Modélisation de la capacité MOS

II.1. Introduction

Ce chapitre est dédié aux codes de simulation développés, lors de ce travail de thèse, pour décrire le fonctionnement de la capacité MOS en présence de phénomènes liés aux variations des paramètres clefs de la capacité. Nous étudierons successivement la diminution du dopage de grille, les variations du dopage de substrat, la variation de l'épaisseur de l'oxyde de grille et les variations latérale et verticale des charges fixes dans l'oxyde.

II.2. La poly-désertion de la grille

Le phénomène de poly-désertion (ou poly-déplétion) de la grille, défini au chapitre I, induit une déformation des courbes C-V ce qui conduit à une extraction imprécise de l'épaisseur de l'oxyde. Or cette épaisseur est un des paramètres clefs de la structure MOS. Dans ce paragraphe, nous présentons la méthode que nous avons développée pour déterminer, à V_{GB} donnée, les deux potentiels de surface (Ψ_{s}) et (Ψ_{sG}) (respectivement pour le substrat et pour la grille), afin de tracer la caractéristique C-V d'une capacité présentant une désertion du poly-silicium de grille.

II.2.1. Détermination des potentiels de surface

Prenons une capacité MOS dont le substrat est de type P et la grille en poly-silicium de type N⁺ non dégénéré. Les équations (I.6) et (I.24) (cf. pages 17 et 21 respectivement) montrent que la détermination des potentiels de surface (c.a.d. Ψ_S et Ψ_{SG}), à partir du potentiel de grille V_{GB} ne peut être obtenue de façon analytique. Afin de résoudre simplement et simultanément ces équations, nous nous sommes basés sur la méthode numérique de Newton et Raphson en remarquant que l'équation (I.24) est une fonction monotone et dérivable par rapport à Ψ_S et Ψ_{SG} .

Considérons les fonctions $h(V_{GB}, \Psi_S, \Psi_{SG})$ et $h_G(V_{GB}, \Psi_S, \Psi_{SG})$ et leurs dérivées respectives $h'(\Psi_S)$ et $h_G'(\Psi_{SG})$ définies à partir des équations suivantes :

$$h(V_{GB}, \Psi_{S}, \Psi_{SG}) = V_{FB} - V_{GB} + \Psi_{S} - \Psi_{SG}$$

$$\frac{\pm \sqrt{2 k T \varepsilon_{0} \varepsilon_{SC} M_{0S}}}{Cox} \left[\frac{m_{0S}}{M_{0S}} (exp(t_{s}\beta\Psi_{S}) - t_{s}\beta\Psi_{S} - 1) - 1 + exp(-t_{s}\beta\Psi_{S}) + t_{s}\beta\Psi_{S} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (II.1)$$

+ si $\Psi_{\rm S}$ < 0 et - si $\Psi_{\rm S}$ > 0

$$h_{G}(V_{GB}, \Psi_{S}, \Psi_{SG}) = V_{FB} - V_{GB} + \Psi_{S} - \Psi_{SG}$$

$$\frac{\mp \sqrt{2 k T \epsilon_{0} \epsilon_{SC} M_{0G}}}{Cox} \left[\frac{m_{0G}}{M_{0G}} (exp(t_{G}\beta\Psi_{SG}) - t_{G}\beta\Psi_{SG} - 1) - 1 + exp(-t_{G}\beta\Psi_{SG}) + t_{G}\beta\Psi_{SG} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(II.2)

+ $si \Psi_{SG} < 0 et - si \Psi_{SG} > 0$

$$h'(\Psi_{\rm S}) = \frac{\partial h(V_{\rm GB}, \Psi_{\rm S}, \Psi_{\rm SG})}{\partial \Psi_{\rm S}}$$
$$= 1 \pm \frac{1}{2C_{\rm ox}} \frac{\sqrt{2 \, k \, T \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm SC} M_{0\rm S}} \left[\frac{m_{0\rm S}}{M_{0\rm S}} (t_{\rm s} \beta \exp(t_{\rm s} \beta \Psi_{\rm S}) - t_{\rm S} \beta) - t_{\rm S} \beta \exp(-t_{\rm S} \beta \Psi_{\rm S}) + t_{\rm S} \beta}{\left[\frac{m_{0\rm S}}{M_{0\rm S}} (\exp(t_{\rm S} \beta \Psi_{\rm S}) - t_{\rm S} \beta \Psi_{\rm S} - 1) - 1 + \exp(-t_{\rm S} \beta \Psi_{\rm S}) + t_{\rm S} \beta \Psi_{\rm S}} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(II.3)

$$h_{G}'(\Psi_{SG}) = \frac{\partial h_{G}(V_{GB}, \Psi_{S}, \Psi_{SG})}{\partial \Psi_{SG}}$$

$$= 1 \mp \frac{1}{2C_{ox}} \frac{\sqrt{2 k T \varepsilon_{0} \varepsilon_{SC} M_{0G}} \left[\frac{m_{0G}}{M_{0G}} (t_{G} \beta exp(t_{G} \beta \Psi_{SG}) - t_{G} \beta) - t_{G} \beta exp(-t_{G} \beta \Psi_{SG}) + t_{G} \beta \right]}{\left[\frac{m_{0G}}{M_{0G}} (exp(t_{G} \beta \Psi_{SG}) - t_{G} \beta \Psi_{SG} - 1) - 1 + exp(-t_{G} \beta \Psi_{SG}) + t_{G} \beta \Psi_{SG} \right]^{\frac{1}{2}}}$$
(II.4)

où M_{0S} , m_{0S} , M_{0G} , et m_{0G} , sont les densités de porteurs majoritaires et minoritaires du substrat et de la grille respectivement. ts est un coefficient égal à (- 1) pour un substrat de type N et à (+1) pour un substrat de type P. De même, t_G est un coefficient égal à (- 1) pour une grille de type N⁺ et (+1) pour une grille de type P⁺.

Pour une tension V_{GB} donnée, les potentiels de surface Ψ_S et Ψ_{SG} sont obtenus lorsque les fonctions h et h_G sont nulles simultanément. On impose une valeur initiale pour les potentiels de surface Ψ_S et Ψ_{SG} (égale à Φ_F par exemple) que l'on note Ψ_{S0} et Ψ_{SG0} . Supposons que ces valeurs soient les solutions des l'équations (II.1) et (II.2), on obtient par conséquent : $h(V_{GB}, \Psi_{S0}, \Psi_{SG0}) = 0$ et $h_G(V_{GB}, \Psi_{S0}, \Psi_{SG0}) = 0$.

Considérons une valeur Ψ_{S1} proche de Ψ_{S0} et développons h(V_{GB}, Ψ_{S0} , Ψ_{SG0}) en série de Taylor autour de Ψ_{S1} et Ψ_{SG1} :

$$h(V_{GB}, \Psi_{S0}, \Psi_{SG0}) = h(V_{GB}, \Psi_{S1}, \Psi_{SG0}) - (\Psi_{S0} - \Psi_{S1})h'(\Psi_{S1}) + \frac{(\Psi_{S0} - \Psi_{S1})^2}{2!}h''(\Psi_{S1}) + \dots \quad (II.5)$$

En utilisant le fait que $h(V_{GB}, \Psi_{SO}, \Psi_{SGO}) = 0$, on peut exprimer Ψ_{SO} :

Chapitre II. Modélisation de la capacité MOS

$$\Psi_{S1} = \Psi_{S0} - \frac{h(V_{GB}, \Psi_{S1}, \Psi_{SG0})}{h'(\Psi_{S1})} + \frac{(\Psi_{S0} - \Psi_{S1})2}{2!} \frac{h''(\Psi_{S1})}{h'(\Psi_{S1})} + \dots$$
(II.6)

Si Ψ_{S1} est suffisamment proche de Ψ_{S0} , les termes d'ordre supérieur, au premier ordre, seront petits. En les négligeant, on obtient ainsi une seconde valeur approchée pour Ψ_{S0} , plus proche de Ψ_{S0} que Ψ_{S1} , donnée par:

$$\Psi_{S2} = \Psi_{S1} - \frac{h(V_{GB}, \Psi_{S1}, \Psi_{SG0})}{h'(\Psi_{S1})}$$
(II.7)

En suivant le même raisonnement que précédemment, le développement de $h_G(V_{GB}, \Psi_{S2}, \Psi_{SG0})$ en série de Taylor autour de Ψ_{SG1} conduit à une valeur approché Ψ_{SG2} , plus proche de Ψ_{SG0} que Ψ_{SG1} :

$$\Psi_{GS2} = \Psi_{SG1} - \frac{h_G(V_{GB}, \Psi_{S2}, \Psi_{SG1})}{h_G'(\Psi_{SG1})}$$
(II.8)

En gardant les dernières valeurs des potentiels de surface déterminées et en répétant la même démarche à chaque itération, i, les valeurs Ψ_{Si} et Ψ_{SGi} se rapprochent de la solution exacte de Ψ_{S0} et Ψ_{SG0} (cf. Fig. II.1).



Figure II.1. Algorithme de résolution des potentiels de surface Ψs et Ψsg.

En pratique, après n itérations, il suffit que $h(V_{GB}, \Psi_{Sn}, \Psi_{SGn}) \leq \varepsilon$, avec ε suffisamment petit, pour poser $\Psi_{S0} \approx \Psi_{Sn}$ et $\Psi_{SG0} \approx \Psi_{SGn}$ avec une précision voulue (par exemple 10^{-11}). Si la valeur Ψ_{S1} est bien choisie, (c.a.d. suffisamment proche de Ψ_{S0}), cette méthode présente l'avantage de converger rapidement vers la solution Ψ_{S0} : le nombre n d'itérations nécessaires est alors relativement faible. Ainsi, cette méthode peut être plus rapide que la méthode de dichotomie pour laquelle l'intervalle de recherche est fixé, empêchant l'optimisation du temps de calcul.

II.2.2. Tracé des potentiels de surface et des charges

A l'aide de l'algorithme décrit au paragraphe précédemment, les valeurs des potentiels de surface peuvent être déterminées pour différentes valeurs de V_{GB}. Dans ce chapitre, nous considérerons que le semiconducteur ne peut jamais être en régime de désertion profonde mais que cela est possible pour le poly-silicium. Dans ce cas l'expression de la charge de la grille (que l'on notera Q_{DG}) se simplifie pour devenir :

$$Q_{DG} = \pm \sqrt{2kT\epsilon_{sinG0}} \left[exp(\beta \Psi_{SG}) - \left(1 - \frac{p_{G0}}{n_{G0}}\right)\beta \Psi_{SG} - 1 \right]^{\frac{1}{2}}$$
(II.9)

avec un signe – pour $\Psi_G > 0$ et un signe + pour $\Psi_G < 0$.

