligned}
& n_{i,j-1} \mu_{n i,j-\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j-1} - \xi_{n i,j}) \frac{\lambda_1 dx_{i+1} + \lambda_8 dx_i}{2 dy_j} \\
+ & n_{i-1,j} \mu_{n i-\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n i-1,j} - \xi_{n i,j}) \frac{\lambda_6 dy_{j+1} + \lambda_7 dy_j}{2 dx_i} \\
- & n_{i,j} \left(\mu_{n i,j-\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j} - \xi_{n i,j-1}) \frac{\lambda_1 dx_{i+1} + \lambda_8 dx_i}{2 dy_j} \right. \\
& + \mu_{n i-\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j} - \xi_{n i-1,j}) \frac{\lambda_6 dy_{j+1} + \lambda_7 dy_j}{2 dx_i} \\
& + \mu_{n i+\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j} - \xi_{n i+1,j}) \frac{\lambda_3 dy_{j+1} + \lambda_2 dy_j}{2 dx_{i+1}} \\
& \left. + \mu_{n i,j+\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j} - \xi_{n i,j+1}) \frac{\lambda_4 dx_{i+1} + \lambda_5 dx_i}{2 dy_{j+1}} \right) \\
+ & n_{i+1,j} \mu_{n i+\frac{1}{2},j} \mathfrak{B}(\xi_{n i+1,j} - \xi_{n i,j}) \frac{\lambda_3 dy_{j+1} + \lambda_2 dy_j}{2 dx_{i+1}} \\
+ & n_{i,j+1} \mu_{n i,j+\frac{1}{2}} \mathfrak{B}(\xi_{n i,j+1} - \xi_{n i,j}) \frac{\lambda_4 dx_{i+1} + \lambda_5 dx_i}{2 dy_{j+1}} \\
& (-(R-G) l_{i,j}.s) - ((R-G)_s l_{i,j}.1) . \delta_{int} = 0 \quad (42)
\end{aligned}$$

Les quantités 's' (cf. relation 39.d), 'l' (cf. relation 41) et ' δ_{int} ' ont la même signification que dans le cas de l'équation de Poisson. De manière complémentaire, l'expression de la forme discrète de l'équation de continuité de courant de trous est déduite en remplaçant les indices 'n' par 'p', en inversant le signe de l'argument des fonctions de Bernoulli et en utilisant la définition de ξ_p définie par la relation (23).

III-5 TRAITEMENT DU PROBLEME NON LINEAIRE COUPLE

La procédure de discrétisation exposée dans la section précédente (III-4) mène à un système couplé d'équations algébriques dont les inconnues sont les valeurs du potentiel, des concentrations en électrons et trous en chacun des points du maillage. Si N désigne le nombre de points de discrétisation, le système complet de $3N$ équations peut s'écrire sous la forme symbolique suivante:

$$\left. \begin{aligned} F_{\psi}(\psi, n, p) &= 0 \\ F_n(\psi, n, p) &= 0 \\ F_p(\psi, n, p) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

Chacun des termes F_{ψ}, F_n, F_p représente un vecteur à N dimensions dont les composantes sont les formes discrètes des trois équations constitutives. La résolution de ce système est particulièrement délicate d'une part à cause du couplage et des fortes non-linéarités et d'autre part à cause du nombre important d'inconnues engendrées par la nécessité d'un maillage dense. Le premier point nécessite des algorithmes numériques stables alors que le second peut exiger des capacités de stockage et des temps de calcul prohibitifs. Essentiellement deux méthodes permettent de résoudre le problème non linéaire couplé. La première consiste à résoudre simultanément le système donné en (43) par la méthode de Newton [13][21][22][23], soit:

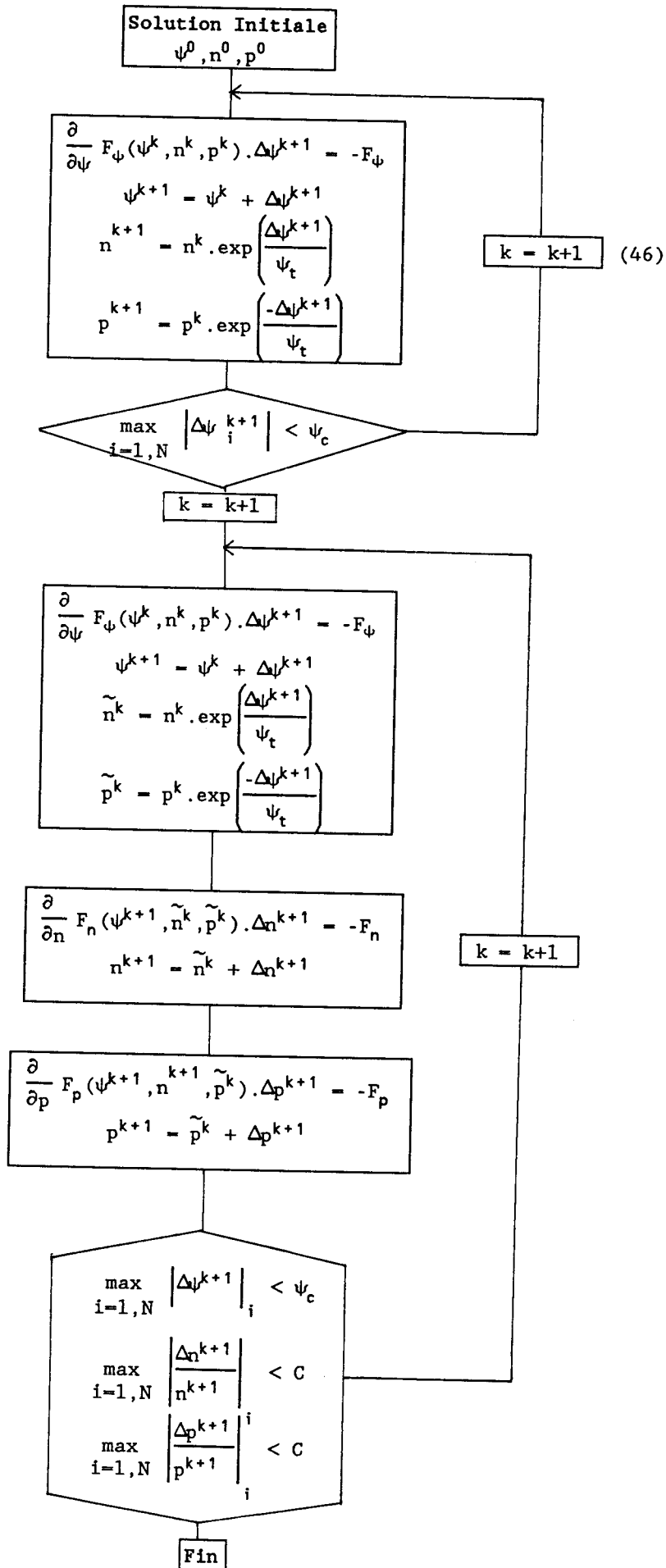
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_{\psi}^k}{\partial \psi} & \frac{\partial F_{\psi}^k}{\partial n} & \frac{\partial F_{\psi}^k}{\partial p} \\ \frac{\partial F_n^k}{\partial \psi} & \frac{\partial F_n^k}{\partial n} & \frac{\partial F_n^k}{\partial p} \\ \frac{\partial F_p^k}{\partial \psi} & \frac{\partial F_p^k}{\partial n} & \frac{\partial F_p^k}{\partial p} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta \psi^{k+1} \\ \Delta n^{k+1} \\ \Delta p^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -F_{\psi}^k \\ -F_n^k \\ -F_p^k \end{pmatrix} \quad (44)$$

La matrice Jacobienne est évaluée à l'itération 'k', ainsi que le résidu représenté par le membre de droite. Par inversion du système, les valeurs corrigées du potentiel et des densités en porteurs sont calculées selon:

$$\begin{pmatrix} \psi^{k+1} \\ n^{k+1} \\ p^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi^k \\ n^k \\ p^k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta \psi^{k+1} \\ \Delta n^{k+1} \\ \Delta p^{k+1} \end{pmatrix} \quad (45)$$

Ce schéma de résolution se révèle être particulièrement attractif pour les systèmes fortement couplés de par ses propriétés quadratiques de convergence. Cette méthode est donc largement utilisée en condition de forte injection, à savoir, lorsque les porteurs minoritaires sont en concentration suffisamment importante pour obtenir un fort couplage entre les équations de continuité de courant via le potentiel électrostatique. Cependant, en régime de faible et moyenne injection, la méthode découplée, proposée en premier lieu par Gummel [1], constitue une alternative performante alliant une bonne stabilité numérique, une convergence linéaire et des besoins réduits en ressources informatiques. Ces arguments motivent le choix de cette dernière méthode dans le cadre de ce travail.

La première version de cet algorithme proposait une résolution alternée de la séquence d'équations (43) jusqu'à vérification de critères de convergence: l'équation de Poisson était linéarisée et résolue dans une seule boucle de Newton-Raphson. Les équations de continuité représentaient alors des équations différentielles linéaires non couplées dont les inconnues étaient successivement n^{k+1} et p^{k+1} à l'itération $k+1$. Cependant, les performances de ce dernier schéma de résolution sont fortement affectées lorsque le terme de génération-recombinaison devient important. D'autre part, le choix de la solution initiale devient critique pour la détermination du potentiel en une seule boucle de Newton. Une version améliorée de cette méthode est utilisée en combinant les approches proposées par Gaur [24] et Engl [21] (ASS: Alternate Step Solving). Le principe de cette méthode est donnée par la séquence suivante de résolution:



Les principales différences de cette méthode par rapport à la version initiale peuvent être caractérisées par:

- (i) une solution initiale affinée du potentiel dans la première boucle d'itérations de Newton-Raphson
- (ii) une correction des concentrations en porteurs (\tilde{n}^k, \tilde{p}^k) à pseudo-potentiels de Fermi constants pour chaque résolution de l'équation de Poisson
- (iii) la prise en compte du terme de génération-recombinaison au niveau d'un Jacobien réduit. Ce Jacobien réduit correspond aux termes diagonaux (2,2) et (3,3) de la matrice globale (44) respectivement dans le cas des équations de continuité de courants en électrons et trous. Cette opération représente une forme complète de la transformation de Gaur et Navon [25] afin d'obtenir un système diagonalement dominant.

Les critères de convergence ont été fixés à $\psi_c = 10^{-3}$ volt sur la correction maximum du potentiel, et à 1% sur les variations relatives en densité de porteurs. Afin d'améliorer la vitesse de convergence de l'algorithme découplé, la solution initiale fait généralement l'objet d'une extrapolation linéaire à partir de résultats calculés antérieurement.

III-6 METHODES DE RESOLUTION DES SYSTEMES LINEAIRES

III-6.1 Introduction

La résolution du système non linéaire par la méthode découplée nécessite l'inversion de trois systèmes linéaires constitués chacun de N équations à N inconnues où N désigne le nombre de points de maillage. Chacune des trois matrices à inverser correspond respectivement à la discrétisation de l'équation de Poisson et des deux équations de continuité de courant. L'utilisation d'un maillage rectangulaire (de type différences finies) possède le remarquable

avantage d'aboutir à des matrices pentadiagonales régulières particulièrement attractives pour ses propriétés de stockage en mémoire. Chacun des systèmes linéaires à traiter s'écrit selon la relation (47):

$$A.x = q \tag{47}$$

En adoptant une numérotation naturelle par ligne des noeuds du maillage, la matrice A prend la forme désignée par la figure 8. Dans ce cas particulier, le maillage est défini par les noeuds aux intersections de 7 (=imax) lignes verticales et de 3 (=jmax) lignes horizontales (figure 8).

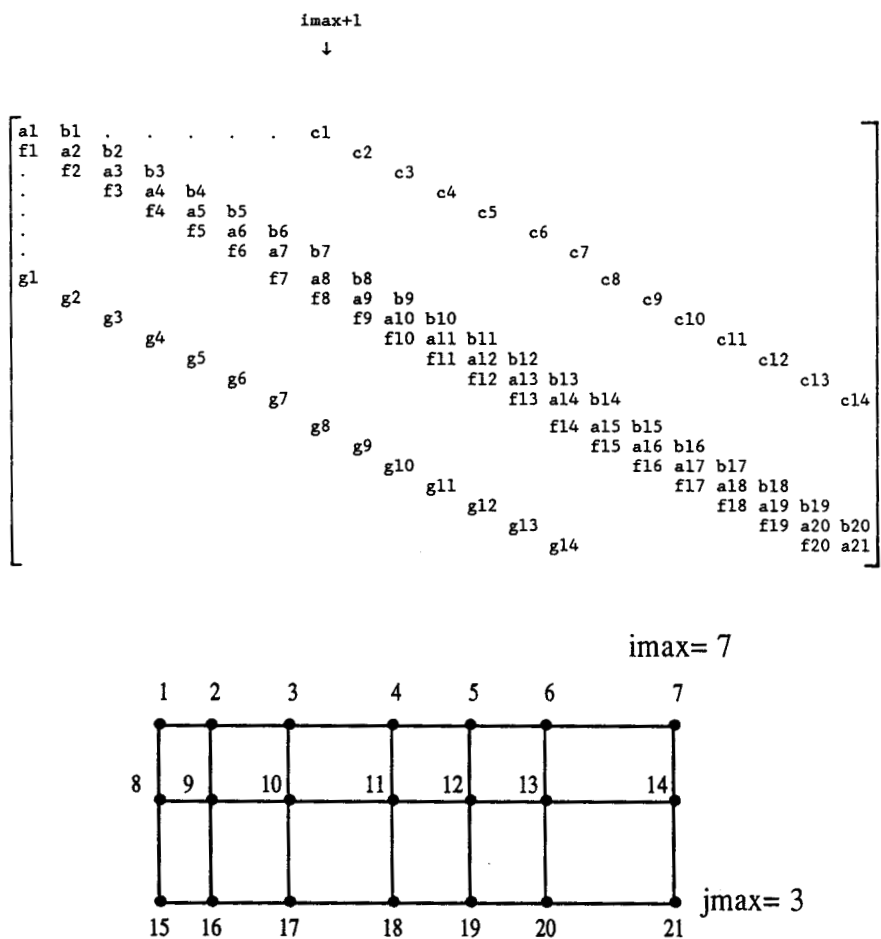


figure 8: Forme de la matrice résultant de la discrétisation des équations du semi-conducteur sur un maillage différences finies: structure bande régulière pentadiagonale. Cette matrice est donnée pour la cas particulier du maillage 3x7 également représenté.

Les éléments de cette matrice correspondent aux différents termes de couplage d'un noeud n avec ses quatre premiers voisins. De manière explicite, si l'on considère les éléments d'une même lignes, leur signification est donnée par:

$\xi_{n-i_{\max}}$: terme de couplage entre le noeud n et le noeud $n-i_{\max}$
 f_{n-1} : terme de couplage entre le noeud n et le noeud $n-1$
 a_n : terme de couplage du noeud n avec lui-même
 b_{n+1} : terme de couplage entre le noeud n et le noeud $n+1$
 $c_{n+i_{\max}}$: terme de couplage entre le noeud n et le noeud $n+i_{\max}$

La notation adoptée correspond à celle utilisée dans le calcul des coefficients de l'équation de Poisson par exemple (cf. relations 39.a - 39.c). De même, les coefficients impliqués dans l'équation (42) définissent la matrice résultant de la discrétisation de l'équation de continuité de courant d'électrons.

Les méthodes directes de résolution sont mal adaptées au type de matrice décrite car:

- (i) l'économie réalisée dans le stockage de la matrice est alors perdue puisque les techniques directes remplissent de termes non nuls les éléments situés dans la largeur de bande.
- (ii) le nombre d'opérations arithmétiques nécessitent un temps prohibitif de calcul dès que le système traité devient d'une taille importante

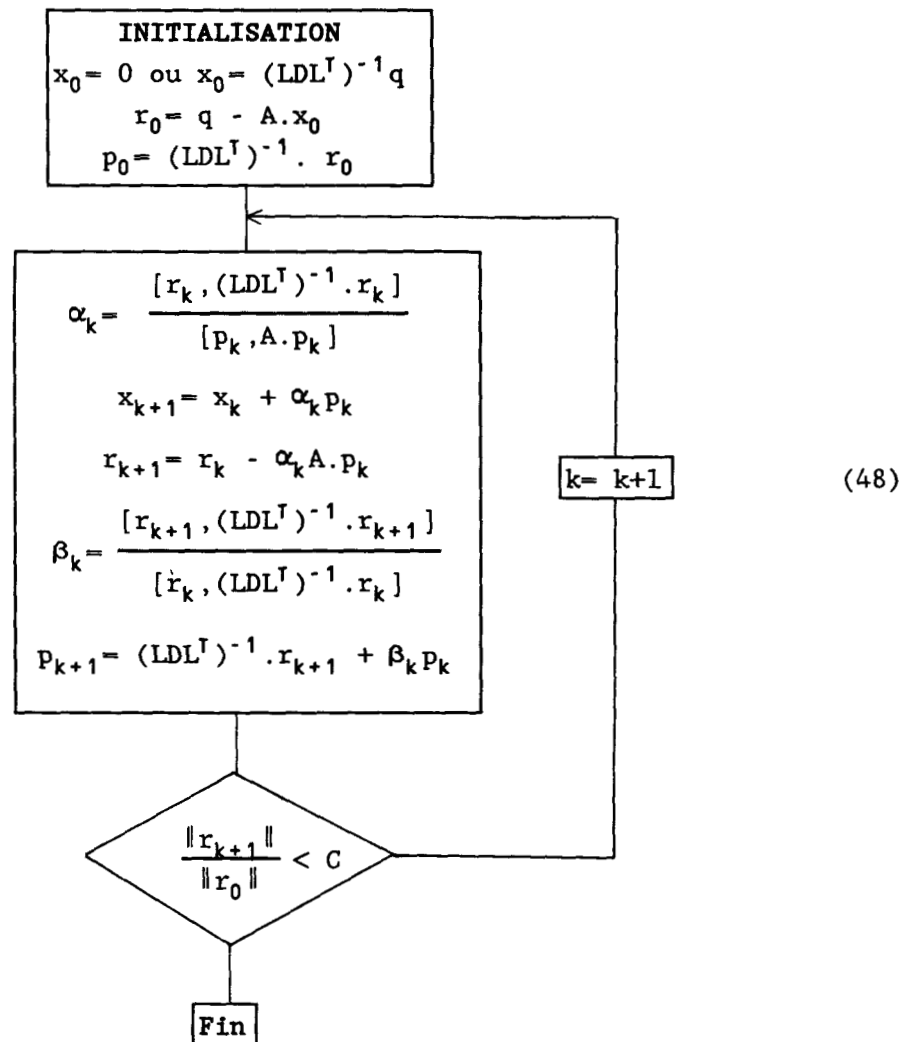
En revanche, les méthodes de résolution itératives se prêtent particulièrement bien aux matrices régulières et éparées dans la mesure où elles ne nécessitent pas de ressources de stockage supplémentaires. Leurs propriétés de convergence sont cependant très dépendantes du type de matrice. Il convient donc de réaliser le choix le mieux adapté au problème spécifique de la simulation de dispositif. Parmi les méthodes itératives les plus populaires, les variantes de Jacobi [27] et de Gauss-Seidel [28] sont relativement semblables et ne diffèrent que dans le choix du type de décomposition de la matrice initiale. Les méthodes de sur-relaxation sont également largement utilisées [29] avec toutefois le problème délicat associé au choix du

coefficient de relaxation. Les derniers développements récents en matière d'analyse numérique ont démontré l'efficacité des méthodes de gradients conjugués appliquées en premier lieu dans les problèmes mécaniques et thermiques [31]. Initialement établie dans le cadre de systèmes symétriques, cette méthode a été élargie au traitement de problèmes asymétriques [32]. Toutefois, aucune propriété de convergence n'a été théoriquement établie dans ce dernier cas [15]. En pratique, les méthodes de gradients conjugués asymétriques ne sont réellement performantes et convergentes que dans le cas de matrices suffisamment bien conditionnées [33]. L'introduction des techniques de préconditionnement [34] a également largement contribué au succès et à la popularité de cette méthode.

Le traitement de l'équation de Poisson mène à un système linéarisé dont la matrice est symétrique et diagonalement dominante. En revanche, les systèmes associés à la résolution de chaque équation de courant sont ni symétriques et ni diagonalement dominants de part le choix des inconnues effectué (n et p). Il convient donc d'exposer, dans ce qui suit, les méthodes de gradients conjugués utilisées ainsi que les techniques de préconditionnement adoptées afin de résoudre les deux types de systèmes linéaires.

III-6.2 Traitement du problème symétrique

La matrice symétrique résultant de la linéarisation de l'équation de Poisson est traitée par un algorithme de gradients conjugués couplé à une décomposition de type LDL^T [35], où (L^T) désigne la matrice transposée de L . De par la structure pentadiagonale de la matrice, la décomposition adoptée est strictement identique à la décomposition incomplète de Cholesky [36]. L'idée de base du préconditionnement sera développée dans le paragraphe suivant qui traite le cas plus général non symétrique. L'algorithme de la méthode de résolution adoptée s'écrit sous la forme présentée en (48) où x_k désigne le vecteur solution à l'itération ' k '. Le système à résoudre est celui de l'équation (47).



Le critère de convergence est fixé par le paramètre C qui contrôle le rapport des normes des vecteurs résiduels entre les itérations 0 et k . Celui-ci est fixé à 10^{-6} dans notre cas particulier. Les éléments de la matrice diagonale D sont donnés par les coefficients \tilde{d}_i (relation 49). La matrice L qui désigne la matrice triangulaire inférieure de la décomposition possède :

- (i) des termes extra diagonaux égaux à ceux de A.
(ii) des termes diagonaux définis par les coefficients \tilde{a}_n ($n=1,N$) définis en (49)

$$\tilde{a}_n = \frac{1}{\tilde{d}_n} = a_n - f_{n-1} \cdot \tilde{d}_{n-1} \cdot b_{n-1} - g_{n-m} \cdot \tilde{d}_{n-m} \cdot c_{n-m} \quad (49)$$

avec $m = \text{imax}$

Cette décomposition est dite de classe (1,1) dans la mesure où chacune des matrices diagonales supérieure et inférieure possède deux bandes extra diagonales (figure 9).

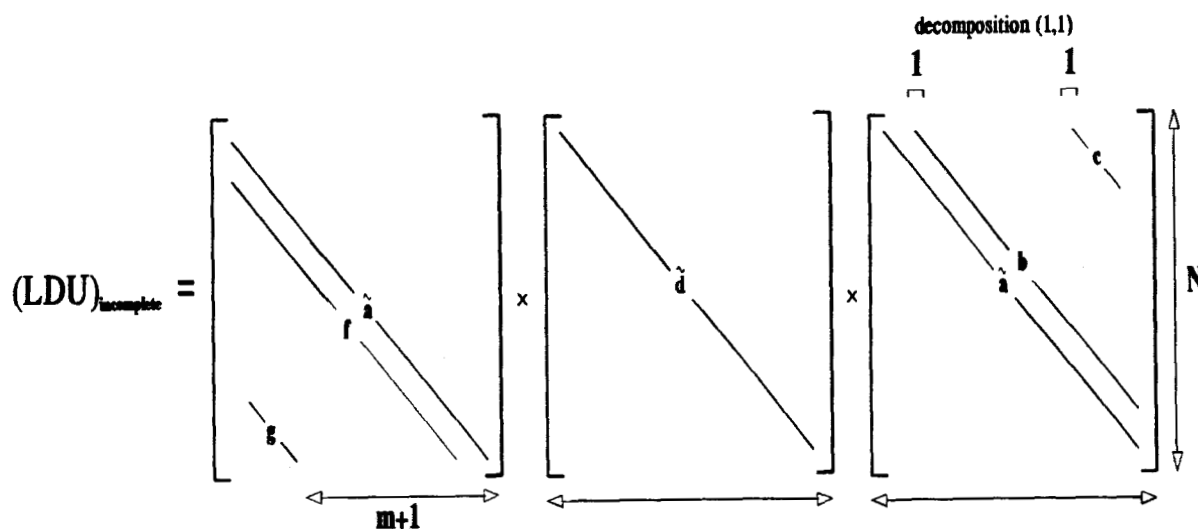


Figure 9: Structure bande de la matrice résultant de la discrétisation de l'équation de Poisson. La décomposition de type (1,1) mise en oeuvre lors du préconditionnement n'affecte pas le nombre de bandes.

III-6.3 Traitement du problème non symétrique

Les systèmes non symétriques sont issus du schéma de discrétisation des équations de continuité en courant. Leur résolution a été entreprise sur la base d'une méthode de bi-gradients conjugués coordonnée à un préconditionnement par décomposition incomplète de type LU de la matrice initiale. Une caractéristique fondamentale concernant la convergence des méthodes itératives est fixée par le rayon spectral de la matrice: si l'ensemble des valeurs propres est situé au voisinage de l'unité, la résolution en est facilitée étant donné que la matrice correspondante s'approche de l'identité. Le principe de base du préconditionnement consiste à transformer le système linéaire initial afin d'obtenir une matrice proche de l'identité. En ce qui concerne la décomposition LU adoptée, la transformation consiste à remplacer le système initial (47) par celui décrit en (49).

$$(L^{-1} A U^{-1}) (U.x) = L^{-1}.q \quad (50)$$

soit sous une forme condensée:

$$B.y = d \quad (51)$$

Si la décomposition LU est complète, B est égal à l'identité et le vecteur solution x est aisément calculable à partir de y par substitution arrière. Si la décomposition n'est pas menée à son terme, $(LU)^{-1}$ ne constitue qu'une approximation de A^{-1} . Le type le plus simple de préconditionnement applicable à une matrice pentadiagonale est du type (1,1). Celle-ci consiste à reproduire respectivement dans L et U le schéma de bandes existant dans la partie triangulaire inférieure et supérieure de A. La prise en compte de bandes supplémentaires lors de la décomposition permet d'obtenir une meilleure approximation de la matrice A. Cette technique n'est cependant efficace que pour un taux de remplissage supplémentaire de l'ordre de 10%. Au-delà de cette limite, l'amélioration des performances de la méthode itérative devient mineure jusqu'à concurrence d'un taux de 85% du niveau complet de factorisation [33]. Une décomposition de type (1,2) a donc été adoptée afin d'améliorer la convergence de la méthode au prix d'un effort supplémentaire acceptable lors de l'étape de factorisation incomplète. Le schéma de

décomposition incomplète détaillé par le groupe d'équations (52) est illustré en figure 10.

$$m = \text{imax}$$

$$\tilde{g}_k = g_k \quad k \in [1, N-m] \quad (52.a)$$

$$\tilde{c}_k = c_k \cdot \tilde{d}_k \quad k \in [1, N-m] \quad (52.b)$$

$$\tilde{h}_k = h_k - \frac{\tilde{b}_{k-1} \cdot \tilde{g}_{k-1}}{\tilde{a}_{k-1}} \quad k \in [1, N-m+1] \quad (52.c)$$

$$\tilde{e}_k = \left(e_k - \frac{\tilde{f}_{k-1} \cdot \tilde{c}_{k-1}}{\tilde{a}_{k-1}} \right) \cdot \tilde{d}_k \quad k \in [1, N-m+1] \quad (52.d)$$

$$\tilde{f}_k = f_k - \frac{\tilde{g}_{k-m+1} \cdot \tilde{e}_{k-m+1}}{\tilde{a}_{k-m+1}} \quad k \in [1, N-1] \quad (52.e)$$

$$\tilde{b}_k = \left(b_k - \frac{\tilde{h}_{k-m+1} \cdot \tilde{c}_{k-m+1}}{\tilde{a}_{k-m+1}} \right) \cdot \tilde{d}_k \quad k \in [1, N-1] \quad (52.f)$$

$$\tilde{a}_k = a_k - \frac{\tilde{f}_{k-1} \cdot \tilde{b}_{k-1}}{\tilde{a}_{k-1}} - \frac{\tilde{h}_{k-m+1} \cdot \tilde{e}_{k-m+1}}{\tilde{a}_{k-m+1}} - \frac{\tilde{g}_{k-m} \cdot \tilde{c}_{k-m}}{\tilde{a}_{k-m}} \quad k \in [1, N] \quad (52.g)$$

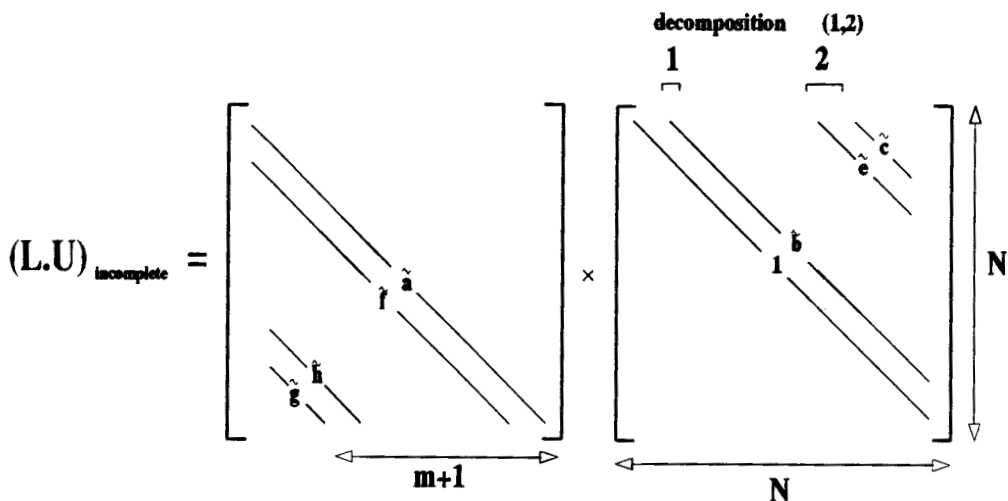
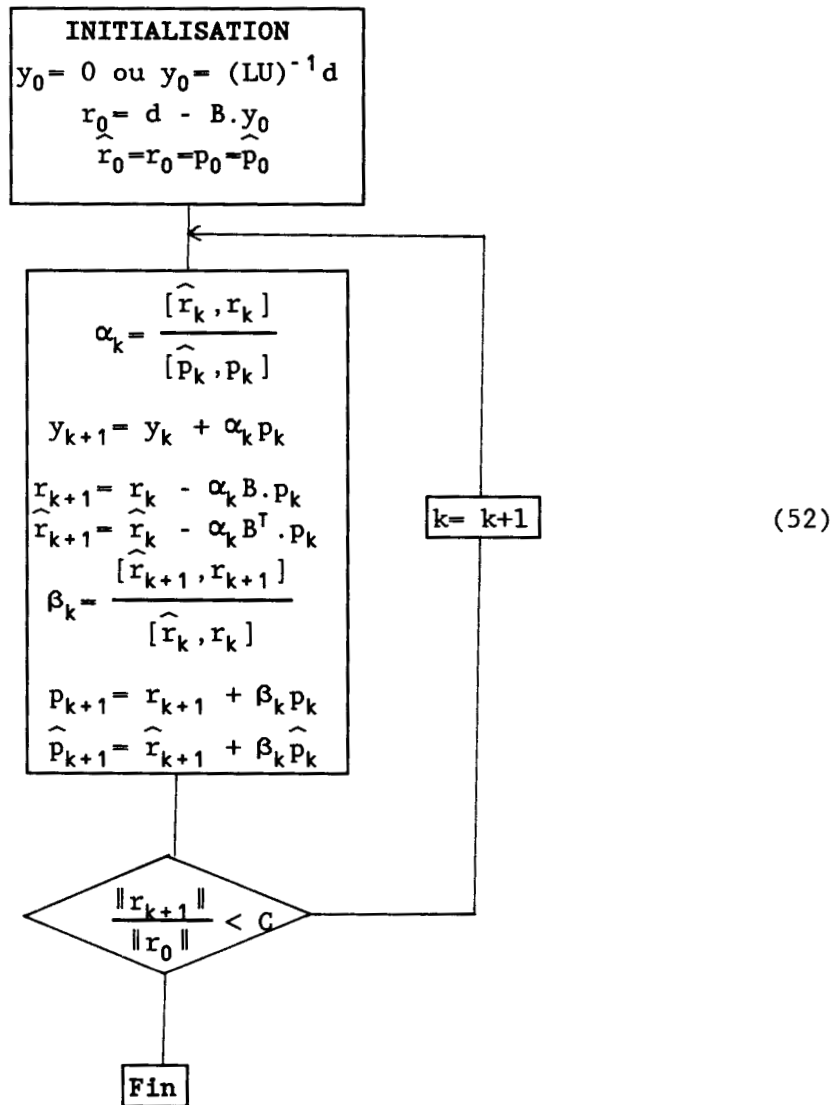


Figure 10: Forme explicite de la décomposition LU adoptée en préconditionnement montrant la structure de la décomposition (1,2).

L'algorithme de gradients conjugués asymétrique BCG [32] (Bi-Conjugate Gradients) appliqué au système preconditionné de l'équation (51) donne :



La figure 11 reporte l'évolution du résidu $\|r_k\|$ en fonction du nombre d'itérations effectué par la méthode de gradients conjugués. Cette figure indique clairement le gain en nombre d'itérations (facteur ~ 2) réalisé grâce au preconditionnement (1,2) par rapport au preconditionnement (1,1).

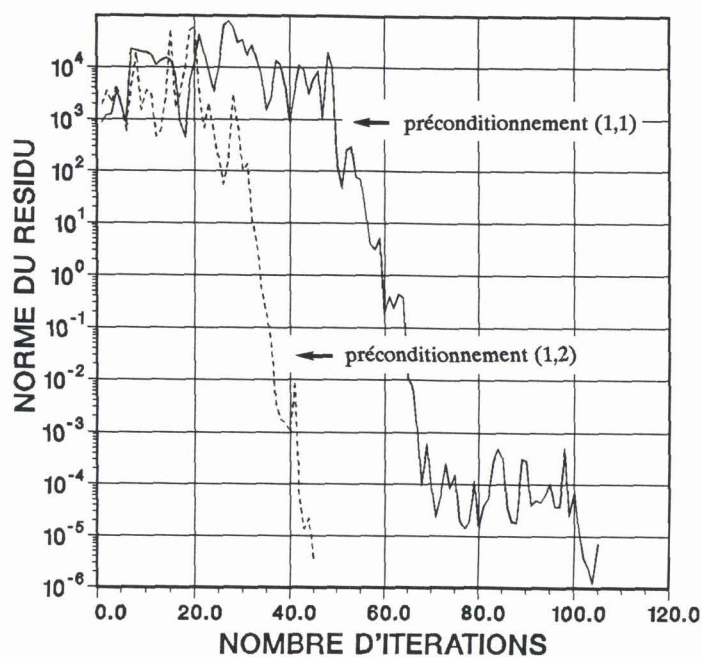


Figure 11: Evolution du résidu en fonction du nombre d'itérations de la méthode BCG. Deux types de préconditionnement ont été pris en compte: types (1,1) et (1,2).

III-7 STRATEGIE DE MAILLAGE

III-7.1 Introduction

La précision de la solution discrète des équations du semi-conducteur est largement tributaire de la densité de maillage adoptée. Dans chaque dispositif cohabitent des régions caractérisées par de fortes variations du potentiel et des densités en porteurs et des zones d'équilibre où ces dernières quantités varient lentement. Les points de discrétisation doivent, par conséquent, être distribués de manière non uniforme afin de préserver la qualité du calcul global. La méthode la plus rigoureuse de procéder à la mise au point d'un maillage, consiste à équi-distribuer l'erreur locale de discrétisation [5]. La formulation des règles mathématiques associées restent toutefois très difficile car dépendante du mode de fonctionnement d'un dispositif particulier. Pour des raisons pragmatiques, des critères simples et faciles à mettre en oeuvre sont utilisés avec plus ou moins de succès [37][38]. La très grande stabilité du schéma de

discrétisation de Scharfetter et Gummel [2] permet cependant d'utiliser un maillage localement non adapté, sans perturbation de la solution dans les régions où le nombre de point est suffisant. En conséquence, une discrétisation permettant une description fine des profils de dopage et de la géométrie, se révèle être suffisante dans l'analyse de la plupart des dispositifs.

III-7.2 Algorithme de maillage

L'approche employée met en oeuvre une méthode de maillage simple et entièrement automatique, gouvernée par les points clés de la géométrie et du profil de dopage du dispositif. Ces points sont répertoriés selon qu'ils correspondent:

- 1) à une profondeur maximum de jonction.
- 2) au point d'intersection d'une jonction latérale avec l'interface Si/SiO₂.
- 3) à une partie plane horizontale de l'interface.
- 4) à une limite du domaine.
- 5) à un point où débute ou se termine une partie non plane de l'interface.

La géométrie la plus simple à discrétiser fait intervenir un interface Si/SiO₂ plan. Un dispositif doté d'un interface non plan, tel que celui présenté en figure 12, représente le cas le plus difficile à mailler. La position de l'ensemble des points clés énumérés ci-dessus y est clairement illustrée.

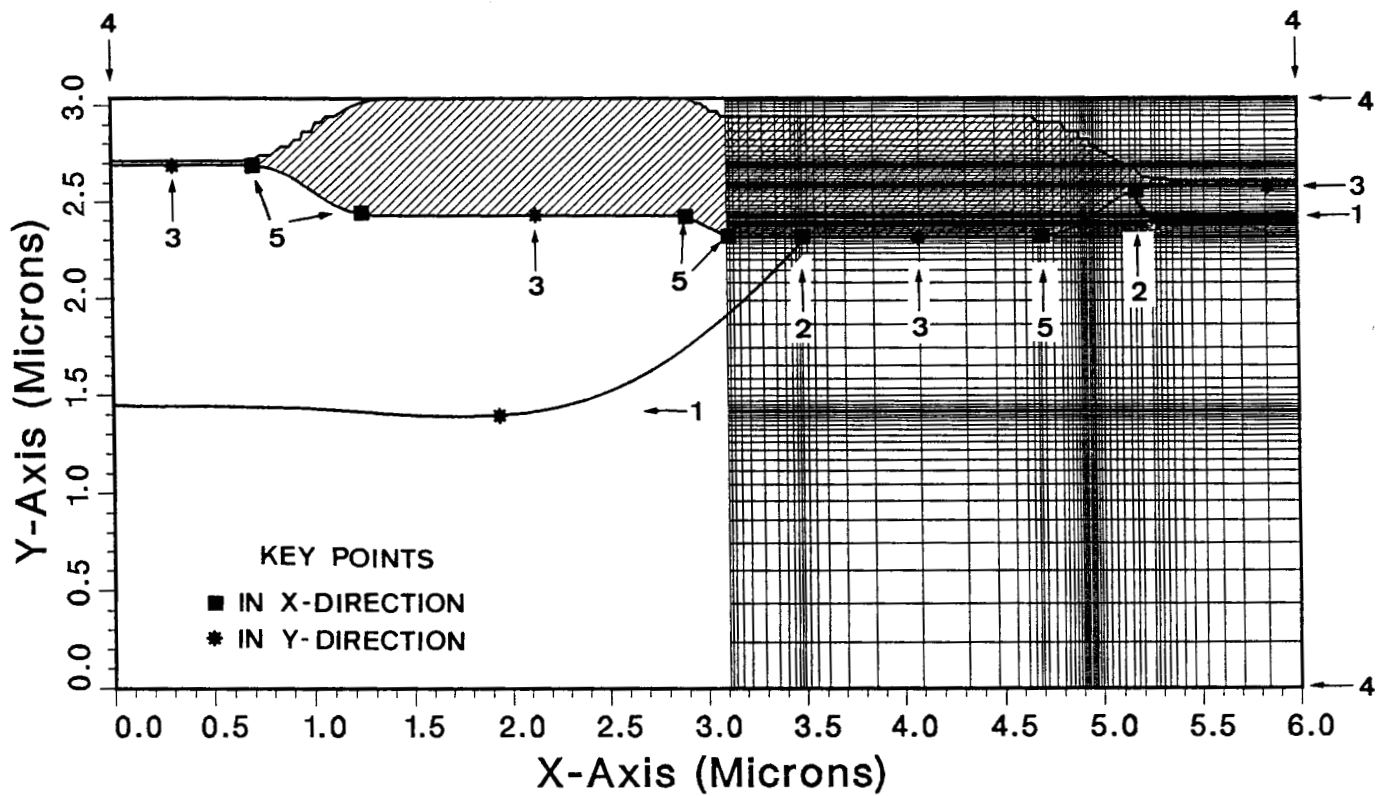


Figure 12: Distribution des points clés définissant les zones de raffinement de maillage. Cette exemple correspond à une structure d'isolation auto-alignée utilisée en technologie CMOS.

La discrétisation du domaine compris entre deux points clés emploie un pas variable obéissant à une progression géométrique (figure 13).

Partant du premier point clé (n°1), la distribution des pas de maillage est d'abord croissante jusqu'au milieu de l'intervalle (point n°2), puis décroissante afin de recouvrir le pas initial au second point clé (n°3).

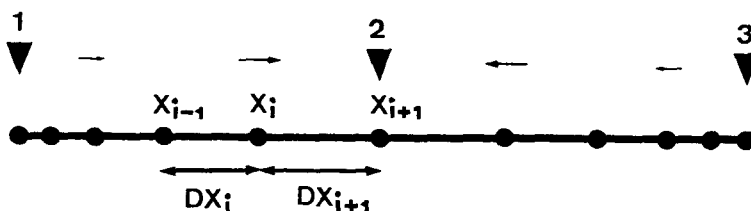


Figure 13: Evolution du pas de maillage entre deux points clés.

La raison de la suite géométrique est donc définie par :

$$RX = \frac{DX_{i+1}}{DX_i} = \frac{(X_{i+1} - X_i)}{(X_i - X_{i-1})} \quad (53)$$

Ce paramètre doit garder une valeur limitée afin de préserver la qualité du profil en impuretés interpolé au voisinage des points clés, d'une part. D'autre part, une telle limitation permet d'éviter les possibles problèmes de convergence de la méthode de gradients conjugués pour des matrices non symétriques très déséquilibrées. Une valeur typique de RX est incluse dans l'intervalle $]1,2]$.

Les structures à interface non plan imposent des contraintes de maillage supplémentaires puisque la courbure de l'interface est reproduite à partir des segments diagonaux reliant deux points de maillage [40]. La séquence de figures, proposée ci-dessous, illustre la technique utilisée afin de reproduire le plus fidèlement possible la forme de l'interface Si/SiO_2 à partir d'un maillage rectangulaire. Le domaine correspond à une structure d'isolation de type LOCOS conventionnel [41].

