



**HAL**  
open science

# Etude des mécanismes de transport dans les diodes tunnels de type MIS associant ferromagnétiques et silicium

Rabia Benabderrahmane

► **To cite this version:**

Rabia Benabderrahmane. Etude des mécanismes de transport dans les diodes tunnels de type MIS associant ferromagnétiques et silicium. Matière Condensée [cond-mat]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2009. Français. NNT: . tel-00544391

**HAL Id: tel-00544391**

**<https://theses.hal.science/tel-00544391>**

Submitted on 8 Dec 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# UNIVERSITE JOSEPH-FOURIER -GRENOBLE I-

## THESE

Pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR

Ecole Doctorale « Electronique, Electrotechnique, Automatique, Télécommunications,  
Signal »

Spécialité : « Micro et Nano Electronique»

Par

**Rabia BENABDERRAHMANE**

Titre :

**Etude des mécanismes de transport dans les diodes tunnels de type MIS  
associant ferromagnétiques et silicium**

Directeur de thèse : Ahmad BSIESY

Soutenue le 13 novembre 2009 devant le jury composé de

### JURY

M. René Louis Inglebert, Professeur UJF,	Président
M. Didier Goguenheim, Professeur ISEN Toulon,	Rapporteur
M. Raouf Bennaceur, Professeur Faculté des sciences Tunis,	Rapporteur
M. Mehdi Kanoun, Dr. Ingénieur ALTIS Semiconductor,	Examineur
M. Ahmad Bsiesy, Professeur UJF,	Examineur

Thèse préparée au laboratoire SPINTEC  
(UMR 8191, CEA/CNRS/INPG/UJF)

# Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier chaleureusement Alain Schuhl, directeur du SPINTEC, pour m'avoir donné la possibilité d'effectuer cette thèse au sein de son équipe.

Merci à M. Didier Goguenheim (ISEN de Toulon) et à M. Raouf Bennaceur (Univ. Des sciences Tunis) d'avoir accepté d'être rapporteur de mon travail.

Merci à M. René Louis Inglebert pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma soutenance.

Un grand merci à Ahmad Bsiesy, mon directeur de thèse pour la confiance qu'il m'a donnée depuis mon stage de fin d'étude. Je le remercie pour sa méthode de diriger ces travaux de thèse, sa disponibilité, son sérieux.

Je remercie également Mehdi Kanoun de m'avoir aidé durant mon stage et ma première année de thèse. J'ai bien profité de ses connaissances dans le domaine des semi-conducteurs.

Je n'oublie pas de remercier également Claire Baraduc, Nicolas Bruyant, Hervé Achard .....

Finalement un grand merci à ma famille : mon mari, mes parents .....

# Sommaire

Introduction générale.....	14
Chapitre 1 : L'électronique du spin.....	17
I. L'électronique du spin : .....	18
1. Phénomène de magnétorésistance :.....	18
2. La jonction tunnel magnétique :.....	18
II. Quelques exemples d'applications de la spintronique dans l'industrie:.....	19
1. Les têtes de lecture :.....	19
2. Les mémoires MRAM (Mémoire magnétique à accès aléatoire) : .....	20
2.1. Avantages des MRAMs: .....	20
2.2. Principe de fonctionnement d'une MRAMs: .....	21
III. La spintronique dans les dispositifs à semi-conducteurs : .....	22
1. L'injection du spin dans les semi-conducteurs : .....	22
1.1. Les sources des électrons polarisés en spin :.....	22
1.1.1. Les métaux ferromagnétiques : .....	22
1.1.2. Les semi-conducteurs magnétiques dilués :.....	23
1.2. Les problèmes liés à l'injection de spin dans les semi-conducteurs :.....	24
2. Le transport du spin dans les semi-conducteurs :.....	26
2.1. Les mécanismes de relaxation des spins : .....	26
2.2. La manipulation du spin dans les semi-conducteurs :.....	26
3. La collection du spin : .....	28
3.1. La détection optique de la polarisation du spin :.....	28
3.2. La détection électrique de la polarisation du spin :.....	28
3.2.1. Mesure par vanne de spin :.....	28
3.2.2. Mesures dites "non locales" : .....	29
4. La spintronique dans le silicium : .....	29
4.1. Motivations pour l'utilisation du silicium :.....	29
4.2. Exemples d'études de l'injection de spin dans le silicium :.....	30
4.2.1. Transistor à diffusion de spin :.....	30
4.2.2. Mise en évidence de magnétorésistance dans les structures verticales.....	32
4.2.3. Mise en évidence de l'injection de spin par des mesures non locales .....	33
5. Conclusion:.....	35
IV. Dispositif de test utilisé dans l'étude de l'injection du spin dans le silicium: .....	35
1. Introduction : .....	35
2. Le dispositif test : .....	36
2.1. Description et principe de fonctionnement: .....	36
3. Les différents dispositifs tests : .....	38
4. Choix des barrières tunnels utilisées : .....	41
4.1. Principales propriétés électriques de SiO <sub>2</sub> :.....	41
4.2. Principales propriétés d'Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : .....	41
5. Etude des propriétés magnétiques des électrodes : .....	42
6. Problèmes liés à la présence d'une électrode magnétique:.....	44
6.1. La diffusion des atomes magnétiques : contamination du substrat:.....	44
6.2. La diffusion des atomes magnétiques : contamination de la barrière: .....	45
Référence:.....	47
Chapitre 2 : Etude des propriétés électriques de la structure métal ferromagnétique/ isolant/ silicium.....	50

I. Introduction à la théorie des condensateurs MOS :	51
1. Condensateur parfait:	51
2. Structure MOS réelle:	55
2.1. Les différentes charges dans l'oxyde :	55
2.1.1. La charge fixe :	55
2.1.2. La charge piégée :	56
2.1.3. La charge mobile ionique :	56
2.1.4. La charge piégée des états d'interface :	56
2.2. Caractéristiques et classification des défauts :	57
II. Propriétés des états d'interface :	58
1. Introduction :	58
2. Les différents types d'états d'interface :	59
3. Densité des états d'interface :	60
4. Distribution énergétique :	60
5.1. Probabilité d'occupation d'un piège :	61
5.2. Charge et capacité des états d'interface en régime statique :	62
5.3. Charge et capacité des états d'interface en régime permanent :	64
6. Détermination des états d'interface :	65
6.1. A partir des caractéristiques $C(V_g)$ :	65
6.1.1. L'effet de « Stretching » sur la $C(V_g)$ due aux états d'interface:	65
6.1.2. La contribution capacitive des états d'interface :	66
6.1.3. Méthode de la capacité haute fréquence:	67
6.1.4. Méthode de la capacité basse fréquence:	69
6.1.5. Méthode de la capacité basse fréquence – Haute fréquence:	69
6.2. Méthode de la conductance:	70
6.2.1. Introduction :	70
6.2.2. Technique de mesure $G-\omega$ :	71
6.2.3. Fluctuations du potentiel de surface :	74
III. Caractérisation électrique des structures MOS avec grille ferromagnétique:	75
1. Etude des états d'interface dans une structure MOS à grille ferromagnétique :	75
2. Etude des défauts électriques à la surface du silicium dans une structure MOS à grille ferromagnétique:	78
3. Etude de l'effet de la grille ferromagnétique sur la durée de vie des porteurs dans le silicium:	79
3.1. La technique $C(t)$ :	79
3.2. Résultats et discussion :	82
4. Conclusion:	85
IV. Caractérisation de l'interface oxyde/silicium dans les structures à oxyde ultra mince:	85
1. Résultats obtenus sur les structures MOS avec oxyde de silicium:	86
1.1. Caractéristiques $C(V_g)$ en fonction de la fréquence : Etude des états d'interface	86
1.2. Effet de recuit :	86
1.3. Effet de la température de mesure sur la densité d'états d'interface :	88
1.5. Conclusion :	90
2. Etude des structures MOS à grille ferromagnétique et avec oxyde d'aluminium:.....	90
2.1. Etude des états d'interface :	90
2.2. Effet de recuit sur les caractéristiques $C(V_g)$ :	91
2.3. Effet de l'épaisseur d'oxyde sur la densité de défauts d'interface :	94
2.5. Conclusion :	94
3. Etude de la section efficace de capture des états d'interface par la méthode $G-\omega$ : ....	95

3.1. Détermination de la densité des états d'interface et comparaison avec la méthode $C(V)_{hf-lf}$ :	95
3.2. Détermination de la section efficace de capture :	96
V. Conclusion :	97
Référence:	99
Chapitre 3 : Etude des mécanismes du transport dans la structure Métal ferromagnétique/ isolant/silicium	103
I. Les différents mécanismes de conduction à travers les oxydes :	104
1. La conduction limitée par les électrodes :	104
1.1. L'émission thermoïonique :	104
1.2. Le mécanisme tunnel direct:	104
1.3. Le mécanisme Fowler-Nordheim :	105
2. La conduction limitée par le volume de l'isolant :	106
2.1. Le mécanisme Poole-Frenkel(PF) :	107
2.2. Le mécanisme de transport par Saut ou « Hopping » :	107
2.3. Le mécanisme tunnel assisté par les pièges :	108
II. Etude des mécanismes de conduction dans un oxyde mince avec une grille ferromagnétique:	109
1. Les caractéristiques courant-tension :	109
2. Détermination du type de mécanisme du transport :	110
2.1. Cas de la structure MIS à grille d'aluminium:	110
2.2. Cas de la structure MIS à grille de NiFe :	111
3. Conclusion :	113
III. Etude des mécanismes de transport à travers les oxydes ultra minces :	113
1. Introduction :	113
2. Limitations du modèle classique de la structure MOS :	114
3. Equation de Schrödinger :	116
3.1. Résolution de l'équation de Schrödinger dans un potentiel indépendant du temps :	116
3.2. Résolution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes à énergie potentielle constante :	117
3.3. Equation de Schrödinger à une dimension :	117
3.4. Conclusion :	118
4. Approximation WKB:	118
5. Approximation de la masse effective :	120
6. Etude du confinement des porteurs à l'interface oxyde/silicium :	121
6.1. Equation de Poisson :	121
6.2. Résolution de l'équation couplée Poisson-Schrödinger :	123
6.3. Les approximations pour la résolution des équations couplées Poisson- Schrödinger :	124
6.3.1. La méthode variationnelle :	124
6.3.2. Approximation du potentiel triangulaire :	125
7. Modélisation du courant tunnel direct:	126
7.1. Méthode de la transparence :	126
7.1.1. Transparence tunnel :	126
7.1.1.1. La méthode des matrices de transfert :	127
7.1.1.2. La méthode semi-classique WKB :	128
7.1.2. Fréquence d'impact :	130
7.1.3. Expression du courant tunnel :	133
7.1.3.1. Courant 2D :	133

7.1.3.2. Courant 3D : .....	134
8. Mise en équation du modèle Tunnel direct : .....	135
8.1. Simulation Poisson-Schrödinger des caractéristiques capacité-tension, C(V) : .	135
8.2. Modèle tunnel direct : .....	137
8.2.1. Injection depuis le substrat : .....	137
8.2.1.1. L'expression de la charge disponible pour le transport tunnel:.....	138
8.2.1.2. L'expression de la transparence de la barrière : .....	138
8.2.1.3. Expression de la fréquence d'impact: .....	140
8.2.2. Injection d'électrons depuis le métal : .....	141
8.2.3. Résultats expérimentaux : transport à travers une barrière de SiO <sub>2</sub> :.....	143
8.2.3.1. Injection d'électrons depuis le substrat : .....	143
8.2.3.2. Injection depuis le métal : .....	145
8.2.4. Résultats expérimentaux : transport à travers la structure à double barrière Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> / SiO <sub>2</sub> :.....	147
8.2.4.1. Injection d'électrons depuis le substrat : .....	147
9. Le mécanisme de conduction tunnel assisté par pièges (TAT):.....	149
9.1. Etat de l'art : .....	149
9.2. Mise en équation du modèle : .....	153
9.2.1. La transparence tunnel : .....	153
9.2.2. Calcul du courant : .....	155
9.2.2.1. La transparence de la barrière : .....	155
9.2.2.2. 1 <sup>er</sup> cas : pièges de même nature : .....	157
9.2.2.3. 2 <sup>ème</sup> cas : pièges de nature différente : .....	157
9.2.2.3.1. Profil spatial des pièges : .....	157
9.2.2.3.2. Profil énergétique dans les pièges : .....	158
9.3. Expression théorique du courant tunnel assisté par pièges: .....	159
9.4. Comparaison modèle TAT- résultats expérimentaux de la structure FM/SiO <sub>2</sub> /Silicium : .....	160
VI. Conclusion : .....	161
Conclusion générale .....	167
Publications .....	169

# Liste des figures

Chapitre 1 : L'électronique du spin.....	17
Figure 1 : (a) Empilement des couches magnétiques (fer) et non magnétiques (chrome) (b) Le rapport de résistance en fonction du champ magnétique .....	18
Figure 2 : (a) la structure de la jonction tunnel magnétique et les résistances équivalentes (b) la TMR d'une jonction tunnel en fonction du champ appliqué.....	19
Figure 3 : Progression de la densité de stockage sur disque dur .....	20
Figure 4: Dispositif d'une mémoire MRAM.....	21
(Assemblée de plusieurs cellules mémoires) .....	21
Figure 5 : Structures de bandes d'un ferromagnétique fort et faible [Montaigne thèse_1999] .....	23
Figure 6 : Structure pour l'injection de spin depuis un contact de fer dans le GaAs [Zhu 2001].....	23
Figure 7 : Schéma de la structure des bandes utilisé pour injecter des spins dans le GaAs à partir du BeMgZnSe [Fiederling 1999] .....	24
Figure 8 : La polarisation en spin du courant en fonction de la position à l'interface ferromagnétique/semi-conducteur avec ou sans résistance d'interface [Fert 2001] .....	25
Figure 9 : Structure de bandes à l'interface Fe/AlGaAs d'une jonction Schottky Fe/GaAs [Hanbicki 2003].....	25
Figure 10 : Schéma du transistor proposé par Datta et Das [Datta 1990] utilisant l'effet Rashba .....	27
Figure 11 : Schéma expliquant le principe de la manipulation du spin dans le semi- conducteur par OHE [Motsnyi 2002].....	28
Figure 12 : Schéma des bandes d'une structure ferromagnétique/semi- conducteur/ferromagnétique dans une configuration vanne de spin.....	29
Figure 13 : Exemple de structures illustrant le principe de la mesure non locale.....	29
Figure 14 : (a) Schéma simplifié de transistor (b) Schéma du transistor fabriqué.....	30
Figure 15 : le courant du collecteur en fonction du champ magnétique pour un transistor de type-p.....	31
Figure 16 : Caractéristique I-V pour un transistor type-p comparée à un modèle de transport par saut (hopping) et Fowler Nordheim.....	31
Figure 17 : le courant d'injecteur en fonction du champ magnétique pour un transistor type-p (a) dans la gamme de l'injection "Hopping" (b) dans la gamme de l'injection Fowler-Nordheim .....	32
Figure 18 : (a) Le dispositif utilisé pour l'injection et la collection du spin (b) la variation du courant collecté en fonction du champ magnétique appliqué dans le plan .....	33
Figure 19 : Schéma du dispositif utilisé pour mettre en évidence l'injection du spin dans le silicium par des mesures non locales [Van't Erve 2007] .....	34
Figure 20: (a) Evolution du potentiel de l'électrode 2 en fonction du champ magnétique à 10K (b) Effet Hanle à 5K: Evolution du potentiel de l'électrode 2 en fonction du champ appliqué .....	35
Figure 21 :(a)Schéma de principe du dispositif test (b) diagramme des bandes de la diode FMIS injectrice (c) diagramme des bandes de la diode FMIS collectrice .....	36
Figure 22 : Schéma complet du dispositif test .....	37
Figure 23 : (a) Schéma technologique du dispositif test (b) Image du dispositif avec les lignes métalliques pour les contacts .....	37
Figure 24 : Dispositif test de la diode FMIS en "fond de tranchée" .....	39



Figure 25 : (a) Layout des capacités (b) Layout des diodes.....	40
Figure 26: (a) Structure des diodes pleine planque (b) Banc de caractérisation électrique .....	40
Figure 27 : Diagramme des bandes du système Si-SiO <sub>2</sub> [Williams 1965].....	41
Figure 28 : Diagramme des bandes du système Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Si .....	42
Figure 29 : Simulation de champ coercitif en fonction de la largeur d'une électrode magnétique d'une longueur de 1.5µm [Bruyant thèse_2008] .....	43
Figure 30 : Simulation des champs coercitifs de deux plots en fonction de la distance qui les sépare [Bruyant thèse_2008].....	44
Figure 31 : Effet des défauts sur les mécanismes du transport à l'injection .....	45
Figure 32 : Effet des états d'interface sur la polarisation du spin à la collection.....	46
Chapitre 2 : Etude des propriétés électriques de la structure métal ferromagnétique/ isolant/ silicium .....	50
Figure 1: (a) Circuit équivalent de la capacité MOS (b) Diagramme de bandes d'une structure MOS parfaite (avant contact) .....	51
Figure 2: Diagramme de bandes d'une structure MOS parfaite en condition d'application d'une polarisation positive .....	52
Figure 3: Les régimes de fonctionnement d'une capacité MOS (a) Accumulation.....	54
(b) Bandes plates (c) Déplétion (d) Inversion .....	54
Figure 4: Caractéristique C(Vg) de la capacité MOS (a) à basse fréquence (b) à haute fréquence(c) en condition de déplétion profonde.....	54
Figure 5 : Les différents types des charges dans l'oxyde.....	55
Figure 6: Les états d'interface donneurs(a) et accepteurs(b) .....	56
Figure 7: Caractéristique C(V) haute fréquence.....	57
(a) sans états d'interface.....	57
(b) avec états d'interface .....	57
Figure 8 : le diagramme de bande pour une capacité type p (a) sans application d'une polarisation, (b) polarisation négative, (c) polarisation positive. La partie hachurée désigne les états d'interface remplies.....	59
Figure 10 : Spectre de la densité des états d'interface en fonction de l'énergie dans la bande interdite de silicium (a )(111)Si/SiO <sub>2</sub> (b)(100)Si/SiO <sub>2</sub> [Schroder2005].....	61
Figure 11: Spectre de la densité des états d'interface en fonction de l'énergie dans la bande interdite de silicium en interface avec le SiO <sub>2</sub> mesurée par méthode capacitive quasi statique. [Autran1993] .....	61
Figure12 : La distribution des états d'interface mesurée par DLTS en courant sur un oxyde SiO <sub>2</sub> non recuit [Johnson1983].....	61
Figure 13 : Diagramme de bandes à l'interface oxyde/Si .....	62
Figure 14 : Schéma équivalent de la capacité MOS réelle.....	65
Figure 15 : La caractéristique C <sub>hf</sub> (ψ <sub>s</sub> ) théorique (a) en comparaison avec C <sub>hf</sub> (Vg) pour une structure MOS avec Dit=10 <sup>12</sup> cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup> (b) [Nicollian1982].....	68
Figure 16 : la courbe ψ <sub>s</sub> (Vg) en présence et en absence d'états d'interface [Nicollian1982] .....	68
Figure 17 : Schéma équivalent d'une structure MOS prenant en compte.....	71
(1) la capacité et la conductance mesurées (2) la résistance série (3) la conductance tunnel (4) la conductance et la capacité des états d'interface [Vogel 2000].....	71
Figure 18 : (a) Git/ω en fonction de la fréquence pour différentes tensions Vg appliquées [Hung 1987] (b) Détermination de la section efficace d'un piège.....	74
Figure 19-a: Caractéristiques C(Vg) haute fréquence et basse fréquence .....	76
pour une structure à grille de NiFe. Epaisseur d'oxyde de silicium de 7nm. Substrat de silicium : type p, dopage Na=1.28 10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup> . Surface=1. 10 <sup>-8</sup> m <sup>2</sup> .....	76

Figure 19-b: Caractéristiques C(Vg) haute fréquence et basse fréquence .....	76
pour une structure à grille d'Al. Epaisseur d'oxyde de silicium de 7nm. Substrat de silicium : type p, dopage Na= $6.28 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Surface= $1.10^{-8} \text{ m}^2$ .....	76
Figure 20: Densité d'états d'interface (Dit) en fonction de l'énergie dans le gap du silicium pour les deux structures MOS à grilles ferromagnétique (NiFe) ou aluminium	77
Figure 21: Profils de dopage dans le silicium pour deux structures MOS avec grille ferromagnétique ou grille aluminium(a). Zoom sur le profil près de la surface du silicium(b). L'origine des abscisses correspond à l'interface Si /SiO <sub>2</sub> .....	79
Figure 22: Caractéristique C(Vg) représentant l'effet « déplétion profonde »ou régime d'inversion hors équilibre.....	80
Figure 23 : (a) Relaxation de la zone de déplétion due à la génération de paires électron-trou (b) Les différents mécanismes de génération des porteurs [Tan2000] .....	81
Figure 24 : (a)Principe de la méthode de Zerbst (b) Exemple de tracé de Zerbst pour un ensemble d'échantillons présentant différentes durées de vie [Tan2000].....	82
Figure 25: Caractéristique C(Vg) (a) de la structure à grille Al avec une surface S= $1.104 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$ (b) de la structure à grille NiFe avec une surface S= $0.39 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$ .....	83
Figure 26: (a) Caractéristique C(t) pour les deux structures à grille Al et NiFe (b) Tracé de Zerbst pour les deux structures à grille Al et NiFe.....	84
Figure 27 : Caractéristiques C(Vg) mesurées sur une structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (2.5nm)/n-Si à différentes fréquences. Surface= $2400 \mu\text{m}^2$ .....	86
Figure 28 : Caractéristiques C(Vg) de deux structures NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si recuite et non recuite mesurées à deux fréquences (1Mhz et 1kHz).....	87
Figure 29 : Spectre Dit(E) pour les deux structures NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si recuite et non recuite mesurés par C(V) <sub>hf-lf</sub> .....	88
Figure 30: Caractéristiques C(Vg) des structures NiFe/SiO <sub>2</sub> (4 nm))/p-Si avec recuit à la fréquence 800 kHz et à différentes températures .....	89
Figure 31 : Evolution de la densité des états d'interface Dit en fonction de la température pour une structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4 nm))/p-Si avec recuit forming gas .....	89
Figure 32 : Caractéristiques C(Vg) mesurées avec une structure NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (3.1nm)/SiO <sub>2</sub> (0.7nm)/n-Si non recuite et à différentes fréquences .....	90
Figure 33 : Caractéristiques C(Vg) des structures NiFe/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (4nm)/n-Si à différents recuits mesurées à haute fréquence 1Mhz .....	91
Figure 34 : Spectre Dit(E) pour les structures NiFe/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (4nm)/ n-Si mesuré par la méthode C(V) <sub>hf-lf</sub> .....	92
Figure 35: Caractéristiques C(Vg) de deux structures NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /p-Si recuite sous densification et non recuite à deux fréquences 1Mhz et 1kHz.....	93
Figure 36 : Spectres Dit(E) de deux structures NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /p-Si recuite sous densification et non recuite mesurés par la méthode C(V) <sub>hf-lf</sub> .....	93
Figure 37 : spectres Dit(E) pour les structures NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si non recuites avec épaisseurs 3nm et 4 nm mesurés par la méthode C(V) <sub>hf-lf</sub> .....	94
Figure 38: G( $\omega$ )/ $\omega$ en fonction de la pulsation pour différentes tensions appliquées sur la grille. Structure MOS avec grille NiFe et oxyde de silicium (4 nm) .....	95
Figure 39 : la densité des états d'interface déterminée par les deux méthodes G- $\omega$ et C(V) <sub>hf-lf</sub> pour la structure de la figure 38.....	96
Figure 40-a: Détermination de la section efficace pour la structure NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (1.26nm)/SiO <sub>2</sub> (0.7nm)/p-Si .....	97
Figure 40-b: Détermination de la section efficace d'un piège pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (3.5nm)/p-Si.....	97
Chapitre 3 : Etude des mécanismes du transport dans la structure Métal ferromagnétique/ isolant/silicium .....	103

Figure 1 : Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique vers la bande de conduction de l'isolant par émission thermoïonique.....	104
Figure 2: Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique par effet tunnel direct à travers une barrière isolante .....	105
Figure 3: Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique par le mécanisme de conduction Fowler-Nordheim .....	106
Figure 4 : (a) Injection par mécanisme de conduction Poole-Frenkel (b) le paramètre Poole-Frenkel $\alpha_{PF}$ en fonction de la distance moyenne entre les pièges .....	107
Figure 5: Injection par mécanisme de conduction de type « Hopping ».....	108
Figure 6 : Conduction dans une couche d'isolant par mécanisme tunnel assisté par un piège (TAT).....	108
Figure 7: Mécanisme de Transport via les états d'interfaces .....	109
Figure 8 : Caractéristiques J-Vg pour les structures à grille Al (Substrat de silicium : type p, $N_a= 6.28 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) ou NiFe (Substrat de silicium : type p, $N_a=1.28 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ).....	110
Figure 9 : Analyse de la caractéristique courant-tension pour une structure MIS à grille d'aluminium (a)Tracé Fowler-Nordheim $\ln (J/F_{ox}^2)$ en fonction de $1/ F_{ox}$ (b) Modélisation des résultats expérimentaux en utilisant un modèle de Fowler-Nordheim .....	111
Figure 10: Le tracé Fowler-Nordheim $\ln (J/F_{ox}^2)$ en fonction de $1/ F_{ox}$ pour la structure MIS à grille NiFe.....	111
Figure 11 : (a) les caractéristiques I-V en fonction de la température pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (7nm)/p-Si (b) Tracé Poole-Frenkel pour la caractéristique à T ambiante (300 K).....	112
Figure 12: Comparaison entre résultat expérimental et modèle Poole-Frenkel pour une structure MIS à grille de NiFe.....	113
Figure 13 : Diagramme de bandes d'énergie faisant apparaître le puits de potentiel à l'interface oxyde/substrat dans le régime d'inversion (a) ou d'accumulation (b).....	114
Figure 14 : quantification de l'énergie à l'interface semi-conducteur/ oxyde dans une structure MOS .....	115
Figure 15 : Distribution de la densité de porteurs dans le puits de potentiel. Comparaison entre approches classiques et quantiques [Clerc thèse 2001].....	115
Figure 16 : Classification des électrons et des trous .....	121
Figure 17 : (a) Schéma d'une barrière tunnel d'énergie potentielle constante par morceau [Ando 1987] (b) Schéma illustrant les réflexions des ondes sur une discontinuité de potentiel.....	127
Figure 18 : Injection d'un électron à travers une barrière trapézoïdale et triangulaire dans une structure MOS .....	129
Figure 19 : Comparaison entre la caractéristique densité du courant de grille en fonction du champ électrique mesurée (points pleins) pour une structure p+ poly silicium/SiO <sub>2</sub> /n-Si et le modèle tunnel direct avec la correction (ligne continue), et sans correction Register (pointillé) [Register 1999].....	130
Figure 20 : Diagramme des bandes illustrant les interférences des ondes à l'interface oxyde/Si [Garros thèse 2004].....	132
Figure 21 : (a) Injection depuis un continuum d'énergie (b) Injection depuis un puits de potentiel.....	133
Figure22 : (a) Diagramme de bandes d'une structure MOS utilisé dans le simulateur C(V) (b) : Schéma de principe utilisé par le simulateur C(V).....	136
Figure 23 : simulation quantique des courbes CV NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si mesurées à 800 kHz et 1kHz.....	137

Figure 24 : Diagramme des bandes (a) d'une structure MIS à une seule barrière (b) d'une structure MIS à double barrière dans le cas de transport d'électrons du substrat vers le métal .....	139
Figure 25 : Diagramme des bandes d'une structure bicouche NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si illustrant les différents mécanismes de conduction.....	140
Figure 26 : Diagramme des bandes (a) d'une structure MIS à une seule barrière (b) d'une structure MIS à double barrière pour l'injection d'électrons du métal vers le semi-conducteur .....	143
Figure 27 : Les caractéristiques I(V) en fonction de la température (80K-300K) pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/n-Si.....	144
Figure 28 : Courbes C(V) à 1MHz et 1kHz comparées avec la théorie pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/n-Si.....	144
Figure 29 : Champ électrique dans l'oxyde SiO <sub>2</sub> en fonction de la polarisation de la grille .....	144
Figure 30 : les concentrations des électrons longitudinaux sur les trois premiers niveaux d'énergie dans le puits quantique. N <sub>l0</sub> :fondamental, N <sub>l1</sub> et N <sub>l2</sub> : les deux niveaux excités.....	144
Figure 31 : Caractéristique courant-tension pour une structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si et comparaison avec le modèle tunnel direct. Les paramètres utilisés dans le modèle sont : $m_{SiO_2} = 0.5m_e$ , $\phi_{SiO_2} = 3.15eV$ .....	145
Figure 32 : Les caractéristiques courant-tension en fonction de la température (100K-300K) pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si .....	146
Figure 33 : Caractéristiques C(V) à 1MHz et 1kHz et comparaison avec une C(V) théorique pour la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si .....	146
Figure 34 : Caractéristique courant-tension de la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si , comparaison avec le modèle tunnel direct. Paramètres du modèle : $m_{SiO_2} = 0.5m_e$ , $\phi_{SiO_2} = 3.15eV$ .....	146
Figure 35 : Caractéristiques C(V) à 1MHz et 1kHz pour une structure NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si comparées avec une C(V) théoriques.....	147
Figure 36 : le champ électrique en fonction de la polarisation de la grille à travers les deux barrières : SiO <sub>2</sub> et Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .....	147
Figure 37-a : Les caractéristiques I(V) en fonction de la température (80K-300K) pour la structure NiFe/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si .....	148
Figure 37-b : Tracé Fowler-Nordheim pour la structure NiFe/ Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si.....	148
Figure 38 : Caractéristique courant-tension de la structure NiFe/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiO <sub>2</sub> /n-Si à T=80K. Comparaison avec le modèle tunnel direct. Les paramètres du modèle sont : $m_{Al_2O_3} = 0.23m_e$ , $\phi_{Al_2O_3} = 2.4eV$ .....	148
Figure 39 : (a) Diagramme de bandes d'une structure MNOS avec des électrons piégés en condition de bandes plates [Lundstrom1972](b) Diagramme de bandes d'une structure MNOS pour l'injection des électrons piégés ( les électrons quittent les pièges par effet tunnel)[Svensson1973].....	149
Figure 40 :(a) Diagramme des bandes d'une structure Al/SiOxNy/Si (R0 est la probabilité Fowler-Nordheim, R1 et R2 les probabilités TAT) (b) Tracé densité du courant en fonction du champ électrique B1 : $\phi_t = 2.55eV$ , $N_t = 2.25 \cdot 10^{19} cm^{-3}$ , B2 : $\phi_t = 2.53eV$ , $N_t = 6.10 \cdot 10^{19} cm^{-3}$ , B3 : $\phi_t = 2.5eV$ , $N_t = 1.10 \cdot 10^{20} cm^{-3}$ .....	150
Figure 41 : Tracé de Pourcentage de différence entre le modèle simplifié de Fleischer et al et modèle non simplifié de Cheng et al (a) en fonction de l'énergie du piège (b) en fonction de champ électrique [Fleischer1992] .....	151

Figure 42 : Schéma de diagramme de bande pour une structure Al/SiO <sub>2</sub> /Si (a) $\phi_t > \phi_B$ (b) $\phi_t < \phi_B$ .....	152
Figure 43 : Schéma de diagramme de bandes proposé pour le modèle TAT (a) régime de bandes plates (b) TAT élastique (la perte en énergie $E_{loss}$ est nulle) (c) TAT inélastique (la perte en énergie $E_{loss}$ est supposé constante).....	152
Figure 44 : (a) Schéma illustrant le passage des électrons par les mécanismes TD ou TAT (b) Schéma illustrant le mécanisme de transport à travers une structure MIS en présence d'un piège .....	154
Figure 45 : Schéma illustrant les différents mécanismes d'injection à travers la barrière en présence d'un défaut.....	156
Figure 46 : Un exemple d'une distribution gaussienne présentant le profil spatial des pièges dans l'oxyde. Les paramètres de cette gaussienne sont : $x_0 = 0.6T_{ox} = 2.178nm$ , $\Delta x_0 = 0.1nm$ , $N_{tmax} = 5.10^{16} m^{-1}$ .....	158
Figure 47: Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation $V_g$ . Etude de l'effet de la distribution spatiale des pièges $\Delta x_0$ sur le courant. ....	159
Figure 48 : Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation $V_g$ . Etude de l'effet de $X_t$ sur le courant pour $X_t > 0.5T_{ox}$ .....	160
Figure 49 : Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation $V_g$ . Etude de l'effet de $N_{tmax}$ . ....	160
Figure 50 : Caractéristique courant-tension de la structure NiFe/SiO <sub>2</sub> (4nm)/p-Si. Comparaison avec caractéristique théorique tirée du modèle TAT et calculée avec les paramètres : $x_t = 0.46T_{ox}$ , $E_c$ (oxide)- $E_t = 3eV$ .....	161

# Liste des tableaux

Chapitre 1 : L'électronique du spin.....	17
Tableau 1 : Comparaison des performances des diverses mémoires RAM .....	21
Tableau 2: Description des différentes plaquettes testées à base d'oxyde de silicium ...	38
Tableau 3: Description des différentes plaquettes testées à base d'alumine.....	39
Tableau 4 : Propriétés des matériaux $\text{SiO}_2$ , $\text{Al}_2\text{O}_3$ , $\text{HfO}_2$ [Manchanda 2000] [Chang thèse_2003] .....	42
Chapitre 2 : Etude des propriétés électriques de la structure métal ferromagnétique/ isolant/ silicium.....	50
Tableau 1 : Valeurs caractéristiques extraites pour les deux structures à grille ferromagnétique et à grille d'aluminium.....	83
Tableau 2 : Valeurs de la durée de vie des porteurs et de la vitesse de génération extraites pour les deux structures à grille ferromagnétique et à grille d'aluminium .....	85
Tableau 3 : Résultats des mesures de la densité des états d'interface pour les structures MOS à oxyde de silicium recuites et non recuites .....	88
Tableau 4: Synthèse des résultats électriques relatifs à la structure MOS à grille ferromagnétique avec oxyde d'aluminium .....	92

# Introduction générale

Le développement et le progrès de la microélectronique ont permis de faciliter la vie quotidienne en créant des nouvelles technologies dans tous les domaines. Ce développement est accompagné d'une miniaturisation de différents composants. Cette réduction des dimensions caractéristiques entraîne une dégradation des composants (augmentation du courant de fuite etc....) et la perte de certaines fonctionnalités des applications. Parmi les solutions proposées, on note le remplacement de l'oxyde du silicium par les oxydes High-K mais aussi l'utilisation des composants hybrides afin d'assurer d'autres nouvelles fonctionnalités.

En effet, la découverte des caractéristiques intéressantes de certains matériaux magnétiques a orienté la recherche vers un nouveau concept : la spintronique. La spintronique ou l'électronique de spin se base sur l'exploitation de deux attributs de l'électron, sa charge et son spin jusque là négligé par l'électronique conventionnelle. Ce domaine a permis de développer plusieurs applications allant des disques durs des ordinateurs aux mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM) en passant par des composants plus futuristes actuellement développés en laboratoire comme le transistor de spin, la spin-LED ou la logique magnétique reprogrammable. La spintronique pourrait bien entraîner la prochaine révolution de la microélectronique.

L'émergence de la spintronique n'est pas limitée aux seules propriétés intéressantes des matériaux magnétiques mais a progressé vers les systèmes hybrides magnétiques/semi-conducteurs [Wolf 2001]. L'idée est de pouvoir mettre au point un composant spintronique où l'on peut moduler la charge, à la manière de l'électronique conventionnelle, mais également le spin. Seul un composant à base de semi-conducteur permettra cette modulation. Or, il n'existe pas à l'heure actuelle de semi-conducteur ferromagnétique à température ambiante. D'où l'idée d'utiliser un métal ferromagnétique pour injecter des spins dans un semi-conducteur non magnétique.

Les efforts se sont orientés vers les semi-conducteurs à gap direct comme les semi-conducteurs III-V tel que le GaAs vu la facilité de manipuler optiquement les spins [Motsnyi 2002]. Plusieurs études ont montré qu'une injection efficace des spins depuis un matériau magnétique vers un semi-conducteur doit être réalisée à travers une barrière tunnel [Motsnyi 2002] insérée entre les deux couches de matériaux. On s'est vite rendu compte des défis scientifiques que cette injection de spin représente dans ces composants hybrides. De nombreuses études fondamentales ont été conduites dans l'objectif de comprendre les mécanismes qui régissent cette injection. Par ailleurs, étant donnée l'importance du silicium dans l'industrie électronique, plusieurs équipes s'intéressent actuellement à la spintronique sur silicium dont notre laboratoire.

Mais vu le gap indirect du silicium, il est difficile d'injecter et analyser optiquement les spins. Donc il est nécessaire de pouvoir injecter et collecter électriquement les porteurs polarisés en spin dans le silicium. Afin d'injecter efficacement les spins et les conserver durant le transport depuis le métal ferromagnétique vers le silicium, dans le silicium et vers le collecteur, une étude approfondie des propriétés de transport à travers la barrière tunnel et des propriétés électriques de la diode ferromagnétique/isolant/silicium (FMIS) est nécessaire. C'est le but principal de ce travail de thèse.

