

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA

Faculté des Sciences

Département de physique

MEMOIRE DE MAGISTER

En Physique appliquée

Spécialité : Optoélectronique

ANALYSE ET SIMULATION D'UN DISPOSITIF AU SILICIUM
MONOCRISTALLIN ; RESOLUTION SEQUENTIELLE DES
EQUATIONS AU REGIME TRANSITOIRE ;
APPLICATION A UN DETECTEUR DE PARTICULES ALPHA

Par

Allaoua OULEBSIR

Devant le jury Composé de :

M. AOUCHER	: Maître de Conférence ; USTHB	Président
K. FERDJANI	: Maître de Conférence ; USTB	Examineur
A. MAHRANE	: Chargé de Recherche ; UDTS	Examineur
M. BOUMAOUR	: Chargé de Recherche ; UDTS	Rapporteur
M. ZITOUNI	: Attaché de Recherche ; UDTS	Co-Rapporteur

Blida, décembre 1998

RESUME

Les nouvelles technologies et les évolutions spectaculaires des ordinateurs ont imposé l'apparition des nouvelles techniques assistées par ordinateurs permettant à la fois d'avoir une vue du produit fini et de simuler son fonctionnement avant sa réalisation définitive. A la lumière de ces grandes évolutions qui ont touché au secteur des semiconducteurs, ce sujet de thèse a été proposé pour la modélisation d'un dispositif au silicium destiné à la détection. Le présent travail aborde un cas particulier du traitement séquentiel des équations de transport de charges en régime stationnaire et transitoire dans un cas bidimensionnel. Dans ces équations, beaucoup de paramètres physiques et technologiques apparaissent et il est difficile de tenir compte intégralement de tout les aspects ; pour cela, nous avons pris les meilleurs modèles de la littérature pour les paramètres de base. Particulièrement pour les profils de dopage, les étapes : d'implantation ionique, de diffusion, de recuits ont été étudiés en développant des applications et des modèles complémentaires pour le programme PROMIS spécialisé dans la modélisation des process technologiques.

Les principales parties effectuées pour le traitement numérique consistent, pour le cas bidimensionnelle conduisant à un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires de type elliptique, à appliquer la méthode des différences finies qui permet de passer du système continu au système discret, à linéariser les équations en utilisant une méthode séquentielle qui découple totalement les équations avec le schéma de Gummel et enfin résoudre le système linéaire par un schéma itératif. Les conditions aux limites associées aux frontières tiennent compte, en plus, des propriétés de l'interface oxyde-silicium en introduisant un taux de recombinaison en surface.

Pour répondre aux besoins de nos calculs, un programme est soigneusement développé en utilisant le schéma de Mayergoyz en l'améliorant dans l'étape du traitement du système linéaire tout en laissant la possibilité d'utiliser la méthode de Newton si le découplage cause des divergences et instabilités. Dérivée du schéma de Gummel, cet algorithme est globalement convergent et souple à programmer. Les résultats obtenus sont validés en les comparant aux résultats des programmes utilisant d'autres méthodes et algorithmes. En régime stationnaire, ces résultats ont permis une analyse détaillant l'étude de l'évolution du potentiel électrostatique, du champ électrique, de la concentration des électrons et des trous et des densités de courant dans les cas, de l'équilibre thermodynamique, des polarisations directes et inverses et en absence d'excitations externes génératrices de porteurs. Cette analyse a permis aussi de déduire la caractéristique $I(V)$ en concluant que la méthode séquentielle convient mieux dans les cas des faibles niveaux d'injections, cas qui correspondent aux conditions de polarisations et caractéristiques d'un détecteur à jonction.

En adaptant la méthode 'Backward Euler' cet algorithme est étendu au régime transitoire en adaptant une discrétisation temporelle convenable et en introduisant la méthode SOR pour la résolution des systèmes linéaires dans les cas de faibles polarisations. Malgré quelques aspects de difficultés sévères apparaissant lors du traitement transitoire, les résultats obtenus sont bien justifiés par les prévisions de l'approche théorique.

L'étude du dispositif détecteur est complétée enfin par la modélisation de la génération des paires électron-trous sous l'impact des particules ? En utilisant le dépôt d'énergie des particules et l'approche de la densité de courant générée. Cette approche a permis une formulation simple qui ne perturbe pas considérablement la stabilité et la convergence des calculs.

Dans le cas où le dépôt d'énergie dépend du temps par une fonction de modulation (impulsion instantanée d'une particule) le cas transitoire a permis une analyse détaillée dans le temps, de l'évolution du potentiel, du champ et des densités des porteurs ce qui a permis donc de simuler efficacement la réponse temporelle du dispositif.

Nos résultats ont été complétés enfin par une comparaison de la caractéristique résultante de notre simulation à celle d'un détecteur réel de type P+N réalisé technologiquement par ailleurs. L'accord avec les mesures expérimentales est considéré parfait tout en expliquant les dérives par les erreurs de discrétisation spatiales et temporelle qui s'introduisent dans les travaux de simulation et les modèles physiques des paramètres des équations qui doivent tenir compte des données technologiques d'une façon plus précise, ce qui ouvre des perspectives intéressantes pour plusieurs travaux futurs.

ABSTRACT

The new technologies and the spectacular evolutions of computers imposed the new technics apparition of Computer Aided Design permitting to have a view of finished product and to simulate its working before the final realization. To the light of these big evolutions that regarding the semiconductors sector, this thesis topic has been proposed for the device numerical analysis of silicon detectors. The ongoing work lands a particular case of the sequential treatment of carriers transport equations in stationary and transient regime and in a two-dimensional case. In these equations, a lot of physical and technological parameters appear and it is difficult to fully hold amount of all the aspects; therefore, we picked up the best models used in the literature for modeling the basic parameters. Particularly the numerical models of the doping profiles steps, ion implantation, diffusion and annealing used in simulation have been studied by developing applications and complementary models for the PROMIS program specialized in the numerical modeling of technological process.

The main parts done for the numeric treatment consist, for the two-dimensional case leading to a partial derivatives system of elliptic nonlinear equations, in order, to apply the method of finite differences to shift from the continuous system to the discreet system, to linearize equations using a sequential method that uncouples equations completely with the Gummel algorithm, finally, to solve the linear system by an iterative method. The boundary conditions associated to the borders hold amount the properties of the oxide-silicon interface by introducing a rate of surface recombination.

A complete program is developed carefully using the Mayergoyz algorithm by improving its own step of the linear system treatment. Allowing the possibility use of the Newton method if the equations uncoupling causes divergences and instabilities. Derived from the Gummel algorithm, this method is globally convergent and flexible to program. The gotten results are validated by comparing them to the results of other programs using other methods and algorithms.

In stationary regime, these results have permitted a precise analysis of the evolution of the electrostatic potential, the electric field, the carrier concentrations and current densities. All these results concern the cases of the thermodynamic equilibrium, direct and inverse polarizations and without external excitation that can generate carriers. This analysis also permitted to deduce the $I(V)$ characteristic while concluding that the sequential method agrees better in cases of the weak injections levels, this last corresponds to the conditions of polarizations and characteristics of a junction detectors.

Adapting the Backward-Euler's method, this algorithm is spread to the transient case using an appropriate temporal discretization to the used algorithm. We introduce the SOR method for the linear system resolution in cases of weak polarizations. In spite of some crucial difficulties aspects appearing at this transient treatment, the gotten results are well justified by the theoretical approach forecasts.

The device detector study is finally completed by the modelization of electron-hole pairs generation under the alpha particles impact. Using the particle deposit energy and the approach of the generated current density, this approach allowed a simple formulation that doesn't considerably disturb the stability and the convergence of calculations.

In case of the energy deposit is a time dependant by a modulation function (instantaneous impulse of a particle), the transient case permitted a precise time analysis evolution of the potential, the field and carriers densities, which has permitted us to simulate appropriately the temporal answer of the device.

Our results have finally been completed by a comparison of the characteristic resulting from our simulation to other given by the real measurements of a P+N detector technologically realized in somewhere else studies. The agreement with the applied measures is considered perfect while explaining the drifts by, the spatial and time discretization errors introduced in all simulation studies and the physical models errors of equation parameters that must contain few amount of technological data, which opens a very interesting perspectives of several future works.

—

.Promis

Gummel

Mayergoyz

Newton

Gummel

I(V)

'Backward Euler'

SOR

α

P⁺N

REMERCIEMENTS

Ce Travail a été effectué au Laboratoire d'Analyse et Simulation de l'Unité de Développement de la Technologie du Silicium (Alger) en convention avec le Département de Physique de l'Institut des Sciences Exactes de l'Université de Blida.

Je voudrais exprimer ma profonde gratitude et mes vifs remerciements à Monsieur M. BOUMAOUR, Directeur de L'UDTS, encadreur de cette thèse pour son accueil, son suivi, son aide, ses conseils, ses encouragements et tout les efforts fournis pour l'élaboration de ce travail et ce, avec beaucoup de patience, de bienveillance et de sagesse. Je lui en suis très profondément reconnaissant.

J'adresse mes sincères remerciements et mon profond respect à Madame M. ZITOUNI pour sa collaboration, ses orientations et ses conseils. Elle a toujours été disponible pour discuter et développer toute question qui a touché de près ou de loin au bon avancement de mes travaux.

Je remercie vivement Monsieur M. AOUCHER, Responsable du Laboratoire des Couches Minces de l'Institut de Physique de l'USTHB qui m'a fait l'honneur d'accepter de présider le jury de cette thèse.

Messieurs, A. MAHRANE Chargé de recherche à l'UDTS et K. FERDJANI Maître de Conférence à l'Institut d'Electronique de l'Université de Blida, ont accepté avec bienveillance d'être examinateurs de ce travail. Je suis très reconnaissant pour leur apport et je les remercie de l'intérêt qu'ils ont témoigné pour mon travail.

Il était très difficile et très triste de faire part de mes remerciements à titre posthume au défunt Dr F. BOUFLAGHEM, initiateur de ce travail à l'UDTS. La collaboration et l'amitié qu'il m'a témoignées étaient exemplaires.

Que les responsables, Monsieur M. DERBAL Directeur de l'Institut des Sciences Exactes, Monsieur, M. SIDOUMOU Directeur Chargé de la postgraduation et de la recherche, Monsieur, BENTIBA Directeur du département de physique, trouvent ici mes sincères remerciements pour leurs soutiens au cours de ma formation.

Je voudrais exprimer ma profonde gratitude et remercier vivement Monsieur O. CHIBANI, Chargé de Recherche au Centre de Radioprotection et Sûreté pour sa contribution et sa compréhension. Pour tout et pour la confiance et l'amitié qu'il m'a témoignée j'étais très sensible, je le remercie.

Je remercie Monsieur M. SIAD, Chargé de Recherche au Centre de Développement des Techniques Nucléaires pour sa collaboration dans l'étude des détecteurs semiconducteurs. Il a toujours été disponible pour répondre à mes questions et a fait de son mieux pour contribuer d'une façon très fructueuse à l'avancement de ce travail.

Nombreux sont ceux qui m'ont apporté leur aide à un moment ou à un autre, d'une façon ou d'une autre, de loin ou de près, Je voudrais remercier particulièrement :

- Monsieur D. OUADJAOUT pour son ouverture, pour la confiance et l'amitié qu'il m'a témoignées.
- Monsieur T. HEDJERSI pour son aide et sa collaboration.
- Monsieur O. MANSERI pour son soutien et sa gentillesse.
- Monsieur A. HARKATI pour son amitié et sa compréhension.

Je voudrais exprimer ma plus vive reconnaissance et adresser mes sincères remerciements au Docteur Md. C. IRATENE, Résident au CHU de Ain-Taya pour son aide surtout dans les moments difficiles, et Mr D. MOUSSA Maître Assistant à l'Institut de physique USTHB pour sa compréhension et sa contribution.

Enfin que, tous mes collègues de l'université de Blida, particulièrement S. Sid-Ali, Enseignant à l'Institut d'Aéronautique, tous les membres du laboratoire matériaux du département de physique, le personnel de l'UDTS, le personnel de la sarl microdos et les membres de la Direction de la société sanamed soient assurés de mes sincères remerciements pour leur soutien et leur encouragement.

TABLE DES MATIERES

RESUMES	01
REMERCIEMENTS	06
TABLES DES MATIERES	08
LISTES DES FIGURES	10
INTRODUCTION	15
1. LES EQUATIONS DE TRANSPORT DANS LES SEMICONDUCTEURS	17
1.1 Introduction	17
1.2 Rappels des équations de Maxwell	17
1.3 Concentration des porteurs	18
1.4 Equations de base des semiconducteurs	19
1.5 Jonction PN	21
1.6 Conclusion	23
2. MODELISATION DES PARAMETRES DES EQUATIONS DE TRANSPORT DES SEMICONDUCTEURS	24
2.1 Introduction	24
2.2 Implantation ionique	24
2.3 Diffusion	28
2.4 Effets des forts dopages	29
2.5 Génération et Recombinaison des porteurs de charges	30
2.6 Mobilités des porteurs	33
2.7 Conclusion	34
3. METHODES DE RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS DE TRANSPORT D'UN DISPOSITIF A SEMICONDUCTEUR	35
3.1 Introduction	35
3.2 Normalisation des équations	35
3.3 Variables du système d'équations	37
3.4 Discrétisation des équations	37
3.4.1 Réseau de discrétisation	38
3.4.2 Technique de discrétisation	38
3.4.3 Discrétisation de l'équation de Poisson	40
3.4.4 Discrétisation des équations de continuité	42
3.5 Linéarisation des équations	47
3.5.1 Méthode de Newton Raphson	47
3.5.2 Méthode de Gummel	48
3.6 Résolution numérique du système linéaire	49
3.7 Conclusion	51
4. RESOLUTION SEQUENTIELLE DES EQUATIONS DU SEMICONDUCTEUR	52
4.1 Introduction	52

4.2 Principes de la méthode résolution séquentielle	52
4.2.1 Formulation des équations	53
4.2.2 Discrétisation des équations	53
4.2.3 Algorithmes de résolution	55
4.3 Application au cas d'un dispositif à jonction P ⁺ N	62
4.3.1 Le dispositif	62
4.3.2 Le profil du dopage	63
4.3.3 Le réseau de discrétisation	68
4.3.4 Les solutions à l'équilibre thermodynamique	68
4.3.5 Les solutions hors équilibre	80
4.3.5.1 Cas des polarisations inverses	82
4.3.5.2 Cas des polarisations directes	95
4.3.6 Caractéristique courant tension	107
4.4 Conclusion	110
5. LES EQUATIONS AU REGIME TRANSITOIRE	111
5.1 Introduction	111
5.2 Modèle de la discrétisation temporelle	111
5.3 Algorithme de résolution des équations en régime transitoire	113
5.4 Evolution temporelle des solutions	114
5.5 Conclusion	124
6. MODELISATION ET SIMULATION D'UN DETECTEUR DE PARTICULES ALPHA AU SILICIUM	125
6.1 Introduction	125
6.2 Hypothèses de bases	126
6.3 Modélisation de la fonction de génération	128
6.4 Profil de la concentration des paires électrons-trous générées	130
6.5 Influence des particules alpha sur le potentiel	132
6.6 Influence des particules sur la concentration des porteurs	133
6.7 Réponse transitoire du détecteur	137
6.8 Conclusion	141
7. REALISATION DES DETECTEURS A JONCTIONS P+N IMPLANTEE	142
7.1 Introduction	142
7.2 L'oxydation	142
7.3 La Photolithographie	143
7.4 L'implantation ionique	146
7.5 La métallisation	146
7.6 Résultats expérimentaux	146
7.7 Conclusion	149
CONCLUSION	150
APPENDICES	153
REFERENCES	162

LISTE DES FIGURES

Figure 3.1	: Géométrie du maillage bidimensionnel des différences finies	38
Figure 3.2	: Schéma des différences finies à cinq points	39
Figure 3.3	: Schéma de discrétisation aux frontières	40
Figure 4.1	: Organigramme de résolution séquentielle des équations	56
Figure 4.2	: Organigramme de résolution de l'équation de Poisson	57
Figure 4.3	: Organigramme de résolution de l'équation de continuité des électrons	58
Figure 4.4	: Organigramme de résolution de l'équation de continuité des trous	59
Figure 4.5	: Structure tridimensionnelle et projection bidimensionnelle du dispositif	62
Figure 4.6	: Profil du dopage le long d'une ligne verticale sous le métal et loin de l'oxyde	63
Figure 4.7	: Contour du profil du dopage	64
Figure 4.8	: Vue tridimensionnelle du profil du dopage	64
Figure 4.9	: Comparaison du profil du dopage à celui obtenu avec Promis	65
Figure 4.10	: Le profil du dopage des différentes distributions verticales obtenu par simulation promis	65
Figure 4.11	: Concentration du bore implanté à (60 KeV et 10^{14} cm ⁻²) après recuit à différentes températures (t= 10 mn)	66
Figure 4.12	: Concentration du bore implanté à (60 KeV et 10^{14} cm ⁻²) après recuit pour différents temps	67
Figure 4.13	: Concentration de l'arsenic implanté à (100 KeV et 10^{15} cm ⁻²) dans le silicium après recuit rapide pour différents temps	67
Figure 4.14	: Maillage bidimensionnel construit par la méthode des différences finies	68
Figure 4.15	: Variation spatiale des mobilités et des durées de vie des porteurs	69
Figure 4.16	: Vue tridimensionnelle de la concentration intrinsèque effective	69
Figure 4.17	: Concentration intrinsèque effective	70
Figure 4.18	: Evolution de la précision de la boucle externe de l'équation de Poisson	71
Figure 4.19	: Evolution de l'erreur de la boucle de Gummel	71
Figure 4.20	: Le potentiel électrostatique à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal.	72
Figure 4.21	: Le potentiel électrostatique à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal et au voisinage de la jonction	72
Figure 4.22	: Lignes équipotentielles à l'équilibre	73
Figure 4.23	: Contour du potentiel électrostatique à l'équilibre	73
Figure 4.24	: Le potentiel électrostatique à l'équilibre	74

Figure 4.25 :	Concentration des électrons et des trous à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal	75
Figure 4.26 :	Concentration des électrons et des trous à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal et au voisinage de la jonction	75
Figure 4.27 :	Concentration des électrons à l'équilibre	76
Figure 4.28 :	Concentration des trous à l'équilibre	76
Figure 4.29 :	Potentiel de Fermi des électrons et des trous	77
Figure 4.30 :	Variation du champ électrique le long d'une ligne sous le métal	77
Figure 4.31 :	Contour et profil du champ électrique à l'équilibre	78
Figure 4.32 :	Le profil du dopage simulé avec PC-1D	78
Figure 4.33 :	Comparaison du potentiel électrostatique obtenu avec le programme et PC-1D	79
Figure 4.34 :	Comparaison de la concentration des porteurs obtenue avec le programme et PC-1D	79
Figure 4.35 :	Evolution de la précision de la boucle externe du schéma de Mayergoyz et celle de Newton pour le potentiel (à - 0.1 V)	81
Figure 4.36 :	Evolution de la précision de la boucle externe du schéma de Mayergoyz et celle de Newton pour l'équation des électrons	81
Figure 4.37 :	Evolution de la précision de la boucle interne utilisant la méthode SOR	82
Figure 4.38 :	Le potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions inverses	82
Figure 4.39 :	Le potentiel électrostatique sous l'oxyde pour différentes tensions inverses	83
Figure 4.40 :	Champ électrique sous le métal pour différentes tensions inverses	83
Figure 4.41 :	Champ électrique sous l'oxyde pour différentes tensions inverses	84
Figure 4.42 :	Variation du potentiel en profondeur latérale	84
Figure 4.43 :	Contour du potentiel pour différentes tensions inverses	85
Figure 4.44 :	Potentiel électrostatique sous une polarisation inverse de 0.2 v	85
Figure 4.45 :	Potentiel électrostatique sous une polarisation inverse de 1 v	86
Figure 4.46 :	Contour du potentiel électrostatique pour différentes tensions inverses	86
Figure 4.47 :	Concentration des électrons sous le métal pour différentes tensions inverses	87
Figure 4.48 :	Concentration des électrons au voisinage de la jonction pour différentes tensions inverses.	88
Figure 4.49 :	Concentration des électrons sous l'oxyde pour différentes tensions inverses.	88
Figure 4.50 :	Variation en profondeur latérale de la concentration des électrons pour différentes tensions inverses.	89
Figure 4.51 :	Concentration des électrons sous une polarisation inverse de 0.2 v	89
Figure 4.52 :	Concentration des électrons sous une polarisation inverse de 0.8 v	90
Figure 4.53 :	Concentration des trous sous le métal pour différentes tensions inverses	90
Figure 4.54 :	Concentration des trous autour de la jonction pour différentes tensions inverses	91

Figure 4.55 :	Concentration des trous sous l'oxyde pour différentes tensions inverses	91
Figure 4.56 :	Variation en profondeur latérale de la concentration des trous en fonction de la tension inverse	92
Figure 4.57 :	Concentration des trous sous une polarisation inverse de 0.2 v	93
Figure 4.58 :	Concentration des trous sous une polarisation inverse de 0.8 v	93
Figure 4.59 :	Concentration des électrons et des trous pour différentes tensions inverses	94
Figure 4.60 :	Potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions directes	95
Figure 4.61 :	Potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions directes et au voisinage de la jonction	96
Figure 4.62 :	Potentiel électrostatique sous l'oxyde pour différentes tensions directes	96
Figure 4.63 :	Champ électrique sous le métal pour différentes tensions directes	97
Figure 4.64 :	Champ électrique sous l'oxyde pour différentes tensions directes	97
Figure 4.65 :	Pic du champ électrique et le point d'inflexion de la courbe du potentiel (à 0.3 v)	98
Figure 4.66 :	Variation du potentiel électrostatique en profondeur latérale	98
Figure 4.67 :	Contour du potentiel électrostatique pour différentes tensions directes	99
Figure 4.68 :	Potentiel électrostatique sous une tensions directe de 0.2 v	99
Figure 4.69 :	Potentiel électrostatique sous une tensions directe de 0.5 v	100
Figure 4.70 :	Concentration des électrons pour différentes tensions directes	100
Figure 4.71 :	Concentration des électrons au voisinage de la jonction pour différentes tensions directes	101
Figure 4.72 :	Concentration des électrons sous l'oxyde pour différentes tensions directes	101
Figure 4.73 :	Variation de le concentration des électrons en profondeur latérale pour différentes tensions directes	102
Figure 4.74 :	Concentration des électrons sous une tensions directe de 0.2 v	102
Figure 4.75 :	Concentration des électrons sous une tensions directe de 0.5 v	103
Figure 4.76 :	Concentration des trous pour différentes tensions directes	103
Figure 4.77 :	Concentration des trous au voisinage de la jonction pour différentes tensions directes	104
Figure 4.78 :	Concentration des trous sous l'oxyde pour différentes tensions directes	104
Figure 4.79 :	Variation en profondeur latérale de la concentration des trous pour différentes tensions directes	105
Figure 4.80 :	Concentration des trous sous une tensions directe de 0.2 v	105
Figure 4.81 :	Concentration des trous sous une tensions directe de 0.5 v	106
Figure 4.82 :	Concentration des électrons et des trous pour différentes tensions directes	106
Figure 4.83 :	Comparaison de la caractéristique en directe obtenue avec notre programme et celle de PC1D pour une même structure unidimensionnelle	107

Figure 4.84 :	Comparaison de la caractéristique en inverse obtenue avec notre programme et celle de PC-1D pour une même structure unidimensionnelle	108
Figure 4.85 :	Caractéristique courant - tension en directe	108
Figure 4.86 :	Caractéristique courant - tension en inverse	109
Figure 5.1 :	Organigramme de la résolution des équations en régime transitoire	114
Figure 5.2 :	Le potentiel électrostatique à différents instants	115
Figure 5.3 :	Le potentiel électrostatique sous l'oxyde à différents instants	115
Figure 5.4 :	Le potentiel électrostatique au voisinage de la jonction à différents instants	116
Figure 5.5 :	Contour du potentiel électrostatique à différents instants	116
Figure 5.6 :	Le potentiel électrostatique à l'instant $t=2$ ns	117
Figure 5.7 :	Le potentiel électrostatique à l'instant $t=10$ ns	117
Figure 5.8 :	Le champs électrique à différents instants	118
Figure 5.9 :	Concentration des électrons à différents instants	118
Figure 5.10 :	Concentration des électrons au voisinage de la jonction à différents instants	119
Figure 5.11 :	Concentration des électrons à l'instant $t = 2$ ns	119
Figure 5.12 :	Concentration des électrons à l'instant $t = 20$ ns	119
Figure 5.13 :	Concentration des trous aux instants $t=2$ ns et 50 ns	120
Figure 5.14 :	Concentration des trous au voisinage de la jonction à différents instants	120
Figure 5.15 :	Concentration des trous à l'instant $t = 2$ ns	121
Figure 5.16 :	Courbe de réponse du dispositif	122
Figure 5.17 :	Evolution du potentiel électrostatique ($t=0$ $V=0.2$ v ; $t>0$ $V=0.4$ v)	122
Figure 5.18 :	Evolution de la concentration des électrons ($t=0$ $V=0.2$ v ; $t>0$ $V=0.4$ v)	123
Figure 5.19 :	Courbe de réponse du dispositif en variant la polarisation inverse de 0.2 v à 0.4v	123
Figure 6.1 :	Structure tridimensionnelle du détecteur	127
Figure 6.2 :	Parcours des charges générées avec des particules incidentes sur P^+	128
Figure 6.3 :	Dépôt d'énergie des particules alpha dans le silicium	130
Figure 6.4 :	Concentration des électrons et des trous générées le long du parcours des particules alpha	131
Figure 6.5 :	Taux de recombinaison SRH et Auger pour une polarisation du dispositif de 10 V en inverse	131
Figure 6.6 :	Taux de génération des porteurs par les particules alpha pour une polarisation du dispositif de 10V en inverse	132
Figure 6.7 :	Potentiel électrostatique sous une polarisation de 10V et en présence des particules	132
Figure 6.8 :	Concentration des électrons en présence et en absence des particules sous une polarisation inverse de 10V	133
Figure 6.9 :	Concentration des électrons en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V	133
Figure 6.10 :	Contour de la concentration des électrons en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V	134

Figure 6.11 :	Concentration des trous en présence et en absence des particules sous une polarisation inverse de 10V	134
Figure 6.12 :	Concentration des trous en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V	135
Figure 6.13 :	Contour de la concentration des trous en présence des Particules sous une polarisation inverse de 10V	135
Figure 6.14 :	Concentration des électrons et des trous sous une polarisation inverse de 10V	135
Figure 6.15 :	Caractéristique courant tension en inverse du détecteur de la figure 6.1	136
Figure 6.16 :	Forme de la fonction de modulation transitoire du terme de génération	138
Figure 6.17 :	Terme de génération à différents instants (a) électrons (b) trous	138
Figure 6.18 :	Evolution de la concentration des électrons (a) et des trous (b)	139
Figure 6.19 :	Concentration des électrons à l'instant $t = 6$ ns	139
Figure 6.20 :	Concentration des électrons à l'instant $t = 10$ ns	139
Figure 6.21 :	Concentration des trous à l'instant $t = 6$ ns	140
Figure 6.22 :	Concentration des trous à l'instant $t = 10$ ns	140
Figure 6.23 :	Impulsion du courant induit	141
Figure 7.1 :	Les différentes étapes technologiques d'élaboration de détecteurs	144
Figure 7.2 :	Les différentes étapes de la photolithographie	145
Figure 7.3 :	Description schématique d'un implanteur	146
Figure 7.4 :	Caractéristique courant tension du dispositif réalisé	147
Figure 7.5 :	Chaîne de spectrométrie nucléaire pour le test de détection	148
Figure 7.6 :	Spectre de particules α de ^{241}Am pour un détecteur à jonction implantée P ⁺ N.	148

INTRODUCTION

L'avènement dans l'industrie de l'ordinateur et ses évolutions spectaculaires ont complètement modifié les méthodes de production en raccourcissant les temps de développement et en s'affranchissant des tâches répétitives et fastidieuses pour laisser aux concepteurs les travaux les plus créatifs. De nouvelles techniques assistées par ordinateurs sont apparues, prenant le pas sur les méthodes traditionnelles et manuelles ; Elles permettent à la fois d'avoir une vue du produit fini, de le modifier le cas échéant, et de simuler son fonctionnement avant sa réalisation définitive.

Dans les technologies des semiconducteurs un composant conçu de manière traditionnelle passe par des phases de formalisation du problème, d'optimisation des étapes de fabrication, d'essais et de mise au point de prototypes. La conception assistée par ordinateur met à la disposition des équipes de conception et d'analyse des outils permettant d'optimiser tous les flux d'informations et permet d'évaluer les conséquences des choix tout en laissant la possibilité d'explorer rapidement d'autres solutions à un haut niveau d'abstraction et en début du cycle de conception.

La simulation est l'étape la plus importante d'une conception puisque c'est elle qui, à partir d'un modèle du système étudié, validera son fonctionnement. Elle est d'autant plus incontournable que le système est complexe. En effet, plus les erreurs seront détectées en amont dans le cycle de conception et de fonctionnement moins elles auront d'influence sur la compétitivité du produit. Plus les modèles sont complexes, plus les ressources de calcul et de mémoire doivent être importantes et le temps de simulation peut devenir rédhibitoire. On est amené actuellement à ne simuler que des sous-ensembles et des structures simples. Des informations industrielles récentes font état de campagnes de simulation fonctionnelle de 3 semaines pour un circuit intégré vidéo d'une complexité de 700000 transistors. Ces simulations se font sur une station de travail puissante. Les chercheurs tentent de réduire la durée de ces simulations en introduisant des algorithmes d'accélération et en utilisant de supercalculateurs ou des machines dédiées. La répartition des simulations a fait l'objet de plusieurs recherches et théories, notamment sur les algorithmes capables d'exploiter la concurrence intrinsèque des modèles.

Dans ce domaine de simulation, différents travaux s'effectuent à l'Unité de Développement de la Technologie du Silicium (UDTS). Ils ont abouti à la maîtrise des modèles et les techniques numériques utilisées dans l'étude des cellules solaires et la mise en œuvre des programmes adaptés. Ce présent travail s'intègre dans les activités du laboratoire d'analyse et simulation de l'UDTS. L'objectif est d'élaborer des outils de modélisation d'autres composants conçus au sein de l'Unité, à savoir les détecteurs à jonctions. D'importants logiciels de calcul numérique bidimensionnel ont déjà été développés, consacrés jusqu'à présent à l'étude de nouvelles conceptions de cellules photovoltaïques ; nous citerons la cellule à émetteur sélectif dont l'analyse se base sur :

- La résolution simultanée des équations de base du semiconducteur

- Le régime permanent
- La génération des porteurs par les photons

Ce travail s'inscrit dans la parfaite continuité et complémentarité de ces travaux : Il s'intéresse à un dispositif détecteur solide en se basant sur la résolution séquentielle des équations. A ce propos nous proposons de développer le régime transitoire et un modèle numérique du terme de génération.

Ce document est subdivisé en quatre parties :

- La première composée des trois premiers chapitres consiste à donner brièvement les équations de transport, les paramètres physiques et les modèles numériques qui seront utilisés dans le programme de simulation bidimensionnelle. Nous présentons au chapitre 3 les méthodes numériques de résolution du système d'équations d'un semiconducteur et nous décrivons la méthode séquentielle utilisée dans les régimes de fonctionnement en faible injection.
- La deuxième partie composée des chapitres 4 et 5 consiste à développer le programme de résolution séquentielle des équations au régime stationnaire et transitoire. La méthode séquentielle utilisée se base sur les travaux les plus récents de plusieurs auteurs. Ce programme permet de calculer la distribution spatiale et temporelle du potentiel électrostatique et des densités des porteurs ainsi que la caractéristique courant - tension du dispositif.
- La troisième partie composée du sixième chapitre est consacrée à l'application des modèles et les méthodes citées précédemment au cas d'un détecteur de particule α . Pour cela un modèle est développé pour décrire le terme de génération des paires électrons-trous sous l'impact de l'interaction des particules α avec le silicium.
- La dernière partie enfin est consacrée à la description des étapes expérimentales pour la réalisation des détecteurs P^+NN^+ par implantation ionique.

L'ensemble de ces parties est complété par deux annexes ; la première décrit la structure du programme que nous avons développé, son mode de fonctionnement et la gestion des entrées sorties ; Le deuxième décrit la structure du programme spécialisé dans la simulation des procédés d'implantation ionique.

En plus de la documentation mise à notre disposition, les moyens de calculs sont :

- Le VAX 785 sous VMS 4.0. Ce système offre des avantages en gestion mémoire mais il présente l'inconvénient d'une vitesse très lente et d'une limite en gestion des nombres réels en virgule flottante. Ceci est observé dans plusieurs applications du programme PROMIS.
- Le PC 486 et Pentium. Les problèmes précédents n'apparaissent pas dans ce genre de machines disposant, plus de 8 Mo de mémoire vive, un microprocesseur intégrant un coprocesseur arithmétique et une horloge d'au moins 100 MHz.
- Le langage de programmation est en général le FORTRAN en 32 bits pour PC : F77L-EM/32 Version 5.01 LAHEY Computer System 1992 pour les applications sous le système d'exploitation MSDOS et Microsoft FORTRAN Visual Workbench 1993 pour les applications sous l'environnement Windows 3.x ou Windows 95.

CHAPITRE 1

LES EQUATIONS DE TRANSPORT DANS LES SEMICONDUCTEURS

1.1 Introduction :

Tout dispositif est le siège de phénomènes physiques microscopiques qui agissent sur ses propriétés macroscopiques. Nous pouvons analyser et interpréter ces propriétés pour déduire les caractéristiques et les performances du dispositif. L'étude se basant sur une modélisation mathématique des phénomènes physiques nous donne un ensemble d'équations de base. Ces équations peuvent être résolues moyennant des considérations approximatives qui justifient leur validité en tenant compte des conditions de fonctionnement du dispositif.

Dans le cas des dispositifs semiconducteurs, l'étude la plus fondamentale consiste à suivre l'évolution du potentiel électrostatique et de l'état des porteurs de charges électriques, les électrons et les trous. Ces grandeurs sont issues des notions fondamentales de la théorie de transport dans les semiconducteurs, elles forment la base théorique des travaux de simulation [1], [2], [9].

1.2 Rappels des équations de Maxwell :

Les équations fondamentales qui décrivent l'état électrique d'un milieu se déduisent des équations de Maxwell de l'approche électromagnétique classique. [1,...,4], [8]

$$\mathbf{rot. E} = - \frac{d\mathbf{B}}{dt} \quad (1.1)$$

$$\mathbf{rot. B} = \frac{d\mathbf{D}}{dt} + \mathbf{J} \quad (1.2)$$

$$\mathbf{div D} = -\rho \quad (1.3)$$

$$\mathbf{div B} = 0 \quad (1.4)$$

\mathbf{E} est le vecteur champ électrique, \mathbf{D} est le vecteur induction électrique, \mathbf{B} est le vecteur champ magnétique, \mathbf{J} est la densité totale de courant parcourant le milieu, ρ est la densité volumique de charge électrique.

Pour un matériau semiconducteur non magnétique, en appliquant la loi de conservation nous dérivons l'équation de Poisson et les équations de continuité auxquelles sont soumis le potentiel électrostatique et les porteurs de charges respectivement.

$$\mathbf{div (grad V)} = - \frac{\rho}{\epsilon} \quad (1.5)$$

$$\mathbf{div J} + \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (1.6)$$

Les équations classiques s'obtiennent de l'approximation des premiers moments de l'équation de transport de Boltzmann [1] [4] [7]. Ces approximations se résument au faits que les porteurs de charges sont soumis à la température du substrat qui est uniforme, et que les autres formes d'interactions électromagnétiques externes sont négligeables.

1.3 Concentration des porteurs :

Pour un matériau de structure énergétique parabolique et isotrope les densités d'états dans la bande de conduction et dans la bande de valence sont fonction de l'énergie et des masses effectives des porteurs. Elles sont données par :

$$D_n(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (1.7)$$

$$D_p(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (1.8)$$

E_c est le niveau d'énergie le plus bas de la bande de conduction., E_v est le niveau d'énergie le plus élevé de la bande de valence. m_n^* et m_p^* sont les masses effectives respectives des électrons et des trous.

La probabilité d'occupation d'un état dans la bande de conduction pour un électron est donnée par la statistique de Fermi Dirac [1] [11] :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} \quad (1.9)$$

E_f est le niveau de Fermi. La probabilité d'occupation d'un état dans la bande de valence pour les trous sera : $f_p(E) = 1 - f_n(E)$

La densité des électrons et des trous se calcule comme suit :

$$n = \int_{E=E_c}^{E_{c\max}} f_n(E) D_n(E) dE \quad (1.10)$$

$$p = \int_{E=E_{v\min}}^{E_v} f_p(E) D_p(E) dE \quad (1.11)$$

L'évaluation exacte de ces intégrales introduit les fonctions intégrales de Fermi d'ordre $\frac{1}{2}$ [5] [6] et nécessite une connaissance préalable des variations de la largeur de la bande interdite.

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_f - E_c}{kT}\right) \quad (1.12)$$

$$p = N_v \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_v - E_f}{kT}\right) \quad (1.13)$$

Où N_c et N_v sont respectivement les densités d'état effectives dans la bande de conduction et dans la bande de valence.

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi kT m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \quad (1.14)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi kT m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} \quad (1.15)$$

$F_{1/2}$ est l'intégrale de Fermi d'ordre $1/2$, qui n'a pas de formulation exacte.

$$F_{1/2}(x) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y}}{1 + \exp(y - x)} dy \quad (1.16)$$

A température ambiante les approximations suivantes sont valables et la statistique de Fermi tend vers le cas classique de Boltzmann.

$$\left(\frac{E_c - E_f}{kT} \right) \gg 1, \left(\frac{E_f - E_v}{kT} \right) \gg 1$$

Les expressions de $F_{1/2}$ s'écrivent dans ce cas :

$$F_{1/2}(x) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(x) \quad (1.17)$$

Les expressions de n et p s'écrivent :

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{kT}\right) \quad (1.18)$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{kT}\right) \quad (1.19)$$

Pour beaucoup d'applications, il convient de définir une concentration intrinsèque n_i tel que :

$$n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (1.20)$$

E_g est la largeur de la bande interdite du semiconducteur.

1.4 Equations de base des semiconducteurs :

L'analyse mathématique du fonctionnement d'un dispositif semiconducteur repose sur un ensemble d'approximations qui sont justifiées par des considérations physiques qui ne doivent cependant pas être restrictives. Pour entreprendre une première approche sans trop de complexités les hypothèses suivantes sont à la base de toute considération simplificatrice [1].

- Tout les processus de collision sont supposés élastiques.
- La variation spatiale du temps de collision et de la structure de bande est négligée.
- Non-dégénérescence du matériau.
- La variation spatiale des forces extérieures est négligeable.
- Absence d'induction magnétique.

- La variation temporelle et spatiale de la température des porteurs est nulle.
- La température du substrat est uniforme et constante.
- La structure de bande du matériau est parabolique.
- Ionisation complète des impuretés.

L'ensemble des équations qui seront traitées dans la suite sont valables pour la plupart des applications à base des dispositifs au silicium. Des améliorations peuvent être introduites au fur et à mesure que des effets particuliers sont à l'origine d'un phénomène physique dont il faut tenir compte dans la modélisation.

1.4.1 Equation de poisson :

L'équation de Poisson dérive de l'équation de Maxwell (1.3) (1.5). Dans un milieu semiconducteur isotrope où les effets de piézoélectricité, de ferroélectricité et d'optique non linéaire sont négligeables elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\tilde{\nabla}(\tilde{\nabla}V) = \frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r}, \quad \rho = q(n - p - N_d + N_a) \quad (1.21)$$

V est le potentiel électrostatique, n et p les concentrations des électrons et des trous, $N_d - N_a$ est la concentration effective d'impureté, ϵ_r est la constante diélectrique relative du silicium.

1.4.2 Equations de continuité :

Deux phénomènes sont à l'origine du déplacement des porteurs dans un matériau semiconducteur. Le premier est dû à la présence d'un champ électrique ; ce déplacement est caractérisé par une mobilité. Le deuxième est dû à la présence d'un gradient de concentration et il est caractérisé par une constante de diffusion.

Dans le cas général, les densités de courant des électrons et des trous sont données par :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= -q n \mathbf{v}_n \\ \mathbf{J}_p &= +q p \mathbf{v}_p \end{aligned} \quad (1.22)$$

\mathbf{v}_n , \mathbf{v}_p sont les vitesses de dérive des électrons et des trous. Ces vitesses sont reliées aux concentrations, aux durées de vie et au champ électrique.

Le transport des porteurs de charge, vérifiant certaines hypothèses, est régi par l'équation de Boltzmann avec l'approximation aux deux premiers moments qui nous donne à l'équilibre thermodynamique [10]:

$$\mathbf{v}_n = -\mu_n \mathbf{E} - \frac{D_n}{n} \tilde{\nabla}n \quad (1.23)$$

$$\mathbf{v}_p = \mu_p \mathbf{E} - \frac{D_p}{p} \tilde{\nabla}p \quad (1.24)$$

\mathbf{E} est le champ électrique. μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous définies par :

$$\mu_n = \frac{q\tau_p}{m_n^*}, \quad \mu_p = \frac{q\tau_n}{m_p^*} \quad (1.25)$$

τ_n et τ_p sont les temps moyens de collision des électrons et des trous.

Ces mobilités sont reliées aux constantes de diffusion des électrons et des trous par la relation d'Einstein dans le cas où les températures des porteurs prennent celle du substrat qui est supposée uniforme et constante.

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad \text{et} \quad D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (1.26)$$

Les densités de courant des électrons et des trous s'écrivent finalement :

$$\mathbf{J}_n = -q.n.\mu_n.\mathbf{E} + q.D_n.\tilde{\nabla}n \quad (1.27)$$

$$\mathbf{J}_p = -q.p.\mu_p.\mathbf{E} - q.D_p.\tilde{\nabla}p \quad (1.28)$$

La formulation la plus générale utilisée dans les modèles numériques consiste à résoudre les équations suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_n - R \quad (1.29)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \mathbf{J}_p + R \quad (1.30)$$

\mathbf{J}_n et \mathbf{J}_p sont respectivement les densités de courants des électrons et des trous, R est le taux de génération-recombinaison des porteurs.

Les paramètres de ces équations dépendent des variables et des grandeurs physiques du problème. En fonction de l'application du dispositif, des modèles numériques doivent être développés pour tenir compte des différents effets qui peuvent accompagner son fonctionnement.

1.5 Jonction PN :

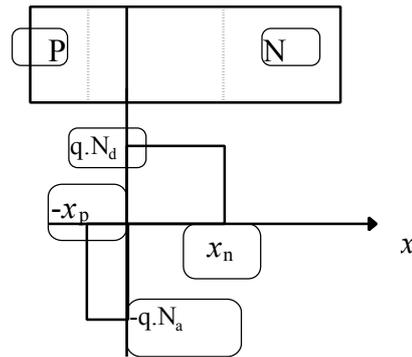
Une jonction se forme lorsque dans un même cristal coexistent une région de type P et une région de type N. Dans le cas d'un substrat de type N il faut introduire des dopants de type accepteurs par diffusion ou par implantation.

Le fait qu'il existe deux régions de nature différente, les porteurs majoritaires de chaque région diffusent de la région la plus concentrée vers la région la moins concentrée. Cette diffusion engendre de part et d'autre de la jonction une accumulation de charges de type différent formant ainsi une zone déplétée et une barrière de potentiel qui s'oppose au déplacement des porteurs jusqu'à l'équilibre. Le courant de diffusion est alors compensé par le courant de dérive des porteurs minoritaires.

1.5.1 Jonction abrupte :

L'approximation du profil par une fonction carrée du côté P et N dans le cas unidimensionnel simplifie l'étude analytique. La chute de potentiel à travers la barrière et la largeur de la zone déplétée se calculent en résolvant l'équation de Poisson suivante [2]:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho}{\epsilon} = -\frac{q}{\epsilon} (p - n + N_d - N_a) \quad (1.31)$$



La zone déplétée étant dépourvue de porteurs de charge, la densité de charge ρ s'écrit :

$$\rho = q(N_d - N_a)$$

Le calcul de l'épaisseur de la zone déplétée ω donne :

$$\omega = \left(\frac{2\varepsilon V_0 (N_a + N_d)}{qN_a N_d} \right)^{1/2} \quad (1.32)$$

V_0 est la différence de potentiel à travers la jonction.

Dans la pratique une région est fortement dopée par rapport à l'autre. Pour une jonction

P⁺N on a $N_a \gg N_d$ d'où :

$$\omega \approx \left(\frac{2\varepsilon V}{qN_d} \right)^{1/2}$$

Cette formulation reste valable dans le cas d'une polarisation externe non nulle ou $V = V_0 + V_{\text{appl}}$.

1.5.2 Caractéristique courant-tension :

Dans le cas d'un dispositif polarisé en inverse où la couche déplétée est assez épaisse, le courant inverse est la somme de plusieurs composantes dont les plus importantes sont :

- Le courant de diffusion
- Le courant de génération
- Le courant de surface

Les caractéristiques idéales courant-tension sont basées sur les hypothèses suivantes :

- 1) La tension de diffusion et la tension appliquée résident aux bornes de la jonction et le reste du dispositif est supposé neutre.
- 2) Les relations de Boltzmann restent valables.
- 3) La densité des porteurs minoritaires injectés est négligeable par rapport à la densité des porteurs majoritaires.
- 4) Absence de courant de génération dans la zone déplétée.

L'expression de la densité de courant s'écrit.

$$J = J_s \left(\exp(V / V_t) - 1 \right) \quad (1.33)$$

$$J_s = \frac{qD_p p_n^0}{L_p} + \frac{qD_n n_p^0}{L_n} \quad (1.34)$$

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \quad (1.35)$$

D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous.

L_n et L_p sont respectivement les longueurs de diffusion des électrons dans la région P et des trous dans la région N.

Pour une polarisation directe $V > 3 V_t$, (V_t étant la tension thermique = 0.026 V) le courant s'écrit

$$J = J_s \exp\left(\frac{V}{V_t}\right) \quad (1.36)$$

Pour une polarisation inverse $V \gg V_t$, $J = -J_s$

Dans le cas d'une jonction abrupte P⁺N on a $p_n^0 \gg n_p^0$ ce qui nous donne :

$$J_s \approx \frac{qD_p p_n^0}{L_p} \approx q \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} \frac{n_i^2}{N_d} = \frac{L_p n_i^2}{\tau_p N_d} \quad (1.37)$$

d'où le courant de diffusion en polarisation inverse $I = A J_s$

1.6 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons effectué un bref survol des phénomènes de transport dans les semiconducteurs. Nous avons revu le calcul de la concentration des électrons et des trous en modélisant leurs densité d'état et la statistique les régissant. Dans la suite de ce travail il est tenu de garder valables toutes les hypothèses citées dans ce chapitre et toute approximation trouve sa validité en se refaisant à l'une ou plusieurs de ces hypothèses.

CHAPITRE 2

MODELISATION DES PARAMETRES DES EQUATIONS DE TRANSPORT DES SEMICONDUCTEURS

2.1 Introduction :

Pour simuler le fonctionnement d'un dispositif semiconducteur, il convient nécessairement de détailler les étapes préalablement effectuées pour la mise en œuvre technologique du dispositif ainsi que les coefficients intervenant dans les équations. Les propriétés macroscopiques du dispositif dépendent essentiellement des paramètres technologiques ; pour en tenir compte intégralement dans la modélisation, des problèmes numériques de convergence et de stabilité apparaissent. Des approximations sont nécessaires donc pour éviter une formulation complexe. Plusieurs auteurs ont considéré des hypothèses restrictives pour développer des outils analytiques plus simples pour les différents cas de fonctionnement du dispositif, cela moyennant et en optimisant l'influence de chaque paramètre. Dans le cas général, les paramètres les plus dominants sont le profil du dopage, les termes de génération recombinaison, les mobilités et les durées de vie des porteurs. Le premier paramètre dépend essentiellement du procédé technologique de fabrication et des caractéristiques du substrat. Des difficultés apparaissent sérieusement si on veut affiner de plus en plus le modèle en tenant compte des différentes étapes technologiques intervenant au cours du procédé ; à cet effet notre étude se base sur des modèles physiques développés et utilisés dans la littérature [1] [2] [12] [13].

Cette partie traitera essentiellement la modélisation des paramètres intervenant dans les équations en absence de toute excitation externe, par la suite on procède à la modélisation de l'effet des particules chargées dans un détecteur semiconducteur.

Nous développons donc les modèles des coefficients les plus importants dans les équations, à savoir :

- Le profil du dopage réalisé par implantation ionique et par diffusion
- L'influence des forts dopages sur les grandeurs physiques
- Les recombinaisons et les mobilités des porteurs

2.2 Implantation ionique :

L'implantation ionique est un moyen d'introduire des atomes d'impuretés dopants dans un substrat pour la réalisation de jonctions. Depuis son développement, cette technique a fourni une alternative à la diffusion dans la technologie des semiconducteurs car elle offre de nombreux avantages.

On citera parmi ces avantages :

- Utilisation de faisceau d'atomes monoénergétique très pur obtenu par la technique de séparation de masse.
- Une bonne précision ($\approx 1\%$) de la concentration pour une large gamme de doses

(10^{11} à 10^{17} ions/cm²).

- Un contrôle précis du profil d'impureté par le choix de la dose et de l'énergie des ions incidents.
- Utilisation d'un environnement propre.
- Utilisation de faibles températures, ce qui permet de préserver les caractéristiques initiales du matériau comme la durée de vie et le temps de collection des porteurs (paramètres particulièrement importants pour les détecteurs solides)

La description analytique du profil d'impuretés implantées se base sur une étude statistique.

Le nombre d'impuretés implantées est donné dans le cas bidimensionnel par [15] [18] [19]

$$C(x, y) = N_d \cdot f(x, y) = N_d \cdot f(x) \cdot f(y) \quad (2.1)$$

N_d est la dose totale implantée ; $f(x)$ et $f(y)$ sont les fonctions densité de probabilité de localisation de l'ion dans un site cristallin, respectivement dans la direction transversale et latérale.

Les propriétés de la fonction de distribution $f(x)$ permettent de définir des grandeurs physiques caractéristiques du profil, ces grandeurs sont les moments de différents ordre de $f(x)$.

- Parcours projeté :

$$R_p = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx \quad (2.2)$$

- Déviation standard σ_p :

$$\sigma_p = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 \cdot f(x) \cdot dx} \quad (2.3)$$

- Le skewness γ_1 :

$$\gamma_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^3 \cdot f(x) \cdot dx}{\sigma_p^3} \quad (2.4)$$

- Le kurtosis β_1 :

$$\beta_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^4 \cdot f(x) \cdot dx}{\sigma_p^4} \quad (2.5)$$

Ces grandeurs peuvent être calculées [20] [21] et mesurées expérimentalement, elles sont données généralement dans des tables [1].

Les distributions les plus utilisées pour décrire un profil du dopage implanté aussi bien dans la direction latérale que dans la direction transversale sont résumées dans ce qui suit [1] :

- La distribution de Gauss :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_p} \cdot \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right) \quad (2.6)$$

Cette distribution est une approximation du premier ordre, elle a comme moments $\gamma_1=0$ et $\beta_2=3$ et elle est valable pour des cibles non amorphes et pour une décade de concentration à partir du pic.

- La distribution JHG (Joined-Half-Gaussian) [1] [22] :

$$f(x) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{2\pi} \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)} \cdot \exp\left(-\frac{(x - R_m)^2}{2(\sigma_1 + \sigma_2)^2}\right) & x < R_m \\ \frac{2}{\sqrt{2\pi} \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)} \cdot \exp\left(-\frac{(x - R_m)^2}{2\sigma_2^2}\right) & x \geq R_m \end{cases} \quad (2.7)$$

Cette distribution décrit les profils implantés asymétriques dans une cible amorphe et cristalline.

Elle est décomposée en deux fonctions Gaussiennes de moments σ_1 , σ_2 et R_m définie par :

$$R_p = R_m + \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\sigma_2 - \sigma_1) \quad (2.8)$$

$$\sigma_p = \sqrt{(\sigma_1^2 - \sigma_1\sigma_2 + \sigma_2^2) - \frac{2}{\pi}(\sigma_2 - \sigma_1)^2} \quad (2.9)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sigma_p^3} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}}(\sigma_2 - \sigma_1) \cdot \left(\left(\frac{4}{\pi} - 1 \right) \cdot (\sigma_1^2 - \sigma_2^2) + \left(3 - \frac{8}{\pi} \right) \cdot \sigma_1\sigma_2 \right) \right] \quad (2.10)$$

- La distribution de Pearson [15] [18] [22]:

Cette distribution se base sur l'équation différentielle

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(y - a) \cdot f(y)}{b_0 + b_1 \cdot y + b_2 \cdot y^2} \quad y = x - R_p \quad (2.11)$$

avec $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot dx = 1$

On définit les moments μ de cette distribution par :

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} y^i \cdot f(y) \cdot dy \quad (2.12)$$

$$R_p = \mu_1$$

$$\sigma_p = \sqrt{\mu_2 - \mu_1^2}$$

$$\gamma_1 = \frac{\mu_3 - 3 \cdot \mu_2 \cdot \mu_1 + 2 \cdot \mu_1^3}{(\mu_2 - \mu_1^2)^{3/2}} \quad (2.13)$$

$$\beta_2 = \frac{\mu_4 - 4 \cdot \mu_3 \cdot \mu_1 + 6 \cdot \mu_2 \cdot \mu_1^2 - 3 \cdot \mu_1^4}{(\mu_2 - \mu_1^2)^2}$$

Les coefficients a, b_0, b_1, b_2, b_3 s'expriment en fonction des grandeurs précédentes et ils sont solution de l'équation $b_0 + b_1 \cdot y + b_2 \cdot y^2 = 0$ qui détermine les différents types des distributions de Pearson. On classe ces distributions selon les cas suivants :

Distribution de Gauss : $\gamma_1=0$ et $\beta_2=3$; $b_1=b_2=0$

Pearson type I : $\gamma_1 \neq 0$ et $\beta_2 < 3 + 1.5\gamma_1^2$; b_1, b_2 réels de signes opposés.

Pearson type II : $\gamma_1=0$ et $\beta_2 < 3$; b_1, b_2 réels de signes opposés.

Pearson type III : $\gamma_1 \neq 0$ et $\beta_2 = 3 + 1.5\gamma_1^2$; $b_2=0$, $b_1 \neq 0$

Pearson type IV : $0 < \gamma_1^2 < 32$ et $\beta_2 > \frac{39 \cdot \gamma_1^2 + 48 + 6 \cdot (\gamma_1^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma_1^2}$
 b_1, b_2 complexes.

Pearson type V : $0 < \gamma_1^2 < 32$ et $\beta_2 = \frac{39 \cdot \gamma_1^2 + 48 + 6 \cdot (\gamma_1^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma_1^2}$
 b_1, b_2 complexes.

Pearson type VI : $\gamma_1 \neq 0$ et $3 + 1.5\gamma_1^2 < \beta_2 = \frac{39 \cdot \gamma_1^2 + 48 + 6 \cdot (\gamma_1^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma_1^2}$
 b_1, b_2 réels de même signe.

Pearson type VII : $\gamma_1=0$ et $\beta_2 > 3$; $b_1=0, b_2 > 3$.

Les paramètres précédents sont déterminés en fonction, de la nature de l'ion, de son énergie et de la nature de la cible.

Expérimentalement, Ryssel [23] et beaucoup d'autres travaux montrent que la distribution la plus valide correspond à celle de Pearson. Ce cas introduit des corrections à la distribution d'impuretés qui donnent un bon accord avec les résultats expérimentaux.

Dans le cas bidimensionnel, la distribution latérale doit tenir compte de la géométrie du masque avec lequel on forme la fenêtre d'implantation. La distribution d'impureté s'écrit en général [24] [20]:

$$C(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_{py}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x, t_{\text{mask}}(y')) \cdot \exp\left(-\frac{(y - y')^2}{2 \cdot \sigma_{py}^2}\right) \cdot dy' \quad (2.14)$$

σ_{py} est la déviation standard dans la direction latérale et $C(x, t_{\text{mask}})$ est la distribution transversale unidimensionnelle au point de profondeur x ou le masque a une épaisseur de t_{mask} .

$$C(x; t_{\text{mask}}(y)) = \begin{cases} 0 & y < a \\ C(x) & y \geq a \end{cases} \quad (2.15)$$

Dans le cas où le masque a une épaisseur uniforme de largeur a , la fonction de distribution s'écrit :

$$C(x, y) = C(x) \cdot \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{a - y}{\sqrt{2} \cdot \sigma_{py}}\right) \quad (2.16)$$

En plus des difficultés de formulation des paramètres d'implantation ionique elle présente aussi des inconvénients tel que la création de défauts de structure cristalline dans le substrat ; on citera parmi ces défauts, les paires lacune-interstitiel, les bilacunes, la

dislocation linéaire, les boucles de dislocations et les fautes d'empilements. Afin de restaurer les propriétés initiales du matériau une guérison de ces défauts est nécessaire. Cela s'effectue par recuit de durée et de température convenables [15] [16] [17].

2.3 Diffusion :

La diffusion d'impuretés est parmi les opérations élémentaires qui interviennent à différentes étapes de la fabrication d'un dispositif semiconducteur. Elle permet d'introduire dans le cristal à des profondeurs variables de l'ordre d'une fraction de micron à quelques microns, des impuretés en quantités convenables pour déterminer des zones P ou N. A des températures suffisamment élevées, les atomes d'impuretés acquièrent une certaine mobilité dans le réseau cristallin et sont donc susceptibles de se déplacer suivant des mécanismes microscopiques décrits par les équations de Fick.

A un gradient de concentration d'atomes d'impuretés correspond un flux sensiblement proportionnel, la constante de proportionnalité (constante de diffusion) croît rapidement avec la température et elle dépend de la nature du substrat et des impuretés [14] [25]

2.3.1 Lois de la diffusion :

La diffusion des atomes dopants dans un substrat est décrite par les deux lois de Fick étudiées dans la plupart des ouvrages classiques [1] [14]:

Equation de diffusion :

$$F(x) = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.17)$$

Equation de conservation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.18)$$

Equation de transport :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial F}{\partial x} \right) \quad (2.19)$$

D étant le coefficient de diffusion [1] [26]

Pour obtenir des couches d'impuretés diffusées dopantes on utilise deux étapes, le prédépôt et la redistribution. Au cours de la première procédure les impuretés sont introduites à une profondeur de quelques dixième de microns, puis la deuxième étape rediffuse plus profondément ces impuretés pour obtenir une couche diffusée convenable et sans introduire de nouveaux atomes dopants.

2.3.2 Etape de prédépôt :

Cette étape s'effectue en plaçant l'échantillon semiconducteur dans un four à une température de 800 à 1000 °C parcouru par un gaz inerte contenant les impuretés souhaitées, le gaz inerte est introduit pour fixer la direction du flux.

On introduit les impuretés par une source solide, source liquide ou par transport chimique. Sur la surface du solide la concentration en surface (C_s) est en équilibre avec la pression partielle p de l'impureté dans le gaz. Pour chaque solide, à une température donnée, on peut atteindre une concentration maximale (égale à la solubilité limite de l'impureté) si on utilise une pression partielle convenable. Ce qui donne une concentration en surface

constante et uniforme.

Le profil du prédépôt s'obtient en intégrant les équations précédentes avec les conditions aux limites :

$$C(x,t) = C_s \quad C(\infty,0) = 0$$

$$\text{et la condition initiale} \quad C(x,0) = 0$$

La solution est alors de la forme :

$$C(x,t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t_p}}\right) \quad (2.20)$$

t_p est la durée du dépôt.

La quantité de dopants introduite sera

$$Q_p(t_p) = \int_0^{\infty} C(x,t) \cdot dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot C_s \cdot \sqrt{D \cdot t_p} \quad (2.21)$$

2.3.3 Etape de redistribution :

Un traitement thermique à haute température suivant l'étape précédente permet de placer plus profondément la jonction et d'abaisser la concentration en surface sans apporter d'autres atomes dopants.

Les nouvelles conditions aux limites sont :

$$\frac{\partial C(0,t)}{\partial x} = 0 \quad C(\infty,t) = 0$$

Le profil du dopage après redistribution de durée t_r est de la forme :

$$C(x,t) = \frac{Q(t_r)}{\sqrt{\pi \cdot D \cdot t_p}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot D \cdot \pi}\right) \quad (2.22)$$

t_r est la durée de la redistribution.

La couche diffusée forme une jonction avec le substrat sous-jacent, elle peut être délimitée par attaque mécanique et marquage chimique pour la mesure de sa profondeur.

2.4 Effets des forts dopages :

Les changements qui se présentent dans la structure de bande d'un semiconducteur fortement dopé ont fait l'objet de plusieurs études [27] [28] [29]. La synthèse des résultats est décrite dans [1]. Ces effets se manifestent sur la largeur de la bande interdite E_g par un rétrécissement δE_g dû à la formation de petites bandes des niveaux d'impuretés. Cela engendre des interactions élevées entre les porteurs libres et les impuretés donnant ainsi lieu à la déformation des densités d'états des porteurs, et par la suite à la non validité des paramètres et des approximations utilisés comme la concentration intrinsèque, les mobilités, les recombinaisons, la loi d'action de masse et la relation d'Einstein.

La plupart des modèles élaborés pour δE_g sont en bon accord avec l'expérience. Le modèle semi-empirique couramment utilisé en simulation des dispositifs présentant des régions avec des niveaux de dopage supérieurs à 10^{17} cm^{-3} est développé par Slotboom [30]. Il trouve une large application dans les dispositifs bipolaires.

$$\delta E_g = qV_1 \left[\log\left(\frac{N_d + N_a}{N_0}\right) + \sqrt{\log^2\left(\frac{N_d + N_a}{N_0}\right) + C} \right] \quad (2.23)$$

Ou $V_1=9.10^{-3}$ v ; $N_0=10^{17}$ cm⁻³ ; $C=0.5$

D'autres auteurs considèrent un rétrécissement effectif du gap d'énergie dans lequel ils prennent en compte la dégénérescence des porteurs majoritaires [30] [31].

Le tableau suivant résume les modifications de certains paramètres sous l'effet d'un fort dopage.

Paramètre	Faibles dopages	Forts dopages
Largeur de la bande interdite	$\delta E_g=0$	$\delta E_g \neq 0$
Loi d'action de masse	$p.n = n_i^2$	$p.n = n_{ieff}^2$
Impuretés (T° ambiante)	Toutes ionisés	Certains atomes sont non ionisés
Statistique	Maxwell Boltzmann pour les majoritaires et minoritaires	Maxwell Boltzmann pour les minoritaires et Fermi Dirac pour les majoritaires
Recombinaison des minoritaires	Via les défauts (SRH)	SRH + Auger
Mobilités	Constantes	Dépendent de la concentration en impureté.
Relation d'Einstein	Valide $\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{q}$	Modifiée : $\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{q} \cdot \frac{F_{1/2}(E_{fn} - E_c)}{F_{-1/2}(E_{fn} - E_c)}$

Tableau 2.1 : Comparaison entre le cas de faible et de fort dopage.

Le rétrécissement effectif δE_{geff} pour un substrat du type N est relié au rétrécissement du gap δE_g par la relation :

$$\delta E_g^{eff} = \delta E_g + \text{Ln}\left(\frac{F_{1/2}(E_{fn} - E_c)}{\exp(E_{fn} - E_c)}\right) \quad (2.24)$$

E_{fn} est le quasi niveau de Fermi réduit des porteurs majoritaires et $F_{1/2}$ l'intégrale de Fermi d'ordre 1/2. Le résultat suivant est donné dans [30].

$$\delta E_g^{eff} = \begin{cases} 18.7 \cdot 10^{-3} \cdot \text{Ln}\left(\frac{N_d}{7 \cdot 10^{17}}\right) \text{ [ev]} & N_d > 7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \\ 0 & N_d \leq 7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \end{cases} \quad (2.25)$$

Cet effet est considéré dans toute la suite à travers l'expression de la concentration intrinsèque effective n_{ieff} :

$$n_{ieff}^2 = n_i^2(T) \cdot \exp\left(\frac{\delta E_g}{kT}\right)$$

2.5 Génération et Recombinaison des porteurs de charges :

Les processus directs bande à bande qui se déroulent dans tout semiconducteur sont souvent masqués par des processus de génération recombinaison plus intenses qui

mettent en jeu des impuretés et défauts inévitablement présents dans tout cristal réel. Aux diverses imperfections du matériaux qui rompent la périodicité du réseau cristallin, peuvent être associés dans la bande interdite des niveaux d'énergie susceptibles d'être occupés par les porteurs [11] [35].

Les mécanismes physiques inhérents sont :

- La recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) résultant des imperfections du cristal.
- La recombinaison radiative par transition directe de bande. Pour le silicium qui est un semiconducteur à bande indirecte cette recombinaison est souvent négligée.
- La recombinaison Auger, dominante dans un matériau fortement ou faiblement dopé soumis à un régime de forte injection.

2.5.1 Recombinaison de Shockley-Read-Hall :

Le modèle de Shockley Read Hall [32] décrit de manière simple le phénomène de recombinaison - et de génération - qui se produit dans le silicium à partir du processus de capture et d'émission de porteurs libres. Un seul niveau profond E_t introduit par un type de centres de génération - recombinaison via lequel transite les porteurs. La notion de durée de vie des porteurs τ est par ailleurs définie.