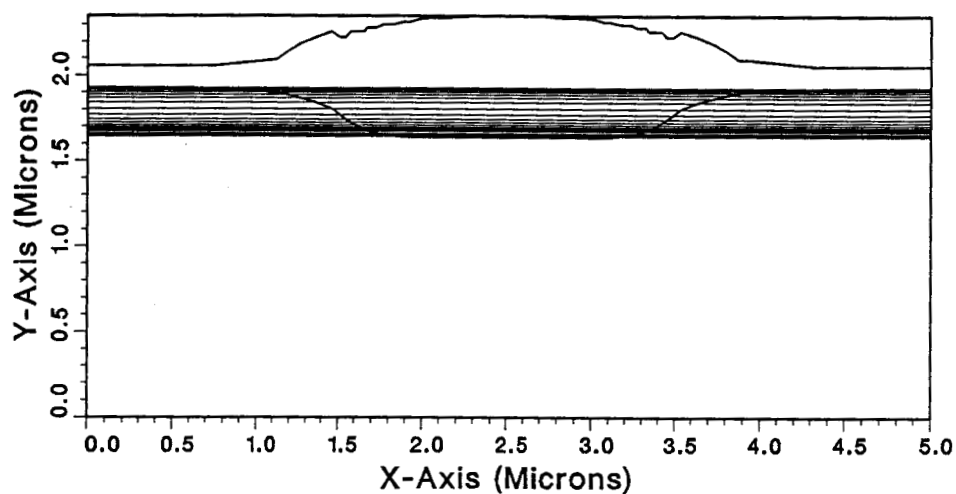


Figure 14: Des lignes de maillage horizontales sont distribuées verticalement sur la hauteur de variation de la forme de l'interface.

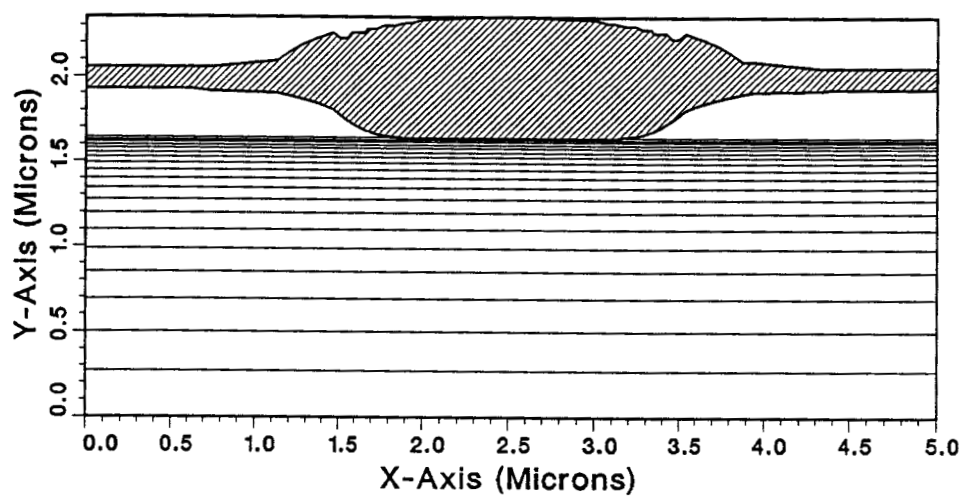


Figure 15: La distribution verticale de maillage dans le silicium est complétée selon un progression strictement croissante jusqu'à atteindre la face arrière.

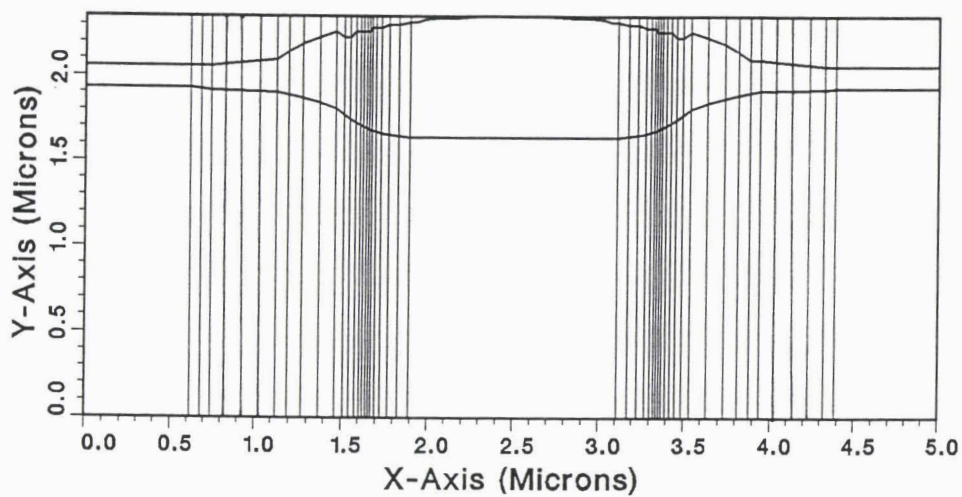


Figure 16: Les lignes de maillage verticales sont générées dans les parties courbes de l'interface. Leur position est calculée afin d'intercepter une ligne de maillage horizontale en point situé sur l'interface exactement.

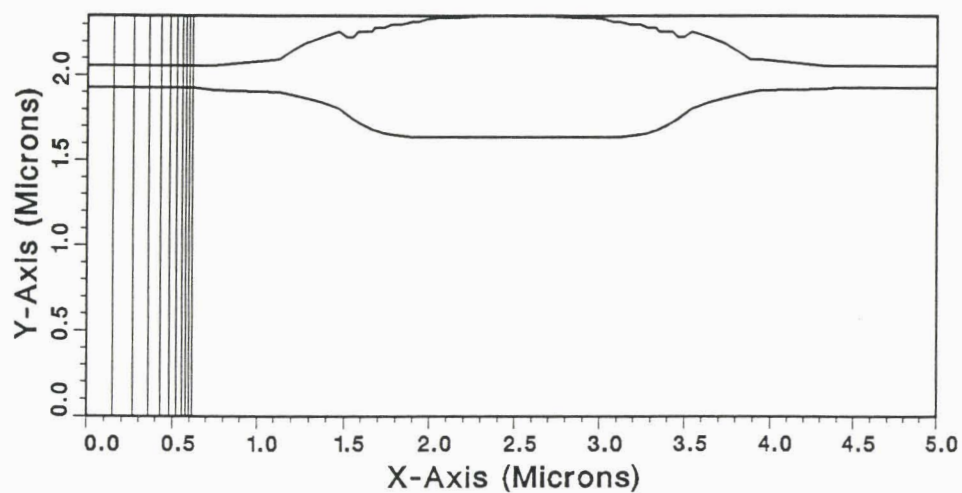


Figure 17: Maillage vertical dans la partie gauche restante à interface plan.

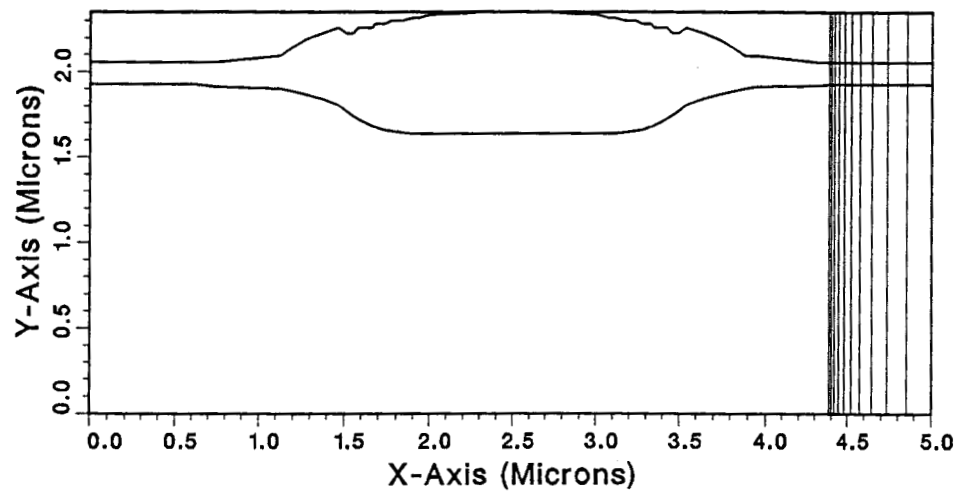


Figure 18: Maillage vertical dans la partie droite restante à interface plan.

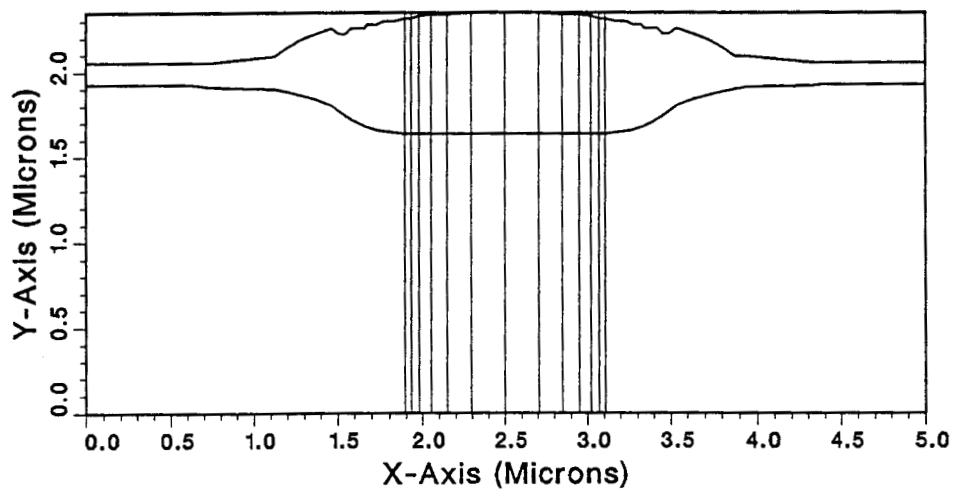


Figure 19: Maillage vertical dans la partie centrale sous oxyde épais.

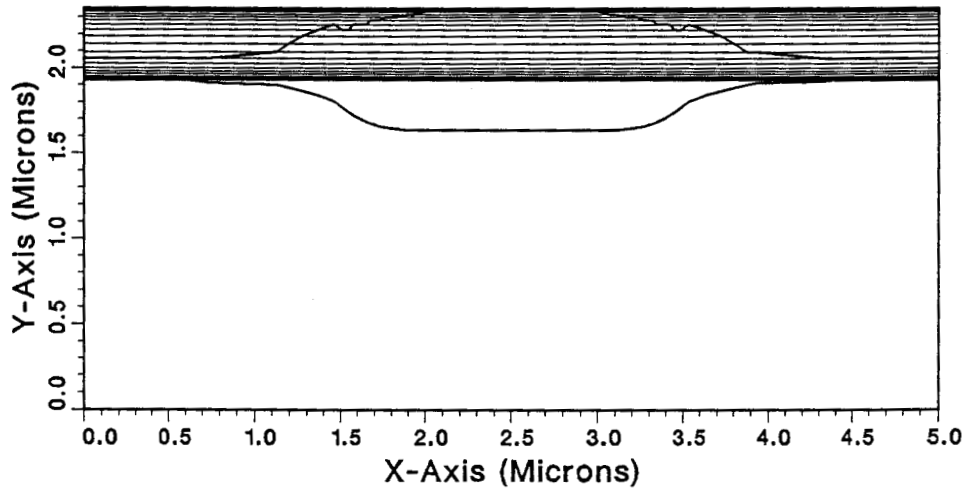


Figure 20: Maillage horizontal dans la partie située au dessus de l'interface Si/SiO₂. Dans cette dernière phase, les lignes de maillage sont distribuées indépendamment de la forme de l'interface entre l'oxyde et le matériau couvrant. Le profil de celui-ci est alors reproduit au mieux en fonction des points de maillage les plus proches.

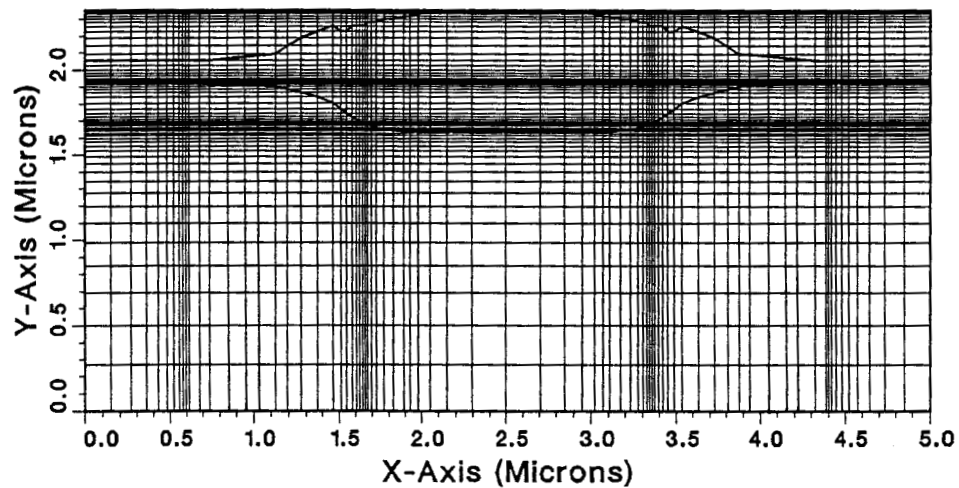


Figure 21: Maillage final de la structure d'isolation considérée en exemple.

La présente technique de maillage ne prétend pas être applicable à tous types de structures complexes. Elle peut cependant être adaptée à la demande afin de traiter des dispositifs à géométrie irrégulière. En ce sens, la méthode de discrétisation présentée dans ce chapitre possède des limitations dans le traitement général des topologies. Cependant, elle représente un compromis intéressant entre une méthode de différences finies figée [10] et une méthode de différences finies généralisée aux éléments triangulaires [42]. La limitation de la première technique est liée au traitement exclusif de formes rectangulaires cependant une configuration très attractive des matrices à inverser. La seconde souffre en partie de problèmes de génération de raffinements de maillage, de mauvais conditionnements des systèmes linéaires et d'instabilités numériques liées à la présence de triangles obtus n'admettant la conservation du courant [17].

III-8 PROBLEME ANNEXE DE DISCRETISATION: DETERMINATION DES LIGNES DE COURANT

III-8.1 Principe

La connaissance des profils de lignes de courant représente une information particulièrement utile dans l'analyse du fonctionnement des dispositifs. Le tracé de ces lignes permet, en effet, d'obtenir un réseau de courbes de niveau caractérisées par un flux constant de courant. A titre d'exemple, les performances des structures bipolaires PNP latérales sont fortement influencées par les mécanismes de recombinaison de surface: les lignes de courant permettent d'évaluer de manière très imagée la contribution du courant recombéné en surface.

La formulation mathématique du problème est entreprise sur la base des équations de continuité de courant, rappelée ici par commodité :

$$\left. \begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n &= -q(G-R) \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p &= q(G-R) \end{aligned} \right\} \quad (54)$$

La conservation du courant total s'écrivant sous la forme (55) montre que le courant est dérivé d'un potentiel vecteur \vec{W} (relation 56) dont la seule composante non nulle est orientée selon l'axe 'z' perpendiculaire au plan 2D d'analyse.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{J}_n + \vec{J}_p) = 0 \quad (55)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{J} &= \vec{\nabla}_x \vec{W} \\ J_x &= \frac{\partial W_z}{\partial y} \quad J_y = -\frac{\partial W_z}{\partial x} \end{aligned} \right\} \quad (56)$$

Les lignes de courant, solutions de l'équation (57), se mettent alors sous la forme d'une dérivée totale (58) qui montre que les lignes de niveau du potentiel W représente les lignes de courant.

$$\frac{dx}{J_x} = \frac{dy}{J_y} \quad (57)$$

$$\frac{\partial W_z}{\partial x} dx + \frac{\partial W_z}{\partial y} dy = 0 \implies W = \text{constante} \quad (58)$$

III-8.2 Discrétisation du problème

Moyennant quelques manipulations, le problème continu peut être reformulé sous la forme (\vec{x} et \vec{y} désignent les vecteurs unitaires du plan 2D de base):

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} W_z) = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial W_z}{\partial x} \vec{x} + \frac{\partial W_z}{\partial y} \vec{y} \right) = -\frac{\partial J_y}{\partial x} + \frac{\partial J_x}{\partial y} \equiv -\vec{\nabla}_x \vec{J} \quad (59)$$

L'égalité posée le premier et le dernier terme intégrée sur un volume fermé V et transformée par les théorèmes de Gauss (membre de droite) et de Stokes (membre de gauche) mène à:

$$\int \vec{\nabla} W_z \cdot \vec{n} \, dS = - \int \vec{J} \cdot \vec{l} \, dS \quad (60)$$

où \vec{n} désigne le vecteur unitaire normal à l'enveloppe de V pointant vers l'extérieur. \vec{l} est le vecteur unitaire parallèle à cette enveloppe, orienté dans le sens trigonométrique.

La discrétisation de l'équation (60) doit être menée de façon consistante à celle du problème de base exposé dans les paragraphes précédents de ce chapitre. Puisque les densités de courant sont définies sur les segments reliant deux points de maillage, l'opération de discrétisation doit être effectuée sur le maillage dual de celui utilisé pour le problème originel (figure 22).

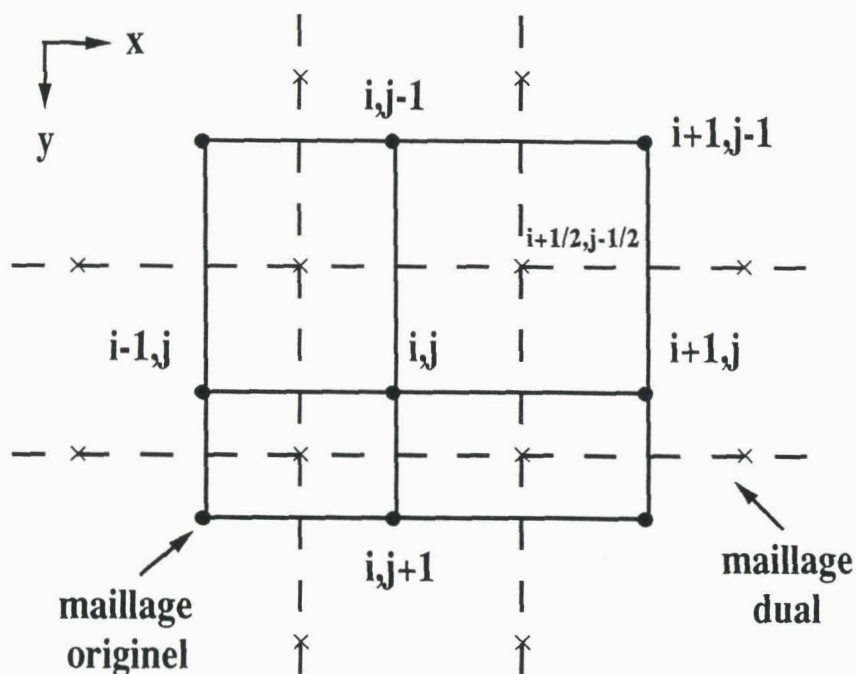


Figure 22: Definition du maillage dual à celui du problème originel. La forme discrète de l'équation (61) prend alors la forme standard suivante:

$$\begin{aligned}
& W_{i+1/2, j-1/2} \frac{dx_{i+1}}{my_j} \\
& W_{i-1/2, j+1/2} \frac{dy_{j+1}}{mx_i} \\
& -W_{i+1/2, j+1/2} \left(\frac{dx_{i+1}}{my_j} + \frac{dy_{j+1}}{mx_i} + \frac{dx_{i+1}}{my_{j+1}} + \frac{dy_{j+1}}{mx_{i+1}} \right) \quad (61) \\
& W_{i+3/2, j+1/2} \frac{dy_{j+1}}{mx_i} \\
& W_{i+1/2, j+3/2} \frac{dx_{i+1}}{my_{j+1}}
\end{aligned}$$

$$+ dx_{i+1} (J_x I_{i+1/2, j+1} - J_x I_{i+1/2, j}) + dy_{j+1} (J_y I_{i, j+1/2} - J_y I_{i+1, j+1/2}) = 0$$

Les solutions limites du problème sont connues de par la solution des trois équations de base qui permettent le calcul des composantes de la densité de courant. Elles sont donc directement introduites dans la formulation des équations discrètes en étendant le maillage dual en dehors du domaine de simulation par une série de points fictifs infiniment proches des frontières. Cette technique élégante proposée par Palm et Van de Wiele [43] permet d'assurer le recouvrement des cellules du maillage originel et du maillage dual. La forme matricielle du système linéaire résultant est symétrique et diagonalement dominante. L'inversion est réalisée selon la méthode de gradients conjugués exposée au paragraphe III-6.2. Il est à noter qu'en l'absence de génération-recombinaison de volume, les lignes de courant relatives aux contributions des électrons et trous peuvent être déterminées séparément. La figure 23 illustre un cas typique de transistor PNP latéral où les phénomènes de recombinaison de surface dominant largement ceux de volume qui sont donc négligés. Le profil des lignes de courant met clairement en évidence la division du courant d'électrons issu de la base en une contribution de recombinaison d'interface et en une contribution injectée dans l'émetteur.

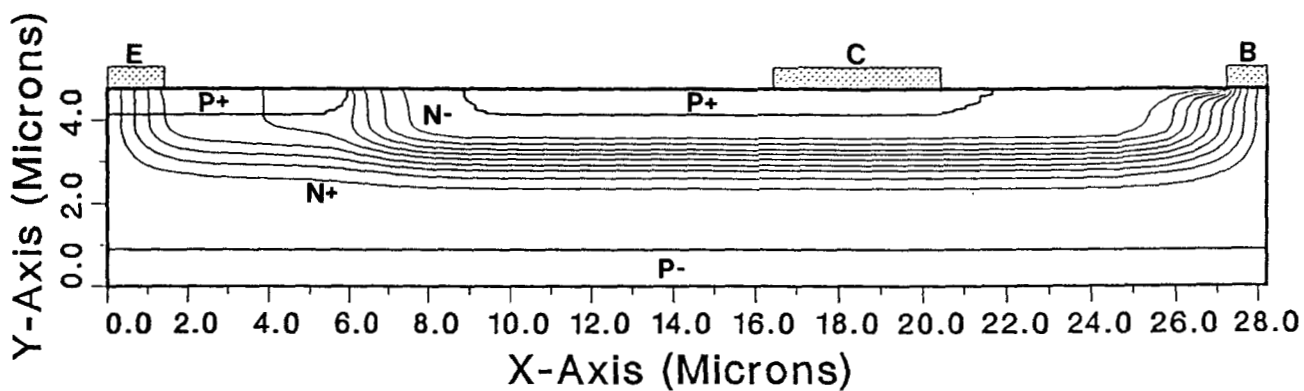


Figure 23: Distribution des lignes de courant d'électrons dans un transistor PNP latéral. La recombinaison de volume n'étant pas prise en compte, les lignes de courant peuvent être tracées individuellement pour chaque type de porteur. Cette figure met en évidence la contribution du courant total de base à la recombinaison de surface. 10% du courant total circule entre chaque ligne.

CHAPITRE III

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] H.K. Gummel, 'A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations', IEEE Transaction on Electron Devices vol. 11, pp 455-465, 1964.
- [2] D.L. Scharfetter, H.K. Gummel, 'Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator', IEEE Transaction on Electron Devices vol. 16, n°1, pp 64-67, Janvier 1964.
- [3] M. Heydemann, 'Méthode numérique d'étude des structures MOS', Electronics Letters, vol. 6, pp 734-736, 1970.
- [4] J.W. Slotboom, 'Computer-aided two-dimensional analysis of bipolar transistor', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 20, pp 669-679, 1973.
- [5] S. Selberherr, W. Fichtner, H.W. Pötzl, 'Minimos-A program package to facilitate MOS device design and analysis', Proc. of NASECODE I Conference, pp 275-279, Dublin, Boole Press.
- [6] G.D. Hatchel, M.H. Mack, R.R. O'Brien, B. Speelpenning, 'Semiconductor analysis using finite elements - Part I: Computational aspects', IBM J. Res. Develop., vol. 25, n°4, pp 232-245, Juillet 1981.
- [7] G.D. Hatchel, M.H. Mack, R.R. O'Brien, B. Speelpenning, 'Semiconductor analysis using finite elements - Part II: IGFET and BJT case studies', IBM J. Res. Develop., vol. 25, n°4, pp 246-260, Juillet 1981.
- [8] J.J. Barnes, R.J. Lomax, 'Finite-element methods in semiconductor device simulation', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 24, n°8, pp 1082-1089, Août 1977.

- [9] O.C. Zienkiewicz, 'The finite element method', Mac Graw-Hill, 1971.
- [10] S. Selberherr, 'Analysis and simulation of semiconductor devices', Springer-Verlag, 1984.
- [11] J. Machek, S. Selberherr, 'A novel finite element method approach to device modelling', IEEE Transaction on Electron Devices vol. 30, pp 1083-1092, Septembre 1983.
- [12] S. Wang, C. Wu, 'Mixed finite element approximation of the stationary semiconductor continuity equations', Proc. of SISDEP-88 Conf., pp 475-484, Septembre 1988.
- [13] E.M Buturla, P.E. Cottrell, B.M Grossman, K.A. Salsburg, 'Finite-element analysis of semiconductor devices: the FIELDAY program', IBM J. Res. Develop., vol. 25, n°4, pp 218-231, Juillet 1981.
- [14] S. Selberherr, A. Schütz, H.W. Pötzl, 'Minimos-A two-dimensional MOS transistor analyzer', IEEE Transaction on Electron Devices vol. 27, pp 1540-1550, 1980.
- [15] S.J. Polak, C. Den Heijer, W.H.A. Schilders, P. Markowich, 'Semiconductor device modelling from the numerical point of view', International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 24, pp 763-838, 1987.
- [16] M. Heydemann, 'Résolution numérique des équations bidimensionnelles de transport dans les semi-conducteurs', Thèse de doctorat en électronique, Octobre 1972.
- [17] C.H. Price, 'Two-dimensional numerical simulation of semiconductor devices', Stanford University Report MDA 903-79-C-0257, Mai 1982.
- [18] J.A. Greenfield, R.W. Dutton, 'Nonplanar VLSI device analysis using the solution of Poisson's equation', IEEE Transaction on Electron Devices, vol. 27, n°8, pp 1520-1532, Août 1980.
- [19] N. Shygio, R. Dang, 'Three-dimensional device simulation using a mixed process/device simulator', in Process and Device Modeling, pp 301-327, North-Holland.

- [20] N. Shigyo, R. Dang, 'Analysis of an anomalous subthreshold current in a full recessed oxide MOSFET using three-dimension device simulator', IEEE Transcatio on Electron Devices, vol. 32, n°2, pp 441-445, Février 1985.
- [21] W.L. Engl, H. Dirks, 'Numerical device simulation guided by physical approaches', Proc. NASECODE I Conf., 1979, Boole Press, Dublin.
- [22] C.S. Rafferty, M.R. Pinto, R.W. Dutton, 'Iterative methods in semiconductor device simulation', IEEE Transaction on Computer-Aided Design, vol. 4, n°4, pp 462-471, Octobre 1985.
- [23] P.E. Cottrell, E.M. Buturla, 'Two-dimensional static and transient simulation of mobile carrier transport in a semiconductor', Proc. NASECODE I Conf., 1979, pp 31-64, Boole Press, Dublin.
- [24] S.P. Gaur, P.A. Habitz, Y.J. Park, R.K. Cook, Y.S. Huang, L.F. Wagner, 'Two-dimensional device simulation program : 2DP', IBM J. Res. Develop., vol. 29, n°3, pp 242-251, May 1985.
- [25] S.P. Gaur, D.H. Navon, 'Two-dimensional carrier flow in a transistor structure under nonisothermal conditions', IEEE Transcation on Electron Devices, vol. 23, pp 50-57, 1976.
- [26] N. Shigyo, 'Three-dimensional simulation of VLSI devices', PhD Thésis, Février 1988.
- [27] J.R. Rice, 'Numerical methods, software, and analysis', Mac Graw Hill, 1983.
- [28] V.N. Faddeva, 'Computational methods of linear algebra', Dover Pubilcations, 1959.
- [29] W.E. Milne, 'Numerical solution of differential equations', Dover Publications, 1970.
- [30] R.S. Varga, 'Iterative matrix analysis', Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1962.

- [31] D.M. Trujillo, H.R. Busby, 'Investigation of highly accurate integration formulae for transient heat conduction analysis using the conjugate gradient method', International Journal for numerical methods in engineering, vol. 18, pp 99-109, 1982.
- [32] C. Den Heijer, 'Preconditioned iterative methods for nonsymmetric linear systems', Proc. of SISDEP I Conf., pp 267-285, Juillet 1984.
- [33] C.S. Rafferty, M.R. Pinto, R.W. Dutton, 'Iterative methods in semiconductor device simulation', IEEE Trans. on Compute-Aided Design, vol.4, n°4, pp 462-471, Octobre 1985.
- [34] S.C. Eisenstat, 'Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods', SIAM, vol. 2, n°1, pp 1-4, Mars 1981.
- [35] T. Wada, R. Dang, 'Modification of ICCG method for application to semiconductor device simulations', Electronics Letters, vol. 18, n°6, pp 265-266, Mars 1982.
- [36] J.A. Meijerink, H.A. Van Der Vost, 'An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix', Mathematics of computation, vol.31, n° 137, pp 148-162, Janvier 1977.
- [37] P. Ciampolini, A. Pierantoni, A. Gnudi, M. Rudan, G. Baccarani, 'Adaptive mesh generation preserving the quality of the initial grid', Proc. of the NUPAD II Workshop, 1988.
- [38] S. Mottet, C. Simon, J.E. Viallet, 'Flux conservative discretization and adaptative mesh refinement: program Carmes', Lecture notes of NASECODE VI Short Course, pp 137-142, Juillet 1989.
- [39] P.A. Markowich, C.A. Ringhofer, S. Selberherr, M. Lentini, 'A singular perturbation approach for the analysis of the fundamental semiconductor equations', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 30, n°9, pp 1165-1180, 1983.
- [40] E. Dubois, D. Collard, B. Baccus, D. Morel, 'IMPACT 3.2 user's guide', ISEN, Janvier 1989.

- [41] E. Dubois, J.L. Coppée, B. Baccus, D. Collard, 'Electrical performances evaluation of isolation structures by coupled process and device simulations', Proc. of SISDEP-88 Conf., pp 151-161, 1988.
- [42] G. Baccarani, R. Guerrieri, P. Ciampolini, M. Rudan, 'HFIELDS: a highly-flexible 2D semiconductor device analysis program', Proc. of NASECODE IV Conf., pp 3-12, Juin 1985.
- [43] E. Palm, F. Van De Wiele, 'Current lines and accurate contact current evaluation in 2-D numerical simulation of semiconductor devices', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 32, n°10, pp 2052-2059, Octobre 1985.

CHAPITRE IV

ETUDE DES PROPRIETES ELECTRIQUES DE STRUCTURES D'ISOLATION

IV-1 INTRODUCTION

IV-1.1 Généralités

L'effort continué développé en très haute densité d'intégration conduit à une réduction des dimensions non seulement des dispositifs actifs mais également des dispositifs d'isolation. Les performances électriques de telles structures sont dépendantes à la fois de lourdes contraintes technologiques et des caractéristiques géométriques des dispositifs. Un certain nombre de règles et de problèmes de base peuvent être dégagés dans la mise au point d'une technologie d'isolation:

- (i) minimisation de la différence de transfert entre le dessin de masque et la géométrie réelle du dispositif d'isolation.
- (ii) possibilité de réduire les dimensions latérales sans affecter l'épaisseur d'oxyde.
- (iii) topologie de surface plane évitant les problèmes de couverture de marche.
- (iv) procédé à faible taux de génération de défauts cristallins.
- (v) reproductibilité.
- (vi) limitations des effets parasites induits sur les dispositifs actifs (capacité, effet canal étroit...).
- (vii) compatibilité avec les procédés existants.

Le procédé LOCOS [1] (LOCAL Oxidation of Silicon), très largement utilisé en isolation de dispositifs intégrés, a démontré ses qualités de simplicité technologique, de reproductibilité et de performances électriques. Ce type de structure est formé par oxydation humide des zones non protégées par un masque constitué d'un bi-couche oxyde/nitrure ($\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$). L'inconvénient majeur de cette technique est lié à la formation d'une zone de transition entre la zone active et l'oxyde épais appelée communément appelée 'bec d'oiseau'. Sa création est liée à la diffusion d'oxygène permettant une croissance d'oxyde sous le masque de nitrure (figure 1).

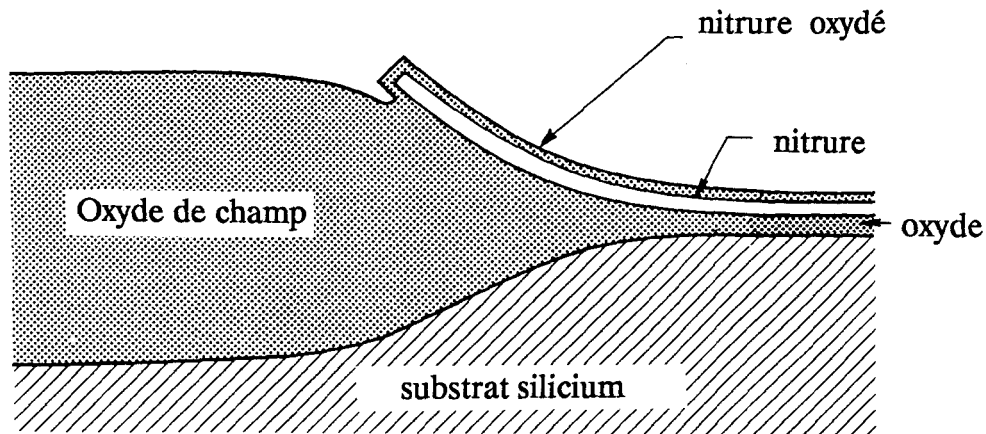


Figure 1: Transition oxyde mince / oxyde épais (bec d'oiseau) après oxydation de champ

La perte d'espace engendrée par l'extension du bec d'oiseau constitue une limitation essentielle du procédé LOCOS standard [2]. La diffusion latérale de l'implantation anti-canal, destinée à augmenter la tension de seuil de la structure d'isolation, représente un facteur supplémentaire de perte d'espace. La manifestation usuelle de ce phénomène est l'effet canal étroit (*narrow channel effect*) qui entraîne une augmentation de la tension du dispositif actif adjacent en réduisant sa largeur. Plusieurs solutions alternatives ont été proposées afin de s'affranchir de ce type de problèmes. Une description détaillée des étapes de fabrication de chacun des procédés existants dépasse largement le cadre de ce travail. Cependant, une

compilation des profils de quelques structures d'isolation est donnée en figure 2.

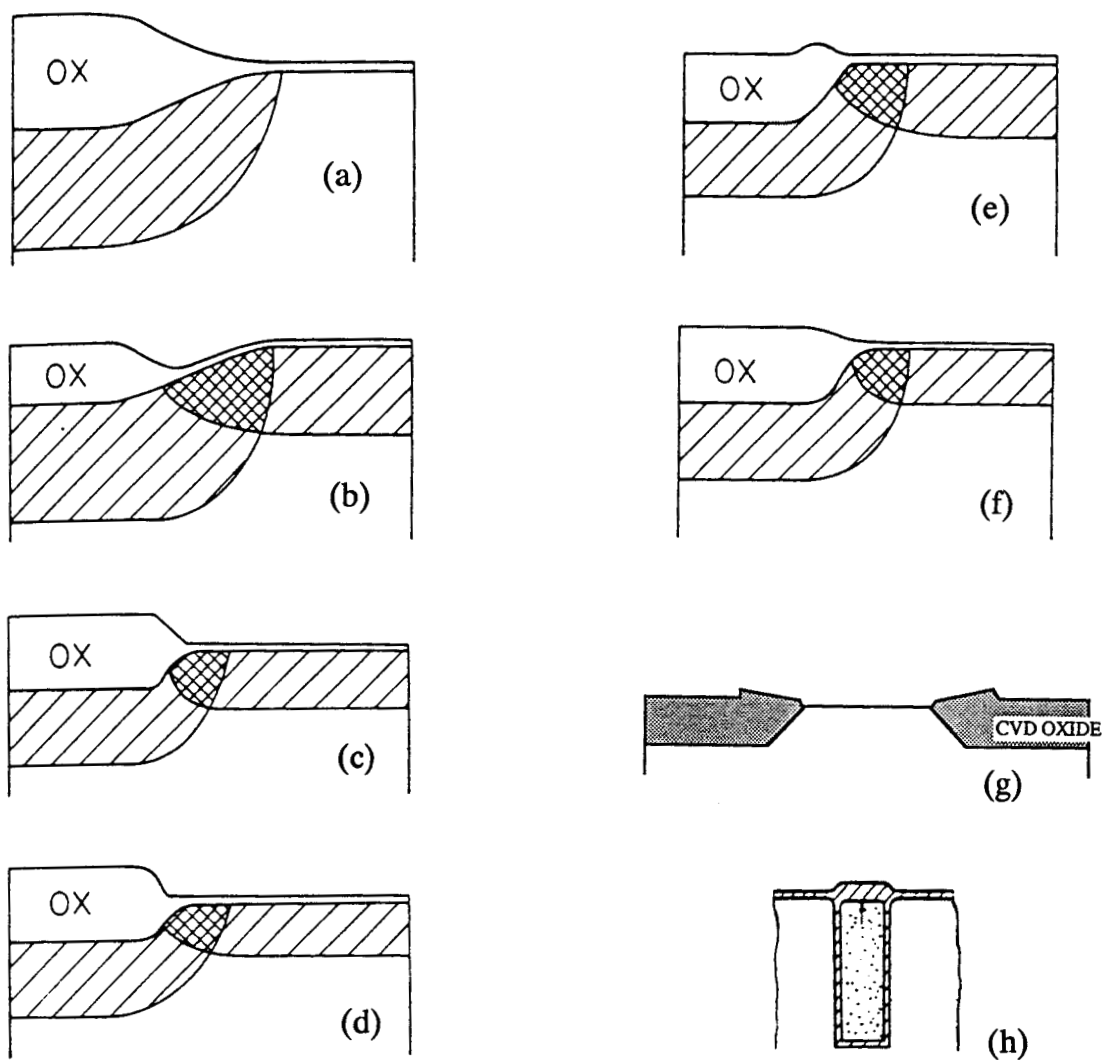


figure 2: Sections de coupe des principales structures d'isolation.

- (a) LOCOS conventionnel
- (b) LOCOS planarisé par une étape d'attaque d'oxyde [2]
- (c) SILO simplifiée (Sealed Interface Local Oxidation): le bi-couche oxyde/nitrure est remplacé par une fine couche de nitrure [3]
- (d) SILO: le bi-couche oxyde/nitrure est remplacé par un sandwich nitrure/oxyde/nitrure [4][5][6]
- (e) LOCOS enterré: gravure du silicium avant oxydation [7][8]
- (f) SWAMI (Side Wall Masked Isolation): succession d'étapes de gravure, dépôt d'oxyde fin, oxydation, décapage de nitrure et de dépôt d'oxyde [9][10][11][12]
- (g) BOX (Buried OXide): succession d'étapes de gravure, dépôt d'oxyde, de planarisation en utilisant des couches de résines sacrificielles [13][14][15]
- (h) TRENCH (tranchée): gravure anisotropique profonde du silicium, oxydation fine, dépôt d'oxyde ou de polysilicium dans la tranchée, oxydation de fermeture [16][17][18][19][20][21].

Les procédés SWAMI, BOX sont fondamentalement différents d'une technique d'oxydation locale du silicium. Ils mettent en oeuvre un certain nombre d'étapes technologiques critiques dont le contrôle est difficile à réaliser. Ce sont donc des procédés relativement peu usités en production. La technique d'isolation TRENCH est également très différente de la simple oxydation locale. Cependant, pour un niveau de complexité équivalent, ses qualités intrinsèques d'isolation ont motivé des développements poussés, essentiellement dans le cadre d'applications bipolaires [22][23]. Néanmoins, ces trois dernières techniques d'isolation font apparaître de nouveaux effets électriques parasites affectant les performances du dispositif actif adjacent: effet canal étroit inverse [24][25], comportement anormal du courant sous le seuil [26][27]. Les procédés de type SILO et LOCOS enterré restent, en revanche, très proches du procédé de base LOCOS et gardent un taux important de compatibilité avec les enchaînements technologiques existants.

IV-1.2 Objectifs de l'étude

Les techniques d'isolation de type 'LOCOS modifié' présente un intérêt technologique évident de par les faibles besoins de sophistication du procédé initial. Cependant, la maîtrise de ces procédés dérivés nécessite une évaluation complète de leurs performances pour des dimensions réduites. A ce titre, de nombreux points de technologie et certains aspects de la physique du composant doivent encore être investigués afin de clarifier le rôle de la géométrie du dispositif d'isolation et de comprendre les effets bidimensionnels qui dominent les structures de faibles dimensions. Goodwin et Plummer [28] ont analysé le fonctionnement des structures d'isolation et ont souligné l'importance de 'l'effet de coin' qui permet d'accéder à de meilleures performances électriques. Cet effet purement géométrique est induit par la courbure de l'oxyde épais dans les régions de bec d'oiseau. En effet, les lignes de champ divergent au voisinage de la courbure convexe du coin d'oxyde où l'effet de champ créé par la polarisation de grille est atténué. La conséquence directe de cet effet réside en un affaiblissement local de la densité de charge induite et en la création d'une barrière de potentiel qui limite l'injection de porteurs dans le transistor parasite sur oxyde épais. Dans le papier mentionné précédemment, la mise en évidence de l'effet de coin et son interprétation physique ont été entrepris sur la base de structures d'isolation de formes idéales. En pratique, la fabrication de structures d'isolation non conventionnelles n'a pas permis de confronter les résultats de simulations et les caractéristiques mesurées avec succès. Selon une approche assez différente, la proportion du volume d'oxyde enterré a également été utilisée comme critère de quantification des performances électriques de structures d'isolation [29]: cette dernière approche de caractérisation présente, toutefois, l'inconvénient de ne pas prendre en compte explicitement la forme de l'interface Si/SiO₂ qui influence grandement l'extension de la barrière de potentiel.

Une approche complémentaire des précédentes est adoptée dans ce travail. Une analyse quantitative des effets bidimensionnels, impliqués dans le fonctionnement des transistors parasites sur oxyde épais, est menée afin de déterminer l'influence de la forme d'oxyde sur les propriétés d'isolation [40]. Cette analyse est orientée selon trois directions d'investigation détaillées comme suit:

i) Dans un premier temps, une formulation semi-analytique décrivant le comportement du courant sous le seuil est clairement établie afin d'expliquer l'incidence de l'effet de coin sur les propriétés d'isolation. Pour ce faire, une solution analytique d'une seule équation de continuité de courant est couplée à une solution bidimensionnelle de l'équation de Poisson. Cette méthode permet de mettre en évidence la relation directe existant entre le courant sous le seuil et la hauteur maximale de barrière de potentiel développée dans le canal parasite. De plus, le mécanisme par lequel le courant sous le seuil devient indépendant de la longueur d'oxyde de champ (L), est clairement identifié.

ii) Une étude théorique systématique de l'influence de la forme de l'oxyde de champ est proposée dans un second temps. Par souci de simplicité, l'analyse porte sur des structures géométriques simples à concentration uniforme de dopants dans le canal. En particulier, les effets électriques induits par la courbure de l'oxyde de champ, d'une part, et par la quantité d'oxyde enterrée, d'autre part, font l'objet d'une caractérisation complète. Une modélisation simple du transistor MOS parasite sur oxyde épais, pouvant être interprétée en termes de longueur effective de canal, est alors proposée.