Le chapitre I décrit l'évolution de l'électronique du spin qui représente le contexte général de ce travail de thèse. Dans ce chapitre, on décrit les différents aspects de la spintronique dans les semi-conducteurs et plus particulièrement dans le silicium. On y traite les mécanismes d'injection, de conservation de spin dans le silicium et la collection de spins. Le dispositif de test utilisé dans notre étude pour analyser les mécanismes de transport a été aussi décrit.

Le chapitre II décrit les caractéristiques électriques des briques de base du dispositif test proposé destinées à être utilisées pour l'injection de spins dans le silicium. Ces briques de base sont des diodes métal ferromagnétique/isolant/silicium. Une étude approfondie de la caractérisation de ces structures sera présentée, en particulier l'étude de l'interface oxyde/silicium qui a un rôle fondamental dans la conservation de spin. Une étude de l'effet de la grille ferromagnétique sur les propriétés électriques de ces structures sera décrite. Des résultats sur des structures à oxyde de silicium ou oxyde d'alumine ultra mince avec différents recuits et différentes épaisseurs vont être présentés.

Le chapitre III décrit une étude détaillée des mécanismes de transport à travers l'isolant dans les structures métal ferromagnétique/isolant/silicium. Cette étude est primordiale pour la compréhension de l'injection de spin dans le silicium. Par exemple, des pièges dans l'oxyde peuvent conduire à la perte de la polarisation des spins. Les résultats expérimentaux seront modélisés en tenant compte de l'effet de ces pièges sur le processus de transport.

Le travail de thèse a été réalisé dans le cadre d'un projet européen (Embedded Magnetic Components) au laboratoire de SPINtronique et TEChnologie des Composants à Grenoble.



Référence :

[Motsnyi 2002]: V. F. Motsnyi, J. De Boeck, J. Das, W. Van Roy, G. Borghs, E. Goovaerts, V. I. Safarov, **Electrical spin injection in a ferromagnet/semiconductor heterostructure**, Appl. Phys. Lett, Vol. (81), 2002, pp. 265-267

[Wolf 2001]: S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. von-Molnar, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, **Spintronics: A spin-Based Electronics Vision for the future**, Science, Vol. (294), 2001, pp.1488-1495

# Chapitre 1 : L'électronique du spin

Depuis 1957, le marché des semi-conducteurs n'a cessé d'évoluer. La diminution de la taille des transistors a permis de mettre un plus grand nombre de transistors sur une même surface tout en améliorant leurs performances. Mais cette miniaturisation a entraîné les technologies CMOS vers leurs limites.

Dans ce cadre, parallèlement aux progrès de la technologie CMOS, d'autres technologies, d'autres voies de recherche et d'autres matériaux se sont développés.

Parmi ces voies, on trouve l'électronique de spin.

En effet, Les connaissances des propriétés de l'électron a permis de penser à un autre degré de liberté qui va permettre de dépasser les limites technologiques et de concevoir d'autres applications. Ce degré de liberté est le « spin » de l'électron. Le spin est une propriété d'une particule qui pourrait être décrite comme la rotation de cette particule sur elle-même. C'est l'équivalent quantique du moment cinétique en physique classique. Le moment cinétique quantique est le responsable du moment magnétique que porte une particule possédant un spin. Une particule possédant un spin peut être vue comme un minuscule aimant.

L'exploitation de cette propriété supplémentaire de l'électron entre dans le cadre de l'électronique de spin ou la spintronique, discipline en plein développement depuis les années 80.

Ce domaine de recherche se base essentiellement sur les propriétés des matériaux magnétiques.

L'association, au sein d'une structure unique, des matériaux magnétiques d'une part et des matériaux semi-conducteurs, isolants ou supra conducteurs d'autre part a permis la découverte de plusieurs phénomènes et l'émergence de nouvelles applications.

## I. L'électronique du spin :

### 1. Phénomène de magnétorésistance :

La première manifestation d'un effet caractéristique de spintronique a été la Magnétorésistance géante (Giant Magneto-Resistance, ou GMR), découverte en 1988 à Orsay par l'équipe d'Albert Fert. Dans des structures artificielles alternant un métal magnétique et un métal non magnétique, un changement de résistance important est observé lorsque, sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, les aimantations macroscopiques des couches magnétiques successives basculent d'un état antiparallèle à un état parallèle aligné. Les amplitudes observées sont d'un, ou de deux ordres de grandeurs supérieures aux valeurs usuelles observées dans des métaux simples.

La magnétorésistance est la variation de résistance électrique sous l'effet d'un champ magnétique appliqué.

On distingue deux types de magnétorésistances :

- Magnétorésistance Anisotrope : MRA

La résistivité dépend de l'orientation du champ extérieur appliqué qui définit la direction de l'aimantation par rapport à la direction de courant électrique qui traverse l'échantillon.

- Magnétorésistance Géante : MRG

Dans certaines structures magnétiques, on peut obtenir une diminution (Géante) de la résistance sous champ appliqué. Cette propriété est mise en évidence dans les structures multicouches ferromagnétique/métallique non magnétique /ferromagnétique.

La figure 1-a présente un empilement des couches magnétiques (le fer) et non magnétiques (le chrome). L'application d'un champ magnétique permet d'aligner les aimantations des couches magnétiques. La mesure du rapport de résistance (le rapport de la résistance mesurée sous champ/la résistance mesurée sous champ nul) de cette structure met en évidence la magnétorésistance (figure 1-b).

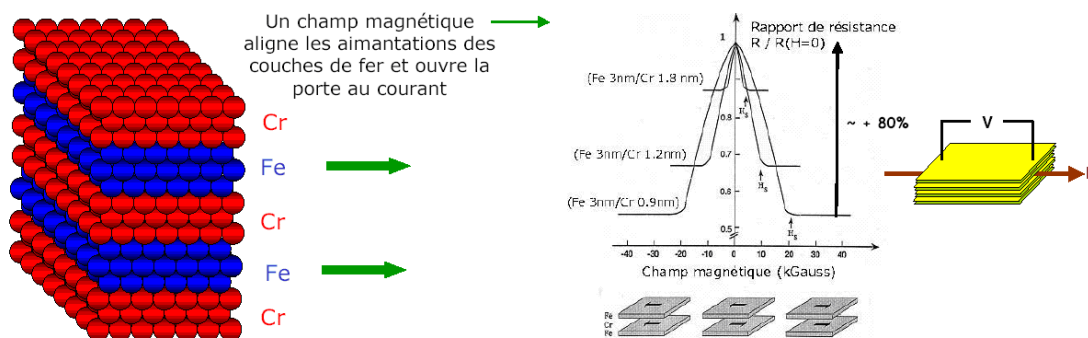


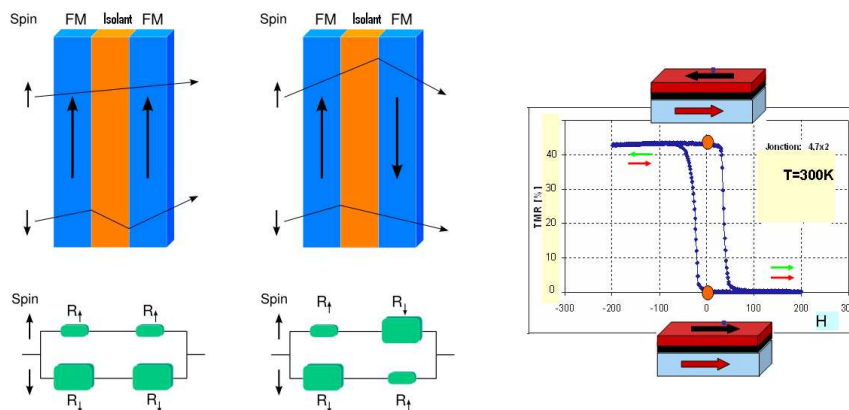
Figure 1 : (a) Empilement des couches magnétiques (fer) et non magnétiques (chrome) (b) Le rapport de résistance en fonction du champ magnétique

### 2. La jonction tunnel magnétique :

Parmi les phénomènes très intéressants dans la spintronique est la magnétorésistance tunnel. Elle est mesurée dans des structures de type ferromagnétique/isolant /ferromagnétique où le courant

sera fonction de deux orientations de deux aimantations d'une couche fixe et une couche libre. Ces jonctions se basent sur le transport tunnel dépendant du spin d'où son nom.

Les deux couches ferromagnétiques présentent deux champs coercitifs différents pour pouvoir changer leurs aimantations séparément par différents champs. Les électrons polarisés franchissent la barrière depuis la première couche jusqu'à la deuxième et selon l'orientation des aimantations un type des électrons polarisés sera préférentiellement injectés. En effet, le courant est traité comme deux canaux indépendants, de spin up et spin down (figure 2-a). Si les deux couches ont la même aimantation alors le courant d'électrons est fort, dans le cas contraire il est faible. Cela conduit au changement de la résistance de la jonction en fonction de la configuration magnétique : c'est la magnétorésistance tunnel. La figure 2-b présente un exemple.



**Figure 2 : (a) la structure de la jonction tunnel magnétique et les résistances équivalentes (b) la TMR d'une jonction tunnel en fonction du champ appliqué**

Ce phénomène de magnétorésistance tunnel est la base des mémoires magnétiques MRAM (partie III.2.).

## II. Quelques exemples d'applications de la spintronique dans l'industrie:

### 1. Les têtes de lecture :

Les têtes de lecture sur les disques durs sont parmi les premières applications de la spintronique. Leur principe se base sur la magnétorésistance et sont en réalité des détecteurs ultra-sensibles de champ magnétique. L'information à détecter est quant à elle stockée sur les disques durs sous forme des domaines magnétiques dans une couche mince magnétique. Quand l'aimantation change au passage d'un domaine à un autre, une fuite de champ magnétique à proximité de la surface aura lieu agissant sur la tête de lecture qui voit sa magnétorésistance modifiée. Cela permet de lire l'information.

Les avantages de ces dispositifs sont :

- La réduction de la taille des têtes de lecture
- La grande densité d'informations sur les disques
- .....

L'introduction des têtes magnétorésistives a permis d'avoir une progression de capacités de stockage d'environ 60% (figure 3).

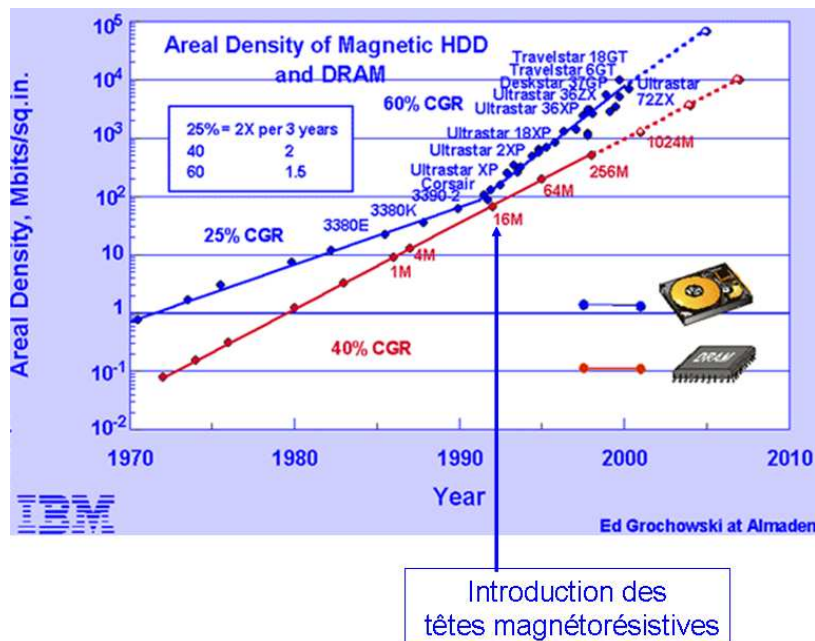


Figure 3 : Progression de la densité de stockage sur disque dur

## 2. Les mémoires MRAM (Mémoire magnétique à accès aléatoire) :

Les mémoires MRAM sont des mémoires basées sur le phénomène de la magnétorésistance d'une structure en multicouches magnétiques et plus précisément sur la magnétorésistance tunnel (TMR). La TMR est obtenue sur une structure en multicouches comprenant deux couches ferromagnétiques séparées par un diélectrique (couramment :  $Al_2O_3$ ) d'épaisseur tunnel (0.6-2nm). La résistance tunnel de cette structure est déterminée par l'orientation relative des aimantations de deux électrodes ferromagnétiques, ce qui permet d'avoir une binarité exploitable dans les applications de type 'mémoire'.

### 2.1. Avantages des MRAMs:

La MRAM rassemble potentiellement tous les avantages des différents types de mémoires actuels :

- Haute densité : les mémoires DRAM sont certes denses, mais volatiles (l'information est perdue si le courant coupé).
- Rapidité : les mémoires SRAM sont rapides, mais peu denses et également volatiles.
- Non volatilité : les mémoires Flash sont non volatiles mais gourmandes en énergie et lentes en écriture.

En effet, le temps d'écriture et d'effacement est de l'ordre de 10ns pour la MRAM et de 1ms pour la Flash.

Certaines applications nécessitent l'utilisation de plusieurs types de mémoires, d'où une complication technologique et une augmentation de coûts. La MRAM pourrait se présenter

comme une mémoire ‘universelle’ comme le montre le tableau comparatif ci-après [Bernard-Granger thèse\_2004] :

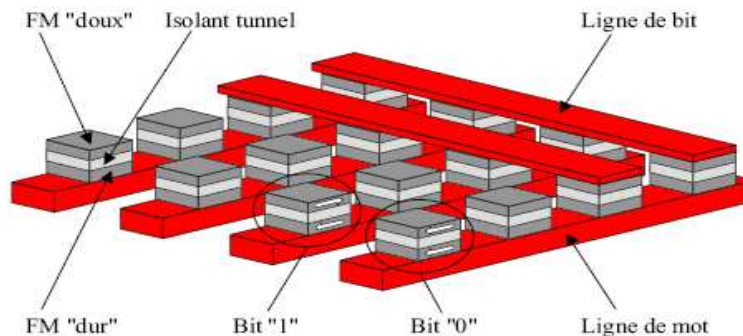
	DRAM	SRAM	FLASH	FeRAM	PCRAM	MRAM
Vitesse écriture	Modéré	Très Rapide	Modéré	Modéré	Modéré	Rapide
Vitesse lecture	Modéré	Rapide	Rapide	Modéré	Rapide	Rapide
Densité	Haute	Faible	Haute	Medium	Haute	Haute
Endurance	Bonne	Bonne	Faible	Faible	Bonne	Bonne
Puissance Consommée	Haute	Faible	Faible	Faible	Faible	Faible
Rafraichissement	Oui	Non	Non	Non	Non	Non
Rétention	Non	Non	Oui	Partielle	Oui	Oui
Scalabilité	Mauvaise	Bonne	Bonne	Modéré	Bonne	Bonne

**Tableau 1 : Comparaison des performances des diverses mémoires RAM**

Signalons enfin que la société Freescale a récemment (juin 2006) [Freescale 2006] commercialisé une carte mémoire MRAM de 4 Mbit et qu’une start-up issue de notre laboratoire (SPINTEC) vient d’être lancée à Grenoble (Crocus Technology) dans ce domaine pour développer une nouvelle technologie MRAM basée sur une écriture assistée thermiquement.

## 2.2. Principe de fonctionnement d’une MRAMs:

On représente ci-après le schéma d’une architecture matricielle de points mémoires de type MRAM [Bernard-Granger thèse\_2004] :



**Figure 4: Dispositif d’une mémoire MRAM (Assemblée de plusieurs cellules mémoires)**

Chaque point mémoire est constitué d’une jonction tunnel magnétique. L’aimantation d’une des couches magnétiques dite « couche dure » de la jonction peut être considérée bloquée. Cela veut dire que son champ coercitif (champ nécessaire pour faire basculer son aimantation) est relativement élevé. En revanche, l’aimantation de la 2<sup>ème</sup> couche dite « douce » peut basculer sous l’effet d’un champ magnétique relativement faible (faible champ coercitif). Ce comportement dissymétrique est obtenu en utilisant des couches de natures différentes que nous ne détaillerons pas ici.

Les deux états possibles de chaque point mémoire correspondent donc à l'orientation parallèle ou antiparallèle de l'aimantation des deux couches magnétiques c'est-à-dire deux niveaux différents de la résistance de la jonction tunnel. Le plan des jonctions est inséré entre un réseau de lignes conductrices inférieures et un réseau de lignes conductrices supérieures.

Pour écrire un point mémoire donné, on envoie simultanément une impulsion de courant extrêmement brève dans la ligne inférieure et la ligne supérieure qui se croisent sur le point mémoire considéré. La superposition des champs magnétiques générés par les courants circulants dans les deux lignes permet de faire commuter l'aimantation de la couche douce de la jonction considérée dans une direction vers la direction opposée suivant son axe de facile d'aimantation. Par contre, les autres éléments mémoires le long des lignes adressées ne ressentent le champ que d'une ligne seulement ce qui n'est pas suffisant pour faire commuter leurs aimantations.

Pour la lecture, on fait passer un courant électrique de la ligne inférieure à la ligne supérieure correspondant au point mémoire que l'on veut adresser. La résistance mesurée entre les deux lignes donne alors directement l'état magnétique de la jonction.

### **III. La spintronique dans les dispositifs à semi-conducteurs :**

Pendant ces dernières années, la spintronique s'est largement développée en particulier dans les domaines de l'enregistrement magnétique et des mémoires magnétiques intégrées. De nombreux chercheurs voient dans l'extension de la spintronique au domaine des semi-conducteurs un potentiel de développement encore plus prometteur. En effet, L'exploitation du spin de l'électron dans des structures hybrides métal/semi-conducteur ouvre un champ d'application totalement nouveau qui va de l'électronique de spin au traitement quantique de l'information, et ce grâce aux techniques éprouvées de la microélectronique sur semi-conducteurs. La spintronique dans les semi-conducteurs a plusieurs intérêts : une longueur de cohérence de spin plus élevée par rapport aux métaux et en plus un seul composant pourrait combiner la détection d'information (stockage dans une mémoire MRAM), le traitement de cette information (par manipulation des spins) et la transmission (information magnétique vers optique).

Dans les dispositifs Spintroniques à Semi-conducteurs, deux conditions doivent être réalisées : une durée de vie de spin élevée et une injection efficace de spins.

Trois étapes très importantes à réaliser dans les dispositifs à semi-conducteurs :

- pouvoir injecter des électrons polarisés en spin
- pouvoir assurer le transport d'électrons dans les semi-conducteurs
- pouvoir collecter ou détecter ces électrons polarisés

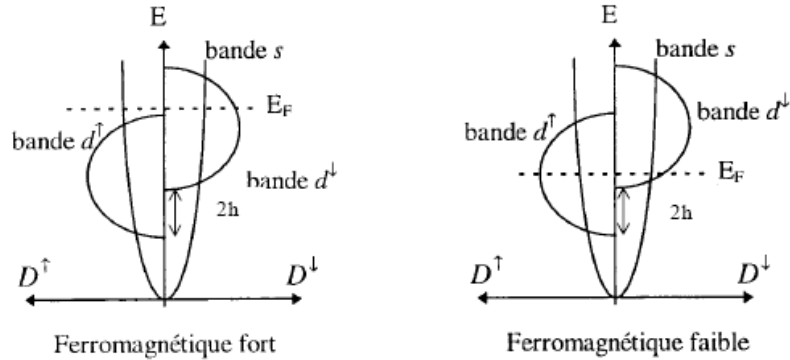
#### **1. L'injection du spin dans les semi-conducteurs :**

##### **1.1. Les sources des électrons polarisés en spin :**

###### **1.1.1. Les métaux ferromagnétiques :**

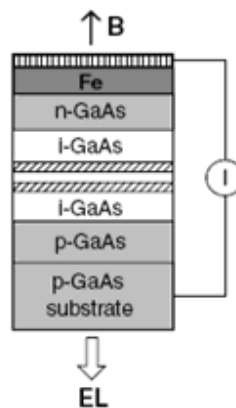
L'asymétrie de la structure des bandes des métaux ferromagnétiques entraîne des populations des électrons de spin *up* et *down* dans les métaux qui ne sont pas égales et donc le courant issu de ces métaux sera polarisé en spin. A l'échelle microscopique, un métal ferromagnétique possède un moment magnétique spontané même en absence d'un champ magnétique appliqué. Selon le

décalage et la position de niveau du fermi  $E_F$ , la bande d peut être totalement remplie (les matériaux ferromagnétiques forts comme le nickel ou le cobalt) ou partiellement remplie (matériaux ferromagnétiques faibles comme le fer) comme le montre la figure 5.



**Figure 5 : Structures de bandes d'un ferromagnétique fort et faible [Montaigne thèse\_1999]**

Ces métaux sont appelés métaux de transition. Parmi lesquels, on cite le fer, le nickel, le cobalt et leurs alliages. Zhu et al ont utilisé le fer comme injecteur du spin dans du GaAs (figure 6) [Zhu 2001]. D'autres groupes ont utilisé le CoFe [Motsnyi 2002], le Ni [Alvarado 1992], le cobalt.



**Figure 6 : Structure pour l'injection de spin depuis un contact de fer dans le GaAs [Zhu 2001]**

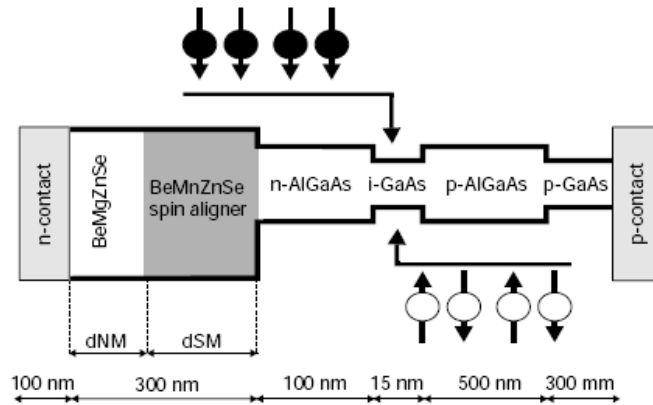
### 1.1.2. Les semi-conducteurs magnétiques dilués :

Les semi-conducteurs magnétiques dilués II-VI ou III-V permettent d'introduire dans une couche des porteurs libres fortement couplés par des interactions d'échange avec des spins localisés. Par exemple, dans les alliages II-VI (CdMnTe, ZnMnTe), les atomes de manganèse sont électriquement neutres et introduisent seulement des spins localisés. Les porteurs sont généralement introduits optiquement ou par dopage. Dans les alliages III-V InMnAs et GaMnAs, l'incorporation du manganèse introduit à la fois des spins localisés et des trous dans la bande de valence. La présence de porteurs libres et de spins localisés permet d'induire un couplage ferromagnétique à longue portée par l'intermédiaire des porteurs.

D'autres matériaux se sont développés comme les semi-conducteurs magnétiques à grand gap GaMnN, ZnCoO, semi-conducteurs IV-IV GeMn ou II-VI ZnCrTe.



La figure 7 présente le dispositif utilisé par Fiederling dans lequel le semi-conducteur magnétique le BeMnZnSe est utilisé pour injecter des électrons polarisés en spin dans du GaAs [Fiederling 1999].



**Figure 7 : Schéma de la structure des bandes utilisé pour injecter des spins dans le GaAs à partir du BeMgZnSe [Fiederling 1999]**

Avec ces semi-conducteurs magnétiques, plusieurs études ont été faites pour montrer l'injection du spin dans un semi-conducteur non magnétique. Mais l'inconvénient de ces matériaux est qu'ils ne sont ferromagnétiques qu'à basses températures  $T_{\text{Curie}} < 200 \text{ K}$ . Pour cela, les recherches se sont dirigées vers d'autres matériaux fonctionnels à température ambiante et qui peuvent fournir des porteurs polarisés en spin : ce sont les métaux ferromagnétiques.

## 1.2. Les problèmes liés à l'injection de spin dans les semi-conducteurs :

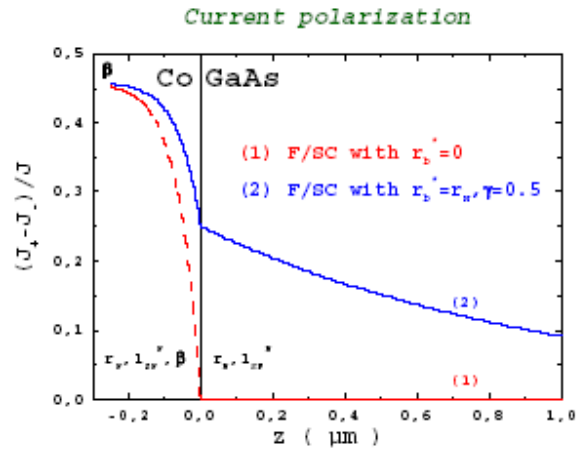
Les premières tentatives d'injection du spin depuis un métal ferromagnétique vers des semi-conducteurs en utilisant un contact ohmique ferromagnétique/ semi-conducteur n'ont pas abouti à des résultats concluants. En effet, le signal de magnétorésistance (signe d'une injection efficace de spin) reste de quelques % et il est attribué à d'autres effets que l'injection de spin [Monzon 1997]. Cette absence d'injection de spin a été attribuée à la grande différence de conductivité entre le ferromagnétique et le semi-conducteur qui réduit considérablement l'efficacité de l'injection du spin.

Parmi les solutions proposées à ce problème, on cite :

- l'utilisation des semi-conducteurs magnétiques comme injecteur des spins pour s'approcher de la conductivité des semi-conducteurs [Ohno 1999] [Fiederling 1999]. Cette solution n'est pas pratique vu que ces matériaux sont ferromagnétiques seulement à basse température.

- Avoir une barrière Schottky ou une barrière tunnel isolante entre le métal ferromagnétique et le semi-conducteur [Rashba 2000] [Fert 2001]. Ces barrières introduisent une résistance d'interface dépendante du spin. La figure 8 montre que sans cette interface la

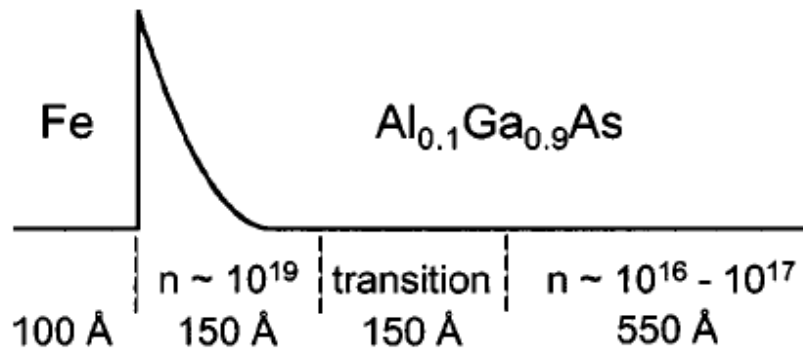
polarisation du courant dans le semi-conducteur s'annule. Cette solution a été adoptée par plusieurs groupes.



**Figure 8 : La polarisation en spin du courant en fonction de la position à l'interface ferromagnétique/semi-conducteur avec ou sans résistance d'interface [Fert 2001]**

La barrière Schottky donne une barrière tunnel naturelle entre le métal et un semi-conducteur fortement dopé.

Hanbicki a utilisé une barrière Schottky Fe/AlGaAs afin d'injecter des spins dans le GaAs [Hanbicki 2003]. Au début, l'injection était minimale à cause de la présence d'une région de déplétion dans le semi-conducteur. La solution était d'introduire une couche mince fortement dopée dans l'hétérostructure (figure 9). Cette couche permet de diminuer cette zone de déplétion ce qui autorise alors le passage du courant par effet tunnel.



**Figure 9 : Structure de bandes à l'interface Fe/AlGaAs d'une jonction Schottky Fe/GaAs [Hanbicki 2003]**

## **2. Le transport du spin dans les semi-conducteurs :**

### **2.1. Les mécanismes de relaxation des spins :**

Nous venons de discuter des problématiques liées à l'injection de spin dans des semi-conducteurs non magnétiques. Bien que cette injection soit un aspect fondamental dans les structures hybrides ferromagnétique/semi-conducteur, la réussite d'un composant spintronique hybride nécessite également le contrôle de la conservation de spin durant son séjour dans le semi-conducteur. En effet, il ya plusieurs phénomènes qui aboutissent à la perte de l'orientation du spin des électrons dans les semi-conducteurs. En général, ces mécanismes provoquent une interaction spin-orbite qui génère un champ magnétique effectif qui aboutit à la modification de l'orientation de spin. L'interaction spin-orbite est un effet qui se produit lorsqu'une particule possédant un spin non nul se déplace dans un espace où règne un champ électrique.

Parmi ces mécanismes, on cite :

- Le mécanisme Elliot-Yafet :

Ce mécanisme a pour origine le potentiel de perturbation dû aux impuretés ionisées (introduit par Elliot) ou aux vibrations du réseau les phonons (introduit par Yafet). L'interaction spin orbite produite conduit à des retournements simultanés de l'orientation du spin.

- Le mécanisme D'Yakonov-Perel :

Il a pour origine le champ électrique cristallin non nul. Ce mécanisme existe dans les cristaux sans centre d'inversion comme les semi-conducteurs III-V (exemple : le GaAs). Le silicium qui est centro-symétrique a un champ cristallin nul et donc ce mécanisme n'y existe pas. Le champ cristallin donne naissance à un champ magnétique effectif qui agit sur le spin qui se met à précesser à une fréquence donnée.

- Le mécanisme Bir, Aronov et Pikus :

Il a pour origine l'interaction d'échange entre le spin des électrons de la bande de conduction et le moment cinétique des trous. Ce mécanisme conduit à une précession du spin des électrons autour d'un axe instantané.

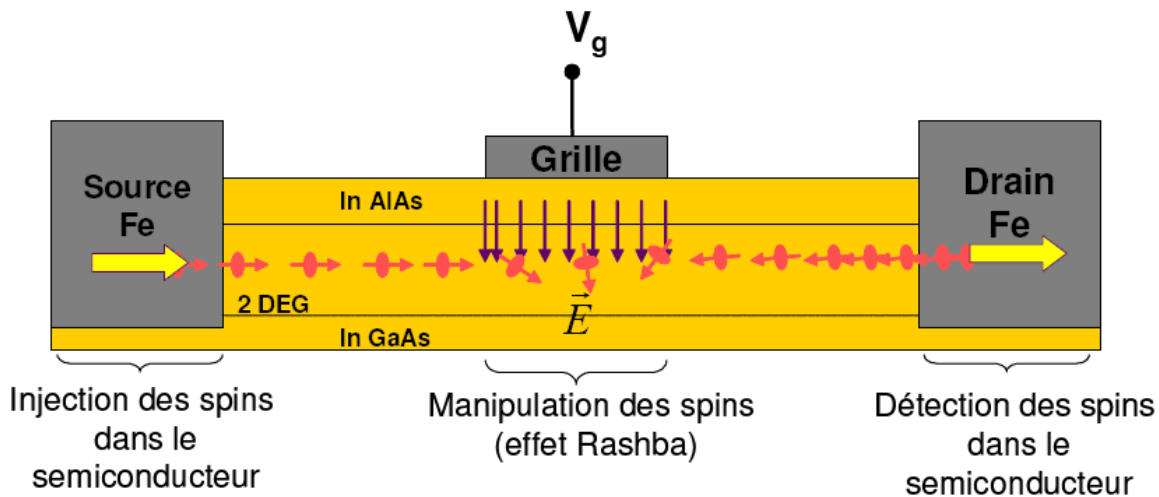
### **2.2. La manipulation du spin dans les semi-conducteurs :**

Un des intérêts pour la spintronique dans les semi-conducteurs est la possibilité de manipulation des spins. Cette manipulation est obtenue grâce à un effet de couplage spin-orbite entre le spin des porteurs (électron ou trou) et un champ magnétique. Ce champ peut être extérieur ou effectif c'est à dire généré par le mouvement de porteurs de charge dans une zone où règne un champ électrique local au sein du semi-conducteur. Parmi les effets qui permettent la manipulation du spin utilisés dans la littérature on peut citer :

- Effet Rashba :

C'est un cas particulier du couplage spin-orbite. Il est important dans les systèmes bidimensionnels (gaz d'électrons à 2D) où il existe un champ électrique uniforme et perpendiculaire au plan de déplacement des électrons.

Cet effet est utilisé dans le concept de SpinFET ou transistor à rotation de spin proposé par Datta and Das en 1990 [Datta 1990] (figure 10). Ce transistor qui a une architecture voisine d'un transistor à effet de champ possède une source, un drain et un canal contrôlable par une tension de grille. La source et le drain sont des contacts sélectifs en spin : ce sont des électrodes ferromagnétiques capables d'injecter et de collecter une orientation donnée de spin. L'amplitude du couplage de Rashba est fonction du champ électrique perpendiculaire et dépend donc de la tension  $V_g$  appliquée sur la grille.



**Figure 10 : Schéma du transistor proposé par Datta et Das [Datta 1990] utilisant l'effet Rashba**

- L'utilisation d'un champ magnétique extérieur :

L'interaction avec un champ magnétique extérieur aboutit à la modification de l'orientation du spin. Ce moyen de manipulation de spin est très utile pour des études fondamentales de l'injection de spin dans les semi-conducteurs. Par exemple, il fut employé par Mottsonyi et al. pour étudier la polarisation en spin dans le GaAs au moyen de l'effet Hanle oblique. Les spins précessent autour du champ appliqué jusqu'à s'aligner le long de ce champ [Mottsonyi 2002] dans une structure de type FM/I/Sc (figure 11). La figure 11 montre la manipulation de l'orientation de spins injectés dans le GaAs par l'électrode ferromagnétique. Le champ appliqué crée une composante de spin  $S_z$  perpendiculaire à la surface. Les règles de sélection qui régissent la recombinaison radiative électrons-trous en fonction de spin de l'électron aboutissent à une polarisation de la lumière émise, circulaire gauche ou circulaire droite suivant l'orientation majoritaire de spin (spin up ou spin down). Ainsi, l'étude de la polarisation de la lumière permet de quantifier la polarisation en spin du courant injecté dans l'électrode.

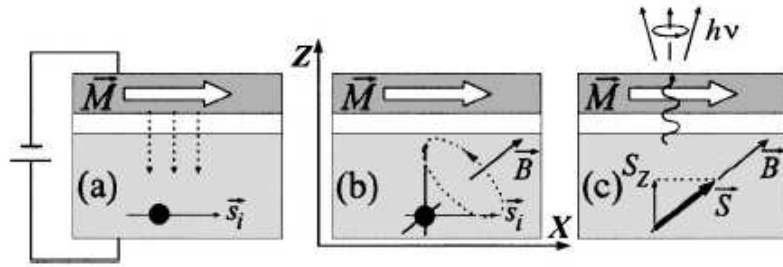


Figure 11 : Schéma expliquant le principe de la manipulation du spin dans le semi-conducteur par OHE [Motsnyi 2002]

### 3. La collection du spin :

#### 3.1. La détection optique de la polarisation du spin :

Comme nous venons de le voir, la détection de spin peut être effectuée par détection optique. Cette détection optique s'affranchit du problème de collection de spin, plus délicate à mettre en œuvre comme nous verrons plus loin. C'est pourquoi l'étude des spins dans les semi-conducteurs s'est concentrée sur les semi-conducteurs III-V, et surtout le GaAs. En effet, ces semi-conducteurs ont une bande interdite directe. Cette propriété permet de détecter la polarisation du spin par la mesure de la polarisation circulaire de la luminescence émise par le substrat comme nous venons de le voir dans le paragraphe précédent.

Cette polarisation est fonction de la composante de spin de l'électron perpendiculaire à la surface. Dans le cas où l'aimantation de l'injecteur est dans le plan, les spins n'ont pas une composante hors du plan et donc aucune polarisation circulaire ne peut être obtenue dans la direction perpendiculaire à la surface. D'où l'utilité de manipuler les spins dans le métal ferromagnétique ou dans le semi-conducteur.

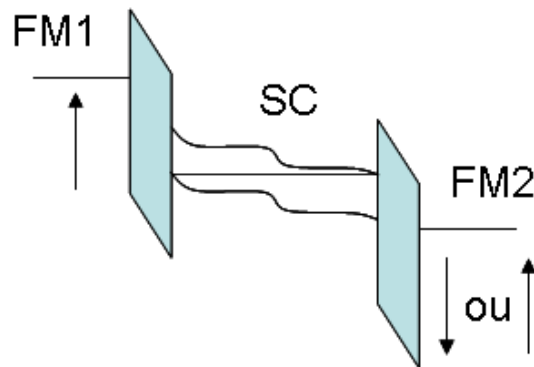
Ramener l'aimantation de l'injecteur hors du plan nécessite un fort champ magnétique (>1.4T). En revanche, l'utilisation de l'approche OHE déjà mentionnée permet de manipuler les spins dans le semi-conducteur par l'application d'un champ oblique moyen modéré (<0.6T sous un angle de 45°) [Motsnyi 2002].