II.2.2.1. Prise en compte de la couche d'inversion de la grille

La figure (II.2.a) présente l'évolution des potentiels de surface du semiconducteur et de grille en fonction de la tension de grille et du dopage du poly-silicium. Notons, que pour un dopage N_G supérieur à 10^{28} m⁻³ (soit un facteur 10^5 par rapport au dopage du substrat), nous pouvons considérer la grille comme un quasi métal (pour la structure considérée), c'est-à-dire que la valeur de Ψ_{SG} reste toujours négligeable devant celles des autres potentiels (voir le point A sur la figure (II.2.a)). Nous constatons également que pour N_G supérieur à 10^{26} m⁻³, l'évolution de Ψ_{S} en régime d'inversion faible et forte semble uniquement se décaler, alors que pour N_G inférieur à 10^{28} m⁻³, elle semble changer de pente. La courbe $\Psi_{SG}(V_{GB})$ est par contre modifiée en régime d'inversion forte dès que N_G est inférieur à 10^{27} m⁻³ (voir le point B sur la figure (II.2.a)).

La figure (II.2.b) donne l'évolution de la charge du semiconducteur (qui est égale à l'opposée de la charge de grille), en fonction de la tension et du dopage de la grille. Pour un rapport (N_G/N_A) supérieur à 100, nous constatons un simple décalage de la courbe Q_{SC} (V_{GB}) alors que pour un rapport (N_G/N_A) inférieur à 100 la forme de cette courbe est modifiée en inversion forte. Le déplacement du minimum de la charge Q_{SC} résulte de la dépendance de la tension de bandes plates de la structure avec le dopage N_G:

$$V_{FB} = \Phi_{FG} - \Phi_{F} = -\frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_{G}}{n_{i}}\right) - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_{sub}}{n_{i}}\right)$$
(II.10)

La figure (II.2.c) présente l'évolution de la charge d'inversion du semiconducteur en mettant en évidence le régime d'inversion faible (échelle logarithmique). Comme nous l'avons déjà constaté pour la courbe $\Psi_{S}(V_{GB})$, en raison de la faible valeur de Ψ_{SG} par rapport à celle de Ψ_{S} , l'évolution de Q_n n'est décalée que pour N_G supérieur 10^{25} m⁻³. Par contre, la pente de $Q_n(V_{GB})$ diminue pour N_G inférieur 10^{25} m⁻³. L'évolution de la charge Q_n en régime d'inversion forte (échelle linéaire) est donnée à la figure (II.2.d). A partir de N_G = 10^{26} m⁻³, la courbe $Q_n(V_{GB})$ présente une pente plus faible jusqu'à faire apparaître une double pente due au passage en inversion forte du poly-silicium (voir les points C sur la figure (II.2.d)).



Figure II.2. Evolutions des potentiels de surface en fonction du potentiel de grille et du dopage du poly-silicium (**a**). Variations de la charge totale du semiconducteur (**b**) et de la charge d'inversion du semiconducteur en échelle linéaire (**c**) et logarithmique (**d**). Les paramètres de la capacité MOS sont : $t_{ox} = 7 \text{ nm}$, $N_A = 2 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$, $V_{FB} \in [-1, -1.2 \text{ V}]$.

II.2.2.1. Désertion profonde du poly-silicium

Comme le montre la figure (II.3), la double pente de la courbe $Q_n(V_{GB})$ (cf. courbe (II.2.d)) disparaît si l'on considère que la couche d'inversion du poly-silicium de grille ne peut jamais être présente (c.a.d. présence du phénomène de désertion profonde de la grille). De plus, la courbe d'évolution de Q_n n'est pas linéaire comme cela est supposé être le cas lorsque le dopage de grille est très important. Cependant cette quasi linéarité apparaît sur la deuxième pente de Q_n lorsque le poly-silicium est en régime d'inversion forte.



Figure II.3. Evolutions de la charge d'inversion (**a**) et des potentiels de surface (**b**) si l'on considère ou non la désertion profonde du poly-silicium. Les paramètres de la capacité $MOS \text{ sont} : t_{ox} = 7 \text{ nm}, N_A = 2 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}, N_G = 1 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}, V_{FB} = -1.2 \text{ V}.$

II.2.3. Courbes C-V d'une capacité MOS avec poly-désertion

II.2.3.1. Prise en compte de la couche d'inversion du poly-silicium

La figure (II.4.a) montre l'évolution de la courbe C-V en fonction du dopage de grille (V_{FB} est fixée à -1 V quel que soit le dopage). On observe une forte diminution de la capacité en régime d'inversion forte du substrat lorsque V_{GB} augmente. La présence d'une telle variation permet la détection du phénomène de désertion de grille. Pour cette simulation, la grille reste dans les régimes d'accumulation et de désertion. Nous pouvons aussi observer, sur cette figure, un abaissement de la courbe en régime accumulation du substrat qui peut conduire à une sur-estimation de l'épaisseur d'isolant [Huang'93]. Pour des dopages de grille plus faibles (cf. Fig. (II.4.b)), le passage en régime d'inversion forte de la capacité de la capa

de la structure (après la diminution de cette dernière) en régime d'inversion forte du substrat [Schuegraf'93].



Figure II.4. Evolution de la courbe C-V en BF pour de "fortes" (**a**) et de "faibles" (**b**) valeurs du dopage de grille. Les paramètres de la simulation sont : $N_A = 2 \times 10^{23} m^{-3}$, $t_{ox} = 7 nm$, $V_{FB} = -1 V$.

Afin de tracer les courbes de la figure (II.4), nous avons supposé que la couche d'inversion de la grille pouvait suivre les variations du signal de grille (petit signal sinusoïdal utilisé pour les mesures) mais nous pouvons aussi considérer que la formation de cette couche (génération thermique des porteurs) est dominée par une constante de temps τ . La capacité de la structure, C_{inv}, est alors calculée en considérant que la couche d'inversion apparaît au bout d'un temps τ :

$$C_{inv} = \frac{1}{\frac{1}{C_{SC}} + \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{\frac{C_{G_{inv}}}{\sqrt{1 + (2\pi f\tau)^2}}}}$$
(II.11)

où f correspond à la fréquence du signal de grille et τ à la constante de temps de formation de la couche d'inversion.

La figure (II.5) montre l'influence de la fréquence du signal de grille sur l'amplitude de la courbe C-V en régime d'inversion forte (de la grille). A haute fréquence (HF), la capacité ne redevient pas égale à C_{ox} à fort V_{GB}.



Figure II.5. Evolution de la courbe C-V des basses fréquences (BF) aux fortes fréquences (HF). Les paramètres de la simulation sont : $N_A = 2 \times 10^{23} m^{-3}$, $N_G = 5 \times 10^{24} m^{-3}$, $t_{ox} = 7 nm$, $V_{FB} = -1 V$.

II.2.3.2. Désertion profonde du poly-silicium

Nous pouvons aussi considérer le cas où la couche d'inversion de la grille ne peut pas se former : la grille est alors en régime de désertion profonde ce qui signifie que sa zone de charge d'espace continue à s'étendre avec le potentiel de grille et que le potentiel de surface continue à croître (c.a.d. qu'il ne sature pas à environ $2 \times \Phi_{Fg}$). Dans ce cas, comme le montre la figure (II.6), la capacité de la structure continue à chuter lorsque V_{GB} augmente.



Figure II.6. Courbes C-V en BF, HF et en désertion profonde. Les paramètres de la simulation sont : $N_A = 2 \times 10^{23} m^{-3}, N_G = 5 \times 10^{25} m^{-3},$ $t_{ox} = 7 nm \text{ et } V_{FB} = -1V.$

II.2.4. Détermination des dopages à partir de la courbe C-V

A partir des caractéristiques C-V, il est possible d'extraire le dopage du substrat (N_{Sub}) et celui de la grille (N_G). Dans ce qui suit, les capacités seront données par unité de surface. Les parties de la courbe C-V qui ne dépendent que du dopage du substrat ou du dopage de grille correspondent au régime de désertion et au régime d'inversion faible du substrat ou de la grille (c.a.d. quand Qsc ou QG correspondent à la charge d'une zone désertée).

Prenons le cas du substrat : en régime de désertion ou de faible inversion du substrat, la longueur de la région de désertion, x_d , est donnée par l'équation :

$$x_{d} = -t_{s} \sqrt{\frac{2\varepsilon_{0}\varepsilon_{SC}}{qN_{sub}}\Psi_{S}}$$
(II.12)

La charge du semiconducteur peut être ré-écrite simplement :

$$Q_{SC} = -(-t_s)qN_{sub}x_d = -(-t_s)\sqrt{2qN_{sub}\varepsilon_0\varepsilon_{SC}\Psi_S}$$
(II.13)

A partir des équations (I.16) et (I.17), l'équation aux potentiels s'écrit :

$$V_{GB} - V_{FB} = \frac{qN_{sub} x_d}{C_{ox}} + \frac{qN_{sub}}{2\varepsilon_{SC}} x_d^2$$
(II.14)

Or

$$C_{SC} = \left| \frac{dQ_{SC}}{d\psi_S} \right| = \sqrt{\frac{qN_{sub}\varepsilon_{Si}}{2\psi_S}}$$
(II.15)

Des équations (II.12), (II.15) nous déduisons :

 $C_{SC} = \varepsilon_{Si} x_d^{-1}$ (II. 16)

En remplaçant x_d dans l'équation (I.18) (cf. page 19) par :

$$x_{d} = \frac{\varepsilon_{SC}\varepsilon_{0}}{C_{SC}}$$
(II.17)

on obtient :

$$\left(\frac{1}{C_{SC}}\right)^{2} + \frac{2}{C_{ox}C_{SC}} - \frac{2}{qN_{sub}\varepsilon_{SC}\varepsilon_{0}} \left(V_{GB} - V_{FB}\right) = 0$$
 (II. 18)

Cette expression est de la forme : $X^{\scriptscriptstyle 2}$ + bX + c = 0 avec X = 1/C_{\rm SC} et a pour solution physique :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} \left(\sqrt{1 + \frac{2C_{ox}^2 (V_{GB} - V_{FB})}{\varepsilon_{sc} q N_{sub}}} \right)$$
(II.19)

Dans cette expression, les capacités étant exprimées par unité de surface, pour retrouver la valeur de la capacité, il faut ré-introduire la surface A_{eff}:

$$\left(\frac{A_{eff}}{C}\right)^2 = \left(\frac{A_{eff}}{C_{ox}}\right)^2 + \frac{2}{q\epsilon_0 \epsilon_{SC} Nsub} \left(V_{GB} - V_{FB}\right)$$
(II.20)

Par conséquent, il n'est pas nécessaire de connaître la valeur de la capacité de l'oxyde (ni celle de son épaisseur) pour déterminer N_{sub} .