(iii) En dernier lieu, les propriétés d'isolation de structures réelles sont comparées sur la base de résultats expérimentaux et de simulations. Les dispositifs caractérisés sont du type LOCOS enterré ou semi-enterré, respectivement dénommés FROX (Fully Recessed OXide) et SROX (Semi Recessed OXide). Afin de prendre en compte des profils de dopage réalistes et une description précise de la forme d'oxyde, une approche de simulation couplée procédé/dispositif est utilisée. Les problèmes d'immunité à l'effet de DIBL (Drain Induced Barrier Lowering) sont également discutés.

IV-2 CALCUL DU COURANT PARASITE SOUS LE SEUIL : APPROCHE SEMI-ANALYTIQUE

Dans le cas d'un transistor MOS plan, la barrière de potentiel est distribuée uniformément le long du canal. L'expression du courant sous le seuil d'inversion est alors donnée par:

$$I_D = \frac{W}{L} \frac{q \mu_n \Phi_t^2 n_i^2 \exp\left(\frac{\Phi_{surf}}{\Phi_t}\right) \left(1 - \exp\left(\frac{-V_{DS}}{\Phi_t}\right)\right)}{N_B \sqrt{2 q L_B \Phi_{surf} / \epsilon_s}} \quad (1)$$

où

μ_n est la mobilité des électrons

n_i concentration intrinsèque

Φ_{surf} potentiel de surface le long du canal

Φ_t la tension thermique (kT/q)

V_{DS} la polarisation drain/source app

N_B concentration uniforme en impuretés du substrat

ϵ_s constante diélectrique du silicium

W/L rapport largeur/longueur du transistor

Selon un résultat classique, le courant montre une dépendance de type exponentielle en fonction du potentiel de surface (Φ_{surf}). Le terme $\Phi_{surf}^{-1/2}$ apparaissant au dénominateur est relatif au calcul approximatif de l'épaisseur de la couche d'inversion. Il est important de noter que les variations du courant dans les structures d'isolation deviennent indépendantes de la longueur du dispositif [28]: cet argument permet de démontrer l'insuffisance de la relation (1) qui ne prend pas en compte cet effet. Les développements qui suivent, se proposent d'établir une formulation capable de considérer la nature bidimensionnelle de la barrière de potentiel le long du canal.

L'expression de la densité de courant d'électrons est donnée par:

$$\vec{J}_n(x,y) = -q n(x,y) \mu_n(x,y) \vec{\nabla} \Phi_n(x,y) \quad (2)$$

où Φ_n désigne le pseudo-potentiel de Fermi des électrons. En considérant l'existence d'un système de coordonnées (\vec{r}, \vec{s}) , tel que \vec{r} soit orienté le long de l'interface et \vec{s} dans la direction perpendiculaire (figure 3), l'équation (2) peut alors s'écrire sous la forme [31][32]:

$$\vec{J}_n(r,s) = -q n(r,s) \mu_n(r,s) \vec{\nabla} \Phi_n(r,s) \quad (3)$$

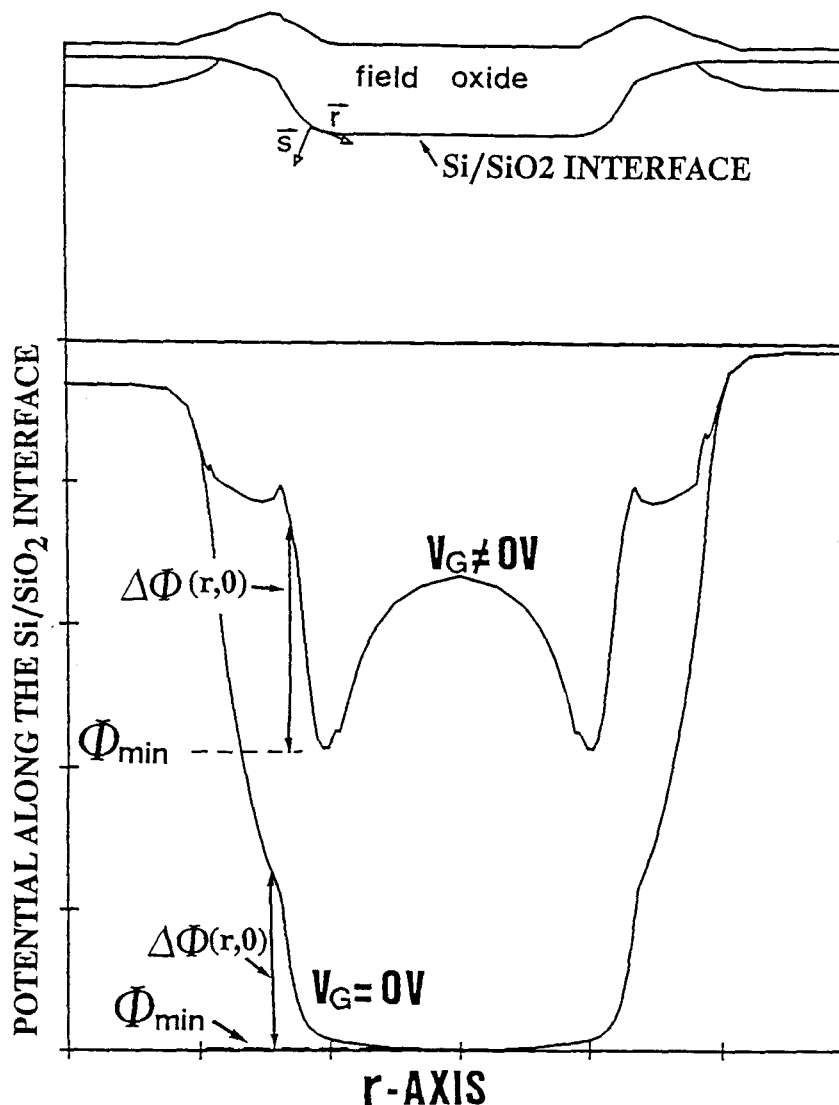


Figure 3: Définition du système de coordonnées, du potentiel minimum de surface Φ_{min} et de la variation $\Delta\Phi(r,s)$.

Puisque le transistor MOS parasite opère en régime de faible injection, le flux de courant peut être supposé parallèle à l'interface Si/SiO₂. Cette hypothèse n'est pas valide dans le voisinage des zones de source et drain où le courant se défocalise. Toutefois, cette condition est, en général, respectée dans les régions où le potentiel de surface est minimum. La composante de courant normale à l'interface est donc négligée et le pseudo-potential Φ_n est considéré comme indépendant de 's'. Par conséquent, la relation (3) se simplifie sous la forme:

$$\vec{J}_n(r,s) = -q n(r,s) \mu_n(r,s) \frac{d\Phi_n(r)}{dr} \vec{r} \quad (4)$$

La relation (4) fait apparaître la concentration en électrons exprimée

par l'équation (5) où le potentiel est référencé par rapport à la tension appliquée au substrat:

$$n(r,s) = \frac{n_i^2}{N_B} \exp \left(\frac{\Phi(r,s) - \Phi_n(r)}{\Phi_t} \right) \quad (5)$$

En considérant que la distribution de potentiel peut être exprimée en termes de variations autour de son minimum rencontré le long de l'interface (cf figure 3), l'expression de Φ s'arrange sous la forme (6) et la densité d'électrons est réécrite sous la forme donnée par la relation (7).

$$\Phi(r,s) = \Phi_{min} + \Delta\Phi(r,s) \quad (6)$$

$$n(r,s) = \frac{n_i^2}{N_B} \exp \left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t} \right) \exp \left(\frac{\Delta\Phi(r,s) - \Phi_n(r)}{\Phi_t} \right) \quad (7)$$

En combinant les équations (4) et (7), le courant total est calculé par intégration du flux de la densité de courant sur une surface fermée englobant le contact de drain. Puisque le courant est essentiellement confiné le long de l'interface, la surface d'intégration se réduit à un plan pris à 'r' constant, s'étendant de l'interface (s=0) au substrat (s=∞). Compte-tenu de ces remarques, le courant total est exprimé par:

$$I_D = -qW \frac{n_i^2}{N_B} \frac{d\Phi_n(r)}{dr} \exp \left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t} \right) \exp \left(\frac{-\Phi_n(r)}{\Phi_t} \right) \int_0^\infty \mu_n(r,s) \exp \left(\frac{\Delta\Phi(r,s)}{\Phi_t} \right) ds \quad (8)$$

La détermination du pseudo-potential des électrons, entrant en jeu dans la relation précédente, est contournée en interprétant (8) comme une équation différentielle dont l'inconnue est Φ_n . L'intégration de cette relation de courant et les conditions limites, exprimées par ($\Phi_n|_{r=r_s} = V_s$) à la source et ($\Phi_n|_{r=r_d} = V_d$) au drain, aboutissent à:

$$\int_{V_s}^{V_d} \exp \left(\frac{\Phi_n(r)}{\Phi_t} \right) d\Phi_n = \frac{-I_D}{qW \frac{n_i^2}{N_B} \exp \left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t} \right)} \int_{r_s}^{r_d} \frac{dr}{\int_0^\infty \mu_n(r,s) \exp \left(\frac{\Delta\Phi(r,s)}{\Phi_t} \right) ds} \quad (9)$$

Moyennant quelques aménagements de l'équation (9), la forme finale du

courant traversant le transistor MOS parasite sur oxyde épais, est donnée par:

$$I_D = -qW \frac{n_i^2}{N_B} \Phi_t \left(1 - \exp\left(\frac{-V_{DS}}{\Phi_t}\right) \right) \exp\left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t}\right) \frac{1}{\int_{r_s}^{r_d} \int_{s_1}^{s_2} \mu_n(r,s) \exp\left(\frac{\Delta\Phi(r,s)}{\Phi_t}\right) ds dr} \quad (10)$$

L'examen de la relation (10) montre que, seules de petites variations de $\Delta\Phi$ autour du minimum de potentiel, contribuent de manière significative aux intégrales figurant au dénominateur: ce comportement est lié à la dépendance de type exponentielle. Le courant est donc gouverné par les régions localisées au voisinage des minima de potentiels où $\Delta\Phi$ varie seulement de quelques Φ_t . Sur la base de cette remarque, les hypothèses suivantes peuvent être établies:

- (i) les variations de $\Delta\Phi$ suivant les deux directions \vec{r} et \vec{s} peuvent être découplées.
- (ii) la mobilité est considérée constante et égale à sa valeur atteinte dans la région du minimum de potentiel.

La variation de potentiel $\Delta\Phi$ est donc décomposée sous la forme donnée par (11) où $\Delta\Phi_r(r)$ et $\Delta\Phi_s(s)$ désignent respectivement les contributions parallèle et perpendiculaire à l'interface.

$$\left. \begin{aligned} \Delta\Phi(r,s) &= \Delta\Phi_r(r) + \Delta\Phi_s(s) \\ \Delta\Phi_r &\geq 0 \quad \Delta\Phi_s \leq 0 \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Une forme simplifiée de la relation de courant est alors exprimée par:

$$I_D = -qW \frac{n_i^2}{N_B} \Phi_t \exp\left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t}\right) \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{-V_{DS}}{\Phi_t}\right) \right) \cdot \mu_n |_{\Phi=\Phi_{min}} \cdot \frac{\int_0^{\infty} \exp\left(\frac{\Delta\Phi_s(s)}{\Phi_t}\right) ds}{\int_{r_s}^{r_d} \exp\left(\frac{-\Delta\Phi_r(r)}{\Phi_t}\right) dr} \quad (12)$$

L'intégrale figurant au dénominateur de la relation (12) indique clairement que le courant du dispositif d'isolation est entièrement déterminé par l'extension de la barrière de potentiel autour de sa valeur minimale. Cette caractéristique est liée au comportement du

terme exponentiel rapidement décroissant dès que $\Delta\Phi_r$ est supérieur à Φ_t . La configuration typique de la barrière de potentiel est uniquement une fonction de la courbure de l'oxyde de champ dans la région de transition oxyde mince/oxyde épais. Ce dernier point permet d'expliquer l'indépendance du courant parasite vis-à-vis de la longueur du dispositif. A cet effet, l'intégrale discutée précédemment, représente une longueur effective électrique (L_{eff}):

$$L_{eff} = \int_{r_s}^{r_d} \exp\left(\frac{-\Delta\Phi_r(r)}{\Phi_t}\right) dr$$

Dans le cas simple où la barrière de potentiel est uniformément distribuée le long du canal, le résultat du calcul unidimensionnel (1) de courant, inversement proportionnel à L , est retrouvé. De manière analogue, le numérateur de l'équation (12) peut être relié à l'extension en profondeur du canal. L'épaisseur de ce dernier est en effet défini par les variations de $|\Delta\Phi_s|$ au voisinage immédiat de l'interface. Cette approche n'est valide que dans le cas d'un état de déplétion suffisant. Par conséquent, la validité des hypothèses émises en (11) est justifiée tant que le champ électrique, créé par la polarisation de grille, est capable de produire une chute de potentiel de quelques Φ_t par rapport à la valeur du potentiel d'interface. La formulation unidimensionnelle du problème est également rétablie en considérant une variation linéaire abrupte de $\Delta\Phi_s$ au voisinage immédiat de l'interface:

$$\left. \begin{aligned} \Delta\Phi_s(s) &= -|E_{surf}| \cdot s \\ |E_{surf}| &= \sqrt{2 q N_B \Phi_{surf} / \epsilon_s} \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

IV-3 ANALYSE DE STRUCTURES IDEALES D'ISOLATION

IV-3.1 Description de la structure

Cette section est consacrée à l'analyse de structures d'isolation de formes idéales afin de caractériser l'influence de la géométrie sur la distribution surfacique de potentiel. Afin d'atteindre cet objectif, deux paramètres complémentaires (figure 4) font l'objet d'une étude détaillée, à savoir:

- (i) l'épaisseur d'oxyde enterré (h)
- (ii) la pente (α) de l'interface Si/SiO₂ dans la région du bec d'oiseau

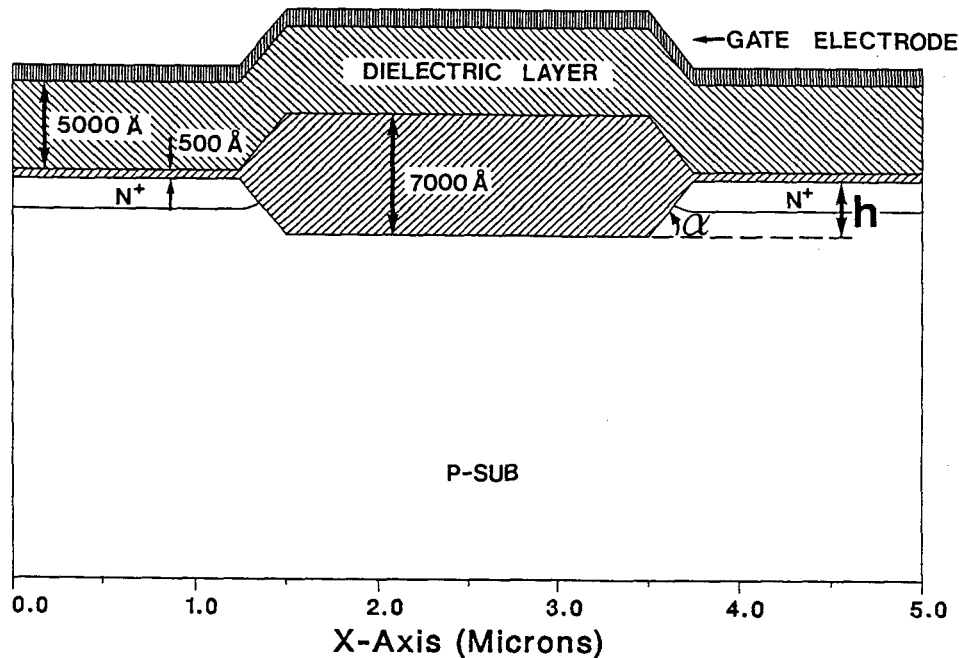


Figure 4: Structure géométrique d'une structure d'isolation idéalisée

Pour la plupart des formes géométriques d'oxyde de champ, le calcul de la distribution de potentiel au voisinage du coin d'oxyde reste une tâche difficile, même par le biais d'une technique de transformation conforme. Ce dernier point justifie l'utilité d'une solution numérique de l'équation de Poisson à deux dimensions. Les caractéristiques de courant sous le seuil sont ensuite calculées selon la relation (12), pour une gamme étendue de géométries. Les structures étudiées peuvent être classées en deux catégories. La première est caractérisée par une hauteur constante d'oxyde enterré et une pente ' α ' ajustable dans la zone de transition avoisinant le bec d'oiseau. La seconde garde une courbure constante d'interface pour différentes valeurs de quantité d'oxyde enterré ' h '. Pour l'ensemble de ces structures, la profondeur de jonction source/drain est égale à 0.25 μm et les épaisseurs oxydes sont gardées constantes: 500 Å pour l'oxyde MOS et 7000 Å pour l'oxyde de champ. Une couche de 5000 Å d'oxyde recouvre l'ensemble du dispositif afin de prendre en compte le niveau d'isolation entre le polysilicium et l'aluminium. La concentration en dopant dans le canal

est uniforme et fixé à $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. L'influence de charges fixes d'interface est négligée. L'un des intérêts essentiels de cette approche est de pouvoir découpler les effets géométriques par rapport à l'influence d'autres paramètres agissant également sur les propriétés d'isolation, tels que l'épaisseur d'oxyde et la présence d'un profil de dopage non uniforme dans le canal.

IV-3.2 Effet de la courbure d'oxyde

Les variations du potentiel minimal de surface en fonction de la pente d'oxyde (α) sont reportées en figure 5. La tension de grille apparaît en paramètre du réseau de courbes. La hauteur d'oxyde enterré (h) est pour chacun des cas égale à 3250 \AA . Ces résultats démontrent qu'un flanc abrupt d'oxyde permet d'accéder à de meilleures performances d'isolation puisque le potentiel de surface décroît pour des valeurs croissantes de l'angle α . Toutefois, l'effet de coin induit par le profil d'oxyde ne devient efficace que pour une valeur suffisante de la polarisation de grille. Les caractéristiques correspondantes de courant sous le seuil sont illustrées par la figure 6. Le courant a été calculé à l'aide de l'équation (12).

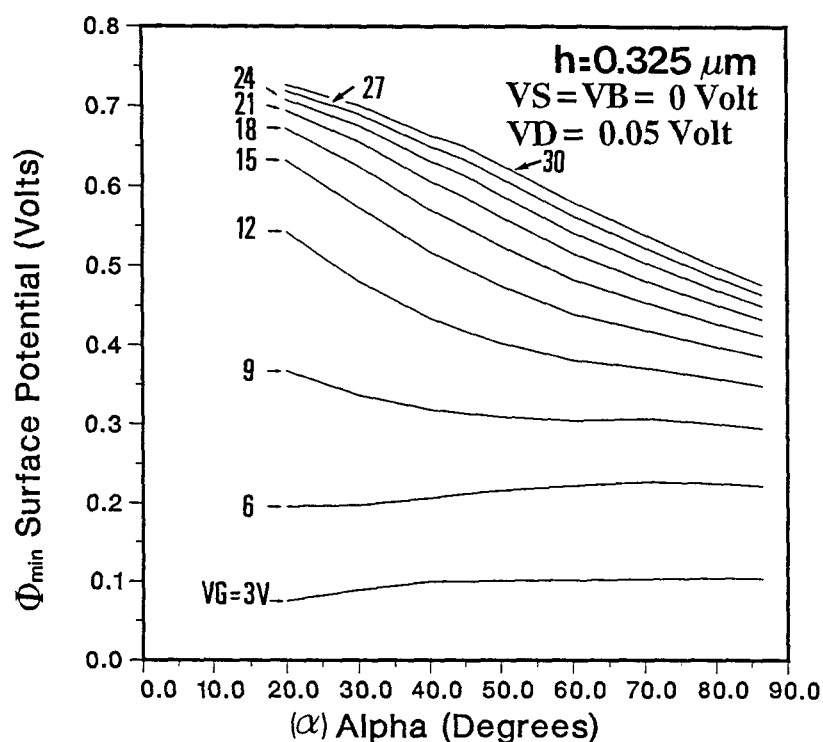


Figure 5: Evolution du potentiel de surface en fonction de la courbure d'oxyde α pour différentes tensions de grille.

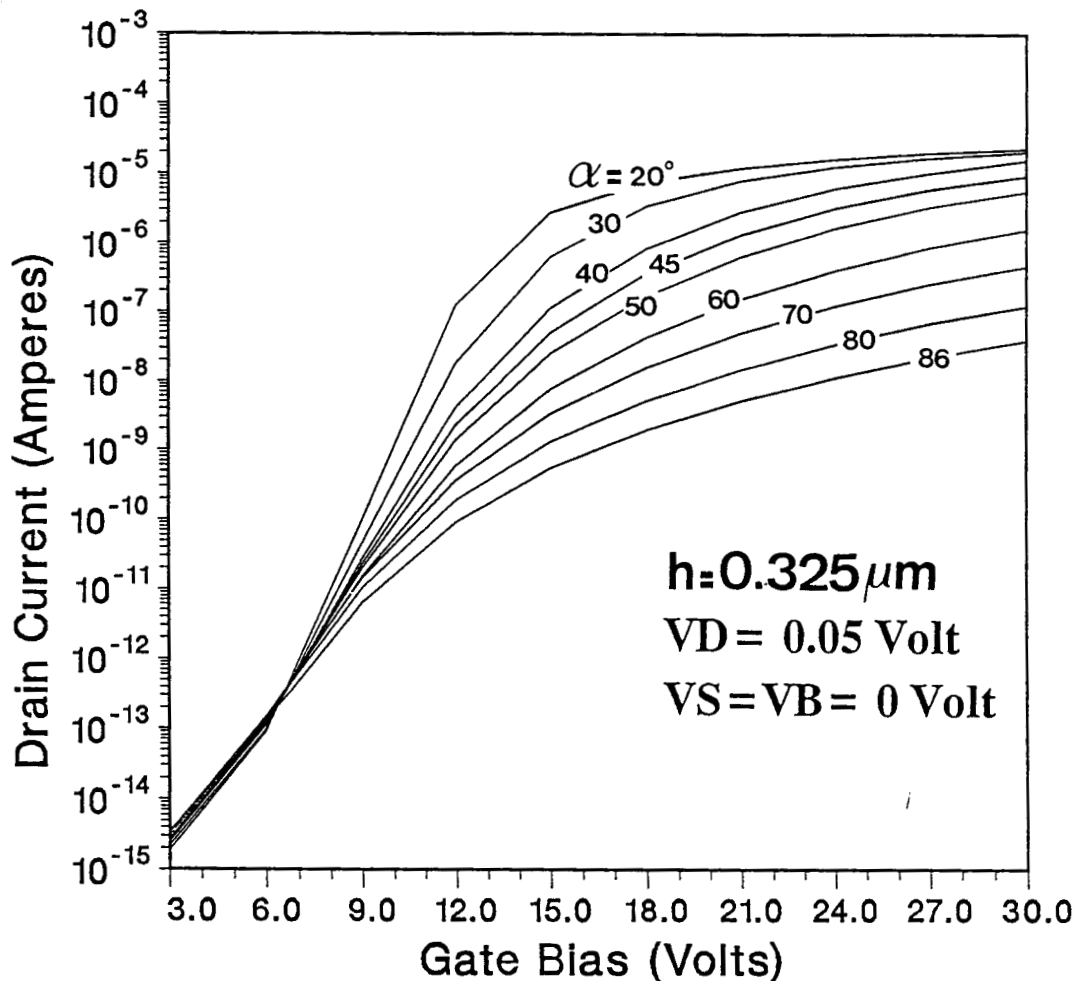


Figure 6: Réseau de caractéristiques sous le seuil $I_D=f(V_G)$ paramétré par la valeur de la pente d'oxyde α .

De manière complémentaire, les propriétés d'isolation de ces structures peuvent être caractérisées par la tension de seuil (V_t) calculée pour un courant de fuite de $1\ \text{pA} \frac{W}{L}$. Les variations de V_t en fonction de la pente α sont représentées en figure 7, pour deux valeurs de 'h': la réduction de la quantité d'oxyde enterré ($h=0.65 \rightarrow 0.325\ \mu\text{m}$) entraîne une diminution de la tension de seuil d'autant plus significative que le flanc d'oxyde est raide (α proche de 90°). Par conséquent, une transition oxyde fin/épais abrupte ne constitue pas une condition suffisante en termes de qualité d'isolation.

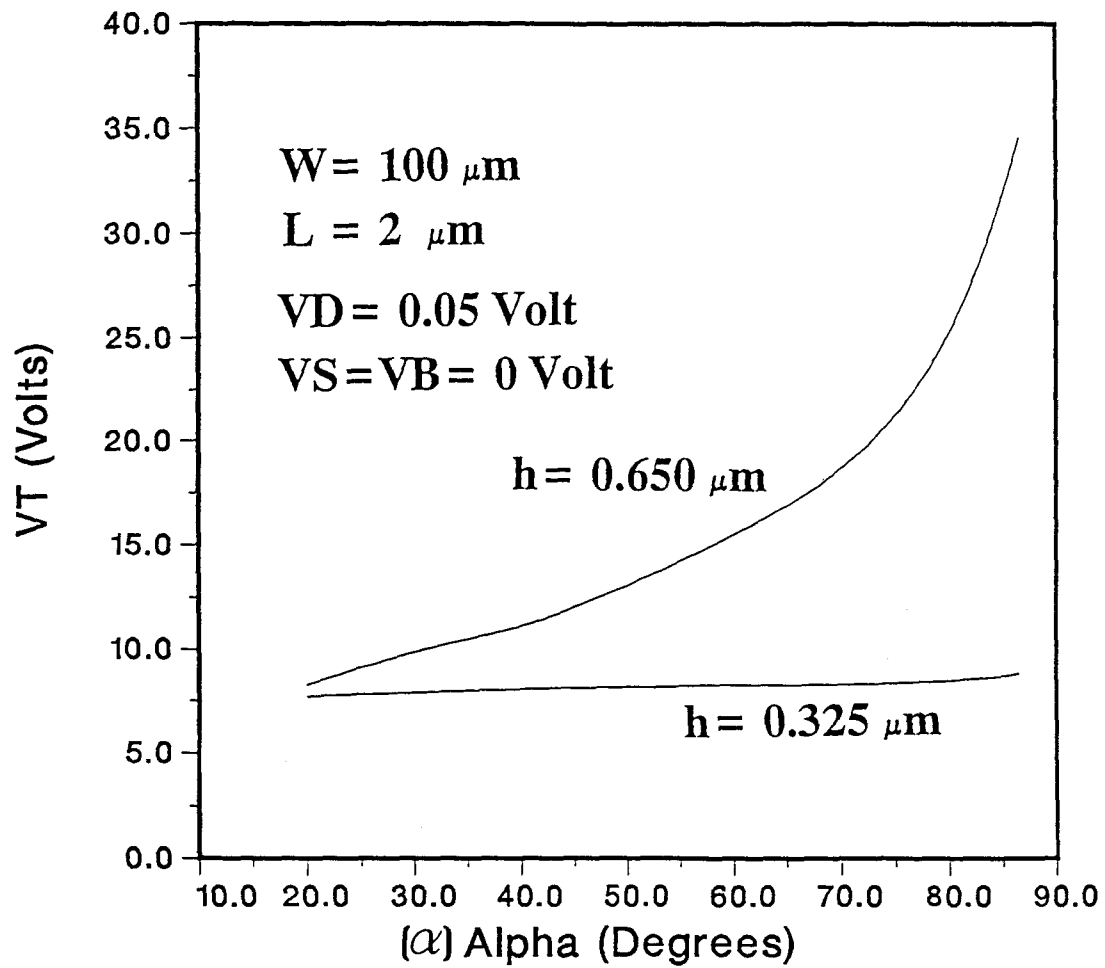


Figure 7: Evolution de la tension de seuil du transistor parasite sur oxyde épais en fonction de la courbure α . Deux hauteurs d'oxyde enterré sont prises en considération: $h = 0.325$ et $0.65 \mu\text{m}$)

IV-3.3 Influence de la quantité d'oxyde enterré

Les résultats complémentaires à ceux du paragraphe précédent sont maintenant exposés afin de quantifier l'effet de la hauteur d'oxyde enterré (h). A cet effet, la figure 8 représente l'évolution du potentiel de surface (Φ_{min}) en fonction de h . La courbure d'oxyde (α) est maintenue constante à une valeur de 90° . Le potentiel de surface décroît très rapidement pour des hauteurs croissantes d'oxyde, uniquement lorsque l'effet de coin existe ($V_g > 6\text{V}$). Les caractéristiques correspondantes de courant sous le seuil sont représentées en figure 9.

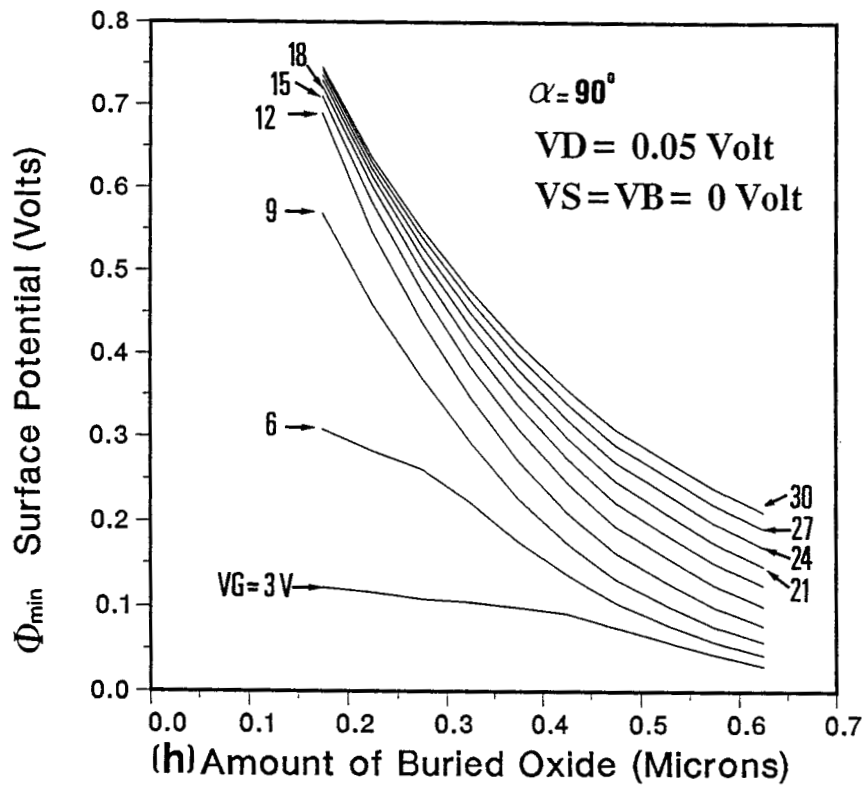


Figure 8: Evolution du potentiel minimal de surface en fonction de la hauteur d'oxyde enterré. La tension de grille V_G paramètre le réseau de courbes.

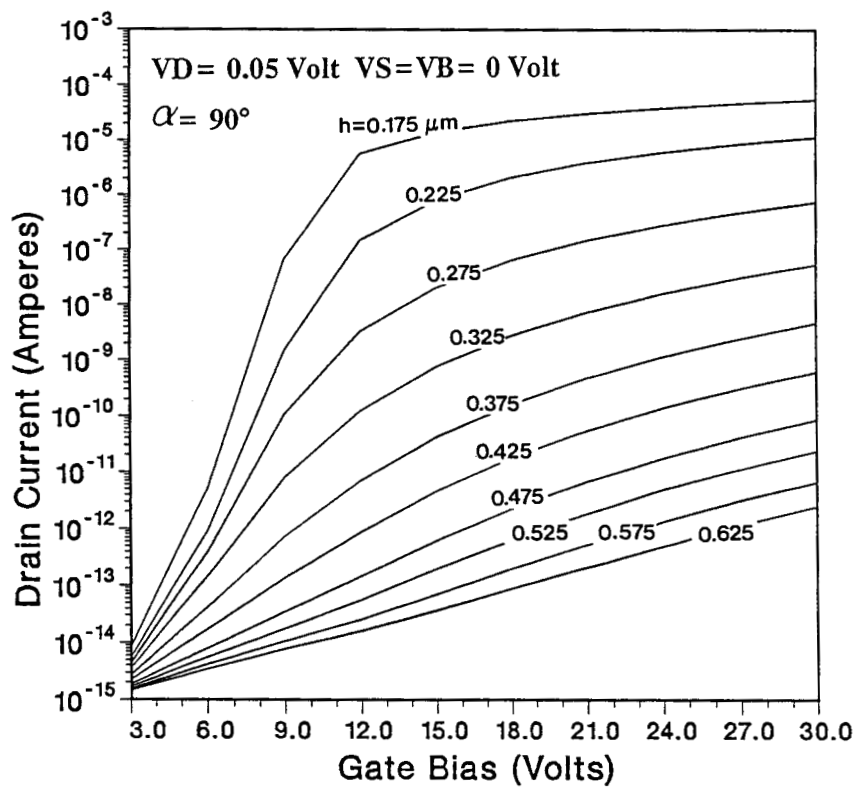


Figure 9: Réseau de caractéristiques $I_D = f(V_G)$ sous le seuil. Paramétrage en fonction de la quantité d'oxyde enterré (h).

Les variations de la tension de seuil du transistor parasite sont maintenant représentées en fonction de la hauteur (h) d'oxyde (figure 10), pour deux valeurs caractéristiques de pentes: $\alpha=90^\circ$ et $\alpha=45^\circ$. Une conclusion complémentaire à celle du paragraphe précédent peut être dressée: la qualité des propriétés d'isolation ne peut pas être établie sur un critère unique dépendant de la hauteur d'oxyde enterré (h).

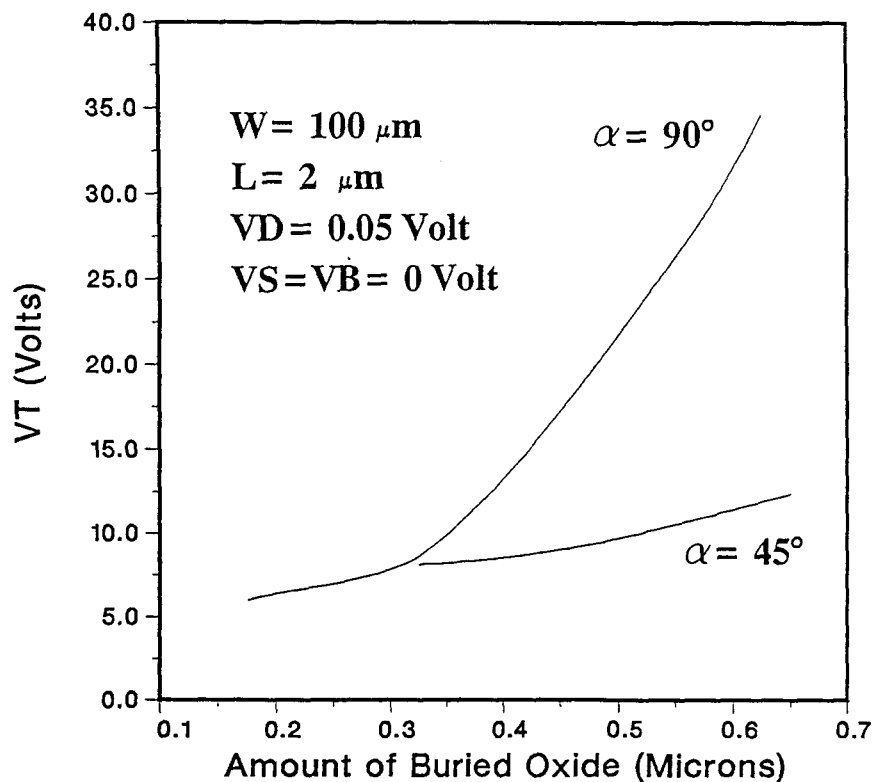


Figure 10: Variations de la tension de seuil du transistor parasite sur oxyde épais en fonction de la hauteur d'oxyde enterrée. Deux valeurs de courbure d'interface paramètre les résultats: $\alpha=45^\circ$ et $\alpha=90^\circ$

IV-3.4 Modélisation et effet de la longueur effective du dispositif

En présence de l'effet de coin, le courant est gouverné par la diffusion des électrons à travers la barrière de potentiel localisée sous les zones de transition oxyde épais / oxyde fin. Le comportement de la structure d'isolation peut être assimilé à celui d'un dispositif constitué de trois transistors connectés en série. Une illustration de

ce modèle élémentaire est proposée dans ce qui suit. Dans ce but, une interprétation plus aisée de la relation de courant peut être conduite en reconsidérant la relation (10) sous la forme:

$$I_D = - \frac{V_{DS}}{\int_{r_s}^{r_d} \frac{dr}{\frac{n_i}{N_B} W \int_0^{\infty} q n(r,s) \mu_n(r,s) ds}} = - \frac{V_{DS}}{\sum_k \frac{1}{\sigma_k}} \quad (14)$$

Cette nouvelle expression du courant utilise une sommation discrète effectuée en fonction de la position dans le long de l'interface. Selon cette approche, le canal est composé de conductances élémentaires connectées en série, dont la forme est donnée par:

$$\frac{1}{\sigma_k} = \frac{\Delta r_k}{\frac{n_i}{N_B} W \int_0^{\infty} q n(r,s) \mu_n(r,s) ds} \quad (15)$$

Puisque le courant total est limité par les régions de plus forte résistivité dans le canal, une large proportion de la tension source/drain appliquée doit chuter dans les régions de coin d'oxyde où la barrière de potentiel est maximale. Afin d'illustrer ce mode spécial de fonctionnement lié à l'existence de l'effet de coin, les variations du pseudo potentiel Φ_n le long de l'interface sont étudiées dans le détail. L'expression de Φ_n est obtenue en adoptant une borne d'intégration supérieure dépendant de 'r' dans la relation (9). En employant de surcroît la simplification introduite en (11), Φ_n prend la forme:

$$\Phi_n(r) = \Phi_t \cdot \ln \left(\exp \left(\frac{V_s}{\Phi_t} \right) \frac{I_D}{\Phi_t q W \frac{n_i^2}{N_B} \exp \left(\frac{\Phi_{min}}{\Phi_t} \right) \mu_n |_{\Phi=\Phi_{min}} \int_{s_1}^{s_2} \exp \left(\frac{\Delta \Phi_s(s)}{\Phi_t} \right) ds} \int_{r_s}^r \exp \left(\frac{-\Delta \Phi_r(r)}{\Phi_t} \right) dr \right) \quad (16)$$

En figure 11 sont représentées les variations de Φ_n pour un dispositif exhibant un effet de coin modéré ($h=0.325 \mu\text{m}$ et $\alpha=45^\circ$). Trois zones de fonctionnement du dispositif parasite peuvent alors être déduites:

- (i) Pour une tension de grille faible, la tension source/drain chute uniformément le long de l'interface puisque chaque section élémentaire du canal contribue de la même manière dans l'établissement du courant total (Figure 11-a: courbes en trait pointillé). La structure d'isolation réagit d'une manière identique à celle d'un dispositif plan unidimensionnel.
- (ii) Lorsque la tension de grille est suffisamment élevée, de profondes barrières de potentiel sont formées sous le coin convexe d'oxyde. Leurs localisations correspondent aux zones de plus forte résistivité. Dans ce cas, la quasi totalité du potentiel source/drain chute dans les zones de coin d'oxyde (figure 11-a: courbes en trait interrompu). Le courant n'est donc plus dépendant de l'espacement total entre zones de source et drain, mais devient plutôt une fonction de la longueur effective (L_{eff}).
- (iii) En accroissant de nouveau la tension de grille, la hauteur des barrières de potentiel décroît (l'effet de coin fléchit). Les variations correspondantes de Φ_n recouvrent progressivement un comportement linéaire (figure 11-b). Le courant sous le seuil tend progressivement vers une dépendance en fonction de l'inverse de la longueur totale du dispositif (L).

L'ensemble des résultats exposés dans cette partie théorique montre que les meilleures performances d'isolation peuvent être atteintes à l'aide de structures profondément enterrées marquées par une transition abrupte oxyde mince /oxyde épais. Cette analyse justifie donc la tendance à l'intégration de structures de type 'TRENCH' malgré les problèmes de technologie qui lui sont associés.

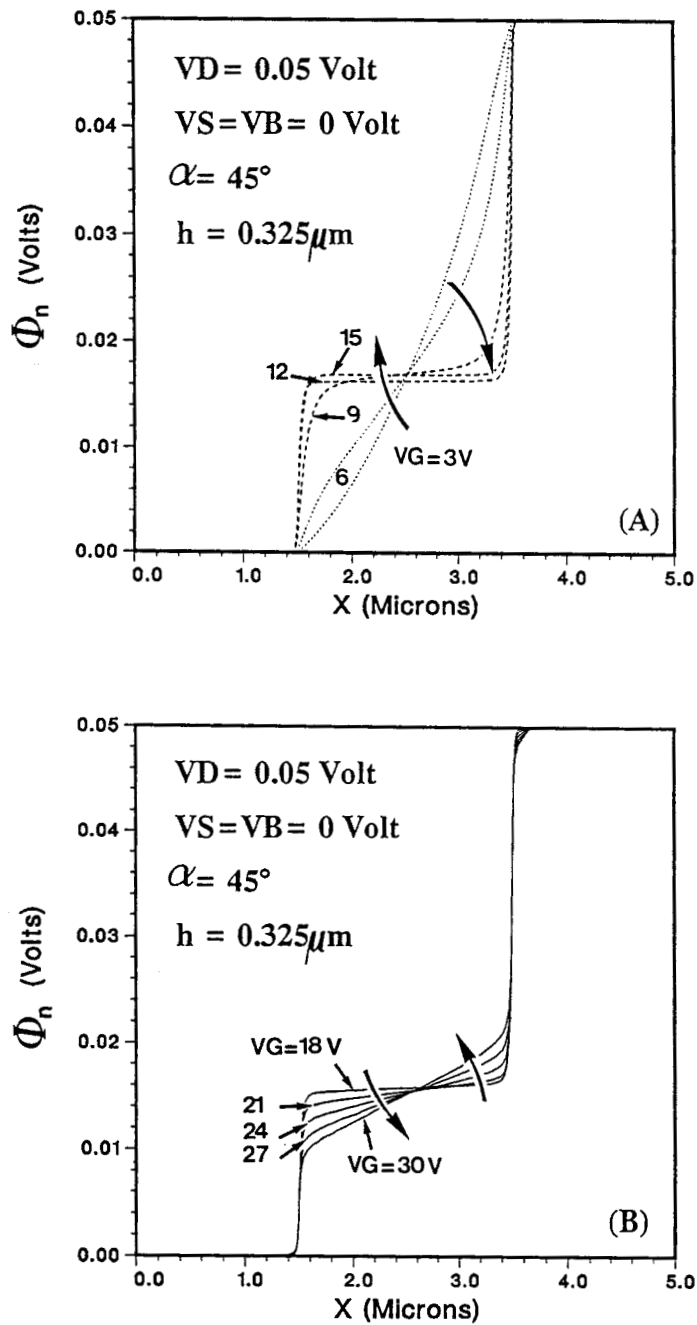


Figure 11: Variations du pseudo-potential Φ_n en surface

- a) pointillé: dépendance typique du courant en $1/L$.
interrompu: courant indépendant de la longueur de l'oxyde de champ.
- b) courant retrouvant progressivement sa dépendance en fonction de la longueur totale (L) de l'oxyde de champ.