#### 3.2. La détection électrique de la polarisation du spin :

La détection optique est très intéressante afin de démontrer l'injection du spin mais n'est pas adaptée dès lors que l'on cherche à réaliser des dispositifs spintroniques intégrables dans un processus CMOS par exemple. Pour cela, une détection électrique est indispensable. Il y a plusieurs voies possibles de détection électrique du spin :

##### 3.2.1. Mesure par vanne de spin :

La mesure vanne de spin concerne les structures à deux couches magnétiques séparées par une couche non magnétique. Elle consiste à mesurer la variation de la résistance de la structure en fonction du champ magnétique appliqué lorsque les aimantations de deux couches passent d'un état parallèle à un état antiparallèle (figure 12).

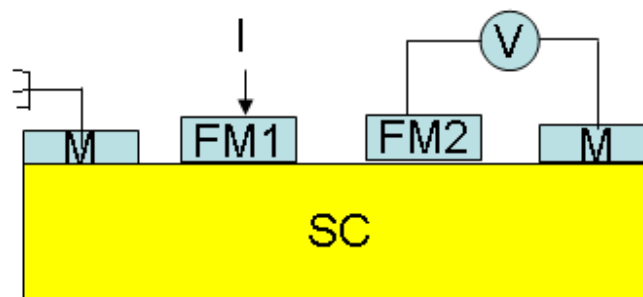


**Figure 12 : Schéma des bandes d'une structure ferromagnétique/semi-conducteur/ferromagnétique dans une configuration vanne de spin**

### 3.2.2. Mesures dites "non locales" :

La méthode de mesure non locale est introduite par Johnson et Silsbee [Johnson 1985] et approfondie par Jedema [Jedema 2001] pour des systèmes métalliques. Elle est utilisée aussi dans le cas des dispositifs à semi-conducteurs : GaAs et silicium [Van't Erve 2007].

Elle consiste à injecter les électrons polarisés à partir d'une électrode ferromagnétique. Ces électrons se propagent dans le semi-conducteur par un mécanisme de dérive-diffusion. La polarisation en spin est atténuée par les mécanismes de diffusion de spin. Cela crée une accumulation de spin et donc une différence de potentiel chimique entre les spins up et les spins down mesurée entre une deuxième électrode magnétique et une électrode non magnétique (figure 13). La d.d.p mesurée est dépendante de l'aimantation de l'électrode et la polarisation en spin.



**Figure 13 : Exemple de structures illustrant le principe de la mesure non locale**

## 4. La spintronique dans le silicium :

### 4.1. Motivations pour l'utilisation du silicium :

Le silicium présente plusieurs avantages par rapport à d'autres semi-conducteurs comme par exemple le GaAs, motivant son étude pour la spintronique:

- La technologie Si représente plus de 90 % du marché du semi-conducteur ce qui faciliterait la dissémination d'éventuels dispositifs spintroniques à base de silicium.

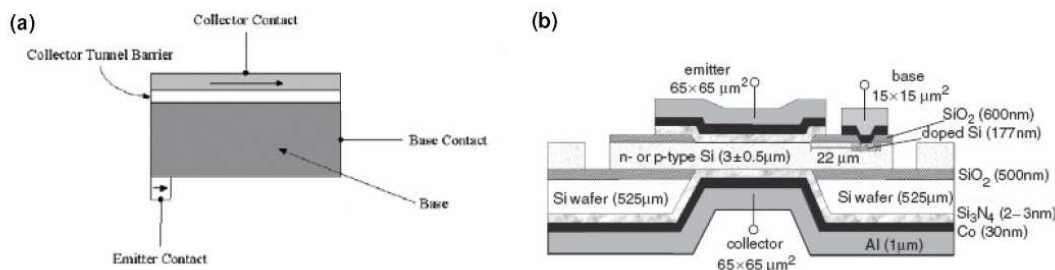
- le rapport la mobilité des trous/ la mobilité des électrons dans le silicium est supérieur à celui de l'arséniure de gallium. En effet, la grande différence de la mobilité entre les trous et les électrons dans le GaAs rend difficile la fabrication de transistors à effet de champ-canal P de rapidité comparable aux transistors FET canal-N, alors que pour le silicium il n'y a aucun problème.

- Vu le faible couplage spin-orbite dans le silicium, la durée de vie du spin dans le silicium est élevée même à température ambiante comparé au cas de GaAs. A 85K, la durée de vie de spin dans le silicium est de 200 ns [Huang 2007] alors que dans le GaAs elle est de 40ns à 30K [Furis 2006]. Ceci donne une longueur de cohérence de spin dans le silicium de quelques microns même à température ambiante.

## 4.2. Exemples d'études de l'injection de spin dans le silicium :

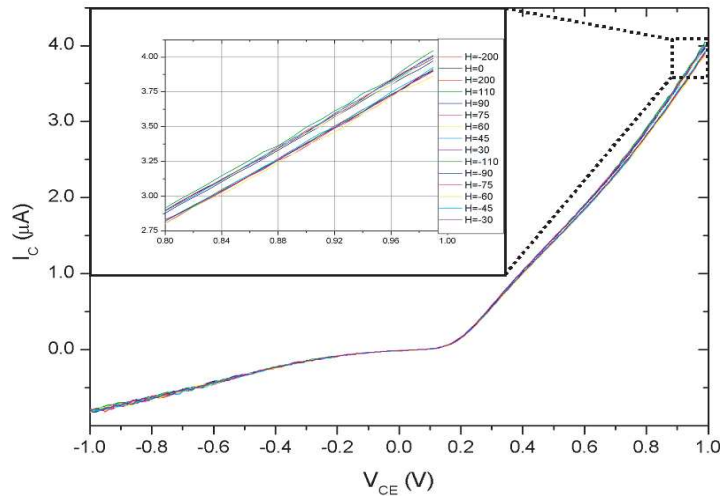
### 4.2.1. Transistor à diffusion de spin :

Dennis et al ont étudié l'injection de spin dans le silicium à travers un transistor appelé transistor à diffusion de spin [Dennis thèse\_2004] [Dennis 2002]. Ce transistor est basé sur l'injection de spin à partir d'un contact ferromagnétique (émetteur) à travers une barrière tunnel. Les électrons polarisés diffusent dans la base jusqu'au collecteur ferromagnétique (figure 14). La structure est une structure verticale réalisée dans un substrat SOI (Silicon-On-Insulator) avec une couche de silicium actif de type p ou n faiblement dopé de  $10^{14}$  à  $10^{15}$   $\text{cm}^{-3}$ . Comme le montre la figure 14, le collecteur est à l'arrière du substrat. La barrière tunnel utilisée dans ce dispositif est le  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Dans le cas d'une injection et collection efficace de spin, ce dispositif présente un gain en courant du collecteur dépendant du champ magnétique comme le montre la figure 15 [Dennis 2002].



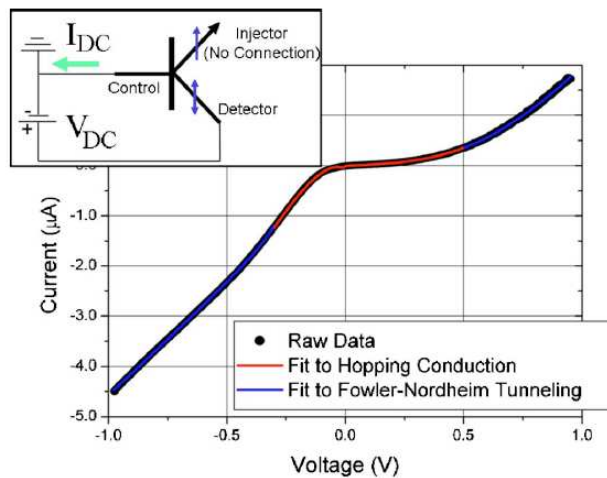
**Figure 14 : (a) Schéma simplifié de transistor (b) Schéma du transistor fabriqué**

Dennis et al ont obtenu une polarisation de spin de 2.5% pour le silicium dopé p et de 10% pour le silicium dopé n à température ambiante.



**Figure 15 : le courant du collecteur en fonction du champ magnétique pour un transistor de type-p [Dennis 2002]**

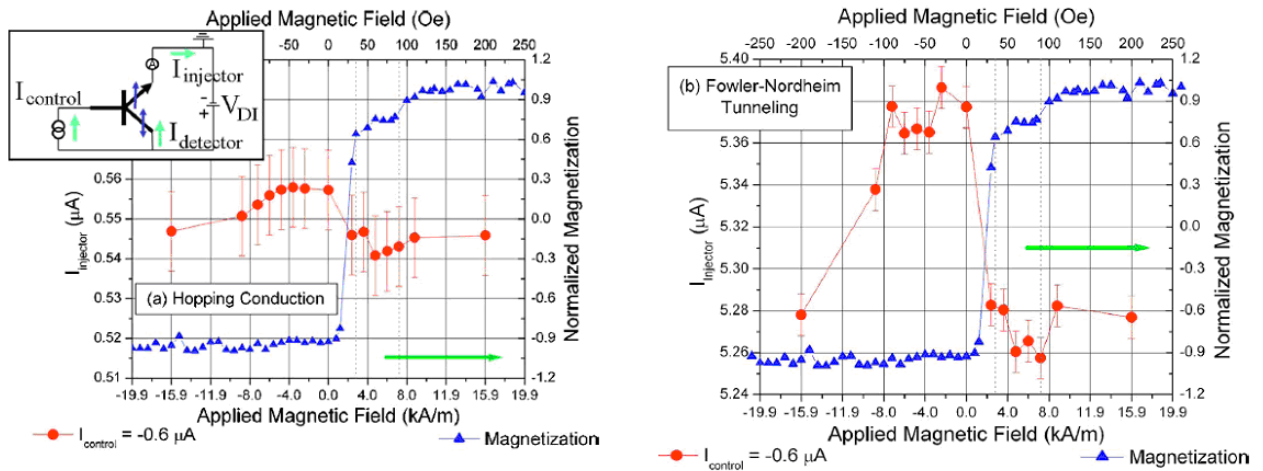
Dennis et al ont montré aussi qu'une injection tunnel et plus précisément l'injection Fowler-Nordheim est fondamentale pour une injection efficace à travers une barrière tunnel [Dennis 2006]. La conduction à travers leur barrière tunnel utilisée (le  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) est de type Hopping (incluant les défauts dans la barrière) à basses tensions et de type Fowler-Nordheim (conduction de type balistique) à hautes tensions comme le montre la figure 16.



**Figure 16 : Caractéristique I-V pour un transistor type-p comparée à un modèle de transport par saut (hopping) et Fowler Nordheim [Dennis 2006]**

Dans la gamme des hautes tensions, avec un mécanisme Fowler-Nordheim, le courant injecté est dépendant du champ magnétique (figure 17-b) appliqué à température ambiante dans le plan de la couche magnétique perpendiculairement à la direction du courant alors dans le cas d'un mécanisme incluant les défauts, aucune dépendance n'est observée (figure 17-a).





**Figure 17 : le courant d'injecteur en fonction du champ magnétique pour un transistor type-p (a) dans la gamme de l'injection "Hopping" (b) dans la gamme de l'injection Fowler-Nordheim**

Dans le cas d'une orientation parallèle des aimantations de l'injecteur et du collecteur, la variation du courant d'injecteur (pour une tension de 1V dans le régime Fowler-Nordheim) est plus large que dans le cas antiparallèle. Cette variation est de  $4.1\% \pm 0.5\%$  dans du Si type-p et de  $12\% \pm 5\%$  dans du Si type-n. Ce résultat très important confirme qu'une conduction via des défauts entraîne la dégradation de polarisation en spin.

#### 4.2.2. Mise en évidence de magnétorésistance dans les structures verticales :

La figure 18-a présente le dispositif conçu par Appelbaum et al pour l'étude de l'injection et la collection de spins dans le silicium [Appelbaum 2007]. Ce dispositif est basé sur l'injection et la collection balistiques des porteurs chauds.

En effet, des porteurs chauds non polarisés sont injectés à partir d'une électrode d'aluminium à travers une barrière tunnel d' $Al_2O_3$  vers une couche ferromagnétique (CoFe) (étape 1). La couche ferromagnétique (CoFe) filtre partiellement les spins en fonction de la direction de son aimantation. Ainsi, les électrons qui passent dans la couche de silicium non dopé de  $10\mu m$  de largeur à travers le contact Schottky ont le spin parallèle à l'aimantation de la couche de CoFe (étape 3). Après un transport vertical à travers la couche non dopé de silicium (étape 4), les spins sont filtrés par une deuxième électrode ferromagnétique (NiFe). Le courant dans la couche de silicium (étape 5) est dépendant des aimantations relatives aux deux couches ferromagnétiques : dans le cas parallèle le courant est plus grand que dans le cas antiparallèle comme le montre la figure 18-b. On mesure une variation du courant collecté de 2% à 85K lorsque les aimantations passent d'un état parallèle à un état antiparallèle.

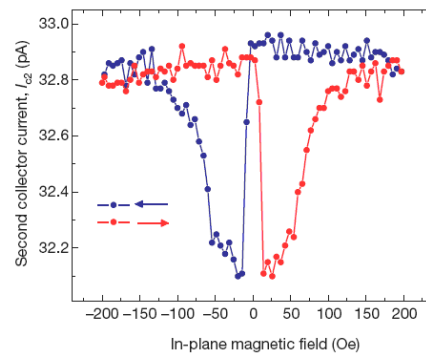
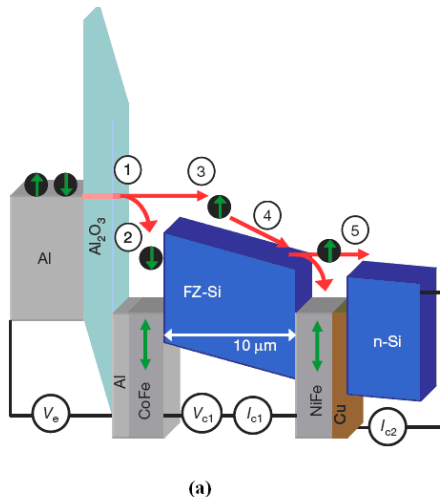
Le choix de ce dispositif est justifié par :

- la première couche non dopée de silicium est choisie car elle a une densité faible d'impuretés conduisant à une bande de conduction linéaire évitant les puits potentiels.
- Les mesures sont faites à 85K : la couche de silicium non dopé est complètement gelée

donc il n'y a pas d'électrons générés thermiquement ou via les impuretés. Les seuls électrons présents sont les électrons polarisés en spin injectés.

- La couche de cuivre est insérée entre la couche NiFe et la couche n-Si pour avoir une barrière basse et pouvoir injecter les électrons à travers la barrière NiFe/n-Si.

- l'anisotropie de forme est utilisée afin d'avoir deux champs coercitifs différents pour les deux couches CoFe et NiFe.

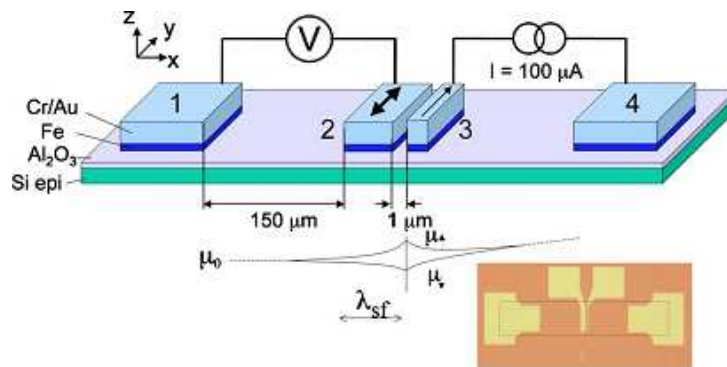


**Figure 18 : (a) Le dispositif utilisé pour l'injection et la collection du spin (b) la variation du courant collecté en fonction du champ magnétique appliqué dans le plan**

Ce dispositif démontre une injection des électrons polarisés en spin dans le silicium mais il convient de remarquer que d'une part ce signal de MR n'est observable qu'à basse température que d'autre part il s'agit de porteurs chauds et non des porteurs thermalisés.

#### 4.2.3. Mise en évidence de l'injection de spin par des mesures non locales :

La figure 19 présente un dispositif horizontal pour injecter et collecter des électrons polarisés en spin [Van't Erve 2007]. Les électrons sont injectés et collectés à partir des contacts métal ferromagnétique (Fe)/barrière tunnel ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) dans du silicium dopé n. Ces contacts ferromagnétiques (notés 2 et 3 dans la figure 19) sont des tailles différentes,  $100 \times 24 \mu\text{m}^2$  et  $100 \times 6 \mu\text{m}^2$  respectivement, permettant d'avoir une anisotropie de forme et donc deux champs coercitifs différents (l'aimantation de la couche 2 peut être renversée à des champs plus faibles).

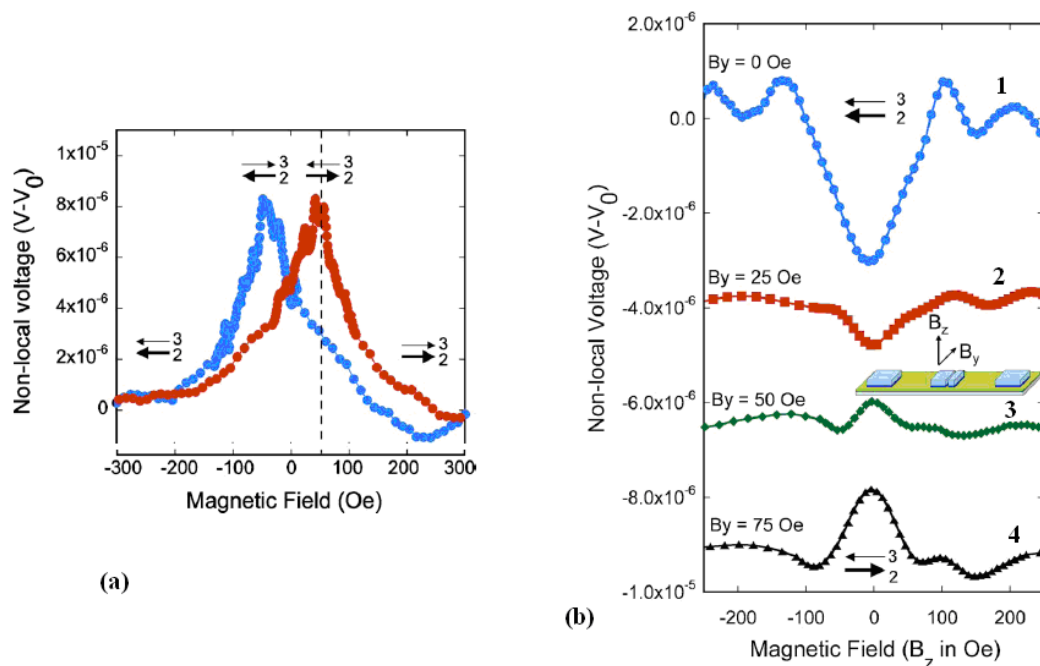


**Figure 19 : Schéma du dispositif utilisé pour mettre en évidence l'injection du spin dans le silicium par des mesures non locales [Van't Erve 2007]**

La détection des électrons polarisés en spin est obtenue de la manière suivante: les électrons polarisés sont injectés dans le silicium à partir du contact 3 produisant un courant qui se propage par un mécanisme de dérive et de diffusion sous l'application d'une tension entre les contacts 3 et 4 et par un mécanisme diffusif à gauche du contact 3. Ce courant net de spin produit une polarisation nette de spin et une différence de potentiel électrochimique dépendante de spin sous le contact ferromagnétique 2. Cette différence est détectée comme un voltage entre le contact magnétique 2 et le contact 1. En effet, l'effet d'accumulation de spin induit un potentiel de l'électrode 2 qui sera dépendant de l'orientation de l'aimantation.

La figure 20-a présente une mesure de la tension entre le contact 2 et 1 à 10K avec un courant de 100µA injecté dans le contact 3. Le champ magnétique est appliqué le long de l'axe y de la couche de Fe. Pour une orientation parallèle de deux contacts 2 et 3, la tension non locale est minimum et pour une orientation antiparallèle, la tension est maximale (pic). La figure 20-b présente des mesures d'effet Hanle réalisées à 5K dans les mêmes conditions de polarisation que la mesure non locale précédente. Ces mesures sont fonction du champ magnétique perpendiculaire à la surface  $B_z$  pour des valeurs de champ dans le plan  $B_y$  pour lesquelles on a des orientations d'aimantation du contact 2 (collecteur) et 3 (injecteur) parallèles et antiparallèles. Dans la courbe 1, les aimantations de deux contacts sont dans la même direction et le signal non local est minimum pour  $B_z=0$ . Quand  $B_z$  augmente, les électrons dans le silicium précessent pendant leur transit jusqu'au collecteur ; le signal non local augmente.

Quand  $B_y$  augmente, l'aimantation du contact 2 commence à s'inverser, le signal Hanle diminue pour  $B_y=250\text{Oe}$  et son signe s'inverse pour  $B_y=500\text{Oe}$  quand le contact 2 voit son aimantation s'inverser. Les contacts 2 et 3 sont largement antiparallèles pour  $B_y=750\text{Oe}$ , le signal non local est maximum pour  $B_z=0$  et diminue quand  $B_z$  augmente.



**Figure 20:** (a) Evolution du potentiel de l'électrode 2 en fonction du champ magnétique à 10K  
 (b) Effet Hanle à 5K: Evolution du potentiel de l'électrode 2 en fonction du champ appliqué  
 [Van't Erve 2007]

## 5. Conclusion:

La spintronique dans les semi-conducteurs a progressé en suivant plusieurs étapes :

- l'injection des électrons à partir des semi-conducteurs magnétiques à basse température à l'injection depuis des métaux de transition à température ambiante.
- l'injection depuis un contact ohmique à l'injection à travers une barrière Schottky ou tunnel dans les semi-conducteurs III-V suivie d'une détection optique des électrons polarisés.
- l'injection des électrons chauds polarisés en spins dans le silicium et leur détection électrique via la magnétorésistance.

## IV. Dispositif de test utilisé dans l'étude de l'injection du spin dans le silicium:

### 1. Introduction :

Depuis quelques années, notre équipe travaillait sur un dispositif test pour l'étude d'injection de spin dans le silicium [Viatcheslav 2004] baptisé MEMIS pour MEMoire Magnétique Intégrée sur Silicium. Ce dispositif est basé sur:

- Une injection électrique des électrons polarisés en spin à partir des métaux de transition à travers une barrière tunnel.
- Un transport dans le silicium vers une autre électrode magnétique.

- Une collection électrique depuis le silicium par l'électrode magnétique à travers une barrière tunnel.

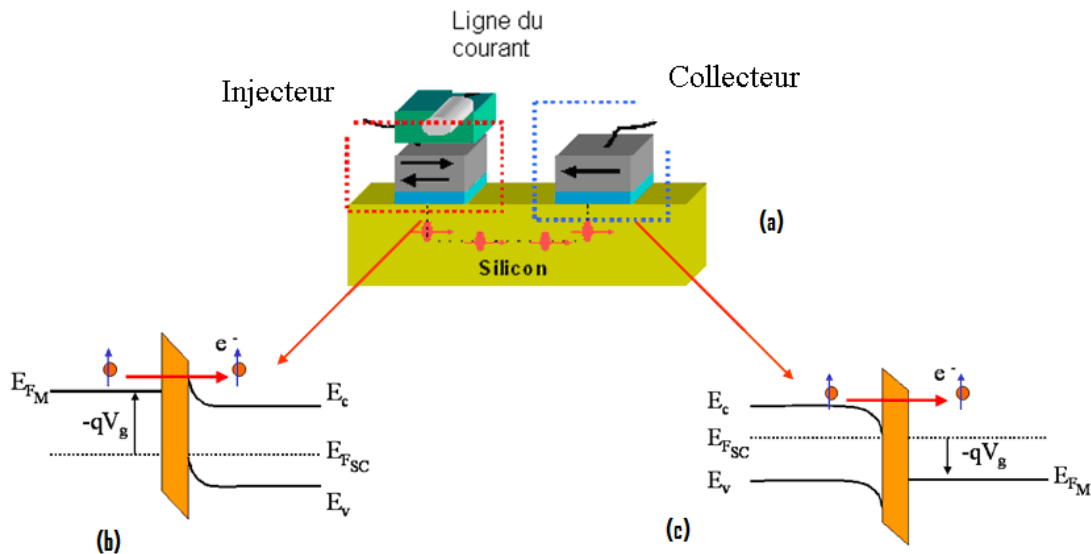
Le dispositif test ainsi que ses différentes variantes en termes de barrières tunnel comme l'oxyde de silicium et l'alumine sont décrits ci-dessous.

## 2. Le dispositif test :

### 2.1. Description et principe de fonctionnement:

Comme le montre la figure 21-a, le dispositif test comprend un injecteur d'électrons polarisés en spin, un canal en silicium permettant la propagation des électrons polarisés en spin vers le collecteur, une électrode magnétique sélective en spin. Le collecteur et l'injecteur sont donc des jonctions tunnel type métal ferromagnétique/Isolant/Si (FMIS) [Viatcheslav 2004].

Ce dispositif préfigure une mémoire MRAM intégrée directement sur silicium : les deux états du point mémoire du dispositif MEMIS sont définis par l'orientation relative des aimantations des deux électrodes magnétiques. L'information binaire peut être écrite sur la cellule mémoire avec un champ magnétique généré par le passage de courant à travers une ligne conductrice (figure 21-a), ou bien grâce à un champ magnétique extérieur. La barrière tunnel doit permettre d'injecter et de collecter les électrons par un mécanisme tunnel direct, mécanisme balistique garantissant la conservation du spin comme représenté schématiquement par la figure 21-b et 21-c.



**Figure 21 : (a) Schéma de principe du dispositif test (b) diagramme des bandes de la diode FMIS injectrice (c) diagramme des bandes de la diode FMIS collectrice**

La figure suivante donne le schéma technologique détaillé du dispositif MEMIS complet dont nous disposons pour l'étude de l'injection de spin dans le silicium. Il comporte l'injecteur et le collecteur qui sont deux diodes respectivement sur un substrat p et un caisson n. Ce choix est justifié par le fait de pouvoir avoir deux diodes polarisées en direct. Pour l'injection, on injecte depuis le métal ferromagnétique pour des tensions négatives (diode p-type avec  $V_g < 0$ ). Pour collecter les électrons, la diode n est polarisée en direct : les électrons passent depuis le substrat vers le métal.

Le dispositif comporte aussi deux contacts ohmiques  $n^{++}$  et  $p^{++}$  qu'on appelle drain et base permettant de régler séparément le courant d'injection et de collection de spin. La séquence technologique d'élaboration de ce dispositif test est décrite en détail dans la thèse de Christophe Duluard [Duluard thèse\_2007].

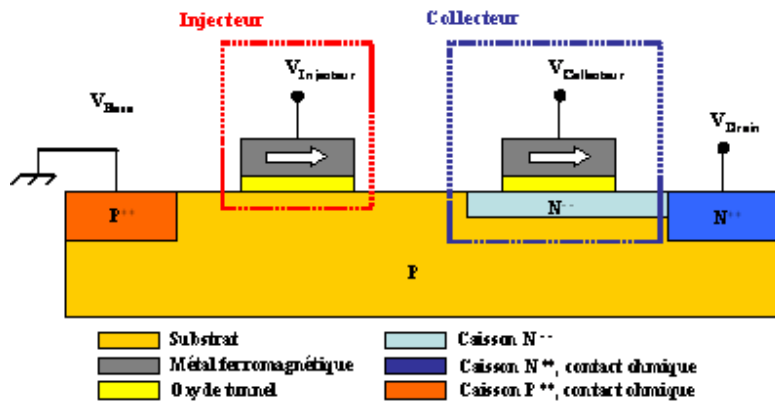


Figure 22 : Schéma complet du dispositif test

La figure 23-a présente le dessin de masque du dispositif. La figure 23-b donne une image optique en vue de dessus du dispositif test. Dans cette image, on distingue les deux électrodes injecteur et collecteur qui ont des rapports d'aspects ( $W*L$ ) différents ainsi que les deux contacts ohmiques.

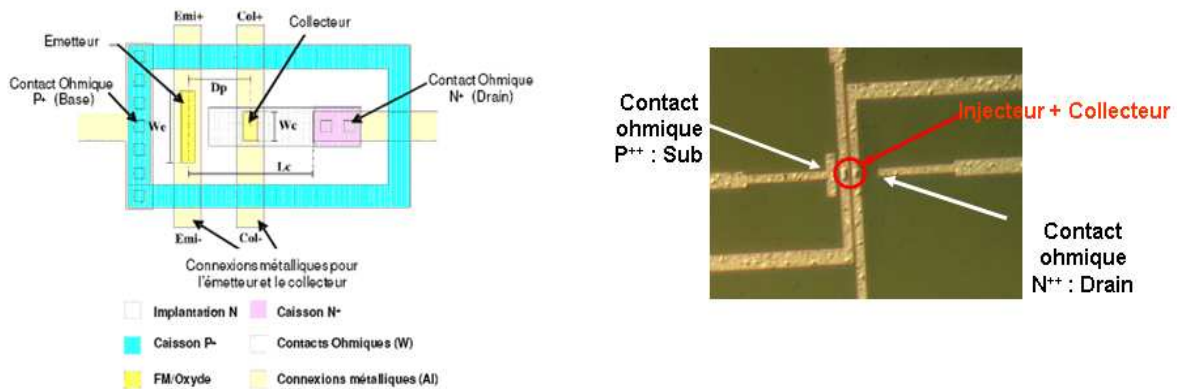


Figure 23 : (a) Schéma technologique du dispositif test (b) Image du dispositif avec les lignes métalliques pour les contacts

### 3. Les différents dispositifs tests :

Rappelons que l'objectif de cette thèse est l'étude des mécanismes de transport dans des structures servant à l'injection de spin dans le silicium. Cette étude s'est déroulée dans le cadre d'un projet de recherche plus large sur le concept de mémoires MRAM intégrées sur silicium. Notre étude a été menée sur des lots de plaquettes de silicium comportant un ensemble d'échantillons avec oxyde de silicium et alumine. L'oxyde de silicium est obtenu par oxydation thermique de silicium sous oxygène à 800°C. La barrière d'alumine est une bicouche d'alumine et de silice. La couche de silice est obtenue par oxydation chimique dans de l'ozone servant à éviter la mise en contact de l'alumine et du silicium dans le but d'éviter la diffusion de l'aluminium. L'alumine est obtenue par dépôt de couches atomiques (ALD) en alternant le dépôt d'une monocouche d'aluminium et son oxydation. La monocouche d'aluminium est réalisée par décomposition de triméthylaluminium à 300°C dans un réacteur Pulsar TM 2000 d'ASM microchemistry. Une oxydation aqueuse transforme cette couche en alumine.

Dans ce lot, on trouve des variantes d'échantillons à différentes épaisseurs et dont certains ont subi des recuits post-dépôt:

- Le recuit « forming gas » : ce recuit est appliqué en fin de réalisation des dispositifs. Ce recuit est fait typiquement à 450°C pendant 30mn sous N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>. Il permet de guérir les défauts d'interface (électriquement actifs) du silicium en saturant les liaisons pendantes par de l'hydrogène.

- Le recuit de densification : ce recuit est appliqué à 700°C sous O<sub>2</sub> pendant 15mn. Le résultat attendu est une plus grande compacité de la couche qui est susceptible de limiter la diffusion des éléments métalliques et aussi de réduire la quantité de charges fixes présentes dans ce type d'oxyde non recuit.

Les tableaux 2 et 3 résument les différents échantillons testés avec l'oxyde de silicium et l'alumine respectivement :

Plaquette n°	Epaisseur de l'oxyde	Type de recuit
1	3 nm	Non recuit
2	2.5 nm	Non recuit
3	4 nm	Non recuit
4	3 nm	Recuit Forming Gaz
5	2.5 nm	Recuit Forming Gaz
6	4 nm	Recuit Forming Gaz

*Tableau 2: Description des différentes plaquettes testées avec une barrière d'oxyde de silicium*

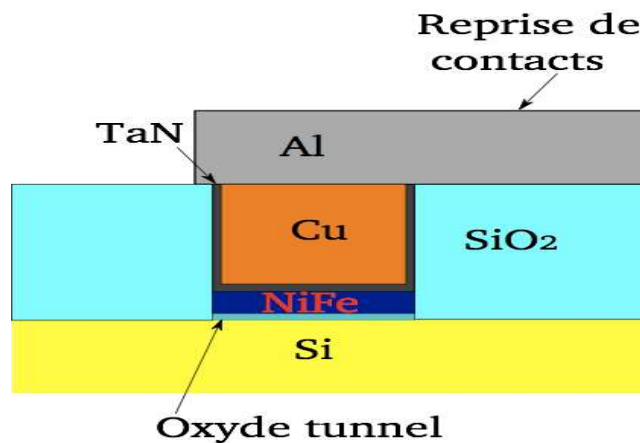
Plaquette n°	Epaisseur de l'oxyde	Type de recuit
1	2 nm	Non recuit
2	2 nm	Recuit de densification
3	3 nm	Non recuit
4	3 nm	Recuit de densification+ Recuit Forming gas
5	4 nm	Non recuit
6	4 nm	Recuit de densification
7	4 nm	Recuit de densification+ Recuit Forming gas
8	4 nm	Recuit Forming gas

**Tableau 3: Description des différentes plaquettes testées avec une barrière d'alumine**

Ce lot comporte des cellules mémoires complètes (figure 24) qui sont destinées à l'étude de la magnétorésistance sous l'effet d'un champ magnétique, des diodes et des transistors destinés à des études électriques.

En effet, comme déjà mentionné, l'injecteur et le collecteur sont des diodes FMIS. Donc, afin d'étudier leurs propriétés, les diodes simples ont été caractérisées :

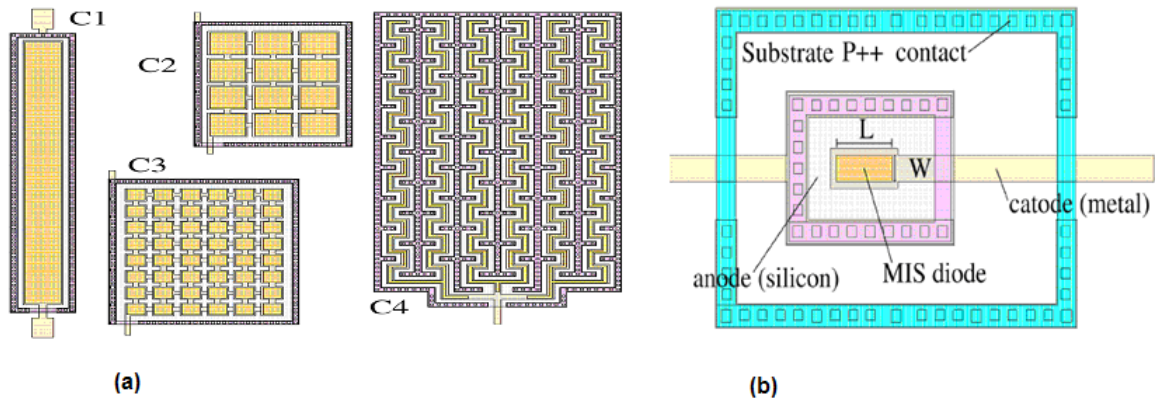
- **Les diodes en fond de tranchée** : Le métal ferromagnétique est le permalloy (NiFe) avec une épaisseur variant de 10 à 25 nm déposé par pulvérisation. L'oxyde tunnel est réalisé en fond de tranchée (figure 24). La reprise de contact sur ces échantillons se fait en face avant à travers un empilement TaN/Cu/Al.



**Figure 24 : Dispositif test de la diode FMIS en "fond de tranchée"**

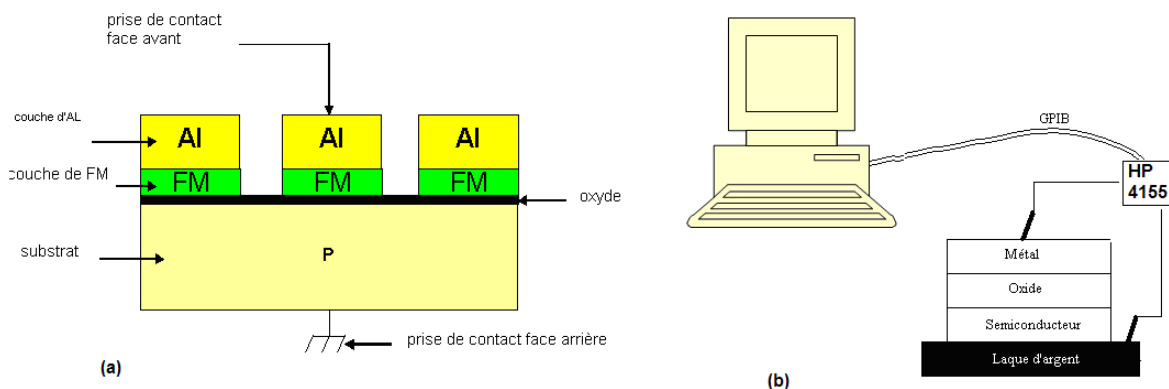
Les diodes FMIS dont les surfaces variant de 2 à 12  $\mu\text{m}^2$  sont destinées à des mesures courant-tension. D'autres structures, les capacités FMIS, ayant des surfaces plus grandes (400  $\mu\text{m}^2$ , 1200  $\mu\text{m}^2$ , 2400  $\mu\text{m}^2$ ) sont destinées aux mesures capacité-tension et conductance-tension. Ces capacités ont des différents périmètres afin d'étudier l'influence des effets de bord. La figure 25 présente le lay-out (dessin de masque) de ces différentes structures.





