

50376

1994

39

x50376

1994

39

N° d'ordre 1244

THESE

présentée à

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

Pour Obtenir le Grade de Docteur en Electronique

par
Zhizhong WANG

**Modélisation de la Piézorésistivité
du Silicium: Application à la Simulation
de Dispositifs M.O.S.**



Soutenue le 14 Janvier 1994, devant la commission d'examen:

- Président : G. SALMER**
- Rapporteurs : J. L. ROBERT
G. BLASQUEZ**
- Examineurs: D. COLLARD
J. SUSKI
M. LANNOO
V. MOSSER**

SCD LILLE 1



D 030 259490 3

内容摘要

为了模拟、优化和实现集成微型半导体压力传感器，该工作从物理方面对半导体硅中的压阻效应进行了全面研究。基于Bir和Pikus的形变势模型，N型和P型半导体硅的三个基本体压阻系数 Π_{11} 、 Π_{12} 及 Π_{44} 以解析形式被表示出来。在这个压阻模型中，我们引进了压力引起的禁带宽度变化效应并发现该效应当电子和空穴的数量相当时起主导作用，而这正是MOS场效应管在弱反型状态下的情况。同时我们也考虑到杂质浓度对压阻系数的影响。MOS场效应管中的反型层是一个二维系统，在这种情况下，载流子垂直于界面方向的运动是量子化的，这一现象解释了压阻系数对横向电场的依赖关系。综合这些考虑，一个二维和三维混合型硅压阻效应模型被移植到半导体器件电特性模拟软件IMPACT 3.3。利用该模拟软件对N型和P型MOS场效应管的压阻效应进行了大量数值模拟。试验结果和模拟结果的一致证实了所建立的硅压阻效应模型的正确性。



à Tianshu

à mon père

à la mémoire de ma mère

Cette thèse a été préparée
dans le Département ISEN de
l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord
(U.M.R. CNRS 9929)

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

Je tiens sincèrement à remercier Messieurs les Professeurs J. L. ROBERT et G. BLASQUEZ pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant la lourde tâche de rapporteur.

Monsieur V. MOSSER m'a fait l'honneur de participer à ce jury. Je tiens à lui exprimer ici ma profonde gratitude pour son encouragement et sa gentillesse.

Je tiens tout particulièrement à remercier Monsieur J. SUSKI, instigateur de ce travail et SMR Schlumberger Industrie pour le soutien technique qui a permis de mener à bien ces travaux. Je lui exprime également mes sincères remerciements pour son soutien moral et pour les nombreuses discussions constructives que nous avons eues. Que notre amitié continue éternellement.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur D. COLLARD pour l'accueil qu'il m'a réservé au sein du laboratoire de microélectronique et pour le soutien constant qu'il a su déployer tout au long de mon activité. Je le remercie également pour avoir courageusement accepté la lourde tâche de corriger ce manuscrit.

Merci particulièrement à Monsieur M. LANNOO qui a accepté d'être membre de ce jury. Je lui exprime ma reconnaissance pour les aides qu'il m'a apportées dans le travail théorique.

Je tiens à remercier Madame C. PRIESTER pour les conseils scientifiques qu'elle m'a apportés.

Merci enfin à Messieurs E. DUBOIS et B. BACCUS pour leur soutien technique et leur gentillesse, ainsi qu'à tous les membres du laboratoire pour l'aide et pour la compréhension qu'ils m'ont manifestées.

SOMMAIRE

Introduction:	5
Chapitre I: Description Phénoménologique de la Piézorésistance	8
1.1. Introduction:	8
1.2. Résistance:	8
1.3. Coefficients de la Piézorésistance:	9
1.4. Coefficients de l'Elastorésistance:	11
1.5. Transformation du Tenseur Π :	12
1.6. Mesure des Coefficients de Piézorésistance:	15
1.7. Exemples d'application:	20
1.8. Relations entre la Résistivité et la Conductivité:	24
Chapitre II: Effets de Contraintes Mécaniques sur les Bandes d'Energie	26
2.1. Réseau du Silicium et Zone de Brillouin:	26
2.2. Structure de Bandes de Silicium:	28
2.3. Effet de Contraintes Mécaniques:	32
2.3.1. Modification de la Bande de Conduction:	32
2.3.2. Modification de la Bande de Valence:	34

2.3.2.1. Modèle de Faible Energie Cinétique des Trous:	37
2.3.2.1.1. Contrainte Parallèle à la Direction <100>:	37
2.3.2.1.2. Contrainte Parallèle à <111>:	39
2.3.2.1.3. Contrainte Parallèle à <110>:	40
2.3.2.2. Perturbation de la Split-off Bande:	43
2.3.2.3. Modèle de Forte Energie Cinétique des Trous:	45
Chapitre III: Conductivité Electrique	47
3.1. Equation Cinétique de Boltzmann:	48
3.2. Concentration de Porteurs:	50
3.3. Conductivités dans un Semiconducteur:	51
3.3.1. Conductivité de la Bande de Conduction du Silicium:	54
3.3.2. Conductivité de la Bande de Valence du Silicium:	56
Chapitre IV: Piézorésistivité dans le Volume du Silicium	59
4.1. Compression Hydrostatique:	59
4.2. Contrainte Uniaxiale:	63
4.2.1. Piézorésistance du Silicium de Type N:	64
4.2.2. Piézorésistance du Silicium de Type P:	68
4.2.2.1. Modèle de Faible Energie Cinétique des Trous:	68
4.2.2.2. Modèle de Forte Energie Cinétique des Trous:	76

4.3. L'effet d'Impureté sur la Piézorésistivité:	80
Chapitre V: Piézorésistivité Bidimensionnelle	86
5.1. Effet de Quantification:	86
5.1.1. Equation de Schrödinger:	88
5.1.2. Equation de Poisson:	90
5.1.3. Statistique Bidimensionnelle:	91
5.1.4. Méthodes Approximatives:	94
5.1.4.1. Approximation du Potentiel Triangulaire:	94
5.1.4.2. Solution Variationnelle de la Fonction d'onde:	99
5.1.4.3. Etats Excités:	101
5.2. Piézorésistivité Bidimensionnelle:	103
5.2.1. Descriptions Phénoménologiques:	103
5.2.2. Distribution des Porteurs sur les Sous-bandes:	105
5.2.3. Piézorésistance Bidimensionnelle des Electrons:	107
5.2.4. Piézorésistance Bidimensionnelle des Trous:	112
Chapitre VI: Simulation de la Piézorésistivité dans les Transistors MOS	118
6.1. Equations du Système:	118
6.1. Modelisation de Piézorésistivité:	122
6.3. Fabrication et Expérimentation:	124

6.4. Simulation et Comparaison:	126
6.5. Utilisation de Programme:	130
Conclusions:	137
Bibliographie:	139

INTRODUCTION

Résumé

Le rôle important des microcapteurs dans la réalisation des microsystèmes justifie le développement d'outils permettant la simulation de leur comportements. L'objectif de ce travail est d'établir un modèle général de la piézorésistivité dans le volume du silicium et dans les transistors MOS. En introduisant ce modèle dans un simulateur de dispositifs, il permet de simuler l'influence des contraintes mécaniques sur les caractéristiques électriques du dispositif.

INTRODUCTION

De récents progrès ^[1, 2, 3] en procédés des micro-usinages, des assemblages et de la stéréolithographie sont en train de faire naître une nouvelle technologie d'INTEGRATION DES MICROSYSTEMES qui pourrait, dans les prochaines années, changer profondément le paysage industriel en conception et réalisation des systèmes électroniques intégrés. Dans cette évolution de la microélectronique, le silicium reste toujours le matériau principal qui, aujourd'hui bien maîtrisé, garderait la fonction électronique et supporterait d'autres matériaux, tels que les alliages III-V de type GaAs ou InP, auxquels on confierait des fonctions complémentaires: émission et détection optoélectroniques etc. En particulier, les microcapteurs et micro-actionneurs jouent un rôle décisif dans la réalisation des microsystèmes.

Le silicium possède d'intéressantes propriétés physiques et chimiques. Les caractéristiques électriques des dispositifs en silicium peuvent être modifiées par l'application d'un champ physique quelconque ^[2], par exemple, un champ électrique ou un champ de contraintes mécaniques. Elles sont également sensibles à la présence de certains éléments chimiques ^[3]. De ce fait, divers microcapteurs, tels que capteurs mécaniques, physiques, chimiques et biologiques, peuvent être réalisés en silicium avec la technologie des micro-usinages et intégrés avec les circuits de traitement de signal sur une même puce ^[4, 5]. Parmi ces applications, on peut dès à présent, mentionner les capteurs mécaniques qui exploitent l'effet de piézorésistivité du silicium. En outre, les contraintes intrinsèques introduites soit par la différence des coefficients d'expansion de matériaux, soit à l'étape de capsulation, peut également perturber le fonctionnement des dispositifs. Elle pose un problème de plus en plus préoccupant dans la conception de circuits intégrés au fur et à mesure que la miniaturisation des composants élémentaires, c'est à dire des transistors MOS et bipolaires, atteint au domaine submicronique ^[6]. Il est déjà prouvé ^[7] que certaines dégradations de composants sont dues à ces contraintes intrinsèques. Une étude approfondie de l'influence de la contrainte mécanique sur les caractéristiques électriques de dispositifs paraît donc nécessaire à la réalisation des systèmes micromécaniques et au développement des technologies submicroniques.

Les étapes nécessaires à la mise au point d'une technologie sont longues et coûteuses et ceci d'autant plus que la structure des dispositifs devient de plus en plus complexe. Un effort considérable a été poursuivi durant la dernière décennie afin de construire des outils de simulations de dispositifs permettant de répondre aux be-

soins pressants de la technologie. En outre, la réduction des coûts et la puissance des nouveaux moyens de calcul ont largement contribué au développement d'outils de CAO (conception assistée par ordinateur). La simulation de dispositif couplée à la simulation de technologies constitue un moyen efficace d'investigation des phénomènes physiques et surtout permet de déterminer l'influence des procédés sur les caractéristiques électriques finales des dispositifs. Aujourd'hui, Il existe déjà des outils informatiques de conception au niveau de la microélectronique. Ces outils ne nécessiteront que d'être modifiés pour prendre en compte les nouveaux aspects dans la fabrication des microsystèmes.

Vus les arguments précédemment annoncés, il y a un grand intérêt à établir un modèle physique de la piézorésistivité du silicium et à l'introduire dans un simulateur de technologie/dispositif. D'une part, il permet d'évaluer l'influence des contraintes intrinsèques induites par chaque étape de fabrication sur les caractéristiques électriques de dispositifs et ainsi d'améliorer la technologie. D'autre part, il peut être mis à profit afin d'optimiser la technologie et obtenir ainsi un capteur mécanique le plus sensible que possible. Pour ce faire, il est indispensable d'avoir une bonne modélisation de l'effet de piézorésistivité du silicium.

La piézorésistivité est la variation de résistivité d'un corps sous l'action d'une modification des contraintes mécaniques qui lui sont appliquées. Un effet important de la piézorésistivité dans les matériaux semiconducteurs a été pour la première fois découvert par C.S.Smith [8] en 1954. A partir de cette date, un effort considérable a été porté afin d'étudier ce phénomène dans les semiconducteurs [7, 9, 10, 11]. En fait, l'effet de piézorésistivité d'un semiconducteur est due à la modification des bandes d'énergie induites par l'application d'une contrainte mécanique. Ceci modifie le processus de transport des porteurs, ainsi que leur mobilité.

Ce travail a d'abord pour but d'étudier les phénomènes de piézorésistivité du silicium et plus particulièrement la piézorésistivité bidimensionnelle dans un transistor MOS. La présence d'un champ électrique transversal perpendiculaire à l'interface Si/SiO₂ dans la couche d'inversion d'un transistor MOS influence la piézorésistivité [10]. En effet, le champ perpendiculaire à l'interface Si/SiO₂ crée un puits de potentiel qui confine les porteurs dans un espace bidimensionnel parallèle à la surface. Ce puits de potentiel quantifie le mouvement des porteurs perpendiculaire à la surface et forme des sousbandes [12]. Ceci est la raison de la dépendance de coefficients des piézorésistivité avec le champ transversal dans un transistor MOS.

A la suite de l'étude théorique de l'effet de piézorésistivité bidimensionnelle, un modèle bidimensionnelle peut être établi et introduit dans le simulateur de procédé/dispositif IMPACT [13]. Durant ce travail, nous avons introduit les coefficients de piézorésistivité sous forme analytique qui sont définis comme les variations relatives

de résistivité par unité de contrainte appliquée. Ceci permet d'abord d'éviter un calcul numérique self-consistent qui exige une lourde consommation inexploitable de temps CPU. Ensuite, comme il est pratiquement impossible de maîtriser tous les mécanismes concernés, l'approche analytique avec certains paramètres d'ajustement s'est trouvée plus envisageable.

Dans un premier temps, nous étudions l'effet de piézorésistivité dans un volume fini du silicium ceci étant la base pour le calcul des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle. Dans le premier chapitre, une description phénoménologique de l'effet de piézorésistivité dans un semiconducteur de structure cubique est présentée; Le deuxième chapitre rappelle d'abord la structure de bandes énergétiques du silicium, ensuite étudie l'influence des contraintes mécaniques sur les bandes de conduction et valence du silicium. Les variations de masses effectives des porteurs induites par la contrainte font également l'objet de ce chapitre; Le troisième chapitre rappelle le processus de transport de porteurs dans un semiconducteur et la définition générale de la conductivité; Le quatrième chapitre étudie en détail la piézorésistivité de volume du silicium. Les méthodes utilisées dans ce chapitre seront appliquées à l'effet de piézorésistivité bidimensionnelle dans un transistor MOS.

Afin d'expliquer la dépendance des coefficients de piézorésistivité avec le champ électrique transversal dans une structure MOS, le chapitre 5 étudie d'abord la quantification du mouvement de porteurs perpendiculaire à l'interface SiO_2/Si . Ensuite, les coefficients piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} sont déduits pour les couches d'inversion de type N et P. La piézorésistivité en régime d'accumulation y est également étudiée.

Le chapitre 6 s'intéresse aux applications de la piézorésistivité. Un modèle mixte 2D/3D de piézorésistivité est introduit dans le simulateur de technologie/dispositif IMPACT. Les résultats de simulations sont comparés aux résultats expérimentaux. Pour terminer, la conclusion nous permettra d'avoir les perspectives plus ouvertes par ce travail.

CHAPITRE I

DESCRIPTION PHENOMENOLOGIQUE DE LA PIEZORESISTANCE

Résumé

Une analyse phénoménologique de la piézorésistance fait l'objet de ce chapitre. Les résultats expérimentaux sont présentés Deux exemples sont donnés pour l'application de la piézorésistivité. La définition des relations entre la conductivité et la résistivité permet d'introduire le calcul des coefficients de piézorésistivité dans les chapitres suivants.

CHAPITRE I

DESCRIPTION PHENOMENOLOGIQUE DE LA PIEZORESISTANCE

1.1. INTRODUCTION:

Généralement, les propriétés physiques d'un matériau solide dépendent de son état de déformation. Par exemple, l'application d'une contrainte mécanique fait varier la résistivité électrique [8]. La variation de la résistivité électrique d'un matériau solide en fonction de la déformation est nommée l'effet d'élastorésistivité. Cependant, ce phénomène s'appelle "piézorésistivité" si la variation de résistivité est considérée comme la conséquence de l'action d'une contrainte. Puisque le tenseur de constante élastique définit la relation entre la déformation et la contrainte, la connaissance d'un effet induit la connaissance de l'autre si les constantes élastiques sont connues. Normalement, l'interprétation théorique de ce phénomène par les paramètres fondamentaux du matériau est plus facile à formater en terme de l'effet d'élastorésistivité, mais il est plus pratique d'utiliser la définition de l'effet de piézorésistivité pour la confrontation expérimentale [2].

Une description phénoménologique de la résistance et de la piézorésistance sera donnée dans ce chapitre. La transformation du tenseur des coefficients piézorésistives sera également étudiée. La discussion se limitera au problème de la piézorésistivité tridimensionnelle. Le problème concernant le système bidimensionnel fera le sujet du chapitre VI. Deux exemples d'application de la piézorésistance de silicium seront présentés. On finira ce chapitre par établir des relations spécifiques entre la résistivité et la conductivité.

1.2. RESISTANCE:

La résistivité électrique d'un matériau quelconque peut être décrite par un tenseur symétrique d'ordre deux. On note habituellement ce tenseur ρ qui contient six éléments indépendants:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{bmatrix} \quad (1-1)$$

où $\rho_{21}=\rho_{12}$, $\rho_{31}=\rho_{13}$, $\rho_{32}=\rho_{23}$. Les tenseurs, tel que ρ , qui dépendent des propriétés d'un cristal, doivent respecter sa symétrie cristalline. Cette condition conduit à cer-

taines relations entre les différents éléments du tenseur ρ qui réduisent le nombre d'éléments indépendants. L'influence de la symétrie cristalline sur la propriété du tenseur ρ a été étudiée en détail par Smith [14]. La réduction du tenseur ρ en fonction des structures cristallines des semiconducteurs est donnée dans le tableau (1-1). Pour une structure cubique telle que celle du silicium, le tenseur de la résistivité se réduit à un scalaire.

Table 1-1: La forme de tenseur ρ pour certains systèmes cristallins, tous les éléments nondiagonaux sont nuls [2].

classes symétriques	éléments indépendants
Trigonal Tétragonal Hexagonal	$\rho_{11} = \rho_{22} \neq 0$ $\rho_{33} \neq 0$
Cubique	$\rho_{11} = \rho_{22} = \rho_{33} \neq 0$

1.3. COEFFICIENTS DE LA PIEZORESISTANCE:

La résistivité d'un solide se modifie sous l'action d'une contrainte X qui est également un tenseur d'ordre deux. La résistivité ρ est donc une fonction de la contrainte X qui peut se mettre sous la forme suivante:

$$\rho_{ij} = \rho_{ij}(X) \quad (1-2)$$

En développant ρ_{ij} autour de l'état sans contrainte, on obtient au premier ordre:

$$\rho_{ij} = \rho_{ij0} + \sum_{k,l} \Pi_{ijkl} \chi_{kl} \quad (1-3)$$

où ρ_{ij0} est la résistivité à l'état sans contrainte. Le deuxième terme de l'équation (1-3) correspond à la variation de la résistivité ρ due à l'application de la contrainte X :

$$\delta\rho_{ij} = \sum_{k,l} \Pi_{ijkl} \chi_{kl} \quad (1-4)$$

où Π_{ijkl} est un élément de piézorésistance Π qui est un tenseur d'ordre quatre. Puisque le tenseur de résistivité ρ et celui de contrainte X sont tous les deux symétriques par rapport aux indices i et j , le tenseur de piézorésistance Π possède également cette propriété:

$$\Pi_{ijkl} = \Pi_{jikl} = \Pi_{ijlk} = \Pi_{jilk} \quad (1-5)$$

Par conséquent, l'équation (1-4) peut être simplifiée en utilisant un seul indice pour la résistivité ρ_{ij} et la contrainte χ_{ij} , et un double indice pour la piézorésistance Π_{ijkl} avec la convention suivante [2]:

Table 1-2: simplification des indices

11	22	33	23	31	12
1	2	3	4	5	6

Table 1-3: La forme de tenseur $\Pi_{\omega\lambda}$ pour certains systèmes cristallins dans le système cristallographique [2].

Système	$\Pi_{\omega\lambda}$
Trigonal Hexagonal	$\begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{13} & \Pi_{14} & \Pi_{15} & \Pi_{16} \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{13} & -\Pi_{14} & -\Pi_{15} & -\Pi_{16} \\ \Pi_{31} & \Pi_{31} & \Pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{41} & -\Pi_{41} & 0 & \Pi_{44} & \Pi_{45} & 2\Pi_{51} \\ \Pi_{51} & -\Pi_{51} & 0 & -\Pi_{45} & \Pi_{44} & 2\Pi_{41} \\ (-\Pi_{16}/2) & (\Pi_{16}/2) & 0 & -\Pi_{15} & \Pi_{14} & (\Pi_{11} - \Pi_{12}) \end{bmatrix}$
Tetragonal	$\begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{13} & 0 & 0 & \Pi_{16} \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{13} & 0 & 0 & -\Pi_{16} \\ \Pi_{31} & \Pi_{31} & \Pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & \Pi_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Pi_{45} & \Pi_{44} & 0 \\ \Pi_{16} & -\Pi_{16} & 0 & 0 & 0 & \Pi_{66} \end{bmatrix}$
Cubique	$\begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{12} & \Pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} \end{bmatrix}$

Ainsi, la résistivité ρ et la contrainte χ se transforment en vecteurs:

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \\ \rho_5 \\ \rho_6 \end{bmatrix} \quad \chi = \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \chi_3 \\ \chi_4 \\ \chi_5 \\ \chi_6 \end{bmatrix} \quad (1-6)$$

Quant au tenseur Π_{ijkl} , il se présente comme un tenseur d'ordre deux dont les éléments sont tels que:

$$\Pi_{\omega\lambda} = \begin{cases} \Pi_{ijkl} & \lambda = 1, 2, 3 \\ 2\Pi_{ijkl} & \lambda = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (1-7)$$

Après les simplifications, l'équation (1-4) prend la forme suivante:

$$\delta\rho_{\omega} = \sum_{\lambda} \Pi_{\omega\lambda} \chi_{\lambda} \quad (1-8)$$

La symétrie du cristal impose également des conditions aux composantes du tenseur $\Pi_{\omega\lambda}$. Le tableau (1-3) présente les tenseurs $\Pi_{\omega\lambda}$ pour certains systèmes cristallins. On voit qu'il n'existe que trois composantes indépendants pour les cristaux de structure cubique tel que silicium.

1.4. COEFFICIENTS DE L'ELASTORESISTANCE:

Si la variation de la résistivité est exprimée en fonction de la déformation de cristal, le phénomène est appelé l'effet d'élastorésistance. La relation entre la variation de résistivité $\delta\rho_{\omega}$ et la déformation ε_{λ} est définie par les coefficients d'élastorésistance $m_{\omega\lambda}$:

$$\delta\rho_{\omega} = \sum_{\lambda} m_{\omega\lambda} \varepsilon_{\lambda} \quad (1-9)$$

Entre la déformation ε_{λ} et la contrainte χ_{κ} , il existe une relation analogue:

$$\varepsilon_{\lambda} = \sum_{\kappa} S_{\lambda\kappa} \chi_{\kappa} \quad (1-10)$$

où $S_{\lambda\kappa}$ sont les constants de rigidité du matériau considéré. Etant donné un cristal, le tenseur de coefficients d'élastorésistance m et le tenseur des constants de rigidité S ont la même structure celui de coefficients de piézorésistance Π [14]. Pour un cristal possédant une structure cubique, $m_{\omega\lambda}$ et $S_{\lambda\kappa}$ sont donnés par les équations suivantes:

$$m_{\omega\lambda} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{12} & 0 & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{11} & m_{12} & 0 & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{12} & m_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_{44} \end{bmatrix} \quad S_{\omega\lambda} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \quad (1-11)$$

A l'aide des équations (1-8), (1-9) et (1-10), on peut trouver la relation entre $m_{\omega\lambda}$ et $\Pi_{\omega\lambda}$:

$$\Pi_{\omega\kappa} = \sum_{\lambda} S_{\omega\lambda} m_{\lambda\kappa} \quad (1-12)$$

L'équation (1-12) indique que la détermination de m ou Π est équivalente une fois connu le tenseur de rigidité S . Les coefficients d'élastorésistivité m se prête correctement à une étude théorique. Par contre, les coefficients de piézorésistance Π sont plus adaptés à la confrontation expérimentale.

1.5. TRANSFORMATION DU TENSEUR Π :

La section précédente a défini les coefficients de piézorésistance $\Pi_{\omega\lambda}$ dans le système cristallographique. Dans la pratique, l'effet de piézorésistivité est souvent mis en profit pour une géométrie d'axe spécifique. Pour obtenir les coefficients de piézorésistance correspondants, il faut effectuer une transformation du système cristallographique à ce système.

Notons les bases cristallographiques e_1, e_2, e_3 et les bases nouvelles e_1', e_2', e_3' (voir la figure 1-1), la relation entre les deux bases s'écrit:

$$\begin{bmatrix} e_1' \\ e_2' \\ e_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} \quad (1-13)$$

où w_{ij} sont les cosinus directeurs du changement de l'axe. En terme d'angles d'Euler, les cosinus directeurs s'écrivent:

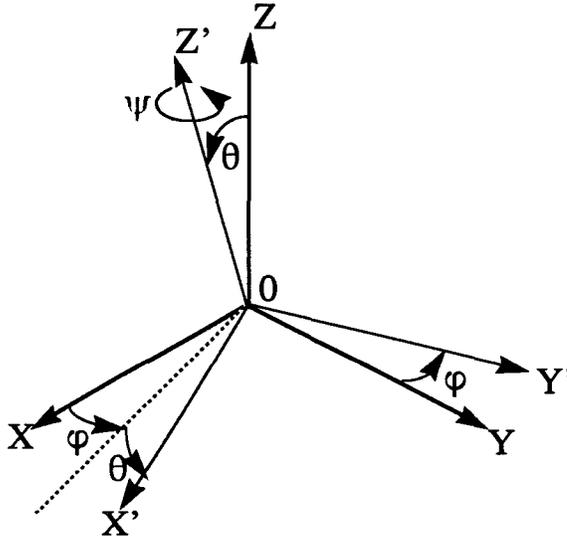


Fig. 1-1: Transformation du système.

$$a = \begin{bmatrix} l_1 & m_1 & n_1 \\ l_2 & m_2 & n_2 \\ l_3 & m_3 & n_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (c\phi c\theta c\psi - s\phi s\psi) & (s\phi c\theta c\psi + c\phi s\psi) & (-s\theta c\psi) \\ (-c\phi c\theta s\psi - s\phi c\psi) & (-s\phi c\theta s\psi + c\phi c\psi) & (s\theta s\psi) \\ (c\phi s\theta) & (s\phi s\theta) & (c\theta) \end{bmatrix} \quad (1-14)$$

où les coefficients w_{ij} sont remplacés par la notation conventionnelle l_i , m_i et n_i et $c\phi = \cos\phi$, $s\phi = \sin\phi$, etc. En notation de matrice compacte, la transformation de la résistivité ρ , qui est un tenseur d'ordre 2 décrit par l'équation (1-1), se fait sous forme suivante:

$$\rho' = a\rho a^{-1} \quad (1-15)$$

où a^{-1} est l'inverse du tenseur de transformation a . Si la résistivité prend la forme d'un vecteur de dimension 6, l'équation (1-15) peut être écrite sous une autre forme équivalente [14].

$$\begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \\ \rho_5 \\ \rho_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & n_1^2 & 2m_1n_1 & 2n_1l_1 & 2l_1m_1 \\ l_2^2 & m_2^2 & n_2^2 & 2m_2n_2 & 2n_2l_2 & 2l_2m_2 \\ l_3^2 & m_3^2 & n_3^2 & 2m_3n_3 & 2n_3l_3 & 2l_3m_3 \\ l_2l_3 & m_2m_3 & n_2n_3 & m_2n_3 + n_2m_3 & l_2n_3 + n_2l_3 & l_2m_3 + m_2l_3 \\ l_3l_1 & m_3m_1 & n_3n_1 & m_1n_3 + n_1m_3 & l_1n_3 + n_1l_3 & l_1m_3 + m_1l_3 \\ l_1l_2 & m_1m_2 & n_1n_2 & m_1n_2 + n_1m_2 & l_1n_2 + n_1l_2 & l_1m_2 + m_1l_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \\ \rho_5 \\ \rho_6 \end{bmatrix} \quad (1-16)$$

où la transformation est représentée par un tenseur de 6 par 6 qui sera ci-dessous noté α . Pour le tenseur de piézorésistivité Π sous forme de deux indices, la transformation est donnée par:

$$\Pi' = \alpha \Pi \alpha^{-1} \quad (1-17)$$

où α^{-1} , l'inverse du tenseur α , peut être obtenu en transposant les lignes et colonnes du tenseur α mais en laissant le facteur 2 dans la partie de trois par trois en haut et à droite.

Table 1-4: Transformation des coefficients de piézorésistance dans un cristal du système cubique^[15], $\Pi_e = \Pi_{11} - \Pi_{12} - \Pi_{44}$.

Relations typiques	Equivalence
$\Pi'_{11} = \Pi_{11} - 2\Pi_e (l_1^2 m_1^2 + m_1^2 n_1^2 + n_1^2 l_1^2)$	$\Pi'_{22} \quad \Pi'_{33}$
$\Pi'_{12} = \Pi_{12} + \Pi_e (l_1^2 l_2^2 + m_1^2 m_2^2 + n_1^2 n_2^2)$	$\Pi'_{13} \quad \Pi'_{23}$
$\Pi'_{14} = 2\Pi_e (l_1^2 l_2 l_3 + m_1^2 m_2 m_3 + n_1^2 n_2 n_3)$	$\Pi'_{15} \quad \Pi'_{16} \quad \Pi'_{24}$ $\Pi'_{25} \quad \Pi'_{26} \quad \Pi'_{34}$ $\Pi'_{35} \quad \Pi'_{36} \quad \Pi'_{45}$ $\Pi'_{46} \quad \Pi'_{56}$
$\Pi'_{44} = \Pi_{44} + 2\Pi_e (l_2^2 l_3^2 + m_2^2 m_3^2 + n_2^2 n_3^2)$	$\Pi'_{55} \quad \Pi'_{66}$

A partir de l'équation (1-17), les nouveaux coefficients de piézorésistance Π' pour un cristal cubique peuvent être trouvés et sont donnés dans le tableau 1-4 où $\Pi_{ij}' = \Pi_{ji}'$ et $\Pi_e = \Pi_{11} - \Pi_{12} - \Pi_{44}$. Les cosinus directeurs pour un coefficient particulier sont déterminés par les indices, par exemple, si l'indice est 35, qui représente 3331, le facteur géométrique est:

$$(l_3^3 l_1 + m_3^3 m_1 + n_3^3 n_1) = (l_3^3 l_1 + m_3^3 m_1 + n_3^3 n_1) \quad (1-18)$$

Les deux coefficients Π_{11}' et Π_{12}' jouent un rôle important dans l'application de la piézorésistivité, ils sont nommés respectivement le coefficient longitudinal Π_l et le coefficient transversal Π_t . Si l'axe X' est orienté dans la direction [110], Π_l et Π_t sont calculés par les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} \Pi_l &= 1/2 (\Pi_{11} + \Pi_{12} + \Pi_{44}) \\ \Pi_t &= 1/2 (\Pi_{11} + \Pi_{12} - \Pi_{44}) \end{aligned} \quad (1-19)$$

Ce sont ces deux coefficients qui seront utilisés dans les mesure expérimentales et la simulation de ce travail.

1.6. MESURE DES COEFFICIENTS DE PIEZORESISTANCE:

Nous nous limitons aux cristaux possédant une structure cubique. Dans ce cas, la résistivité du cristal s'exprime sous la forme suivante:

$$\rho = \rho_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1-20)$$

où ρ_0 est la résistivité du cristal à l'état sans contrainte. Dans la pratique, les coefficients de piézorésistance sont définis en divisant l'équation (1-8) par la valeur ρ_0 :

$$\Pi_{w\lambda} = \frac{\delta \rho_w}{\rho_0 X_\lambda} \quad (1-21)$$

Soumettant le cristal à un champ électrique, la densité de courant électrique est donnée par l'équation suivante:

$$\begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{31} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{23} & \rho_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix} \quad (1-22)$$

En maintenant le courant constant, l'application d'une contrainte mécanique entraîne un changement de la résistivité qui induit une variation du champ électrique elle-même mesurable. Ceci peut être décrit par:

$$\begin{bmatrix} \delta\rho_{11} & \delta\rho_{12} & \delta\rho_{31} \\ \delta\rho_{12} & \delta\rho_{22} & \delta\rho_{23} \\ \delta\rho_{31} & \delta\rho_{23} & \delta\rho_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta E_1 \\ \delta E_2 \\ \delta E_3 \end{bmatrix} \quad (1-23)$$

Cette équation donne un moyen de mesurer les coefficients de piézorésistance. Les échantillons du cristal sont préparés sous forme de barreau de section rectangulaire. Les axes du système sont définis par les arêtes du barreau. La figure 1-2 présente les trois configurations permettant de mesurer les trois coefficients de piézorésistance Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} pour un cristal cubique. La mesure directe du coefficient Π_{44} conformément à la figure 1-2b est difficile à réaliser. Par contre, l'équation (1-19) indique qu'il est possible de déduire le coefficient Π_{44} des coefficients longitudinal et transversal de piézorésistivité Π_l et Π_t mesurés dans un barreau de cristal orienté dans la direction [110]. Si la contrainte appliquée est suffisamment faible, la résistivité du cristal varie linéairement avec cette contrainte. Le tableau 1-5 présente les résultats expérimentaux pour le silicium de type N et P.

Table 1-5: Les valeurs des coefficients de piézorésistance du silicium de type n et p ^[16] pour de faible valeur dopage, en unit de $1 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyne}$.

	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}	Π_l (110)	Π_t (110)
N-type Si	-102.2	53.4	-13.6	-31.2	-17.6
P-type Si	6.6	-1.1	138.4	71.8	-66.4

L'influence de la concentration d'impuretés sur les coefficients de piézorésistance du silicium devient important dans le cas de forte dopage. La figure 1-3 ^[17] montre que le coefficient de piézorésistance Π_{11} pour le silicium de type n varie fortement pour des concentrations d'impureté supérieures à $1 \times 10^{18} / \text{cm}^3$. L'évolution des coefficients Π_{11} en fonction de la concentration d'impureté peut être expliquée par le mécanisme du transfert des électrons entre les différentes vallées figurant dans la bande de conduction.

L'évolution du coefficient Π_{44} avec la concentration d'impureté, mesuré à la température de 300K pour le silicium de type n, est présentée dans la figure 1-4 ^[17]. Lorsque la concentration d'impureté atteint la valeur de $5 \times 10^{19} / \text{cm}^3$, le coefficient

Π_{44} augmente brutalement. La différence entre les variations de Π_{11} et Π_{44} en fonction de la concentration indique que les deux coefficients sont d'origines différentes. En effet, le coefficient Π_{44} pour le silicium de type n est dû à la variation de la masse effective des électrons.

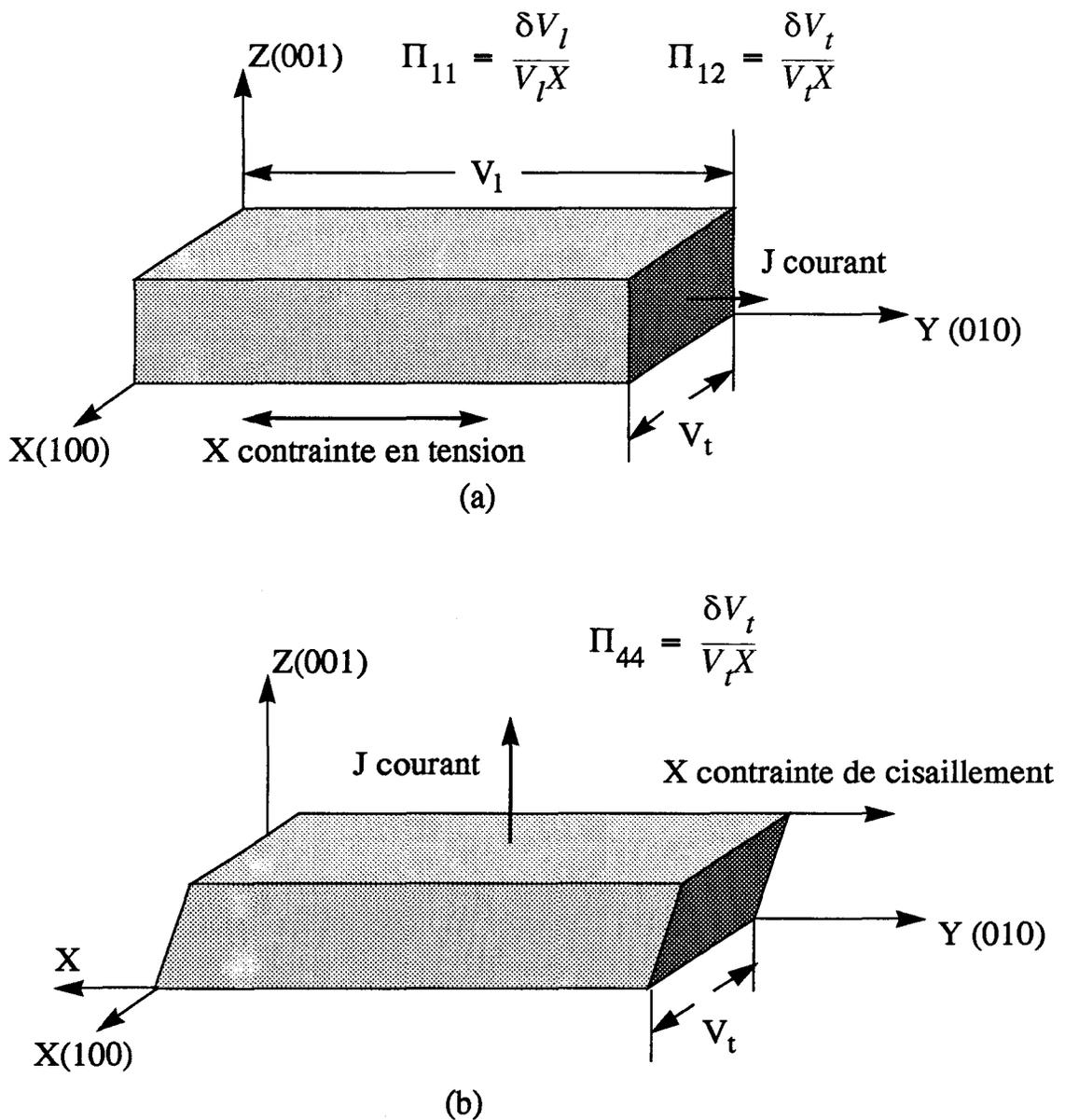


Fig. 1-2: les configurations de mesure des coefficients de piézorésistance dans un cristal de structure cubique sous l'application d'une contrainte uniaxiale. Dans la configuration (a), Π_{11} et Π_{12} sont mesurés, la configuration (b) permet d'obtenir le coefficient Π_{44} .

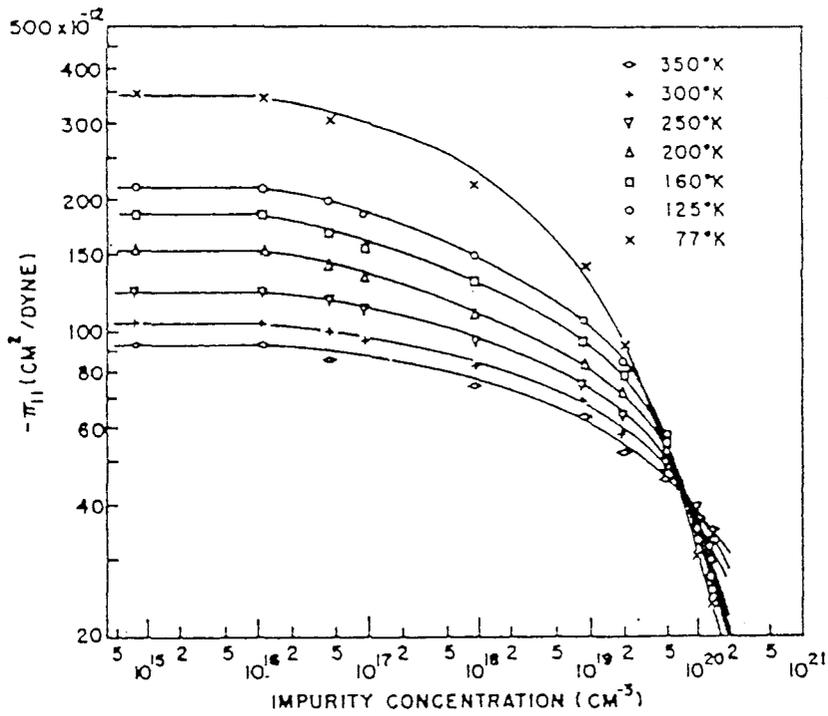


Fig. 1-3: La variation de Π_{11} du silicium de type n avec la concentration d'impuretés avec la température comme paramètre.

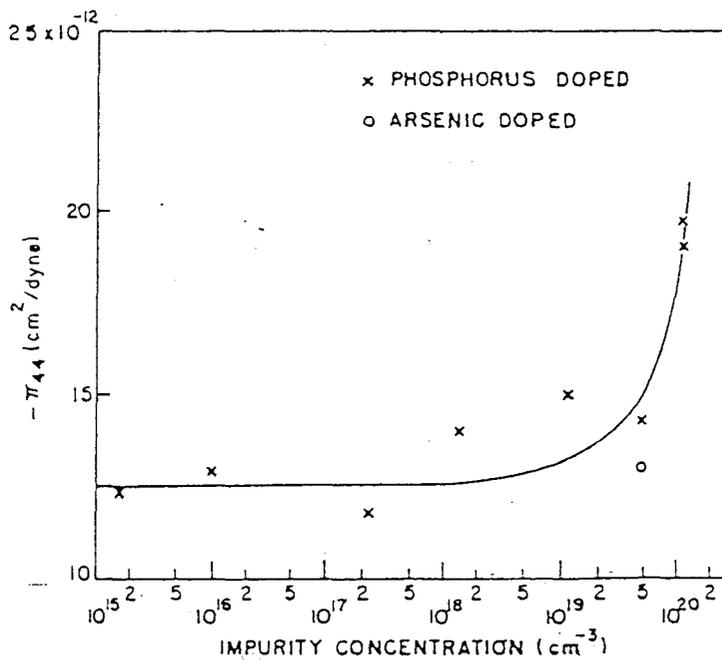


Fig. 1-4: La variation de coefficient de piézorésistance Π_{44} en fonction de la concentration d'impuretés à la température de 300K.

Le coefficient Π_{12} pour le silicium de type n dépend de la concentration d'impureté de la même manière que Π_{11} . Quant aux coefficients pour le silicium de type p, leurs évolutions avec la concentration d'impureté peuvent être expliqués en combinant les deux mécanismes induites par la contrainte: l'effet du transfert de porteurs et la variation de la masse effective des porteurs.

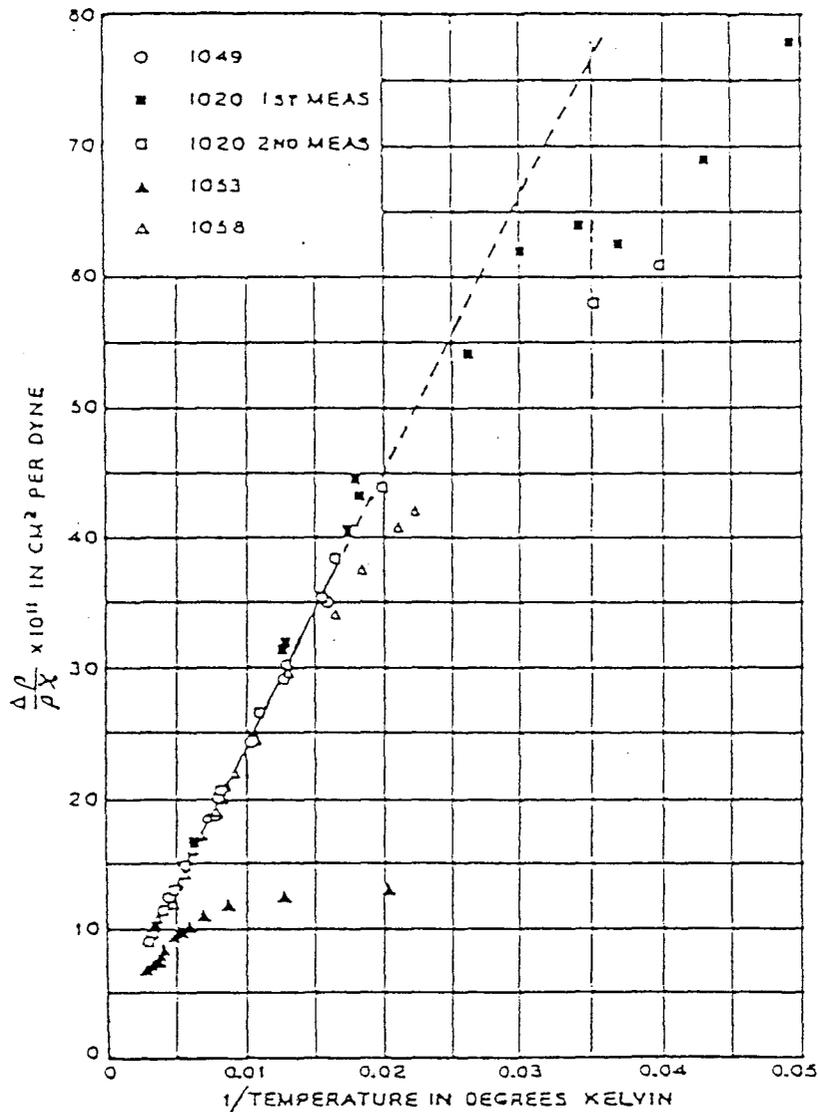


Fig. 1-5: Variation de piézorésistance avec la température. Les points supérieurs représente la fonction de $\Pi_{11n} = \Pi_{11n}(1/T)$ pour le silicium de type n, les points inférieurs correspondent à la fonction de $\Pi_{1p} = \Pi_{1p}(1/T)$ pour le silicium de type p (par rapport à la direction [110]).