Le taux de recombinaison donné par la loi de Shockley-Read-Hall s'exprime par [32]

$$R_{srh} = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (2.26)$$

τ_n et τ_p sont les durées de vie des électrons et des trous, n_1 et p_1 sont des concentrations dépendant de la position et de l'état du niveau d'énergie de l'impureté. Pour un niveau des pièges confondu avec le niveau intrinsèque on a $n_1 = p_1 = n_i$.

Outre la concentration intrinsèque n_i qui peut être influencée par les effets de forts dopages, les temps de vie τ_n , τ_p des porteurs minoritaires jouent un rôle essentiel dans la détermination du terme de recombinaison de Shockley-Read-Hall.

Ces temps de vie s'expriment par :

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_p V_{th} N_t} \quad ; \quad \tau_p = \frac{1}{\sigma_n V_{th} N_t} \quad (2.27)$$

σ_n , σ_p sont les sections efficaces de capture des centres de recombinaison pour les électrons et les trous, V_{th} est la vitesse thermique et N_t est la densité des centres de recombinaison.

Dans le cas des faibles dopages N_t est constante et les durées de vie sont indépendantes du profil, par contre un fort dopage induit des centres pièges qui font diminuer les durées de vie.

Les expressions empiriques des temps de vie s'écrivent en fonction du profil du dopage comme suit :

$$\tau_n = \frac{\tau_{n0}}{1 + \frac{N_d + N_a}{N_{nref}}} \quad ; \quad \tau_p = \frac{\tau_{p0}}{1 + \frac{N_d + N_a}{N_{pref}}} \quad (2.28)$$

τ_n , τ_p , N_{nref} et N_{pref} sont des constantes rassemblées dans [1]

2.5.2 Recombinaison en surface :

En plus des imperfections dans le volume du semiconducteur plusieurs phénomènes se produisent à la surface recouverte généralement d'un oxyde et ils introduisent dans la bande interdite des densités d'états supplémentaires [33].

Le taux de recombinaison en surface s'écrit :

$$R_s = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\frac{1}{S_n}(n + n_1) + \frac{1}{S_p}(p + p_1)} \quad (2.29)$$

La recombinaison des porteurs minoritaires qui prend place via ces niveaux peut être convenablement décrite par la vitesse de recombinaison en surface S_0 [34] qui s'exprime par :

$$S_0 = \sqrt{s_n \cdot s_p} V_{th} \cdot kT \cdot N_{ss} \quad (2.30)$$

N_{ss} étant la densité d'états d'interface.

Ce terme de recombinaison a une influence prépondérante sur les performances des dispositifs comportant de grandes surfaces d'oxydes.

2.5.3 Recombinaison Auger :

Dans ce type de recombinaison, un électron de la bande de conduction se recombine directement avec un trou de la bande de valence en libérant une quantité d'énergie qui est transférée à un autre porteur. Ce processus qui caractérise l'effet Auger est l'inverse du mécanisme d'ionisation par choc dans la création d'une paire électron-trou. La recombinaison Auger fait intervenir trois particules, deux électrons et un trou ou un électron et deux trous [1].

Le taux de recombinaison net est donné par l'expression suivante :

$$R_{aug} = (n \cdot p - n_i^2) \cdot (n \cdot C_n - p \cdot C_p) \quad (2.31)$$

C_n et C_p sont des coefficients de valeur entre 10^{-31} et $3 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$ à la température ambiante [1]. Ce processus de recombinaison devient important dans les régions de fortes concentrations de porteurs.

2.5.4 Génération de porteurs par ionisation :

Ce processus est le phénomène inverse de la recombinaison Auger, une paire électron-trou est créée directement par l'effet d'autres porteurs qui ont une énergie suffisante pour ioniser les atomes le long de leur parcours [36]. Ce taux de génération est donné par :

$$G_{coll} = \alpha_n \frac{|J_n|}{q} + \alpha_p \frac{|J_p|}{q} \quad (2.32)$$

Où J_n et J_p sont les vecteurs densité de courants des électrons et des trous.

α_n et α_p sont les coefficients d'ionisation qui dépendent de la composante du champ électrique parallèle à la direction du flux du courant.

$$\mathbf{a}_n = A_n \cdot \exp \left[- \left(\frac{E_n^{\text{crt}}}{E} \right) \mathbf{b}_n \right] \quad (2.33)$$

$$\mathbf{a}_p = A_p \cdot \exp \left[- \left(\frac{E_p^{\text{crt}}}{E} \right) \mathbf{b}_p \right] \quad (2.34)$$

Les constantes A_n et A_p dépendent du matériau et du champ électrique interne ; leurs valeurs sont autour de $6 \cdot 10^5$ à $4 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ pour le silicium [1].

Les constantes β_n et β_p sont généralement prises égales à l'unité. E_n^{crt} et E_p^{crt} sont les champs électriques critiques associés aux porteurs et qui dépendent du matériau et principalement de la plage du champ électrique régnant dans le dispositif. On note que ce type de génération n'existe plus dès que le vecteur champ électrique est normal à la direction du vecteur densité de courant.

2.6 Mobilités des porteurs :

La dépendance directe des équations de base des mobilités des porteurs impose le choix d'un modèle satisfaisant pour assurer une précision quantitative des résultats. Il existe plusieurs mécanismes physiques qui affectent les mobilités. Les plus prépondérants ont fait l'objet de plusieurs études et donnent comme synthèse les expressions suivantes [1] [2] [12] [13] :

- Effet de la température :

$$\mu_n^L = \mu_n^0 \left(\frac{T}{300} \right)^{-\alpha_n} \quad \mu_p^L = \mu_p^0 \left(\frac{T}{300} \right)^{-\alpha_p} \quad (2.35)$$

Ces paramètres sont donnés pour le silicium :

$$\begin{aligned} \mu_n^0 &= 1448 \text{ cm}^2 \text{v}^{-1} \text{s}^{-1} & \alpha_n &= 2.33 \\ \mu_p^0 &= 473 \text{ cm}^2 \text{v}^{-1} \text{s}^{-1} & \alpha_p &= 2.23 \end{aligned}$$

L'influence des impuretés ionisées sur les mobilités est modélisée généralement par la formulation de Scharfetter Gummel [37]

$$\mu_{n,p}^{\text{LI}} = \frac{\mu_{n,p}^L}{\sqrt{1 + \frac{C_t}{C_{n,p}^{\text{ref}} + \frac{C_t}{S_{n,p}}}}} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} C_n^{\text{ref}} &= 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}, S_n = 350 \\ C_p^{\text{ref}} &= 4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}, S_p = 81 \end{aligned}$$

C_t est la concentration totale d'impuretés ionisées.

- L'effet des interactions entre porteurs est modélisé par Caughey, Thomas [38] et Adler [39] :

$$\mu_{n,p}^{\text{LIC}} = \frac{1}{\frac{1}{\mu_{n,p}^{\text{LI}}} + \frac{1}{\mu^{\text{C}}}} \quad (2.37)$$

Le terme μ^C s'écrit en fonction des concentrations des électrons et des trous comme suit :

$$\mu^C = \frac{1.428 \cdot 10^{20} (\text{cm}^{-1} \text{v}^{-1} \text{s}^{-1})}{\sqrt{n \cdot p} \cdot \ln \left[1 + 4.54 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2} \cdot (n \cdot p)^{-1/3} \right]} \quad (2.38)$$

- Le facteur le plus influant sur les mobilités étant le champ électrique, Scharfetter et Gummel ont suggéré le modèle suivant :

$$\mu_{n,p}^{\text{LIE}} = \frac{\mu_{n,p}^{\text{LI}}}{\sqrt{1 + \frac{C_t}{C_{n,p}^{\text{ref}} + C_t/S_{n,p}} + \frac{(E/A_{n,p})^2}{E/A_{n,p} + F_{n,p}} + \left(\frac{E}{B_{n,p}} \right)^2}} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} A_n &= 3.5 \cdot 10^3 \text{ Vcm}^{-1}, & F_n &= 8.8, & B_n &= 7.4 \cdot 10^3 \text{ Vcm}^{-1} \\ A_p &= 6.1 \cdot 10^3 \text{ Vcm}^{-1}, & F_p &= 1.6, & B_p &= 2.5 \cdot 10^4 \text{ Vcm}^{-1} \end{aligned}$$

2.7 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté les principaux modèles physiques qui formeront une base de données pour nos programmes numériques. Ces modèles sont décomposés en deux parties : la première développe la modélisation de deux méthodes de fabrication de jonctions dans un substrat silicium, l'implantation ionique et la diffusion ; L'implantation ionique par ses avantages permet de contrôler le profil du dopage en jouant sur la dose et l'énergie des ions implantés. Cette technique est très utilisée dans la réalisation des dispositifs à jonction superficielle, cas des détecteurs de rayonnements à jonctions. Les paramètres du dispositif comme les durées de vie et les temps de collections des porteurs ne sont pas trop perturbés dans ce cas du fait qu'on utilise de faibles températures. Ce procédé nous donne un profil du dopage qui peut être décrit par plusieurs fonctions de distributions latérales et transversales. La seconde traite la modélisation des paramètres intervenant dans les équations. Les mobilités et les termes de génération et recombinaison sont modélisés par les approches couramment utilisées dans la littérature. Des améliorations sont toujours nécessaires lorsqu'on traite un cas précis de dispositif qui fait intervenir des considérations physiques plus détaillées. Pour le cas de la génération par des particules chargées le modèle spécifique est explicité au chapitre 6 lors de l'étude du dispositif détecteur exposé à un flux de radiation.

CHAPITRE 3

METHODES DE RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS DE TRANSPORT D'UN DISPOSITIF SEMICONDUCTEUR

3.1 Introduction :

L'aspect non linéaire des équations de continuité des électrons et des trous rend impossible de résoudre analytiquement le système d'équations régissant le comportement des dispositifs semiconducteurs. Les difficultés s'accroissent lorsque l'on considère des modèles physiques très précis et des structures géométriques pour lesquelles l'étude devrait être en toute rigueur bidimensionnelle ou voire tridimensionnelle. Les moyens de calculs informatiques s'imposent dans ces conditions. La tâche principale d'une simulation du fonctionnement d'un dispositif est de résoudre les équations décrites précédemment par les méthodes d'analyses numériques en utilisant un ensemble d'approximations qui sont justifiées par les hypothèses tirées des considérations physiques et des conditions de fonctionnement du dispositif.

L'étude bidimensionnelle conduit à un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires de type elliptique. L'existence et l'unicité de la solution ont été étudiées par plusieurs auteurs [42] [45]. Dans le cas de notre étude, le traitement du système d'équations consiste à utiliser la méthode des différences finies pour passer du système continu au système discret, linéariser les équations en utilisant la méthode de Gummel pour le traitement séquentiel et enfin résoudre le système linéaire obtenu en utilisant une des méthodes itératives classiques connues et adaptées aux grands systèmes dont la matrice est très creuse.

3.2 Normalisation des équations :

Dans tout problème numérique il est évident que la précision des calculs a une très grande importance. Dans les dispositifs semiconducteurs les inconnues n et p prennent des valeurs très élevées dans certaines régions du dispositif (10^{20} cm^{-3}), il est de même pour le champ électrique. Par conséquent des difficultés de calcul surviennent dans l'évaluation des différences entre ces grands nombres. Ceci altère donc la précision des résultats. Pour surmonter ces difficultés on procède à normaliser le système pour n'utiliser que des grandeurs sans dimensions et équivalentes. Les constantes de normalisation utilisées sont résumées dans le tableau 3.1, elles dérivent des valeurs données par De Mari [47] [48]. D'autres méthodes de normalisations sont souvent utilisées pour une meilleure mise en forme des équations [1].

Grandeur	Constante de normalisation	Unité
Distances	$L_d = \sqrt{kT/q^2 n_i}$	μm
Potentiel	$V_t = kt/q$	V
Concentrations	$N = \max(N_d - N_a , x, y \in \text{réseau})$	cm^{-3}
Coefficient de diffusion	D_0	$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
Mobilités	D_0/V_t	$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{v}^{-1}$
Génération recombinaison	$D_0 n_i/L_d^2$	$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$
Temps	$\tau_0 = L_d^2/D_0$	s
Densité de courant	$J_0 = ND_0q/L_d$	Acm^{-2}
Densité de charge de surface	$\sigma_0 = \epsilon V_t/L_d$	C cm^{-2}
Densité de charge volumique	$\rho_0 = \epsilon V_t/L_d^2 = qn_i$	C cm^{-3}

Tableau 3.1 : Grandeurs de normalisation

Les équations normalisées s'écrivent comme suit :

Equation de Poisson :

$$\Delta\psi + \lambda^2 (p - n + N_d - N_a) = 0 \quad \lambda^2 = \frac{qL_d N}{\epsilon V_t} \quad (3.1)$$

λ étant un facteur de normalisation

Equation de continuité des électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \tilde{N} \mathbf{J}_n - R + G \quad (3.2)$$

$$\mathbf{J}_n = D_n \tilde{N} \nabla n - \mu_n n \tilde{N} \nabla \psi \quad (3.3)$$

Equation de continuité des trous :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \tilde{N} \mathbf{J}_p - R + G \quad (3.4)$$

$$\mathbf{J}_p = D_p \tilde{N} \nabla p + \mu_p p \tilde{N} \nabla \psi \quad (3.5)$$

Dans le cas bidimensionnel ces équations s'écrivent comme suit :

Equation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} + \lambda^2 \{p(x, y) - n(x, y) + (N_d - N_a)(x, y)\} = 0 \quad (3.1.a)$$

Equation de continuité des électrons :

$$\frac{\partial n(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial J_n^x(x, y, t)}{\partial x} + \frac{\partial J_n^y(x, y, t)}{\partial y} - (R - G)(x, y, t) \quad (3.2.a)$$

$$J_n^x(x, y, t) = D_n(x, y, t) \cdot \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial x} - \mu_n(x, y, t) \cdot n(x, y, t) \cdot \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial x} \quad (3.3.a)$$

$$J_n^y(x, y, t) = D_n(x, y, t) \cdot \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial y} - \mu_n(x, y, t) \cdot n(x, y, t) \cdot \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial y}$$

Equation de continuité des trous :

$$\frac{\partial p(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial J_p^x(x, y, t)}{\partial x} + \frac{\partial J_p^y(x, y, t)}{\partial y} - (R - G)(x, y, t) \quad (3.4.a)$$

$$J_p^x(x, y, t) = D_p(x, y, t) \cdot \frac{\partial p(x, y, t)}{\partial x} + \mu_p(x, y, t) \cdot p(x, y, t) \cdot \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial x} \quad (3.5.a)$$

$$J_p^y(x, y, t) = D_n(x, y, t) \cdot \frac{\partial n(x, y, t)}{\partial y} + \mu_n(x, y, t) \cdot n(x, y, t) \cdot \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial y}$$

3.3 Variables du système d'équations :

Les équations de transport décrivent l'évolution de l'état de plusieurs grandeurs physiques. Ces équations ont comme inconnues le potentiel électrostatique et les concentrations des électrons et des trous en fonction desquelles d'autres grandeurs s'écrivent. Dans la programmation, le choix des variables peut influencer les performances des calculs. En général dans la méthode de résolution séquentielle les variables utilisées sont : le potentiel électrostatique et les quasi potentiel de Fermi des électrons et des trous (ψ, u, v). Les termes u et v (variables de Slotboom) sont définis comme suit :

$$u = \frac{n}{n_i} \exp(-\psi) \quad v = \frac{p}{n_i} \exp(+\psi) \quad (3.6)$$

Cette représentation est adaptée pour les algorithmes qui dérivent du schéma de Gummel [46] [37], elle n'est applicable que dans le cas des faibles polarisations à cause des termes exponentiels qui peuvent engendrer des dépassements arithmétiques.

3.4 Discrétisation des équations :

A la structure réelle on associe une structure de simulation bidimensionnelle (figure 3.1) définie par un domaine rectangulaire Ω limité par une frontière Γ . Les équations de transports seront écrites dans ce domaine. Une méthode de discrétisation des équations sera appliquée pour le passage du système continue au système discret. La géométrie rectangulaire du dispositif, la forme particulière des équations et les conditions aux limites associées avantagent le choix de la méthode des différences finies. La propriété offerte par cette méthode est que le système d'équations obtenu satisfait à des critères de conditionnement qui allègent les traitements numériques par la suite. Dans la majorité des cas, le maillage doit être uniforme pour, d'une part, éviter l'insertion inutile d'un nombre important de points dans certains endroits et d'autre part, insérer suffisamment de points dans les endroits où la variation d'une grandeur physique est importante. Cela nécessite par conséquent une étude adéquate du maillage pour une bonne optimisation.

La géométrie de la structure du dispositif à étudier est représentée à la figure suivante :

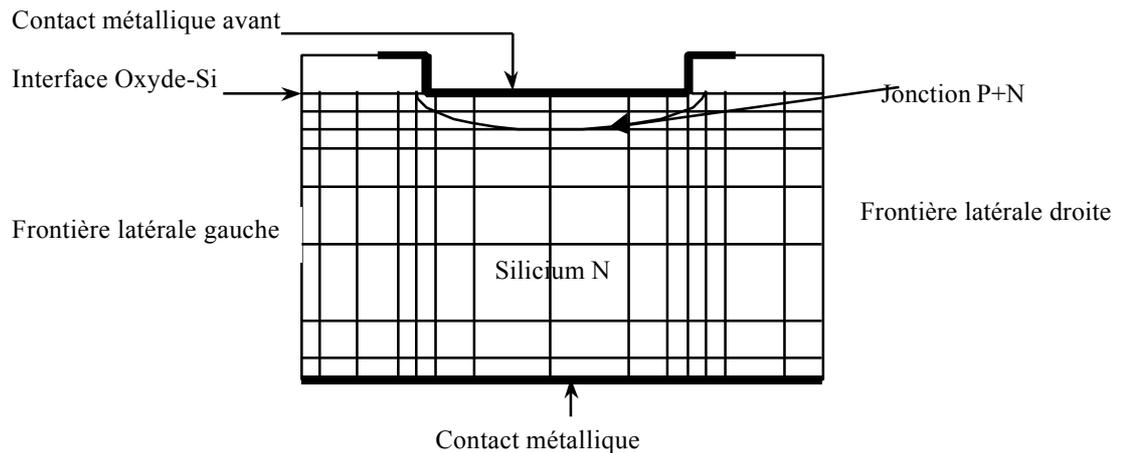


Figure 3.1 : Géométrie du maillage bidimensionnel des différences finies

3.4.1 Réseau de discrétisation :

Dans le cas bidimensionnel, le maillage à mettre en œuvre avec la méthode des différences finies consiste à répartir parallèlement aux axes de coordonnées un nombre fini de droites formant ainsi avec N_x lignes et N_y colonnes un nombre total de points égal à $N_x \cdot N_y$ (figure 3.1)

Le pas de discrétisation est non uniforme pour tenir compte de la non-uniformité des grandeurs physiques dans certains endroits de la structure. Citons par exemple le potentiel électrostatique, le champ électrique et le dopage au voisinage de la jonction.

La répartition des points de discrétisation est une opération importante dans le déroulement de la suite des procédures numériques, elle présente les inconvénients suivants [40] [12] [41]:

- Utiliser un réseau très dense conduit rapidement à un système dont la résolution nécessite des moyens de calcul énormes.
- Ne pas prendre suffisamment de points aux endroits où les inconnues varient sensiblement altère la précision des résultats.

Une attention particulière est toujours donnée pour la génération d'un maillage le plus convenable et le plus optimisé. En général, pour tenir compte globalement des propriétés qui s'imposent dans la construction du maillage, les critères suivants sont respectés :

- Le nombre total de points doit être inférieur à une limite qui dépend de la structure et de la puissance de la machine.
- Eviter les variations brutales du pas de discrétisation.
- Les positions de la jonction et des bords de la zone de déplétion doivent être préalablement connus.

3.4.2 Technique de discrétisation :

Dans le réseau de discrétisation chaque point est repéré par ses coordonnées (x_i, y_j) avec :

$$0 \leq x_i \leq L_x \text{ et } 0 \leq y_j \leq L_y$$

$$0 \leq i \leq N_x \text{ et } 0 \leq j \leq N_y$$

L_x et L_y sont les dimensions latérale et transversale du dispositif.

N_x et N_y sont les nombres de noeuds de discrétisation latéraux et transversaux.

En chaque point sont évaluées toutes les grandeurs du problème et les équations continues sont remplacées par les équations aux différences qui se déduisent du schéma de la figure 3.2.

Dans ce schéma, on adopte les notations suivantes [1] [2] :

$$\begin{aligned} h_i &= x_{i+1} - x_i & h_{i-1} &= x_i - x_{i-1} & 1 \leq i \leq N_x \\ k_j &= y_{j+1} - y_j & k_{j-1} &= y_j - y_{j-1} & 1 \leq j \leq N_y \end{aligned} \quad (3.8)$$

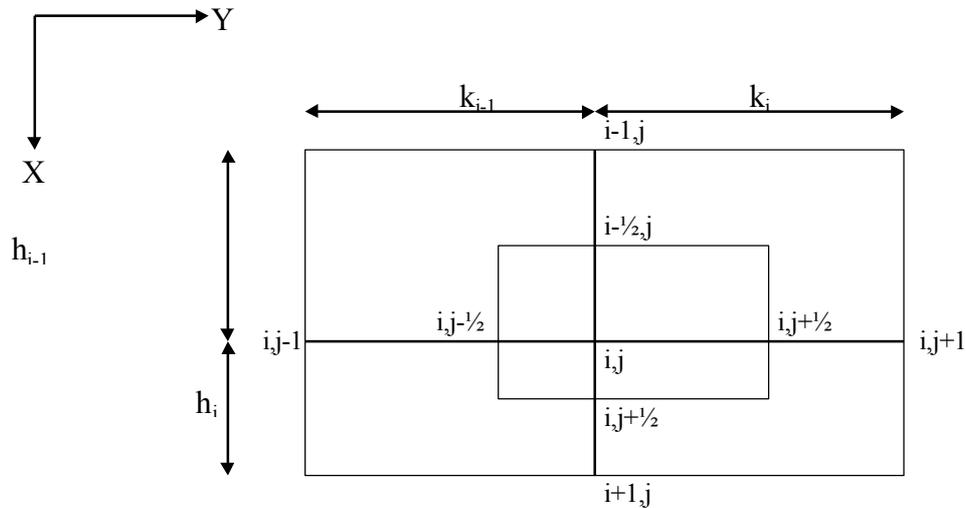


Figure 3.2 : Schéma des différences finies à cinq points

Toutes les grandeurs qui dépendent des coordonnées (x,y) s'écrivent au nœud correspondant :

$$\begin{aligned} u(x,y) &\equiv u(x_i, y_j) = u_{ij} \\ u\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, y_j\right) &= u_{i+1/2, j} & u\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}, y_j\right) &= u_{i-1/2, j} \\ u\left(x_i, \frac{y_{j+1} + y_j}{2}\right) &= u_{i, j+1/2} & u\left(x_i, \frac{y_{j-1} + y_j}{2}\right) &= u_{i, j-1/2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Le remplacement des opérateurs différentiels par les équivalents discrets se base sur les développements du premier ordre des dérivées des fonctions représentant la grandeur physique ; En négligeant les termes d'ordre supérieurs on écrit :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ij} \cong \frac{u_{i+1/2, j} - u_{i-1/2, j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} \quad (3.10)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{ij} \cong \frac{u_{ij+1/2} - u_{ij-1/2}}{\frac{k_j + k_{j-1}}{2}} \quad (3.11)$$

Les dérivées secondes s'expriment en fonction des dérivées premières comme suit :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{ij} \cong \frac{\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i+1/2j} - \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i-1/2j}}{\frac{k_i + k_{i-1}}{2}} \quad (3.12)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{ij} \cong \frac{\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{ij+1/2} - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{ij-1/2}}{\frac{k_j + k_{j-1}}{2}} \quad (3.13)$$

Ces approximations sont appliquées essentiellement au potentiel électrostatique. Les densités de courants et les concentrations des porteurs font intervenir d'autres considérations et hypothèses qui prennent compte de la stabilité du système discret.

Pour discrétiser les équations dans la totalité de la structure, on doit distinguer les différentes régions où il faut tenir compte des conditions imposées par les points correspondants. Les points des frontières entourant la structure seront traités en construisant une ligne fictive à un pas de discrétisation égal au précédent.

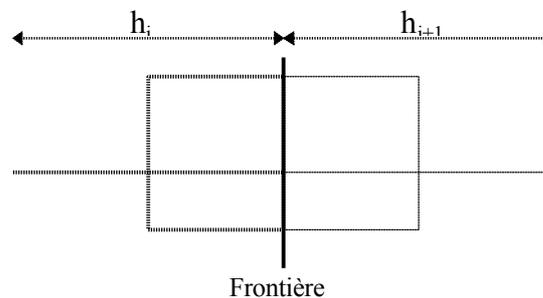


Figure 3.3 : Schéma de discrétisation aux frontières

3.4.3 Discrétisation de l'équation de Poisson :

3.4.3.1 Dans le silicium :

La région du silicium est formée par tout les points appartenant à l'intérieur du dispositif dont les quatre premiers voisins ne font pas intervenir les points de l'interface Oxyde-Silicium, des frontières latérales et ceux des contacts métalliques.

Dans le cas bidimensionnel l'équation (1.30) s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \lambda^2 (n - p - N_d + N_a) = 0 \quad (3.14)$$

On adoptant les formulations des dérivées (3.10-13) on obtient l'équation de Poisson discrète [49] [50] [51]:

$$\alpha^{\Psi_{i+1j}} \cdot \alpha_{i+1j} + \alpha^{\Psi_{i-1j}} \cdot \Psi_{i-1j} + \alpha^{\Psi_{ij+1}} \cdot \Psi_{ij+1} + \alpha^{\Psi_{ij-1}} \cdot \Psi_{ij-1} = \alpha^{\Psi_{ij}} \cdot \Psi_{ij} + \lambda^2 n_i (u_{ij} \cdot \exp(\Psi_{ij}) - v_{ij} \cdot \exp(-\Psi_{ij})) - \lambda^2 \cdot \text{Dop}_{ij} \quad (3.15)$$

$$\text{avec : } \alpha^{\Psi_{i+1j}} = \frac{2}{(h_i + h_{i-1})h_i} \quad \alpha^{\Psi_{i-1j}} = \frac{2}{(h_i + h_{i-1})h_{i-1}}$$

$$\alpha^{\Psi_{ij+1}} = \frac{2}{(k_j + k_{j-1})k_j} \quad \alpha^{\Psi_{ij-1}} = \frac{2}{(k_j + k_{j-1})k_{j-1}} \quad (3.16)$$

$$\alpha^{\Psi_{ij}} = \alpha^{\Psi_{i+1j}} + \alpha^{\Psi_{i-1j}} + \alpha^{\Psi_{ij+1}} + \alpha^{\Psi_{ij-1}}$$

Ces coefficients vérifient les propriétés suivantes :

$$\alpha^{\Psi_{i+1j}} > 0 \quad \alpha^{\Psi_{i-1j}} > 0 \quad \alpha^{\Psi_{ij+1}} > 0 \quad \alpha^{\Psi_{ij-1}} > 0 \quad \alpha^{\Psi_{ij}} > 0 \quad (3.17)$$

3.4.3.2 à l'interface oxyde-silicium :

La condition de continuité des composantes du champ électrique qui résulte du passage du silicium à l'oxyde impose une formulation dont on doit tenir compte durant la discrétisation. Ces conditions sont du type Neumann pour le potentiel et les concentrations des porteurs.

La condition de continuité s'écrit :

$$\left(\varepsilon_{\text{si}} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}} \right)_{\text{si}} - \left(\varepsilon_{\text{ox}} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}} \right)_{\text{ox}} + \sigma_{\text{int}} = 0 \quad (3.18)$$

Où : σ_{int} est la densité de charge surfacique à l'interface.

$$\sigma_{\text{int}} = q \cdot N_{\text{ss}} \cdot \Delta E \quad (3.19)$$

$N_{\text{ss}} = 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ est la densité d'états d'interface

$\Delta E = kT$ ($T=300 \text{ °K}$) est une approximation de l'intervalle d'énergie qui englobe les niveaux d'interfaces .

ε_{ox} , ε_{si} sont respectivement les constantes diélectriques de l'oxyde (SiO_2) et du silicium.

\mathbf{n} est la normale dirigée vers l'extérieur.

Tenir compte de ces conditions dans la discrétisation de l'équation de Poisson conduit à l'expression discrète à l'interface oxyde-silicium [1] [12] :

$$\alpha^{\Psi_{\text{os}_{m+1j}}} \cdot \Psi_{m+1j} + \alpha^{\Psi_{\text{os}_{m-1j}}} \cdot \Psi_{m-1j} + \alpha^{\Psi_{\text{os}_{mj+1}}} \cdot \Psi_{mj+1} + \alpha^{\Psi_{\text{os}_{mj-1}}} \cdot \Psi_{mj-1} = \alpha^{\Psi_{\text{os}_{mj}}} \cdot \Psi_{mj} + \frac{1}{h_m + \xi \cdot h_{m-1}} f^{\text{os}_{mj}}$$

$$(3.20)$$

avec : $\xi = \varepsilon_{\text{ox}}/\varepsilon_{\text{si}}$

$$f^{mj}_{os} = h_m \cdot \lambda^2 \cdot \left\{ n_i \left[u_{mj} \cdot \exp(\psi_{mj}) - v_{mj} \cdot \exp(-\psi_{mj}) \right] - \text{Dop}_{mj} \right\} - \frac{2 \cdot \sigma_{int}}{\epsilon_s} \quad (3.21)$$

m est l'indice i de la ligne correspondant à l'interface.

Les coefficients α se transforment donc comme suit :

$$\begin{aligned} \alpha^{\psi^{os}}_{m+1j} &= \frac{h_m + h_{m-1}}{h_m + \zeta \cdot h_{m-1}} \alpha^{\psi}_{m+1j} & \alpha^{\psi^{os}}_{i-1j} &= \frac{h_{m-1} + h_m}{h_{m-1} + \xi \cdot h_m} \alpha^{\psi}_{i-1j} \\ \alpha^{\psi^{os}}_{mj+1} &= \alpha^{\psi}_{m+1j} & \alpha^{\psi^{os}}_{mj-1} &= \alpha^{\psi}_{mj-1} \\ \alpha^{\psi^{os}}_{mj} &= \alpha^{\psi^{os}}_{mj+1} + \alpha^{\psi^{os}}_{mj-1} + \alpha^{\psi^{os}}_{m+1j} + \alpha^{\psi^{os}}_{m-1j} \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.4.3.3 aux frontières latérales :

Aux points appartenants à une frontière latérale gauche ou droite, c'est la condition de type Neumann qui s'applique aussi bien pour le potentiel électrostatique que pour les densités des porteurs de charges. Le champ électrique s'annule à l'extérieur de la structure, ce qui correspond à la condition de type Neumann pour le potentiel :

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_{y=0} = 0 \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_{y=L_y} = 0 \quad (3.23)$$

Ceci se traduit dans le schéma par :

$$\begin{aligned} \alpha^{\psi}_{i+1j} &= \frac{2}{(h_i + h_{i-1})h_i} & \alpha^{\psi}_{i-1j} &= \frac{2}{(h_i + h_{i-1})h_{i-1}} \\ \alpha^{\psi}_{ij+1} &= \frac{4}{k_j^2} & \alpha^{\psi}_{ij-1} &= 0 \quad \text{pour la frontière gauche.} \\ \alpha^{\psi}_{ij-1} &= \frac{4}{k_{j-1}^2} & \alpha^{\psi}_{ij+1} &= 0 \quad \text{pour la frontière droite.} \end{aligned} \quad (3.24)$$

3.4.3.4 Aux contacts métalliques :

La condition de type Dirichlet s'applique pour le potentiel et les concentrations des porteurs on admettant que : i) les contacts sont idéalisés, ii) la vitesse de recombinaison est infinie, iii) la neutralité électrique y prévaut, iv) que les variables correspondent à l'équilibre thermodynamique.

$$\begin{aligned} \psi_{ij} &= \psi^0_{ij} + \psi_{appl} \quad i=1, j = j_1, j_2 \quad (j_1, j_2 \text{ sont les indices des limites du contact avant}). \\ \psi_{ij} &= \psi^0_{ij} + \psi_{appl} \quad i=N_x, j = 1, N_y \quad (\text{contact arrière}). \end{aligned}$$

3.4.4 Discrétisation des équations de continuité :

En utilisant le couple de variables (Ψ, u, v) les expressions des densité de courants s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= D_n n_i \exp(+\psi) \tilde{N}u \\ \mathbf{J}_p &= D_p n_i \exp(-\psi) \tilde{N}v \end{aligned} \quad (3.25)$$

La discrétisation des équations de continuité, se basant sur les même approximations des dérivées partielles par les expressions aux différences ont fait l'objet de plusieurs études [43] [44]. On a conclu que cette formulation cause une importante erreur de discrétisation et imprécision des calculs. Les oscillations des concentrations des électrons et des trous qui s'observent par conséquent sont dues à l'approximation du potentiel qui figure en forme exponentielle ce qui rend sensible leurs variations. Cet effet est accentué par de trop grandes non-uniformité du maillage.

Pour éviter ces inconvénients Scharfetter et Gummel [46] [37], en supposant que le champ électrique est constant entre deux noeuds voisins, ont proposé le développement des expressions des densités de courant autour d'un noeud à mis distance d'un pas de discrétisation.

$$J_n^x(x, y_j) = J_n^x \Big|_{i+1/2j} + \left(x - x_i - \frac{h_i}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x} J_n^x \Big|_{i+1/2j} + O(h^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} J_n^x \Big|_{i+1/2j} \quad (3.26)$$

avec $x_i \leq x \leq x_{i+1}$

$$J_n^y(x_i, y) = J_n^y \Big|_{ij+1/2} + \left(y - y_j - \frac{k_j}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial y} J_n^y \Big|_{ij+1/2} + O(k^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} J_n^y \Big|_{ij+1/2} \quad (3.27)$$

avec $y_j \leq y \leq y_{j+1}$

$$J_p^x(x, y_j) = J_p^x \Big|_{i+1/2j} + \left(x - x_i - \frac{h_i}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial x} J_p^x \Big|_{i+1/2j} + O(h^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} J_p^x \Big|_{i+1/2j} \quad (3.28)$$

avec $x_i \leq x \leq x_{i+1}$

$$J_p^y(x_i, y) = J_p^y \Big|_{ij+1/2} + \left(y - y_j - \frac{k_j}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial y} J_p^y \Big|_{ij+1/2} + O(k^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} J_p^y \Big|_{ij+1/2} \quad (3.29)$$

avec $y_j \leq y \leq y_{j+1}$

Ces expressions s'identifient aux expressions des densité de courants (3.25), ce qui nous permet d'écrire les équations différentielles et les conditions aux limites décrivant l'évolution des concentrations des électrons et des trous dans l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ et $[y_j, y_{j+1}]$.

$$\begin{aligned} \mu_n n \frac{\partial \psi}{\partial x} - D_n \frac{\partial n}{\partial x} &= J_n^x \Big|_{i+1/2j} + \left(x - x_i - \frac{h_i}{2} \right) \frac{\partial}{\partial x} J_n^x \Big|_{i+1/2j} \\ n(x_i, y_j) &= n_{ij} \quad n(x_{i+1}, y_j) = n_{i+1j} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Une expression analogue s'écrit pour l'équation de continuité des trous.

La résolution de ces équations différentielles permet de déduire la variation de la concentration des électrons et celle des trous dans chaque intervalle de discrétisation [1].

On négligeant les termes en $O(h^3)$ dans la solution analytique on obtient l'approximation de ces expressions :

$$n(x, y_j) = n_{ij} - \frac{1 - \exp\left[\left(\psi_{i+1j} - \psi_{ij}\right) \frac{x - x_i}{h_i}\right]}{1 - \exp(\psi_{i+1j} - \psi_{ij})} (n_{ij} - n_{i+1j}) \quad (3.31)$$

avec : $x_i \leq x \leq x_{i+1}$

$$n(x_i, y) = n_{ij} - \frac{1 - \exp\left[\left(\psi_{ij+1} - \psi_{ij}\right) \frac{y - y_j}{k_j}\right]}{1 - \exp(\psi_{ij+1} - \psi_{ij})} (n_{ij} - n_{ij+1}) \quad (3.32)$$

avec : $y_j \leq y \leq y_{j+1}$

Ces expressions nous permettent enfin de calculer les expressions des densités de courants au centre de chaque intervalle :

$$J_n^x \Big|_{i+1/2j} \cong D_n \Big|_{i+1/2j} \frac{1}{h_i} \left[B(\psi_{ij} - \psi_{i+1j}) n_{ij} - B(\psi_{i+1j} - \psi_{ij}) n_{i+1j} \right] \quad (3.33)$$

$$J_n^y \Big|_{ij+1/2} \cong D_n \Big|_{ij+1/2} \frac{1}{k_j} \left[B(\psi_{ij} - \psi_{ij+1}) n_{ij} - B(\psi_{ij+1} - \psi_{ij}) n_{ij+1} \right] \quad (3.34)$$

$$J_p^x \Big|_{i+1/2j} \cong D_p \Big|_{i+1/2j} \frac{1}{h_i} \left[B(\psi_{ij} - \psi_{i+1j}) p_{i+1j} - B(\psi_{i+1j} - \psi_{ij}) p_{ij} \right] \quad (3.35)$$

$$J_p^y \Big|_{ij+1/2} \cong D_p \Big|_{ij+1/2} \frac{1}{k_j} \left[B(\psi_{ij} - \psi_{ij+1}) p_{ij+1} - B(\psi_{ij+1} - \psi_{ij}) p_{ij} \right] \quad (3.36)$$

Où $B(x) = \frac{x}{\exp(x) - 1}$ est la fonction de Bernoulli qui diverge lorsque x est très voisin de zéro.

Cet divergence doit être éliminée par une approximation appropriée dans un intervalle autour de zéro.

Les approximations des densités de courant sont suggérées par Scharfetter et Gummel, elles nous permettent de déduire les expressions discrètes finales des équations de continuités.

3.4.4 1 Discrétisation des équations de continuité dans le Silicium :

Les approximations des dérivées premières à ce niveau, en utilisant les résultats précédents, s'appliquent convenablement et permettent d'écrire l'équation discrète des électrons aux noeuds de la région du semiconducteur loin des frontières, de l'interface et des contacts:

$$\alpha_{i+1j}^n \cdot n_{i+1j} + \alpha_{i-1j}^n \cdot n_{i-1j} + \alpha_{ij+1}^n \cdot n_{ij+1} + \alpha_{ij-1}^n \cdot n_{ij-1} = \alpha_{ij}^n \cdot n_{ij} + R(\psi, n, p) \Big|_{ij} \quad (3.37)$$

Les coefficients α^n dépendent des fonctions de Bernoulli, des constantes de diffusion et des coefficients de l'équation de Poisson :

$$\begin{aligned}
\alpha^n_{i+1j} &= D_n \Big|_{i+1/2j} \cdot \alpha^\Psi_{i+1j} \cdot B(\Psi_{i+1j} - \Psi_{ij}) \\
\alpha^n_{i-1j} &= D_n \Big|_{i-1/2j} \cdot \alpha^\Psi_{i-1j} \cdot B(\Psi_{i-1j} - \Psi_{ij}) \\
\alpha^n_{ij+1} &= D_n \Big|_{ij+1/2} \cdot \alpha^\Psi_{ij+1} \cdot B(\Psi_{ij+1} - \Psi_{ij}) \\
\alpha^n_{ij-1} &= D_n \Big|_{ij-1/2} \cdot \alpha^\Psi_{ij-1} \cdot B(\Psi_{ij-1} - \Psi_{ij}) \\
\alpha^n_{ij} &= \alpha^n_{i+1j} + \alpha^n_{i-1j} + \alpha^n_{ij+1} + \alpha^n_{ij-1}
\end{aligned} \tag{3.38}$$

D'une manière analogue on déduit l'expression de l'équation de continuité discrète des trous :

$$\alpha^p_{i+1j} \cdot p_{i+1j} + \alpha^p_{i-1j} \cdot p_{i-1j} + \alpha^p_{ij+1} \cdot p_{ij+1} + \alpha^p_{ij-1} \cdot p_{ij-1} = \alpha^p_{ij} \cdot p_{ij} + R(\Psi, n, p) \Big|_{ij} \tag{3.39}$$

Les coefficients α^p dépendent des fonctions de Bernoulli, des constantes de diffusion et des coefficients de l'équation de Poisson :

$$\begin{aligned}
\alpha^p_{i+1j} &= D_p \Big|_{i+1/2j} \cdot \alpha^\Psi_{i+1j} \cdot B(\Psi_{ij} - \Psi_{i+1j}) \\
\alpha^p_{i-1j} &= D_p \Big|_{i-1/2j} \cdot \alpha^\Psi_{i-1j} \cdot B(\Psi_{ij} - \Psi_{i-1j}) \\
\alpha^p_{ij+1} &= D_p \Big|_{ij+1/2} \cdot \alpha^\Psi_{ij+1} \cdot B(\Psi_{ij} - \Psi_{ij+1}) \\
\alpha^p_{ij-1} &= D_p \Big|_{ij-1/2} \cdot \alpha^\Psi_{ij-1} \cdot B(\Psi_{ij} - \Psi_{ij-1}) \\
\alpha^p_{ij} &= \alpha^p_{i+1j} + \alpha^p_{i-1j} + \alpha^p_{ij+1} + \alpha^p_{ij-1}
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Les coefficients de diffusion D_n et D_p sont évalués à mi-distance de chaque intervalle par interpolation linéaire :

$$D_n \Big|_{i+1/2j} = \frac{D_n \Big|_{ij} + D_n \Big|_{i+1j}}{2} \tag{3.41}$$

3.4.4 2 Discrétisation des équations de continuité à l'interface :

A l'interface Oxyde-Silicium, le même schéma de discrétisation s'applique sauf qu'il faut tenir compte de la recombinaison en surface R_s .

La composante normale à l'interface de la densité de courant s'écrit :

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = -q \cdot R_{\text{surf}} \tag{3.42}$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = +q \cdot R_{\text{surf}} \tag{3.43}$$

Cette condition se traduit dans le schéma aux différences (figure 3.3) à l'interface par :

$$\begin{aligned}
J_n^x \Big|_{i-1/2j} &= -2 \cdot R_{\text{surf}} - J_n^x \Big|_{i+1/2j} \\
J_p^x \Big|_{i-1/2j} &= +2 \cdot R_{\text{surf}} - J_p^x \Big|_{i+1/2j}
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Ceci nous permet donc d'écrire les équations des électrons et des trous :

$$\alpha^{n^{os}}_{m+1j} \cdot n_{m+1j} + \alpha^{n^{os}}_{mj+1} \cdot n_{mj+1} + \alpha^{n^{os}}_{mj-1} \cdot n_{mj-1} = \alpha^{n^{os}}_{mj} \cdot n_{mj} + R(\psi, n, p)|_{mj} - \frac{2}{h_m} R_{surf}|_{mj} \quad (3.45)$$

$$\alpha^{p^{os}}_{m+1j} \cdot p_{m+1j} + \alpha^{p^{os}}_{mj+1} \cdot p_{mj+1} + \alpha^{p^{os}}_{mj-1} \cdot p_{mj-1} = \alpha^{p^{os}}_{mj} \cdot p_{mj} + R(\psi, n, p)|_{mj} + \frac{2}{h_m} R_{surf}|_{mj} \quad (3.46)$$

Les coefficients α^{os} sont identiques à ceux des équations écrites dans la région du silicium.

3.4.4 3 Discrétisation des équations de continuité aux frontières latérales :

La méthode des points fictifs nous donne en considérant les conditions suivantes :

$$\mathbf{J}_n \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.47)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.48)$$

Les mêmes expressions discrètes sont utilisées en remplaçant les coefficients par ceux qui correspondent à chaque frontière.

- Frontière droite : $\alpha^{n}_{i+1j} = 0$; - Frontière gauche : $\alpha^{n}_{i-1j} = 0$

3.4.4 4 Discrétisation des équations de continuité aux contacts métalliques :

Aux frontières le long des contacts métalliques ohmiques, les concentrations des porteurs correspondent à l'équilibre thermodynamique, et la neutralité électrique y prévaut :

$$n \cdot p = n_i^2 \quad n - p - dop = 0 \quad (3.49)$$

Ce qui donne en chaque point :

- Dop_{ij} > 0

$$n_{ij} = n_i \sqrt{1 + \left(\frac{Dop_{ij}}{2n_i}\right)^2} + \frac{Dop_{ij}}{2} \quad (3.50)$$

$$p_{ij} = \frac{n_i^2}{n_{ij}}$$

- Dop_{ij} < 0

$$p_{ij} = n_i \sqrt{1 + \left(\frac{Dop_{ij}}{2n_i}\right)^2} - \frac{Dop_{ij}}{2} \quad (3.51)$$

$$n_{ij} = \frac{n_i^2}{p_{ij}}$$

3.5 Linéarisation des équations :

Les étapes précédentes nous ont permis de discrétiser les équations et d'aboutir à un système non linéaire dont les inconnues sont : Le potentiel électrostatique, la concentration des électrons et la concentration des trous. Nous introduisant $3.N_x.N_y$ inconnues si on a $N_x.N_y$ nœuds.

Il est possible d'écrire le système sous la forme condensée suivante :

$$F(\xi) = \begin{pmatrix} F_\psi(\psi, n, p) \\ F_n(\psi, n, p) \\ F_p(\psi, n, p) \end{pmatrix} = 0 \quad (3.52)$$

F_ψ dénote l'équation discrète de Poisson (3.15), F_n et F_p dénotent respectivement les équations de continuité discrètes des électrons et des trous (3.37,39).

La non-linéarité de ce système est due à la présence des termes exponentiels et des produits $n.p$

Le traitement de ces équations revient donc à la résolution de ce système en adaptant les méthodes numériques classiques.

On distingue parmi les méthodes de linéarisation des équations (3.15,37 et 39) :

- La méthode de Newton Raphson pour le traitement simultané [12]. Cette méthode reste pratique dans les cas où les équations sont liées, ce qui correspond par exemple au fonctionnement en forte injection.
- La méthode de Gummel pour les traitements séquentiels [37][46]: Cette méthode s'applique dans les cas où les équations sont faiblement liées, par exemple lors du fonctionnement du dispositif en faible injection.

3.5.1 Méthode de Newton Raphson :

En adoptant une approximation initiale du vecteur ξ^0 qui doit être comprise dans un voisinage immédiat de la solution exacte ξ supposée existante et unique dans ce voisinage, la méthode permet de calculer une meilleure approximation ξ_{ij} donnée par :

$$\xi_k = \xi_k^0 + \delta\xi_k \quad (3.53)$$

La correction $\delta\xi_{ij}$ est la solution du système d'équations linéaire :

$$\mathbf{J}_k \cdot \delta\xi_k = -\mathbf{F}_k(\xi_k^0) \quad (3.54)$$

où \mathbf{J}_k est la matrice Jacobienne du système.

Considérons le système d'équations linéaire (3.54) repris ci dessus à l'itération m :

$$\mathbf{J}_k^m \cdot \delta\xi_k^m = -\mathbf{F}_k^m(\xi_k^0) \quad (3.55)$$

Comme la méthode de discrétisation à cinq points fait intervenir les quatre plus proches voisins, le système (3.55) peut s'écrire:

$$HM_{ij} \cdot \delta\xi_{ij+1} + DM_{ij} \cdot \delta\xi_{i+1j} + GM_{ij} \cdot \delta\xi_{i-1j} + BM_{ij} \cdot \delta\xi_{ij-1} + CM_{ij} \cdot \delta\xi_{ij} + F_{ij}(\xi_{ij}) = 0 \quad (3.56)$$

BM_{ij} , GM_{ij} , CM_{ij} , DM_{ij} , HM_{ij} sont des matrices définies suivant le type de la méthode de résolution utilisée.

Dans le cas de la résolution simultanée, la matrice Jacobienne du système est pentadiagonale composée de bloc 3x3, les coefficients sont définis à chaque point comme suit

$$\begin{aligned}
 DM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta \psi_{i+1j}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta n_{i+1j}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta p_{i+1j}} \\ \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta \psi_{i+1j}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta n_{i+1j}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta p_{i+1j}} \\ \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta \psi_{i+1j}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta n_{i+1j}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta p_{i+1j}} \end{bmatrix} & GM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{dF^\Psi_{ij}}{d\psi_{i-1j}} & \frac{dF^\Psi_{ij}}{dn_{i-1j}} & \frac{dF^\Psi_{ij}}{dp_{i-1j}} \\ \frac{dF^n_{ij}}{d\psi_{i-1j}} & \frac{dF^n_{ij}}{dn_{i-1j}} & \frac{dF^n_{ij}}{dp_{i-1j}} \\ \frac{dF^P_{ij}}{d\psi_{i-1j}} & \frac{dF^P_{ij}}{dn_{i-1j}} & \frac{dF^P_{ij}}{dp_{i-1j}} \end{bmatrix} \\
 HM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta \psi_{ij+1}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta n_{ij+1}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta p_{ij+1}} \\ \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta \psi_{ij+1}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta n_{ij+1}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta p_{ij+1}} \\ \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta \psi_{ij+1}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta n_{ij+1}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta p_{ij+1}} \end{bmatrix} & BM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta \psi_{ij-1}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta n_{ij-1}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta p_{ij-1}} \\ \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta \psi_{ij-1}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta n_{ij-1}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta p_{ij-1}} \\ \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta \psi_{ij-1}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta n_{ij-1}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta p_{ij-1}} \end{bmatrix} \\
 CM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta \psi_{ij}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta n_{ij}} & \frac{\delta F^\Psi_{ij}}{\delta p_{ij}} \\ \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta \psi_{ij}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta n_{ij}} & \frac{\delta F^n_{ij}}{\delta p_{ij}} \\ \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta \psi_{ij}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta n_{ij}} & \frac{\delta F^P_{ij}}{\delta p_{ij}} \end{bmatrix} & & (3.57)
 \end{aligned}$$

3.5.2 Méthode de Gummel :

Le traitement séquentiel des équations (3.15,37) et (3.39) consiste à résoudre l'équation de poisson non linéaire pour le potentiel en prenant les variables n et p de l'itération précédente, puis résoudre les deux équations de continuité pour les concentrations des porteurs en injectant le potentiel déjà calculé en (3.15). Ce schéma donne deux systèmes linéaires à résoudre séparément :

$$\mathbf{J}^\Psi(\psi^m, n^{m-1}, p^{m-1}) \cdot \delta \psi^m = -F^\Psi(\psi^m, n^{m-1}, p^{m-1}) \quad (3.58)$$

$$\mathbf{J}^\zeta(\psi^{m-1}, n^m, p^m) \cdot \delta \zeta^m = -F^\zeta(\psi^{m-1}, n^m, p^m) \quad (3.59)$$

ζ est le vecteur (n,p) ; \mathbf{J}^Ψ est la matrice jacobienne de l'équation de poisson composée d'éléments simples de structure pentadiagonale.

$$DM_{ij} = \frac{\delta F^{\Psi}_{ij}}{\delta \Psi_{i+1j}} ; GM_{ij} = \frac{\delta F^{\Psi}_{ij}}{\delta \Psi_{i-1j}} ; HM_{ij} = \frac{\delta F^{\Psi}_{ij}}{\delta \Psi_{ij+1}} ; BM_{ij} = \frac{\delta F^{\Psi}_{ij}}{\delta \Psi_{ij-1}} ; CM_{ij} = \frac{\delta F^{\Psi}_{ij}}{\delta \Psi_{ij}} \quad (3.60)$$

\mathbf{J}_Z est la matrice Jacobienne déduite de la linéarisation des équations de continuité ; les éléments de ces matrices se calculent de la même manière que dans le cas simultané mais pour les deux équations F_n et F_p .

Les éléments de la matrice prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} DM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta n_{i+1j}} & \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta p_{i+1j}} \\ \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta n_{i+1j}} & \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta p_{i+1j}} \end{bmatrix} & GM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta n_{i-1j}} & \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta p_{i-1j}} \\ \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta n_{i-1j}} & \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta p_{i-1j}} \end{bmatrix} \\ HM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta n_{ij+1}} & \frac{\delta F^{n}_{ij}}{\delta p_{ij+1}} \\ \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta n_{ij+1}} & \frac{\delta F^{p}_{ij}}{\delta p_{ij+1}} \end{bmatrix} & BM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{dF^{n}_{ij}}{dn_{ij-1}} & \frac{dF^{n}_{ij}}{dp_{ij-1}} \\ \frac{dF^{p}_{ij}}{dn_{ij-1}} & \frac{dF^{p}_{ij}}{dp_{ij-1}} \end{bmatrix} \\ CM_{ij} &= \begin{bmatrix} \frac{dF^{n}_{ij}}{dn_{ij}} & \frac{dF^{n}_{ij}}{dp_{ij}} \\ \frac{dF^{p}_{ij}}{dn_{ij}} & \frac{dF^{p}_{ij}}{dp_{ij}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.61)$$

En résumé, l'étape de linéarisation nous donne un ou plusieurs systèmes linéaires $A.X=B$ avec A une matrice pentadiagonale très creuse. Cette particularité fort intéressante doit être exploitée dans le choix de la méthode de résolution du système linéaire et dans la programmation pour optimiser l'espace mémoire de l'ordinateur et le temps de calcul.

3.6 Résolution numérique du système linéaire :

Pour déterminer à chaque itération de Newton la correction $\delta \xi$ à appliquer à la solution précédente, on doit résoudre le système (3.15), (3.37) et (3.39) à matrice pentadiagonale très creuse de dimension $3.N_x.N_y$ dans le cas simultané ou les deux systèmes ; (3.15) (équation de Poisson) dont la matrice jacobienne est de dimension $N_x.N_y$ et (3.37,39) de dimension $2.N_x.N_y$ (équations de continuité) dans le cas de la résolution séquentielle.

En général, N_x et N_y sont relativement grands ce qui donne une dimension très élevée de la matrice J .

3.6.1 Méthodes de résolution :

Les méthodes adéquates pour le traitement de ces matrices se relèvent des techniques itératives spécifiques aux grands systèmes [52].

Toute méthode itérative de résolution du système $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$ repose sur la décomposition de \mathbf{A} , tel que

$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$ ou \mathbf{D} est la diagonale de \mathbf{A} , \mathbf{L} est la matrice triangulaire inférieure stricte extraite de \mathbf{A} et \mathbf{U} est la matrice triangulaire supérieure stricte extraite de \mathbf{A} .

Pour un vecteur d'initialisation \mathbf{X}^0 on utilisera un algorithme qui nous permet le calcul d'un vecteur \mathbf{X} le plus proche de la solution.

Les algorithmes itératifs se basent sur l'une des méthodes suivantes :

- Méthode de Jacobi :

L'algorithme de la méthode itérative de Jacobi s'écrit :

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B} \quad (3.62)$$

Comme critère d'arrêt des itérations le rapport $\frac{\|\mathbf{r}^{(k)}\|}{\|\mathbf{b}\|} < \varepsilon$ est utilisé. \mathbf{r} est le vecteur résidu $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)}$, ε est une précision définie.

- Méthode de Gauss-Seidel :

L'algorithme de la méthode itérative de Gauss-Seidel s'écrit :

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{L} \mathbf{X}^{(k+1)} + \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{D}^{-1} \mathbf{B} \quad (3.63)$$

Le même critère que précédemment peut être utilisé pour l'arrêt des itérations.

- Méthode de relaxation :

$$(\mathbf{D} - \omega \mathbf{L}) \cdot \mathbf{X}^{(k+1)} = [(\mathbf{1} - \omega) \mathbf{D} + \omega \mathbf{U}] \cdot \mathbf{X}^{(k)} + \omega \mathbf{B} \quad (3.64)$$

ou ω est le facteur de relaxation compris entre 0 et 2.

Une condition suffisante de convergence des trois algorithmes est que la matrice \mathbf{A} soit à diagonale fortement dominante.

La méthode de relaxation est particulièrement adaptée pour la résolution des grands systèmes linéaires dans lesquels la matrice \mathbf{A} est très creuse ; elle simplifie considérablement le nombre d'itérations et diminue l'influence des erreurs d'arrondis.

La possibilité d'accélération de la convergence est liée à l'emploi de la sur-relaxation.

Une valeur optimale du coefficient de sur-relaxation ω_{opt} est nécessaire pour assurer à la méthode SOR son avantage. La détermination de ω_{opt} exige le calcul du rayon spectral de la matrice jacobienne et ceci pour chacune des itérations successives vu que ces matrices changent. Un tel calcul est très difficile et complique le schéma mais des estimations grossières et méthodiques de ω peuvent être avantageuses.

Parmi d'autres méthodes itératives utilisées on citera :

- Méthode ICCG : (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient) [52] utilisant l'élimination de Gauss pour le conditionnement de la matrice \mathbf{A} en utilisant comme décomposition $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^t$. Cet algorithme est applicable pour les systèmes à matrices symétriques.
- Méthode CGS : (Conjugate Gradient Squared) [53] se basant sur la généralisation de la théorie du gradient conjugué.
- Méthode ADI : (Alternating Direction Implicit) [54] [55] se basant sur la décomposition $\mathbf{A} = \mathbf{H} + \mathbf{V}$, le processus est convergent si \mathbf{H} et \mathbf{V} sont définies positives ou l'une des matrices est définie positive l'autre est non définie négative.

3.6.2 La solution initiale :

Toutes les méthodes citées ci dessus supposent la connaissance d'une solution initiale à partir de laquelle le processus itératif évolue. Dans le cas de la méthode de Newton cette initialisation doit être soignée pour rester dans le voisinage immédiat de la solution exacte et assurer une convergence quadratique du processus ; la méthode de Gummel par contre, est convergente sans contraintes sur la solution initiale.

En général la solution initiale adaptée se construit à partir du profil du dopage. En absence d'influence extérieure la structure est caractérisée uniquement par ce profil qui détermine le potentiel électrostatique et la densité des porteurs.

Ce mode d'initialisation n'est pas très rigoureux aux voisinages de la zone déserte ce qui ralentit la convergence au début du processus itératif mais il décrit globalement le profil des variables.

Pour un fonctionnement hors équilibre du dispositif, les conditions extérieures sont graduellement modifiées, en prenant à chaque fois au départ de chaque nouvelle situation la solution la plus récente obtenue.

3.7 Conclusion :

Cette partie décrit essentiellement la méthode des différences finies à cinq points utilisée pour passer du système d'équations continue au système discret. L'équation de Poisson discrète s'obtient sans difficultés dans toutes les régions du domaine d'intégration. Pour la discrétisation de la densité de courant, la méthode de Scharfetter Gummel est utilisée pour éviter les instabilités du système.

Le système discret obtenu peut être linéarisé par la méthode de Newton-Raphson pour le traitement simultané, ou par la méthode de Gummel pour le traitement séquentiel. Dans les deux cas nous aboutissons à des systèmes linéaires $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$ où la matrice \mathbf{A} est pentadiagonale, généralement à diagonale dominante. Les méthodes itératives sont les plus adéquates pour résoudre ces systèmes pour enfin calculer en tout point du dispositif le potentiel électrostatique, les concentrations des électrons et des trous, les densités de courant et les quasi-potentiels de Fermi des porteurs ainsi que toutes les grandeurs qui dépendent de ces variables.

CHAPITRE 4

RESOLUTION SEQUENTIELLE DES EQUATIONS DU SEMICONDUCTEUR

4.1 Introduction :

La méthode de Newton utilisée pour résoudre simultanément les équations présente les inconvénients suivants :

- Une convergence locale qui n'est assurée que si la solution initiale est suffisamment travaillée, par conséquent, les procédures de conditionnements et d'amortissement qui sont nécessaires pour améliorer la convergence alourdissent les calculs.
- La méthode nécessite l'utilisation des machines avec une grande capacité mémoire lorsqu'il est indispensable d'utiliser un réseau de discrétisation très fin ou dans le cas du traitement tridimensionnel.

Pour éviter ces difficultés plusieurs schémas de résolutions en mode séquentiel ont fait l'objet d'études intensives depuis la présentation en 1964 de l'algorithme de Gummel [46] pour une structure unidimensionnelle.

Les algorithmes présentés actuellement sont étendus au cas bidimensionnel [58] et tridimensionnels [61] et ils sont améliorés en utilisant d'autres schémas qui présentent des avantages en convergence et en temps de calcul.

Dans ce chapitre, nous présenterons la méthodologie utilisée pour traiter les équations en utilisant un schéma nouvellement introduit et qui offre une souplesse d'utilisation et une convergence sûre. Nous présenterons les résultats obtenus pour le cas de l'équilibre puis hors équilibre en ne tenant pas compte de l'aspect génération de porteurs et du régime transitoire qui seront traités dans les chapitres suivants.

4.2 Principes de la méthode de résolution séquentielle :

Pour la résolution séquentielle des équations dans un dispositif semiconducteurs à jonction et à l'état stationnaire une méthode itérative a été développée par Mayergoyz [58]. La technique utilisée se base sur le schéma de Gummel pour le découplage des équations aux dérivées partielles (3.1-3.5) et la résolution séparée de chaque équation. Cette méthode est une généralisation du schéma développé pour l'équation de Poisson par le même auteur [56] [57].

Cette méthode a l'avantage de converger globalement sans conditions sur le modèle d'initialisation des variables (ψ, n, p). Elle reste valable dans les cas des faibles polarisations et en régime de faible injection.

La résolution s'effectue point par point et indépendamment du reste des noeuds ce qui permet d'utiliser un maillage dense sans être limité en espace mémoire de l'ordinateur.

4.2.1 Formulation des équations :

En régime stationnaire, le fonctionnement du dispositif est régi par l'équation de Poisson et les équations de continuités des électrons et des trous. La structure de simulation est formée par un entrelacement de droites parallèlement aux axes de coordonnées x et y . Les équations de continuités sont écrites en fonction des variables de Slotboom u et v .

$$u = \frac{n}{n_i} \cdot \exp\left(-\frac{V}{V_t}\right) = \exp\left(-\frac{\phi_n}{V_t}\right) \quad v = \frac{p}{n_i} \cdot \exp\left(\frac{V}{V_t}\right) = \exp\left(\frac{\phi_p}{V_t}\right) \quad (4.1)$$

Où ϕ^n et ϕ^p sont les quasi potentiel de Fermi des électrons et des trous, n_i est la concentration intrinsèque.

Les équations découplées par la méthode de Gummel s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi^{(j+1)} &= \lambda^2 \left[u^{(j)} \cdot \exp(\psi^{(j+1)}) - v^{(j)} \exp(-\psi^{(j+1)}) \right] - \lambda^2 \cdot \text{Dop} \\ \nabla \cdot \left(D_n \cdot n_i \cdot \exp(\psi^{(j+1)}) \cdot \nabla u^{(j+1)} \right) &= R(\psi^{(j)}, u^{(j+1)}, v^{(j)}) \\ \nabla \cdot \left(D_p \cdot n_i \cdot \exp(-\psi^{(j+1)}) \cdot \nabla v^{(j+1)} \right) &= R(\psi^{(j)}, u^{(j)}, v^{(j+1)}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

Où j est l'ordre de l'itération de Gummel, n_i est la concentration intrinsèque effective.

R le terme de génération recombinaison écrit en fonction des variables de l'itération précédente et celles de l'itération courante. λ est une constante induite de la normalisation du système.

4.2.2 Discrétisation des équations :

Le schéma aux différences finies à cinq points décrit dans le paragraphe 3.4.2 appliqué au maillage de la structure de simulation nous donne les équations discrètes qui s'écrivent de la même forme dans le silicium, aux frontières latérales et à l'interface oxyde-silicium.

Cette forme particulière de l'équation de Poisson et des équations de continuité permet de généraliser l'algorithme tout en offrant une souplesse en programmation.

Les équations discrètes s'écrivent [57] [60] [62, 63] :

$$\begin{aligned} \alpha^{n_{i+1j}} \cdot \eta_{i+1j} + \alpha^{n_{i-1j}} \cdot \eta_{i-1j} + \alpha^{n_{ij+1}} \cdot \eta_{ij+1} + \alpha^{n_{ij-1}} \cdot \eta_{ij-1} = \\ \alpha^{n_{ij}} \cdot \eta_{ij} + G_{ij}(\eta_{ij}) + f_{ij} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Où η est l'une des variables (ψ, u, v) correspondant à l'équation à résoudre.

α^n sont les coefficients de l'équation discrète relative à la variable η .