**Figure 25 : (a) Layout des capacités (b) Layout des diodes**

- **Les diodes pleine plaque** : sont des simples diodes de type MIS illustrées par la figure 26-a. Ces structures appartiennent à un lot d'échantillons qui ne comprend que des diodes simples réalisées sur des plaquettes de silicium qui ont un diamètre de 100mm et un dopage de type P (Bore). Un oxyde thermique de 7 nm est réalisé en pleine plaque. Une couche de 50 nm d'épaisseur d'un métal ferromagnétique (le NiFe) est réalisée par pulvérisation cathodique (PVD). Le métal ferromagnétique (FM) est couvert d'une couche d'aluminium afin d'éviter l'oxydation naturelle du métal. Des diodes avec des grilles d'aluminium (Al/SiO<sub>2</sub>/Si) sont utilisées comme référence afin d'observer les effets induits par le métal ferromagnétique. La surface des différentes diodes varie entre 10\*10 μm<sup>2</sup> et 17.88 mm<sup>2</sup>. Afin d'effectuer les mesures, l'échantillon est fixé sur un support conducteur grâce à la laque d'argent. Les contacts sont pris directement sur la grille en face avant d'une part et sur le support conducteur en face arrière d'autre part (figure 26-b). L'objectif de cette étude comparative entre les diodes MIS à grille ferromagnétique et grille d'aluminium est de voir les effets induits par l'introduction de métal ferromagnétique en processus CMOS et donc l'effet des métaux 3d sur les caractéristiques électriques de ces structures.



**Figure 26: (a) Structure des diodes pleine plaque (b) Banc de caractérisation électrique**

#### 4. Choix des barrières tunnels utilisées :

Dans notre étude, nous nous sommes intéressés à deux types d'oxyde à utiliser comme barrière tunnel; l'oxyde de silicium et l'oxyde d'aluminium. Le choix de  $\text{SiO}_2$  est justifié par son utilisation en technologie CMOS. Le choix d' $\text{Al}_2\text{O}_3$  est justifié par ses applications en spintronique.

##### 4.1. Principales propriétés électriques de $\text{SiO}_2$ :

La figure 27 présente le premier diagramme de bandes du système Si- $\text{SiO}_2$  obtenu par Williams à partir des mesures de photoémission [Williams 1965].

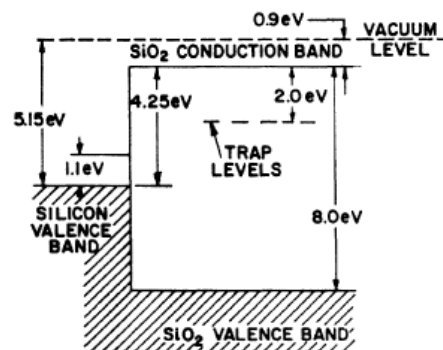


Figure 27 : Diagramme des bandes du système Si- $\text{SiO}_2$  [Williams 1965]

La largeur de la bande interdite de l'oxyde de silicium est d'environ 9 eV. Cette valeur est relativement importante, ce qui donne un caractère isolant au  $\text{SiO}_2$ .

La hauteur de barrière pour les électrons est de 3.15 eV alors que pour les trous elle est de 4.75 eV. L'oxyde de silicium a une résistivité de l'ordre de  $10^{15}$  à  $10^{16}$   $\Omega \cdot \text{cm}$  ce qui confirme le caractère isolant de cet oxyde. La mobilité des électrons dans le  $\text{SiO}_2$  thermique à la température ambiante est de 10 à 20  $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  et la mobilité des trous est de l'ordre de  $10^{-5}$   $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . Le  $\text{SiO}_2$  a une constante diélectrique de  $3.9 \epsilon_0$ , avec  $\epsilon_0$  la permittivité du vide, relativement faible par rapport aux oxydes High-k. Dans le  $\text{SiO}_2$ , différents types de défauts peuvent exister : les défauts intrinsèques qui sont liés à l'arrangement des atomes de silicium et d'oxygène entre eux, et les défauts extrinsèques qui sont dus à la présence d'atomes étrangers dans l'oxyde pouvant être introduits au cours d'un processus technologique.

##### 4.2. Principales propriétés d' $\text{Al}_2\text{O}_3$ :

L'évolution progressive de la microélectronique depuis quelques années s'accompagnait d'une diminution de l'épaisseur de l'oxyde (l'oxyde de grille dans le cas des transistors), ce qui entraînait des problèmes d'ordre physique ou technologiques. D'autres oxydes ont été proposés et plus particulièrement les oxydes à forte constante diélectrique, les « High-k ». En effet, grâce à ces plus grandes constantes diélectriques, on peut garder une épaisseur d'oxyde fixe tout en augmentant la capacité de couplage grille-canal du transistor [Kingon 2000].

Pour remplacer le  $\text{SiO}_2$ , les oxydes High-k doivent satisfaire certains critères en terme de valeur de la permittivité, structure de bande, discontinuité des bandes pour le transport des charges, stabilité thermodynamique, qualité de l'interface avec le Si, morphologie, compatibilité avec l'électrode de grille et avec le procédé technologique, fiabilité...etc.

Le tableau suivant donne une comparaison avec le SiO<sub>2</sub> des caractéristiques des deux oxydes High-k les plus connus l'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> et le HfO<sub>2</sub> :

	Constante diélectrique	Bande interdite (eV)	Discontinuité bande de conduction (eV)	Stabilité thermique par rapport au silicium
SiO <sub>2</sub>	3,9	9	3,15	>1050°C
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	~10	8,8	2,8	~1000°C
HfO <sub>2</sub>	~20	6	1,5	~950°C

Tableau 4 : *Propriétés des matériaux SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfO<sub>2</sub> [Manchanda 2000] [Chang thèse\_2003]*

L'alumine avec ses propriétés est un oxyde très intéressant. En plus de son utilisation en microélectronique, l'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> est très utilisé dans le domaine de la spintronique. En effet, les premiers résultats expérimentaux de magnétorésistance tunnel à température ambiante ont été obtenus avec l'alumine [Moodera 1995] [Miyasaki 1995].

La figure 28 présente la structure des bandes du système Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si :

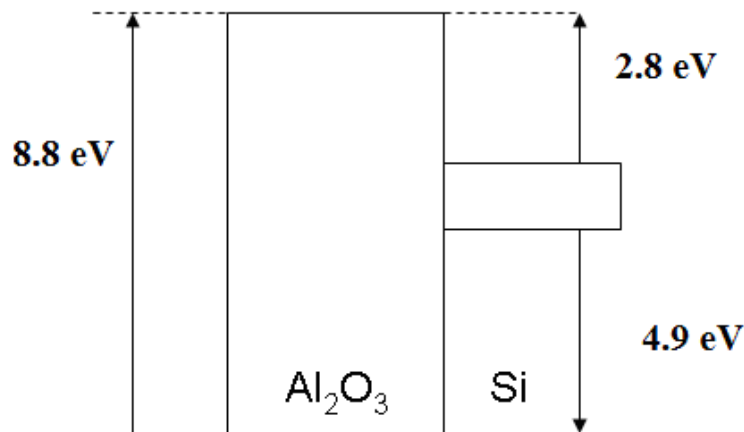


Figure 28 : *Diagramme des bandes du système Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si*

## 5. Etude des propriétés magnétiques des électrodes :

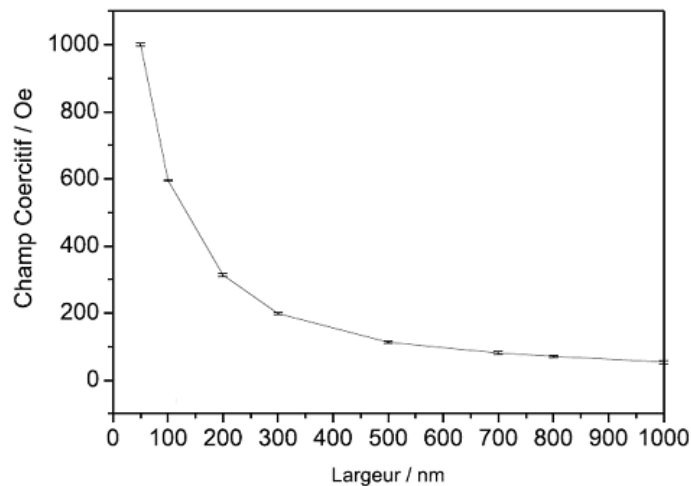
L'utilisation de la magnétorésistance dans la mise en évidence de l'injection de spins dans le silicium grâce à des dispositifs test comme celui de la figure 22 suppose l'utilisation d'électrodes magnétiques avec des propriétés bien contrôlées. Les électrodes doivent être mono-domaines à l'état rémanent. D'autre part, l'utilisation d'un champ magnétique extérieur comme moyen de manipulation des aimantations des électrodes pour passer d'une configuration parallèle à anti-parallèle suppose que les deux électrodes aient des champs coercitifs différents. Enfin, le couplage magnétique des deux électrodes entre elles ne doit pas modifier de façon significative leurs champs coercitifs respectifs. Ces trois propriétés ont été étudiées par N.Bruyant [Bruyant thèse\_2008] et nous résumons ci-après les conclusions de ces études.

- Electrodes mono domaines :

L'électrode mono-domaine permet d'avoir une polarisation uniforme de tous les électrons et par la suite une polarisation en spin maximale. L'utilisation des électrodes de taille réduite permet d'avoir cette condition. Des simulations rapportées dans la thèse de Nicolas Bruyant faites sur une électrode de longueur 1.5  $\mu\text{m}$  avec des différentes largeurs ont montré que pour des largeurs inférieures à 500nm, l'électrode est mono-domaine.

- Champs de retournement de deux électrodes différents :

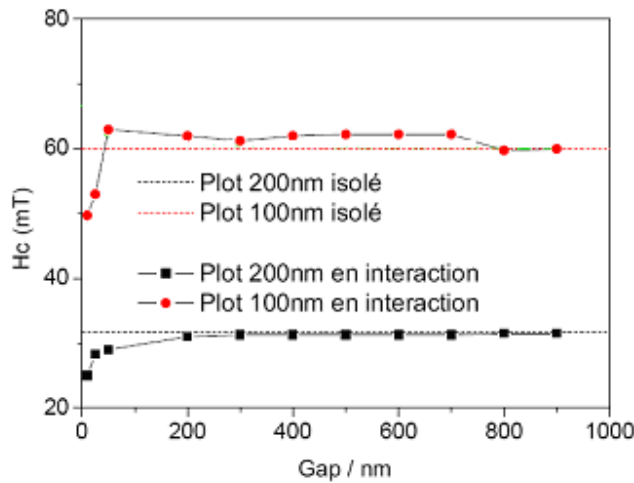
Les simulations précédentes ont montré aussi que le champ coercitif (champ de retournement) varie comme l'inverse de la largeur de l'électrode (figure 29). Donc en choisissant bien les dimensions des deux électrodes utilisées dans le dispositif test, on obtient deux champs coercitifs différents. Cela permet d'avoir grâce à un champ magnétique extérieur, les deux aimantations des électrodes dans un état parallèle ou antiparallèle. L'anisotropie de forme permet donc d'avoir cette différence de champ de retournement de deux électrodes magnétiques.



**Figure 29 : Simulation de champ coercitif en fonction de la largeur d'une électrode magnétique d'une longueur de 1.5 $\mu\text{m}$  [Bruyant thèse\_2008]**

- Couplage dipolaire entre les électrodes :

Des simulations micro magnétiques ont été effectuées sur deux électrodes de largeur de 100 nm et 200 nm. Ces deux électrodes sont espacées d'une distance variant entre 10 nm et 900 nm. La figure 30 montre le champ coercitif calculé en fonction de l'espacement pour des électrodes isolées, pour des électrodes en interaction. Ces simulations montrent que pour des distances d'espacement supérieures à 50 nm l'interaction peut être négligée.



*Figure 30 : Simulation des champs coercitifs de deux plots en fonction de la distance qui les sépare [Bruyant thèse\_2008]*

## 6. Problèmes liés à la présence d'une électrode magnétique:

Une électrode magnétique intégrée sur silicium peut modifier les propriétés électriques du substrat mais également les mécanismes de transport à travers la barrière tunnel. Ces problèmes sont liés à la diffusion des atomes magnétiques.

### 6.1. La diffusion des atomes magnétiques : contamination du substrat:

Dans sa thèse, Duluard a étudié la contamination de l'oxyde et de silicium dans des structures métal ferromagnétique/isolant/silicium [Duluard thèse\_2007].

Cette étude est motivée par la démonstration dans la littérature de l'effet néfaste des métaux 3d sur l'injection du spin. La contamination par ces métaux induit des défauts dans le silicium qui entraînent la diminution de la durée de vie des porteurs polarisés en spin, ainsi que des défauts dans l'oxyde qui entraînent la perte des spins [Jansen 1998] [Jansen2000].

Il existe différents outils d'analyse pour étudier la diffusion des métaux ferromagnétiques. Parmi ces méthodes, on peut citer :

- La TOF-SIMS :

Le TOF-SIMS (Time Of Flight Secondary Ion Mass Spectroscopy) est un analyseur à temps du vol. Cette méthode est basée sur la mesure du temps du vol des ions secondaires entre l'échantillon et le détecteur. Cette étude est utilisée sur le silicium après la gravure du métal ferromagnétique et de l'oxyde.

- La  $\mu$ PCD :

Bigot a étudié l'influence de différents contaminants Fer, Nickel, Cobalt sur la durée de vie des porteurs par la méthode  $\mu$ PCD (Microwave Photoconductance Decay). Cette méthode permet de remonter à la durée de vie des porteurs dans le volume du silicium [Duluard thèse\_2007]. Il a été

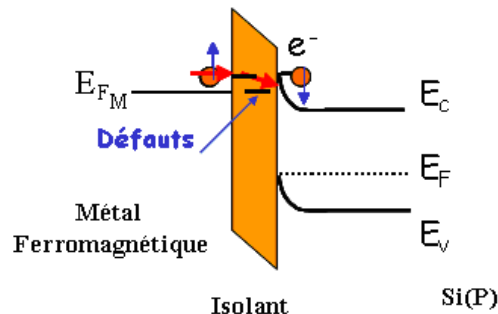
montré que la durée de vie diminue très fortement en présence du fer comme contaminant (elle passe de quelques 100  $\mu\text{s}$  sans contamination à quelques  $\mu\text{s}$  avec une contamination initiale en surface de  $10^{12}$  at. / $\text{cm}^2$ ). Il a été observé aussi que l'influence d'autres contaminants cobalt et nickel est plus faible que dans le cas du fer (la durée de vie de porteurs minoritaires passe de quelques 100 $\mu\text{s}$  sans contamination à 50 $\mu\text{s}$  avec une contamination initiale en surface de  $10^{13}$  at. / $\text{cm}^2$ ).

- La méthode C(t) :

La méthode C(t) permet aussi de déterminer la durée de vie des porteurs minoritaires en surface du silicium. Cette technique a été employée dans notre étude où on a pu démontrer l'effet sur la durée de vie des porteurs, de la diffusion des métaux ferromagnétiques et plus précisément le Nickel et le Fer dans le silicium par la comparaison entre les deux structures métal ferromagnétique/ $\text{SiO}_2$ /Si et Al/ $\text{SiO}_2$ /Si. Cette méthode sera décrite en détail dans le chapitre II.

## 6.2. La diffusion des atomes magnétiques : contamination de la barrière:

Comme expliqué précédemment, l'injection des électrons polarisés en spin se fait à partir du métal ferromagnétique vers la bande de conduction du silicium dopé p. Afin de conserver le spin lors du passage des électrons à travers la barrière tunnel, une injection de type tunnel direct est nécessaire. Or, la présence des défauts dans la barrière peut modifier les mécanismes de transport. En effet, des mécanismes du transport via les défauts peuvent exister. Ces mécanismes peuvent entraîner la perte de l'orientation du spin des électrons (figure 31).

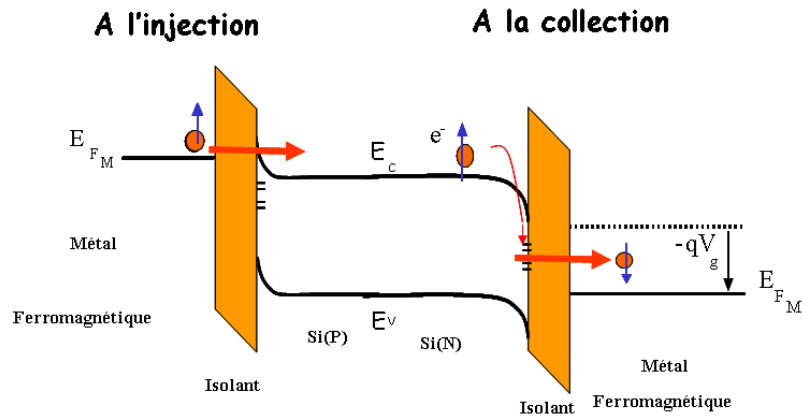


*Figure 31 : Effet des défauts sur les mécanismes du transport à l'injection*

En effet, il a été montré que la présence des impuretés et des défauts localisés dans la barrière d'une jonction tunnel (jonction Ni/NiO/Co) introduit des canaux assistés par les impuretés conduisant même à l'inversion du signe de la magnétorésistance tunnel TMR [Tsymbol 2003]. Cela confirme bien l'effet néfaste des défauts dans la barrière sur la polarisation du spin.

Les mécanismes du transport à travers la barrière tunnel seront étudiés en détail dans le chapitre III.

A la collection, les électrons polarisés en spin passent depuis le substrat du silicium vers le métal ferromagnétique. Ces électrons peuvent être piégés à l'interface barrière silicium/isolant par les états d'interface (figure 32) pendant une durée qui peut excéder la durée de vie du spin, ce qui entraîne la dépolarisation du spin.



**Figure 32 : Effet des états d'interface sur la polarisation du spin à la collection**

De plus, les défauts à l'interface sont connus pour avoir un rôle néfaste sur la polarisation du spin, la TMR [Schuhl 2005]. En effet, la présence des impuretés crée des canaux de conduction additionnels.

La caractérisation de l'interface barrière tunnel/silicium sera étudiée dans le chapitre II.

## Référence:

[Alvarado 1992]: S F. Alvarado, P. Renaud, **Observation of spin polarized electron tunneling from a ferromagnet into GaAs**, Phys. Rev. Lett, Vol. (68), 1992, pp. 1387-1390

[Appelbaum 2007]: I. Appelbaum, B.Huang, D J. Monsma, **Electronic measurement and control of spin transport in silicon**, nature, Vol (447), 2007, pp. 295-298

[Bernard-Granger thèse\_2004] : F. Bernard-Granger, **Modélisation et simulation de micro systèmes magnétiques Application aux têtes de lecture GMR pour enregistrer sur bande et aux mémoires magnétiques de type MRAM**, Thèse de doctorat, UJF-Grenoble, 18 Octobre 2004

[Chang thèse\_2003] : Y. Chang, **Etude de caractérisation de matériaux diélectriques de grille à forte permittivité pour les technologies CMOS ultimes**, Thèse de doctorat, INSA de Lyon, Juillet 2003

[Bruyant thèse\_2008] : N. Bruyant, **Conception et caractérisation de dispositifs permettant l'étude du transport dépendant du spin dans le silicium**, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, Décembre 2008

[Datta 1990]: S. Datta, B. Das, **Electronic analog of the electro-optic modulator**, Appl. Phys. Lett, Vol. (56),1990, pp. 665-667

[Dennis 2002]: C. L. Dennis, C. Sirisathitkul, G. J. Ensell, J. F. Gregg, S. M. Thompson, **High current gain silicon-based spin transistor**, J. Phys.D: Appl.Phys., Vol. (36), 2002, pp. 81-87

[Dennis thèse\_2004]: C. L. Dennis, **A silicon-Based Spin Transistor**, Thèse de doctorat, l'université d'Oxford, 2004

[Dennis 2006]: C. L. Dennis, J. F. Gregg, G. J. Ensell, S. M. Thompson, **Evidence for electrical spin tunnel injection into silicon**, J. Appl. Phys, Vol. (100), 2006, pp. 043717-1-043717-3

[Duluard thèse\_2007] :C.DULUARD, **Etude de la faisabilité des mémoires magnétiques intégrées sur silicium**, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, Mars 2007

[Fert 2001]: A. Fert, H. Jaffrès, **Conditions for efficient spin injection from a ferromagnetic metal into a semiconductor**, Phys. Rev. B, Vol. (64), 2001, 184420-1-184420-9

[Fiederling 1999]: R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, **Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode**, Nature, Vol.(402), 1999, pp. 787-789

[Furis 2006] M. Furis, D. L. Smith, S. A. Crooker, and J. L. Reno. **Bias-dependent electron spin lifetimes in n-gas and the role of donor impact ionization**, Appl. Phys. Lett., (89), 2006, pp.102102-1-102102-3



[Freescale 2006]: <http://www.eetimes.com/news/semi/showArticle.jhtml?articleID=190301247>

[Hanbicki 2003]: A. T. Hanbicki, O. M. J. Van't Erve, R. Magno, G. Kioseoglou, C. H. Li, B. T. Jonker, G. Itkos, R. Malloy, M. Yasar, A. Petrou, **Analysis of the transport process providing spin injection through an Fe/AlGaAs Schottky barrier**, Appl. Phys. Lett, Vol (82), 2003, pp.4092-4094

[Huang 2007] :B. Huang, D.J. Monsma, and I. Appelbaum, **Coherent spin transport through a 350 micron thick silicon wafer**, Phys. Rev.Lett, Vol. (99), 2007, pp. 177209-1-177209-4

[Jansen1998]:R.Jansen, J.S.Moodera, **Influence of barrier impurities on the magnetoresistance in ferromagnetic tunnel junctions**, J. Appl. Phys, Vol. (83),1998, pp.6682-6684

[Jansen2000]:R.Jansen, J.S.Moodera, **Magnetoresistance in doped magnetic tunnel junctions: effect of spin scattering and impurity-assisted transport**, Phys.Rev.B, Vol .(61), 2000, pp. 9047-9050

[Jedema 2001]: F. J. Jedema, A. T. Filip, B. J. van Wees, **Electrical spin injection and accumulation at room temperature in an all-metal mesoscopic spin valve**, Nature, Vol.(410), 2001, pp. 345–348

[Johnson 1985]: M. Johnson, R. H. Silsbee, **Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals**, Phys. Rev. Lett., Vol.(55), 1985,pp.1790–1793

[Kington2000]: A.I. Kingon, J.-P. Maria, S.K. Streiffer, **Alternative dielectrics to silicon dioxide for memory and logic devices**, Nature, Vol. (406), 2000, pp. 1032-1038

[Lou 2006]: X. Lou, C. Adelmann, M. Furis, S. A. Crooker, C. J. Palmstrom, P. A. Crowell, **Electrical detection of spin accumulation at a ferromagnet-semiconductor interface**, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.(96), 2006, pp.176603-1-176603–4

[Manchanda2000]: L. Manchanda, M.L. Green, R.B. Van Dover, M.D. Morris, A. Kerber, Y. Hu, J-P. Han, P.J. Silverman, T.W. Sorsch, G. Weber, V. Donnelly,K. Pelhos, F. Klemens, N.A. Ciampa,A. Kornblit, Y.O. Kim, J.E. Bower, D. Barr, E. Ferry, D. Jacobson,J. Eng,B. Busch, H. Schulte, **Si-doped aluminates for high temperature metal-gate CMOS: Zr-Al-Si-O, a novel gate dielectric for low power applications**, IEEE Int. Electron Devices Meet., 2000,pp. 23-26

[Motsnyi 2002]: V. F. Motsnyi, J. De Boeck, J. Das, W. Van Roy, G. Borghs, E. Goovaerts, V. I. Safarov, **Electrical spin injection in a ferromagnet/semiconductor heterostructure**, App.Phys.Lett, Vol. (81), 2002,pp. 265-267

[Monzon 1997]: F. G. Monzon, M. Johnson,M. L. Roukes, **Strong Hall voltage modulation in hybrid ferromagnet/semiconductor microstructures**, Appl.Phys. Lett, Vol. (71), 1997,pp. 3087- 3089

[Montaigne thèse\_1999]: F. Montaigne, **Effet tunnel dépendant du spin : des simples aux doubles jonctions**, Thèse de doctorat, l'université Paris VII –Denis Diderot, 1999

[Ohno 1999]: Y. Ohno, O. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, D. D. Awschalom, **Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure**, Nature, Vol. (402), 1999, pp. 790-792

[Rashba 2000]: E. I. Rashba, **Theory of electrical spin injection: Tunnel contacts as a solution of the conductivity mismatch problem**, Phys.Rev.B, Vol. (62), 2000, pp. R16267-R16270

[Schuhl 2005]: A. Schuhl, D. Lacour, **Spin dependent transport: GMR&TMR**, C. R. Physique, Vol. (6), 2005, pp. 945-955

[Shockley1952]: W. Shockley, W. T. Read, **Statistics of the Recombination of Holes and Electrons**, Phys. Rev. , Vol.(87), 1952, pp.835-842

[Tsymbal 2003]: E. Y. Tsymbal, A. Sokolov, I. F. Sabirianov, B. Doudin, **Resonant Inversion of Tunneling Magnetoresistance**, Phys. Rev. Lett, Vol. (90), 2003, pp. 186602-1-186602-3

[Van't Erve 2007]: O. M. J. Van't Erve, A. T. Hanbicki, M. Holub, C. H. Li, C. Awo-Affouda, **Electrical injection and detection of spin-polarized carriers in silicon in a lateral transport geometry**, Appl.Phys.Lett, Vol. (91), 2007, pp. 212109-1-212109-3

[Viatcheslav 2004] S. Viatcheslav, **Mémoire magnétique à détection de spin**, CNRS, Brevet FR2849562, 2004

[Zhu 2001]: H. J. Zhu, M. Ramsteiner, H. Kostial, M. Wassermeier, H. P. Sconherr, K. H. Ploog, **Room temperature spin injection from Fe into GaAs**, Phys.Rev.Lett, Vol. (87), 2001,pp. 016601-1-016601-4

## Chapitre 2 : Etude des propriétés électriques de la structure métal ferromagnétique/isolant/silicium

On a vu dans le chapitre I qu'une condition nécessaire à l'injection de spins dans le silicium à partir d'une source d'électrons polarisés (une électrode ferromagnétique) est la maîtrise des mécanismes de transport à l'interface ferromagnétique/silicium. En effet, les diodes tunnel ferromagnétique/isolant/silicium qui peuvent être utilisées comme injecteurs et collecteurs d'électrons polarisés en spin doivent permettre un transport balistique d'électrons sans faire intervenir les défauts ni dans la barrière tunnel ni à l'interface entre celle-ci et le silicium. De plus, la proximité de l'électrode ferromagnétique et du silicium ne doit pas introduire des défauts qui peuvent risquer d'entraîner une forte dégradation de la durée de vie d'électrons polarisés en spin.

Dans ce chapitre, une étude approfondie de la caractérisation de ces structures sera présentée, notamment de l'interface isolant/silicium vu son rôle fondamental dans le transport d'électrons entre le ferromagnétique et le silicium. Dans la première partie, une description théorique de ces structures ainsi que les différentes méthodes de caractérisation seront données. Par la suite, les résultats expérimentaux obtenus sur des structures à oxyde de silicium mince dédiées à l'étude de l'effet de la grille ferromagnétique seront présentés. Les résultats sur des structures à oxyde de silicium ou oxyde d'aluminium ultra mince vont être détaillés en troisième partie. L'objectif est d'étudier les caractéristiques de transport en fonction de la nature de la barrière (silice ou alumine) et en fonction de différents traitements de ces dernières, comme par exemple le recuit.

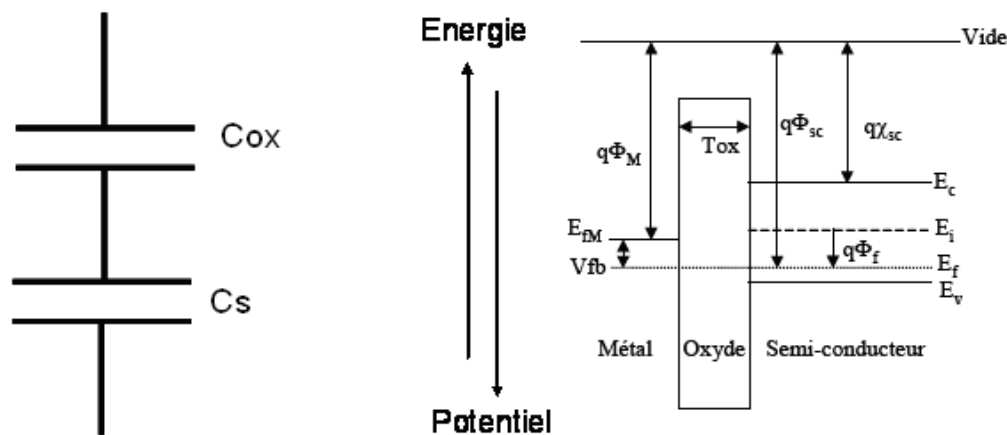
## I. Introduction à la théorie des condensateurs MOS :

L'étude que nous avons menée est basée sur l'analyse des caractéristiques électriques des structures FM/I/S assimilables à une structure MOS (Métal/Oxyde/Semi-conducteur).

Dans cette partie, on décrit la théorie de la structure MOS qui permet d'analyser et de comprendre les différents résultats obtenus. Pour des raisons de simplification, nous commencerons par étudier un condensateur MOS parfait.

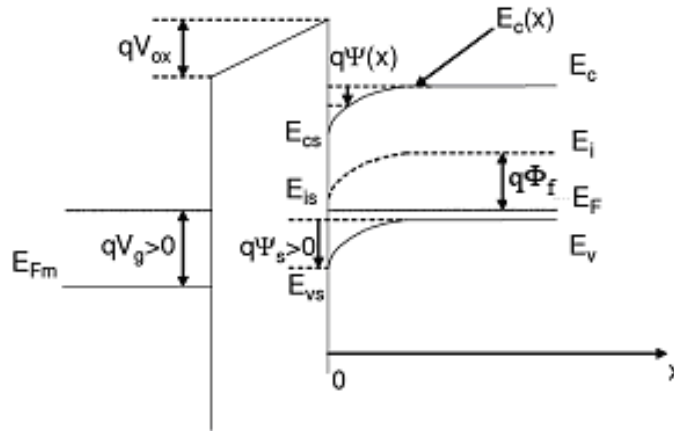
### 1. Condensateur parfait:

Un condensateur MOS parfait est un condensateur dont l'oxyde ne présente aucune charge électrique et l'interface ne présente aucun piège [Mathieu1998]. Son circuit équivalent se réduit à deux capacités en série ; la capacité de l'oxyde  $C_{ox}$  et de la capacité du semi-conducteur  $C_s$  (figure 1-a). La figure 1-b présente le diagramme de bande d'une structure MOS parfaite avant contact :



**Figure 1: (a) Circuit équivalent de la capacité MOS (b) Diagramme de bandes d'une structure MOS parfaite (avant contact)**

Les deux niveaux de fermi dans le métal et dans le semi-conducteur s'alignent lors de la mise en contact de deux matériaux. Il apparaît alors une courbure de bande d'énergie à la surface du semi-conducteur qui reflète une différence entre la surface et le volume du semi-conducteur. Cette différence de potentiel est notée  $\Psi(x)$ . Il apparaît également une différence de potentiel dans l'oxyde, notée  $V_{ox}$ . La zone de courbure de bande à la surface du semi-conducteur contient une charge d'espace s'étendant sur une distance appelée profondeur ou largeur de zone de charge d'espace. L'application d'une polarisation sur la grille entraîne une modification de la différence de potentiel dans l'oxyde et de la courbure des bandes dans le semi-conducteur. Ajoutons que le potentiel de surface du semi-conducteur (par rapport à son volume) est noté  $\Psi_s$  (figure 2).



**Figure 2: Diagramme de bandes d'une structure MOS parfaite en condition d'application d'une polarisation positive**

On définit la tension des bandes plates  $V_{fb}$  présentée dans la figure 1-b par la différence entre les potentiels de sortie du métal et du semi-conducteur :  $V_{fb} = \phi_{ms} = \phi_m - \phi_s$  dans le cas d'une structure parfaite. L'application de cette tension  $V_{fb}$  permet d'avoir la condition des bandes plates présentée dans la figure 1-b.

Le niveau de fermi dans le volume du semi-conducteur est défini par rapport à  $E_i$ , le niveau intrinsèque, par le potentiel de Fermi  $\phi_f$  suivant l'expression :

$$E_f = E_i - q \cdot \phi_f \quad (1)$$

Dans le cas où l'approximation de Boltzmann est valable et pour des dopages (semi-conducteur type p)  $N_a$  modérés,  $\phi_f$  est donnée par l'expression suivante:

$$\phi_f = \frac{kT}{q} \cdot \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) \quad (2)$$

L'application d'une différence de potentiel extérieure ( $V_g$ ) entraîne une modification de la charge de la zone de charge d'espace, et donc de la capacité du semi-conducteur. La capacité de la structure est donc fonction de la polarisation appliquée et elle est décrite par la caractéristique  $C(V_g)$ .

La caractéristique  $C(V_g)$  de la capacité MOS présente trois régimes en plus du régime des bandes plates. Ces régimes sont : l'accumulation, la déplétion et l'inversion.

Une brève description des régimes de polarisation est donnée dans le cas d'un substrat de type P. Un raisonnement analogue peut être mené dans le cas d'un substrat de type N :

- L'accumulation (figure 3(a)):

L'application d'une tension négative ( $V_g < V_{fb}$ ) entraîne la courbure des bandes d'énergie vers le haut. Les porteurs majoritaires (les trous) sont attirés vers la grille et s'accumulent à l'interface

oxyde/Semi-conducteur, d'où le terme accumulation. La capacité mesurée se réduit à celle de l'oxyde étant donné que celle du semi-conducteur devient très grande.

- les bandes plates (figure 3(b)) :

Aucune charge n'apparaît et les bandes restent horizontales. Ce régime est dit « bandes plates ». Pour être dans ce régime, il faut appliquer une tension  $V_{fb}$  qu'on appelle tension des bandes plates.

- La déplétion (figure 3(c)) :

Pour  $V_g > V_{fb}$ , les porteurs majoritaires (les trous) sont repoussés de l'interface vers le volume. Les bandes se courbent vers le bas et une zone négative de charge d'espace (ZCE) due à la présence des atomes dopants ionisés et non compensés, se forme près de l'interface ce qui introduit une capacité  $C_s$  en série avec la capacité d'oxyde.

- L'inversion (figure 3(d)) :

Pour  $V_g \gg V_{fb}$ , les bandes se courbent de plus en plus vers le bas. Les porteurs minoritaires (les électrons) sont attirés vers l'interface. Le régime d'inversion est établi lorsque la densité des électrons à l'interface dépasse celle de trous en surface (inversion faible) puis celle de trous dans le volume (forte inversion).

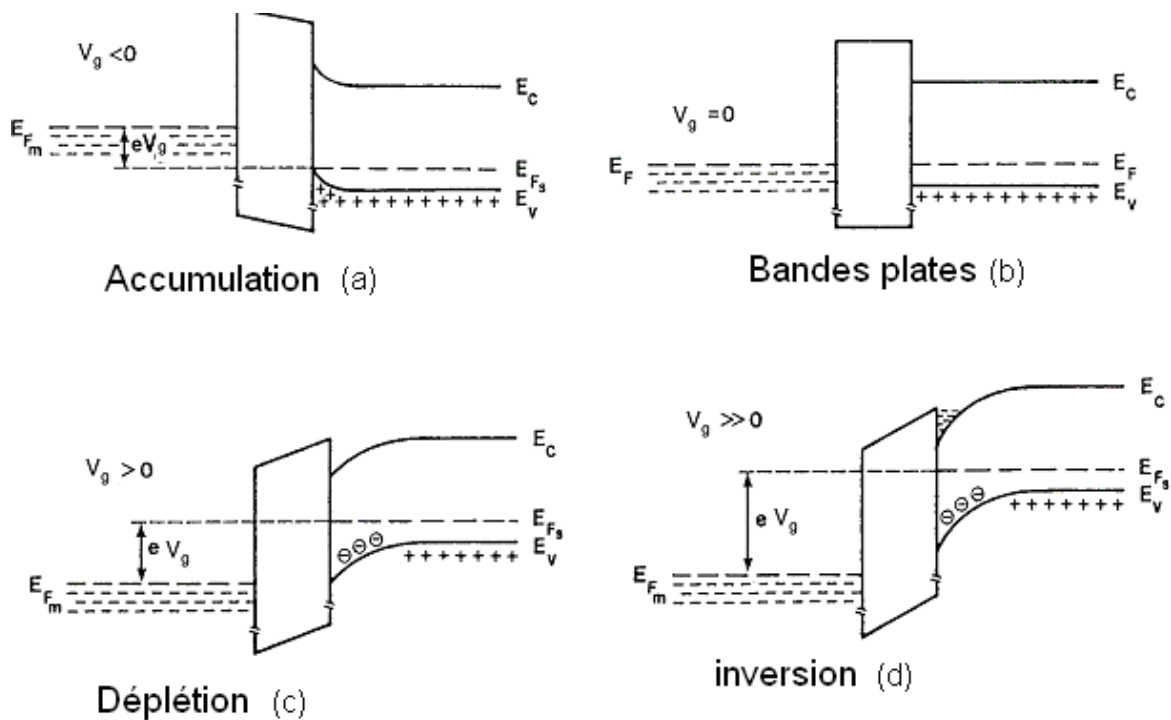
La valeur de la capacité dans ce dernier régime dépend de la fréquence de mesure:

- Haute fréquence ( $f > \text{kHz}$ ): la charge négative attribuée aux électrons (porteurs minoritaires dans substrat P) ne peut pas suivre les variations de la tension  $V_g$ . La capacité totale correspond à l'association en série de la capacité d'oxyde et celle du substrat qui correspond à la largeur maximum de la zone de charge d'espace.