Par un raisonnement similaire appliqué au poly-silicium de grille, on peut écrire :

$$\left(\frac{A_{eff}}{C}\right)^2 = \left(\frac{A_{eff}}{C_{ox}}\right)^2 + \frac{2}{q\epsilon_0\epsilon_{SC}N_G}(V_{GB} - V_{FB})$$
(II.21)

Ainsi le tracé de $(A_{eff}/C)^2 = f(V_{GB})$ permet d'extraire à la fois les dopages N_{sub} et N_G de la capacité suivant la portion de la courbe C-V sélectionnée.

II.2.4.1. Exemple : cas d'une capacité MOS

Considérons la mesure C-V d'une capacité MOS représentée par des ronds sur la figure (II.7.a). Le dopage de substrat, N_{sub} est alors extrait à partir de la pente de la droite déterminée en choisissant deux points dans la zone de désertion du substrat sur le graphe (A_{eff}/C)² = f(V_{GB}) (cf. Fig. (II.7.b)). De plus, connaissant le paramètre C_{ox}, l'ordonnée à l'origine permet d'extraire la tension de bandes plates.

$$N_{sub} = \frac{2}{q \varepsilon_{SC} \varepsilon_0 \text{ pentel}}$$
(II.22)

$$V_{FB} = \left[\left(\frac{A_{eff}}{C_{ox}} \right)^2 - b \right] \left(\frac{q \varepsilon_{sc} \varepsilon_0 N_{sub}}{2} \right)$$
(II.23)

où b représente l'ordonnée à l'origine du tracé de $(A_{eff}/C)^2 = f(V_{GB})$

Notons, que dans ce cas, les charges d'interface Qit, ont été négligées, ce qui permet l'obtention d'une droite. Si ces charges ne sont plus négligeables, la droite de pente « pente 1 » aura tendance à se courber légèrement et l'équation donnant la capacité devra être remplacée par l'expression :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{Cox} + \frac{1}{CD + Cit}$$
(II.24)

De la même manière, en choisissant les deux points dans la zone correspondant au régime de désertion de la grille (forte valeur de V_{GB} sur le graphe (A_{eff}/C)² = f(V_{GB})), le dopage de la grille, N_G, sera déterminé à partir de la pente de la droite (cf. pente 2 sur la figure (II.7.b)) :

$$N_{G} = \frac{2}{q \varepsilon_{SC} \varepsilon_{0} \text{ pente2}}$$
(II.25)



Figure II.7. Comparaison, pour une capacité MOS avec poly-désertion de grille, d'une courbe C-V mesurée et d'une courbe C-V simulée (**a**). Extraction du dopage de substrat N_{sub} et du dopage de grille N_G à partir du tracé de $1/C^2$ en fonction de V_{GB} (**b**). Les paramètres de la capacité mesurée sont : $t_{ox} = 11$ nm, $V_{FB} = -1V$, $W \times L = 30000 \ \mu m^2$. Les dopages extraits sont : $N_{sub} = 2 \times 10^{23} \ m^{-3}$ et $N_G = 1 \times 10^{26} \ m^{-3}$.

II.2.4.2. Exemple : cas d'une capacité SOS

Lorsque la grille et le substrat sont des semiconducteurs dont les dopages sont du même ordre de grandeur, la courbe C-V de la capacité SOS (Semiconducteur-Oxide-Semiconducteur) prend la forme d'une cloche (cf. Fig. (II.8.a)).



Figure II.8. Comparaison pour une capacité SOS avec poly-désertion de grille d'une courbe C-V mesurée et d'une courbe C-V simulée (a). Extraction du dopage de substrat N_{sub} et du dopage de grille N_G à partir du tracé de $1/C^2$ en fonction de V_{GB} (b). Les dimensions de la capacité mesurée sont $W \times L = 56000 \ \mu m^2$. Les paramètres extraits sont : $N_{sub} = 1.721 \times 10^{25} \ m^{-3}$, $N_G = 4.19 \times 10^{25} \ m^{-3}$ et tox = 8.3 nm.

En nous basant sur le cas de la capacité MOS, nous avons réalisé un programme semi-automatisé, sous environnement mathcad, pour extraire les dopages du substrat et de la grille de ces capacités SOS. Par exemple, à partir de la courbe $(A_{eff}/C)^2 = f(V_{GB})$, tracée sur la figure (II.8.b), et du choix des zones de désertion du substrat et de la grille, les dopages de la capacité SOS mesurée ont pu être extraits : $N_{sub} = 1.721 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ et $N_G = 4.19 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$.

Notons, qu'à partir des mesures C-V des capacités MOS (ou SOS) ayant des oxydes minces (30-40Å), il est également possible de déterminer l'épaisseur d'oxyde, t_{ox}, à partir de la méthode de Maserjian [Maserjian'74]. Cette méthode est basée sur la fonction suivante :

$$Y(V_{GB}) = \frac{1}{C^3} \frac{\partial C}{\partial V_{GB}} = \frac{1}{C^3} \frac{\partial C_{SC}}{\partial \Psi_S}$$
(II.26)

où C représente la capacité mesurée.

A partir de cette équation en régime d'accumulation, selon Maserjian *et al.*, il est possible d'écrire la relation suivante :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{Cox} + KY^{\frac{1}{n+1}}$$
(II.27)

pour laquelle K est une constante et n un exposant dépendant de la statistique des porteurs en accumulation (n=1 pour la statistique de Bolzmann, n=3 pour la mécanique quantique et n=5 pour la statistique de métal dégénéré).

Ainsi, pour une valeur de n donnée, l'ordonnée à l'origine du tracé de (1/C) en fonction de $(Y^{1/n+1})$ fournit la valeur de C_{ox} et donc de t_{ox}. Dans ce premier paragraphe, nous avons étudié l'impact de la poly-désertion de la grille sur les caractéristiques de la capacité. Nous nous proposons, à présent, d'étudier l'impact des variations du dopage de substrat d'une capacité.

II.3. Non uniformité du dopage du substrat

En raison des procédés de fabrication (croissance de l'oxyde, implantation du substrat, ajustage de la tension de seuil...), le dopage du substrat n'est pas réellement uniforme dans le volume du semiconducteur. Pour un dopage de substrat non constant entre l'interface oxyde/substrat et le volume du substrat (cf. Fig. II.9), il est nécessaire de déterminer la courbure des bandes du semiconducteur afin d'obtenir la charge totale de la zone désertée. Nous avons donc réalisé un simulateur de courbes C-V (sous environnement Mathcad) pour résoudre l'équation de Poisson en 1 dimension dans le substrat.



Figure II.9. Capacité MOS à dopage de substrat non constant

II.3.1. Modélisation

Nous développons ici la méthode numérique itérative fondée sur les différences finies à une dimension afin de déterminer $\Psi(y)$ pour un potentiel de surface donné. En conservant la résolution de l'équation de Poisson à une dimension, la densité de charge dans le substrat s'écrit :

$$\rho(y) = q[p(y) - n(y) + N_{D}(y) - N_{A}(y)]$$
(II.28)

où N_A(y) et N_D(y) représentent les densités de dopants (de types accepteurs et donneurs) de l'interface vers le volume du semiconducteur.

Comme le montre la figure (II.10), la résolution de l'équation de Poisson nécessite le découpage de l'axe y en petits éléments de longueur Δ . L'épaisseur de la couche d'inversion étant très faible par rapport à la longueur de la ZCE, il est indispensable de découper l'axe y de façon non uniforme : le maillage est plus resserré à l'interface.



Figure II.10. *Maillage du substrat à une dimension.*

La dérivée première de la courbure de bandes est donnée par :

$$\Psi_{i}' = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_{i-1}}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}}$$
(II.29)

Par suite, la dérivée seconde de la courbure de bandes s'écrit de la façon suivante :

$$\Psi_{i}^{"} = \frac{\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_{i}}{\Delta_{i}} - \frac{\Psi_{i} - \Psi_{i-1}}{\Delta_{i-1}}}{\Delta_{i}^{'}} = \frac{2}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}} \left[\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_{i}}{\Delta_{i}} - \frac{\Psi_{i} - \Psi_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right]$$
(II.30)

Chapitre II. Modélisation de la capacité MOS

car:

$$\Delta_{i}' = \frac{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}}{2} \tag{II.31}$$

On développe alors l'expression (II.30) :

$$\Psi_{i}^{"} = \frac{2}{(\Delta_{i-1} + \Delta_{i})\Delta_{i}\Delta_{i-1}} \left[\Delta_{i-1}\Psi_{i+1} - \Delta_{i-1}\Psi_{i} - \Delta_{i}\Psi_{i} + \Delta_{i}\Psi_{i-1} \right]$$
(II.32)

pour exprimer la courbure de bandes au point i :

$$\Psi_{i} = -\frac{\Delta_{i}\Delta_{i-1}}{2}\Psi_{i}^{"'} + \frac{\Delta_{i-1}}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}}\Psi_{i+1} + \frac{\Delta_{i}}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}}\Psi_{i-1}$$
(II.33)

D'après l'équation de Poisson (1D), la dérivée seconde de la courbure de bandes au point i dans le semiconducteur correspond à la densité de charge en ce point divisée par la permittivité du substrat, nous pouvons donc écrire :

$$\Psi_{i} = \frac{\Delta_{i}\Delta_{i-1}}{2} \frac{\rho_{i}}{\varepsilon_{Si}} + \frac{\Delta_{i-1}}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}} \Psi_{i+1} + \frac{\Delta_{i}}{\Delta_{i-1} + \Delta_{i}} \Psi_{i-1}$$
(II.34)

La charge totale du semiconducteur (par unité de surface) s'obtient en intégrant la densité de charge p suivant l'axe y :

$$Q_{SC} = \sum_{i} \frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} \Delta_i \tag{II.35}$$

II.3.2. Etude d'un dopage de substrat non constant

Dans ce paragraphe, nous considérons un profil de dopage de type gaussien de largeur variable (Δy variable) centré plus ou moins loin de l'interface (y_c variable) décrit par l'expression suivante :

$$N_{A}(y) = N_{A \max} \exp\left(-\left(\frac{y - y_{C}}{\Delta y}\right)^{2}\right) + N_{A \min}$$
(II.36)

où N_{Amax} correspond à la valeur maximale de la gaussienne et N_{Amin} au dopage minimum du substrat.

II.3.2.1. Gaussienne de largeur variable centrée à l'interface

Dans cette partie, nous considérons que la gaussienne est centrée à l'interface (c.a.d. $y_c = 0$) et que la largeur de cette gaussienne est variable jusqu'à l'obtention d'un dopage constant (c.a.d. Δy très grand).

Les profils de dopage choisis sont tracés sur la figure (II.11.a). La figure (II.11.b) présente les courbes C-V correspondantes. Soit N_{A0} la courbe de référence (dopage constant), nous remarquons qu'une diminution de la largeur de la gaussienne induit :

- Un décalage de la courbe C-V dans le régime d'inversion forte,
- Une déformation de la courbe dans le régime d'inversion faible puis de désertion.