La dépendance de la piézorésistance avec la température est également importante pour la réalisation de capteurs fondés sur le principe de la piézorésistivité. La figure 1-5 montre la variation du coefficient Π_{11n} pour le silicium de type n et celle du coefficient longitudinal Π_{lp} pour le silicium de type p (par rapport à la direction $\langle 110 \rangle$) avec la température [18]. Les résultats expérimentaux montrent que les deux coefficients de piézorésistance du silicium Π_{11n} et Π_{lp} varient linéairement avec l'inverse de la température. Les autres coefficients possèdent la même dépendance thermique que Π_{11n} et Π_{lp} .

1.7. EXEMPLES D'APPLICATION:

Le premier exemple d'application de la piézorésistivité s'agit d'un capteur de pression dont les éléments sensibles sont des résistances diffusées dans une membrane de silicium. La figure 1-6 présente une structure typique [19, 20] de ce type de capteurs. La technologie de microgravure anisotrope permet de former une membrane dans un substrat du silicium orienté $\langle 001 \rangle$. Il y a deux résistances parallèles aux bords de la membrane, les deux autres y étant perpendiculaires. Généralement, les bords de membrane prennent les directions $\{110\}$. Les quatre résistances sont reliées à former un pont de Wheatstone. Cette configuration permet d'obtenir une plus grande sensibilité car les coefficients piézorésistives longitudinal et transversal Π_l et Π_t du silicium de type p sont de signes opposés.

Une pression appuyant au dessus de la membrane carrée crée une contrainte perpendiculaire à chaque côté de la membrane. Cette contrainte est proportionnelle à la pression appliquée:

$$X = K \times P \tag{1-23}$$

où X est la contrainte au bord de la membrane, P est la pression et K est une constante qui dépend de l'épaisseur et la dimension de membrane et des autres paramètres. La figure 1-6(c) montre que la tension de sortie est donnée par:

$$V_{out} = V_A - V_B \tag{1-24}$$

La variation relative de la tension de sortie V_{out} est calculée par:

$$\frac{\Delta V_{out}}{V_{cc}} = \frac{\Delta R_2 (R_1 + R_2) - R_2 (\Delta R_1 + \Delta R_2)}{(R_1 + R_2)^2} - \frac{\Delta R_4 (R_3 + R_4) - R_4 (\Delta R_3 + \Delta R_4)}{(R_3 + R_4)^2} \tag{1-25}$$

Si la condition, $R_1=R_2=R_3=R_4=R_0$, est imposée aux résistances et si les coefficients longitudinal et transversal de piézorésistance sont respectivement représentés par Π_l et Π_t , la sensibilité du capteur est calculée par:

$$\alpha = \Delta V_{out}/V_{cc}P = \frac{1}{2}(\Pi_t - \Pi_l)K \quad (1-26)$$

Puisque les signes de Π_l et Π_t pour le silicium de type p sont opposés, un tel placement des résistances améliore la sensibilité de ce capteur de pression.

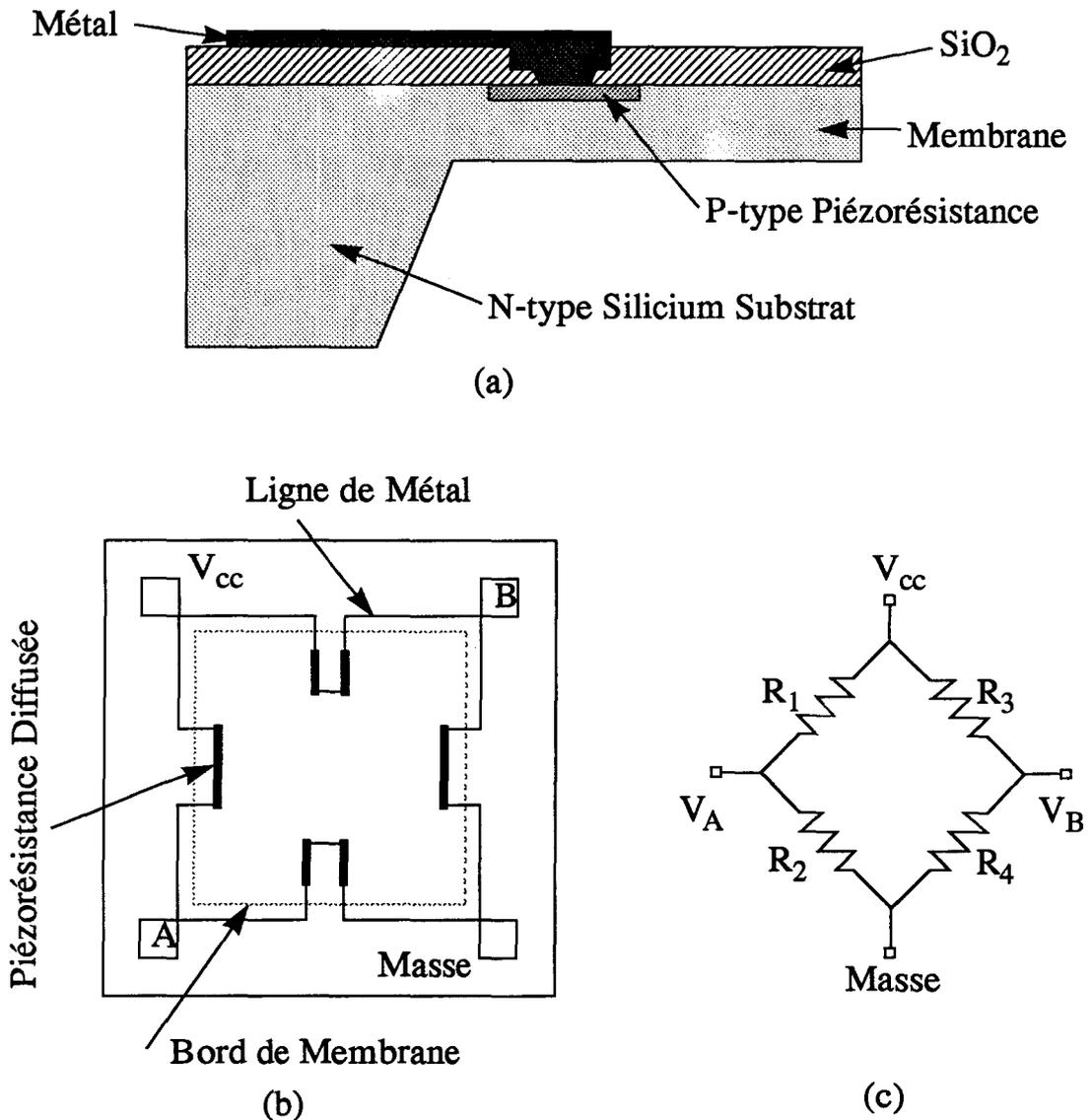


Fig. 1-6 Une structure typique de capteur de pression utilisant la piézorésistance du silicium. (a) coupe partielle; (b) vue de dessus; (c) schéma équivalent.

Le deuxième exemple est un oscillateur en anneau de transistors P-MOS formé sur une membrane circulaire [21]. Comme la résistance diffusée, un composant actif présente également l'effet de piézorésistivité. L'effet de la piézorésistivité dans

un transistor MOS sera étudié en détail au chapitre IV. La figure 1-7 présente le circuit électrique de ce capteur qui est constituée d'un oscillateur à trois étages et d'un buffer.

La figure 1-8 illustre le schéma d'un capteur consisté de deux oscillateurs. La fréquence d'oscillation pour un oscillateur est donnée par:

$$f_{osc} = \frac{1}{N} \frac{I_D(X)}{10C_i U_b} \quad (1-27)$$

où N est le nombre d'étage, C_i est la capacité d'entrée de chaque étage et U_b est la tension d'alimentation. L'équation (1-27) montre comment la variation du courant de drain $I_D(X)$ induite par la contrainte influence la fréquence d'oscillation.

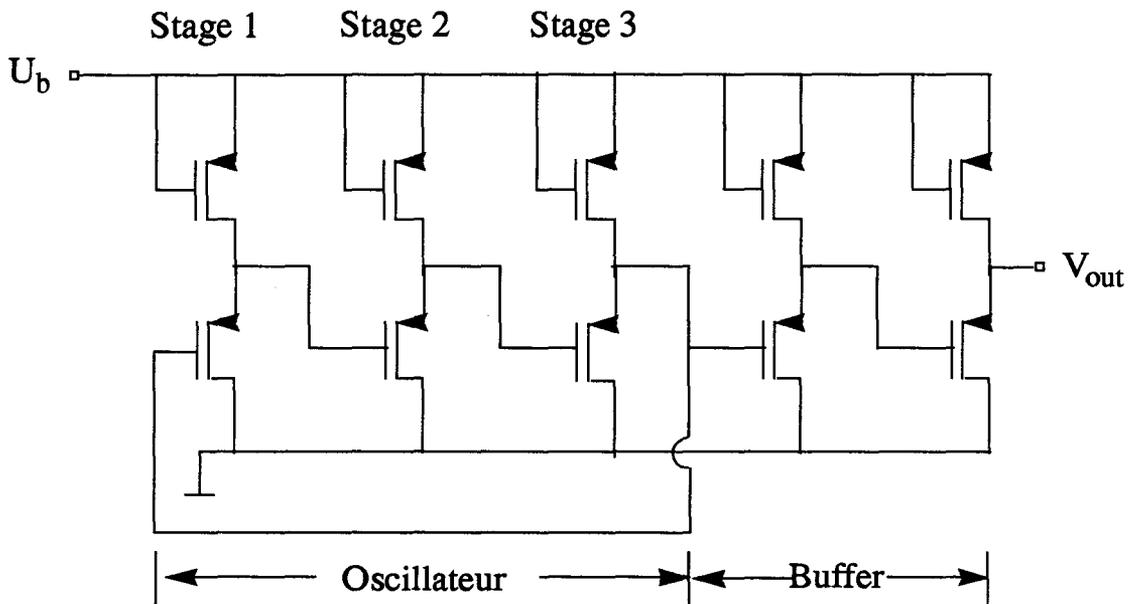


Fig. 1-7: Circuit électrique d'un oscillateur de trois étages en P-MOS transistors avec un buffer, $U_b = -20V$.

Si le coefficient de piézorésistance est indépendant des conditions d'opération, la fréquence d'oscillation de ce type de capteur peut être généralisé comme suit^[10]:

$$f = f_0 (1 - \Pi X) F_1(U_b) F_2(T) \quad (1-28)$$

où f_0 est la fréquence d'oscillation à l'état sans contrainte, X est la contrainte créée par la pression et T est la température. Si l'oscillateur transversal et l'oscillateur longitudinal sont identiques et s'ils sont placés symétriquement sur la membrane circulaire comme dans la figure 1-8, le rapport entre les fréquences d'oscillation des deux capteurs est donné par:

$$r = \frac{f_t}{f_l} = \frac{1 - \Pi_t X}{1 - \Pi_l X} \quad (1-29)$$

où t et l réfèrent les oscillateurs transversaux et longitudinaux respectivement. Comme les variations de fréquence induites par la piézorésistivité restent faibles, l'équation (1-29) peut être réécrite sous forme suivante:

$$r = 1 + (\Pi_t - \Pi_l) X \quad (1-30)$$

où les termes d'ordre supérieur ont été négligés. On voit que le rapport des fréquences varie linéairement avec la contrainte et donc avec la pression. Le fait que les coefficients longitudinal et transversal de piézorésistance Π_l et Π_t pour les transistors P-MOS sont de signes opposés montre qu'une conception telle que celle de la figure 1-8 augmente la sensibilité globale du capteur de pression.

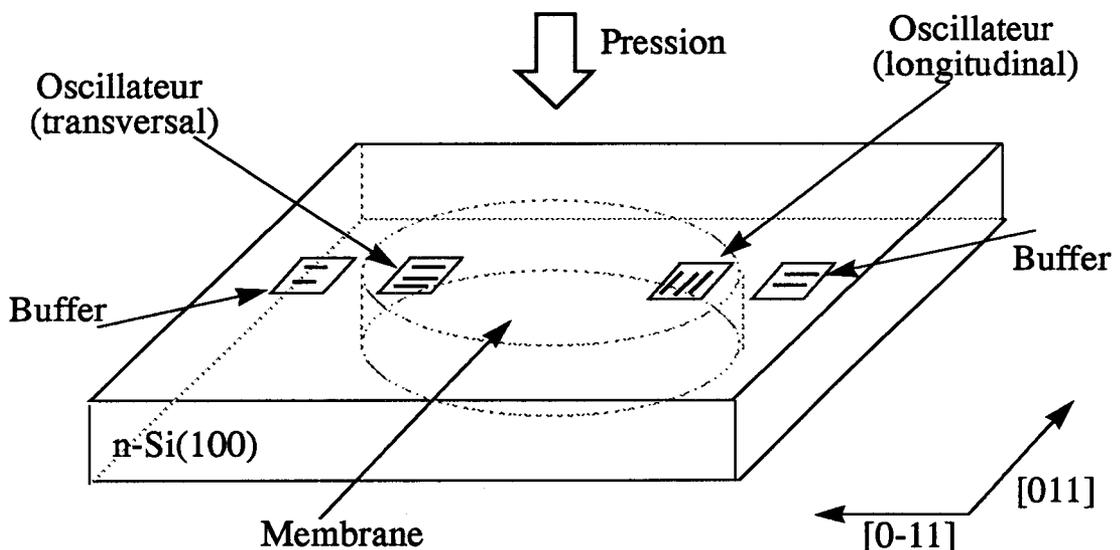


Fig. 1-8: Schéma d'un capteur de pression avec deux oscillateurs, l'un est transversal, l'autre est longitudinal.

1.8. RELATIONS ENTRE LA RESISTIVITE ET LA CONDUCTIVITE:

Le calcul des coefficients de piézorésistivité fait toujours appel à la conductivité. Il est donc nécessaire d'établir les relations entre les variations de résistivité $\delta\rho$ et de conductivité $\delta\sigma$. La relation entre la résistivité ρ et la conductivité σ est simplement définie par:

$$\rho = \sigma^{-1} \quad (1-31)$$

Si la conductivité σ est modifiée par l'application d'une contrainte d'une quantité $\delta\sigma$, la variation correspondante de la résistivité ρ est donnée par:

$$\delta\rho = -\rho \cdot \delta\sigma \cdot \rho \quad (1-32)$$

On va appliquer l'équation (1-32) aux deux cas qui seront rencontrés dans le calcul des coefficients de piézorésistivité. Dans le premier cas, les tenseur de conductivité et de résistivité sont diagonaux:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad \rho = \begin{bmatrix} 1/\sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{bmatrix} \quad (1-33)$$

avec $\rho_{11} = 1/\sigma_{11}$, $\rho_{22} = 1/\sigma_{22}$ et $\rho_{33} = 1/\sigma_{33}$. En se portant (1-33) dans (1-32), on obtient:

$$\begin{bmatrix} \delta\rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \delta\rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \delta\rho_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 1/\sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \delta\sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \delta\sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (1-34)$$

ainsi

$$\begin{bmatrix} \delta\rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \delta\rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \delta\rho_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \delta\sigma_{11}/\sigma_{11}^2 & 0 & 0 \\ 0 & \delta\sigma_{22}/\sigma_{22}^2 & 0 \\ 0 & 0 & \delta\sigma_{33}/\sigma_{33}^2 \end{bmatrix} \quad (1-35)$$

l'équation (1-35) indique que:

$$\frac{\delta\rho_{ii}}{\rho_{ii}} = -\frac{\delta\sigma_{ii}}{\sigma_{ii}} \quad (1-36)$$

L'équation (1-36) donne un simple résultat que la variation relative d'un composante de résistivité égale à celle du composante correspondant de conductivité avec un signe opposé. Elle s'appliquera au calcul des coefficients Π_{11} et Π_{12} .

Pour le deuxième cas, le calcul se fait dans un système où les tenseurs de conductivité et de résistivité ne sont pas diagonaux. Si l'on effectue une transformation du système de sorte que les nouveaux axes x', y', z' prennent respectivement les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$, les tenseurs de conductivité et de résistivité du premier cas deviennent:

$$\sigma' = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) & \frac{1}{2}(\sigma_{11} - \sigma_{22}) & 0 \\ \frac{1}{2}(\sigma_{11} - \sigma_{22}) & \frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad \rho' = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\rho_{11} + \rho_{22}) & \frac{1}{2}(\rho_{11} - \rho_{22}) & 0 \\ \frac{1}{2}(\rho_{11} - \rho_{22}) & \frac{1}{2}(\rho_{11} + \rho_{22}) & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{bmatrix} \quad (1-37)$$

On s'intéresse à ce cas parce qu'il permet de trouver le coefficient de piézorésistivité Π_{44} . On voit que les tenseurs σ' et ρ' dans l'équation (1-37) font apparaître les composantes nondiagonales σ'_{12} et ρ'_{12} nécessaires à déterminer le coefficient de piézorésistivité Π_{44} . En utilisant l'équation (1-32), on obtient:

$$\delta\rho'_{12} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\delta\sigma_{11}}{\sigma_{11}^2} - \frac{\delta\sigma_{22}}{\sigma_{22}^2} \right) \quad (1-38)$$

Pour $\sigma_{11} = \sigma_{22}$, il en résulte que:

$$\frac{\delta\rho'_{12}}{\rho'_{11}} = -\frac{\delta\sigma'_{12}}{\sigma'_{11}} \quad (1-39)$$

avec $\sigma'_{11} = \sigma_{11} = \sigma_{22}$. Cette relation est presque équivalente à l'expression (1-36). On appliquera l'équation (1-39) au calcul du coefficient de piézorésistivité Π_{44} pour le silicium de type N. Si $\sigma_{11} \neq \sigma_{22}$, on obtient par l'équation (1-38):

$$\frac{\delta\rho'_{12}}{\rho'_{11}} = -\left(\frac{\delta\sigma_{11}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}} - \frac{\delta\sigma_{22}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{11}}{\sigma_{22}} \right) \quad (1-40)$$

On voit que dans ce cas, la variation relative de la résistivité n'est plus simplement égale à celle de la conductivité correspondante avec un signe opposé. l'équation (1-40) s'appliquera au calcul du coefficient de piézorésistivité Π_{44} pour le silicium de type P.

CHAPITRE II

EFFETS DE CONTRAINTES MECANIQUES SUR LES BANDES D'ENERGIE

Résumé

En tenant compte de la symétrie du réseau du silicium, l'influence des contraintes mécaniques sur la bande de conduction et la bande de valence est définie par le modèle de potentiel de déformation de Bir et Pikus. La modification des bandes d'énergie se présente par le déplacement de l'ensemble des bandes et la variation des masses effectives de porteurs.

CHAPITRE II

EFFETS DE CONTRAINTES MECANIKES SUR LES BANDES D'ENERGIE

Un matériau solide est constitué de deux parties, l'une est l'ensemble des noyaux atomiques dont chacun est fixé dans un point de l'espace, l'autre est l'ensemble des électrons qui se comporte comme un gaz dans le champ électrique créé par les noyaux atomiques. Les interactions entre les électrons et les noyaux atomiques conduisent à la création de bandes énergétiques. La connaissance de la structure de bande est indispensable à l'étude du processus de transport des porteurs dans ce matériau car elle permet de déterminer la distribution des porteurs dans l'espace k - p . Lorsqu'un matériau est soumis à une perturbation extérieure telle qu'un champ électrique ou un champ de contrainte mécanique, la distribution des électrons s'écarte de l'état à l'équilibre thermodynamique. Ceci se traduit par la conductivité et la piézorésistivité qui sont fondamentales aux applications électroniques.

Ce chapitre rappelle d'abord la structures des bandes de conduction et de valence du silicium. Ensuite nous étudierons en détail l'influence d'une contrainte mécanique sur la structure de bande. Nous définissons également les masses effectives des porteurs en incluant les effets des contraintes. En ce concernent les trous dans la bande de valence, deux modèles seront distingués: l'un s'applique aux trous dont les énergies cinétiques sont faibles, l'autre conviens aux trous possédant de fortes énergies cinétiques. Les effets des contraintes mécaniques sur la structure de bandes énergétiques seront utilisés dans le calcul des coefficients de piézorésistivités tridimensionnelle et bidimensionnelle.

2.1. RESEAU DU SILICIUM ET ZONE DE BRILLOUIN:

Un cristal peut être représenté d'une part par un réseau direct dans l'espace réel, et d'autre part, par un réseau réciproque dans l'espace du vecteur d'onde k . Le réseau du silicium est une structure diamant qui est constituée de deux réseaux cubiques à faces centrées, imbriqués et décalés l'un de l'autre d'un quart de la diagonale principale. La figure 2-1 montre le réseau du silicium qui peut être considéré comme un seul réseau cubique à faces centrées dont la maille élémentaire contient deux atomes du silicium: un atome situé aux noeuds du réseau cubique à faces centrées, l'autre se trouvant dans la direction $\langle 111 \rangle$ et à une distance d'un quart de la diagonale principale du premier atome. Il est connu que chaque réseau direct correspond à un réseau réciproque, par exemple le réseau direct de type cubique à faces centrées peut être représenté par un réseau réciproque de type cubique centré dans l'espace du vecteur d'onde k , et ceci est le cas du silicium.

La zone de Brillouin est définie dans l'espace du vecteur d'onde k de manière suivante: Traçons les vecteurs à partir d'un point du réseau réciproque aux points de

voisinage, la zone de Brillouin est la volume la plus petite formée par les plans qui sont perpendiculaires à ces vecteurs et à travers les mi-points de ces vecteurs. La figure 2-1 montre la zone de Brillouin du silicium où le point Γ a un groupe symétrique O_h et un point Δ sur les axes cristallographiques possède un groupe C_{4v} [9, 22, 23].

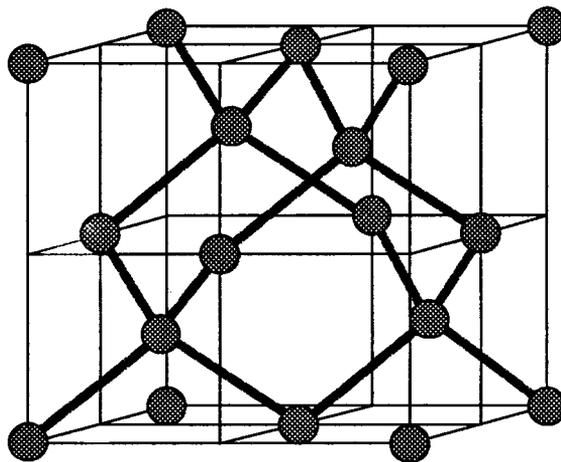


Fig. 2-1: Le reseau de type diamant qui peut être considéré comme un réseau cubique à faces centrées dont la maille élémentaire est constituée de deux atomes identiques séparés d'une distance d'un quart de la diagonale principale dans la direction $\langle 111 \rangle$.

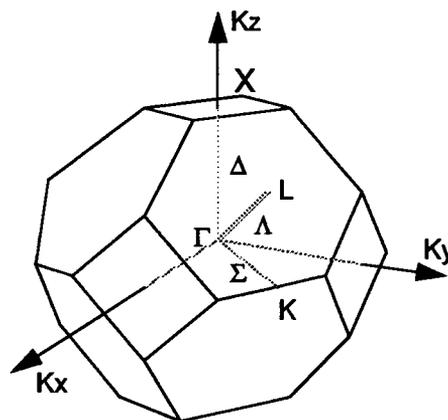


Fig. 2-2: la zone de Brillouin du silicium, les points Δ , Λ et Σ sont respectivement dans les directions $\langle 001 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$, les points X , L et K sont respectivement les intersections de ces directions avec la frontière de la zone de Brillouin.

2.2. STRUCTURE DE BANDES DE SILICIUM:

Les états des électrons dans un cristal se classent dans une série de bandes permises séparées par des bandes interdites. Les électrons remplissent ces bandes permises selon la statistique de Fermi-Dirac. Pour les semiconducteurs, il y a deux bandes importantes qui déterminent les propriétés électriques du matériau: la bande de conduction qui est la première bande quasi-vide, et la bande de valence la dernière bande quasi-pleine. Le bas de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence sont des points d'extrémité dans l'espace du vecteur d'onde \mathbf{k} . En utilisant les propriétés symétriques de ces points d'extrémité, nous allons définir la structure de bandes du silicium par la méthode $\mathbf{k-p}$ ^[9]. Soit \vec{k}_0 un point d'extrémité non-dégénéré, les niveaux énergétiques au voisinage de ce point $E_n(\vec{k}_0 + \vec{k})$ s'écrivent ^[9]:

$$E_n(\vec{k}_0 + \vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \sum_{\alpha\beta} \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_{\alpha\beta}} k_\alpha k_\beta \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3 \quad (2-1)$$

où $m_{\alpha\beta}$ sont les composantes de masse effective des porteurs. Une transformation aux axes principaux rend le tenseur de masse effective diagonal, l'équation (2-1) devient:

$$E_n(\vec{k}_0 + \vec{k}) = E_n(\vec{k}_0) + \sum_{\alpha} \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_{\alpha}} k_{\alpha}^2 \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (2-2)$$

En principe, les axes principaux de masse effective coïncident avec les axes de symétrie au point \vec{k}_0 . Le tableau 2-1 présente certains cas utiles pour le silicium.

Table 2-1: Spectre près d'un point de limite non-dégénéré

Groupe symétrique	Spectre	Axes principaux
e	$\frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_1} k_1^2 + \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_2} k_2^2 + \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_3} k_3^2$	axes arbitraires la surface d'énergie constante est une ellipsoïde
C_{4v}	$\frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2) + \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_3} k_3^2$	axe-z au long de l'axe C_4 , axe-x et axe-y arbitrairement dans le plan perpendiculaire à C_4 la surface d'énergie constante est une ellipsoïde de révolution
O_h	$\frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_1} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$	axes arbitraires la surface d'énergie constante est une sphère

Si le point limite \vec{k}_0 n'est pas au centre de la zone de Brillouin, il existe d'autres points \vec{k}_0^i équivalents au point \vec{k}_0 dans la zone de Brillouin, pour lesquels $E_n(\vec{k}_0^i) = E_n(\vec{k}_0)$. Dans ce cas, la bande d'énergie est dite "multivallée". Pour la bande de conduction du silicium, il y a six points équivalents qui se situent respectivement dans les directions $\langle 100 \rangle$, $\langle \bar{1}00 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 0\bar{1}0 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ et $\langle 00\bar{1} \rangle$ avec $|\vec{k}_0^i| = 0.85k_x$, où k_x est la distance entre le point X et l'origine Γ (voir la figure 2-2). La bande de conduction du silicium est illustrée par la figure 2-3. Les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution autour de chacun des axes équivalents. Les masses effective des électrons de silicium sont données dans le tableau 2-2.

Table 2-2: Les masse effectives longitudinale et transversale des électrons pour le silicium, m_0 est la masse d'un électron libre [24].

Masse Longitudinale	Masse Transverse
$m_l = 0.91 m_0$	$m_t = 0.19 m_0$

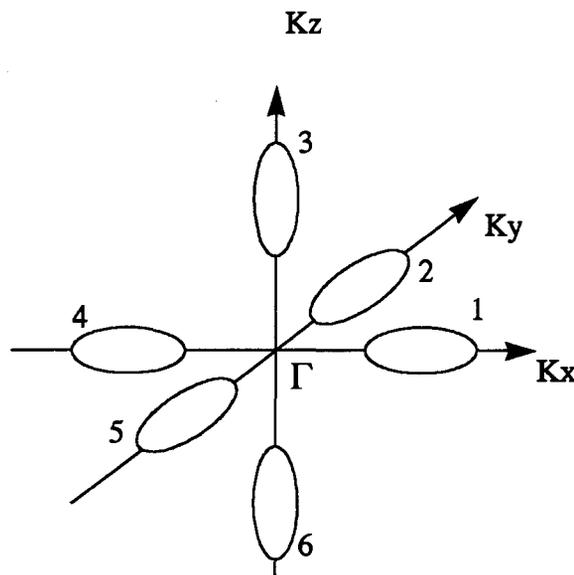


Fig. 2-3: Bande de conduction du silicium

En ce qui concerne la bande de valence du silicium, il s'agit d'un point d'extrémité dégénéré qui se trouve au centre de la zone de Brillouin. La bande de valence

du silicium consiste en trois branches dont deux branches Γ_8 sont dégénérées au point Γ et la troisième Γ_6 se situe au-dessous d'une quantité Δ dû au spin-orbital *splitting*. Les spectres près du point Γ sont les solutions de l'équation suivante:

$$|H - EI| = 0 \quad (2-3)$$

où l'Hamiltonian H est une matrice de six par six qui prend en compte le couplage spin-orbite [9], E est le niveau énergétique et I est une matrice identité. l'Hamiltonian H de l'équation (2-3) est donnée dans le tableau 2-3 où les termes F, G, H et I sont définis par [9]:

$$\begin{aligned} F &= Ak^2 + \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2) & G &= Ak^2 - \frac{B}{2}(k^2 - 3k_z^2) \\ H &= -Dk_z(k_x + ik_y) & I &= \frac{\sqrt{3}}{2}B(k_x^2 - k_y^2) - iDk_xk_y \end{aligned} \quad (2-4)$$

où A, B, C et D sont les paramètres de la bande de valence qui peuvent être mesurés par la technique de la résonance cyclotron [25, 26, 27].

Table 2-3: La matrice H de l'Hamiltonian [9]

j, m	$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	F	H	I	0	$\frac{iH}{\sqrt{2}}$	$-i\sqrt{2}I$
$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	H^*	G	0	I	$\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$	$i\sqrt{3/2}H$
$\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$	I^*	0	G	-H	$-i\sqrt{3/2}H^*$	$\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$
$\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$	0	I^*	$-H^*$	F	$-i\sqrt{2}I^*$	$-\frac{iH^*}{\sqrt{2}}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{iH^*}{\sqrt{2}}$	$-\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$	$i\sqrt{3/2}H$	$i\sqrt{2}I$	$\frac{F+G}{2} - \Delta$	0
$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$i\sqrt{2}I^*$	$-i\sqrt{3/2}H^*$	$-\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}}$	$\frac{iH}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{F+G}{2} - \Delta$

Si Δ est grand par rapport à l'énergie cinétique des trous, le problème est simplifié, il suffit de déterminer les valeurs propres d'une matrice de l'ordre quatre, et d'une matrice de l'ordre deux. Ces matrices donnent les spectres de chaque branche de la bande de valence. Les solutions des équations caractéristiques correspondantes sont décrites par deux équations suivantes.

Pour les deux branches Γ_8 :

$$E_{1,2} = Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_x^2k_z^2)} \quad (2-5)$$

Pour la branche Γ_6 :

$$E_3 = Ak^2 - \Delta \quad (2-6)$$

Le signe plus et moins dans l'équation (2-5) indique qu'il y a deux types de trous, les trous lourds correspondants au signe moins et les trous légers correspondants au signe plus, dont les surfaces d'énergie constante se présentent sous forme de sphères déformées illustrées dans la figure 2-4. Pour le silicium, le spin-orbital splitting Δ est égal à 0.044 eV.

Il faut effectuer certaines approximations afin de définir les masses effectives des trous. Dans un système de coordonnées sphériques, l'équation (2-5) devient:

$$E_{1,2} = [A \pm \sqrt{B^2 + C^2(\sin\theta)^2((\sin\phi\cos\phi\sin\theta)^2 + (\cos\theta)^2)}] k^2 \quad (2-7)$$

En prenant la moyenne angulaire de $E_{1,2}$, on obtient:

$$E_{1,2} = \left(A \pm \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}} \right) k^2 \quad (2-8)$$

Ceci revient à remplacer une surface déformée par une certaine surface sphérique moyenne. Pour le silicium, la masse effective des trous lourds est donnée par:

$$m_h = \frac{m_0}{A - \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}} = 0.52m_0 \quad (2-9)$$

et celle des trous légers est donnée par:

$$m_l = \frac{m_0}{A + \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}} = 0.16m_0 \quad (2-10)$$

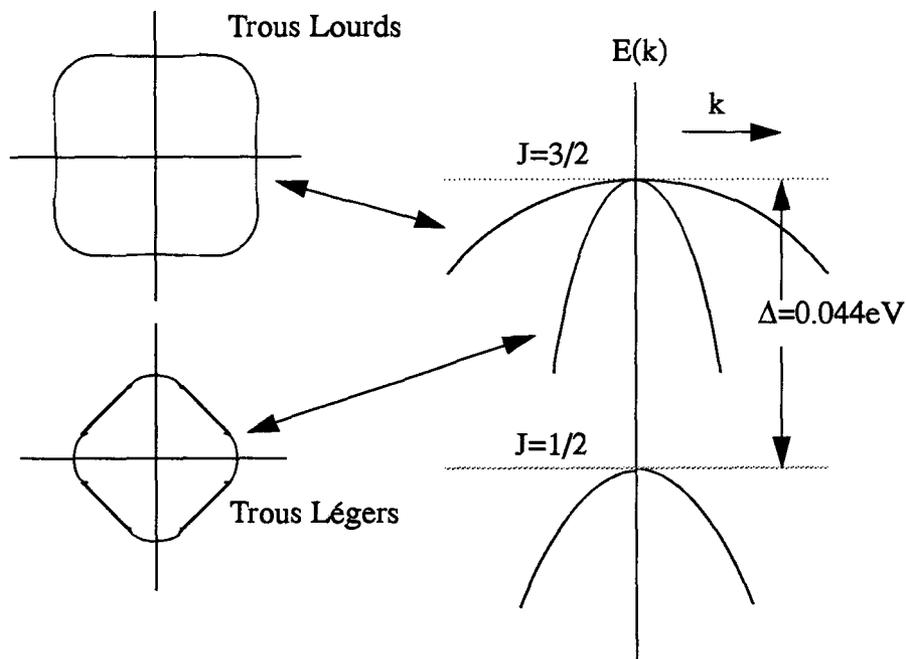


Fig. 2-4: Surfaces d'énergie constante et structure de la bande de valence du silicium.

2.3. EFFET DE CONTRAINTES MECANIQUES:

L'application d'une contrainte mécanique à un cristal modifie le réseau cristallin. La structure des bandes énergétiques doit donc se conformer à la symétrie du nouveau réseau. Par exemple ^[9], un réseau cubique à faces centrées sous une contrainte au long d'un axe de rotation de l'ordre quatre, tel qu'un axe $\langle 001 \rangle$, se transforme en un réseau tétragonal centré; un réseau tétragonal centré devient un réseau orthorhombique centré suite une contrainte appliquée dans la direction de l'axe de rotation de l'ordre deux $\langle 100 \rangle$; à la présence d'une contrainte orientée dans la direction d'un autre axe de rotation de l'ordre deux $\langle 110 \rangle$, un réseau tétragonal centré se transforme en un réseau orthorhombique à faces centrées. La modification de la structure des bandes énergétiques due au changement de la structure de réseau peut être résolue par la théorie de perturbation ^[9]. Cette partie a pour but d'étudier comment la bande de conduction et la bande de valence du silicium se transforment lorsqu'il y a une contrainte appliquée. Ensuite, on définira les nouvelles masses effectives de porteurs modifiée par la contrainte appliquée. Du fait de la simplicité, on exprime le problème en terme de déformation.

2.3.1. MODIFICATION DE LA BANDE DE CONDUCTION:

On sait maintenant que le bas de la bande de conduction du silicium se situe aux six points équivalents dans le groupe des directions $\{100\}$. Sur un tel point, la modification de la bande de conduction est décrite par ^[9]:

$$\begin{aligned}
\Delta E_1(\vec{k}) = \Delta E_4(\vec{k}) &= \Xi_d(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \Xi_u \varepsilon_{xx} + \Xi_m \varepsilon_{yz} k_y k_z \\
\Delta E_2(\vec{k}) = \Delta E_5(\vec{k}) &= \Xi_d(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \Xi_u \varepsilon_{yy} + \Xi_m \varepsilon_{zx} k_z k_x \\
\Delta E_3(\vec{k}) = \Delta E_6(\vec{k}) &= \Xi_d(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \Xi_u \varepsilon_{zz} + \Xi_m \varepsilon_{xy} k_x k_y
\end{aligned}
\tag{2-11}$$

où ε_{ij} sont les composantes de la déformation, Ξ_d, Ξ_u sont appelés les constantes du potentiel de déformation [28, 29], et Ξ_m est un paramètre qui représente la variation de masses effectives due à la déformation et qui peut être mesuré par la résonance cyclotron [30]. Cette équation est écrite en se référant à la figure 2-5. Le premier terme de l'équation (2-11) décrit le mouvement de l'ensemble de six vallées dans l'espace énergétique, le deuxième terme donne les déplacements de chaque vallée relatives au mouvement d'ensemble, le troisième terme représente la déformation des surfaces d'énergie constante.

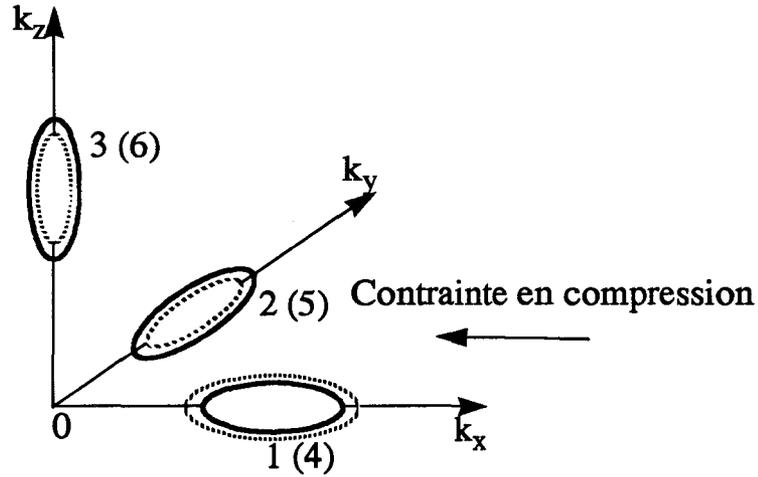


Fig. 2-5: Déplacement des vallées sous une contrainte uniaxiale en compression dans la direction $\langle 100 \rangle$. Les ellipses des lignes continues représentent les états sans contrainte et celles en pointillées sont les états avec contrainte. Vallées 2, 5; 3, 6 montent et vallées 1,4 descendent.

Pour une contrainte uniaxiale X dans la direction $\langle 100 \rangle$, la déformation est donnée par:

$$\varepsilon_{xx} = s_{11}X, \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = s_{12}X, \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0
\tag{2-12}$$

les modifications des six vallées de la bande de conduction sont calculées par:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_1 = \Delta E_4 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{11} X \\
 \Delta E_2 = \Delta E_5 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{12} X \\
 \Delta E_3 = \Delta E_6 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{12} X
 \end{aligned}
 \tag{2-13}$$

Dans ce cas, les vallées de la bande de conduction ne se déforment pas, elle ne se déplacent que comme une unité dans l'espace énergétique. La figure 2-5 illustre la modification de la bande de conduction due à une contrainte uniaxiale en compression dans la direction $\langle 100 \rangle$. Les valeurs des paramètres Ξ_d, Ξ_u, Ξ_m pour le silicium sont données dans le tableau 2-4.

Table 2-4: Les trois constantes concernant la variation de la bande de conduction du Si

Ξ_d en unité de eV	Ξ_u en unité de eV [31]	Ξ_m en unité de $\frac{\hbar^2}{2m_0}$ [30]
néant	8.6	86.8

2.3.2. MODIFICATION DE LA BANDE DE VALENCE:

Comme la bande de valence est une bande dégénérée, une matrice de six par six $H(\epsilon)$ [9] décrivant la contribution des contraintes à l'Hamiltonian représente le modèle du potentiel de déformation:

$$H(\epsilon) = \begin{bmatrix}
 f & h & j & 0 & \frac{ih}{\sqrt{2}} & -i\sqrt{2}j \\
 h^* & g & 0 & j & \frac{i(g-f)}{\sqrt{2}} & i\sqrt{\frac{3}{2}}h \\
 j^* & 0 & g & -h & -i\sqrt{\frac{3}{2}}h^* & \frac{i(g-f)}{\sqrt{2}} \\
 0 & j^* & -h^* & f & -i\sqrt{2}j^* & -\frac{ih^*}{\sqrt{2}} \\
 -\frac{ih^*}{\sqrt{2}} & -\frac{i(g-f)}{\sqrt{2}} & i\sqrt{\frac{3}{2}}h & i\sqrt{2}j & \frac{f+g}{2} - \Delta & 0 \\
 i\sqrt{2}j^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}h^* & -\frac{i(g-f)}{\sqrt{2}} & \frac{ih}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{f+g}{2} - \Delta
 \end{bmatrix}
 \tag{2-14}$$

avec

$$\begin{aligned} f &= \frac{l+m}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + m\varepsilon_{zz}, g = \frac{1}{3} (f + 2(m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + l\varepsilon_{zz})) \\ h &= -\frac{1}{\sqrt{3}} n (i\varepsilon_{xz} + \varepsilon_{yz}), j = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2} (l-m) (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - in\varepsilon_{xy} \right) \end{aligned} \quad (2-15)$$

où l , m et n sont des paramètres du potentiel de déformation. La solution de l'équation caractéristique $|H(\vec{k}) + H(\varepsilon) - IE| = 0$ donne les spectres de la bande de valence contenant l'effet de la contrainte mécanique. On constate que la matrice $H(\vec{k})$ et la matrice $H(\varepsilon)$ ont la même structure.

Si le spin-orbital *splitting* Δ est important par rapport à l'énergie des trous, les solutions peuvent être simplifiées comme suit.

Pour la branche Γ_6 :

$$E_6 = Ak^2 + a\varepsilon - \Delta \quad (2-16)$$

Pour les branches Γ_8 :

$$E_{1,2}(\varepsilon, k) = Ak^2 + a\varepsilon \pm (E_k + E_{ek} + E_e)^{1/2} \quad (2-17)$$

où

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \\ E_k &= B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2) \\ E_{ek} &= Bb (3(k_x^2 \varepsilon_{xx} + k_y^2 \varepsilon_{yy} + k_z^2 \varepsilon_{zz}) - k^2 \varepsilon) + 2Dd (k_x k_y \varepsilon_{xy} + k_x k_z \varepsilon_{xz} + k_y k_z \varepsilon_{yz}) \\ E_e &= \frac{b^2}{2} ((\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})^2) + d^2 (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) \end{aligned} \quad (2-18)$$

Les paramètres A , B et D sont déjà définis, les trois autres paramètres a , b et d sont définis par l , m et n de la manière suivante:

$$a = (l+2m)/3, b = (l-m)/3, d = n/\sqrt{3} \quad (2-19)$$

a , b et d sont les constantes du potentiel de déformation pour la bande de valence, ils peuvent également être déterminés par la résonance cyclotron [27, 32, 33].