- Basse fréquence ( $f \sim \text{Hz}$ ): les électrons de la couche d'inversion qui s'apparente à une couche métallique suivent le signal. La capacité totale correspond à celle de l'oxyde.

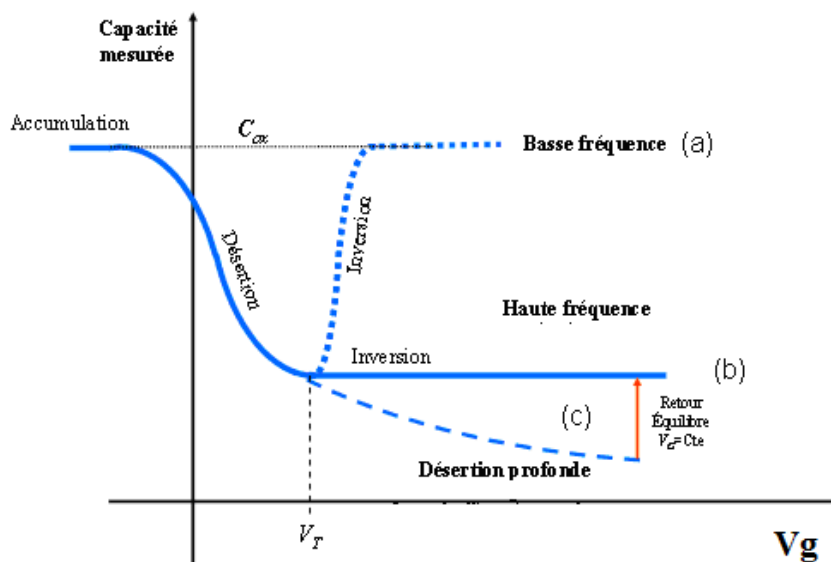
Un autre régime peut apparaître dans la caractéristique  $C(V_g)$  : la déplétion profonde. Ce régime est un régime hors équilibre.

En effet, en condition d'inversion, la charge de la ZCE est due à celle des ions fixes et la couche d'inversion. En déplétion profonde, la couche d'inversion (les électrons) n'a pas le temps de se former et la ZCE s'étend au delà de la largeur maximale de la zone de déplétion qui correspond au seuil de l'apparition de la couche d'inversion: la capacité totale décroît avec la tension.



**Figure 3: Les régimes de fonctionnement d'une capacité MOS (a) Accumulation (b) Bandes plates (c) Déplétion (d) Inversion**

La figure 4 représente l'allure de la caractéristique  $C(V_g)$  pour les différentes conditions de mesure : basse fréquence (a), haute fréquence (b) et en condition de déplétion (désertion) profonde (c).  $V_T$  est la tension de seuil d'apparition de l'inversion.



**Figure 4: Caractéristique  $C(V_g)$  de la capacité MOS (a) à basse fréquence (b) à haute fréquence (c) en condition de déplétion profonde**

## 2. Structure MOS réelle:

Dans le cas réel, la structure MOS peut contenir différents types de charges soit dans l'oxyde soit à l'interface [Kanoun thèse\_2004]. Ces charges peuvent être soit des charges fixes, des charges mobiles localisées dans l'oxyde ou des charges d'interface localisées à l'interface oxyde/semi-conducteur.

Ces différents types de charges influencent la structure MOS et induisent des modifications de la caractéristique  $C(V_g)$  par rapport au cas précédent.

### 2.1. Les différentes charges dans l'oxyde :

On distingue quatre types de charges [Deal1980]: la charge fixe, la charge piégée, la charge mobile ionique et la charge des états d'interface (figure 5).

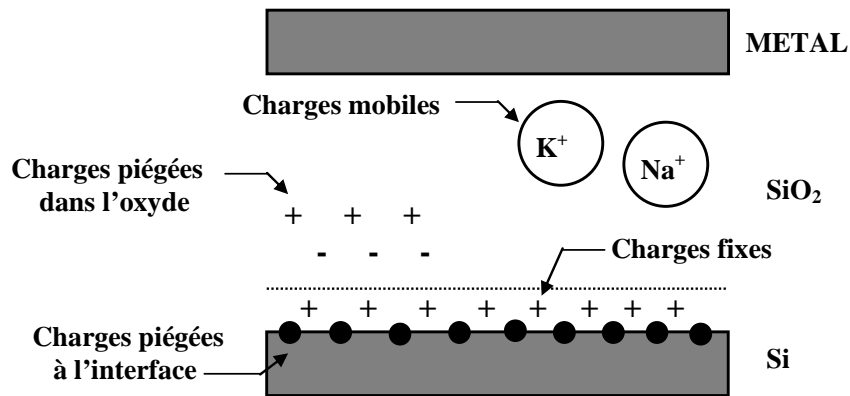


Figure 5 : Les différents types des charges dans l'oxyde

#### 2.1.1. La charge fixe :

La charge fixe est une charge localisée très près des interfaces oxyde/semi-conducteur et oxyde/grille. Cette charge est attribuée à un excès de silicium dans l'oxyde qui persiste à la fin du processus d'oxydation [Klau1989]. La présence d'une charge fixe à l'interface oxyde/semi-conducteur induit à la surface du semi-conducteur une charge image opposée qui modifie le potentiel de surface du semi-conducteur, la tension de seuil et la tension des bandes plates du dispositif. La présence des charges fixes fait translater la courbe  $C(V_g)$  selon l'axe des tensions d'une valeur :

$$\Delta V_{fb1} = - \int_0^{t_{ox}} \frac{\rho_f(x) \cdot x \cdot dx}{\epsilon_{ox}} \quad (3)$$

Où  $\rho_f$  présente la densité volumique de charges fixes dans l'oxyde et  $x$  leurs positions par rapport à l'interface. On constate à partir de cette équation, que dans le cas où les charges fixes sont positives, la courbe est décalée vers les tensions négatives et dans le cas où les charges fixes sont négatives elle est décalée vers les tensions positives.



### 2.1.2. La charge piégée :

Dans ce cas, la charge, positive ou négative, est piégée par les pièges du volume de l'oxyde. On peut diminuer la densité de ces charges par dépiégeage par l'application d'un stress thermique ou d'un champ électrique.

### 2.1.3. La charge mobile ionique :

Les charges mobiles sont dues à la contamination de l'oxyde par des impuretés ioniques (métaux alcalins :  $K^+$ ,  $Li^+$ ,  $Na^+$ ...) introduites lors du processus de fabrication de l'oxyde. Elles sont nommées mobiles car elles peuvent migrer d'une interface à une autre sous l'effet d'un champ électrique ou sous l'effet de la température.

### 2.1.4. La charge piégée des états d'interface :

Cette charge est piégée par les défauts à l'interface oxyde/semi-conducteur (états d'interface). Ces états d'interface ont un rôle très important dans le fonctionnement des dispositifs vu leur proximité avec le semi-conducteur. Selon la polarisation appliquée, la nature des états d'interface et leur position énergétique (par rapport au niveau du fermi de semi-conducteur), la charge qui correspond à ces états peut être positive ou négative.

En effet, Il existe deux types d'états d'interface : les états donneurs et les états accepteurs. Ces deux types d'états peuvent exister simultanément dans la même structure. Un état donneur est neutre lorsqu'il a capturé un électron et positif lorsqu'il est vide alors qu'un état accepteur est chargé négativement lorsqu'il a capturé un électron et devient neutre lorsqu'il a perdu son électron. La figure 6 représente schématiquement la charge portée par des états donneurs (a) ou accepteurs(b). Le niveau de Fermi en surface  $E_{Fs}$  définit le niveau des pièges vides ou remplis d'électrons :

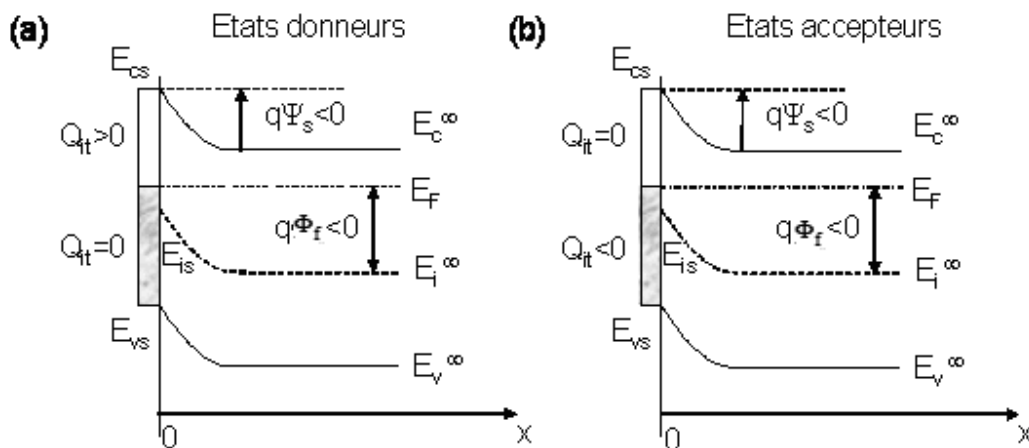
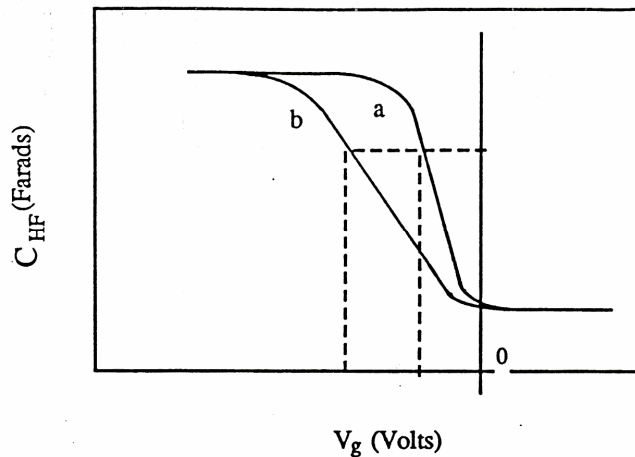


Figure 6: Les états d'interface donneurs(a) et accepteurs(b)

Ces états d'interface entraînent également la modification de la tension de bandes plates  $V_{fb}$ . Ce décalage de  $V_{fb}$  est donné par :

$$\Delta V_{fb2} = -\frac{t_{ox}}{\epsilon_{ox}} \cdot Q_{it} \quad (4)$$

Où  $Q_{it}$  est la charge piégée à l'interface. En présence de ces charges, la pente de la courbe  $C(V_g)$  en régime de déplétion est modifiée. En effet, l'occupation des états d'interfaces varie avec le potentiel de surface, et par la suite la courbe  $C(V_g)$  sera déplacée d'une valeur qui dépend de la tension appliquée (variation du potentiel de surface). La figure 7 montre l'effet des états d'interface sur la caractéristique  $C(V_g)$  :



**Figure 7: Caractéristique  $C(V)$  haute fréquence**  
**(a) sans états d'interface**  
**(b) avec états d'interface**

## 2.2. Caractéristiques et classification des défauts :

Dans la structure MOS, les défauts introduisent des niveaux d'énergie pouvant se situer à l'intérieur de la bande interdite de l'oxyde [Ball89]. On distingue deux types des défauts :

- Défauts peu profonds : dans le cas où le porteur est faiblement lié au défaut, le niveau d'énergie associé  $E_t$  est proche de la bande de conduction  $E_c$  dans le cas d'un électron (ou de la bande de valence  $E_v$  dans le cas d'un trou). Il s'agit d'un défaut " peu profond ".
- Défauts profonds : dans le cas où le porteur est fortement lié au défaut, le niveau  $E_t$  est situé loin d' $E_c$  et de  $E_v$  mais proche du milieu de la bande interdite. Il s'agit d'un défaut " profond ".

Dans l'oxyde, les défauts sont assimilables à des puits du potentiel. Ils sont aptes à capter des porteurs et peuvent être classés en deux types :

- les pièges :

Lorsque le défaut capture un porteur de la bande de conduction (ou de valence) et le réémet ensuite vers cette même bande, il est appelé un piège. Un piège peut être accepteur (chargé

négativement s'il est occupé par un électron et neutre s'il est vide) ou donneur (neutre s'il est occupé par un électron et chargé positivement s'il est vide).

- les centres de recombinaison :

Lorsque le défaut échange des porteurs avec les bandes de conduction et de valence, il est considéré comme un centre de recombinaison.

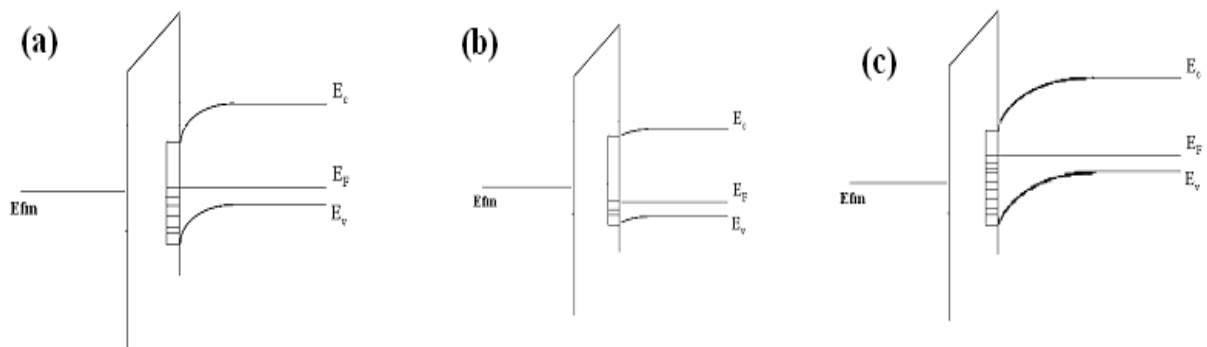
L'aptitude d'un défaut à capturer un porteur est décrite par sa section efficace de capture. Elle décrit la surface perpendiculaire au flux des porteurs dans laquelle le défaut peut capturer un porteur. Elle s'exprime donc en unité de surface (en général en  $\text{cm}^2$ ). Les défauts peuvent être aussi classés selon leurs sections efficaces de capture : par exemple dans le cas de la capture d'un électron, si le défaut est initialement chargé positivement, alors il est attractif coulombien et sa section efficace de capture est grande ( $10^{-14} \text{cm}^2 \leq \sigma < 10^{-12} \text{cm}^2$ ). S'il est chargé négativement, il est répulsif coulombien et sa section de capture est petite ( $10^{-22} \text{cm}^2 < \sigma \leq 10^{-18} \text{cm}^2$ ). Enfin si le piège est neutre, il peut capturer aussi bien un électron qu'un trou, sa section de capture est moyenne ( $10^{-18} \text{cm}^2 < \sigma < 10^{-14} \text{cm}^2$ ).

## II. Propriétés des états d'interface :

Comme déjà mentionné, les états d'interface jouent un rôle très important dans le fonctionnement des dispositifs électroniques. Dans notre étude, en plus du rôle que peuvent jouer ces pièges sur les mécanismes du transport de porteurs dans la structure FM/I/Si, la capture des électrons polarisés en spin par les états d'interface risque d'induire la perte de la polarisation en spin de ces électrons si la durée de capture excède la durée de vie de spin. C'est pourquoi une grande partie de ce chapitre sera consacrée à l'étude des états d'interface dans les structures MOS avec grille ferromagnétique.

### 1. Introduction :

Les états d'interface sont des défauts localisés à l'interface oxyde/semi-conducteur. Chaque défaut peut occuper un ou plusieurs niveaux énergétiques dans la bande interdite du semi-conducteur. Ces défauts peuvent échanger des charges avec le semi-conducteur. En particulier, ils interagissent avec la bande de conduction par la capture ou l'émission des électrons et avec la bande de valence par la capture ou l'émission des trous. En effet, le processus de capture ou émission se fait lorsque ces états d'interface changent d'occupation. Le changement dans l'occupation des états d'interface est produit par les changements de la polarisation appliquée. La figure 8 montre ces effets dans le cas d'une structure MOS avec un substrat p. Dans la figure 8-a, aucune polarisation n'est appliquée : la courbure de bandes est due à la présence des états d'interface chargés et aux autres contributions à la tension des bandes plates. Les états d'interface au dessous de niveau de fermi sont pleins et ceux au dessus sont vides. En appliquant une polarisation négative, le bord de la bande de valence à la surface se déplace vers le niveau de fermi. Les états d'interface se vident par la capture des porteurs majoritaires (les trous dans ce cas) jusqu'à ce que l'équilibre s'établisse. Dans le cas où la polarisation est positive, le bord de la bande de conduction à la surface se déplace vers le niveau de fermi et les états d'interface se remplissent par l'émission des porteurs majoritaires jusqu'à l'équilibre.

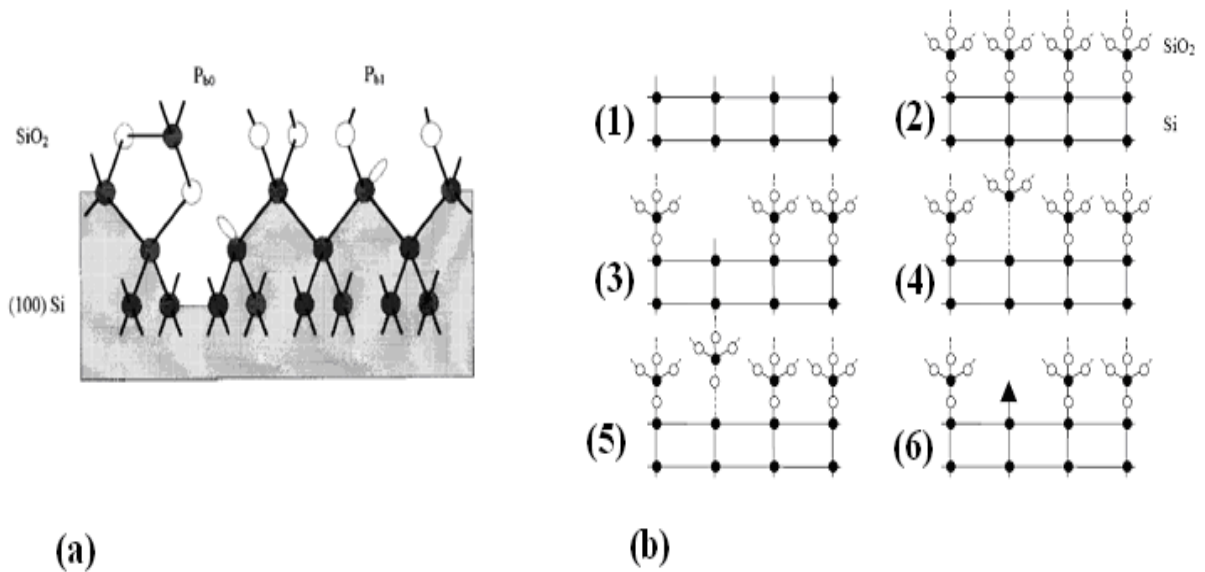


**Figure 8 : le diagramme de bande pour une capacité type p (a) sans application d'une polarisation, (b) polarisation négative, (c) polarisation positive. La partie hachurée désigne les états d'interface remplis.**

## 2. Les différents types d'états d'interface :

La mise en contact de deux matériaux, le semi-conducteur et l'oxyde, entraîne la création des défauts à l'interface généralement en un nombre plus grand que les défauts dans l'oxyde.

Dans la littérature, plusieurs auteurs ont identifiés dans le  $\text{SiO}_2$  des états d'interface qui sont des liaisons pendantes nommées centres Pb [Poindexter81], [Gerardi86], [Fleetwood96]. En effet, l'oxydation thermique de silicium conduit à la présence naturelle des défauts à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ . Ils sont identifiés par résonance paramagnétique électronique (RPE). L'apparition de ces centres Pb dépend de l'orientation cristalline de la surface de silicium [Poindexter1981]. En effet, à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (111), la technique RPE a révélé un seul type de défaut, appelé centre Pb, associé à des atomes de silicium  $\text{Si}_3\equiv\text{Si}\cdot$  [Caplan1979] [Brower1983] [Van Gorp1992] [Stesmans1993]. Par contre, à l'interface  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (100), la RPE a différencié deux types de défauts nommés  $\text{Pb}_0$  et  $\text{Pb}_1$  [Poindexter1981]. Comme les centres Pb, les centres  $\text{Pb}_0$  sont identifiés comme des liaisons pendantes  $\text{Si}_3\equiv\text{Si}\cdot$  alors que les centres  $\text{Pb}_1$  sont identifiés comme des liaisons  $\text{Si}_2\text{O}\equiv\text{Si}\cdot$  (voir figure 9-a). Ce type de défaut peut être donneur ou accepteur situé respectivement dans la moitié basse et haute de la bande interdite [Uren96]. La figure 9-b résume les liaisons chimiques les plus probables à l'interface  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  [Saku1981].



**Figure 9 :** (a) Les centres Pb à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> [Poindexter1981] (b) Liaisons chimique à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> [Saku1981] (1) surface libre Si (2) interface parfaite (3) liaison Si<sub>3</sub>≡Si• pendante (4) liaison Si-Si faible (5) liaison Si-O faible (6) impureté à l'interface

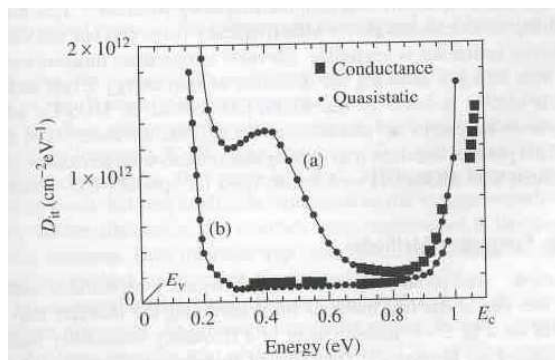
### 3. Densité des états d'interface :

Les états d'interface peuvent être estimés en mesurant leurs densités notées  $D_{it}$  ou  $N_{ss}$ . Cette densité décrit le nombre de défauts à l'interface électriquement actifs par unité de surface et d'énergie ( $eV^{-1}cm^{-2}$ ). La densité d'états d'interface indique souvent la qualité de la technologie utilisée. En effet, pour une surface de bonne qualité, les valeurs de  $D_{it}$  extraites sont d'environ quelques  $10^9-10^{10}eV^{-1}cm^{-2}$  [White 1972] [Autran1993] alors que pour des interfaces de mauvaise qualité on arrive jusqu'à quelques  $10^{13}eV^{-1}cm^{-2}$  [Kanoun 2007] [Poindexter 1984].

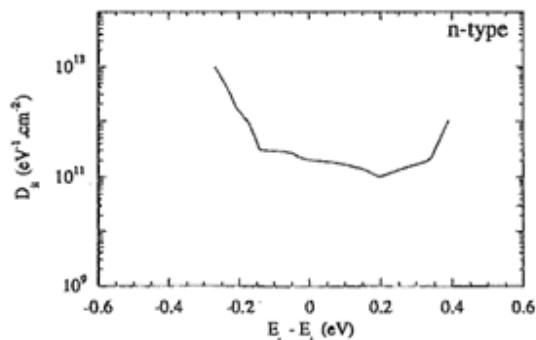
### 4. Distribution énergétique :

Vu le grand nombre des liaisons distordues et pendantes à l'interface, les états d'interface introduisent un continuum de niveaux d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur [Sakurai 1981]. Dans la littérature, plusieurs auteurs ont obtenu un profil énergétique en forme de U [kanoun 2007] [Schroder 2005] [White 1972] (figure 10). Ils ont montré que la densité d'états d'interface obtenue varie assez rapidement de part et d'autre du centre de la bande interdite ce qui donne un profil en forme de U. En calculant les niveaux d'énergie associés aux différentes liaisons chimiques possibles, Sakurai et al. ont montré que la forme en U du profil  $D_{it}(E)$ , peut s'expliquer par une distribution des longueurs et des angles des liaisons faibles Si-Si et Si-O [Saku81].

Par contre, Autran et al ont montré des profils en énergie plus plats [Autran1993]. La figure 11 montre un profil obtenu par méthode capacitive quasi statique. Aggarwal et al ont obtenu aussi par la méthode capacitive un profil en énergie plus plat [Aggarwal1984].

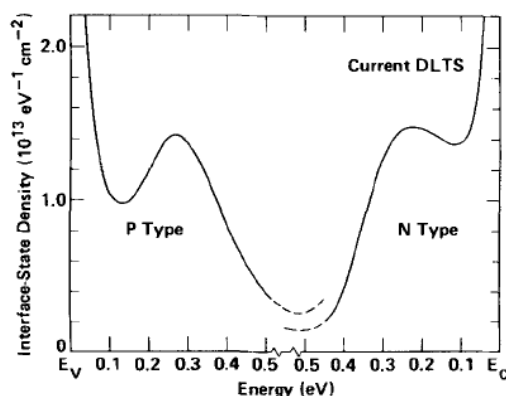


**Figure 10 :** Spectre de la densité des états d'interface en fonction de l'énergie dans la bande interdite de silicium (a) (111)Si/SiO<sub>2</sub> (b) (100)Si/SiO<sub>2</sub> [Schroder2005]



**Figure 11:** Spectre de la densité des états d'interface en fonction de l'énergie dans la bande interdite de silicium en interface avec le SiO<sub>2</sub> mesurée par méthode capacitive quasi statique. [Autran1993]

Le spectre  $D_{it}(E)$  peut présenter des pics de part et d'autre du milieu de la bande interdite [Poindexter1984] [Johnson1983]. La figure 12 donne l'exemple d'un spectre  $D_{it}(E)$  pour un substrat type p et type n où on observe un pic. Ces pics sont attribués aux centres Pb [Nish1971].



**Figure12 :** La distribution des états d'interface mesurée par DLTS en courant sur un oxyde SiO<sub>2</sub> non recuit [Johnson1983]

**5. Probabilité d'occupation d'un piège, charge et capacité des états d'interface en régime statique et permanent:**

### 5.1. Probabilité d'occupation d'un piège :

Parmi les propriétés des états d'interface qui permettent de comprendre leur fonctionnement est leur probabilité d'occupation [Garros 2004]. Considérons un état d'interface situé à l'énergie  $E_t$ . La figure 13 présente le diagramme de bandes à l'interface oxyde/Si. On définit l'énergie de la bande de conduction  $E_c$ , l'énergie de la bande de valence  $E_v$ , le niveau de fermi  $E_F$ , le niveau intrinsèque  $E_i$ , l'énergie du piège à la surface par les termes  $E_{cs}$ ,  $E_{vs}$ ,  $E_{Fs}$ ,  $E_{is}$ ,  $E_{ts}$  respectivement.

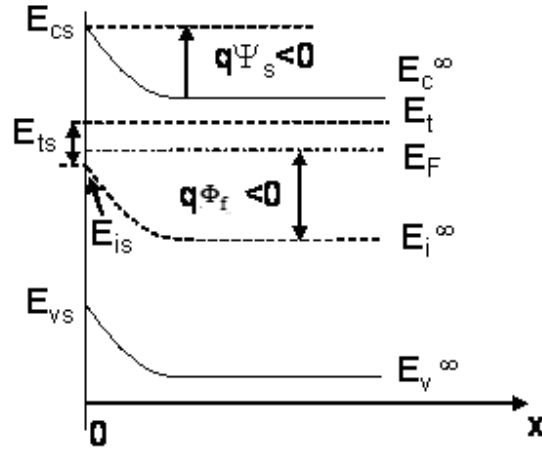


Figure 13 : Diagramme de bandes à l'interface oxyde/Si

En définissant l'origine d'énergie par  $E_{is} = 0$ , la probabilité d'occupation d'un piège d'énergie  $E_{ts}$  par un électron en régime statique obéit à une distribution Fermi-Dirac et s'écrit sous la forme :

$$f_0(E_{ts}) = \frac{1}{1 + \exp(\beta(E_{ts} - E_{Fs}))} \quad (5)$$

Où  $\beta = \frac{1}{kT}$

Etant donné que tous les pièges situés au dessous du niveau de Fermi  $E_{Fs}$  sont remplis et ceux situés au-dessus de  $E_{Fs}$  sont vides, la probabilité d'occupation est approximée par :

$$\begin{aligned} f_0(E_{ts}) &= 1 \text{ si } E_{ts} < E_{Fs} \\ f_0(E_{ts}) &= 0 \text{ si } E_{ts} > E_{Fs} \end{aligned} \quad (6)$$

## 5.2. Charge et capacité des états d'interface en régime statique :

Soient  $Dit^d(E_{ts})$  et  $Dit^a(E_{ts})$  les densités d'états d'interface respectivement pour les états donneurs et accepteurs. Les charges  $Q_{it}^d$  des états donneurs et  $Q_{it}^a$  des états accepteurs en fonction de potentiel de surface  $\Psi_s$  sont calculées en intégrant la distribution  $Dit(E_{ts})$  respectivement pour les états donneurs et les états accepteurs du niveau de la bande de valence en surface  $E_{VS}$  au niveau de la bande de conduction en surface  $E_{CS}$ . Elles sont données par les équations suivantes :

$$Q_{it}^d(\psi_s) = +q \int_{E_{VS}}^{E_{CS}} (1 - f_0(E_{ts})) Dit^d(E_{ts}) dE_{ts} \quad (7)$$

$$Q_{it}^a(\psi_s) = -q \int_{E_{VS}}^{E_{CS}} f_0(E_{ts}) Dit^a(E_{ts}) dE_{ts} \quad (8)$$

En remplaçant  $f_0$  par son expression simplifiée, on obtient :

$$Q_{it}^d(\psi_s) = +q \int_{E_{Fs}}^{E_{CS}} Dit^d(E_{ts}) dE_{ts} = +q \int_{q(\psi_s - \phi_f)}^{E_g/2} Dit^d(E_{ts}) dE_{ts} \quad (9)$$

$$Q_{it}^a(\psi_s) = -q \int_{E_{Vs}}^{E_{Fs}} Dit^a(E_{ts}) dE_{ts} = -q \int_{-E_g/2}^{q(\psi_s - \phi_f)} Dit^a(E_{ts}) dE_{ts} \quad (10)$$

En utilisant la relation :  $E_{Fs} = E_F - E_{is} = E_F - E_{i\infty} + E_{i\infty} - E_{is} = -q\phi_f + q\psi_s$   
La charge totale  $Q_{it}$  est donc la somme de deux charges  $Q_{it}^d$  et  $Q_{it}^a$  :

$$Q_{it}(\psi_s) = Q_{it}^d(\psi_s) + Q_{it}^a(\psi_s) \quad (11)$$

$$Q_{it}(\psi_s) = q \int_{q(\psi_s - \phi_f)}^{E_g/2} Dit^d(E_{ts}) dE_{ts} - q \int_{-E_g/2}^{q(\psi_s - \phi_f)} Dit^a(E_{ts}) dE_{ts} \quad (12)$$

La capacité des états d'interface est définie par [Nicollian 1982] :

$$C_{it}(\psi_s) = -\frac{dQ_{it}(\psi_s)}{d\psi_s} \quad (13)$$

Cette capacité présentant les états d'interface vient s'ajouter en parallèle avec la capacité  $C_s$  dans le schéma équivalent de la figure 1. En présence de  $C_{it}$ , la capacité totale de la structure MOS s'écrit :

$$\frac{1}{C(Vg)} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{SC}(\psi_s) + C_{it}(\psi_s)} \quad (14)$$

Avec  $Vg$  la tension appliquée qui s'écrit en fonction du potentiel de surface, de la différence des potentiels de sortie du métal et du semi-conducteur ( $\phi_M - \phi_{SC}$ ), des charges dans l'oxyde ( $Q_{eq}$ ), à l'interface ( $Q_{it}$ ) et dans la zone de charge d'espace ( $Q_{SC}(\psi_s)$ ):

$$Vg = \psi_s + \phi_M - \phi_{SC} - \frac{Q_{SC}(\psi_s) + Q_{eq} + Q_{it}(\psi_s)}{C_{ox}} \quad (15)$$

$Q_{eq}$ , la charge équivalente dans l'oxyde vue de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, est donné par la relation

$$\text{suivante : } Q_{eq} = q \int_0^{T_{ox}} n(x) dx$$

avec  $n(x)$  la densité de charges dans l'oxyde.

$Q_{sc}$  est obtenue par l'application de la loi de Gauss dans le semi-conducteur et donnée par la

$$\text{relation : } Q_{sc}(\psi_s) = -\epsilon_s E_s = \epsilon_s \left[ \frac{d\psi}{dx} \right]_{x=0}$$

avec  $E_s$  le champ électrique régnant à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>.

En posant  $\Psi_s=0$  dans l'expression de  $Vg$ , la tension des bandes plates s'écrit sous la forme:

$$V_{fb} = \phi_M - \phi_{SC} - \frac{Q_{eq} + Q_{it}(\psi_s = 0)}{C_{ox}} \quad (16)$$

D'où  $Vg$  peut s'écrire en fonction de  $V_{fb}$  :

$$Vg = \psi_s + V_{fb} - \frac{Q_{SC}(\psi_s) + Q_{it}(\psi_s) - Q_{it}(\psi_s = 0)}{C_{ox}} \quad (17)$$



En régime statique, le transfert de charges entre les pièges et les bandes du silicium s'effectue en équilibre thermodynamique. Cela correspond à une mesure à très basse fréquence de la caractéristique  $C(Vg)$ .

### 5.3. Charge et capacité des états d'interface en régime permanent :

En régime permanent alternatif (AC), pour calculer la probabilité d'occupation des états d'interface dépendante de temps, le modèle SRH (Shockley-Read-Hall) est utilisé [Shockley52]. Cette probabilité est décrite par une équation dynamique du premier ordre :

$$\frac{df(E_{ts}, t)}{dt} = c_n \cdot (1-f) \cdot n_s(t) - e_n \cdot f - c_p \cdot f \cdot p_s(t) + e_p \cdot (1-f) \quad (18)$$

Avec  $n_s(t)$ ,  $p_s(t)$  les densités des électrons et de trous à l'interface oxyde/silicium et  $c_n$ ,  $e_n$ ,  $c_p$ ,  $e_p$  les coefficients de capture et émission respectivement pour les électrons et les trous. Masson et al ont résolu cette équation pour une capacité MOS avec un diélectrique  $HfSi_xO_y/HfO_2$  sur silicium [Masson2002].

La charge des états donneurs et des états accepteurs en régime permanent sont données par les expressions suivantes :

$$Q_{it}^d(\psi_s(t)) = +q \int_{E_{vs}}^{E_{cs}} (1-f(E_{ts})) Dit^d(E_{ts}) dE_{ts} \quad (19)$$

$$Q_{it}^a(\psi_s(t)) = -q \int_{E_{vs}}^{E_{cs}} f(E_{ts}) Dit^a(E_{ts}) dE_{ts} \quad (23)$$

La charge totale est donc :

$$Q_{it}(\psi_s(t)) = Q_{it}^d(\psi_s(t)) + Q_{it}^a(\psi_s(t)) \quad (24)$$

La capacité des états d'interfaces lorsque le régime stationnaire est établie est donnée par :

$$C_{it}(\psi_s) = -\frac{dQ_{it}(\psi_s)}{d\psi_s} \quad (25)$$

En régime permanent ou alternatif, la capacité  $C_{it}$  dépend de la fréquence du petit signal AC de mesure qui se superpose à la polarisation continue  $Vg$ . Pour les hautes fréquences, les états d'interface n'ont pas le temps de répondre : la capacité  $C_{it}$  tend vers 0 alors que pour les basses fréquences la capacité  $C_{it}$  est plus grande. En tenant compte de cette capacité  $C_{it}$ , le schéma équivalent de la capacité MOS sera celui de la figure 14 :

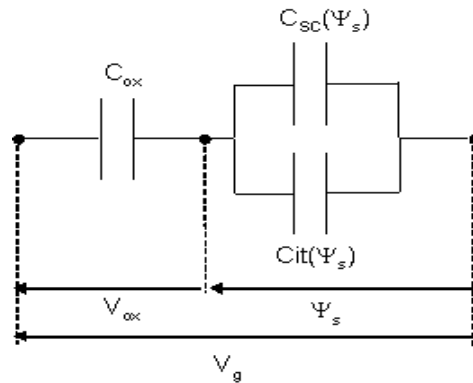


Figure 14 : Schéma équivalent de la capacité MOS réelle

La capacité  $C_{it}$  et par la suite la densité des états d'interface peuvent être calculées par différentes techniques détaillées dans la partie qui suit.