En revanche, le régime d'accumulation n'est pas affecté par cette variation du profil du dopage et la tension de bandes plates reste constante ($V_{FB} = -1V$) alors que V_T diminue.



Figure II.11. Profils du dopage (**a**) et courbes C-V correspondantes (**b**) si l'on considère un dopage centré à l'interface et de largeur variable. L'épaisseur d'isolant est de 3 nm.

II.3.2.2. Gaussienne non centrée à l'interface

Considérons à présent, à largeur de gaussienne constante, un décalage du maximum de dopage par rapport à l'interface (cf. Fig. (II.12.a)). Soit N_{A1} le dopage de référence de la courbe C-V, la figure (II.12.b) montre qu'un décalage important de la gaussienne déforme assez peu la courbe mais qu'il entraîne un décalage global de celle-ci (variation de V_{FB} et de V_T).

Notons qu'il n'y a pas de déformation caractéristique de la courbe C-V par rapport aux résultats obtenus en diminuant fortement la largeur de la gaussienne.



Figure II.12. Profils du dopage (**a**) et courbes C-V correspondantes (**b**) si l'on considère une largeur de gaussienne constante et un maximum décalé par rapport à l'interface. L'épaisseur d'isolant est de 3 nm.

II.3.2.3. Gaussiennes non centrées à l'interface à largeurs variables

Finalement, nous considérons un profil de dopage dont le maximum se situe à 20 nm de l'interface avec une largeur variable (cf. Fig. (II.13.a)). En prenant le dopage N_{A9} pour référence, la figure (II.13.b) met en évidence la déformation de la courbe C-V pour une forte diminution de la largeur de la gaussienne ce qui confirme les résultats précédents.



Figure II.13. Profils du dopage (**a**) et courbes C-V correspondantes (**b**) si l'on considère une gaussienne centrée à 20 nm de l'interface et de largeur variable. L'épaisseur d'isolant est de 3 nm.

Comme nous l'avons décrit au paragraphe II.2.4, à partir des caractéristiques C-V, il est possible d'extraire le dopage du substrat (N_{Sub}). Si le dopage n'est pas constant, la dérivée de l'équation (II.20) par rapport à V_{GB} permet de retrouver le profil du dopage :

Chapitre II. Modélisation de la capacité MOS

$$\frac{d\left(\frac{A_{eff}^2}{C^2}\right)}{dV_{GB}} = \frac{2}{qN_{sub}\varepsilon_{Si}}$$
(II.37)

ou encore :

$$N_{sub} = \frac{2}{\frac{d\left(\frac{A_{eff}^2}{C^2}\right)}{q\epsilon_{Si} \frac{dV_{GB}}{dV_{GB}}}}$$
(II.38)

Grâce aux deux relations suivantes, nous pouvons déterminer le profil du dopage du substrat de la capacité MOS à partir de sa caractéristique C-V.

$$\begin{cases} N_{sub} (x) = \frac{2}{\left(\frac{A_{eff}^2}{C(V_{GB})^2}\right)} \\ q \varepsilon_{Si} \frac{d\left(\frac{A_{eff}^2}{C(V_{GB})^2}\right)}{dV_{GB}} \\ x(V_{GB}) = \varepsilon_{Si} \left[\frac{A_{eff}^2}{C(V_{GB})} - \frac{A_{eff}^2}{C_{ox}}\right] \end{cases}$$
(II.39)

Après avoir observé l'impact des dopages sur la capacité MOS, nous nous proposons d'étudier celui de l'épaisseur d'oxyde, t_{ox}.

II.4. Effet d'une épaisseur non constante

Afin de garantir les mêmes caractéristiques électriques des composants appartenant au même Wafer (plaquette de silicium), l'épaisseur d'isolant doit être uniforme. Cependant, durant les étapes technologiques du procédé de fabrication du wafer, des non uniformités d'épaisseur d'oxyde peuvent apparaître. Les origines de ces non uniformités sont multiples avec par exemple : la rugosité de surface du silicium, un défaut du masque, ou encore la position du wafer lors des recuits avec une température non constante dans les fours, etc... Par conséquent, nous nous sommes intéressés à l'impact d'une non uniformité d'épaisseur d'oxyde sur les caractéristiques électriques de la capacité.

II.4.1. Modélisation pseudo 2D des courbes C-V et I-V

Nous avons réalisé un simulateur pseudo 2D prenant en compte d'éventuelles variations d'épaisseur d'oxyde d'une capacité MOS lors de la détermination de ces caractéristiques C-V et I-V. Ce simulateur est basé sur le découpage de la capacité originelle en N capacités MOS élémentaires d'épaisseur d'isolant constante en supposant qu'elles ne s'influencent pas entre elles (cf. Fig. (II.14)).



Figure II.14. *Capacité MOS à épaisseur d'isolant de grille non constante.*

Pour n'étudier que l'influence de l'épaisseur d'oxyde, on suppose :

- qu'il n'y a pas d'état d'interface ($Q_{it} = 0$),
- qu'il n'y a pas de charge fixe ($Q_{ox} = 0$),
- que les dopages sont uniformes.

II.4.1.1. Modélisation des courbes C-V

Soit V_{GB} la tension appliquée sur la grille, le potentiel de surface de chaque capacité élémentaire est déterminé le long de l'interface Si/SiO₂ à l'aide de l'équation liant la polarisation appliquée sur la grille, V_{GB}, et le potentiel de surface, Ψ_S (cf. Eq. (I.6)) :

$$V_{GB} = V_{FB} + \Psi_{Si} - \frac{Q_{SCi}}{C_{oxi}}$$
(II.40)

où C_{oxi} et Q_{SCi} correspondent respectivement à la capacité d'oxyde et à la charge du substrat de la i^{ème} capacité élémentaire (cf. Eq. (I.14)).

Connaissant Q_{SCi}, on détermine la capacité correspondante, C_{SCi}, à partir de l'équation (I.2). Chaque capacité élémentaire, C_i (de surface effective A_{effi}), correspondant à la mise en série des capacités élémentaires de l'isolant, C_{oxi}, et du semiconducteur C_{SCi}, est alors calculée à partir de l'équation (I.1). Ainsi notre simulateur détermine les caractéristiques C-V de chacune des N capacités élémentaires. Pour calculer la capacité totale de la structure, il suffit alors de faire la somme des capacités élémentaires placées en parallèle :

$$C = \sum_{i} C_{i}$$
(II.41)

I.4.1.2. Modélisation des courbes I-V

En ce qui concerne le calcul du courant de la structure totale, le potentiel (cf. Eq. (II.42)) et le champ électrique (cf. Eq. (II.43)) aux bornes de l'isolant de chaque capacité élémentaire doivent être déterminés :

$$V_{\text{oxi}} = \frac{-Q_{\text{SCi}}}{C_{\text{oxi}}}$$
(II.42)

$$\xi_{\text{oxi}} = \frac{-V_{\text{oxi}}}{t_{\text{ox}i}}$$
(II.43)

Dans le cas d'un courant tunnel Fowler-Nordheim, le champ élevé à travers l'oxyde abaisse la largeur de la barrière de potentiel et permet aux électrons de passer par effet tunnel. On observe cet effet pour des valeurs, ξ_{oxi} , du champ électrique dans l'oxyde tels que $qV_{oxi} > \Phi_{bi}$, (c.a.d. $q\xi_{oxi} > \Phi_{bi}/t_{oxi}$) où Φ_{bi} est la barrière à l'interface oxyde/semiconducteur pour la i^{éme} capacité élémentaire (différence d'énergie entre le niveau d'énergie considéré du semiconducteur et le bas de la bande de conduction de l'oxyde).

Le courant tunnel de chaque capacité élémentaire est alors donné par la relation:

$$\operatorname{Itun}_{i} = \begin{cases} \operatorname{A}_{effi} \frac{q 2m_{e} \xi_{oxi}^{2}}{8\pi h m_{ox} \phi_{b_{i}}} \frac{1}{\left(1 - \sqrt{\frac{\Phi_{b_{i}} \mp V_{oxi}}{\phi_{b_{i}}}}\right)^{2}} \exp\left[\frac{-\gamma}{\pm \xi_{oxi}} \left[-\left(\phi_{b_{i}}\right)^{\frac{3}{2}} + \left(\phi_{b_{i}} \mp V_{oxi}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\right] \operatorname{si} \phi_{b_{i}} > \pm V_{oxi} \\ \operatorname{A}_{effi} \frac{q 2m_{e} \xi_{oxi}^{2}}{8\pi h m_{ox} \phi_{b_{i}}} \exp\left[\frac{\gamma\left(\phi_{b_{i}}\right)^{\frac{3}{2}}}{\pm \xi_{oxi}}\right] \operatorname{si} \phi_{b_{i}} \le \mp V_{oxi} \end{cases}$$
(II.44)

où $\gamma = \frac{4}{3\hbar}\sqrt{2qm_{si}m_{o}}$, me est la masse effective de l'électron, m_{si}=0.327, m_o = 9.1×10^{-31} kg et m_{ox} est la masse effective de l'électron dans l'oxyde (en général on prend m_{ox} $\approx 0.5 \times m_0$ et $\Phi_b \approx 3.05$ eV). Les signes $\pm et \mp$ sont dus aux deux passages tunnels possibles des électrons du substrat vers la grille (V_{oxi} > 0) et de la grille vers le substrat (V_{oxi} < 0).

Finalement, la somme des courants tunnel correspondant aux capacités élémentaires est égale au courant tunnel de la structure totale :

$$I = \sum_{i} Itun_{i}$$
(II.45)

II.4.1.3. Simulations des courbes C-V et I-V

Considérons une capacité de surface W×L dont l'épaisseur d'isolant varie linéairement suivant la longueur L (cf. Fig. (II.15.a)). La figure (II.15.b) présente les courbes C-V (par unité de surface) pour les capacités élémentaires ayant les épaisseurs extrêmes et pour la capacité de la structure globale.

A partir de la courbe C-V de la structure globale, nous avons extrait les paramètres caractéristiques (dopages et épaisseur d'oxyde) de cette structure afin de les comparer aux valeurs implémentées pour la simuler. Nous avons observé que :

- Les dopages extraits à l'aide de la courbe C-V de la structure totale, restent inchangés par rapport aux dopages implémentés dans le simulateur.
- L'épaisseur d'isolant de notre structure extraite à partir de la méthode de Maserjean [Maserjean'74] est de 5.46 nm ce qui est légèrement inférieur à la valeur moyenne implémentée.



Figure II. 15. Variation de l'épaisseur d'isolant (suivant L) d'une capacité MOS (**a**) et courbes C-V correspondantes (**b**). Les paramètres de la simulation sont : $N_A = 7 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$, $V_{FB} = -1V$, $W = L = 10 \ \mu m$.