4.2.2.1 Equation de Poisson :

L'identification des coefficients de l'équation (4.3) à ceux de l'équation discrète 3.15 nous donne :

$$G_{ij}(\psi_{ij}) = \lambda^2 \cdot n_i \left[u_{ij} \cdot \exp(\psi_{ij}) - v_{ij} \cdot \exp(-\psi_{ij}) \right] \quad (4.4)$$

$$f_{ij} = -\lambda^2 \cdot \text{Dop}_{ij} \quad (4.5)$$

$$\alpha^{\Psi}_{i+1j} = \frac{2}{h_i(h_i + h_{i-1})} \quad \alpha^{\Psi}_{i-1j} = \frac{2}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})}$$

$$\alpha^{\Psi}_{ij+1} = \frac{2}{k_j(k_j + k_{j-1})} \quad \alpha^{\Psi}_{ij-1} = \frac{2}{k_{j-1}(k_j + k_{j-1})} \quad (4.6)$$

$$\alpha^{\Psi}_{ij} = \alpha^{\Psi}_{i+1j} + \alpha^{\Psi}_{i-1j} + \alpha^{\Psi}_{ij+1} + \alpha^{\Psi}_{ij-1}$$

A l'interface oxyde-silicium ces expressions s'écrivent [1] [12] :

$$G_{mj}(\Psi_{mj}) = \frac{h_m}{h_m + \zeta h_{m-1}} \cdot \lambda^2 \cdot n_i \left[u_{mj} \cdot \exp(\Psi_{mj}) - v_{mj} \cdot \exp(-\Psi_{mj}) \right] - \frac{h_m}{h_m + \zeta h_{m-1}} \cdot \frac{2 \cdot \sigma_{\text{int}}}{\epsilon_s} \quad (4.7)$$

$$f_{mj} = -\frac{h_m}{h_m + \zeta h_{m-1}} \cdot \lambda^2 \cdot \text{Dop}_{mj} \quad (4.8)$$

$$\alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{m+1j} = \frac{h_m + h_{m-1}}{h_m + \zeta h_{m-1}} \alpha^{\Psi}_{m+1j} \quad \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{m-1j} = \frac{h_{m-1} + h_m}{h_{m-1} + \xi h_m} \alpha^{\Psi}_{m-1j}$$

$$\alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{mj+1} = \alpha^{\Psi}_{mj+1} \quad \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{mj-1} = \alpha^{\Psi}_{mj-1} \quad (4.9)$$

$$\alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{mj} = \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{mj+1} + \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{mj-1} + \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{m+1j} + \alpha^{\Psi^{\text{OS}}}_{m-1j}$$

4.2.2.2 Equations de continuité :

Dans les équations de continuité le terme de génération recombinaison est introduit en utilisant le modèle de Seidman [64].

$$R(\Psi, u, v) = n_i^2 (u \cdot v - 1) \cdot r(\Psi, u, v) \quad (4.10)$$

Pour les électrons ce terme s'écrit :

$$R\left(\Psi^{(j)}, u^{(j+1)}, v^{(j)}\right) = n_i^2 \left(u^{(j+1)} \cdot v^{(j)} - 1 \right) \cdot r\left(\Psi^{(j)}, u^{(j+1)}, v^{(j)}\right) \quad (4.11)$$

Pour les trous :

$$R\left(\Psi^{(j)}, u^{(j)}, v^{(j+1)}\right) = n_i^2 \left(u^{(j)} \cdot v^{(j+1)} - 1 \right) \cdot r\left(\Psi^{(j)}, u^{(j)}, v^{(j+1)}\right) \quad (4.12)$$

Les termes des équations de continuité discrètes s'écrivent alors :

Pour les électrons :

$$G_{ij} = \left(n_i^2 \cdot v_{ij} \cdot r_{ij} \right) \cdot u_{ij} \quad (4.13)$$

$$f_{ij} = -n_i^2 \cdot r_{ij}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^u_{i+1j} &= D_n \Big|_{i+1/2j} \cdot \alpha^{\psi_{i+1j}} \cdot B(\psi_{ij} - \psi_{i+1j}) \cdot n_i \cdot \exp(\psi_{ij}) \\
\alpha^u_{i-1j} &= D_n \Big|_{i-1/2j} \cdot \alpha^{\psi_{i-1j}} \cdot B(\psi_{ij} - \psi_{i-1j}) \cdot n_i \cdot \exp(\psi_{ij}) \\
\alpha^u_{ij+1} &= D_n \Big|_{ij+1/2} \cdot \alpha^{\psi_{ij+1}} \cdot B(\psi_{ij} - \psi_{ij+1}) \cdot n_i \cdot \exp(\psi_{ij}) \\
\alpha^u_{ij-1} &= D_n \Big|_{ij-1/2} \cdot \alpha^{\psi_{ij-1}} \cdot B(\psi_{ij} - \psi_{ij-1}) \cdot n_i \cdot \exp(\psi_{ij}) \\
\alpha^u_{ij} &= \alpha^u_{i+1j} + \alpha^u_{i-1j} + \alpha^u_{ij+1} + \alpha^u_{ij-1}
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Pour les trous :

$$\begin{aligned}
G_{ij} &= (n_i^2 \cdot u_{ij} \cdot r_{ij}) \cdot v_{ij} \\
f_{ij} &= -n_i^2 \cdot r_{ij} \\
\alpha^v_{i+1j} &= D_p \Big|_{i+1/2j} \cdot \alpha^{\psi_{i+1j}} \cdot B(\psi_{i+1j} - \psi_{ij}) \cdot n_i \cdot \exp(-\psi_{ij}) \\
\alpha^v_{i-1j} &= D_p \Big|_{i-1/2j} \cdot \alpha^{\psi_{i-1j}} \cdot B(\psi_{i-1j} - \psi_{ij}) \cdot n_i \cdot \exp(-\psi_{ij}) \\
\alpha^v_{ij+1} &= D_p \Big|_{ij+1/2} \cdot \alpha^{\psi_{ij+1}} \cdot B(\psi_{ij+1} - \psi_{ij}) \cdot n_i \cdot \exp(-\psi_{ij}) \\
\alpha^v_{ij-1} &= D_p \Big|_{ij-1/2} \cdot \alpha^{\psi_{ij-1}} \cdot B(\psi_{ij-1} - \psi_{ij}) \cdot n_i \cdot \exp(-\psi_{ij}) \\
\alpha^v_{ij} &= \alpha^v_{i+1j} + \alpha^v_{i-1j} + \alpha^v_{ij+1} + \alpha^v_{ij-1}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

A l'interface oxyde-silicium ces expressions se modifient en :

$$\begin{aligned}
R^{os}_{mj}(\psi_{mj}, u_{mj}, v_{mj}) &= R_{mj}(\psi_{mj}, u_{mj}, v_{mj}) + \frac{2}{h_m} R_{surf}(\psi_{mj}, u_{mj}, v_{mj}) \\
\alpha^v_{m-1j} &= 0
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Le terme de recombinaison en surface R_{surf} (expression 2.30) s'écrit sous la forme (4.10), il est introduit sans difficultés dans les équations à l'interface.

4.2.3 Algorithme de résolution :

La séquence de résolution des équations sera comme suit :

- A - Résolution de l'équation de Poisson non linéaire en ψ .
- B - Résolution de l'équation de continuité des électrons en u en utilisant la nouvelle valeur du potentiel.
- C - Résolution de l'équation de continuité des trous en v en utilisant le couple des nouvelles valeurs (ψ, u)

Le processus itératif A B C se répète jusqu'à la satisfaction d'un critère de convergence.

L'organigramme de la figure 4.1 montre les différentes étapes de ce processus.

La méthode appliquée pour chaque équation se décompose en deux boucles :

- Une boucle externe (indice k) résoud à chaque point du réseau de discrétisation le système d'équations suivant [58] :

$$\alpha_{ij} \cdot \eta_{ij}^{(k+1)} + G_{ij}(\eta_{ij}^{(k+1)}) - F_{ij}(\eta_{ij}^{(k+1)}) = 0 \quad (4.18)$$

$$F_{ij}^{(k+1)} = \alpha_{i+1j} \cdot \eta_{i+1j}^{(k)} + \alpha_{i-1j} \cdot \eta_{i-1j}^{(k)} + \alpha_{ij+1} \cdot \eta_{ij+1}^{(k)} + \alpha_{ij-1} \cdot \eta_{ij-1}^{(k)} - f_{ij} \quad (4.19)$$

- Une boucle interne (indice v) résout l'équation (4.18) au inconnues $\eta_{ij}^{(k+1)}$ par la méthode itérative de Newton unidimensionnelle.
-

$$\eta_{ij}^{(k+1)(v+1)} = \eta_{ij}^{(k+1)(v)} - \frac{\alpha_{ij} \cdot \eta_{ij}^{(k+1)(v)} + G_{ij}^{(k+1)(v)} - F_{ij}^{(k+1)(v)}}{\alpha_{ij} + \left[\frac{\partial G_{ij}}{\partial \eta_{ij}} \right] (\eta_{ij}^{(k+1)(v)})} \quad (4.20)$$

L'équation (4.20) nous donne la solution en η au noeud (i,j) qui servira à évaluer F au prochain noeud. En refait cette procédure pour tout les noeuds du réseau. Un critère de convergence à la fin de chaque boucle externe est exécuté pour l'arrêt éventuel des itérations.

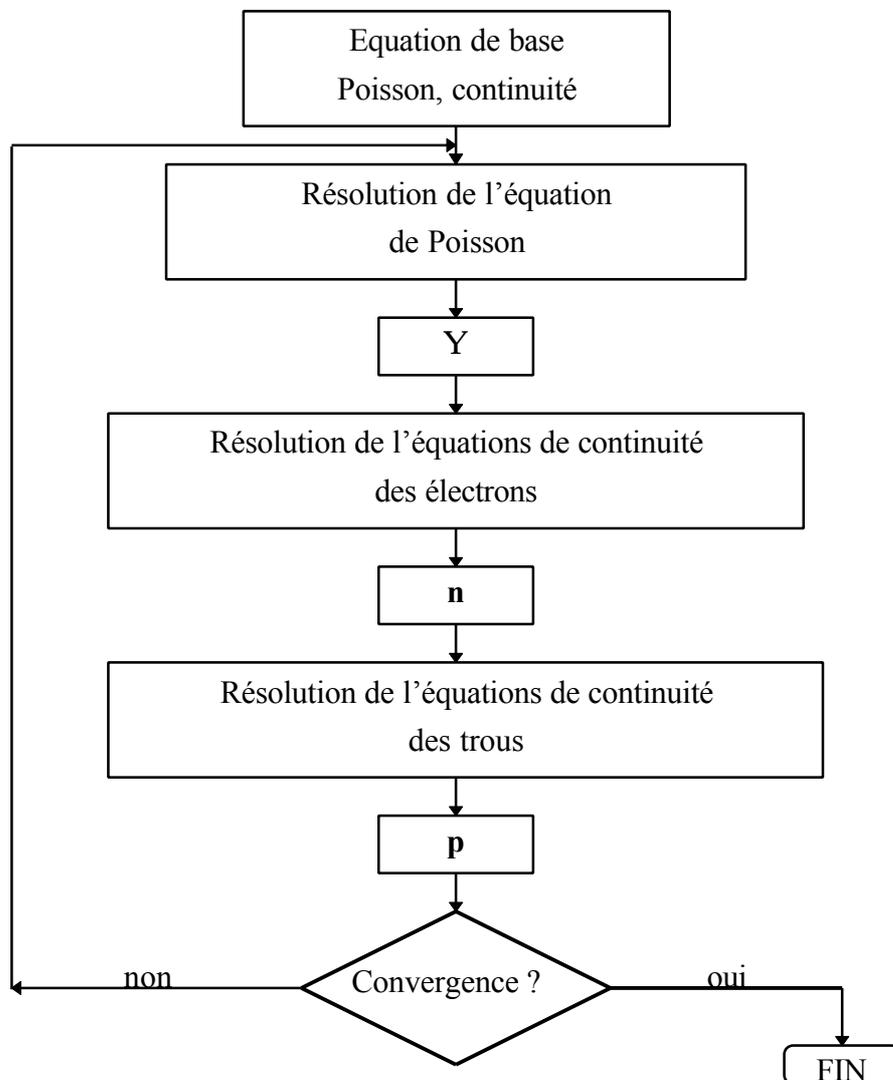


Figure 4.1 : Organigramme de résolution séquentielle des équations

4.2.3.1 Schéma de résolution de l'équation de Poisson :

L'algorithme précédent appliqué à l'équation de Poisson nous donne le schéma suivant :

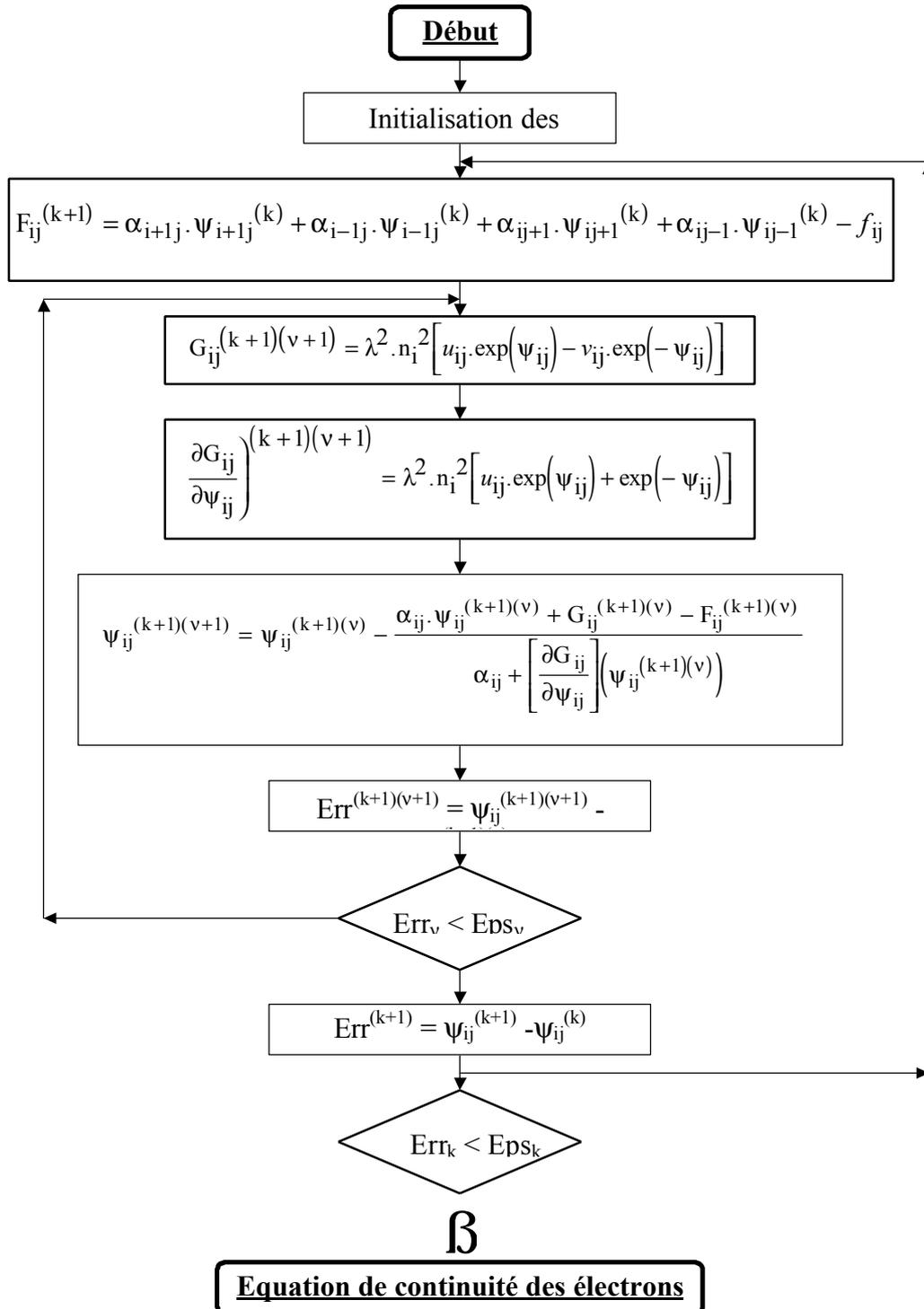


Figure 4.2 : Organigramme de résolution de l'équation de Poisson

4.2.3.2. Schéma de résolution de l'équation de continuité des électrons :

Le potentiel électrostatique obtenue précédemment et la concentration des trous seront utilisés comme paramètres dans l'équation de continuité des électrons. De la même façon, le schéma de résolution de l'équation des électrons sera :

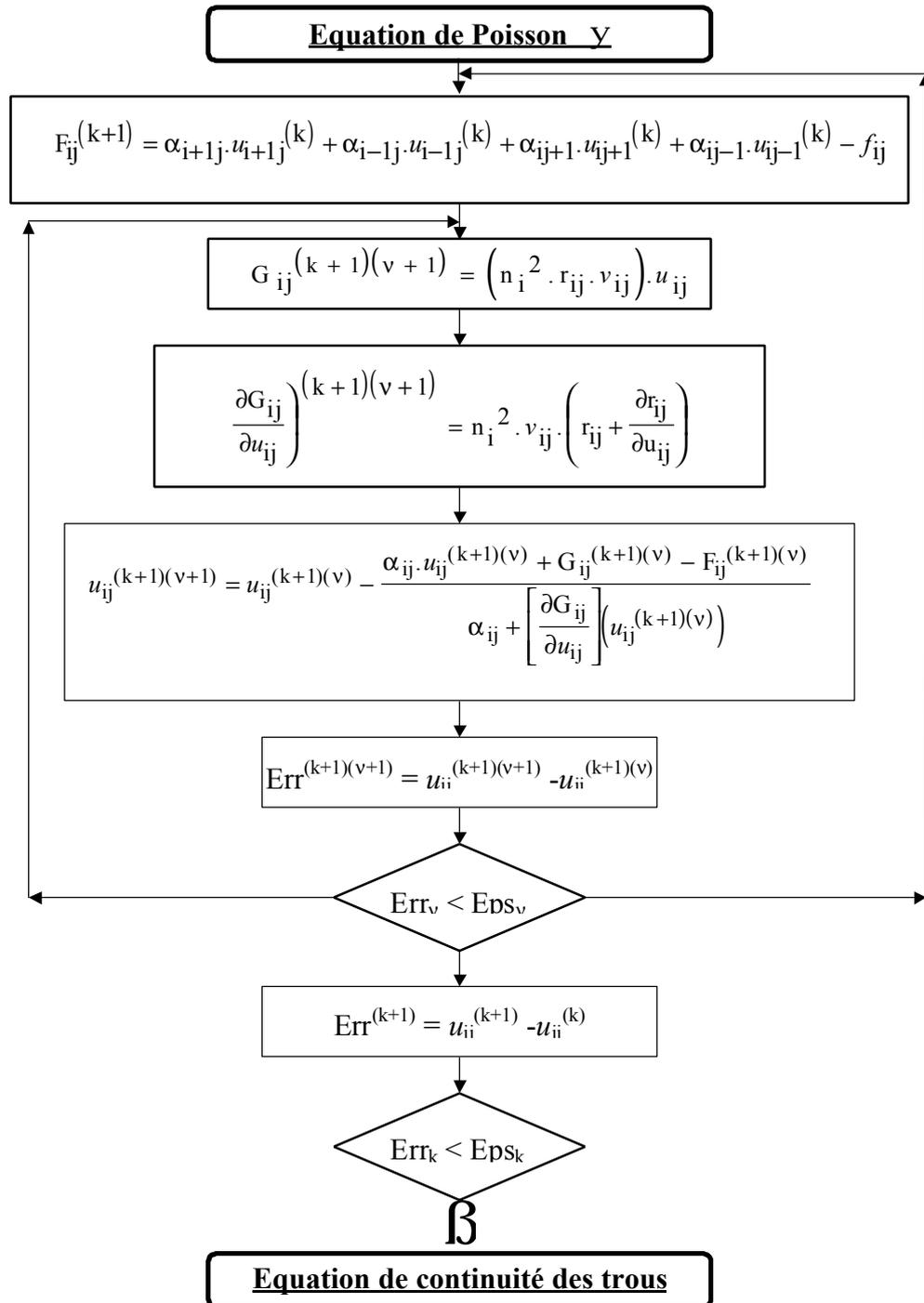


figure 4.3 : Organigramme de résolution de l'équation de continuité des électrons

4.2.3.3. Schéma de résolution de l'équation de continuité des trous :

Le potentiel électrostatique et la concentration des électrons obtenus précédemment seront utilisés comme paramètres dans l'équation de continuité des trous dont le schéma de résolution se présente comme suit :

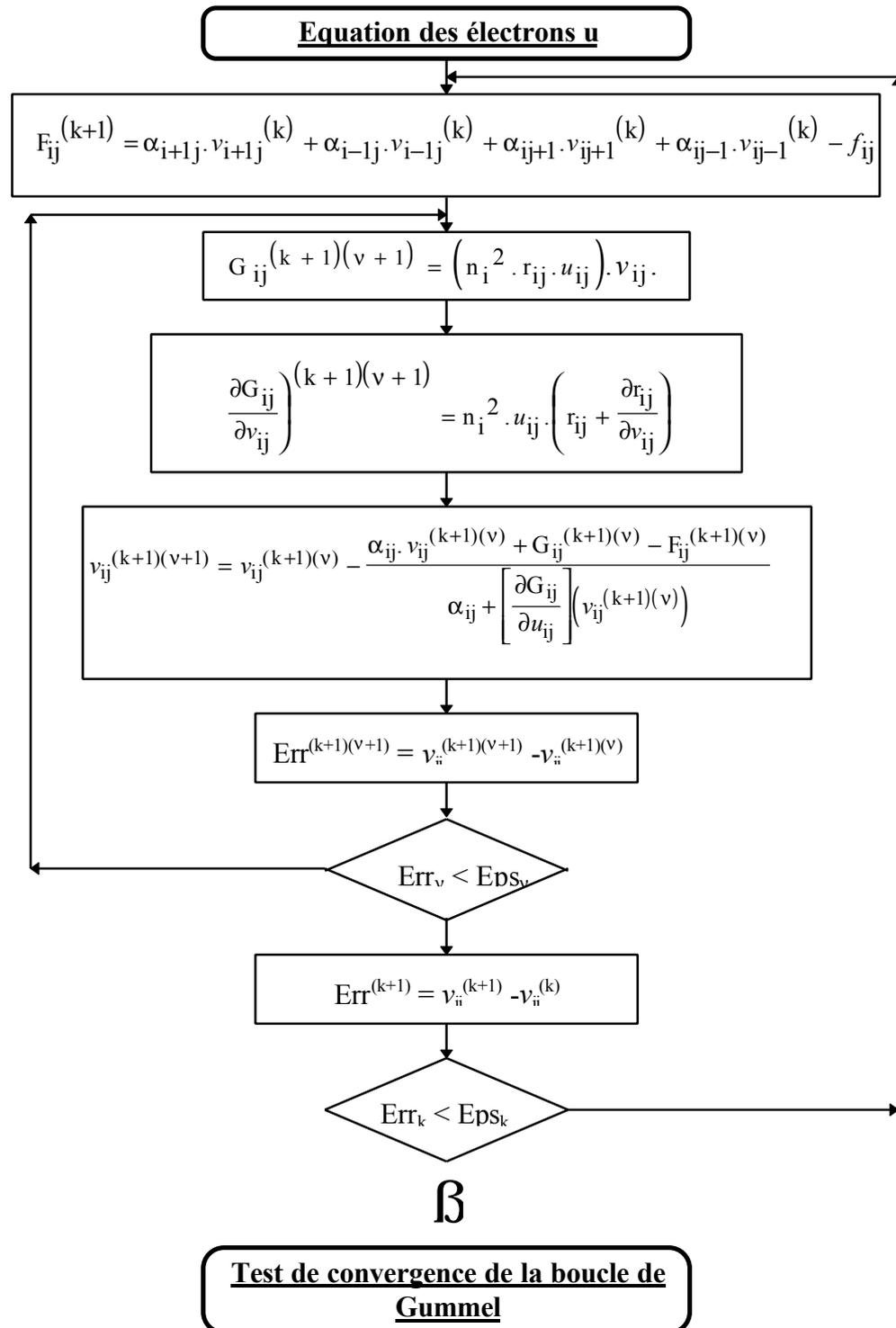


Figure 4.4 : Organigramme de résolution de l'équation de continuité des trous

4.2.3.4. Etude de la convergence :

Les coefficients de l'équation de Poisson et ceux des équations de continuité sous forme discrète (4.3) vérifient principalement les propriétés suivantes pour tout les noeuds de discrétisation :

a)

$$\begin{aligned} \alpha_{i+1j} \geq 0 \quad , \quad \alpha_{i-1j} \geq 0 \quad , \quad \alpha_{ij+1} \geq 0 \quad , \quad \alpha_{ij-1} \geq 0 \\ \alpha_{ij} > 0 \quad , \quad \alpha_{ij} \geq \alpha_{i+1j} + \alpha_{i-1j} + \alpha_{ij+1} + \alpha_{ij-1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

b) La fonction $G_{ij}(\eta)$ est monotone croissante.

En effet pour l'équation de Poisson on vérifie :

$$\frac{\partial G}{\partial \eta}(\eta) > 0 \quad (4.22)$$

A l'interface oxyde-silicium cette propriété reste vérifiée

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G}{\partial \psi} \right)_{mj}(\psi_{mj}) = \frac{h_m}{h_m + \zeta h_{m-1}} \cdot \lambda^2 \cdot n_i^2 \left[u_{mj} \cdot \exp(\psi_{mj}) + v_{mj} \cdot \exp(-\psi_{mj}) \right] \\ - \frac{2 \cdot h_m}{(h_m + \zeta h_{m-1}) \cdot \epsilon_s} \cdot \left(\frac{\partial \sigma_{int}}{\partial \psi} \right)_{mj} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Les travaux de Mayergoyz, Gaitan et Korman [59] sur la densité de charge à l'interface démontrent que :

$$-\left(\frac{\partial \sigma_{int}}{\partial \psi} \right)_{mj} > 0 \quad (4.24)$$

Le modèle de Seidman pour le terme de génération et dans le cas des fort dopages nous permet d'assurer que :

$$\frac{\partial G}{\partial u} > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial G}{\partial v} > 0 \quad (4.25)$$

aussi bien pour les électrons que pour les trous.

Nous déduisons donc que la boucle interne converge vers une solution unique.

Pour prouver la convergence de la boucle externe nous procédons comme suit :

Soient deux itérations successives d'ordre k, k+1

notons

$$\delta_{ij}^{k+1} = \eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^k \quad \text{et} \quad \eta_{ij}(\lambda) = \eta_{ij}^k + \lambda \cdot \delta_{ij}^{k+1} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

L'équation (4.18) nous donne :

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} \cdot \delta_{ij}^{k+1} + \left[G_{ij}(\eta_{ij}^{k+1}) - G_{ij}(\eta_{ij}^k) \right] = \\ \alpha_{i+1j} \cdot \delta_{i+1j}^k + \alpha_{i-1j} \cdot \delta_{i-1j}^k + \alpha_{ij+1} \cdot \delta_{ij+1}^k + \alpha_{ij-1} \cdot \delta_{ij-1}^k \end{aligned} \quad (4.26)$$

Définissons

$$I = \left[G_{ij}(\eta_{ij}^{k+1}) - G_{ij}(\eta_{ij}^k) \right] = \int_0^1 \frac{d}{d\lambda} G_{ij}[\eta_{ij}(\lambda)] \cdot d\lambda = \delta_{ij}^{k+1} \cdot \gamma_{ij}^{k,k+1} \quad (4.27)$$

Où

$$\gamma_{ij}^{k,k+1} = \int_0^1 \frac{dG_{ij}}{d\eta} [\eta_{ij}(\lambda)] \cdot d\lambda > 0 \quad (4.28)$$

nous calculons δ_{ij}^{k+1}

$$\delta_{ij}^{k+1} = \frac{\alpha_{i+1j} \cdot \delta_{i+1j}^k + \alpha_{i-1j} \cdot \delta_{i-1j}^k + \alpha_{ij+1} \cdot \delta_{ij+1}^k + \alpha_{ij-1} \cdot \delta_{ij-1}^k}{\alpha_{ij} + \gamma_{ij}^{k,k+1}} \quad (4.29)$$

Les propriétés des coefficients α et γ déduites de (4.21) (4.22) et (4.24) nous permettent de dériver l'approximation suivante [58] :

$$\max_{ij} |\delta_{ij}^{k+1}| \leq q^{k,k+1} \cdot \max_{ij} |\delta_{ij}^k|$$

Où

$$q^{k,k+1} = \max_{ij} \left(\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \gamma_{ij}^{k,k+1}} \right) < 1$$

La convergence de la boucle externe est donc assurée s'il existe un réel q indépendant de la variable η et de l'itération k et tel qu'on a :

$$q^{k,k+1} \leq q < 1$$

D'après (4.28) et les définitions précédentes il existe un réel γ_0 indépendant de la variable η

et de l'itération k tel que : $\min_{\eta, ij} \left(\frac{dG_{ij}}{d\eta}(\eta) \right) \geq \gamma_0 > 0$

Pour l'équation de Poisson

$$\gamma_0 = \lambda^2 \frac{2 \cdot n_i}{V_t} \cdot \exp\left(\frac{\phi_{p,\min} - \phi_{n,\max}}{2 \cdot V_t} \right) \quad (4.30)$$

$\phi_{p,\min}$, $\phi_{n,\max}$ étant respectivement le minimum et le maximum du quasi potentiel de Fermi des trous et des électrons donnés par l'itération précédente de Gummel.

Pour les équations de continuité

$$\gamma_0 = n_i^2 \cdot v_{\min} \cdot r_{\min} \quad \text{pour les électrons} \quad (4.31)$$

$$\gamma_0 = n_i^2 \cdot u_{\min} \cdot r_{\min} \quad \text{pour les trous} \quad (4.32)$$

u_{\min} , v_{\min} sont donnés par l'itération précédente de Gummel.

En prenant

$$0 < q = \max_{ij} \left(\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ij} + \gamma_0} \right) < 1 \quad (4.33)$$

Nous déduisons que la boucle externe converge indépendamment des valeurs initiales de η . L'initialisation plus ou moins proche de la solution exacte améliore uniquement le temps de convergence.

4.3 Application au cas d'un dispositif à jonction P⁺N :

4.3.1 Le dispositif :

La structure du dispositif à étudier est représentée à la figure 3.1, Elle est constituée d'une diode bidimensionnelle avec une jonction implantée, le substrat de base est du silicium monocristallin type N avec une résistivité de $2 \text{ k}\Omega \text{ cm}$ et d'orientation $\langle 111 \rangle$.

La jonction P⁺N est réalisée par implantation du Bore à une énergie de 60 keV et une dose de 10^{14} cm^{-2} à travers une fenêtre limitée par deux couches d'oxyde SiO_2 d'épaisseur $0.1 \mu\text{m}$ [15]. Cette structure à base du silicium de forte résistivité est conçue pour la détection des particules alpha ayant une énergie autour de 5 MeV.

La structure tridimensionnelle du dispositif et la projection bidimensionnelle dans le plan (x,y) est illustrée à la figure suivante :

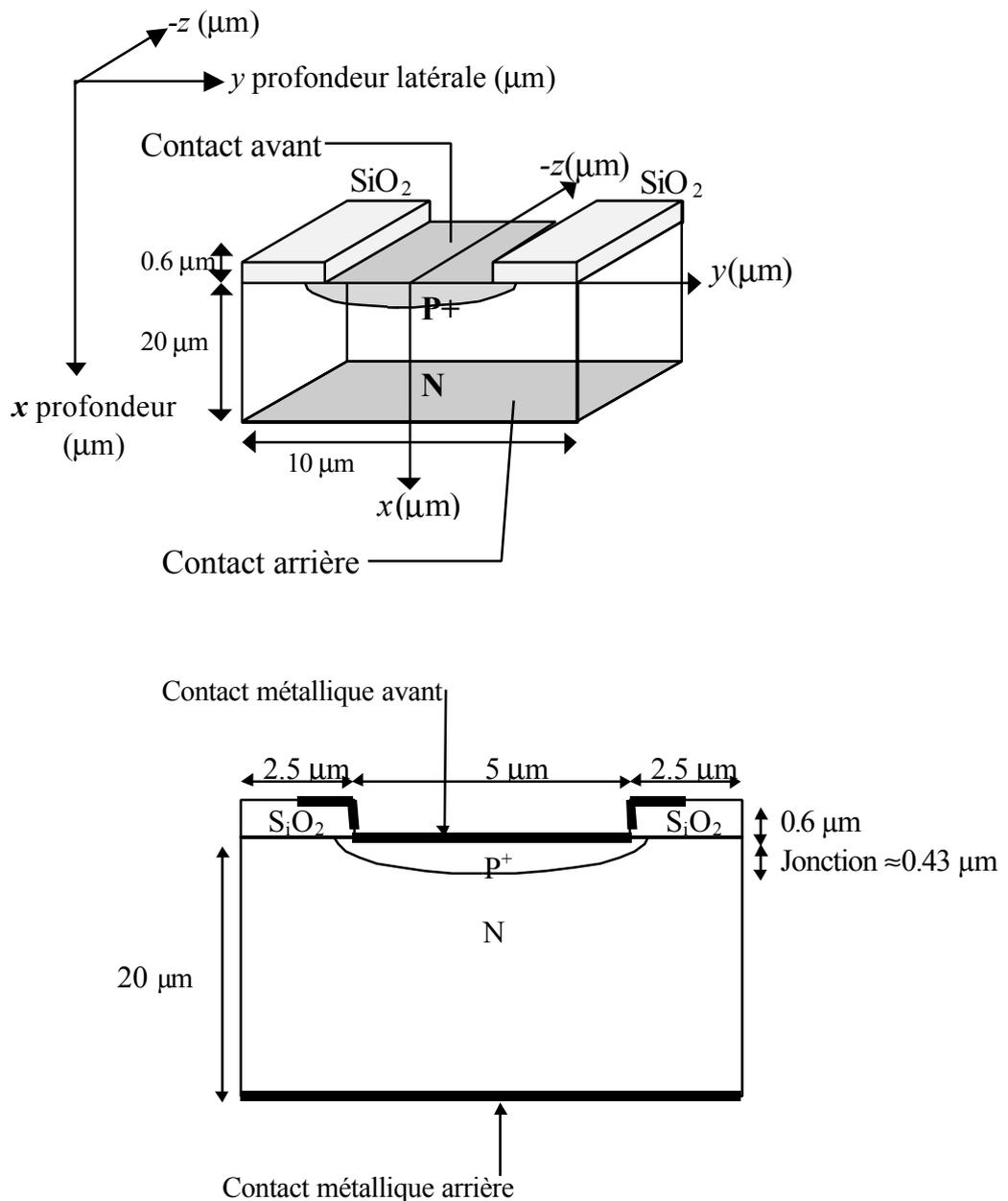


Figure 4.5 : Structure tridimensionnelle et projection bidimensionnelle du dispositif

La concentration du substrat de base est de $2.3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. La géométrie du dispositif est limitée par : $20 \text{ }\mu\text{m}$ en profondeur x ; de $5 \text{ }\mu\text{m}$ en largeur y et de 1 cm en largeur z . Le code simulant les différentes étapes de réalisation et du fonctionnement de ce dispositif est développé en Fortran. Composé de plusieurs routines, ce programme permet de calculer le profil du dopage, le potentiel électrostatique et les concentrations des électrons et des trous en chaque point du réseau de discrétisation. D'autres grandeurs physiques peuvent être dérivées facilement connaissant ces trois principales inconnues. (Le quasi potentiel des électrons et des trous, le champs électrique, les densité de courants etc.)

4.3.2 Le profil du dopage :

La distribution des atomes d'impuretés par implantation ionique est simulée en utilisant l'approche Gaussienne modulée par une fonction d'erreur complémentaire pour tenir compte de l'implantation latérale.

Ce profil est donné par la distribution suivante :

$$N_d(x, y) = \frac{N_0}{\Delta R_p \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x - R_p)^2}{2 \cdot \Delta R_p}\right) \cdot \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{a - y}{\Delta R_{pl} \cdot \sqrt{2}}\right) \quad (4.34)$$

R_p , ΔR_p et ΔR_{pl} sont respectivement le rayon projeté, la déviation standard en profondeur et la déviation standard latérale. Ces paramètres sont donnés dans des tables.

Les paramètres de ce profil sont :

Concentration de la base : $2.3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ (résistivité $\approx 2 \text{ k}\Omega\text{-cm}$)

Dose d'implantation : 10^{14} cm^{-2} ; Energie d'implantation : 60 KeV

$R_p = 0.19 \text{ }\mu\text{m}$; $\Delta R_p = 0.0556 \text{ }\mu\text{m}$; $\Delta R_{pl} = 8.91 \cdot 10^{-02} \text{ }\mu\text{m}$

Concentration maximale : $7.066 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à une profondeur $x = 0.2 \text{ }\mu\text{m}$

Concentration en surface : $2.05 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; Profondeur de la jonction : $x_j \approx 0.47 \text{ }\mu\text{m}$

La représentation graphique de ce profil est donnée dans les figures suivantes :

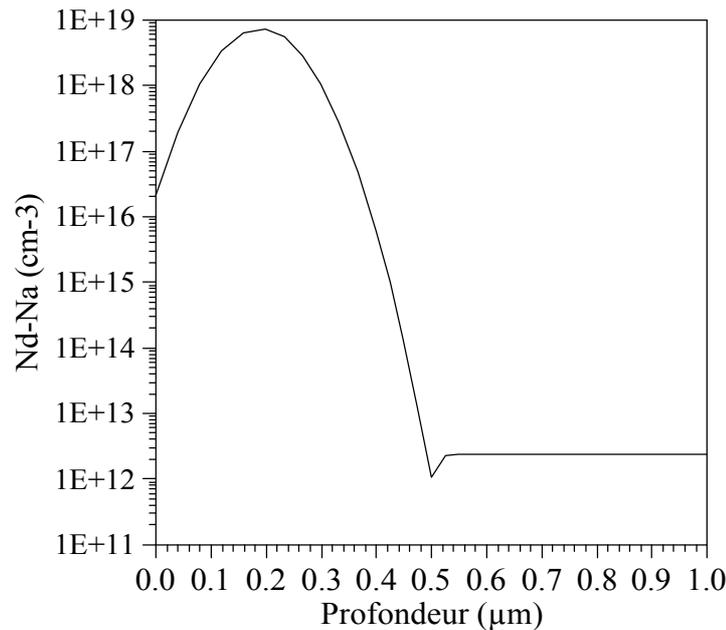


Figure 4.6 : Profil du dopage le long d'une ligne verticale sous le métal et loin de l'oxyde

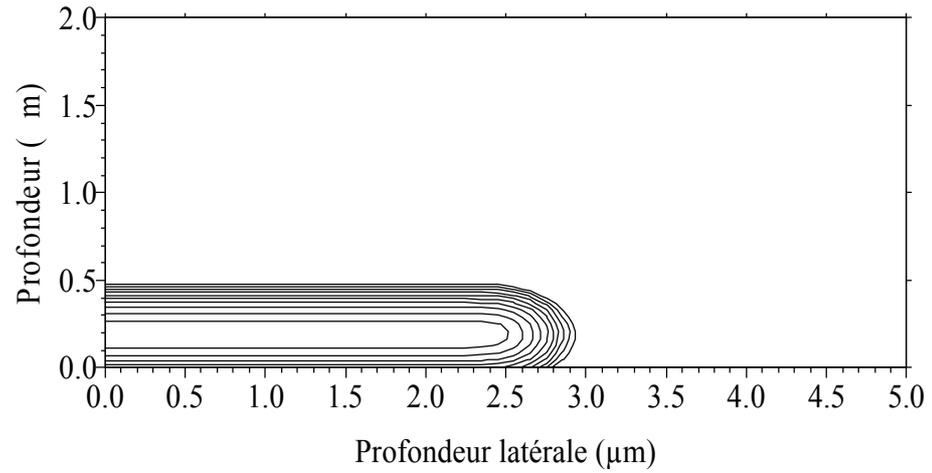


Figure 4.7 : Contour du profil du dopage

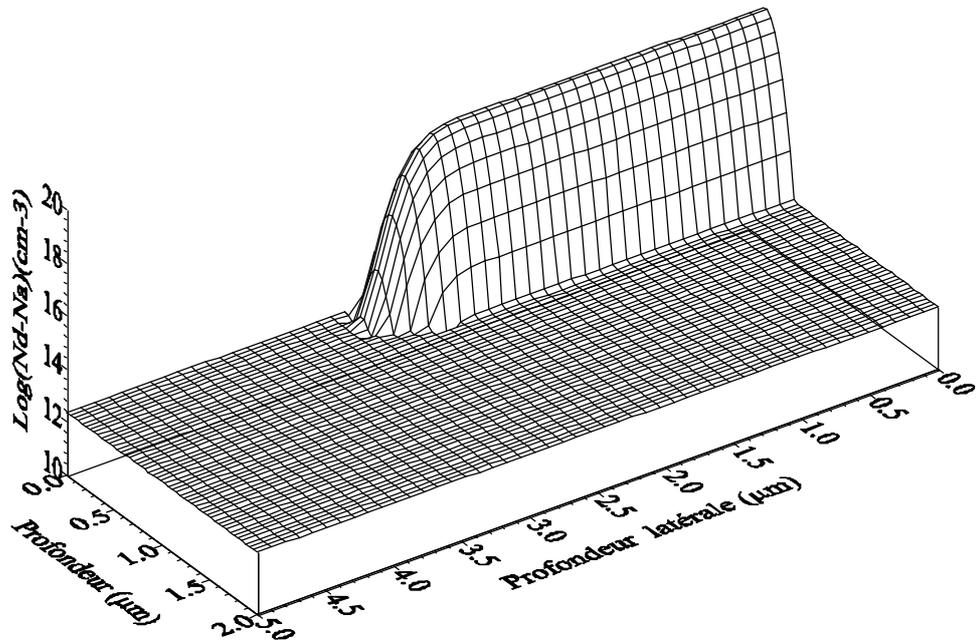


Figure 4.8 : Vue en perspective du profil du dopage

Ce profil du dopage est validé par les résultats de simulation avec le programme PROMIS destiné principalement aux applications de l'implantation ionique dans les matériaux [65]. Pour le cas de la distribution utilisée dans notre programme, le profil comparé à celui obtenu avec le programme PROMIS sont en excellent accord (Figure 4.9) .

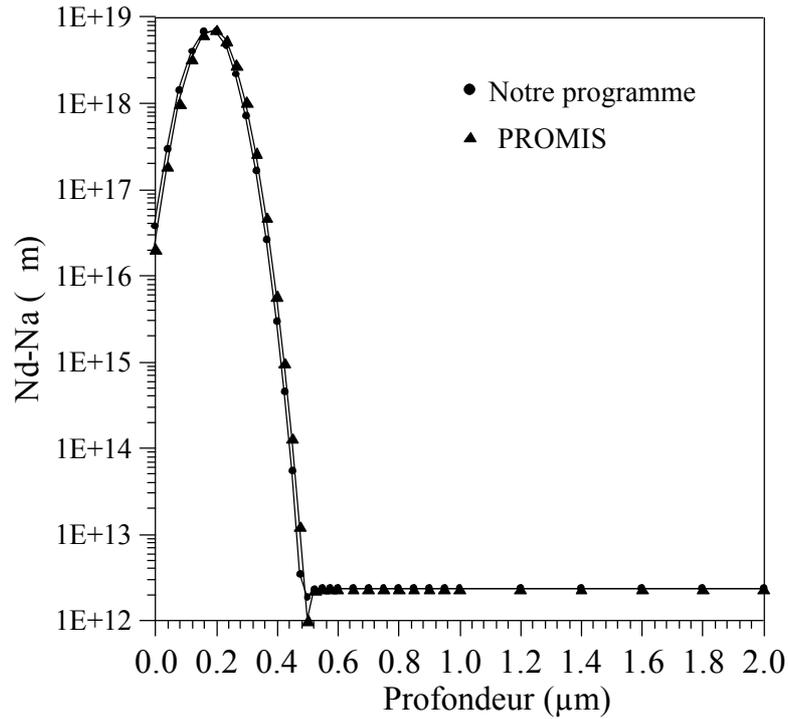


Figure 4.9 : Comparaison du profil du dopage à celui obtenu avec Promis

Pour élargir le domaine d'application du programme d'autres profils issus d'autres codes peuvent être utilisés pour tenir compte des différents modèles des distributions verticales et transversales et pour s'approcher le mieux du cas expérimental. Le profil des quatre principales distributions utilisées en implantation ionique est représenté à la figure 4.10.

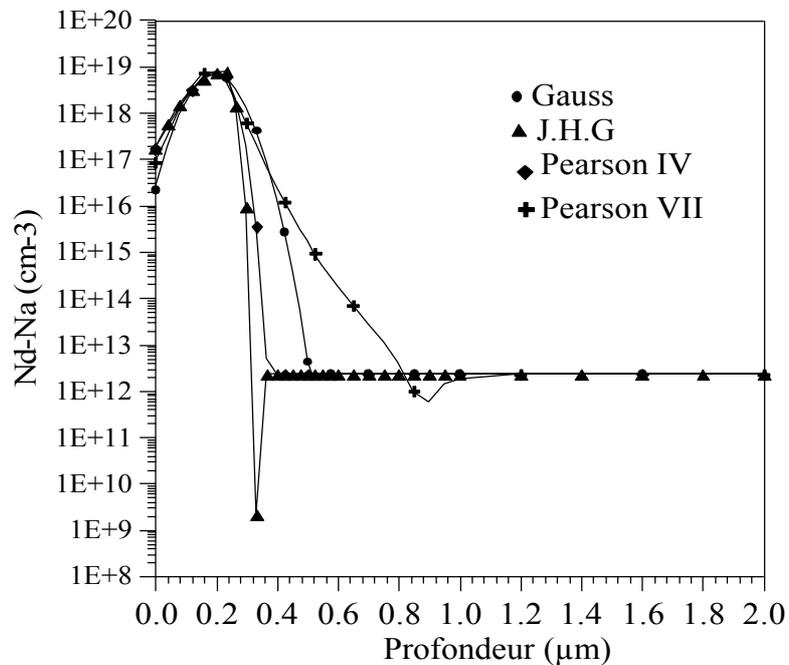


Figure 4.10 : Le profil du dopage des différentes distributions verticales obtenue par simulation PROMIS

Cette figure montre que le profil Pearson VII est le plus profond, il présente une faible variation autour de la jonction, ce qui n'est pas le cas pour le reste des profils qui varient rapidement dans ces régions. Cette propriété peut être exploitée pour utiliser un réseau de discrétisation dont la densité de lignes varie uniformément autour de la jonction.

Les travaux expérimentaux montrent que ce sont les distributions Pearson qui décrivent convenablement un profil implanté [1] [65] [15].

Dans certains travaux, il faut tenir compte des effets qui accompagnent l'implantation ionique. En effet le bombardement ionique provoque des effets qui se résument en général à la création des défauts et des désordres dans la structure du matériau. La nature de ces défauts dépend du type de l'ion et de son énergie ainsi que du mécanisme de perte de son énergie. Pour les ions légers la quantité d'énergie transférée aux atomes est faible, elle est presque transmise en totalité au réseau par les collisions électroniques. Ceci donne un parcours profond des ions et une probabilité très faible de création de défauts. Par contre les ions lourds ont une perte d'énergie suffisamment importante ce qui provoque une densité de défauts élevée. Les défauts créés doivent être guéris pour restituer les propriétés initiales du matériau et veiller à ce que les caractéristiques fondamentales du dispositif se conservent pendant l'implantation et la guérison.

Le recuit est une forme de redistribution des ions implantés qui permet de corriger ces effets. En général un recuit est caractérisé par deux conditions de travail, la température et la durée. On citera parmi les recuits utilisés :

- Le recuit classique caractérisé par une durée relativement grande (quelques dizaines de minutes) et une large gamme de températures (550-1200 °C).
- Le recuit rapide caractérisé par une durée de quelques dizaines de secondes et une température autour de 1000 °C.

Dans les programmes de simulation, ces phénomènes sont décrits par les modèles du traitement numérique et graphique des équations de diffusion et de redistribution. Le programme PROMIS que nous utilisons intègre les modèles complets pour simuler ces différents cas de recuits.

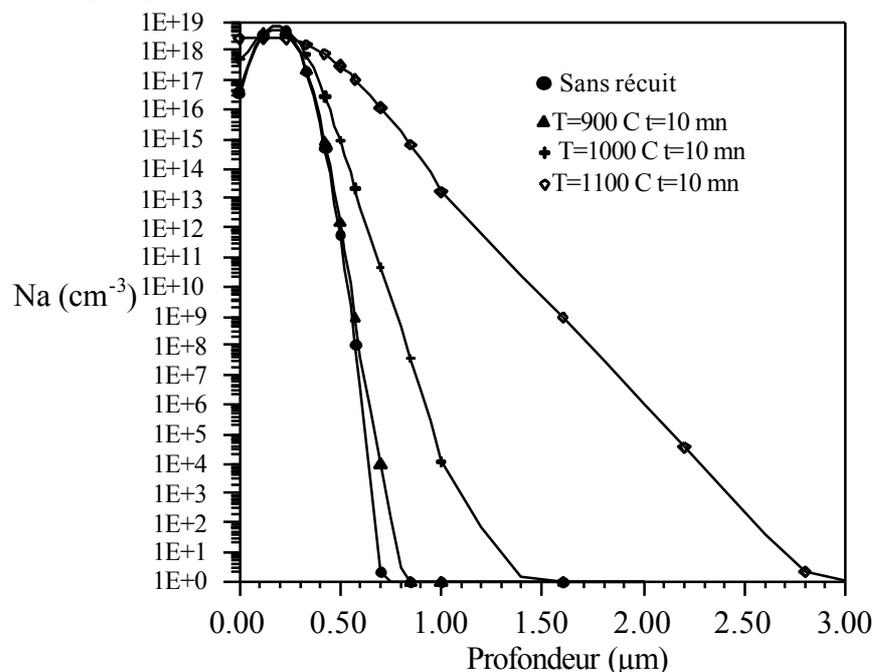


Figure 4.11 : Concentration du bore implanté à (60 KeV et 10^{14} cm^{-2}) après recuit à différentes températures

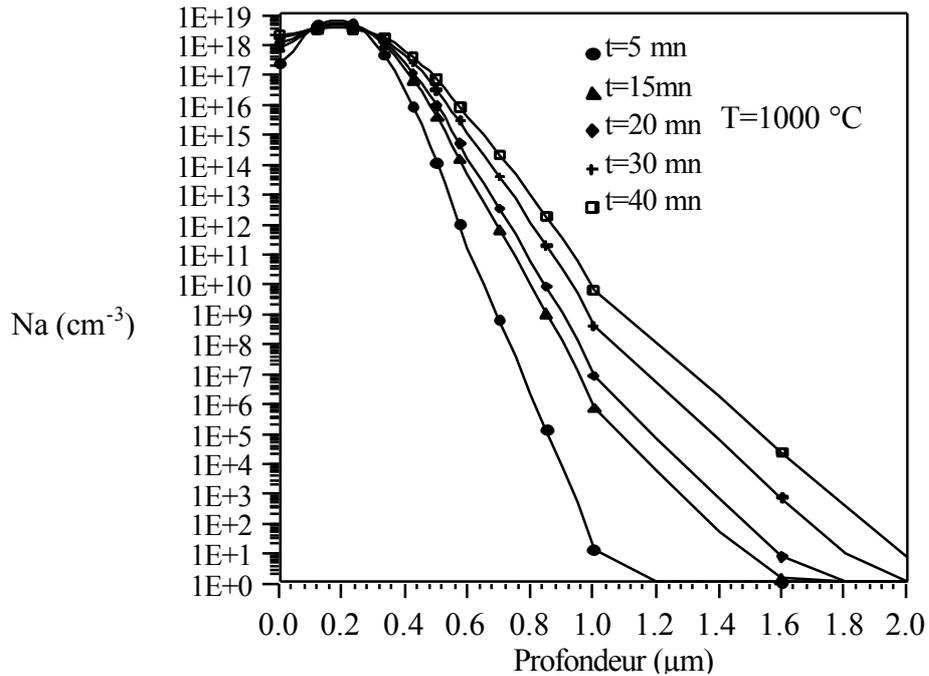


Figure 4.12 : Concentration du bore implanté à (60 KeV et 10^{14} cm^{-2}) après recuit pour différents temps

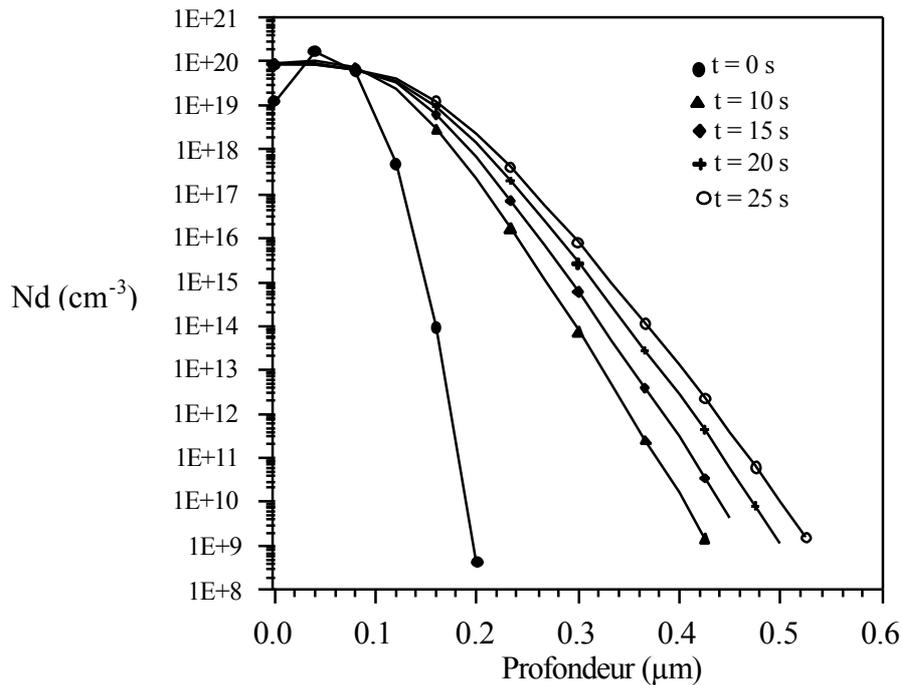


Figure 4.13 : Concentration de l'arsenic implanté à (100 KeV et 10^{15} cm^{-2}) dans le silicium après recuit rapide pour différents temps et à 1200 °C

Les figures précédentes donnent la concentration du bore implanté dans le substrat après recuit classique (Figure 4.11 et 4.12). Nous remarquons la variation rapide du profil avec l'augmentation de la température de 900 à 1100 °C . La concentration maximale ($x = R_p$) diminue de $8 \cdot 10^{19}$ à $3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; Une fraction de la différence est diffusée vers l'arrière augmentant ainsi la concentration en surface, et l'autre fraction est diffusée vers l'avant

approfondissant par conséquent la jonction. La figure 4.13 illustre les résultats de l'implantation de l'arsenic après recuit rapide.

4.3.3 Le réseau de discrétisation :

Nous dérivons la structure de simulation à partir de la figure 4.5 en tenant compte de la symétrie du dispositif par rapport à l'axe ox ; Figure 4.14. Le maillage est construit dans une première étape pour la description optimale du profil du dopage. On insère suffisamment de lignes autour de la jonction et autour du coude de la limite y de l'oxyde.

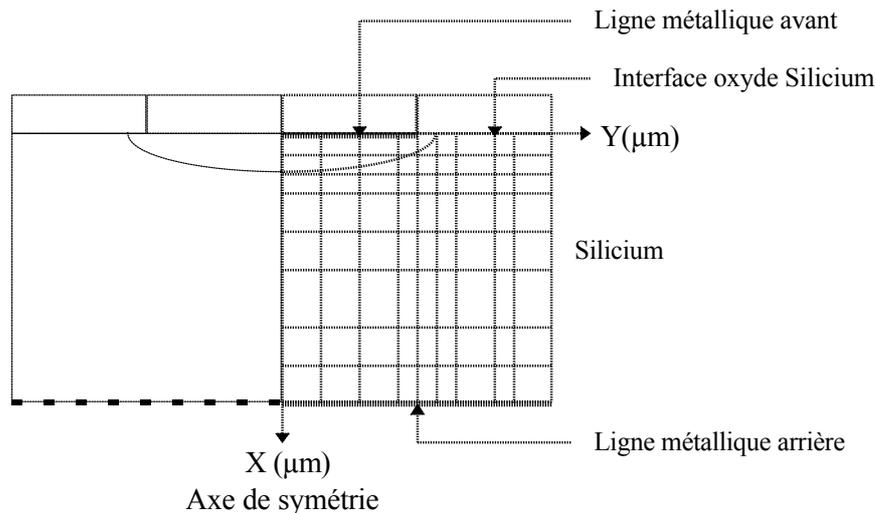


Figure 4.14 : Maillage bidimensionnel construit par la méthode des différences finies

Les critères suivants sont respectés :

- Distance minimale entre deux lignes successive est de $10^{-4} \mu\text{m}$.
- Insertion d'un nombre de lignes fixes qui sont distribuées le long du dispositif pour garder une uniformité de la variation de la densité de lignes.
- Deux pas successifs le long de x et y vérifient $0.25 \leq \frac{h_i}{h_{i+1}} \leq 2$

La configuration finale du réseau est construite avec 66 lignes le long de la direction verticale sur

$20 \mu\text{m}$, 24 lignes sont distribuées sur $1.5 \mu\text{m}$ (autour de la jonction) et 33 lignes latérales sur $5 \mu\text{m}$ dont 10 lignes sur $1 \mu\text{m}$ autour de la frontière de l'oxyde. Ceci donne un total de 2178 points.

4.3.4 Les solutions à l'équilibre thermodynamique :

Un code complet a été développé en première étape pour le régime stationnaire dans un dispositif dont la géométrie est illustrée à la figure 4.5. Les deux contacts métalliques sont supposés ohmiques et sont soumis donc à l'équilibre. Les équations sont résolues successivement par rapport au potentiel électrostatique, le quasi potentiel de Fermi des électrons et le quasi potentiel de Fermi des trous. Les variables de Slotboom sont utilisées sous une forme ou uniquement les termes différences ($\psi - \phi_n$, $\phi_p - \psi$) qui sont utilisés pour

éviter les dépassements arithmétiques dus au grandes variations des valeurs de u et v ($\exp(\phi_n)$ et $\exp(-\phi_p)$).

Les modèles physiques utilisés ont été décrits au chapitre 2. Dans les figures suivantes, on représente le résultat des modèles utilisés pour tenir compte des variations spatiales des mobilités, de la concentration intrinsèque effective et des temps de vies intervenants dans la formulation des paramètres des équations.

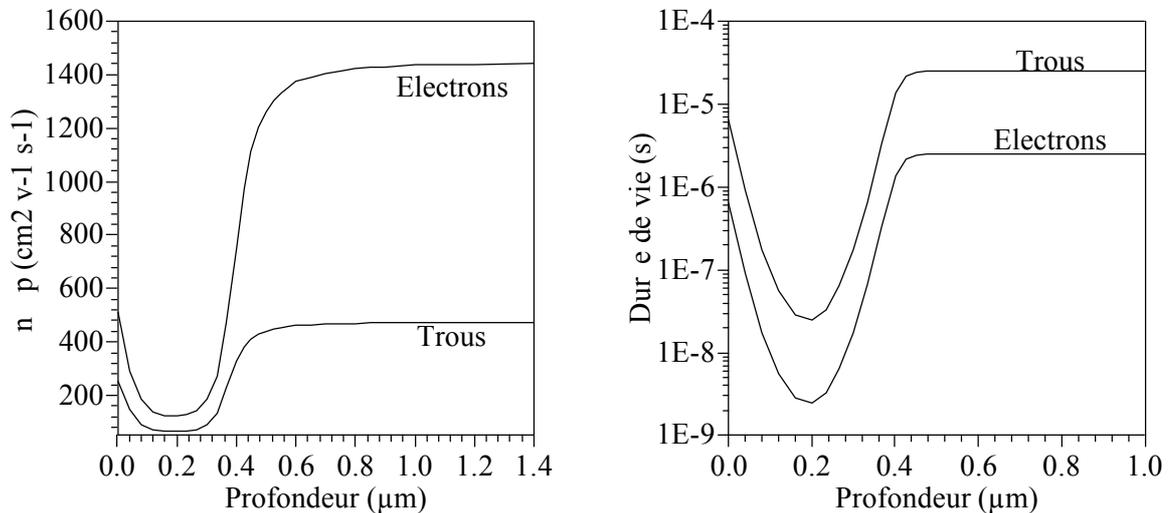


Figure 4.15 : Variation spatiale des mobilités et des durées de vie des porteurs

Les mobilités des électrons et des trous dans la région de la base restent constantes ($1448 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$ pour les électrons, $473 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$ pour les trous), dans la région de fort dopage, elles chutent considérablement et elles atteignent des valeurs inférieures à $200 \text{ cm}^2 \text{ v}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Cette dégradation est exprimée dans le modèle décrit dans les formules (2.35) (2.36) (2.39). Les durées de vie des porteurs sont constantes dans la base ($\approx 3 \mu\text{s}$ pour les électrons $0.2 \mu\text{s}$ pour les trous), autour du maximum du profil du dopage leurs chutes est remarquables ($\approx 3 \text{ ns}$ pour les électrons 0.6 ns pour les trous). Ces influences sont modélisées dans les formules (2.28).

Pour la concentration intrinsèque effective nous illustrons sa variation dans les courbes des figures suivantes :

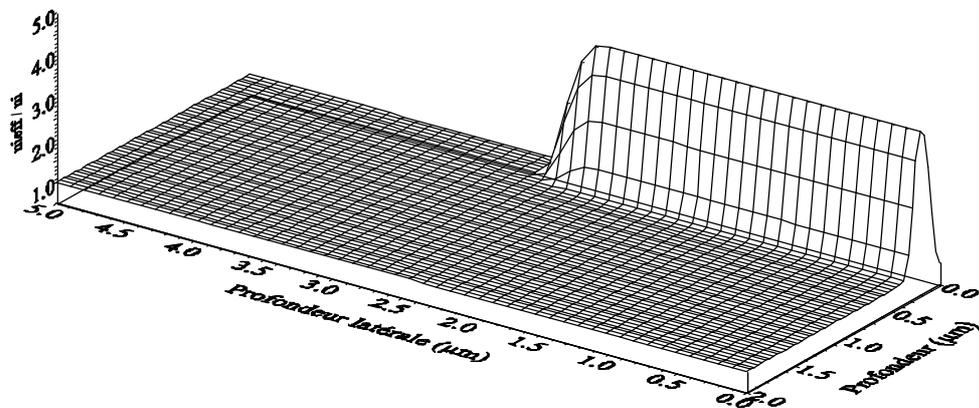


Figure 4.16 : Vue tridimensionnelle de la concentration intrinsèque effective

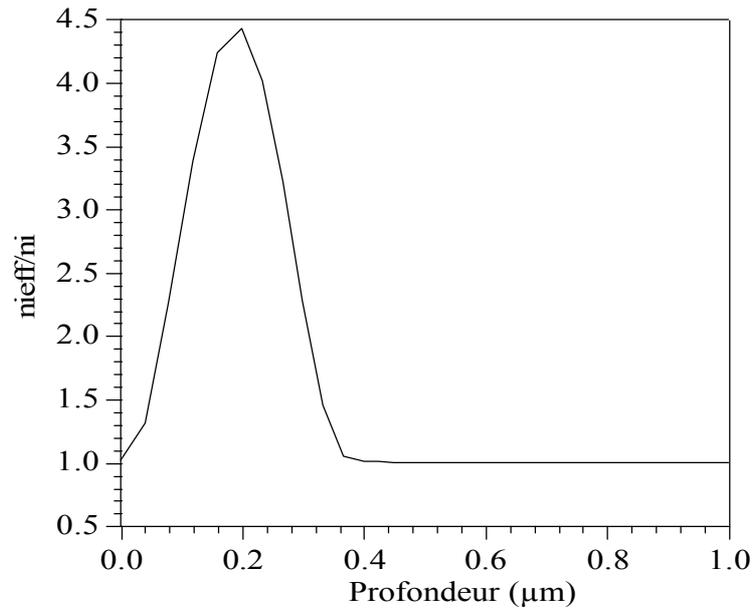


Figure 4.17 : Concentration intrinsèque effective

La concentration intrinsèque effective est influencée beaucoup plus dans la région de fort dopage, sa valeur maximale correspond au pic du profil du dopage ($x \approx 0.2 \mu\text{m}$), dans la base elle reste constante ($1.48 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$)

Les variables (ψ , n , p) sont initialisées à partir du profil du dopage et pour tout les noeuds du réseau suivant le modèle de la neutralité électrique dans tout le dispositif :

- $Dop_{ij} = (N_d - N_a)_{ij} > 0$:

$$n_{ij} = \frac{Dop_{ij}}{2} + n_{ieff} \sqrt{1 + \left(\frac{Dop_{ij}}{2n_{ieff}}\right)^2} \quad p_{ij} = \frac{n_{ieff}^2}{n_{ij}}$$

$$V_{ij} = V_t \cdot \text{Log}\left(\frac{n_{ij}}{n_{ieff}}\right) \quad (4.35)$$

- $Dop_{ij} < 0$:

$$p_{ij} = -\frac{Dop_{ij}}{2} + n_{ieff} \sqrt{1 + \left(\frac{Dop_{ij}}{2n_{ieff}}\right)^2} \quad n_{ij} = \frac{n_{ieff}^2}{p_{ij}}$$

$$V_{ij} = -V_t \cdot \text{Log}\left(\frac{p_{ij}}{n_{ieff}}\right) \quad (4.36)$$

4.3.4.1 Le potentiel électrostatique :

L'équation de Poisson mise sous forme (4.3) est résolue à chaque itération de Gummel en utilisant l'organigramme (4.2). La boucle externe incrémentant la fonction F_{ij} est la plus importante pour l'obtention de la solution finale. En effet, la boucle interne, du fait qu'elle utilise la méthode de Newton unidimensionnelle, converge généralement en moins de 10 itérations pour une précision absolue inférieure à 10^{-7} et cela pour chaque itération externe.

La précision utilisée atteint 0.01 % de ($V_t = 0.026$ V) pour la boucle externe et la boucle de Gummel.