Table 2-5: Séparation de la band de valence due à la contrainte mécanique uniaxiale X,
 $\beta = \delta_2/\delta_1 = 0.84$ [27]

contrainte	<100>	<111>	<110>
déformation	$\epsilon_{xx} = s_{11}X$ $\epsilon_{yy} = s_{12}X$ $\epsilon_{zz} = s_{12}X$ $\epsilon_{xy} = 0$ $\epsilon_{xz} = 0$ $\epsilon_{yz} = 0$	$\epsilon_{xx} = \frac{1}{3}(s_{11} + 2s_{12})X$ $\epsilon_{yy} = \frac{1}{3}(s_{11} + 2s_{12})X$ $\epsilon_{zz} = \frac{1}{3}(s_{11} + 2s_{12})X$ $\epsilon_{xy} = \frac{1}{3}s_{44}X$ $\epsilon_{xz} = \frac{1}{3}s_{44}X$ $\epsilon_{yz} = \frac{1}{3}s_{44}X$	$\epsilon_{xx} = \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})X$ $\epsilon_{yy} = \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})X$ $\epsilon_{zz} = s_{12}X$ $\epsilon_{xy} = \frac{1}{2}s_{44}X$ $\epsilon_{xz} = 0$ $\epsilon_{yz} = 0$
ϵ	$(s_{11} + 2s_{12})X$	$(s_{11} + 2s_{12})X$	$(s_{11} + 2s_{12})X$
$\delta E_{1,2}$	$\delta_1 = 2b(s_{11} - s_{12})X$	$\delta_2 = (2/\sqrt{3})ds_{44}X$	$\delta_3 = (1/2)\delta_1(1 + 3\beta^2)^{1/2}$

Table 2-6: Les valeurs de paramètres pour la bande de valence du silicium [34]

paramètres de bande de valence	valeurs ($\hbar^2/2m_0$)	constantes du potentiel de déformation	valeurs (eV)
A	4.22	a	
B	0.78	b	-2.1
D	4.99	d	-4.85

Les équations (2-16), (2-17) et (2-18) indiquent qu'une déformation isotrope ($\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ et $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{xz} = 0$) déplace ensemble les trois branches de la bande de valence d'une quantité:

$$\Delta E = a\epsilon \quad (2-20)$$

Par contre, une déformation anisotrope lève la dégénérescence des branches Γ_8 au point Γ . Le *splitting* correspondant est calculé par:

$$\delta E_{1,2} = E_1 - E_2 = 2E_e^{1/2} \quad (2-21)$$

$\delta E_{1,2}$ est fonction de la contrainte mécanique appliquée. Trois exemples importants sont présentés dans le tableau 2-5 où s_{ij} sont les coefficients de rigidité du matériau considéré. Tous les paramètres utilisés dans le calcul suivant sont indiqués dans le tableau 2-6 pour le silicium. Le calcul de la masse effective des trous sera effectué pour ces différentes situation dans la partie suivante.

2.3.2.1. MODELE DE FAIBLE ENERGIE CINETIQUE DES TROUS:

La faible énergie cinétique signifie que l'énergie cinétique des trous E_k est inférieure à la séparation des deux branches supérieures de la bande de valence $\delta E_{1,2}$ induite par la contrainte mécanique. A cette condition, on peut développer les spectres $E_{1,2}(\epsilon, k)$ de l'équation (2-17) en série de E_{ek}/E_e . Avec une approximation du premier ordre, on obtient:

$$E_{1,2} = a\epsilon \pm E_e^{1/2} + \left(A \mp \frac{Bb\epsilon}{2E_e^{1/2}} \right) k^2 \pm \frac{Dd}{E_e^{1/2}} (k_x k_y \epsilon_{xy} + k_x k_z \epsilon_{xz} + k_y k_z \epsilon_{yz}) \pm \frac{3Bb}{2E_e^{1/2}} (k_x^2 \epsilon_{xx} + k_y^2 \epsilon_{yy} + k_z^2 \epsilon_{zz}) \quad (2-22)$$

où l'on a négligé les termes de E_k/E_e ($E_k/E_e \ll E_{ek}/E_e$). L'équation (2-22) montre que le modèle de faible énergie cinétique permet d'utiliser le concept de masse effective pour décrire le mouvement de trous. A l'aide de l'équation (2-22), on va étudier la dépendance de la masse effective des trous avec la contrainte mécanique. Nous nous limiterons aux cas où la contrainte est uniaxiale et appliquée dans les trois directions de haute symétrie: $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$.

2.3.2.1.1. CONTRAINTE PARALLELE A LA DIRECTION $\langle 100 \rangle$:

Une contrainte mécanique uniaxiale X appliquée dans la direction $\langle 100 \rangle$ crée une déformation:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= s_{11}X & \epsilon_{yy} &= s_{12}X & \epsilon_{zz} &= s_{12}X \\ \epsilon_{xy} &= 0 & \epsilon_{xz} &= 0 & \epsilon_{yz} &= 0 \end{aligned} \quad (2-23)$$

En reportant cette déformation dans l'équation (2-22), on obtient les spectres pour les branches Γ_8 :

$$E_{1,2} = (A \pm B) k_x^2 + (A \mp \frac{B}{2}) k_y^2 + (A \mp \frac{B}{2}) k_z^2 \quad (2-24)$$

On en déduit aisément l'inverse de la masse effective de trous:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{m_{11}^1} &= A+B & \frac{1}{m_{22}^1} &= A-\frac{B}{2} & \frac{1}{m_{33}^1} &= A-\frac{B}{2} \\
 \frac{1}{m_{11}^2} &= A-B & \frac{1}{m_{22}^2} &= A+\frac{B}{2} & \frac{1}{m_{33}^2} &= A+\frac{B}{2}
 \end{aligned}
 \tag{2-25}$$

Table 2-7: Masse effective des trous du Si sous contrainte parallèle à $\langle 100 \rangle$, en unité de m_0

Branche $E_{1/2^+}$	valeur	branche $E_{3/2}$	valeur
m_{11}^1	0.20	m_{11}^2	0.29
m_{22}^1	0.26	m_{22}^2	0.22
m_{33}^1	0.26	m_{33}^2	0.22

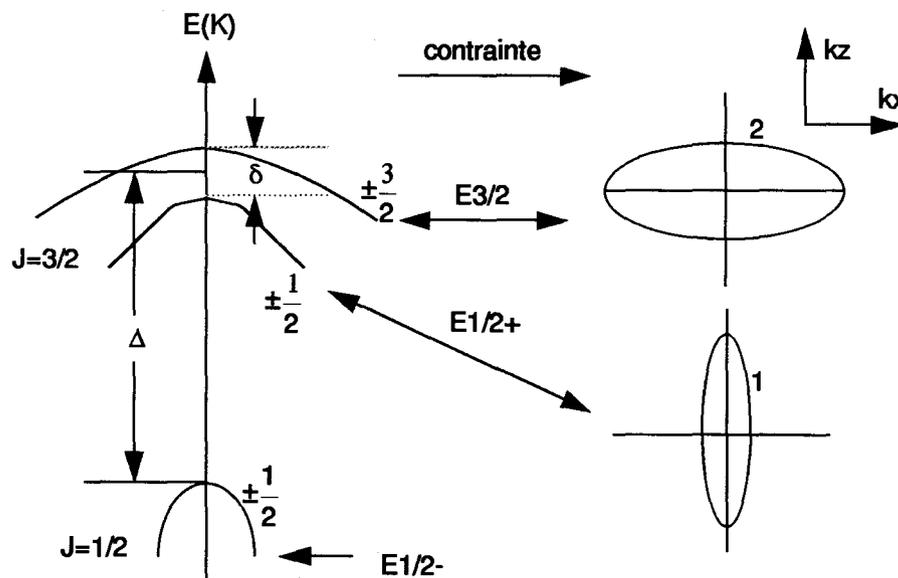


Fig. 2-6: Bande de valence du silicium sous une contrainte uniaxiale de traction dans la direction $\langle 100 \rangle$.

L'équations (2-25) indiquent que, dans ce cas, les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution dont l'axe de révolution est parallèle à la direction de la contrainte uniaxiale. La figure 2-6 montre la structure de la bande de valence modifiée par la contrainte uniaxiale appliquée dans la direction $\langle 100 \rangle$. La masse effective des trous bien définie par l'équation (2-25) permettra les calculs concernant l'effet de quantification et l'effet de piézorésistivité dans les transistors MOS. Les deux branches séparées sont respectivement nommées $E_{1/2^+}$ et $E_{3/2}$ selon leur caractéristiques de moments spin/orbite. Les composantes de la masse effective des trous correspondant à l'application de la contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 100 \rangle$ sont données dans le tableau 2-7.

2.3.2.1.2. CONTRAINTE PARALLELE A $\langle 111 \rangle$:

La déformation correspondant à une contrainte uniaxiale de la direction $\langle 111 \rangle$ est donnée par:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} &= (s_{11} + 2s_{12}) X/3 \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} &= s_{44} X/3 \end{aligned} \quad (2-26)$$

En reportant ces éléments de déformation dans l'équation (2-22), on obtient les spectres pour les deux branches Γ_8 dans le système cristallographique:

$$E_{1,2} = Ak^2 \pm \frac{\sqrt{3}}{3} D (k_x k_y + k_x k_z + k_y k_z) \quad (2-27)$$

A partir de cette équation, on trouve l'inverse du tenseur de la masse effective des trous:

$$\left[\frac{1}{m^1} \right] = \begin{bmatrix} A & \sqrt{3}D/6 & \sqrt{3}D/6 \\ \sqrt{3}D/6 & A & \sqrt{3}D/6 \\ \sqrt{3}D/6 & \sqrt{3}D/6 & A \end{bmatrix} \quad \left[\frac{1}{m^2} \right] = \begin{bmatrix} A & -\sqrt{3}D/6 & -\sqrt{3}D/6 \\ -\sqrt{3}D/6 & A & -\sqrt{3}D/6 \\ -\sqrt{3}D/6 & -\sqrt{3}D/6 & A \end{bmatrix} \quad (2-28)$$

Une transformation du système est nécessaire à diagonaliser le tenseur de la masse effective. Pour ce faire, il faut que l'axe X' , Y' et Z' du nouveau système prennent respectivement les directions $\langle 111 \rangle$, $\langle \bar{1} 1 0 \rangle$ et $\langle \bar{1} \bar{1} 2 \rangle$ du l'ancien système (voir la figure 2-7). Après cette transformation, les spectres s'expriment comme suit:

$$E_{1,2} = (A \pm \frac{\sqrt{3}}{3} D) k_x^2 + (A \mp \frac{\sqrt{3}}{6} D) k_y^2 + (A \mp \frac{\sqrt{3}}{6} D) k_z^2 \quad (2-29)$$

Les masses effectives diagonalisées sont données dans le tableau 2-8. L'équation (2-29) indique également que dû à l'application de la contrainte, les surfaces

d'énergie constante de la bande de valence deviennent des ellipsoïdes de révolution dont l'axe de révolution prend la direction de la contrainte: $\langle 111 \rangle$.

Table 2-8: Masse effective des trous du Si sous contrainte papallèle à $\langle 111 \rangle$, en unité de m_0

Branche $E_{1/2^+}$	valeur	branche $E_{3/2}$	valeur
$A + \frac{\sqrt{3}}{3}D$	0.75	$A - \frac{\sqrt{3}}{3}D$	0.14
$A - \frac{\sqrt{3}}{6}D$	0.18	$A + \frac{\sqrt{3}}{3}D$	0.36
$A - \frac{\sqrt{3}}{6}D$	0.18	$A + \frac{\sqrt{3}}{3}D$	0.36

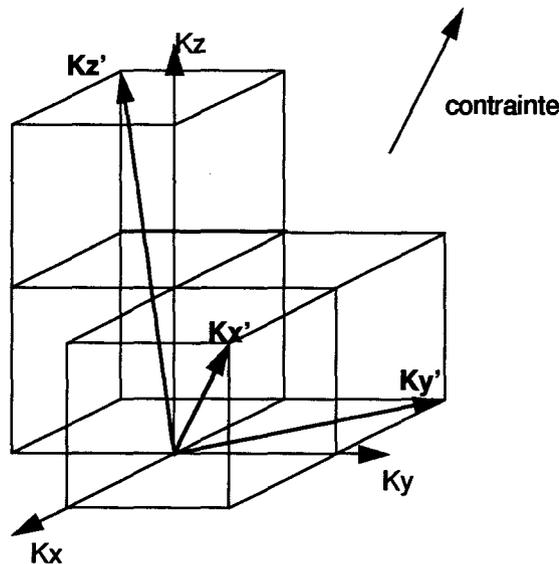


Fig. 2-7: Transformation du système pour diagonaliser le tenseur de masse effective des trous sous l'application d'une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 111 \rangle$.

2.3.2.1.3. CONTRAINTE PARALLELE A $\langle 110 \rangle$:

L'application d'une contrainte uniaxiale le long de la direction $\langle 110 \rangle$ est souvent exploitée dans la pratique. Par exemple, le canal des transistors MOS utilisés

dans les capteurs de pression est orienté selon la direction $\langle 110 \rangle$. Une telle contrainte X crée une déformation suivante:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})X & \varepsilon_{zz} &= s_{12}X \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2}s_{44}X & \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} &= 0 \end{aligned} \quad (2-29)$$

En introduisant ces éléments de déformation dans l'équation (2-22), les spectres dans le système cristallographique sont donnés par:

$$E_{1,2} = (A \pm \frac{B}{2}\eta_1)k_x^2 + (A \pm \frac{B}{2}\eta_1)k_y^2 + (A \mp B\eta_1)k_z^2 \pm \sqrt{3}D\eta_2 k_x k_y \quad (2-30)$$

où η_1 et η_2 sont définis en fonction de β par:

$$\eta_1 = \frac{1}{(1 + 3\beta^2)^{1/2}} \quad \eta_2 = \frac{\beta}{(1 + 3\beta^2)^{1/2}} \quad (2-31)$$

avec $\beta = 0.85$.

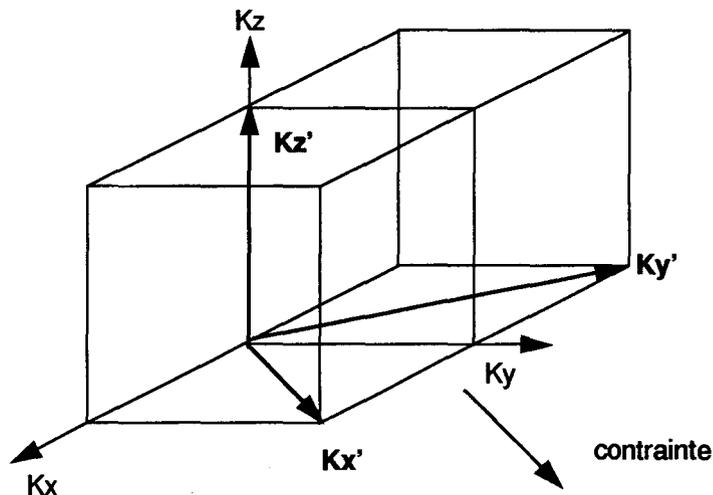


Fig. 2-8: Transformation du système pour diagonaliser le tenseur de masse effective des trous dans le cas où la contrainte uniaxiale est appliquée dans la direction $\langle 110 \rangle$.

L'équation (2-30) nous permet d'écrire l'inverse du tenseur de la masse effective des trous pour les deux branches $E_{1/2^+}$ et $E_{3/2}$:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{m^1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A + \frac{B}{2}\eta_1 & \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & A + \frac{B}{2}\eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & A - B\eta_1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{m^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A - \frac{B}{2}\eta_1 & -\frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & A - \frac{B}{2}\eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & A + B\eta_1 \end{bmatrix} \quad (2-32)$$

Afin de diagonaliser le tenseur de la masse effective, il faut effectuer une transformation du système avec les axes X' , Y' et Z' du nouveau système orientés respectivement dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$ de l'ancien système (voir la figure 2-8).

Les masses principales pour la branche $E_{1/2^+}$ sont données par:

$$\frac{1}{m_{11}^1} = A + \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \quad \frac{1}{m_{22}^1} = A + \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \quad \frac{1}{m_{33}^1} = A - B\eta_1 \quad (2-33)$$

Pour la branche $E_{3/2}$, on obtient:

$$\frac{1}{m_{11}^2} = A - \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \quad \frac{1}{m_{22}^2} = A - \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \quad \frac{1}{m_{33}^2} = A + B\eta_1 \quad (2-34)$$

Les équations (2-33) et (2-34) montrent que les surfaces d'énergie constante ne sont plus des ellipsoïdes de révolution pour une contrainte uniaxiale appliquée dans la direction $[110]$. Le tableau 2-9 présente les valeurs des masses effectives des trous du silicium calculées à partir des équations (2-33) et (2-34).

Table 2-9: Masse effective des trous du Si sous contrainte parallèle à $\langle 110 \rangle$, en unité de m_0 .

Branche $E_{1/2^+}$	valeur	branche $E_{3/2}$	valeur
m_{11}^1	0.15	m_{11}^2	0.52
m_{22}^1	0.42	m_{22}^2	0.16
m_{33}^1	0.26	m_{33}^2	0.21

2.3.2.2. PERTURBATION DE LA SPLIT-OFF BANDE:

Dans ce calcul précédent, on a supposé que le *splitting* de spin-orbite Δ est suffisamment grand de sorte que la matrice de l'Hamiltonian puisse-t- être décomposée en deux matrices indépendantes: l'une est la matrice diagonale supérieure de dimension 4 qui représentent les branches supérieures de la bande de valence; l'autre est la matrice diagonale inférieure de dimension 2 qui décrit la *split-off* branche de la bande de valence. La partie 2.3.2.1. a suivi cette supposition, il en ressort que les masses effectives des trous ne dépendent que de la direction de la contrainte uniaxiale. Mais lorsque la séparation des deux branches supérieures, due à une forte contrainte, devient importante par rapport à celle de spin-orbite Δ , l'interaction entre les branches $E_{1/2^+}, E_{3/2}$ et la *split-off* branche $E_{1/2^-}$ n'est plus négligeable. Cette interaction peut être traitée comme une perturbation pour le cas de faible contrainte. En utilisant la méthode de perturbation, les spectres de branches $E_{1/2^+}, E_{3/2}$ modifiés par la *split-off* branche $E_{1/2^-}$ sont décrits par [9]:

$$E_{1,2}(\epsilon, k) = E_{1,2}^0(\epsilon, k) + \frac{1}{\Delta} \left(E_{\epsilon} \pm \frac{E_{\epsilon^3}}{2E_{\epsilon}^{1/2}} \right) + \frac{1}{\Delta} \left(E_{\epsilon k} \pm \frac{1}{2E_{\epsilon}^{1/2}} \left(E_{\epsilon^2 k^2} - \frac{E_{\epsilon^3} E_{\epsilon k}}{2E_{\epsilon}} \right) \right) \quad (2-35)$$

où $E_{1,2}^0(\epsilon, k)$ a déjà été défini par l'équation (2-22), E_{ϵ} et $E_{\epsilon k}$ sont identiques aux expressions données par l'équation (2-18), $E_{\epsilon^2 k^2}$ et E_{ϵ^3} sont définis par:

$$\begin{aligned} E_{\epsilon^2 k^2} = & -Bb^2 [(k^2 - 3k_x^2)(\epsilon - 3\epsilon_{yy})(\epsilon - 3\epsilon_{zz}) + \\ & + (k^2 - 3k_y^2)(\epsilon - 3\epsilon_{zz})(\epsilon - 3\epsilon_{xx}) + \\ & + (k^2 - 3k_z^2)(\epsilon - 3\epsilon_{xx})(\epsilon - 3\epsilon_{yy})] + \\ & + 3Bd^2 [(k^2 - 3k_x^2)\epsilon_{yz}^2 + (k^2 - 3k_y^2)\epsilon_{zx}^2 + (k^2 - 3k_z^2)\epsilon_{xy}^2] + \\ & + 6Dbd [k_y k_z \epsilon_{yz}(\epsilon - 3\epsilon_{xx}) + k_z k_x \epsilon_{zx}(\epsilon - 3\epsilon_{yy}) + k_x k_y \epsilon_{xy}(\epsilon - 3\epsilon_{zz})] + \\ & + 6\sqrt{3}Dd^2 (k_x k_y \epsilon_{xz} \epsilon_{yz} + k_x k_z \epsilon_{xy} \epsilon_{yz} + k_y k_z \epsilon_{xy} \epsilon_{xz}) \end{aligned} \quad (2-36)$$

et

$$\begin{aligned} E_{\epsilon^3} = & -b^3 (\epsilon - 3\epsilon_{xx})(\epsilon - 3\epsilon_{yy})(\epsilon - 3\epsilon_{zz}) + 6\sqrt{3}d^3 \epsilon_{xy} \epsilon_{xz} \epsilon_{yz} + \\ & + 3bd^2 [(\epsilon - 3\epsilon_{xx})\epsilon_{yz}^2 + (\epsilon - 3\epsilon_{yy})\epsilon_{zx}^2 + (\epsilon - 3\epsilon_{zz})\epsilon_{xy}^2] \end{aligned} \quad (2-37)$$

L'équation (2-35) montre que l'intervention de la troisième branche conduit à deux effets. Premièrement, la séparation $\delta E_{1,2}$ induite par la contrainte mécanique uniaxiale ne dépend plus linéairement de la contrainte:

$$\delta E_{1,2} = E_1 - E_2 = 2E_\epsilon^{1/2} + \frac{1}{\Delta} \frac{E_\epsilon^3}{E_\epsilon^{1/2}} \quad (2-37)$$

Cependant le terme de correction est négligeable devant le premier terme. Le deuxième effet est la variation de la masse effective des trous en fonction de la contrainte, décrite par le troisième terme de l'équation (2-35). C'est un phénomène qui contribuera beaucoup à l'effet de piézorésistivité du silicium de type P.

La variation de masse effective des trous en fonction de la contrainte peut être calculée à partir de l'équation (2-35). Trois exemples respectivement correspondants aux contraintes uniaxiales dans les directions $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ sont présentés dans ce qui suit.

Contrainte parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$:

$$\begin{aligned} \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) &= \frac{2B\delta_1}{\Delta} & \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) &= -\frac{B\delta_1}{\Delta} & \delta \left(\frac{1}{m_{33}^1} \right) &= -\frac{B\delta_1}{\Delta} \\ \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) &= 0 & \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) &= 0 & \delta \left(\frac{1}{m_{33}^2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2-38)$$

avec $\delta_1 = 2b(s_{11} - s_{12})X$.

Pour une contrainte parallèle à la direction $\langle 111 \rangle$, les axes principales X' , Y' et Z' sont respectivement dans les directions $\langle 111 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$, et nous obtenons les variations de masse effectives des trous:

$$\begin{aligned} \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) &= \frac{2D\delta_2}{\sqrt{3}\Delta} & \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) &= -\frac{D\delta_2}{\sqrt{3}\Delta} & \delta \left(\frac{1}{m_{33}^1} \right) &= -\frac{D\delta_2}{\sqrt{3}\Delta} \\ \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) &= 0 & \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) &= 0 & \delta \left(\frac{1}{m_{33}^2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2-39)$$

avec $\delta_2 = (2/\sqrt{3})s_{44}dX$.

Pour une contrainte parallèle à la direction $\langle 110 \rangle$, les axes principales X' , Y' et Z' sont respectivement dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$:

Pour la branche $E_{1/2^+}$:

$$\begin{aligned} \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2}B + \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta + \frac{1}{2}B\gamma_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta\gamma_2 \right) \\ \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2}B - \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta + \frac{1}{2}B\gamma_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta\gamma_2 \right) \\ \delta \left(\frac{1}{m_{33}^1} \right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} (-B - B\gamma_1) \end{aligned} \quad (2-40)$$

Pour la branche $E_{3/2}$:

$$\begin{aligned}\delta\left(\frac{1}{m_{11}^2}\right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2}B + \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta - \frac{1}{2}B\gamma_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta\gamma_2\right) \\ \delta\left(\frac{1}{m_{22}^2}\right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2}B - \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta - \frac{1}{2}B\gamma_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\beta\gamma_2\right) \\ \delta\left(\frac{1}{m_{33}^2}\right) &= \frac{\delta_1}{2\Delta} (-B + B\gamma_1)\end{aligned}\quad (2-41)$$

où γ_1, γ_2 sont définis en fonction de β par:

$$\gamma_1 = \frac{27\beta^4 - 9\beta^2 - 2}{2(1 + 3\beta^2)^{3/2}} \quad \gamma_2 = \frac{9\beta^2 + 7}{2(1 + 3\beta^2)^{3/2}} \quad (2-42)$$

On remarque qu'il n'y a qu'une seule branche dont la masse effective des trous est dépendante de la contrainte dans le cas où la direction de la contrainte est $\langle 100 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$.

2.3.2.3. MODELE DE FORTE ENERGIE CINETIQUE DES TROUS:

Si l'énergie cinétique des trous est élevée que la condition $E_k \gg E_{ek} \gg E_e$ est vérifiée, les spectres $E_{1,2}(\epsilon, k)$ de l'équation (2-17) peuvent être développés en série de E_{ek}/E_k . Avec une approximation du premier ordre, on obtient:

$$\begin{aligned}E_{1,2}(\epsilon, k) &= E_{1,2}(k) \pm \frac{Bb}{2E_k^{1/2}} [3(k_x^2\epsilon_{xx} + k_y^2\epsilon_{yy} + k_z^2\epsilon_{zz}) - k^2\epsilon] \pm \\ &\quad \pm \frac{Dd}{E_k^{1/2}} (k_x k_y \epsilon_{xy} + k_x k_z \epsilon_{xz} + k_y k_z \epsilon_{yz})\end{aligned}\quad (2-42)$$

où les termes E_e/E_k sont négligés et où $E_{1,2}(k)$ est le spectre en énergie de la bande de valence dans l'état sans contrainte. Nous allons appliquer l'équation (2-42) à deux cas intéressants. Pour une contrainte parallèle à la direction $[100]$, la modification de la bande de valence due à la contrainte $\Delta E_{1,2}(\epsilon, k)$ s'écrit:

$$\Delta E_{1,2}(\epsilon, k) = \pm \frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2E_k^{1/2}} (2k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \quad (2-43)$$

Pour une contrainte de la direction $\langle 110 \rangle$, on obtient:

$$\Delta E_{1,2}(\varepsilon, k) = \pm \frac{1}{2E_k^{1/2}} \left[\frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + Dds_{44}k_xk_y \right] \quad (2-44)$$

Les équations (2-43) et (2-44) montrent qu'il n'y a plus de déplacement énergétique de l'ensemble de la bande de valence, la modification de la bande ne dépend que de la direction du vecteur d'onde \vec{k} . Si l'on prend l'énergie cinétique moyenne des trous égale à $\frac{3}{2}KT$, l'effet de la contrainte se manifestera par la variation de la masse effective de trous. En effectuant cette supposition, on obtient, pour une contrainte parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$:

$$\Delta E_{1,2}(\varepsilon, k) = \pm \frac{A \pm \sqrt{B^2 + C^2/5}}{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}} Bb(s_{11} - s_{12})X (2k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \quad (2-45)$$

et pour une contrainte appliquée dans la direction $\langle 110 \rangle$:

$$\Delta E_{1,2}(\varepsilon, k) = \pm \frac{A \pm \sqrt{B^2 + C^2/5}}{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}} \left[\frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + Dds_{44}k_xk_y \right] \quad (2-46)$$

Les équations (2-45) et (2-46) nous permet de trouver aisément la variation des masses effectives des trous. Nous parlerons davantage sur ce sujet dans le chapitre IV.

CHAPITRE III

CONDUCTIVITE ELECTRIQUE

Résumé

A partir de l'équation cinétique de Boltzmann, la conductivité des électrons et des trous est définie dans l'approximation de la masse effective et le temps de relaxation. Le contenu de ce chapitre est important pour le développement du calcul des coefficients de piézorésistivité.

CHAPITRE III

CONDUCTIVITE ELECTRIQUE

La conductivité électrique est un effet de transport qui décrit le mouvement des porteurs électriquement chargés sous l'action de champs électriques intérieurs ou extérieurs. Le chapitre II a rappelé que l'effet du potentiel périodique dans un cristal sur les électrons se traduit par une masse effective des électrons. Les porteurs dans un semiconducteurs (les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence) sont considérés comme porteurs libres mais avec des masses effectives différentes que la masse d'un électron libre m_0 .

Selon la mécanique quantique, les porteurs dans un semiconducteur se distribuent dans l'espace réel \vec{r} et l'espace du vecteur d'onde \vec{k} , c'est-à-dire dans un espace de phase. La fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ [35] est telle que $f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{r} d\vec{k}$ représente le nombre de porteurs (électrons ou trous) dans le volume élémentaire $d\vec{r} d\vec{k}$ autour du point \vec{r}, \vec{k} de l'espace de phase au temps t . En connaissant la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$, on peut calculer la densité de courant à l'endroit du cristal \vec{r} au temps t par une intégration sur l'espace du vecteur d'onde \vec{k} :

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{r}, \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{k} \quad (3-1)$$

où e est la charge d'un électron, $\vec{v}(\vec{r}, \vec{k})$ est la vitesse des électrons et le facteur $1/4\pi^3$ est la densité d'état dans l'espace du vecteur d'onde k par unité de volume de l'espace réel en tenant compte de l'effet de spin. Quand il n'y a pas de champ électrique appliqué, la fonction de distribution $f_0(\vec{r}, \vec{k})$ à l'état d'équilibre donne un courant nul, c'est-à-dire:

$$\int_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{r}, \vec{k}) f_0(\vec{r}, \vec{k}) d\vec{k} = 0 \quad (3-2)$$

Ainsi la densité de courant peut être récrit par:

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{r}, \vec{k}) [f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})] d\vec{k} \quad (3-3)$$

En conséquence, le problème de transport de porteurs est représenté par la recherche de l'écart de la fonction de distribution de l'état d'équilibre $[f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})]$.

L'objectif de ce chapitre est de rappeler brièvement la théorie de transport pour les semiconducteur. A partir de l'équation cinétique de Boltzmann, on introduira tout d'abord le concept du temps de relaxation afin de caractériser les processus de diffusion des porteurs par de différentes mécanismes. Ensuite, la solution générale de la conductivité sera concrétisée dans le développement des conductivités des électrons et des trous pour le silicium.

3.1. EQUATION CINETIQUE DE BOLTZMANN:

Un électron dans un semiconducteur subit des collisions avec d'autres électrons et avec les perturbations locales induites par les défauts ou les impureté. Lorsque l'on applique un champ électrique externe dont le potentiel est $V(\vec{r})$, la fonction de distribution à l'état stationnaire se modifie selon l'équation cinétique de Boltzmann [36]:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}) - \frac{e}{\hbar} \nabla V(\vec{r}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\vec{k}'} w(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{r}, \vec{k}') - f(\vec{r}, \vec{k})] d\vec{k}' \quad (3-4)$$

où $\vec{v} = \partial\vec{r}/\partial t$ est la vitesse des électrons, $w(\vec{k}, \vec{k}') d\vec{k}'$ représente la probabilité de passage d'un porteur de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' , et le facteur $1/4\pi^3$ est la densité d'état dans l'espace de vecteur d'onde \vec{k} par unité de volume de l'espace réel en tenant compte de l'effet de spin. L'équation (3-4) montre qu'à l'état stationnaire l'évolution de la fonction de distribution due à l'effet du champ électrique externe et au mouvement des porteurs se trouve compensée par les collisions des porteurs et par les perturbations locales du champ périodique du réseau.

Il est difficile de trouver une solution générale de l'équation de Boltzmann. Cette tâche est cependant notamment allégée lorsqu'on introduit le concept du temps de relaxation des processus en cause. Le membre de droite de l'équation (3-4) représente l'effet de collisions qui assurent le retour du système à l'état d'équilibre perturbé par l'application d'un champs extérieur $V(\vec{r})$. Si l'on suppose que la vitesse de rétablissement de l'équilibre est proportionnelle à l'écart de l'état d'équilibre $[f(\vec{r}, \vec{k}) - f_0(\vec{r}, \vec{k})]$, la droite de l'équation (3-4) peut être approximée par:

$$\frac{1}{4\pi^3} \int_{\vec{k}'} w(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{r}, \vec{k}') - f(\vec{r}, \vec{k})] d\vec{k}' = -[f(\vec{r}, \vec{k}) - f_0(\vec{r}, \vec{k})] / \tau(\vec{k}) \quad (3-5)$$

où $\tau(\vec{k})$ représente le temps de retour à l'état d'équilibre, il est appelé temps de relaxation [36]. Généralement, $\tau(\vec{k})$ est fonction du vecteur d'onde \vec{k} . En combinant les équations (3-4) et (3-5), on obtient:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}) - \frac{e}{\hbar} \nabla V(\vec{r}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (3-6)$$

L'expression (3-6) est l'équation qui décrit le transport stationnaire dans le cas où le temps de relaxation permet de caractériser les effets des collisions. Nous cherchons une solution de l'équation (3-6) sous forme d'une série telle que [36]:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{r}, \vec{k}) + \dots \quad (3-7)$$

où $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}), f^{(2)}(\vec{r}, \vec{k}),$ etc, sont les termes de corrections de différents ordres appliqués à la fonction de distribution à l'état d'équilibre. Les dérivées de $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$ par rapport à \vec{k} et \vec{r} doivent être du même ordre que $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{k})$, de sorte qu'une solution approchée puisse-t-elle être trouvée en négligeant tous les termes d'ordres supérieurs. En première approximation la solution de l'équation (3-6) est donc de la forme:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}) \quad (3-8)$$

Introduisant (3-8) dans (3-6), on obtient l'équation qui détermine la fonction $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} [f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})] - \frac{e}{\hbar} \nabla V(\vec{r}) \cdot \nabla_{\vec{k}} [f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})] = -\frac{f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (3-9)$$

La fonction de distribution $f_0(\vec{r}, \vec{k})$ à l'état d'équilibre est ici exprimée en fonction de la distribution de Fermi-Dirac:

$$f_0(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{1}{1 + e^{(E-F)/(KT)}} \quad (3-10)$$

où E est l'énergie des électrons, F le niveau de Fermi, K la constante de Boltzmann et T la température absolue. Si l'on étudie un cristal dans lequel le niveau de Fermi et la température sont uniformes, on obtient les dérivées de $f_0(\vec{r}, \vec{k})$ en remarquant que E ne dépend que du vecteur d'onde \vec{k} :

$$\nabla_{\vec{r}} f_0(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{e^{(E-F)/(KT)} \nabla_{\vec{r}} \left(\frac{E-F}{KT} \right)}{[1 + e^{(E-F)/(KT)}]^2} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \left[\nabla_{\vec{r}} F + (E-F) \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right] = 0 \quad (3-11a)$$

et

$$\nabla_{\vec{k}} f_0(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{e^{(E-F)/(KT)} \nabla_{\vec{k}} E}{[1 + e^{(E-F)/(KT)}]^2 KT} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} \quad (3-11b)$$

où $\hat{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E$ est la vitesse des électrons et $\frac{\partial f_0}{\partial E}$ égale à:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{e^{(E-F)/(KT)}}{[1 + e^{(E-F)/(KT)}]^2} \frac{1}{KT} \quad (3-12)$$

En négligeant les termes de $\nabla_{\vec{r}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$, $\nabla_{\vec{k}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$, on obtient la correction de premier ordre:

$$\frac{f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} = \frac{\partial f_0}{\partial E} (e\vec{E} \cdot \hat{v}) \quad (3-13)$$

où $\vec{E} = -\nabla V(\vec{r})$ est le champ électrique appliqué. En tenant compte de la structure de bandes énergétiques d'un semiconducteur, sa conductivité électrique peut être calculée à partir des équation (3-3) et (3-13).

3.2. CONCENTRATION DE PORTEURS:

Dans l'espace des vecteurs d'onde, et prenant en compte l'effet de spin, la densité d'état par unité de volume de l'espace réel est simplement donnée par:

$$N(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3} = \frac{1}{4\pi^3} \quad (3-14)$$

ainsi la concentration en porteurs est calculée par l'intégrale suivante:

$$n = \int_{\vec{k}} f_0 N(\vec{k}) d\vec{k} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} f_0 d\vec{k} \quad (3-15)$$

Comme la fonction de distribution f_0 est fonction de l'énergie, il y a tout intérêt à passer de l'espace du vecteur d'onde à l'espace d'énergie. Pour ce faire, on suppose que la structure de bande peut être décrite par les masses effectives:

$$E(k) = \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_1} k_1^2 + \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_2} k_2^2 + \frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_3} k_3^2 \quad (3-16)$$

où $\tilde{\hbar} = \hbar / (2\pi)$. Un changement de variables:

$$w_1 = \frac{\tilde{\hbar} k_1}{\sqrt{2m_1}}, w_2 = \frac{\tilde{\hbar} k_2}{\sqrt{2m_2}}, w_3 = \frac{\tilde{\hbar} k_3}{\sqrt{2m_3}} \quad (3-17)$$

transforme l'équation (3-15) sous la forme:

$$n = 2 \left(\frac{2m_d}{h^2} \right)^{3/2} \int_k f_0 d\vec{w} \quad (3-18)$$

où $m_d = \sqrt[3]{m_1 m_2 m_3}$ est la masse effective de densité d'état. L'équation (3-16) est également simplifiée comme suit:

$$E = w_1^2 + w_2^2 + w_3^2 = w^2 \quad (3-19)$$

Avec un système de coordonnées sphériques ayant l'axe polaire orienté le long de k_z , on obtient:

$$\begin{aligned} w_1 &= w \sin \theta \cos \varphi, \quad w_2 = w \sin \theta \sin \varphi, \quad w_3 = w \cos \theta \\ d\vec{w} &= w^2 \sin \theta dw d\theta d\varphi = w^2 dw d\Omega \end{aligned} \quad (3-20)$$

et l'équation (3-19) nous donne:

$$dE = 2w dw \Leftrightarrow dw = \frac{dE}{2\sqrt{E}} \quad (3-21)$$

En reportant (3-21) et (3-20) dans l'intégrale (3-18), on obtient:

$$n = \left(\frac{2m_d}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty f_0 E^{+1/2} dE \int d\Omega = 4\pi \left(\frac{2m_d}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{(+1)/2}}{1 + e^{(E-F)/KT}} dE \quad (3-22)$$

Si l'on normalise l'énergie par rapport à la quantité KT , l'équation (3-22) devient:

$$n = 4\pi \left(\frac{m_d KT}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{(+1)/2}}{1 + e^{(x-x_f)}} dx \quad (3-23)$$

où x, x_f sont définis par:

$$x = \frac{E}{KT} \quad x_f = \frac{F}{KT} \quad (3-24)$$

3.3. CONDUCTIVITES DANS UN SEMICONDUCTEUR:

Pour pouvoir caractériser la conductivité électrique d'un semiconducteur, il faut établir une relation entre la densité de courant \vec{j} et l'intensité du champ électri-

que \vec{E} donnant naissance à ce courant. En introduisant le résultat de l'équation (3-13) dans l'équation (3-3), la densité de courant est donnée par:

$$\vec{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} (\vec{E} \cdot \vec{v}) \vec{v} d\vec{k} \quad (3-25)$$

Un tenseur de conductivité σ peut alors être défini par:

$$\sigma_{ij} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} v_i v_j d\vec{k} \quad (3-26)$$

Ainsi la densité de courant s'écrit sous la forme de la loi d'Ohm:

$$\vec{J} = \sigma \cdot \vec{E} \quad (3-27)$$

Deux hypothèses vont être faites pour le calcul de conductivité. La première considère que le temps de relaxation soit une puissance de l'énergie [36]:

$$\tau(\vec{k}) = \tau(E) = \tau_0 E^p \quad (3-28)$$

où l'exposant p dépend du mécanisme de diffusion de porteurs. La seconde suppose que la structure de bande puisse-t-êre décrite par les masses effectives selon l'équation (3-16). Dans ce cas, la vitesse des électrons est définie par:

$$v_i = \frac{\hbar k_i}{m_i} \quad (3-29)$$

Après le changement de variables défini par l'équation (3-17), la vitesse des électrons devient:

$$v_i = w_i \sqrt{2/m_i} \quad (3-30)$$

En considérant les équations (3-19), (3-20), (3-21), (3-28) et (3-30), la conductivité (3-26) s'écrit:

$$\sigma_{ij} = -\frac{2e^2}{\sqrt{m_i m_j}} \left(\frac{m_d}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \tau(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} E^{3/2} dE \int \left(\frac{w_i}{w} \right) \left(\frac{w_j}{w} \right) d\Omega \quad (3-31)$$

Pour l'intégrale angulaire dans l'équation (3-31), deux cas sont ici donnés:

$$\int \left(\frac{w_x}{w}\right) \left(\frac{w_x}{w}\right) d\Omega = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (\sin\theta)^2 (\cos\varphi)^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{3}$$

$$\int \left(\frac{w_x}{w}\right) \left(\frac{w_y}{w}\right) d\Omega = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (\sin\theta)^2 \sin\varphi \cos\varphi \sin\theta d\theta d\varphi = 0$$
(3-32)

La solution générale [36] est:

$$\int \left(\frac{w_i}{w}\right) \left(\frac{w_j}{w}\right) d\Omega = \frac{4\pi}{3} \delta_{ij}$$
(3-33)

Avec ce résultat, l'équation (3-31) s'exprime sous une forme suivante:

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{\sqrt{m_i m_j}} \left[4\pi \left(\frac{m_d}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} f_0 E^{-1/2} dE \right] \left[\frac{\int_0^{\infty} \tau(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} E^{3/2} dE}{\int_0^{\infty} f_0 E^{+1/2} dE} \right] \delta_{ij}$$
(3-34)

où le première terme entre crochets est la concentration en porteurs, le second terme entre crochets est le temps de relaxation moyen donné par:

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} E^{3/2} dE}{\int_0^{\infty} f_0 E^{-1/2} dE}$$
(3-35)

Ainsi la conductivité s'écrit:

$$\sigma_{ij} = en (e \langle \tau \rangle / \sqrt{m_i m_j}) \delta_{ij}$$
(3-36)

On introduit le tenseur de mobilité dont les éléments sont définis par:

$$\mu_{ij} = \frac{e \langle \tau \rangle}{\sqrt{m_i m_j}} \delta_{ij}$$
(3-37)

Donc la conductivité des électrons pour une bande décrite par (3-16) peut être écrite sous forme de teneur tel que:

$$\sigma = \begin{bmatrix} en\mu_{11} & 0 & 0 \\ 0 & en\mu_{22} & 0 \\ 0 & 0 & en\mu_{33} \end{bmatrix} \quad (3-38)$$

Comme les axes du système coïncident avec les axes principaux des ellipsoïdes de la bande énergétique, ce tenseur est diagonal. Un changement du système peut faire apparaître des éléments nondiagonaux dans le tenseur de conductivité. En appliquant (3-38), nous allons développer respectivement les conductivités des électrons et des trous pour le silicium.

3.3.1. CONDUCTIVITE DE LA BANDE DE CONDUCTION DU SILICIUM:

La bande de conduction du silicium comporte six vallées se situant respectivement dans le groupe des directions $\{100\}$ (voire la figure 3-1).

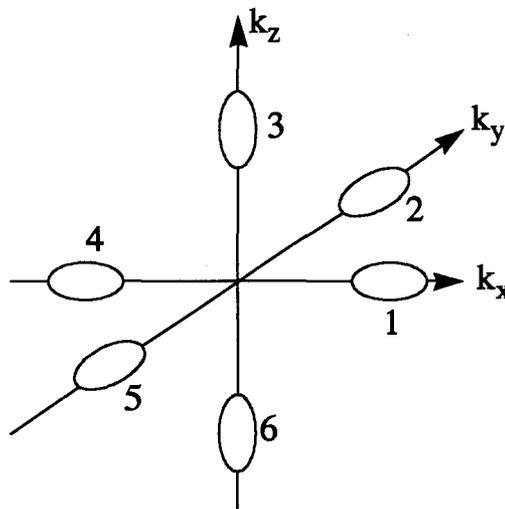


Fig. 3-1: Positions de six vallées de la bande de conduction de silicium dans l'espace du vecteur d'onde.