IV-4 APPLICATION A DES STRUCTURES REELLES DE TYPE LOCOS

IV-4.1 Introduction

Cette partie traite des propriétés d'isolation de structures LOCOS et LOCOS enterré principalement sur la base des observations et calculs menés dans les paragraphes précédents. Bien que les techniques numériques aient fait l'objet d'une description détaillée dans le chapitre III, un rappel de la stratégie de simulation est effectué dans un premier temps, afin de porter l'accent sur l'aspect de couplage procédé/dispositif. Un descriptif rapide des étapes de fabrication des dispositifs utilisés est ensuite donné. Enfin, les performances électriques des structures étudiées sont comparées du point de vue simulation et expérimental.

IV-4.2 Stratégie de simulation

Les performances électriques des structures d'isolation sont très intimement liées à la courbure de l'oxyde de champ dont les moindres variations affectent profondément les caractéristiques de courant résultantes. La stratégie utilisée met en oeuvre les deux aspects de simulation de procédé et de dispositifs [33]. Son intérêt est double puisqu'elle permet à la fois de prendre en compte des profils de dopage réalistes et une forme précise d'oxyde [34].

L'ensemble logiciel IMPACT représente la base de simulation numérique utilisée. Parmi les outils disponibles, IMPACT-2 et IMPACT-3.2 ont été retenus dans le cadre de l'application à des structures d'isolations:

- (i) IMPACT-2 fournit la composante de simulation de procédé [35] [36] [37]. Les profils d'oxyde résultant des étapes d'oxydation font l'objet d'une modélisation analytique par combinaison de fonctions 'erreur' reproduisant la forme de l'oxyde de champ.
- (ii) IMPACT-3.2 est un simulateur de dispositif spécialement dédié à l'analyse de transistors parasites sur oxyde épais [34] [38] [39]. L'ensemble des caractéristiques de ce simulateurs a été largement développé dans le chapitre III.

IV-4.3 Description des étapes de fabrication

Le substrat orienté <100> de type p possède une résistivité de 18 Ωcm . Le masque d'isolation est constitué d'un bi-couche d'oxyde thermique (500 Å) et de nitrure LPCVD (1500 Å). Concernant la structure enterrée, les régions non protégées sont gravées à l'aide d'une solution de KOH avant oxydation. Une implantation de champ anti-canal est ensuite réalisée (bore, 25 keV, $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$), suivie d'une étape d'oxydation humide à 950 °C (épaisseur d'oxyde $\sim 7500 \text{ Å}$). Les étapes suivantes correspondent à un procédé standard NMOS à grille polysilicium. Une couche d'oxyde CVD épaisse de 5000 Å sépare le niveau de polysilicium de la ligne d'interconnexion servant de grille au dispositif parasite. Les profondeurs de jonctions des zones de source/drain sont de 0.25 μm . Le dispositif expérimental est formé par l'oxyde d'isolation séparant les deux jonctions d'arsenic. Les structures d'isolation possèdent une largeur de 100 μm et plusieurs longueur d'oxyde de champ ont été réalisées. Une section de coupe de chaque type de structure est illustrée par une photo SEM en figure 12.

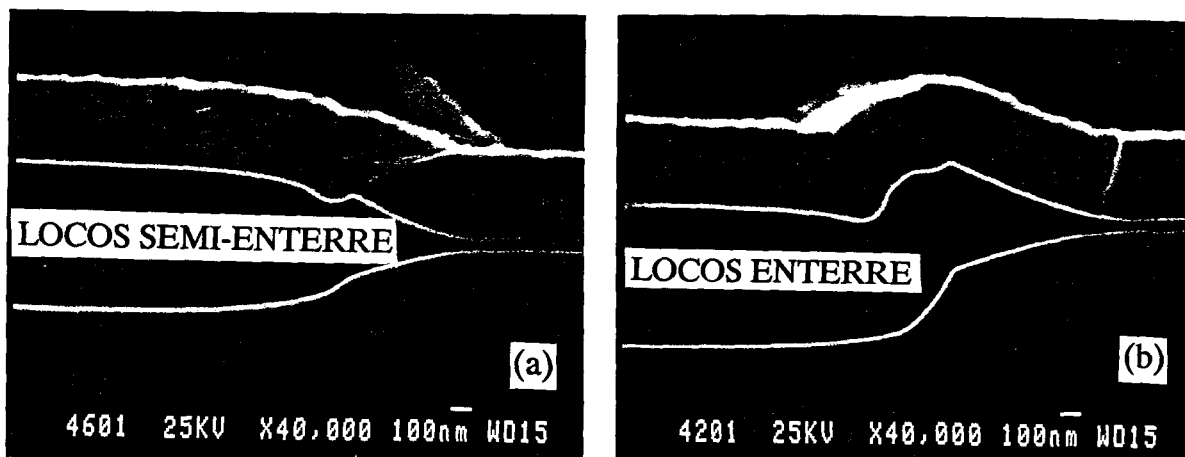


Figure 12: Photographies SEM des dispositifs d'isolation étudiés

(a): structure semi-enterrée (LOCOS standard)

(b): structure enterrée

IV-4.4 Comparaison des performances d'isolation

Les caractéristiques de courant calculées par la relation (12), ainsi que les mesures correspondantes, sont reportées en figure 13. Les conditions de polarisations sont: $V_{DS} = 50$ mV et $V_{BS} = 0$ V. Un masque de $16 \mu\text{m}$ définit la longueur des structures. Une densité de charge surfacique de $2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a été introduite dans les calculs d'après l'estimation donnée par des mesures de type C-V. Le bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux permettent de valider l'approche adoptée en simulation.

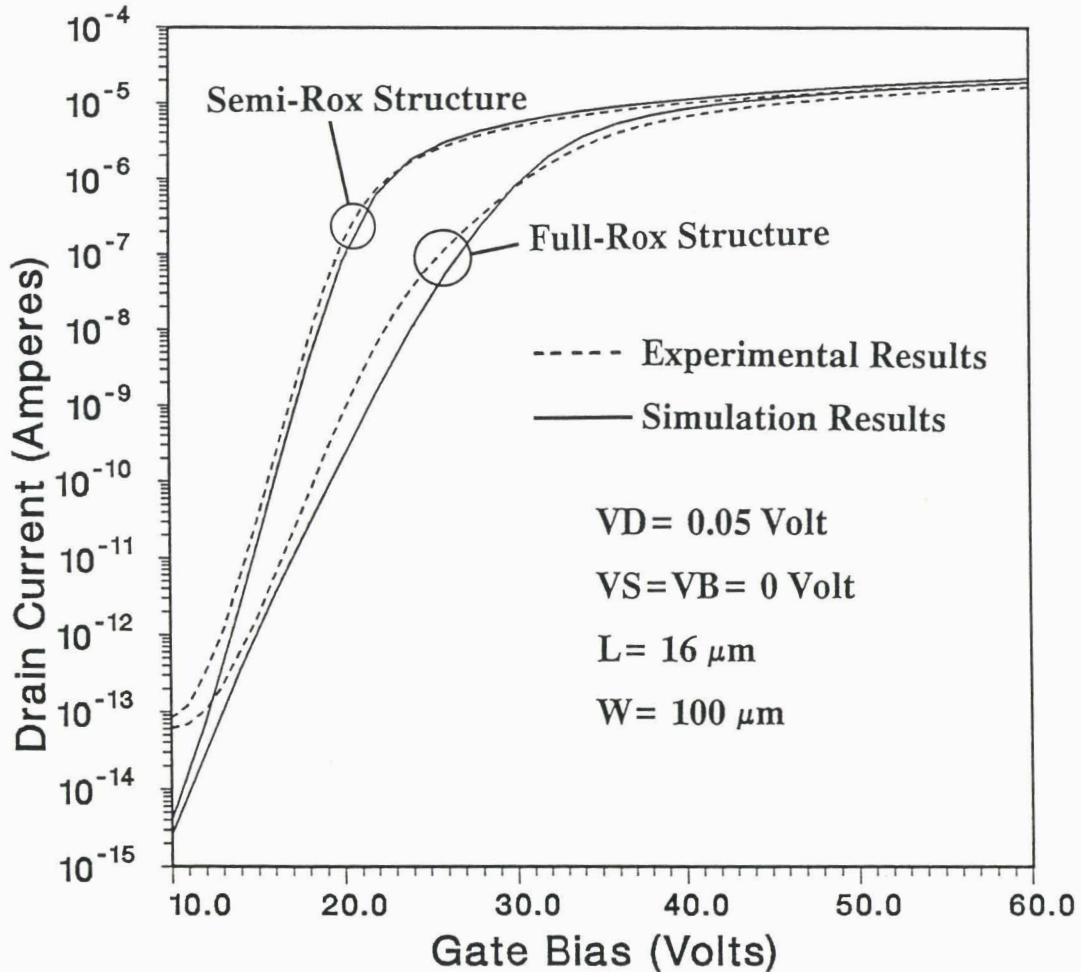


Figure 13: Caractéristiques $I_D = f(V_G)$ mesurées et simulées pour les deux types de structures LOCOS.

La structure enterrée démontre de meilleures propriétés d'isolation que la structure semi-enterrée sur toute la gamme de courant. Le résultat de simulation de procédé (figure 14) montre que le profil d'oxyde de la structure enterrée est abrupt et que la partie plane d'interface est plus profonde que la position des jonctions. Par conséquent, les coins d'oxyde font partie intégrante du canal parasite qui démontrent un comportement fortement bidimensionnel. Comme il a été mis en évidence dans le paragraphe précédent, la topologie d'oxyde crée de profondes barrières de potentiel dans les régions incurvées: la figure 15 montre la distribution de potentiel à l'interface Si/SiO₂ pour différentes polarisations de grille.

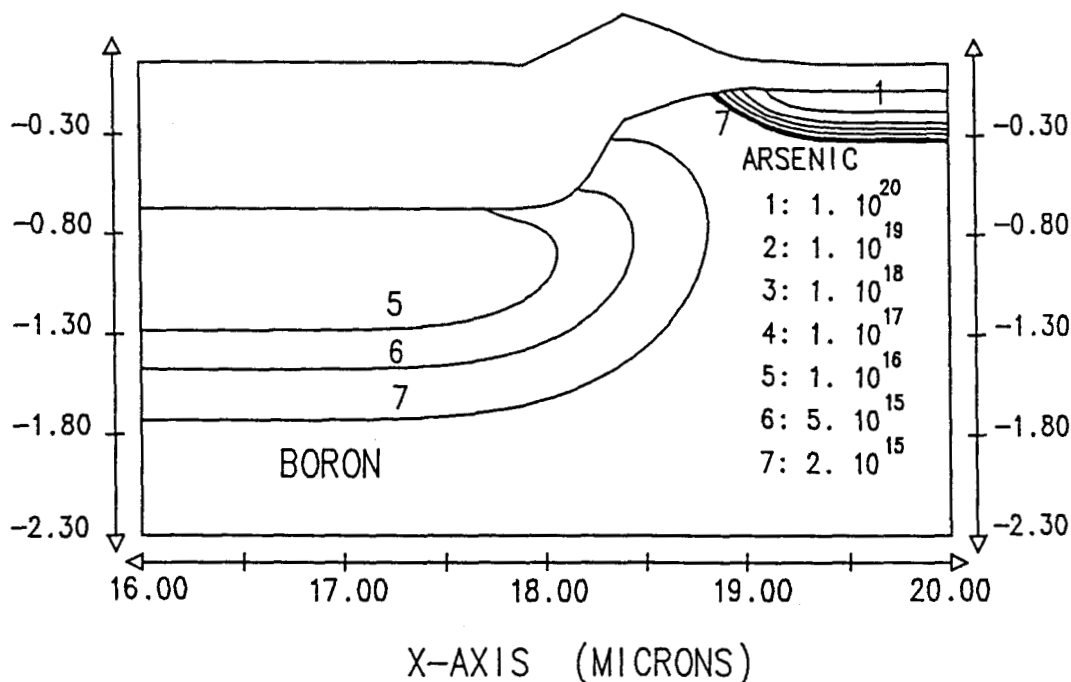


Figure 14: Structure LOCOS enterrée - Simulation de procédé montrant les profils de concentration et la forme d'oxyde.

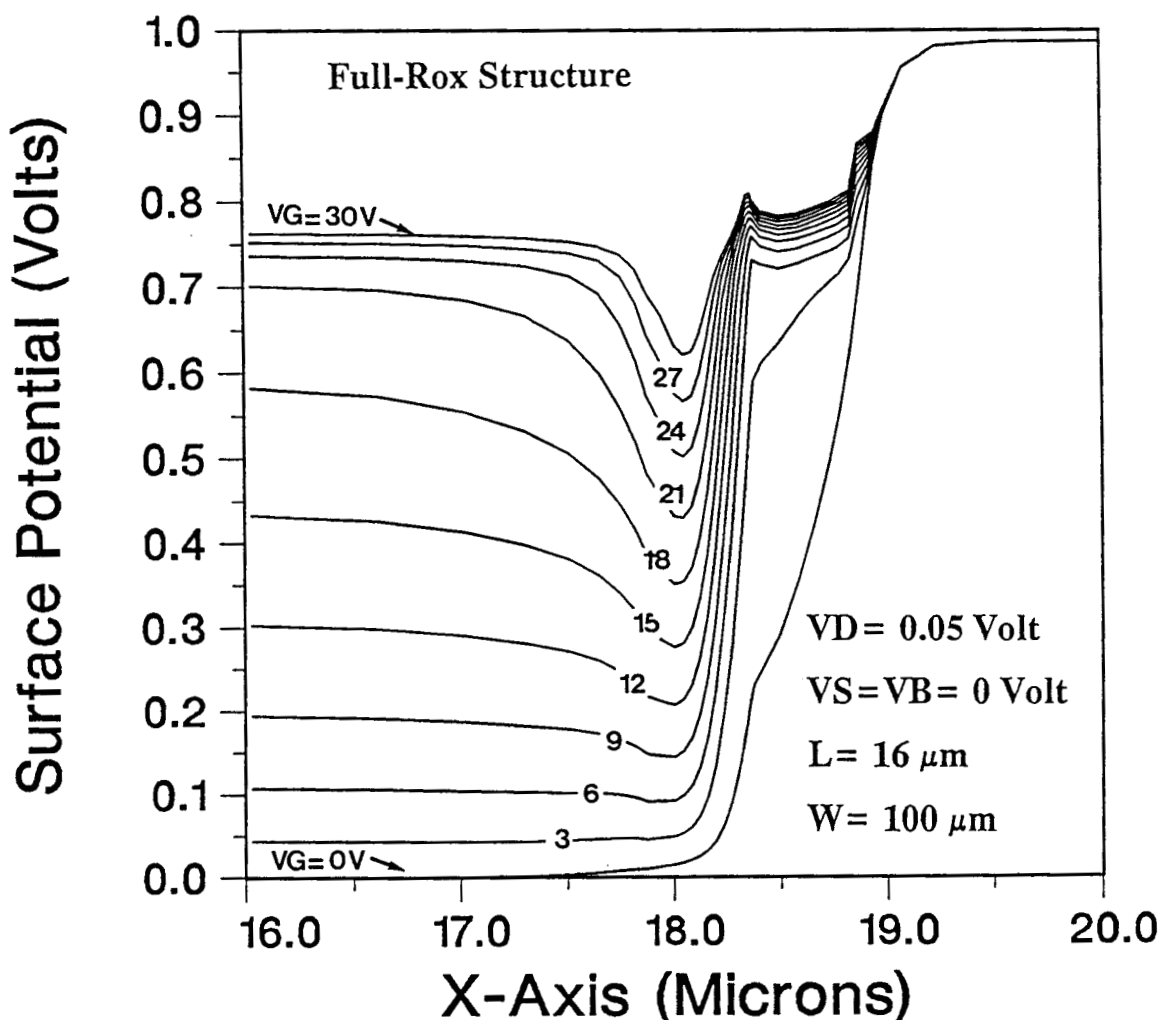


Figure 15: Structure enterrée - Distribution de potentiel le long de l'interface (seule la région de drain du dispositif complet est représentée)

Dans le cas de la structure semi-enterrée, la courbure de l'oxyde est plus douce dans la zone de transition oxyde mince / oxyde épais (figure 16). Par conséquent, le potentiel de surface est moins affecté par l'effet de géométrie et les barrières de potentiel développées sont moins hautes que dans le cas de la structure enterrée (figure 17).

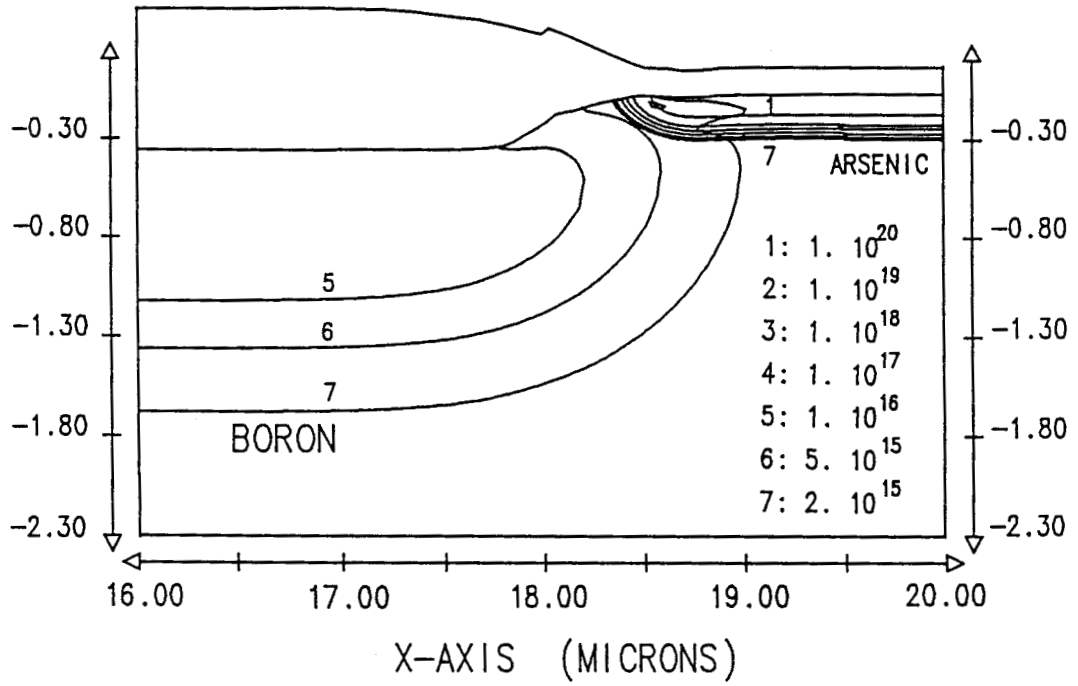


Figure 16: Structure LOCOS semi-enterrée - Simulation de procédé montrant les profils de concentration et la forme d'oxyde.

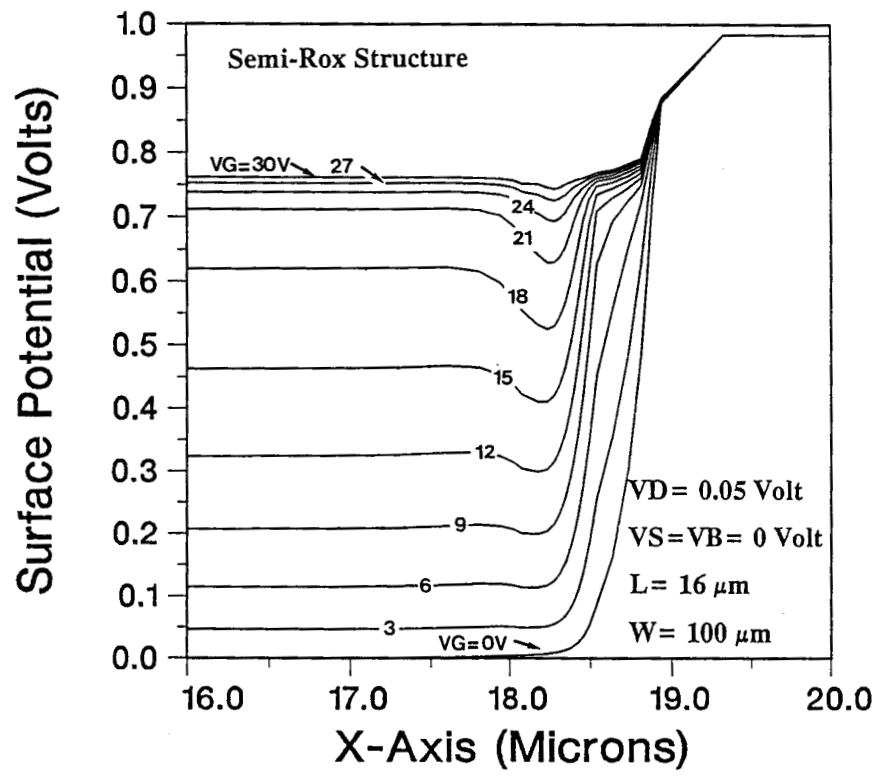


Figure 17: Structure semi-enterrée - Distribution de potentiel le long de l'interface (seule la région de drain du dispositif complet est représentée)

IV-4.5 Sensibilité à la longueur du dispositif

Les variations de courant en fonction de la longueur de canal sont représentées en figure 18 pour les deux types d'oxydes de champ. Les longueurs de masques associées sont de $2 \mu\text{m}$ et $16 \mu\text{m}$. La structure semi-enterrée accuse une dépendance en inverse de la longueur de la structure. En revanche, la structure enterrée ne révèle pas un comportement identique grâce à l'influence des barrières de potentiel développées dans les zones courbes de l'oxyde de champ: le mode typique de fonctionnement, décrit au paragraphe IV-3.4, est vérifié. Les variations de longueur effective (L_{eff}), discutée précédemment, sont reproduites en figure 19:

$$L_{\text{eff}} = \int_{r_s}^{r_d} \exp\left(\frac{-\Delta\phi_r(r)}{\phi_t}\right) dr \quad (17)$$

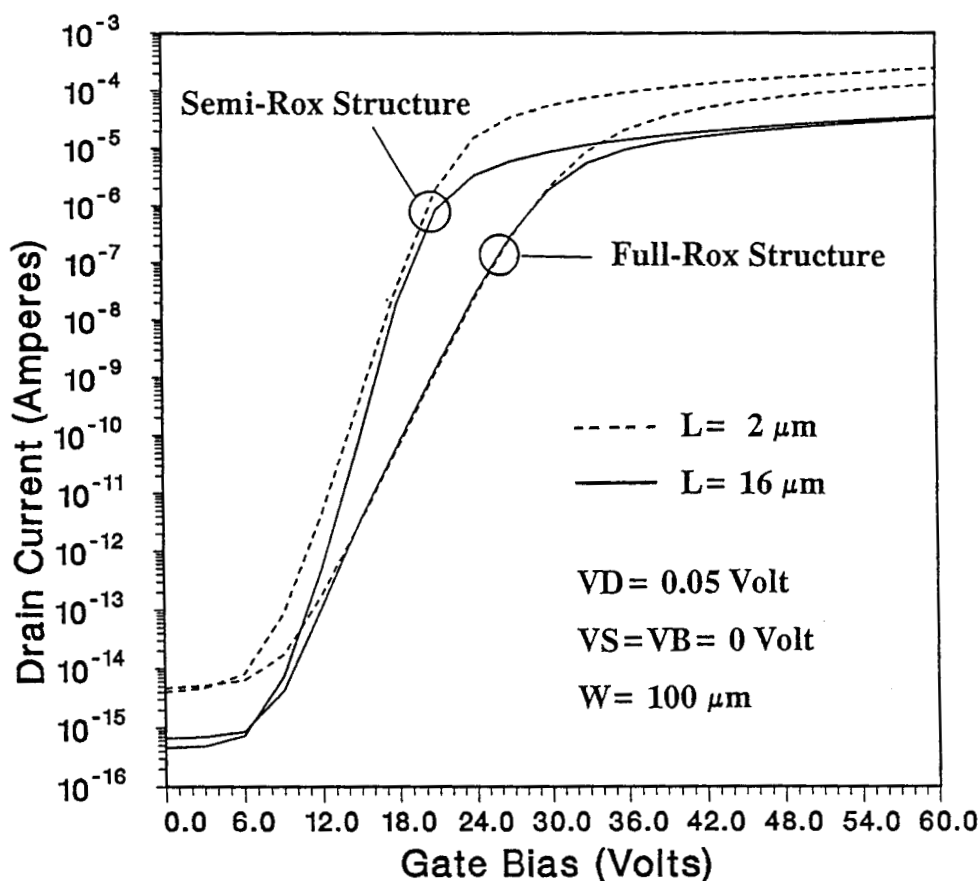


Figure 18: Caractéristiques I_D - V_G des structures LOCOS semi-enterrées et enterrées pour des longueurs de masques de $2 \mu\text{m}$ et $16 \mu\text{m}$.

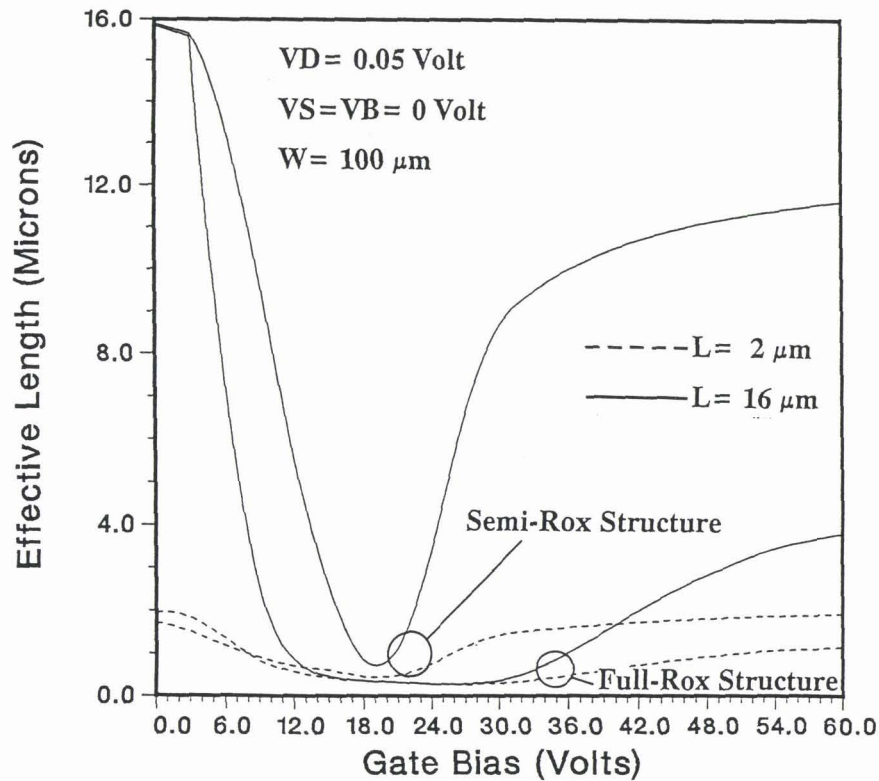


Figure 19: Variations de la longueur électrique effective en fonction de la tension de grille. Les deux types de structures (SROX et FROX) pour les deux longueurs de masques (2 et 16 μm) sont considérées.

Le fonctionnement du dispositif parasite met en évidence trois régimes distincts:

- (i) Pour une faible polarisation de grille ($V_G < 6$ V), la longueur effective reste constante et correspond à la longueur géométrique du dispositif.
- (ii) Un accroissement de la tension de grille produit alors une chute rapide de la longueur effective. Deux cas distincts peuvent alors être observés suivant la force de l'effet de coin. La structure enterrée montre une longueur effective constante ($V_G = 6$ à 30 V), qui est identique pour les deux longueurs de masques (2 et 16 μm). Par contre, la longueur effective du dispositif semi-enterré ne respecte pas de palier mais s'accroît immédiatement. De plus, deux longueurs effectives minimales différentes sont atteintes suivant la longueur du masque. Ce dernier point montre que le courant traversant la structure LOCOS semi-enterrée, est beaucoup plus sensible à la longueur réelle (L).

(iii) Enfin, la hauteur des barrières de potentiel est réduite par l'effet de champ de plus en plus puissant lorsque V_G augmente: chaque type de structure d'isolation retrouve alors progressivement une dépendance du courant en fonction de la longueur réelle (L).

IV-4.6 Sensibilité à la polarisation de drain

L'influence de la tension de drain sur la configuration de la barrière de potentiel (DIBL: Drain Induced Barrier Lowering) est analysée dans cette partie. Son effet, combiné à l'effet géométrique induit par les coins d'oxyde, est sur des dispositifs longs de $2 \mu\text{m}$, ne possédant pas la couche d'isolation de 5000 \AA sous la grille. Due à la forte polarisation de drain, les équations de continuité de courant sont résolues de manière consistante avec l'équation de Poisson. La tension de drain module la distribution de potentiel dans la région de drain (diffusion n^+) et modifie la hauteur de barrière dans la région correspondante. La figure 20 illustre la distribution de potentiel de surface obtenue pour différentes valeurs de la tension de grille comprises entre 0 et 15 volts. Pour les deux types de structures LOCOS, la barrière de potentiel adjacente au drain est absorbée par la zone de déplétion contrôlée par V_{DS} . Cependant, la structure enterrée permet de minimiser l'effet de la tension de drain dans la zone de source, contrairement au cas semi-enterré. Ce dernier résultat démontre la meilleure immunité des structures profondément enterrées à l'effet de DIBL [28] [39]. De nouveau, sous une polarisation de drain de 5 volts, la structure enterrée démontre une insensibilité à la longueur d'oxyde de champ. Ce dernier point est illustré en figure 21 représentant les caractéristiques de courant relatives à des structures longues de 2 et $7 \mu\text{m}$.

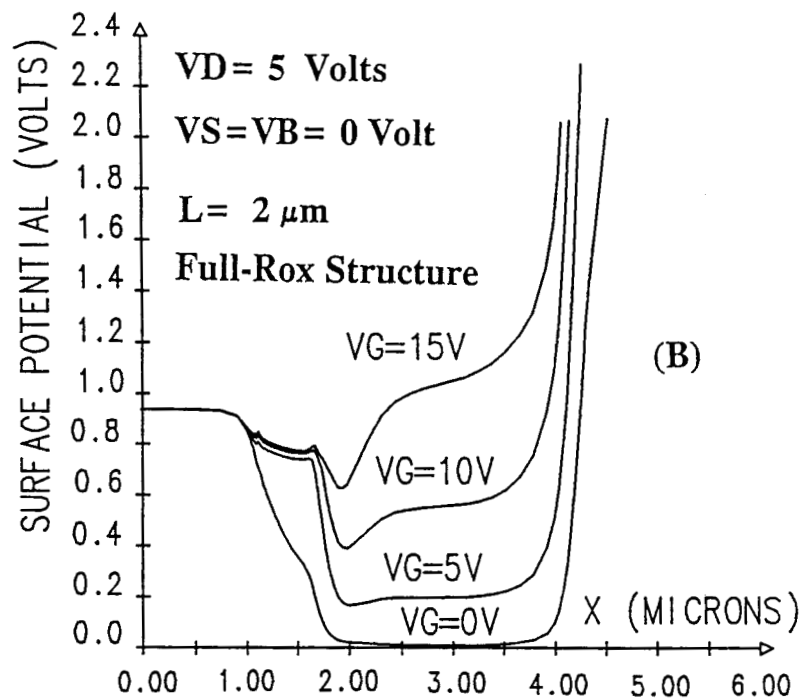
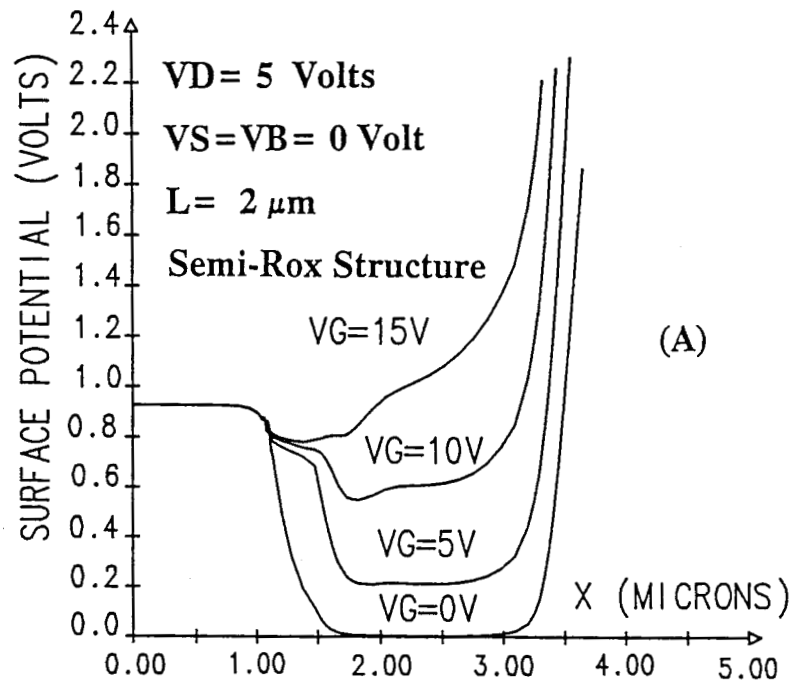


Figure 20: Distribution de potentiel en surface sous forte polarisation de drain:

- a) Structure semi-enterrée
- b) Structure enterrée

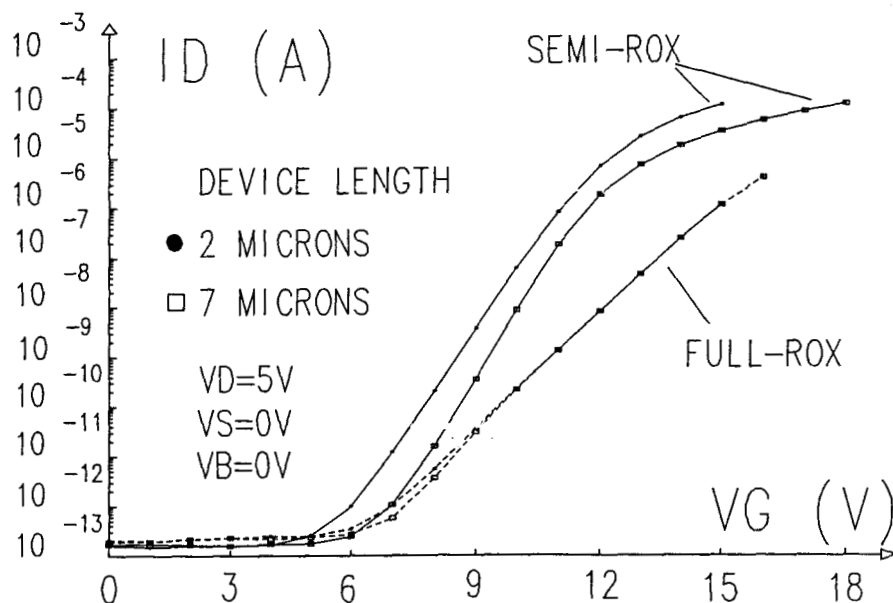


Figure 21: Caractéristiques de courant sous le seuil sous forte polarisation de drain ($V_D = 5V$): le courant de la structure enterrée ne montre pas de dépendance typique en $1/L$.

IV-5 CONCLUSIONS

Une étude détaillée du fonctionnement physique des structures d'isolation a été menée au travers de développements analytiques, de simulations couplées procédé/dispositif et de mesures de caractéristiques de courant sous le seuil [40]. Les conclusions de cette analyse montrent que les propriétés d'isolation peuvent être expliquées en termes de hauteur maximale de barrière de potentiel et de longueur effective de canal.

Les principes de base mis en évidence dans ce travail sont également applicables au cas de technologies CMOS où le dispositif parasite est formé d'un oxyde de champ séparant une jonction source/drain d'un transistor actif et le puits du transistor complémentaire [41] [42]. Le phénomène le plus critique dans ce cas est un effet de perçage lié:

- (i) à la proximité de la jonction et du puits
- (ii) à la profondeur de jonction du puits
- (iii) au fait qu'un seul coin d'oxyde soit inclus dans le canal parasite.

Une comparaison détaillée de plusieurs techniques d'isolation (LOCOS, LOCOS enterré, SILO, SILO enterré, BOX ..) dépassent largement le cadre de ce travail essentiellement consacré aux aspects physiques de fonctionnement. Cependant, les arguments développés dans le cadre de la comparaison de deux structures LOCOS sont également applicables au cas de structures SILO. En guise d'exemple, les résultats, proposés par Coppée et Van De Wiele [8], ont démontré la supériorité des propriétés d'isolation d'une structure LOCOS particulière sur une structure SILO (figure 22). Les caractéristiques de ces structures sont résumées dans le tableau I.

TABLEAU I

Structure	Epaisseur d'oxyde de champ	Longueur du bec d'oiseau
LOCOS enterré	5000 Å	0.5 μm
SILO enterré	5000 Å	0 μm

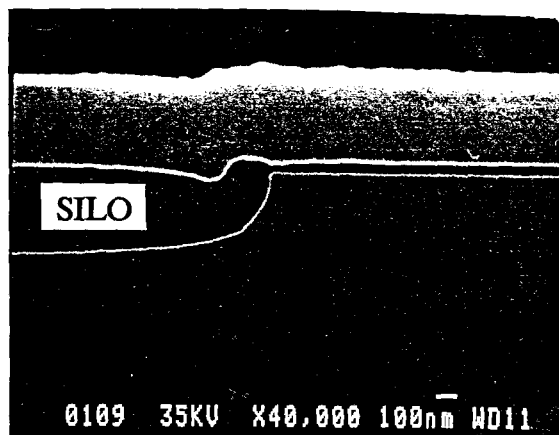
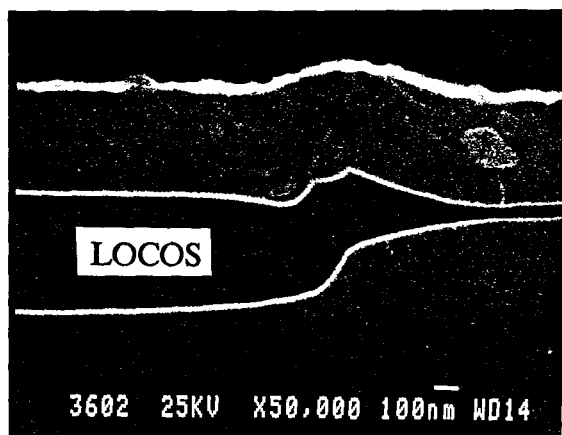


Figure 22: Photographies SEM des structures LOCOS et SILO enterrées

Par examen des résultats de simulation de procédé (figure 23), il apparaît que l'extension plus importante du bec de la structure LOCOS éloigne la jonction d'arsenic du coin d'oxyde et accentue l'effet bidimensionnel de formation de barrière de potentiel. Cette hypothèse est par ailleurs clairement vérifiée par les caractéristiques de courant de ces deux structures (figure 24).

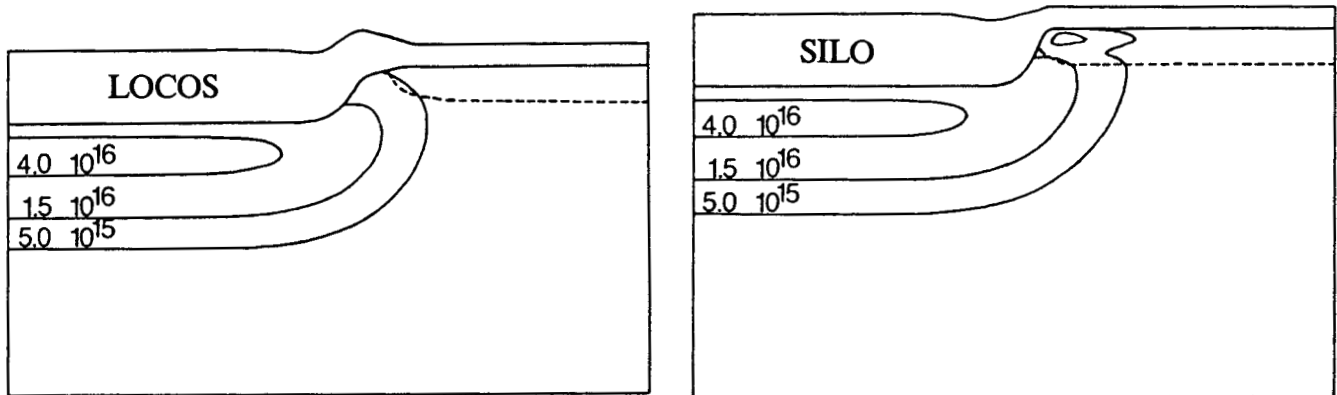


Figure 23: Résultats de simulation de procédé. Le trait interrompu désigne le lieu de la jonction d'arsenic. Les traits continus correspondent aux isovaleurs de bore implantés en anti-canal.