Durant la première itération de Gummel où la solution est éloignée de la solution exacte, la boucle externe de l'équation de Poisson converge en un grand nombre d'itérations (3000-4000), ce qui prend un temps d'exécution relativement élevé pour un maillage de ($66 \times 33 = 2178$) noeuds de discrétisation. Sur un PC à processeur 100 MHz ce temps est d'environ de 15 mn.

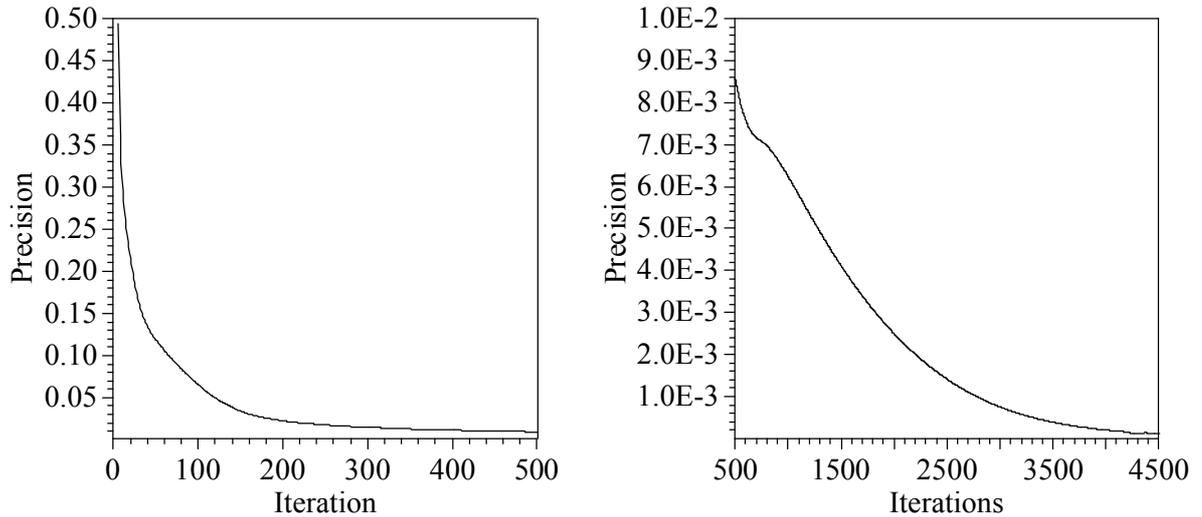


Figure 4.18 : Evolution de la précision de la boucle externe de l'équation de Poisson

On remarque bien que le taux de variation de la précision en fonction du nombre d'itération est très faible. Après les 300 premières itérations ce taux est d'environ $10^{-3}/1000$. Ceci impose donc un nombre élevé d'itérations pour arriver à une précision inférieure à 10^{-4} .

L'évolution de l'erreur de la boucle de Gummel est illustrée à la figure suivante :

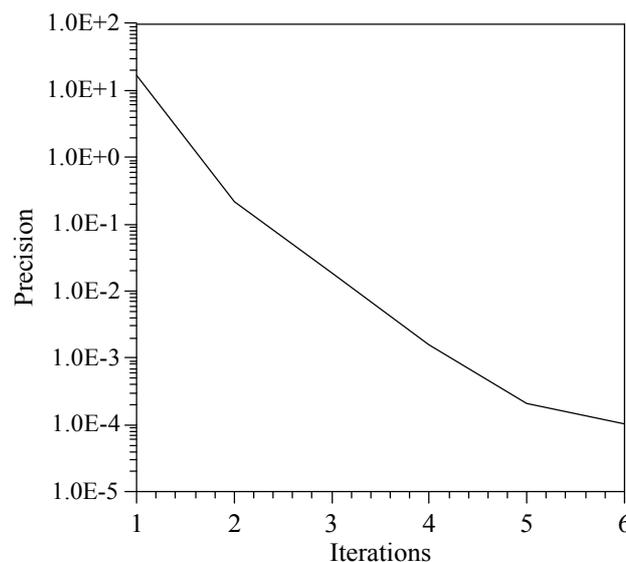


Figure 4.19 : Evolution de l'erreur de la boucle de Gummel

Le potentiel électrostatique obtenu après convergence de la boucle de Gummel en deux itérations et pour une précision de 0.01 de V_t est représenté sur les figures (4.20 – 24).

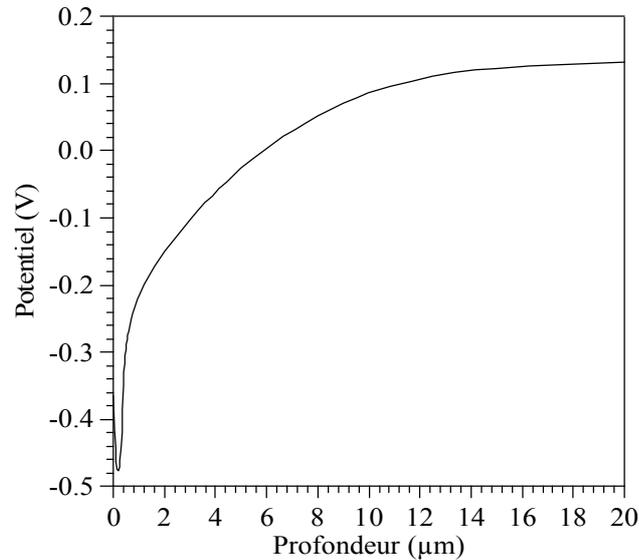


Figure 4.20 : Le potentiel électrostatique à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal.

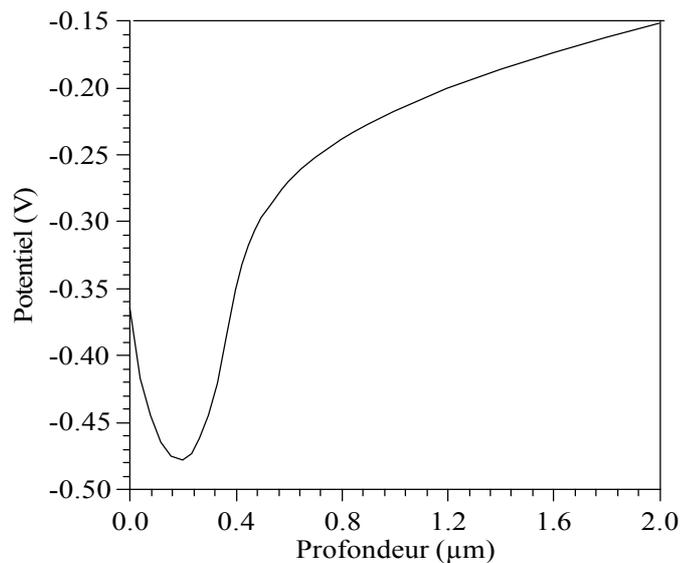


Figure 4.21 : Le potentiel électrostatique à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal et au voisinage de la jonction

Le profil du potentiel électrostatique au voisinage du pic du profil reste inchangé par rapport à sa valeur initiale qui correspond au cas de la neutralité électrique ; Près de la jonction, il varie continuellement avec une pente qui diminue jusqu'à la zone quasi neutre. Le substrat de base étant faiblement dopé (10^{12} cm^{-3}) la région dépletée est très large et le potentiel ne devient constant qu'à partir de 15 μm approximativement.

La tension de diffusion calculée à partir du graphe de la figure 4.18 est égale à 0.61 v ce qui est très proche de la valeur classique pour le Silicium à 300 °K.

La distribution du potentiel dans le plan (x,y) est illustrée aux figures suivantes :

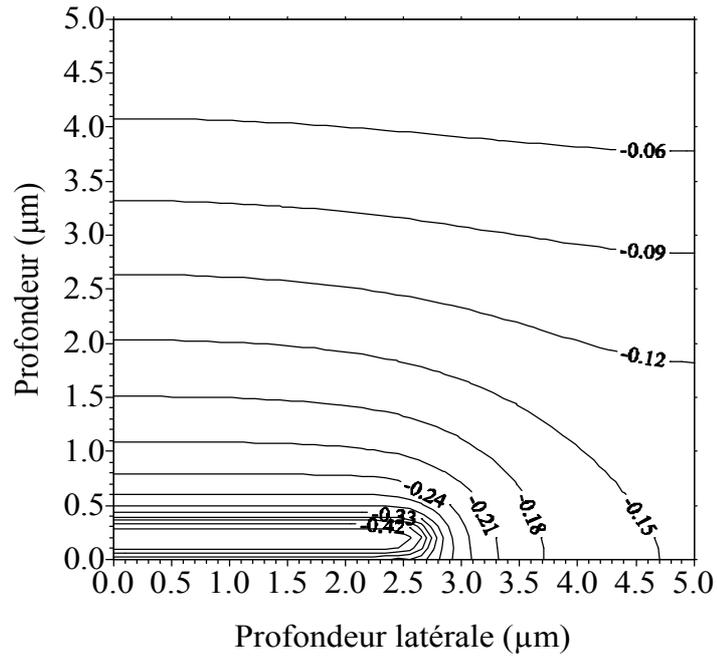


Figure 4.22 : Lignes équipotentielle à l'équilibre

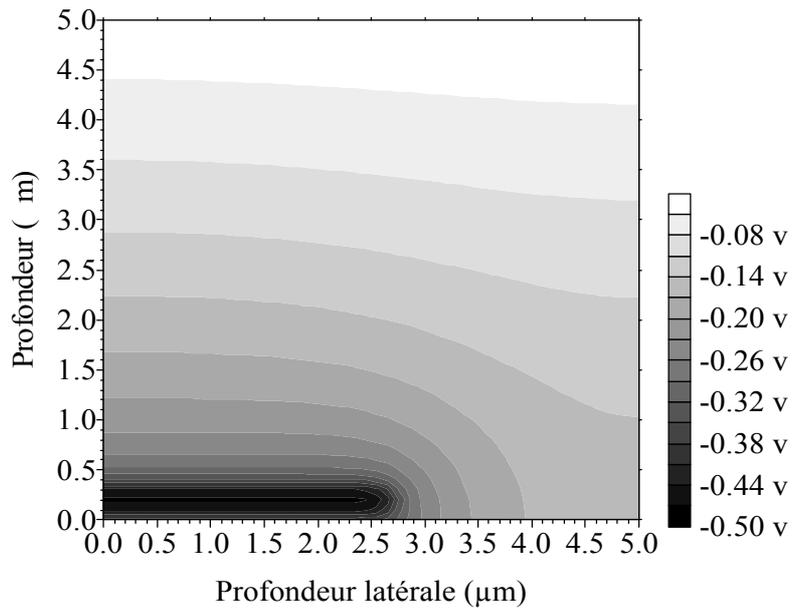


Figure 4.23 : Contour du potentiel électrostatique à l'équilibre

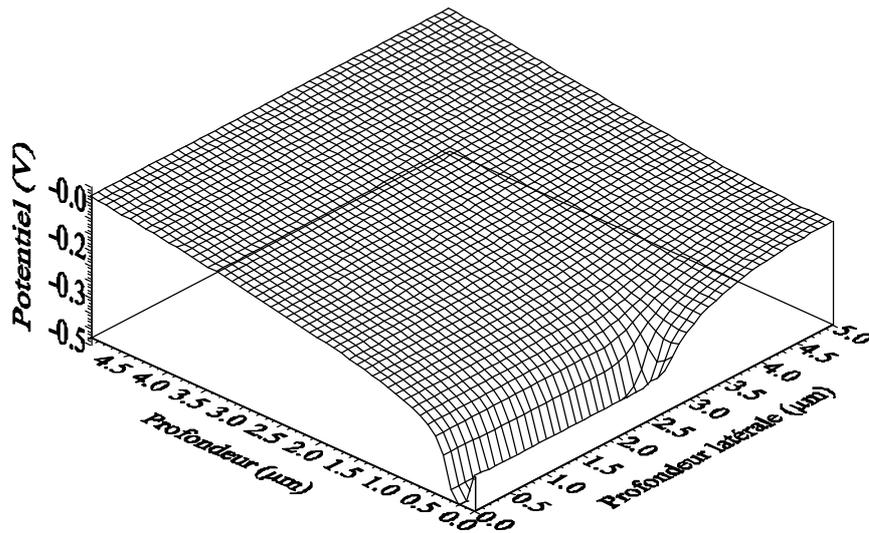


Figure 4.24 : Le potentiel électrostatique à l'équilibre

Les figures précédentes montrent clairement un comportement différent du potentiel dans les régions, sous le métal, sous l'oxyde et dans la zone intermédiaire. Sous le métal le potentiel est régi par les propriétés de la jonction P⁺N ; Sous l'oxyde, car il s'agit du même substrat que la base, le potentiel s'uniformise avec les lignes correspondantes à la base loin de la face avant. Dans la zone intermédiaire (limite de la couche d'oxyde et le contact métallique), le potentiel suit des variations continues imposées par le coude la jonction Figure 4.7.

4.3.4.2 La concentration des électrons et des trous :

A chaque itération de Gummel dans les équations de continuité des électrons et des trous, le potentiel est celui obtenu par la résolution de l'équation de Poisson, donc il est plus proche de la solution exacte ; ceci influe considérablement sur les itérations externes de chaque équation.

En général, à l'état stationnaire et à l'équilibre thermodynamique, une itération de la boucle externe et une itération de la boucle interne sont suffisantes pour dépasser une précision de 10^{-8} si l'équation de Poisson est résolue avec une précision de 10^{-4} . On rappelle que les variables utilisées sont celles de Slotboom modifiées $u = \exp(\psi - \phi_n)$ et $v = \exp(\phi_p - \psi)$ pour ne pas manipuler les grandes variations imposées par les formes exponentielles en quasi-potentiels de Fermi des électrons et des trous. La totalité des paramètres et des coefficients des équations de continuité sont exprimés en fonction de ces nouvelles grandeurs.

Les figures suivantes représentent les concentrations des électrons et des trous obtenues après convergence de la boucle de Gummel.

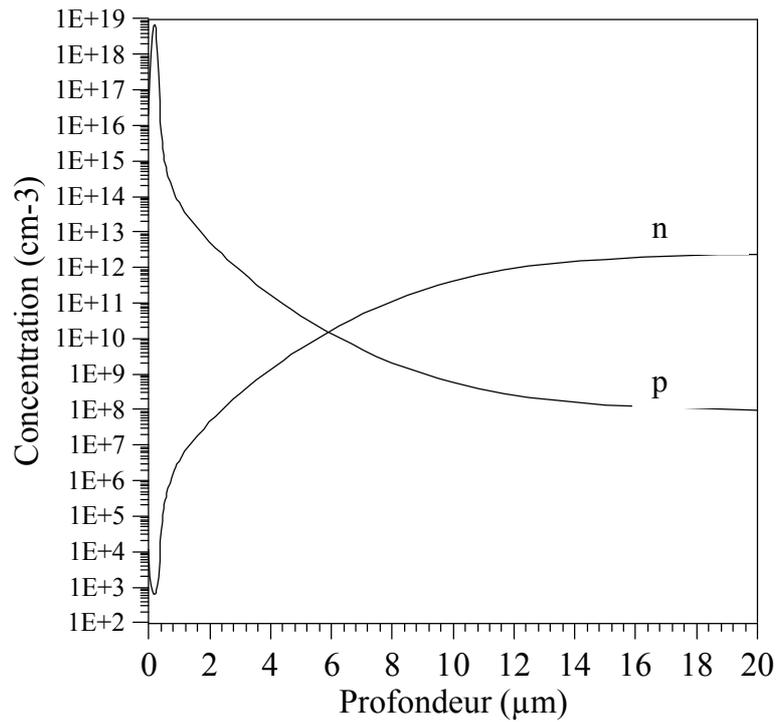


Figure 4.25 : Concentration des électrons et des trous à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal

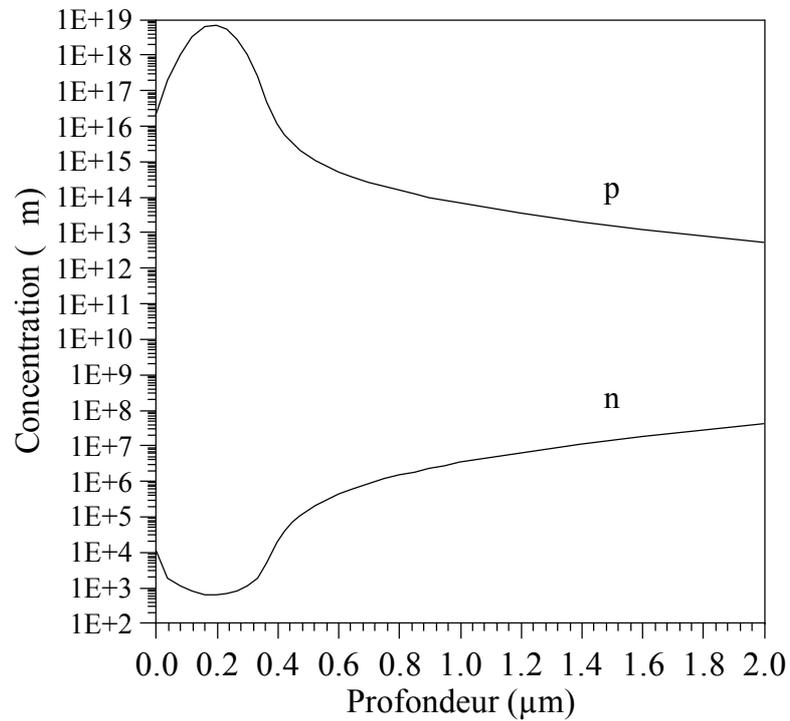


Figure 4.26 : Concentration des électrons et des trous à l'équilibre le long d'une ligne sous le métal et au voisinage de la jonction

La figure (4.25) nous renseigne sur la largeur de la zone de charge d'espace évaluée à une dizaine de microns. Dans la région P^+ , on remarque que la concentration des minoritaires

est faible, de l'ordre de 10^3 cm^{-3} , par contre, les majoritaires atteignent 10^{19} cm^{-3} . Dans la base, les électrons majoritaires ont une concentration constante de $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et celle des trous est de 10^8 cm^{-3} (région quasi neutre).

Au voisinage de la jonction, les électrons et les trous présentent un pic correspondant au maximum du profil du dopage dans la même région. Autour d'une profondeur de $6 \mu\text{m}$ les concentrations des électrons et des trous se rejoignent ($10^{10} \text{ cm}^{-3} = n_i$), il s'agit donc d'une région intrinsèque.

Les vues en perspective de la concentration des électrons et des trous sont illustrées aux figures suivantes :

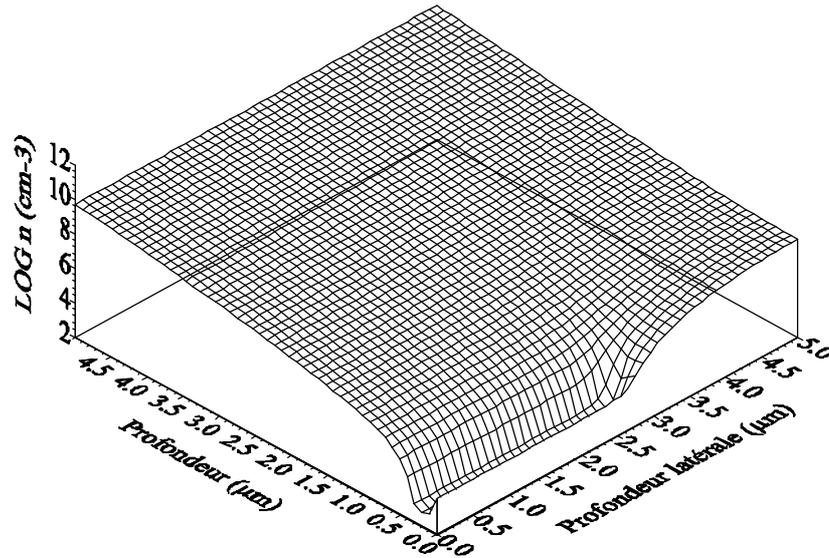


Figure 4.27 : Concentration des électrons à l'équilibre

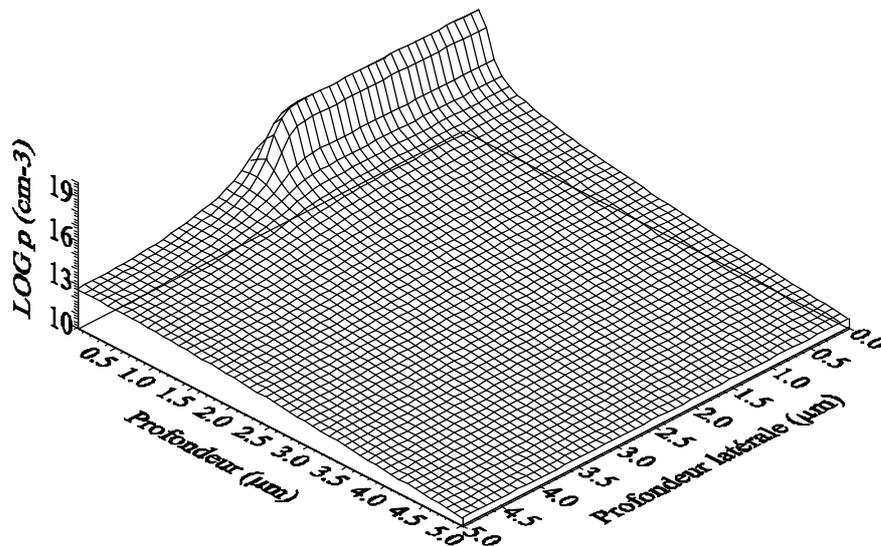


Figure 4.28 : Concentration des trous à l'équilibre

Ces figures montrent le comportement bidimensionnel des électrons et des trous dans les régions, sous le métal, sous l'oxyde et dans la zone intermédiaire. Sous le métal les électrons et les trous suivent les propriétés de la jonction P^+N ; Sous l'oxyde car il s'agit du

même substrat que la base, les électrons et les trous rejoignent les variations dans la base loin de la face avant. Dans la zone intermédiaire (limite de la couche d'oxyde et le contact métallique) les porteurs suivent les variations continues imposées par le coude la jonction.

Les figures suivantes montrent les variations des quasi potentiels des électrons et des trous.

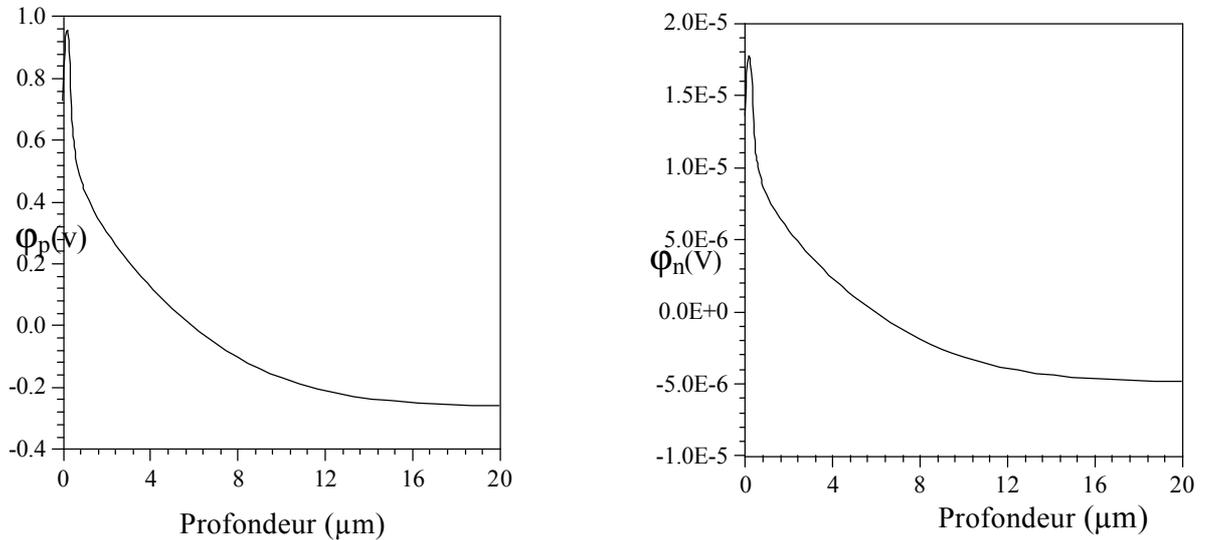


Figure 4.29 : Potentiel de Fermi des électrons et des trous

Les variations du champ électrique sont illustrées aux figures suivantes ; elles correspondent aux différents endroits de la structure.

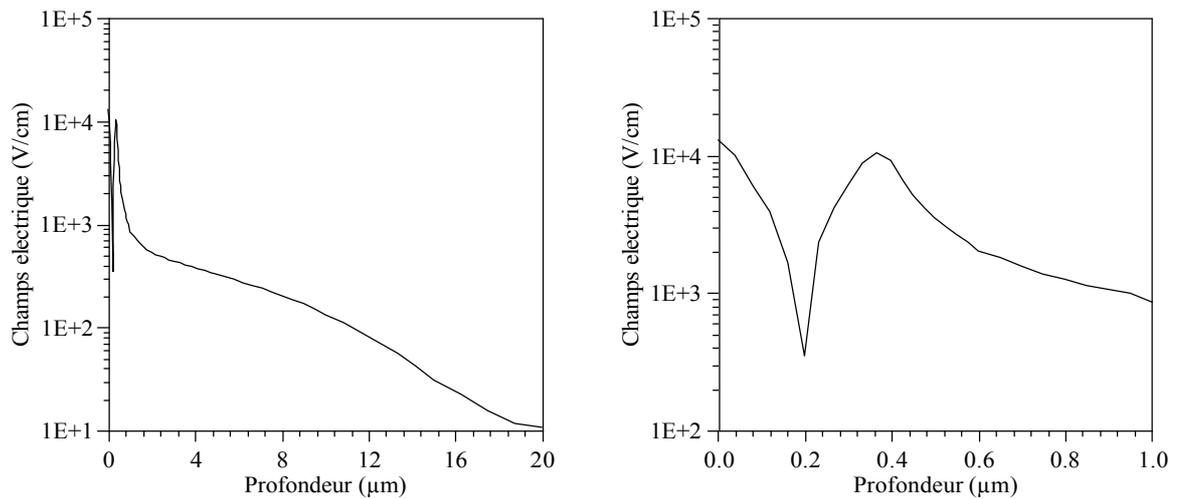


Figure 4.30 : Variation du champ électrique le long d'une ligne sous le métal

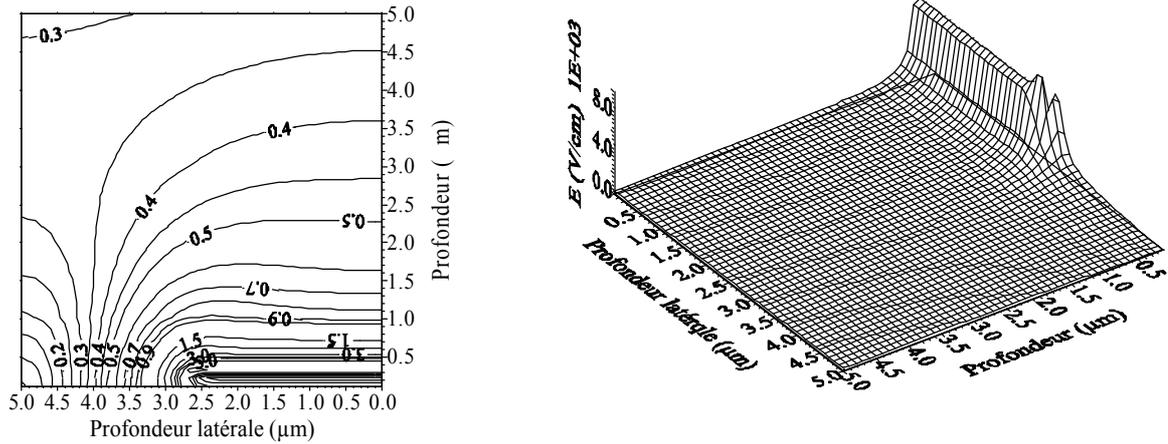


Figure 4.31 : Contour et profil du champ électrique à l'équilibre

La courbe du champ électrique de la figure 4.30 montre les deux pics (négatif et positif) correspondant respectivement au maximum du profil du dopage et à la courbure du potentiel située entre le pic et la base.

La courbe en perspective de la figure 4.31 montre que les variations du champ sont localisées aux régions au-dessous du contact métallique et au voisinage du coude de la jonction. Dans la base le champ présente de faibles variations.

4.3.4.3 Validation des résultats :

Le programme que nous avons développé selon l'algorithme de Gummel et utilisant le schéma de Mayergoyz permet de calculer en tout point du réseau le potentiel électrostatique et les concentrations des porteurs. Pour la validation du programme, nous avons comparé ses résultats à ceux du programme PC-1D [66] en appliquant les données d'une structure unidimensionnelle au Si à jonction diffusée P⁺N. Le profil du dopage simulé par PC-1D est introduit dans notre programme ainsi que la géométrie du dispositif. Les mêmes modèles physiques ont été utilisés que ce soit en mobilités, temps de vie des porteurs, recombinaison S.R.H et Auger concentration intrinsèque effective etc. Le profil du dopage unidimensionnel simulé avec PC-1D est représenté à la figure suivante :

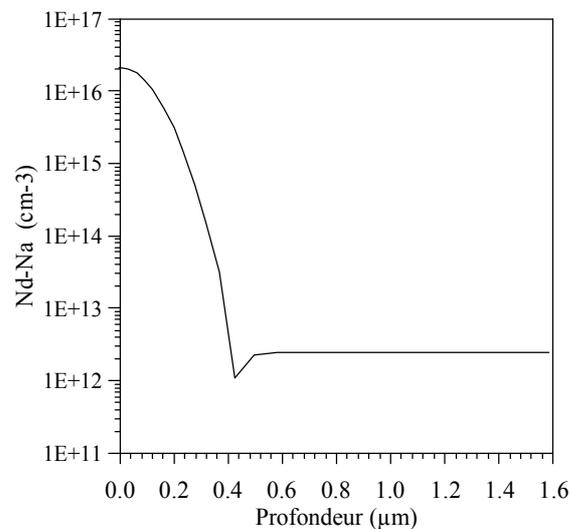


Figure 4.32 : Le profil du dopage simulé avec PC-1D

L'utilisation du même profil de dopage et des mêmes modèles physiques est indispensable pour comparer les résultats. Les courbes suivantes donnent la distribution unidimensionnelle du potentiel électrostatique et de la concentration des porteurs issues des deux programmes.

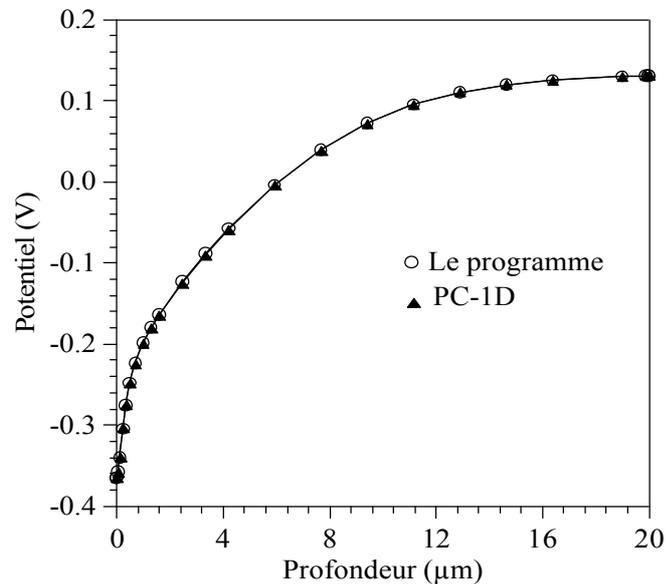


Figure 4.33 : Comparaison du potentiel électrostatique obtenu avec le programme et PC-1D

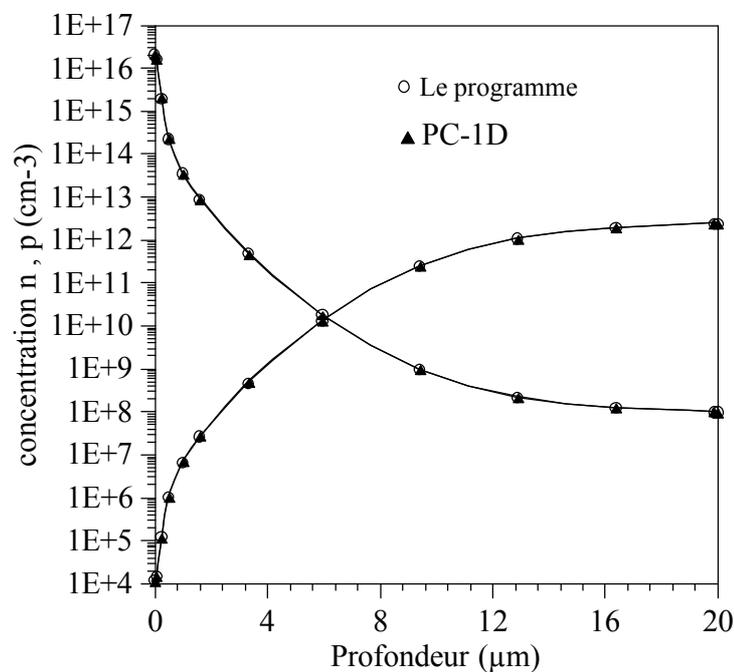


Figure 4.34 : Comparaison de la concentration des porteurs obtenue avec le programme et PC-1D

L'examen comparé de ces profils, potentiels électrostatiques, concentrations des électrons des trous nous renseigne sur l'accord parfait des résultats issus des deux programmes. Cela résulte principalement des modèles physiques précis introduits dans notre programme.

4.3.5 Les solutions hors équilibre :

Lorsqu'on polarise le dispositif, les équations de transports étant soumises aux conditions de Dirichlet aux contacts métalliques, un régime de fonctionnement s'impose et on peut se trouver pour un substrat type N dans l'une des situations suivantes :

- $p \ll N_d$ $n \approx N_d$ condition voisine de celle qu'on observait à l'équilibre thermodynamique on parle alors de la situation de faible niveau d'injection.
- $p \gg N_d$ $p \approx n$ correspond à une situation de fort niveau d'injection.

L'application de l'algorithme dans le cas hors équilibre s'effectue en prenant les tensions graduellement augmentées à partir de l'équilibre. Le pas de variation dépend de la polarisation. Dans le cas inverse ce pas peut atteindre 1 V, la convergence des étapes itératives des trois équations est relativement rapide et sûre sans observer d'instabilités dans les calculs. La tension maximale qu'on peut atteindre est de l'ordre de 18 V, tout dépend de la précision de la machine et du compilateur utilisé. En polarisations directes, des difficultés sévères s'observent dans les cas suivants :

- La solution initiale est trop écartée de la solution exacte
- La tension externe dépasse l'ordre de 0.3 V
- La précision de la boucle interne des équations des électrons et des trous n'est pas suffisante.
- Le réseau de discrétisation dans sa construction n'est pas précisément optimal par rapport aux critères cités ci dessus.

Pour une tension donnée, la solution finale des équations s'obtient après un temps relativement élevé. Le calcul de la caractéristique courant-tension du dispositif peut par conséquent être lourd. Une procédure d'accélération de la convergence et de minimisation du temps d'exécution est nécessaire. Pour cela, la méthode de Newton est appliquée pour la résolution de l'équation non linéaire de Poisson et des équations de continuité en utilisant les étapes du même schéma [57]. Le système linéaire obtenu est résolu par la méthode SOR avec une évaluation estimative et automatique du facteur de relaxation. [1]. Cette adaptation influe considérablement sur le temps d'exécution pour les applications hors équilibre et principalement en polarisation directe et elle s'observe clairement dans les figures suivantes (cas d'une polarisation inverse de 0.1 V). Cette amélioration reste avantageuses uniquement pour les faibles polarisations (0.1 - 5 V inverse, 0.1 0.3 V directes). Dans les cas de fortes polarisations, il est recommandé d'utiliser l'algorithme sans recours à l'accélération citée précédemment car elle provoque une divergence dans ce cas.

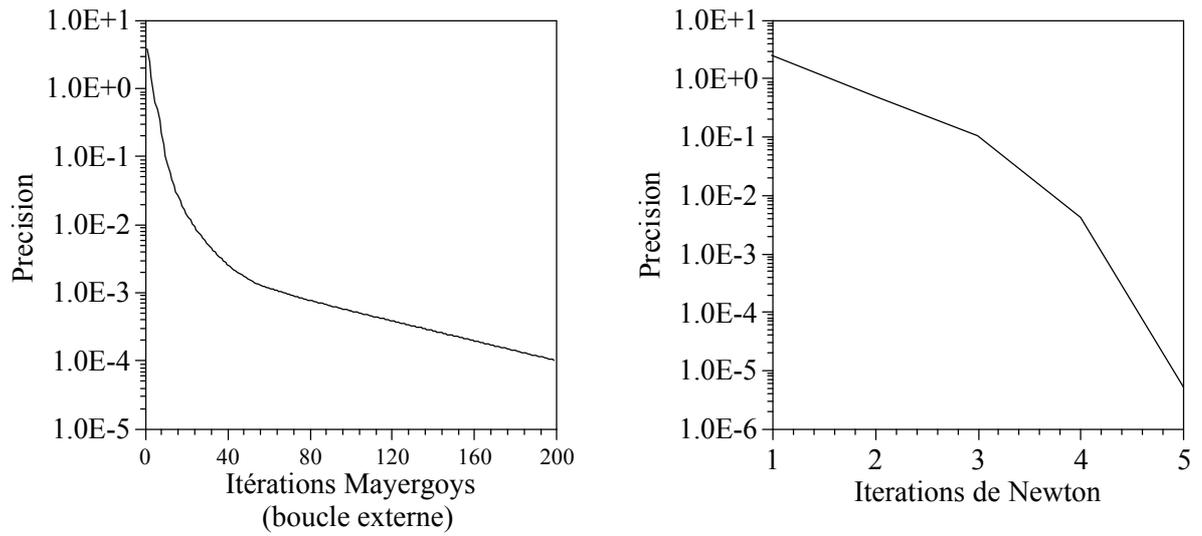


Figure 4.35 : Evolution de la précision de la boucle externe du schéma de Mayergoyz et celle de Newton pour le potentiel (à - 0.1 V)

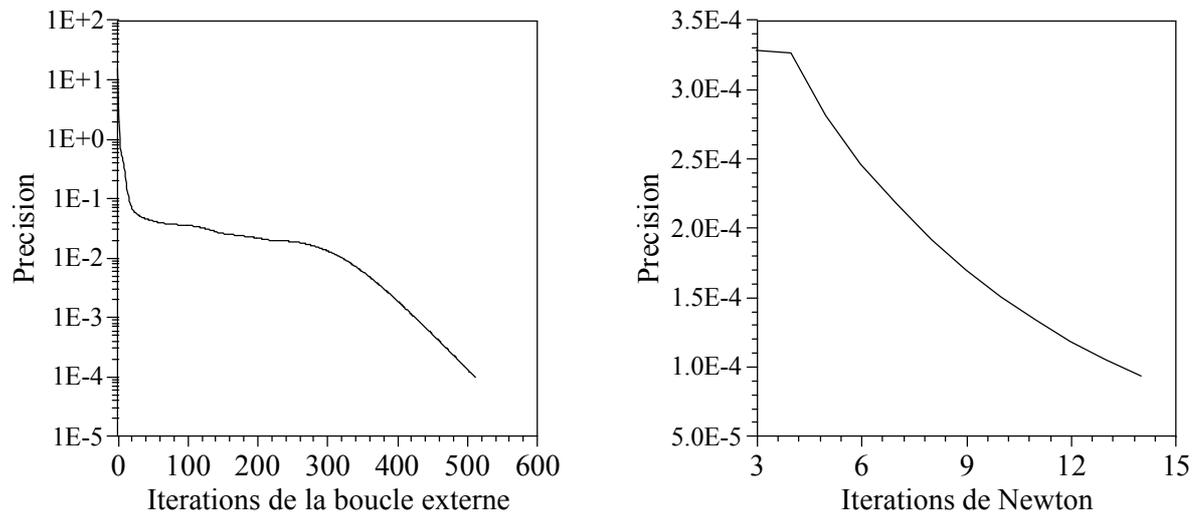


Figure 4.36 : Evolution de la précision de la boucle externe du schéma de Mayergoyz et celle de Newton pour l'équation des électrons (à - 0.1 V)

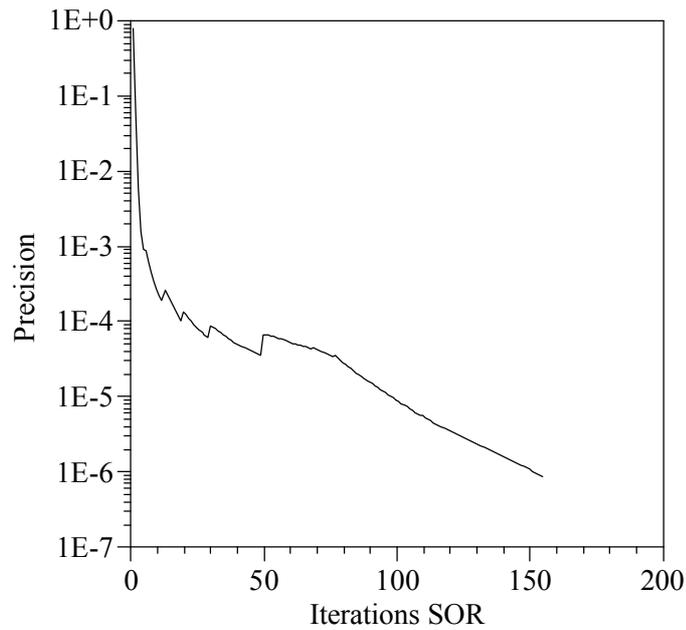


Figure 4.37 : Evolution de la précision de la boucle interne utilisant la méthode SOR

4.3.5.1 Cas des polarisations inverses :

a) Evolution du potentiel électrostatique :

En appliquant une tension de 0 V à 10 V en inverse et graduellement on doit s'attendre à une augmentation de la tension de diffusion et de la largeur de la zone déplétée. Ceci se confirme en analysant les résultats représentés sur les figures suivantes :

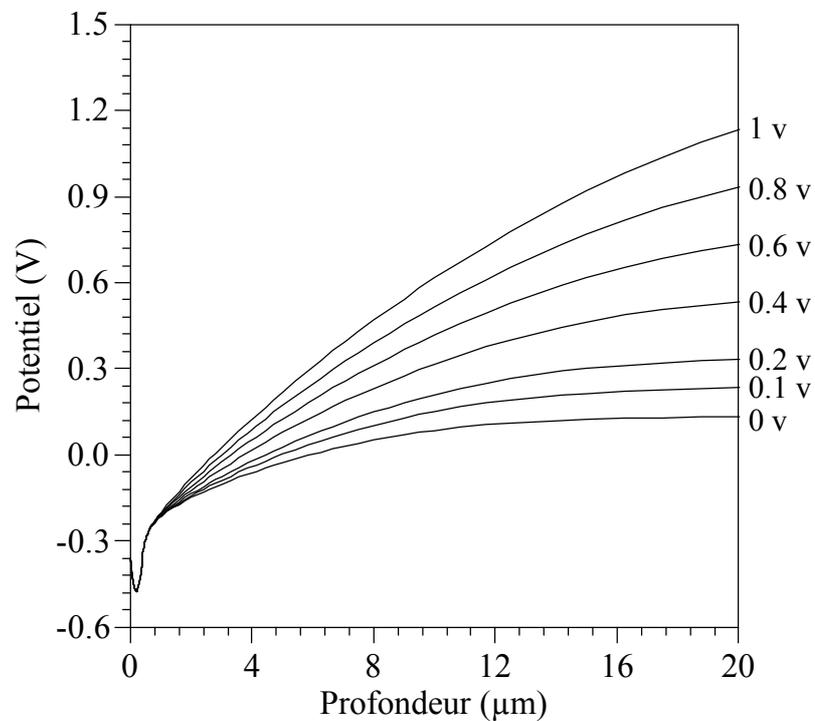


Figure 4.38 : Le potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions inverses

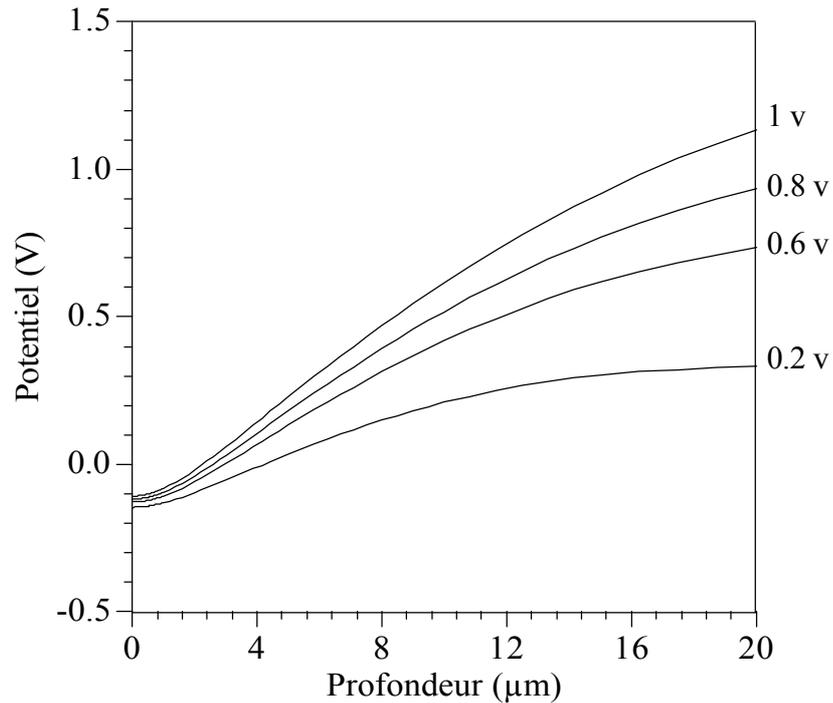


Figure 4.39 : Le potentiel électrostatique sous l'oxyde pour différentes tensions inverses

Sous l'oxyde le potentiel suit les variations illustrées sur la figure 4.39. La tension étant appliquée au contact métallique arrière, au contact avant le potentiel reste constant et la pente de la courbe augmente. La petite barrière qui se forme est due à l'influence du contact métallique avant sur les régions très voisines de l'oxyde.

La variation du champ électrique en fonction de la polarisation appliquée est représentée sur les figures suivantes :

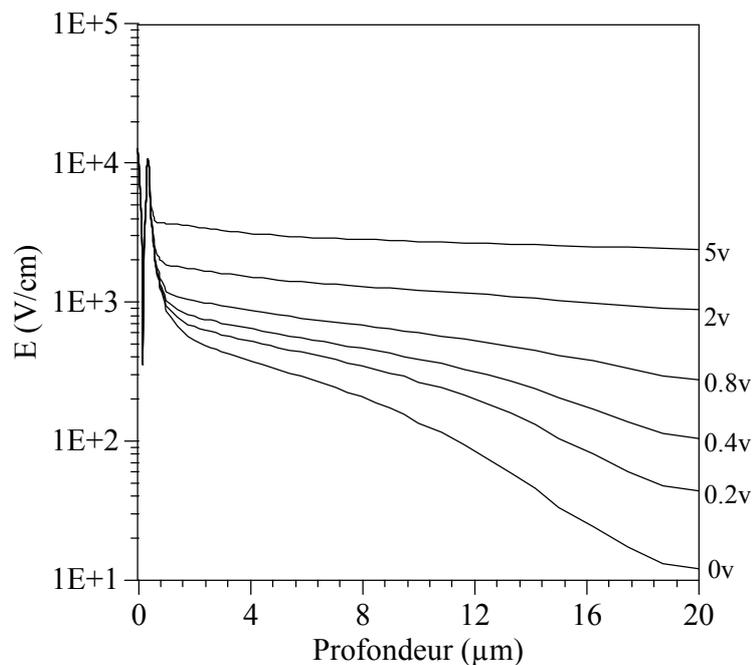


Figure 4.40 : Champ électrique sous le métal pour différentes tensions inverses

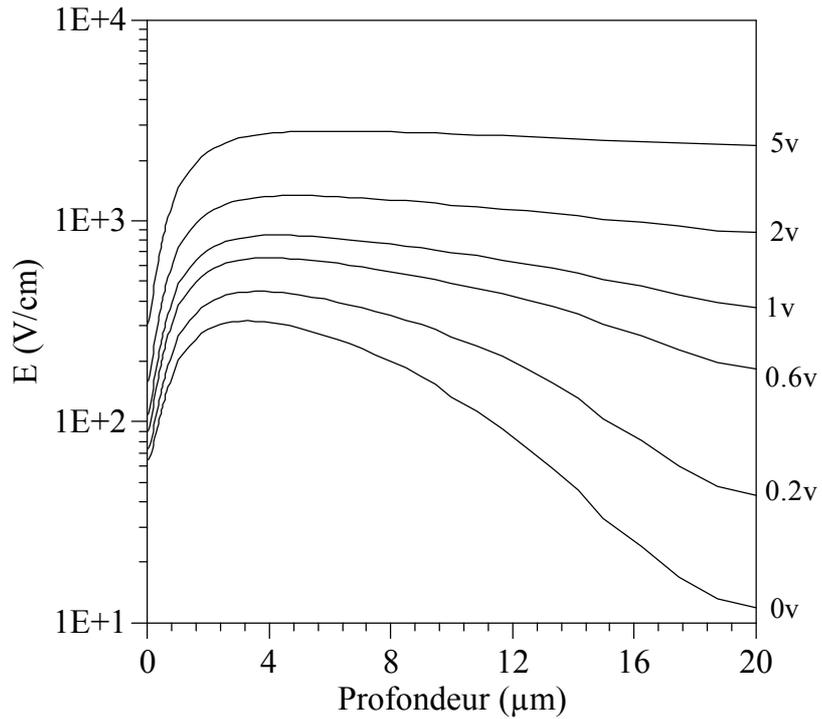


Figure 4.41 : Champ électrique sous l'oxyde pour différentes tensions inverses

Sous le métal, la barrière de potentiel augmente, le champ électrique par conséquent augmente. La figure 4.40 montre la variation de plus en plus faible de la pente de la courbe du champ, au-delà de 0.8 V le champ devient uniforme (forte polarisation).

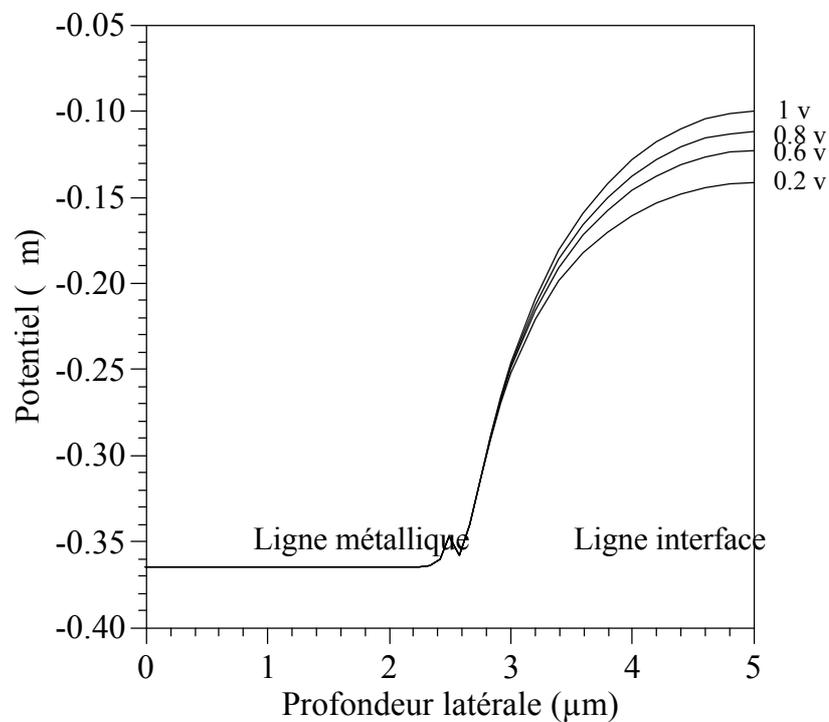


Figure 4.42 : Variation du potentiel en profondeur latérale

Le long de la ligne latérale comportant les points métalliques et les points de l'interface, le potentiel suit les courbes de la figure 4.42. Les points du contact étant soumis à la condition de Dirichlet ; le potentiel reste constant indépendamment de la polarisation de l'autre contact ; Autour des points du coude de la jonction, il varie lentement et loin du coude, il suit le comportement de la base qui subit l'action du contact arrière.

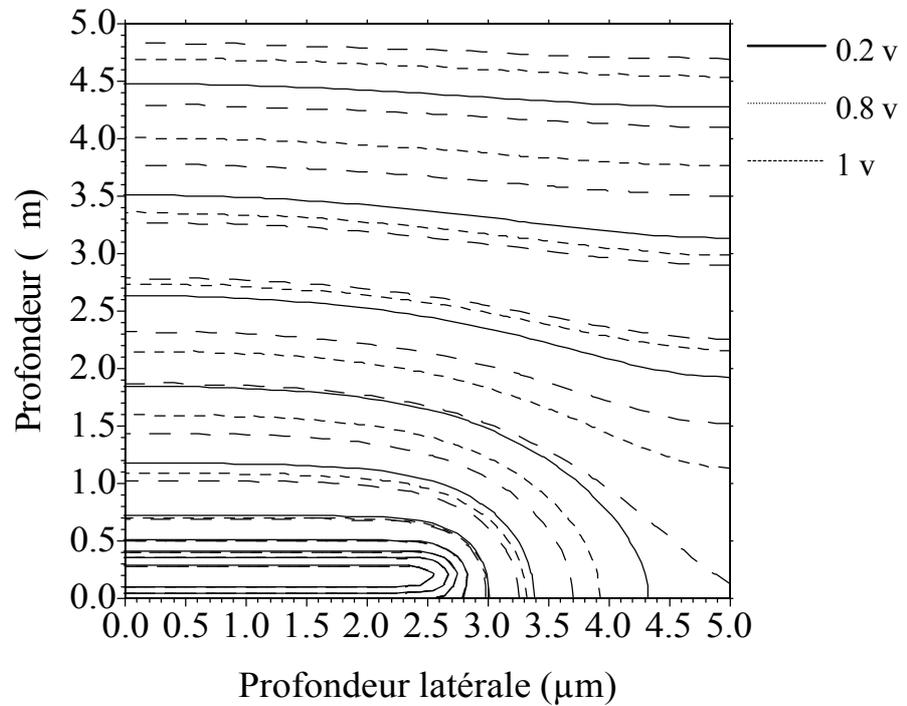


Figure 4.43 : Contour du potentiel pour différentes tensions inverses

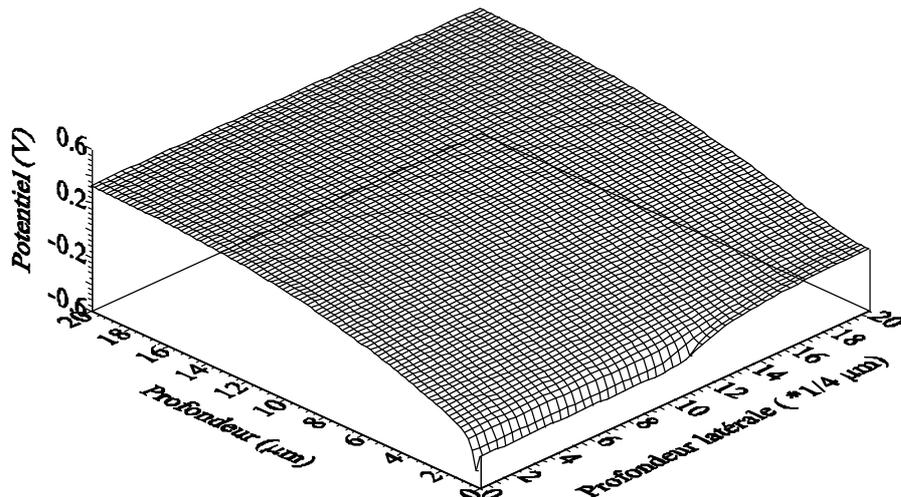


Figure 4.44 : Potentiel électrostatique sous une polarisation inverse de 0.2 v

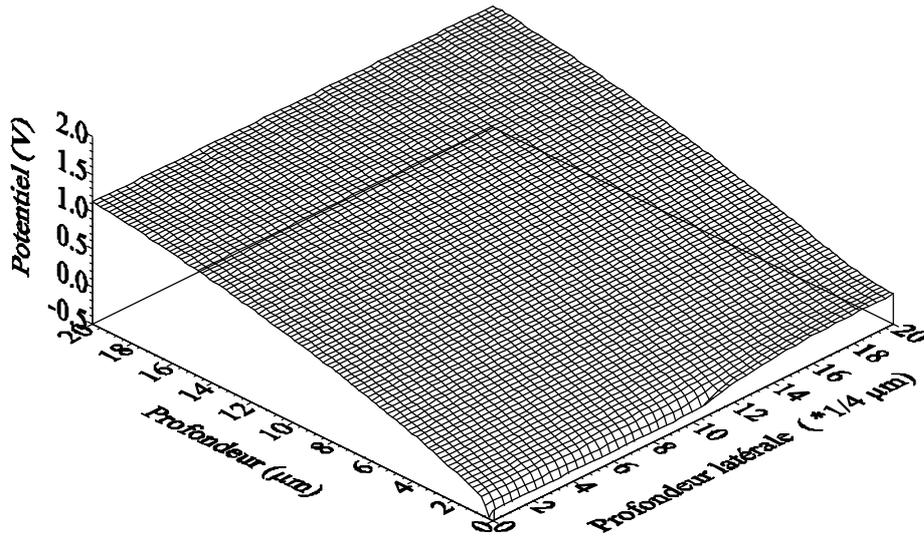


Figure 4.45 : Potentiel électrostatique sous une polarisation inverse de 1 v

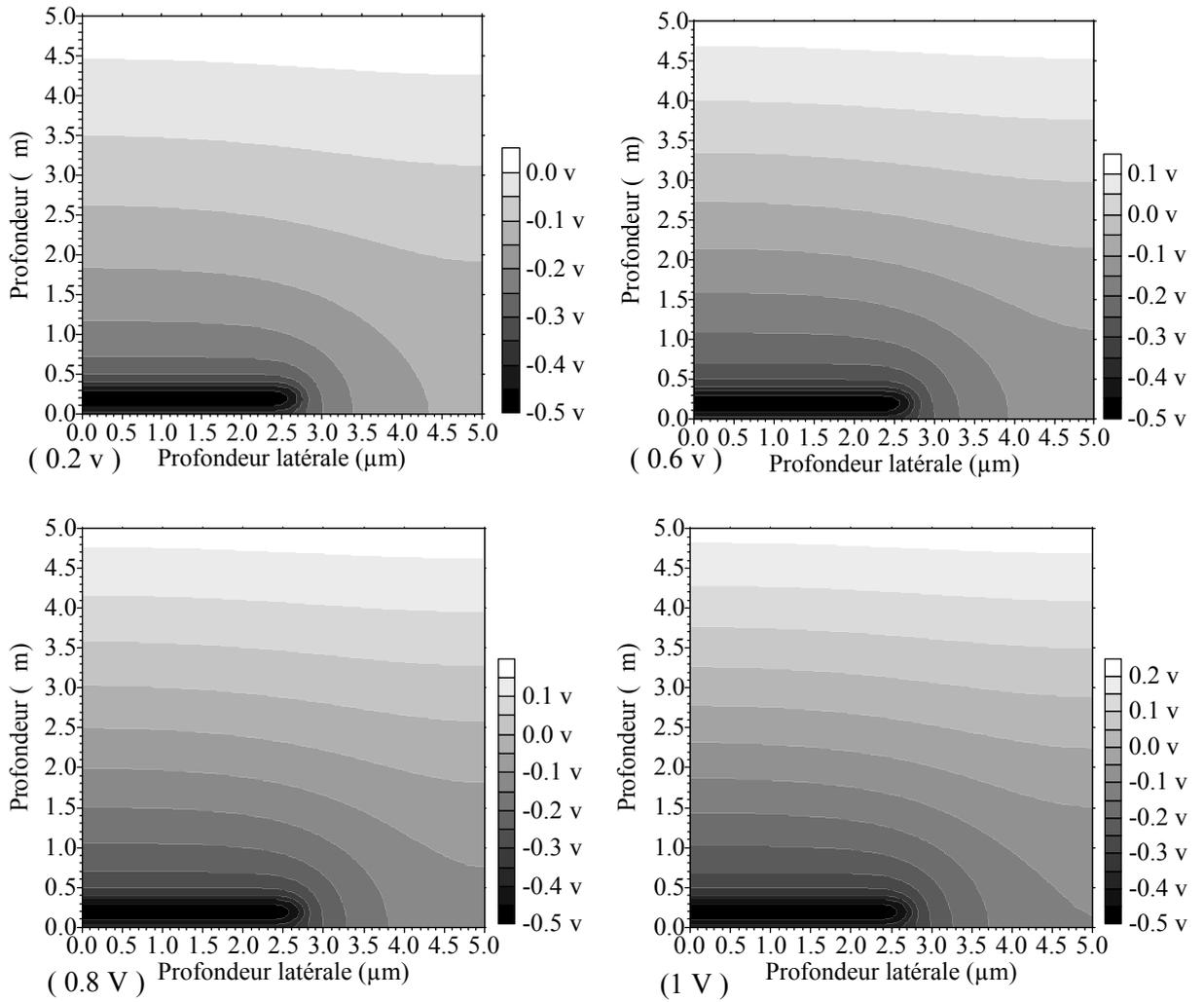


Figure 4.46 : Contour du potentiel électrostatique pour différentes tensions inverses

La figure 4.43 visualise la répartition dans le plan (x,y) des lignes équipotentielles, l'influence de la polarisation du contact arrière est beaucoup plus importante que celle du contact avant.

Les figures 4.44 et 4.45 montrent les différences des vues en perspective du potentiel dans les deux cas de polarisations inverse : 0.2 V et 1 V. Dans le deuxième cas, le potentiel tend de plus en plus à devenir linéaire.

Les figures 4.46 récapitulent l'évolution bidimensionnelle du potentiel dans le plan (x,y) .

b) Evolution de la concentration des porteurs de charges :

Pour plusieurs tensions inverses le calcul des concentrations des électrons et des trous nous donnent les résultats suivants :

- Concentration des électrons :

Au-dessous du contact métallique la concentration des électrons est illustrée sur les figures suivantes :

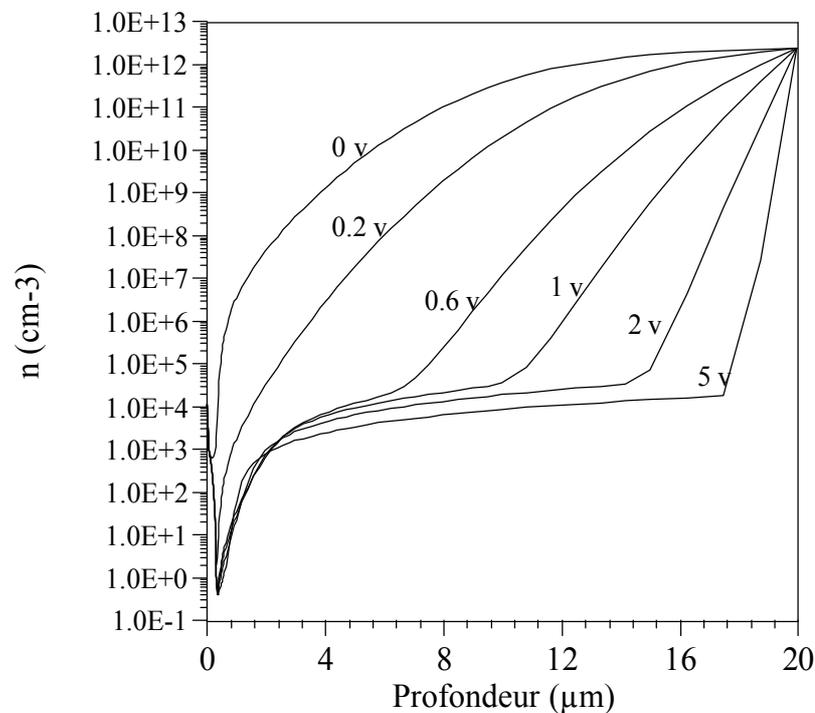


Figure 4.47 : Concentration des électrons sous le métal pour différentes tensions inverses

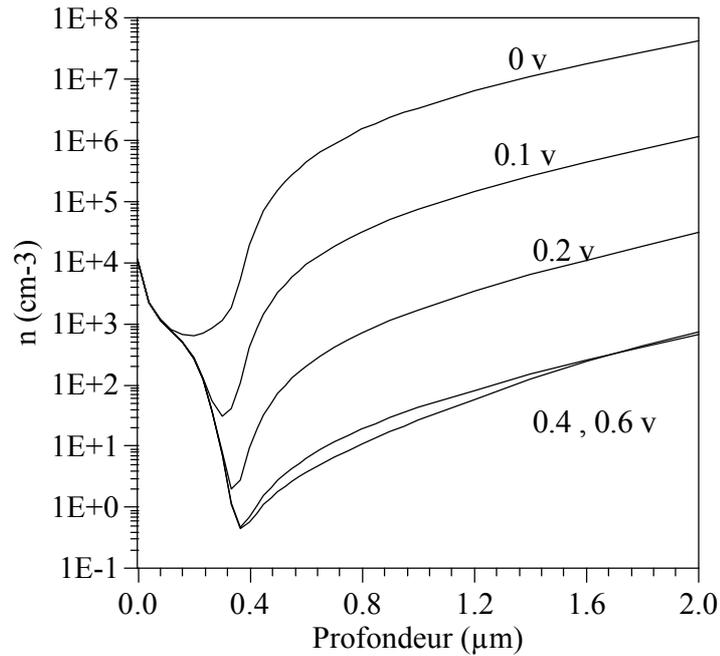


Figure 4.48 : Concentration des électrons au voisinage de la jonction pour différentes tensions inverses.