Cette comparaison a été réalisée pour différentes valeurs de t_{ox} moyen. La figure (II.16) présente les tracés de t_{ox} moyen et t_{ox} extrait en fonction de t_{ox} moyen. Ce graphe montre que l'épaisseur extraite est toujours inférieure à t_{ox} moyen.



Figure II.16. Tracé de la variation de t_{ox} moyen (trait plein) et de t_{ox} extrait (pointillés) en fonction de t_{ox} moyen.

En ce qui concerne les courbes I-V, la figure (II.17.a) présente les courants d'électrons (par unité de surface) qui traversent les capacités élémentaires ayant des épaisseurs extrêmes et le courant total de la structure. Il est possible de simuler le courant tunnel de la capacité MOS si on suppose que son épaisseur est égale à l'épaisseur extraite. La figure (II.17.b) montre que dans ce cas, le courant est sous-estimé par rapport au courant de la structure.



Figure II.17. Courants tunnels (par unité de surface) des capacités élémentaires (pour les épaisseurs extrêmes) et de la structure (**a**). Comparaison du courant tunnel de la structure avec celui simulé à partir de l'épaisseur d'isolant extraite (**b**).

En résumé, lorsqu'une capacité présente une non uniformité de son épaisseur d'isolant, l'épaisseur extraite des courbes C-V est toujours inférieure à t_{ox} moyen et les paramètres Fowler-Nordheim extraits des courbes I-V seront erronés. Notons que ce modèle est un modèle pseudo 2D puisque nous supposons que chaque capacité n'influence pas ces voisines. Cependant, ce modèle simplifié n'est plus valable en présence d'une brusque marche d'escalier qui induit alors un champ distordu. Dans ce cas, l'utilisation d'un simulateur 2D type ISE ou silvaco, est nécessaire. Cependant, la création de son propre simulateur 2D permet une plus grande souplesse pour la modélisation physique et l'implantation des lois de conduction ou certains mécanismes physiques.

II.4.2. Comparaison entre la modélisation pseudo 2D et 2D

L'influence des capacités voisines nécessite la modélisation 2D du potentiel de surface. Certes il existe des simulateurs 2D comme ISE ou silvaco, mais nous avons choisi de faire notre propre simulateur 2D. Ainsi, il nous est possible d'implanter des lois de conduction et certains mécanismes physiques. Ce simulateur réalisé par Laurent Raymond, membre du laboratoire, est basé sur la méthode des éléments finis avec un maillage triangulaire et adaptatif permettant un resserrement à l'interface et aux points anguleux. Ce maillage est obtenu à l'aide d'un logiciel du domaine public (<u>www.geuz.org</u>) avec un code C⁺⁺ compatible avec notre solveur mathcad.

Soit une capacité avec une épaisseur d'oxyde, t_{ox}, non uniforme, observons la répartition du potentiel du silicium vers la grille (cf. Fig. (II.18)). La grille n'est pas représentée, mais se trouverait en haut de cette figure. La zone supérieure (bleue) représente le diélectrique SiO₂ avec une interface grille/SiO₂ supposée lisse. La zone noire irrégulière correspond à une interface rugueuse SiO₂/semiconducteur. Cette zone dense noire est due à l'affinement du maillage. En effet, lorsque l'interface est non uniforme, le maillage est resserré pour tenir compte des changements d'orientation de l'interface. De plus, lorsque la tension appliquée entre la grille et le substrat augmente, la courbure de bande est de plus en plus importante ce qui correspond à une chute de potentiel. L'échelle des potentiels au rouge pour les forts potentiels. Les figures (II.18) montrent l'influence de l'augmentation du potentiel appliqué entre la grille et le substrat avec la diminution du niveau de Fermi de la grille et la courbure du diagramme de bandes. Ainsi, la structure simulée fonctionne.



 V_{GB} = 2.1 V

Ce simulateur permet également la représentation des lignes équipotentielles qui sont perpendiculaires aux lignes de champs. La figure (II.19.a) présente ces équipotentielles avec en noir le maillage; cependant, il est difficile d'observer clairement les lignes de champs sauf au niveau du silicium. La figure (II.19.b) est un zoom de la figure (II.19.a), au niveau de l'interface Si/SiO₂ pour une des non uniformité de t_{ox} en forme de cuvette renversée. Le maillage est resserré au niveau de cette cuvette, surtout au point anguleux (passage de marche). Les équipotentielles sont des droites lorsque l'interface est uniforme, mais sont déformées au niveau de la non uniformité. Ainsi, on peut observer des lignes qui entrent dans le silicium puis en ressortent, ce qui souligne l'influence des capacités voisines au niveau de la non uniformité et donc la nécessité de faire une simulation 2D. De plus, on sait que les électrons suivent les lignes de champ qui sont perpendiculaires aux équipotentielles. Ainsi, on distinguera deux zones :

- Les zones où il n'y a pas de perturbation c.a.d. avant et après la non uniformité.
 Dans ce cas, les électrons auront un chemin rectiligne à travers le diélectrique.
- Les zones de non uniformité, où les électrons auront un chemin distordu afin de rester perpendiculaire à l'interface. Dans ce cas, pour le calcul des courants, des tubes de conduction, correspondant aux chemins des électrons du substrat vers la grille, devront être calculés.



Figure II.19. Représentation des lignes équipotentielles (**a**) et zoom sur une des non uniformité de l'interface Substrat/SiO₂ (**b**). Données : $N_A = 10^{24} m^{-3}$, $t_{ox} = 7 nm$ et la marche constituant la non uniformité est de 2 nm.

Afin de vérifier la validité de notre approche pseudo 2D, nous avons comparé les caractéristiques C-V obtenues avec celles simulées à partir du modèle 2D (c.a.d. du calcul de l'équation de Poisson suivant deux dimensions en chaque nœud du maillage). La figure (II.20) donne un exemple de maillage d'une capacité MOS ayant un oxyde très rugueux d'épaisseur moyenne 3 nm.



Figure II.20. Exemple d'un maillage 2D de la structure par la méthode des éléments finis. Ce maillage comporte environ 15 000 points [Cuinet'04].

On remarquera la forme particulière de ce maillage qui est triangulaire et de répartition aléatoire. Cette particularité permet d'éviter des effets parasites de symétrie lors du calcul de l'équation de Poisson. On remarquera aussi que le maillage est plus resserré à l'interface oxyde /silicium pour garantir une plus grande précision, et donc une plus grande fiabilité des résultats. La figure (II.21.a) présente les trois profils de l'épaisseur d'oxyde choisis pour cette comparaison avec une interface SiO_2/Si plate (pointillés), une interface légèrement rugueuse (cercles) et une interface très rugueuse (ligne grise). Ces trois structures d'études ont la même épaisseur d'oxyde moyenne égale à 3 nm. Cependant la figure (II.21.b) met en évidence l'augmentation de la capacité due à la dépendance du chemin des lignes de champ avec la rugosité de l'interface SiO₂/Si.



Figure II.21. Profils des interfaces Si/SiO_2 choisis (**a**) pour étudier l'impact de la rugosité sur les caractéristiques C-V simulées à l'aide de notre modèle pseudo 2D et du modèle 2D (**b**). Données : $N_A = 5 \ 10^{23} \ m^{-3}$, $t_{oxmoy} = 3 \ nm$.

De surcroît, la comparaison des caractéristiques C-V de la figure (II.21.b) valide notre approche pseudo 2D pour le calcul des capacités dans le cas d'interface non rugueuse ou peu rugueuse. Cette comparaison montre que lorsque la rugosité augmente, les effets 2D ne sont plus négligeables et le modèle pseudo 2D tend à sous estimer la valeur de la capacité. Cependant, notre modèle pseudo 2D permet l'obtention de bonnes caractéristiques C-V au premier ordre et présente un très grand intérêt en terme de rapidité de calcul par rapport au modèle 2D. La même comparaison pour les caractéristiques I-V de ces structures est en cours de réalisation avec le calcul des tubes de conduction correspondant aux chemins des électrons du substrat vers la grille.

Après s'être intéressés aux variations des dopages et de l'épaisseur d'oxyde d'une capacité, nous nous proposons d'étudier l'impact des non uniformités des charges fixes présentes dans l'oxyde d'une capacité. Deux études sont possibles : l'une dans le cas de charges fixes non constantes entre la source et le drain et l'autre dans le cas de charges fixes non uniformément réparties dans le volume de l'isolant.

II.5. Charges fixes latérales non constantes

La présence de défauts dans l'isolant d'une structure Métal/Isolant/Semiconducteur (MIS) entraîne la variation de la tension de seuil V_T ou de la tension de bandes plates V_{FB}, l'augmentation de la pente sous le seuil et du niveau de bruit du courant (courbes I_{DS}(V_{GS})), et la déformation de la relation capacité-tension C-V. D'un point de vue électrique, les charges piégées dans les états d'interface ou sur les défauts d'oxyde proches de l'interface sont mesurables car elles évoluent au cours de la mesure, tandis que les charges fixes d'oxyde n'évoluent pas. Nous nous sommes intéressés à ces charges fixes, notées Q_{ox}, dont la présence le long de l'interface isolant / substrat entraîne une translation de la courbe C-V : translation avec $\Delta V_{FB} < 0$ lorsque Q_{ox} > 0 et translation avec $\Delta V_{FB} > 0$ lorsque Q_{ox} < 0.

II.5.1. Modélisation des courbes C-V et I-V

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'effet de la non uniformité des charges fixes, Q_{ox} , vues de l'interface, sur les caractéristiques I-V et C-V d'une capacité MOS. Q_{ox} sera donc une charge surfacique exprimée en Cm⁻². Comme pour le cas de la non uniformité d'épaisseur d'isolant, le simulateur que nous avons réalisé, est basé sur le découpage de la capacité MOS en N capacités élémentaires placées en parallèle (cf. Fig. (II.22)).



Figure II.22. Capacité MOS à densité de charges fixes non uniforme (vue de l'interface).

La charge fixe Q_{oxi} de chaque capacité élémentaire est considérée comme constante. L'équation (I.7) permet la prise en compte de cette charge Q_{oxi} , dans le calcul du potentiel de surface. Les caractéristiques C-V de chacune de ces capacités sont ensuite évaluées comme précédemment à l'aide de l'équation (I.14). A nouveau, on suppose que les capacités ne s'influencent pas entre elles (modélisation pseudo 2D). Les caractéristiques de la structure globale sont alors déterminées à l'aide de l'équation (II.41). Les courants tunnels sont déterminés de la même manière que dans le cas précédent (§ II.4.1.2.).