## 6. Détermination des états d'interface :

### 6.1. A partir des caractéristiques $C(V_g)$ :

Pour les méthodes capacitives d'analyse de la densité d'états d'interface, deux approches sont souvent adoptées [Nicollian1982] :

- la comparaison entre la capacité mesurée à haute fréquence et la capacité théorique : méthode de TERMAN ou encore la comparaison entre la capacité à basse fréquence et la capacité théorique : méthode de BERGLUND.
- la comparaison entre la capacité mesurée à haute fréquence et la capacité mesurée à basse fréquence : méthode de Castagné et Vapaille.

Les mesures capacitives permettent de mettre en évidence la présence des états d'interface par :

- La déformation (stretchout) de la courbe  $C(V_g)$  selon la tension  $V_g$  appliquée sur la capacité
- La contribution capacitive des états d'interface dans la capacité totale

#### 6.1.1. L'effet de « Stretching » sur la $C(V_g)$ due aux états d'interface:

L'occupation des états d'interface varie avec la tension  $V_g$  appliquée ce qui déforme la courbe  $C(V_g)$  [Nicollian 1982]. Afin d'étudier de près cette déformation, nous comparons la courbure des bandes de deux capacités avec et sans états d'interface lorsque la charge de grille change d'une quantité  $dQ_g$ .

Commençons par la capacité sans états d'interface : la neutralité électrique globale de la structure exige que le changement dans la charge de grille soit équilibré par un changement de charge à la surface de silicium  $dQ_s$ . Ainsi, l'équation de neutralité électrique s'écrit :

$$dQ_g + dQ_s = 0 \quad (26)$$

Par conséquent, la modification de la courbure de bande permet d'assurer cet équilibre.

Dans le cas de la structure avec des états d'interface, la charge de ces états varie avec  $V_g$ . Donc, un changement  $dQ_g$  entraîne aussi un changement de la charge de ces états,  $dQ_{it}$ . L'équation de neutralité devient alors :

$$dQ_g + dQ_{it} + dQ_s = 0 \quad (27)$$

Vu que les états d'interface ajoutent une charge additionnelle, le changement dans  $dQ_s$  sera plus faible. Donc, le changement dans la courbure de bandes est plus faible dans le cas de la capacité avec des états d'interface. Par conséquent, dans ce cas pour amener la capacité de l'accumulation vers l'inversion, une plus large gamme de variation de la charge de grille est nécessaire. Or, la charge de grille est liée à la tension de grille  $V_g$  par la relation  $dQ_g = C \cdot dV_g$ , donc une plus large amplitude de  $V_g$  est nécessaire dans le cas de la capacité avec les états d'interface. C'est la raison pour la quelle, la courbe  $C(V_g)$  se trouve étirée le long de l'axe de polarisation  $V_g$  dans le cas d'une structure MOS avec états d'interface. Cet effet est communément appelé « stretching ». On peut étudier qualitativement le « stretching » par la loi de Gauss :

$$C_{ox} \cdot (V_g - \psi_s) = -Q_{it}(\psi_s) - Q_s(\psi_s) \quad (28)$$

Pour une variation infinitésimale  $dV_g$ , l'équation (28) donne une variation  $d\psi_s$  selon l'équation (29):

$$C_{ox} \cdot dV_g = [C_{ox} + Cit(\psi_s) + C_s(\psi_s)] d\psi_s \quad (29)$$

Avec  $Cit(\psi_s) = -\frac{dQ_{it}(\psi_s)}{d\psi_s}$  et  $C_s(\psi_s) = -\frac{dQ_s}{d\psi_s}$  sont respectivement la capacité des états d'interface et la capacité de semi-conducteur par unité de surface.

A partir de l'équation (29), nous observons qu'une variation  $dV_g$  entraîne une variation de la courbure de bande plus faible quand  $Cit$  n'est pas nulle (présence d'états d'interface). Donc, l'équation (29) traduit bien de façon qualitative le « stretching » de la courbe  $C(V_g)$ .

### 6.1.2. La contribution capacitive des états d'interface :

Comme nous l'avons déjà évoqué dans le paragraphe précédent, dans une capacité MOS idéale, le principe de la neutralité électrique fait que la variation de la charge de la grille  $dQ_g$  est compensée par une variation de la charge dans le semi-conducteur  $dQ_s$ . L'équation de la neutralité est donnée par l'équation (26).

Dans le cas où la structure présente des états d'interface, nous devons prendre en considération le changement de la charge  $dQ_{it}$ . La neutralité électrique est alors donnée par l'équation (27).

La valeur de la capacité totale d'une structure MOS est donnée par l'équation (30):

$$C = \frac{dQ_g}{dV_g} \quad (30)$$

En régime statique (basse fréquence), où les états d'interface ont le temps de « suivre » la variation de  $V_g$ , la charge totale par unité de surface est donnée par :

$$Q_g = -(Q_s + Q_{it}) \quad (31)$$

Nous avons vu que la capacité des états d'interface est définie par :

$$C_{it}(\psi_s) = -\frac{dQ_{it}(\psi_s)}{d\psi_s} \quad (32)$$

A basse fréquence, la capacité correspondante  $C_{lf}$ , s'écrit en fonction de la capacité d'oxyde, la capacité des états d'interface et la capacité du semi-conducteur et à l'aide de l'équation (29):

$$\begin{aligned} C_{lf} &= \frac{dQ_g \cdot d\psi_s}{d\psi_s \cdot dV_g} \\ &= \frac{C_{ox}}{C_{ox} + C_{it} + C_s} \cdot (C_s + C_{it}) \end{aligned} \quad (33)$$

L'équation (33) correspond au schéma électrique équivalent de la figure (14) et justifie donc l'utilisation de ce schéma dans le cas d'une structure MOS avec états d'interface en régime statique.

### 6.1.3. Méthode de la capacité haute fréquence:

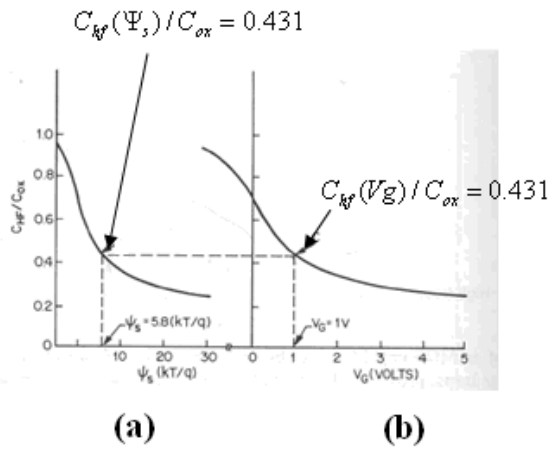
Terman a développé la méthode haute fréquence pour déterminer la capacité des états d'interface [Nicollian1982]. Dans cette méthode, la capacité est mesurée à hautes fréquences en fonction de la polarisation  $V_g$  de la grille. A ces fréquences, la charge des états d'interface ne peut pas suivre le signal alternatif. La caractéristique capacité-tension ( $C(V_g)$ ) ainsi obtenue est comparée à une caractéristique théorique d'une structure sans états d'interface.

En effet, bien que la charge des états d'interface ne puisse pas suivre la composante alternative (AC) de  $V_g$  dans les mesures des capacités hautes fréquences, cette charge suit les variations de  $V_g$  lorsque la capacité de la structure MOS est variée de l'accumulation vers l'inversion. Ces états n'ajoutent aucune capacité mais entraînent la déformation de la courbe  $C(V_g)$  (effet stretching). En effet, comme la charge piégée  $Q_{it}$  varie avec le potentiel de surface  $\Psi_s$ , la caractéristique  $C(V_g)$  sera plus ou moins translatée en fonction de la polarisation  $V_g$ .

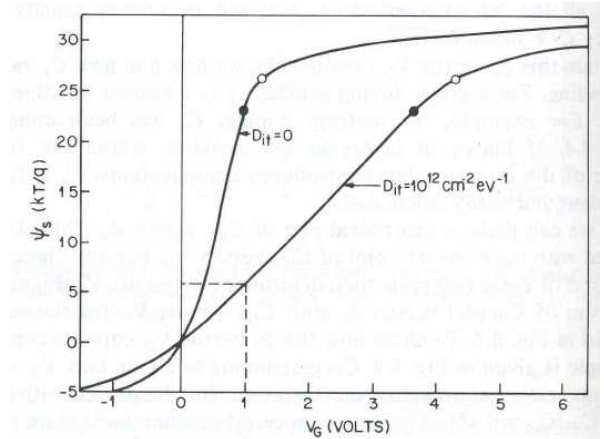
Pour les mesures à hautes fréquences, la capacité équivalente de la structure est donnée par :

$$C_{hf} = \frac{C_s \cdot C_{ox}}{C_s + C_{ox}} \quad (34)$$

Cette expression correspond à la capacité équivalente du schéma de la figure 1. Ce circuit ne contient pas explicitement des informations sur les états d'interface. Cependant,  $C_s$  varie avec le potentiel de surface  $\Psi_s$  qui est lui-même fonction de la charge des  $D_{it}$ . Donc la capacité  $C_{hf}$  mesurée est la même que la capacité d'une structure parfaite pour  $\Psi_s$  donné. Connaissant  $\Psi_s$  correspondant à une valeur  $C_{hf}$  de la  $C(V_g)$  parfaite nous permet d'avoir la tension  $V_g$  qui correspond à la même valeur  $C_{hf}$  de la courbe  $C(V_g)$  réelle comme le montre La figure 15 :



**Figure 15 : La caractéristique  $C_{hf}(\psi_s)$  théorique (a) en comparaison avec  $C_{hf}(V_g)$  pour une structure MOS avec  $D_{it}=10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$  (b) [Nicollian1982]**



**Figure 16 : la courbe  $\psi_s(V_g)$  en présence et en absence d'états d'interface [Nicollian1982]**

Cela permet de tracer  $\psi_s(V_g)$  pour la structure réelle (avec les états d'interface). Ainsi, la relation  $\psi_s(V_g)$  contient toutes les informations sur ces états pour les mesures capacitives à haute fréquence. La figure 16 montre pour le même exemple que les états d'interface entraînent un étirement (stretching) de la courbe  $\psi_s(V_g)$  le long de l'axe  $V_g$ . L'étirement (stretching) mesuré par  $\frac{d\psi_s}{dV_g}$  permet de déterminer la densité des états d'interface  $D_{it}$ .

$\frac{d\psi_s}{dV_g}$  est déterminé par une dérivation numérique ou graphique de la relation  $\psi_s(V_g)$ . La capacité des états d'interface  $C_{it}(\psi_s)$  est alors déterminée à partir de l'équation (35) qui découle de l'équation (29):

$$C_{it}(\psi_s) = C_{ox} \cdot \left[ \left( \frac{d\psi_s}{dV_g} \right)^{-1} - 1 \right] - C_s(\psi_s) \quad (35)$$

Une fois  $C_{it}$  déterminée à partir de cette équation, la densité des états d'interface  $D_{it}$  est calculée à partir de la relation :

$$C_{it}(\psi_s) = q \cdot D_{it}(\psi_s) \quad (36)$$

Où  $q$  est la charge de l'électron.

#### 6.1.4. Méthode de la capacité basse fréquence:

La méthode basse fréquence a été développée et utilisée pour la première fois par Berglund [Nicollian1982]. La capacité est mesurée en fonction de la polarisation  $V_g$  de la grille à une basse fréquence fixée, ce qui fait que les états d'interface répondent immédiatement au signal AC et ajoutent une capacité  $C_{it}$  à la capacité mesurée tout en déformant la courbe  $C(V_g)$  comme dans le cas précédent.

La capacité basse fréquence  $C_{lf}$  est donnée par l'expression :

$$C_{lf} = \frac{C_{ox}}{C_{ox} + C_{it} + C_s} \cdot (C_s + C_{it}) \quad (37)$$

D'où l'expression de  $C_{it}$  dans la relation (38) :

$$C_{it} = \left( \frac{1}{C_{lf}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} - C_s \quad (38)$$

$C_{ox}$  est mesuré expérimentalement en condition d'accumulation forte alors que  $C_s(\psi_s)$  est calculée à l'aide de son expression théorique [Nicollian1982]. La connaissance de la relation entre le potentiel de surface  $\psi_s$  et la tension appliquée  $V_g$  est très importante pour l'étude des structures MOS. Cette relation  $\psi_s(V_g)$  peut être déterminée expérimentalement à partir de la courbe  $C(V_g)$  basse fréquence. Cette méthode a été utilisée pour la première fois par Berglund. A partir de l'équation (35), nous obtenons :

$$\psi_s = \psi_{s_0} + \int_{V_{g_0}}^{V_g} \frac{C_{ox}}{C_{ox} + C_{it} + C_s} dV_g \quad (39)$$

Où  $V_{g_0}$  correspond à une tension initiale correspondant à  $\psi_{s_0}$ . Utilisant l'équation (37), l'équation (39) devient :

$$\psi_s = \psi_{s_0} + \int_{V_{g_0}}^{V_g} \left[ 1 - \frac{C_{it} + C_s}{C_{ox} + C_{it} + C_s} \right] dV_g = \psi_{s_0} + \int_{V_{g_0}}^{V_g} \left[ 1 - \frac{C_{lf}}{C_{ox}} \right] dV_g \quad (40)$$

L'intégration de l'équation (40) se fait donc sur la capacité basse fréquence. La valeur  $V_{g_0}$  est arbitraire et donc  $\psi_{s_0}$  correspondant est inconnu. Pour minimiser l'incertitude sur  $\psi_{s_0}$ ,  $V_{g_0}$  peut être choisie en accumulation ou inversion où  $\psi_s$  varie peu en fonction de  $V_g$ .

#### 6.1.5. Méthode de la capacité basse fréquence – Haute fréquence:

Castagné et Vapaille ont été les premiers à utiliser la combinaison des mesures capacitives hautes et basses fréquences pour accéder aux valeurs de  $D_{it}$  [Nicollian1982]. Cette méthode permet de déterminer la capacité  $C_s$  mesurée du semi-conducteur.

En effet, à haute fréquence, la capacité est donnée par l'équation (34).

A basse fréquence, la capacité est donnée par l'équation (37).

A partir de l'équation (34) on détermine l'expression de la capacité  $C_s$ . Ceci donne l'équation (41):

$$C_s = \left( \frac{1}{C_{hf}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} \quad (41)$$

En remplaçant  $C_s$  par son expression dans l'équation (37) qui correspond à la mesure de capacité à basse fréquence, on obtient :

$$Cit = \left( \frac{1}{C_{lf}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} - C_s = \left( \frac{1}{C_{lf}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} - \left( \frac{1}{C_{hf}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} \quad (42)$$

L'expression de  $Cit$  montre que la capacité des états d'interface peut être directement extraite expérimentalement à partir des mesures  $C(V)$  à haute fréquence et à basse fréquence.

En posant  $\Delta C = C_{lf} - C_{hf}$ , la densité des états d'interface  $Dit$  est donnée par :

$$Dit = \frac{Cit}{q} = \left[ \left( \frac{1}{\frac{\Delta C}{C_{ox}} + \frac{C_{hf}}{C_{ox}}} - 1 \right)^{-1} - \left( \frac{1}{\frac{C_{hf}}{C_{ox}}} - 1 \right)^{-1} \right] = \frac{\Delta C}{q} \left( 1 - \frac{C_{hf} + \Delta C}{C_{ox}} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{C_{hf}}{C_{ox}} \right)^{-1} \quad (43)$$

Cette méthode est connue sous le nom la méthode  $C(V)_{hf-lf}$ . Vu la simplicité relative de sa mise en œuvre, c'est cette méthode que nous avons utilisée dans l'analyse de nos résultats expérimentaux exposés dans la suite de ce chapitre.

## 6.2. Méthode de la conductance:

### 6.2.1. Introduction :

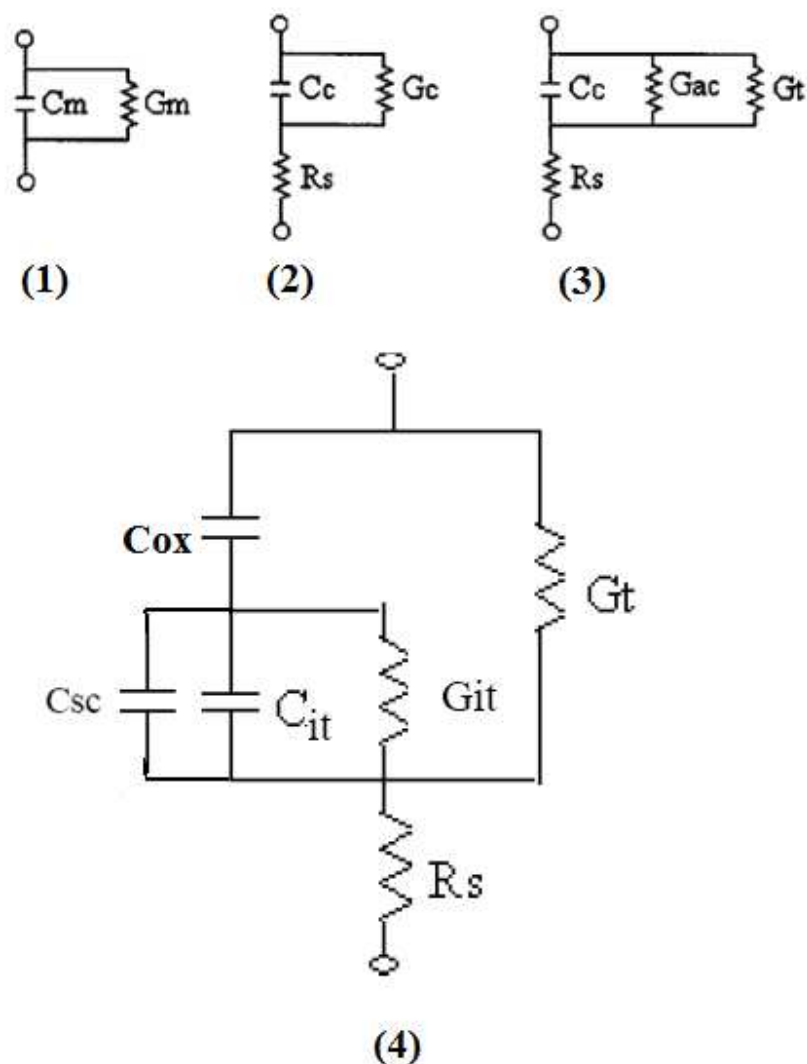
La méthode de la conductance est proposée par Nicollian et Goetzberger en 1967 [Nicollian1982] [Werner1986] [Hung1987]. Dans la suite et pour simplifier, nous appelons cette méthode la « G- $\omega$  ». La G- $\omega$  est la méthode la plus complète pour caractériser les états d'interface : elle permet de mesurer la densité des états d'interface ( $Dit$ ), la section efficace de capture des porteurs majoritaires par les états d'interface et elle donne aussi des informations sur les fluctuations du potentiel de surface. La technique G- $\omega$  est basée sur la mesure de la conductance parallèle équivalente  $G_{it}$  d'une structure MOS en fonction de la fréquence et de la tension  $V_g$  appliquée à la grille. La conductance qui représente les pertes dues à la capture et l'émission des porteurs par les pièges d'interface, est une mesure de la densité des états d'interface  $Dit$ .

Selon la fréquence du signal, ces pertes sont plus au moins importantes. En effet, à très basses fréquences, les échanges des porteurs entre les pièges et les bandes de silicium s'effectuent à l'équilibre thermodynamique vu que les états d'interface répondent rapidement à ce petit signal. Par voie de conséquence, on ne constate aucune perte énergétique et la conductance mesurée est donc faible. A hautes fréquences, les états d'interface, n'ayant pas le temps de suivre le signal, n'échangent pas de porteurs avec les bandes, ce qui limite les pertes et donc la conductance est là

encore faible. Donc, les pertes sont plutôt constatées pour des fréquences intermédiaires (de quelques Hertz à ~1Mhz). La technique de mesure  $G-\omega$  et le principe de détermination des propriétés des états d'interface sont décrits dans le paragraphe suivant.

### 6.2.2. Technique de mesure $G-\omega$ :

La figure 17(4) présente le schéma équivalent de la structure MOS en prenant en compte la conductance  $G_{it}$  et la capacité  $C_{it}$  associées aux états d'interface. Ce schéma est établi par Nicollian [Nicollian 1982] en tenant compte des fuites statiques à travers l'oxyde  $G_t$  (conductance tunnel) et la résistance série  $R_s$  associée au substrat et aux contacts.



**Figure 17 : Schéma équivalent d'une structure MOS prenant en compte (1) la capacité et la conductance mesurées (2) la résistance série (3) la conductance tunnel (4) la conductance et la capacité des états d'interface [Vogel 2000]**



Afin de déterminer la densité des états d'interface  $Dit(E)$ , il faut déterminer leur conductance  $G_{it}(E)$  et ceci à partir de la conductance  $G_m$  et la capacité  $C_m$  mesurées par le capacimètre (figure 17(1)). En effet, on peut transformer l'impédance mesurée selon le processus dans la figure 17 [Vogel2000]. En introduisant la résistance série  $R_s$ , on peut remplacer le schéma équivalent (1) par le schéma équivalent (2) tout en définissant  $C_c$  et  $G_c$  comme étant la capacité et la conductance corrigées par rapport à  $R_s$ . L'impédance mesurée peut s'écrire sous la forme :

$$G_m + jC_m \omega = \frac{1}{R_s + \frac{1}{G_c + jC_c \omega}}$$

Avec  $\omega$  la pulsation.

A partir de cette égalité, on détermine les expressions de  $C_m$  et  $G_m$  en fonction de  $C_c$ ,  $G_c$  et  $R_s$ .  $C_m$  et  $G_m$  sont données par les équations (44) et (45) :

$$C_m = \frac{C_c}{(G_c \cdot R_s + 1)^2 + \omega^2 \cdot C_c^2 \cdot R_s^2} \quad (44) \quad G_m = \frac{G_c \cdot (G_c \cdot R_s + 1) + \omega^2 \cdot C_c^2 \cdot R_s^2}{(G_c \cdot R_s + 1)^2 + \omega^2 \cdot C_c^2 \cdot R_s^2} \quad (45)$$

On peut extraire aussi les expressions de  $C_c$  et  $G_c$  données par les équations (46) et (47) :

$$C_c = \frac{C_m}{(1 - G_m \cdot R_s)^2 + \omega^2 \cdot C_m^2 \cdot R_s^2} \quad (46)$$

$$G_c = \frac{\omega^2 \cdot C_m \cdot C_c \cdot R_s - G_m}{G_m \cdot R_s - 1} \quad (47)$$

En introduisant la conductance tunnel  $G_t$ , on peut passer de schéma équivalent (2) au schéma (3) avec  $G_{ac}$  la conductance corrigée par rapport à  $G_t$ .  $G_{ac}$  est donnée par l'équation (48) :

$$G_{ac} = G_c - G_t = \frac{\omega^2 \cdot C_m \cdot C_c \cdot R_s - G_m}{G_m \cdot R_s - 1} - G_t \quad (48)$$

La conductance statique  $G_t$  est donnée par une simple dérivation d'une caractéristique  $I_g(V_g)$  de la structure MOS.

Afin de déterminer  $R_s$ , la structure MOS est polarisée en accumulation car son effet sur l'admittance mesurée à une fréquence donnée est remarquable en accumulation [Nicollian1982]. Le circuit équivalent de la structure en accumulation se réduit à la mise en série de la capacité de l'oxyde  $C_{ox}$  et  $R_s$ . La résistance série est donc la partie réelle de l'impédance mesurée (figure 17(1)) en accumulation. Elle est donnée par l'équation (49) [Nicollian1982] :

$$R_s = \frac{G_{ma}}{G_{ma}^2 + \omega^2 \cdot C_{ma}^2} \quad (49)$$

Où  $G_{ma}$  et  $C_{ma}$  présentent respectivement la conductance et la capacité mesurées en accumulation.

Le passage du schéma (3) au schéma (4) fait apparaître  $G_{it}$  la conductance des états d'interface.

La conductance  $G_{it}$  peut donc être obtenue expérimentalement à partir de la capacité mesurée  $C_m$  et la conductance mesurée  $G_m$  après correction de la résistance série et de la conductance tunnel.

Elle est donnée par la relation [Nicollian1982] : 
$$\frac{G_{it}}{\omega} = \frac{\omega \cdot C_{ox} \cdot G_{ac}}{G_c^2 + \omega^2 \cdot (C_{ox} - C_c)^2}$$

La conductance  $G_{it}$  introduite dans la figure 17-d contient toutes les informations nécessaires pour définir les états d'interface. Un piège à l'interface est caractérisé par sa position énergétique et sa constante de temps de capture. A une fréquence donnée caractéristique d'un piège, les échanges de porteurs avec ce piège sont maximum ce qui veut dire que  $G_{it}/\omega$  présente un maximum et donc un pic en fréquence. D'autre part, le niveau d'énergie (de piège) sondé de la bande interdite dépend de la position du niveau de Fermi et donc de  $V_g$ . En conséquence, pour une valeur de fréquence fixe, la variation de  $V_g$  fait qu'un piège donné va répondre au signal et donc  $G_{it}$  présente aussi un pic en  $V_g$ . L'amplitude du pic donne alors la densité des états d'interface alors que la tension  $V_g$  donne la position énergétique des pièges. Dans la méthode de la conductance, on se place dans le régime de déplétion, ce qui ne permet de caractériser que la moitié inférieure de la bande interdite pour un semi-conducteur type p et la moitié supérieure pour un type n. La conductance en déplétion associée à un continuum en énergie d'états d'interface s'exprime par la relation (50) [Nicollian1982] :

$$\frac{G_{it}(\omega)}{\omega} = \frac{q \cdot D_{it}(E)}{2} \cdot \frac{\ln(1 + (\omega \cdot \tau)^2)}{\omega \cdot \tau} \quad (50)$$

Où  $\tau$  est la constante du temps du piège défini par :

$$\tau = \left[ v_{th} \cdot \sigma \cdot N_{dop} \cdot \exp\left(-\psi_s \cdot \frac{q}{kT}\right) \right]^{-1} \quad (51)$$

avec  $v_{th}$  : vitesse thermique des porteurs ( $10^7$  cm/s),  $N_{dop}$  le dopage et  $\sigma$  la section efficace du piège .

En traçant  $(G_{it}/\omega)$  en fonction de la fréquence pour chaque polarisation  $V_g$  en déplétion (figure 18-a), on détermine le spectre de  $D_{it}$  en fonction de  $V_g$  à partir de l'équation 50. La relation  $\Psi_s(V_g)$  permet alors de retracer  $D_{it}$  en fonction de  $\Psi_s$  et par la suite en fonction de l'énergie dans le gap. Comme nous l'avons déjà mentionné, les pièges sont caractérisés par une constante de temps de capture. A partir de cette constante du temps, nous pouvons extraire la section efficace de capture qui décrit l'aptitude du piège à capturer des porteurs. A partir de l'équation 51, nous pouvons déterminer  $\sigma$  à partir du tracé en log de la courbe  $\tau(\Psi_s)$  (figure 18-b) [Nicollian 1965].

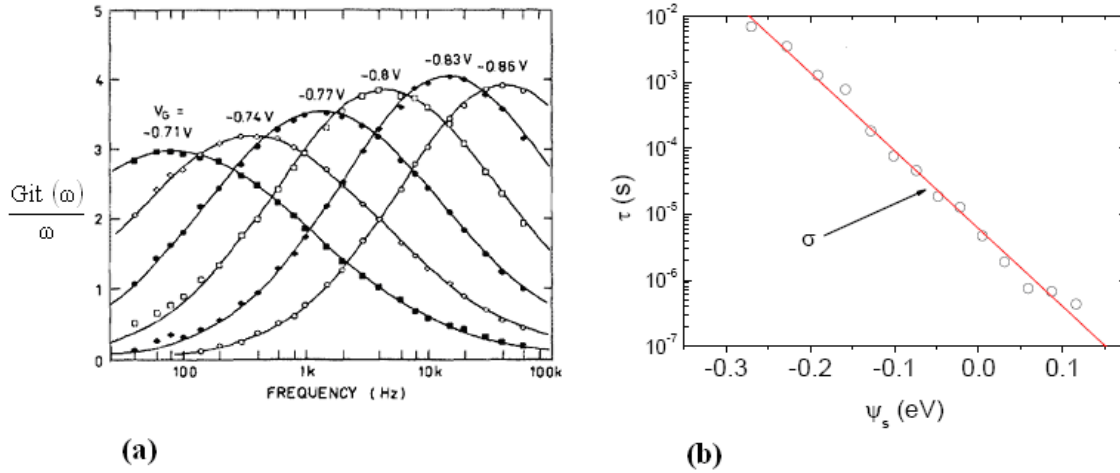


Figure 18 : (a)  $Git/\omega$  en fonction de la fréquence pour différentes tensions  $V_g$  appliquées [Hung 1987] (b) Détermination de la section efficace d'un piège

### 6.2.3. Fluctuations du potentiel de surface :

Dans le cas d'une mauvaise uniformité de la barrière isolante ou dans le cas où il existe des charges localisées à l'interface, la valeur du potentiel de surface est imprécise [Nicollian 1982]. En effet, une distribution spatiale aléatoire ou non uniforme des charges d'interface localisées conduit à une distribution spatiale de potentiel de surface le long du plan de l'interface oxyde/silicium. Généralement, et afin de tenir compte de cette non-uniformité le potentiel est décrit par une distribution gaussienne de valeur moyenne  $\langle \psi_s \rangle$  et de variance  $\sigma_s^2$  :

$$P(\psi_s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_s^2}} \cdot \exp\left(-\frac{(\psi_s - \langle \psi_s \rangle)^2}{2\sigma_s^2}\right) \quad (52)$$

$P(\psi_s)$  représente la probabilité pour que le potentiel de surface soit  $\psi_s$ .

D'après Nicollian [Nicollian 1982], la valeur moyenne de  $\frac{\langle Git \rangle}{\omega}$  est donnée par la relation (53) :

$$\frac{\langle Git \rangle}{\omega} = \frac{q}{2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Dit}{\omega\tau} \ln(1 + \omega^2 \cdot \tau^2) \cdot P(\psi_s) \cdot d\psi_s \quad (53)$$

Où la constante de temps  $\tau$  est défini par :  $\tau = \frac{1}{C_{n,p} \cdot N_{A,D}} \cdot \exp(\pm \langle \psi_s \rangle)$  (54)

Dans la relation (54),  $C_n$  et  $C_p$  représentent les coefficients de probabilité de capture des électrons et trous respectivement,  $N_A$  et  $N_D$  les dopages correspondants du substrat. Remplaçons  $P(\psi_s)$  et  $\tau$  par leurs expressions et notons  $\zeta = \omega \cdot \tau$  et  $\eta = \psi_s - \langle \psi_s \rangle$ , l'équation (53) devient après simplification :

$$\frac{\langle Git \rangle}{w} = \frac{qN_{ss}}{2\zeta \cdot \sqrt{2\pi} \cdot \sigma_s^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2\sigma_s^2}\right) \cdot \exp(-\eta) \cdot \ln(1 + \zeta^2 \cdot \exp(2\eta)) d\eta \quad (55)$$

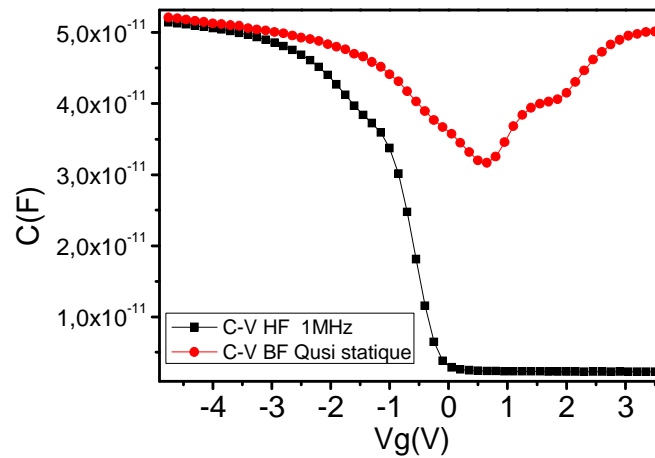
Comme dans la partie précédente, l'équation (55) est dérivée afin de déterminer la valeur de  $\omega\tau$  pour laquelle  $\frac{\langle Git \rangle}{\omega}$  est maximale, et déterminer ainsi la densité des états d'interface.

### III. Caractérisation électrique des structures MOS avec grille ferromagnétique:

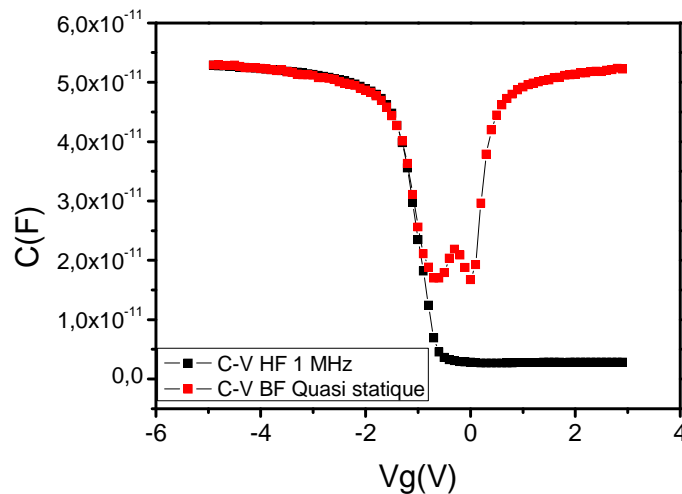
Dans le premier chapitre de ce manuscrit, nous avons vu que l'injection de spins dans le silicium à partir d'un ferromagnétique nécessite l'emploi d'une structure MOS avec un oxyde tunnel. Cependant, afin d'étudier l'effet de la grille ferromagnétique sur les caractéristiques de ces structures, ce qui n'a jamais été étudié auparavant, nous avons commencé par étudier ce type de structures mais avec un oxyde mince (~7nm d'épaisseur). Trois caractéristiques électriques de la structure MOS à grille ferromagnétique ont ainsi été étudiées ; les états d'interface (Dit), les défauts induits à la surface du silicium et l'évaluation des durées de vie de porteurs minoritaires dans le silicium. Pour cela, on a comparé deux structures, l'une avec grille ferromagnétique (NiFe/SiO<sub>2</sub> (7 nm)/Si) et l'autre avec grille en aluminium (Al/SiO<sub>2</sub> (7nm)/Si).

#### 1. Etude des états d'interface dans une structure MOS à grille ferromagnétique :

Afin de déterminer la densité des états d'interface, des mesures  $C(Vg)$  à haute fréquence (1MHz) et basse fréquence (mesure quasi statique) ont été effectuées sur des structures MOS avec grille ferromagnétique ou grille aluminium. Nous avons donc appliqué la technique haute fréquence-basse fréquence ( $C(V)_{hf-lf}$ ) proposée par Castagné et Vapaille. Les figures 19-a et 19-b présentent respectivement les caractéristiques  $C(Vg)$  haute et basse fréquence pour les deux structures à grille de NiFe et d'Al:



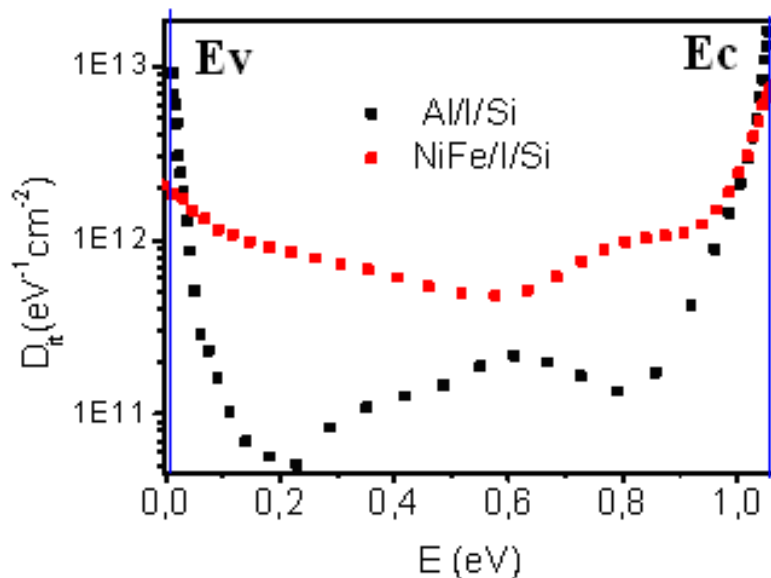
**Figure 19-a: Caractéristiques  $C(V_g)$  haute fréquence et basse fréquence pour une structure à grille de NiFe. Epaisseur d'oxyde de silicium de 7nm. Substrat de silicium : type p, dopage  $N_a=1.28 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Surface= $1. \cdot 10^{-8} \text{ m}^2$ .**



**Figure 19-b: Caractéristiques  $C(V_g)$  haute fréquence et basse fréquence pour une structure à grille d'Al. Epaisseur d'oxyde de silicium de 7nm. Substrat de silicium : type p, dopage  $N_a= 6.28 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Surface= $1.10^{-8} \text{ m}^2$ .**

Dans le cas de la structure à grille NiFe, on observe une déformation des caractéristiques  $C(V_g)$  que ce soit à haute fréquence ou à basse fréquence. Par contre, ce phénomène n'a pas été observé sur les structures avec la grille d'Al. On peut remarquer également un décalage entre la  $C(V_g)$  à haute fréquence et celle à basse fréquence, uniquement dans le cas de NiFe. La figure 19-a montre aussi un décalage vertical plus marqué dans le cas du NiFe, ce qui montre la présence d'une densité plus importante des états d'interface qui parviennent à suivre le signal AC. L'effet

de ces états d'interface est d'ajouter une capacité  $C_{it}$  qui sera d'autant plus grande que leur densité est plus élevée. L'extraction de la densité des états d'interface,  $D_{it}$ , a bien confirmé ces observations. La figure 20 présente la variation de  $D_{it}$  en fonction de l'énergie  $E$  dans le gap de silicium pour les deux structures. Nous remarquons bien que la densité des états d'interface dans le cas de la grille ferromagnétique est nettement plus importante que dans le cas d'une grille d'aluminium. En effet, il y a par exemple un ordre de grandeur de différence entre les deux spectres  $D_{it}$  près des deux bandes d'énergie. On obtient ainsi une densité d'états de l'ordre de  $10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$  qui est beaucoup plus importante que celle attendue pour une interface Si/SiO<sub>2</sub> réalisée avec des procédés qui sont à l'état de l'art de la technologie CMOS. En effet, on s'attend dans ce cas à une valeur de  $D_{it}$  de l'ordre de  $10^{10} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$  [White 1972] [Autran1993] étant donné que les structures étudiées sont réalisées dans une filière technologique de pointe. Or, dans le cas de la structure à grille NiFe, on a environ deux ordres de grandeur de plus en  $D_{it}$ , ce qui traduit la présence d'une très grande densité des défauts qui sont très probablement liés à la présence d'une grille NiFe.