A partir de l'équilibre, la concentration des électrons diminue rapidement en faisant varier la tension de 0 V à 1V (figure 4.47), cela introduit un élargissement rapide de la zone déplétée. Pour des polarisations supérieures, la variation devient lente et pratiquement nulle lorsque la zone déplétée prend la longueur totale du dispositif.

Au voisinage de la jonction, les variations sont localisées au-delà du pic du maximum du dopage. Cette variation est caractérisée par une chute très rapide autour de $0.3 \mu\text{m}$, propriété imposée par la forme du profil dans cette région.

Le long d'une ligne au-dessous de l'oxyde, la concentration des électrons suit l'allure de la courbe suivante pour différentes tensions inverses :

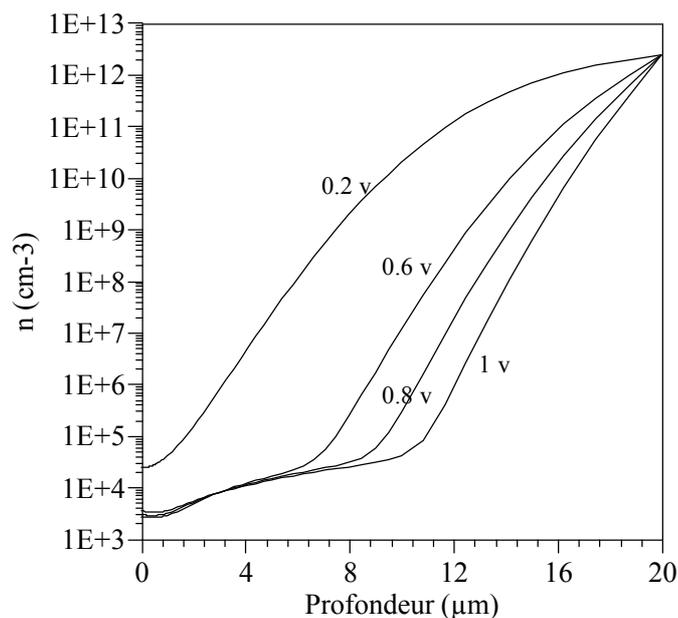


Figure 4.49 : Concentration des électrons sous l'oxyde pour différentes tensions inverses.

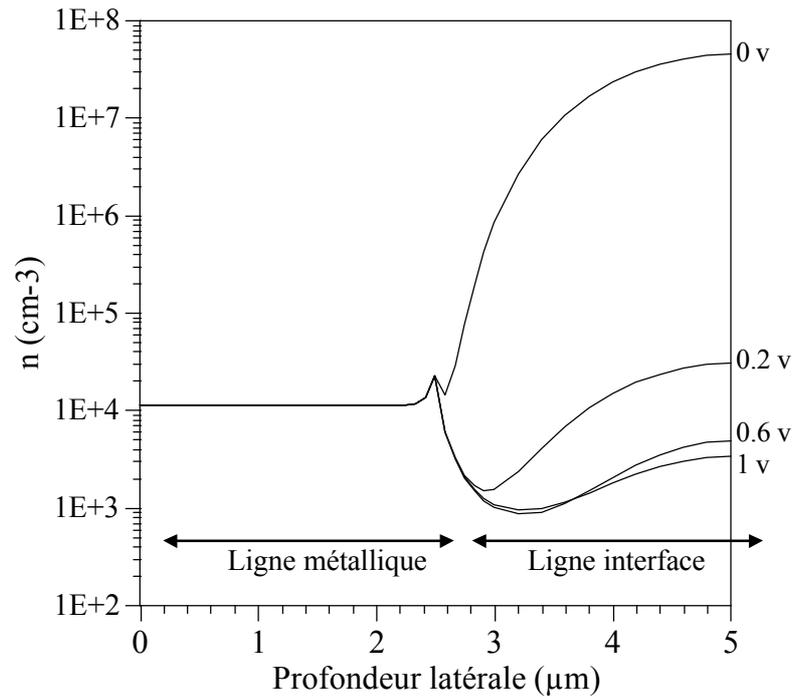


Figure 4.50 : Variation en profondeur latérale de la concentration des électrons pour différentes tensions inverses.

Sous l'effet de la déplétion totale de la jonction dans la région au-dessous du métal, la concentration des électrons diminue plus lentement dans la région centrale (entre le contact arrière et l'interface) étant donné que l'interface subit faiblement l'action de la polarisation du contact arrière supposé ohmique.

Le long de la ligne latérale comportant les points du contact avant et ceux de l'interface, la concentration des électrons prend l'allure de la figure 4.50, elle reste constante aux points du contact soumis à la condition de type Dirichlet. A l'interface, la diminution rapide de la densité des électrons se retrouve dans cette zone i.e. la déplétion se propage dans toute la base y compris au-dessous de l'oxyde.

Le profil en perspective de la concentration des électrons pour les deux polarisations inverses 0.2 V et 0.8 V est illustré aux figures suivantes :

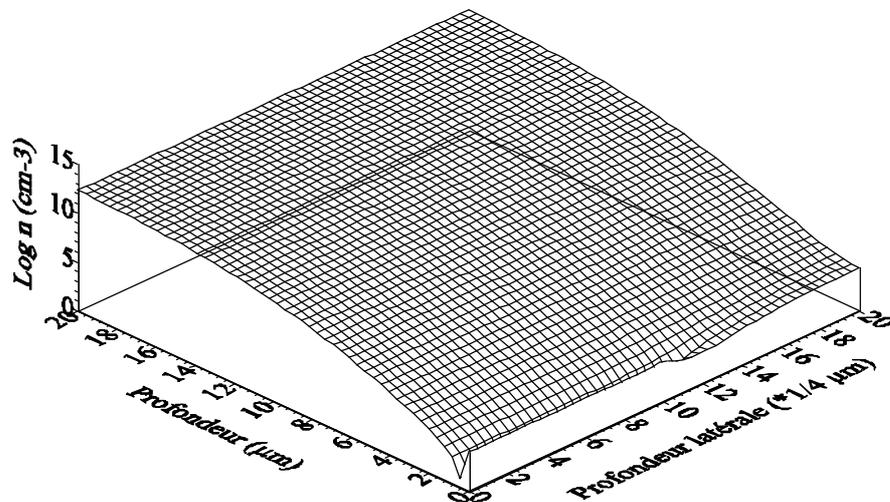


Figure 4.51 : Concentration des électrons sous une polarisation inverse de 0.2 v

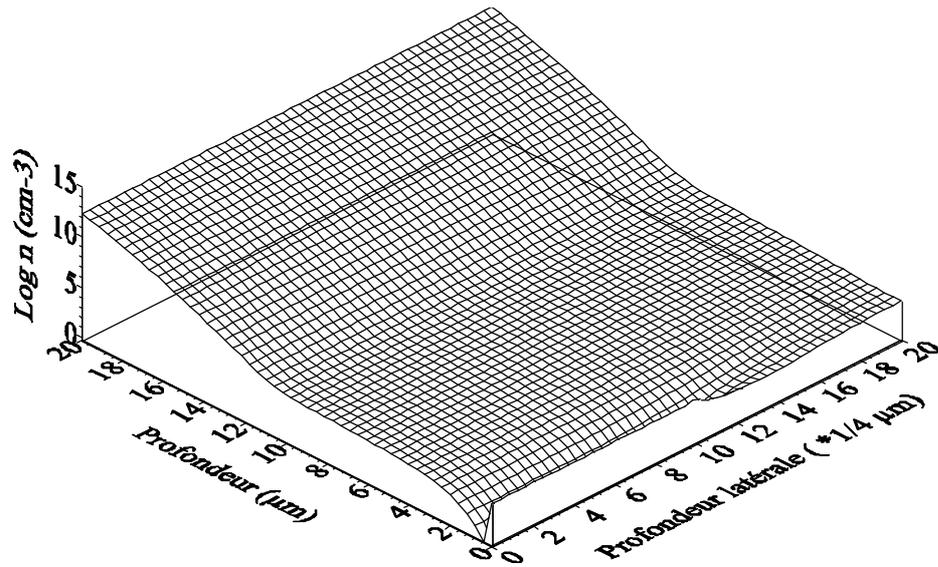


Figure 4.52 : Concentration des électrons sous une polarisation inverse de 0.8 v

Les deux courbes précédentes montrent clairement l'aplatissement dans la base de la concentration des électrons sous l'effet de la polarisation inverse. Vers le contact arrière, la concentration présente une pente due à la condition de Dirichlet.

- Concentration des trous :

Au dessous du contact métallique, la concentration des trous est illustrée sur les figures suivantes :

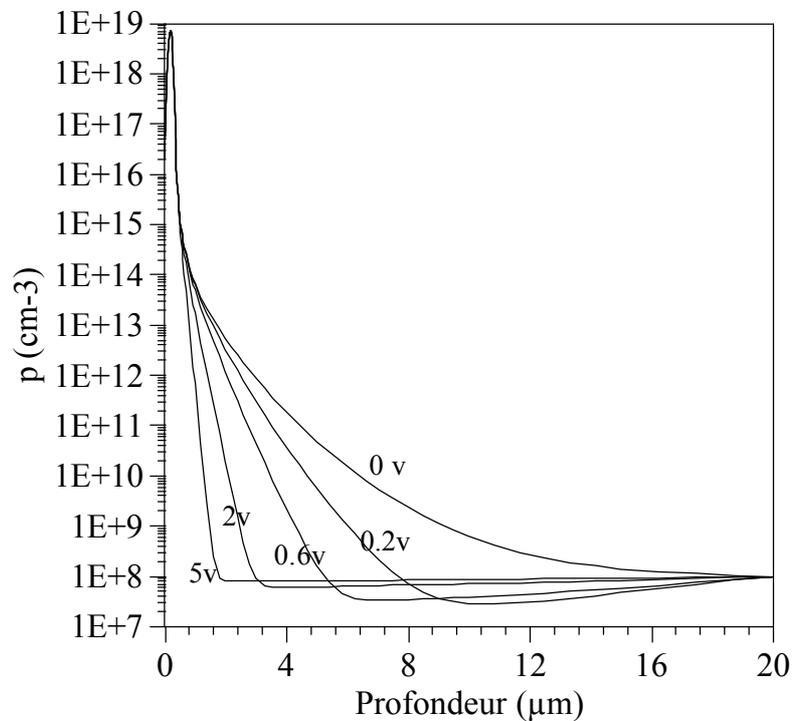


Figure 4.53 : Concentration des trous sous le métal pour différentes tensions inverses

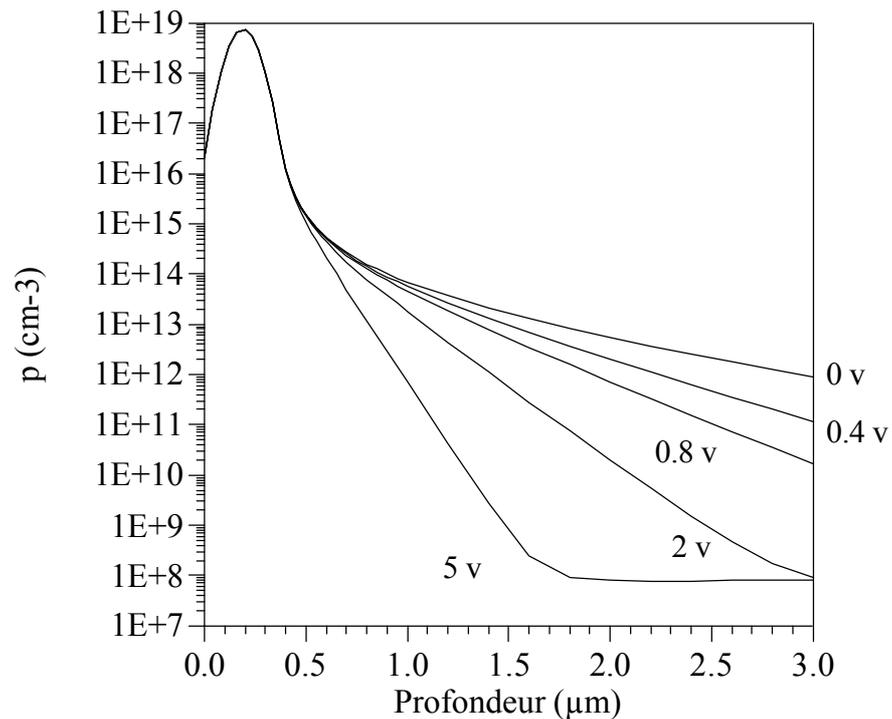


Figure 4.54 : Concentration des trous autour de la jonction pour différentes tensions inverses

La figure 4.53 montre la diminution de la concentration des trous en profondeur sous le métal avant au delà du pic du profil du dopage (autour de $0.5 \mu\text{m}$). Cette diminution est due à la diffusion des porteurs de part et d'autres de la jonction sous l'effet de la barrière de potentiel qui augmente avec la polarisation inverse.

Autour du pic du profil du dopage (P^+) les trous sont des majoritaires, leur concentration n^* est pas influencée par l'injection.

Sous l'oxyde, (figure 4.55), une diffusion faible des trous est concentrée sur un voisinage du coude de la jonction.

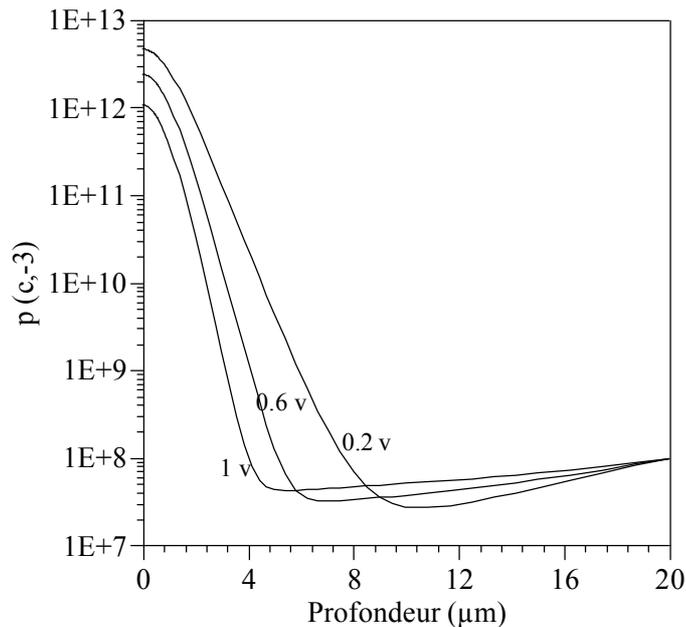


Figure 4.55 : Concentration des trous sous l'oxyde pour différentes tensions inverses

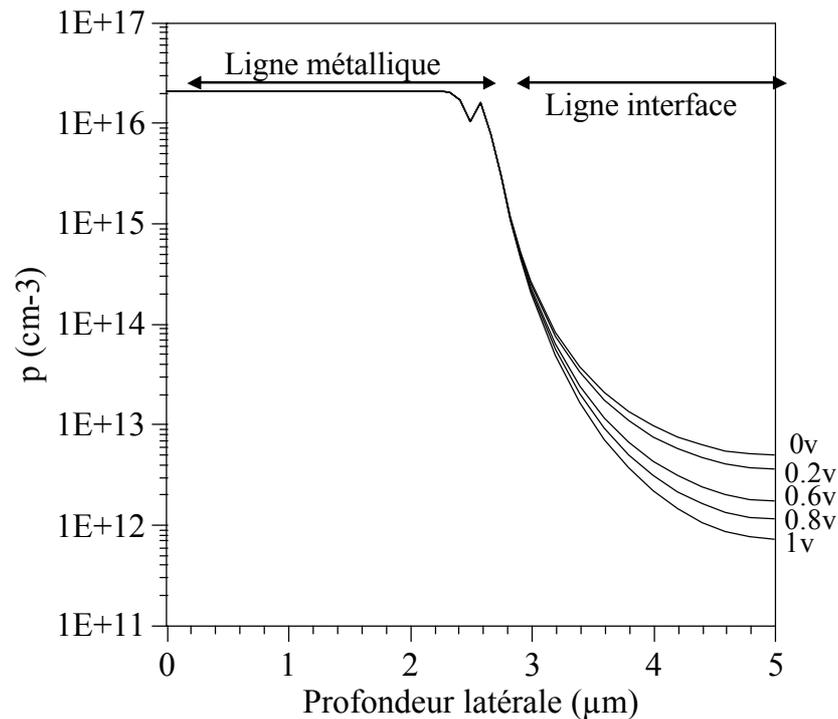


Figure 4.56 : Variation en profondeur latérale de la concentration des trous en fonction de la tension inverse

Suivant une ligne latérale comportant les points du métal avant et ceux de l'interface, la figure précédente montre que sur le contact les trous demeurent avec la concentration à l'équilibre imposée par la condition de Dirichlet. Au voisinage du coude, la variation existe mais elle est faible ;

loin du coude, ce sont les propriétés du substrat qui dominent et on remarque la diminution des trous sous l'effet de la barrière.

Les courbes des figures (4.57) et (4.58) donnent les vues en perspective de la concentration des trous sous les deux polarisations inverses 0.2 V et 0.8 V ; D'une manière analogue avec les électrons, le profil des trous s'aplatit dans la base et la région de charge d'espace s'élargit de plus en plus.

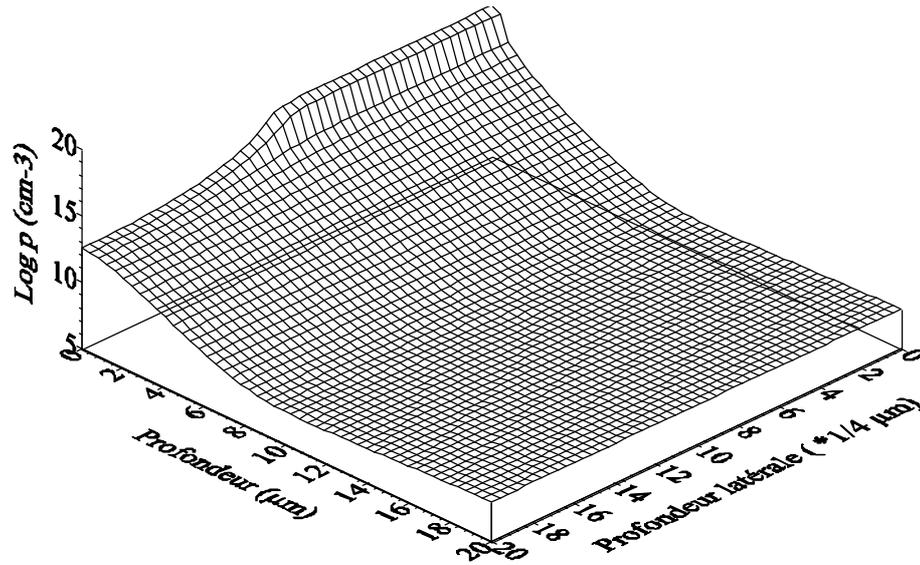


Figure 4.57 : Concentration des trous sous une polarisation inverse de 0.2 v

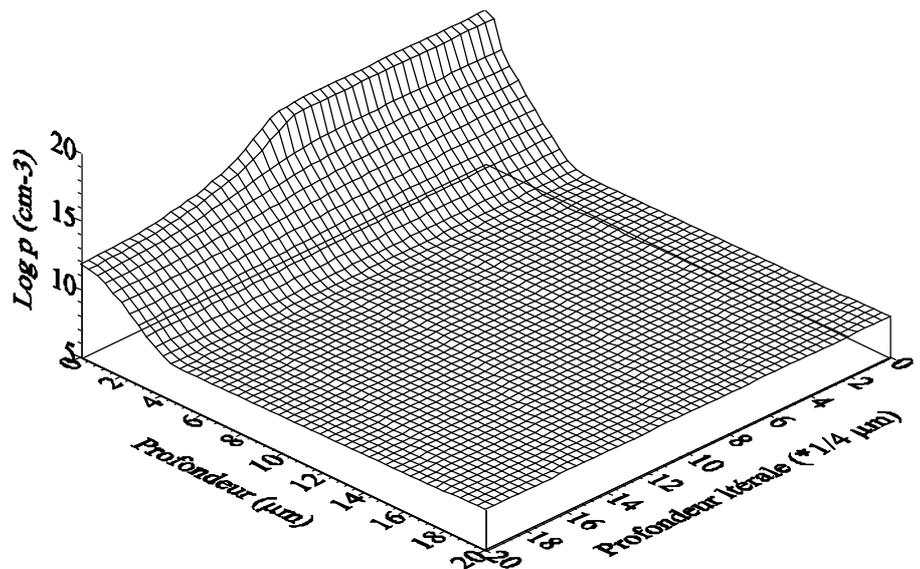


Figure 4.58 : Concentration des trous sous une polarisation inverse de 0.8 v

Les figures 4.59 montrent le profil de la concentration des électrons et des trous sous le métal et sa variation en fonction de la polarisation inverse. On observe clairement que la largeur de la région déplétée augmente sensiblement avec la polarisation et que le dispositif est soumis à de faibles niveaux d'injection. Le dernier point justifie les performances des calculs (précision élevée ; nombre d'itérations faibles) qui convergent sans poser de difficultés sérieuses, rappelons que l'algorithme utilisé assure sa validité dans le cas des faibles injections ou les équations sont faiblement liées.

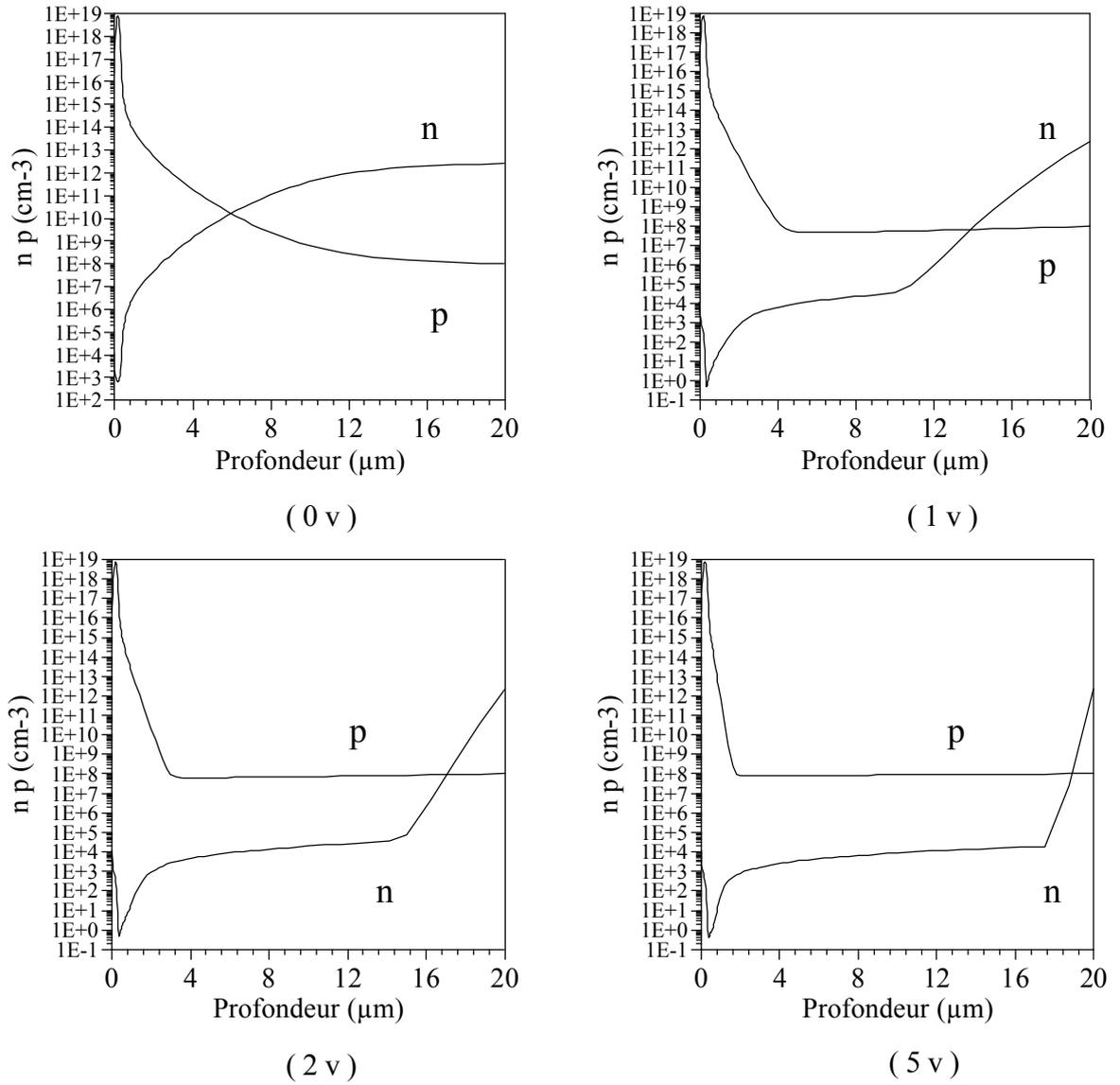


Figure 4.59 : Concentration des électrons et des trous pour différentes tensions inverses

4.3.5.2 Cas des polarisations directes :

Les difficultés notées précédemment imposent une rigueur dans le choix des précisions des boucles externes de l'équation de Poisson et des équations de continuité. Le pas de variation du potentiel appliqué doit être autour de 0.1 V à 0.2 V au maximum pour ne pas alourdir les calculs. Les différentes tensions sont appliquées au contact P⁺ : ($V=V_0+V_{\text{appl}}$) et le contact du côté N reste libre ($V=V_0$).

a) Evolution du potentiel électrostatique :

Pour différentes tensions directes, le potentiel électrostatique est représenté sur les figures suivantes :

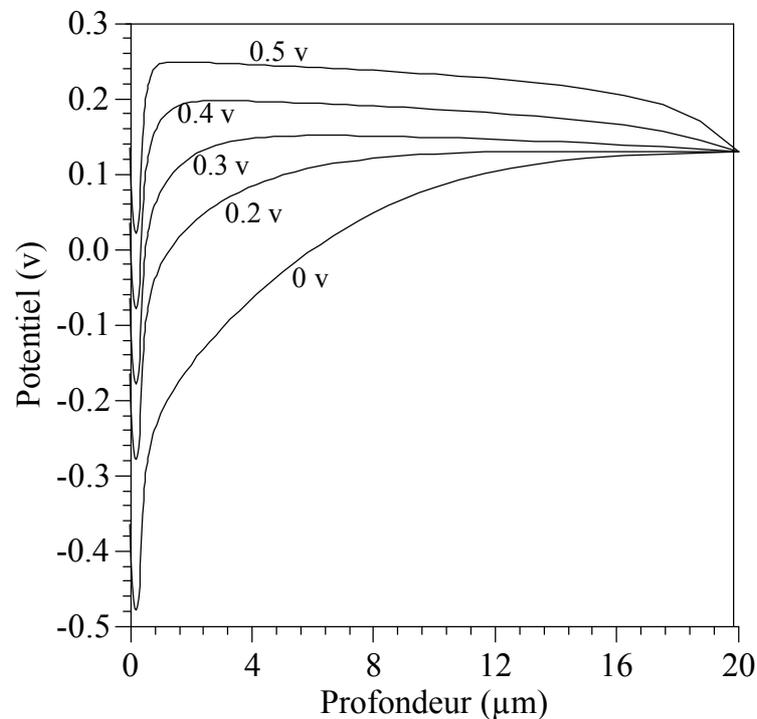


Figure 4.60 : Potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions directes

Sous le métal, le potentiel suit les variations illustrées sur la figure 4.60 et 4.61 pour la région au voisinage de la jonction. La tension étant appliquée au contact métallique avant, au contact arrière le potentiel reste constant et la pente de la courbe diminue fortement. La barrière diminue d'une fraction égale au saut de la tension appliquée. On remarque que ce saut induit le déplacement en entier de la courbe vers le haut. Pour des tensions directes élevées, le potentiel devient linéaire et le dispositif se comporte comme un conducteur.

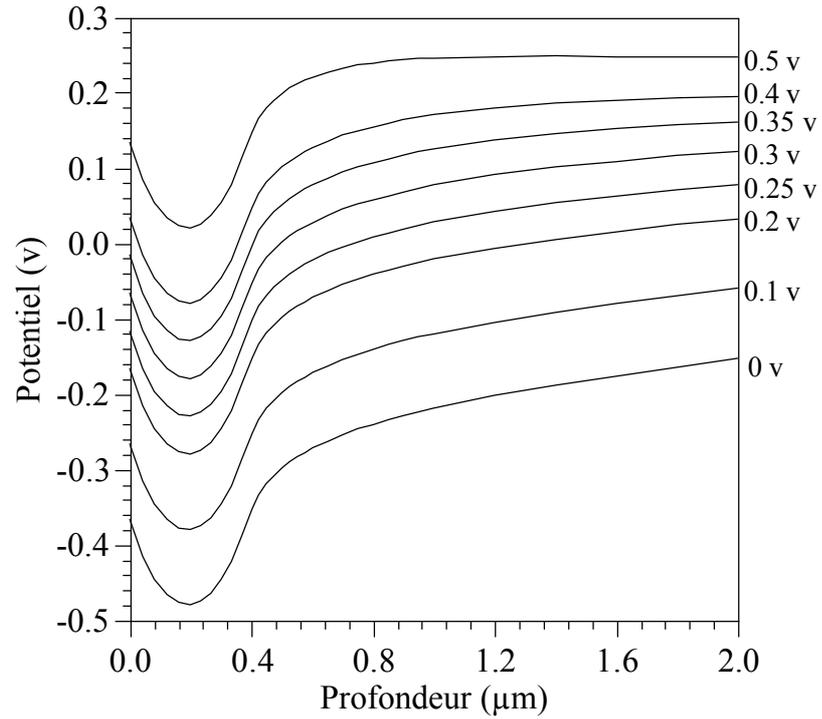


Figure 4.61 : Potentiel électrostatique sous le métal pour différentes tensions directes et au voisinage de la jonction

Sous l'oxyde, la variation du potentiel est similaire (figure 4.62), il présente des sauts sur la frontière gauche dus au prolongement de la tension appliquée sur le contact avant.

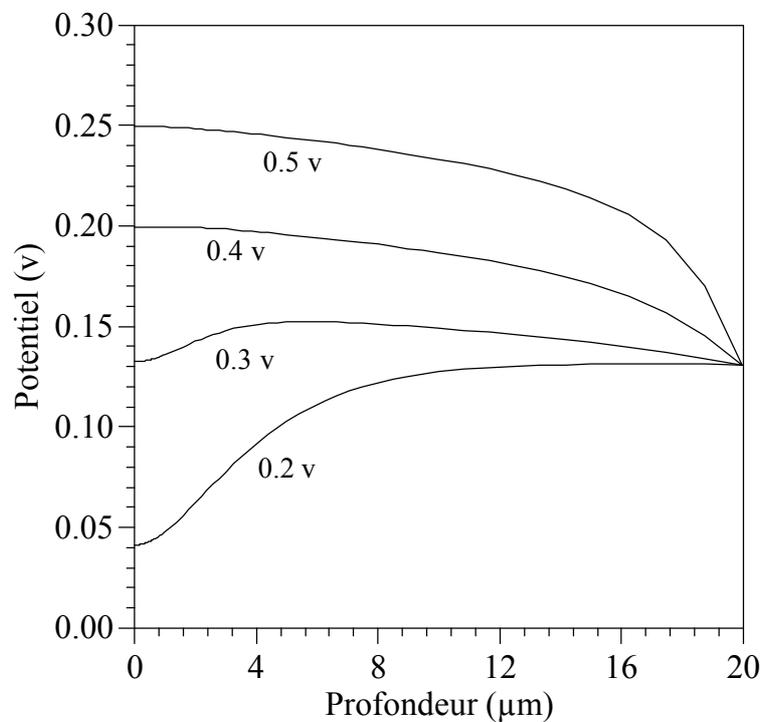


Figure 4.62 : Potentiel électrostatique sous l'oxyde pour différentes tensions directes

La répartition du champ électrique sous le métal et sous l'oxyde est présentée sur les figures suivantes :

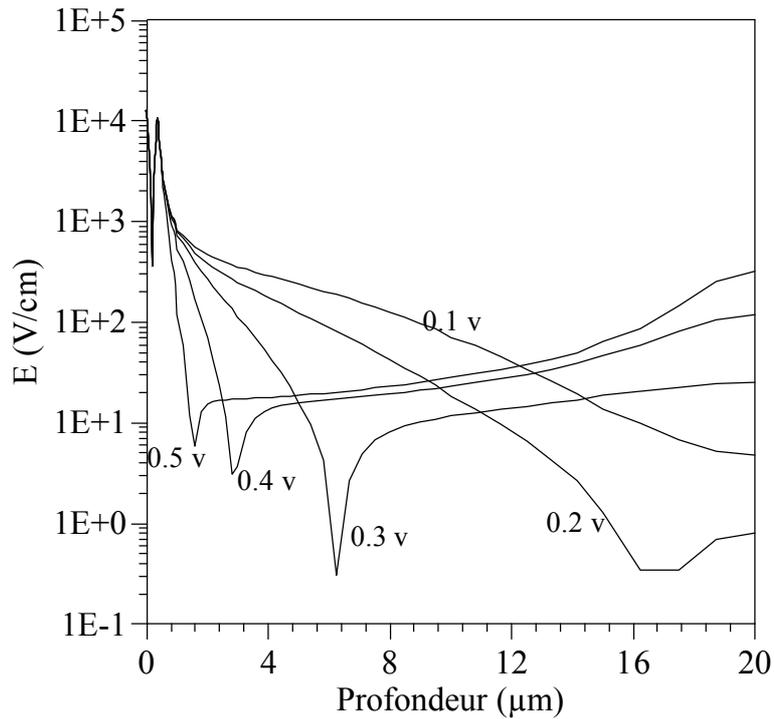


Figure 4.63 : Champ électrique sous le métal pour différentes tensions directes

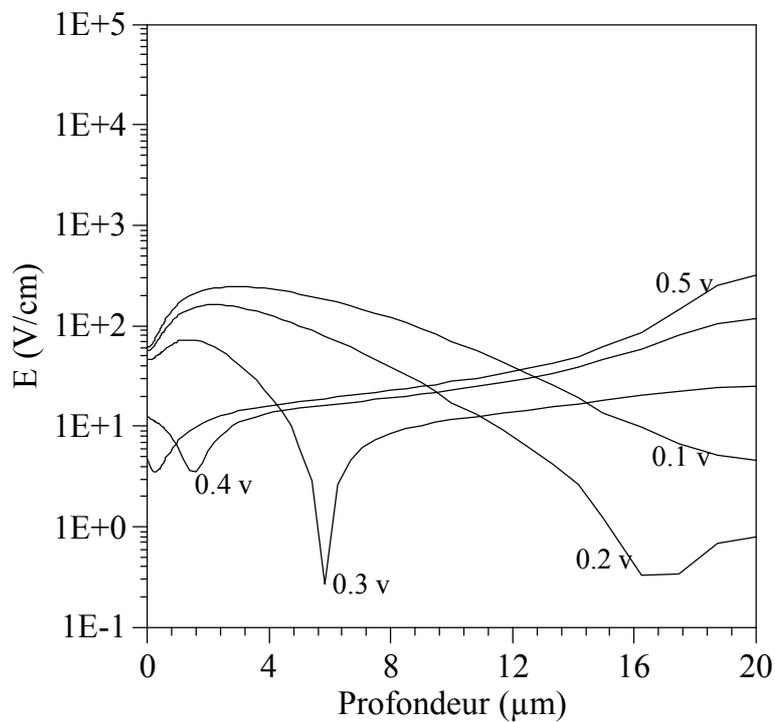


Figure 4.64 : Champ électrique sous l'oxyde pour différentes tensions directes

Nous remarquons l'existence d'un pic en plus de celui qui correspond au pic du potentiel au voisinage du maximum du dopage, ce pic coïncide avec le point d'inflexion du potentiel

qui se forme avec le décalage du potentiel vers le haut (figure 4.65). Avec l'augmentation de la tension directe ce pic se déplace vers l'arrière.

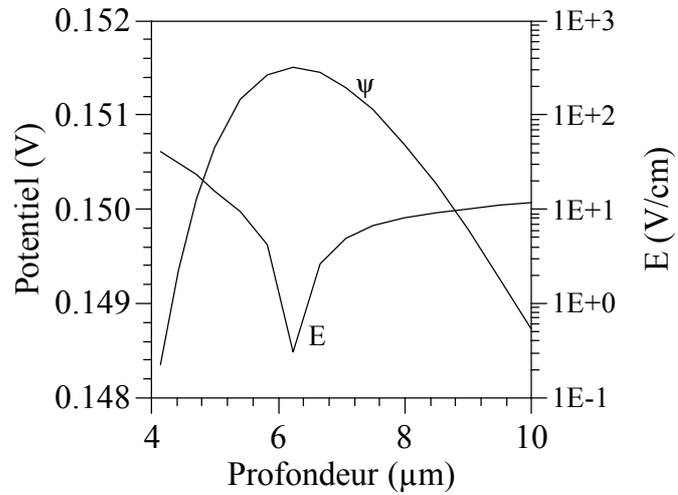


Figure 4.65 : Pic du champ électrique et le point d'inflexion de la courbe du potentiel (à 0.3 v)

Suivant une ligne latérale comportant les points du contact avant et ceux de l'interface, la courbe du potentiel se déplace entièrement avec des valeurs égales aux pas d'incrémentations de la tension appliquée (figure 4.66).

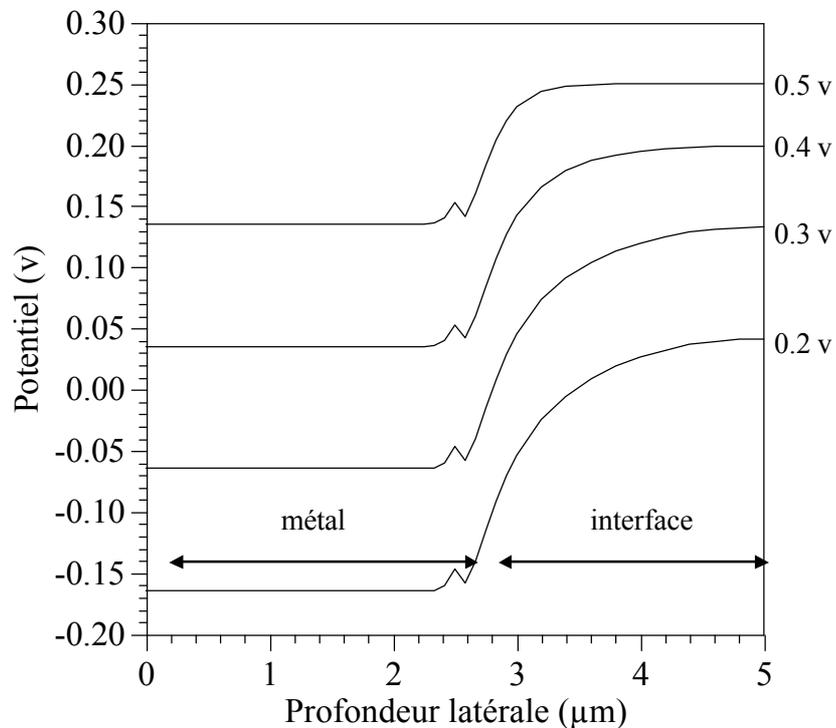


Figure 4.66 : Variation du potentiel électrostatique en profondeur latérale

La distribution des lignes équipotentiellles est présentée sur la figure suivante, nous remarquons le décalage clair des lignes à partir du métal avant.

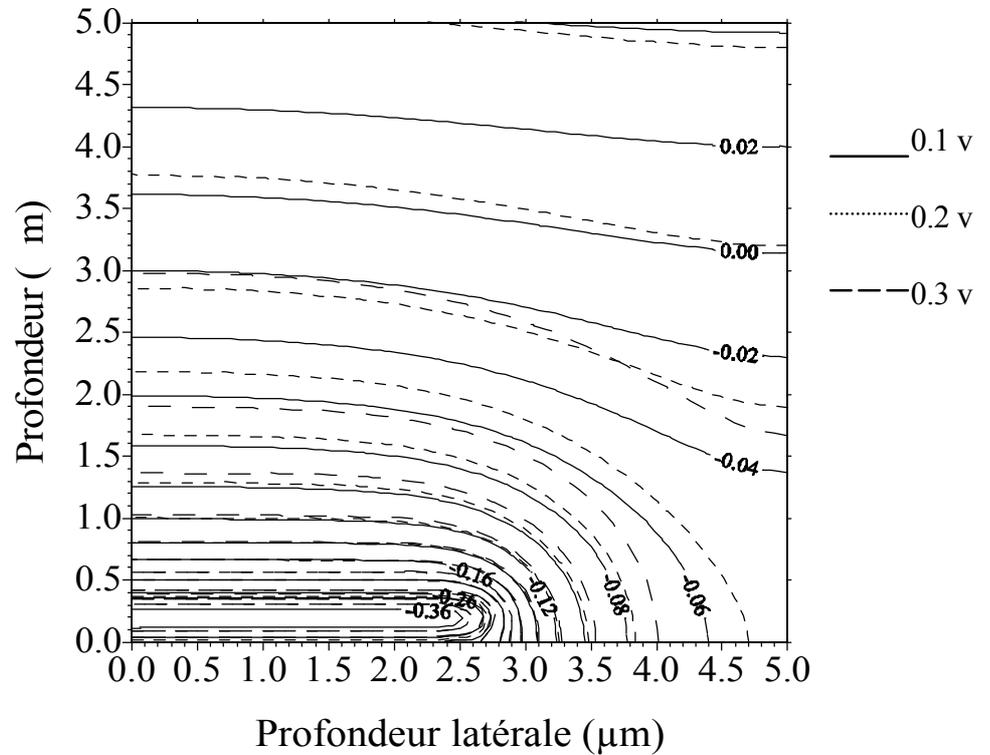


Figure 4.67 : Contour du potentiel électrostatique pour différentes tensions directes

La représentation en perspective dans les deux cas de polarisations directes, 0.2 V et 0.5 V (figures 4.68-69) montre les décalages et la courbure vers le haut que subit la courbe du potentiel électrostatique.

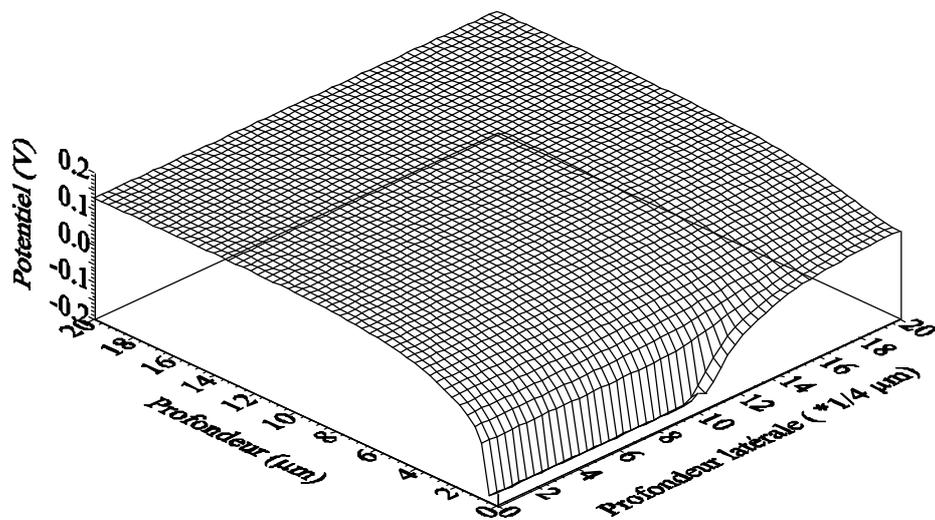


Figure 4.68 : Potentiel électrostatique sous une tensions directe de 0.2 v

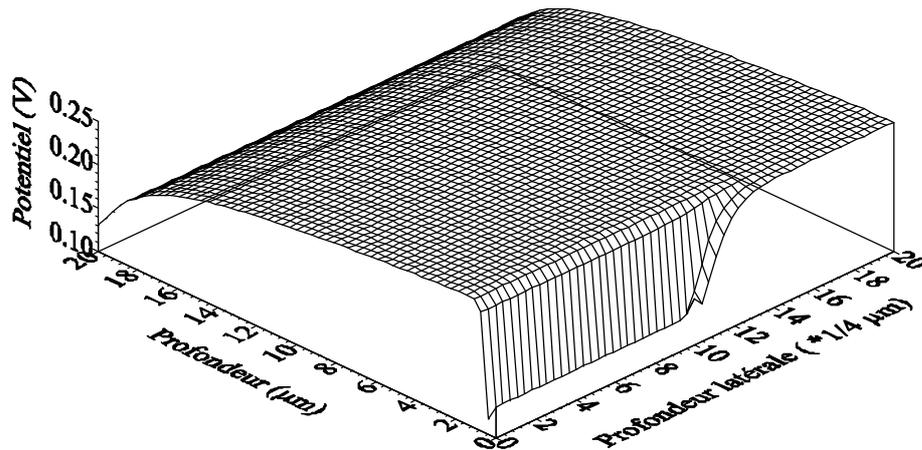


Figure 4.69 : Potentiel électrostatique sous une tension directe de 0.5 v

b) Evolution de la concentration des porteurs de charges :

Pour plusieurs tensions directes, les résultats de calcul des concentrations des électrons et des trous sont représentés sur les figures suivantes

- Concentration des électrons :

Au-dessous du contact métallique la concentration des électrons est illustrée sur les figures suivantes :

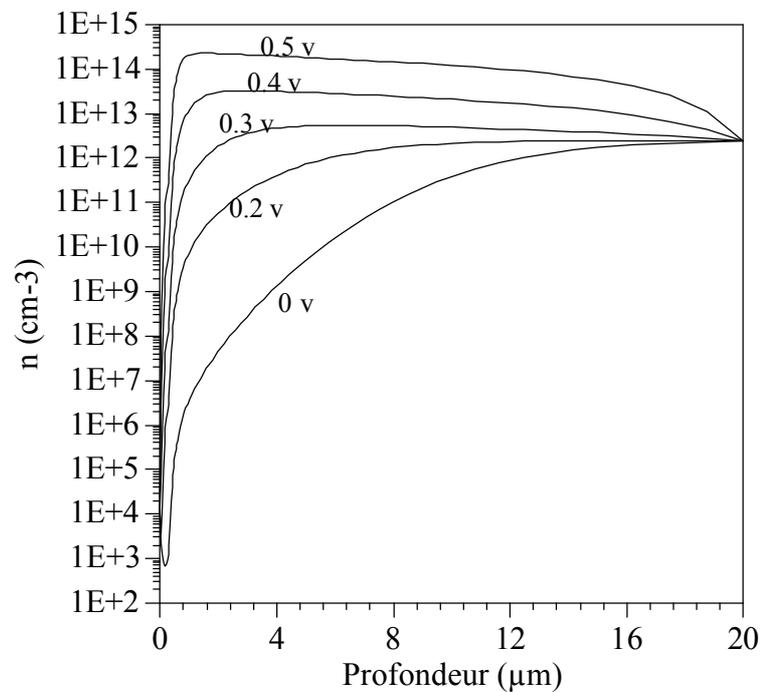


Figure 4.70 : Concentration des électrons pour différentes tensions directes

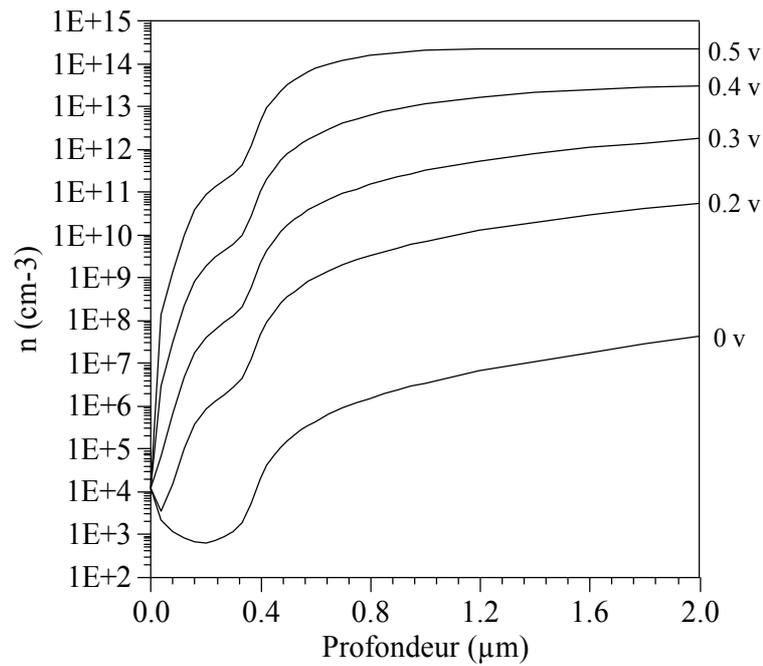


Figure 4.71 : Concentration des électrons au voisinage de la jonction pour différentes tensions directes

Les électrons étant des minoritaires dans la région P+ l'injection d'un excès de porteurs influe sur leur distribution, c'est ce que montrent les figures 4.70-71.

Sous l'oxyde un décalage du profil des électrons est similaire à celui du potentiel, il est dû à l'influence du coude de la jonction sur la portion du substrat au-dessous de l'oxyde.

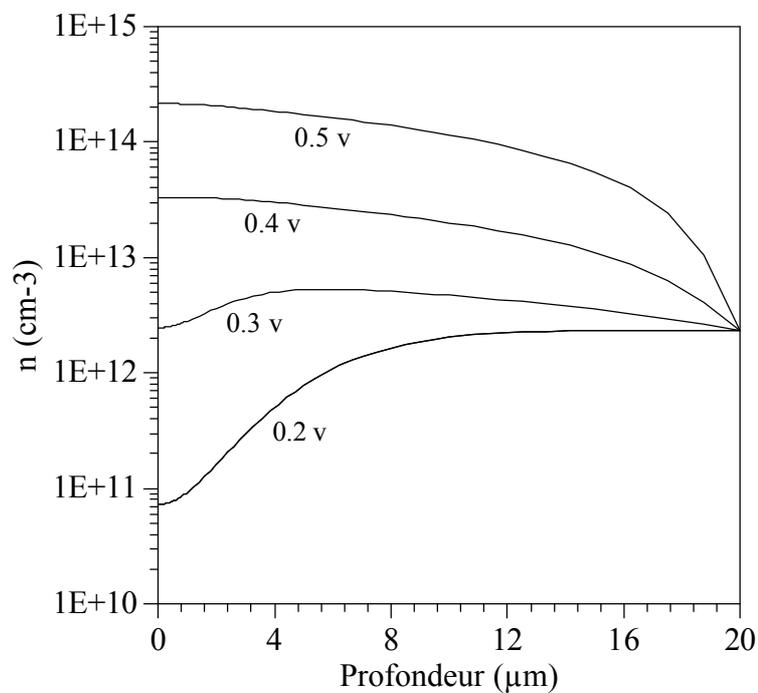


Figure 4.72 : Concentration des électrons sous l'oxyde pour différentes tensions directes

Suivant une ligne latérale comportant les points du contact métallique et ceux de l'oxyde, les électrons gardent leurs valeurs aux points métalliques sous la condition de Dirichlet et décalent vers le haut sous les propriétés du coude et du substrat sur le reste des points.

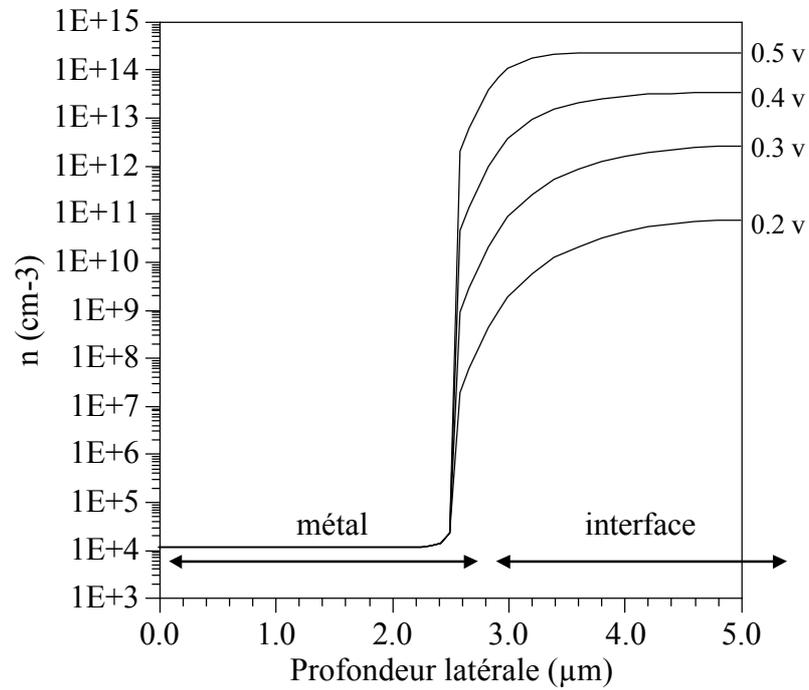


Figure 4.73 : Variation de la concentration des électrons en profondeur latérale pour différentes tensions directes

La vue en perspective du profil de la concentration des électrons montre les variations importantes dans le voisinage de la région P+ qui s'allongent au près de 4 à 5 μm . Sa valeur est autour de 10^{12} cm^{-3} .

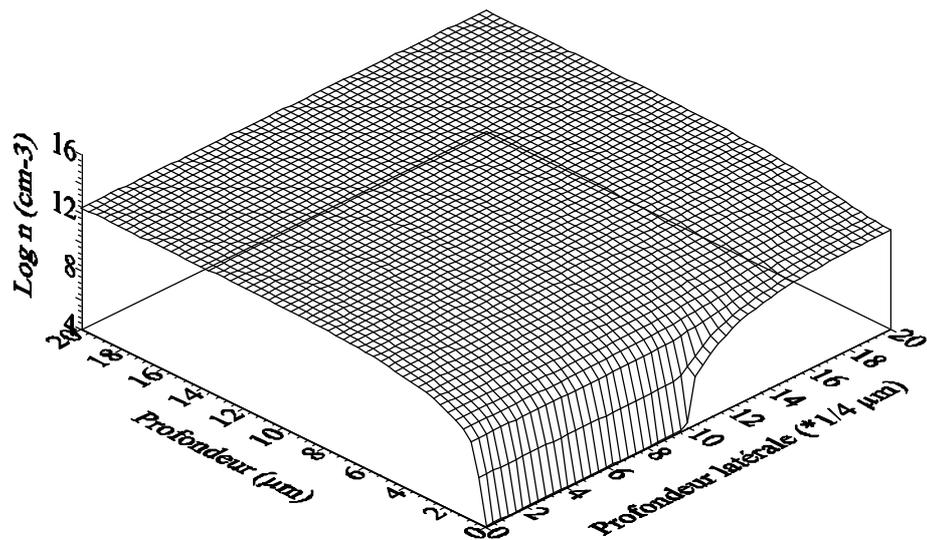


Figure 4.74 : Concentration des électrons sous une tension directe de 0.2 v

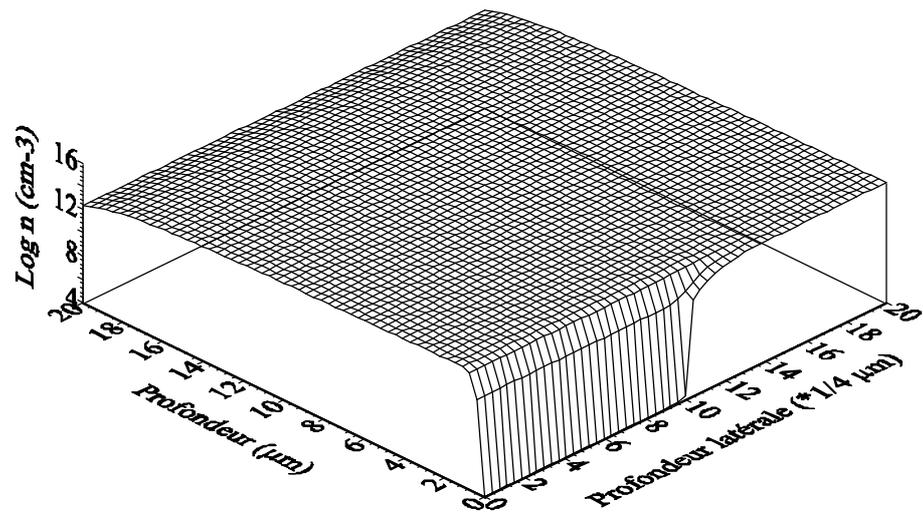


Figure 4.75 : Concentration des électrons sous une tensions directe de 0.5 v

- Concentration des trous :

Au-dessous du contact métallique, la concentration des trous est illustrée sur les figures suivantes :

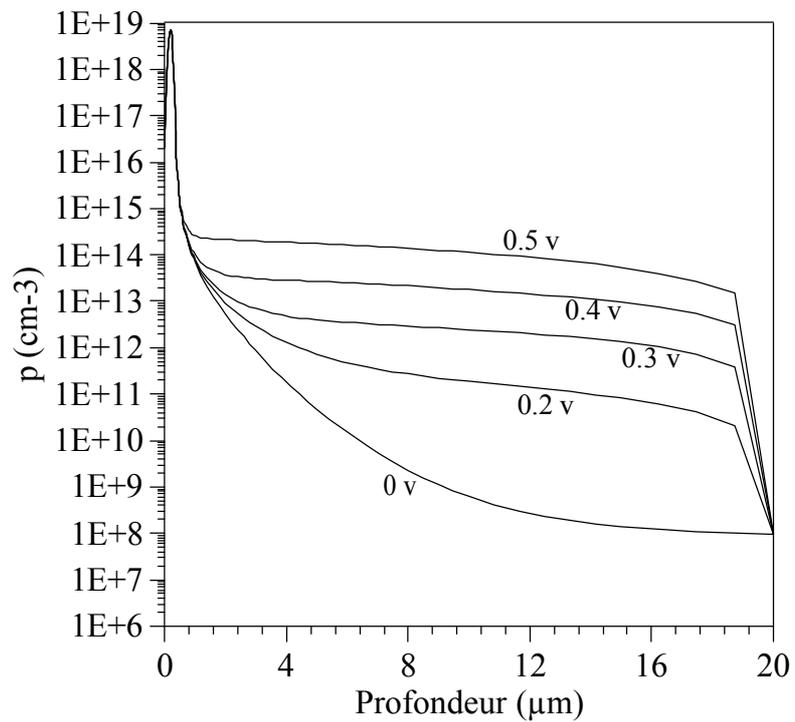


Figure 4.76 : Concentration des trous pour différentes tensions directes

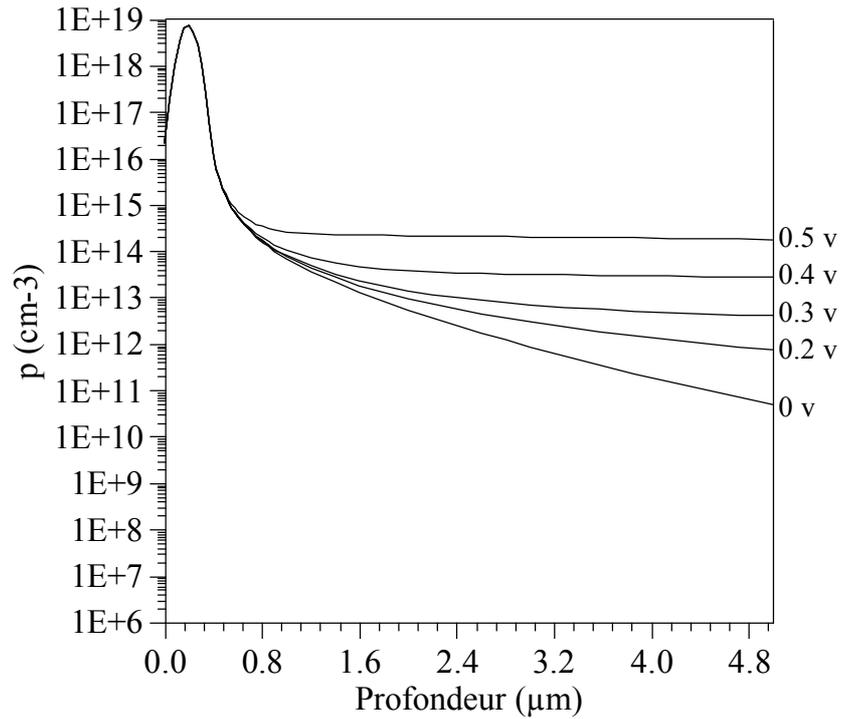


Figure 4.77 : Concentration des trous au voisinage de la jonction pour différentes tensions directes

La concentration des trous, majoritaire dans la zone P+, ne varie pas et suivent le profil du cas de l'équilibre. Elle augmente par contre dans la base pour atteindre des valeurs de l'ordre de 10^{12} - 10^{14} cm^{-3} pour des polarisations de l'ordre de 0.5 V. L'excès de porteurs dans ce cas est élevé. A la frontière arrière, la chute de la concentration des trous du dernier point est due à la condition de Dirichlet dans le métal.

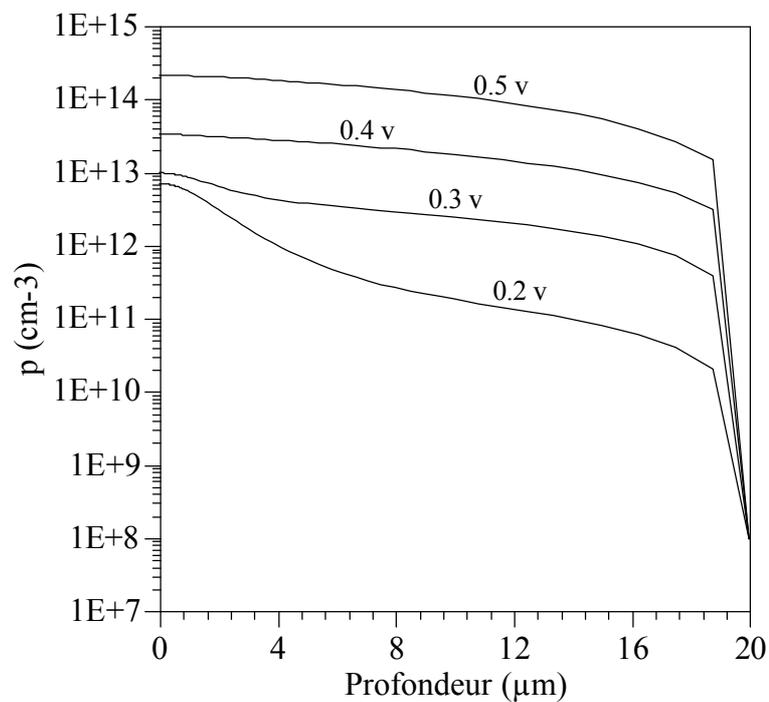


Figure 4.78 : Concentration des trous sous l'oxyde pour différentes tensions directes

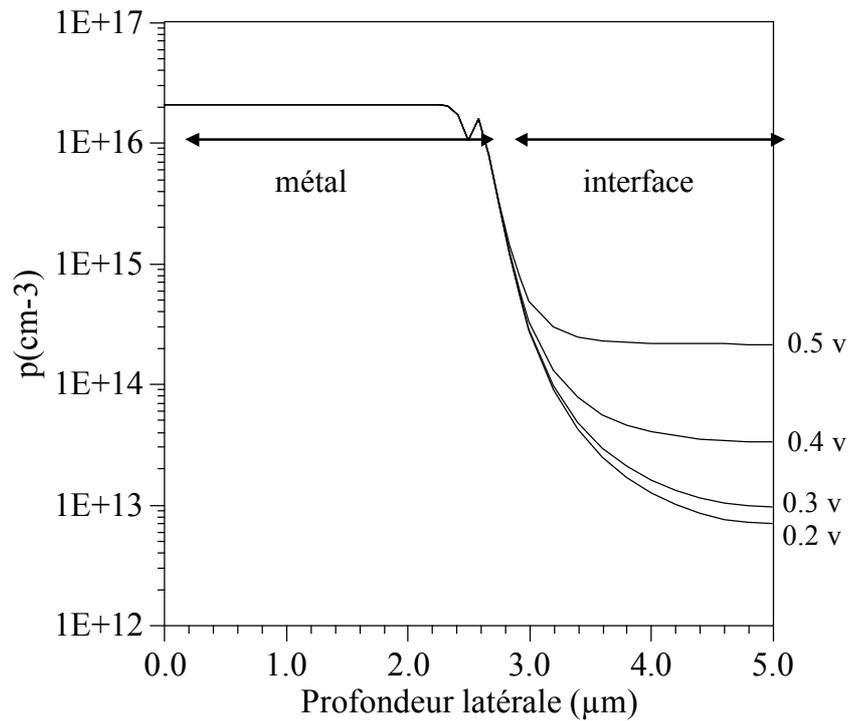


Figure 4.79 : Variation en profondeur latérale de la concentration des trous pour différentes tensions directes

Le long d'une ligne latérale, la concentration des trous reste inchangée aux points du contact métallique et elle augmente d'une façon analogue à la région du substrat aux points de l'interface.