En numérotant les vallées par le symbole ν et en désignant la conductivité due aux électrons d'une vallée donnée par le symbole σ^ν , on obtient la conductivité totale des électrons:

$$\sigma = \sum_{\nu=1}^6 \sigma^\nu \quad (3-39)$$

Pour la vallée v , la conductivité σ^v s'écrit:

$$\sigma^v = en_v \begin{bmatrix} \mu_{11}^v & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{22}^v & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{33}^v \end{bmatrix} \quad (3-40)$$

où n_v est la concentration des électrons dans la vallée v . Puisque les six vallées sont énergiquement équivalentes, à l'état d'équilibre, nous avons:

$$\begin{aligned} n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = n/6 \\ \tau^1 = \tau^2 = \tau^3 = \tau^4 = \tau^5 = \tau^6 = \tau \end{aligned} \quad (3-41)$$

En appliquant l'équation (3-40) à chaque vallée, on obtient:

$$\begin{aligned} \sigma^1 = \sigma^4 = \frac{1}{6} en \begin{bmatrix} e\tau/m_l & 0 & 0 \\ 0 & e\tau/m_t & 0 \\ 0 & 0 & e\tau/m_l \end{bmatrix} & \quad \sigma^2 = \sigma^5 = \frac{1}{6} en \begin{bmatrix} e\tau/m_t & 0 & 0 \\ 0 & e\tau/m_l & 0 \\ 0 & 0 & e\tau/m_t \end{bmatrix} \\ \sigma^3 = \sigma^6 = \frac{1}{6} en \begin{bmatrix} e\tau/m_t & 0 & 0 \\ 0 & e\tau/m_l & 0 \\ 0 & 0 & e\tau/m_t \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3-42)$$

où m_l, m_t sont respectivement les masses effectives longitudinale et transversale des électrons. Selon l'équation (3-39) on additionne les contributions de chaque vallée pour obtenir la conductivité totale des électrons:

$$\sigma = en \begin{bmatrix} e\tau \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) & 0 & 0 \\ 0 & e\tau \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) & 0 \\ 0 & 0 & e\tau \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) \end{bmatrix} \quad (3-43)$$

En introduisant la masse effective de conductivité m_c définie par:

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) \quad (3-44)$$

La conductivité de la bande de conduction du silicium s'écrit:

$$\sigma = en \begin{bmatrix} e\tau/m_c & 0 & 0 \\ 0 & e\tau/m_c & 0 \\ 0 & 0 & e\tau/m_c \end{bmatrix} = en\mu \quad \text{avec} \quad \mu = \frac{e\tau}{m_c} \quad (3-55)$$

L'équation (3-55) indique que la conductivité de la bande de conduction du silicium se réduit à une grandeur scalaire dû à la répartition symétrique des conductivités des six vallées.

3.3.2. CONDUCTIVITE DE LA BANDE DE VALENCE DU SILICIUM:

La bande de valence du silicium est dégénérée au centre de la zone de Brillouin. Comme l'a montré le chapitre II, la bande de valence peut être approximée par deux branches ayant des masses effectives isotropes, la branche des trous lourds et la branche des trous légers (voir la figure 3-2). Dans l'approximation de masse effective, les deux branches sont représentées par:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_l} k^2 \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m_h} k^2 \end{aligned} \quad (3-56)$$

où l et h signifient respectivement les trous légers et les trous lourds.

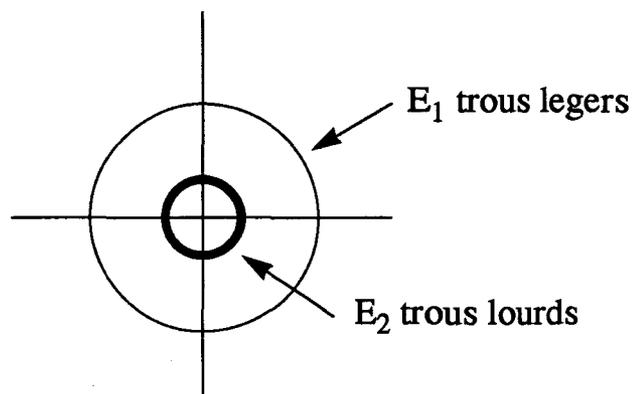


Fig. 3-2: Les surfaces approximatives d'énergie constante de la bande de valence de silicium.

Les trous lourds et les trous légers contribuent tous à la conductivité de la bande de valence:

$$\sigma = \sigma_h + \sigma_l \quad (3-57)$$

où les conductivités de trous lourds et trous légers σ_h, σ_l s'écrivent:

$$\sigma_h = ep_h \begin{bmatrix} e\tau_h/m_h & 0 & 0 \\ 0 & e\tau_h/m_h & 0 \\ 0 & 0 & e\tau_h/m_h \end{bmatrix} \quad \sigma_l = ep_l \begin{bmatrix} e\tau_l/m_l & 0 & 0 \\ 0 & e\tau_l/m_l & 0 \\ 0 & 0 & e\tau_l/m_l \end{bmatrix} \quad (3-58)$$

où p_h, p_l sont respectivement les concentrations en trous lourds et en trous légers. τ_h, τ_l sont les temps de relaxation des trous lourds et des trous légers et en principe ils sont différents dû à la différence de leurs masses effectives. Cependant, si l'on suppose que τ_h, τ_l sont égaux, la conductivité induite par les trous s'écrit:

$$\sigma = ep \begin{bmatrix} e\tau \left(\frac{1}{1+r} \frac{1}{m_h} + \frac{r}{1+r} \frac{1}{m_l} \right) & 0 & 0 \\ 0 & e\tau \left(\frac{1}{1+r} \frac{1}{m_h} + \frac{r}{1+r} \frac{1}{m_l} \right) & 0 \\ 0 & 0 & e\tau \left(\frac{1}{1+r} \frac{1}{m_h} + \frac{r}{1+r} \frac{1}{m_l} \right) \end{bmatrix} \quad (3-59)$$

où $\tau = \tau_l = \tau_h, p = p_h + p_l$ est concentration totale des trous et $r = p_l/p_h$ est le rapport entre la concentration des trous légers et celle des trous lourds. On introduit également une masse effective de conductivité pour les trous:

$$\frac{1}{m_c} = \left(\frac{1}{1+r} \frac{1}{m_h} + \frac{r}{1+r} \frac{1}{m_l} \right) \quad (3-60)$$

La conductivité induite par les trous prend donc la forme suivante:

$$\sigma = ep \begin{bmatrix} \frac{e\tau}{m_c} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e\tau}{m_c} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{e\tau}{m_c} \end{bmatrix} = ep\mu \quad \text{avec} \quad \mu = \frac{e\tau}{m_c} \quad (3-61)$$

L'équation (3-61) montre que la conductivité de trous est également isotrope dans l'approximation de masse effective isotrope.

Pour terminer ce chapitre, considérons maintenant la conductivité d'un corps comportant les 2 types de porteurs: électrons et trous. Dans la mesure où l'approximation de masse effective est valable, la conductivité totale est la somme de la contribution des deux types de porteurs:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p \quad (3-62)$$

où n représente les quantités liés avec les électrons et p représente les quantités concernant les trous. Pour un semiconducteur de type N, le nombre d'électrons est nettement supérieur à celui de trous ainsi la conductivité des électrons y est dominante; pour un semiconducteur de type P, par contre, ce sont les trous qui détermine la conductivité. S'il s'agit d'un semiconducteur avec un niveau de Fermi près du milieu de gap, il faut tenir compte de tous les deux types de porteurs car les nombres des électrons et des trous y sont comparables.

CHAPITRE IV

PIEZORESISTIVITE DANS LE VOLUME DU SILICIUM

Résumé

En combinant le modèle de potentiel de déformation et la définition de la conductivité, la piézorésistivité dans le volume du silicium est étudiée dans les deux cas: compression hydrostatique et contrainte uniaxiale. Les coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} sont trouvés sous forme analytique pour le silicium de type N et de type P.

CHAPITRE IV

PIEZORESISTIVITE DANS LE VOLUME DU SILICIUM

Ce chapitre étudie l'effet de piézorésistivité dans un semiconducteur uniformément dopé. Un semiconducteur comporte deux types de porteurs, à savoir, les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence. La conductivité totale d'un semiconducteur est donc donnée par:

$$\sigma_{ij} = en\mu_{n,ij} + ep\mu_{p,ij} = \sum_{\nu} en_{\nu}\mu_{n,ij}^{\nu} + \sum_{\vartheta} ep_{\vartheta}\mu_{p,ij}^{\vartheta} \quad (4-1)$$

où $\mu_{n,ij} = \frac{1}{n} \sum_{\nu} n_{\nu}\mu_{n,ij}^{\nu}$ est la mobilité moyenne des électrons, $\mu_{p,ij} = \frac{1}{p} \sum_{\vartheta} p_{\vartheta}\mu_{p,ij}^{\vartheta}$ est la mobilité moyenne de trous. ν, ϑ représentent respectivement le numéro des vallées de la bande de conduction et le numéro des branches de la bande de valence. Un calcul en variations de l'équation (4-1) donne:

$$\delta\sigma_{ij} = \left[en\mu_{n,ij} \frac{\delta n}{n} + ep\mu_{p,ij} \frac{\delta p}{p} \right] + \left[en\mu_{n,ij} \frac{\delta\mu_{n,ij}}{\mu_{n,ij}} + ep\mu_{p,ij} \frac{\delta\mu_{p,ij}}{\mu_{p,ij}} \right] \quad (4-2)$$

Les termes entre la première paire de crochets correspondent aux variations du nombre de porteurs dues au changement de la largeur de bande interdite et les termes dans la seconde paire de crochets représentent les variations de mobilité dues aux transferts de porteurs entre différentes vallées, et aux variations du temps de relaxation et de masses effectives. A partir de l'équation (4-2), on traitera d'abord le cas où la contrainte appliquée est hydrostatique. Ensuite, on étudiera l'effet de piézorésistivité du silicium de type N et P lorsque la contrainte appliquée est uniaxiale. En ce qui concerne l'effet de piézorésistivité pour le silicium de type P, on établira deux modèles en distinguant faible ou forte énergie cinétique des trous, et on y discutera également leur validité en fonction de la température et de la contrainte. Une investigation complète de l'influence de concentration d'impureté sur les coefficients de piézorésistivité terminera ce chapitre.

4.1. COMPRESSION HYDROSTATIQUE:

Une contrainte hydrostatique crée un tenseur de déformation dont les composantes diagonales sont identiques et les composantes non diagonales sont nulles. Cette déformation hydrostatique est présentée par:

$$\epsilon = \frac{\Delta V}{3V} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \frac{\Delta V}{3V} \quad (4-3)$$

où $\Delta V/V$ est la variation relative du volume de semiconducteur. Dans ce cas, le tenseur de déformation devient un scalaire. Par ailleurs, et de manière plus générale, une déformation quelconque peut être décomposée sous la forme suivante [37]:

$$\varepsilon_{ij} = \left[\varepsilon_{ij} - \left(\frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{ll} \right) \delta_{ij} \right] + \left(\frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{ll} \right) \delta_{ij} \quad (4-4)$$

Le second terme du membre de droite correspond au tenseur d'une déformation hydrostatique. Le tenseur défini par le premier terme est le tenseur de cisaillement. Par conséquent, l'effet de la déformation hydrostatique mérite d'être étudié dans un premier temps pour l'application de la piézorésistivité.

Une déformation hydrostatique fait varier le paramètre du réseau cristallin sans changer ses propriétés de symétrie. Les bandes énergétiques gardent la même structure que l'état sans contrainte mais la largeur de bande interdite se modifie. Dans ce cas, il est supposé que la contribution de la variation de mobilités de porteurs dans l'équation (4-2) n'existe pas [2], on obtient donc:

$$\delta\sigma_{ij} = en\mu_{n,ij} \frac{\delta n}{n} + ep\mu_{p,ij} \frac{\delta p}{p} \quad (4-5)$$

La condition de neutralité dans un semiconducteur est donnée par:

$$n - p = N_d - N_a = N \quad (4-6)$$

où N_a, N_d sont respectivement les concentrations d'accepteurs et de donneurs, ici, les accepteurs et les donneurs sont supposés complètement ionisés. Pour un semiconducteur nondégénéré, le produit des concentrations de porteurs est calculé par:

$$np = n_i^2 = N_v N_c e^{-E_g/KT} \quad (4-7)$$

où n_i est la concentration intrinsèque de porteurs, N_c, N_v les densités d'états effectives pour la bande de conduction et pour la bande de valence, et E_g la largeur de bande interdite. En variation, les équations (4-6) et (4-7) donnent:

$$\begin{aligned} \delta n &= \delta p \\ p\delta n + n\delta p &= n_i^2 \left(-\frac{\delta E_g}{KT} \right) \end{aligned} \quad (4-8)$$

où l'on suppose que l'ionisation d'impureté est indépendante de la contrainte méca-

nique. δE_g est la variation de la largeur de bande interdite E_g . Il ressort de l'équation (4-8):

$$\delta n = \delta p = \frac{np}{n+p} \left(-\frac{\delta E_g}{KT} \right) \quad (4-9)$$

En portant les résultats dans l'équation (4-5), la variation de conductivité est donnée par:

$$\delta \sigma_{ij} = (e\mu_{n,ij} + e\mu_{p,ij}) \left(-\frac{\delta E_g}{KT} \frac{np}{n+p} \right) \quad (4-10)$$

Pour un semiconducteur à symétrie cubique comme le silicium, il en résulte:

$$\frac{\delta \sigma_{11}}{\sigma} = -\frac{\delta E_g}{KT} \frac{r}{1+r} \frac{1+b}{1+rb} \quad (4-11)$$

où $r = p/n$ est le rapport entre les concentrations des trous et des électrons, $b = \mu_p/\mu_n$ le rapport entre les mobilités des trous et celle des électrons et σ est la conductivité à l'état sans contrainte qui est un scalaire pour un semiconducteur à symétrie cubique.

Une variation de la largeur de la bande interdite est déterminée par un déplacement du bas de la bande de conduction et du haut de la bande de valence. Les déplacements de E_c et E_v peuvent être différents. Dans un cas générale la position de E_c et E_v dépend de la contrainte appliquée X :

$$E_c(X) = E_c + \frac{\partial E_c}{\partial X} X + \frac{\partial^2 E_c}{\partial X^2} X^2 + \dots \quad (4-12)$$

Si l'on se limite au cas de faible contraintes, on peut négliger tous les termes d'ordres supérieurs à la première:

$$E_c(X) = E_c + \delta E_c = E_c + \Delta_c X \quad (4-13)$$

Le supplément d'énergie potentielle qu'acquiert un électron dans un réseau déformé est appelé potentiel de déformation, et la grandeur Δ_c porte le nom de constante du potentiel de déformation. Les mêmes considérations sont applicables à la position du haut de la bande de valence:

$$E_v(X) = E_v + \delta E_v = E_v + \Delta_v X \quad (4-14)$$

La variation de la largeur de la bande interdite due à l'application de contraintes peut être donc calculée par:

$$\delta E_g = \delta E_c - \delta E_v = (\Delta_c - \Delta_v) X \quad (4-15)$$

On introduit ici une constante du potentiel de déformation Δ_g qui représente la variation de la largeur de la bande interdite par unité de contrainte.

$$\Delta_g = \Delta_c - \Delta_v \quad (4-16)$$

Revenons sur le calcul du coefficient de piézorésistivité induite par une contrainte hydrostatique. En se référant au chapitre II, pour une contrainte hydrostatique X , on obtient une variation relative de la conductivité qui s'exprime grâce aux coefficients de piézorésistivité:

$$\delta\sigma_{11}/\sigma = -(\Pi_{11} + 2\Pi_{12}) X \quad (4-17)$$

En combinant les équations (4-11), (4-16) et (4-17), le coefficient de piézorésistivité dû à l'application d'une contrainte hydrostatique est donné par:

$$\Pi_v = \Pi_{11} + 2\Pi_{12} = \frac{\Delta_g}{KT} \frac{r}{1+r} \frac{1+b}{1+rb} = \frac{\Delta_g}{KT} f(r) \quad (4-18)$$

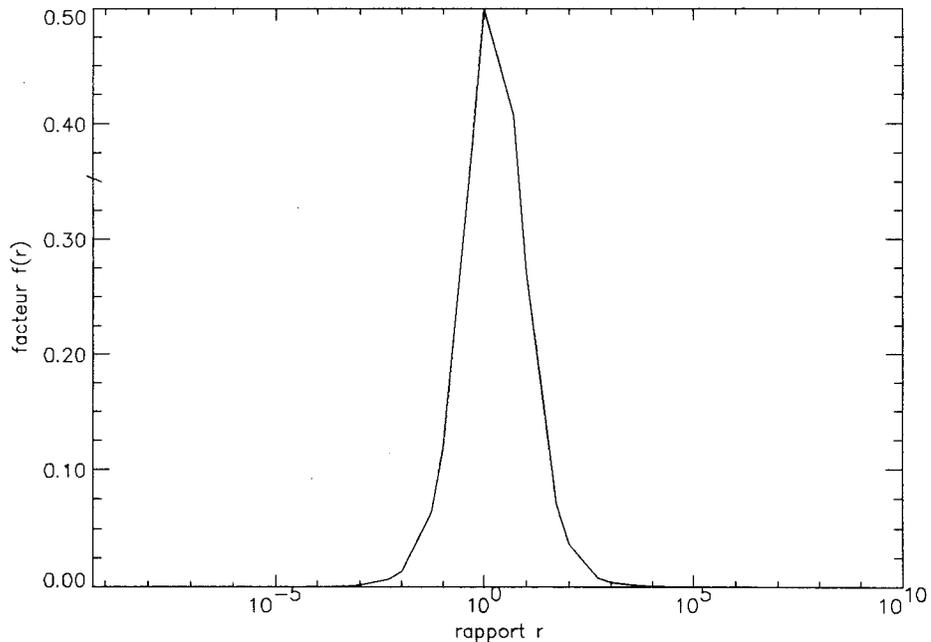


Fig. 4-1: Evolution du facteur $f(r)$ avec le rapport des concentrations de trous et d'électrons, r .

L'équation (4-18) indique que le coefficient de piézorésistivité est inversement proportionnel à la température, et est fonction du rapport des concentrations des trous et des électrons r . La figure 4-1 trace l'évolution du facteur $f(r)$ en fonction du rapport r . On y voit que plus le semiconducteur est intrinsèque, plus l'effet de piézorésistivité hydrostatique est important. Avec une valeur typique $\Delta_g = 1.5 \times 10^{-12} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2/\text{dyne}$ [38] à la température ambiante ($T=300\text{K}$), on obtient un coefficient de piézorésistivité $\Pi = \Delta_g/KT = 60 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyne}$ avec $f(r) \approx 1$. Cette valeur est équivalent aux coefficients de piézorésistivité de silicium. Il en ressort qu'il faut prendre en compte l'effet de variation de la bande interdite lorsque les nombres des électrons des trous deviennent comparables

4.2. CONTRAINTE UNIAXIALE:

Pour un semiconducteur dopé de type N ou de type P, la figure 4-1 montre que l'effet des variations des concentrations en porteurs devient négligeable. Dans ce cas, la variation de conductivité est due à la variation de mobilité, le deuxième terme de l'équation (4-2):

$$\delta\sigma_{ij} = en\mu_{n,ij} \frac{\delta\mu_{n,ij}}{\mu_{n,ij}} + ep\mu_{p,ij} \frac{\delta\mu_{p,ij}}{\mu_{p,ij}} \quad (4-19)$$

En appliquant cette équation à un semiconducteur à symétrie cubique tel que le silicium, on obtient la variation relative de conductivité:

$$\frac{\delta\sigma_{ij}}{\sigma_0} = \left(\frac{\delta\mu_{n,ij}}{\mu_n} + rb \frac{\delta\mu_{p,ij}}{\mu_p} \right) / (1 + rb) \quad (4-20)$$

où σ_0, r, b ont la même signification que dans l'équation (4-11), μ_n et μ_p sont respectivement les mobilités des électrons et des trous à l'état sans contrainte. Si le semiconducteur est fortement dopé de type N, le paramètre r est nettement inférieur à l'unité, et l'équation (4-20) devient:

$$\delta\sigma_{ij}/\sigma_0 = \delta\mu_{n,ij}/\mu_n \quad (4-21)$$

Il en ressort que l'effet de piézorésistivité est uniquement déterminé par les électrons de la bande de conduction. De même, ce sont les trous qui dominent l'effet de piézorésistivité dans un semiconducteur fortement dopé de type P:

$$\delta\sigma_{ij}/\sigma_0 = \delta\mu_{p,ij}/\mu_p \quad (4-22)$$

Dans la partie suivante, nous allons étudier le phénomène de piézorésistivité

déterminé par les porteurs majoritaires dans un semiconducteur. Pour ce faire, d'une part il est supposé que l'ionisation d'impureté est indépendante de la contrainte mécanique, le nombre de porteurs majoritaires restant ainsi constant. Ceci nous permet de déterminer le niveau de Fermi dans l'effet de transfert ^[2, 36] entre les vallées de la bande de conduction ou les branches de la bande de valence. D'autre part, la contrainte appliquée est uniaxiale.

4.2.1. PIEZORESISTANCE DU SILICIUM DE TYPE N:

Au chapitre III, nous avons rappelé que la bande de conduction du silicium est constituée de six vallées équivalentes. La conductivité totale est la somme de la contribution de chaque vallée:

$$\sigma_{ij} = \sum_{v=1}^6 en_v \mu_{ij}^v = \sum_{v=1}^6 en_v \frac{e\tau_{ij}^v}{m_{ij}^v} \quad (4-23)$$

où n_v est la concentration des électrons de vallée v qui est calculée par:

$$n_v = \frac{1}{6} N_c e^{-(E_v - F)/KT} = \frac{1}{6} n \quad (4-24)$$

où la statistique de Boltzmann est utilisée, et où N_c est la densité d'états effective de la bande de conduction. En variation, l'équation (4-23) s'écrit:

$$\delta\sigma_{ij} = \sum_{v=1}^6 en_v \mu_{ij}^v \left(\frac{\delta n_v}{n_v} \right) + \sum_{v=1}^6 en_v \mu_{ij}^v \left(\frac{\delta \tau_{ij}^v}{\tau_{ij}^v} \right) + \sum_{v=1}^6 en_v \mu_{ij}^v \left[\frac{\delta (1/m_{ij}^v)}{(1/m_{ij}^v)} \right] \quad (4-25)$$

Dans cette équation, le premier terme représente la redistribution des électrons due au transfert des électrons entre les différentes vallées ^[2], le deuxième vient de la variation du temps de relaxation lié à la diffusion d'intervallée ^[2]; le dernière terme prend en compte la variation de masse effective due à la déformation des vallées.

Considérons d'abord le problème de la redistribution des électrons parmi les six vallées due à l'application d'une contrainte uniaxiale X dans la direction $\langle 100 \rangle$. Les modifications de chaque vallée peut être obtenues par l'équation (2-11) du chapitre II:

$$\begin{aligned} \delta E_1 = \delta E_4 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{11} X \\ \delta E_2 = \delta E_5 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{12} X \\ \delta E_3 = \delta E_6 &= \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \Xi_u s_{12} X \end{aligned} \quad (4-26)$$

Prenons maintenant l'équation (4-24), en variation, on obtient:

$$\delta n_v = -\frac{\delta E_v - \delta F}{KT} n_v = -\frac{1}{6} \frac{\delta E_v - \delta F}{KT} n \quad (4-27)$$

Puisque la concentration totale des électrons reste constante, nous avons la condition:

$$\sum_{v=1}^6 \delta n_v = 0 \quad (4-28)$$

En combinant les équations (4-27) et (4-28), on obtient:

$$\sum_{v=1}^6 \delta E_v - 6\delta F = 0 \quad (4-29)$$

Avec les équations (4-29) et (4-26), le déplacement du niveau de Fermi est déterminé par:

$$\delta F = \Xi_d (s_{11} + 2s_{12}) X + \frac{1}{3} \Xi_u (s_{11} + 2s_{12}) X \quad (4-30)$$

Les variations relatives de concentrations des électrons dans chaque vallée sont ainsi données par:

$$\begin{aligned} \frac{\delta n_1}{n_1} = \frac{\delta n_4}{n_4} &= -\frac{2}{3KT} \Xi_u (s_{11} - s_{12}) X \\ \frac{\delta n_2}{n_2} = \frac{\delta n_5}{n_5} &= \frac{1}{3KT} \Xi_u (s_{11} - s_{12}) X \\ \frac{\delta n_3}{n_3} = \frac{\delta n_6}{n_6} &= \frac{1}{3KT} \Xi_u (s_{11} - s_{12}) X \end{aligned} \quad (4-31)$$

L'équation (4-26) indique qu'une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 100 \rangle$ n'induit pas de variations de masses effectives. Le dernier terme de l'équation (4-25) donc est nul. Nous allons considérer le problème du deuxième terme de l'équation (4-25) qui correspond à l'effet de diffusion intervallée. Dans une diffusion intervallée l'état initial et l'état final se trouvent dans des vallées différentes. Lorsqu'un électron diffuse de la vallée i à la vallée j , la densité d'état final est pro-

portionnelle à la racine carrée de la différence énergétique entre l'état finale et le minimum de vallée j ^[2], c'est-à-dire que la densité est proportionnelle à la quantité $[E - (E_j - E_i) \pm \hbar\omega]^{1/2}$ où E est l'énergie de l'état initial dans vallée i et $\hbar\omega$ est l'énergie des phonons. Le signe plus correspond à l'absorption de phonons et le signe moins représente l'émission de phonons. A l'état sans contrainte, il n'y a pas de différence énergétique entre vallée i et vallée j , à savoir $(E_j - E_i) = 0$. Si E_j augmente par rapport à E_i dû à l'application de contrainte, la densité d'état finale pour la diffusion intervallée $i \rightarrow j$ diminue. En conséquence, la probabilité de diffusion pour un électron de la vallée i diminue résultant en une augmentation du temps de relaxation. L'effet quantitative de la diffusion intervallée sur la piézorésistivité nécessite un développement théorique complet de la diffusion de particules. Ceci est en dehors de l'objectif de ce travail. Mais R. W. Keyes ^[2] a démontré que la variation relative de temps de relaxation est proportionnelle à celle de concentration des électrons:

$$\delta\tau_{ij}^v/\tau_{ij}^v = \alpha_{ij}^v(\delta n_v/n_v) \quad (4-32)$$

où les coefficients α_{ij}^v sont appelés facteur d'enrichissement. Keyes a également indiqué que la valeur absolue du facteur d'enrichissement se varie entre 0 et 0.3. En tenant compte des équations (4-31) et (4-32), la variation de conductivité par les électrons due à une contrainte uniaxiale dans la direction [100] s'écrit:

$$\delta\sigma_{ij} = \sum_{v=1}^6 en_v\mu_{ij}^v(1 + \alpha_{ij}^v) \frac{\delta n_v}{n_v} \quad (4-33)$$

En supposant que les facteurs d'enrichissement α_{ij}^v sont indépendants des vallées et des orientations par rapport à la direction de la contrainte, on obtient en explicitant l'équation (4-33),:

$$\begin{aligned} \delta\sigma_{11} &= \frac{1}{3}en \left[\frac{2}{3KT} \Xi_u(s_{11} - s_{12}) X \right] (\mu_t - \mu_l) (1 + \alpha) \\ \delta\sigma_{22} &= \frac{1}{3}en \left[\frac{-1}{3KT} \Xi_u(s_{11} - s_{12}) X \right] (\mu_t - \mu_l) (1 + \alpha) \end{aligned} \quad (4-34)$$

où μ_p, μ_t sont les mobilités longitudinale et transversale qui sont définies par:

$$\mu_l = \frac{e\tau}{m_l} \quad \mu_t = \frac{e\tau}{m_t} \quad (4-35)$$

Maintenant on peut écrire les deux premiers coefficients de piézorésistivité du silicium:

$$\begin{aligned}\Pi_{11} &= -\frac{\delta\sigma_{11}}{\sigma_0 X} = -\frac{2\Xi_u(s_{11}-s_{12})}{3KT} \frac{1-r_\mu}{2+r_\mu} (1+\alpha) \\ \Pi_{12} &= -\frac{\delta\sigma_{22}}{\sigma_0 X} = \frac{\Xi_u(s_{11}-s_{12})}{3KT} \frac{1-r_\mu}{2+r_\mu} (1+\alpha)\end{aligned}\quad (4-36)$$

où $r_\mu = \mu_l/\mu_t = m_l/m_t$. Selon l'équation (4-36), le coefficient de piézorésistivité pour une contrainte hydrostatique $\Pi_v = \Pi_{11} + 2\Pi_{12}$ est nul. Ceci est cohérent avec la conclusion que l'effet de piézorésistivité hydrostatique est pratiquement négligeable lorsque le semiconducteur est fortement dopé.

Pour trouver le troisième coefficient de piézorésistivité du silicium Π_{44} , il faut appliquer une contrainte uniaxiale X dans la direction $\langle 110 \rangle$. Selon l'équation (4-28), cette contrainte modifie la bande de conduction de la manière suivante:

$$\begin{aligned}\delta E_1 = \delta E_4 &= \Xi_d(s_{11} + 2s_{12})X + \Xi_u \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})X + \Xi_m \frac{1}{2}s_{44}Xk_x k_y \\ \delta E_2 = \delta E_5 &= \Xi_d(s_{11} + 2s_{12})X + \Xi_u \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12})X \\ \delta E_3 = \delta E_6 &= \Xi_d(s_{11} + 2s_{12})X + \Xi_u s_{12}X\end{aligned}\quad (4-37)$$

Dans ce cas, les deux premiers termes de l'équation (4-25) sont nuls, et le troisième donne [39]:

$$\delta\sigma_{12} = \frac{1}{3}\Xi_m s_{44} e^{2n\tau} \left(\frac{1}{2}X\right) \quad (4-38)$$

Par la définition, le coefficient de piézorésistivité Π_{44} est donné par:

$$\Pi_{44} = -\frac{\delta\sigma_{12}}{\sigma_0 (X/2)} = -\frac{\Xi_m s_{44} m_t}{2+r_\mu} \quad (4-39)$$

Ainsi les trois coefficients de piézorésistivité de base Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} du silicium de type N sont exprimés sous forme analytique. Une comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats calculés par les équations (4-36) et (4-39) est présentée dans le tableau 4-1 où les valeurs des paramètres concernés sont déjà don-

nées dans les chapitres précédents. En ce qui concerne le paramètre Ξ_m , une valeur de fitting $\Xi_m = 71.58 (\tilde{h}^2/2m_0)$ a été prise qui très approche de la valeur mesurée $\Xi_m = 86.8 (\tilde{h}^2/2m_0)$ [30]. Le tableau 4-1 montre un bon accord entre le calcul et la mesure.

Table 4-1: Les coefficients de piézorésistivité à la température T=300K, en unité de 1.0×10^{-12} cm²/dyne, avec $\Xi_u = 8.6eV$, $\Xi_m = 71.58\tilde{h}^2/2m_0$ et $\alpha = 0.28$.

comparaison	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}
par théorie	-102.6	51.3	-13.5
expérimentation [16]	-102.2	53.4	-13.6

4.2.2. PIEZORESISTANCE DU SILICIUM DE TYPE P:

Considérons maintenant l'effet de piézorésistivité pour le silicium de type P qui est beaucoup plus complexe que celui du silicium de type N. La bande de valence comporte deux branches d'énergie correspondant aux trous lourds et aux trous légers. Lorsque le cristal est soumis à une déformation anisotrope, la symétrie du réseau est rompue, la dégénérescence au centre de la zone de Brillouin est levée et les parties hautes de la bande de valence pour les trous légers et les trous lourds se déplacent en sens inverses. De plus les surfaces d'énergie constante de la bande de valence se déforment résultant en la variation de masse effective des trous. Le chapitre II a indiqué que l'on peut modéliser la modification de la bande de valence due à l'application de contrainte dans les régimes de faible énergie cinétique des trous et de forte. Nous commençons d'abord à traiter le cas de faible énergie cinétique.

4.2.2.1. MODELE DE FAIBLE ENERGIE CINETIQUE DES TROUS:

Le régime de faible énergie cinétique des trous satisfait à la condition: $E_\varepsilon \gg E_{\varepsilon k} \gg E_k$. Dans ce cas, on peut utiliser l'approximation de la masse effective pour les trous (voir le chapitre II), la conductivité totale de la bande de valence s'écrit:

$$\sigma_{ij} = \sum_{\kappa=1}^2 ep_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} = \sum_{\kappa=1}^2 ep_{\kappa} \left(\frac{e\tau_{ij}^{\kappa}}{m_{ij}^{\kappa}} \right) \quad (4-40)$$

où κ est le numéro des branches de la bande de valence, m_{ij}^{κ} sont les masses effectives des trous modifiées par la contrainte. Ce modèle a déjà été utilisé pour calculer

certain coefficients spécifiques de piézorésistivité [7]. Nous allons le développer d'une manière plus générale afin de trouver les trois coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} du silicium de type P. Pour une contrainte uniaxiale X dans la direction [100], le chapitre II a montré que la bande de valence devient comme suit:

$$E_{1,2} = (A \pm B) k_x^2 + (A \mp \frac{B}{2}) k_y^2 + (A \mp \frac{B}{2}) k_z^2 \pm \frac{1}{2} \delta_1 + \frac{2B\delta_1}{\Delta} k_x^2 - \frac{B\delta_1}{\Delta} k_y^2 - \frac{B\delta_1}{\Delta} k_z^2 \quad (4-41)$$

avec $\delta_1 = 2b(s_{11} - s_{12})X$. Les termes de modifications de masses effectives en fonction de la contrainte n'existe que pour la branche 1. Les concentrations en trous de chaque branche sont calculées par:

$$p_1 = N_{v1} e^{-\frac{(F - E_v - \frac{1}{2}\delta_1)}{KT}} \quad p_2 = N_{v2} e^{-\frac{(F - E_v + \frac{1}{2}\delta_1)}{KT}} \quad (4-42)$$

où E_v est le haut de la bande de valence à l'état sans contrainte et N_{v1}, N_{v2} sont les densités d'état effective des deux branches de la bande de valence. En négligeant les variations de masses effectives en fonction des contraintes, les densités d'état effective sont définies par:

$$N_{v1} = \frac{4\pi}{h^3} \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{(A+B)(A-B/2)^2}} (KT)^{3/2} \quad (4-43)$$

$$N_{v2} = \frac{4\pi}{h^3} \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{(A-B)(A+B/2)^2}} (KT)^{3/2}$$

Le rapport des concentrations des deux branches de la bande de valence est ainsi donné par:

$$r_p = \frac{p_1}{p_2} = \left[\frac{(A-B)(A+B/2)^2}{(A+B)(A-B/2)^2} \right]^{1/2} e^{2b(s_{11} - s_{12})X/KT} \quad (4-44)$$

A partir de l'équation (4-42), on peut obtenir les variations des concentrations de trous pour les deux branches de la bande de valence:

$$\delta p_1 = p_1 \frac{-\delta F + b(s_{11} - s_{12})\delta X}{KT} \quad \delta p_2 = p_2 \frac{-\delta F - b(s_{11} - s_{12})\delta X}{KT} \quad (4-45)$$

Puisque le nombre total de trous contribuant à la conduction est supposé constant: $\delta p_1 = -\delta p_2$, on en déduit le déplacement du niveau de Fermi:

$$\delta F = \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} b (s_{11} - s_{12}) \delta X \quad (4-46)$$

en reportant (4-46) dans (4-45), on obtient:

$$\delta p_1 = \frac{p_1 p_2}{p_1 + p_2} \frac{2b (s_{11} - s_{12}) \delta X}{KT} \quad \delta p_2 = -\frac{p_1 p_2}{p_1 + p_2} \frac{2b (s_{11} - s_{12}) \delta X}{KT} = -\delta p_1 \quad (4-47)$$

L'expression en variation de l'équation (4-40), la conductivité par les trous, donne:

$$\delta \sigma_{ij} = \sum_{\kappa=1}^2 e p_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} \left(\frac{\delta p_{\kappa}}{p_{\kappa}} \right) + \sum_{\kappa=1}^2 e p_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} \left(\frac{\delta \tau_{ij}^{\kappa}}{\tau_{ij}^{\kappa}} \right) + \sum_{\kappa=1}^2 e p_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} \left(\frac{\delta (1/m_{ij}^{\kappa})}{(1/m_{ij}^{\kappa})} \right) \quad (4-48)$$

En introduisant le facteur d'enrichissement précédemment défini, l'équation (4-48) devient:

$$\delta \sigma_{ij} = \sum_{\kappa=1}^2 e p_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} \left(\frac{\delta p_{\kappa}}{p_{\kappa}} \right) (1 + \alpha_{ij}^{\kappa}) + \sum_{\kappa=1}^2 e p_{\kappa} \mu_{ij}^{\kappa} \left(\frac{\delta (1/m_{ij}^{\kappa})}{(1/m_{ij}^{\kappa})} \right) \quad (4-49)$$

En supposant le facteur d'enrichissement soit indépendant des branches de la bande de valence et en explicitant les termes nécessaires dans l'équation (4-49), on obtient:

$$\begin{aligned} \delta \sigma_{11} &= e^2 \frac{p_1 p_2}{p_1 + p_2} \frac{2b (s_{11} - s_{12}) \delta X}{KT} [\tau_{11}^1 (A + B) - \tau_{11}^2 (A - B)] (1 + \alpha_{11}) + \\ &\quad + e^2 p_1 \tau_{11}^1 \frac{4Bb (s_{11} - s_{12}) \delta X}{\Delta} \\ \delta \sigma_{22} &= e^2 \frac{p_1 p_2}{p_1 + p_2} \frac{2b (s_{11} - s_{12}) \delta X}{KT} \left[\tau_{22}^1 \left(A - \frac{B}{2} \right) - \tau_{22}^2 \left(A + \frac{B}{2} \right) \right] (1 + \alpha_{22}) - \\ &\quad - e^2 p_1 \tau_{22}^1 \frac{2Bb (s_{11} - s_{12}) \delta X}{\Delta} \end{aligned} \quad (4-50)$$

En ne retenant que les effets linéaires aux contraintes, on peut définir les coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} du silicium de type P comme suit:

$$\Pi_{11} = -\delta\sigma_{11}/(\bar{\sigma}_0\delta X) \quad \Pi_{12} = -\delta\sigma_{22}/(\bar{\sigma}_0\delta X) \quad (4-51)$$

où $\bar{\sigma}_0 = (\sigma_{11} + \sigma_{22})/2$ est la conductivité des trous à l'état sans contrainte. En négligeant la partie liée aux variations de masses effectives dans l'équation (4-41) pour le calcul de $\bar{\sigma}_0$, on obtient les deux coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} comme suit:

$$\begin{aligned} \Pi_{11} = & -\frac{\frac{2b(s_{11}-s_{12})}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} [r_{\tau 11}(A+B) - (A-B)] (1+\alpha_{11})}{r_p r_{\tau 11} (A+B/2) + (A-B/2)} - \\ & -\frac{\frac{4Bb(s_{11}-s_{12})}{\Delta} r_p r_{\tau 11}}{r_p r_{\tau 11} (A+B/2) + (A-B/2)} \\ \Pi_{12} = & -\frac{\frac{2b(s_{11}-s_{12})}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left[r_{\tau 22}(A-\frac{B}{2}) - (A+\frac{B}{2}) \right] (1+\alpha_{22})}{r_p r_{\tau 22} (A+B/2) + (A-B/2)} + \\ & +\frac{\frac{2Bb(s_{11}-s_{12})}{\Delta} r_p r_{\tau 22}}{r_p r_{\tau 22} (A+B/2) + (A-B/2)} \end{aligned} \quad (4-52)$$

avec

$$r_p = p_1/p_2 \quad r_{\tau 11} = \tau_{11}^1/\tau_{11}^2 \quad r_{\tau 22} = \tau_{22}^1/\tau_{22}^2 \quad (4-53)$$

En supposant $\alpha_{11} = \alpha_{22}$ et $r_{\tau 11} = r_{\tau 22}$, l'équation (4-52) nous permet de conclure également que l'effet de piézorésistivité hydrostatique est pratiquement négligeable quand le semiconducteur est fortement dopé, c'est-à-dire $\Pi_v = \Pi_{11} + 2\Pi_{12} = 0$.

Comme dans le silicium de type N, il faut appliquer une contrainte uniaxiale dans la direction [110] pour avoir le troisième coefficient de piézorésistivité Π_{44} . Selon le chapitre II, une telle contrainte uniaxiale X transforme la bande de valence de la manière suivante:

$$\begin{aligned}
E_{1,2} = & (A \pm \frac{B}{2} \eta_1 \pm \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) k_x^2 + (A \pm \frac{B}{2} \eta_1 \mp \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) k_y^2 + (A \mp B \eta_1) k_z^2 \pm \frac{1}{2} \delta_3 + \\
& + \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2} B + \frac{\sqrt{3}}{2} D \beta \pm \frac{1}{2} B \gamma_1 \pm \frac{\sqrt{3}}{2} D \beta \gamma_2 \right) k_x^2 + \frac{\delta_1}{2\Delta} \left(\frac{1}{2} B - \frac{\sqrt{3}}{2} D \beta \pm \frac{1}{2} B \gamma_1 + \mp \frac{\sqrt{3}}{2} D \beta \gamma_2 \right) k_y^2 + \\
& + \frac{\delta_1}{2\Delta} (-B \mp B \gamma_1) k_z^2
\end{aligned} \quad (4-54)$$

où les axe x, y, z du système sont respectivement dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$ et $\beta, \delta_1, \delta_3, \eta_1, \eta_2, \gamma_1, \gamma_2$ ont déjà été définis au chapitre II.

On récrit ici l'équation (1-40) qui décrit la relation entre la variation de la résistivité et celle de la conductivité en prenant en compte les orientations cristallographiques:

$$\frac{\delta \rho'_{12}}{\bar{\rho}'_0} = - \left(\frac{\delta \sigma_{11}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}} - \frac{\delta \sigma_{22}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{11}}{\sigma_{22}} \right) \quad (4-55)$$

où $\bar{\rho}'_0 = (\rho'_{11} + \rho'_{22})/2$. Le signe prime désigne le système cristallographique. Les quantités sans signe prime sont dans le système dont les axe x, y, z du système sont respectivement dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$.