**Figure 20: Densité d'états d'interface ( $D_{it}$ ) en fonction de l'énergie dans le gap du silicium pour les deux structures MOS à grilles ferromagnétique (NiFe) ou aluminium**

La variation de la densité des états d'interface dans le cas de l'aluminium présente un maximum local à environ  $E_v+0.4\text{eV}$  correspondant à l'énergie des centres  $P_b$  attribués aux liaisons pendantes [Gerardi1986]. Un autre maximum est observé à environ  $E_v+0.6\text{eV}$ . Pour le cas de la structure à grille NiFe, on observe deux maximums. Le premier est bien clair et localisé proche de la bande de conduction à une énergie  $E_c-0.3\text{eV}$ . Ce maximum peut être attribué à la diffusion des atomes du Nickel ou/et Fer. Le second est plus étalé et localisé proche de la bande de valence et s'étendant sur une énergie de  $0.4\text{eV}$ . En effet, ce maximum peut être attribué à la présence de plusieurs pics rapprochés originaires probablement de la diffusion des atomes magnétiques.

## 2. Etude des défauts électriques à la surface du silicium dans une structure MOS à grille ferromagnétique:

Un autre résultat peut être extrait des caractéristiques  $C(Vg)$ . Il s'agit de l'évolution du profil de dopage à la surface du silicium qui est étroitement lié aux défauts électroniques qui peuvent être générés par la présence d'une grille ferromagnétique. C'est pourquoi, cette étude du profil de dopage présente un grand intérêt pour notre travail. Rappelons que dans le régime de déplétion, la capacité de la structure MOS est donnée par :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{1}{C_{ox}^2} + \frac{2|Vg - V_{fb}|}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_{si} \cdot q \cdot N_{dop} \cdot S^2} \quad (56)$$

La dérivée de cette équation par rapport à  $Vg$  donne l'expression du dopage :

$$N_{dop} = \frac{2}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_{si} \cdot q \cdot \left[ \frac{\partial(S/C)^2}{\partial Vg} \right]} \quad (57)$$

Par ailleurs, l'expression de la capacité de la zone de charge d'espace  $C_{sc}$  en régime de déplétion est donnée par :

$$\frac{1}{C_{sc}} = S \cdot \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{C_{ox}} \right) = \frac{W}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_{si}} \quad (58)$$

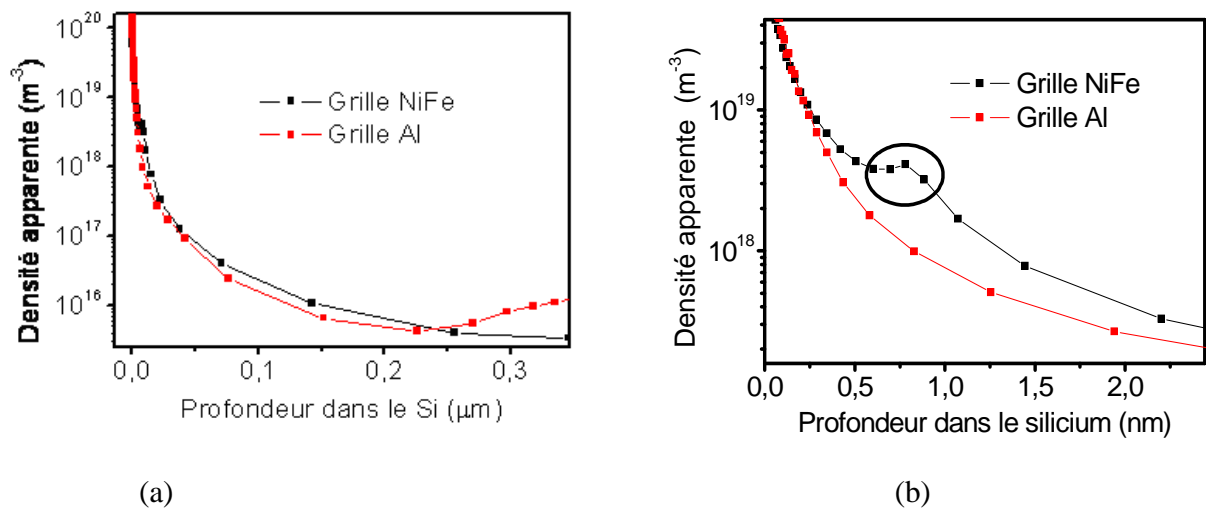
$$D'où, W = \epsilon_0 \cdot \epsilon_{si} \cdot S \cdot \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{C_{ox}} \right) \text{ la largeur de la zone de charge d'espace} \quad (59)$$

Nous voyons donc que  $W$  est fonction de la tension appliquée. Etant donné que  $W$  est fonction de  $Vg$  et que l'expression de  $N_{dop}$  fait intervenir  $Vg$ , il ya une relation entre  $N_{dop}$  et  $W$  comme le montre les relations suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} N_{dop} = f(Vg) \\ W = g(Vg) \end{array} \right\} \rightarrow N_{dop} = h(W)$$

En conclusion, l'étude de la capacité en régime de déplétion fournit un moyen d'étudier le profil de dopage de la surface du silicium.

La figure 21-a présente une comparaison entre les profils de dopage des deux structures MOS avec grille ferromagnétique ou grille en aluminium. Ces profils ne montrent pas de différences marquées. Toutefois, en dilatant l'échelle près de la région de l'interface (surface du substrat), nous observons un pic de dopage à 1nm de profondeur dans le cas d'une grille ferromagnétique (NiFe) (figure 21-b). Ce pic suggère, là encore, la présence d'impuretés supplémentaires qui peuvent résulter de la diffusion du Ni et/ou du Fe à partir de la grille. Rappelons que le substrat de silicium et la couche d'oxyde ( $SiO_2$ ) sont au départ identiques pour les deux structures. La différence observée dans le profil de dopage est bel est bien liée à la nature de la grille.



**Figure 21: Profils de dopage dans le silicium pour deux structures MOS avec grille ferromagnétique ou grille aluminium(a). Zoom sur le profil près de la surface du silicium(b). L'origine des abscisses correspond à l'interface Si /SiO<sub>2</sub>**

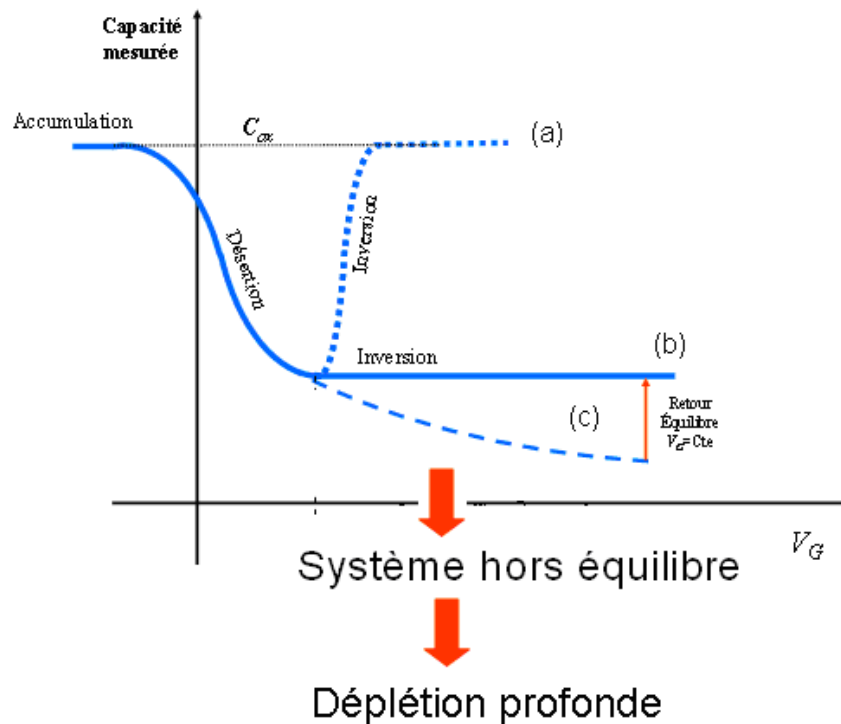
### 3. Etude de l'effet de la grille ferromagnétique sur la durée de vie des porteurs dans le silicium:

L'étude de la durée de vie des porteurs est un moyen intéressant pour connaître l'impact de la grille ferromagnétique sur les caractéristiques électriques du silicium dans une structure MOS à grille ferromagnétique. Comme précédemment, l'étude est basée sur la comparaison des structures MOS avec grille ferromagnétique ou avec aluminium. Il existe plusieurs moyens pour mesurer la durée de vie de porteurs dans le silicium. Une étude antérieure effectuée dans notre laboratoire a mis en œuvre une mesure de la durée de vie de porteurs minoritaires par analyse de la décroissance de photoconduction (PCD : PhotoConduction Decay) [Duluard thèse\_2007]. Cette étude a permis de mettre en évidence une diminution de la durée de vie de porteurs majoritaires dans le cas d'une grille ferromagnétique. Cependant, cette mesure donne une durée de vie moyennée sur tout le volume du substrat et suppose de retirer la grille ferromagnétique, d'où une certaine difficulté liée à la préparation du substrat. Dans la présente étude, nous avons opté pour une technique d'analyse pouvant d'une part fournir une mesure de la durée de vie à la surface du silicium, c'est-à-dire là où la contamination risque d'être maximum. D'autre part, comme nous le verrons par la suite, cette technique ne nécessite pas de préparation particulière de l'échantillon de test. Nous avons utilisé la technique C(t) (étude de l'évolution de la capacité en fonction du temps) décrite ci-dessous.

#### 3.1. La technique C(t) :

L'une des méthodes permettant de remonter à la durée de vie de porteurs minoritaires est la méthode de ZERBST [Schroder1971] basée sur la mesure de la capacité en fonction du temps. La technique C(t) est basée sur la mesure de l'évolution de la valeur de la capacité d'une structure MOS au cours du temps lors de la transition d'un état hors équilibre qui est la déplétion profonde à un état d'équilibre correspondant au régime d'inversion (figure 22) [Heiman1967].





**Figure 22: Caractéristique  $C(V_G)$  représentant l'effet « déplétion profonde » ou régime d'inversion hors équilibre**

La figure 22 représente une caractéristique  $C(V_G)$  faisant apparaître le régime de déplétion profonde (figure 22 (c)). Le mécanisme qui assure la transition de la déplétion profonde à l'inversion (courbe (c) vers courbe (b)) est la génération des paires électron-trou ( $e^-$ ,  $h^+$ ) qui contribuent à l'établissement de la zone d'inversion (figure 23-a). La dynamique de cette transition est directement liée aux différents mécanismes qui sont responsables de la génération des porteurs. En effet, la génération de paires ( $e^-$ ,  $h^+$ ) peut se faire par cinq mécanismes différents qui sont [Tan2000] représentés schématiquement sur la figure 23-b. Ces mécanismes sont :

- 1- Génération des porteurs dans le volume de la ZCE (zone de charges d'espace) caractérisée par la durée de vie de génération  $\tau_g$
- 2- Génération latérale à la surface de la ZCE caractérisée par la vitesse de génération surfacique  $S_g$
- 3- Génération sous la grille à la surface de la ZCE caractérisée par la vitesse de génération surfacique  $S'_g$
- 4- Génération quasi neutre du volume caractérisée par la longueur de diffusion de porteurs minoritaires  $L_n$
- 5- Génération en surface arrière caractérisée par la vitesse de génération  $S_c$

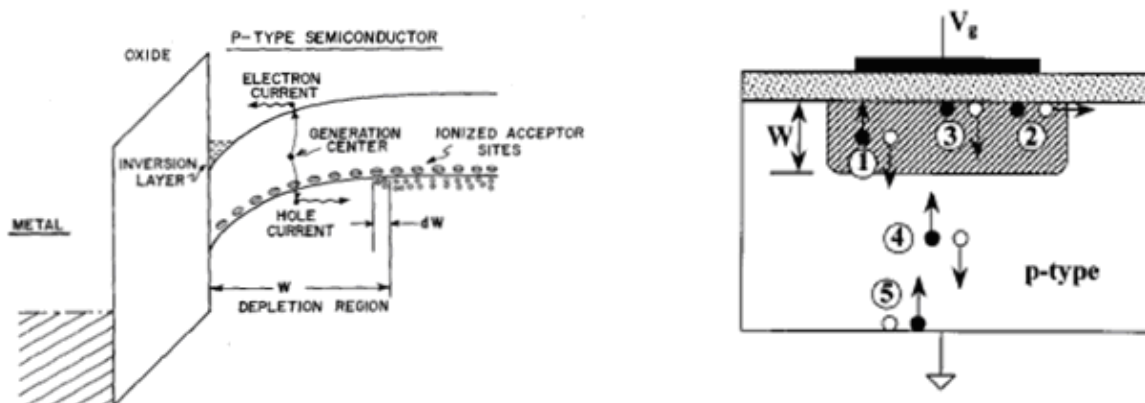


Figure 23 : (a) Relaxation de la zone de déplétion due à la génération de paires électron-trou  
(b) Les différents mécanismes de génération des porteurs [Tan2000]

Le taux de génération des charges par unité de surface ( $G$ ) est la somme de ces différentes contributions :

$$G = G(1) + G(2) + G(3) + G(4) + G(5) \quad (60)$$

Tan et al. a montré que l'expression de  $G$  est donnée par la relation (61) :

$$G = \frac{q \cdot n_i \cdot W}{\tau_g} + \frac{q \cdot n_i \cdot S_g \cdot A_s}{A_G} + q \cdot n_i \cdot S'_g + \frac{q \cdot n_i^2 \cdot D_n}{N_A \cdot L_n} \quad (61)$$

Où  $A_s = 2 \cdot \pi \cdot r$  la surface latérale de la ZCE (dans le cas d'une grille circulaire de rayon  $r$ ). Par ailleurs,  $A_G = \pi \cdot r^2$  représente la surface de la grille.

La mesure  $C(t)$  est une extraction des propriétés de la zone de charge d'espace (ZCE). En effet, les deux derniers termes de l'expression (61) peuvent être négligés à température ambiante car ils représentent la génération des porteurs dans le volume du substrat. En ne considérant que les deux premiers termes, l'expression du courant dans la zone de charge d'espace  $I_{scr}$  sera donnée par :

$$I_{scr} = \frac{q \cdot n_i \cdot W \cdot A_G}{\tau_g} + q \cdot n_i \cdot S_g \cdot A_s = \frac{q \cdot n_i \cdot W \cdot A_G}{\tau_{g,eff}} \quad (62)$$

Avec  $\tau_{g,eff}$  la durée de vie effective des porteurs:

$$\tau_{g,eff} = \left( \frac{1}{\tau_g} + \frac{1}{\tau_s} \right)^{-1} \quad (63)$$

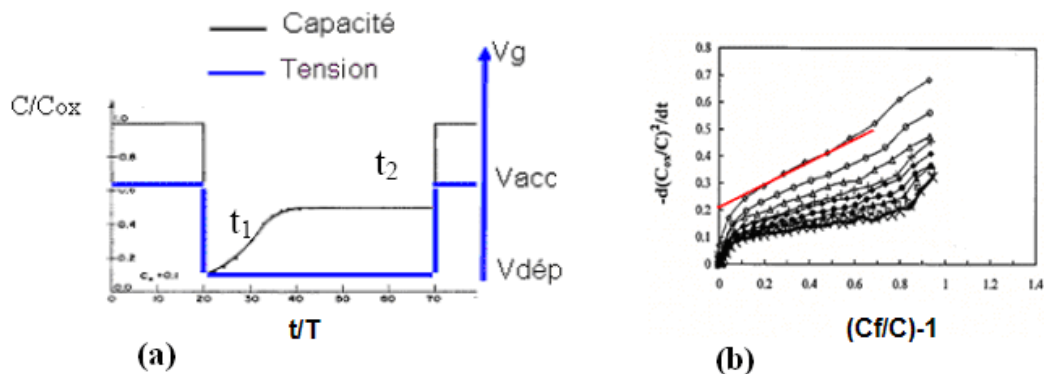
Où  $\tau_s = \frac{r}{2 \cdot S_g}$  la durée de vie de génération surfacique latérale.

Les deux grandeurs à déterminer sont donc  $\tau_g$  et  $S_g$ . C'est la méthode de Zerbst [Schroder1971] qui permet de le faire. Cette méthode consiste à appliquer une impulsion de tension sur la grille de la capacité MOS. Cette impulsion de tension permet un basculement rapide du régime d'accumulation vers le régime de déplétion profonde. Ceci met la ZCE dans un état hors équilibre thermodynamique. La structure retrouve l'équilibre (l'inversion) au bout d'un certain temps T grâce à la génération des porteurs minoritaires. La figure 24-a illustre l'évolution de la capacité en fonction du temps qui accompagne l'application d'un créneau de tension. On observe que la capacité de la structure évolue d'une valeur initiale à  $t = t_1$ , celle de la capacité en déplétion profonde, à une valeur finale Cf à  $t=t_2$ , celle de la capacité en inversion (régime d'équilibre). Les données obtenues lors de la mesure C (t) peuvent être converties en tracé de Zerbst. Dans ses travaux, Zerbst a démontré que la dérivée par rapport au temps du carré de l'inverse de la capacité est donnée par [Schroder1971]:

$$-\frac{d\left(\frac{C_{ox}}{C}\right)^2}{dt} = \frac{2.n_i.C_{ox}}{\tau_{g,eff}.N_A.Cf} \left(\frac{Cf}{C} - 1\right) + \frac{2.\epsilon_{ox}.n_i.S_g}{\epsilon_{si}.t_{ox}.N_A} \quad (64)$$

où  $N_A$  représente le dopage du substrat. Il est donc évident que si nous

traçons  $-\frac{d\left(\frac{C_{ox}}{C}\right)^2}{dt} = f\left(\frac{Cf}{C} - 1\right)$ , appelé tracé de Zerbst, nous pouvons remonter à  $\tau_{g,eff}$  ainsi qu'à  $S_g$  respectivement à partir de la pente et de l'ordonnée à l'origine de la partie linéaire du tracé de Zerbst (voir figure 24-b).

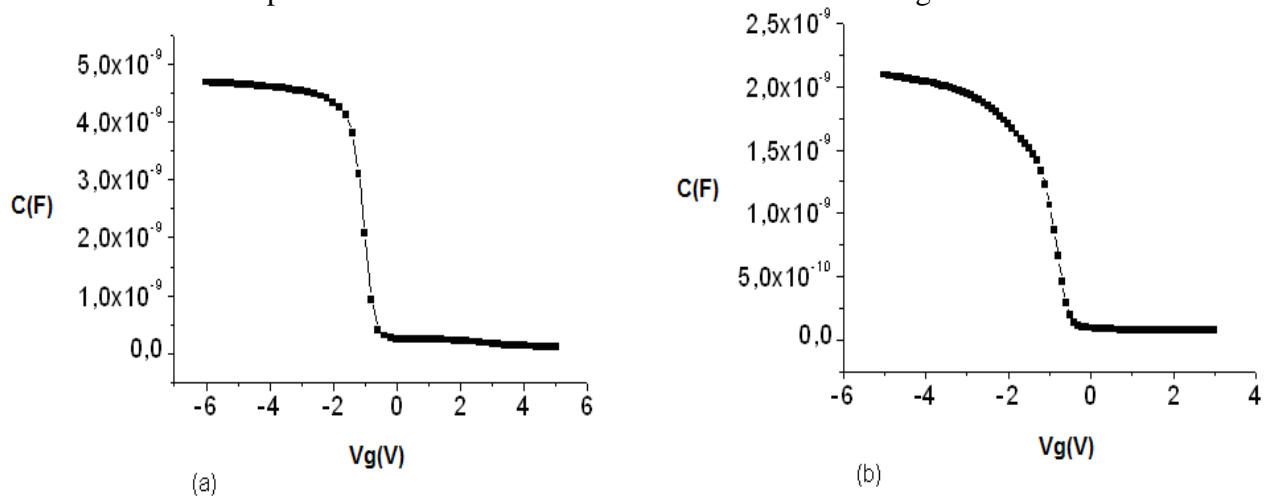


**Figure 24 : (a) Principe de la méthode de Zerbst (b) Exemple de tracé de Zerbst pour un ensemble d'échantillons présentant différentes durées de vie [Tan2000]**

### 3.2. Résultats et discussion :

Les figures 25-a et 25-b montrent les courbes C(Vg) de deux structures mesurées à grille d'aluminium et de NiFe respectivement. La courbe relative à la structure à grille NiFe présente

une déformation non observée pour l'autre structure. Comme déjà indiqué, cette déformation est probablement liée à la présence des défauts d'interface dans la structure à grille NiFe.



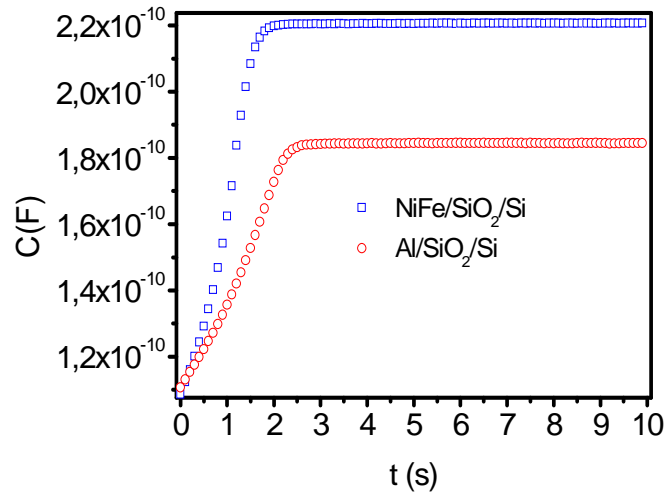
**Figure 25: Caractéristique  $C(V_g)$  (a) de la structure à grille Al avec une surface  $S=1.104 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$  (b) de la structure à grille NiFe avec une surface  $S= 0.39 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$**

Grâce aux mesures  $C(V_g)$ , on a pu extraire les valeurs caractéristiques des deux structures : le dopage, l'épaisseur de l'oxyde et la tension des bandes plates. Ces valeurs sont reportées dans le tableau 1 :

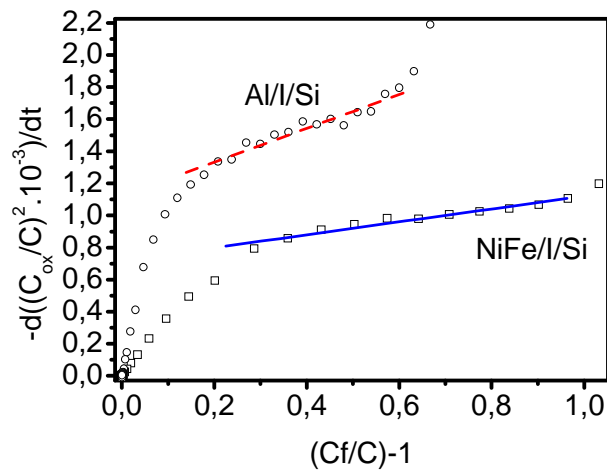
	Epaisseur d'oxyde extraite (nm)	dopage ( $\text{cm}^{-3}$ )	Tension des bandes plates (V)
Al/SiO <sub>2</sub> /p-Si	6.83	$6.28 \cdot 10^{15}$	-0.94
NiFe/SiO <sub>2</sub> /p-Si	6.51	$1.28 \cdot 10^{16}$	-1.7

**Tableau 1 : Valeurs caractéristiques extraites pour les deux structures à grille ferromagnétique et à grille d'aluminium**

A partir de ces valeurs extraites, nous pouvons remarquer que la tension de bandes plates dans le cas d'une grille ferromagnétique est décalée vers les tensions négatives. Cela montre la présence d'une quantité plus importante de charges (positives) dans le volume de  $\text{SiO}_2$  dans le cas de la structure à grille NiFe. Dans la figure 26-a, on compare les caractéristiques  $C(t)$  pour les deux structures à grille aluminium et à grille NiFe respectivement. On remarque dans les deux cas une montée exponentielle de la capacité qui s'explique par la génération de porteurs minoritaires suivie d'une saturation qui marque l'établissement de l'équilibre (le régime d'inversion). Cette saturation est établie plus rapidement pour le cas à grille NiFe que pour le cas de l'aluminium. En effet, dans ce dernier cas l'équilibre est établi au bout de 2.6 secondes alors que pour le NiFe l'équilibre est établi au bout de 2 secondes.



(a)



(b)

Figure 26: (a) Caractéristique  $C(t)$  pour les deux structures à grille Al et NiFe (b) Tracé de Zvest pour les deux structures à grille Al et NiFe

Afin de remonter aux valeurs de  $\tau_{g,eff}$  et  $S_g$ , nous avons effectué le tracé de Zerst (figure 26-b). Les valeurs extraites sont reportées dans le tableau 2 :

	$\tau_{g,eff}$	$S_g$
Al/SiO <sub>2</sub> /p-Si	0.24 $\mu$ sec	2.05m/sec
NiFe/SiO <sub>2</sub> /p-Si	0.14 $\mu$ sec	3.7m/sec

**Tableau 2 : Valeurs de la durée de vie de génération des porteurs et de la vitesse de génération extraites pour les deux structures à grille ferromagnétique et à grille d'aluminium**

Notons que la durée de vie de génération des porteurs est plus faible dans le cas de la structure à grille NiFe et la vitesse de génération est plus grande. Les valeurs de  $\tau_{g,eff}$  et  $S_g$  peuvent être attribuées à la génération favorisée des porteurs augmentée par la présence des états d'interface et des défauts dans le substrat. Ces observations suggèrent fortement l'effet de la diffusion du nickel et /ou du fer vers l'interface Si/SiO<sub>2</sub> et dans le silicium.

#### 4. Conclusion:

En comparant les résultats entre la structure à grille NiFe et la structure à grille d'aluminium, il semble bien que les métaux 3d contaminent l'oxyde comme le montre le décalage de la tension des bandes plates  $V_{fb}$ , ainsi que le silicium comme le suggère la diminution des durées de vie des porteurs. On remarque aussi que la vitesse de génération surfacique  $S_g$  dans le cas de NiFe est plus grande que celui de l'aluminium, ce qui est cohérent avec le fait que  $\tau_{g,eff}(\text{NiFe}) < \tau_{g,eff}(\text{Al})$ . Ceci peut être attribué d'une part aux états d'interface, plus importants dans le cas du NiFe que dans le cas d'aluminium, et d'autre part aux centres de recombinaison dans le volume du substrat qui contribuent à la génération des porteurs et donc à l'établissement de l'équilibre plus rapide. A la lumière de ces résultats, on constate qu'une amélioration des caractéristiques de ces structures (diminution des défauts par recuit, utilisation d'autres barrières tunnels plus résistifs à la diffusion des métaux ferromagnétiques etc....) est nécessaire.

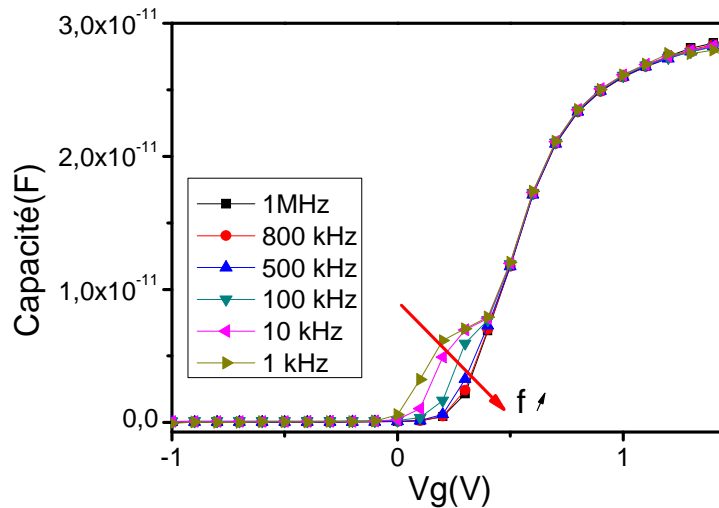
#### IV. Caractérisation de l'interface oxyde/silicium dans les structures à oxyde ultra mince:

L'étude des propriétés électriques des structures MOS à grille ferromagnétique détaillée dans la partie précédente de ce chapitre montre l'existence de défauts électriques dans l'oxyde, à l'interface oxyde/silicium ainsi qu'à la surface du substrat. Outre les conséquences qu'ils peuvent avoir sur les caractéristiques électriques, il est très probable que ces défauts aient des effets néfastes sur la polarisation en spin des électrons transitant du ferromagnétique vers le silicium. C'est pourquoi, il est important d'étudier les moyens de remédier à ces défauts soit en effectuant des recuits pour les guérir, soit au cas où le recuit ne suffit pas, procéder à un changement de couche isolante. C'est l'objet de cette partie de l'étude consacrée aux oxydes ultra minces avec une grille ferromagnétique.

## 1. Résultats obtenus sur les structures MOS avec oxyde de silicium:

### 1.1. Caractéristiques $C(V_g)$ en fonction de la fréquence : Etude des états d'interface

La figure 27 présente des caractéristiques  $C(V_g)$  d'une structure avec grille ferromagnétique et oxyde de silicium d'une épaisseur de 2.5 nm pour des fréquences allant de 1 kHz à 1 MHz. Les courbes  $C(V_g)$  présentent un épaulement en régime de déplétion dont l'amplitude augmente au fur et à mesure de la diminution de la fréquence de mesure. Cet épaulement n'est autre que la réponse capacitive des états d'interface. Leur contribution capacitive à la capacité totale augmente avec la diminution de la fréquence de mesure vu que les états d'interface suivent de plus en plus efficacement le signal AC avec la diminution de la fréquence [Ouisse1993]. Le schéma équivalent à basse fréquence est celui de la figure 14.



*Figure 27 : Caractéristiques  $C(V_g)$  mesurées sur une structure  $NiFe/SiO_2(2.5nm)/n-Si$  à différentes fréquences. Surface= $2400\mu m^2$*

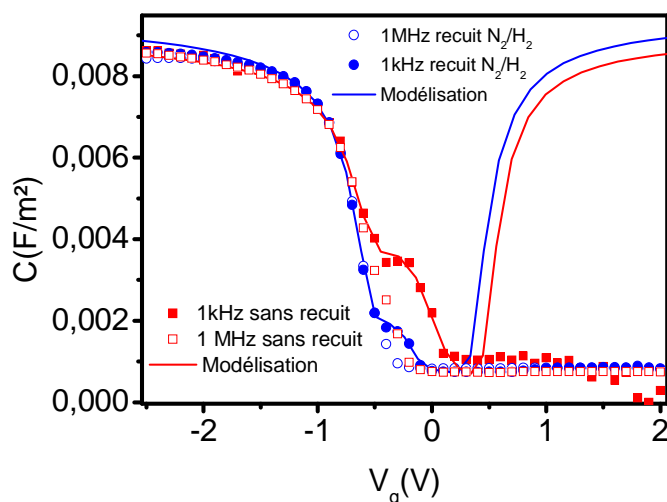
Les caractéristiques des états d'interface (densité, section efficace de capture, nature, position énergétique...) peuvent être évaluées soit par modélisation de la réponse de ces états en fonction de la fréquence (figure 27) [Masson2002], soit par des mesures de conductance ou par des mesures capacitives comme nous l'avons expliqué précédemment.

La concentration des défauts à l'interface oxyde/silicium peut être modifiée en procédant à des recuits en température et en atmosphère d'hydrogène. Utilisant l'amplitude de l'épaulement observé dans les caractéristiques  $C(V_g)$  comme indicateur de la qualité de l'interface, nous avons soumis la structure à des recuits et analysé les conséquences sur les caractéristiques  $C(V_g)$ .

### 1.2. Effet de recuit :

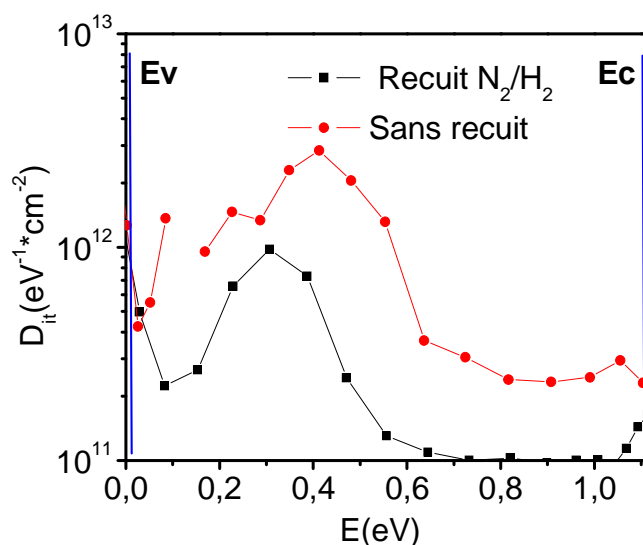
Certaines structures à oxyde  $SiO_2$  ont subi un recuit sous « Forming gas », mélange d'hydrogène et d'azote à une température de  $450^\circ$  pour une durée typique de l'ordre de 30 mn. La figure 28 représente les caractéristiques  $C(V_g)$  obtenues à haute fréquence (1 MHz) et à basse fréquence (1 kHz) pour deux structures MOS à grilles ferromagnétiques, l'une recuite sous forming gas et

l'autre sans recuit. Les caractéristiques ont été modélisées en utilisant un simulateur des  $C(V_g)$  qui consiste à reconstituer la courbe  $C(V_g)$  à partir des équations de base de la structure MOS et à partir du calcul de la charge stockée dans le semi-conducteur, en résolvant les équations couplées Poisson-Schrödinger. Cette modélisation tient compte aussi de la présence des états d'interface. L'épaisseur d'oxyde extraite à partir des modélisations  $C(V_g)$  est de 3.5 nm pour la structure recuite et 3.6 nm pour la structure non recuite. Rappelons que l'épaisseur physique de la couche d'oxyde est de 4 nm. Les courbes  $C(V_g)$  présentent une déformation plus marquée en régime de déplétion à basse fréquence (1 kHz), signe de la réponse des états d'interface. La structure non recuite présente des déformations et des dispersions en fréquence plus marquées que dans le cas de la structure recuite. Cela veut dire que dans le cas non recuit, il y a plus d'états d'interface qui répondent au signal et qui contribuent à la capacité. Le recuit a donc permis d'améliorer l'interface et de remédier en partie aux défauts. Nous avons pu vérifier ces observations de façon plus quantitative grâce à la détermination de la densité des états d'interface par la méthode  $C(V)_{hf-lf}$ . La figure 29 montre le spectre de  $D_{it}$  en fonction de l'énergie dans le gap de silicium. On remarque que l'échantillon recuit présente une densité de défauts plus faible. Mais le recuit n'a pas un effet très marqué du fait que la diminution de la densité des états d'interface après recuit n'est que d'un facteur 3 environ.