Les courbes en perspective nous renseignent clairement sur l'augmentation globale de la concentration des trous dans la base (figures 4.80-81).

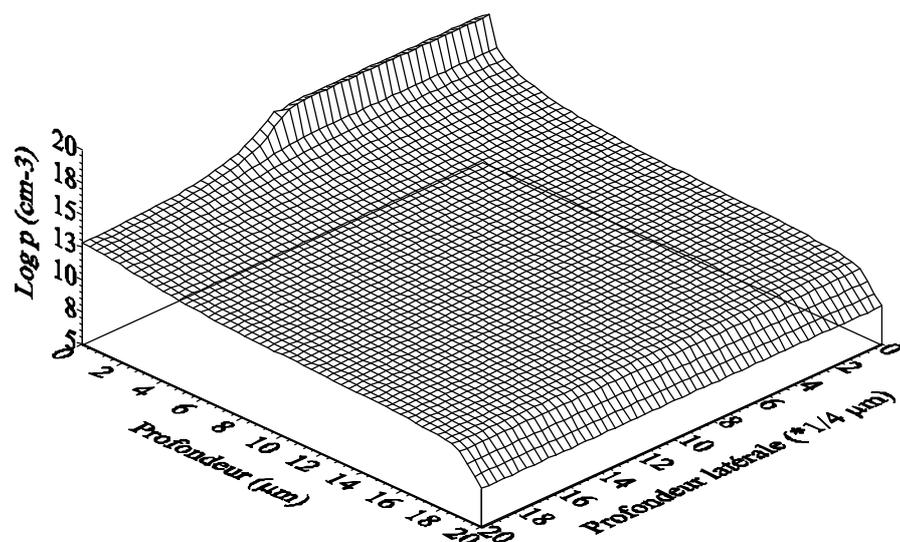


Figure 4.80 : Concentration des trous sous une tension directe de 0.2 v

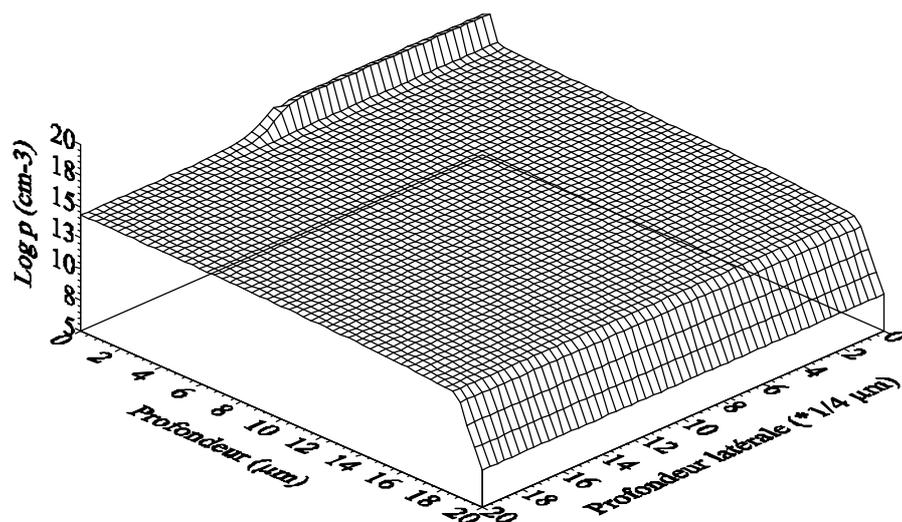


Figure 4.81 : Concentration des trous sous un tensions directe de 0.5 v

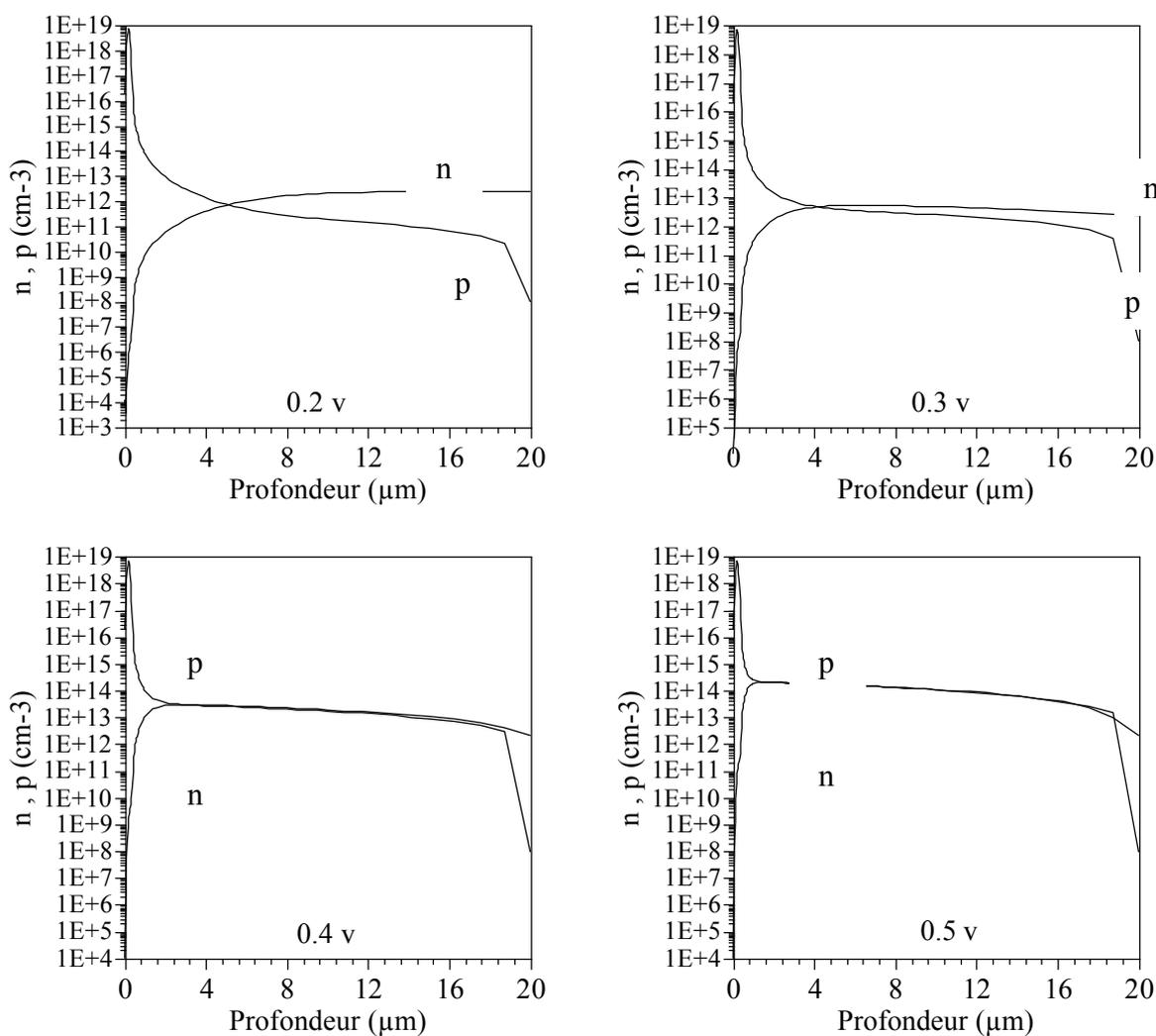


Figure 4.82 : Concentration des électrons et des trous pour différentes tensions directes

Les courbes de la figure 4.82 montrent que pour une tension autour de 0.3 V la base est soumise au régime de fort niveau d'injection et la largeur de la zone déplétée diminue. Ceci explique rigoureusement les difficultés de convergence et de stabilités observées dans les calculs du fait que l'algorithme utilisé suppose un niveau de faible injection. La concentration autour de laquelle se stabilisent les électrons et les trous de la base dépend de la polarisation ; elle augmente d'un facteur 10 pour une variation de la tension appliquée de 0.4 v à 0.5 v

4.3.6 Caractéristique courant tension :

L'un des objectifs principaux de notre étude est le calcul de la caractéristique courant tension du dispositif pour pouvoir tirer des conclusions bénéfiques concernant son fonctionnement et sa réponse vis à vis d'une excitation extérieure. Les étapes précédentes nous ont permis de calculer avec une précision suffisante en chaque point de discrétisation le potentiel électrostatique et la concentration des électrons et des trous. Le schéma utilisé est celui de Scharfetter et Gummel qui suppose constante la densité de courant dans un pavé de discrétisation sur x et y . Le courant total traversant un élément étant égal au produit de la densité de courant normale par l'élément de surface correspondant. Le courant traversant tout le dispositif sera donc l'intégrale sur la surface totale de la densité de courant.

L'application de ces calculs dans le cas du dispositif pris pour la validation de nos résultats pour une structure unidimensionnelle, utilisant un profil de diffusion la caractéristique courant –tension calculée est illustrée à la figure 4.32 :

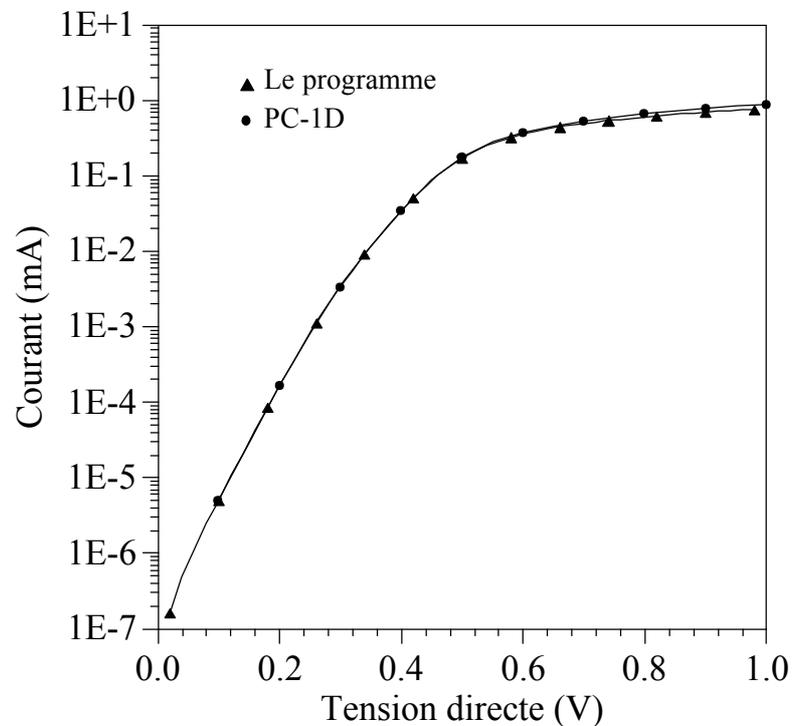


Figure 4.83 : Comparaison de la caractéristique en directe obtenue avec notre programme et celle de PC1D pour une même structure unidimensionnelle

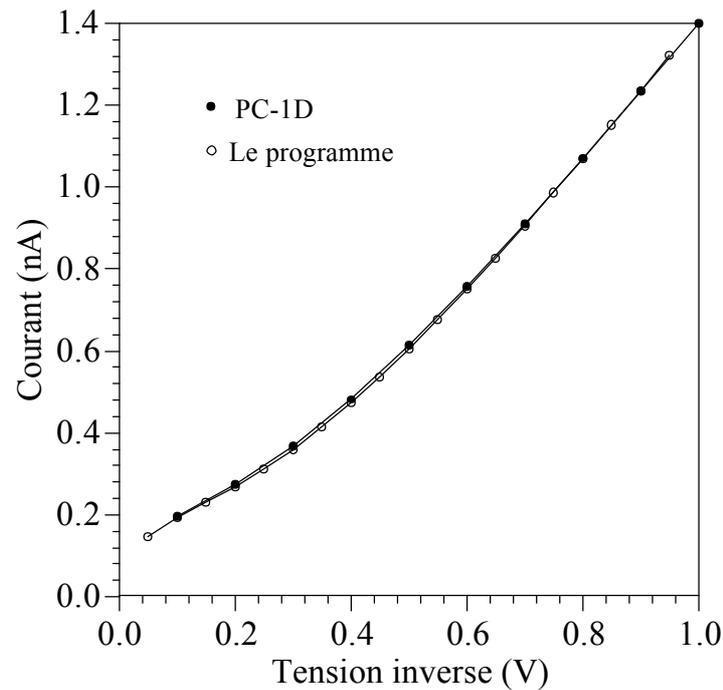


Figure 4.84 : Comparaison de la caractéristique en inverse obtenue avec notre programme et celle de PC-1D pour une même structure unidimensionnelle

Ces deux caractéristiques confirment la validité de la procédure de calcul du courant utilisée dans notre programme de simulation. Comparés aux résultats du programme PC-1D pour des structures unidimensionnelles l'accord est satisfaisant. Néanmoins des différences remarquables sont observées dans le cas des polarisations élevées en directe car ces dernières, imposent un régime de forts niveaux d'injection.

Dans le cas du dispositif à l'étude, le calcul du courant total pour chaque polarisation nous donne la caractéristique en directe et en inverse représentées sur les figures suivantes.

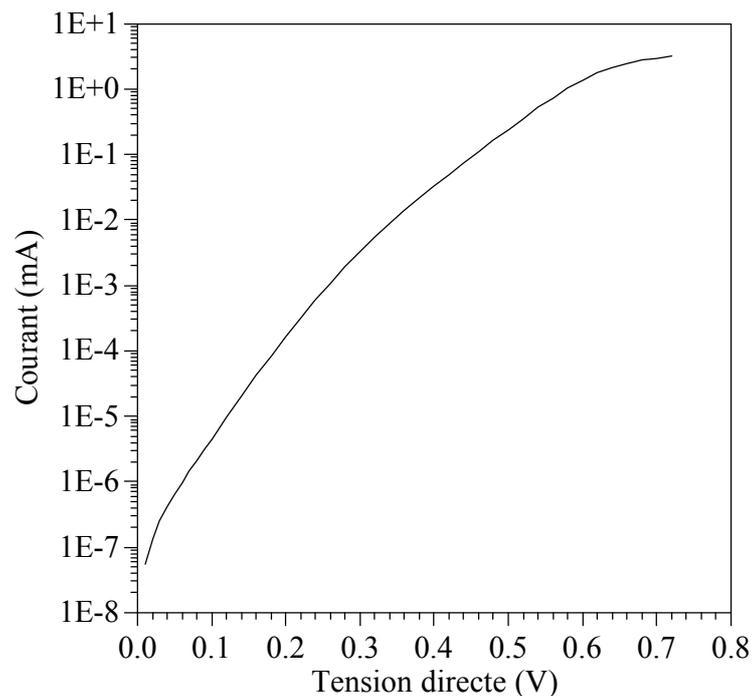


Figure 4.85 : Caractéristique courant - tension en directe

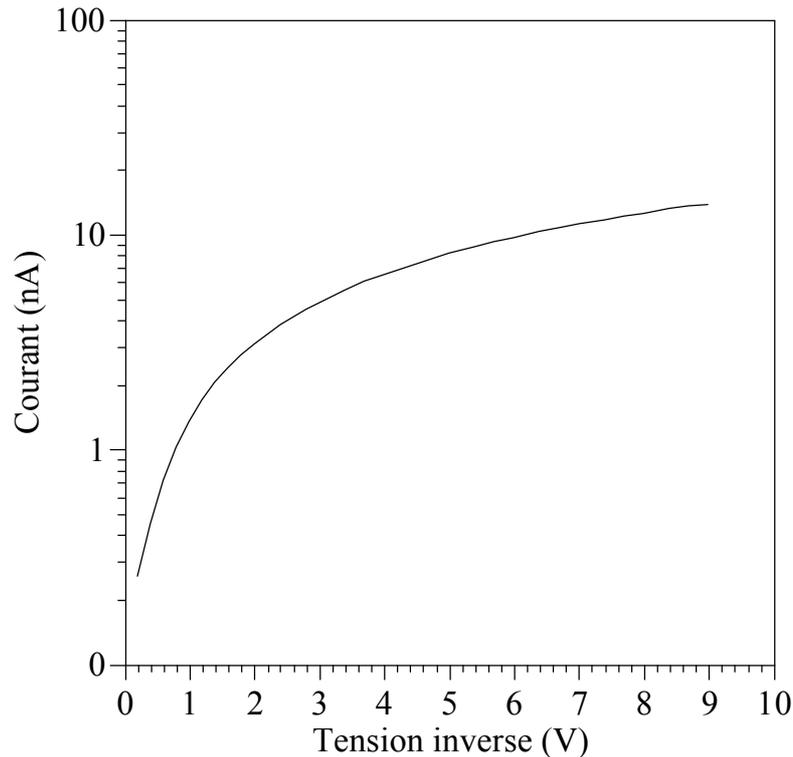


Figure 4.86 : Caractéristique courant - tension en inverse

Le courant inverse est principalement la somme du courant de diffusion et du courant de génération en volume. Le courant de diffusion peut être négligé dans une diode suffisamment déplétée, c'est le cas du dispositif en étude ou nous avons vu qu'une tension de moins de 5 V fait élargir complètement la zone déplétée.

De la caractéristique inverse, on déduit que le courant est proportionnel à la tension appliquée. La constante de proportionnalité définit (pour les faibles variations de la tension appliquée) la conductance dynamique en inverse de la diode. Elle est évaluée à $1.6 \cdot 10^{-9} \Omega^{-1}$, il lui correspond une résistance dynamique de 625 M Ω .

Pour des tensions autour de 10 V en inverse, le courant du dispositif est de l'ordre de 15 nA. Pour un détecteur au silicium de type N de résistivité autour de 2000 Ω -cm et à jonction P⁺N ayant les mêmes caractéristiques du profil décrit dans ce travail, les tests expérimentaux effectués ont donné des courants inverses de l'ordre d'une centaine de nano-Ampères. La différence est expliquée par le fait que certains détails des étapes technologiques ne sont pas pris en compte dans la modélisation. On citera comme exemple l'utilisation des températures élevées (recuit rapide à 1000 °C) qui provoquent des dégradations de la durée de vie des porteurs minoritaires. Ces dégradations doivent être modélisées pour pouvoir améliorer les résultats des calculs. Enfin, concrètement, l'objectif des étapes actuelles est atteint, les calculs permettent suffisamment d'évaluer les grandeurs physiques permettant la connaissance des points de fonctionnements importants du dispositif.

4.4 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons explicité l'algorithme de calcul qui permet de résoudre séquentiellement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous dans un dispositif semiconducteur en régime permanent. Le schéma de Mayergoyz a été mis en œuvre et a montré une convergence globale assurée sans conditions sur les solutions initiales. L'algorithme utilisé pour chaque équation est décomposé en deux boucles, une boucle externe qui rassemble l'influence des points voisins sur chaque noeud et une boucle interne qui résout chaque équation par la méthode de Newton unidimensionnelle.

La première application de ce modèle numérique au cas d'un dispositif au silicium type N de résistivité élevée à l'équilibre et hors équilibre montre des résultats en accord avec ceux issus du programme PC-1D. La mise en œuvre du programme a été une tâche très difficile car elle a nécessité beaucoup de temps, de perfectionnement et d'améliorations au cours des exécutions. Cet algorithme est complété par le calcul de la caractéristique courant tension du dispositif. Cette caractéristique est l'information la plus complète ; elle peut être exploitée avec les résultats expérimentaux pour prédire les paramètres déterminant le fonctionnement du dispositif.

CHAPITRE 5

LES EQUATIONS AU REGIME TRANSITOIRE

5.1 Introduction :

Le traitement des équations du semiconducteur au régime transitoire s'impose lorsque les conditions aux limites sont variables par rapport au temps ou s'il existe un paramètre physique dépendant du temps. Ceci se retrouve dans le cas d'un détecteur de particules alpha ou le flux des particules peut être sous forme d'impulsions de durée δt . Les équations transitoires tiennent compte des dérivées de la concentration des porteurs par rapport au temps [9] [67]. Sous forme condensée on écrit généralement [1]:

$$\begin{aligned} F_{\psi}(\psi, n, p) &= 0 \\ F_n(\psi, n, p) &= \frac{\partial n}{\partial t} \\ F_p(\psi, n, p) &= \frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Au domaine spatial $D[x,y]$ s'ajoute un domaine temporel $[0,T]$ où seront appliquées les équations et elles seront résolues en tenant compte des conditions au limites temporelles :

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t = 0) &= \psi_0(x, y) \\ n(x, y, t = 0) &= n_0(x, y) \\ p(x, y, t = 0) &= p_0(x, y) \end{aligned} \quad (5.2)$$

La difficulté remarquable du traitement de ces équations est le fait que dans l'équation de Poisson ne figure pas un terme explicite d'une dérivée ou d'une dépendance en temps. Différents auteurs [68] [69-73] ajoutent à l'équation de Poisson un terme qui dépend du temps et ils lui affectent un facteur multiplicatif négligeable pour ne pas trop perturber les calculs et les solutions.

5.2 Modèle de discrétisation temporelle :

La plupart des modèles de discrétisation temporelle utilisent le principe de la subdivision de l'intervalle du temps en plusieurs petits intervalles en général inégaux pour tenir compte des variations non uniformes des variables. Dans chaque petit intervalle, les équations sont considérées stationnaires et vérifient instantanément les équations suivantes [40] [2]:

$$\begin{aligned} \nabla(\nabla\psi_{m+1}) - \lambda^2(n_{m+1} - p_{m+1} - \text{Dop}) &= 0 \\ \frac{n_{m+1} - n_m}{d_m} - \nabla(D_n \cdot \nabla n_{m+1} - \mu_n \cdot n_{m+1} \cdot \nabla\psi_{m+1}) + R(\psi_{m+1}, n_{m+1}, p_{m+1}) &= 0 \quad (5.3) \\ \frac{p_{m+1} - p_m}{d_m} - \nabla(D_p \cdot \nabla p_{m+1} + \mu_p \cdot p_{m+1} \cdot \nabla\psi_{m+1}) + R(\psi_{m+1}, n_{m+1}, p_{m+1}) &= 0 \end{aligned}$$

m est l'indice relatif au temps, (ψ_m, n_m, p_m) est la solution à l'instant t_m , $(\psi_{m+1}, n_{m+1}, p_{m+1})$ est la solution à l'instant t_{m+1} , $d_m = t_{m+1} - t_m$ est l'intervalle de temps de discrétisation.

Différents schémas ont été proposés pour la résolution de ces équations, contribuant à chaque fois par des améliorations par rapport à différentes instabilités et oscillations observées [71].

Dans notre travail, nous utiliserons le schémas d'Euler classique (Backward Euler Method) [1] [73] qui a été utilisée par plusieurs auteurs [74][75] et donne des résultats satisfaisants. Cette méthode est stable sans conditions sur le choix des pas de discrétisation d_m [1].

La difficulté principale de ce schéma est le fait qu'il faut résoudre à chaque instant un système d'équations non linéaires très grand. Cela revient dans l'algorithme de Gummel à augmenter considérablement le temps d'exécution.

5.2.1 Discrétisation de l'équation de Poisson :

La même méthodologie décrite au chapitre 4 est utilisée pour la discrétisation de l'équation de Poisson entre deux instants t_m et t_{m+1} [74]

$$\begin{aligned} \alpha \psi_{i+1j} \cdot \psi_{i+1jm+1} + \alpha \psi_{i-1j} \cdot \psi_{i-1jm+1} + \alpha \psi_{ij+1} \cdot \psi_{ij+1m+1} + \alpha \psi_{ij-1} \cdot \psi_{ij-1m+1} \\ = \alpha \psi_{ij} \cdot \psi_{ijm+1} + \lambda^2 n_i \left[u_{ijm+1} \cdot \exp(\psi_{ijm+1}) - v_{ijm+1} \cdot \exp(-\psi_{ijm+1}) \right] - \lambda^2 \text{Dop}_{ij} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Nous remarquons que ce sont les mêmes éléments discrets que dans le cas stationnaire [58] [60] qui forment l'équation de Poisson à chaque instant t_m . L'algorithme décrit précédemment sera donc utilisé intégralement.

$$\begin{aligned} G_{ijm+1}(\psi_{ijm+1}) &= \lambda^2 \cdot n_i \left[u_{ijm+1} \cdot \exp(\psi_{ijm+1}) - v_{ijm+1} \cdot \exp(-\psi_{ijm+1}) \right] \\ f_{ij} &= -\lambda^2 \cdot \text{Dop}_{ij} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Les mêmes conditions aux limites spatiales restent valables pour l'interface et les contacts sauf si on impose une condition qui dépend du temps.

5.2.2 Discrétisation des équations de continuité :

D'une manière analogue à la méthode de discrétisation dans le cas stationnaire on déduit les expressions discrètes de l'équation des électrons et des trous dans l'intervalle t_{m+1}, t_m [74]

$$\alpha^{n_{i+1jm+1}} \cdot n_{i+1jm+1} + \alpha^{n_{i-1jm+1}} \cdot n_{i-1jm+1} + \alpha^{n_{ij+1m+1}} \cdot n_{ij+1m+1} +$$

$$\alpha^{n_{ij-1m+1}} \cdot n_{ij-1} = \alpha^{n_{ij}} \cdot n_{ijm+1} + G_{ijm+1} \left(n_{ijm+1} \right) + f_{ijm+1} + \frac{n_{ijm+1} - n_{ijm}}{d_m}$$
(5.6)

Pour les électrons :

$$G_{ijm+1} = \left(n_i^2 \cdot v_{ijm+1} \cdot r_{ijm+1} \right) \cdot u_{ijm+1}$$

$$f_{ijm+1} = -n_i^2 \cdot r_{ijm+1}$$

$$\alpha^u_{i+1jm+1} = D_n \Big|_{i+1/2jm+1} \cdot \alpha^{\Psi_{i+1jm+1}} \cdot B \left(\Psi_{ijm+1} - \Psi_{i+1jm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^u_{i-1jm+1} = D_n \Big|_{i-1/2jm+1} \cdot \alpha^{\Psi_{i-1jm+1}} \cdot B \left(\Psi_{ijm+1} - \Psi_{i-1jm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^u_{ij+1m+1} = D_n \Big|_{ij+1/2m+1} \cdot \alpha^{\Psi_{ij+1m+1}} \cdot B \left(\Psi_{ijm+1} - \Psi_{ij+1m+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^u_{ij-1m+1} = D_n \Big|_{ij-1/2m+1} \cdot \alpha^{\Psi_{ij-1m+1}} \cdot B \left(\Psi_{ijm+1} - \Psi_{ij-1m+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^u_{ijm+1} = \alpha^u_{i+1jm+1} + \alpha^u_{i-1jm+1} + \alpha^u_{ij+1m+1} + \alpha^u_{ij-1m+1}$$
(5.7)

Pour les trous :

$$G_{ijm+1} = \left(n_i^2 \cdot u_{ijm+1} \cdot r_{ijm+1} \right) \cdot v_{ijm+1}$$

$$f_{ijm+1} = -n_i^2 \cdot r_{ijm+1}$$

$$\alpha^v_{i+1jm+1} = D_p \Big|_{i+1/2jm+1} \cdot \alpha^{\Psi_{i+1jm+1}} \cdot B \left(\Psi_{i+1jm+1} - \Psi_{ijm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(-\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^v_{i-1jm+1} = D_p \Big|_{i-1/2jm+1} \cdot \alpha^{\Psi_{i-1jm+1}} \cdot B \left(\Psi_{i-1jm+1} - \Psi_{ijm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(-\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^v_{ij+1m+1} = D_p \Big|_{ij+1/2m+1} \cdot \alpha^{\Psi_{ij+1m+1}} \cdot B \left(\Psi_{ij+1m+1} - \Psi_{ijm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(-\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^v_{ij-1m+1} = D_p \Big|_{ij-1/2m+1} \cdot \alpha^{\Psi_{ij-1m+1}} \cdot B \left(\Psi_{ij-1m+1} - \Psi_{ijm+1} \right) \cdot n_i \cdot \exp \left(-\Psi_{ijm+1} \right)$$

$$\alpha^v_{ijm+1} = \alpha^v_{i+1jm+1} + \alpha^v_{i-1jm+1} + \alpha^v_{ij+1m+1} + \alpha^v_{ij-1m+1}$$
(5.8)

Les expressions des mobilités et du terme de génération recombinaison peuvent être discrétisées d'une manière simple en utilisant la solution à l'instant précédent (Ψ_m, n_m, p_m), cela nous donne un système linéaire en n et p.

5.3 Algorithme de résolution des équations au régime transitoire :

Dans chaque intervalle $d_m = t_{m+1} - t_m$ l'algorithme de résolution est construit sur le même schéma que dans le cas permanent sauf qu'il faut tenir compte des termes discrets dépendants du temps. Cette procédure impose la résolution du système des trois équations dans chaque intervalle de temps par la boucle externe de Gummel ce qui augmente en

général le nombre d'itérations et le temps d'exécution pour atteindre la solution à l'instant final.

Les différentes parties de l'algorithme sont décrites dans l'organigramme de la figure 5.1.

Le système d'équations an régime transitoire offre un avantage tel que la résolution du système linéaire devient simplifiée du fait que la dominance diagonale devient renforcée par les termes $1/d_m$ et qu'à chaque instant la solution initiale est proche de la solution à l'instant suivant.

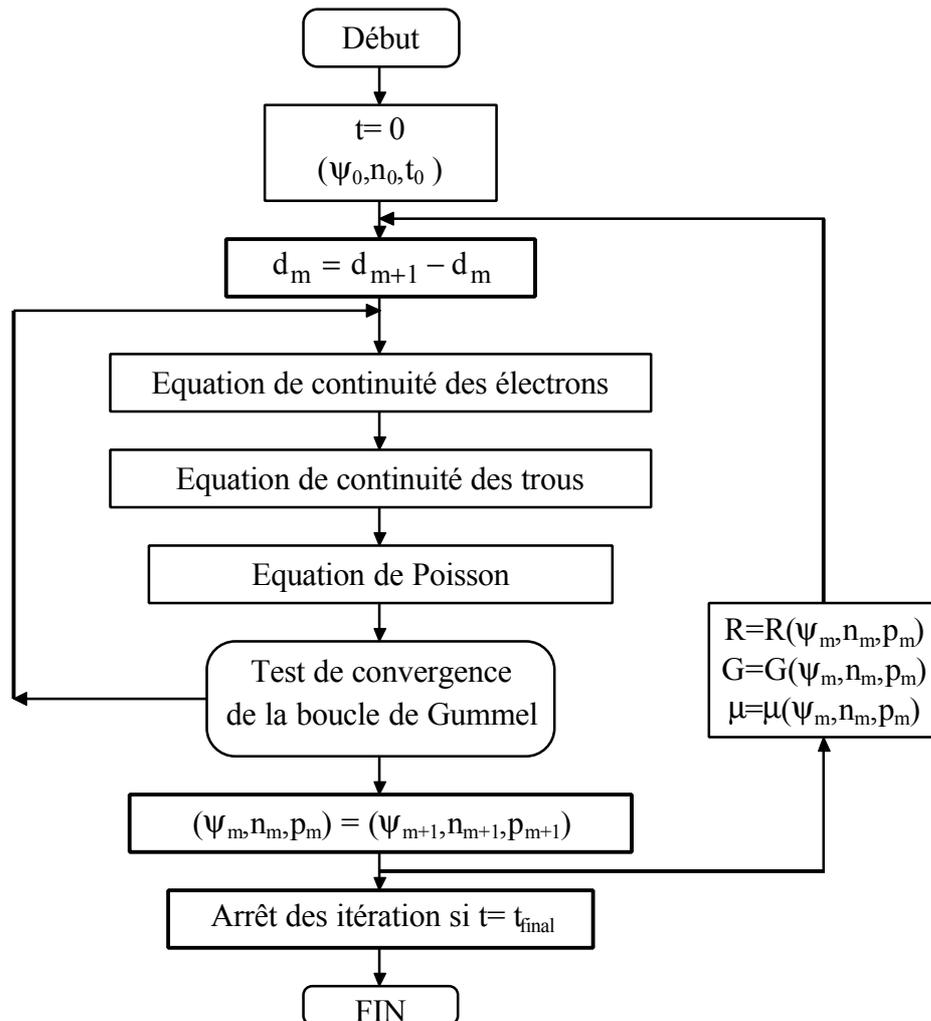


Figure 5.1 : Organigramme de la résolution des équations en régime transitoire

5.4 Evolution temporelle des solutions :

5.4.1 Le potentiel électrostatique :

Partant d'une solution initiale déduite de la condition de neutralité électrique, le potentiel électrostatique évolue vers la solution à l'équilibre selon les solutions intermédiaires représentées dans les graphes suivants.

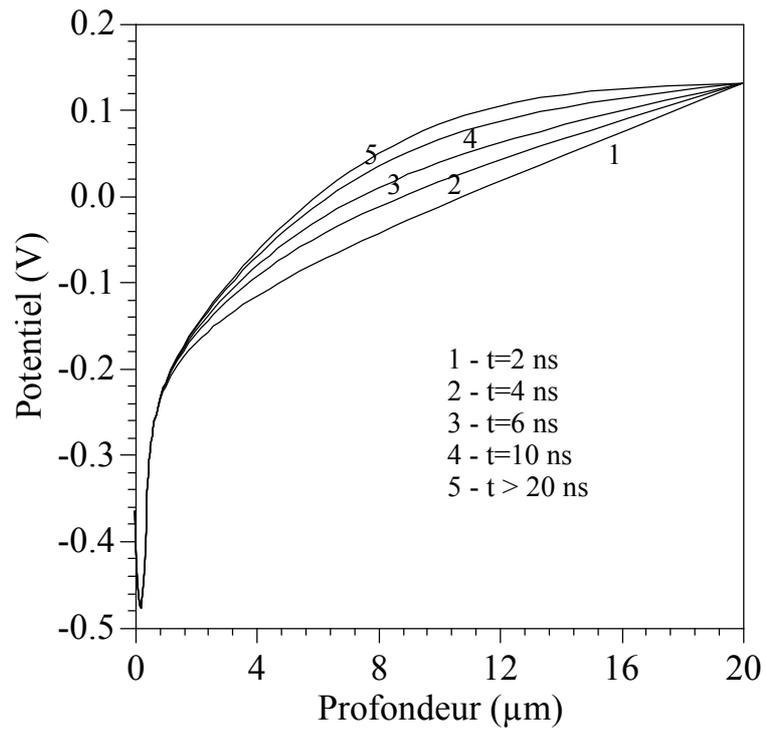


Figure 5.2 : Le potentiel électrostatique à différents instants

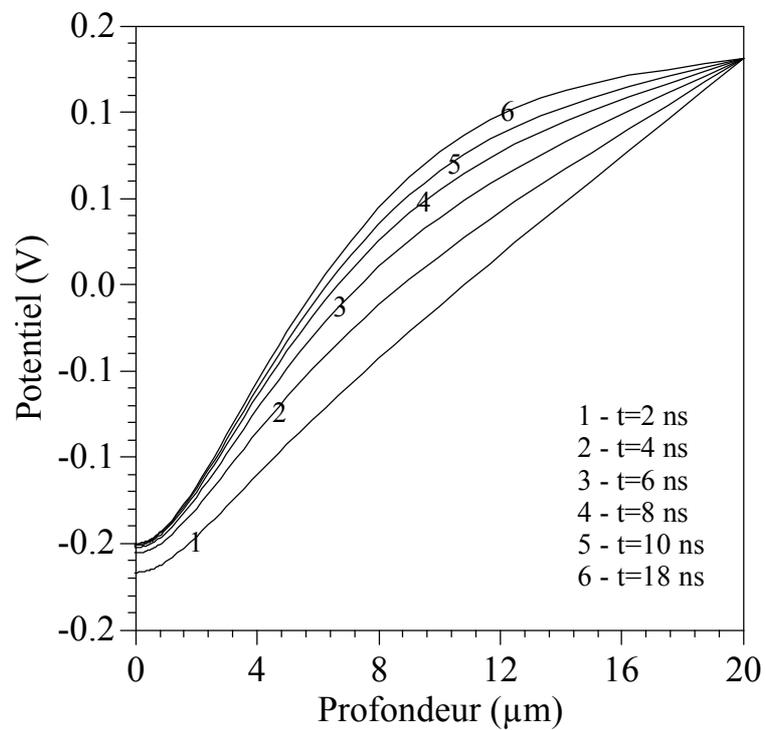


Figure 5.3 : Le potentiel électrostatique sous l'oxyde à différents instants

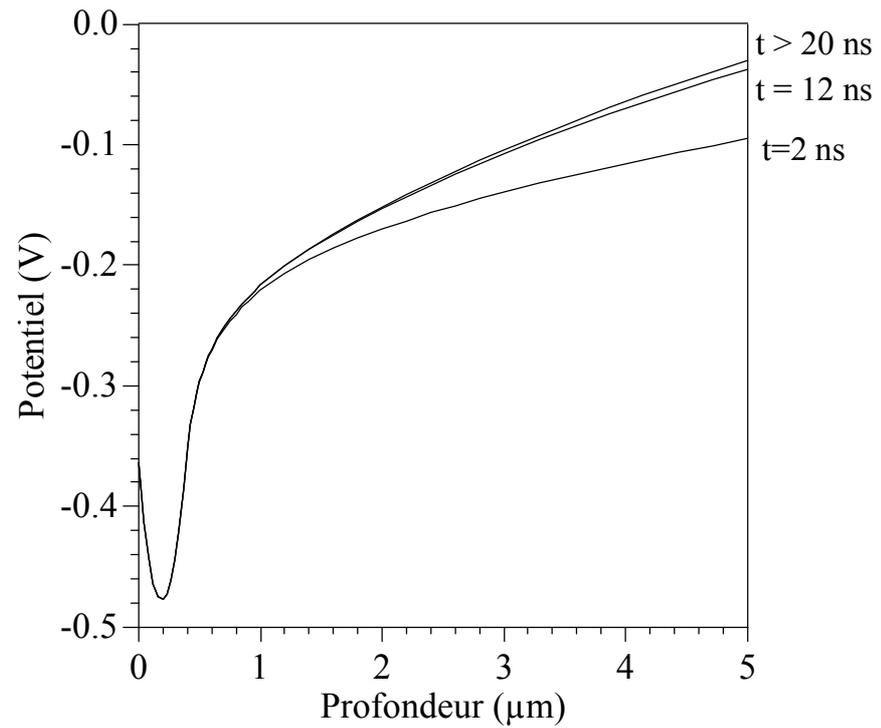


Figure 5.4 : Le potentiel électrostatique au voisinage de la jonction à différents instants

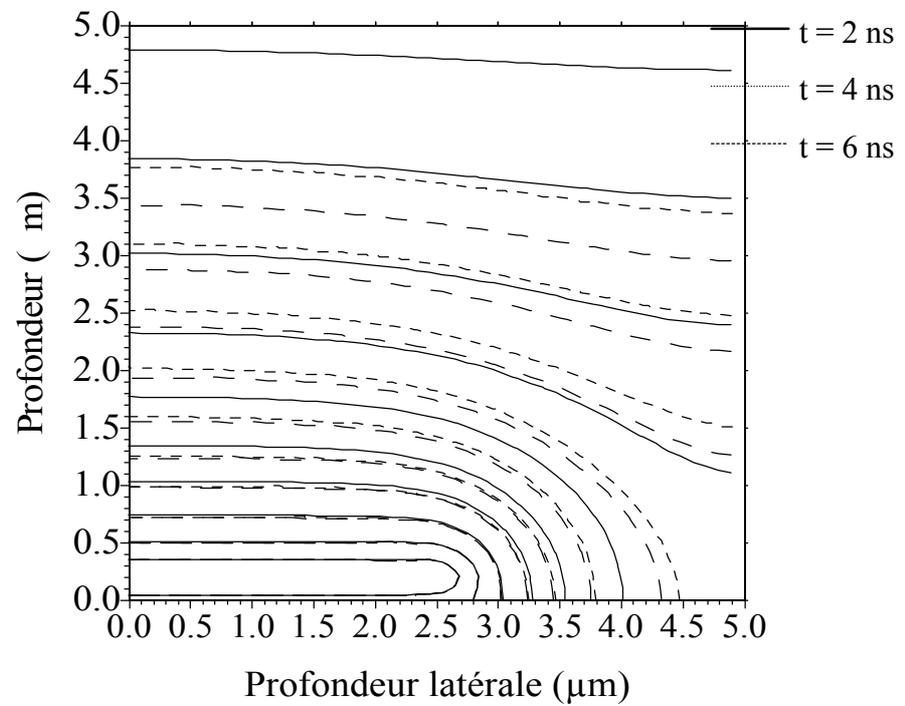


Figure 5.5 : Contour du potentiel électrostatique à différents instants

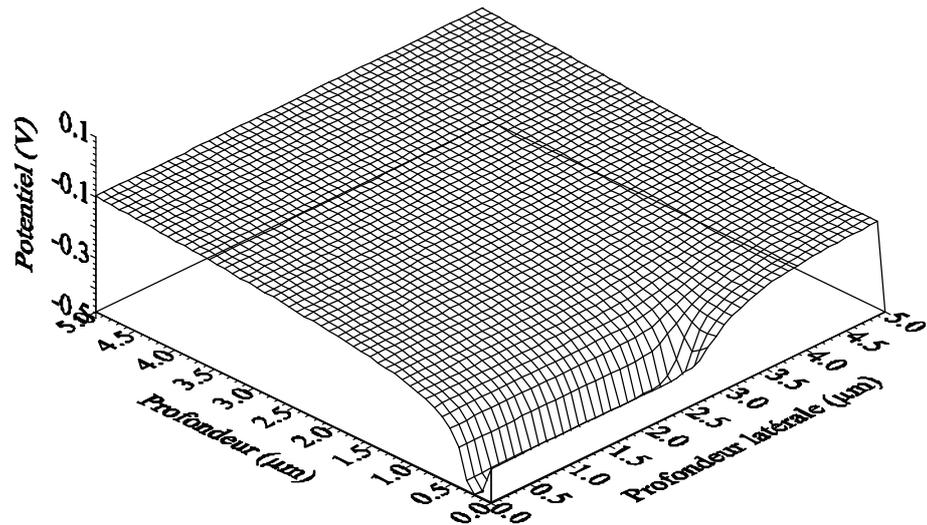


Figure 5.6 : Le potentiel électrostatique à l'instant $t=2$ ns

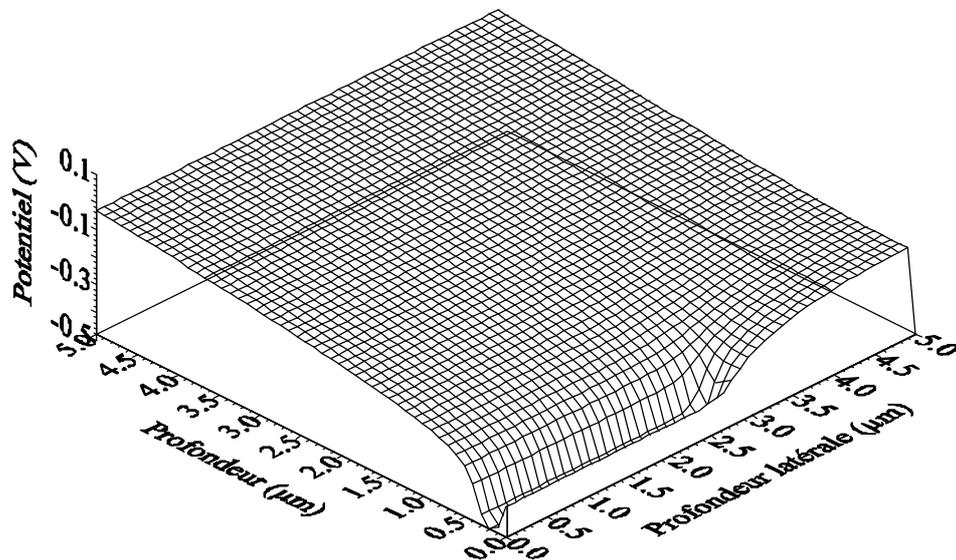


Figure 5.7 : Le potentiel électrostatique à l'instant $t=10$ ns

Les figures 5.1, 5.2 et 5.3 indiquent que le potentiel augmente uniquement dans la base, au voisinage de la jonction et autour du maximum du profil du dopage, il reste constant, ces zones sont soumises à l'équilibre thermodynamique. Sous l'oxyde, cette variation s'observe le long de tout le dispositif ; dans les endroits juste au-dessous de la ligne de l'oxyde, elle est beaucoup plus lente par rapport à la base. Les figures tridimensionnelles 5.5 et 5.6 ne montrent pas clairement les différences vu que les perturbations sont petites et qu'elles se passent uniquement au milieu de la base.

Les variations du potentiel sont bien explicites dans la courbe du champ électrique de la figure 5.8. Dans l'intervalle de 2 ns, nous avons un champ uniforme le long de la base. Lorsque le temps augmente la courbure du potentiel augmente et le champ électrique perd son uniformité.

Etant donné que l'équation de Poisson ne dépend pas explicitement du temps, les variations du potentiel sont dues implicitement aux variations des concentrations des électrons et des trous.

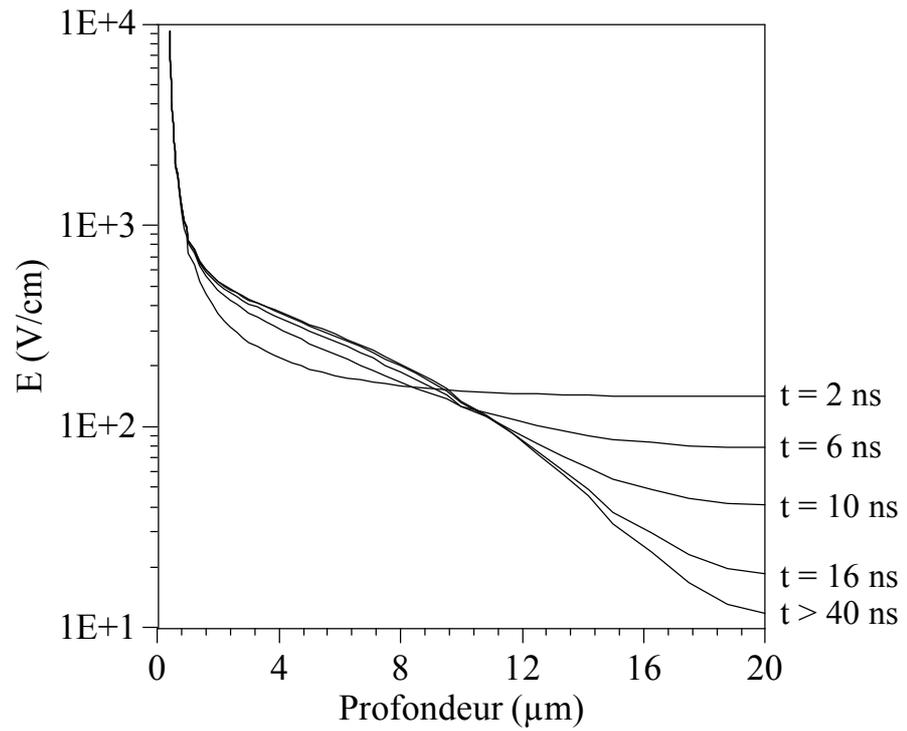


Figure 5.8 : Le champ électrique à différents instants

5.4.2 La concentration des électrons :

La concentration des électrons à différents instants est représentée sur les figures suivantes.

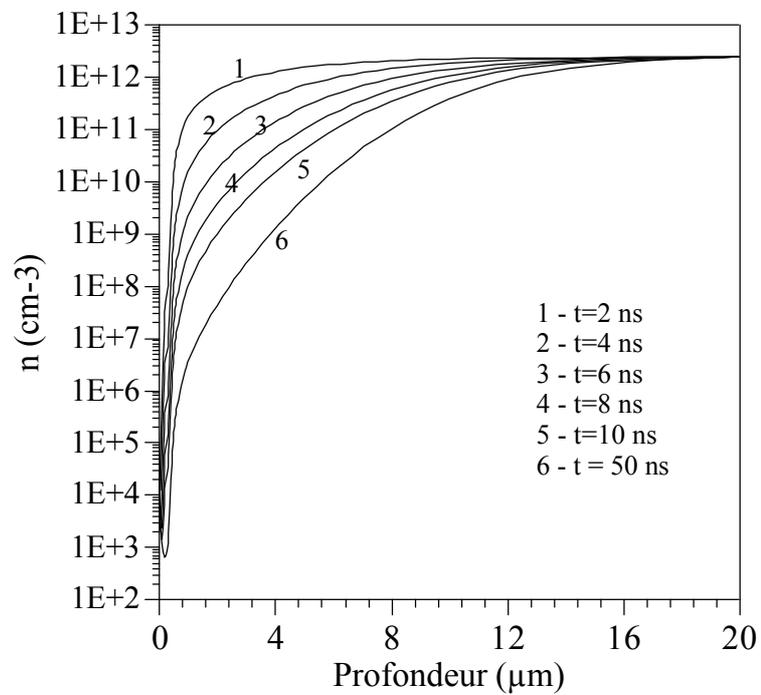


Figure 5.9 : Concentration des électrons à différents instants

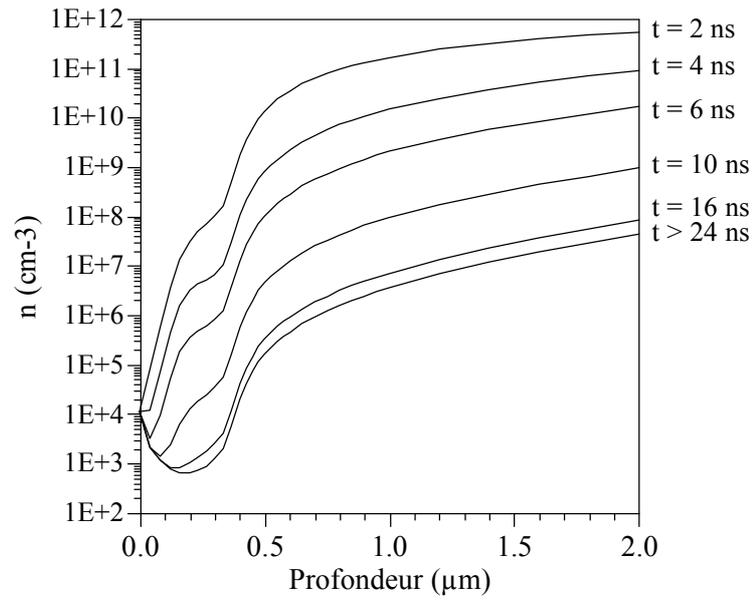


Figure 5.10 : Concentration des électrons au voisinage de la jonction à différents instants

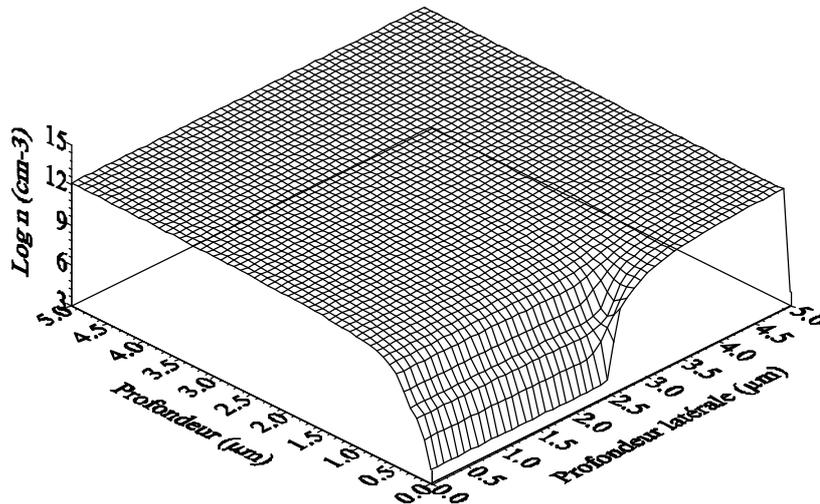


Figure 5.11 : Concentration des électrons à l'instant $t = 2$ ns

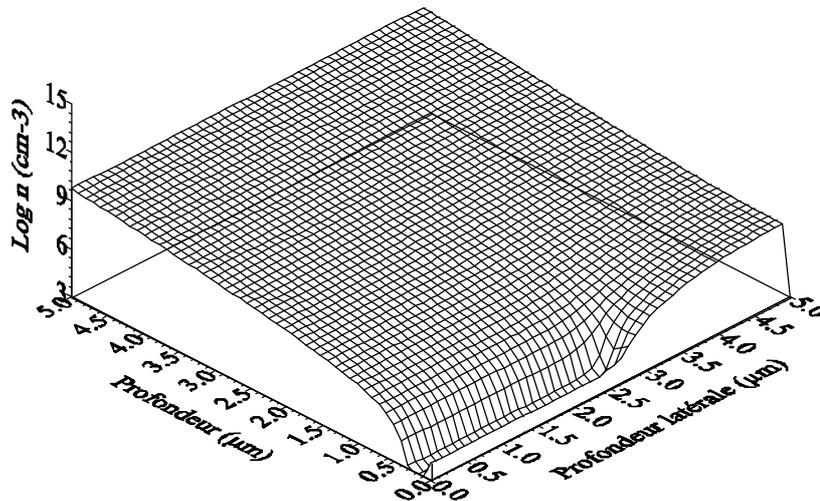


Figure 5.12 : Concentration des électrons à l'instant $t = 20$ ns

5.4.3 La concentration des trous :

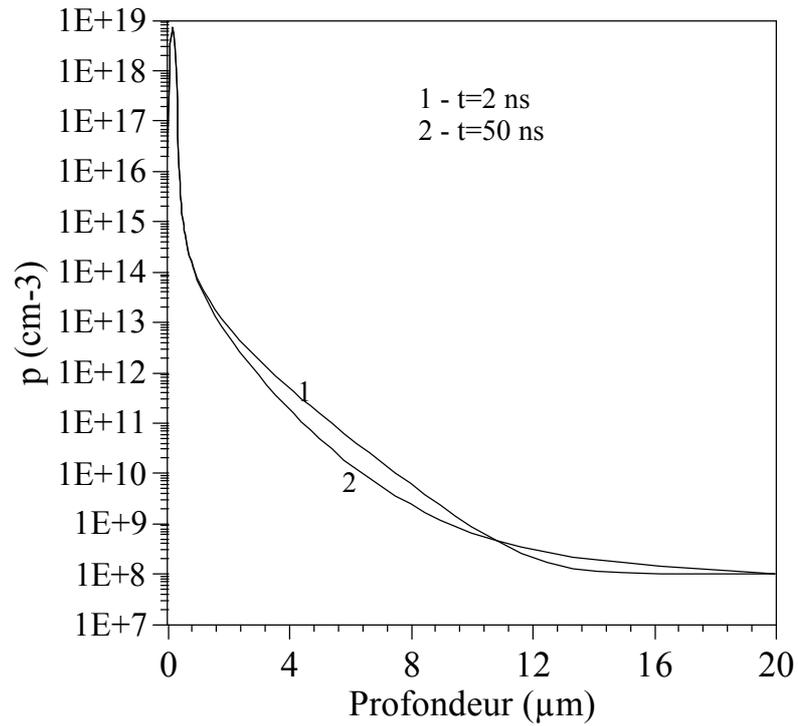


Figure 5.13 : Concentration des trous aux instants $t=2\text{ ns}$ et 50 ns

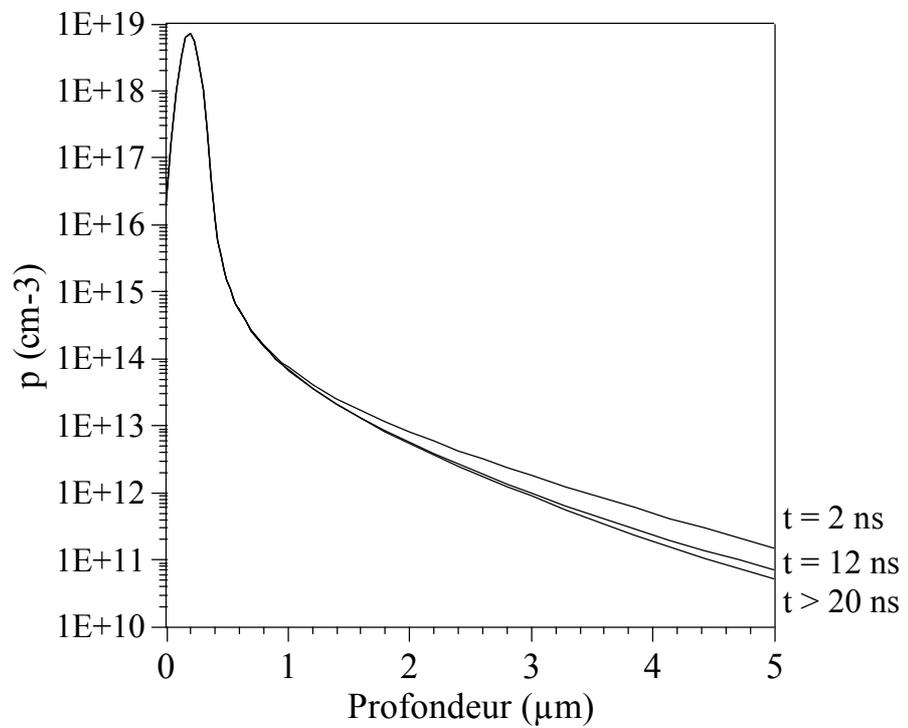


Figure 5.14 : Concentration des trous au voisinage de la jonction à différents instants

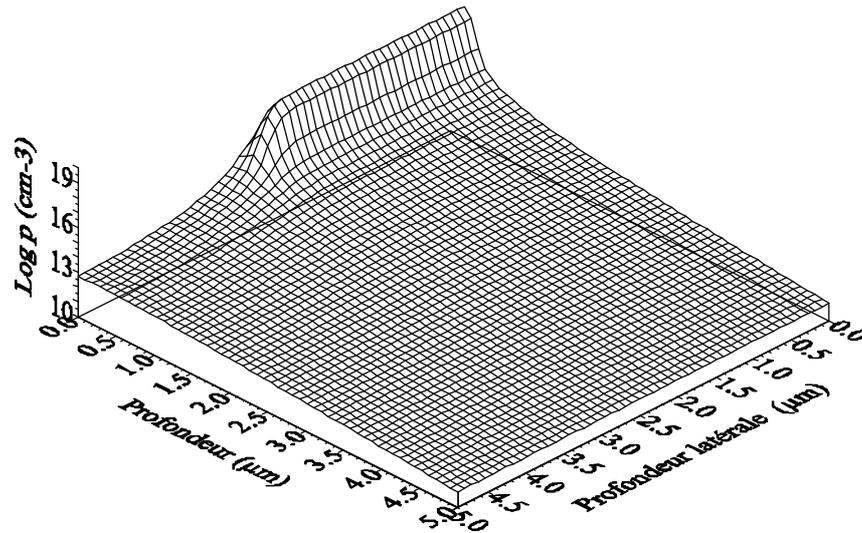


Figure 5.15 : Concentration des trous à l'instant $t = 2$ ns

Nous remarquons que la densité des électrons (mineurs de la région P+) varie plus que celle des trous, surtout au voisinage du contact métallique avant (figure 5.10). Cela est dû au fait que le terme de discrétisation temporelle influe beaucoup plus sur l'équation de continuité des électrons que sur l'équation des trous et que pour la structure P⁺N la variation de la concentration des trous varie quasi instantanément avec le potentiel dans la base. Par contre, au voisinage du contact P⁺, la concentration des trous reste constante au cours du temps de même que le potentiel.

Au-delà de 50 ns en moyenne, les solutions des équations tendent vers une solution qui coïncide exactement avec celle obtenue avec le modèle stationnaire, ceci justifie par conséquent la validité de l'algorithme.

Le calcul du courant s'est effectué à chaque instant nous donnant ainsi la réponse du dispositif caractérisée par une constante du temps τ calculée d'après la figure 5.16. Ce temps caractéristique décrit l'évolution du courant à partir de l'état hors équilibre forcé par l'Initialisation qu'on vient d'utiliser à l'instant initial.

Le courant prend des valeurs élevées aux cours des premiers intervalles de temps puis il chute en exponentielle. L'interpolation des valeurs du courant en fonction du temps nous donne la forme suivante :

$$I = I_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad \tau \text{ ayant une valeur approximative de } 4 \text{ ns.}$$

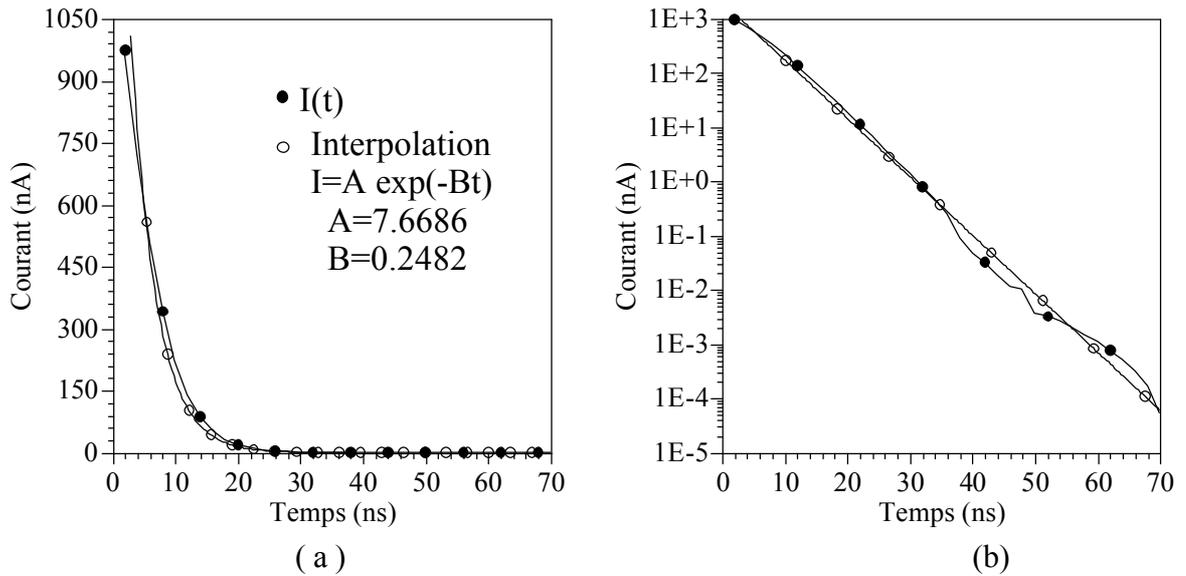


Figure 5.16 : Courbe de réponse du dispositif (a) Echelle linéaire
 (b) Echelle logarithmique
 $\tau = 1/B \approx 4 \text{ ns}$

Dans le cas où le dispositif est soumis à une polarisation inverse de 0.4 V les variations du potentiel et de la concentrations des électrons suivent respectivement les allures des figures 5.17 et 5.18.

La solution évolue à partir de celle donnée pour une polarisation de 0.2 V à $t = 0 \text{ s}$.

Si la condition aux limites sur le potentiel n'est pas variable en fonction du temps, au cours du premier intervalle (0.2 ns), le potentiel s'approche suffisamment de la solution finale. Les électrons par contre prennent beaucoup plus de temps pour atteindre la solution (quelques dizaines de nano-secondes) et les trous suivent instantanément le potentiel et atteignent la solution qui n'est pas très loin si la polarisation ne diffère pas beaucoup de l'ancienne valeur.