II.5.2. Impact de la non uniformité de charges

II.5.2.1. Impact sur les courbes C-V

Pour illustrer l'utilisation de ce simulateur, considérons une capacité MOS de surface W×L dont la charge fixe varie linéairement suivant sa longueur L comme l'indique la figure (II.23.a). La figure (II.23.b) montre les courbes C-V de la structure et des capacités élémentaires (par unité de surface) présentant les densités de charges fixes extrêmes. Malgré la déformation de la courbe C-V de la structure par rapport à une courbe C-V classique, l'épaisseur d'oxyde extraite correspond à celle implémentée et le dopage du substrat extrait à une valeur de 6 % inférieure à celle implémentée.



Figure II.23. Variation de la charge fixe (suivant L) d'une capacité MOS (**a**) et courbes C-V correspondantes (**b**). Les paramètres de la simulation sont : $t_{ox} = 3$ nm, $V_{FB} = -1V$, $N_A = 7 \times 10^{23} m^{-3}$, $W = L = 10 \ \mu m$.

II.5.2.2. Impact sur les courbes I-V

La figure (II.24.a) donne les courbes I-V extrêmes de la structure (par unité de surface) ainsi que le courant de la structure totale. A partir de la détermination de la tension de bandes plates et de la connaissance de la courbe C-V de la capacité ainsi que du dopage du substrat, il est possible de déterminer la charge fixe effective présente dans la structure. On peut alors déterminer le courant qui traverse par effet tunnel ces structures possédant ces charges fixes parasites. La figure (II.24.b) montre que ce courant est inférieur au courant de la structure.



Figure II.24. Courants tunnels des capacités élémentaires (pour les charges fixes extrêmes) et de la structure (**a**). Comparaison du courant tunnel de la structure avec celui simulé à partir de la charge effective extraite (**b**).

II.6. Charges fixes non uniformément réparties dans l'isolant

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'impact de la non uniformité des charges fixes entre le substrat et la grille, sur les caractéristiques I-V et C-V d'une capacité MIS. L'isolant peut être constitué d'une couche de SiO₂ ou d'un empilement de deux couches formées par du SiO₂ et un matériau à haute constante diélectrique (high κ) comme l'oxyde d'hafnium (HfO₂). Notre approche s'inscrit dans la continuité des travaux de Ku *et al.* [Ku'94] dans lesquels la résolution de Poisson a été réalisée pour le cas d'une charge fixe répartie uniformément dans l'oxyde.

II.6.1. Modélisation de la courbe I-V d'une capacité MOS

Considérons une capacité MOS dont la grille et le substrat sont très fortement dopés (avec des dopages uniformes). Notre simulateur repose sur le découpage de l'oxyde en différentes tranches de même largeur (cf. Fig. (II.25)).



Figure II.25. Capacité MOS présentant une charge non uniforme dans l'isolant de grille, formé par du SiO₂.

L'équation au potentiel avec ou sans la déplétion de la grille (I.24) peut être écrite en prenant en compte la charge dans l'oxyde :

$$V_{GB} = \Phi_{MS} - \frac{Q_{oxeff}}{C_{ox}} + \Psi_S - \Psi_{SG} - \frac{Q_{SC}(\Psi_S)}{C_{ox}}$$
(II.46)

où la charge de l'isolant, Q_{oxeff} , est une charge surfacique. Comme la grille est très fortement dopée, on peut négliger les effets de la charge sur l'interface oxyde/grille. Par suite, la charge volumique, $Q_{ox}(y)$ peut se ramener à une charge surfacique, Q_{oxeff} , vue de l'interface substrat/diélectrique :

$$Q_{\text{oxeff}} = \int_{0}^{\infty} \frac{t_{\text{ox}} - y}{t_{\text{ox}}} Q_{\text{ox}}(y) dy$$
(II.47)

Pour un potentiel de grille donné, la résolution de l'équation (II.46) permet la détermination du potentiel de surface et donc du potentiel aux bornes de l'oxyde :

$$V_{ox} = -\frac{Q_{SC} + Q_{oxeff}}{C_{ox}}$$
(II.48)

On obtient alors la distribution spatiale du potentiel dans l'oxyde, V(y), à partir de la résolution de l'équation de Poisson (par la méthode des différences finies), en considérant la charge volumique Q_{ox} (et non la charge surfacique Q_{oxeff}) et les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} V(y=0) = 0\\ V(y=t_{ox}) = V_{ox} \end{cases}$$
(II.49)

La variation de la barrière de potentiel vue par les électrons du substrat s'exprime alors par la relation suivante :

$$\Phi_{\rm si} = \begin{cases} \Phi_{\rm b} - V({\rm y}) & {\rm si} & \Phi_{\rm b} > V({\rm y}) \\ 0 & {\rm sinon} \end{cases}$$
(II.50)

La variation de la barrière de potentiel vue par les électrons de la grille est donnée par :

$$\Phi_{\text{poly}} = \begin{cases} \Phi_b - V(y) + V_{\text{ox}} & \text{si } \Phi_b > V(y) - V_{\text{ox}} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(II.51)

Ainsi, la transparence des électrons en fonction de leur électrode est déterminée à partir de l'expression [Fromhold'81] :

$$T_{\text{Esi,poly}} = \exp\left(-2\sqrt{\frac{2qm_{\text{nox}}}{\hbar 2}} \int_{0}^{t_{\text{ox}}} \sqrt{\Phi_{\text{si,poly}}} dy\right)$$
(II.52)

Par conséquent, on peut déterminer le courant des électrons au niveau du substrat et de la grille :

$$I_{si,poly} = A_{eff} Q_{nsi,poly} F_{imp} T_{Esi,poly}$$
(II.53)

où F_{imp} représente la fréquence d'impact des électrons sur la barrière de potentiel et A_{eff} la surface effective de la capacité.

II.6.2. Modélisation de la courbe I-V d'une capacité MIS

Pour modéliser une capacité dont l'isolant est formé par un empilement SiO₂/HfO₂, nous avons apporté quelques modifications au modèle précédent (§ II.6.1.).



Figure II.26. Schématisation d'une capacité MOS présentant une charge non uniforme dans l'isolant de grille, formé par un empilement SiO₂/HfO₂.

L'ajout d'une couche de diélectrique entraîne la présence d'une nouvelle capacité (cf. Fig. (II.26)). Ainsi l'expression de la capacité d'oxyde devient :

$$C_{ox} = \frac{C_{ox1} C_{ox2}}{C_{ox1} + C_{ox2}}$$
(II.54)

Notons que toute la charge générée dans l'oxyde est supposée être répartie uniquement dans la couche d'hafnium [Garros'03]. Afin de considérer toutes les couches de diélectriques comme équivalentes à une seule couche de SiO₂, une épaisseur d'isolant équivalente doit être calculée pour la couche de HfO₂:

$$t_{\text{ox}_{2}\text{eq}} = \frac{\varepsilon_{\text{sio}_{2}}}{\varepsilon_{\text{HFO2}}} t_{\text{ox}_{2}}$$
(II.55)

$$t_{\text{oxeq}} = t_{\text{ox2eq}} + t_{\text{ox1}} \tag{II.56}$$

En supposant que toutes les charges fixes sont situées à l'intérieur de la couche de HfO₂, la densité de charge effective vue de l'interface entre le substrat et le diélectrique est donnée par la relation suivante :

$$Q_{\text{oxeff}} = \int_{0}^{\text{tox}} \frac{t_{\text{ox}} - t_{\text{ox}2\text{eq}}}{t_{\text{ox}}} Q_{\text{oxeq}}(y) dy$$
(II.57)

Chapitre II. Modélisation de la capacité MOS

où :

$$Q_{\text{oxeq}} = Q_{\text{ox}} \frac{\varepsilon_{\text{HFO}_2}}{\varepsilon_{\text{SiO}_2}}$$
(II.58)

Une dernière modification doit également être apportée pour le calcul du potentiel de surface. En effet, la présence des deux couches d'isolant, implique le calcul du potentiel aux bornes de chaque isolant. Considérons la structure représentée sur la figure (II.27), où le sens positif correspond à l'axe des tensions.



Figure II.27. Schématisation d'une structure avec un isolant constitué de deux matériaux différents (I) et (II), et une charge Q piégée à l'interface de ces deux matériaux.

Le théorème de Gauss appliqué à un cylindre perpendiculaire à l'interface entre les deux matériaux permet d'écrire la relation :

$$-\varepsilon_1 \xi_{\text{ox}_1} + \varepsilon_2 \xi_{\text{ox}_2} = \frac{Q}{\varepsilon_0}$$
(II.59)

où ε_1 , ε_2 , ξ_{ox1} et ξ_{ox2} correspondent respectivement aux permittivités relatives et aux champs électriques présents dans les matériaux (I) et (II).



A partir du système capacitif équivalent présenté sur la figure (II.28), la charge Q piégée à l'interface des deux matériaux s'écrit :

$$Q = -Q_2 + Q_1 \tag{II.60}$$

avec $\begin{cases} Q_{1} = C_{1}V_{ox1} \\ Q_{2} = C_{2}V_{ox2} \end{cases}$ (II.61)

La continuité des potentiels implique la relation :

$$V_{ox1} + V_{ox2} = V_{ox}$$
(II.62)

A partir des équations (II.59), (II.61) et (II.62), on déduit la relation (II.63) :

$$Q = -C_2 \operatorname{Vox}_2 + C_1 \operatorname{Vox}_1 \tag{II.63}$$

A partir des relations (II.61) à (II.63), on déduit les expressions des potentiels aux bornes des deux matériaux constituant l'isolant :

$$V_{ox1} = \frac{C_{ox2}}{C_{ox1} + C_{ox2}} V_{ox} + \frac{Q_{oxeff12}}{C_{ox1} + C_{ox2}}$$
(II.64)

$$V_{ox2} = \frac{C_{ox1}}{C_{ox1} + C_{ox2}} V_{ox} - \frac{Q_{oxeff12}}{C_{ox1} + C_{ox2}}$$
(II.65)

où Qoxeff12 est la densité de charge effective à l'interface entre les deux diélectriques.

Enfin, la résolution spatiale du potentiel à l'intérieur de l'oxyde, V(y), est obtenue comme précédemment à partir de la résolution de l'équation de Poisson (méthode des différences finies), ce qui permet la détermination de la transparence tunnel et du courant tunnel qui en découle.