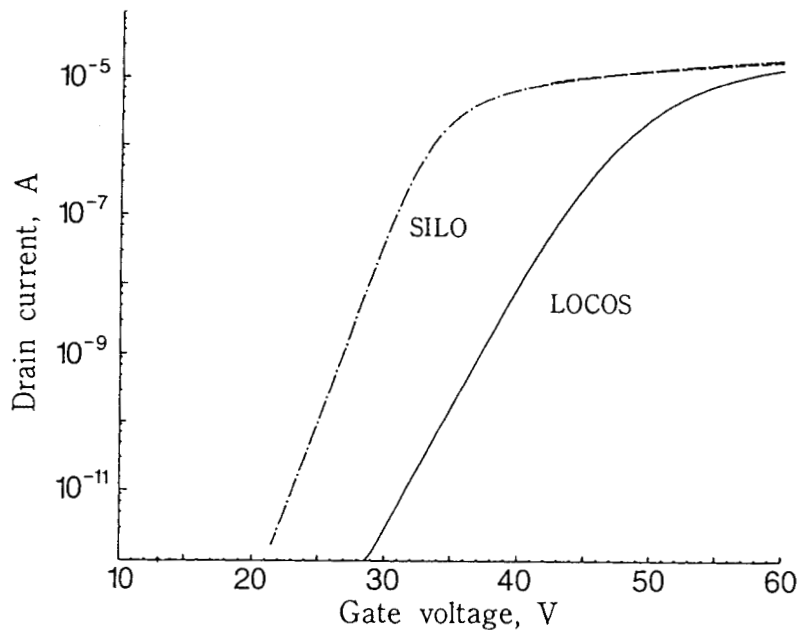


Figure 24: Caractéristiques mesurées de courant
($V_{DS}=50$ mV, $V_{BS}=0$ V)

CHAPITRE IV

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] J.A. Appels, E. Kooi, M.M. Paffen, J.J.H Schatorji, W.W.C. Verkuylen, 'Local oxidation of silicon and its application in semi-conductor device technology', Philips Res. Rep., vol. 25, n°2, pp 118-132, 1970.
- [2] W.G. Oldham, 'Isolation technology for scaled MOS VLSI', IEDM Tech. Dig., pp 216-219, Décembre 1982.
- [3] J.C.H. Hui, T.Y.Chiu, S.W.S Wong, W.G. Oldham, 'Sealed-interface local oxidation technology', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 29, n°4, pp 554-561, Avril 1982.
- [4] J. Hui, T.Y.Chiu, S. Wong, W.G Oldham, 'Electrical properties of MOS devices made with SILO technology', IEDM Tech. Dig., pp 220-223, Décembre 1982.
- [5] P. Deroux-Dauphin, J.P. Gonchond, 'Physical and electrical characterization of a SILO isolation structure', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 32, n°11, pp 2392-2398, Novembre 1985.
- [6] J.L. Coppée, F. Van De Wiele, 'SILO isolation technique: a study of active and parasitic device characteristics with semi-recessed and fully-recessed field oxides', Solid-State Electronics, vol. 11, n°5, pp 887-891, Mai 1985.
- [7] E. Bassous, H.N. Yu, V. Maniscalco, 'Topology of silicon structures with recessed SiO₂', J. Electrochem. Soc., vol. 123, n°11, pp 1729-1737, Novembre 1976.
- [8] J.L. Coppée, F. Van De Wiele, 'Experimental study of the electrical performance of isolation structures', IEEE Electron Device Lett., vol.9, n°10, pp 536-538, Octobre 1988.

- [9] K.Y. Chiu, J.L. Moll, K.M. Cham, J. Lin, C. Lage, S. Angelos, R.L. Tillman, 'The sloped-wall SWAMI - A defect-free zero bird's beak local oxidation process for scaled VLSI technology', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 30, n°11, pp 1506-1511, Novembre 1983.
- [10] K.Y. Chiu, R. Fang, J. lin, J.L Moll, C. Lage, S. Angelos, R. Tillman, 'The SWAMI - A defect free and near-zero bird's beak local oxidation process and its application in VLSI technology', IEDM Tech. Dig., pp 224-227, Décembre 1982.
- [11] S. Sawada, T. Higuchi, T. Mizuno, S. Shinozaki, O. Ozawa, 'Electrical properties for MOS LSI's fabricated using stacked oxide SWAMI technology', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 32, n°11, pp 2243-2248, Novembre 1985.
- [12] K.Y. Chiu, J.L. Moll, J. Manoliu, 'A bird's beak free local oxidation technology feasible for VLSI circuits fabrication', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 29, n°4, pp 536-540, Avril 1982.
- [13] T. Shibata, R. Nakayama, K. Kurosawa, S. Onga, M. Konaka, H. Iizuka, 'A simplified BOX (buried-oxide) isolation technology for megabit dynamic memories' , IEDM Tech. Dig., pp 27-30, Décembre 1983.
- [14] R.F. Kwasnick, E.B. Kaminsky, P.A. Frank, 'Buried-oxide isolation with etch-stop (BOXES)', IEEE Electron Device Letters, vol. 9, n°2, pp 62-64, Février 1982.
- [15] E. Figueras, S. Hazebrouck, F. Van De Wiele, 'An analysis of the advantages of a box isolation technique', Proc. of ESSDERC'88 Conf., pp 549-552, 1988.
- [16] E. Arai, 'Submicron MOS VLSI process technologies', IEDM Tech. Dig., pp 19-22, Décembre 1983.
- [17] K.T. Cham, S.Y. Chiang, D. Wenocur, R.D. Rung, 'Characterization and modeling of the trench surface inversion problem for the TRENCH isolated CMOS technology', IEDM Tech. Dig., pp 23-26, Décembre 1983.
- [18] R.D. Rung, 'TRENCH isolation prospects for application in CMOS VLSI', IEDM Tech. Dig., pp 574-577, Décembre 1984.

- [19] H. Mikoshiba, T. Homma, K. Hamano, 'A new TRENCH isolation technology as a replacement of LOCOS', IEDM Tech. Dig., pp 578-581, Décembre 1984.
- [20] K. Hieda, F. Horiguchi, H. Watanabe, K. Sunouchi, I. Inoue, T. Hamamoto, 'New effects of TRENCH isolated transistor using side-wall gates', IEDM Tech. Dig., pp 736-739, Décembre 1987.
- [21] G. Fuse, H. Ogawa, K. Tateiwan, I. Nakao, S. Odanaka, M. Fukumoto, H. Iwasaki, T. Ohzone, 'A practical TRENCH isolation technology with a novel planarization process', IEDM Tech. Dig., pp 732-735, Décembre 1987.
- [22] H. Goto, T. Takada, R. Abe, Y. Kawabe, K. Oami, M. Tanaka, 'An isolation technology for high performances bipolar memories - IOPII', IEDM Tech. Dig., pp 58-61, Décembre 1982.
- [23] H. Goto, K. Inayoshi, 'Trench isolation schemes for bipolar devices: benefits and limiting aspects', Ultra-fast silicon bipolar technology, Springer-Verlag, 1988.
- [24] L.A. Akers, 'The inverse narrow-width effect', IEEE Electron Device Letters, vol. 7, n°7, pp 419-421, Juillet 1986.
- [25] K.K.L. Hsueh, J.J. Sanchez, T.A. Demassa, L.A. Akers, 'Inverse-narrow-width effects and small-geometry MOSFET threshold voltage model', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, n°3, pp 325-338, Mars 1988.
- [26] N. Shigyo, R. Dang, 'Analysis of an anomalous subthreshold current in a fully recessed oxide MOSFET using three-dimension device simulator', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 32, n°2, pp 441-445, Février 1985.
- [27] N. Shigyo, R. Dang, 'Three-dimensional device simulation using a mixed process/device simulator', W.L. Engl Ed., North-Holland, pp 301-327, 1985.
- [28] S.H. Goodwin, J.D. Plummer, "Electrical performance and physics of isolation region structures for VLSI.", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-31, n°7, July 1984.
- [29] S.W. Sun, K.C. Weng, "Effects of field-oxide volume ratio and interface-charge density on submicron modified-LOCOS isolations." Solid-State Electronics, vol. 32, n°4, pp 333-336, April 1989.

- [30] D.K. Ferry, L.A. Akers, E.W. Greeneich, Ultra Large Scale integrated microelectronics., Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1988.
- [31] J.A. Greenfield, R.W. Dutton, "Nonplanar VLSI device analysis using the solution of Poisson's equation.", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-27, n°8, pp 1520-1532, August 1980.
- [32] D.B. Scott, S.G. Chamberlain, "A calibrated model for the subthreshold operation of a short channel MOSFET including surface states.", IEEE Journal of Solid-State Circuits, vol. SC-14, n°3, pp 633-644, June 1979.
- [33] H. Klose, A. Seidl, "Combined process modeling and subthreshold device simulations.", Solid-State Electronics, vol. 29, n°3, pp 371-375, March 1986.
- [34] E. Dubois, J.L. Coppee, B. Baccus, D. Collard, "Electrical performances evaluation of isolation structures by coupled process and device simulations.", Third Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Devices and Processes, (G. Baccarani and M. Rudan Eds.), pp 151-161, 1988.
- [35] D. Collard, K. Taniguchi, "IMPACT-A point-defect-based two-dimensional process simulator: modeling the lateral oxidation-enhanced diffusion of dopants in silicon.", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-33, n°10, October 1986.
- [36] D. Collard, B. Baccus, E. Dubois, D. Morel, "An integrated 2D process/device simulator for MOS technology.", Software tools for process, device and circuit modelling. (W. Grans Ed.), Boole Press, pp 16-31, 1989.
- [37] C. Mallardeau et al., '1.2 μm BICMOS technology for mixed analog-digital applications', Proc. ESSDERC Conf., pp 461-464, 1989.
- [38] E. Dubois, D. Collard, B. Baccus, D. Morel, 'IMPACT-3.2 User's guide', ISEN, Janvier 1989.
- [39] E. Dubois, J.L. Coppee, B. Baccus, D. Collard, "Electrical performances comparison of semi and fully recessed isolation structures.", Proc. ESSDERC, pp 813-816, Septembre 1988.

- [40] E. Dubois, J.L. Coppée, B. Baccus, D. Collard, 'A study of the electrical performances of isolation structures', IEEE Trans. on Electron Devices, à paraître Juin 1990.
- [41] J.Y. Chen, D.E. Snyder, 'Modeling device isolation in high-density CMOS', IEEE Electron Device Letters, vol. 7, n°2, pp 64-65, Février 1986.
- [42] A.G. Lewis, J.Y. Chen, R.A. Martin, T.Y. Huang, 'Device isolation in high-density LOCOS-isolated CMOS', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, n°6, pp 1337-1345, Juin 1987.

CHAPITRE V

CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PHENOMENES DE PERCAGE EN TECHNOLOGIE BIPOLAIRE A EMETTEUR MURE

V-1 INTRODUCTION

La maîtrise des procédés technologiques et l'utilisation d'une technique d'oxydation locale (LOCOS) d'isolation ont rendu possible la réalisation de composants bipolaires à haute densité d'intégration [1] [2]. L'amélioration des performances intrinsèques de transistors bipolaires est très intimement liée à des contraintes concernant la formation de la base, telles que:

- (i) la réduction du nombre de Gummel (ou de manière équivalente, la résistance pincée de base) afin de maximiser le gain en courant
- (ii) la réduction de la largeur de base afin de diminuer le temps de transit des porteurs minoritaires

L'un des principaux obstacles à la réalisation de telles structures réside dans les phénomènes de canalisations (*emitter/collector pipes and spikes*) engendrés par les défauts cristallins qui accélèrent localement la diffusion des impuretés d'émetteur dans la base [3][4][5]. La pénétration partielle ou complète de la région d'émetteur dans la base donne alors naissance à un fort courant de fuite ou à un court-circuit émetteur/collecteur. Ce type de problème, généralement lié à la formation de fautes d'empilement induites par oxydation, peut être résolu par optimisation des températures d'oxydation et par le choix du type d'orientation du substrat. En dehors des considérations précédentes, la réduction des dimensions verticales et latérales d'un dispositif bipolaire nécessite l'optimisation et le contrôle sévère des étapes de fabrication. Ce

dernier point est particulièrement vrai lorsque l'isolation est réalisée par une oxydation locale de type LOCOS enterré donnant lieu à des effets parasites de nature très bidimensionnelle dans les régions bordant l'oxyde profond (région du 'bec d'oiseau'). Une non uniformité marquée des caractéristiques des zones d'émetteur et de base résultant de ces effets de coin conduit à distinguer une zone de base intrinsèque de nature unidimensionnelle, et une zone périphérique de base confinée le long du mur d'oxyde. Une des principales conséquences du rétrécissement de cette zone réside en une sensibilité accrue à un phénomène local de perçage. Chaque étape du procédé de fabrication revêt alors une importance capitale dans la mesure où elle peut également renforcer l'affaiblissement du niveau de dopage et moduler la largeur de base en périphérie.

Ce chapitre propose une contribution à l'étude des phénomènes de perçage dans les transistors bipolaires (NPN) à émetteur muré. Une description sommaire des étapes de fabrication et des profils de dopage résultants font l'objet d'une première analyse afin de mettre en évidence l'effet de pincement de base. Dans un second temps, une étude en variations, à partir du procédé initial, est réalisée afin de démontrer la sensibilité au phénomène de perçage de la configuration à émetteur muré. Ces variations de procédé portent sur :

- (i) le profil de couche enterrée
- (ii) la dose implantée d'émetteur
- (iii) la dose implantée de base
- (iv) le contrôle de l'étape de gravure d'ouverture de contact

Dans un dernier temps, l'importance relative de chaque variation est discutée et l'extension des résultats à d'autres technologies est discutée.

V-2 DESCRIPTION DE LA STRUCTURE A EMETTEUR MURE

Une configuration typique de la structure à émetteur muré est représentée en figure 1, laissant apparaître la forme d'oxyde de champ et la topologie de surface perturbée par la 'tête d'oiseau'. La technologie de base, utilisée dans le cadre de ce travail, est empruntée au procédé SUBILO-N [7]. Hormis sa caractéristique essentielle liée à une configuration à émetteur muré contre une isolation de type LOCOS enterré, cette technologie permet d'atteindre une fréquence de coupure de l'ordre de 7.5 GHz ($V_{cb} = 2$ V) pour des transistors NPN optimisés.

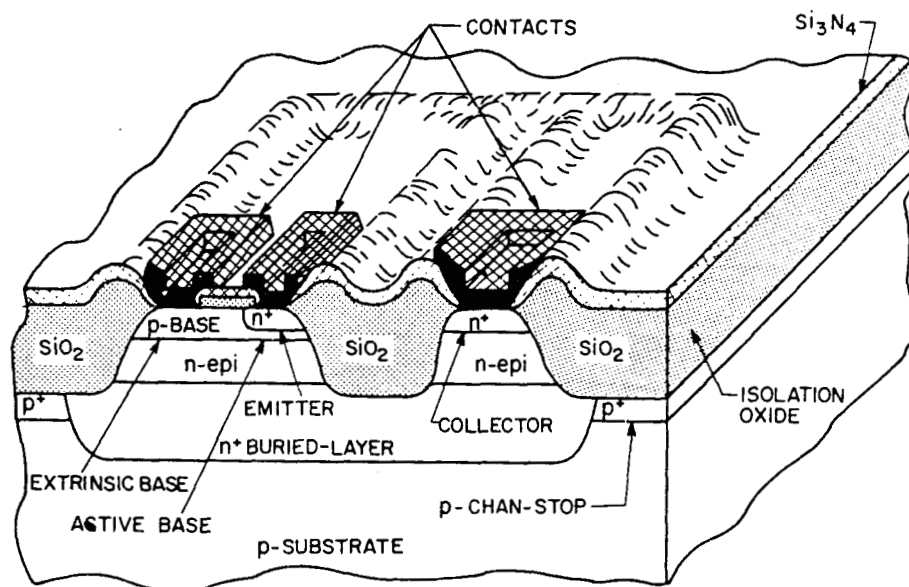
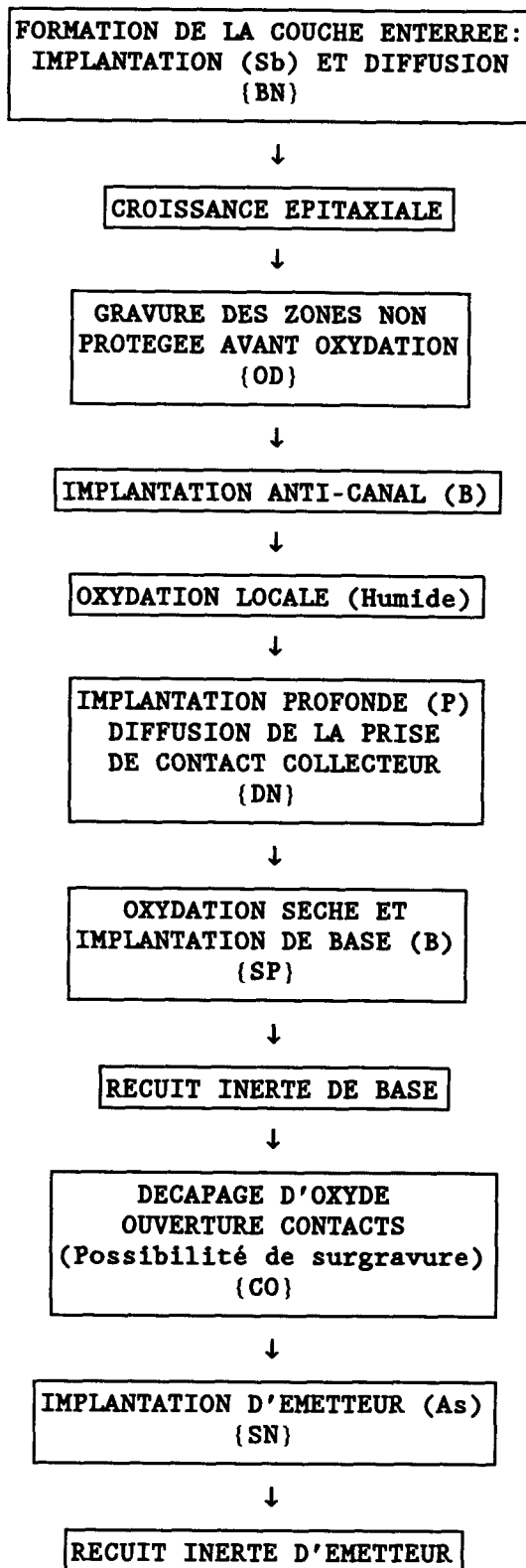


Figure 1: Vue schématique d'un transistor bipolaire NPN à émetteur muré isolé par une technique LOCOS enterrée [3].

Une table simplifiée des principales étapes de fabrication est donnée ci-dessous:

TABLE I



Le dessin de masques correspondant à la structure étudiée est représenté en figure 2. La signification de chaque masque est spécifiée dans le tableau I et correspond au terme entre accolades () à l'exception de 'DP' et 'IN' qui définissent respectivement le masque de prise de contact au substrat de type p et le masque de métallisation. Une partie seulement de la structure complète a été prise en compte au niveau de la simulation: le domaine d'intérêt se restreint donc à une partie de la zone active du transistor et de la structure d'isolation. Cette région est approximativement délimitée en figure 2 dans un plan de coupe X1-X2.

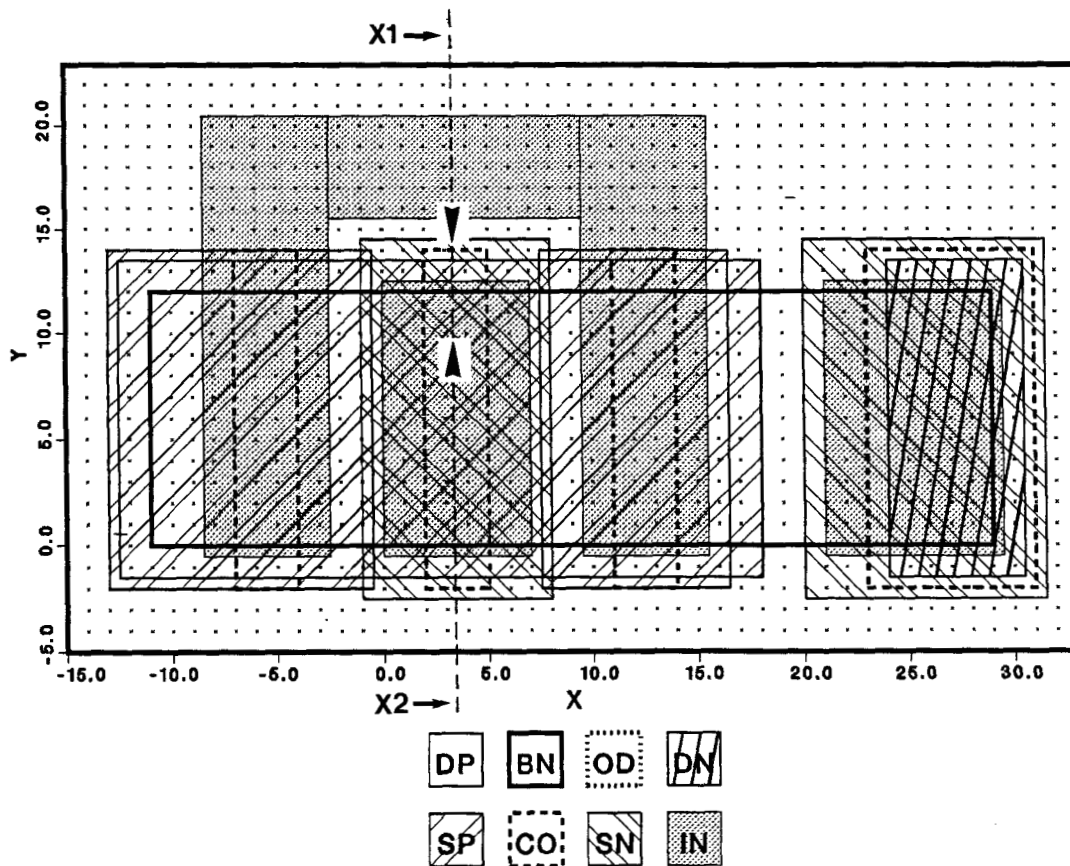


Figure 2: Dessin de masques de la structure NPN à émetteur muré. Le domaine de simulation est délimité par les deux flèches dans le plan de coupe X1-X2.

La figure 3 fournit un résultat de simulation de procédé multicouche [8] mettant en évidence le lieu des jonctions émetteur/base et base collector [9][10][11]. Les sections de coupe verticales réalisées dans la zone intrinsèque de base, d'une part, et dans la région bordant l'oxyde de champ, d'autre part, indiquent clairement la non uniformité latérale du profil de base induite par la configuration à émetteur muré (figure 4). L'effet de pincement de base, qui en résulte, est principalement dû à un effet géométrique lié à :

- (i) la topologie perturbée du système Si/SiO₂ dans la région du bec d'oiseau
- (ii) la différence des pénétrations moyennes des ions bore et arsenic implantés à travers des épaisseurs d'oxyde différentes

Les effets opposés de ségrégation [12] du bore et de l'arsenic à l'interface Si/SiO₂, bien que propres à un rétrécissement local de la base, ne jouent pas un rôle critique dans la cas étudié. En revanche, ces premiers résultats de simulation de procédé, montre que le pincement de base se situe à l'aplomb de l'extrémité du bec d'oiseau, rendant ainsi cette région plus sensible à un éventuel phénomène de perçage.

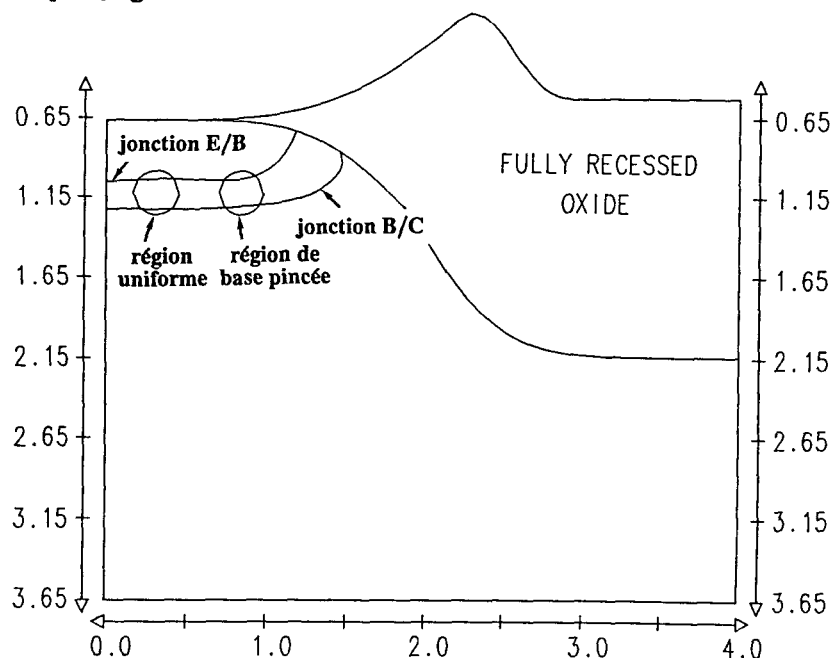


Figure 3: Résultat de simulation bidimensionnelle de procédé montrant le lieu des jonctions émetteur/base et base/collecteur définissant les régions unidimensionnelle et pincée de base.

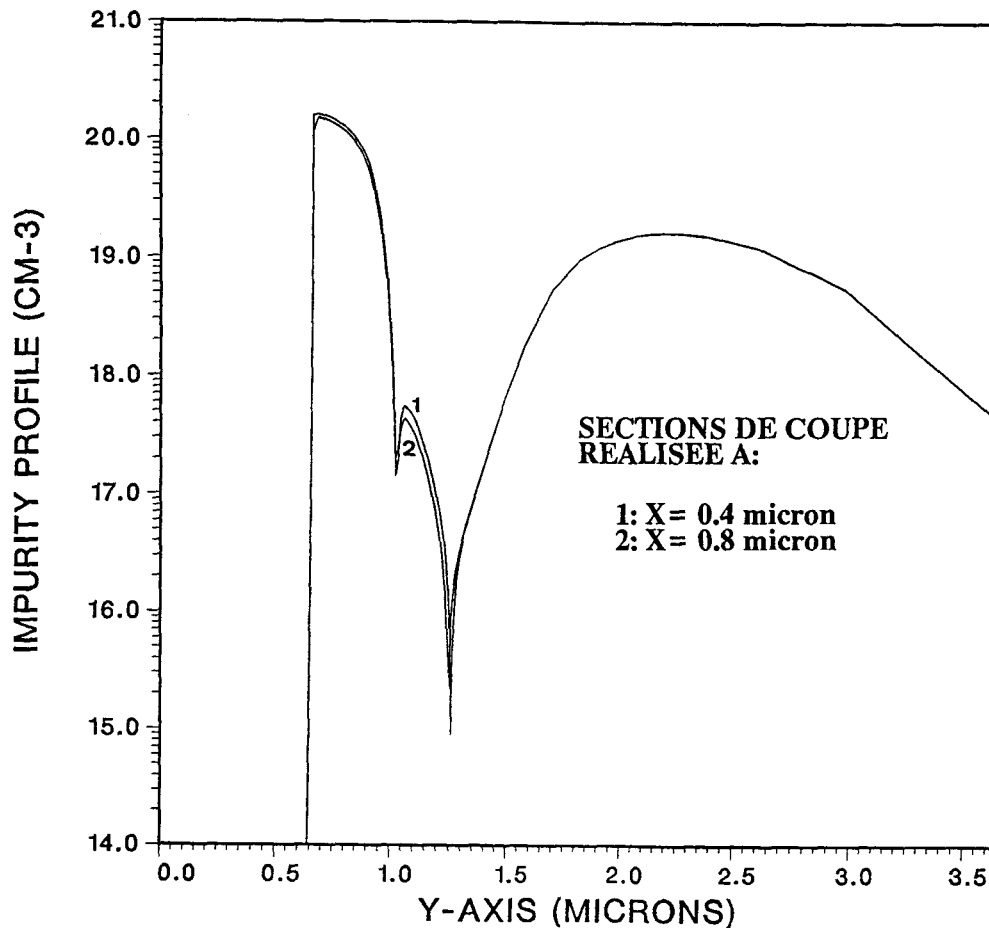


Figure 4: Sections de coupes verticales illustrant la différence des profils de dopages dans les zones unidimensionnelle (1: $X=0.4 \mu\text{m}$) et périphérique (2: $X=0.8 \mu\text{m}$) de base.

V-3 ETUDE DE LA SENSIBILITE AU PHENOMENE DE PERCAGE

V-3.1 Influence du profil de couche enterrée

Une couche enterrée très fortement dopée est, en pratique, réalisée afin de réduire la résistance de collecteur. D'autre part, une zone épitaxiée à faible concentration en impuretés est souhaitable dans le but de minimiser la capacité base/collecteur qui représente une limitation essentielle dans les applications hautes fréquences. Du point de vue technologique, le contrôle de l'extension de la couche enterrée vers la base est fortement perturbé par l'effet d'auto-dopage d'autant plus prononcé que le niveau de concentration dans la zone épitaxiée est faible. Une extension trop prononcée de la couche enterrée vers la base peut alors renforcer le pincement de base

existant et déclencher un phénomène de perçage [9]. Deux types de simulations ont été effectués en adoptant des profils de couches enterrées légèrement différents (figure 5).

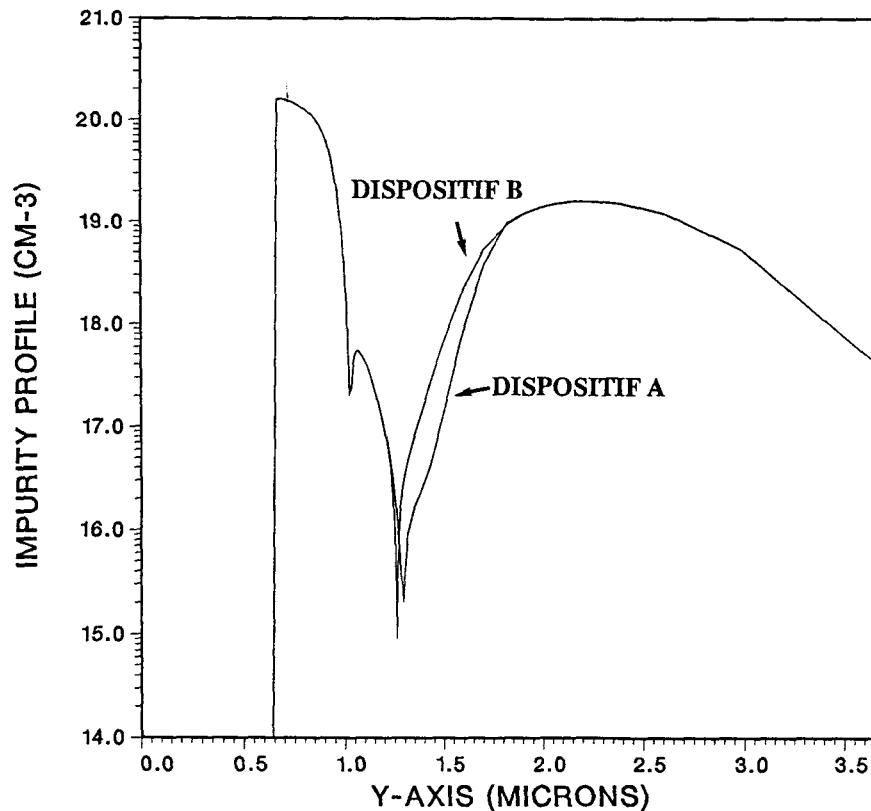


Figure 5: Sections de coupes montrant la différence des profils de couches enterrées dans la région uniforme.

Dans l'ensemble des simulations électriques effectuées, les caractéristiques en courant correspondent à une tension nulle sur l'émetteur et la base: seule la tension émetteur/collecteur varie afin de déterminer la tenue en tension de la structure par le paramètre BV_{CEX} [13]. Les caractéristiques $I_c - V_{ce}$ des deux structures (figure 6) montrent que seul le dispositif B est affecté par le profil rentrant d'antimoine qui contribue au pincement électrique de base par une extension prononcée de la zone de charge d'espace associée à la jonction base/collecteur. Le phénomène ainsi déclenché correspond, bien-entendu à un effet local correspondant au rétrécissement et à la baisse du niveau de dopage dans la zone périphérique de base: les profils de concentrations en porteurs démontrent l'existence d'un chemin de courant lorsque le dispositif B est polarisé à $V_{CE} = 20$ volts (figure 7).

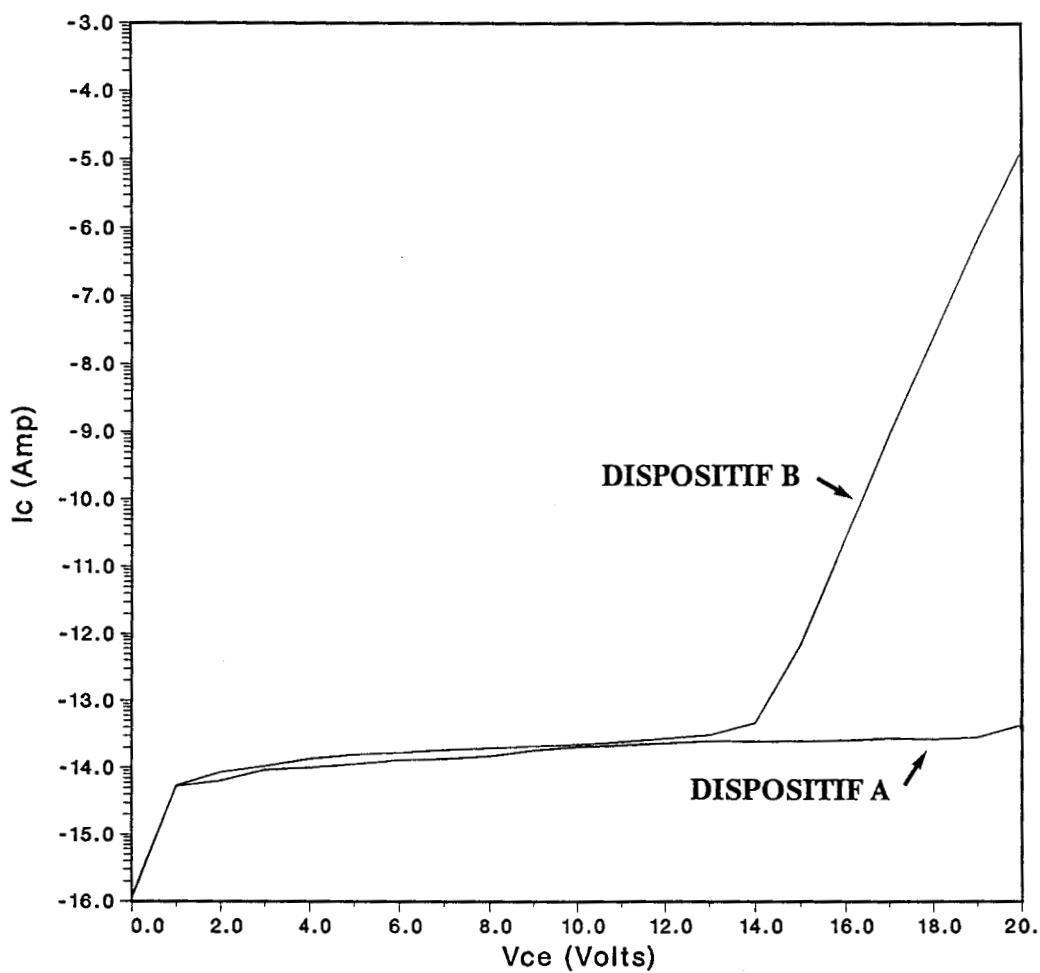


Figure 6: Caractéristique en courant I_C - V_{CE} correspondant à une variation des profils de couches enterrées.

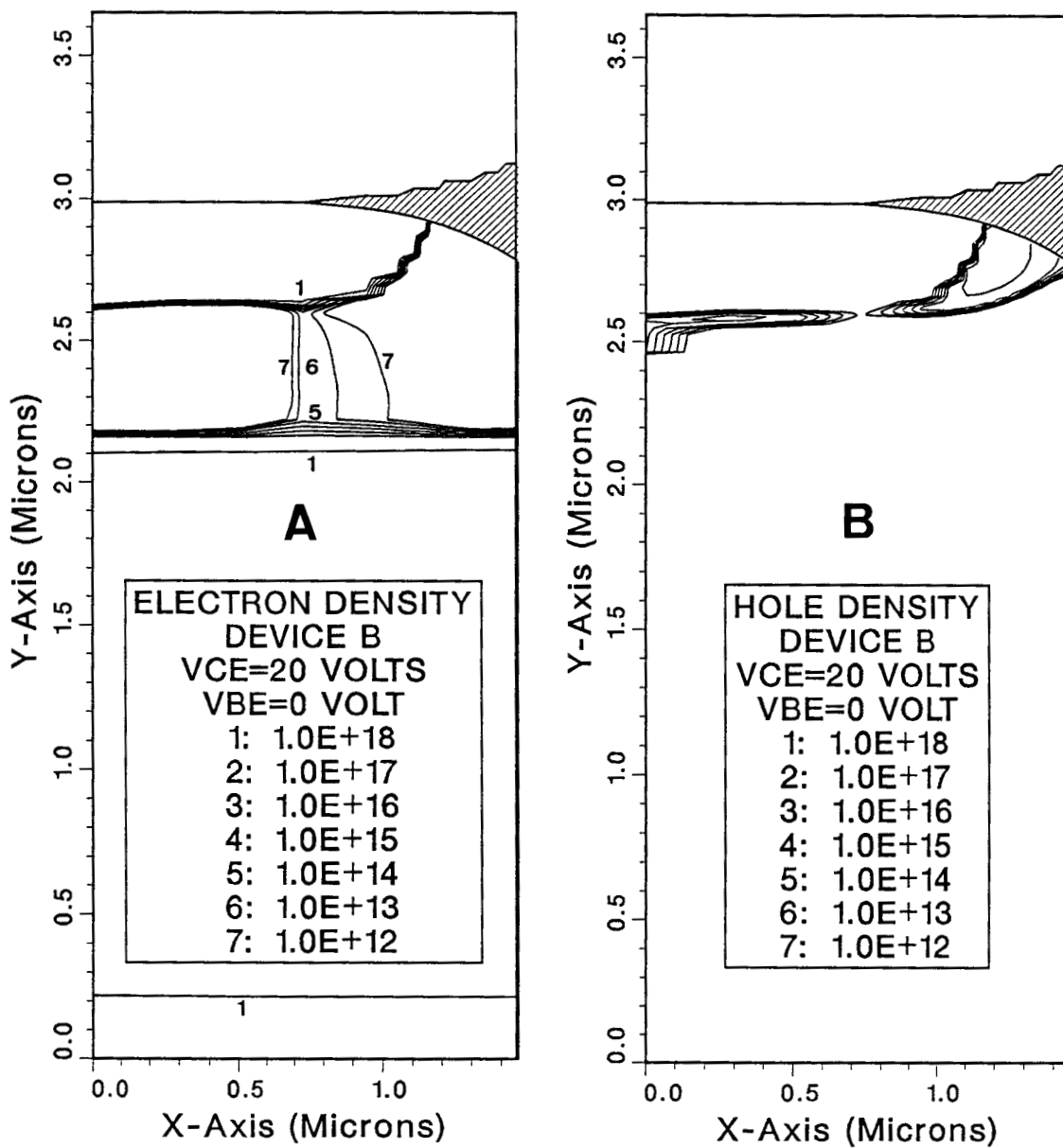


Figure 7: Mise en évidence du chemin de courant de perçage
 (A) isovaleurs de concentration en électrons
 (B) isovaleurs de concentration en trous

V-3.2 Influence de la dose implantée d'émetteur

Une zone d'émetteur implantée en arsenic est avantageusement utilisée afin de former une jonction peu profonde. Une région très fortement dopée est ainsi réalisée et permet de minimiser la résistance d'accès d'émetteur et de limiter l'injection de porteurs minoritaires afin d'améliorer les performances de gain en courant. Le profil de dopage de l'émetteur représente également un facteur important quant à la détermination de la largeur de base. Afin de d'estimer son effet sur la qualité de tenue en tension du dispositif, une variation de procédé a été réalisée en réduisant de 33% la quantité implantée d'arsenic. L'effet immédiat de la variation de ce paramètre est une chute proportionnelle de $6.2 \text{ k}\Omega/\square$ à $4.2 \text{ k}\Omega/\square$ de la résistance pincée de base dans la zone unidimensionnelle. La figure 8 permet d'évaluer l'impact de cette variante de procédé sur le profil d'impuretés dans la zone intrinsèque. Par un mécanisme identique à celui exposé dans le paragraphe précédent, l'utilisation d'une forte dose d'arsenic favorise l'extension de la zone de charge d'espace de la jonction émetteur/base vers la base. Cet effet est d'autant plus marqué que l'écart entre les niveaux de concentrations dans l'émetteur et la base est important. La figure 9 fournit une base de comparaison entre deux sections de coupe montrant les concentrations en porteurs des deux dispositifs. Seul le transistor à forte dose implantée d'arsenic met en évidence une distribution anormalement haute d'électrons dans la base qui perturbe la condition de neutralité rencontrée en mode opératoire normal. Les caractéristiques de courant correspondantes sont illustrées en figure 10.

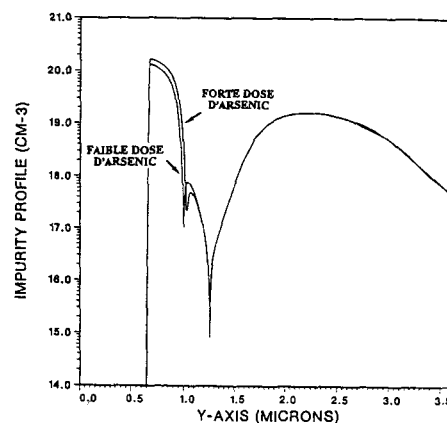


Figure 8: Profils unidimensionnels de dopage résultant de la variation de dose implantée d'arsenic lors de la formation de l'émetteur.

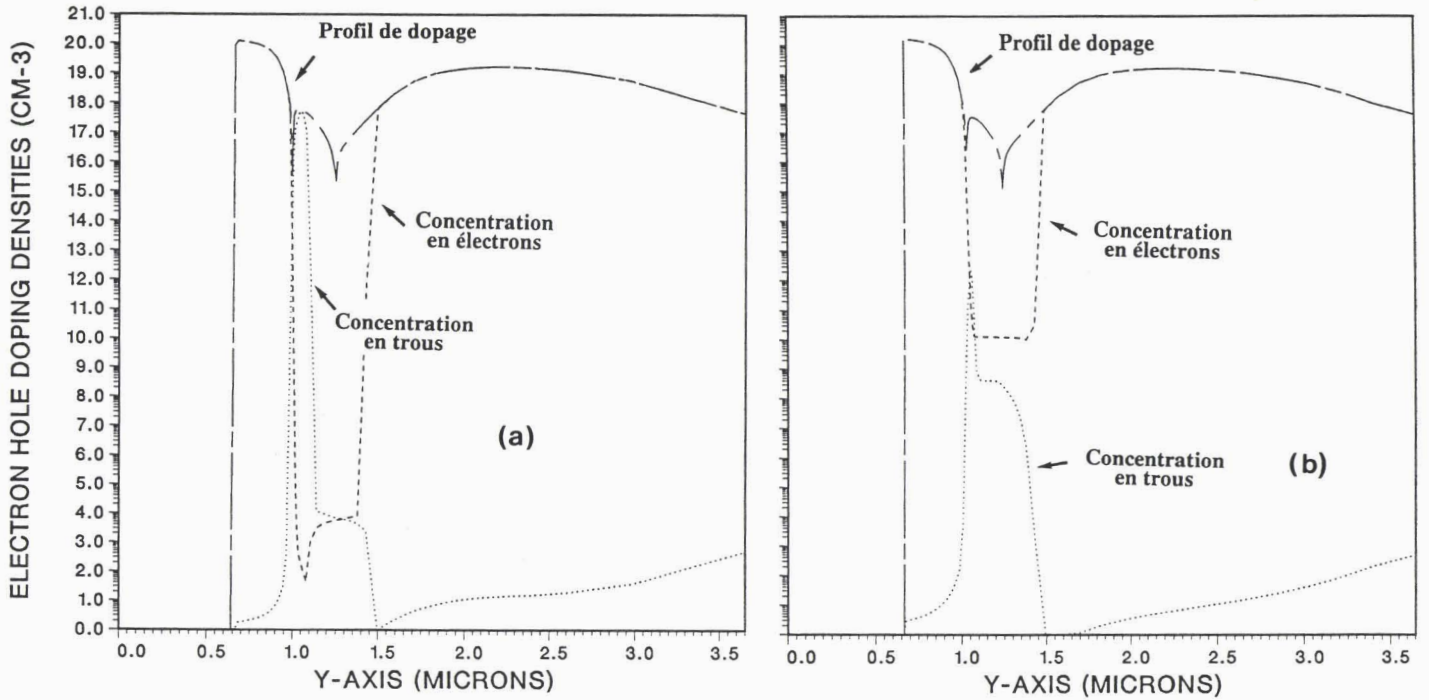


Figure 9: Profils de concentrations en porteurs dans la zone périphérique de base.