En rejetant les variations de masses effectives en fonction des contraintes, le rapport de concentrations en trous est donné par:

$$r_p = \left[\frac{(A + \frac{B}{2} \eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) (A + \frac{B}{2} \eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) (A - B \eta_1)}{(A - \frac{B}{2} \eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) (A - \frac{B}{2} \eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} D \eta_2) (A + B \eta_1)} \right]^{1/2} e^{-\delta_3/KT} \quad (4-56)$$

Les composantes correspondantes de conductivité s'écrivent:

$$\begin{aligned}
\sigma_{11} &= e^2 p_1 \tau_{11}^1 \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) + e^2 p_2 \tau_{11}^2 \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) \\
\sigma_{22} &= e^2 p_1 \tau_{22}^1 \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) + e^2 p_2 \tau_{22}^2 \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right)
\end{aligned} \quad (4-57)$$

où

$$\begin{aligned}
\frac{1}{m_{11}^1} &= A + \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & \frac{1}{m_{22}^1} &= A + \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \\
\frac{1}{m_{11}^2} &= A - \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 & \frac{1}{m_{22}^2} &= A - \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2
\end{aligned}
\tag{4-58}$$

En supposant $\tau_{11}^1 = \tau_{22}^1 = \tau_1$, $\tau_{11}^2 = \tau_{22}^2 = \tau_2$ et en introduisant $r_\tau = \tau_1/\tau_2$, on trouve le rapport de les deux composantes de conductivité:

$$r_\sigma = \frac{\sigma_{11}}{\sigma_{22}} = \frac{r_p r_\tau \left(A + \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \right) + \left(A + \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \right)}{r_p r_\tau \left(A - \frac{B}{2}\eta_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \right) + \left(A - \frac{B}{2}\eta_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}D\eta_2 \right)}
\tag{4-59}$$

La redistribution des concentrations des trous due à la variation de contrainte se manifeste par:

$$\delta p_1 = -\delta p_2 = \frac{p_1 p_2}{p_1 + p_2} \frac{2b(s_{11} - s_{12})(1 + 3\beta^2)^{1/2} \delta X}{KT}
\tag{4-60}$$

En incluant l'effet de la diffusion intervallée, on obtient les variations de conductivité:

$$\begin{aligned}
\delta \sigma_{11} &= e^2 \tau_{11}^1 \delta p_1 \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) (1 + \alpha_{11}^1) + e^2 \tau_{11}^2 \delta p_2 \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) (1 + \alpha_{11}^2) + \\
&\quad + e^2 p_1 \tau_{11}^1 \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) \delta X + e^2 p_2 \tau_{11}^2 \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) \delta X \\
\delta \sigma_{22} &= e^2 \tau_{22}^1 \delta p_1 \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) (1 + \alpha_{22}^1) + e^2 \tau_{22}^2 \delta p_2 \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) (1 + \alpha_{22}^2) + \\
&\quad + e^2 p_1 \tau_{22}^1 \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) \delta X + e^2 p_2 \tau_{22}^2 \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) \delta X
\end{aligned}
\tag{4-61}$$

où α_{ii}^j sont les facteurs d'enrichissement, les taux de variation des masses effectives de trous dus à la variation des contraintes sont données par:

$$\begin{aligned}
\delta\left(\frac{1}{m_{11}^1}\right) &= \frac{b(s_{11} - s_{12})}{2\Delta} (B + \sqrt{3}D\beta + B\gamma_1 + \sqrt{3}D\beta\gamma_2) \\
\delta\left(\frac{1}{m_{22}^1}\right) &= \frac{b(s_{11} - s_{12})}{2\Delta} (B - \sqrt{3}D\beta + B\gamma_1 - \sqrt{3}D\beta\gamma_2) \\
\delta\left(\frac{1}{m_{11}^2}\right) &= \frac{b(s_{11} - s_{12})}{2\Delta} (B + \sqrt{3}D\beta - B\gamma_1 - \sqrt{3}D\beta\gamma_2) \\
\delta\left(\frac{1}{m_{22}^2}\right) &= \frac{b(s_{11} - s_{12})}{2\Delta} (B - \sqrt{3}D\beta - B\gamma_1 + \sqrt{3}D\beta\gamma_2)
\end{aligned} \tag{4-62}$$

L'ensemble de ces développements permettent de calculer le coefficient de piézorésistivité Π_{44} pour le silicium de type P. En utilisant l'équation (4-55), on définit le coefficient de piézorésistivité Π_{44} , linéaire à la contrainte appliquée, comme suit:

$$\Pi_{44} = \frac{\delta\rho'_{12}}{\rho'_0(\delta X/2)} = -\left(\frac{\delta\sigma_{11}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{22}}{\sigma_{11}} - \frac{\delta\sigma_{22}}{\sigma_{11} + \sigma_{22}} \frac{\sigma_{11}}{\sigma_{22}}\right) \left(\frac{2}{\delta X}\right) \tag{4-63}$$

en explicitant les termes nécessaires dans l'équation (4-63), le coefficient de piézorésistivité Π_{44} pour le silicium de type P est donné par:

$$\begin{aligned}
\Pi_{44} = & -2 \left[\frac{\frac{\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) - \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) \right) (1 + \alpha_{11}) + r_p r_\tau \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right)}{r_p r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right)} \right] \frac{1}{r_\sigma} + \\
& + 2 \left[\frac{\frac{\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_\tau \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) - \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) \right) (1 + \alpha_{22}) + r_p r_\tau \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right)}{r_p r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right)} \right] r_\sigma
\end{aligned} \tag{4-64}$$

avec

$$\Delta E = b(s_{11} - s_{12}) (1 + 3\beta^2)^{1/2} \tag{4-65}$$

où l'on suppose $\tau_{11}^1 = \tau_{22}^1 = \tau_1$, $\tau_{11}^2 = \tau_{22}^2 = \tau_2$ et $\alpha_{11}^1 = \alpha_{11}^2 = \alpha_{11}$, $\alpha_{22}^1 = \alpha_{22}^2 = \alpha_{22}$.

Ainsi, les trois coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} du silicium de type P sont trouvés et sont exprimés par les équations (4-52) et (4-63) respectivement.

Dans le cas de l'application d'une contrainte uniaxiale au long de la direction $\langle 110 \rangle$, on peut également calculer les coefficients de piézorésistivité longitudinal et transversal Π_l , Π_t (par rapport à cette direction) par le même raisonnement:

$$\Pi_l = -\frac{\delta\sigma_{11}}{\bar{\sigma}_0\delta X} = -\frac{\frac{2\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) - \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) \right) (1 + \alpha_{11}) + r_p r_\tau \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right)}{r_p r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right)} \quad (4-66)$$

$$\Pi_t = -\frac{\delta\sigma_{22}}{\bar{\sigma}_0\delta X} = -\frac{\frac{2\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_\tau \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) - \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) \right) (1 + \alpha_{22}) + r_p r_\tau \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right)}{r_p r_\tau \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right)}$$

où $\bar{\sigma}_0 = (\sigma_{11} + \sigma_{22}) / 2$. Le tableau (4-2) compare les valeurs expérimentales et théoriques des coefficients de piézorésistivité du silicium de type P.

Table 4-2: Coefficients de piézorésistivité du silicium de type P à la température T=300K, en unité de 1.0×10^{-12} cm²/dyne, avec $r_{\tau 11} = r_{\tau 22} = 1.0$ et $\alpha_{11} = \alpha_{22} = -0.30$ pour Π_{11} et Π_{12} , $r_\tau = 1.0$ et $\alpha_{11} = \alpha_{22} = 0.00$ pour Π_{44} , Π_l et Π_t .

	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}	Π_l	Π_t
par théorie	27.0	-13.5	136.9	76.7	-60.2
expérimentation [5]	6.6	-1.1	138.4	71.8	-66.4

Si l'on prend en compte les dépendances des masses effectives et des niveaux d'énergie des trous avec la contrainte appliquée, les coefficients de piézorésistivité sont fonction de la contrainte. La figure 4-2 montre les évolutions des coefficients de piézorésistivité avec les contraintes en tension et en compression. Dans la mesure où les valeurs de contraintes ne dépassent pas 1.0×10^9 dyne/cm², on constate que les coefficients de piézorésistivité peuvent être considérés indépendants de la contrainte. Ceci justifie également la cohérence entre la façon de calcul de coefficients de piézorésistivité utilisée et leur définition.

Le tableau 4-2 et la figure 4-2 montrent que pour les coefficients de piézoré-

sistivité Π_{44} , Π_p , Π_t du silicium de type P, un bon accord existe entre le calcul théorique et l'expérimentation. Pour les coefficients de piézorésistivité Π_{11} et Π_{12} , il existe un écart important si le temps de relaxation est pris isotrope et indépendant de la masse effective des trous, c'est-à-dire $r_{\tau 11} = r_{\tau 22} = 1.0$. Certains travaux [40, 41] ont montré que le temps de relaxation est fonction de la masse effective. En prenant donc le rapport des temps de relaxation dépendant de la masse effective, $r_{\tau 11} = 0.55$, $r_{\tau 22} = 1.75$, on obtient $\Pi_{11} = 6.1$ et $\Pi_{12} = -1.3$. Ainsi ils se trouvent alors en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Ceci confirme que le temps de relaxation des trous est fortement affecté par leur masses effectives et cet effet doit être pris en compte dans le calcul des coefficients de piézorésistivité pour les trous.

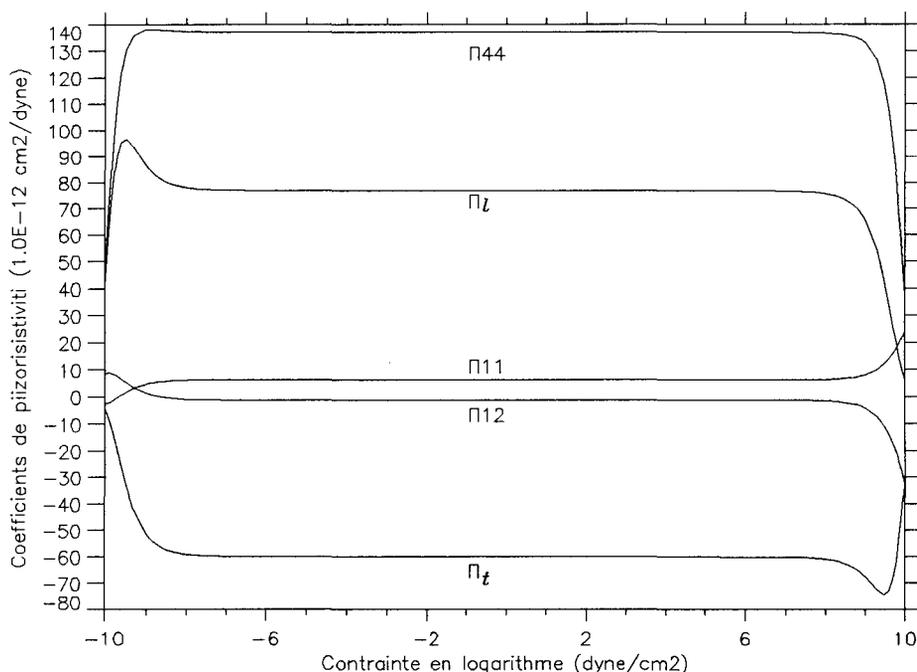


Fig. 4-2: Evolutions des coefficients de piézorésistivité du silicium de type P en fonction de contrainte, avec $r_{\tau 11} = r_{\tau 22} = 1.0$ et $\alpha_{11} = \alpha_{22} = -0.30$ pour Π_{11} et Π_{12} , $r_{\tau} = 1.0$ et $\alpha_{11} = \alpha_{22} = 0.00$ pour Π_{44} .

4.2.2.2. MODELE DE FORTE ENERGIE CINETIQUE DES TROUS:

Dans le régime de forte énergie cinétique des trous, nous avons la condition $E_k \gg E_{\epsilon k} \gg E_{\epsilon}$ qui nous permet de développer les spectres $E_{1,2}(\epsilon, k)$ en série de $E_{\epsilon k}/E_k$. Selon l'équation (2-42), les spectres de la bande de valence modifiés par une contrainte parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$ s'écrivent:

$$E_{1,2}(\varepsilon, k) = E_{1,2}(k) \pm \frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2E_k^{1/2}} (2k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \quad (4-67)$$

Pour une contrainte dans la direction $\langle 110 \rangle$, on obtient:

$$E_{1,2}(\varepsilon, k) = E_{1,2}(k) \pm \frac{1}{2E_k^{1/2}} \left[\frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + Dds_{44}k_xk_y \right] \quad (4-68)$$

où $E_{1,2}(k)$ est le spectre en énergie de la bande de valence à l'état sans contrainte qui a la forme suivante:

$$E_{1,2}(k) = Ak^2 \pm E_k^{1/2} \quad (4-69)$$

avec $E_k = B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_x^2k_z^2)$. Les équations (4-67) et (4-68) montrent qu'il n'y a plus de déplacement de l'ensemble de la bande de valence dans le régime de forte énergie cinétique. La variation de la structure de bande ne dépend que de la direction du vecteur d'onde \vec{k} .

Dans un système de coordonnées sphériques, l'équation (4-69) devient:

$$E_{1,2}(k) = [A \pm \sqrt{B^2 + C^2(\sin\theta)^2((\sin\phi\cos\phi\sin\theta)^2 + (\cos\theta)^2)}] k^2 \quad (4-70)$$

En prenant la moyenne de $E_{1,2}$ par rapport aux angles, on obtient:

$$E_{1,2}(k) = \left(A \pm \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}} \right) k^2 \quad (4-71)$$

Ceci équivaut à moyenner la surface ondulée d'énergie constante des trous par une surface sphérique et nous permet d'utiliser l'approximation de la masse effective. Il résulte de l'équation (4-70) qu'il existe deux types de trous: les trous lourds et les trous légers. Les masses effectives sont données par:

$$m_h = m_0' \left(A - \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}} \right) \quad m_l = m_0' \left(A + \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}} \right) \quad (4-72)$$

où h et l s'appliquent respectivement aux trous lourds et trous légers. Dans l'approximation de masse effective, la conductivité de trous s'écrit:

$$\sigma = ep_h \begin{bmatrix} e\tau_h/m_h & 0 & 0 \\ 0 & e\tau_h/m_h & 0 \\ 0 & 0 & e\tau_h/m_h \end{bmatrix} + ep_l \begin{bmatrix} e\tau_l/m_l & 0 & 0 \\ 0 & e\tau_l/m_l & 0 \\ 0 & 0 & e\tau_l/m_l \end{bmatrix} \quad (4-73)$$

On peut prendre une énergie moyenne des trous égale à $3KT/2$ selon la loi de la thermodynamique. En reportant cette énergie dans l'équation (4-70), on trouve les valeurs moyennes du vecteur d'onde pour les trous lourds et légers:

$$\overline{(k^2)}_h = \frac{3KT}{2(A - \sqrt{B^2 + C^2/5})} \quad \overline{(k^2)}_l = \frac{3KT}{2(A + \sqrt{B^2 + C^2/5})} \quad (4-74)$$

Ainsi l'on obtient le terme $E_k^{1/2}$ dans les équations (4-67) et (4-68):

$$(E_k^{1/2})_h = \frac{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}}{2(A - \sqrt{B^2 + C^2/5})} \quad (E_k^{1/2})_l = \frac{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}}{2(A + \sqrt{B^2 + C^2/5})} \quad (4-75)$$

En reportant ces valeurs dans les équations (4-67) et (4-68), on obtient les modifications de la bande de valence, pour une contrainte parallèle à la direction $\langle 100 \rangle$:

$$\Delta E_{1,2}(\epsilon, k) = \pm \frac{A \pm \sqrt{B^2 + C^2/5}}{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}} Bb(s_{11} - s_{12}) X (2k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \quad (4-76)$$

et pour une contrainte de la direction $\langle 110 \rangle$:

$$\Delta E_{1,2}(\epsilon, k) = \pm \frac{A \pm \sqrt{B^2 + C^2/5}}{3KT\sqrt{B^2 + C^2/5}} \left[\frac{Bb(s_{11} - s_{12})X}{2} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) + Dds_{44}k_xk_y \right] \quad (4-77)$$

Les équations (4-76) et (4-77) indiquent qu'après cette approximation, l'effet de contraintes ne se manifeste que par la variation de la masse effective des trous. En faisant la même démarche que la section précédente, nous trouvons les coefficients de piézorésistivité du silicium de type P dans le régime de forte énergie cinétique:

$$\Pi_{11} = -\frac{2}{3KT} \frac{r_p r_\tau (A + \sqrt{B^2 + C^2/5}) - (A - \sqrt{B^2 + C^2/5}) Bb(s_{11} - s_{12})}{r_p r_\tau (A + \sqrt{B^2 + C^2/5}) + (A - \sqrt{B^2 + C^2/5}) \sqrt{B^2 + C^2/5}} \quad (4-78a)$$

$$\begin{aligned}\Pi_{12} &= -\Pi_{11}/2 \\ \Pi_{44} &= \Pi_{11} \frac{Dds_{44}}{Bb(s_{11} - s_{12})}\end{aligned}\quad (4-78b)$$

où $r_p = p_l/p_h$ et $r_\tau = \tau_l/\tau_h$. Le tableau 4-3 donne les valeurs théoriques et expérimentales des coefficients de piézorésistivité pour le silicium de type P.

Table 4-3: Coefficients de piézorésistivité du silicium de type P à la température T=300K, en unité de 1.0E-12 cm²/dyne, avec $r_\tau = 0.43$.

comparaison	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}
par théorie	7.3	-3.7	138.3
expérimentation [16]	6.6	-1.1	138.4

Le tableau 4-3 montre qu'il y a bon accord entre le calcul théorique et l'expérimentation en supposant que le rapport des temps de relaxation des trous légers et lourds prend une valeur égale à 0.43 [27, 35]. Ceci confirme encore une fois la conclusion que le temps de relaxation des trous dépend fortement de leur masses effectives.

Il en résulte que le modèle de forte énergie cinétique des trous est également applicable au calcul des coefficients de piézorésistivité pour le silicium de type P. Nous faisons ici une estimation simple pour déterminer les zones de validité des modèles à faible et forte énergie cinétique. Prenons une contrainte $X = 1.0 \times 10^9 \text{ dyne/cm}^2$ dans la direction $\langle 110 \rangle$, la séparation des deux branches de la bande de valence $\delta E_{1,2} = 2E_\epsilon^{1/2}$ égale à 4.12 meV. Avec le terme moyen de E_k par rapport aux angles, dans un système sphérique, on obtient:

$$E_k = (B^2 + C^2/5)k^4 \quad (4-79)$$

Ainsi, la bande de valence à l'état sans contrainte est décrit par:

$$E_{1,2} = (A \pm \sqrt{B^2 + C^2/5})k^2 \quad (4-80)$$

A la température ambiante T=300K, l'énergie cinétique moyenne de trous est $KT = 25 \text{ meV}$. On prend la moyenne des énergies des trous légers et de trous lourds:

$$\bar{E}_{1,2} = Ak^2 = KT \quad (4-81)$$

par les équations (4-74) et (4-81), on obtient:

$$E_k^{1/2} = (\sqrt{B^2 + C^2/5}/A)KT \quad (4-82)$$

La valeur de $E_k^{1/2}$ est égale à 13.6 meV à la température ambiante. On voit que dans ce cas, $E_k \gg E_e$, c'est donc le modèle de forte énergie cinétique des trous qui s'adapte le mieux au calcul des coefficients de piézorésistivité tridimensionnelle pour le silicium de type P à la température ambiante. Le modèle de faible énergie cinétique des trous convient à s'appliquer au cas de basse température et aux contraintes importantes. Mais certains autres arguments, qui seront discutés au chapitre V, indique que l'on doit utiliser le modèle de faible énergie cinétique lorsqu'il s'agit de la piézorésistivité bidimensionnelle.

4.3. L'EFFET D'IMPURETE SUR LA PIEZORESISTIVITE:

Dans cette partie, nous allons étudier l'influence des impuretés sur l'effet de piézorésistance. Telle que cela a été rappelé au chapitre III, la conductivité d'une vallée de la bande de conduction ou d'une branche de la bande de valence s'écrit:

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_{\vec{k}} \tau_{\alpha\beta}^i(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E_i} v_{\alpha\beta}^i v_{\alpha\beta}^i d\vec{k} \quad (4-83)$$

où f_0 est la fonction de distribution à l'état d'équilibre. Dans l'approximation de la masse effective, on peut procéder une transformation des variables k_α, k_β en faisant intervenir l'énergie E_i et l'angle solide Ω (voir chapitre III), ainsi l'équation (4-83) devient:

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = -\frac{2e^2}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \left(\frac{2m_d}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \tau_{\alpha\beta}^i(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E_i} E_i^{3/2} dE_i \int \left(\frac{k_\alpha}{k}\right) \left(\frac{k_\beta}{k}\right) d\Omega \quad (4-84)$$

où $m_d = \sqrt[3]{m_1 m_2 m_3}$ est la masse effective de densité d'état et m_α, m_β sont respectivement les masses effectives selon les axes α et β . Si l'on suppose que le temps de relaxation des porteurs est une fonction de la puissance de l'énergie:

$$\tau_{\alpha\beta}^i(\vec{k}) = \tau^i(E) = \tau_0^i E_i^p \quad (4-85)$$

l'équation (4-84) peut être réécrite sous forme suivante:

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = -\frac{2e^2}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \left(\frac{m_d}{h^2}\right)^{3/2} \omega_{\alpha\beta} \tau_0^i \left(p + \frac{3}{2}\right) (K_B T)^{p+3/2} F_{p+1/2} \left(\frac{E_F}{K_B T}\right) \quad (4-86)$$

où $F_{p+1/2}(E_F/K_B T)$ est l'intégrale de Fermi définie par:

$$F_{p+1/2} \left(\frac{E_F}{K_B T}\right) = \int_0^\infty \frac{x^{p+1/2}}{1 + \exp(x - E_F/K_B T)} dx \quad (4-87)$$

Dans l'équation (4-86), $\omega_{\alpha\beta}$ représente l'intégrale angulaire de l'équation (4-84) et K_B est la constante de Boltzmann. A partir de l'équation (4-86), la valeur moyenne de la conductivité totale s'exprime sous forme simplifiée suivante:

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} = (K_B T)^{p+3/2} F_{p+1/2} \left(\frac{E_F}{K_B T}\right) \bar{\sigma}_0 \quad (4-88)$$

où $\bar{\sigma}_0$ est la conductivité à la température absolument zéro, $T = 0K$.

Avec l'application d'une contrainte, la variation de conductivité peut être obtenue grâce à l'équation (4-86):

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = -\frac{e^2}{4\pi^3} \left\{ \int \frac{\partial}{\partial E_i} \left(\tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \right) v_\alpha^i v_\beta^i \Delta E_i d\vec{k} + \frac{1}{h} \int \tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \left(\frac{\partial \Delta E_i}{\partial k_\alpha} v_\beta^i + \frac{\partial \Delta E_i}{\partial k_\beta} v_\alpha^i \right) d\vec{k} \right\} \quad (4-89)$$

En intégrant par partie le second terme, on obtient:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{e^2}{4\pi^3} \left\{ \int \frac{\partial}{\partial E_i} \left(\tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \right) v_\alpha^i v_\beta^i \Delta E_i d\vec{k} + \frac{2}{h} \int \tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \frac{\partial^2 E_i}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Delta E_i d\vec{k} \right\} \quad (4-90)$$

Deux situations peuvent être distinguées. La première concerne les coefficients Π_{11} , Π_{12} du silicium de type N pour lesquels les modifications énergétiques ΔE_i sont indépendantes du vecteur d'onde. La seconde est le troisième coefficient Π_{44} où une dépendance existe. Pour les coefficients Π_{11} , Π_{12} , la seconde intégrale dans l'équation (4-90) est nulle et cette équation devient:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{2e^2}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \left(\frac{m_d}{h^2}\right)^{3/2} \int \frac{\partial}{\partial E_i} \left(\tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \right) E_i^{3/2} dE_i \int \left(\frac{k_\alpha}{k}\right) \left(\frac{k_\beta}{k}\right) \Delta E_i d\Omega \quad (4-91)$$

on en déduit:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i \propto (K_B T)^{p+1/2} F_{p-1/2} \left(\frac{E_F}{K_B T} \right) \quad (4-92)$$

en utilisant la relation $F'_{p+1/2}(E_F/K_B T) = (p+1/2) F_{p-1/2}(E_F/K_B T)$, on obtient les coefficients de piézorésistivité Π_{11}, Π_{12} pour le silicium de type N:

$$\Pi_{11} \propto \frac{1}{K_B T} \frac{F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{F_{p+1/2}(E_F/K_B T)} \quad (4-93)$$

$$\Pi_{12} \propto \frac{1}{K_B T} \frac{F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{F_{p+1/2}(E_F/K_B T)}$$

A faible dopage et à température ambiante (300K), nous avons:

$$\frac{F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{F_{p+1/2}(E_F/K_B T)} = 1, \Pi_{11} = \Pi_{11}(300K), \Pi_{12} = \Pi_{12}(300K) \quad (4-94)$$

En combinant les équations (4-93) et (4-94), on obtient ^[42]:

$$\Pi_{11} = M(N, T) \Pi_{11}(300K), \Pi_{12} = M(N, T) \Pi_{12}(300K) \quad (4-95)$$

où le facteur $M(N, T)$ est défini par:

$$M(N, T) = \frac{300}{K_B T} \frac{F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{F_{p+1/2}(E_F/K_B T)} \quad (4-96)$$

Ce facteur décrit les dépendances des coefficients Π_{11}, Π_{12} du silicium de type N sur la concentration d'impuretés et la température.

Pour le coefficient de piézorésistivité Π_{44} du silicium de type N, les modifications énergétiques ΔE_i dépendent du vecteur d'onde. Dans ce cas, la deuxième intégrale dans l'équation (4-90) est également nulle. Ainsi, la variation de conductivité est donnée par:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{4e^2}{h^2} \left(\frac{m_d}{h^2}\right)^{3/2} \int \frac{\partial}{\partial E_i} \left(\tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \right) E_i^{5/2} dE_i \int \left(\frac{k_\alpha}{k}\right) \left(\frac{k_\beta}{k}\right) \Delta E_i(\theta, \varphi) d\Omega \quad (4-97)$$

Après une intégration par partie, la variation de la conductivité peut être simplifiée comme suit:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i \propto (K_B T)^{p+3/2} F_{p+1/2}(E_F/K_B T) \quad (4-98)$$

Selon la définition du coefficient de piézorésistivité $\Pi_{44} = -\Delta\sigma_{12}/(\bar{\sigma}_0 X)$, il en résulte que Π_{44} est indépendant de la température et de la concentration d'impuretés.

Pour les coefficients de piézorésistivité $\Pi_{11}, \Pi_{12}, \Pi_{44}$ du silicium de type P calculés par le modèle de forte énergie cinétique, les modifications énergétiques ΔE_i ne dépendent que des variables angulaires θ, φ . Dans ce cas l'équation (4-90) devient:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{2e^2}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \left(\frac{m_d}{h^2}\right)^{3/2} \int \frac{\partial}{\partial E_i} \left(\tau_{\alpha\beta}^i \frac{\partial f_0}{\partial E_i} \right) E_i^{3/2} dE_i \int \left(\frac{k_\alpha}{k}\right) \left(\frac{k_\beta}{k}\right) \Delta E_i(\theta, \varphi) d\Omega \quad (4-99)$$

Donc, la variation de conductivité est telle que:

$$\Delta\sigma_{\alpha\beta}^i \propto (K_B T)^{p+1/2} F_{p-1/2}\left(\frac{E_F}{K_B T}\right) \quad (4-100)$$

On trouve les mêmes résultats pour les coefficients de piézorésistivité $\Pi_{11}, \Pi_{12}, \Pi_{44}$ du silicium de type P calculés par le modèle de forte énergie cinétique que pour les coefficients de piézorésistivité Π_{11}, Π_{12} du silicium de type N:

$$\begin{aligned} \Pi &= M(N, T) \Pi(300K) \\ M(N, T) &= \frac{300 F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{K_B T F_{p+1/2}(E_F/K_B T)} \end{aligned} \quad (4-101)$$

Pour les coefficients de piézorésistivité $\Pi_{11}, \Pi_{12}, \Pi_{44}$ du silicium de type P calculés par le modèle de faible énergie cinétique de trous, les modifications énergétiques contiennent deux contributions: l'une est liée au déplacement de branches de la bande de valence, l'autre aux déformations des surfaces d'énergie constante,

c'est-à-dire aux variations des masses effectives des trous. Dans ce cas, les coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} , Π_{44} du silicium de type P peuvent être décomposés en deux parties:

$$\Pi = \frac{300}{K_B T} \frac{F'_{p+1/2}(E_F/K_B T)}{F_{p+1/2}(E_F/K_B T)} \Pi_1(300K) + \Pi_2 \quad (4-102)$$

où $\Pi_1(300K)$ est la partie du coefficient de piézorésistivité à la température de 300K, liée au déplacement de branches de la bande de valence, et Π_2 est due aux variations de la masse effective des trous. Il faut noter que Π_2 est indépendant de la température et de la concentration en impuretés comme le coefficient Π_{44} du silicium de type N.

Il est donc possible de déterminer quel modèle (modèle de faible énergie cinétique et modèle de forte énergie cinétique) correspond au calcul des coefficients de piézorésistivité Π_{11} , Π_{12} , Π_{44} du silicium de type P en fonction de leurs comportements avec la température.

Nous donnons ici un exemple du facteur $M(N, T)$ pour le silicium de type N. Si l'on suppose l'exposant, $p = -1/2$, on obtient:

$$F_{p+1/2}(E_F/K_B T) = \ln(1 + e^{E_F/K_B T}) \quad (4-103)$$

$$F'_{p+1/2}(E_F/K_B T) = \frac{1}{1 + e^{-E_F/K_B T}}$$

Pour une concentration en impureté N donnée, le niveau de Fermi est déterminé par l'équation suivante:

$$N = 4\pi \left(\frac{2m_d}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{E^{-1/2}}{1 + e^{(E-F)/KT}} dE = 4\pi \left(\frac{2m_d K_B T}{h^2} \right)^{3/2} F_{1/2}(E_F/K_B T) \quad (4-104)$$

En combinant les équations (4-103) et (4-94), on peut calculer l'évolution du facteur $M(N, T)$ pour le silicium de type N en fonction de la concentration en impureté. La figure 4-3 montre le résultats de ce calcul pour différentes températures et un bon accord existe avec les résultats expérimentaux^[7].

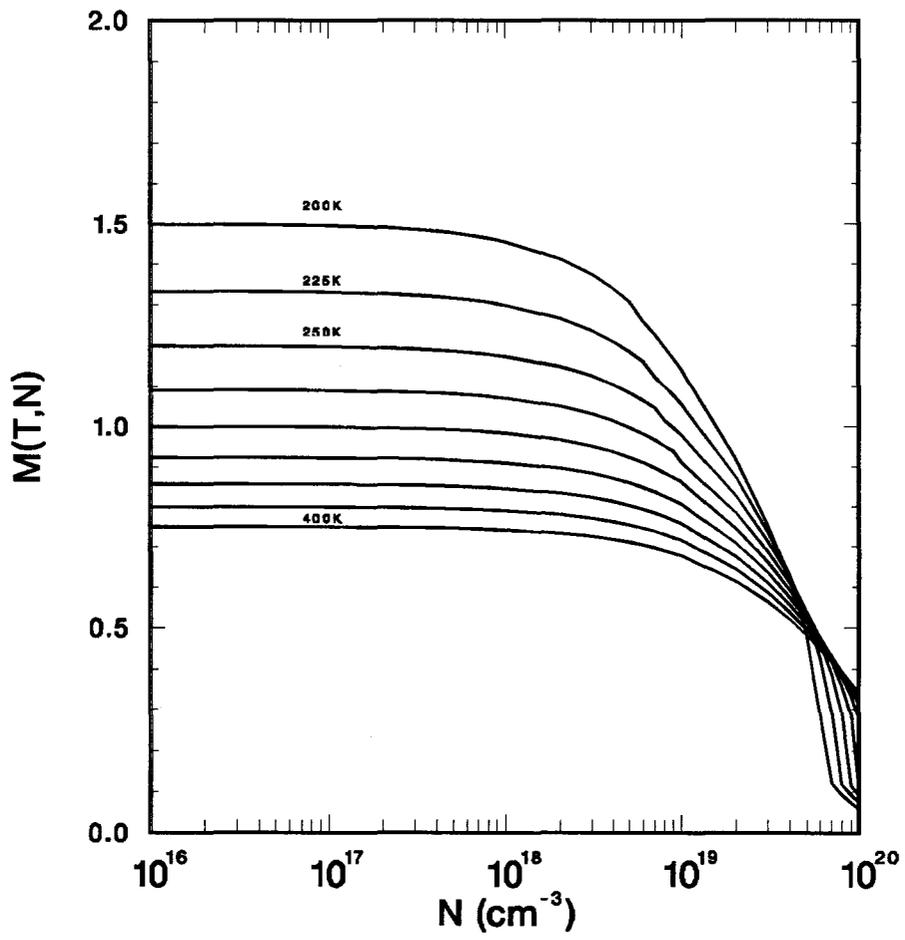


Fig. 4-3: Evolution du facteur $M(T,N)$ pour le silicium de type N en fonction de la concentration d'impuretés.

CHAPITRE V

PIEZORESISTIVITE BIDIMENSIONNELLE

Résumé

En se basant sur la structure de sous-bandes due à l'effet de quantification, les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle sont calculés d'une façon analogue que celle utilisée dans le volume du silicium. La variation de la largeur de la bande interdite doit être prise en compte dans le régime de faible inversion. Certaines évidences expérimentales indiquent que le modèle de faible énergie cinétique doit être choisi pour la piézorésistivité des trous dans une couche d'inversion de type P.

CHAPITRE V

PIEZORESISTIVITE BIDIMENSIONNELLE

Le canal des transistors MOS est caractéristique d'une structure MIS (métal-isolant-semiconducteur). Dans une telle structure, le système est bidimensionnel du fait de la quantification du mouvement perpendiculaire à la surface. L'effet de piézorésistivité dans ce système bidimensionnel présente des caractéristiques différentes à celui d'un système tridimensionnel (dans un volume de semiconducteur), par exemple, les coefficients de piézorésistivité sont fonctions du champ électrique transversal.

Nous commencerons ce chapitre par étudier l'effet de quantification dans une structure MIS. Certaines approximations seront utilisées pour calculer les niveaux des sous-bandes. La redistribution des porteurs due à la structure de sous-bandes nous permettra d'expliquer la dépendance des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle avec le champ électrique transversal. Au long du développement de la structure de sous-bandes, nous prenons le cas des électrons comme exemple, cependant tout le raisonnement concernant les électrons reste valable pour les trous dans l'approximation de masse effective. En basant sur la structure de sous-bandes, nous développerons les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle sous forme analytique en référant au calcul de la piézorésistivité tridimensionnelle au chapitre IV.

5. 1. EFFET DE QUANTIFICATION:

Dans une structure MIS, la différence des travaux de sortie de métal et de semiconducteur peut entraîner l'existence d'une couche d'accumulation ou d'une couche d'inversion dans le semiconducteur. La polarisation de la structure permet en outre de passer d'un régime à l'autre, c'est-à-dire de maîtriser, dans un même semiconducteur, le signe et la densité des porteurs libres localisés à la surface du semiconducteur.

Considérons une situation moyenne dans le régime de forte inversion (Figure 5-1), les électrons sont localisés près de la surface. La charge d'espace est constituée d'une charge de déplétion ayant par exemple une densité superficielle de l'ordre de 10^{11} atomes/cm², et d'une charge d'inversion ayant une densité superficielle typique de l'ordre de 10^{12} atomes/cm². La charge de déplétion vient des accepteurs ionisés, de sorte que si l'on suppose un dopage homogène, $N_a = 4.0 \times 10^{15}$ atomes/cm³, la largeur de la zone de déplétion est de l'ordre de $10^{11} / 4.0 \times 10^{15}$, soit $z_{dep} \cong 1 \mu$. La charge d'inversion est formée par les électrons de la bande de conduction. En prenant le modèle le plus simple avec une couche d'inversion supposée homogène et une distribution de Boltzmann, la densité équivalente d'états de la bande de conduction N_c étant de l'ordre de 10^{19} atomes/cm³, la largeur moyenne de

la couche d'inversion est de l'ordre de $10^{12}/10^{19}$ soit $z_{inv} \cong 10$ Angströms. Ceci n'est qu'un calcul très approximatif, en fait, la couche d'inversion s'étend typiquement, à partir de la surface, sur une distance de quelques dizaines d'Angströms [43].

Examinons maintenant le mouvement des électrons dans ce puits de potentiel de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur. Considérons tout d'abord la représentation corpusculaire des électrons dans le semiconducteur. Ces électrons sont des particules de masse effective m_e , animées d'un mouvement Brownien caractérisé par un libre parcours moyen $l = v_{th}\tau$ où v_{th} est la vitesse thermique des électrons et τ le temps d'intervalle entre deux collisions. A la température ambiante $v_{th} \cong 10^7$ cm/s et $\tau \cong 10^{-13} \rightarrow 10^{-12}$ s, ce qui donne $l = 100 \rightarrow 1000$ Angströms. La largeur du puits de potentiel est inférieure au parcours moyen des électrons. Ces électrons se comportent alors comme des particules libres dans le puits de potentiel formé par la charge d'espace, leur mouvement est conditionné par les réflexions sur les faces du puits, leurs états d'énergie sont quantifiés.

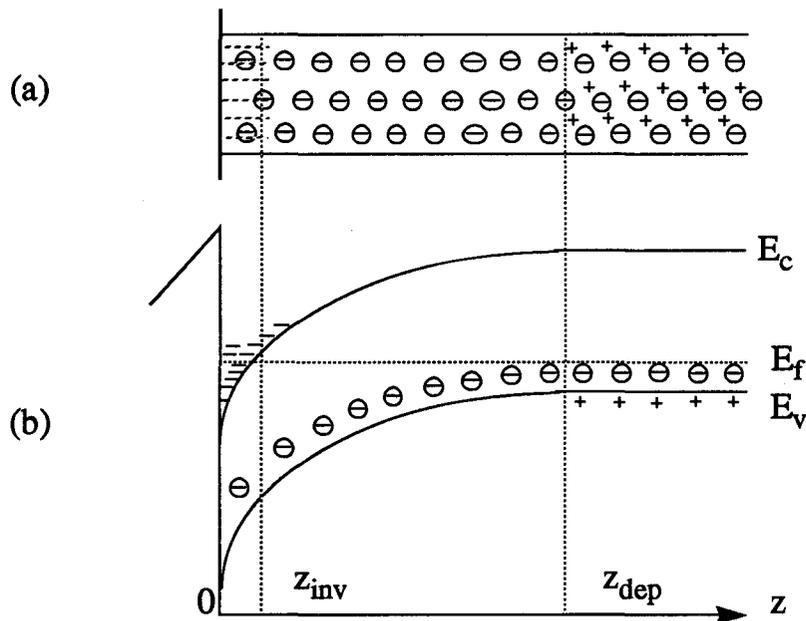


Fig. 5-1: Charge d'espace dans un semiconducteur de type P d'une structure MIS en régime de forte inversion. (a) Distribution spatiale de charge; (b) Courbure de bandes.

Considérons maintenant la représentation ondulatoire de l'électron. Les électrons dans le semiconducteur occupent des états d'énergie ayant la forme suivante:

$$E = E_c + \hbar^2 k^2 / 2m_e \quad (5-1)$$

La longueur d'onde de Broglie associée à ces électrons est donnée par:

$$\lambda = 2\pi/k = \hbar/\sqrt{2m_e(E-E_c)} \quad (5-2)$$

Si l'on suppose le niveau de Fermi situé à une centaine de meV de la bande de conduction, en prenant $m_e \cong m_0$, la longueur d'onde associée aux électrons du niveau de Fermi est $\lambda_f \cong 40$ Angströms. On constate que les électrons sont confinés dans un puits de potentiel dont la largeur est du même ordre de grandeur que leur longueur d'onde. Il en résulte donc l'existence d'ondes stationnaires.

En conséquence, les électrons ou les trous confinés dans une couche d'inversion ou d'accumulation, se comportent comme un gaz des électrons ou des trous à deux dimensions. Leur mouvement est libre dans le plan de la structure, et est quantifié dans la direction perpendiculaire. Il faut indiquer ici que le calcul par une théorie classique n'est qu'approché, et qu'une étude détaillée passe par un traitement quantique [44, 45].

5.1.1. EQUATION DE SCHRODINGER:

Les équations du système à deux dimensions consiste en l'équation de Schrödinger et l'équation de Poisson qui sont couplées l'une et l'autre. Considérons d'abord l'équation de Schrödinger. Pour ce faire, nous construisons d'abord un système de coordonnées tel que son origine se situe à l'interface oxyde/silicium, l'axe x et l'axe y sont parallèles à l'interface, l'axe z est orienté vers le silicium et perpendiculaire à l'interface. La courbure de la bande à la surface du semiconducteur est caractérisée par un potentiel $\phi(z)$. Dans l'approximation de masse effective, l'équation de Schrödinger s'écrit [45]:

$$\left(\frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{ij} p_i p_j\right) \Psi(\vec{r}) - e\phi(z) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (5-3)$$

où $\Psi(\vec{r})$ est la fonction d'onde, e la charge d'électron, E le niveau d'énergie de l'électron, $p_i = -i\hbar(\partial/\partial x_i)$, $i = 1, 2, 3$ est l'opérateur du moment de l'électron dans la direction de l'axe x_i , et w_{ij} est le tenseur inverse de la masse effective:

$$w = \frac{1}{\hbar^2} \begin{bmatrix} \partial^2 E / \partial k_x^2 & \partial^2 E / \partial k_x \partial k_y & \partial^2 E / \partial k_x \partial k_z \\ \partial^2 E / \partial k_y \partial k_x & \partial^2 E / \partial k_y^2 & \partial^2 E / \partial k_y \partial k_z \\ \partial^2 E / \partial k_z \partial k_x & \partial^2 E / \partial k_z \partial k_y & \partial^2 E / \partial k_z^2 \end{bmatrix} \quad (5-4)$$

A l'absence de la charge d'espace, la fonction d'onde de l'électron $\Psi(\vec{r})$ est

une fonction de Bloch. En présence d'une charge d'espace, qui est toujours lentement variable devant le potentiel cristallin, la fonction d'onde s'écrit sous forme du produit d'une fonction de Bloch par une fonction enveloppe. L'énergie de l'électron est constitué de l'énergie de la bande de conduction et de l'énergie du mouvement associé à la présence de la charge d'espace. L'équation (5-3) indique que l'énergie potentielle de l'électron n'est fonction que de la variable z , ainsi le mouvement de l'électron n'est perturbé que dans la direction z . Il reste libre dans le plan xy . La fonction d'onde pour la $n^{\text{ième}}$ sous-bande peut s'écrire sous la forme suivante [45]:

$$\Psi_n(x, y, z) = \xi_n(z) e^{i\theta_z} e^{ik_1x + ik_2y} \quad (5-5)$$

où $\theta_z = -(w_{31}k_1 + w_{32}k_2) / w_{33}$. En introduisant cette fonction d'onde dans l'équation (5-3), on obtient:

$$\frac{\tilde{\hbar}^2}{2m_3} \frac{\partial^2 \xi_n(z)}{\partial z^2} + [e\phi(z) + E_n] \xi_n(z) = 0 \quad (5-6)$$

où $m_3 = 1/w_{33}$ est la masse effective de l'électron dans la direction perpendiculaire à la surface de semiconducteur, E_n représente le niveau de la sous-bande du mouvement le long de l'axe z . En supposant que la barrière d'énergie entre l'oxyde et le silicium est infini, la fonction d'onde $\xi_n(z)$ doit satisfaire les conditions aux limites comme suit:

$$\xi_n(z=0) = 0 \quad \xi_n(z \rightarrow \infty) = 0 \quad (5-7)$$

Les énergies E_n dans l'équation (5-6) décrivent la quantification du mouvement des électrons dans la direction perpendiculaire à l'interface de l'oxyde et du silicium. En ce qui concerne le mouvement des électrons dans le plan parallèle à l'interface, il reste libre. Il en résulte une structure de sous-bandes avec une quantification discrète suivant k_3 et une variation pseudo-continue suivant k_1 et k_2 :

$$E_n(\vec{k}) = E_n + \frac{\tilde{\hbar}^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\tilde{\hbar}^2 k_2^2}{2m_2} \quad (5-8)$$

où $E_n(\vec{k})$ est l'énergie totale de l'électron, m_1 et m_2 sont les masses effectives selon les axes X et Y parallèles à la surface. Si l'on désigne $k_{//}^2 = k_1^2 + k_2^2$, on peut tracer les courbes de dispersion illustrées par la figure 5-2.

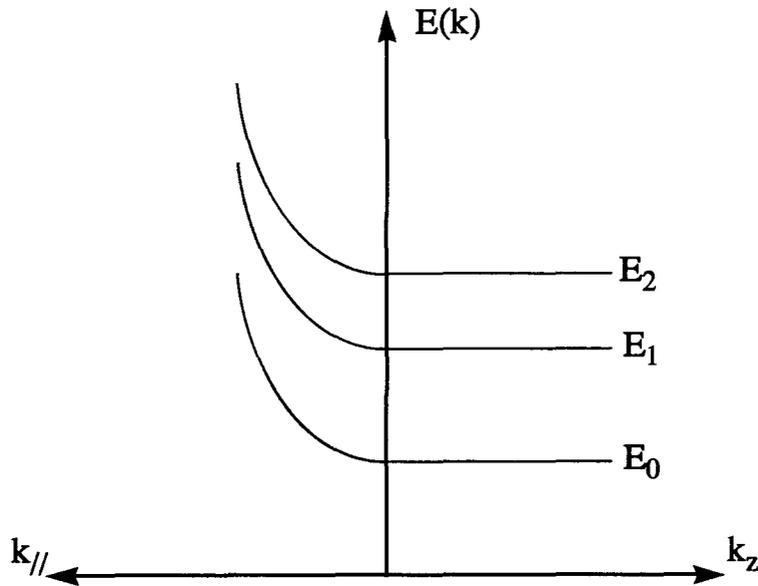


Fig. 5-2: Structure des sous-bandes d'énergie.