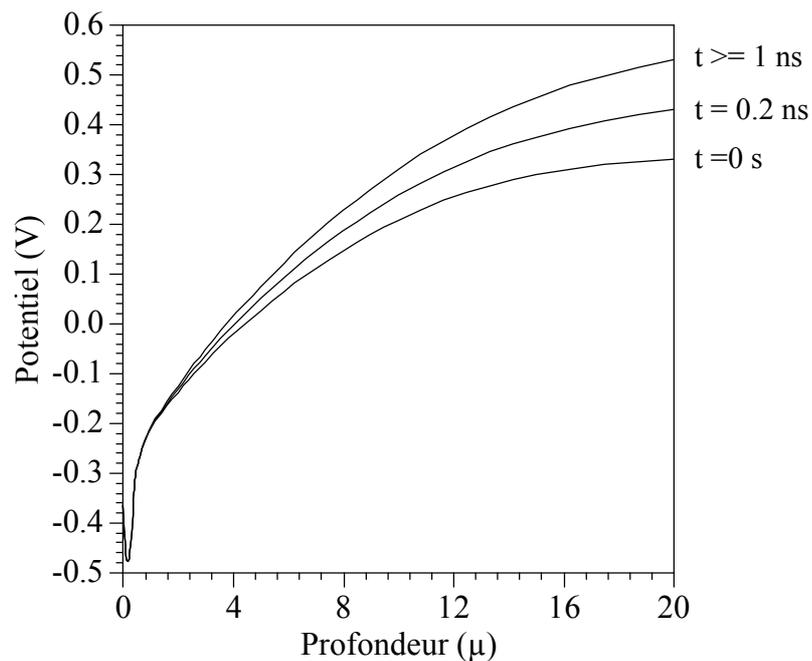


Figure 5.17 : Evolution du potentiel électrostatique ($t=0 \text{ V}=0.2 \text{ V}$; $t>0 \text{ V}=0.4 \text{ V}$)

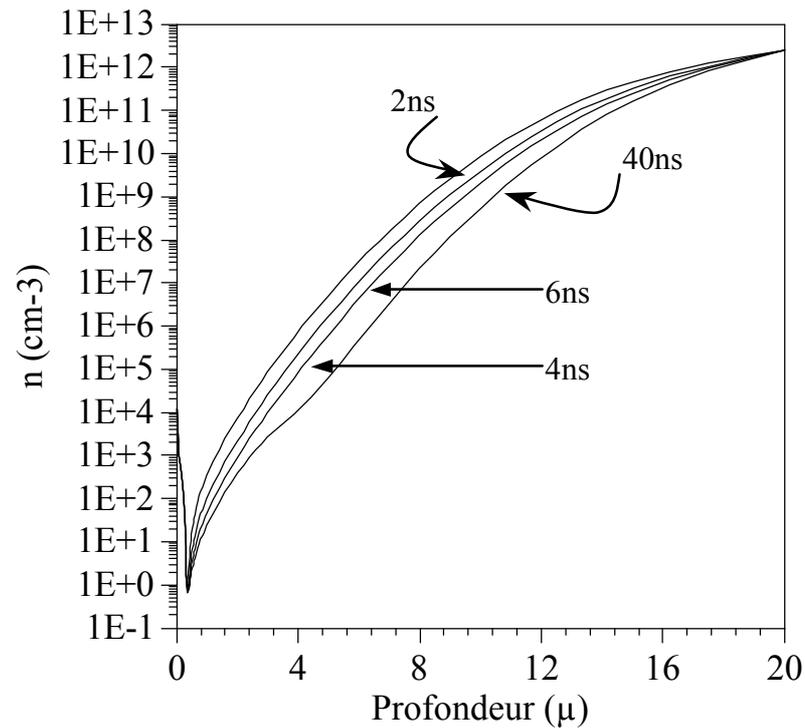


Figure 5.18 : Evolution de la concentration des électrons ($t=0$ $V=0.2$ V ; $t>0$ $V=0.4$ V)

La réponse du dispositif est calculée en faisant varier linéairement la tension appliquée de 0.2 v à 0.4 v pendant 1 ns pour ne pas alourdir les calculs. Le temps caractéristique dans ce cas est autour de 2 ns. Cette diminution a deux origines, la première est relative à la capacité équivalente de la diode qui diminue en polarisation inverse et la deuxième est liée à la résistances dynamique de la jonction. Les deux paramètres dépendent donc de la tension de polarisation ; c'est le résultat classique d'une diode PN hors équilibre.

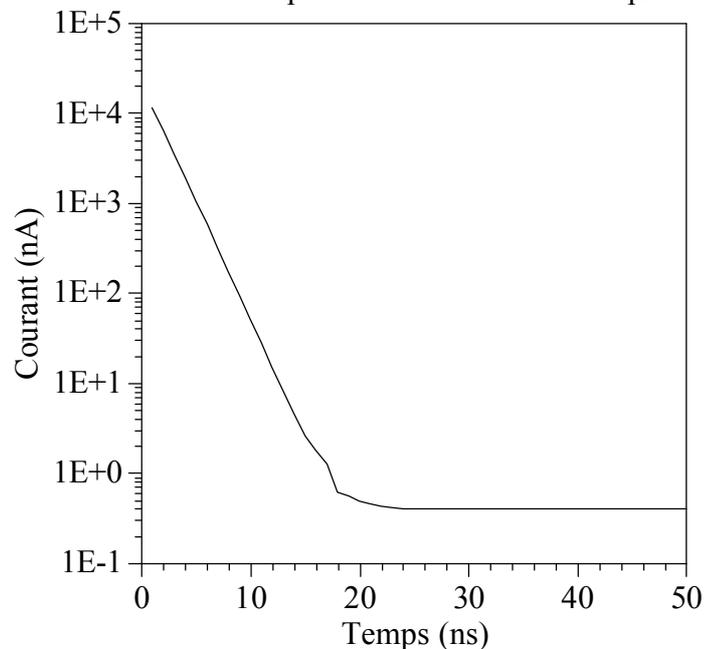


Figure 5.19 : Courbe de réponse du dispositif en variant la polarisation inverse de 0.2 V à 0.4 V

L'une des difficultés à signaler dans ce traitement transitoire est que la discrétisation temporelle se base sur la génération d'un maillage en temps qui doit être soigneusement étudié pour assurer la convergence de l'algorithme. En général l'intervalle du temps de simulation doit être quelque peu élevé (> 50 ns) pour que le pas de discrétisation ne soit pas très petit et n'altère surtout pas la stabilité des calculs. Théoriquement, il existe des lois de corrélations entre les pas en temps et le réseau spatial. Ce sont les variations spatiales des grandeurs physiques dans certains endroits sensibles qui imposent des variations du pas en abscisse. Le pas de discrétisation temporel est lié aux variations rapides du phénomène avec le temps ; il doit être petit à chaque instant où le gradient des porteurs majoritaires est important vu que ces derniers jouent un rôle essentiel dans la détermination de l'erreur de discrétisation.

5.5 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons développé l'applicabilité de l'algorithme de résolution séquentielle des équations de transport d'un semiconducteur en régime transitoire. Le schéma d'Euler est utilisé pour la discrétisation temporelle en intégrant des modifications pour l'adapter à l'algorithme de Gummel et à celui de Mayergoyz tout en améliorant les itérations par la méthode de Newton.

A partir d'une solution imposée à l'instant initial, cet algorithme nous a donné les profils du potentiel électrostatique et les distributions des porteurs de charges à plusieurs instants intermédiaires dans l'intervalle de temps de simulation. Ces solutions se stabilisent à partir de 20 ns. L'intervalle de temps de simulation doit être relativement large (> 50 ns) pour ne pas trop alourdir les calculs par une discrétisation temporelle très fine. Compte tenu des étapes étudiées dans les parties précédentes, ce chapitre complète l'étude numérique des équations pour tenir compte des effets transitoires dus préalablement à la variation en temps de l'un des paramètres physiques du dispositif. Dans le cas de notre étude, il s'agit du terme de génération des paires électrons-trous qui dépend du temps. Cette étude fera l'objet du prochain chapitre.

CHAPITRE 6

MODELISATION ET SIMULATION D'UN DETECTEUR DE PARTICULES ALPHA AU SILICIUM

6.1 Introduction :

Les détecteurs de rayonnements nucléaires à base des semiconducteurs figurent parmi les outils importants de la physique des particules. Depuis leur apparition ils prennent part de plus en plus activement à la spectrométrie et à la dosimétrie de rayonnements ionisants ainsi que dans l'étude de la reconstruction des trajectoires des particules. Toutes leurs utilisations sont permises grâce à leurs caractéristiques favorables comparées à celles obtenues avec les chambres à gaz et les scintillateurs. Ces améliorations sont de plus en plus maîtrisées dans les dispositifs au silicium, matériau dont la technologie est très avancée. En outre, l'introduction, il y a une dizaine d'années, des techniques modernes de la microélectronique dans le domaine des détecteurs au silicium, a permis une standardisation de la fabrication de la plupart des dispositifs.

La plupart des structures à semiconducteurs développées pour les détecteurs solides est l'introduction d'une ou plusieurs jonctions qui permettent de générer le domaine d'interaction qui nous donne un signal le plus fiable. L'historique du développement des dispositifs détecteurs se résume en ce qui suit :

Les premiers systèmes de détection permettant la reconstruction des traces de particules sont les chambres à bulles. Elles utilisent les propriétés de certains liquides qui, lorsqu'ils sont traversés par une particule, donnent naissance à des bulles qui sont réparties le long du trajet de celle-ci et qui peuvent être analysées grâce à la photographie de l'événement. La décennie suivante est marquée par l'apparition de la localisation à partir de l'enregistrement et du traitement de signaux électriques issus des charges créées par ionisation des atomes du gaz (compteurs proportionnels) ou du cristal (détecteurs à semiconducteurs). Beaucoup de travaux ont été mis au point pour améliorer la mesure du temps de collecte et la trajectoire des charges en allant vers les connecteurs externes.

Le principe du détecteur à semiconducteur repose sur la création, dans une région du matériau, d'une zone désertée de tous porteurs libres, à l'intérieur de laquelle règne un champ électrique. Au cours d'une interaction particule-matière, un nombre de paires électrons-trous, proportionnel à la perte d'énergie de la particule, est généré dans cette zone désertée. Ces porteurs, entraînés par le champ électrique induisent alors une impulsion électrique.

La structure élémentaire qui permet d'obtenir une zone désertée est la diode à jonction. Nous appliquerons les modèles physiques et numériques étudiés aux chapitres précédents au cas d'un détecteur à base de silicium monocristallin type N à jonction implantée exposé

à un faisceau monoénergétique de particules alpha (5 à 5.5 MeV). Ce faisceau est supposé normal à la surface de la fenêtre d'interaction et il est uniformément distribué. (figure 6.1) . Lors de la conception d'un détecteur à jonction on procède aux choix des caractéristiques suivantes :

- Epaisseur suffisante pour l'absorption de tout le rayonnement générateur des porteurs.
- Durée de vie des porteurs élevée
- Forte mobilité des porteurs
- Absence de piégeage des porteurs
- Haute résistivité (faible bruit)

6.2 Hypothèses de bases :

Dans le travail de modélisation nous supposerons que la structure atomique du dispositif nous permet d'ignorer tous les phénomènes collectifs tel que la diffraction, la canalisation et autres interférences qui existent en plus du phénomène de création des paires électrons-trous. Du point de vue interaction, le matériau est considéré comme la somme pondérée de plusieurs éléments simples. Les équations de transports et de conservation lient les différentes grandeurs physiques et permettent en les analysant de connaître avec une précision suffisante les propriétés électriques et la réponse du dispositif à des excitations dues aux particules énergétiques.

Les modèles utilisés sont décrits au paragraphe 3 du chapitre 2 et ils se résument en les points suivants :

- La région P^+ à fort dopage influe sur la concentration intrinsèque en introduisant le rétrécissement de la bande interdite. Equation (2.25)
- La région P^+ à fort dopage influe sur les temps de vie des porteurs, le modèle étant décrit par l'équation (2.28)
- Malgré la qualité des substrats détecteurs qui est très pure on tiendra compte des recombinaisons via les niveaux pièges introduit lors du dopage et les dégradations du matériau induits par les différentes conditions de travail. Ces recombinaisons sont décrites par la loi de Shockley Read Hall, équation (2.26) où on supposera que les niveaux pièges coïncident avec le niveau intrinsèque.
- Sur l'interface oxyde-silicium on tiendra compte de la recombinaison en surface décrite par l'équation (2.30) ou on supposera que les niveaux pièges coïncident avec le niveau intrinsèque
- Etant donné que la région fortement dopée P^+ augmente la probabilité des transitions directes, on tiendra compte alors de la recombinaison Auger. Equation (2.31)
- Le phénomène de génération par ionisation est négligé ; cela est du à la concentration de la base qui est faible ainsi qu'aux faibles valeurs des densités de courant.
- Dans les expressions des mobilités des porteurs, on tiendra compte de l'effet de la température équation (2.35), de l'effet des impuretés ionisées (2.36) et de l'effet du champs électrique (2.39). Le dernier effet est le plus dominant étant donné que le détecteur est soumis en général à un champ électrique intense du aux fortes polarisations inverses.

L'interaction d'une particule chargée avec le substrat silicium est caractérisée par la distribution de son dépôt d'énergie. L'énergie perdue en chaque point est absorbée pour

libérer un nombre de paires électrons-trous. Ce nombre est proportionnel à l'énergie des particules incidentes. Pour les particules alpha d'énergie donnée ξ , leur parcours dans le silicium est limité par le dépôt total de l'énergie. Ce parcours total est de 23 μm pour l'énergie comprise entre 5 et 5.5 MeV. Sous l'influence du champ électrique intense formé par la différence de potentiel externe, les porteurs libérés se collectent aux armatures donnant ainsi une impulsion électrique. Ces impulsions sont traitées et analysées par une chaîne de spectrométrie qui nous donne la réponse en énergie du détecteur de laquelle nous pouvons remonter à l'étude des propriétés de la source ou autres paramètres physiques du dispositif.

En plus des hypothèses citées au paragraphe 4, les approximations ci-dessous sont utilisées ; celles ci dérivent des conditions de fonctionnement du détecteur ainsi que de sa structure géométrique.

On résume ces approximations par :

- Les faibles épaisseurs des zones des contacts métalliques et de la région P^+ permettent de ne considérer que la partie centrale en silicium.
- La structure tridimensionnelle réelle sera décomposée en un empilement de parallélépipèdes formés par les éléments de surface générés par le réseau de discrétisation dans le plan (x,y) et le côté z de profondeur égale à la largeur du détecteur (figure 6.1). Ces parallélépipèdes sont contenus uniquement dans le volume d'interaction limité par le contact métallique avant et le contact métallique arrière.
- Les effets de la diffusion latérale des particules sont négligés.

L'étude sera décomposée en deux parties, la première traitera la réponse du dispositif à un flux de particules α monoénergétique et constant dans le temps. La deuxième traitera le cas d'une impulsion α de durée δt_α générée à l'instant t_α .

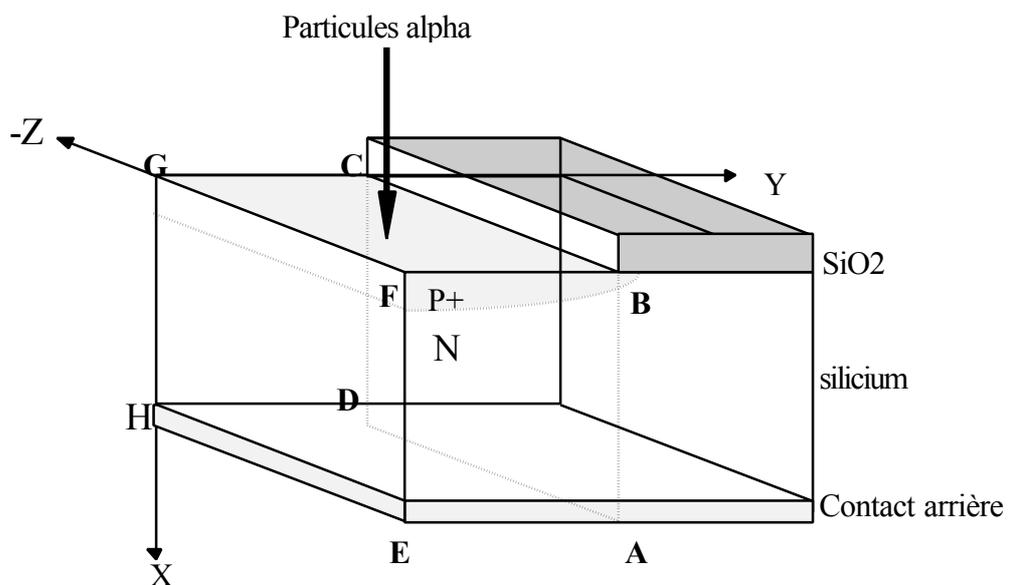


Figure 6.1 : Structure tridimensionnelle du détecteur

Les équations de transport utilisées dans le programme sont décrites comme suit : [89]

$$\tilde{N}(\tilde{N}\psi) = \frac{q}{\epsilon_0\epsilon_r} (n - p - N_d - N_a) \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \tilde{N} \mathbf{J}_n - R_n + G_n \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \tilde{N} \mathbf{J}_p - R_p + G_p \quad (6.3)$$

$$\mathbf{J}_n = -q \cdot n \cdot \mu_n \cdot \tilde{N}\psi + q \cdot D_n \cdot \tilde{N}n \quad (6.4)$$

$$\mathbf{J}_p = -q \cdot n \cdot \mu_p \cdot \tilde{N}\psi - q \cdot D_p \cdot \tilde{N}p \quad (6.5)$$

ψ est le potentiel électrostatique, n et p sont les concentrations des électrons et des trous, $R_{n,p}$ et $G_{n,p}$ sont les taux de recombinaison et de génération des électrons et des trous. Dans ces expressions nous ne tenons pas compte de l'effet de l'irradiation préalable du dispositif par des particules pouvant changer la structure cristalline en introduisant une forte concentration de défauts.

En régime permanent, la méthode de discrétisation à cinq points est utilisée pour générer le système discret : Expressions (3.15) et (3.20) pour l'équation de Poisson, expressions (3.37) et (3.45) pour l'équation des électrons, et enfin (3.39) et (3.46) pour l'équation des trous. Au terme de recombinaison R s'ajoute le terme de génération G ce qui donne un taux de génération/recombinaison total $R-G$.

6.3 Modélisation de la fonction de génération :

Dans cette partie, nous compléterons les modèles physiques par une étude de l'aspect génération des paires sous l'impact des particules alpha. Cela revient à construire le terme de génération en se référant aux approximations citées ci-dessus.

Il est important de limiter toute génération de porteurs qui ne sont pas issus de l'interaction particules-Silicium. Une fois les charges générées, il faut éviter encore qu'elles se recombinent afin d'obtenir le signal le plus élevé possible. De ce point de vue, la qualité du matériau est le facteur déterminant (substrat de haute résistivité). Le détecteur étant un composant d'une chaîne de détection, cette qualité se retrouve au niveau du courant d'obscurité dont va dépendre le bruit.

Dans chaque élément de volume, nous calculerons la densité de courant des porteurs qui permet de déduire le terme de génération qui s'additionnera aux taux de génération-recombinaisons.

Nous prenons le cas où le dispositif est soumis aux particules du côté P^+ (figure 6.2). En un point x_0 la paire électron-trou créée subit l'action du champ électrique et l'électron se collectant au contact du côté N aura parcouru une distance supérieure à celle du trou qui se collecte du côté P.

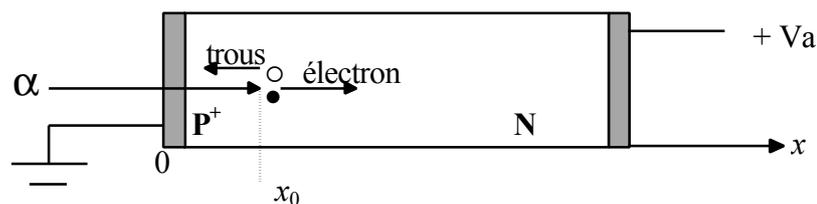


Figure 6.2 : Parcours des charges générées avec des particules incidentes sur P^+

La création des paires électron-trou le long du parcours d'une particule d'énergie ξ dépend du mécanisme du dépôt de son énergie dans le substrat silicium. Les zones de comptage de la dose déposée sont déterminées par les pas de discrétisation suivant la direction x et nous supposons uniforme ce dépôt le long de la direction latérale (y). En profondeur, ce dépôt est donné dans des tables (figure 6.3) ou peut être obtenu avec les programmes de simulation tel que Trim (Versions 90, 96). Connaissant la répartition spatiale du dépôt d'énergie, le calcul du nombre de paires électron-trou s'effectue en utilisant l'énergie moyenne de création d'une paire $\epsilon_m = 3.66$ eV pour le silicium. Cette énergie est prise différente de l'énergie de la bande interdite du Silicium (1.14 eV) pour tenir compte d'autres absorptions dues aux autres formes de collisions.

Le nombre moyen de paires électron-trou généré s'écrit :

$$\Delta n(x, t) = \frac{\Delta \xi(x)}{\epsilon_m} \cdot f(t) \quad (6.6)$$

$\Delta \xi(x)$ est l'énergie perdue par la particule à la profondeur x .

La fonction $f(t)$ décrit la dépendance temporelle du nombre de paires créées. Cette dépendance peut être due au mécanisme de piégeage et émission des électrons et des trous via les niveaux introduits par une irradiation préalable du matériau [77].

La charge électrique équivalente s'écrit : $\Delta Q(x, t) = q \cdot \Delta n(x, t)$, q étant la charge élémentaire.

Une charge créée en x_0 subissant l'action du champ électrique $E(x_0, t)$ se déplace avec une vitesse $v(x_0, t)$ liée au champ électrique et à la mobilité par la relation classique

$$v(x_0, t) = \mu(x_0, t) \cdot E(x_0, t) \quad (6.7)$$

Pour une densité de charges créées $\Delta q(t)$ à $x = x_0$ dans un intervalle Δx_0 appartenant au parallélépipède $(\Delta x_0, \Delta y, \Delta z)$, le courant dû aux porteurs générés s'écrit [77] [80] [81]:

$$\Delta i(t) = \Delta Q_\alpha(t) \cdot \frac{v_d(t)}{d} \quad (6.8)$$

$\Delta Q_\alpha(t)$ est la charge électrique induite dans l'élément de volume $(\Delta x_0, \Delta y, \Delta z)$:

$$\text{avec } 0 \leq x_0 \leq x_\alpha \text{ et } 0 \leq x_\alpha \leq d \quad (6.9)$$

x_α est le parcours de la particule. d est l'épaisseur du détecteur

La densité de courant correspondante s'écrit :

$$\Delta J_n(x, t) = q \cdot \Delta n_\alpha(x, t) \cdot \frac{\Delta x_0}{d} \cdot \mu(x, t) \cdot E(x, t) \quad (6.10)$$

$\Delta n_\alpha(x, t) = \frac{\Delta n(x, t)}{\Delta x_0 \cdot \Delta y \cdot \Delta z}$ est la concentration volumique de porteurs créés dans l'élément

de volume $(\Delta x_0, \Delta y, \Delta z)$.

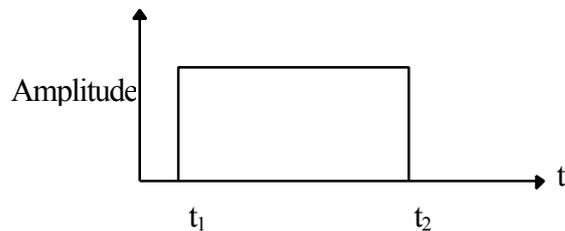
Le long du parcours de la particule, aux variations spatiales de la densité de courant correspond un taux de génération

$$\left. \frac{\partial n, p}{\partial t} \right)_\alpha \equiv G_\alpha = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n, p_\alpha}{\partial x_0}(x_0, t) \quad (6.11)$$

La résolution des équations en introduisant ce terme de génération, respectivement pour les électrons et les trous, permet d'obtenir les solutions en potentiel électrostatique et en porteurs de charges sous l'influence des particules. Cette résolution tient compte de la nature du dispositif et de l'ensemble des effets accompagnant le transport des porteurs : effets des recombinaisons, effets des forts dopages et des durées de vie des porteurs etc.

6.4 Profil de la concentration des paires électrons trous générées :

En première application, nous supposons que les particules sont uniformément réparties sur la surface de la fenêtre de la région d'interaction. Leur flux est constant par rapport au temps. (Cas d'une impulsion carrée ou le flux est constant entre les instants t_1 et t_2).



L'excès en électrons ou en trous se calcule en chaque nœud de discrétisation à partir de la perte d'énergie obtenue par interpolation cubique des données de $\frac{d\xi}{dx}(x)$ pour les particules alpha dans le silicium. On affecte en chaque position, un poids au groupe de charges créées pour tenir compte de la non uniformité du processus du dépôt.

Dans un intervalle Δx_0 ce poids s'écrit [76] : $\omega = \frac{\Delta x_0}{d}$

La distribution en profondeur de la perte d'énergie des particules alpha dans le silicium est représentée sur la figure suivante [84]:

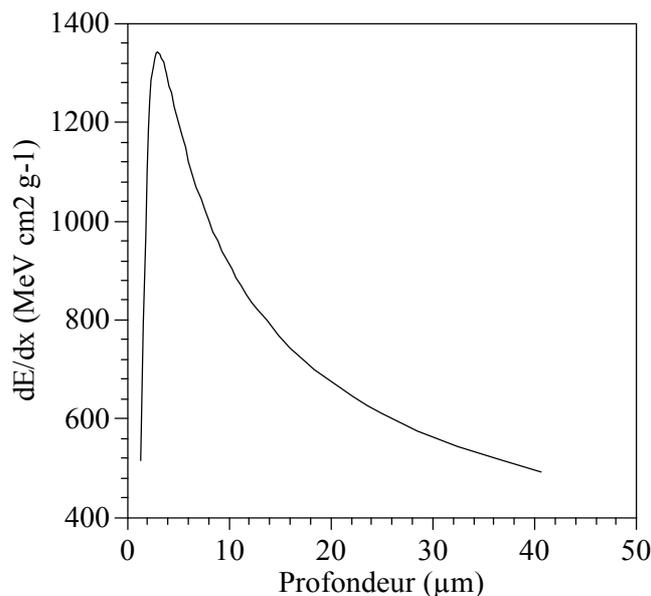


Figure 6.3 : Dépôt d'énergie des particules alpha dans le silicium

Les profils des concentrations en excès sont représentés dans les graphes suivants :

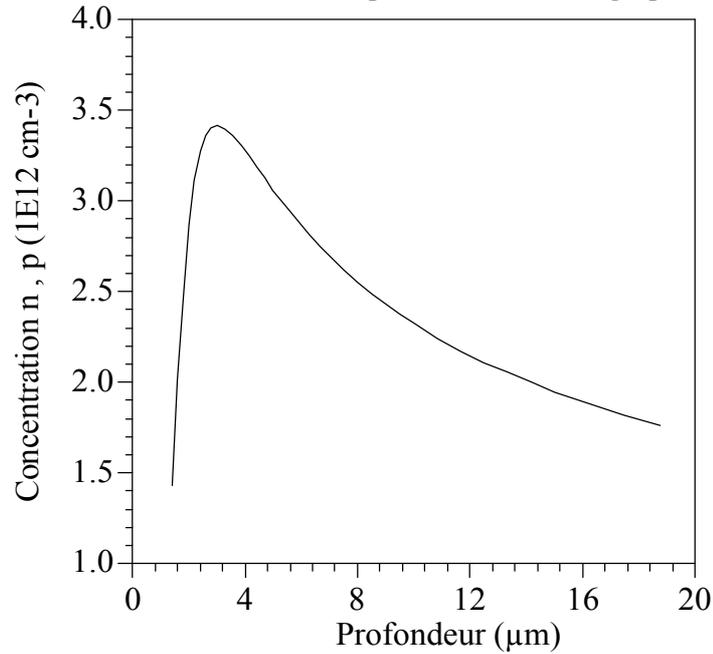


Figure 6.4 : Concentration des électrons et des trous générée le long du parcours des particules alpha

Nous supposons que la concentration des paires générées est uniforme le long de la direction latérale ($0 \leq y \leq y_c$, y_c est la limite de l'oxyde).

Pour une profondeur totale de 20 μm , nous avons approximativement 10^6 paires créées, ceci correspond à une concentration d'électrons et de trous injectés $\Delta n = \Delta p = 2.10^{12} \text{ cm}^{-3}$

La comparaison du terme de génération calculé à celui des recombinaisons SRH et Auger pour une polarisation de 10 V en inverse est décrite dans les courbes des figures 6.5 et 6.6.

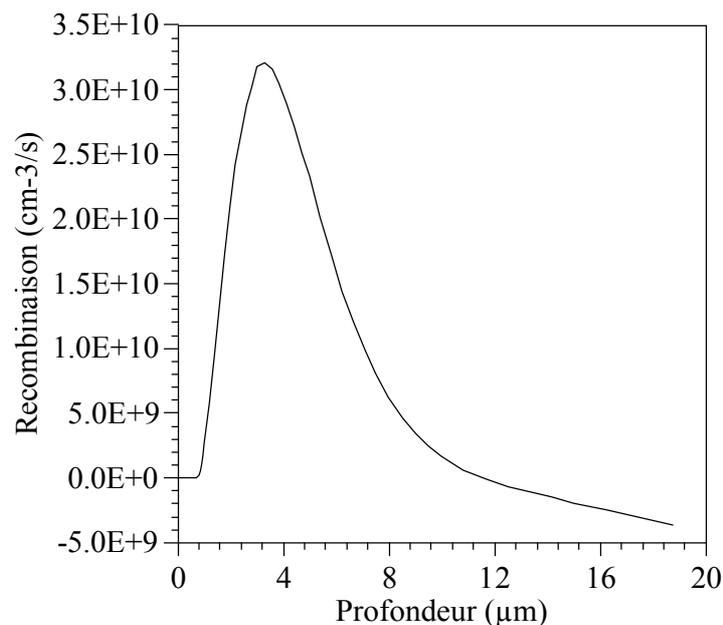


Figure 6.5 : Taux de recombinaison SRH et Auger pour une polarisation du dispositif de 10 V en inverse

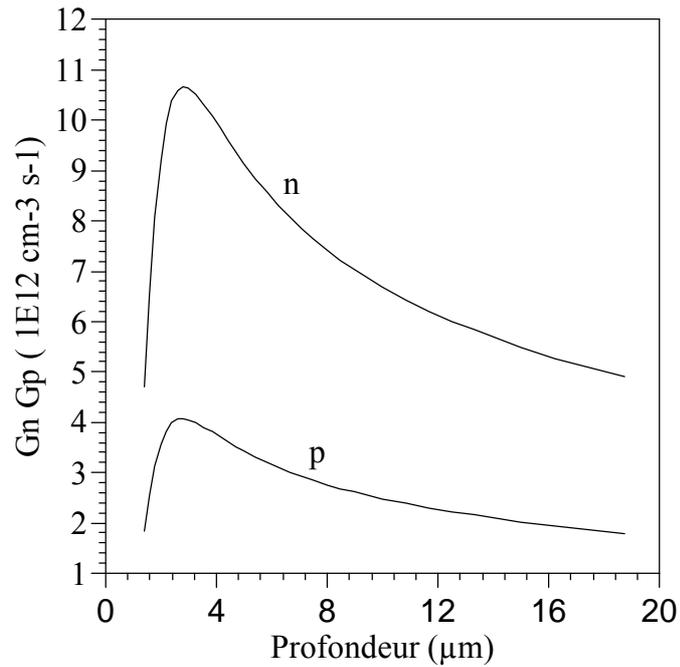


Figure 6.6 : Taux de génération des porteurs par les particules alpha pour une polarisation du dispositif de 10V en inverse

Nous remarquons que le taux de génération est élevé par rapport au taux de recombinaison. Les différences qui existent entre le terme de génération des électrons et celui des trous sont dues à la différence des mobilités et des durées de vie.

6.5 Influence des particules alpha sur le potentiel :

Prenant le cas du dispositif polarisé en inverse avec une tension de 10 V. Le profil du potentiel électrostatique issu de la résolution des équations en tenant compte de la génération est représenté sur la figure suivante.

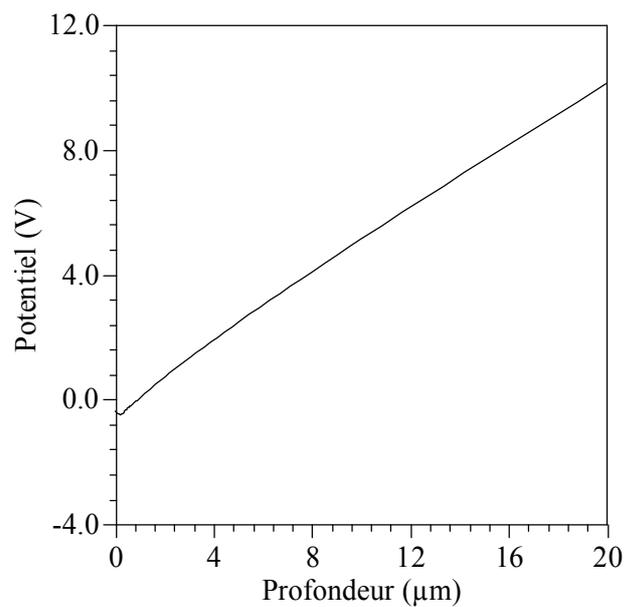


Figure 6.7 : Potentiel électrostatique sous une polarisation de 10V et en présence des particules

Ce profil coïncide avec celui obtenu en absence des particules. Les différences qui ne sont pas très visibles graphiquement sont situées au voisinage de la limite de la zone exposée aux particules et celle qui est protégée avec l'oxyde.

6.6 Influence des particules sur la concentration des porteurs :

Les particules très énergétiques générant un nombre important d'électrons et de trous induisent une forte injection dans le substrat. Sous une polarisation inverse de 10 V, les électrons ont une concentration autour de 10^4 cm^{-3} (dans la base). En injectant 10^{12} cm^{-3} électrons la résolution des équations subit un mauvais conditionnement et provoque des oscillations et instabilités. Nous évitons ces problèmes en augmentant progressivement la concentration des porteurs générés en utilisant le facteur multiplicatif.

6.6.1 Les électrons :

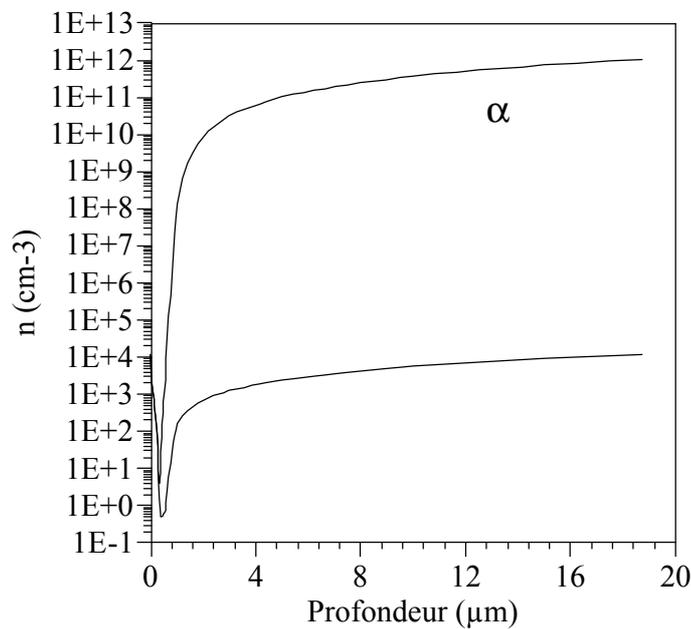


Figure 6.8 : Concentration des électrons en présence et en absence des particules sous une polarisation inverse de 10V

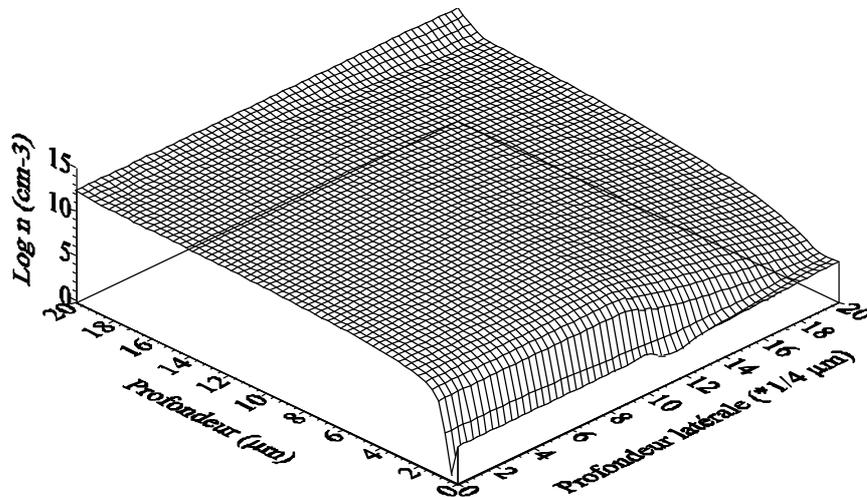


Figure 6.9 : Concentration des électrons en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V

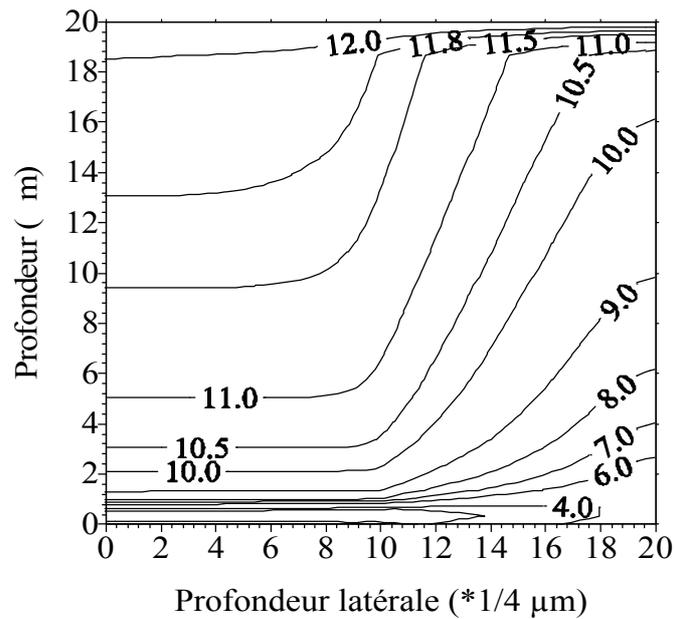


Figure 6.10 : Contour de la concentration des électrons en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V

A la figure 6.8, on constate que la concentration des électrons augmente considérablement (de 10^4 à 10^{12} cm^{-3}) dans le volume d'interaction des particules alpha ; ce volume est limité par le contact avant et le plan ABCD de la figure 6.1. Dans le volume sous l'oxyde, la densité des électrons et des trous gardent approximativement leurs valeurs vu que les particules ne pénètrent pas en profondeur, ce sont les effets latéraux qui influent sur les porteurs de cette région.

6.6.2 Les trous :

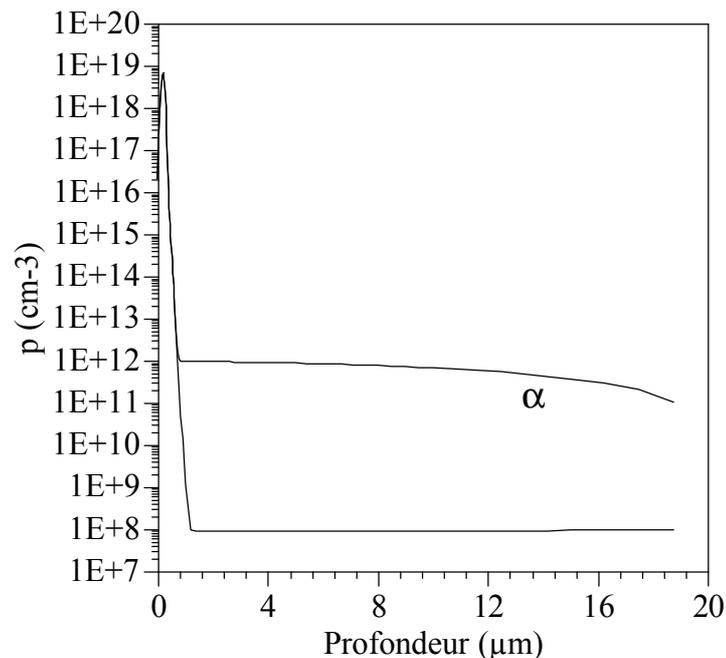


Figure 6.11 : Concentration des trous en présence et en absence des particules sous une polarisation inverse de 10V

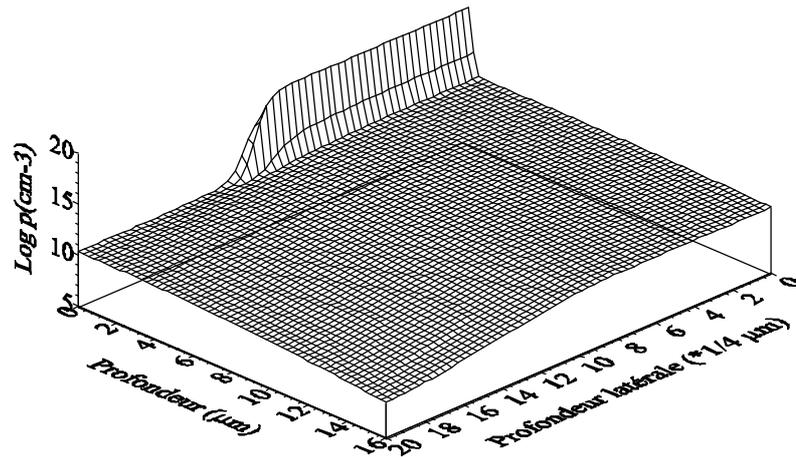


Figure 6.12 : Concentration des trous en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V

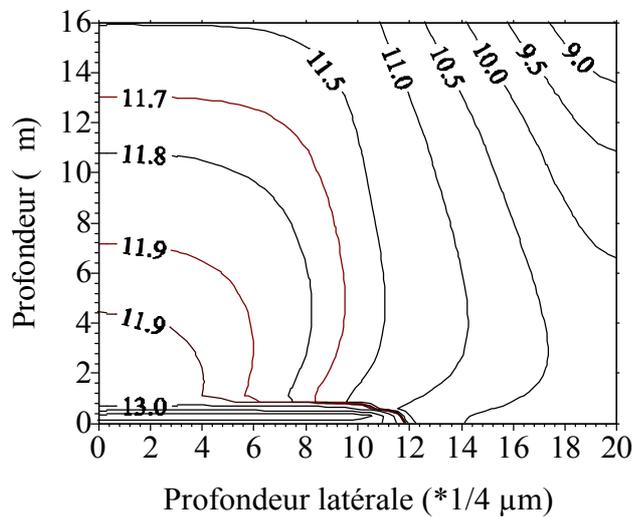


Figure 6.13 : Contour de la concentration des trous en présence des particules sous une polarisation inverse de 10V

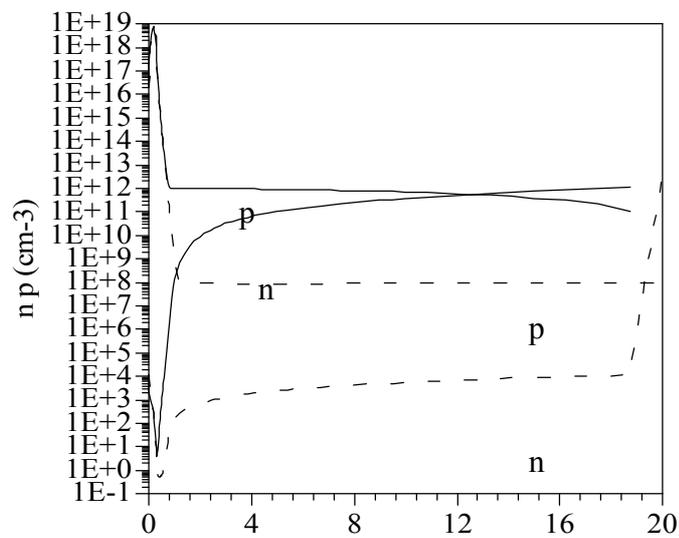


Figure 6.14 : Concentration des électrons et des trous sous une polarisation inverse de 10V
 ————— en présence des particules - - - - - en absence des particules

La figure 6.11 illustre la densité de trous, on remarque qu'elle varie de 10^8 à 10^{12} cm^{-3} . Cette variation est nettement inférieure à celle des électrons.

Les figures 6.10 et 6.13 donnent les contours des électrons et des trous dans le plan (x,y) et nous observons clairement les variations latérales des concentrations des porteurs.

La figure 6.14 montre l'influence des particules alpha sur la distribution des électrons et des trous. Nous remarquons que leurs concentrations finales sont voisines et elles sont proches de 10^{12} cm^{-3} . Cette valeur, égale à la concentration des porteurs en excès, indique donc qu'il s'agit bien d'un régime de forte injection.

Le calcul du courant total parcourant le dispositif en polarisation inverse est effectué de la même façon que pour les parties précédentes. Le temps d'exécution s'avère élevé car à chaque polarisation, on doit résoudre les équations avec un terme de génération important ; ceci fait glisser la valeur de la concentration des électrons d'une quantité importante. La non-uniformité en profondeur du dépôt d'énergie de la particule et son absence totale sous l'oxyde affecte le processus de calcul, principalement à l'étape de résolution de l'équation de continuité des électrons. Pour cela, il a été convenu d'utiliser l'algorithme construit avec le schéma de Mayergoyz qui nous donne de très bons résultats dans le cas des polarisations inverses élevées qui peuvent atteindre 18 V au maximum.

La figure suivante donne la caractéristique courant tension du détecteur précédent sous le flux de particules.

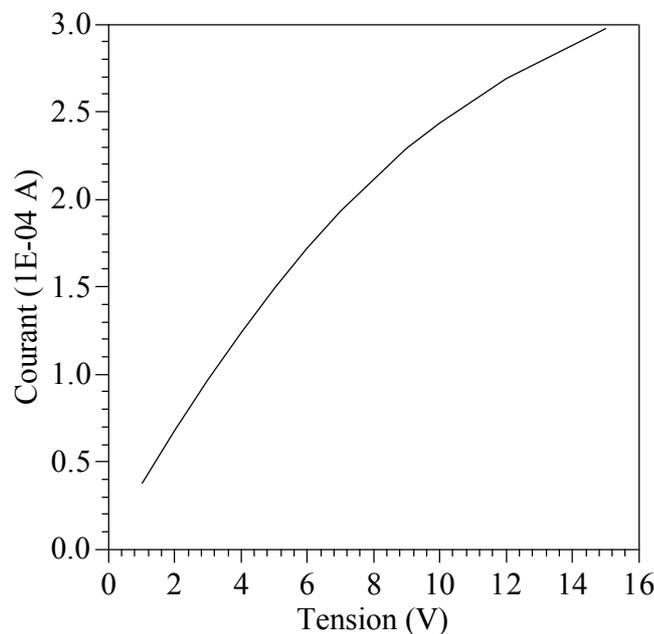


Figure 6.15 : Caractéristique courant tension en inverse du détecteur de la figure 6.1

Le courant qui était de l'ordre du nA en absence des particules externes augmente à 10^{-4} A, en plus il augmente avec la tension de polarisation. Ce courant est dû principalement aux porteurs de charges générés. Son sens est bien celui du courant à dominance des trous qui correspond au cas du bombardement du côté P^+ .

6.7 Réponse transitoire du détecteur :

La variation temporelle du nombre de paires créées peut avoir plusieurs origines. Le premier est le fait d'irradier le détecteur par d'autres particules (des neutrons en général) qui introduisent une concentration de niveaux d'impureté importante. Ces niveaux deviennent des centres de recombinaison, ils peuvent être étudiés par analogie au modèle de Shockley-Read-Hall via un niveau d'énergie qui se crée dans la bande interdite [76]. Ce modèle utilise le processus de capture et d'émission de porteurs libres par le niveau. Cet échange de porteurs avec le niveau E_t est caractérisé par un temps de capture τ_t et d'émission τ_d pour les électrons et les trous. Ces temps de vie sont définis par :

$$\tau_{t(np)} = \frac{1}{\sigma_{vt(np)} N_T} \quad \tau_{d(np)} = \frac{1}{\sigma_{vt(np)} N_a} \quad (6.12)$$

$$N_a = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT}\right) \text{ pour les électrons} \quad (6.13)$$

$$N_a = N_v \exp\left(-\frac{E_v - E_t}{kT}\right) \text{ pour les trous}$$

N_c et N_v sont les densités d'états des électrons et des trous respectivement dans la bande de conduction et dans la bande de valence.

A un instant donné, la concentration de paires $n(t)$ et la concentration des niveaux occupés vérifient les équations suivantes :

$$\begin{aligned} dn(t) &= -\sigma_t \cdot v_t \cdot n(t) \cdot [N_t - N_t(t)] dt + \sigma_d \cdot v_t \cdot N_c \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) N_t(t) dt \\ dN_t(t) &= -dn(t) \\ n(t=0) &= n_0 \quad (\text{Charges générées par les particules}) \\ N_t(t=0) &= N_{T0} \quad (= 0 \text{ dans la plus part des cas}) \end{aligned} \quad (6.14)$$

La résolution analytique de ces équations donne une expression de $n(t)$ très complexe. Des approximations sont utilisées pour un dispositif P⁺N dans les cas suivants [76] [77] ; Concentration initiale des niveaux intermédiaires $N_{T0} = 0$ et $n_0 \ll N_T$ et pour un temps de collection des charges de l'ordre de 30 ns et pour $\tau_t \approx \tau_d > 30$ ns nous aurons :

$$n(t) = n_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{a \cdot \tau_t}\right) \quad \text{avec } a = 1 + \frac{24\text{ns}}{\tau_d} \quad (6.15)$$

Dans le cas contraire ou le temps de collection est très petit devant le temps du piégeage τ_t nous avons une variation linéaire de $n(t)$: $n(t) = n_0(1 - t/\tau_t)$. Dans tous les cas, la concentration des paires diminue avec le temps.

L'aspect aléatoire des interactions particules - silicium donne en général une distribution Gaussienne de l'excitation. Autour de l'instant de propagation du flux des particules t_α la génération $G_{n,p}$ prend la même forme en introduisant la durée de la pulse qui correspond au temps pendant lequel la particule perd son énergie. On écrit le terme de génération avec l'expression suivante [89] :

$$G_t(t) = G \cdot f(t) = G \cdot \exp\left(-\frac{(t - t_\alpha)^2}{\delta t^2}\right) \quad (6.16)$$

Les équations dans ce cas sont décrites au chapitre 5 pour leur résolution en régime transitoire.

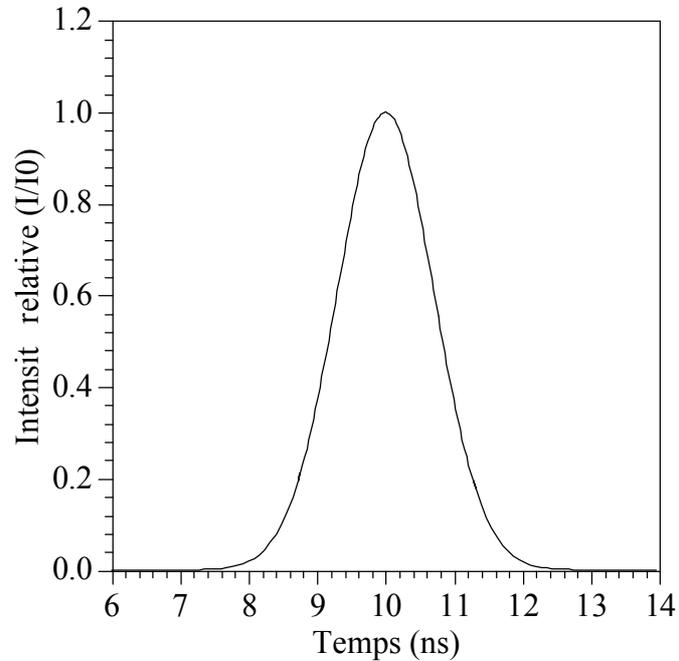


Figure 6.16 : Forme de la fonction de modulation transitoire du terme de génération

Le terme de génération pour les électrons et les trous évalué à chaque instant est représenté aux figures suivantes :

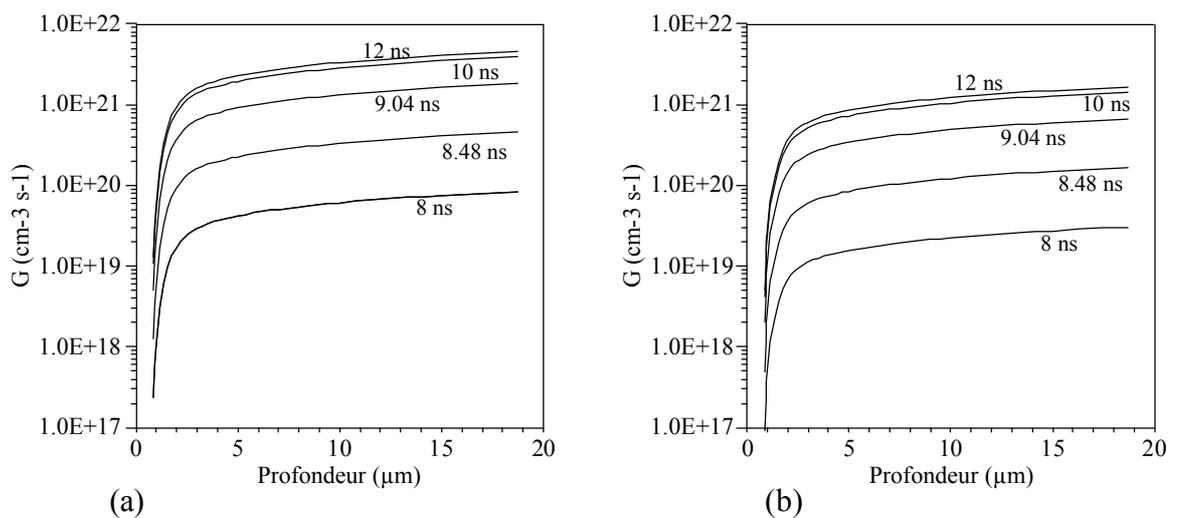


Figure 6.17 : Terme de génération à différents instants (a) électrons (b) trous

Ces courbes montrent l'évolution rapide du terme de génération dans l'intervalle de montée de l'excitation.

Au cours du temps, la variation de la concentration des porteurs de charges prend les formes illustrées aux figures suivantes :

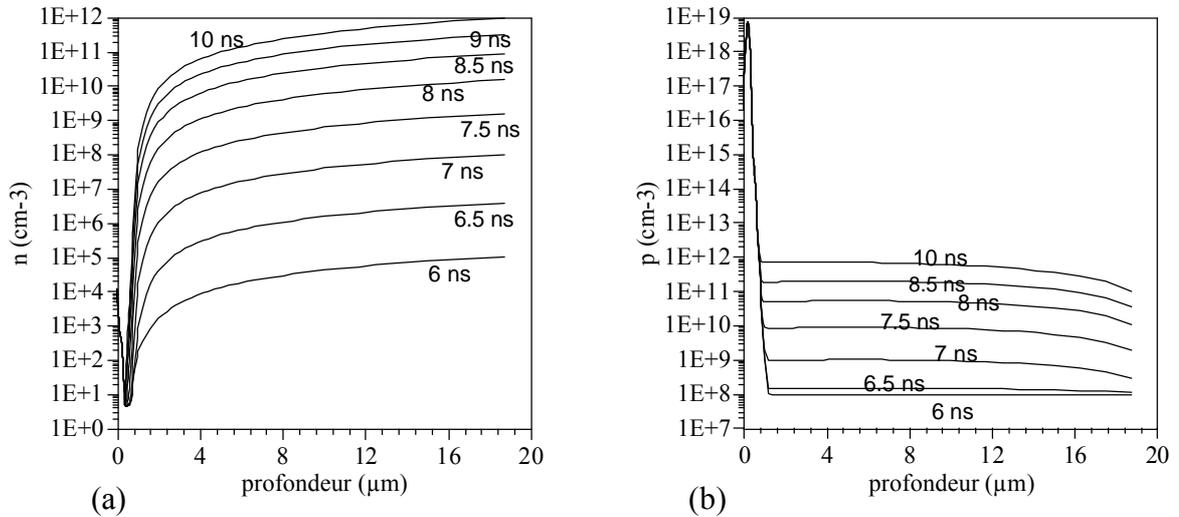


Figure 6.18 : Evolution de la concentration des électrons (a) et des trous (b)

Les figures suivantes montrent les vues en perspectives de la concentration des électrons sous l'effet des particules à un instant précis (6 ns).

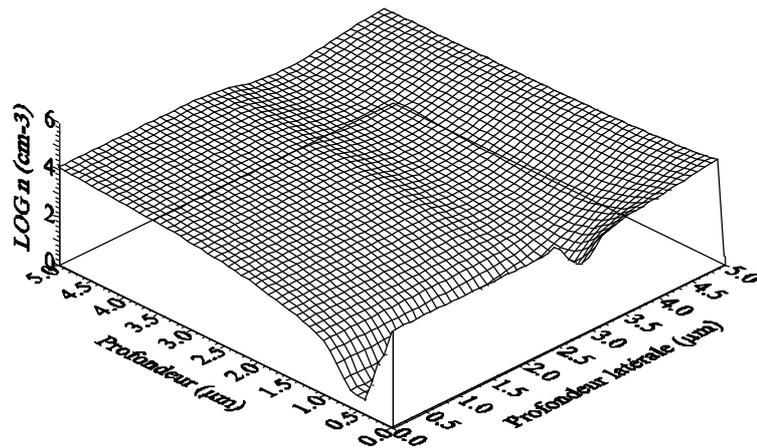


Figure 6.19 : Concentration des électrons à l'instant $t = 6$ ns

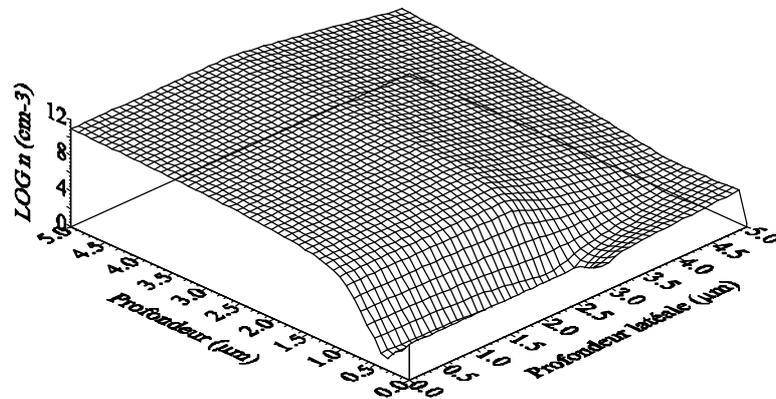


Figure 6.20 : Concentration des électrons à l'instant $t = 10$ ns

Les figures suivantes montrent les vues en perspectives de la concentration des trous sous l'effet des particules à un instant précis (6 ns).

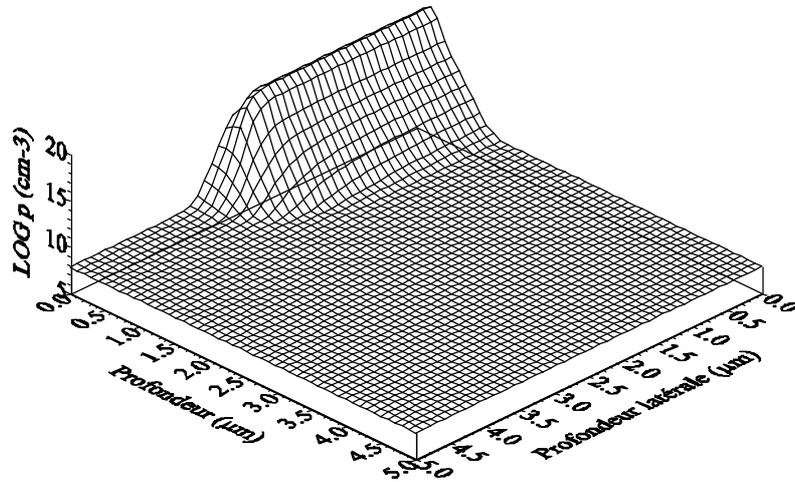


Figure 6.21 : Concentration des trous à l'instant $t = 6 \text{ ns}$

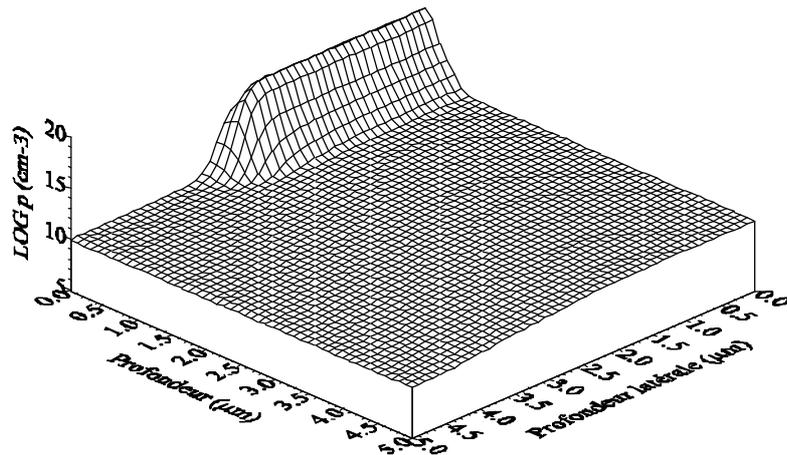


Figure 6.22 : Concentration des trous à l'instant $t = 10 \text{ ns}$

La concentration des électrons varie rapidement avec le temps, elle passe de $\approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$ à 6 ns à $\approx 10^6$ à 6.5 ns et elle atteint 10^{12} cm^{-3} à 10 ns. La concentration des trous, par contre, varie lentement surtout autour de 5 ns, début de la pulse alpha, ses valeurs passent de 10^8 cm^{-3} à 5 ns à 10^{12} cm^{-3} à 10 ns.

Les calculs du courant sur le temps total de l'excitation donne la forme d'impulsion de la figure suivante :

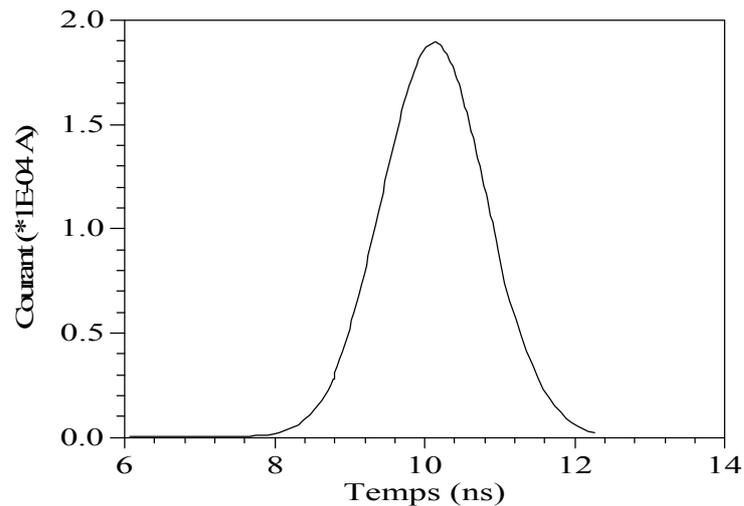


Figure 6.23 : Impulsion du courant induit

La résolution des équations en régime transitoire est effectuée sur l'intervalle de temps entourant l'instant où il y a eu incidence de la particule (de 6 à 14 ns). Le terme de génération varie très rapidement autour du maximum ; les calculs donnent un courant extérieur prenant une forme identique à celle de la fonction de génération. A noter que nous n'avons pas tenu compte du phénomène de piégeage et du dépiégeage des porteurs via les niveaux créés par les particules dans la bande interdite ; cela se justifie car la constante du temps intervenant dans leurs descriptions est largement supérieure à la durée de la pulse. La discrétisation temporelle a nécessité l'insertion de beaucoup de points dans l'intervalle de la pulse. Les valeurs du courant passent de 0 (t=6ns) à 0.2 mA (t=10ns) valeur qui correspond au maximum du terme de génération et elle ne diffère pas trop de la valeur dans le cas permanent (0.25 mA) La différence est liée au modèle de discrétisation temporelle et à la précision des boucles de Gummel et des boucles internes et externe ainsi que la propagation des erreurs de discrétisation temporelle.

6.8 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons développé un modèle pour la formulation de la fonction de génération des porteurs de charges dans le silicium sous l'impact des particules alpha ayant une énergie autour de 5MeV. Cette approche complète les modèles physiques décrits au chapitre 3 pour la simulation du détecteur.

La distribution de l'énergie perdue par la particule dans le volume d'interaction a été utilisée pour le calcul de la concentration des électrons et des trous en excès en utilisant l'énergie moyenne de création d'une paire électron-trou. Le calcul du taux de génération correspondant s'effectue en utilisant la densité de courant due aux porteurs générés.

Le dispositif P⁺N à jonction implantée, sous une polarisation inverse de 10 V a été utilisé pour l'étude de l'influence des particules sur la distribution des porteurs et sur le potentiel électrostatique. L'effet dominant de cette génération sur les calculs est le fait qu'en forçant le système en forte injection, des oscillations et des instabilités s'observent. Des résultats ont été présentés et un calcul de courant justifie la validité de cette approche. Enfin, la réponse impulsionnelle a été simulée en utilisant les modèles développés pour le régime transitoire tenant compte des variations en temps de la fonction de génération en forme Gaussienne. L'objectif fixé durant tout notre travail est concrètement atteint avec tous les résultats présentés. Dans les parties suivantes, une comparaison des caractéristiques calculées et mesurées d'un détecteur réel améliorera notre étude.

CHAPITRE 7

LA REALISATION DES DETECTEURS A JONCTION P+N IMPLANTEE

7.1 Introduction :

Les études numériques présentées aux chapitres précédents nous ont permis de calculer les caractéristiques en obscurité et en excitation d'un dispositif à jonction. Dans l'élaboration expérimentale de ces dispositifs, il est indispensable d'optimiser les étapes les plus critiques et ce en analysant convenablement les différents résultats de la simulation avant la mise en oeuvre technologique du dispositif. Pour cela, la connaissance et la maîtrise des étapes technologiques sont nécessaires [4].

Dans ce chapitre nous décrierons succinctement les différentes étapes technologiques dans la fabrication d'un détecteurs à jonction P⁺NN⁺ sur lequel nos travaux de simulation se sont basés (voir figure 4.5).

Partant de plaquette de silicium monocristallin de résistivité élevée, les étapes technologiques se succèdent jusqu'à l'obtention de la diode prête au test de détection. Ces étapes [90] représentées à la figure 7.1 se résument comme suit (figure 7.1) :

- Formation d'un oxyde épais à travers lequel seront ouvertes des fenêtres de dopage.
- Ouverture des zones à planter au moyen de la photolithographie.
- Implantation des dopants sur la face avant (type p) et sur la face arrière (type n) et recuit.
- Métallisation sur les deux faces
- Gravure de l'Aluminium sur la face avant au moyen de la photolithographie et recuit
- Montage et test

7.2 L'oxydation :

La première étape du procédé est l'oxydation thermique. Elle consiste à faire réagir des atomes d'oxygène avec le silicium pour former un oxyde du silicium SiO₂ dont l'un des rôles est la passivation de la surface, c'est à dire la neutralisation d'une partie des états de surfaces qui influent sur la vitesse de génération en surface et donc sur le courant d'obscurité.