- a) faible dose implantée d'arsenic
- b) forte dose implantée d'arsenic

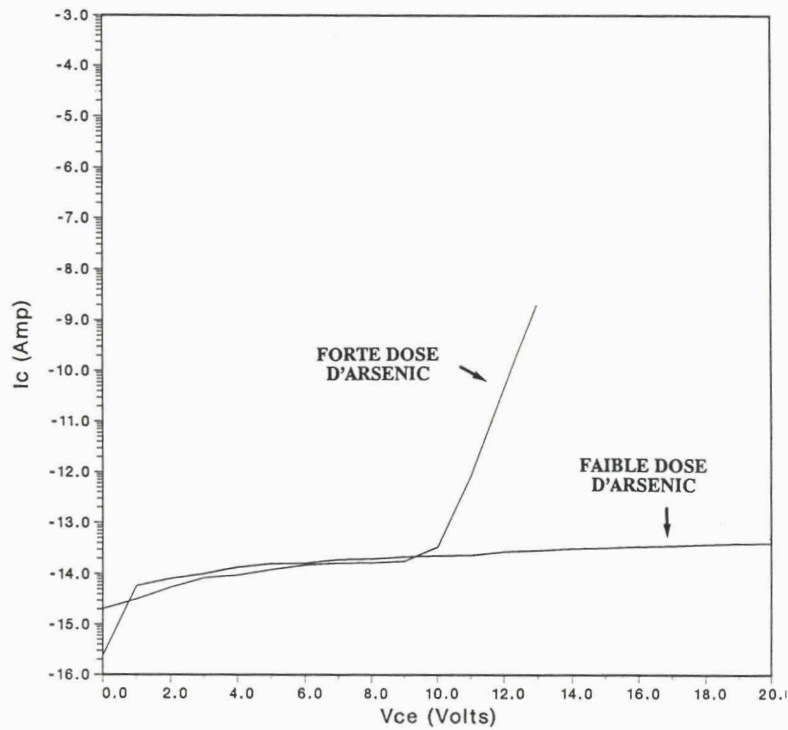


Figure 10: Caractéristiques en courant $I_c - V_{ce}$ mettant en évidence la faible tenue en tension de la structure à forte dose implantée d'arsenic.

V-3.3 Influence de la dose implantée de base

Le profil de dopage dans la base joue un rôle capital dans la détermination des performances du transistor. L'optimisation de ce profil est cependant soumise à deux contraintes essentielles pour lesquelles un compromis doit être atteint. Celui-ci peut s'exprimer en fonction du nombre de Gummel relié à la dose de bore contenue dans la partie active de la base. Un nombre de Gummel assez faible favorise le gain en courant du transistor. En contre-partie, ce dernier doit être suffisamment élevé afin de préserver la qualité d'immunité au perçage sans atteindre, toutefois, la limite de claquage par avalanche. L'ensemble de ces considérations doivent, de plus, être combinées à une forme graduelle du profil de base qui favorise le transit des porteurs minoritaires grâce au champ électrique induit par le gradient de concentration. Afin de quantifier l'effet du profil de base sur les caractéristiques en perçage de la configuration à émetteur muré, des variations de $\pm 25\%$ ont été effectuées sur la dose nominale de bore. Les caractéristiques principales des dispositifs simulés sont résumées dans les tableaux II et III respectivement relatifs aux zones uniformes et périphériques de base.

TABLEAU II

Dispositif	Largeur de base μm	Resistance pincée de base $\text{k}\Omega/\square$	Nombre de Gummel 10^{12} cm^{-2}
1	0.229	6.22	5.29
2	0.231	5.84	5.82
3	0.241	5.11	7.07

TABLEAU III

Dispositif	Largeur de base μm	Resistance pincée de base $\text{k}\Omega/\square$	Nombre de Gummel 10^{12} cm^{-2}
1	0.214	7.63	3.93
2	0.221	6.82	4.63
3	0.226	6.25	5.28

Les différents profils de dopage résultants sont donnés en figure 11. La figure 12 reporte les caractéristiques en courant des trois dispositifs démontrant l'influence du nombre de Gummel dont la décroissance provoque un décalage de plus en plus important de la tension de perçage. Cet effet est essentiellement lié à la loi de répartition de la zone de charge d'espace autour de la jonction base/collecteur et à sa tendance à s'étendre plus largement dans la zone la plus faiblement dopée. La figure 13 montre deux étapes essentielles dans le mécanisme de formation du chemin de perçage en ce qui concerne les dispositifs 1 et 2 à une tension d'émetteur/collecteur de 13 volts.

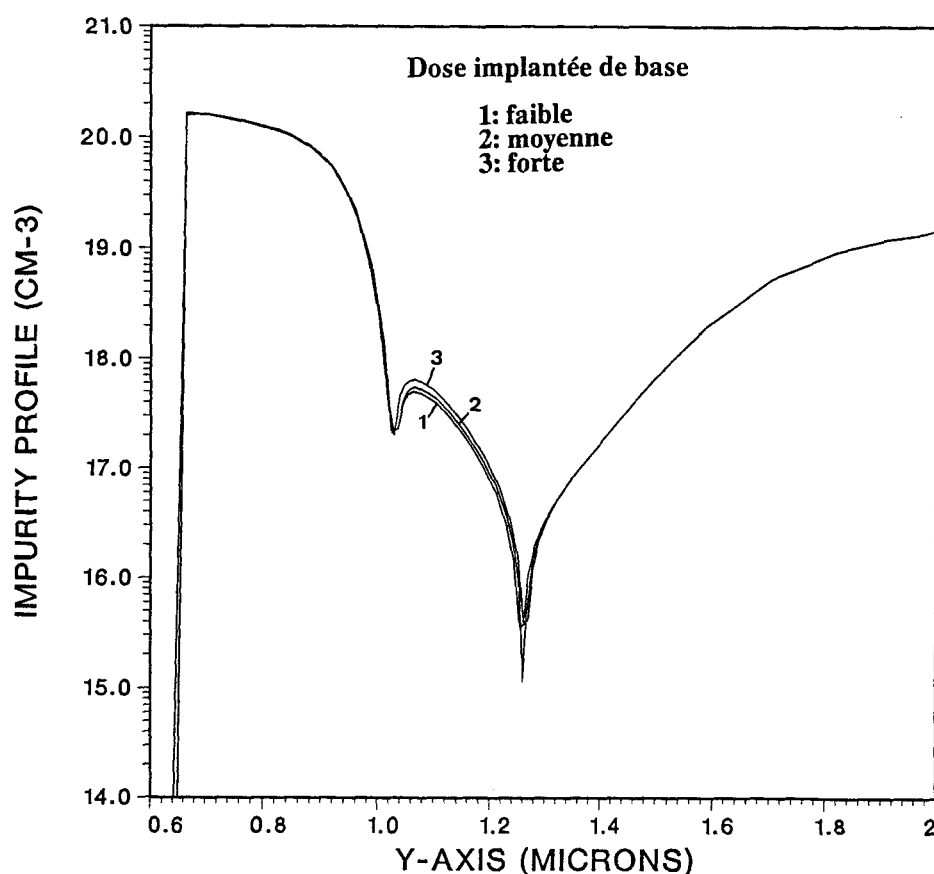


Figure 11: Différences de profils de base dans la région uniforme pour les trois valeurs de doses implantées.

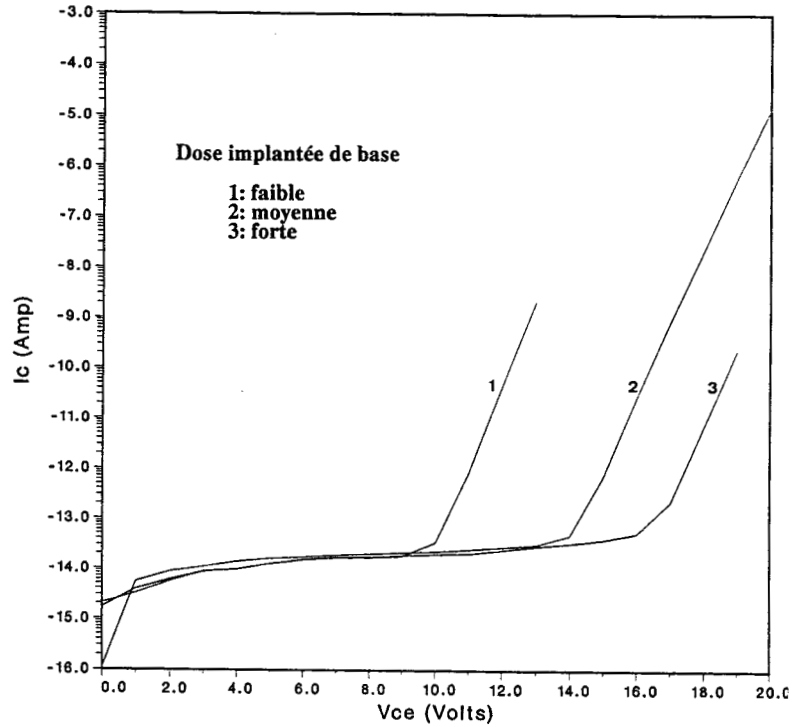


Figure 12: Caractéristiques en courant des trois dispositifs caractérisés par trois conditions d'implantation de base différentes.

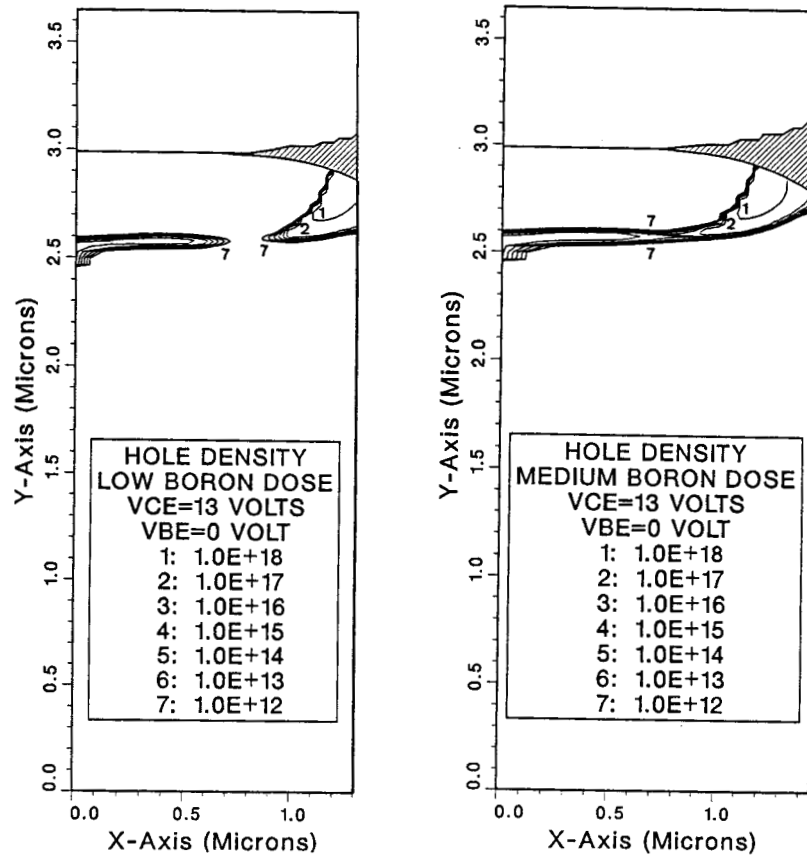


Figure 13: Distribution de concentration de trous à $V_{ce}=13$ volts mettant en évidence le chemin de perçage dans la zone de pincement de base du dispositif 1. Le dispositif 2 montre une distribution de trous assurant toujours le lien entre les zones intrinsèque et murée de base.

V-3.4 Sensibilité à la surgravure de l'oxyde

L'étude de la sensibilité au phénomène de perçage a impliqué, jusqu'à présent, des paramètres clés dont l'optimisation est systématiquement remise en cause lors du développement ou de la modification du procédé. Bien que la technologie SUBILO-N soit particulièrement sensible à la dispersion de ces paramètres [15][16], les déviations de procédés qui en résultent peuvent être identifiées par des mesures électriques systématiques effectuées sur des structures de test (PCM: Process Control Modules) [17]. Le procédé est également très dépendant de la qualité et de la précision des étapes d'alignement de masques, de gravure du silicium et d'oxyde... Les possibles répercussions qui pourraient être engendrées par un manque de contrôle de ces étapes peuvent être critiques et sont parfois difficilement identifiables.

L'étape de gravure d'oxyde, nécessaire à la définition des trous de contact, revêt une importance particulière dans la mesure où celle-ci est réalisée entre le recuit de base et l'implantation d'émetteur. Dans ce cadre, l'effet d'une possible surgravure d'oxyde est étudié afin de déterminer son impact sur le pincement de base déjà existant [18]. La figure 14 représente le lieu des jonctions émetteur/base et base/collecteur pour la forme d'oxyde nominale, des profils d'oxyde surgravés de 200 et 400 Å: plus la quantité d'oxyde surgravée est importante, plus la jonction émetteur/base pénètre profondément dans le substrat. L'implantation de base étant antérieure à la définition des trous de contact, la position de la jonction base/collecteur reste inchangée. La conséquence directe d'une légère surgravure du bec d'oiseau mène donc à un pincement de base encore plus prononcé [19]. Le second effet remarquable concerne l'étalement de la zone de pincement toujours localisée dans le substrat: les variations de la concentration de compensation le long de la jonction (figure 15) illustre également la diminution du niveau de dopage au niveau de l'interface Si/SiO₂.

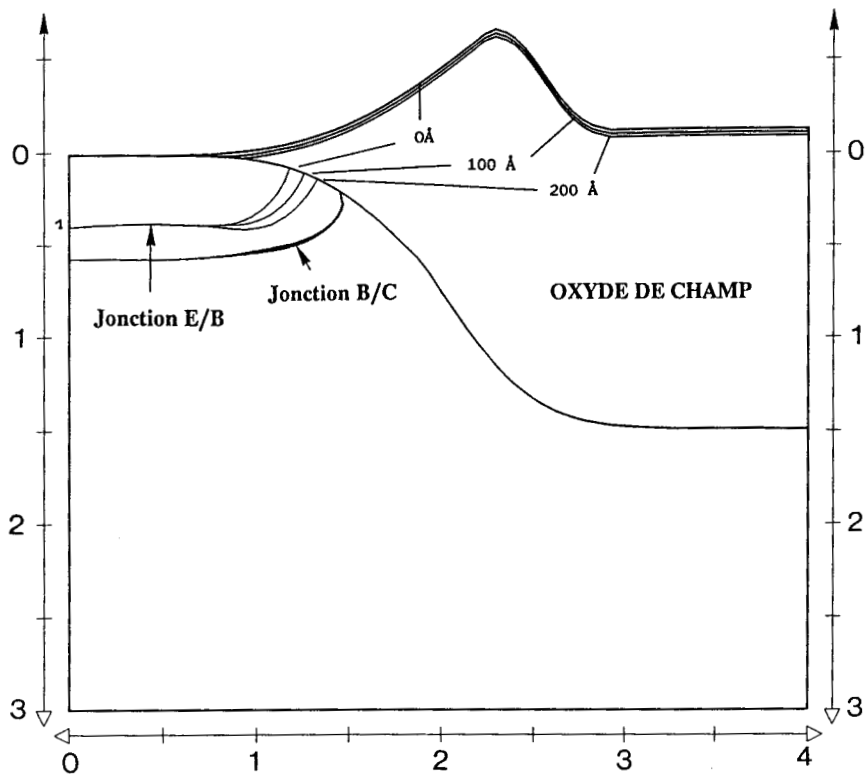


Figure 14: Localisation des jonctions dans le procédé nominal et pour des surgravures d'oxyde de 200 et 400 Å.

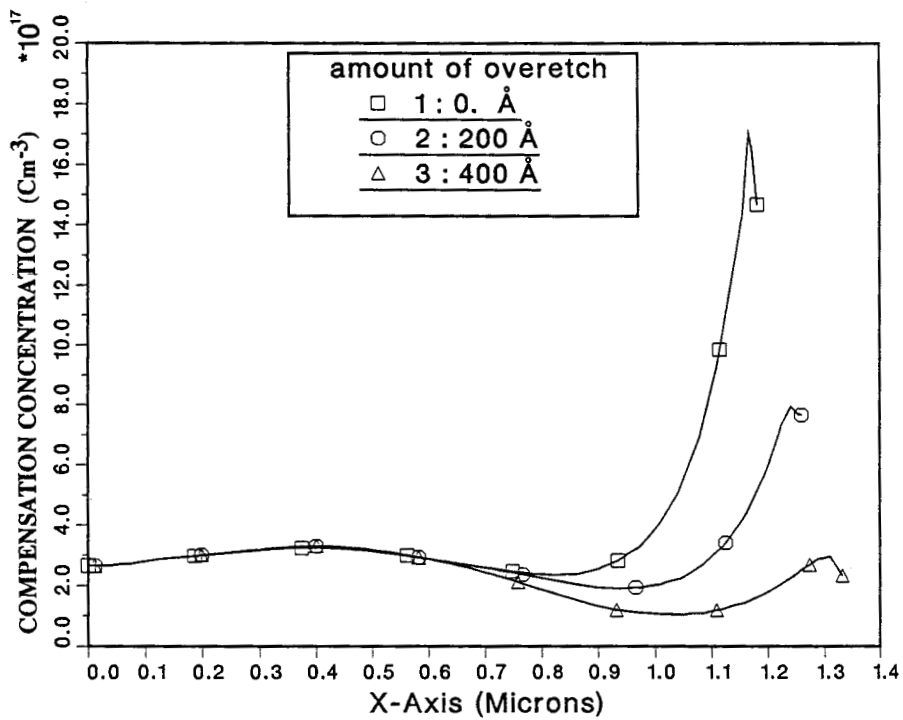


Figure 15: Variations de la concentration de compensation le long de la jonction émetteur/base pour les trois conditions de gravure d'oxyde.

Les résultats de simulation de dispositif (figure 16) mettent en évidence la réduction importante de la tension de perçage associée à une surgravure de 200 Å. Ces résultats sont parfaitement cohérent avec les mesures expérimentales relevées sur des dispositifs identiques appartenant à un même lot de fabrication pour lequel l'effet de surgravure a été étudié (figure 17). Dû à la dispersion étonnante des caractéristiques en courant mesurées, seule une interprétation qualitative du phénomène est possible. De plus, des résultats quantitatifs peuvent être réellement obtenus seulement en considérant la géométrie complète de la structure bipolaire tridimensionnelle de nature (cf. figure 2).

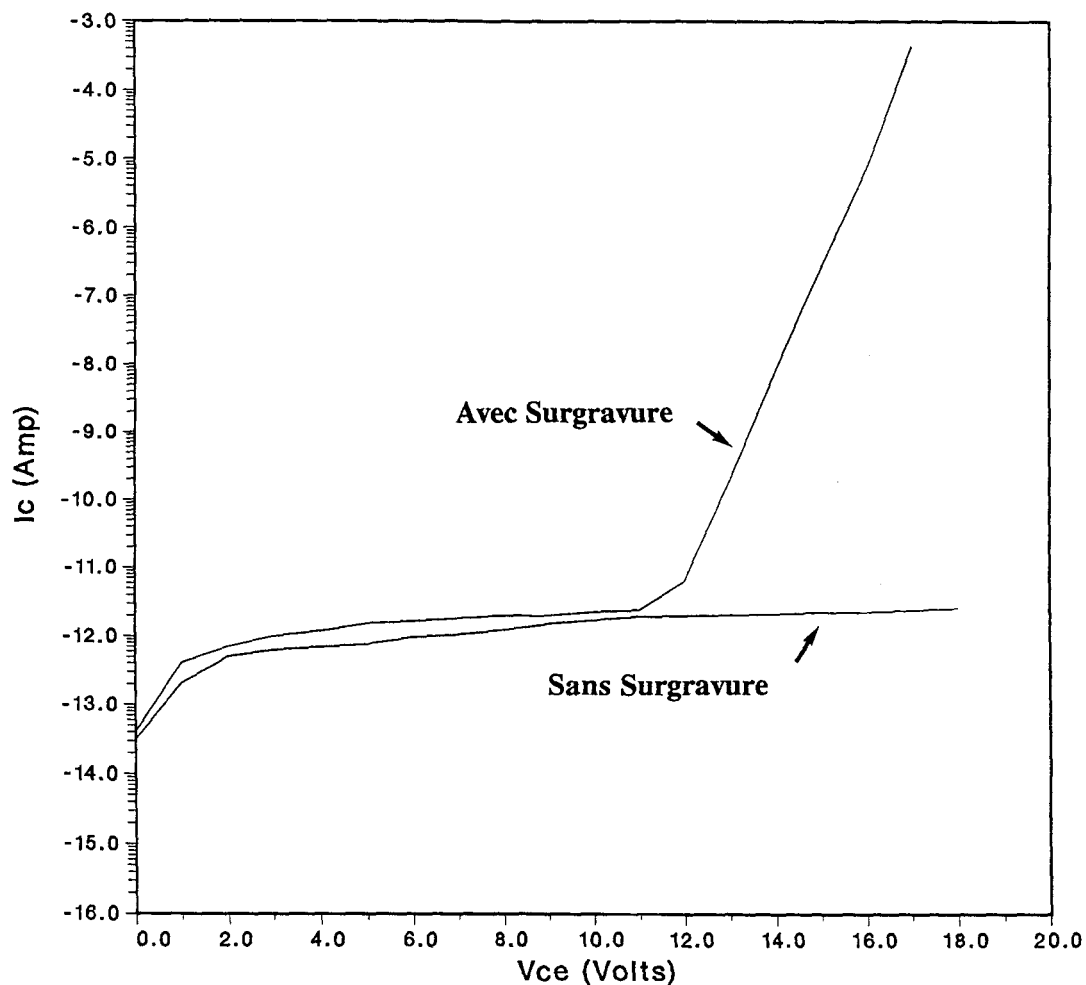


Figure 16: Caractéristiques en courant I_c - V_{ce} correspondant à des dispositifs sans et avec 200 Å d'oxyde surgravé.

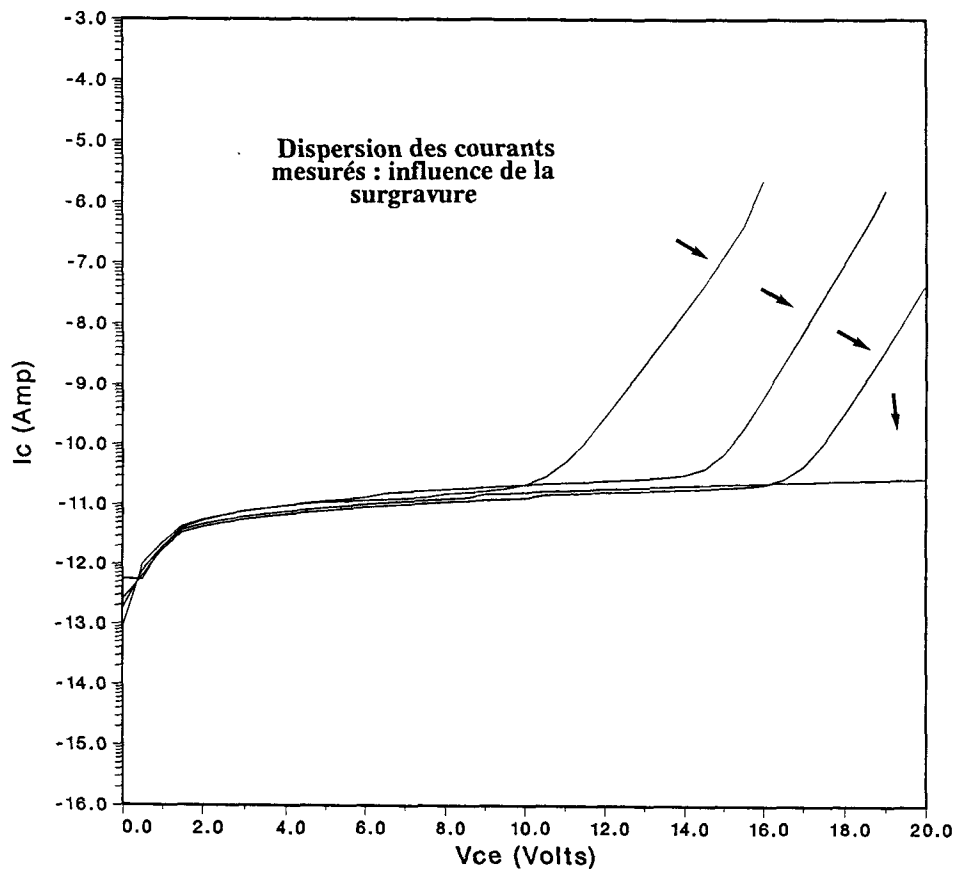


Figure 17: Caractéristiques $I_c - V_{ce}$ expérimentales montrant la dispersion des mesures obtenues sur un même lot de fabrication.

V-4 CONCLUSION

Cette contribution à l'étude du fonctionnement de transistors bipolaires à émetteur muré a permis de mettre en évidence un phénomène original de pincement de base localisé au voisinage de la structure d'isolation. La principale conséquence de cet effet réside en une extrême sensibilité aux courants de perçage en fonction de variations effectuées sur les paramètres nominaux du procédé. La forte dépendance de la tension de perçage rencontrée à l'égard d'une légère surgravure d'oxyde fait, de l'étape d'ouverture de contacts, la cause la plus probable de la dispersion observée sur des caractéristiques mesurées.

Dans un cadre plus général, l'effet de perçage constitue une limitation majeure particulièrement importante depuis l'émergence des technologies auto-alignées à émetteur et base en silicium polycristallin, isolées par tranchée [20][21]. Ces structures sont

essentiellement concernées par deux types de problèmes relatifs au perçage. Le premier est induit par un lien insuffisant entre les zones de base extrinsèque et intrinsèque respectivement dopées à partir d'une couche polycristalline et par implantation ionique [22][23][24][25]. Le second problème réside dans la configuration à émetteur muré contre une isolation de type TRENCH très sensible à la génération de défauts cristallins au voisinage de l'interface Si/SiO₂ [26]. Afin de s'affranchir de ce dernier type d'inconvénient, un oxyde de champ conventionnel peut être aménagé en zone de transition entre la partie active du transistor et l'isolation TRENCH (figure 18) [27][28]. Le problème de sensibilité au perçage de la base est alors ramené à celui étudié dans le cadre de ce travail.

SELF-ALIGNED TRANSISTOR WITH BUTTED EMITTER

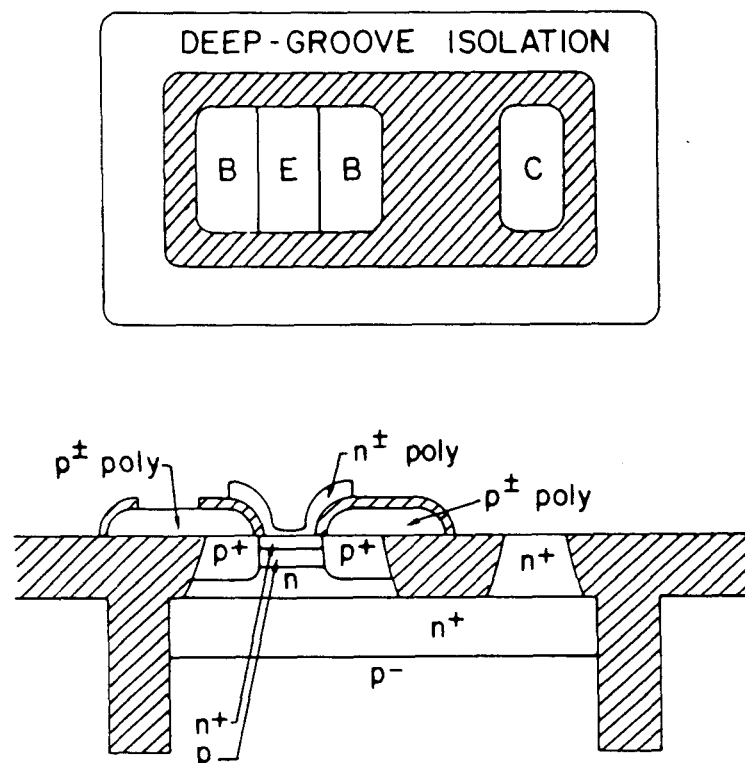


Figure 18: Représentation schématique d'un transistor NPN auto-aligné (SAP transistor: Self-Aligned Polysilicon transistor) isolé par tranchée (TRENCH). Le dessin de masque correspondant montre que l'émetteur est muré contre un oxyde de champ aménagé en zone de transition entre la zone active du transistor et l'isolation profonde de type TRENCH [27].

CHAPITRE V

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] W.C. Ko, T.C. Gwo, P.H. Yeung, S.J. Radigan, 'A simplified fully implanted bipolar VLSI technology', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 30, n°3, pp 236-239, Mars 1983.
- [2] H. Stork, 'Submicron bipolar', Proc. of Special VLSI Workshop, Symposium on VLSI technology, pp 97-116, Mai 1986.
- [3] S.M. Sze, 'VLSI technology', Mac Graw Hill, 1983.
- [4] F. Barson, 'Emitter-collector shorts in bipolar devices', IEEE Journal of Solid-State Circuits, vol.11, n°4, pp 505-510, Août 1976.
- [5] A.C.M. Wang, S. Kakihana, 'Leakage and h_{FE} degradation in microwave bipolar transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 21, n°11, pp 667-674, Novembre 1974.
- [6] L.C. Parrillo, R.S. Payne, T.E. Seidel, M.D. Robinson, G.W. Reutlinger, D.E. Post, R.L. Field, 'The reduction of emitter-collector shorts in a high-speed all-implanted bipolar technology', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 28, n°12, pp 1508-1514, Décembre 1981.
- [7] RTC-PHILIPS COMPOSANTS, 'IC design manual Subilo-N', Caen.
- [8] B. Baccus, E. Dubois, D. Collard, D. Morel, 'Efficient two dimensional multilayer process simulation of advanced bipolar devices', Solid-State Electronics, vol. 32, n°11, pp 1013-1023, 1989.
- [9] E. Dubois, B. Baccus, D. Collard, 'Accurate two-dimensional process and device simulations for the analysis of punchthrough in walled emitter bipolar transistors', Proc. of NASECODE VI Conf., pp 384-389, Juillet 1989.

- [10] B. Baccus, D. Collard, 'Two-dimensional study of SUBILO-N technology', Report of command 1989350, phase 2, Novembre 1988.
- [11] E. Dubois, B. Baccus, D. Collard, 'Device simulation of SUBILO-N technology: study of the punchthrough effect.', Report of command 1989350, phase 3, Décembre 1988.
- [12] L. Borucki, H.H. Hansen, K. Varahramyan, 'FEDSS - A 2D semiconductor fabrication process simulator', IBM J. Res. Develop., vol 29, n°3, pp 263-276, 1985.
- [13] P.R. Gray, R.G. Meyer, 'Analysis and design of analog integrated circuits', Wiley, 1984.
- [14] S.M. Sze, 'Physics of semiconductor devices', Wiley, 1981.
- [15] J. Lebailly, I. Pouilloux, communication privée, RTC-Philips components, Caen.
- [16] P. Leduc, communication privée, RTC-Philips components, Caen.
- [17] H.C. De Graaff, F.M. Klaassen, 'Compact transistor modelling for circuit design', Ed. S. Selberherr, Springer-Verlag, 1990.
- [18] E. Dubois, B. Baccus, D. Collard, 'Analysis of the punchthrough effect in walled emitter bipolar transistors', Proc. of ESSDERC'89 Conf., pp 789-792, Septembre 1989.
- [19] B. Baccus, 'Simulation bidimensionnelle de technologies silicium - l'approche multicouche', Thèse de Doctorat en Electronique, Mars 1990.
- [20] G.P. Li, T.C. Chen, C.T. Chuang, J.M.C. Stork, D.D. Tang, M.B. Ketchen, L.K. Wang, 'Bipolar transistor with self-aligned lateral profile', IEEE Electron Device Letters, vol. 8, n°8, pp 338-340, Août 1987.
- [21] G.P. Li, T.H. Ning, C.T. Chuang, M.B. Ketchen, D.D.L. Tang, J. Mauer, 'A advanced high-performance trench-isolated self-aligned bipolar technology', IEE Trans. Electron Devices, vol. 34, n°11, pp 2246-2253, Novembre 1987.

- [22] C.T. Chuang, D.D.L. Tang, G.P. Li, E. Hackbarth, 'On the punchthrough characteristics of advanced self-aligned bipolar transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, n°7, pp 1519-1524, Juillet 1987.
- [23] P.F. Lu, G.P. Li, D.D.L. Tang, 'Lateral encroachment of extrinsic-base dopant in submicrometer bipolar transistors', IEEE Electron Device Letters, vol. 8, n°10, Octobre 1987.
- [24] C.T. Chuang, 'The effect of extrinsic encroachment on the switch-on transient of advanced narrow-emitter bipolar transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, n°3, pp 309-313, Mars 1988.
- [25] G.P. Li, E. Hackbarth, C.T. Chuang, D.D.L. Tang, T.C. Chen, 'Methodology for bipolar process diagnosis and its application to advanced self-aligned bipolar transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, n°8, pp 1736-1740, Août 1987.
- [26] M. Vora, Y.L. Ho, S. Bhamre, F. Chien, G. Bakker, H. Hingarh, C. Schmitz, 'A sub-100 picosecond bipolar ECL technology', IEDM Tech. Dig., pp 34-37, 1985.
- [27] D.D.L. Tang, 'Scaling the silicon bipolar transistor', in Submicron integrated circuits, Ed. R.K. Watts, pp 87-121, Wiley, 1989.
- [28] T. Yamaguchi, Y.C. Simon Yu, E.E. Lane, J.S. Lee, E.E. Patton, R.D. Herman, D.R. Ahrendt, V.F. Drobny, T.H. Yuzuriha, V.E. Garuts, 'Process and device performances of high-speed double Poly-Si bipolar technology using Borosenic-Poly process with coupling-base implant', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, n°8, pp 1247-1256, Août 1988.



CHAPITRE VI

CONTRIBUTION A L'ETUDE DES PHENOMENES DE SURFACE DANS LES TRANSISTORS PNP LATERAUX

VI-1 INTRODUCTION

L'intégration de transistors bipolaires PNP latéraux est essentiellement guidée par les besoins en applications de type analogique. Un des principaux intérêts de cette structure réside dans sa compatibilité complète avec le procédé de fabrication des transistors NPN verticaux. La représentation simplifiée, donnée en figure 1, montre que:

- i) l'émetteur et le collecteur sont constitués par des zones P⁺ dont le profil est identique à celui des régions de base extrinsèque des transistors NPN.
- ii) la base active du transistor est intégrée dans la couche épitaxiale.
- iii) la polarisation de base est appliquée par l'intermédiaire de la couche enterrée N⁺ dont le rôle est attaché au collecteur dans le cas du transistor NPN.

L'optimisation du procédé étant en majeure partie dédiée au transistor NPN vertical, des différences majeures existent entre le comportement électrique des deux structures:

- (i) limitation en fréquence: la largeur de base latérale, environ d'un ordre de grandeur plus grande que celle du NPN, engendre des temps de transit plus élevés.

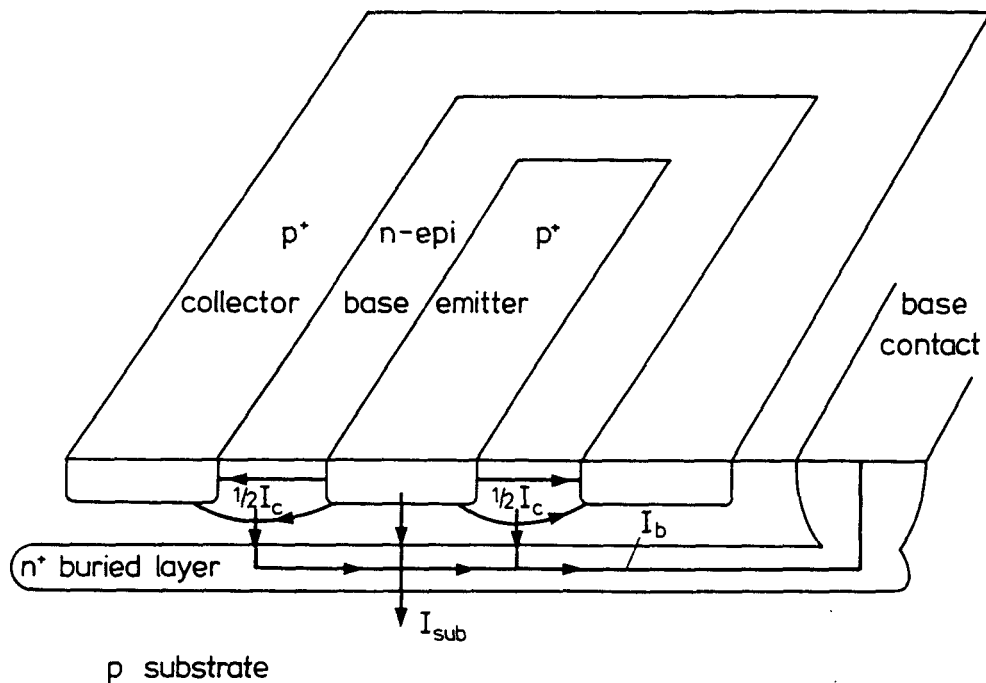


Figure 1: Représentation schématique du transistor PNP latéral. La composante d'injection latérale est privilégiée en augmentant le périmètre de la jonction émetteur/base: le comportement électrique est fortement conditionné par le caractère tridimensionnel de la structure. [3]

- (ii) limitation en niveau de courant liée à la surface réduite émetteur/base constituée par la jonction latérale P^+/N_{epi} .
- (iii) la réduction de l'efficacité d'émetteur et l'accroissement de sa résistance d'accès associée sont des effets provoqués par le niveau de dopage moins élevé de cette région.
- (iv) influence du transistor PNP vertical dont le collecteur est constitué par le substrat qui dégrade le paramètre α (I_c/I_e) du transistor latéral.
- (v) accroissement du courant de base provoqué par recombinaison à l'interface Si/SiO_2 .

Quelques-unes de ces limitations peuvent être atténuées en utilisant, par exemple, une géométrie de transistor favorisant l'injection de périmètre (accroissement du niveau de courant possible) ou une couche enterrée fortement dopée afin de limiter le gain du transistor parasite vertical. En revanche, l'excès du courant de base engendré par la recombinaison de surface est un facteur beaucoup plus difficilement contrôlable dans la mesure où les propriétés de surface sont intimement liées aux conditions de fabrication. La présence de centres recombinants et de charges d'interface sont deux facteurs essentiels dans la détermination des propriétés électriques des transistors PNP latéraux, principalement affectées en régime de faible injection.

L'importance des phénomènes de surface dans les transistors PNP latéraux motive une analyse détaillée des principales implications sur le fonctionnement électrique du dispositif. Cette étude est principalement orientée vers les effets rencontrés en régime de faible injection pour lequel une forte dégradation du gain en courant est observée [1]. Les structures PNP latérales sont, par nécessité, caractérisées par des géométries de nature hautement tridimensionnelle. L'étude de leur fonctionnement, par le biais de simulation de dispositif, est malheureusement ici limitée à un aspect bidimensionnel (2D) ne pouvant donner accès qu'à des résultats qualitatifs.

Dans un premier temps, la cohérence des résultats 2D est donc vérifiée à l'aide d'une approche analytique simple permettant d'obtenir une estimation du gain 3D d'une géométrie particulière de transistor PNPL: ce calcul est basé sur une approche régionale de modélisation exploitant une notion de paramètre unité [2][3]. Une analyse des effets de surface est ensuite menée afin de démontrer les répercussions sur les caractéristiques de gain et de courants de base. Pour ce faire, une démarche hiérarchique a été adoptée, mettant en jeu successivement la recombinaison de surface et les charges fixes d'interface.

VI-2 LIENS ENTRE MODELLISATIONS BIDIMENSIONNELLE ET TRIDIMENSIONNELLE

Le but de cette partie préliminaire est de pouvoir évaluer les différences existant entre des résultats fournis par une approche bidimensionnelle de simulation, d'une part, et des résultats de mesures obtenues sur une structure PNP latérale fortement marquée par sa nature tridimensionnelle, d'autre part. Dans ce cadre, la notion de paramètres unités permet de déterminer l'importance relative de chaque région du dispositif dans le calcul d'une composante de courant particulière. Les composantes de courant essentielles entrant en jeu dans le fonctionnement du dispositif sont représentées en figure 2 sur une section de coupe du dispositif [2].