5.1.2. EQUATION DE POISSON:

Le potentiel électrostatique $\phi(z)$ dans l'équation (5-3) est déterminé par l'équation de Poisson:

$$\frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} = -\frac{\rho(z)}{\epsilon_s} \quad (5-9)$$

où $\rho(z)$ est la densité totale de charge, c'est-à-dire la charge de déplétion plus la charge d'inversion ou d'accumulation, ϵ_s est la constante diélectrique de semiconducteur. Il y a deux conditions aux limites qui s'imposent au potentiel:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \phi(z) = 0 \quad \epsilon_i \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_{0^-} = \epsilon_s \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_{0^+} \quad (5-10)$$

où ϵ_i est la constante diélectrique de l'oxyde. La référence du potentiel est pris dans le volume de semiconducteur. En supposant que toutes les impuretés sont ionisées, la densité totale de charge peut s'exprimer sous la forme suivante:

$$\rho(z) = -e [(N_a - N_d) - p] - en \quad (5-11)$$

où N_a, N_d sont respectivement les concentrations en accepteurs et en donneurs. p est la concentration en trous qui s'écrit:

$$p(z) = N_v e^{-(E_f - E_{v0} + e\phi(z))/K_b T} = p_0 e^{e\phi(z)/K_b T} \quad (5-12)$$

où E_{v0} est le haut de la bande de valence dans le volume. n est la concentration en électrons qui est calculée par:

$$n(z) = \sum_i n(E_i, E_f) \xi_i^2(z) = \sum_i n_i \xi_i^2(z) \quad (5-13)$$

où E_i est le niveau de la sous-bande i , n_i est le nombre des électrons sur la sous-bande i qui est calculé avec la statistique bidimensionnelle, le niveau de Fermi E_f à l'état sans contrainte est déterminé par le niveau de Fermi dans le volume de semi-conducteur.

La résolution exacte de l'équation de Schrödinger (5-6) et de l'équation de Poisson (5-9) demande une méthode numérique self-consistante [12, 46, 47, 48] vu le couplage entre deux équations. Cette méthode réclamant d'importantes ressources de calcul, son utilisation n'est pas optimale dans la simulation de la piézorésistivité de transistors MOS. Dans ce qui suit, nous allons utiliser les méthodes approchées pour calculer les niveaux de sous-bandes.

5.1.3. STATISTIQUE BIDIMENSIONNELLE:

Dans une couche d'inversion ou d'accumulation, les porteurs sont limités dans un espace à deux dimensions du fait de la quantification du mouvement perpendiculaire à l'interface. La structure de sous-bandes s'écrit:

$$E_i(\vec{k}) = E_i + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} \quad (5-14)$$

Dans ce système à deux dimensions, la densité d'états dans l'espace de K est donnée, compte tenu du spin, par:

$$N(k) = 2 / (2\pi)^2 \quad (5-15)$$

Etant donné une énergie E , le contour d'énergie constante dans l'espace \vec{k} est une ellipse:

$$k_1^2/a^2 + k_2^2/b^2 = 1 \quad (5-16)$$

avec

$$a^2 = \frac{2m_1(E - E_i)}{\tilde{h}^2} \quad b^2 = \frac{2m_2(E - E_i)}{\tilde{h}^2} \quad (5-17)$$

La surface de l'ellipse est déterminé par:

$$S(E) = \pi ab = \frac{2\pi\sqrt{m_1m_2}(E - E_i)}{\tilde{h}^2} \quad (5-18)$$

En tenant compte de l'équation (5-15), le nombre d'états dans cette zone pour la $i^{\text{ème}}$ sous-bande est donné par:

$$N(E, E_i) = \frac{2\pi\sqrt{m_1m_2}(E - E_i)}{\tilde{h}^2} \frac{2}{(2\pi)^2} = \frac{\sqrt{m_1m_2}(E - E_i)}{\pi\tilde{h}^2}, \quad (E \geq E_i) \quad (5-19)$$

Ainsi, la densité d'états dans l'espace énergétique pour la $i^{\text{ème}}$ sous-bande prend la forme suivante:

$$g(E, E_i) = \frac{dN(E, E_i)}{dE} = \frac{\sqrt{m_1m_2}}{\pi\tilde{h}^2}, \quad (E \geq E_i) \quad (5-20)$$

Ce résultat indique que la densité d'état dans l'espace énergétique est indépendante du niveau des sous-bandes. En prenant toutes les sous-bandes dont les niveaux énergétiques sont inférieures à l'énergie E , la densité d'états totale dans l'espace énergétique s'écrit:

$$g(E) = m_d/\pi\tilde{h}^2 \sum_i H(E - E_i) \quad (5-21)$$

où $m_d = \sqrt{m_1m_2}$ est la masse effective de densité d'états et $H(x)$ est la fonction de Heaviside:

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (5-22)$$

La courbe représentant la densité d'états est présentée dans la figure 5-3.

A la température T , la population des électrons sur chaque sous-bande est calculée par:

$$n_i = \int_{E_i}^{\infty} \frac{m_d}{\pi \hbar^2} f(E) dE \quad (5-23)$$

où $f(E)$ est la distribution de Fermi-Dirac. En explicitant la distribution de Fermi-Dirac, l'équation (5-23) devient:

$$n_i = \frac{m_d}{\pi \hbar^2} \int_{E_i}^{\infty} \frac{dE}{1 + e^{(E-E_f)/KT}} = \frac{m_d}{\pi \hbar^2} KT \cdot F[(E_f - E_i)/KT] \quad (5-24)$$

où E_f est le niveau de Fermi, et $F(x) = \ln(1 + e^x)$ est l'intégrale de Fermi-Dirac. La densité totale d'électrons dans la couche d'inversion est donnée par $n = \sum_i n_i$, soit:

$$n = \frac{m_d}{\pi \hbar^2} KT \sum_i F[(E_f - E_i)/KT] \quad (5-25)$$

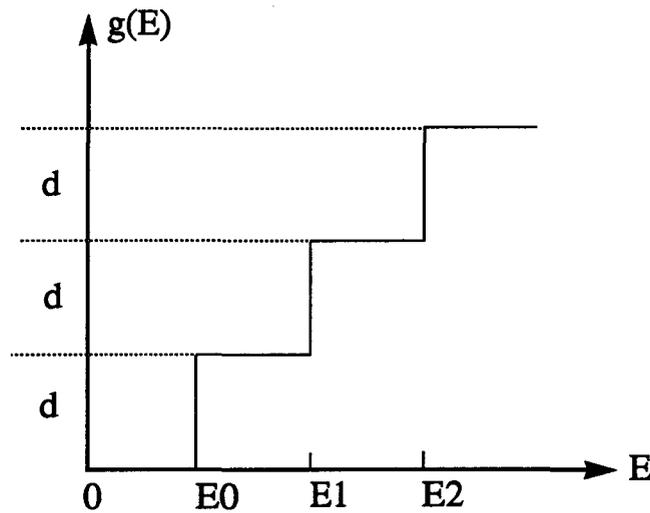


Fig. 5-3: Densité d'états en fonction de l'énergie, où $d = \sqrt{m_1 m_2} / \pi \hbar^2$.

En outre, la carré du module de la fonction enveloppe $|\xi_i(z)|^2$ dans l'équa-

tion (5-55), représente la probabilité de présence, au point d'abscisse z , d'un électron de la sous-bande i . Etant donné le nombre des électrons sur la $i^{\text{ème}}$ sous-bande n_i , la distribution spatiale de ces électrons est calculée par:

$$n_i(z) = n_i |\xi_i(z)|^2 \quad (5-26)$$

La distribution spatiale de l'ensemble des électrons dans la couche d'inversion s'écrit:

$$n(z) = \sum_i n_i |\xi_i(z)|^2 \quad (5-27)$$

Ainsi la charge d'espace associée à la couche d'inversion est donnée par:

$$\rho_{invs}(z) = -e \sum_i n_i |\xi_i(z)|^2 \quad (5-28)$$

L'abscisse moyenne des électrons se trouvant au niveau E_i est définie par:

$$z_i = \frac{\int_0^{\infty} z |\xi_i(z)|^2 dz}{\int_0^{\infty} |\xi_i(z)|^2 dz} \quad (5-29)$$

et l'abscisse moyenne de l'ensemble des électrons dans la couche d'inversion est ainsi donnée par:

$$z_m = \frac{\sum_i n_i \int_0^{\infty} z |\xi_i(z)|^2 dz}{\sum_i n_i} \quad (5-30)$$

5.1.4. METHODES APPROXIMATIVES:

Dans cette partie, nous allons résoudre l'équation de Schrödinger avec certaines approximations sur la fonction du potentiel $\phi(z)$. Il faut préciser que le silicium de la structure MIS étudiée est orienté selon le plan (001). Ceci est très important car l'orientation du silicium détermine les masses effectives des porteurs dans la direction perpendiculaire à l'interface qui seront décisives pour la structure de sous-bandes.

5.1.4.1. APPROXIMATION DU POTENTIEL TRIANGULAIRE:

Le potentiel $\phi(z)$ varie linéairement au voisinage de l'interface et se courbe quand z augmente, pour tendre vers une valeur constante dans la région neutre de semiconducteur. Le potentiel $\phi(z)$ peut être décomposé en deux parties: le potentiel

d'inversion $\phi_{invs}(z)$ et le potentiel de déplétion $\phi_{depl}(z)$. Le potentiel d'inversion devient constant lorsque z prend des valeurs supérieures à quelques z_m (l'abscisse moyenne définie dans l'équation (5-30)), le potentiel de déplétion devient constant pour $z=z_d$ (la largeur de la zone de déplétion). Les ordres de grandeur de z_m et z_d sont respectivement de 30 Angströms et 1 micron, de sorte que, dans la région où se situent les charges d'inversion, les valeurs de z sont telles que $z \cong z_m \ll z_d$. On peut donc simplifier le potentiel de déplétion $\phi_{depl}(z)$ de la manière suivante:

$$\phi_{depl}(z) = -\frac{eN_{depl}}{\epsilon_s}z \left(1 - \frac{z}{2z_d}\right) \cong -\frac{eN_{depl}}{\epsilon_s}z \quad (5-31)$$

Avec cette approximation, le potentiel résultant de la charge de déplétion varie linéairement avec z .

En ce qui concerne le potentiel d'inversion $\phi_{invs}(z)$, le problème est moins immédiat car ce potentiel varie dans la zone d'inversion. Toutefois si la charge d'inversion est faible devant la charge de déplétion on peut négliger la contribution de $\phi_{invs}(z)$ et écrire le potentiel sous la forme suivante:

$$\phi(z) = -Ez \quad (5-32)$$

où $E = eN_{depl}/\epsilon_s$ est le champ électrique créé par la charge de déplétion à l'interface.

Si la charge d'inversion n'est pas négligeable devant la charge de déplétion, on prend un potentiel effectif de sorte qu'il varie linéairement le long de l'axe z :

$$\phi(z) = -E_{eff}z \quad (5-33)$$

avec

$$E_{eff} = e(N_{depl} + f \cdot n) / \epsilon_s \quad (5-34)$$

où E_{eff} représente le champ électrique effectif, n est la densité superficielle des électrons et f est un coefficient numérique pondérant la participation moyenne des charges d'inversion. $f = 0$ correspond à la seule contribution de la charge de déplétion, $f = 1$ donne à E_{eff} la valeur du champ électrique à l'interface et $f = 1/2$ donne à E_{eff} une valeur intermédiaire dans la zone d'inversion. Généralement, le facteur f est fonction du dopage et de la densité des électrons.

Cette approximation est d'autant plus justifiée que le semiconducteur est peu dopé, ce qui donne une largeur importante à la zone de déplétion z_d , et que la masse effective des porteurs est grande, ce qui conduit à une faible extension spatiale des fonctions d'onde et par suite une faible valeur de z_m .

En résumé, ce modèle nous donne le potentiel suivant:

$$\begin{aligned}\phi(z) &= -\infty & z < 0 \\ \phi(z) &= -E_{eff}z & z \geq 0\end{aligned}\quad (5-35)$$

En reportant ce potentiel dans l'équation de Schrödinger, on obtient:

$$-\frac{\tilde{h}^2}{2m_3} \frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} + eE_{eff}z \xi_i(z) = E_i \xi_i(z) \quad (5-36)$$

avec les conditions aux limites pour la fonction d'onde $\xi_i(z=0) = 0$ et $\xi_i(z \rightarrow \infty) = 0$. On récrit l'équation (5-36) sous une autre forme:

$$\frac{d^2 \xi_i(z)}{dz^2} - \frac{2m_3 e E_{eff}}{\tilde{h}^2} \left(z - \frac{E_i}{e E_{eff}} \right) \xi_i(z) = 0 \quad (5-37)$$

En introduisant la variable u qui est définie comme suit:

$$u = (2m_3 e E_{eff} / \tilde{h}^2)^{1/3} (z - E_i / e E_{eff}) \quad (5-38)$$

l'équation (5-37) devient:

$$d^2 \xi_i(u) / du^2 - u \xi_i(u) = 0 \quad (5-39)$$

Les solutions de cette équation sont les fonctions d'Airy. En revenant sur la variable z , les fonctions d'onde et les niveaux de sous-bandes s'écrivent:

$$\begin{aligned}\xi_i(z) &= Ai \left[\left(\frac{2m_3 e E_{eff}}{\tilde{h}^2} \right)^{1/3} \left(z - \frac{E_i}{e E_{eff}} \right) \right] \\ E_i &= \left(\frac{e E_{eff} \tilde{h}}{(2m_3)^{1/2}} \right)^{2/3} \lambda_i\end{aligned}\quad (5-40)$$

où $Ai(x)$ est la fonction d'Airy ^[49], λ_i est un nombre dont ses certaines valeurs discrètes sont données au tableau (5-1). Si i est supérieur à neuf, une bonne approximation ^[44] est donnée par:

$$\lambda_i = \left[\frac{3\pi}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3} \quad (7-41)$$

Table 5-1: Les dix premières valeurs de λ_i [49]

i	λ_i	i	λ_i
0	2.338	5	9.022
1	4.087	6	10.040
2	5.520	7	11.008
3	6.787	8	11.936
4	7.944	9	12.829

Table 5-2: Niveaux de sous-bandes et abscisses moyennes des électrons du silicium orienté selon le plan (001), le champ électrique est $E_{eff} = 10^5$ (V/cm).

i	E_i	z_i	E'_i	z'_i
0	36.78	2.45	63.54	4.24
1	64.29	4.29	111.07	7.40
2	86.83	5.79	150.02	10.00
3	106.76	7.12	184.45	12.30
4	124.96	8.33	215.90	14.39
5	141.91	9.46	245.20	16.35
6	157.93	10.53	272.86	18.19
7	173.15	11.54	299.17	19.94
8	187.75	12.52	324.39	21.63
9	201.80	13.45	348.66	23.24

Selon les propriétés des fonctions d'Airy, l'abscisse moyenne des électrons du niveau E_i est calculée par:

$$z_i = \frac{\int_0^{\infty} z \xi_i^2(z) dz}{\int_0^{\infty} \xi_i^2(z) dz} = \frac{2E_i}{3eE_{eff}} \quad (5-42)$$

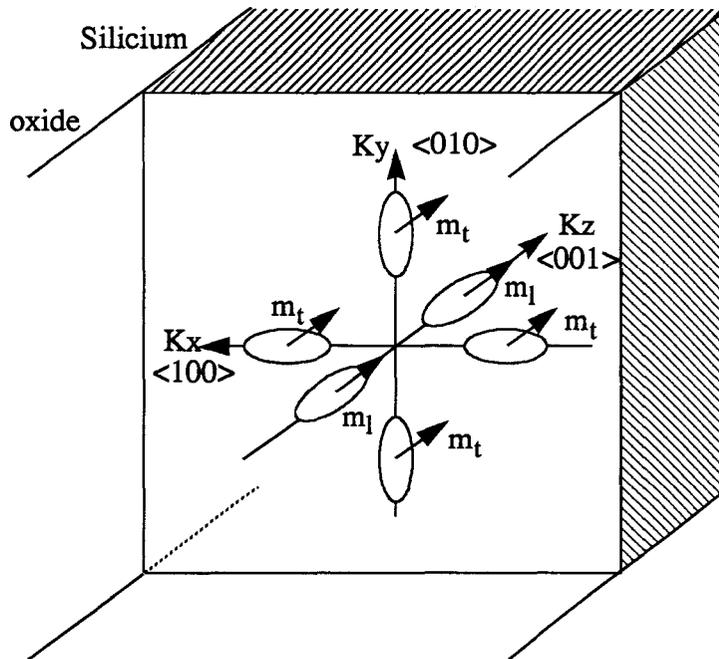


Fig. 5-4: Configuration des six vallées de la bande de conduction du silicium orienté selon le plan (001) et masses effectives dans la direction perpendiculaire à l'interface.

On va appliquer le modèle du puits de potentiel triangulaire à la structure du silicium. le silicium est un semiconducteur multivallée. le bas de la bande de conduction se situe sur l'axe $\langle 001 \rangle$ en $k_m = 0.85k_0$ où k_0 représente le vecteur d'onde au point de l'intersection de la direction $[001]$ avec la frontière de la première zone de Brillouin. En raison de la symétrie cubique du silicium, il existe 6 directions équivalentes, soit $\langle 100 \rangle$, $\langle \bar{1}00 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 0\bar{1}0 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ et $\langle 00\bar{1} \rangle$, il y a donc 6 minima équivalents dans la bande de conduction. Les surfaces d'énergie constante au voisinage de chaque minima sont des ellipsoïdes de révolution autour de l'axe considéré, centrés en k_m . L'énergie d'un électron de la vallée en $(0, 0, k_m)$, par exemple, est donnée par:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_t} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_l} (k_z - k_m)^2 \quad (5-43)$$

où m_t, m_l sont respectivement les masses effectives longitudinale et transversale.

Considérons maintenant une structure MIS dont le plan de surface du silicium soit (001) (figure 5-3). Pour leur mouvement perpendiculaire à l'interface, les électrons des vallées $(0,0, \pm k_m)$ sont caractérisés par leur masse effective longitudi-

nale m_t . Par contre les électrons des vallées $(\pm k_m, 0, 0)$ et $(0, \pm k_m, 0)$ sont caractérisés par leur masse effective transversale m_t . Ainsi, dans l'approximation du potentiel triangulaire, il existe deux équations différentes et par suite deux séries différentes de sous-bandes d'énergie. Les niveaux des sous-bandes et les abscisses moyennes des électrons pour un champ électrique $E_{eff} = 10^5 V/cm$ sont calculés par l'équation (5-40) et présentés dans le tableau (5-2). On marque que le niveau fondamental de la deuxième série de sous-bandes se trouve juste au-dessous de la première série de sous-bandes.

5.1.4.2. SOLUTION VARIATIONNELLE DE LA FONCTION D'ONDE:

La solution variationnelle est une autre méthode d'approximation qui suppose que tous les porteurs se situent sur la première sous-bande d'énergie (la limite électronique quantique) et qui minimise ensuite l'énergie totale du système avec une fonction d'onde d'essai. Fang et Howard^[50] ont proposé une fonction d'onde pour la première sous-bande:

$$\xi_0(z) = (b^3/2)^{1/2} z e^{-bz/2} \quad (5-44)$$

où le paramètre b sera obtenu en minimisant l'énergie totale du système. Avec cette fonction d'onde, l'abscisse moyenne des électrons dans le semiconducteur est:

$$z_m = \int_0^{\infty} z |\xi_0(z)|^2 dz = \frac{3}{b} \quad (5-45)$$

La valeur b qui minimise l'énergie totale du système est^[50]:

$$b = \left[12e^2 m_3 / \epsilon_s \tilde{h}^2 \right]^{1/3} (N_{depl} + \frac{11}{32} N_{invs})^{1/3} \quad (5-46)$$

où N_{depl} est la densité superficielle des impuretés dans la zone de déplétion et N_{invs} la densité superficielle des électrons d'inversion. Avec cette valeur de b , le niveau de la première sous-bande est donné par:

$$E_0 = (1.5)^{5/3} (e^2 \tilde{h} / \epsilon_s)^{2/3} \frac{N_{depl} + (55/96) N_{invs}}{(m_3 (N_{depl} + (11/32) N_{invs}))^{1/3}} \quad (5-47)$$

Le tableau (5-3) donne certaines valeurs de E_0 et l'abscisse moyenne des électrons z_m de la première sous-bande en fonction de N_{invs} avec $N_{depl} = 1.2 \times 10^{11}$

atomes/cm². La figure 5-4 présente l'évolution du niveau énergétique et de l'abscisse moyenne des électrons z_m de la première sous-bande en fonction de N_{invs} en fixant toujours $N_{depl} = 1.2 \times 10^{11}$ atomes/cm². Dans le tableau (5-3), on voit que la largeur de la zone d'inversion pour $N_{invs} = 1.0 \times 10^{11}$ atomes/cm² égale à 30 Angströms. Ceci est cohérent avec la simple estimation faite au début de ce chapitre.

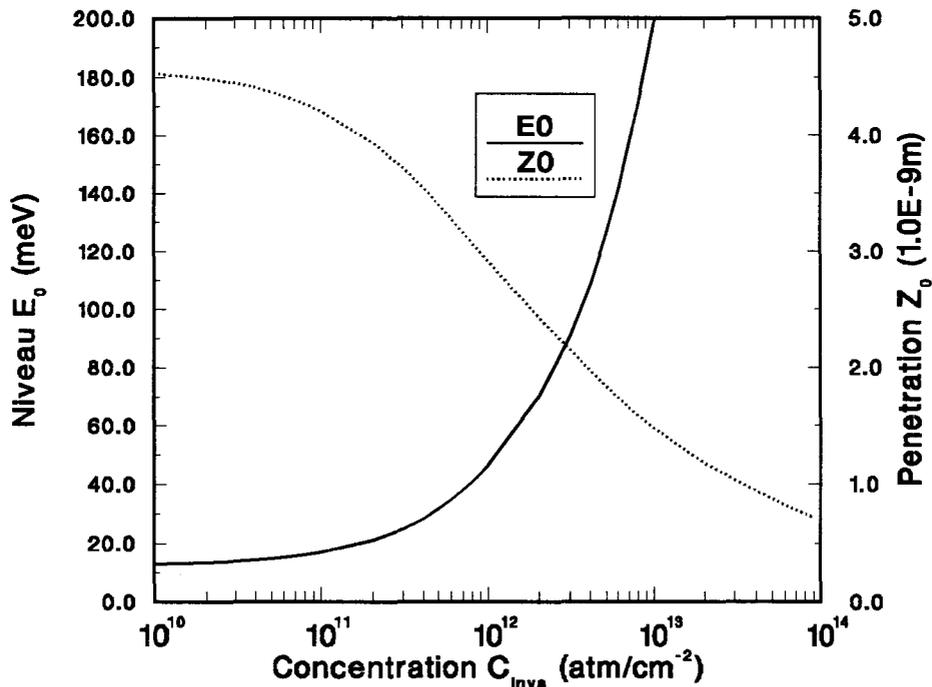


Fig 5-4 Niveau d'énergie de la première sous-bande et abscisse moyenne en fonction de la densité des électrons d'inversion obtenus grâce à la méthode variationnelle, $N_{depl} = 1.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Table 5-3: Niveau de la première sous-bande et abscisse moyenne en fonction de la densité des électrons d'inversion obtenus par la méthode variationnelle. $N_{depl} = 1.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, E_0 en unite de meV, z_0 en nm.

$N_{invs} (\text{cm}^{-2})$	E_0	z_0	$N_{invs} (\text{cm}^{-2})$	E_0	z_0
1.0E10	13.01	4.54	1.0E12	46.11	2.92
5.0E10	14.84	4.38	5.0E12	125.47	1.84
1.0E11	17.02	4.21	7.0E12	156.20	1.66
5.0E11	31.56	3.40	1.0E13	197.34	1.48

5.1.4.3. ETATS EXCITES:

En utilisant la méthode variationnelle et en prenant la limite électronique quantique, on a trouvé le niveau d'énergie de la première sous-bande. Pour les états excités, les niveaux d'énergie peuvent être calculés en traitant le potentiel d'inversion et celle de déplétion comme des sources de perturbation pour la solution du puits triangulaire [12]. Le potentiel triangulaire est défini en utilisant le champ induit par la charge de déplétion à l'interface. La charge d'inversion est supposée se limiter dans un plan situant à une distance z_0 de la surface. $z_0 = 3/b$ est l'abscisse moyenne des électrons de la première sous-bande dans le semiconducteur. Cette méthode nous donne les niveaux d'énergie des états excités [12].

$$E_i = E_{i,d} - e^2 F_d F_i z_0^2 / 4E_{i,d} - 4E_{i,d}^2 / 15eF_d z_d + eF_i z_0 \quad (5-48)$$

où $E_{i,d}$ est le niveau d'énergie obtenu par l'approximation du puits triangulaire en utilisant le champ de la charge de déplétion $F_d = eN_{depl}/\epsilon_s$, $F_i = eN_{invs}/\epsilon_s$ est le champ créé par la charge d'inversion, $z_d = N_{depl}/(N_a - N_d)$ est l'extension de la zone de déplétion. Le deuxième terme représente l'abaissement des états excités dû au puits de potentiel de la couche d'inversion. Le troisième terme donne la contribution de la courbure de potentiel de déplétion. Le dernier terme est la modification de la couche d'inversion à l'énergie potentielle de la surface. A l'aide de l'équation (5-48), la figure 5-5 nous donne les évolutions des six sous-bandes $E_0, E_1, E_2, E_0', E_1', E_2'$ en fonction du champ électrique à l'interface pour le silicium orienté selon le plan (001), avec $N_a = 2.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_{depl} = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Comme le niveau E_0' est très proche du niveau E_1 , il faut donc compter la deuxième série de sous-bandes E_i' dans le calcul des distributions des électrons à température ambiante.

La figure 5-6 compare les résultats calculés avec l'équation (5-48) et ceux obtenus par l'approximation du puits triangulaire en prenant le facteur $f = 0.80$ pour la sous-bande E_0 et $f = 0.48$ pour la sous-bande E_0' dans l'équation (5-34). On voit que l'approximation du puits triangulaire permet d'atteindre une bonne précision en choisissant judicieusement le facteur f . De plus, cette approximation évite de calculer certains paramètres tels que la largeur de la zone de déplétion z_d dans le régime de forte inversion et la charge de déplétion N_{depl} . Si le semiconducteur n'est pas uniformément dopé, le calcul du paramètre z_d est difficile. Si le modèle décrit par l'équation (5-48) est implanté dans un simulateur de dispositifs MOS, le choix du maillage peut également influencer le calcul du paramètre z_d et N_{depl} . Ainsi, pour éviter ces difficultés, on préfère utiliser l'approximation du puits triangulaire en choisissant le facteur f .

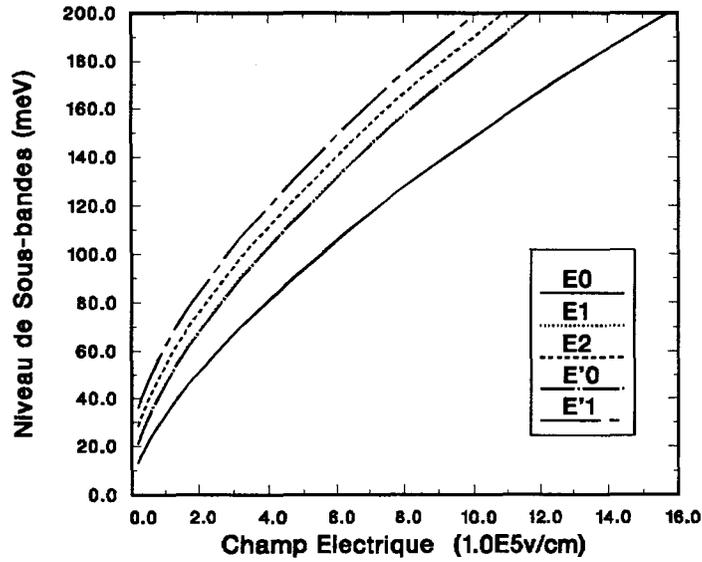


Fig. 5-5: Evolutions des niveaux d'énergie de sous-bandes en fonction du champ électrique à l'interface, les courbes sont calculées par l'équation (5-48).

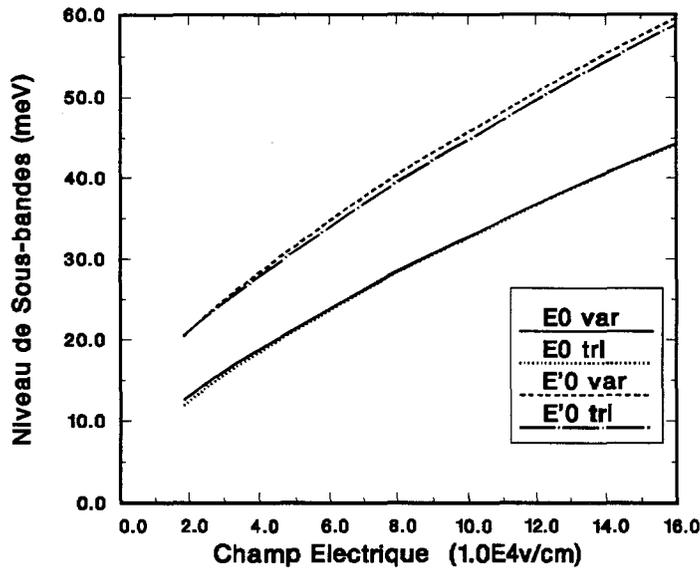


Fig. 5-6: Comparaison entre les niveaux de sous-bandes calculés par la méthode de perturbations (var) et par l'approximation du puit triangulaire (trl) en prenant $f=0.80$ pour la première sous-bande E_0 et $f=0.48$ pour la deuxième sous-bande E'_0 .

L'effet de quantification des trous dans la couche d'inversion a été également observé expérimentalement [51, 52, 53]. Les niveaux de sous-bandes des trous sont plus difficile accessible dû à dégénérescence de la bande de valence. En utili-

sant la représentation de Luttinger, des calculs plus ou moins rigoureux de self-consistance ont été effectués pour trouver les sous-bandes des trous dans une structure MIS [54, 55]. Mais, une telle méthode de self-consistance restera trop lourde pour la simulation de l'effet de piézorésistivité dans les transistors MOS. Dans l'approximation de la masse effective modifiée par la contrainte mécanique, nous allons appliquer la même méthode d'approximation que celle utilisées pour le cas des électrons au calcul des niveaux de sous-bandes des trous.

5.2. PIEZORESISTIVITE BIDIMENSIONNELLE:

Cette partie étudie l'effet de piézorésistivité dans le canal d'une structure MIS sous l'application d'une contrainte uniaxiale. L'effet quantique est introduit afin d'expliquer la variation des coefficients de piézorésistivité en fonction de la tension de grille [10].

5.2.1. DESCRIPTIONS PHENOMENOLOGIQUES:

Dans un système bidimensionnel tel que une couche d'inversion dans un transistor MOS, il n'existe pas de mouvement de transport vertical à l'interface. Ainsi le tenseur de résistivité du système bidimensionnel s'écrit sous forme suivante [11]:

$$[\rho_{ij}] = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{bmatrix} \quad (5-49)$$

Si le tenseur est symétrique dû à la symétrie du cristal, le tenseur de résistivité peut être considéré comme un vecteur:

$$[\rho_i] = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_4 \end{bmatrix} \quad (5-50)$$

où $\rho_1 = \rho_{11}$, $\rho_2 = \rho_{22}$, $\rho_4 = \rho_{12} = \rho_{21}$. Pour un silicium orienté selon le plan (001), le tenseur de conductivité devient un scalaire:

$$[\rho_{ij}] = \rho \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad [\rho_i] = \rho \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5-51)$$

où les axes du système de coordonnées sont les axes cristallographiques.

Le tenseur de contrainte dans le cas bidimensionnel est défini d'une manière analogue:

$$\begin{bmatrix} X_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_4 \end{bmatrix} \quad (5-52)$$

où la convention de notation en indice est la même que celle du tenseur de résistivité.

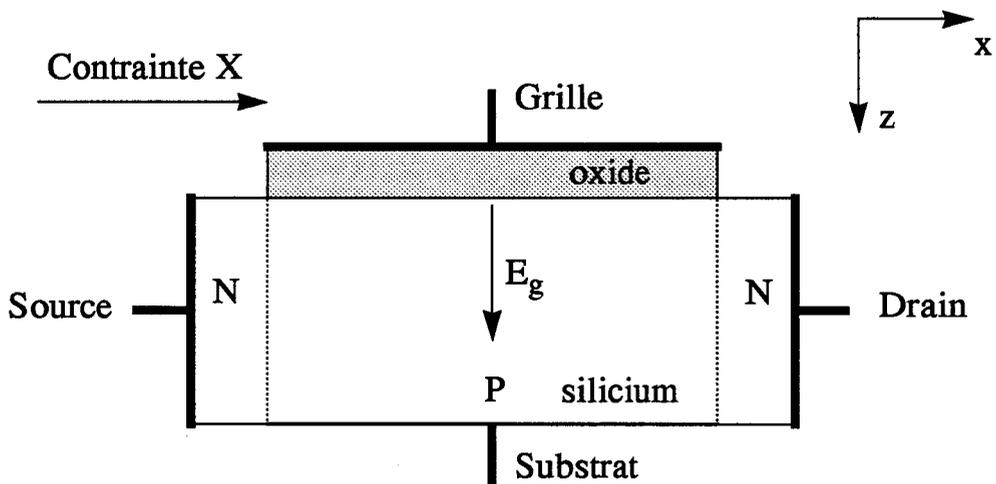


Fig. 5-7: Structure schématique où les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle du silicium sont définis.

Quant au tenseur de piézorésistivité bidimensionnelle, il prend généralement la forme suivante ^[11]:

$$\begin{bmatrix} \Pi_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{14} \\ \Pi_{21} & \Pi_{22} & \Pi_{24} \\ \Pi_{41} & \Pi_{42} & \Pi_{44} \end{bmatrix} \quad (5-53)$$

où les coefficients de piézorésistivité Π_{ij} sont définis comme:

$$\Pi_{ij} = \Delta\rho_i / \bar{\rho} X_j \quad (5-54)$$

où $\Delta\rho_i$ est la variation de la résistivité due à l'application de la contrainte, $\bar{\rho} = (\rho_{11} + \rho_{22})/2$ est la moyenne des deux résistivités principaux à l'état sans contrainte.

Pour le silicium orientée (001), le tenseur de piézorésistivité bidimensionnelle devient, du fait de la symétrie de cette orientation:

$$[\Pi_{ij}] = \begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \Pi_{44} \end{bmatrix} \quad (5-55)$$

Comme dans le volume de silicium, il n'y a que trois coefficients indépendants dans l'expression (5-55). Nous allons calculer les trois coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour le silicium orienté (001) en tenant compte de l'effet de quantification et de l'effet de modification des bandes énergétiques dus à l'application d'une contrainte uniaxiale. La figure 5-7 présente schématiquement la structure où vont être calculés les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle.

5.2.2. DISTRIBUTION DES PORTEURS SUR LES SOUS-BANDES:

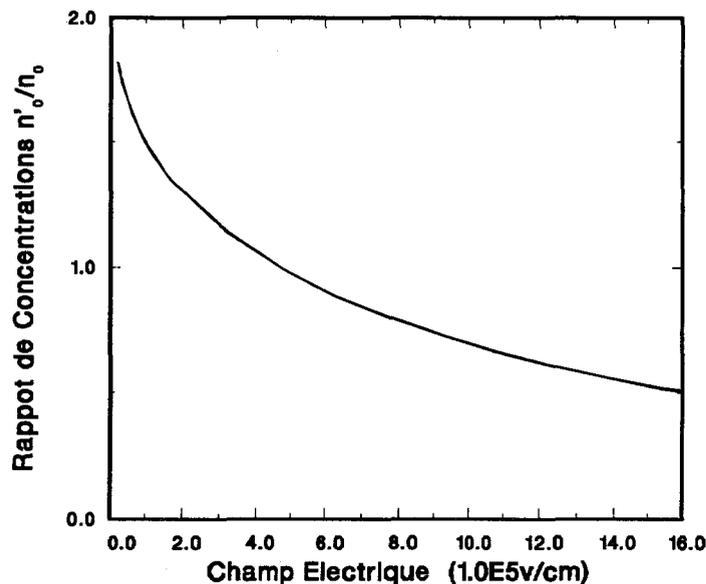


Fig. 5-8: Evolution du rapport de concentrations des électrons pour le silicium orienté (001) en fonction du champ électrique à l'interface Si/SiO₂.

Dans le système bidimensionnel d'une structure MIS, il existe généralement deux séries de sous-bandes énergétiques du fait qu'il y a deux différentes masses ef-

fectives des électrons ou trous dans la direction perpendiculaire à la surface. Nous allons considérer les premières sous-bandes de chaque série pour estimer la distribution de porteurs sur les deux séries de sous-bandes. Pour ce faire, on calcule le rapport entre les populations de porteurs sur ces deux sous-bandes.

Considérons d'abord les électrons de la bande de conduction du silicium orienté (001). Dans la théorie classique, toutes les six vallées sont identiquement occupées. Par contre, le modèle quantique montre que les sous-bandes des deux vallées dont les axes de révolution sont perpendiculaires à la surface sont plus peuplées que ceux des quatre autres vallées. Ceci est dû à la différence de leur masses effectives dans la direction perpendiculaire à la surface. Les deux premières sous-bandes de chaque série E_0, E_0' sont respectivement fonction des masses effectives m_l et m_t . Si l'on prend la statistique de Boltzmann, le rapport entre les populations de ces deux sous-bandes est donné par:

$$B = \frac{n_0'}{n_0} = \frac{m_t}{\sqrt{m_l m_t}} e^{-(E_0' - E_0)/KT} \quad (5-56)$$

La figure 5-8 donne l'évolution du rapport B en fonction du champ électrique de grille E_g à l'interface. Le fait que le rapport B varie en fonction du champ électrique E_g peut être servi à expliquer la dépendance des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle avec le champ électrique E_g .

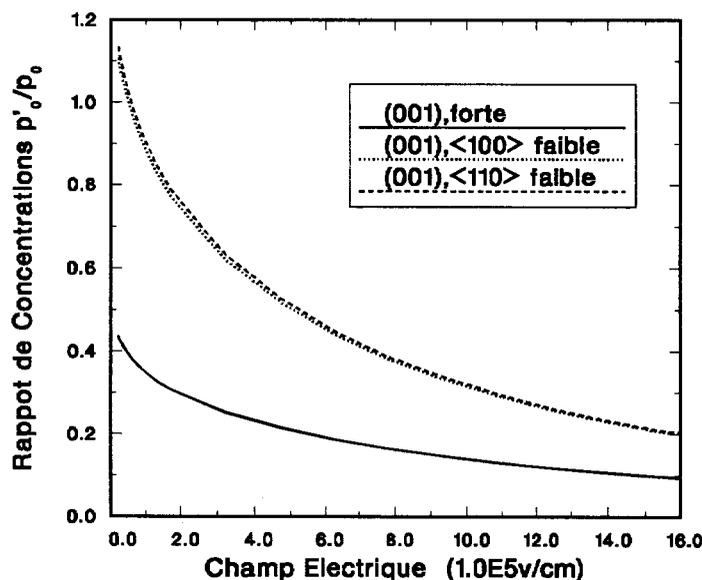


Fig. 5-9: Evolution du rapport de concentrations entre les deux types de trous pour le silicium orienté (001) en fonction du champ électrique à l'interface Si/SiO₂: dans le modèle de faible énergie cinétique, contrainte dans les direction <100 > et <110 >; pour le modèle de forte énergie cinétique, la direction de contrainte est arbitraire.

Etudions maintenant les trous de la bande de valence pour le silicium également orienté selon le plan (001). En présence de la contrainte mécanique, le chapitre II a montré que la masse effective des trous dépend de leur énergie cinétique et de la direction de la contrainte. Trois cas particuliers sont ici traités. Les deux premiers cas correspondent à l'application d'une contrainte uniaxiale dans les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ respectivement. Pour ces deux premiers cas, la condition d'une faible énergie cinétique est prise. Si la condition de forte énergie cinétique des trous est satisfaite, nous avons la présence des trous lourds et légers avec des masses effectives isotropes. Les valeurs de masses effectives des trous pour les différents cas ont déjà été données au chapitre II. La figure 5-9 présente l'évolutions du rapport des concentrations des trous sur les premières sous-bandes de deux séries dans les trois cas décrits ci-dessus. Dans le modèle de faible énergie cinétique, les deux courbes se superposent quasiment. Et le modèle de forte énergie cinétique montre que la différence des populations entre les deux types de trous est plus importante que celle du modèle de faible énergie cinétique. Ceci sera un des arguments pour lesquels le modèle de forte énergie cinétique ne convient pas au calcul des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour les trous.

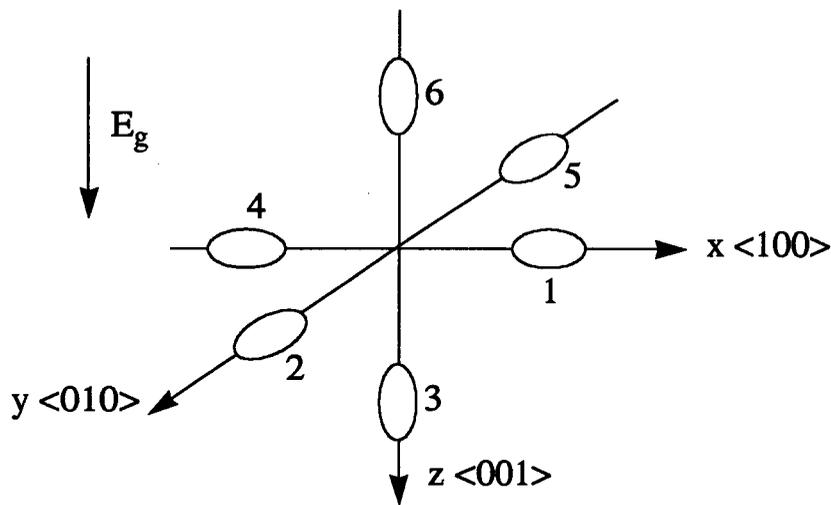


Fig. 5-10: Positions de six vallées de la bande de conduction du silicium, le champ électrique de la grille est dans la direction $\langle 001 \rangle$ et la surface du silicium dans la structure de MIS est (001).

5.2.3. PIEZORESISTANCE BIDIMENSIONNELLE DES ELECTRONS:

La figure 5-7 nous présente schématiquement la structure d'un transistor de NMOS où le substrat est dopé P. La capacité MOS est commandée par la tension de grille. A polarisation zéro, la couche d'inversion ne se forme pas et le transistor est

bloqué. La grille doit être polarisée par une tension supérieure à une tension de seuil pour que la couche d'inversion riche en électrons puisse se former permettant ainsi un courant entre la source et le drain. La couche d'inversion est un système bidimensionnel des les électrons.

Si l'on suppose que la tension entre la source et le drain est faible, la couche d'inversion peut être considérée uniforme le long du canal. Notons respectivement la longueur et la largeur du canal par L et W . A faible tension drain/source, le courant drain est calculé par:

$$I_d = \frac{W}{L} \sigma V_d \quad (5-57)$$

où σ est la conductivité bidimensionnelle des électrons dans la couche d'inversion et V_d est la tension de drain par rapport à la source.

Il existe six vallées équivalentes dans la bande de conduction du silicium (voir la figure 5-10). Dans une structure MIS où le silicium est orienté (001), les deux vallées dans l'axe z se situent plus bas dans l'espace énergétique que les quatre autres vallées dû à l'effet de quantification du mouvement des électrons perpendiculaire à la surface. Les populations des électrons dans ces six vallées ne sont donc plus équivalentes. La conductivité bidimensionnelle due aux électrons dans la couche d'inversion s'écrit:

$$[\sigma_{ij}] = 2e^2 \left\{ n_1 \tau_1 \begin{bmatrix} 1/m_t & 0 \\ 0 & 1/m_l \end{bmatrix} + n_2 \tau_2 \begin{bmatrix} 1/m_t & 0 \\ 0 & 1/m_l \end{bmatrix} + n_3 \tau_3 \begin{bmatrix} 1/m_t & 0 \\ 0 & 1/m_l \end{bmatrix} \right\} \quad (5-58)$$

où n_i est la densité superficielle des électrons de vallée i , τ_i est le temps de relaxation des électrons, m_t et m_l sont respectivement les masses effectives transversale et longitudinale des électrons.

Puisque la vallée 1 est identique à la vallée 2, c'est-à-dire $n_1 = n_2$, la conductivité de l'équation (5-58) devient:

$$[\sigma_{ij}] = 2en_1 (B\mu_{3t} + \mu_{1t} + \mu_{1l}) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5-59)$$

où $B = n_3/n_1$, $\mu_{3t} = e\tau_3/m_p$, $\mu_{1t} = e\tau_1/m_p$, $\mu_{1l} = e\tau_1/m_l$. Dans ce cas, la conductivité est un scalaire. L'expression (5-59) est la conductivité à l'état sans contrainte mécanique.