II.6.3. Simulation des courbes I-V pour une capacité MOS

Considérons une densité de charges fixes uniformément répartie dans l'isolant SiO₂ d'une capacité MOS et traçons le diagramme de bandes de la structure. La figure (II.29.a) illustre la comparaison entre le diagramme de bandes de la structure obtenu avec et sans la résolution de poisson dans l'isolant (c'est-à-dire en considérant que le champ électrique y est uniforme). Pour une polarisation positive (cf. Fig. (II.29)), la présence de charges négatives entraîne une déformation du diagramme de bandes de l'isolant visible seulement grâce à la résolution de l'équation de Poisson dans l'isolant. L'aspect bombé de la bande de conduction de l'isolant, dû aux charges fixes négatives, implique une augmentation de la barrière de potentiel à franchir par les électrons provenant du substrat. Par conséquent, la probabilité pour que ces électrons traversent la barrière de potentiel diminue. Cette probabilité de passage est aussi appelée transparence des électrons. Elle est directement reliée au courant tunnel par l'expression (II.64). Nous avons calculé cette transparence dans l'approximation WKB avec ou sans résolution de l'équation de Poisson. La figure (II.29.b) montre clairement l'impact de la déformation des bandes d'énergies qui se traduit par une diminution de la transparence des électrons (cf. Fig. II.29.b) et par suite celle du courant tunnel.



Figure II.29. Diagramme de bandes d'une capacité MOS avec ou sans résolution de l'équation de Poisson dans l'isolant (**a**), diminution de la transparence tunnel des électrons due aux charges fixes de l'isolant (**b**). Les paramètres de la simulation sont : $N_A = 7 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$, $t_{ox} = 6 \text{ nm}$, $V_{FB} = -1V$, W = L = 10 µm, et $Q_{oxeff} = 2 \text{ 10}^{16} \text{ Cm}^{-2}$.

Considérons à présent une densité de charges fixes de type gaussienne centrée dans l'isolant d'une capacité MOS à électrodes fortement dopées (cf. Fig. (II.30.a)). La présence de ces charges induit une déformation du diagramme de bandes de l'isolant que dans le cas où l'équation de Poisson est résolue (cf. Fig. (II.30.b)).

Soit une polarisation positive, la présence de charges fixes négatives bombe la bande de conduction de l'isolant ce qui augmente la largeur de la barrière de potentiel à franchir par les électrons du substrat (cf. Fig. (II.30.b)). La figure (II.30.c) montre la diminution du courant tunnel des électrons en fonction des différentes densités de charges fixes données sur la figure (II.30.a). A priori, on peut supposer que la présence de cette charge négative Q_{ox} est bénéfique puisqu'elle diminue le courant de fuite ; cependant, elle s'accompagne aussi d'une variation de la tension de bandes plates et d'une chute de la mobilité si on considère un transistor MOS et non plus une capacité MOS.

Notons que les effets néfastes de la diminution du courant tunnel ont également été observés pour les mémoires de type EEPROM avec la fermeture de la fenêtre de programmation [Papadas'92]. En effet, le chargement et déchargement de la grille flottante provoque une dégradation de l'oxyde tunnel avec notamment l'apparition de charges fixes chargées négativement. Usuellement, la diminution de l'efficacité d'injection est modélisée avec une modification des paramètres FN au cours de l'utilisation de la mémoire [Plossu'01].





Figure II.30. Distributions des charges fixes de type gaussienne centrées dans l'isolant d'une capacité MOS (a) et diagramme de bandes correspondant pour le profil C5 avec prise en compte ou non de la résolution de Poisson dans l'isolant (b). Evolution de la transparence des électrons en fonction du potentiel de grille et de la distribution des charges (c) [Bernardini'03a].

A partir des courbes I-V et de l'expression classique du courant Fowler-Nordheim, (cf. Eq. (I.33), page 24), il est possible de déterminer les variations des paramètres caractéristiques (c.a.d. A et B) comme le montre la figure (II.31) pour les tensions de grille positives. On observe ainsi une diminution de A et une augmentation de B.



Figure II.31. Diminution du paramètre A (a) et augmentation du paramètre B (b) du courant Fowler-Nordheim (pour les tensions de grille positives) en fonction de la charge vue de l'interface avec le substrat (c.a.d. pour les profils allant de C1 à C5) [Bernardini'04a].

Il est évident que les courbes A(Q_{oxeff}) et B(Q_{oxeff}) données sur la figure (II.31) ne sont valables que pour les profils de charges que nous avons choisis dans ce paragraphe

(gaussiennes centrées) ; celles-ci seront modifiées si l'on suppose un profil uniforme, en exponentiel ou aléatoire.

II.6.4. Simulation des courbes I-V pour une capacité MIS

Dans la suite de ce paragraphe, nous supposons que toute la charge parasite du diélectrique est localisée dans la couches de HfO₂ (cf. Fig. (II.32.a)) [Houssa'00]. Comme dans le cas précédent (isolant formé d'une seule couche de diélectrique), la charge fixe piégée dans le diélectrique induit une déformation du diagramme de bandes. Cette déformation n'est visible que par la résolution de l'équation de Poisson à l'intérieur du diélectrique (cf. Fig. (II.32.b)). Il en résulte une augmentation de la largeur de la barrière à traverser par les électrons (cf. Fig. (II.32.c)) et par conséquent une diminution de la transparence tunnel et du courant tunnel qui en découle.





Figure II.32. Distribution uniforme de la charge fixe dans l'empilement SiO₂/HfO₂ d'une capacité MIS (a), diagramme de bandes correspondant avec prise en compte ou non de la résolution de Poisson dans l'isolant (b) et tracé de la transparence tunnel des électrons avec prise en compte ou non de la résolution de Poisson dans l'isolant (c), [Bernardini'03a].

On peut aussi remarquer que la transparence tunnel est plus élevée pour l'injection à partir du substrat que de la grille. Ce phénomène est dû à la dissymétrie du diagramme de bandes de la structure [Yang'98].

Considérons à présent une situation plus réaliste avec une distribution non uniforme des charges localisées majoritairement à l'interface SiO_2/HfO_2 (cf. Fig. (II.33.a)). Comme précédemment, la déformation du diagramme de bandes n'est visible que par la résolution de l'équation de poisson à l'intérieur du diélectrique (cf. Fig. (II.33.b)). La décroissance similaire de la transparence tunnel pour une distribution de charges fixes uniforme ou non uniforme (cf. Fig. (II.32.c) et (II.33.c)) est due aux calculs de celles-ci, calculs qui se font en partie à partir de la charge effective vue de l'interface.





Figure II.33. Distribution non uniforme de la charge fixe dans l'empilement SiO₂/HfO₂ d'une capacité MIS (a), diagramme de bandes correspondant avec prise en compte ou non de la résolution de Poisson dans l'isolant (b) et tracé de la transparence tunnel qui en découle (c) [Bernardini'04a].

II.6.5. Résolution spatiale de la charge piégée Qox

A partir de cette étude, nous avons mis au point une nouvelle technique de caractérisation qui permet la détermination de la densité de charges piégées dans l'isolant d'une capacité SOS (Semiconducteur/Oxide/Semiconducteur) après des stress électriques. Cette méthode repose sur le fait que la position de la charge n'a pas le même impact sur les deux courants car la probabilité de passage des électrons est différente suivant l'électrode injectante (grille ou substrat).

II.6.5.1. Structure d'étude

La capacité utilisée pour cette étude a une surface $W \times L = 1000 \times 75 \ \mu m^2$. Elle est constituée d'un substrat de type N⁺, sur lequel une couche tunnel SiO₂ a été déposée, puis recouverte par une grille en poly-silicium de type N. Afin d'extraire les paramètres caractéristiques de cette capacité MOS, nous avons réalisé une mesure C-V quasi-statique à l'aide de l'appareil HP4140B piloté par le logiciel ICCAP, Agilent Technologies. L'appareil HP4140B est relié à une platine sous pointes où se trouve le wafer, c'est à dire le dispositif étudié. Lors de la mesure du courant aux bornes de notre dispositif, la tension V_G varie linéairement. Avant de faire la mesure C-V quasi-statique, les capacités parasites des câbles ont été évaluées (en laissant la pointe de la grille en l'air et l'autre pointe posée sur le drain).



Figure II.34. Mesure et simulation d'une courbe C-V de notre structure d'étude.

La figure (II.34) présente deux courbes C-V : l'une simulée (trait plein) et l'autre mesurée (points) pour une vitesse de rampe $\partial V/\partial t = 100 \text{ mV.s}^{-1}$. Les paramètres extraits sont le dopage du substrat N_{Sub} = $1.5 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$, celui de la grille N_G = $1.2 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ et l'épaisseur d'oxyde t_{ox} = 8.3 nm. Notons un léger décalage entre la mesure et la simulation de la courbe C-V qui révèle la présence d'un dopage de substrat non uniforme.

II.6.5.2. Impact du stress électrique

La figure (II.35) correspond aux différentes mesures du courant en fonction de la polarisation appliquée sur la grille et des stress appliqués sur cette électrode. Les mesures ont été réalisées sur différentes capacité SOS ayant toujours les mêmes paramètres caractéristiques. La courbe symbolisée par des ronds correspond à la courbe initiale (dispositif vierge) tandis que les courbes en traits pleins correspondent aux mesures de courant après l'application d'une tension constante soit négative, $V_{\rm G} = -9.5V$

(cf. Fig. (II.34.a)), soit positive, $V_G = 8 V$ (cf. Fig. (II.35.b)). Ces stress sont dits cumulatifs car une fois qu'ils sont appliqués, la mesure I-V est réalisée puis à nouveau le stress est appliqué et ainsi de suite jusqu'au claquage de l'oxyde.



Figure II.35. Evolution de la courbe I-V d'une capacité MOS pour plusieurs stress électriques cumulatifs négatifs ($V_G = -9.5$ V) (**a**) et positifs (**b**) ($V_G = 8V$) [Bernardini'03b].

Suite aux stress négatifs appliqués, c'est à dire l'injection d'électrons de la grille vers le substrat, on observe une chute du courant plus importante du côté des tensions V_G négatives. De façon symétrique par rapport aux stress négatifs, pour des stress positifs, la diminution du courant Fowler-Nordheim est plus prononcée pour les tensions de grille V_G positives que pour les tensions de grille négatives (cf. Fig. (II.35.b)).

II.6.6. Détermination de Qox (Δy)

Les dissymétries, observées lors de la diminution du courant, suggèrent une répartition non uniforme des charges piégées dans l'isolant avec par exemple une concentration plus importante de charges près du substrat après des stress positifs. A partir de ces observations, nous nous proposons de comparer trois types de répartition dans l'isolant : uniforme, Gaussienne et exponentielle.

Supposons, tout d'abord, que la distribution spatiale de charges fixes piégées dans l'oxyde soit uniforme. Dans un premier temps, nous calibrons notre simulateur à partir de la caractéristique correspondante à la capacité vierge donnée sur la figure (II.35.b). En effet, en supposant que pour une structure vierge la charge dans l'oxyde soit nulle $(Q_{ox} = Q_0 = 0 \text{ C.m}-3)$, comme le courant tunnel est proportionnel à la fréquence d'impact des électrons (F_{imp}) et à la masse de l'électron dans l'oxyde (m_{ox}), nous modifions ces deux paramètres jusqu'à reproduire la courbe mesurée (cf. ronds noirs de la figure (II.36.a)). Cette figure présente également deux autres mesures, relatives aux caractéristiques I(V) tracées pour des tensions V_{GB} positives après deux stress cumulés à $V_G = 8V$ (symbolisées par des ronds vides et des carrés noirs). Considérons les charges uniformément réparties dans l'oxyde, Q_1 et Q_2 , piégées respectivement durant les deux stress positifs étudiés. En modifiant les valeurs de Q_1 et Q_2 , implémentées dans notre simulateur, nous obtenons les courbes présentées à la figure (II.36.a).