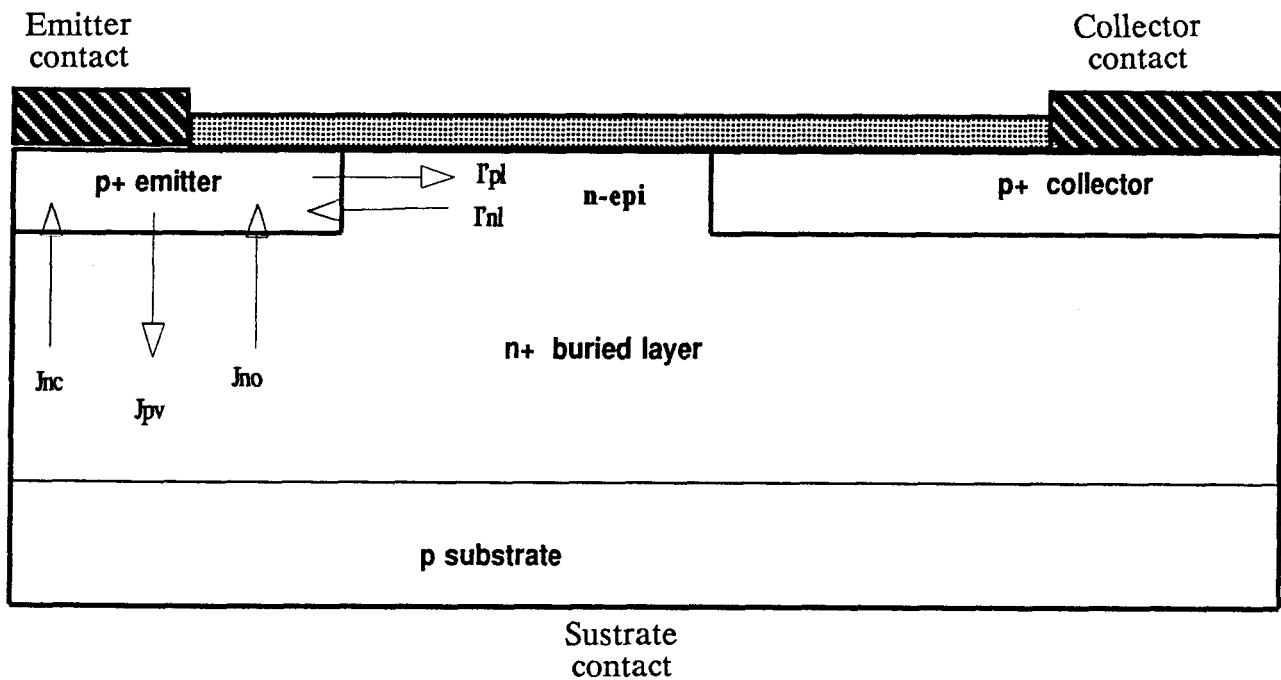


Figure 2: Principales composantes de courant entrant en jeu dans le fonctionnement du transistor PNP latéral. La recombinaison de volume est supposée négligeable.

Les composantes de courants peuvent être classées sous deux catégories selon le type de porteur impliqué:

(i) Composantes de courant d'électrons

J_{nc} : densité de courant injectée sous la surface du contact émetteur. Ce courant correspond à une injection d'électrons de la base dans l'émetteur ($A/\mu m^2$).

J_{no} : densité de courant injectée sous l'interface Si/SiO₂. Courant injecté de la base dans l'émetteur se recombinant à l'interface ($A/\mu m^2$).

I'_{nl} : courant par unité de longueur périmétrique. Courant injecté de la base dans l'émetteur par la jonction latérale P⁺/N_{epi} ($A/\mu m$).

(ii) Composantes de courant de trous

J_{pv} : courant injecté de l'émetteur dans la base (couche enterrée) établissant le courant collecteur du transistor PNP vertical parasite ($A/\mu m^2$).

I'_{pl} : composante latérale de courant périmétrique injecté de l'émetteur dans la base (base intrinsèque) ($A/\mu m$).

J_{pr} : densité de courant correspondant à la recombinaison de trous dans la base, (négligée dans le cas présent) ($A/\mu m^2$).

Les relations de courant permettant de calculer les courants terminaux sont alors donnés par:

$$I_c = P_b \cdot I'_{pl} \quad (1)$$

$$I_b = S_c \cdot J_{nc} + S_o \cdot J_{no} + P_b \cdot I'_{nl} + (S_o + S_c) \cdot J_{pr} \quad (2)$$

$$I_e = I_c + I_b \quad (3)$$

$$I_s = (S_o + S_c) \cdot J_{pv} \quad (4)$$

où S_c représente la surface du contact émetteur, S_o la surface de l'interface Si/SiO₂ associée à l'émetteur, P_b le périmètre de la jonction émetteur/base. Un paramètre annexe dépendant de I'_{pl} et de la largeur effective de base (W_b) est donnée par:

$$I''_{pl} = I'_{pl} \cdot W_b \quad (5)$$

L'ensemble de ces paramètres unités a été déterminé sur la base de mesures effectuées sur des géométries de transistors fabriqués à cet effet [4][5]. Une seconde possibilité consiste à extraire ces paramètres à partir de simulations de dispositifs. Deux méthodes de calcul différentes ont été mises en oeuvre selon que le paramètre unité soit relatif à une composante surfacique ou périmétrique. Dans le premier cas, le calcul consiste à adopter deux géométries différentes de transistors n'affectant qu'une seule composante de courant: le paramètre à déterminer est alors déduit à l'aide d'une des relations (1)-(5). Le second cas concerne les composantes périmétriques qui peuvent être accédées soit en intégrant le courant sur une surface se limitant à la zone de jonction latérale, soit à partir des relations (1)-(5) et de la connaissance des paramètres surfaciques. Le tableau I donne un point de comparaison entre les paramètres obtenus par voie de simulation ou selon une méthode de mesure. Ces valeurs sont exprimées en terme de courants de saturation: J_{snc} , J_{spv} , J_{sno} , I''_{spl} et I'_{snl} .

TABLEAU I

PARAMETRE	SIMULATION	MESURE	UNITE
J_{snc}	56.56	45	10^{-21} A/ μm^2
J_{spv}	3.43	3.5	10^{-21} A/ μm^2
J_{sno}	6.4	1.3	10^{-21} A/ μm^2
I''_{spl}	1081	700	10^{-21} A
I'_{snl}	2.06	16	10^{-21} A/ μm

Les valeurs des différentes caractéristiques du transistor sont données par :

$$\begin{aligned}
 W_b &= 2.85 \mu\text{m} \\
 P_b &= 43.20 \mu\text{m} \\
 S_o &= 108.80 \mu\text{m}^2 \\
 S_c &= 7.84 \mu\text{m}^2
 \end{aligned}$$

Un relativement bon accord existe entre les deux jeux de paramètres. Les écarts rencontrés en ce qui concerne les paramètres J_{sno} , I''_{spl} , I'_{snl} peuvent en partie être expliqués de la manière suivante :

J_{sno} : ce paramètre est, bien entendu, lié aux valeurs de vitesse de recombinaison adoptées ($S_n = S_p = 1000$ cm/s dans ce cas). De plus cette valeur ne représente qu'une valeur moyenne alors qu'en pratique la distribution de courant recombiné peut être largement non uniforme et même être prédominante en dehors de la zone d'émetteur.

I''_{spl} : ce paramètre est dépendant de la largeur effective de base dont la valeur a été fixée a priori dans le cas de paramètres unités obtenus déduits par mesures.

I'_{snl} : la détermination de ce paramètre reste très délicate sur la base de simulations de dispositifs. Cependant, le courant associé à cette composante périmétrique est relativement faible en comparaison du courant surfacique du même type (J_{snc} par exemple).

Afin d'obtenir une comparaison quantitative entre les résultats obtenus par le biais de simulations et de mesures, les deux jeux de paramètres unités (PU) ont été utilisés dans le calcul du gain en moyenne injection de la structure de test dont le dessin de masques est représenté en figure 3 (la signification de chaque niveau de masque a déjà été établie au paragraphe V-2 du chapitre précédent). Les valeurs obtenues sont de 13.34 (PU obtenus par simulation) et de 8.95 (PU obtenus par mesure) [6]. Ces deux valeurs sont incluses dans l'intervalle de dispersion standard rencontré sur ce dispositif particulier [7]:

$$h_{FE} \begin{cases} \text{minimum: } 8 \\ \text{moyenne: } 11 \\ \text{maximum: } 14 \end{cases}$$

Les derniers résultats démontrent la consistance globale des simulations effectuées. De plus, la valeur de gain égale à 13.34, qui a été obtenue à partir des paramètres unités extraits de simulations, est en excellent accord avec le gain de moyenne injection déduit d'une mesure directe, comme le démontre la figure 4. En termes quantitatifs, la simulation du transistor bidimensionnel, défini par la coupe donnée en figure 3, fournit une valeur de gain en moyenne injection l'ordre de 3.20 assez éloignée du gain de la structure réelle 3D. Cependant, comme le démontre la caractéristique en figure 4, les variations typiques du gain 2D permettent de reproduire qualitativement celles du gain réel. Sur la base de cette dernière conclusion, les paragraphes suivants proposent une étude plus approfondie des effets de surface, essentiellement focalisée sur l'interprétation des phénomènes mis en jeu plutôt que sur des aspects de simulation quantitative.

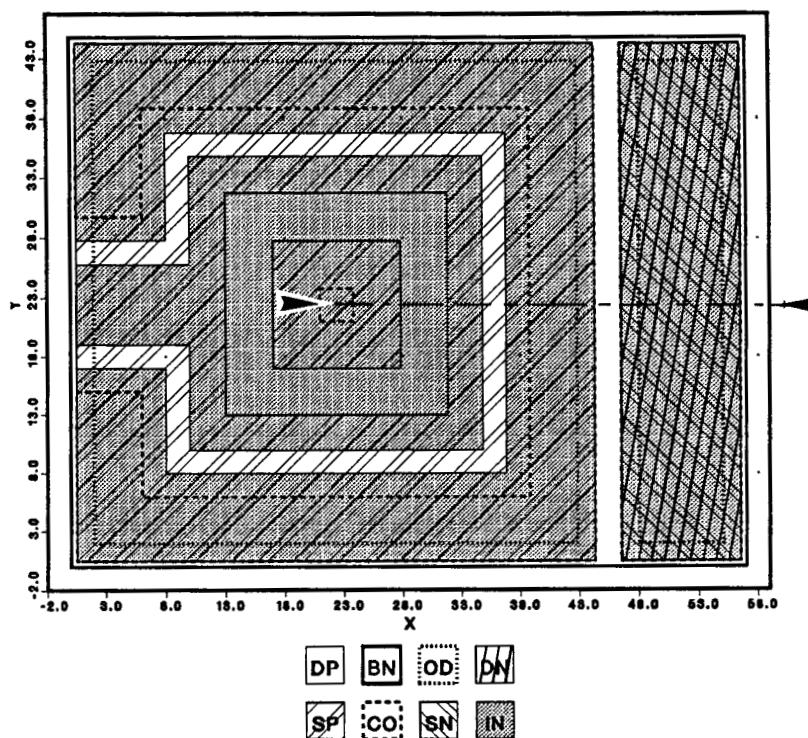


Figure 3: Dessin de masques correspondant à la structure de transistor PNP latéral étudié: la signification de chaque niveau de masquage correspond à celui établi au paragraphe V-2.

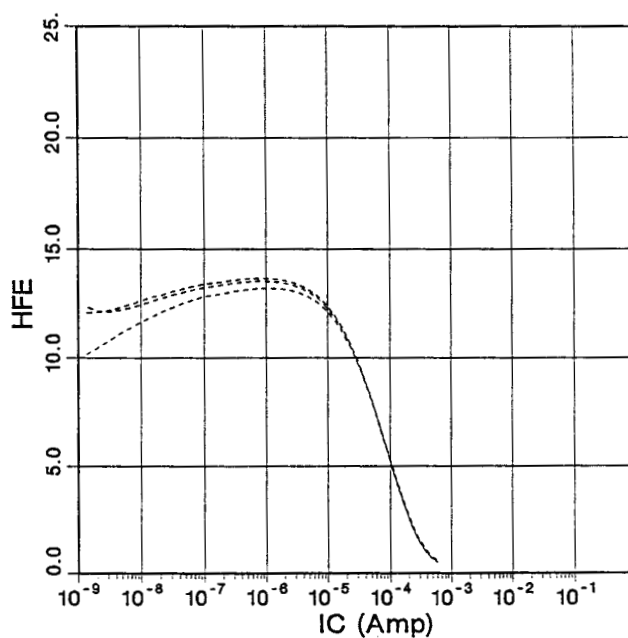


Figure 4: Caractéristiques mesurées de gain en courant concernant la structure PNP latérale étudiée. Les trois courbes montrent la dispersion obtenue en faible injection.

VI-3 ANALYSE DES PHENOMENES DE SURFACE EN FAIBLE INJECTION

VI-3.1 Introduction

Cette section propose une analyse qualitative de l'effet de dégradation de gain en faible injection dans les structures PNP latérales, imputable à l'excès de courant de base provoqué par la recombinaison en surface. Comme il a été établi dans le paragraphe 5.2.5, le modèle de recombinaison de surface nécessite la détermination expérimentale de trois paramètres, à savoir: les sections de capture des électrons et des trous, ainsi que la répartition de densité d'états de pièges en surface. Ces quantités sont cependant fortement dépendantes des conditions technologiques, et doivent, en ce sens, être déterminées pour un procédé particulier. L'absence de données expérimentales, concernant le procédé SUBILO-N, nécessite une simplification du problème qui consiste à adopter des vitesses de recombinaisons (s_n et s_p) constantes correspondant à des états d'interface monovalents situés au milieu de la bande interdite ($n_1=p_1=n_{ie}$). La relation (91) figurant au chapitre II se simplifie donc sous la forme:

$$(R-G)_s = \frac{\frac{n_s p_s - n_{ie}^2}{(n_s + n_{ie})} + \frac{n_{ie}^2}{(p_s + n_{ie})}}{s_p + s_n} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_{Si/SiO_2}) \quad (6)$$

De plus, les charges surfaciques liées à la population de ces pièges sont négligées: seule la charge fixe d'interface est prise en compte. Afin de découpler les effets induits par la recombinaison et la présence de charges d'interface, le premier phénomène seul est d'abord pris en compte. Il est cumulé à l'effet de charges fixes d'interface dans un second temps. La recombinaison de volume, supposée négligeable par rapport à celle de surface, est ignorée. La structure bidimensionnelle étudiée correspond à celle désignée par le plan de coupe de la figure 3. L'oxyde de champ séparant les contacts de collecteur et de base est ignoré au niveau des simulations: sa présence est d'une importance relative puisque la jonction base/collecteur est polarisée en inverse. Les résultats de simulation de procédé associés montrent le lieu des jonctions (figure 5) et différents profils de coupe correspondants aux zones d'émetteur (ou

collecteur), de base intrinsèque et de base extrinsèque au niveau de la prise de contact (figure 6).

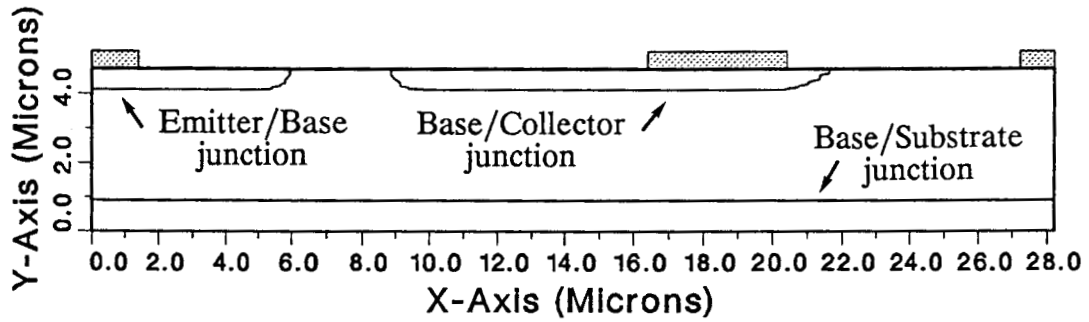


Figure 5: Résultat de simulation de procédé montrant l'extension du domaine 2D et le lieu des différentes jonctions.

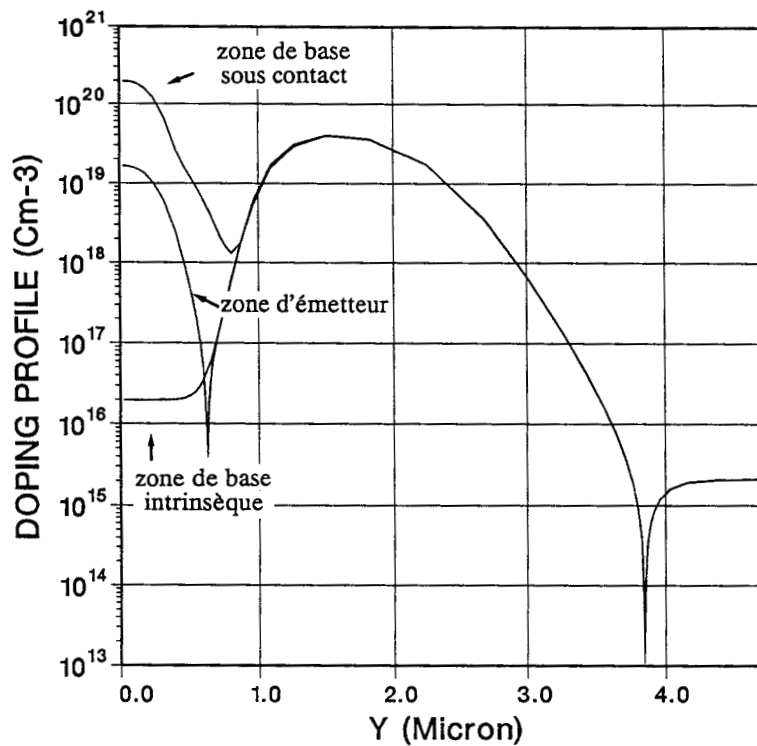


Figure 6: Sections de coupes illustrant les profils de dopage dans les zones d'émetteur (ou de collecteur), de base intrinsèque et de base extrinsèque sous la prise de contact de base.

VI-3.2 Influence de la vitesse de recombinaison

Deux valeurs caractéristiques de vitesse de recombinaison ont été adoptées: 1000 et 5000 cm/s. Elles donnent une bonne estimation des valeurs minimales et maximales possibles [4]. En référence à la polarisation d'émetteur, le collecteur et le substrat sont fixés à -1 volt alors que la tension de base varie entre 0 et -1 volt. Pour les deux vitesses de recombinaison, les courants terminaux d'électrons sont reportés en figure 7 et 8. Le courant évalué sur le contact de base représente la quantité totale d'électrons injectés. Ce courant se divise en deux composantes essentielles: une portion du courant est recueillie sur le contact d'émetteur alors que la seconde composante correspond à la recombinaison de surface. Les courants d'électrons collectés sur les contacts de substrat et de collecteur sont négligeables puisqu'ils correspondent à des jonctions polarisées en inverse. La figure 7 ($s_n=s_p=1000$ cm/s) montre que le courant de recombinaison domine le courant total de base, en régime de faible injection, jusqu'à une tension base/émetteur de -0.47 volt. La même conclusion s'applique dans le cas d'une vitesse de recombinaison plus élevée (5000 cm/s): l'influence croissante de la recombinaison de surface marque maintenant sa domination sur le courant total de base jusqu'à $V_{be} = -0.72$ volt (figure 8).

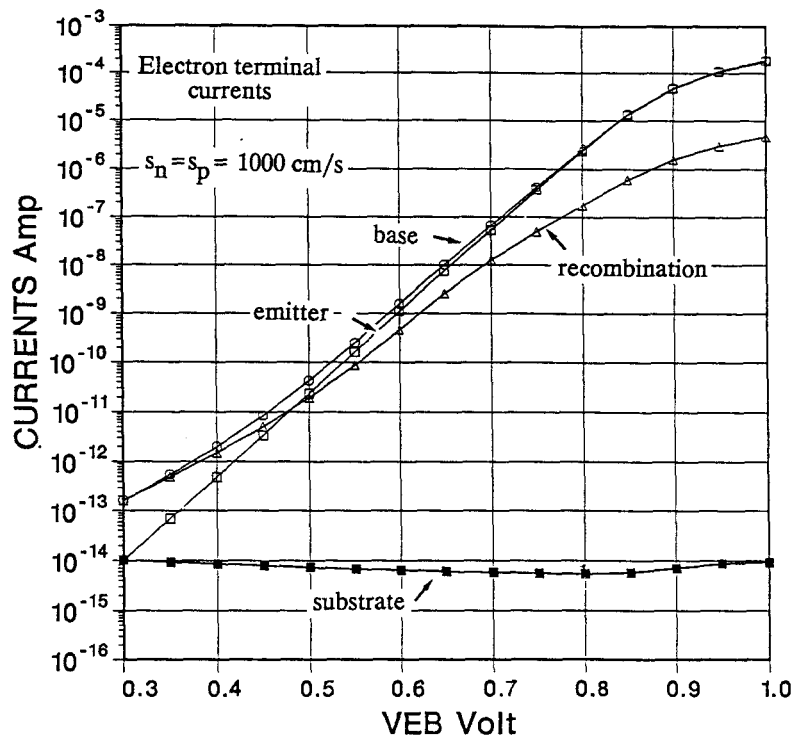


Figure 7 : Evolution des courants terminaux d'électrons en fonction de la tension émetteur/base ($s_n=s_p=1000$ cm/s).

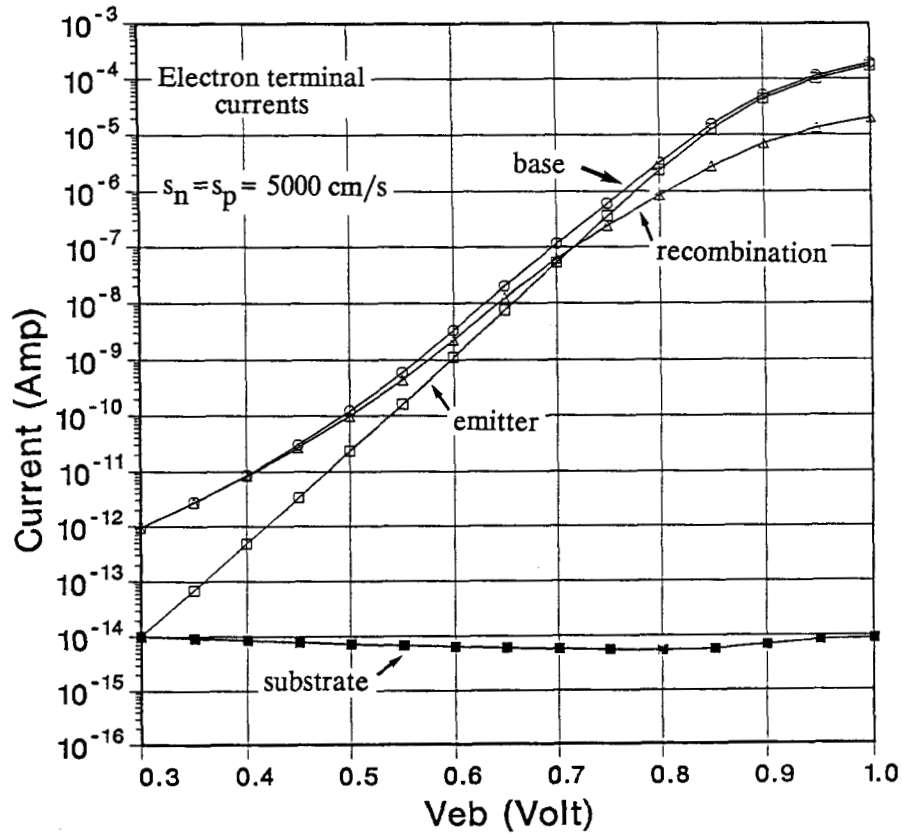


Figure 8 : Evolution des courants terminaux d'électrons en fonction de la tension émetteur/base ($s_n = s_p = 5000$ cm/s). Le courant de recombinaison domine le courant total de base en faible injection.

L'influence de la recombinaison de surface est également observable, à un degré moindre, en effectuant le bilan des courants de trous recueillis sur les quatre électrodes. Ce point est illustré par les figures 9 et 10 qui représentent les variations des courants terminaux de trous en fonction de la tension émetteur/base, respectivement pour des vitesses de recombinaison de 1000 et 5000 cm/s. Pour une vitesse de 5000 cm/s, le régime de faible injection met en évidence une importante proportion de courant d'émetteur alimentant la recombinaison de surface jusqu'à une tension base/émetteur de -0.5 volt.

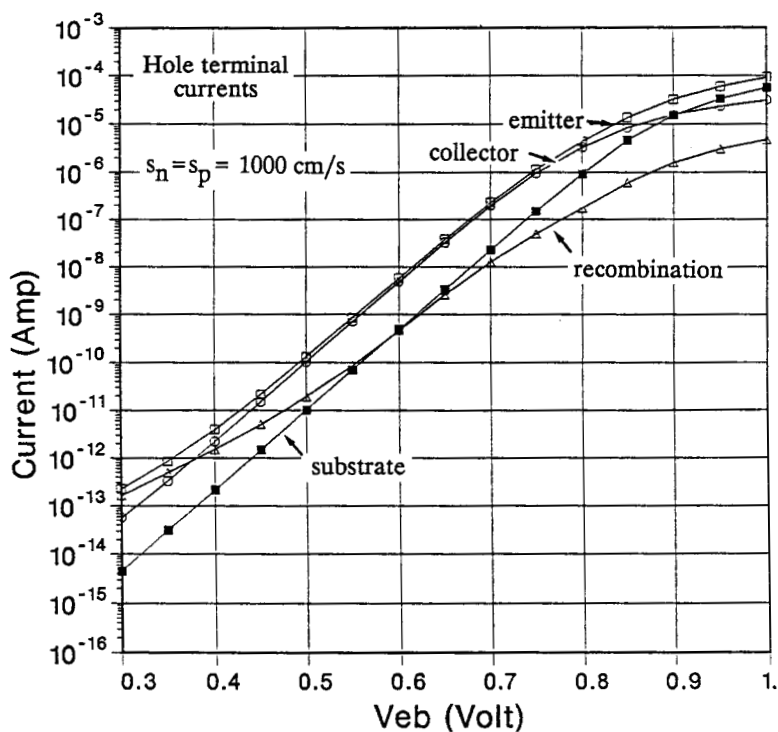


Figure 9: Evolution des courants terminaux de trous en fonction de la tension émetteur/base ($s_n = s_p = 1000 \text{ cm/s}$).

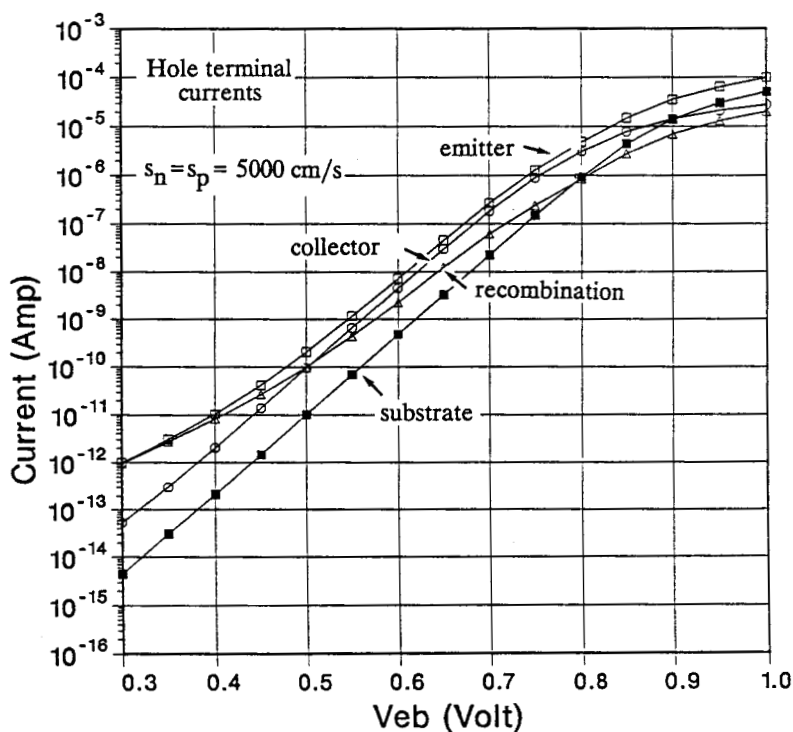


Figure 10: Evolution des courants terminaux de trous en fonction de la tension émetteur/base ($s_n = s_p = 5000 \text{ cm/s}$). Une large proportion du courant de trous injectés par l'émetteur est recombinié au niveau de l'interface.

Les principales répercussions de la recombinaison à l'interface sur le gain en courant du dispositif sont présentées en figure 11. A titre de comparaison, la caractéristique de gain sans recombinaison y est également reportée. La dégradation du gain en faible injection est facilement explicable par l'accroissement du courant de base dont une partie alimente la recombinaison de surface. Un autre point remarquable est la diminution notable de la valeur maximale de gain. Celui-ci est, en effet, réduit de moitié lorsque la vitesse de recombinaison est accrue de 1000 à 5000 cm/s.

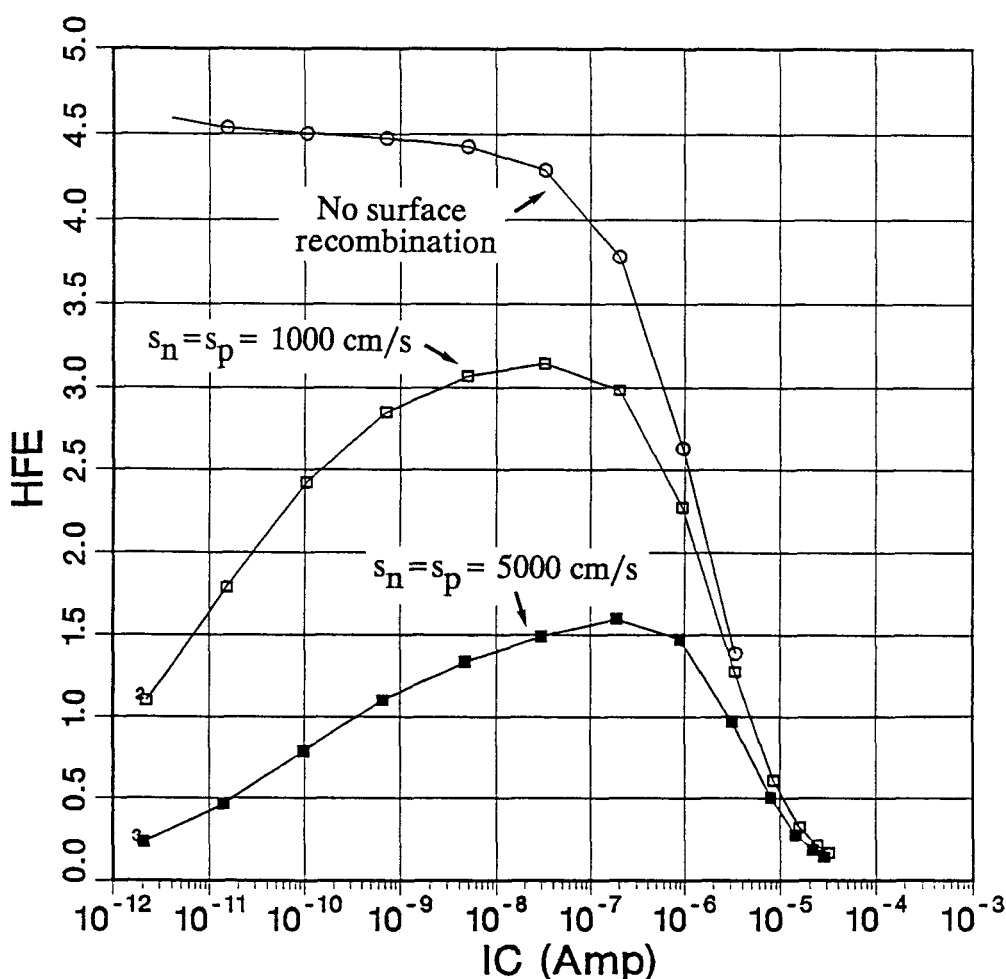


Figure 11: Caractéristiques de gain en courant obtenues pour trois conditions de recombinaison à l'interface.

Les résultats présentés jusqu'à présent ont permis d'établir l'influence critique de la recombinaison de surface sur la dégradation des caractéristiques de gain. Il reste cependant à établir l'importance relative de chaque zone de l'interface où la

recombinaison peut avoir lieu. Pour ce faire, la distribution de courant recombiné le long de l'interface a été déterminée: les figures 12 et 13 donnent cette distribution pour chacune des vitesses de recombinaison adoptées. La répartition du courant est donnée à partir du bord droit du contact émetteur ($x=1.4 \mu\text{m}$). La jonction latérale émetteur/base est positionnée à $6 \mu\text{m}$ et la jonction base/collecteur à $8.85 \mu\text{m}$. Différents régimes de fonctionnement ont été pris en compte:

- (i) En faible injection ($V_{be} = -0.3$ et -0.5 volt), la recombinaison intervient principalement dans la zone de charge d'espace de la jonction émetteur/base. La contribution significative de courant recombiné est donc très localisée et atteint son maximum pour des concentrations d'électrons et de trous égales qui maximisent la fonction de recombinaison.
- (ii) En régime de moyenne injection ($V_{be} = -0.7$ volt), la recombinaison est prédominante dans la région de base ($x > 6 \mu\text{m}$) où la recombinaison est approximativement donnée par le produit de la vitesse de recombinaison des trous et de l'excès de porteurs minoritaires: $s_p \cdot \Delta p$. De manière analogue, la recombinaison de surface dans la zone d'émetteur est donnée par: $s_n \cdot \Delta n$. La concentration en dopant dans l'émetteur étant supérieure à celle de base, l'excès de trous dans la base est supérieure à l'excès d'électrons dans l'émetteur: ce dernier point explique la recombinaison dominante dans la région de base puisque les vitesses s_n et s_p sont égales.
- (iii) En forte injection ($V_{be} = -0.9$ volt), la tendance est inversée. Puisque la concentration en porteurs minoritaires rejoint le niveau de porteurs majoritaires dans la base (figure 14), la recombinaison est maintenant approximée par $s_n \cdot \frac{\Delta n}{2}$. En revanche, l'expression de la recombinaison dans l'émetteur reste la même que précédemment. La recombinaison dans la base est donc globalement limitée par le régime de forte injection: ceci explique la recombinaison dominante dans la région d'émetteur.

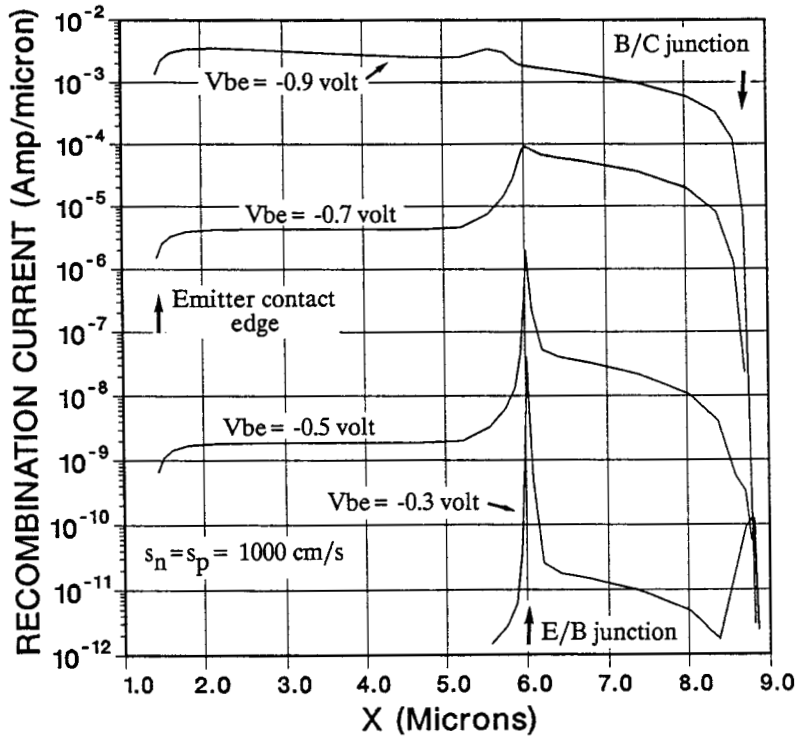


Figure 12: Distribution du courant de recombinaison le long de l'interface ($s_n=s_p=1000$ cm/s).

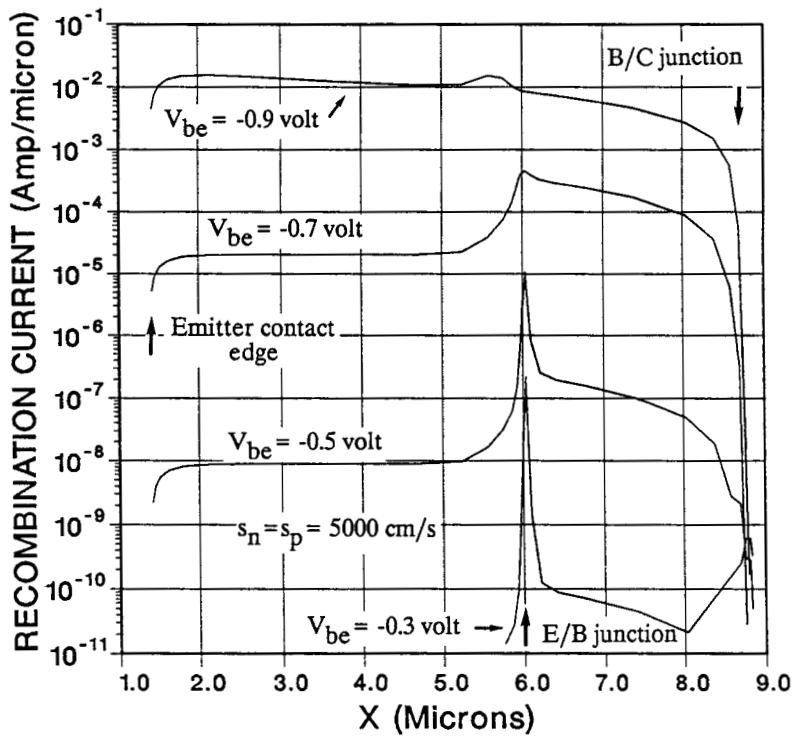


Figure 13: Distribution du courant de recombinaison le long de l'interface ($s_n=s_p=5000$ cm/s).

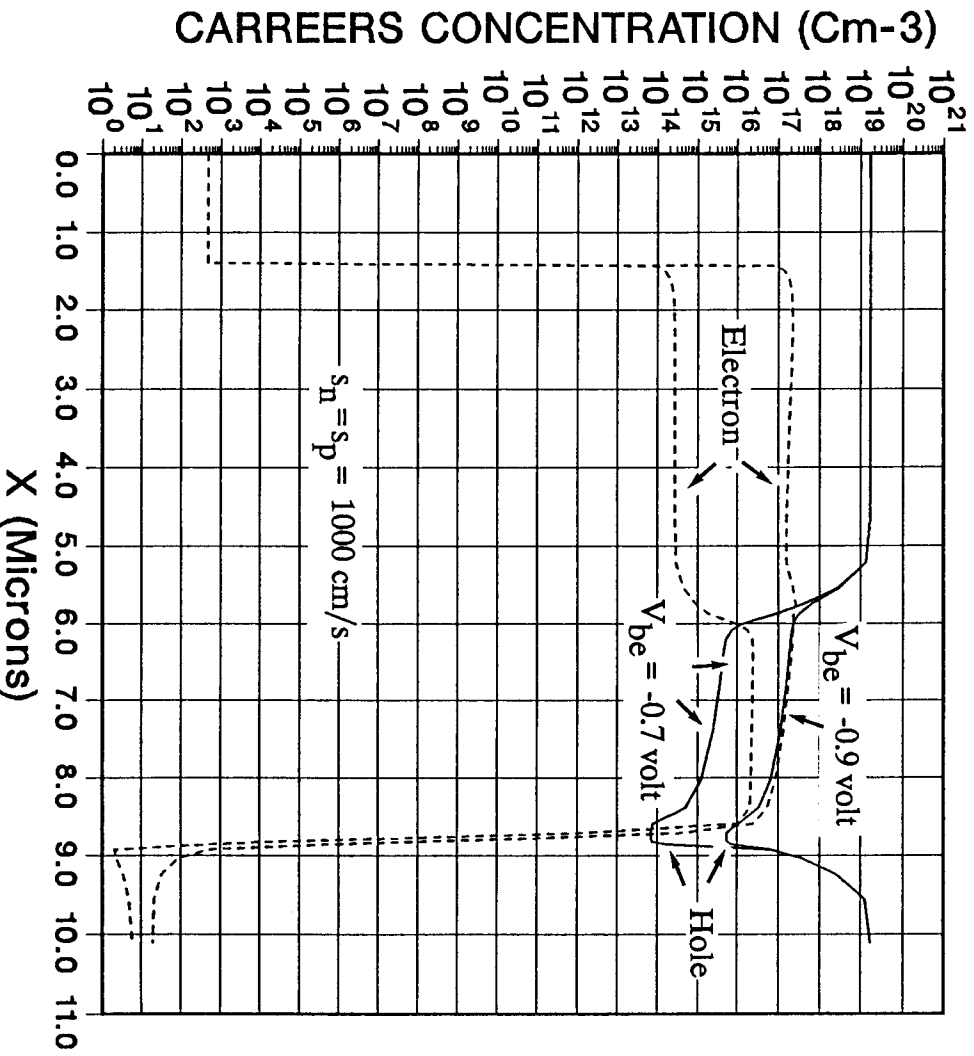


Figure 14: Distribution en porteur le long de l'interface du transistor PNP latéral. A $V_{be} = -0.7$ volt, le dispositif fonctionne en moyenne injection et la concentration en porteur minoritaire au début de la zone neutre de base est donnée par: $p \sim \frac{n_{1e}^2}{N_b} \exp\left(\frac{qV_{eb}}{k_b T}\right)$. Lorsque $V_{be} = -0.9$ volt, la forte injection limite l'excès de porteurs minoritaires dans la base: $p \sim n_{1e} \exp\left(\frac{qV_{eb}}{2k_b T}\right)$ au début de la zone neutre de base.

Le tracé des lignes de courant offre une possibilité particulièrement attractive d'illustrer les mécanismes de recombinaison. Il permet de visualiser des informations sur l'amplitude des différents courants recombinaison et de déterminer les zones l'interface où la recombinaison est privilégiée. De plus, aucun phénomène de recombinaison de volume n'étant pris en compte, les lignes de courant correspondant à chaque type de porteur peuvent être tracées individuellement (cf. paragraphe III-8). La figure 15 met en évidence les lignes de courant d'électrons pour un dispositif non affecté par la recombinaison de surface: la totalité du courant d'électrons de base est injectée dans l'émetteur et est collectée par le contact. Il est intéressant de noter qu'une faible proportion du courant total (<10%) contribue à l'injection latérale correspondant au paramètre unité I'_{nl} . La figure 16 illustre la distribution de lignes de courant rencontrée pour trois régimes différents de fonctionnement: 16-a faible injection, 16-b moyenne injection, 16-c forte injection. La vitesse de recombinaison correspondante est de 1000 cm/s. Ces résultats établissent de manière précise la décomposition du courant total de base en deux composantes reliées, par ailleurs, aux paramètres unités J_{nc} et J_{no} . Une contribution significative au courant de recombinaison n'est effectivement trouvée que pour un régime de faible injection.