L'oxydation s'effectue dans un four à haute température parcouru par courant gazeux oxydant.

On distingue deux types d'oxydations selon la nature de l'oxydant :

- Oxydation sèche : réalisée en présence d'un courant gazeux d'oxygène sec selon la réaction : $\text{Si} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiO}_2$
- Oxydation humide : beaucoup plus rapide, où l'oxygène est saturé en vapeur d'eau.

La réaction s'écrit : $\text{Si} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{SiO}_2 + 2\text{H}_2$

L'oxydation sèche est utilisée pour la fabrication des couches d'oxydes minces dont la qualité est déterminante pour le fonctionnement des circuits. La densité d'états d'interface et la densité de charges fixes dans l'oxyde dépendent directement des conditions d'oxydation telle que la durée et la température, la nature du gaz et l'orientation cristallographique du substrat.

7.3 La Photolithographie :

Cette technique permet de transférer les dessins du masque sur les couches minces recouvrant le substrat. Elle se décompose en une succession d'opérations illustrées à la figure 7.2. On trouve :

- Dépôt d'un film de résine : Il s'agit de déposer sur toute la surface de la plaquette une couche mince de résine photosensible.
- Alignement du masque et insolation : Un dessin sur masque est placé au-dessus de la plaquette et positionné au moyen de mouvements micrométriques. L'ensemble est ensuite exposé à la lumière ultraviolette ; Pour une résine photosensible positive, les zones insolées deviennent solubles dans une solution aqueuse basique (révélateur). Inversement, dans le cas d'une résine négative, c'est la partie insolée qui est, en polymérisant sous l'effet des UV, devient insoluble.
- Développement et séchage : Cette partie consiste à éliminer certaines parties de la résine suivant le motif. Les plaquettes sont immergées dans le développeur ; les zones insolées sont éliminées (résine positive). Les échantillons sont ensuite soigneusement rincés dans l'eau désionisées et séchées sur une plaque chauffante à 120 °C.
- La gravure : Cette technique permet d'éliminer les couches qui ne sont pas protégées par la résine. Dans le cas de l'oxyde sa gravure est obtenue par action d'acide fluorhydrique HF suivant la réaction :

$$\text{SiO}_2 + 6\text{HF} \longrightarrow \text{H}_2\text{SiF}_6 + \text{H}_2\text{O}$$
 En pratique, cette réaction est réalisée en solution HF diluée tamponnée avec NH_4F . La vitesse de gravure est de l'ordre de 25 Å/s à 28 °C.
 La gravure de l'Aluminium est réalisée au moyen d'une solution aqueuse à base d'acide phosphorique (77 % H_3PO_4 , 15 % CH_3COOH , 3 % HNO_3)

Nettoyage : Le nettoyage des plaquettes est nécessaire pour éliminer toute trace de résine. Ceci peut être réalisé soit par exposition UV de toute la surface recouverte soit par trempage dans un solvant.

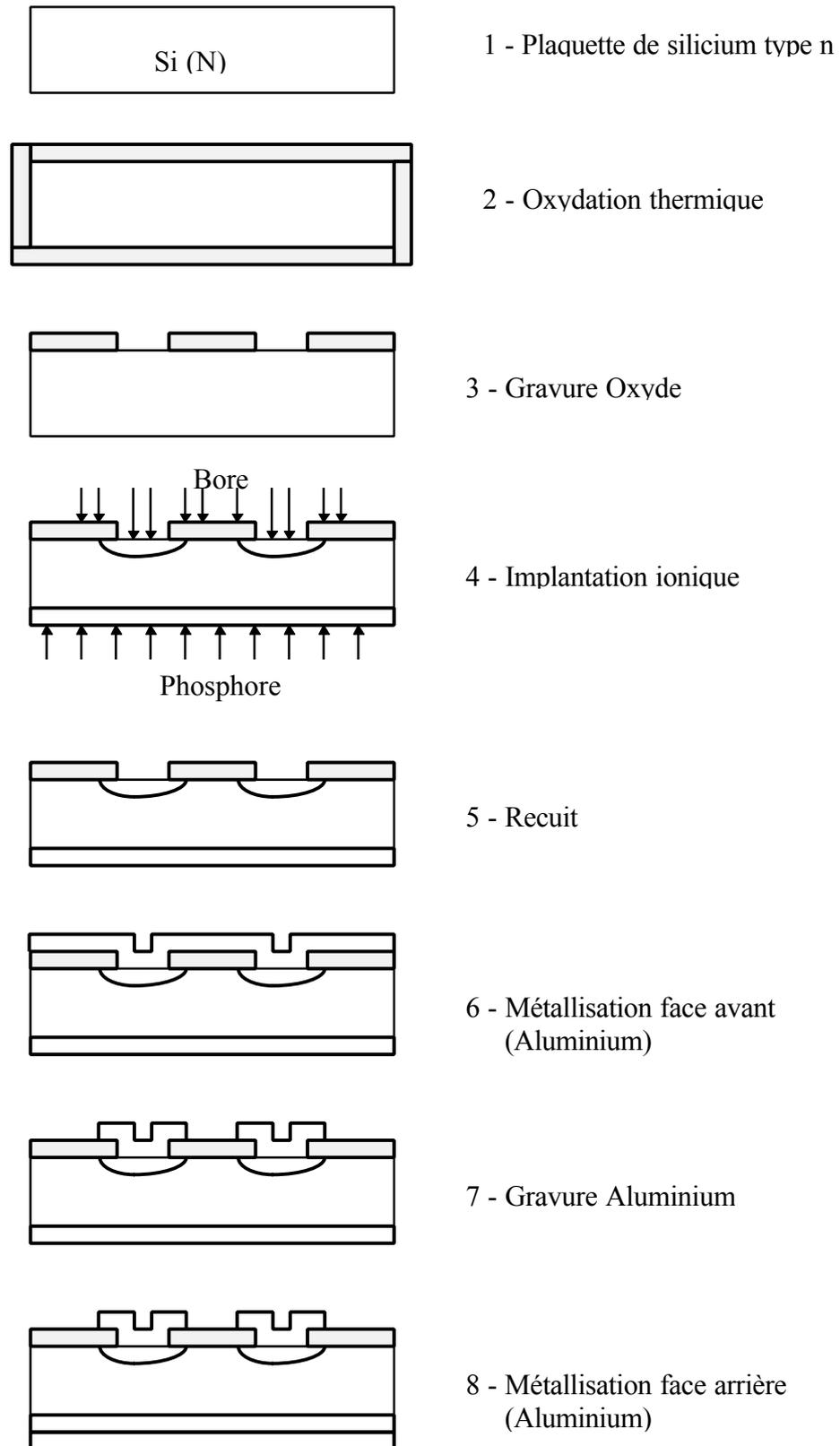


Figure 7.1 : Les différentes étapes technologiques d'élaboration de détecteurs à jonction implantée

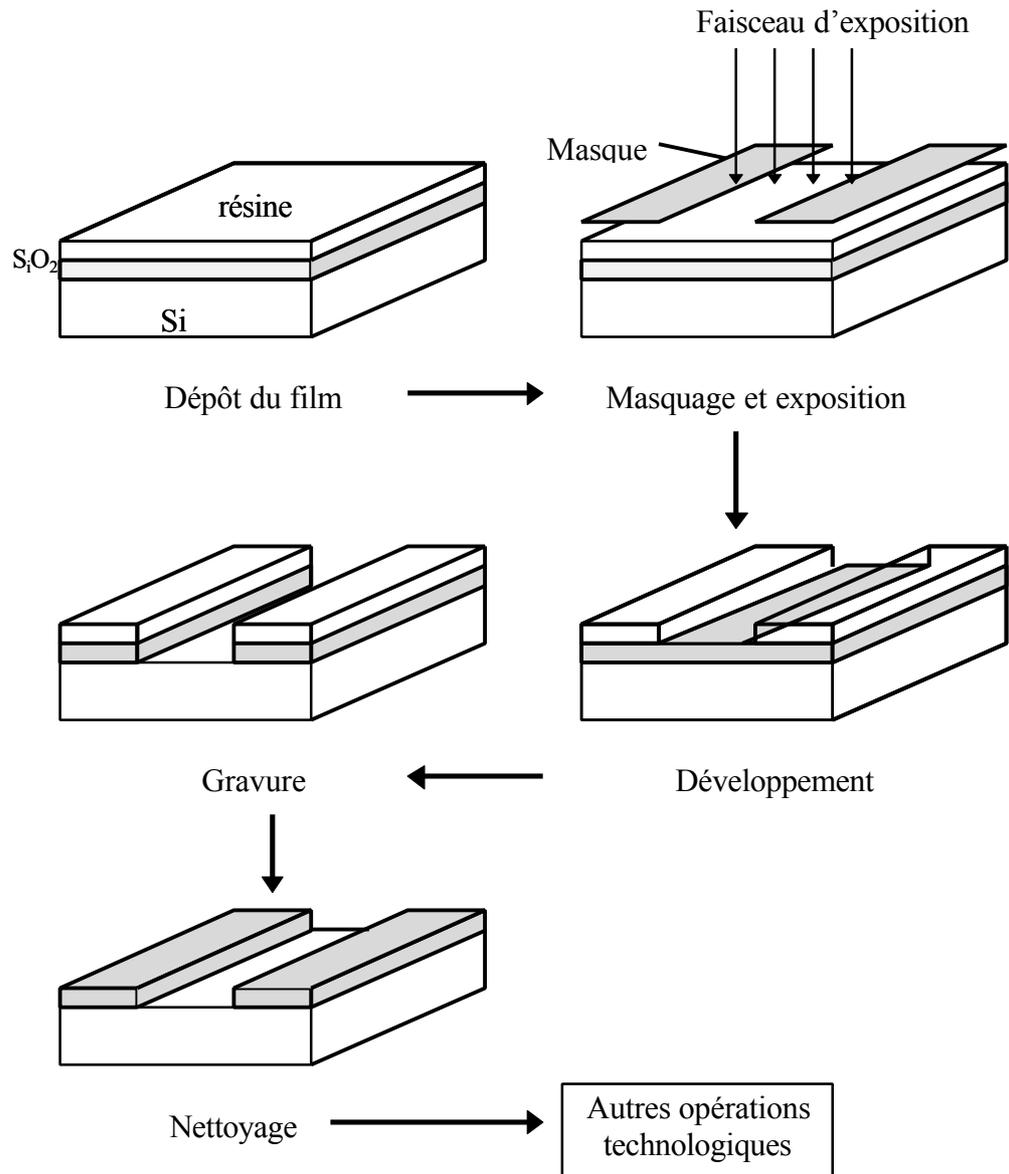


Figure 7.2 : Les différentes étapes de la photolithographie

7.4 L'implantation ionique :

La technique d'implantation ionique consiste à communiquer par accélération une énergie cinétique suffisante à des ions de l'impureté choisie pour les faire pénétrer sur une certaine distance à l'intérieur du cristal.

Le dispositif expérimental est décrit dans le schéma suivant :

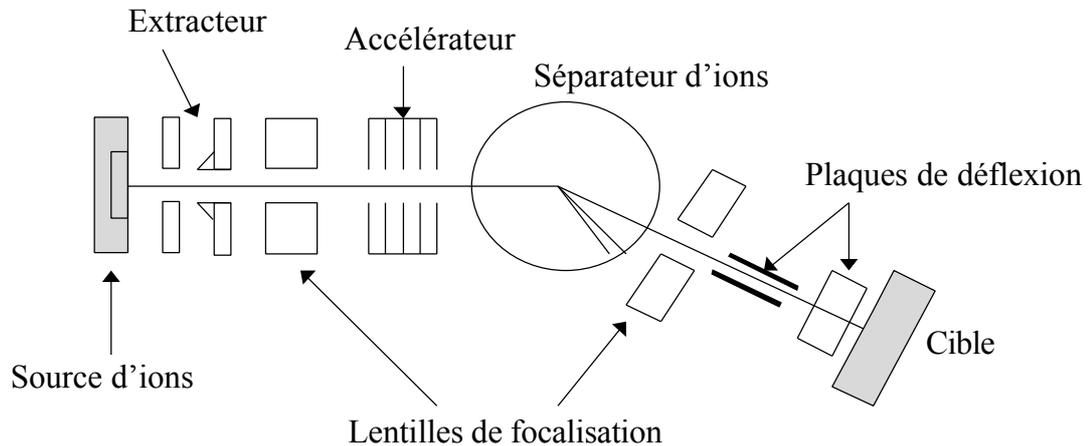


Figure 7.3 : Description schématique d'un implantateur

Les tensions d'accélération peuvent aller jusqu'à 500 kV, les sources d'ions émettant toujours, outre les ions de l'impureté choisie, des quantités non négligeables d'ions d'autres éléments, une séparation de masse est nécessaire pour isoler un faisceau ayant la pureté requise. Des systèmes de focalisation et de balayage permettent de contrôler le faisceau et d'assurer l'homogénéité des doses au niveau de la cible. La profondeur de pénétration dans le cristal des ions d'impuretés reste en général faible (inférieur au micron) mais la quantité totale d'ions implantés (dose) est parfaitement contrôlable. Cette technique est applicable pratiquement à tous les types de substrat et d'impuretés.

7.5 La métallisation :

Cette étape consiste à déposer sur la surface de la plaquette une couche conductrice qui sera ensuite gravée pour limiter les contacts métalliques. Ce dépôt s'effectue par évaporation thermique ou par pulvérisation cathodique.

Pour obtenir un contact Aluminium-Silicium de bonnes qualités, un recuit est nécessaire. En effet en chauffant le système au environ de 450 °C, on favorise la constitution d'un alliage Aluminium-silicium sur une épaisseur très fine ce qui donne une bonne adhérence au contact.

7.6 Résultats expérimentaux :

Le travail expérimental qui va servir à confronter nos résultats de simulation a été réalisé par ailleurs [15]. Il a aboutit à la mise en oeuvre d'un détecteur au silicium à jonction implantée. Toutes les étapes ont été complétées par des mesures permettant finalement de

caractériser le détecteur et d'effectuer les test de détection. Le tableau suivant résume les paramètres de chaque phase :

- Réalisation des masques : Masque d'implantation et masque de métallisation
- Plaquettes de silicium utilisées : type N, diamètre 3 pouces, épaisseur 300 μm , orientation $\langle 111 \rangle$, Résistivité 1.8 $\text{k}\Omega \text{ cm}$,
- Oxydation : Température 1000 $^{\circ}\text{C}$, Flux d'oxygène + H_2O
Épaisseur de la couche d'oxyde 5700 \AA . indice 1.46
- Implantation : Face avant Bore Dose = $5 \cdot 10^{14}$ ions/ cm^2 Energie = 25 keV
Face arrière Phosphore Dose = 10^{15} ions/ cm^2 Energie = 30 keV
- Recuits : Classique ; Température 600 $^{\circ}\text{C}$, temps 1 h
- Métallisation : Pulvérisation cathodique Face avant Al 500 \AA ; Face avant Al 500 \AA
+ Recuit Température 450 $^{\circ}\text{C}$

La comparaison de la caractéristiques courant tension obtenue expérimentalement et celle obtenue avec notre programme est représentée à la figure suivante :

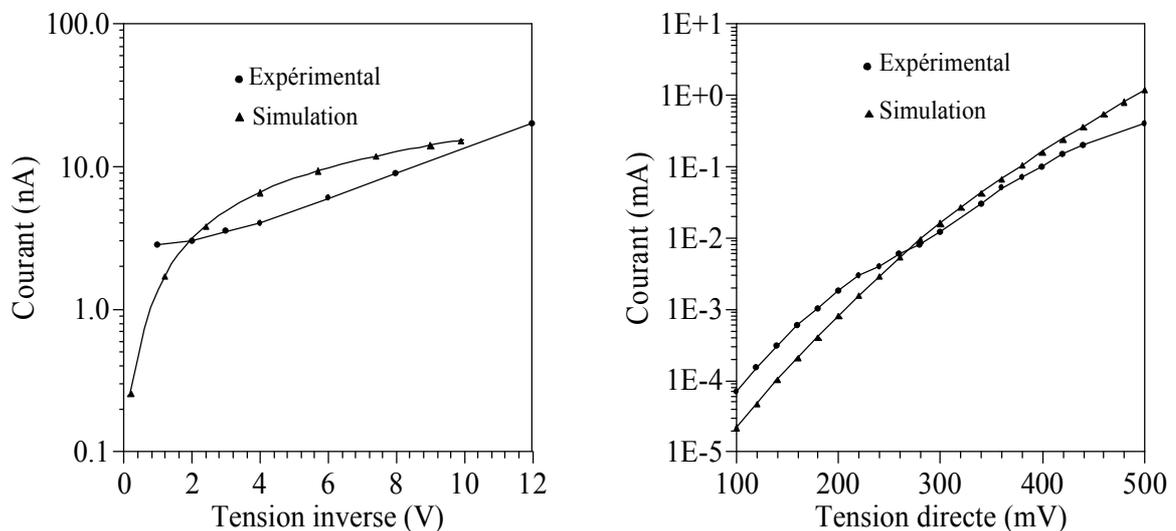


Figure 7.4 : Caractéristique courant tension du dispositif réalisé

Dans les calculs numériques, nous avons utilisé uniquement les faibles polarisations (<15 V) vu les capacités du modèle séquentiel. Globalement, la comparaison donne un accord qui peut être considéré très bon, toutefois, les écarts sont dus probablement aux phases expérimentales qui ne sont pas prises compte intégralement dans la simulation et ces détails sont importants dans la détermination des courants de fuites et des courants sous faibles polarisations

L'ajustement fin des paramètres aussi bien physiques qu'expérimentaux devait permettre une meilleure corrélation quantitative. Toutefois, compte tenu de la complexité de cerner individuellement ces paramètres, il n'entre pas dans objectifs immédiats de procéder à un tel exercice. Notre but est de valider notre programme de calcul par une comparaison avec des mesures expérimentales.

Résolution énergétique du détecteur :

Nous avons complété notre étude en réalisant des mesures de la résolution énergétique du détecteur étudié. Afin de se rapprocher des conditions expérimentales et des

caractéristiques du dispositif, des calculs d'optimisation ont été effectués. La condition principale est la polarisation inverse appliquée pour une déplétion totale de la jonction. Le test de détection consiste à soumettre un flux de rayonnement issu d'une source radioactive sur la surface avant du détecteur. Les impulsions générées sont traitées par une chaîne de spectroscopie nucléaire qui donne la répartition en énergie du rayonnement incident. Cette chaîne est constituée généralement d'un préamplificateur de charge, d'un amplificateur à gain variable, des systèmes de polarisation et des étages de filtrage et mise en forme (figure 7.5). Le signal issu de cette chaîne est injecté dans un analyseur de spectre qui donne le spectre en énergie du type de rayonnement analysé.

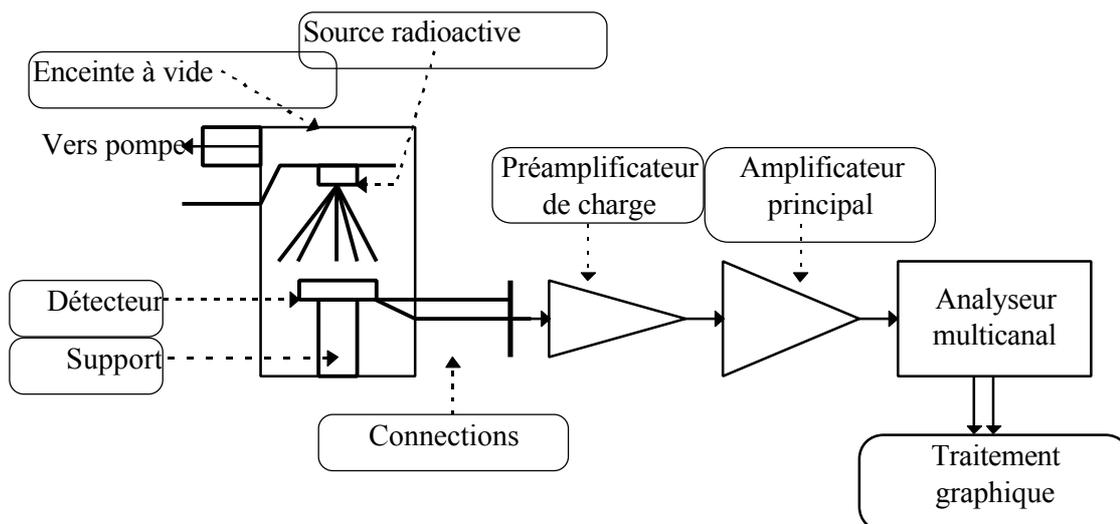


Figure 7.5 : Chaîne de spectrométrie nucléaire pour le test de détection

La figure 7.6 illustre le spectre des particules alpha obtenu expérimentalement

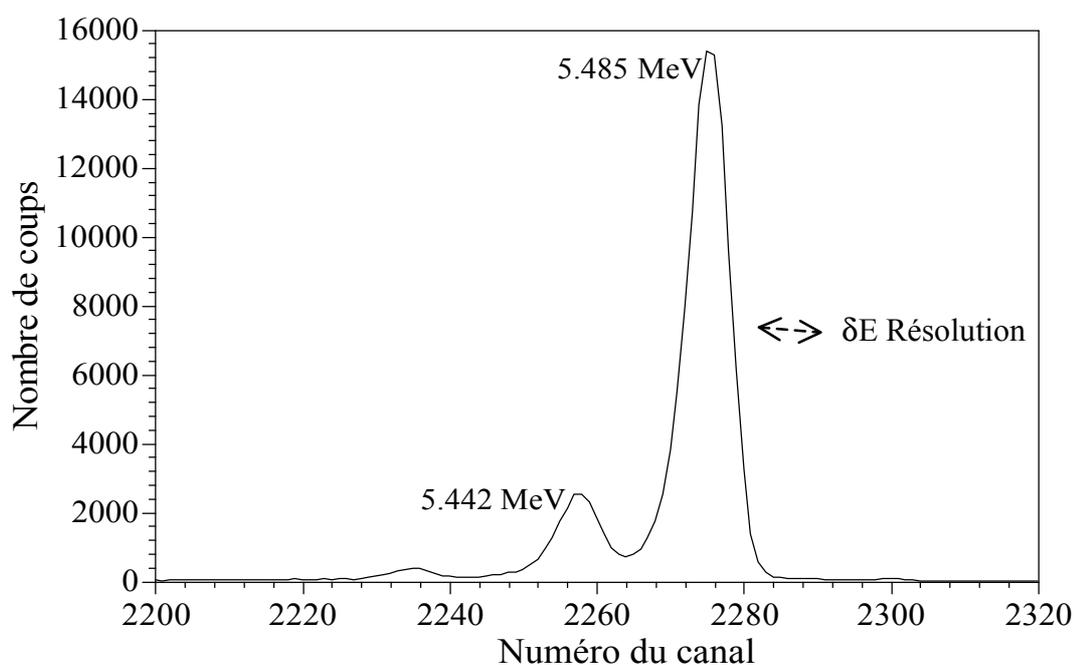


Figure 7.6 : Spectre de particules α de ^{241}Am pour un détecteur à jonction implantée P⁺N.

Les mesures effectuées sur le dispositif précédent ont abouti à déterminer sa résolution énergétique qui est de 18.6 KeV. La source α utilisée est ^{241}Am . Il demeure que cette caractérisation doit être intégrée dans nos modèles pour disposer d'un outil complet de simulation de détecteurs.

7.7 Conclusion :

Ce chapitre a été consacré à la description des étapes technologiques nécessaires à la conception d'un détecteur au silicium à jonction implantée P^+NN^+ . Partant des plaquettes silicium pour usage détecteur (haute pureté, forte résistivité) les étapes technologiques nécessitent les moyens de la photolithographie, de l'implantation ionique à faibles énergies et un moyen fiable de dépôt de couches minces d'Aluminium pour réaliser de contacts métalliques performants. Les caractéristiques du dispositif P^+NN^+ réalisé expérimentalement sont comparées à ceux issus de la simulation. Ces comparaisons donnent un très bon accord. La mesure expérimentale du spectre de résolution n'est pas confrontée aux travaux de simulations qui permettent le calcul numérique de cette résolution. Ce dernier travail reste à entreprendre pour compléter le code de simulation de ce genre de dispositif.

CONCLUSION

Tout au long de ce travail, nous avons œuvré à l'élaboration et la mise au point d'un programme de résolution numérique bidimensionnelle des équations de transport des porteurs de charges dans un dispositif au silicium monocristallin. Les particularités de cette étude résident dans trois principaux thèmes :

- i) Les modèles numériques du traitement séquentiel des équations de transport de charge
- ii) Le régime transitoire
- iii) La modélisation de la génération des paires électrons trous sous l'impact de particules chargées.

Nous avons développé les étapes de conception du dispositif à jonction et les modèles numériques utilisés en simulation. L'orientation globale du travail est la modélisation d'un détecteur de particules chargées conçu avec une jonction superficielle. Cette jonction est réalisée par implantation ionique et les modèles analytiques sont décrits afin de pouvoir les exploiter en modélisation ; dans cette technique, la description des profils consiste à utiliser la distribution convenable des ions implantés qui tient compte de l'implantation latérale étant donné que la structure comporte une couche d'oxyde conçue en masque. Ces étapes sont étudiées en développant des applications et des modèles appropriés pour le programme PROMIS. Cet outil est important car il dispose de modèles analytiques sophistiqués étendus au cas bidimensionnel pour l'implantation ionique et la diffusion.

Tout au long de nos travaux, nous avons mis en œuvre une méthodologie, d'étude des modèles, de programmation avancée et la maîtrise des méthodes numériques de base utilisées en simulation avant de les appliquer au cas réel d'un détecteur réalisé par ailleurs et de comparaître les résultats à ceux issus des mesures expérimentales.

Les paramètres physiques intervenant dans les équations de transport de charge sont pris à partir des modèles classiques utilisés dans la littérature en optimisant leurs applications au cas du dispositif à l'étude. Nous avons tenu compte de la zone fortement dopée qui peut être introduite par un procédé technologique de diffusion ou d'implantation ionique. Cette influence est contenue dans l'expression de la concentration intrinsèque effective exprimée en fonction du rétrécissement de la bande interdite. Les mobilités des porteurs étant le paramètre le plus influant, nous en tenons compte en utilisant le modèle décrit par Scharfetter Gummel. Il tient compte de l'influence de la température, des impuretés ionisées et du champ électrique, plusieurs essais ont montré que le dernier effet est prédominant dans les détecteurs.

Le traitement numérique des équations a été effectué en utilisant une méthode séquentielle qui se base sur le découplage des équations avec le schéma de Gummel. La méthode des différences finies a été utilisée pour passer du système d'équations continue au système discret. La méthode de Scharfetter et Gummel est appliquée pour la discrétisation des densités de courants pour éviter les instabilités du système. Les conditions aux limites associées tiennent compte des propriétés de l'interface oxyde-silicium en introduisant un taux de recombinaison en surface qui s'écrit en fonction de la vitesse de recombinaison des porteurs à cet endroit. Cette condition était incontournable dans notre travail sachant que la surface de l'oxyde couvre la moitié de la largeur du dispositif.

Pour répondre aux besoins de nos calculs un programme a été soigneusement développé pour résoudre les équations de transport en utilisant la méthode de Mayergoyz pour la résolution séquentielle. Dérivée du schéma de Gummel cette méthode a deux principaux avantages : convergence globale assurée sans conditions sur le modèle d'initialisation des variables ; méthode souple à programmer et ne nécessitant pas de machines de hautes performances. Beaucoup de tests d'exécution ont été effectués pour la mise au point finale d'une version validée et adaptée au régime transitoire.

Des résultats obtenus dans les cas des polarisations inverses allant jusqu'au 18 V, on conclut que l'algorithme est stable et qu'il converge globalement. Par contre, dans les cas des polarisations directes, une lourdeur et une instabilité s'observent dès qu'on dépasse une polarisation de 0.35 V, ceci est du au régime de forte injection imposée. Là, le recours à une résolution simultanée des équations est conseillée.

En régime transitoire, l'algorithme est adapté en utilisant la méthode de 'Backward Euler'. Le réseau de discrétisation temporelle est introduit manuellement, opération qui nécessite de revoir et d'introduire une méthode de génération automatique.

L'étude du dispositif est complétée par la modélisation de la génération des paires électron-trous sous l'impact des particules α . La réponse du dispositif à une impulsion instantanée d'une particule, sous une polarisation inverse de 10 V a été simulée. Les résultats obtenus montrent une bonne concordance avec les mesures expérimentales. Les différences sont dues, aux effets de certaines étapes technologiques qui ne sont pas prises en compte, à la géométrie de simulation et des faibles polarisations inverses utilisées en simulation. Les études de modélisation des paramètres physiques et des algorithmes séquentiels et simultanés en fortes polarisations inverses sont à envisager pour mener à bien la simulation des détecteurs fonctionnant généralement sous ses conditions.

Des perspectives intéressantes de développement s'offrent à cet outil de conception en incluant les effets d'autres types de radiations (Gamma, Rayons X...). De même, le couplage à un mode de résolution simultané des équations pourrait étendre les possibilités de calcul en régime de forte injection. Ce dernier mode ralenti considérablement la convergence des procédures itératives de calcul de notre programme compte tenu du fort découplage des équations.

Nous signalerons également les développements possibles et intéressants du calcul du spectre de résolution qui devront permettre une corrélation quantitative avec les caractéristiques expérimentales des dispositifs de détection.

Finalement, cette étude qui a atteint l'ensemble des objectifs initialement ciblés, nous a permis d'acquérir un savoir-faire en conception assistée par ordinateur d'un dispositif détecteur semiconducteur. Le développement de modèles spécifiques pour le programme PROMIS a, en outre, enrichi notre travail en abordant la simulation des procédés technologiques (implantation ionique et la diffusion thermique). Nous avons mis en œuvre un programme fini et complet pour le traitement séquentiel des équations en régime permanent et transitoire qui, en première application, tient compte de la génération des porteurs de charges sous l'impact des particules α . La mise au point des procédures graphiques à trois dimensions a été également un domaine où nos efforts ont été concluants pour l'exploitation des données des calculs.

Nous souhaitons enfin, que notre contribution puisse apporter une aide efficace pour le progrès des travaux de simulation et de conception dans nos laboratoires et un soutien aux développements technologiques coûteux des dispositifs semiconducteurs.

APPENDICES

APPENDICE A :

STRUCTURE DU PROGRAMME DE RESOLUTION SEQUENTIELLE DES EQUATIONS DU SEMICONDUCTEUR

Le programme est conçu pour la résolution séquentielle des équations régnant dans un dispositif semiconducteur à jonction. Il est écrit en FORTRAN, composé globalement d'un programme principale et d'une bibliothèque comportant les modèles physiques et les routines de la méthode de la résolution séquentielle (Chapitre 4). Son exécution consiste à écrire un fichier de données en format texte respectant une syntaxe simple où on précise généralement :

- Les données de la géométrie du dispositif
- Les fichiers input/output
- Le profil du dopage
- Les paramètres de la résolution du système d'équations

La structure du dispositif doit être de la forme suivante :

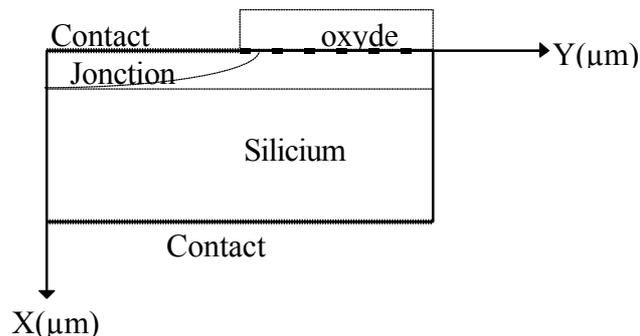


Figure a.1 : Structure de simulation bidimensionnelle

L'adaptation du programme pour d'autres structures est possible en modélisant convenablement les conditions aux limites (interfaces oxyde-silicium, contacts métalliques, frontières latérales) et les paramètres physiques des régions du substrat (matériau de base, dimensions...)

Après chaque exécution, le programme génère, selon les données du fichier input, deux fichiers ; Le premier donne le résumé de chaque étape du programme et les détails du déroulement des itérations. Ce fichier permet de contrôler et de suivre les différentes étapes de l'application. Le deuxième, contient en format texte, les données point par point du profil du dopage et des solutions intermédiaires.

Le programme principal est décrit dans l'organigramme suivant :

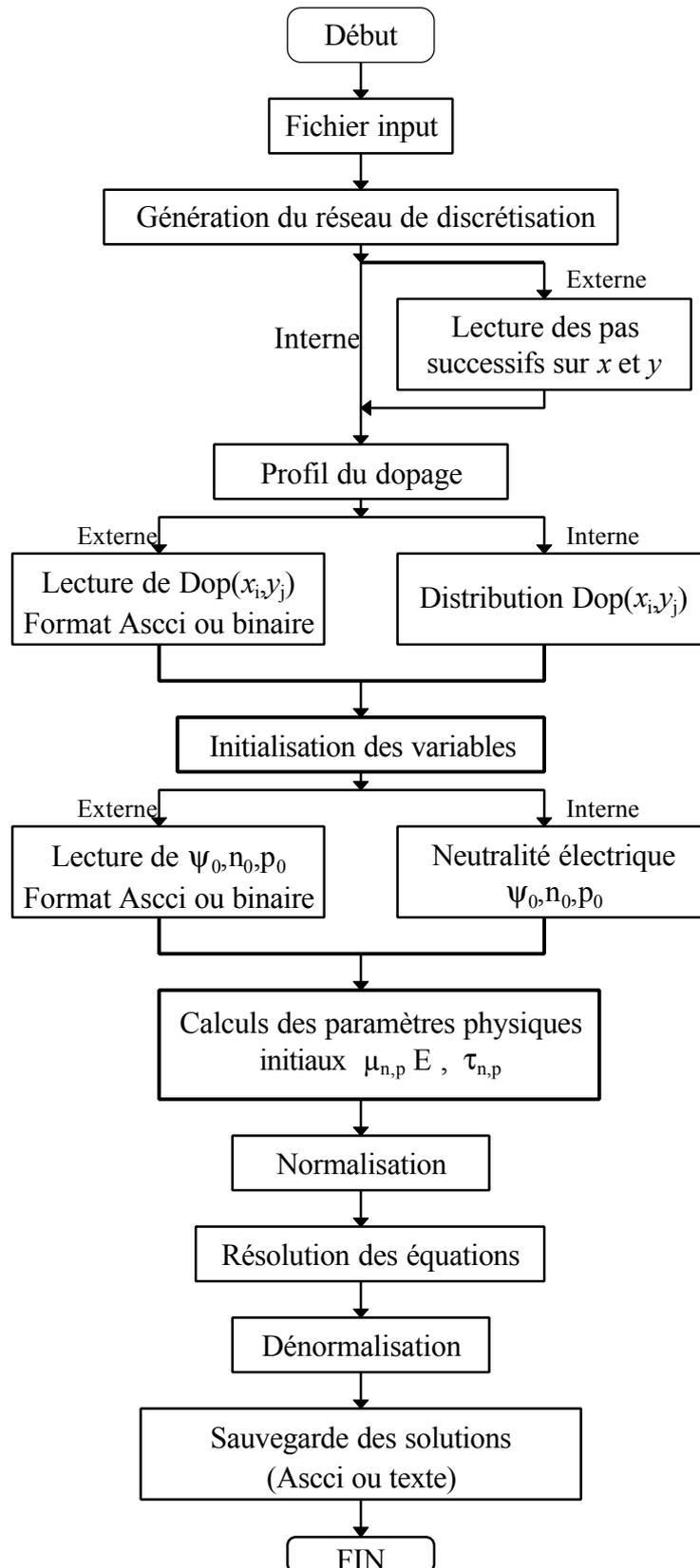


Figure a.2 : Différentes parties constituant le programme principal

La partie résolution des équations est composée d'une routine comportant la boucle de Gummel et faisant appel aux routines de résolution de l'équation de Poisson, de l'équation

de continuité des électrons et de l'équation de continuité des trous successivement. Chacune de ces sous routines est composée d'une boucle interne et d'une boucle externe. (Schéma décrit au chapitre 4).

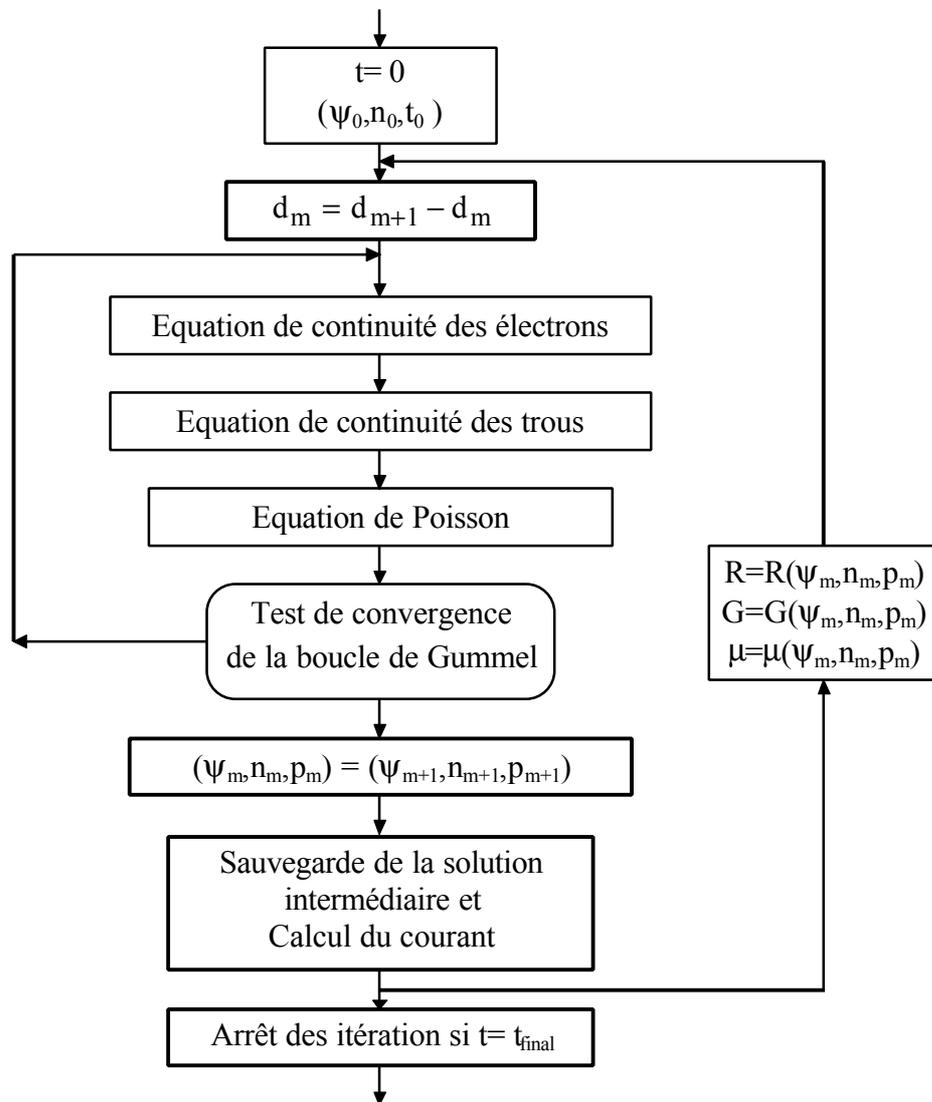


Figure a.3 : Différentes parties constituant la routine résolution des équations

Les résultats du programme sont donnés en fichiers texte ou binaires avec le format suivant :

WRITE(UNIT,*)SYSTXT	<i>Titre Sommaire du fichier (72 caractères)</i>
WRITE(UNIT,*)TEXT	<i>Titre détaillé (72 caractères)</i>
WRITE(UNIT,*)NE,NX,NY	<i>Nombre de variable et nombre de lignes x et y</i>
WRITE(UNIT,*)	
WRITE(UNIT,*)	
WRITE(UNIT,*)	<i>Libres</i>
WRITE(UNIT,*)	
WRITE(UNIT,*)	
WRITE(UNIT,*)(POSX(I),I=1,NX)	<i>Positions x des noeuds</i>
WRITE(UNIT,*)(POSY(I),I=1,NY)	<i>Positions y des noeuds</i>
DO 10 IE=1,NE	
DO 10 I=1,NX	
10 WRITE(UNIT,*)(W(IE,(I-1)*NY+J),J=1,NY)	<i>Les variables</i>

Des programmes interfaces sont écrits facilement pour l'exploitation de ces résultats avec d'autres logiciels graphiques.

Exemple :

Nous donnons ici un exemple d'exécution du programme pour la structure étudiée dans les précédents chapitres pour le cas de la résolution des équations à l'équilibre thermodynamique, dans le cas stationnaire, en tenant compte d'une génération et enfin en tenant compte du cas transitoire. Le fichier input s'écrit comme suit :

```
1          START
2          -----
3          SIMULATION BIDIMENSIONNELLE D'UN DETECTEUR P+NN+
4          -----
5          66 66
6          'DETECTEUR.CNT' .F. 'DETECTEUR.PRI' .T. 'SOLUTION.SAV'
7          .F. 'PHK.DAT' .T.
8          .T. 2.5 0.01 1.0E+12 1.0E-3
9          'EXTERN' 'SAVE' .F. 'DOPAGE.SAV' 'BOREIN.SAV'
10         'EXTERN' 'SAVE' 'SOLUTION0.SAV'
11         .T. 'SRH' .T. 'AUG' .T. 'GEN'
12         .T. ,ALP' 1.1 200 0.0 1.0E-06
13         'MAYERG'
14         1000 1.0E-03 2
15         50000 1.0E-10 50000 1.0E-10 0 0
16         50000 1.0E-10 50000 1.0E-12 0 0
17         50000 1.0E-10 50000 1.0E-12 0 0
18         0.00 10.00
19         .F. 'INTERN' 'DSTIME.DAT' 0.0E-09 0.5E-09
20         2.0E-09 3.0E-09 0.5E-09 0.5E-09 1 .F.
21         END
```

La première et la dernière ligne indiquent le début et la fin du fichier, à la cinquième ligne, on précise le nombre de lignes parallèles respectivement à x et y du réseau de discrétisation. À la sixième ligne, on précise les noms de fichier de sortie permettant de consulter les étapes intermédiaires des calculs, on précise aussi les fichiers contenant les résultats en format texte ou binaire, ces fichiers sont écrits selon un standard choisi dans toute la programmation. Les variables logiques précédant chaque nom de fichier contrôlent la génération ou non de ce fichier.

À la huitième ligne, on précise l'existence ou non de l'oxyde sur la frontière $x=0$, la position y du premier coin de l'oxyde et les paramètres de l'interface oxyde-silicium (densité d'états d'interfaces et densité de charges dans l'oxyde). La neuvième ligne précise le type du profil du dopage à utiliser (INTERN pour l'utilisation du profil implanté de type Gaussien, EXTERN pour l'utilisation d'un profil externe généré par d'autres programmes en format binaire ou ascii). À la dixième ligne, on précise le mode d'initialisation des variables, INTERN pour l'utilisation de la solution de l'équilibre et de neutralité électrique, EXTERN pour charger une solution à partir d'un fichier externe binaire ou ascii issu d'une autre exécution ou d'un autre programme. À la onzième et douzième lignes, on précise les types de recombinaisons à utiliser, SRH et Auger et les données de la fonction génération des porteurs. À la treizième ligne, on précise la méthode de résolution à utiliser (Newton ou Mayergoz). Les paramètres de la boucle de Gummel sont précisés à la

quatorzième ligne, Les trois lignes suivantes indiquent successivement les paramètres des boucles internes et externes de chaque équation (potentiel, électrons et trous). A la dix-huitième ligne, on indique les polarisations appliquées aux contacts P+ et N. Les deux lignes qui suivent précisent l'utilisation ou non du régime transitoire et ses paramètres respectifs t_0 , t_f et Δt initial.

Ce programme est testé et validé par comparaison de ses résultats à ceux issues du programme PC-1D pour une même structure unidimensionnelle. Sa construction simple et structurée offre l'avantage de pouvoir modifier, sans difficultés, les différentes parties du programme source. Des routines et des modèles physiques peuvent être intégrés facilement pour l'adapter au cas d'une résolution simultanée ou au cas tridimensionnel.

APPENDICE B :

STRUCTURE DU PROGRAMME DE SIMULATION DES PROCÉDES TECHNOLOGIQUES DES DISPOSITIFS SEMICONDUCTEURS 'PROMIS'

PROMIS (**PRO**cess **MO**delling **I**n **S**emiconductors) est un programme de simulation bidimensionnelle des processus d'implantation ionique et de diffusion dans les semiconducteurs. La structure évoluée du programme offre la possibilité d'intégrer des modèles physiques sophistiqués pour la simulation des différentes phases d'un processus technologique et pour le traitement d'une grande classe d'équations elliptiques et paraboliques régnant ces processus.

Particulièrement, il intègre des modèles physiques complets et sophistiqués de l'implantation ionique. Il utilise le modèle analytique pour la description des moments latéraux de la distribution d'ions. Il possède aussi un simulateur Monte Carlo complet pour l'implantation d'un élément quelconque dans un matériau de structure arbitraire.

Les processus qui font intervenir les équations paraboliques, le programme effectue la résolution simultanée des équations en utilisant la méthode des différences finies à cinq points pour le cas bidimensionnel et à trois points pour le cas unidimensionnel. La discrétisation temporelle utilise la méthode de 'Backward Euler'. Pour la discrétisation spatiale de la densité de courant la méthode de Scharfetter Gummel est utilisée. Les systèmes non linéaires sont résolus par la méthode de Newton. Deux méthodes de résolution des systèmes linéaires sont possibles, la méthode SOR par block et la méthode de Gauss. D'autres routines peuvent être intégrées facilement. L'adaptation du réseau de discrétisation spatiale et temporel s'effectue automatiquement par le contrôle des critères d'insertion et d'effacement de lignes.

Pour les nouveaux modèles et les coefficients des équations à résoudre l'utilisateur doit développer un ensemble de routines définissant les coefficients des équations, les paramètres physiques et les conditions aux limites.

Le source du programme est écrit en FORTRAN, il s'exécute sur le système VAX VMS. La version de ce programme possède des routines de gestion mémoire virtuelle pour les machines vectorielles ou les systèmes Vax et stations Sun. Des efforts ont été fournis pour l'adaptation de ces routines sur les machines Intel X86 et Pentium en utilisant les compilateurs fortran sous dos ou sous Windows.

Une application de ce code suit en général deux étapes :

- Ecrire un fichier input suivant une syntaxe propre au logiciel définissant les configurations, réseau - fichiers entrées/sorties - géométrie du dispositif - les différentes étapes de l'application.
- Ecrire éventuellement les routines auxiliaires en FORTRAN pour la définition des paramètres dont les modèles ne sont pas disponibles dans la bibliothèque principale.

L'exécution du programme PROMIS est basée sur un programme interpréteur (PARSER) qui lit le fichier input et génère un fichier contenant le code source (PASS2.FOR) qui contient les exécutions relatives à l'application en cours.

Le déroulement de l'exécution du programme se résume sur le schéma suivant :

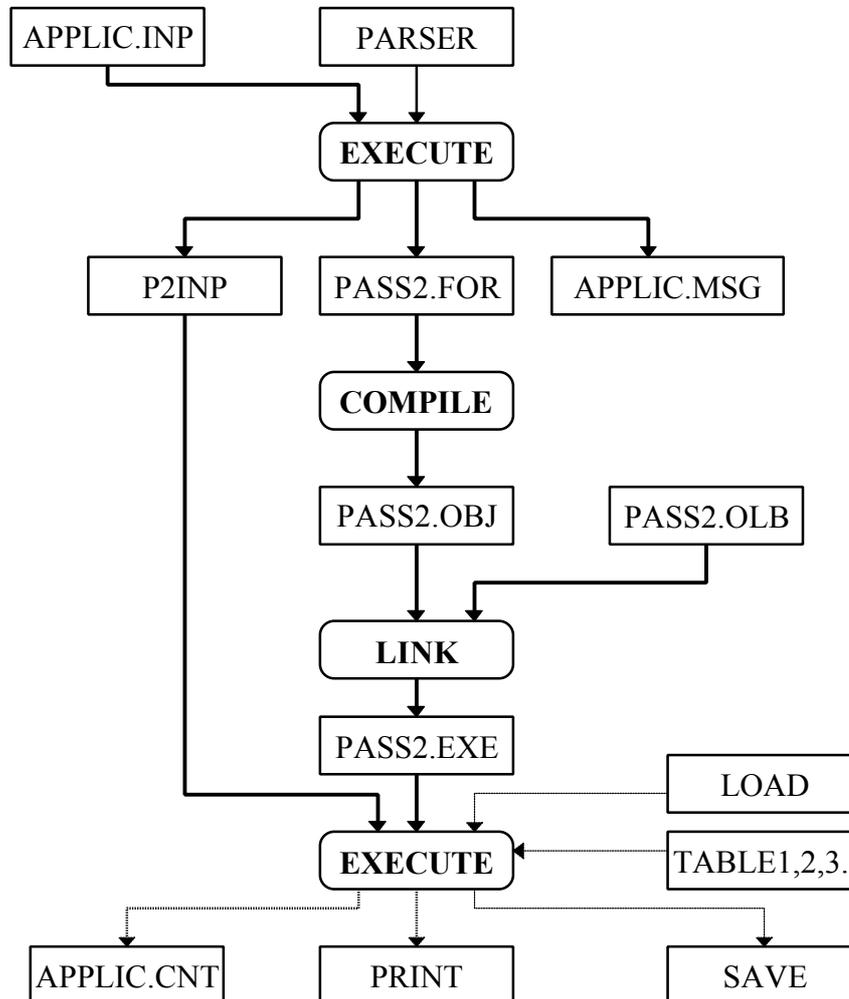


Figure a.4 : Les différentes phases d'exécution du programme PROMIS

Une fois le fichier input est écrit l'exécution du programme PARSER génère, en plus du fichier source pass2.for, deux autres fichiers INPUT.MSG et P2INP. Le premier est un fichier texte ou il réécrit les commandes de l'input et éventuellement les erreurs de syntaxe ; Le deuxième fichier, est en format binaire, il contient les données successives qui permettent de contrôler l'application. Dans le cas où le fichier input est correct on procède à la compilation du code source pass2.for puis l'édition des liens avec la bibliothèque pass2.olb et éventuellement d'autres bibliothèques. Un fichier exécutable pass2.exe se crée par conséquent s'il n'y a pas d'erreurs de compilation ou de liens. Pendant l'exécution de ce fichier le fichier P2INP est lu et à la fin, un fichier de contrôle est créé résumant ainsi toutes les étapes de cette application. Des données binaires externes peuvent être lues pendant l'exécution en format (SAVE et LOAD) ou en format de tables.

En général, les applications en technologie des semiconducteurs le temps d'exécution peut être élevé lorsque le processus contient plusieurs étapes ; pour cela le code PROMIS offre la

possibilité d'interrompre l'exécution temporairement et la poursuivre au moment voulu à partir des données de sauvegarde de la dernière interruption.

Cette structure du programme offre les principaux avantages :

- Le programme principal PASS2.FOR utilise la dimension exacte des tableaux fixée dans le fichier input, ceci évite d'utiliser inutilement de grandes dimensions de tableaux qui peuvent limiter l'espace mémoire de la machine.
- Le programme interpréteur ajoute à chaque application les routines non utilisées de la bibliothèque en éliminant toutes les instructions exécutables, ceci permet de ne pas charger les routines inutiles pour l'application et de ne pas alourdir l'exécutable.

Les équations paraboliques traitées par le programme PROMIS en régime simultané et transitoire sont dérivées de la forme des équations de diffusion dans les semiconducteurs. Leur forme générale s'écrit comme suit :

$$\sum_{j=1}^N \alpha_{ij} \cdot \frac{\partial w_j}{\partial t} + \left(\frac{\partial J_i^x}{\partial x} + \frac{\partial J_i^y}{\partial y} \right) + \gamma_i = 0 \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Avec comme définition des densités des courants :

$$\begin{aligned} J_i^x &= \sum_{j=1}^N \left(a_{ij}^x \cdot \frac{\partial w_j}{\partial x} + b_{ij}^x \cdot w_j \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + c_{ij}^x \cdot w_j \right) + d_i^x \\ J_i^y &= \sum_{j=1}^N \left(a_{ij}^y \cdot \frac{\partial w_j}{\partial y} + b_{ij}^y \cdot w_j \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} + c_{ij}^y \cdot w_j \right) + d_i^y \end{aligned} \quad (2)$$

w_j sont les variables des équations, N est le nombre d'équations. ψ correspond à l'une des variables w_j .

Le premier terme de l'équation (2) correspond à la composante de diffusion, le deuxième terme correspond à la composante de dérive, le troisième terme correspond à la composante de convection et le dernier terme est une constante additive. Le coefficient α est généralement une matrice unité, γ représente le taux de génération recombinaison.

Les conditions aux limites sont définies sur chaque frontière de la structure de simulation (figure a.1) qui est généralement rectangulaire. Elles sont écrites sous la forme suivante :

$$\sum_{j=1}^N \beta_{ij} \cdot J_j^n + \phi_i = 0 \quad (3)$$

J_j^n est la j^{me} composante normale à la surface de la densité de courant.

Application :

Un modèle complet pour la résolution semi-séquentielle des équations en utilisant le schéma de Gummel est développé et testé en ajoutant des codes supplémentaires du fait que le code PROMIS ne traite pas le cas séquentiel. Ces résultats, encore une fois, valident concrètement nos résultats et les résultats comparés donnent un accord parfait.

Le modèle est décomposé en deux parties, la première consiste à simuler toutes les phases du procédé technologique de réalisation du dispositif et la deuxième consiste à résoudre l'équation de Poisson seule puis les équations de continuités simultanément. La structure est la même que celle prise dans le chapitre 4.

Les principaux résultats en régime stationnaire et à l'équilibre sont représentés aux figures suivantes.

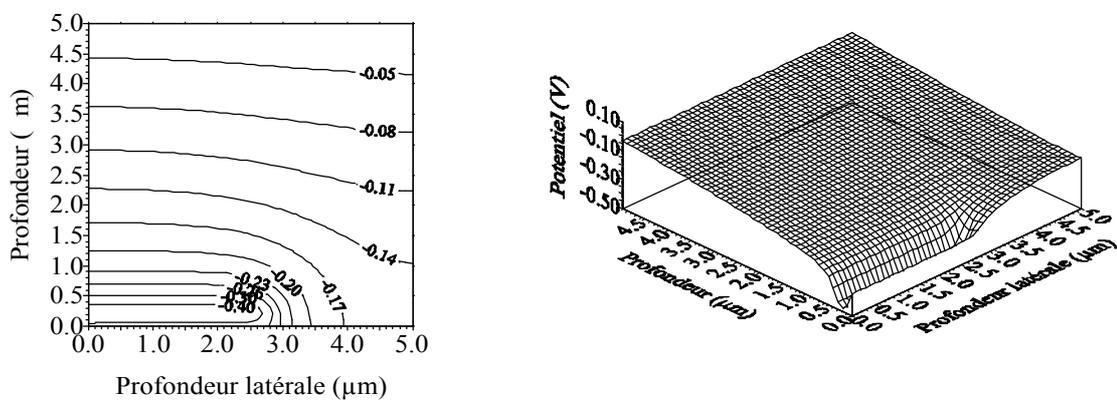


Figure a.5 : Potentiel électrostatique à l'équilibre obtenue avec le modèle développé pour PROMIS

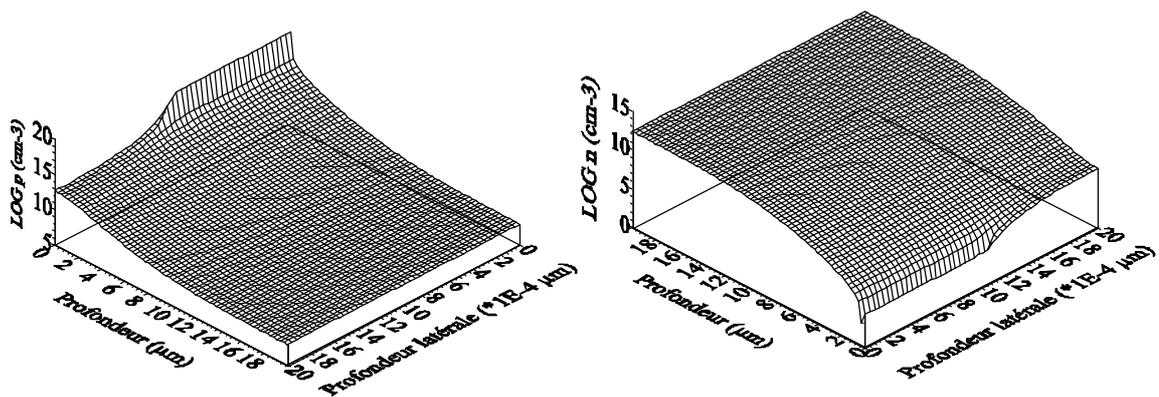


Figure a.6 : Concentration des électrons et des trous à l'équilibre obtenue avec le modèle développé pour PROMIS

En conclusion, le programme PROMIS est un outil numérique très puissant pour la simulation bidimensionnelle des différentes phases de la conception technologique de dispositifs semiconducteurs. Il englobe les modèles de l'implantation ionique, de la diffusion thermique et les différents recuits. Il reste l'outil complet pour entamer l'étude par simulation d'un dispositif à partir des phases de sa conception jusqu'à sa caractérisation par un calcul de la caractéristique $I(V)$ ou $C(V)$ s'il s'agit des composants à jonctions.

REFERENCES

1. S. Selberherr Springer Verlag Wien New York 1984
2. Christopher M Snowden World Scientific Publishing 1986
3. C. Kittel 5^{ime} édition Dunod 1983
4. S. M. Sze 2^d édition 1981
5. Aymerich-Humett X. Serra-Mestres F. Millan J. Solid St. Elect. 24 10 1981
6. M. T. Abuel Ma'atti Sol. St. Electronics. 37 N° 7 1994
7. Mock, M. S. Sol. St. Elect. 16 1973
8. Stratton R. IEEE Trans. Elect. Dev. Ed 19 12 1972
9. Wolfgang Fichtner Donald J. Rose IEEE Trans. Elect. Dev. Ed 30 9 1983
10. P. Leturcq G. Rey Dunod univ. 1978
11. Kireev, P. S. MIR publishers 1978
12. M. Boumaour These d'état univ. Kath. De Louvain 1984
13. Susan P. Edwards Katholike univ. Leuven 1988
14. F. F. Wang North Holand Publishing company Amsterdam New York 1981
15. T. Hedjarsi thèse de Magister UDTs 1993
16. User Manual of PROMIS 1991
17. User Manual of SUPREM 3
18. G. Hobler E. Langer S. Selberherr S. Sol. Stat. Electron. 30 N°4 1987
19. W. Jungling P. Pichler S. Selberherr E. Guerrero H. W. Potzl IEEE trans. Elect. Dev. 32 N°1 1985
20. W. Jungling P. Pichler S. Selberherr E. Guerrero H. W. Potzl Proc. Nasescode IV p477 1985
21. G. Hobler S. Selberherr Proc. Nasescode V conf. P225 1987
22. Gibbons J. F. Mylroie Appl. Phys. Lett. 22 N°11 1973
23. Ryssel, H. Proc. VLSI Process and Device modeling pp 1-41, Katholike Univ. Leuven 1983
24. Mei L. Dutton R. W. Hansen S. E. Repport G-201-13, Stanford University 1982
25. Ryssel H. Habberger K. Hoffmann K. Prinke G. Dumcke R. Sachs IEEE trans. Elect. Dev. ED27 1980
26. Antoniadis D. A. Process and Device Simulation for MOS VLSI circuits The Hague Martinus Nijhoff 1983
27. Slotboom, De graff H. C. Sol. Stat. Elect. 19 p 857 1976

28. Del Alamo J. A. Swanson R. M. IEEE Trans. Elect. Dev. ED31 p1878 1984
29. Ghannam M. Y. Ph. d. dissertation Katholike univ. Leuven 1985
30. Del Alamo J. A. Swanson R. M. IEEE Trans. Elect. Dev. ED34 p1580 1987
31. Morales-Acevedo A. Jour. Appl. Phys. 65 5 2121 1989
32. Shockley W. D. Van Nostrand Company INC 7th edition New Jersey 1959
33. Grove A. S. New York Dunod 1971
34. King, R. R. Sinton R. A. Swanson R. M. IEEE trans. Elect. Dev. ED 37 365 1990
35. Queisser H. J. Sol. Stat. Electron 21 1495 1978
36. Chynoweth A. G. Phys. Review 109 1537 1958
37. Sharfeter D. L. Gummel H. K. IEEE Trans. Elec. Dev. ED16 64-77 1969
38. Caughey D. M. Thomas R. E. Proc. IEEE 52 2192 1967
39. Adler, M. S. Sol. Stat. Elect. 26 N° 5 387-396 1983
40. Andre M. thèse 3^{ime} cycle, Lyon 1972
41. H. Boubekeur thèse de Magister UDTs 1993
42. Mock, M. S. Pure and Appl. Math 25, 781 1972
43. Mock, M. S. SIAM J. Math. Anal. 5, N°4, 597 1974
44. Mock, M. S. J. Math. Anal. Appl. 49, 215 1975
45. Bank, R. E. Jerome, J. W., Rose, D. J. Report 82-11274-2 Bell Laboratories 1982
46. H. K. Gummel IEEE Trans. Electron Devices ED-11 1964
47. DeMari, A. Sol. Stat. Elec. 11, 33 1968
48. DeMari, A. Sol. Stat. Elec. 11, 1021 1968
49. I. D. Mayergoyz J. Appl. Phys. 59 1 1986
50. Can E. Korman I. D. Mayergoyz J. Appl. Phys. 68 3 1990
51. Qi Lin Neil Goldsman Gwo-Chung Tai Sol. Stat. Electronics 37 2 1994
52. D. S. Kershaw Journ. Comp. Phys. 26 1978
53. C. den. Heijer Nascocode IV Ed. J. J. H. Miller 19-21 1985
54. Douglas J. Rachford H. H. Trans. Amer. Math. Soc. 82 p421 1956
55. Peaceman D. W. Rachford H. H. J. Siam 3 p28 1955
56. I. D. Mayergoyz J. Appl. Phys. 59 1 1986
57. W. W. Keller J. Appl. Phys. 61 11 1987
58. Can E. Korman I. D. Mayergoyz J. Appl. Phys. 68 3 1990
59. M. Gaitan I. D. Mayergoyz C. Korman , IEEE Trans. Elect. Devices ED-37 1990
60. Can E. Korman I. D. Mayergoyz G. C. Tai J. Appl. Phys. 73 2611 1993
61. R. Madabhushi C.E. Korman I. Mayergoyz Sol. St. Electronics 39 1 1996

62. Qi Lin Neil Goldsman Gwo-Chung Tai Sol. Stat. Electron 36 2 1993
63. Qi Lin Neil Goldsman Gwo-Chung Tai Sol. Stat. Electronics 37 2 1994
64. T. I. Seidman S. C. Choo Sol. Stat. Electron 15 1972
65. L. Laanab Thèse de doctorat Université Paul Sabatier Toulouse 1993
66. Basore P. A. Proceeding of the Sixth Biennial University/Government/ Industry Microelectronics Symposium, p. 73-76
67. Cottrell P. E. Buturla E. M. Proc Nascod I p 31-64 1979
68. Kreskowski J. P. Grubin H. L. Proc. Nascod III p 155-160 1983
69. Mock M. S. J. Comp. Phys. 21 20-37 1976
70. Mock M. S. Proc. Nascod I Conf. P120 1979
71. Mock M. S. Solid Stat. Elelc. 24 9559 1981
72. Mock M. S. Dub lin Boole Press 1983
73. Mock M. S. SIAM J Math. Anal. 5 N°4 p597 1974
74. G. C. Tai Can E. Korman I. D. Mayergoz Sol. Stat. Electronics 37 N°7 1994
75. R. Madabhushi C.E. Korman I. Mayergoz Sol. St. Electronics 39 1 1996
76. Zheng Li and H. W. Kraner International Conference on Advanced Technology and particle physics Italy 1992
77. F. Lemeilleur, M. Glaser, E.H.M. Heijine ... CERN GENEVA International Conference on Large scale Applications and radiation Hardness of semiconductor Detectors Italy 1993
78. V. Eremin N. Strokan, E. Verbitskaya Z. Li NIM A 372 1996
79. V. A. J. van Ligt J. H. Alexander IEEE Trans. Nucl. Science NS 14 N6 1967
80. G. Cavalleri et al. NIM 21 1963
81. P.A Tove K. Falk NIM 29 1964
82. Li H. W. Kraner NIM 308 1991
83. G. Cavalleri et al, NIM 92 1971
84. C. F. Williamson, J-P Boujot J. Picard tables of range and stopping power of chemical element for charged particles. Nim 321 1992
85. D. Pitzl and al NIM 311 1992
86. E. Gatti P. F. Manfredi Riv Nuovo Cim 9 1 1986
87. H. W. Kraner et al. NIM a 326 1993
88. Z. Li. et al. IEEE Trans. Nucl. Sci 40 4 1993
89. Ali Salem A. W. Smith K. F. Brennan IEEE Trans. Elect. Dev. 41 N°7 1994
90. J. C. Fontaine thèse doctorat CRN Strasbourg 1993