Figure II.36. Fits des caractéristiques I(V) mesurées après un stress $V_G = 8V$ pour des tensions V_{GB} positives (**a**), à partir des distributions uniformes Q_1 et Q_2 (**b**) et comparaisons entre mesures et simulations de la caractéristique I-V pour des tensions de grille négatives pour les mêmes valeurs de Q_1 et Q_2 (**c**). Q_0 est la distribution de charge de la courbe vierge servant de référence pour calibrer notre simulateur.

A partir des valeurs obtenues pour Q_1 et Q_2 , (voir Fig. (II.36.b)), les simulations des caractéristiques I(V) pour des tensions de grille V_{GB} négatives ont aussi été réalisées. Dans ce cas, la figure (II.36.c) témoigne de l'impossibilité de reproduire les résultats expérimentaux mesurés (symbolisés par des ronds vides et des carrés noirs), par des simulations réalisées avec une répartition Q_{0x} uniforme déterminée à partir des caractéristiques I(V) tracées pour des tensions V_{GB} positives.

De la même manière, des résultats similaires ont été obtenus en déterminant la distribution de charges fixes Q_1 et Q_2 à partir du fit des mesures reportés sur la figure

(II.36.c), pour des tensions V_{GB} négatives, puis en simulant les caractéristiques I(V) pour les tensions V_{GB} positives. Par conséquent, il est impossible d'obtenir les résultats expérimentaux par simulation, en utilisant une même répartition Q_{ox} uniforme à la fois pour des tensions positives et négatives.

Supposons, à présent, que la répartition de la charge soit de type Gaussienne. Nous obtenons une bonne corrélation entre mesures et simulations lorsque le maximum de cette gaussienne est très proche de l'interface. Cependant, comme le montrent les figures (II.37), les meilleurs résultats sont obtenus en considérant une répartition de type exponentielle décroissante à partir de l'interface avec le substrat. Les courbes $Q_{ox}(y)$ extraites à partir de la comparaison mesures-simulations sont données sur la figure (II.37.b) pour trois temps de stress cumulatifs.

La loi suivie par la distribution de la charge piégée s'écrit alors sous la forme suivante :

$$Q_{ox} = Q_{max} \exp\left(\frac{-y}{\lambda}\right) + Q_{min}$$
(II. 66)

où λ est une longueur caractéristique.

Les principaux paramètres de ces courbes sont regroupés dans le tableau (II.1) ce qui met en évidence l'augmentation de Q_{max} et λ en fonction du temps de stress.

Courbes	Temps de stress (min)	Qmax (×104 Cm ⁻³)	λ(nm)
Q_{0}	0	0	0
Q_1	16	-300	1.1
Q_2	70	-375	1.325
Q_{3}	208	-382	1.625

Tableau II.1. Evolution des principaux paramètres de la répartition spatiale de la charge piégée en fonction du temps de stress [Bernardini'03b].

Cette augmentation de λ correspond aussi à un mouvement des charges piégées vers l'intérieur de l'isolant pendant le stress électrique. Ce type de répartitions en exponentielles décroissantes ainsi que leurs augmentations en stress ont déjà été observés pour les pièges proches de l'interface par pompage de charge à deux niveaux (signal carré) [Maneglia'99]. Si on se réfère à l'équation (II.52), on peut aussi remarquer que la probabilité de trouver un électron à une certaine distance de l'interface est donnée par une exponentielle décroissante (si l'on suppose une barrière trapézoïdale). Cela implique qu'il y a plus d'électrons qui peuvent être piégés près de l'interface que loin de celle-ci.





Figure II.37. Fits des caractéristiques I(V) mesurées après un stress $V_G = 8V$ pour des tensions V_{GB} positives (**a**), à partir des distributions en exponentiel décroissante de la charge piégée durant ces stress (**b**) et comparaisons entre mesures et simulations de la caractéristique I-V pour des tensions de grille négatives pour les mêmes valeurs Qox (**c**) [Bernardini'03b].

Notons, que le décalage entre deux courbes successives de courant augmente avec le temps de stress et la valeur de la tension de stress appliquée.

II.6.7. Origine de la charge fixe générée dans l'oxyde

Afin de trouver une explication possible quant à l'origine des charges Q_{0x} mesurées, nous avons étudié la variation temporelle de Q_{0x} pour les valeurs reportées dans le tableau (II.1). Considérons la cinétique de remplissage des pièges données par l'expression :

$$N_{trap}(t) = N_{tot} [1 - \exp(-\sigma(e))]$$
(II.67)

où N_{tot} est la densité totale de pièges, e la densité d'électrons injectés et σ la section de capture des pièges.

Le tracé des points obtenus à partir des données du tableau (II.1) est présenté sur la figure (II.38). Les valeurs obtenues à partir de ce fit sont : $N_{tot} = 2 \times 10^{13}$ cm⁻² et et $\sigma = 6 \times 10^{-20}$ cm². Cette valeur de σ est proche de celle d'un centre de piège neutre relié à un groupement hydroxyle, comme un centre Si-O-H.



Figure II.38. Etude cinétique des charges piégées, Q_{ox} à partir des valeurs du tableau (II.1).

Afin d'affiner notre étude de la cinétique des pièges, de nouvelles courbes $Q_{ox}(t)$ ont été étudiées (cf. Fig. (II.39)).



Figure II.39. Evolution de la résolution spatiale de la charge piégée en fonction du temps de stress [Bernardini'04b].

Comme le montre la figure (II.40.a), l'utilisation de l'expression (II.67) de la cinétique de remplissage des pièges dans le cas de l'évolution de la charge Q_{0x} présentée sur la figure (II.39), ne permet pas de retrouver les valeurs extraites à partir de la figure (II.38). En effet, la valeur $\sigma = 1.1 \times 10^{-18}$ cm² extraites à partir du fit de la figure (II.40.a) est trop petite (100 fois plus petite que la valeur typiquement obtenue dans le SiO₂). Un autre modèle a donc été utilisé pour simuler la cinétique de ces charges fixes, Q_{0x} . Le modèle est basé sur la libération d'atomes d'hydrogène due aux impacts des électrons pendant le stress [Brown'91]. Nous supposons que la densité de charges générées durant

un stress, ΔN_{ox} , est proportionnelle au décalage de la courbe de courant mesurée avant et après ce stress, ΔI_G . Durant le stress positif, les électrons sont injectés du substrat vers la grille, puis accélérés et permettent la création de paires électrons-trous. Lors des collisions avec l'interface grille/SiO₂, des électrons cassent les liaisons Si-H induites par la passivation de l'interface du poly-silicium. Les trous créés précédemment peuvent alors réagir avec les atomes d'hydrogène pour produire des ions H⁺. Ces derniers circulent à l'intérieur du diélectrique par sauts aléatoires (random hopping mechanism) vers l'interface Si/SiO₂. A l'interface, les ions H⁺ reprennent un électron au substrat et deviennent très réactifs. Ainsi des atomes d'hydrogène vont générer des défauts de type Si-O-H à l'intérieur de l'oxyde. Ces défauts sont connus pour être des pièges à électrons (venant de l'interface Si/SiO₂) en formant des charges SiO⁻ qui peuvent correspondre aux charges fixes que nous détectons durant les stress à V_G constant [Nicollian'82]. Leur présence serait plus importante près de l'interface Si/SiO₂ à cause de la plus forte probabilité de trouver à la fois des défauts Si-O-H et des électrons.



Figure II.40. Nouvelle étude cinétique des charges piégées, variation de la charge générée Q_{ox} en fonction de la densité d'électrons injectés (**a**) et variation de la charge générée Q_{ox} durant le stress à tension positive constante à partir du modèle de dispersion de l'hydrogène (**b**) [Bernardini'04b].

La variation ΔN_{ox} est donnée par la relation suivante [Houssa'01] :

$$\Delta N_{\text{ox}} = \left(1 - \int_{0}^{1_{\text{SiO}_{2}}} G_{\text{SiO}_{2}}(y) dy\right) N_{\text{H}+}$$
(II.68)

où N_{H+} est la densité de protons générés suite à l'injection d'électron du substrat vers la grille et $G_{SiO2}(y)$ est une fonction liée à la probabilité P(x,t) de trouver un ion H⁺ à la distance x de l'anode au temps t.

La fonction G(y) est une approximation de la fonction décrite par McLean and Ausman [McLean'77]. Dans l'équation (II.68), le paramètre $l_{SiO2} = x_c/l_h t^{\alpha}$, où x_c correspond à la position du centroïd du défaut , l_h est la distance moyenne du saut des protons et α est un paramètre caractérisant la dispersion du transport des protons dans le matériau. En se basant sur les valeurs utilisées pour le SiO₂, nous avons fixé, pour notre étude, $l_h=2.5$ Å et $\alpha=0.3$ [Houssa'01]. La cinétique de génération des charges dans l'oxyde mesurée a été comparée à celle obtenue par le modèle précédemment décrit. La figure (II.40.b) met en évidence le bon accord entre les données extraites des mesures (cercles) et celles obtenues avec le modèle (trait plein). Les valeurs réalistes déterminées par le modèle, $N_{\rm H}$ + = 4×10¹³ cm⁻² et x_c = 3 nm, nous laissent penser que les défauts précurseurs de la génération des charges négatives pourraient être les centres Si-O-H.

II.7. Conclusion

Dans ce chapitre, différentes non uniformités présentes dans les capacités MIS ont été envisagées. Diverses méthodes de modélisation ont été développées pour étudier l'impact de ces non uniformités sur les caractéristiques C-V et I-V des capacités MOS. Les simulateurs utilisés ont été développés sous environnement Mathcad. Dans un premier temps, nous avons étudié la dégradation des courbes C-V induite par la poly-désertion de la grille de la capacité. Puis, nous avons mis en évidence la déformation de la courbe C-V pour un dopage de substrat non constant. Dans le troisième paragraphe, nous avons décrit l'impact d'une non uniformité de l'épaisseur d'isolant d'une capacité, avec des paramètres électriques extraits des courbes C-V et I-V erronés. Le dernier paragraphe présente l'impact des non uniformités des charges fixes dans l'isolant. Une méthode de détermination de la répartition des charges fixes a été développée. Enfin, une origine possible de la charge générée au cours des stress électriques a été envisagée avec la création de centres précurseurs Si-O-H.