Du fait de la quantification, les positions énergétiques des six vallées deviennent anisotropes. Le fait que le temps de relaxation des électron soit une fonction de son énergie conduit ainsi à une anisotropie du temps de relaxation dû aux mécanis-

mes de la diffusion d'intervallée et de la diffusion d'intravallée. En conséquence, la différence entre les temps de relaxation des différentes vallées se traduit par:

$$\tau_3 = \tau_6 = \tau_1 + \Delta\tau \quad \text{avec} \quad \tau_1 = \tau_4 = \tau_2 = \tau_5 \quad (5-60)$$

où $\Delta\tau$ représente l'influence des diffusions intervallée et intravallée. Certains travaux préconisent^[10, 56] que la diffusion intervallée rend $\Delta\tau$ positif, alors que la diffusion intravallée le rend négatif. On peut donc déterminer le mécanisme prédominant par le signe du facteur $\Delta\tau$.

L'application d'une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 100 \rangle$ diminue les positions des vallées 1, 4 dans l'espace énergétique et augmente celles des vallées 2, 5 et 3, 6. Ceci entraîne un transfert des électrons des vallées 2, 5 et 3, 6 aux vallées 1, 4. De plus, la diffusion intervallée est modifiée par le changement des positions relatives entre ces vallées. Cette contribution à l'effet de piézorésistivité peut être représenté par un facteur d'enrichissement^[2]. Suivant le même procédé que celui du calcul des coefficients de piézorésistivité des électrons dans le volume, on peut trouver les deux premiers coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour les électrons:

$$\Pi_{11} = -\frac{\Xi_u (s_{11} - s_{12})}{(2+B)KT} \frac{(1+B)(1-r_\mu) + B(\Delta\tau/\tau_1)}{1+B+B(\Delta\tau/\tau_1) + r_\mu} (1 + \alpha_{11}) \quad (5-61)$$

$$\Pi_{12} = \frac{\Xi_u (s_{11} - s_{12})}{(2+B)KT} \frac{(1-r_\mu) - B(\Delta\tau/\tau_1)}{1+B+B(\Delta\tau/\tau_1) + r_\mu} (1 + \alpha_{12})$$

où $r_\mu = \mu_{1l}/\mu_{1t} = m_t/m_l$. Afin de trouver le troisième coefficient de piézorésistivité Π_{44} , il faut appliquer une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 110 \rangle$. Une telle contrainte fait apparaître des composantes non-diagonales dans le tenseur de masse effective^[30] (voir le chapitre II et le chapitre IV). Grâce à ces composantes non-diagonales de la masse effective, le troisième coefficient de piézorésistivité bidimensionnelle Π_{44} est défini par:

$$\Pi_{44} = -\frac{(1 + \Delta\tau/\tau_1) s_{44} \Xi_m m_t B}{1+B+B(\Delta\tau/\tau_1) + r_\mu} \quad (5-62)$$

Les expressions (5-61) et (5-62) pour les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle peuvent être transformées dans la configuration de trois dimension. Le passage se fait en mettant $B = n_3/n_1 = 1$ et $\Delta\tau/\tau_1 = 0$. Ainsi les coefficients de pié-

zorésistivité dans le volume peuvent être directement obtenus par les équation (5-61) et (5-62).

Kawaji [56] a démontré que le temps de relaxation des électrons dans un système bidimensionnelle est fonction des niveaux énergétiques de sous-bandes. Puisque les niveaux de sous-bandes dépendent du champ électrique perpendiculaire à l'interface Si/SiO₂, on peut supposer que le rapport des temps de relaxation τ_3/τ_1 varie en fonction du champ électrique E_g à l'interface de la manière suivante:

$$\tau_3/\tau_1 = (1 + E_g/E_{c1})^{s_1} \quad (5-63)$$

Le facteur d'enrichissement α_{ij} dépend également du champ électrique E_g , on le définit comme:

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij0} (1 - (E_g/E_{c2})^{s_2}) \quad (5-64)$$

où α_{ij0} est le facteur d'enrichissement lorsque le champ électrique est nul. Quant au paramètre Ξ_m concernant à la variation de masse effective des électrons, on peut le relier avec le champ électrique E_g par:

$$\Xi_m = \Xi_{m0} (1 + (E_g/E_{c3})^{s_3}) \quad (5-65)$$

où Ξ_{m0} est la valeur du paramètre Ξ_m en absence du champ électrique. Les paramètres E_{ci} sont les valeurs critiques du champ électrique dans les cas correspondants.

Table 5-4: Valeurs des paramètres nécessaires au calcul des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour les électrons en fonction du champ électrique.

Paramètres	Valeurs	Paramètres	Valeurs
s_1	0.2	α_{110}	0.12
s_2	2.0	α_{120}	0.25
s_3	2.0	α_{440}	0.00
E_{c1} (V/cm)	2.4E5	N_a (atms/cm ³)	2.0E15
E_{c2} (V/cm)	1.6E6	N_{depl} (atms/cm ²)	1.6E11
E_{c3} (V/cm)	1.6E6	z_d (1.0E-4cm)	0.8

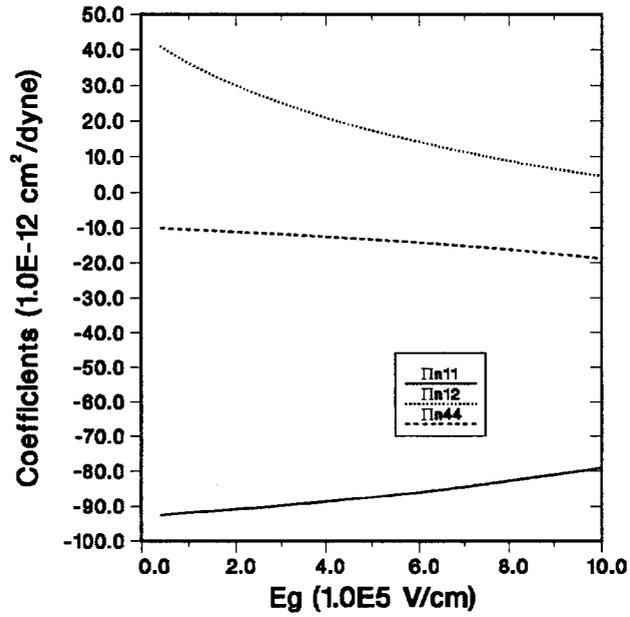


Fig. 5-10: Variations des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle en fonction du champ électrique transversal à l'interface, à température ambiante (300K.)

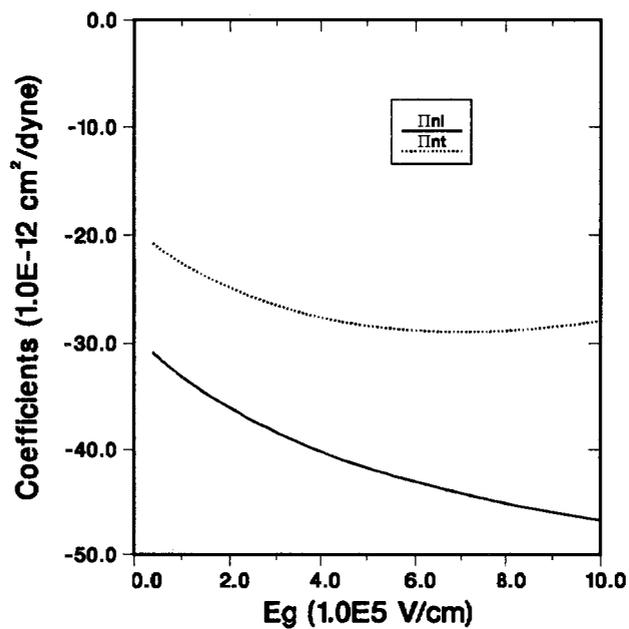


Fig. 5-11: Variations des coefficients longitudinal et transversal de piézorésistivité bidimensionnelle dans la direction $\langle 110 \rangle$ en fonction du champ électrique transversal à l'interface à température ambiante (300K).

En reportant ces modèles dans les équations (5-61) et (5-62), la figure 5-10 montre les évolutions des trois coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour les électrons en fonction du champ électrique E_g . Les valeurs des paramètres concernés sont données dans le tableau 5-4. Les niveaux de sous-bandes sont calculés en combinant la méthode variationnelle et la méthode de perturbation. Nous avons considéré dix sous-bandes pour les vallées 3, 6 et cinq sous-bandes pour les vallées 1, 4 et 2, 5. La figure (5-10) montre que nous arrivons à avoir un bon accord entre les résultats expérimentales et les calculs théoriques [16, 57].

Les coefficients longitudinal et transversal de piézorésistivité bidimensionnelle par rapport à la direction $\langle 110 \rangle$ sont obtenus par

$$\Pi_l = (\Pi_{11} + \Pi_{12} + \Pi_{44})/2 \quad \Pi_t = (\Pi_{11} + \Pi_{12} - \Pi_{44})/2 \quad (5-66)$$

Les variations des coefficients Π_p , Π_t en fonction du champ électrique E_g sont présentées dans la figure (5-11). On y trouve également un bon accord entre les résultats expérimentales et les calculs théoriques [16, 57]. Le canal des transistors de MOS est couramment dans la direction $\langle 110 \rangle$, ce sont donc les coefficients Π_p , Π_t qui seront les plus utilisés dans les capteurs de micro-mécanique.

5.2.4. PIEZORESISTANCE BIDIMENSIONNELLE DES TROUS:

En présence d'une contrainte mécanique, la bande de valence du silicium se modifie de deux manières: l'une est lié au modèle de faible énergie cinétique, l'autre au modèle de forte énergie cinétique. Dans le modèle de forte énergie cinétique [13], les trous sont classés en trous lourds et trous légers avec une masse effective isotrope. Mais, une masse effective isotrope indique un temps de relaxation isotrope. Ceci veut dire que le coefficient de piézorésistivité bidimensionnelle des trous Π_{11} et le coefficient Π_{44} ont le même signe, et que le module du coefficient Π_{11} est deux fois plus grand que celui du coefficient Π_{12} (voir l'équation (4-72)). Ces prévisions sont pourtant complètement contraire aux résultats expérimentaux [16, 57, 58]. De plus, le modèle de forte énergie cinétique entraîne une forte dépendance des coefficients de piézorésistivité avec le champs électrique, ce qui n'est pas cohérent avec les résultats expérimentaux [16, 57, 58]. Il faut donc considérer le modèle de faible énergie cinétique pour étudier les comportements des trous dans la couche d'inversion lorsqu'une contrainte mécanique uniaxiale est appliquée.

Il existe trois coefficients indépendants de piézorésistivité bidimensionnelle de trous pour le silicium orienté (001). Afin de trouver ces trois coefficients, il faut appliquer deux types de contraintes mécaniques uniaxiales, l'une dans la direction $\langle 100 \rangle$, et l'autre dans la direction $\langle 110 \rangle$. Dans un premier temps, nous nous intéressons aux deux premiers coefficients Π_{11} et Π_{12} en appliquant une contrainte mécanique uniaxiale dans la direction $\langle 100 \rangle$. Dans ce cas, la conductivité

bidimensionnelle assistée par trous est donnée par:

$$[\sigma_{ij}] = ep_1 \begin{bmatrix} e\tau_{11}^1/m_{11}^1 & 0 \\ 0 & e\tau_{22}^1/m_{22}^1 \end{bmatrix} + ep_2 \begin{bmatrix} e\tau_{11}^2/m_{11}^2 & 0 \\ 0 & e\tau_{22}^2/m_{22}^2 \end{bmatrix} \quad (5-67)$$

où les deux branches supérieures de la bande de valence sont prises en compte. p_1 et p_2 sont les densités superficielles des trous dans les deux branches calculées par la statistique bidimensionnelle de Boltzmann. Dans ce calcul, les niveaux de sous-bandes des trous sont calculés à l'aide de l'approximation du puits triangulaire où on ne prend en compte que la première sous-bande de chaque série. m_{ij}^1, m_{ij}^2 sont les masses effectives de trous qui sont définies au chapitre II. En variant la contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 100 \rangle$, la variation de la conductivité s'écrit:

$$\delta\sigma_{ii} = \sum_{v=1}^2 e\delta p_v \left(\frac{e\tau_{ii}^v}{m_{ii}^v} (1 + \alpha_{ii}) \right) + \sum_{v=1}^2 ep_v \left(e\tau_{ii}^v \delta \left(\frac{1}{m_{ii}^v} \right) \right) \quad (5-68)$$

où le premier terme est la contribution du transfert des trous dû au déplacement de la bande de valence. Le facteur d'enrichissement α_{ii} prend en compte la variation du temps de relaxation due au mécanisme de la diffusion entre les deux branches. Le second terme est lié à la variation de la masse effective des trous due à la déformation de la bande de valence. En suivant le même procédé que pour le calcul de coefficients de piézorésistivité tridimensionnelle des trous dans le volume, on obtient les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle Π_{11} et Π_{12} pour les trous:

$$\begin{aligned} \Pi_{11} &= - \frac{\frac{2b(s_{11}-s_{12})}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} [r_{\tau_{11}}(A+B) - (A-B)] (1 + \alpha_{11})}{r_p r_{\tau_{11}} (A+B/2) + (A-B/2)} - \frac{\frac{4Bb(s_{11}-s_{12})}{\Delta} r_p r_{\tau_{11}}}{r_p r_{\tau_{11}} (A+B/2) + (A-B/2)} \\ \Pi_{12} &= - \frac{\frac{2b(s_{11}-s_{12})}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left[r_{\tau_{22}} \left(A - \frac{B}{2} \right) - \left(A + \frac{B}{2} \right) \right] (1 + \alpha_{12})}{r_p r_{\tau_{22}} (A+B/2) + (A-B/2)} + \frac{\frac{2Bb(s_{11}-s_{12})}{\Delta} r_p r_{\tau_{22}}}{r_p r_{\tau_{22}} (A+B/2) + (A-B/2)} \end{aligned} \quad (5-69)$$

avec

$$r_p = p_1/p_2 \quad r_{\tau_{11}} = \tau_{11}^1/\tau_{11}^2 \quad r_{\tau_{22}} = \tau_{22}^1/\tau_{22}^2 \quad \alpha_{12} = \alpha_{22} \quad (5-70)$$

Les expressions (5-69) pour les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle Π_{11} et Π_{12} sont identiques à celles de l'équation (4-47). Mais la définition de la densité de trous est ici bidimensionnelle alors que celle du chapitre VI est tridimensionnelle.

Le temps de relaxation est également différent dû à l'effet quantique.

Pour trouver le troisième coefficient de piézorésistivité Π_{44} , il faut connaître la variation de la composante hors-diagonale $\delta\sigma_{12}$ de la conductivité dans le système cristallographique. Ceci peut être réalisé en appliquant une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 110 \rangle$. Pour des raisons de simplicité, on calcule d'abord les coefficients longitudinal et transversal de piézorésistivité bidimensionnelle des trous Π_p, Π_t par rapport à la direction $\langle 110 \rangle$. Une contrainte uniaxiale dans la direction $\langle 110 \rangle$ crée un tenseur de masse effective des trous qui est diagonal dans un système d'axes x, y et z respectivement dans les directions $\langle 110 \rangle, \langle \bar{1}10 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$. Ainsi la conductivité totale de trous prend la même forme que l'équation (5-67). Avec la même méthode que celle utilisée pour le calcul des coefficient de piézorésistivité bidimensionnelle des trous Π_{11} et Π_{12} , on obtient les coefficients longitudinal et transversal de piézorésistivité bidimensionnelle des trous Π_p, Π_t par rapport la direction $\langle 110 \rangle$:

$$\Pi_t = - \frac{\frac{2\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_{\tau t} \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) - \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right) \right) (1 + \alpha_t) + r_p r_{\tau t} \delta \left(\frac{1}{m_{11}^1} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{11}^2} \right)}{r_p r_{\tau t} \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right)} \quad (5-71)$$

$$\Pi_l = \frac{\frac{2\Delta E}{KT} \frac{r_p}{1+r_p} \left(r_{\tau t} \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) - \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right) \right) (1 + \alpha_t) + r_p r_{\tau t} \delta \left(\frac{1}{m_{22}^1} \right) + \delta \left(\frac{1}{m_{22}^2} \right)}{r_p r_{\tau t} \left(\frac{1}{m_{11}^1} + \frac{1}{m_{22}^1} \right) + \left(\frac{1}{m_{11}^2} + \frac{1}{m_{22}^2} \right)}$$

avec

$$\Delta E = b (s_{11} - s_{12}) (1 + 3\beta^2)^{1/2}$$

où l'on suppose que $r_{\tau l} = \tau_{11}^1 / \tau_{11}^2, r_{\tau t} = \tau_{22}^1 / \tau_{22}^2, r_p = p_1 / p_2, 1/m_{ii}^1, 1/m_{ii}^2, \delta(1/m_{ii}^1)$ et $\delta(1/m_{ii}^2)$ sont calculés dans le cas où une contrainte uniaxiale est appliquée dans la direction $\langle 110 \rangle$ (voir les équations (2-33) et (2-34)). Quant au coefficient de piézorésistivité bidimensionnelle de trous Π_{44} , il peut être obtenu par les coefficients Π_p, Π_t comme suit:

$$\Pi_{44} = \Pi_l - \Pi_t \quad (5-72)$$

Le tableau 5-5 donne les valeurs initiales des facteurs d'enrichissement et des rapports entre les temps de relaxation apparaissant dans les équations (5-69) et (5-71). Pour justifier que les deux facteurs d'enrichissement $r_{\tau 110}, r_{\tau 220}$ sont très différents que l'unité, le temps de relaxation des trous est supposé dépendre de la masse

effective des trous et de la direction de contrainte de mécanique [40, 41]. Selon le tableau (5-5), on remarque que le temps de relaxation des trous est très sensible à la contrainte dans la direction $\langle 100 \rangle$, alors qu'il est insensible à la contrainte dans la direction $\langle 110 \rangle$. Ce phénomène a déjà été rencontré dans le cas de piézorésistivité tridimensionnelle (voir le paragraphe 4.2.2.1. du chapitre IV). Pour évaluer la dépendance des coefficients de piézorésistivité définis par les équations (5-69) et (5-71), on suppose d'abord que les facteurs d'enrichissement et les rapports entre les temps de relaxation sont indépendants du champ électrique transversale E_g . Avec cette supposition, la figure (5-12) donne les évolutions des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle pour les trous en fonction du champ électrique à l'interface E_g .

Table 5-5: Les valeurs des facteurs d'enrichissement et des rapports entre les temps de relaxation

Contrainte // $\langle 100 \rangle$		Contrainte // $\langle 110 \rangle$	
$\alpha_{110}=0.30$	$r_{\tau 110}=0.425$	$\alpha_{t0}=-0.3$	$r_{\tau t0}=1.0$
$\alpha_{120}=0.25$	$r_{\tau 220}=3.250$	$\alpha_{t0}=-0.3$	$r_{\tau t0}=1.0$

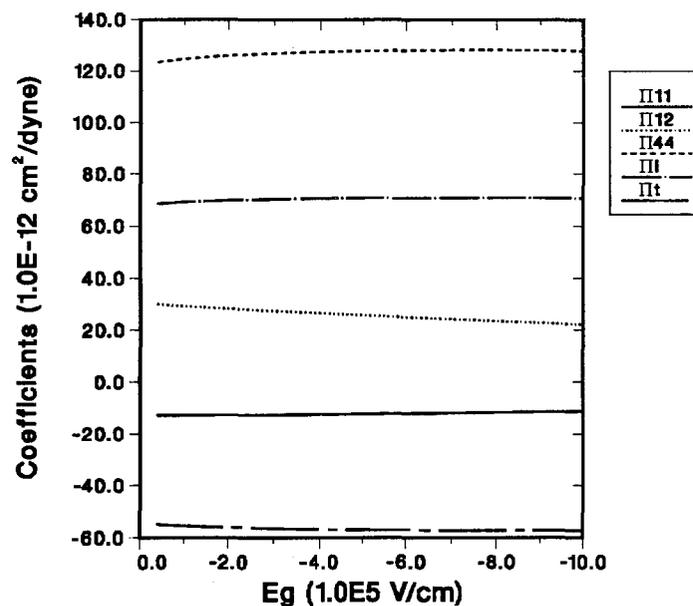


Fig. 5-12: Evolutions des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle des trous en fonction du champ électrique E_g à l'interface où il est supposé que les facteurs d'enrichissement et les rapports entre les temps de relaxation sont indépendants du champ électrique transversal, $N_{depl} = 1.6 \times 10^{11} \text{ atoms/cm}^2$.

Table 5-6: Valeurs des champs électriques critiques utilisées dans le calcul des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle des trous

Contrainte // <100>	Contrainte // <110>
$E_{c11} = 2.4 \times 10^6 V/cm$	$E_{c1} = 2.6 \times 10^6 V/cm$
$E_{c12} = 4.0 \times 10^6 V/cm$	$E_{ct} = 8.0 \times 10^5 V/cm$

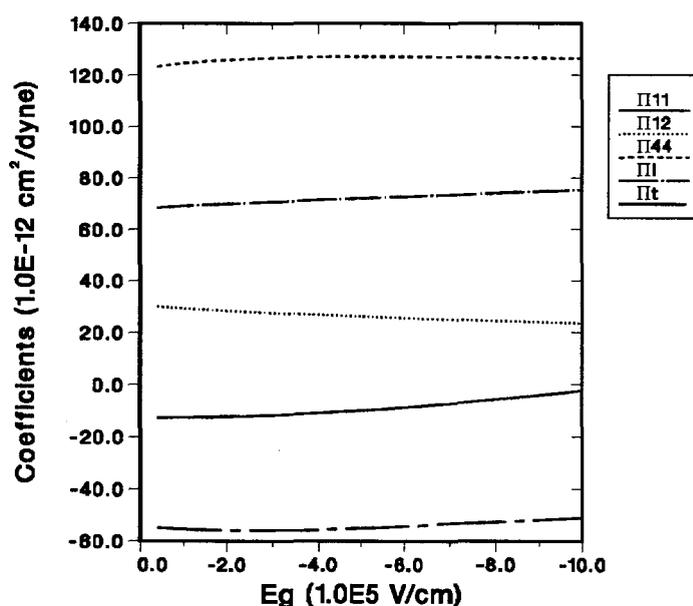


Fig. 5-13: Evolutions des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle des trous en fonction du champ électrique E_g à l'interface où il est supposé que les facteurs d'enrichissement et des rapports entre les temps de relaxation sont dépendants du champ électrique transversal de manière indiquée par l'équation (5-72), avec $N_{depl} = 1.6 \times 10^{11} atoms/cm^2$.

Avec les valeurs des paramètres du tableau (5-5), la figure 5-12 nous montre que les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle des trous calculés par les équations (5-69) et (5-71), sont du même ordre de grandeur que ceux obtenus expérimentalement. Cependant, il existe certains écarts en ce qui concerne les évolutions des coefficients calculés et expérimentaux [16, 57, 58] avec le champ électrique E_g . Afin d'ajuster les évolutions des coefficients en fonction du champ électrique transversal, comme pour les électrons, on peut supposer que les rapports entre les temps de relaxation de trous sont fonctions du champ électrique transversal de la manière suivante:

$$r_{\tau ij} = r_{\tau ij0} [1 + (E_g/E_{cij})^2] \quad (5-72)$$

où E_{cij} sont les champ électriques critiques pour les cas correspondants. Le tableau 5-6 présente les valeurs E_{cij} qui permet un bon accord avec l'expérience.

En tenant compte de la dépendance des rapports de temps de relaxation des trous avec le champ électrique transversal, la figure 5-13 montre que les évolutions de coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle de trous sont en meilleur accord avec les résultats expérimentaux [16, 57, 58].

Ainsi, le modèle de faible énergie cinétique des trous nous permet de trouver les coefficients de piézorésistivité corrects pour une couche d'inversion de type P dans une structure MIS. Nous avons pris en compte l'approximation de la masse effective des trous modifiée par une contrainte uniaxiale et l'effet de quantification. Nous croyons que ce modèle s'appliquera mieux au cas où les conditions de basse température, forte inversion et contraintes importantes sont réalisés. Mais l'hypothèse concernant le rapport de temps de relaxation des trous reste encore à être justifiée.

CHAPITRE VI

SIMULATION DE LA PIEZORESISTIVITE DANS LES TRANSISTORS MOS

Résumé

Dans un premier temps, les équations du système sont établies en tenant compte de l'effet de quantification. Un modèle mixte de piézorésistivité 2D/3D est introduit dans le simulateur de dispositifs IMPACT3.3 en considérant le canal comme une succession de tranches verticales. La variation de la largeur de la bande interdite et l'effet du champ électrique latéral sont également pris en compte. La simulation montre un très bon accord avec les résultats expérimentaux. L'utilisation de la carte &PIE concernant la simulation de la piézorésistance dans les transistors MOS est décrite à la fin de ce chapitre.

CHAPITRE VI

SIMULATION DE LA PIEZORESISTIVITE DANS LES TRANSISTORS MOS

Nous avons étudié l'effet de la piézorésistivité tridimensionnelle et bidimensionnelle du silicium dans les chapitres précédents. A ce stade, ces modèles prêts à être introduits dans un simulateur de dispositifs MOS. Cependant, le calcul des niveaux des sous-bandes est un problème difficile à résoudre dans un transistor MOS puisque le canal n'est pas uniforme le long du canal dû à l'application de tension de drain V_d . Il nous faut là encore faire certaines approximations. Dans un premier temps, nous établirons les équations du système en incluant l'effet de quantification du mouvement des porteurs perpendiculaire à l'interface Si/SiO₂. Ensuite, nous séparerons le calcul des sous-bandes du calcul du potentiel et des densités de porteurs par découpler les équations du système. En divisant le canal le long du canal, on peut appliquer le modèle de la piézorésistivité bidimensionnelle à chaque tranche obtenue. La résolution de l'équation de Poisson et les deux équations de continuité pour les deux types de porteurs s'effectue par le simulateur bidimensionnel IMPACT [56]. IMPACT donne les distributions du champ électrique et des porteurs dans un transistor MOS nécessaires au calcul des sous-bandes et à la simulation de la piézorésistivité. Dans la simulation du transistor MOS, nous considérons aussi l'effet de variation de la bande interdite due à la contrainte mécanique et l'influence du champ électrique latéral sur les coefficients piézorésistifs. Quelques exemples des comparaisons entre l'expérimentation et la simulation seront présentés et discutés à la fin de ce chapitre.

6.1. EQUATIONS DU SYSTEME:

Au canal d'un transistor MOS, les porteurs se trouvent dans un système à deux dimensions. En régime de forte inversion, la dimension perpendiculaire à l'interface est énergiquement une dimension fermée. Dans le plan parallèle à l'interface, le mouvement des porteurs reste libre. On peut donc proposer un système mixte, dans lequel le mouvement des porteurs est quantifié dans la direction perpendiculaire à l'interface et est classique dans le plan du canal. Prenons l'axe x dans la direction de la longueur du canal, l'axe y dans la direction de la largeur du canal et l'axe z perpendiculaire à l'interface. Usuellement, la largeur du canal est nettement plus grande que la longueur, cette dimension n'intervient pas donc dans le calcul. Dans ce cas, le potentiel n'est fonction que des variables x et z . Considérons le cas des électrons comme exemple, dans l'approximation de masse effective, l'équation de Schrödinger s'écrit [39]:

$$\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} p_i p_j\right) \Psi(x, y, z) - e\phi(y, z) \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (6-1)$$

où $\Psi(x, y, z)$ est la fonction d'onde, e la charge d'électron, E le niveau énergétique des électrons, et $p_i = -i\hbar(\partial/\partial x_i)$, $(1, 2, 3)$ le moment des électrons selon l'axe x_i , w_{ij} sont les composants du tenseur inverse de la masse effective. La fonction d'onde pour la $n^{\text{ième}}$ sous-bande peut être décomposée sous la forme suivante ^[39] (voir le chapitre V):

$$\Psi_n(x, y, z) = \xi_n^y(z) e^{i\theta_z} e^{ik_1x + ik_2y} \quad (6-2)$$

où $\theta_z = -(w_{31}k_1 + w_{32}k_2)/w_{33}$. La fonction d'enveloppe $\xi_n^y(z)$ est caractérisée par la variable y puisque le potentiel $\phi(y, z)$ est fonction de y . En reportant la fonction d'onde (6-2) dans l'équation (6-1), on obtient:

$$\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2 \xi_n^y(z)}{dz^2} + [e\phi(y, z) + E_n^y] \xi_n^y(z) = 0 \quad (6-3)$$

où $m_3 = 1/w_{33}$ est la masse effective des électrons dans la direction perpendiculaire à la surface de semiconducteur. Comme la fonction d'enveloppe $\xi_n^y(z)$, le niveau de sous-bande E_n^y est également caractérisée par la variable y . Si la barrière énergétique à l'interface Si/SiO₂ est supposée infinie, on obtient une condition aux limites telle que:

$$\xi_i^y(0) = 0 \quad (6-4)$$

De même, la fonction d'onde pour les points suffisamment loins de l'interface tend à prendre une valeur nulle, soit:

$$\xi_i^y(\infty) = 0 \quad (6-5)$$

Le potentiel électrostatique $\phi(y, z)$ est déterminé par l'équation de Poisson:

$$\nabla^2 \phi(y, z) = \frac{e(n - p + N_a - N_d)}{\epsilon_s} \quad (6-6)$$

où $\nabla^2 = (\partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2)$, ϵ_s est la constante diélectrique du silicium et les impuretés sont supposées complètement ionisées. La concentration en trous, p , est

calculée par la statistique tridimensionnelle:

$$p(y, z) = N_v e^{-(E_{fp} + e\phi(y, z))/K_B T} \quad (6-7)$$

où E_{fp} est le quasi-niveau de Fermi des trous et K_B la constante de Boltzmann. La concentration des électrons n est calculée par la statistique bidimensionnelle:

$$n(y, z) = \frac{m_d}{\pi \hbar^2} K T \sum_i \ln [1 + e^{(E_{fn} - E_i)/K_B T}] \xi_i^2(z) \quad (6-8)$$

où E_{fn} est le quasi-niveau de Fermi des électrons.

Les deux équations de continuité de charge s'écrivent comme suit:

$$\nabla \cdot (\vec{J}_n) = -e(G - R) \quad \nabla \cdot (\vec{J}_p) = e(G - R) \quad (6-9)$$

où $\nabla = \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$, \vec{J}_n et \vec{J}_p sont respectivement les densités de courants des électrons et des trous, G et R sont respectivement les taux de génération et recombinaison. Dans la dimension de quantification z , le courant porté par un électron est calculé par [63]:

$$j(z) = \frac{-ie\hbar}{2m_3} (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial z} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial z}) = \frac{-ie\hbar}{2m_3} \left[\xi^*(z) \frac{\partial \xi(z)}{\partial z} - \xi(z) \frac{\partial \xi^*(z)}{\partial z} \right] \quad (6-10)$$

où Ψ est la fonction d'onde électronique. La densité totale de courant des électrons dans la direction z s'écrit:

$$J_{nz} = \sum_j \frac{-ie\hbar n_j}{2m_3} \left[\xi_j^*(z) \frac{\partial \xi_j(z)}{\partial z} - \xi_j(z) \frac{\partial \xi_j^*(z)}{\partial z} \right] \quad (6-11)$$

où n_j est le nombre des électrons sur la $j^{\text{ième}}$ sous-bande. Un courant des électrons exprimé en terme de la fonction d'onde couple l'équation de Schrödinger (6-3) avec l'équation de Poisson (6-6) et l'équation de continuité (6-9). Dans une telle approche, un temps de CPU trop important est nécessaire à résoudre le système des équations car il faut d'abord chercher les sous-bandes et ensuite calculer la distribution du champ électrique et celle des porteurs.

Pour éviter une telle lourdeur, nous supposons que le courant des électrons dans la direction z peut être calculé classiquement comme les courants dans les

autres directions. Dans la théorie classique, la densité de courant des électrons et celle de courant des trous sont définies par:

$$\begin{aligned} \vec{J}_n(y, z) &= -en(y, z)\mu_n\nabla\phi(y, z) + eD_n\nabla n(y, z) \\ \vec{J}_p(y, z) &= -ep(y, z)\mu_p\nabla\phi(y, z) - eD_p\nabla p(y, z) \end{aligned} \quad (6-12)$$

où μ_n, μ_p sont respectivement les mobilités des électrons et des trous, D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous.

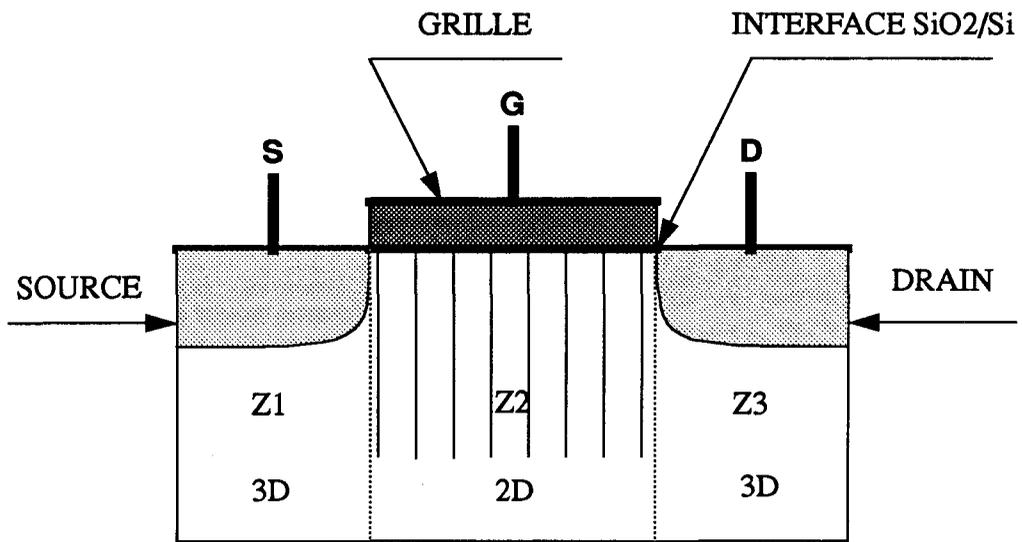


Fig. 6-1: Structure d'un transistor MOS. Le canal est constitué de tranches afin d'appliquer le modèle de piézorésistivité bidimensionnelle.

En approximant le courant des électrons dans la direction z , on peut d'abord obtenir les solutions pour n, p et ϕ par la résolution de l'équation de Poisson (6-6) et les équations de continuité (6-9). Ensuite, on cherche les niveaux de sous-bandes en reportant le potentiel dans l'équation de Schrödinger (6-3). Ainsi, on arrive à découpler l'équation de Schrödinger des équations de Poisson et de continuité. L'équation (6-3) montre qu'il faut considérer le canal comme une succession de tranches verticales afin de pouvoir appliquer le modèle du calcul de sous-bandes. La figure 6-1 illustre la structure d'un transistor MOS et la partition du canal. On résume ici les équations du système:

$$\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2 \xi_n^y(z)}{dz^2} + [e\phi(y, z) + E_n^y] \xi_n(z) = 0 \quad (6-13a)$$

$$\nabla^2 \phi(y, z) = \frac{e(n - p + N_a - N_d)}{\epsilon_s} \quad (6-13b)$$

$$\nabla \vec{J}_n(y, z) = -e(G - R) \quad (6-13c)$$

$$\nabla \vec{J}_p(y, z) = e(G - R)$$

Le procédé de résolution de ces équations du système est tel que le simulateur IMPACT résout l'équation (6-13b) et l'équation (6-13c) et fournit ainsi le potentiel ϕ , la distribution d'impureté et la distribution du champ électrique à l'équation (6-13a) qui calcule l'effet quantique. Il faut remarquer que les résultats obtenus pour les électrons sont également valables pour les trous dans l'approximation de masse effective.

6.1. MODELISATION DE PIEZORESISTIVITE:

Dans un premier temps, nous nous intéressons au calcul des sous-bandes dans le canal de transistors MOS. Une fois déterminé le potentiel ϕ , l'équation (6-13a) nous permet de calculer les sous-bandes tranche par tranche. Une solution exacte de l'équation (6-13a) nécessite un traitement numérique complet. Mais cette approche serait incohérente, au sens de la précision, car le potentiel ϕ est déjà issu d'une solution approximative. Une méthode explicite sera ici utilisé qui, de plus, permet de réduire considérablement les temps de calcul. Un autre obstacle est qu'il est difficile à trouver précisément la largeur de la zone de déplétion z_d par IMPACT dû au raffinement du maillage et à la nonuniformité du dopage dans le canal. On choisit donc la méthode du puits triangulaire en prenant un champ électrique effective $E_{g\text{eff}}$ calculé à l'interface SiO₂/Si (voir le chapitre V). Les deux niveaux fondamentaux parmi les deux séries de sous-bandes seront pris en compte pour le calcul de la redistribution des porteurs.

Avec les niveaux des sous-bandes, les coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle dans le canal de transistor MOS peuvent être calculés. On implante le modèle de piézorésistivité bidimensionnelle dans le canal (la zone Z2 dans la figure 6-1) et le modèle de piézorésistivité tridimensionnelle dans les zones de source et de drain (la zone Z1 et la zone Z3 dans la figure 6-1). Notons la contrainte mécanique par X et le coefficient de piézorésistivité par Π , l'effet de piézorésistivité est introduit dans le simulateur IMPACT en ajoutant un terme piézorésistif au modèle de mobilité:

$$\mu = \mu_0 (1 - \Pi \cdot X) \quad (6-14)$$

où μ_0 est la mobilité à l'état sans contrainte.

Le chapitre IV a montré qu'une autre contribution à la variation de conductivité dû à l'application d'une contrainte est le changement de la bande interdite

E_{gap} . Cet effet est important en régime de faible inversion car les concentrations des électrons et des trous sont comparables. Cet effet est inclus dans IMPACT par:

$$E_{gap} = E_{gap0} + \Delta_g \cdot X \quad (6-15)$$

où E_{gap0} est la largeur de bande interdite à l'état sans contrainte, Δ_g est le taux de variation de la bande interdite avec la contrainte.

Car ce n'est pas une tâche facile à déterminer la cause de la légère dépendance des coefficients de piézorésistivité bidimensionnelle dans une couche d'inversion du type P avec le champ électrique latéral E_d , nous ne retiendrons donc l'influence du champ électrique latéral que pour les couches d'inversion de type N dans la simulation. Il est connu que la vitesse dérive des électrons se sature progressivement lorsque le champ électrique devient important. Ceci entraîne une réduction de la mobilité des électrons à fort champ électrique. La loi de diminution de mobilité en fonction du champ électrique est décrite par le modèle de Yamacuchi [58].

$$\mu \propto (1 + (E_d/E_{sat})^\beta)^{-1/\beta} \quad (6-16)$$

où E_{sat} est le champ électrique correspondant à la vitesse de saturation. Borchert et Dorda [59] ont proposé que la vitesse de saturation doit être différente pour les différentes directions. En combinant ces deux considérations, nous supposons donc que le rapport de mobilité pour la vallée 1 μ_{1l}/μ_{1t} dépend du champ électrique latéral de la manière suivante:

$$\mu_{1l}/\mu_{1t} = r_{limit} + (r_{ini} - r_{limit}) (1 + (E_d/E_{sat})^\beta)^{-1/\beta} \quad (6-17)$$

où r_{ini} est le rapport initial de $\mu_{1l}/\mu_{1t} = m_t/m_l$ et r_{limit} est sa valeur limite qui se situe entre 0.194 et 1 [59].

Table 6-1: Valeurs de certains paramètres utilisés dans la simulation

paramètres	valeurs	paramètres	valeurs
Δ_g	4.5E-12 (eV cm ² /dyne)	r_{ini}	0.19
E_{sat}	1.0E4 (V/cm)	r_{limit}	0.55

La figure 6-2 montre un maillage typique utilisé pour la simulation de pié-

zorésistivité de transistors MOS où les zones raffinées correspondent à l'interface SiO₂/Si et aux positions des jonctions. Les valeurs des paramètres utilisées dans la simulation sont données dans le tableau 6-1.

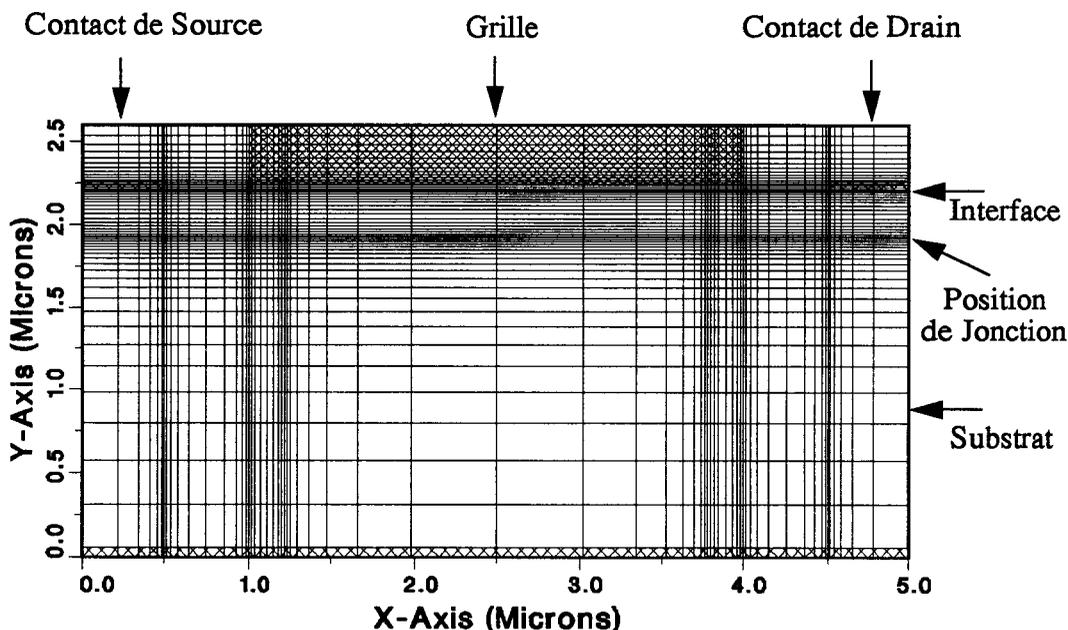


Fig. 6-2: Maillage typique utilisé pour la simulation de la piézorésistivité de transistors MOS. Les zones raffinées correspondent à l'interface et les position de jonctions.

6.3. FABRICATION ET EXPERIMENTATION:

Les transistors MOS, de type N et P, sont fabriqués avec la technologie CMOS 2microns de ES2. Cette technologie utilise un caisson de type N et est réalisée avec des wafers 5 puces de silicium orienté (100). Ces dispositifs sont caractérisés par des mesures statistiques et par une confrontation systématique avec les résultats de simulation. Les transistors de type N ont un canal orienté dans la direction $\langle 110 \rangle$, de longueur 3 microns et de largeur 25 microns; l'épaisseur d'oxyde de grille est de 400 Angströms. Les wafers sont découpés de telle manière à placer les transistors NMOS sur une poutre de silicium de dimension $36\text{mm} \times 3\text{mm} \times 0.65\text{mm}$. La figure 6-3 montre la configuration de mesurer la piézorésistance des transistors NOMS avec ces poutres. Un côté de la poutre est fixé, de l'autre côté une force est appliquée par des masses variables.

Les transistors de type P sont caractérisés par un canal dans la direction $\langle 110 \rangle$, de longueur 5 microns et de largeur 25 microns et un épaisseur d'oxyde de grille 250 Angströms. Ces transistors de type P sont implantés sur une membrane micro-usinée dans le silicium qui permet de convertir la pression appliquée en contrainte et d'amplifier cette contrainte pour augmenter la sensibilité du capteur. Ils

sont placés au bord de la membrane là où la contrainte est maximale et supposée uniaxiale. La pression est appliquée au dessus de la membrane. La configuration de mesure est montré dans la figure 6-4.