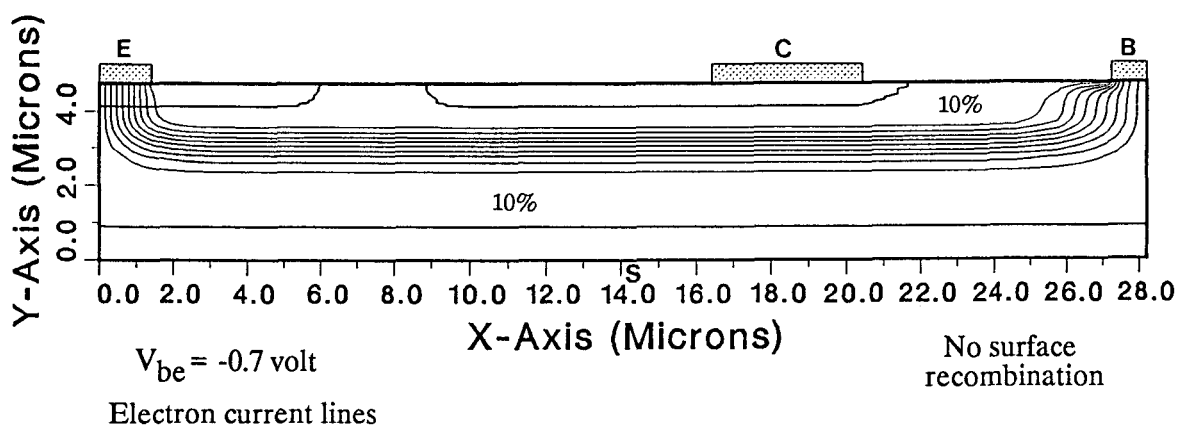


Figure 15: Disposition des lignes de courant en électrons pour un dispositif non affecté par la recombinaison de surface

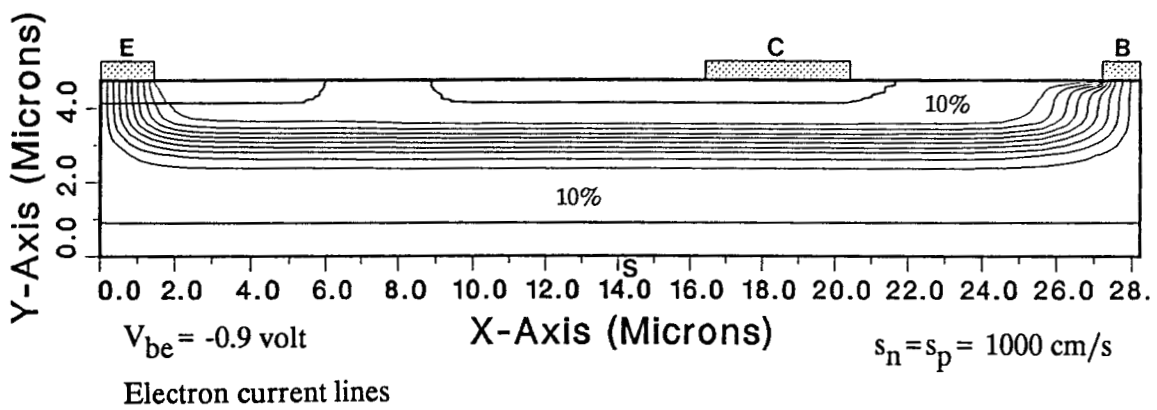
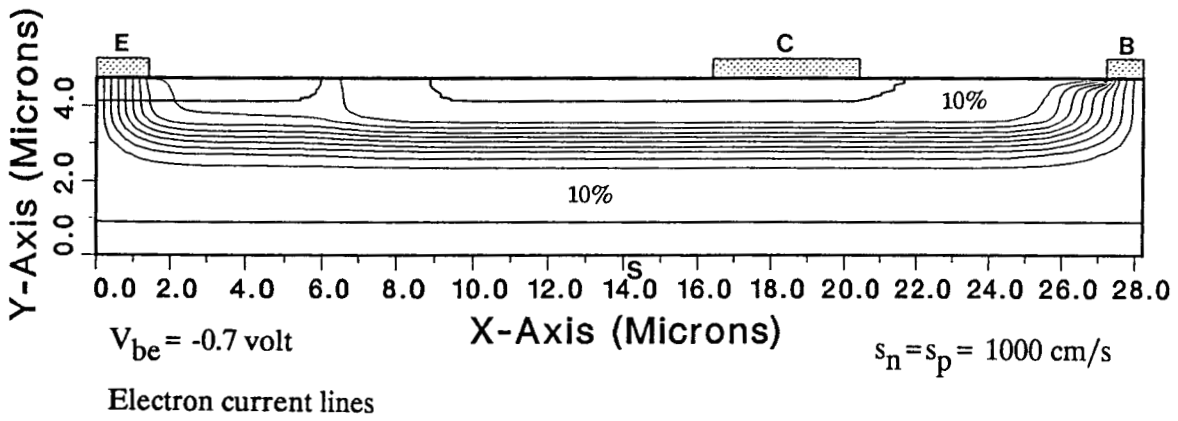
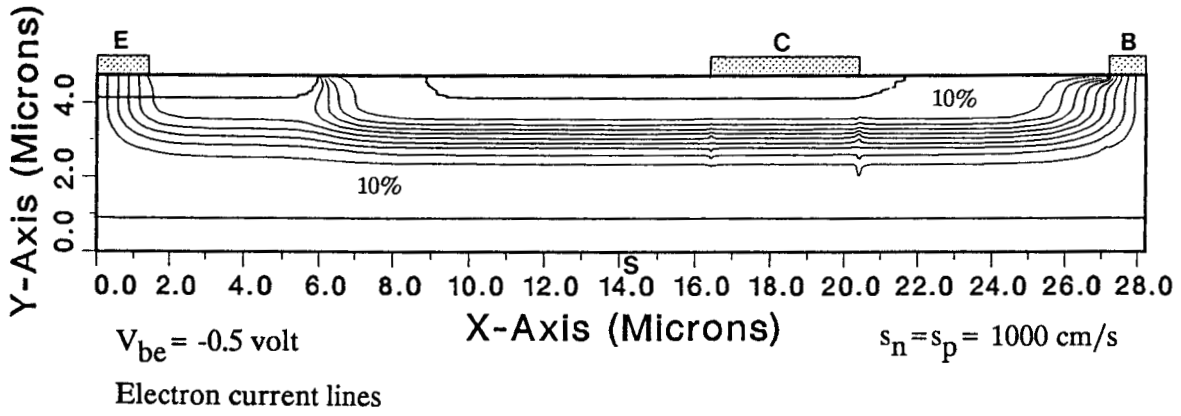


Figure 16: Configuration des lignes de courant d'électrons pour différentes conditions de polarisation ($s_n = s_p = 1000$ cm/s).
 (a): $V_{be} = -0.5$ volt , (b): $V_{be} = -0.7$ volt , (c): $V_{be} = -0.9$ volt

La figure 17 présente les mêmes informations que la figure 16 pour une vitesse de recombinaison de 5000 cm/s. Une comparaison entre 16-a et 17-a montre clairement le déplacement des lignes de courant nécessaire à une alimentation plus importante de la surface en porteurs.

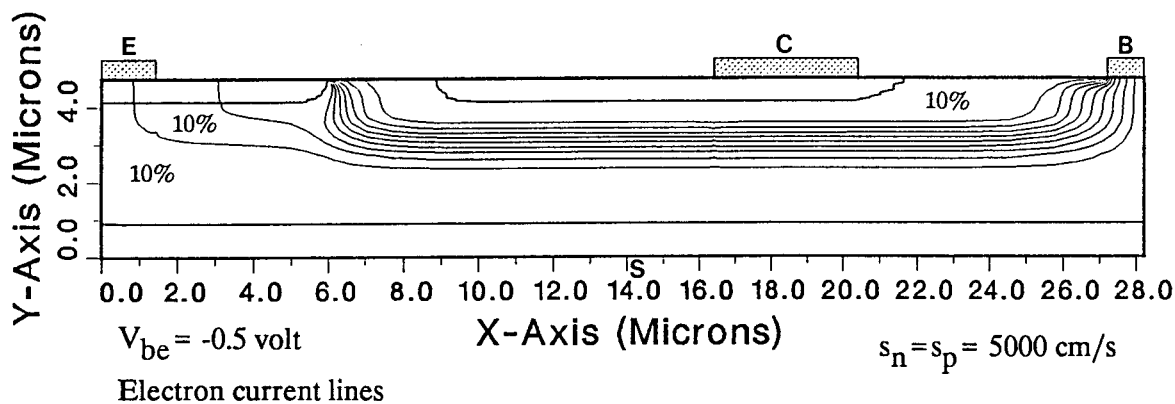
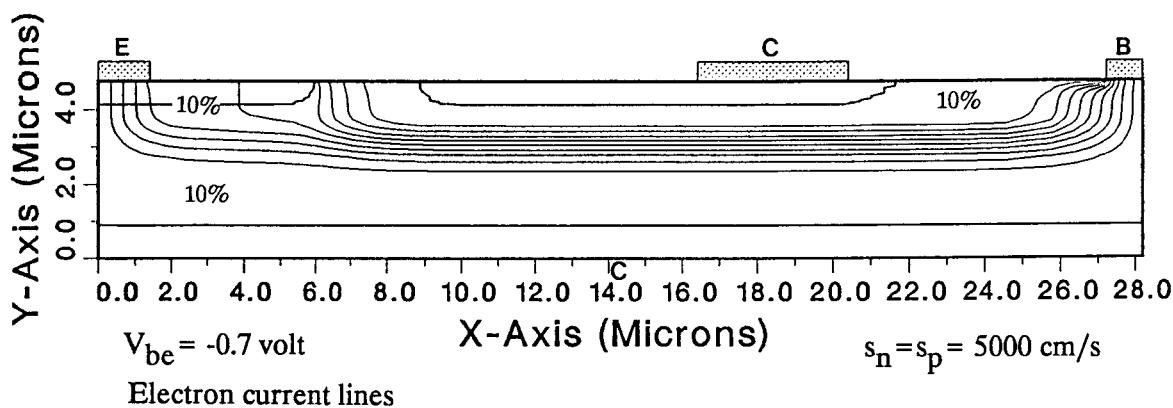
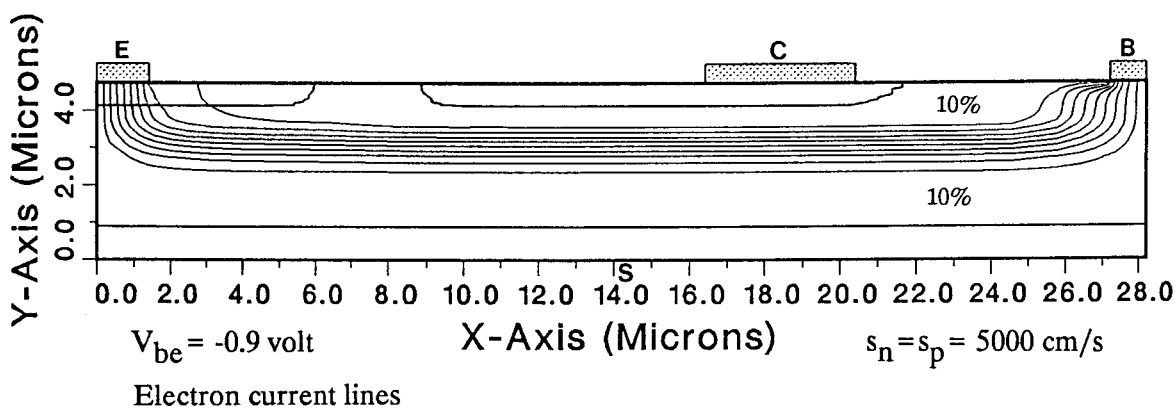


Figure 17: Configuration des lignes de courant d'électrons pour différentes conditions de polarisation ($s_n = s_p = 5000$ cm/s).
 (a): $V_{be} = -0.5$ volt , (b): $V_{be} = -0.7$ volt , (c): $V_{be} = -0.9$ volt

Le flot de courant de trous est représenté en figure 18 pour deux conditions de polarisations: $V_{be} = -0.5$ et -0.7 volt. Le fonctionnement du transistor PNP vertical parasite y est clairement illustré. Son effet est relativement pondéré en faible et moyenne injection puisque moins de 10% du courant injecté par l'émetteur est perdu. Les structures PNP latérales sont en général fortement marquées par le caractère fortement bidimensionnel du flot de courant circulant entre émetteur et collecteur [8]. Un tel effet est cependant fortement atténué par le niveau de dopage élevé et la forte pénétration de la couche enterrée vers la base active. De ce fait, environ 85% du courant injecté par l'émetteur atteint le collecteur en restant confiné dans un espace ne dépassant pas la profondeur de jonction émetteur/base.

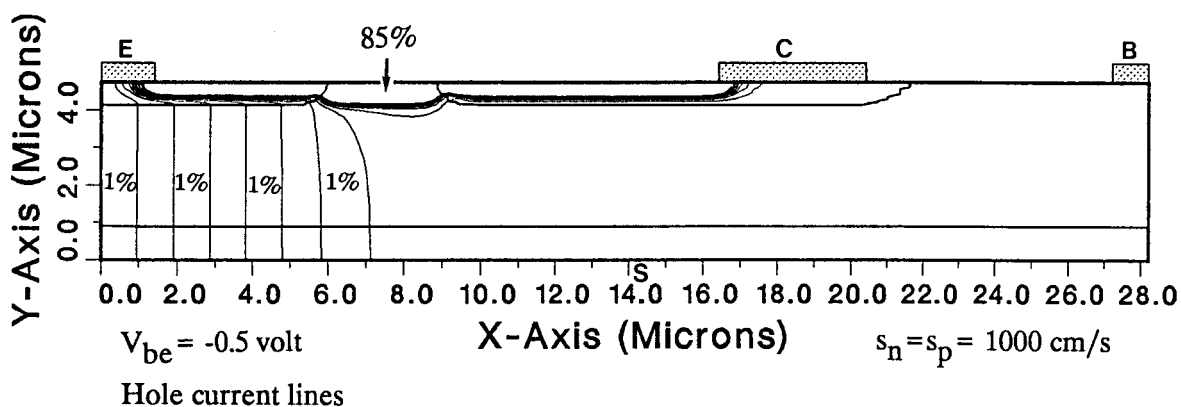
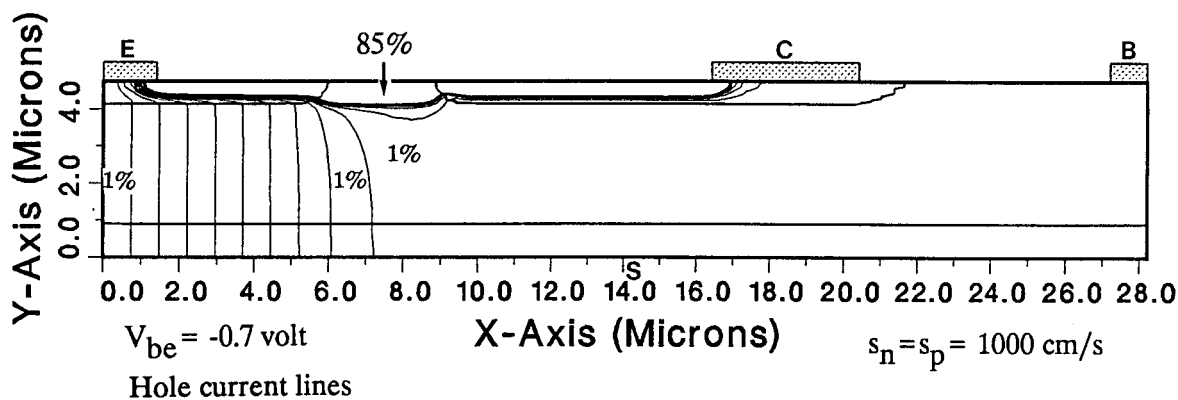


Figure 18: Configuration des lignes de courant de trous pour différentes conditions de polarisation ($s_n = s_p = 1000$ cm/s).

(a): $V_{be} = -0.5$ volt , (b): $V_{be} = -0.7$ volt

VI-3.3 Influence combinée de la recombinaison et de charges fixes d'interface.

L'objet de cette section est d'investiguer les possibles effets induits par la présence de charges fixes d'interface (Q_{ss}). L'ordre de grandeur de la densité de charges rencontrée pour le procédé SUBILO-N est inclus dans l'intervalle 10^{11} - 10^{12} cm^{-2} (N_{ss}) [9]. Ces charges sont positives. Les charges mobiles dues à la contamination ionique (Na^+, K^+) sont par défaut incluses dans la valeur de Q_{ss} . Une densité de charges uniforme de 10^{12} cm^{-2} a donc été introduite dans les calculs. La figure 19 présente les variations des courants terminaux en électrons. Une comparaison avec la figure 7, pour laquelle aucune charge d'interface n'est prise en compte, montre que la recombinaison est fortement enrichie en faible injection ($-0.5 < V_{be} < -0.3$). En revanche, ce courant de recombinaison décroît très rapidement et atteint une valeur inférieure à celle obtenue sans charges d'interface. Cet effet de forte recombinaison à faible niveau d'injection est également observable sur l'évolution des courants terminaux de trous en figure 20 (à comparer avec la figure 9 pour laquelle $Q_{ss} = 0$).

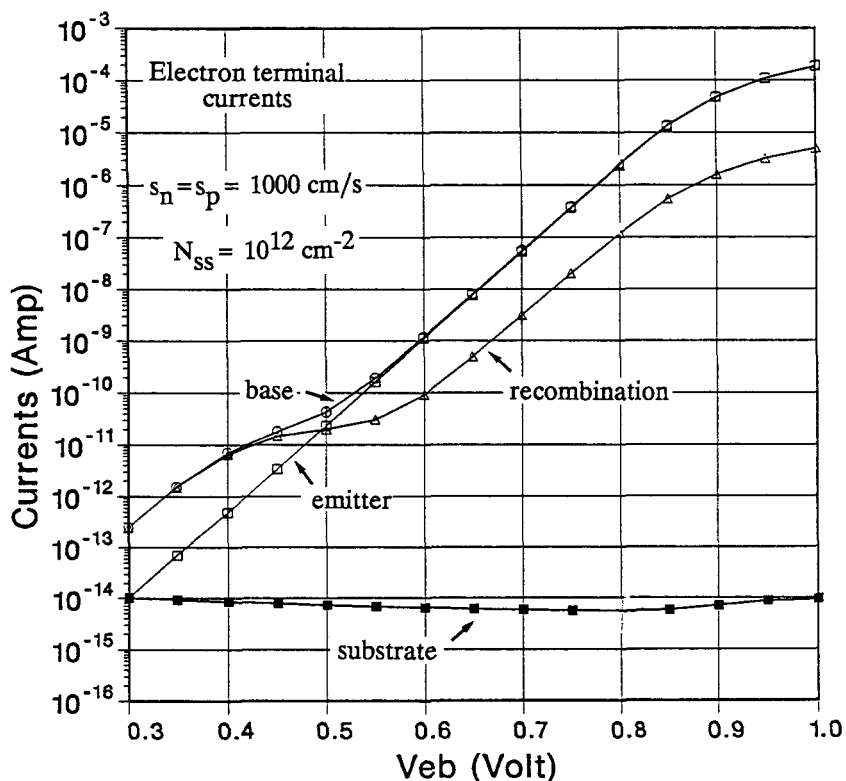


Figure 19: Evolution des courants terminaux d'électrons en fonction de la tension émetteur/base: $s_n = s_p = 1000$ cm/s et $Q_{ss} = q \cdot 10^{12}$ Cb. cm^{-2} .

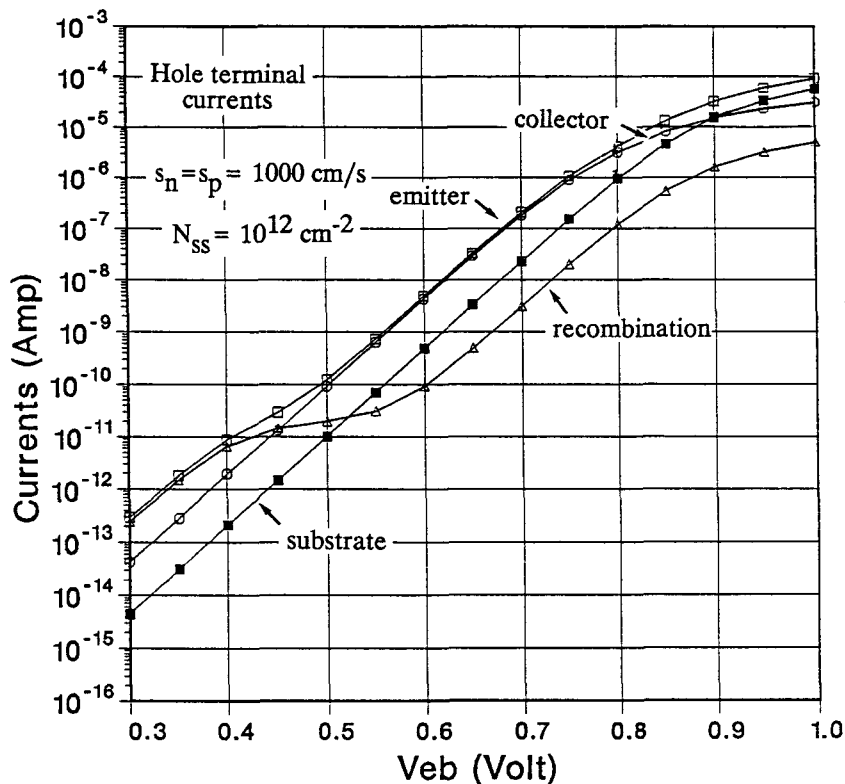


Figure 20: Evolution des courants terminaux de trous en fonction de la tension émetteur/base: $s_n = s_p = 1000$ cm/s et $Q_{ss} = q \cdot 10^{12}$ Cb.cm $^{-2}$.

La figure 21 montre la nouvelle distribution de courant de recombinaison le long de l'interface qui est différente en plusieurs points de celle obtenue sans charge d'interface:

- (i) En faible injection, le pic de recombinaison dans la zone de charge d'espace subit un fort accroissement qui explique l'évolution du courant de recombinaison représenté en figure 19. Cet effet peut être expliqué par le déplacement de la zone de charge d'espace émetteur/base lié à la présence de charges d'interface. Celles-ci provoquent, en effet, une forte déplétion surfacique de trous et un enrichissement de la densité d'électrons. Le phénomène est clairement établi par les profils en porteurs le long de l'interface en présence ou non de charges d'interface (figure 22).

(ii) En moyenne injection, la recombinaison de surface dominante dans la région de base a été établie en l'absence de charge (voir figure 12). Par contre, la déplétion en trous limitent le phénomène de recombinaison en présence de charges d'interface: la recombinaison est donc maintenant dominante dans l'émetteur. Un accroissement du gain en courant est prévisible en moyenne injection.

(iii) En forte injection, la zone d'émetteur gouvernait déjà la recombinaison de surface en l'absence de charges. L'effet de déplétion en trous n'affecte donc pas la distribution de courant recombinaison dans cette zone. Cependant, la différence entre courants recombinaison dans l'émetteur et dans la base est encore accrue.

Les caractéristiques finales de gain en courant sont reportées en figure 23, respectivement pour des densités N_{ss} de $0,5 \cdot 10^{11}$ et 10^{12} cm^{-2} . Ainsi qu'il a été démontré auparavant, la dégradation du gain en faible injection est accrue par la présence de charges positives fixes d'interface. Par contre le régime de moyenne injection bénéficie d'un accroissement de gain lié à la limitation de la recombinaison de surface par effet de déplétion de trous dans la base. Une charge d'interface Q_{ss} égale à $q \cdot 5 \cdot 10^{11} \text{ Cb/cm}^2$ réalise un juste compromis entre les deux effets contradictoires rencontrés en faible et moyenne injection.

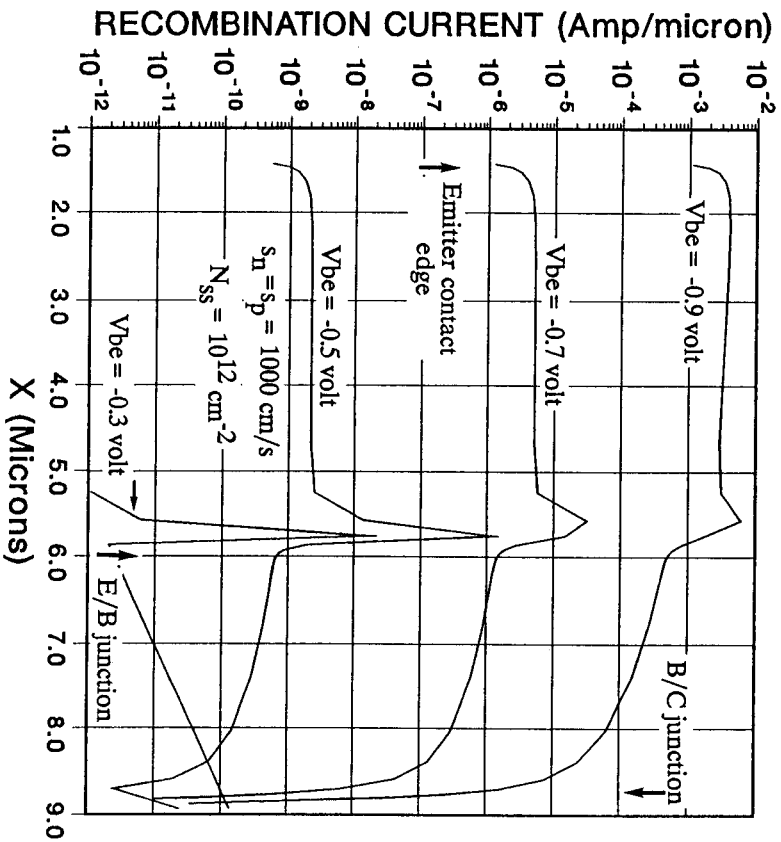


Figure 21: Distribution de courant recombiné le long de l'interface:
 $s_n = s_p = 1000 \text{ cm/s}$ et $Q_{ss} = q \cdot 10^{12} \text{ Ch.cm}^{-2}$.

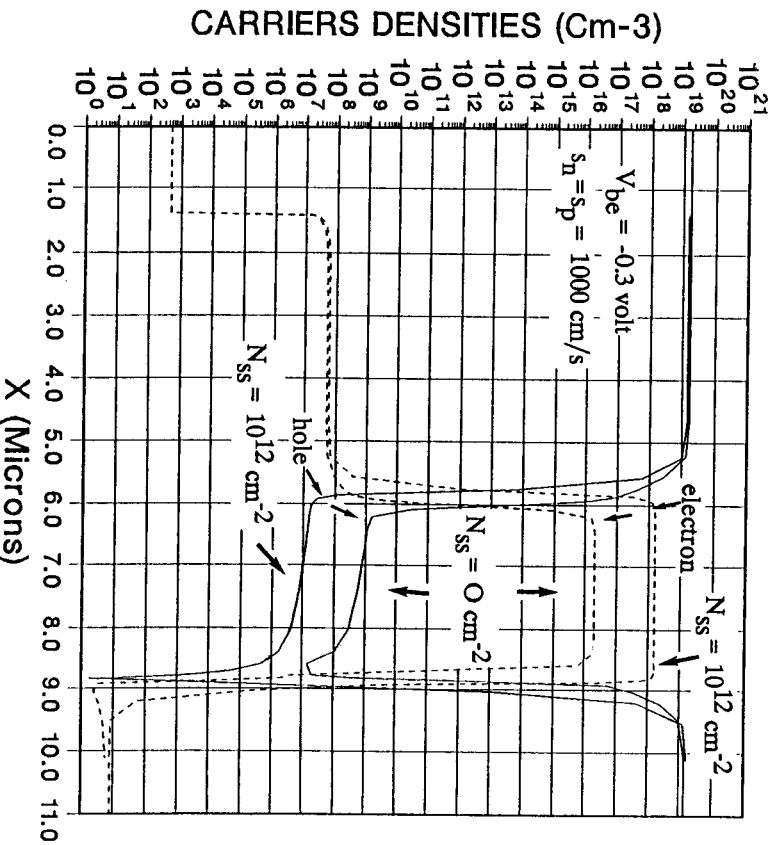


Figure 22: Comparaison des distributions en électrons et en trous le long de l'interface pour des dispositifs affectés ou non d'une charge d'interface.

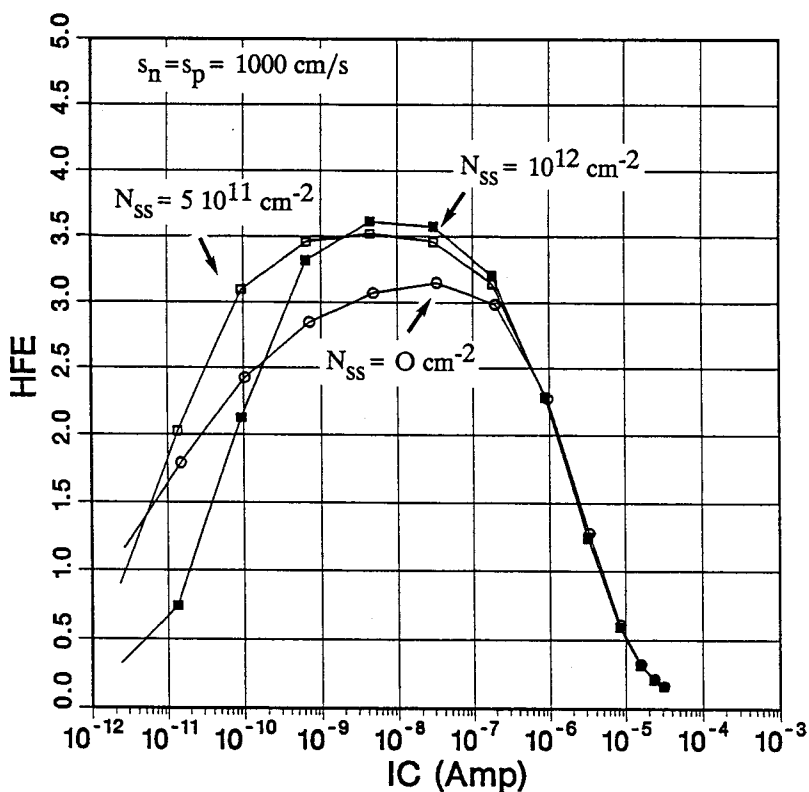


Figure 23: Caractéristiques de gain en courant montrant l'effet des charges fixes d'interface ($s_n = s_p = 1000 \text{ cm/s}$).

VI-4 CONCLUSIONS

L'étude qui vient d'être développée a permis de mettre en évidence l'influence des phénomènes de surface dans le fonctionnement de transistors bipolaires latéraux. Sur la base de cette contribution, les principales conclusions suivantes ont pu être dessinées:

- en régime de faible injection, particulièrement attrayant en application faible puissance, la recombinaison de surface peut avoir un effet dramatique sur le gain en courant. Cette dégradation est liée à un accroissement du courant de base nécessaire à alimenter la recombinaison de surface dans la zone de charge d'espace émetteur/base.

- la présence de charges fixes positives d'interface aggrave le mécanisme de dégradation du gain en faible injection. Par contre, son effet peut être bénéfique en moyenne injection.
- un certain nombre d'informations utiles, telles que l'importance relative de chaque région dans le mécanisme de recombinaison, la configuration des lignes de courant... a été donnée au cours de la présente étude.

Afin d'enrichir les résultats présentés, et de pouvoir aborder ce problème en terme quantitatif, les points suivants sont essentiels:

- caractérisation complète de l'interface Si/SiO₂ afin de connaître de manière précise les charges d'interface, les vitesses de recombinaisons et la répartition de pièges dans la bande interdite. Ces paramètres sont, en effet propres à la technologie étudiée.
- extension des calculs à un domaine tridimensionnel. Ce dernier point est essentiel pour l'obtention de résultats quantitatifs en ce qui concerne des géométries courantes de transistors PNP latéraux.

Une extension immédiate de ce travail concerne l'étude de dispositifs bipolaires compatibles CMOS. En effet, l'intégration de transistors bipolaires latéraux peut être réalisée en technologie CMOS sans modification du procédé initial. Ainsi, l'utilisation de transistors bipolaires compatibles CMOS s'avère être particulièrement attractive dans les applications micropuissance et faible bruit [10] [11], sans avoir systématiquement recours à une technologie Bi-CMOS. Les effets parasites, affectant le fonctionnement de telles structures bipolaires latérales, sont typiquement du même type que ceux étudiés dans ce chapitre.

CHAPITRE VI

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] L. Deferm, S. Decoutere, C. Claeys, G. Declerck, J. Heyman, D. Beernaert, 'The influence of the interface trap density on the performance of bipolar devices', Proc. of BCTM Conference, pp 136-139, 1989.
- [2] C. Chapron, A. Dupont, P. Leduc, 'Bipolar device Modelling at RTC Caen based on unity component model', RTC-Philips internal report 308-85, Octobre 1985.
- [3] H.C. De Graaff, F.M. Klaassen, 'Compact transistor modelling for circuit design', Computational Microelectronics, Ed. S. Selberherr, Springer-Verlag, 1990.
- [4] B. Benameur, 'Etude bidimensionnelle de la répartition des charges stockées dans les transistors bipolaires: théorie et mesure', Thèse de Doctorat présentées à l'Université de Caen, Juillet 1986.
- [5] P. Leduc, 'New geometries of lateral PNP transistors', RTC-Philips Caen internal report, MODN 201, Février 1988.
- [6] E. Dubois, B. Baccus, D. Collard, 'Device simulation of lateral PNP transistor in SUBILO-N technology', ISEN Report n° 1995532, phase 2, Décembre 1989.
- [7] P. Leduc, 'Dispersion des transistors PNP latéraux', RTC-Philips Caen internal report, MODN 219, Novembre 1988.
- [8] K.S. Seo, C.K. Kim, 'On the geometrical factor of lateral PNP transistors', IEEE Trans. Electron Devices, vol. 27, n°1, pp 295-297, Janvier 1980.

- [9] B. Foucher, 'Détermination des densités de charges et de concentrations en ions sodium et potassium dans les oxydes par la méthode C(V) et TVS', RTC-Philips internal note, Novembre 1983.
- [10] E.A. Vittoz, 'MOS transistors operated in the lateral bipolar mode and their application in CMOS technology', J. Solid-State Circuits, Vol. 18, pp 273-279, 1983.
- [11] T.W. Pan, A.A. Abidi, 'A 50-dB variable gain amplifier using parasitic bipolar transistors in CMOS', J. Solid-State Circuits, vol. 24, n°4, Août 1989.

CHAPITRE VII

CONCLUSIONS

Cinq thèmes principaux ont été abordés dans le cadre de ce travail:

- Le premier d'entre-eux concerne la physique des phénomènes de transport et explicite le degré de sophistication des modèles existants. Bien que les dispositifs microdimensionnés nécessitent la mise en oeuvre de modèles de transport de plus en plus complexes, l'approche classique de dérive-diffusion couvre encore un spectre étendu d'applications originales.
- Le second point aborde l'ensemble des techniques numériques nécessaires à la résolution du jeu d'équations décrivant le comportement électrique d'un dispositif. Un compromis a été réalisé dans le choix de la technique de discrétisation en essayant de regrouper les qualités d'une méthode de différences finies pure et d'une technique de différences finies triangulaires. La robustesse des algorithmes et la rapidité d'exécution sont deux points cruciaux retirés de la première méthode. La possibilité de traiter des géométries complexes est un atout dont la méthode, ici mise en oeuvre, a partiellement tiré parti de la seconde technique numérique évoquée.

La mise en évidence et l'interprétation d'effets électriques originaux, relevant de technologies MOS et bipolaire avancées, entrent dans le cadre de trois applications spécifiques du simulateur de dispositif mis au point:

- Les défis à tenir en matière de très haute densité d'intégration MOS passent inévitablement par l'optimisation des structures

d'isolation. Une analyse poussée du fonctionnement électrique de telles structures a été développée par le biais d'une approche analytique, de simulations et de résultats expérimentaux. Les qualités d'isolation sont explicables en termes de hauteur de barrière de potentiel et de longueur effective du canal. Ces deux informations fournissent des éléments de réponse essentiels dans les choix technologiques à réaliser et dans les directions possibles d'optimisation.

- Une contribution à l'étude du phénomène de perçage dans les transistors bipolaires à émetteur muré constitue la seconde application originale de ce travail. La configuration typique d'émetteur et de base murés, contre une isolation du type LOCOS enterré, a révélé une extrême sensibilité à un effet de pincement local de base dégradant les qualités d'immunité au perçage.
- Les performances électriques de transistors bipolaires PNP latéraux sont fortement perturbées par les phénomènes de transport dans la base s'opérant au voisinage de l'interface. L'implication des effets de recombinaison et de charges à l'interface a été investiguée dans le cadre de la troisième application.

Il est important de souligner qu'une approche de simulation de dispositif systématiquement couplée à la simulation de procédé a été mis en oeuvre dans chacune des applications. L'efficacité de cette technique de couplage a été démontrée par la confrontation de résultats de calcul à quelques données expérimentales.

Plusieurs types d'applications entrent dans le prolongement immédiat des travaux qui viennent d'être présentés. Celles-ci ont, par ailleurs, déjà été soulignées dans les conclusions partielles des trois derniers chapitres. Elles concernent:

- L'analyse des propriétés d'isolation en technologie CMOS beaucoup plus sensible à un effet de perçage dans le transistor parasite dont le canal s'étend entre une région de source/drain et un puits de polarisation du transistor complémentaire [1].

- L'étude des phénomènes de perçage en technologie bipolaire auto-alignée pouvant être affectée par une mauvaise connexion base intrinsèque / base extrinsèque ou par un pincement de base dans la région murée de la structure [2].
- L'optimisation de structures bipolaires PNP latérales sur la base d'une caractérisation complète des propriétés d'interface. L'investigation des effets parasites dans les structures bipolaires compatibles CMOS s'inscrit également en parfaite continuité de ce travail [3].

Enfin, il convient d'établir les perspectives de recherche à plus long terme qui concernent:

- L'inclusion d'un modèle sophistiqué de transport permettant de prendre en compte les effets non stationnaires engendrés par le microdimensionnement. Ce point est particulièrement important pour l'optimisation des technologies MOS dont la longueur de grille est inférieure à $0.5 \mu\text{m}$ [4][5]. En outre, des résultats quantitatifs, par exemple sur les effets de courant substrat, ne peuvent être obtenus que par une telle approche.
- L'extension des méthodes de discrétisation par la mise en oeuvre d'une méthode de différences finies triangulaires [6] ou d'une méthode d'éléments finis mixtes. Ce type d'extension représente un point de passage quasi-obligatoire afin de pouvoir traiter des structures complexes sans limitation topologique liée à la discrétisation spatiale du domaine. Ce dernier point ne représente cependant pas une condition suffisante à l'obtention d'un code de simulation flexible et d'utilisation aisée: la fiabilité et la capacité d'extension d'un programme de grande taille est, en effet, fortement liée à la méthodologie adoptée lors de son développement.
- Le développement d'un simulateur pouvant traiter des géométries tridimensionnelles reste un objectif à atteindre à plus long terme [7]. L'exemple des structures bipolaires latérales démontrent l'utilité d'un tel outil. Au delà de ce cas

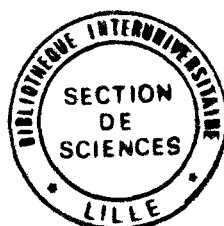
particulier, la disponibilité d'outils tridimensionnels couplés de procédé et de dispositif représente un formidable atout dans le développement des technologies largement submicroniques présentes ou à venir.



CHAPITRE VII

REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] R.C. Vankemmel, K.M. De Meyer, 'A study of the corner effect in trench-like isolated structures', IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 37, n°1, pp 168-176, Janvier 1990.
- [2] D.D.L. Tang, 'Scaling the silicon bipolar transistor', in Submicron integrated circuits', Ed. R.K. Watts, pp 87-121, Wiley, 1989.
- [3] T.W. Pan, A.A. Abidi, 'A 50-dB variable gain amplifier using parasitic bipolar transistors in CMOS', IEEE J. Solid-State Circuits, vol. 24, n°4, Août 1989.
- [4] G. Baccarani, M.R. Wordeman, 'An investigation of steady-state velocity overshoot in silicon', Solid-State Electronics, vol. 28, n°4, pp 407-416, Avril 1985.
- [5] R. Thoma, A. Edmunds, B. Meinerzhagen, H. Peifer, W.L. Engl, 'A generalized hydrodynamic model capable of incorporating Monte Carlo results', IEDM Tech. Dig., pp 139-142, 1989.
- [6] C.H. Price, 'Two-dimensional numerical simulation of semiconductor devices', Stanford University Report MDA 903-79-C-0257, Mai 1982.
- [7] E.M. Buturla, P.E. Cottrell, B.M. Grossman, K.A. Salsburg, 'Finite-element analysis of semiconductor devices: the FIELDAY program', IBM J. Res. Develop., vol. 25, n°4, pp 218-231, Juillet 1981.



RESUME

La simulation de dispositif électrique constitue un moyen efficace d'analyse des phénomènes de transport dans les composants semiconducteurs. Elle est, à ce titre, largement utilisée en tant qu'outil d'optimisation et d'aide au développement de technologies silicium.

Cette thèse propose une contribution à la compréhension de problèmes électriques critiques rencontrés dans des dispositifs fortement influencés par les effets bidimensionnels. Concernant les technologies MOS, l'efficacité d'isolation de structures de type LOCOS est étudiée par le biais d'une approche semi-analytique déduite de simulations couplées procédé/dispositif, d'une part, et de la confrontation à des résultats expérimentaux, d'autre part: les performances d'isolation y sont interprétées en terme de longueur effective de canal et sont conditionnées par la forme et la hauteur de la barrière de potentiel développée sous l'oxyde de champ. Deux thèmes essentiels ont été abordés en technologie bipolaire. Le premier traite du phénomène de perçage dans les transistors NPN à émetteur muré: un pincement de base localisé au voisinage de la structure d'isolation est mis en évidence. La principale conséquence de cet effet réside en une extrême sensibilité des courants de perçage en fonction de légères variations effectuées sur les paramètres nominaux du procédé. Le second thème d'étude dédié aux dispositifs bipolaires concerne les limitations des performances de transistors PNP latéraux. La dégradation du gain en régime de faible injection est expliquée par les phénomènes de recombinaison à l'interface Si/SiO₂. L'effet de charges fixes surfaciques y est également traité.

Afin de pouvoir prendre en compte la spécificité de ces problèmes, un simulateur bidimensionnel de dispositif, IMPACT3.2, a été mis au point. Basé sur une méthode étendue de différences finies rectangulaires, cet outil de simulation a été développé dans le souci de répondre aux exigences suivantes: rapidité d'exécution, traitement de géométries non planes, adaptation aux technologies MOS et bipolaires, couplage à la simulation de procédé.

MOTS-CLES

Simulation de dispositif

Device simulation

Simulation couplée procédé/dispositif

Coupled process/device simulation

Isolation LOCOS

LOCOS isolation

Courants de perçage

Punchthrough currents

Recombinaison de surface

Surface recombination

Méthode des différences finies

Finite differences method