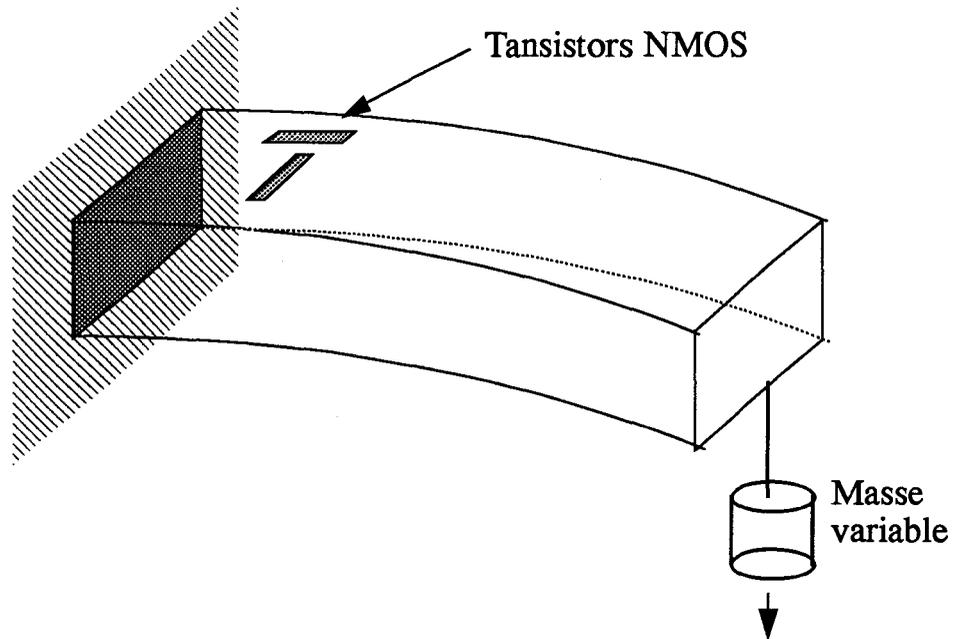


Fig. 6-3: Configuration de mesuer la piézorésistance des transistors NMOS. Un côté de la poutre est fixé, de l'autre côté une force est appliquée par des masses variables.

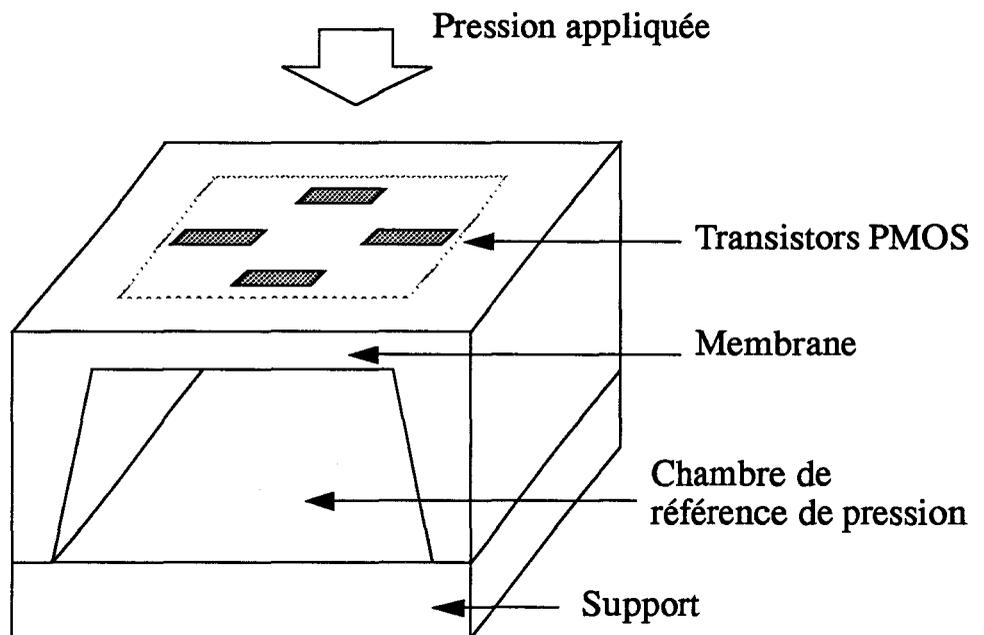


Fig. 6-4: Mesure de la piézorésistance des transistors MOS avec la membre micro-usinée.

Un banc de mesure automatisé a été conçu pour mesurer la pression, la température, le courant et la tension. La température est contrôlée avec une précision de 0.1K pendant la mesure. La contrainte créée par la pression ou la masse reste inférieure à 1.0×10^9 dyne/cm². La mesure a été effectuée par J. Suski et V. Mosser à AMR. Soit X la contrainte, ΔI_d la variation de courant de drain due à la contrainte X , I_d le courant de drain à l'état sans contrainte, le coefficient de piézorésistivité macroscopique des transistors MOS est défini par:

$$\Pi = -\Delta I_d / I_d X \quad (6-18)$$

6.4. SIMULATION ET COMPARAISON:

La modelisation de la piézorésistivité des transistors MOS est introduite dans le simulateur IMPACT par les équations (6-14), (6-15) et (6-18). Les valeurs des paramètres concernés sont regroupées dans le tableau 6-1. Dans un premier temps, IMPACT simule le procédé de fabrication des transistors NMOS et PMOS relative à la technologie CMOS 2 microns de ES2. Cette première phase permet de d'obtenir la distribution d'impuretés pour les types de transistors. Ce type de simulation permet d'optimiser le procédé paramètre afin d'accentuer ou réduire la sensibilité du composant aux contraintes.

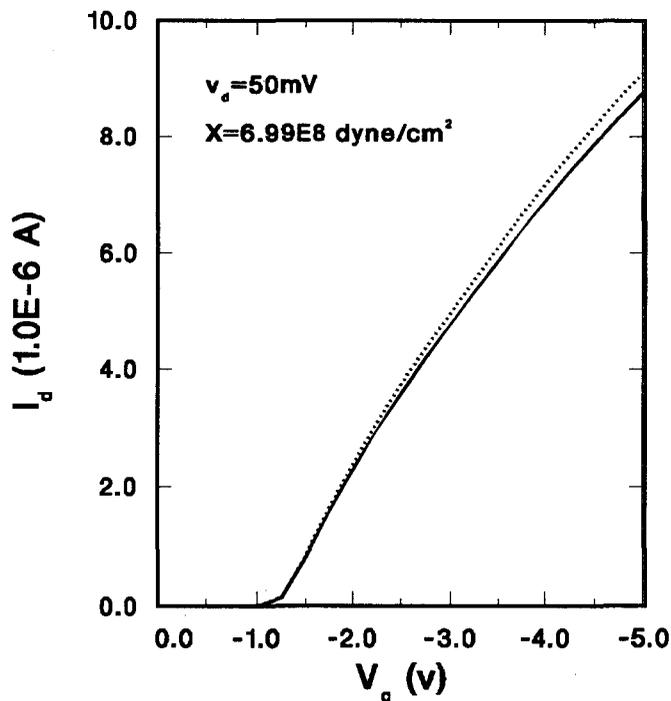


Fig. 6-5: Caractéristiques I_d - V_g simulées d'un transistor PMOS avec $L=5$ microns, $W=20$ microns. La tension de drain égale à 50 mV. La direction de la contrainte X est perpendiculaire au canal. La ligne continue correspond au cas sans contrainte et la ligne pointillée avec contrainte.

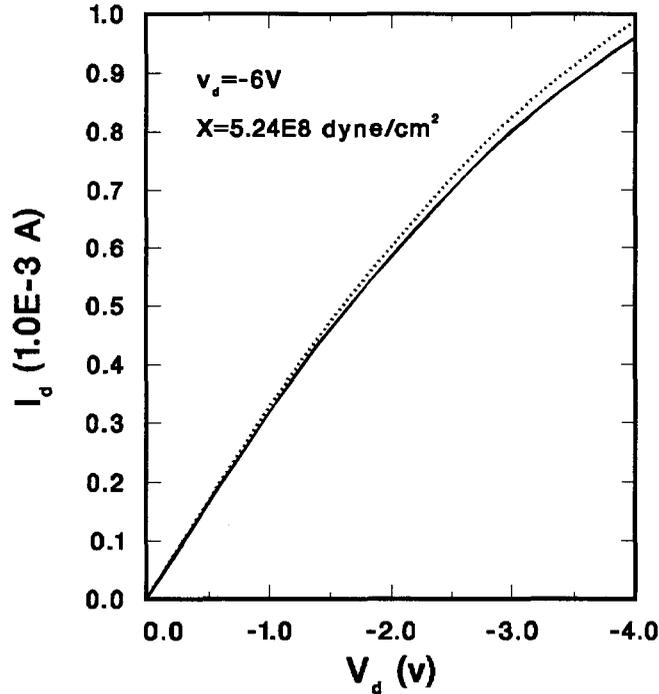


Fig. 6-6: Caractéristiques I_d - V_d simulées d'un transistor PMOS avec $L=5$ microns, $W=20$ microns. La tension de grille égale à -6 V. La direction de la contrainte X est perpendiculaire au canal. La ligne continue correspond au cas sans contrainte et la ligne pointillée avec contrainte.

De nombreuses validations ont été effectuées pour s'assurer un bon accord entre la simulation et l'expérimentation. Dans la simulation, la contrainte uniaxiale est parallèle au canal des transistors NMOS et est perpendiculaire au canal des transistors PMOS. Pour illustrer les résultats obtenus, les figures 6-5 et 6-6 présentent respectivement les caractéristiques électriques simulées I_d - V_g et I_d - V_d d'un transistor PMOS avec et sans contrainte.

Pour vérifier le modèle de piézorésistivité, la figure 6-7 montre la variation relative du courant de drain $\Delta I_d/I_d$ en fonction de la tension de grille V_g pour un transistor NMOS ($L=3$ microns, $W=25$ microns). Le canal du transistor NMOS prend la direction $\langle 110 \rangle$. La tension de drain V_d est égale à 25 mV. La contrainte est appliquée dans la direction parallèle au canal. La figure 6-8 présente la variation relative du courant de drain $\Delta I_d/I_d$ en fonction de la tension de drain V_d pour le même transistor NMOS. La tension de grille V_g est 4 V et la contrainte est également parallèle à la direction du canal. Sur ces deux figures, les lignes continues représentent les résultats de simulation et les points carrés sont les résultats expérimentaux.

La figure 6-9 donne la variation relative du courant de drain $\Delta I_d/I_d$ en fonction de la tension de grille V_g pour un transistor PMOS avec $L=5$ microns,

$W=20\mu\text{m}$. Le canal du transistor PMOS est également dans la direction $\langle 110 \rangle$. La tension de drain V_d est égale à 50mV . La contrainte est appliquée dans la direction perpendiculaire au canal. La figure 6-10 présente la variation relative du courant de drain $\Delta I_d/I_d$ en fonction de la tension de drain V_d pour un autre transistor PMOS de même dimension. La tension de grille V_g est à -6V et la contrainte est également perpendiculaire à la direction du canal. De même, les lignes continues représentent les résultats de simulation et les points sont les résultats expérimentaux.

Sur ces quatre figures, il existe un bon accord entre la simulation et l'expérimentation. Dans les figures 6-7 et 6-9, nous pouvons remarquer que l'effet de variation de la bande interdite devient important en régime de faible inversion. Le décalage entre la simulation et les points expérimentaux dans la figure 6-9 peut s'expliquer par la différence entre les tensions de seuil simulée et expérimentale.

Dans la figure 6-8, la courbe $\Delta I_d/I_d=f(V_g)$ pour un transistor PMOS reste pratiquement constante. Ceci est dû à l'absence de l'effet du champ électrique latéral dans le modèle de la piézorésistivité pour les transistors PMOS.

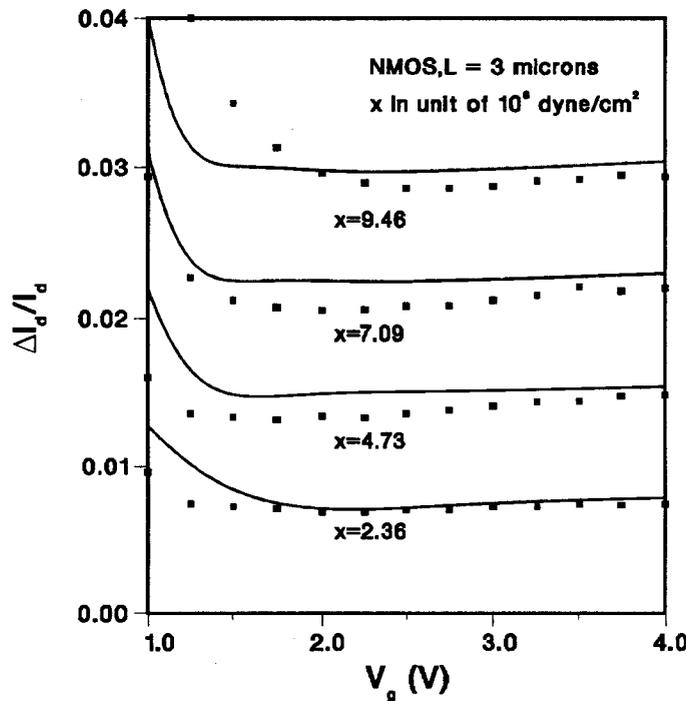


Fig. 6-7: L'évolution de $\Delta I_d/I_d-V_g$ pour un transistor NMOS avec $L=3\mu\text{m}$, $W=25\mu\text{m}$. la tension de drain V_d égale à 25mV . Les lignes continues correspondent à la simulation et les points à la mesure. La direction de la contrainte X est parallèle au canal.

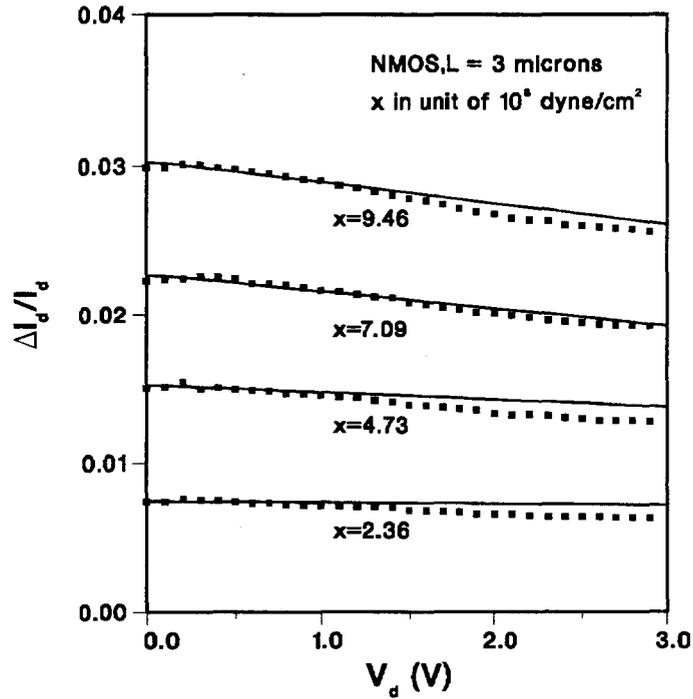


Fig. 6-8: L'évolution de $\Delta I_d/I_d - V_d$ pour un transistor NMOS avec $L=3$ microns, $W=25$ microns. la tension de grille V_g égale à 4V. Lignes continues correspondent à la la simulation et les points à la mesure. La direction de la contrainte X est parallèle au canal.

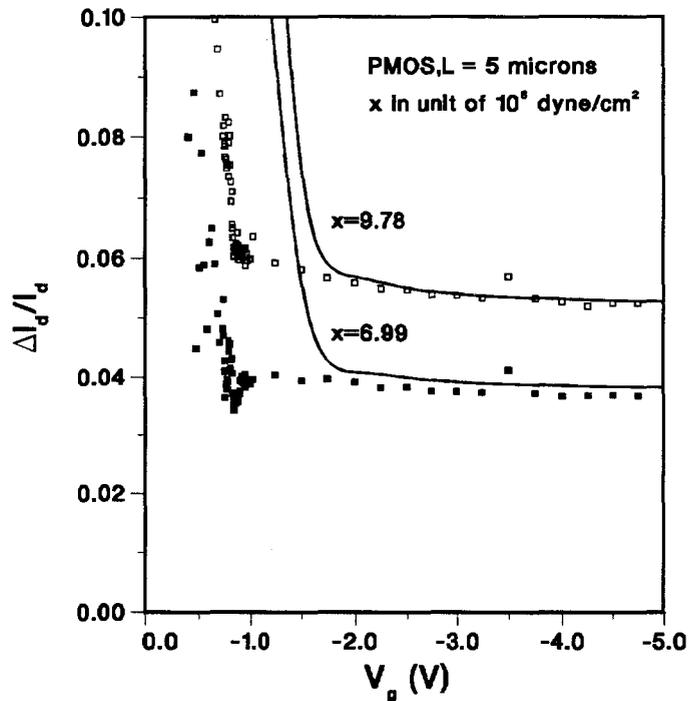


Fig. 6-9: L'évolution de $\Delta I_d/I_d - V_g$ pour un transistor PMOS avec $L=5$ microns, $W=20$ microns. la tension de drain V_d égale à 50 mV. Les lignes continues correspondent à la simulation et les points à la mesure. La direction de la contrainte X est perpendiculaire au canal.

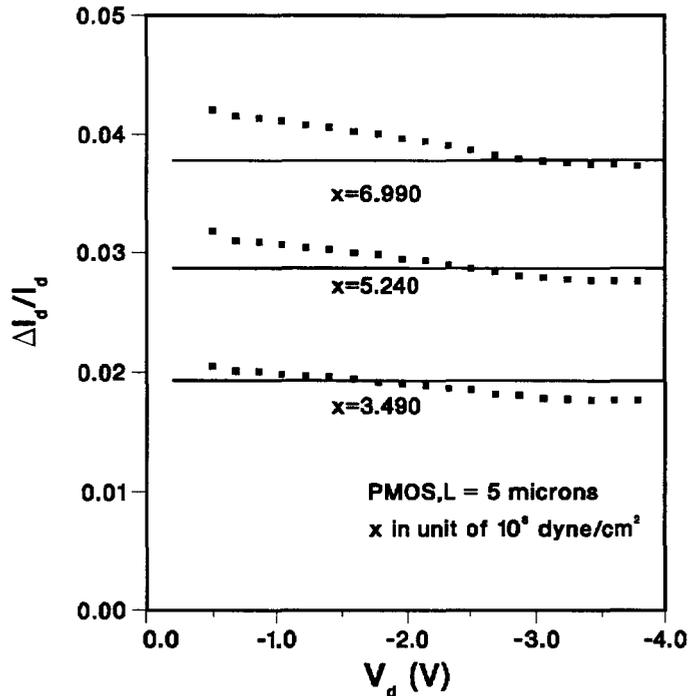


Fig. 6-10: L'évolution de $\Delta I_d/I_d$ - V_d pour un transistor PMOS avec $L=5$ microns, $W=20$ microns. la tension de grille V_d égale à -6 V. Lignes continues correspondent à la la simulation et les points à la mesure. La direction de la contrainte X est perpendiculaire au canal.

6.5. UTILISATION DE PROGRAMME:

L'effet de piézorésistivité est introduit dans le simulateur de dispositifs IMPACT3.3 qui calcule les caractéristiques électriques des transistors MOS. Une carte &PIE est créée pour simuler l'effet de piézorésistivité dans les transistors MOS. Dans la carte &PIE, sept données d'entrée sont utilisés pour spécifier la valeur de la contrainte, la direction de la contrainte, le type de transistors MOS et l'orientation du canal de transistors etc. Ils sont décrit par la suite:

PIEZ	Par défaut	: NO
	Possibilités	: NO, YES
	Spécifie si l'effet de piézorésistivité doit être inclus dans la simulation.	
ORNT	Par défaut	: 100
	Possibilités	: 100, 110
	Spécifie l'orientation du canal.	
KIND	Par défaut	: NMOS
	Possibilités	: NMOS, PMOS
	Spécifie le type de transistor MOS à simuler.	

- DRCT** Par défaut : L
Possibilités : L, T
Spécifie la direction de la contrainte uniaxiale par rapport à la longueur du canal. L: longitudinal; T: transversal.
- STRS** Par défaut : NONE
Possibilités : Toutes les valeurs positives et négatives
Spécifie la valeur de la contrainte uniaxiale appliquée en dyne/cm². Cette valeur doit être non nulle.
- NAME** Par défaut : NONE
Possibilités : Chaîne de 8 caractères au maximum
Spécifie le nom du fichier où seront stockés les résultats de simulation de même type sans contrainte.
- TYPE** Par défaut : NONE
Possibilités : Chaîne de 8 caractères au maximum
Spécifie le type du fichier où seront stockés les résultats de simulation de même type sans contrainte.

Deux fichiers de données pour les simulations Id-Vg et Id-Vd d'un transistor NMOS à l'état sans contrainte sont donnés comme exemples. Dans ces deux fichiers, la carte de &PIE n'est pas nécessaire à écrire.

```

*-----*
*                ES2 NMOS                *
* 2D DEVICE SIMULATION SANS CONTRAINTE *
*                ID / VG CHARACTERISTIC  *
*-----*

*----- DEVICE DESCRIPTION-----*
&SIM LEVL=5 , NAME=ES2NMOS , TYPE=DEV &END
&MOS TYPE=NMOS , WIDT=25. , LCSO=0.50 ,
LRSO=0.50 , LGAT=3.00 ,
LRDR=0.50 , Lcdr=0.50 &END
&GAT TYPE=NPOLY , TGAT=0.35 &END
&FIX NSS=1.E+10 &END
&MSH DX=0.0150 , RX=1.8, DY=0.010, RY=1.2 &END

*----- ID / VG CHARACTERISTIC-----*
&BIA TYPE=IDVG , VG0=0.0 , VD0=0.025 , VB0=0.0 ,
VG=4.0 , VD=0.025 , VB=0.0 ,
DVG=0.25 , DVD=0.5 , DVB=0.0 ,
VS=0.0 &END

*-----PIEZORESISTIVE CARTE-----*
&PIE PIEZ=NO , ORNT=110 , KIND=NMOS, DRCT=L, STRS=2.36E+8,
NAME=NMOSDG0, TYPE=RLI &END

*----- OUTPUT RESULTS-----*
&RES NPV=NO , JELE=NO , JHOL=NO , EFI=NO ,
MOB=NO , G-R=NO &END
&GRP PSI=YES,ELE=YES,HOL=YES,DOP=YES,
VG=4.00,VD=0.025,VB=0.00 &END
&END

```

```
*-----*
*                ES2 NMOS                *
* 2D DEVICE SIMULATION SANS CONTRAINTE *
*                ID / VD CHARACTERISTIC   *
*-----*
```

```
*----- DEVICE DESCRIPTION-----*
&SIM LEVL=5 , IMP2=YES , NAME=ES2NMOS , TYPE=DEV &END
&MOS TYPE=NMOS , WIDT=25. , LCSO=0.50 ,
LRSO=0.50 , LGAT=3.00 ,
LRDR=0.50 , Lcdr=0.50 &END
&GAT TYPE=NPOLY , QSS=2.E+10 , TGAT=0.35 &END
&MSH DX=0.0150 , RX=1.80 &END
```

```
*----- ID / VG CHARACTERISTIC-----*
&BIA TYPE=IDVD , VG0=0.5 , VD0=0.0 , VB0=0.0 ,
VG=4.0 , VD=3.0 , VB=0.0 ,
DVG=0.5 , DVD=0.1 , DVB=0.0 ,
VS=0.0 &END
```

```
*----- PIEZORESISTIVE CARD-----*
&PIE PIEZ=NO , KIND=NMOS , DRCT=L , ORNT=110 , STRS=7.09E+8 ,
NAME=NMOSDD0 , TYPE=RLI &END
```

```
*----- OUTPUT RESULTS-----*
&RES NPV=NO , JELE=NO , JHOL=NO , EFI=NO ,
MOB=NO , G-R=NO &END
&GRP PSI=YES,ELE=YES,HOL=YES,DOP=YES,VG=4.00,VD=3.00,
VB=0.00 &END
&END
```

Les simulations avec la prise en compte de la piézorésistivité sont données dans les deux fichiers suivants où NOSDG0.RLI et MOSDD0.RLI sont les noms des fichiers de simulation correspondante à l'état sans contrainte.

```
*-----*
*                ES2 NMOS                *
* 2D DEVICE SIMULATION AVEC CONTRAINTE *
*                ID / VG CHARACTERISTIC   *
*-----*

*----- DEVICE DESCRIPTION-----*
&SIM LEVL=5 , NAME=ES2NMOS , TYPE=DEV &END
&MOS TYPE=NMOS , WIDT=25. , LCSO=0.50 ,
LRSO=0.50 , LGAT=3.00 ,
LRDR=0.50 , Lcdr=0.50 &END
&GAT TYPE=NPOLY , TGAT=0.35 &END
&FIX NSS=1.E+10 &END
&MSH DX=0.0150 , RX=1.8, DY=0.010, RY=1.2 &END

*----- ID / VG CHARACTERISTIC-----*
&BIA TYPE=IDVG , VG0=0.0 , VD0=0.025 , VB0=0.0 ,
VG=4.0 , VD=0.025 , VB=0.0 ,
DVG=0.25 , DVD=0.5 , DVB=0.0 ,
VS=0.0 &END

*-----PIEZORESISTIVE CARTE-----*
&PIE PIEZ=YES, ORNT=110 , KIND=NMOS, DRCT=L, STRS=2.36E+8,
NAME=NMOSDG0, TYPE=RLI &END

*----- OUTPUT RESULTS-----*
&RES NPV=NO , JELE=NO , JHOL=NO , EFI=NO ,
MOB=NO , G-R=NO &END
&GRP PSI=YES,ELE=YES,HOL=YES,DOP=YES,
VG=4.00,VD=0.025,VB=0.00 &END
&END
```

```
*-----*
*                ES2 NMOS                *
* 2D DEVICE SIMULATIO AVEC CONTRAINTE *
*                ID / VD CHARACTERISTIC  *
*-----*
```

```
*----- DEVICE DESCRIPTION-----*
&SIM LEVL=5 , IMP2=YES , NAME=ES2NMOS , TYPE=DEV &END
&MOS TYPE=NMOS , WIDT=25. , LCSO=0.50 ,
LRSO=0.50 , LGAT=3.00 ,
LRDR=0.50 , LCDR=0.50 &END
&GAT TYPE=NPOLY , QSS=2.E+10 , TGAT=0.35 &END
&MSH DX=0.0150 , RX=1.80 &END
```

```
*----- ID / VG CHARACTERISTIC-----*
&BIA TYPE=IDVD , VG0=0.5 , VD0=0.0 , VB0=0.0 ,
VG=4.0 , VD=3.0 , VB=0.0 ,
DVG=0.5 , DVD=0.1 , DVB=0.0 ,
VS=0.0 &END
```

```
*----- PIEZORESISTIVE CARD-----*
&PIE PIEZ=YES , KIND=NMOS , DRCT=L , ORNT=110 , STRS=7.09E+8 ,
NAME=NMOSDD0 , TYPE=RLI &END
```

```
*----- OUTPUT RESULTS-----*
&RES NPV=NO , JELE=NO , JHOL=NO , EFI=NO ,
MOB=NO , G-R=NO &END
&GRP PSI=YES,ELE=YES,HOL=YES,DOP=YES,VG=4.00,VD=3.00,
VB=0.00 &END
&END
```

Un fichier de sortie pour une simulation de la piézorésistivité de transistors MOS est donné au dessous. Il rappelle les conditions nécessaires de la simulation de piézorésistivité et la variation relative du courant de drain en fonction de la tension de grille. Le fichier porte le même nom que celui de fichier de données et le type comme PIE.

```
*****
*           PIEZORESISTIVE RESULTS           *
*           DID/ID IN FONCTION OF VG OR VD   *
*****
```

```
*           DID/ID--VG                       *
```

```
VD= -0.05000V    STRESS= 0.699E+09DYNE/CM2
```

0.0000000000000000479E	-78 0.201396737669742545
0.0000000000000000000E	+00 3.01135714221760531
-0.2500000000000000000	-0.149847050593439918
-0.5000000000000000000	+0.834221146203450378
-0.7500000000000000000	-0.142235385208046253
-1.0000000000000000000	-0.145226858160726155
-1.2500000000000000000	-0.897369883643671790E-01
-1.5000000000000000000	-0.510470815506176897E-01
-1.7500000000000000000	-0.441985500493266735E-01
-2.0000000000000000000	-0.417185460608378985E-01
-2.2500000000000000000	-0.405345157035221287E-01
-2.5000000000000000000	-0.398582390885310707E-01
-2.7500000000000000000	-0.394202786758164432E-01
-3.0000000000000000000	-0.391311906534612787E-01
-3.2500000000000000000	-0.389052947700395859E-01
-3.5000000000000000000	-0.387608904478739342E-01
-3.7500000000000000000	-0.386201489752614237E-01
-4.0000000000000000000	-0.385131134318675936E-01
-4.2500000000000000000	-0.384221237830076586E-01
-4.5000000000000000000	-0.383419353569731712E-01
-4.7500000000000000000	-0.382725805136446265E-01
-5.0000000000000000000	-0.382047727719477649E-01

CONCLUSIONS

Résumé

A l'aide du modèle de potentiel de déformation de Bir et Pikus, les coefficients de piézorésistivité tridimensionnelle et bidimensionnelle ont été trouvés sous forme analytique pour les électrons et les trous. Un modèle mixte de piézorésistivité 2D/3D a été introduit dans le simulateur de dispositifs IMPACT3.3. La variation de la largeur de la bande interdite joue un rôle important dans le régime de faible inversion. Un bon accord existe entre la simulation et l'expérimentation. Quelques considérations proposent une poursuite à ce travail.

CONCLUSIONS

A travers ce travail, nous avons étudié en profondeur le problème de la piézorésistance dans les semiconducteurs, en particulier dans le silicium. Presque tous les aspects de la piézorésistance des semiconducteurs sont abordés, tels que la dépendance de la température, la dépendance de la densité d'impureté, l'influence de champ électrique, etc.

Pour interpréter le phénomène de la piézorésistivité des semiconducteurs, une compréhension au niveau de la physique fondamentale est nécessaire. A l'aide de la théorie des groupes, le travail a commencé par l'étude de la formation des bandes énergétiques dans un cristal. Ensuite, nous avons investigué l'influence d'une contrainte mécanique sur la bande énergétique. L'origine de l'effet de piézorésistivité est la modification des bandes énergétiques due à l'application d'une contrainte mécanique. Dans la mesure de l'approximation de masse effective, le processus de transport des porteurs (électrons et trous) se traduit par l'expression de mobilité qui est généralement dépendante de la structure des bandes. Deux types de mécanismes sont pris en compte dans le calcul des coefficients de piézorésistivité:

- la variation du nombre total des porteurs due au changement de la largeur de la bande interdite. Cet effet est important dans le cas où les nombres d'électrons et de trous sont comparables.
- le transfert des porteurs entre les différentes vallées (électrons dans la bande de conduction) ou entre les différentes branches (trous dans la bande de valence); la variation de temps de relaxation due à la modification de la bande énergétique; et la variation de la masse effective de porteurs en fonction de la contrainte.

En ce qui concerne la piézorésistivité bidimensionnelle, par exemple, dans une couche d'inversion de transistors MOS, la quantification du mouvement des porteurs perpendiculaire à la surface est introduit afin de prendre en compte la dépendance de coefficients de piézorésistivité avec le champ électrique transversal. Les niveaux de sous-bandes sont calculés par l'approximation du puits triangulaire avec un facteur d'ajustement f . Incluant toutes ces considérations, les coefficients de piézorésistivité tridimensionnelle et bidimensionnelle, Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} , sont obtenus sous forme analytique pour les électrons et également les trous du silicium. D'ailleurs, les coefficients de piézorésistivité tridimensionnelle et bidimensionnelle sont compatibles entre eux. Ils se transforment avec le passage de certains paramètres.

Le modèle de piézorésistivité du silicium a été incorporé dans le simulateur de dispositifs IMPACT33. Deux zones sont distinguées: la zone du canal où le modèle bidimensionnel est appliqué en découpant le canal en tranche dans la direction latérale; la zone de source et de drain où le modèle tridimensionnel est utilisé. La validation de modélisation de piézorésistivité du silicium est démontré par la confrontation de résultats de calculs avec des données expérimentales. La simulation et l'expérimentation confirment la conclusion que l'effet de la variation de la bande interdite devient important dans le régime de faible inversion.

En ce qui concerne la poursuite de ce travail, plusieurs types d'applications peuvent être envisagés:

- la détermination de la piézorésistance dans une résistance en silicium avec un dopage nonuniforme.
- l'introduction du modèle de piézorésistivité dans un simulateur de circuits électriques tel que SPICE. Ceci nous permet de simuler, par exemple, un capteur de pression basé sur un oscillateur en anneau des inversseurs CMOS.
- le couplage d'un simulateur mécanique avec un simulateur électrique. Ce type de lien fournira certainement un outil performant pour la conception de capteurs de pression en silicium.
- Evaluation de l'influence des contraintes intrinsèque aux caractéristiques électriques de dispositifs submicroniques.

Enfin, il est important de souligner que nous avons gardé la même structure de bande énergétique dans le système bidimensionnel que dans le volume de silicium, c'est-à-dire que nous supposons la masse effective de porteurs indépendante du champ électriques existant dans le canal de transistors MOS. De ce fait, nous avons du prendre certaines approximations audacieuses pour optimiser le modèle de piézorésistivité, notamment en ce qui concerne le rapport de temps de relaxation de trous. Il a été déjà observé en résonance cyclotron que la masse effective des porteurs varie en fonction du champ électrique dans une couche d'inversion de type MIS [61, 62]. Bien que la dépendance de la masse effective des porteurs avec le champ électrique dans un système bidimensionnel est un problème dépassant les limites de ce travail, nous croyons que l'inclusion de cet effet dans le modèle de piézorésistivité doit nous permettre une meilleur explication de l'effet de piézorésistivité.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE:

1. G. Abstreiber, 'Engineering the future of electronics', *Phys. World*, Vol. 5 No. 3 (1992) 36-39.
2. R. Keyes, 'The effects of elastic deformation on the electrical conductivity of semiconductors', *Solid State Phys.*, Vol. 11 (1960) 149-218.
3. L. Bousse, N.F. de Rooij et P. Bergveld, 'Operation of Chemically Sensitive Field Effect Sensors as a Function of the Insulator-Electrolyte Interface', *IEEE Trans. Electron Devices*, Vol. E-30 (1983) 1263-1270.
4. K.D. Wise et N. Najafi, 'The Coming Opportunities in Microsensors Systems', *Transducers'91*, Digest of technical papers, San-Francisco (Juin 1991) 2-7.
5. N.F. de Rooij, 'Current Status and Future Trends of Silicon Microsensors', *Transducers'91*, Digest of technical papers, San-Francisco (Juin 1991) 8-13.
6. A. Hamada, T. Furusawa, N. Saito et E. Takeda, 'A new aspect of mechanical stress effects in scaled MOS devices', *IEEE Trans. Electron. Devices*, Vol. 38 No. 4 (1991) 895-900.
7. Y. Kanda, 'Piezoresistance effect of silicon', *Sensors and Actuators A*, Vol. 28 (1991) 83-91.
8. C. S. Smith, 'Piezoresistance effect in silicon and germanium', *Phys. Rev.*, Vol. 94 No. 1 (1954) 42-49.
9. G. Bir et G. Pikus, "Symmetry and strain-induced effects in semiconductors", Wiley, New York (1974).
10. G. Dorda, 'Piezoresistance in quantized conduction bands in silicon inversion layers', *J. Appl. Phys.*, Vol. 42 No. 5 (1971) 2053-2060.
11. D. Colman, R. Bate et J. Mize, 'Mobility and piezoresistance in silicon p-type inversion layers', *J. Appl. Phys.*, Vol. 39 No. 4 (1968) 1923-1931.
12. F. Stern, 'Self-consistence results for n-type Si inversion layers', *Phys. Rev. B*, Vol. 5 No. 12 (1972) 4891-4899.
13. D. Collard, B. Baccus, E. Dubois et D. Morel, 'IMPACT 1-2-3: integrated 2D process/device simulator for MOS technology', *Lecture Notes of Software Forum, NASECODE5 Conf.*, Dublin, Ireland (juillet 1989) 16-31.
14. C. S. Smith, 'Macroscopic symmetry and properties of crystals', *Solid State Phys.*, Vol. 6 (1958) 175-249.
15. J. J. Wortman et R. A. Evans, 'Young's modulus, shear modulus, and Poisson's ratio in silicon and germanium', *J. Appl. Phys.*, Vol. 36 No. 1 (1965) 153-156.

16. C. Canali, G. Ferla, B. Morten et A. Taroni, ' Piezoresistivity effects in MOS-FET useful for pressure transducers ', *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 12 (1979) 1973-1983.
17. O. N. Tufte et E. L. Stelzer, ' Piezoresistive properties of heavy doped n-type silicon ', *Phys. Rev.*, Vol. 133 No. 6A (1964) A1705-1716.
18. F. I. Morin, T. H. Geballe et C. Herrig, ' Temperature dependence of the piezoresistance of high-purity silicon and germanium ', *Phys. Rev.*, Vol. 105 No. 2 (1957) 525-539.
19. S. K. Clark et K. B. Wise, ' Pressure sensibility in anisotropically etched thin-diaphragm pressure sensors ', *IEEE Trans. Electron. Devices*, Vol. ED-26 No. 12 (1979) 1887-1979.
20. S. C. Kim et K. B. Wise, ' Temperature sensibility in silicon piezoresistive pressure transducers ', *IEEE Trans. Electron. Devices*, Vol. ED-30 No. 7 (1983) 802-810.
21. J. Neumeister, G. Schuster et W. V. Münch, ' A silicon pressure sensor using MOS ring oscillators ', *Sensors and Actuators*, Vol. 7 (1985) 167-176.
22. J. C. Slater, " Quantum theory of molecules and solids ", McGraw-Hill Book Company Inc., Vol. 1 (1963).
23. J. C. Slater, " Quantum theory of molecules and solids ", McGraw-Hill Book Company Inc., Vol. 2 (1965).
24. R. Poerschke, " Semiconductors: Group IV Elements and III_V Compounds ", Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991).
25. J. M. Luttinger, ' Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General Theory ', *Phys. Rev.*, Vol. 102 No. 4 (1956) 1030-1041.
26. H. Hasegawa, ' Theory of cyclotron resonance in strained silicon crystals ', *Phys. Rev.*, Vol. 129 No. 3 (1963) 1029-1040.
27. J. C. Hensel et G. Feher, ' Cyclotron resonance experiment in uniaxially stressed silicon: Valence band inverse mass parameters and deformation potential ', *Phys. Rev.*, Vol. 129 No. 3 (1963) 1041-1062.
28. W. Shockley et J. Bardeen, ' Energy bands and mobilities in monatomic semiconductors ', *Phys. Rev.*, Vol. 77 (1950) 407-408.
29. W. Shockley et J. Bardeen, ' Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals ', *Phys. Rev.*, Vol. 80 (1950) 72-80.
30. J. C. Hensel, H. Hasegawa et M. Nakayama, ' Cyclotron resonance in uniaxially stressed silicon: II. Nature of the covalent bond ', *Phys. Rev.*, Vol. 138 No. 1A (1965) A225-A238.
31. I. Balslev, *Phys. Rev.*, Vol. 143 (1966) 636.
32. P. Lawaetz, *Phys. Rev. B*, Vol. 4 (1971) 3460.

33. L. D. Laude , F. M. Pllak et M. Cardona, Phys. Rev. B, Vol. 3 (1971) 2623.
34. R. Buczko, ' Effect of uniaxial Stress on shallow acceptor states in silicon and germanium ', IL NUOVO CIMENTO, Vol. 9D No. 6 (1987) 669-689.
35. Landou et Lifshitz, " Statistical physics ", Pergmon Press (1976).
36. P. Kiréev, " La physique des semiconducteurs ", Traduction française Editions Mir. (1975), Chapitre 2.
37. E. Dieulesaint et D. Royer, " Ondes elastique dans les solides ", Masson (1974).
38. W. paul et G. L. Pearson, Phys. Rev., Vol. 89 (1955) 1755.
39. Y. Kanda et K. Suzuki, ' Origin of the shear piezoresistance coefficient Π_{44} of n-type silicon ', Phys. Rev. B, Vol. 43 No. 8 (1991) 6754-6756.
40. G. I. Bir, E. Normantas et G. E. Pikus, ' Galvanomagnetic effects in semiconductors with degenerate zones ', Soviet Phys. Solid State, Vol. 4 No. 5 (1962) 867-877.
41. C. Herring et E. Vogt, ' Transport and deformation potential theory for many-valley semiconductors with anisotropic scattering ', Phys. Rev., Vol. 101 No. 3 (1956) 944-961.
42. Y. Kanda, ' A graphical representation of the piezoresistance coefficients in silicon ', IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-29 No. 1 (1982) 64-70.
43. H. Mathieu, " Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", Masson, Paris (1987).
44. T. Anto, B. Fowler et F. Stern, ' Electronique properties of two-dimensional system ', Rev. of Modern Phys., Vol. 54 No. 2 (1982) 437-672.
45. F. Stern et W. Howard, ' Properties of semiconductor surface inversion layers in electric quantum limit ', Phys. Rev., Vol. 163 No. 3 (1967) 816-835.
46. B. Vinter, ' Many body effects in n-type Si inversion layers. II. Excitations to higher subbands ', Phys. Rev. B, Vol. 15 (1977) 3947-3958.
47. T. Ando, ' Density-functional calculation of sub-band structure in accumulation and inversion layers ', Phys. Rev. B, Vol. 13 (1976) 3468-3477.
48. J. Suné, P. Olivo et B. Ricc6, ' Self-consistent solution of the Poisson and Schr6dinger equations in accumulated semiconductor-insulator interfaces ', J. Appl. Phys., Vol. 70 No. 1 (1991) 337-345.
49. M. Abramowitz et I. Stegun, " Handbook of Mathematical Functions ", U. S. GPO, Washington D. C. (1964).
50. F. Fang et W. Howard, ' Negative field-effect mobility on (100) Si surfaces ', Phys. Rev. Lett., Vol. 16 (1966) 797-799.

51. K. Von Klitzing, G. Landwelu et G. Dorda, ' Shubikov- de Haas oscillations in p-type inversion layers on p-type silicon ', Solid State Commun., Vol. 14 (1974) 387-393.
52. K. Von Klitzing, G. Landwelu et G. Dorda, ' Quantum oscillation of (111) and (100) silicon field effect transistors ', Solid State Commun., Vol. 15 (1974) 489-493.
53. A. Lakhani, D. Stiles et Y. Cheng, ' Oscillatory magnetoconductance of p-type inversion layers in Si surfaces ', Phys. Rev. Lett., Vol. 32 (1974) 1003-1006.
54. Y. Hemura, ' Theoretical consideration on quantization for carriers in MOS structures ', Surf. Sci., Vol. 58 (1976) 1-16.
55. E. Bangert et G. Landwehr, ' Self-consistent calculations of electric subbands in p-type silicon inversion layers ', Surf. Sci., Vol. 58 (1976) 138-140. S. Kawajj, ' The two-dimensional lattice scattering mobility in a semiconductor inversion layer ', J. Phys. Society of Japan, Vol. 27 No. 4 (1969) 906-908.
56. S. Kawajj, ' The two-dimensional lattice scattering mobility in a semiconductor inversion layer ', J. Phys. Society of Japan, Vol. 27 No. 4 (1969) 906-908.
57. H. Mikoshiba, ' Stress-sensitive properties of silicon-gate MOS devices ', Solid State Elec., Vol. 24 (1981) 221-231.
58. G. Dorda, H. Friedrich et E. Preuss, ' Band structure investigation on p-type silicon inversion layers by piezoresistance and mobility measurements ', J. Vac. Sci. Technol., Vol. 9 (1972) 759-761.
59. K. Yamaguchi, ' A mobility model for carriers in the MOS inversion layers ', IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-30 (1983) 658-663.
60. B. Borchert et G. Dorda, ' Hot electron effects on short channel MOSFET's determined by the piezoresistance effect ', IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. ED-3 (1988) 483-488.
61. G. Dorda, ' Effective masse change od electrons in silicon inversion layers observed by piezoresistance ', Appl. Phys. Letters, Vol. 17 No. 9 (1970) 406-408.
62. G. Landwehr, E. Bangert, K. von Klitzing, Th. Englet et G. Dorda, ' Comments on the hole mass in silicon inversion layers ', Solid State Commun., Vol. 19 (1976) 1031-1035.
63. L. I. Schiff, ' Quantum Mechanics ', Deuxième édition, McGraw-Hill Book Company Inc. (1955).