**Figure 28 : Caractéristiques  $C(V_g)$  de deux structures  $NiFe/SiO_2$  (4nm)/p-Si recuite et non recuite mesurées à deux fréquences (1MHz et 1kHz)**





**Figure 29 : Spectre  $D_{it}(E)$  pour les deux structures  $NiFe/SiO_2$  (4nm)/p-Si recuite et non recuite mesurés par  $C(V)_{hf-lf}$**

Le tableau 3 donne une synthèse des résultats obtenus pour les structures MOS avec grille ferromagnétique avec 4 nm d'oxyde  $SiO_2$  pour deux types de dopage du substrat. On constate que dans les deux cas, le recuit sous forming gas entraîne une diminution de la densité des états d'interface. Cette dernière reste toutefois élevée par rapport à ce qui est attendu pour une interface silicium/  $SiO_2$ .

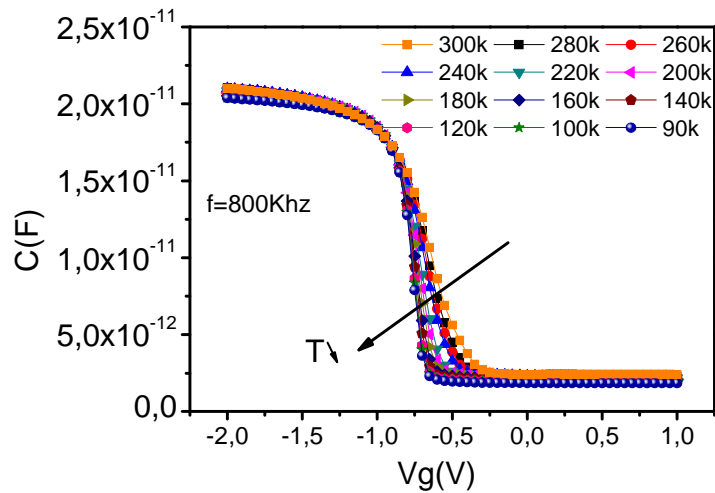
	Structure non recuite type-p	Structure recuite type-p	Structure non recuite type-n	Structure recuite type-n
$D_{it}$ ( $eV^{-1}.cm^{-2}$ )	$2.86 \cdot 10^{12}$	$9.83 \cdot 10^{11}$	$1.79 \cdot 10^{12}$	$4.93 \cdot 10^{11}$

**Tableau 3 : Résultats des mesures de la densité des états d'interface pour les structures MOS à oxyde de silicium recuites et non recuites**

### 1. 3. Effet de la température de mesure sur la densité d'états d'interface :

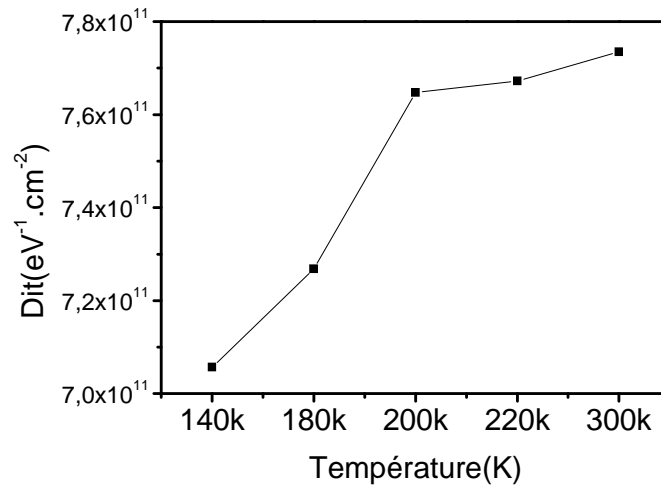
Comme déjà mentionné, l'injection des électrons polarisés en spin doit être assurée par un mécanisme de transport balistique d'électrons ne faisant pas intervenir les défauts ni dans la barrière tunnel ni à l'interface entre celle-ci et le silicium. En particulier, les électrons peuvent être piégés à l'interface silicium/isolant par les états d'interface actifs pendant une durée qui peut excéder la durée de vie du spin ce qui entraîne une forte dégradation de la durée de vie d'électrons polarisés en spin. Pour cela, une diminution de l'effet des états d'interface actifs favorise l'augmentation du signal polarisé en spin. Des mesures réalisées en fonction de la température montrent que la densité des états d'interface actifs diminue. La figure 30 montre les caractéristiques  $C(Vg)$  pour une structure MOS à grille ferromagnétique avec 4nm d'oxyde  $SiO_2$  ayant subi un recuit sous forming gas. Ces mesures capacitives sont faites à différentes températures allant de 300K à 90K à une fréquence 800 kHz. On remarque qu'en diminuant la

température, l'effet de « stretching » disparaît progressivement : signe d'une diminution de la contribution des états d'interface. En effet, à basses températures les états d'interface sont gelés et donc le comportement de ces états diminue car le piégeage et le dépiégeage des porteurs par ces états sont activés thermiquement.



**Figure 30: Caractéristiques  $C(V_g)$  des structures NiFe/SiO<sub>2</sub> (4 nm)/p-Si avec recuit à la fréquence 800 kHz et à différentes températures**

La mesure de la densité des états d'interface confirme bien qu'en diminuant la température, la densité de défauts actifs diminue (figure 31).



**Figure 31 : Evolution de la densité des états d'interface  $D_{it}$  en fonction de la température pour une structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4 nm)/p-Si avec recuit forming gas**

## 1.5. Conclusion :

Les structures MOS avec grille ferromagnétique et oxyde de silicium ultra mince présentent des densités des états d'interface de l'ordre de  $10^{11}$ - $10^{12}$   $\text{cm}^{-2}$   $\text{eV}^{-1}$ . Ces densités sont plus importantes que dans le cas des structures MOS à grille non ferromagnétiques [White 1972] et elles semblent être liées à la diffusion des atomes ferromagnétiques à travers la barrière d'oxyde. Ces défauts risquent de compromettre l'injection de spins dans le silicium, d'où la nécessité d'utiliser une autre barrière.

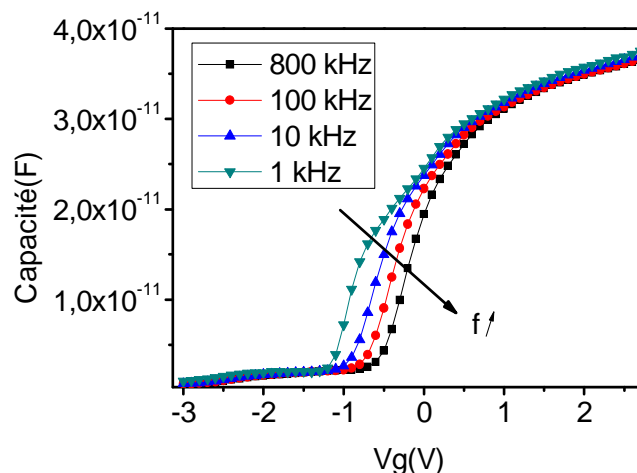
## 2. Etude des structures MOS à grille ferromagnétique et avec oxyde d'aluminium:

Dans les composants spintroniques actuels basés sur l'effet tunnel dépendant du spin, deux types d'oxyde sont utilisés, l'alumine et l'oxyde de magnésium. Des performances record en termes d'amplitude de magnétorésistance tunnel ont été obtenues avec l'oxyde de magnésium [Parkin 2004]. Il aurait été ainsi naturel que nous nous intéressions à ce type de barrière si sa technologie était maîtrisée sur silicium. Or, ce n'est pas le cas. C'est pourquoi, notre choix est allé pour l'oxyde d'aluminium déposé par ALD (Atomic Layer Deposition) (le procédé de dépôt de l'oxyde d'aluminium est décrit dans la partie IV.3 du premier chapitre) et étudié en technologie silicium comme oxyde de grille à haute permittivité diélectrique.

### 2.1. Etude des états d'interface :

La figure 32 présente une caractéristique  $C(V_g)$  d'une structure MOS à grille ferromagnétique avec 4nm d'oxyde d'aluminium. A partir de la modélisation  $C(V_g)$ , des épaisseurs de 3.1 nm d' $\text{Al}_2\text{O}_3$  et 0.7 nm de  $\text{SiO}_2$  ont été extraites.

Cette courbe présente une dispersion marquée en régime de déplétion suggérant une grande densité des états d'interface.



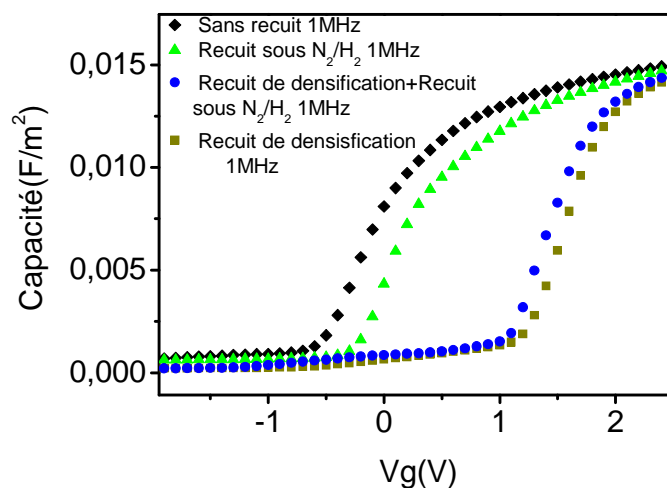
*Figure 32 : Caractéristiques  $C(V_g)$  mesurées avec une structure  $\text{NiFe}/\text{Al}_2\text{O}_3$  (3.1nm)/ $\text{SiO}_2$ (0.7nm)/n-Si non recuite et à différentes fréquences*

Dans les structures à oxyde d'aluminium, les états d'interface peuvent être diminués aussi en améliorant l'interface par différents types de recuits. L'effet du recuit est étudié dans le paragraphe suivant.

## 2.2. Effet de recuit sur les caractéristiques $C(V_g)$ :

Afin d'étudier l'effet du recuit sur l'interface  $Al_2O_3/Si$ , des structures MOS avec une épaisseur de 4 nm d' $Al_2O_3$  ont été utilisées et dont les épaisseurs extraites par modélisation sont reportés dans le tableau 4. La figure 33 montre les  $C(V_g)$  mesurées à haute fréquence (1 MHz) pour les quatre structures qui ont subi différents recuits : recuit de densification, recuit forming gas ou l'ensemble des deux recuits. Le recuit de densification est appliqué à  $700^\circ C$  sous  $O_2$  pendant 15mn alors que le recuit forming gas est appliqué sous mélange d'hydrogène et d'azote à une température de  $450^\circ$  pour une durée typique de l'ordre de 30 mn. Ces recuits ont dû être effectués avant le dépôt de la grille afin d'éviter la contamination du four de recuit par les éléments ferromagnétiques contrairement au processus MOS standard où le recuit intervient en fin de processus de fabrication.

Les courbes  $C(V_g)$  montrent que la tension des bandes plates ( $V_{fb}$ ) est décalée vers les tensions positives pour les échantillons recuits (voir tableau 4). Cela indique que les propriétés électriques sont largement améliorées sous l'effet de différents recuits. La valeur de  $V_{fb}$  la plus positive est observée avec l'échantillon qui a subi un recuit de densification. Cette conclusion est confortée par la valeur de la densité des états d'interface déterminée par la méthode  $C(V)_{hf-lf}$ . La figure 34 montre les spectres de  $D_{it}$  en fonction de l'énergie dans le gap de silicium. On remarque que tous les recuits ont entraîné une amélioration de l'interface en comparaison avec l'échantillon non recuit et que l'échantillon avec le recuit de densification présente la densité de défauts la plus faible.



*Figure 33 : Caractéristiques  $C(V_g)$  des structures  $NiFe/Al_2O_3(4nm)/n-Si$  à différents recuits mesurées à haute fréquence 1MHz*

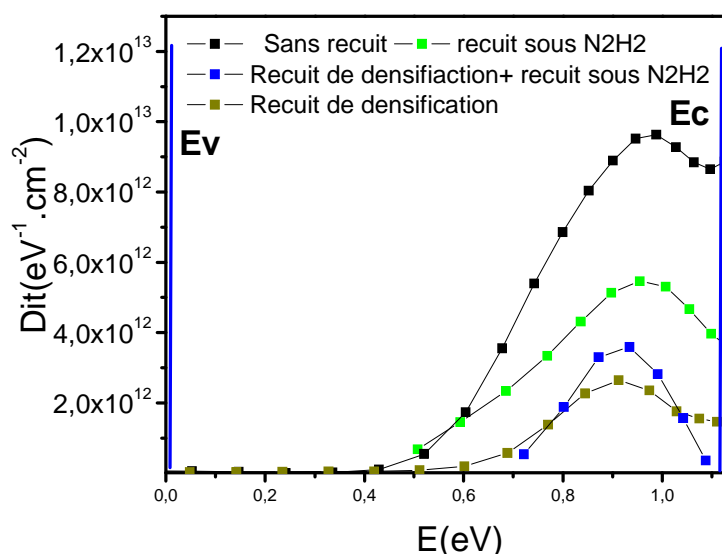


Figure 34 : Spectre  $Dit(E)$  pour les structures  $NiFe/ Al_2O_3 (4nm)/ n-Si$  mesuré par la méthode  $C(V)_{hf-lf}$

	Structure non recuite	Structure recuite sous forming gas	Structure recuite sous forming gas+ recuit de densification	Structure avec recuit de densification
Épaisseur extraite par simulation	0.7 SiO <sub>2</sub> 3.1 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.7 SiO <sub>2</sub> 3.1 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.6 SiO <sub>2</sub> 2.9 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.7 SiO <sub>2</sub> 2.9 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
$Dit(eV^{-1}.cm^{-2})$	$9.62 \cdot 10^{12}$	$5.46 \cdot 10^{12}$	$3.58 \cdot 10^{12}$	$2.64 \cdot 10^{12}$
$V_{fb}(V)$	- 0.31	- 0.088	1.3	1.43

Tableau 4: Synthèse des résultats électriques relatifs à la structure MOS à grille ferromagnétique avec oxyde d'aluminium

On remarque que le recuit sous forming gas (N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>) permet de diminuer la densité des états d'interface d'un rapport de 1.8 et le recuit de densification d'un rapport de 3.6.

L'effet du recuit de densification est surtout observé sur des échantillons à plus faible épaisseur physique, de 2 nm d'alumine (figure 35). La figure 35 présente les caractéristiques  $C(V_g)$  pour une structure recuite sous densification d'épaisseurs extraites 0.7 nm de SiO<sub>2</sub> et 1.26 nm d'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> et une structure non recuite à épaisseurs extraites 0.7 nm de SiO<sub>2</sub> et 1.67 nm d'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Comme on peut le remarquer, la courbe  $C(V_g)$  à basse fréquence pour la structure non recuite présente d'importantes déformations qui disparaissent pour la structure recuite. De plus, la dispersion en fréquence est assez marquée mais diminue fortement pour la structure recuite, ce qui traduit une diminution de la densité des états d'interface. En effet, la mesure quantitative montre que leur

densité diminue de  $5.51 \cdot 10^{13}$  à  $2.29 \cdot 10^{12} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$  après recuit. De plus, le spectre des défauts s'éloigne de la bande de valence ce qui rend difficile la capture des défauts (figure 36).

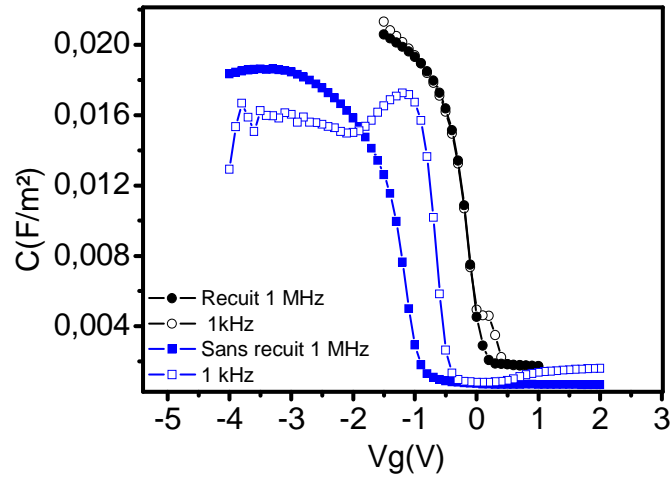


Figure 35: Caractéristiques  $C(V_g)$  de deux structures  $\text{NiFe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$  recuite sous densification et non recuite à deux fréquences 1MHz et 1kHz

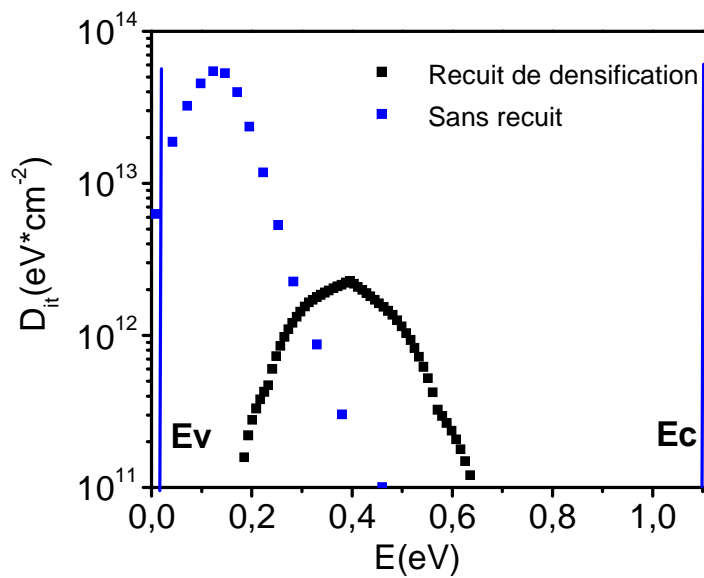


Figure 36 : Spectres  $D_{it}(E)$  de deux structures  $\text{NiFe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2/\text{p-Si}$  recuite sous densification et non recuite mesurés par la méthode  $C(V)_{hf-lf}$

### 2.3. Effet de l'épaisseur d'oxyde sur la densité de défauts d'interface :

L'étude de la densité des défauts que nous venons de présenter tend à montrer que ces défauts sont liés à la présence d'une grille ferromagnétique, et donc à une diffusion des atomes magnétiques à travers la barrière d'oxyde. Cette diffusion a très probablement lieu lors du dépôt de la grille ferromagnétique, réalisé dans notre cas par pulvérisation cathodique. En effet, nous avons constaté que le traitement thermique n'entraînait pas d'augmentation de la densité des défauts. Dans ces conditions, on s'attend à ce que l'épaisseur de la couche d'oxyde joue un rôle sur la diffusion des atomes à partir de la grille ferromagnétique.

L'effet de l'épaisseur de la couche d'oxyde a été étudié en analysant la densité des états d'interface par la technique  $C(V)_{hf-lf}$  pour deux épaisseurs d'oxyde de 3 nm (épaisseurs extraites sont de 2.75 nm d' $Al_2O_3$  et 0.7 nm de  $SiO_2$ ) et 4 nm (épaisseurs extraites sont de 3.1 nm d' $Al_2O_3$  et 0.7 nm de  $SiO_2$ ). Ces structures n'ont subi aucun recuit. La figure 37 présente les spectres de densité d'états d'interface obtenus. Elle montre qu'en augmentant l'épaisseur de l'oxyde, il y a une diminution de la densité des états d'interface.

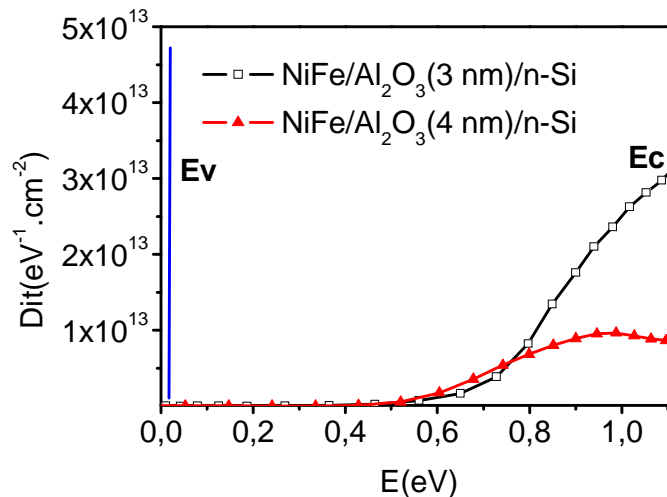


Figure 37 : spectres  $Dit(E)$  pour les structures  $NiFe/Al_2O_3/SiO_2/n-Si$  non recuites avec épaisseurs 3nm et 4 nm mesurés par la méthode  $C(V)_{hf-lf}$

### 2.5. Conclusion :

Les structures à base d'alumine présentent des densités des états d'interface proches de celles reportées dans la littérature. En effet, Y. Chang a trouvé des densités des états d'interface variant de  $3.10^{11}$  à  $10^{12} cm^{-2} eV^{-1}$  pour des structures MOS à grille métallique avec une double barrière  $Al_2O_3/SiO_2$  [Chang 2003]. Ce résultat montre que la grille ferromagnétique n'introduit pas des défauts supplémentaires à l'interface silicium/isolant. Ceci suggère que l'oxyde d'aluminium, contrairement à l'oxyde de silicium, se comporte comme barrière contre la diffusion des atomes magnétiques de la grille.

### 3. Etude de la section efficace de capture des états d'interface par la méthode $G-\omega$ :

Outre l'étude de leur densité, la section efficace de capture des pièges d'interface représente une donnée fondamentale pouvant renseigner sur la nature de ces pièges et leur efficacité de capture de porteurs. Dans ce domaine, c'est la méthode  $G-\omega$  qui permet d'accéder à ce type d'information, inaccessible par la méthode  $C(V)_{\text{hf-lf}}$ . C'est pourquoi, nous avons appliqué cette méthode sur des structures MOS à grille ferromagnétique avec les deux types d'oxyde,  $\text{SiO}_2$  et  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

#### 3.1. Détermination de la densité des états d'interface et comparaison avec la méthode $C(V)_{\text{hf-lf}}$ :

La densité des états d'interface est déterminée pour une structure à oxyde de silicium d'épaisseur physique 4nm recuit sous forming gas. Rappelons que l'étude de la fonction  $G(\omega)/\omega$  en fonction de  $\omega$  permet d'avoir une série de spectres donnant les valeurs de  $D_{\text{it}}$  pour une polarisation  $V_g$  donnée, ce qui permet de tracer le spectre de  $D_{\text{it}}$  en fonction de  $V_g$ . La connaissance de l'expression  $\Psi_s(V_g)$  permet de retracer  $D_{\text{it}}$  en fonction de  $\Psi_s$ , autrement dit en fonction de l'énergie dans le gap de silicium. La figure 38 présente les spectres  $G(\omega)/\omega$  en fonction de  $\omega$  pour différentes valeurs de  $V_g$ . On remarque bien que ces courbes présentent des maximums à des pulsations différentes.

La figure 39 donne les  $D_{\text{it}}$  pour la même structure obtenues par la méthode  $G-\omega$  et par  $C(V)_{\text{hf-lf}}$ . On remarque qu'il n'y a pas de différence significative entre les deux densités et que les deux spectres présentent un maximum à la même énergie à  $E = E_v + 0.3 \text{ eV}$ .

Ce résultat montre que les deux techniques mettent en évidence les mêmes états d'interface.

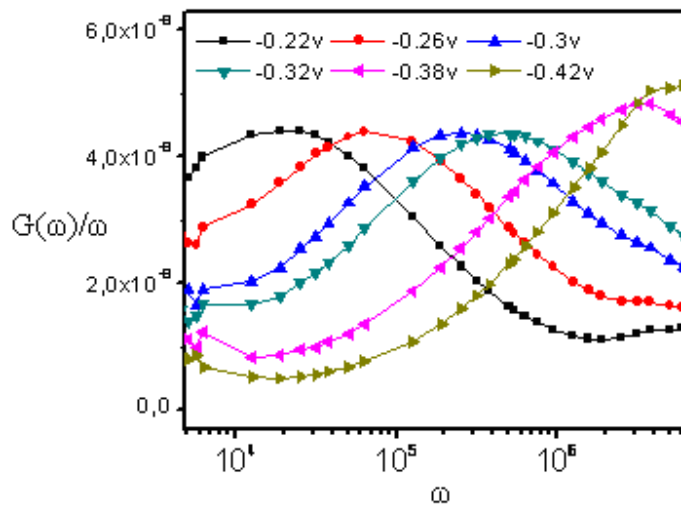
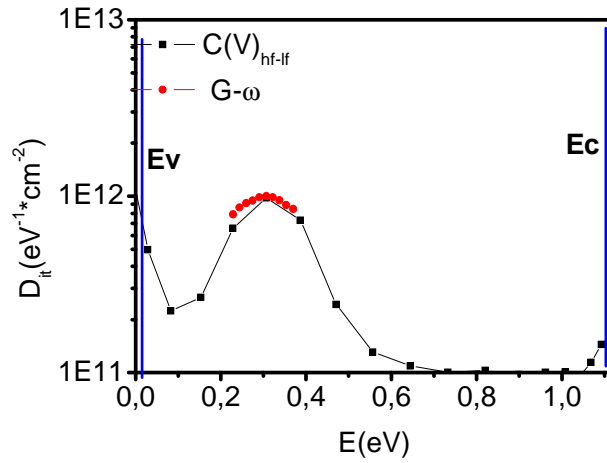


Figure 38:  $G(\omega)/\omega$  en fonction de la pulsation pour différentes tensions appliquées sur la grille. Structure MOS avec grille NiFe et oxyde de silicium (4 nm)

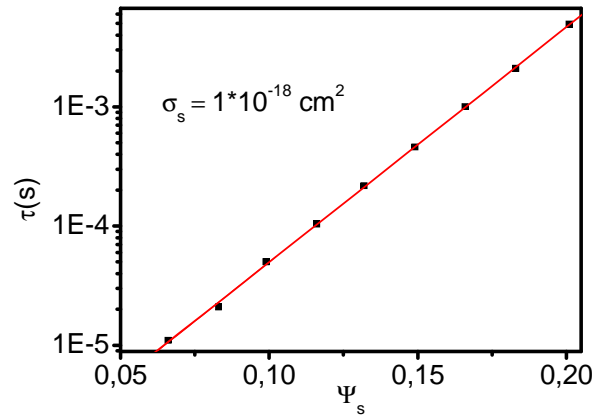




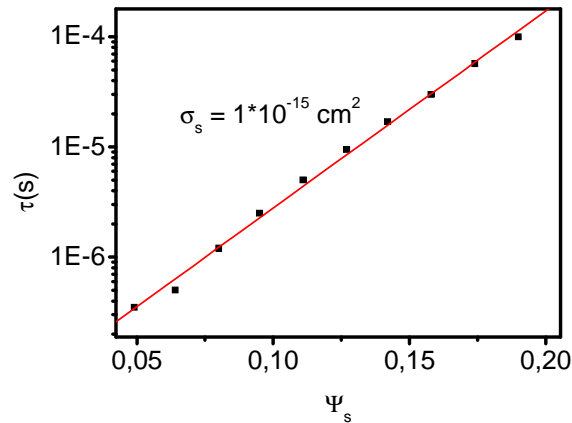
*Figure 39 : la densité des états d'interface déterminée par les deux méthodes  $G-\omega$  et  $C(V)_{hf-lf}$  pour la structure de la figure 38*

### 3.2. Détermination de la section efficace de capture :

La section efficace de capture des états d'interface est extraite à partir du tracé de temps de capture en fonction du potentiel de sortie  $\tau(\Psi_s)$  (équation 41). Les figures 40-a et 40-b présentent les tracés  $\tau(\Psi_s)$  pour un échantillon NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(1.26nm)/SiO<sub>2</sub>(0.7nm)/p-Si avec recuit densification et un échantillon NiFe/SiO<sub>2</sub>(3.5nm)/p-Si recuit sous Forming Gas respectivement. La pente de la courbe donne une section efficace de capture de  $10^{-18}$  cm<sup>2</sup> pour l'échantillon à oxyde alumine et une section de  $10^{-15}$  cm<sup>2</sup> pour l'échantillon à oxyde de silicium. Les valeurs de la section efficace de capture obtenue montrent que ces défauts sont du type coulombien répulsif dans l'échantillon à oxyde alumine et des centres Pb dans les échantillons à oxyde de silicium. On remarque aussi que les centres coulombiens ont une section plus faible que les centres Pb donc ils sont moins aptes à capturer des porteurs.



**Figure 40-a: Détermination de la section efficace pour la structure NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(1.26nm)/SiO<sub>2</sub>(0.7nm)/p-Si**



**Figure 40-b: Détermination de la section efficace d'un piège pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub>(3.5nm)/p-Si**

## V. Conclusion :

Dans ce chapitre, on a étudié les propriétés électriques de la structure métal ferromagnétique/isolant/silicium. Plus précisément, les défauts à l'interface, dans l'oxyde et dans le silicium ont été caractérisés par le biais des méthodes capacitives et de conductance.

L'étude et la caractérisation des échantillons à 7 nm de SiO<sub>2</sub> a permis de constater que la grille ferromagnétique favorise la présence des défauts à l'interface, dans l'oxyde et dans le substrat. Ces défauts jouent un rôle déterminant pour l'injection de spin dans le silicium en provoquant la capture des électrons polarisés en spin et en influençant les mécanismes de transport (conduction via les défauts) comme nous allons le montrer dans le chapitre suivant. Les défauts dans le substrat influencent aussi le transport dans le substrat en se comportant comme des centres de recombinaison, ce qui risque de diminuer la durée de vie des porteurs.

De même, une caractérisation des défauts et plus particulièrement les états d'interface a été faite sur des structures à SiO<sub>2</sub> ultra mince et des structures à double barrière Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub>. Ces études ont montré que le recuit améliore l'interface en réduisant la densité des défauts. Les différents recuits (recuit forming gas et recuit de densification) appliqués ont permis de réduire la densité des états d'interface. Le recuit forming gas appliqué sur les échantillons à oxyde de silicium n'a pas un effet très remarquable alors que le recuit de densification appliqué sur les échantillons à oxyde alumine a des effets très marqués sur l'amélioration de l'interface qui surpassent les effets du recuit forming gas. L'effet de la température de mesure sur la densité des états d'interface actifs a été étudié. Nous avons montré qu'en diminuant la température, cette densité diminue. Ce résultat montre l'importance d'étudier le transport dépendant de spin dans le silicium à basses températures.

En conclusion, on a constaté aussi que les structures à SiO<sub>2</sub> présentent une densité des états d'interface bien plus élevée (d'environ deux ordres de grandeur) que la densité usuelle en technologie CMOS. En revanche, les structures à double barrière Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> présentent des densités proches de celles rapportées dans la littérature avec des grilles non ferromagnétiques. Cela suggère que la barrière alumine est une barrière efficace contre la diffusion des métaux ferromagnétiques, ce qui en fait un candidat intéressant pour les applications spintroniques sur silicium.

## Référence:

[Aggarwal 1984]: A. K. Aggarwal, M. H. White, **On the Nonequilibrium Statistics and small signal admittance of Si-SiO<sub>2</sub> Interface Traps in the deep depleted gated diode structure**, J. Appl. Phys., Vol (55), 1984, pp.3682-3694

[Autran 1993]: J. L. Autran, F. Seigneur, C. Plassu, B. Balland, **Characterization of Si-SiO<sub>2</sub> interface states: comparison between different charge pumping and capacitance techniques**, J. Appl. Phys., Vol (74), 1993, pp.3932-3935

[Brower 1983]: K. Brower, **<sup>29</sup>Si hyperfine structure of unpaired spins at the Si/SiO<sub>2</sub> interface**, Appl. Phys. Lett., Vol (43), 1983, pp. 1111-1113

[Buchanan 1999]: D.A. Buchanan, **Scaling the gate dielectric: Materials, integration, and reliability**, IBM J., RES. & DEV., Vol (43), 1999, pp. 245-264

[Caplan 1979]: P. Caplan, E. Poindexter, B. Deal, R. Razouk, **ESR centers, interfaces states, and oxide fixed charge in thermally oxidized silicon wafers**, J. Appl. Phys., Vol (50), 1979, pp.5847-5854

[Chang 2003]: Y. Chang, **Etude de caractérisation de matériaux diélectriques de grille à forte permittivité pour les technologies CMOS ultimes**, Thèse de doctorat, INSA Lyon, Juillet 2003

[Cheng 1999]: B.Cheng, M. Cao, P.V. Voorde, W. Greene, H. Stork, Z. Yu, J.C.S. Woo, **Design Consideration of high-k Gate Dielectrics for Sub-0.1um MOSFET's**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol(46), 1999, pp. 261-262.

[Chowdhury 2006]: N.A. Chowdhury, P. Srinivasan, D. Misra, **Trapping in deep defects under substrate hot electron stress in TiN/Hf-silicate based gate stacks**, Solid-State Electronics, Vol (51), December 2006, pp. 102-110

[Deal 1980]: B. E. Deal, **Standardized Terminology for Oxide Charges Associated with Thermally Oxidized Silicon**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol (27), 1980, pp.606-608

[Duluard thèse\_2007] : C.DULUARD, **Etude de la faisabilité des mémoires magnétiques intégrées sur silicium**, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, 2007

[Fleetwood 1996]: D. M. Fleetwood, **Fast and slow border traps in MOS devices**, Trans. Nucl. Sci., Vol (43), June 1996, pp. 779-786.

[Garros 2004] : X. GARROS, **Caractérisation et modélisation de l'oxyde d'Hafnium comme alternative à la silice pour les futures technologies CMOS submicroniques**, Thèse de doctorat, Université de Provence, 24 Février 2004.

[Gerardi 1986]: G. J. Gerardi, E. H. Poindexter, P. J. Caplan et N. M. Johnson, **Interface traps and Pb centers in oxidized (100)**, Appl. Phys. Lett., Vol (49), August 1986, pp. 348-350.

[Green 2001]: M.L.Green, E.P. Gusev, R. Degraeve, E.L. Garfunkel, **Ultrathin (<4nm) SiO<sub>2</sub> and Si-O-N gate dielectric layers for silicon microelectronics: Understanding the processing, structure, and physical and electrical limits**, J. Appl. Phys., Vol (90), 2001, pp. 2057-2121.

[Heiman 1967] : F. P. Heiman, **On the Determination of Minority Carrier Lifetime from the Transient Response of an MOS Capacitor**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol. ED-14 n°11, 1967, pp. 781-784

[Hung 1987]: K.K. HUNG, Y.C.CHENG, **Characterization of Si-SiO<sub>2</sub> interface traps in p-metal-oxide-semiconductor structures with thin oxides by conductance technique**, J. App. Phys, Vol (62), 1987, pp.4204-4211

[Johnson1983]:N. M. Johnson, D. K. Biegelsen, M. D. Moyer, S. T. Chang, E. H. Poindexter, P. J. Caplan, **Characteristic electronic defects at the Si-SiO<sub>2</sub> interface**, Appl. Phys. Lett., Vol (43), 1983, pp. 563-565

[Kanoun thèse\_2004] : M. Kanoun, **Caractérisation électrique des structures MOS à nano cristaux de Ge pour des applications mémoires non volatiles**, Thèse de doctorat, l'institut national de sciences appliquées de Lyon, 9 novembre 2004

[Kanoun 2007]: M. Kanoun, R. Benabderrahmane, C.Duluard, C.Baraduc, N.Bruyant, H.Achard, A.Bsiesy, **“Electrical study of ferromagnet-oxide-semiconductor diode for a magnetic memory device integrated on silicon”**, Appl. Phys. Lett, Vol (90), 2007, pp.192508-1-192508-3

[Kington 2000]: A.I. Kington, J.-P. Maria, S.K. Streiffer, **Alternative dielectrics to silicon dioxide for memory and logic devices**, Nature, Vol(406), 2000, pp. 1032-1038

[Knoll 1982]: M. Knoll, D. Braugnig, W. R. Fahrner, **Generation of oxide charge and interface states by ionizing radiation and by tunnel injection experiments**, IEEE Transactions on nuclear science, Vol (29),1982, pp.1471-1478

[Lucovsky 2002]: G. Lucovsky, J.L. Whitten, Y. Zhang, **A molecular orbital model for the electronic structure of transition metal atoms in silicate and aluminate alloys**, Microelectron. Eng., Vol (59), 2001, pp. 329-334

[Manchanda 2000]: L. Manchanda, M.L. Green, R.B. Van Dover, M.D. Morris, A. Kerber, Y. Hu, J.-P. Han, P.J. Silverman, T.W. Sorsch, G. Weber, V. Donnelly, K. Pelhos, F. Klemens, N.A. Ciampa, A. Kornblit, Y.O. Kim, J.E. Bower, D. Barr, E. Ferry, D. Jacobson, J. Eng, B. Busch, H. Schulte, **Si-doped aluminates for high temperature metal-gate CMOS: Zr-Al-Si-O, a novel gate dielectric for low power applications**, Tech. Dig. Int. Electron Devices Meet., 2000, pp. 23-26

[Masson 2002]: P. Masson, J. L. Autran, M. Houssa, X. Garros, C. Leroux, **Frequency characterization and modelling of interface traps in HfSixOy/HfO<sub>2</sub> gate dielectric stack from a capacitance point-of-view**, Appl. Phys. Lett., Vol (81), 2002, pp. 3392-3394

[Mathieu 1998]: H. MATHIEU, **Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques**, MASSON, Paris, 4<sup>ème</sup> édition, 1998

[Nicollian 1965]: E.H.Nicollian, A.Goetzberger, **MOS conductance technique for measuring surface state parameters**, Appl. Phys. Lett., Vol (7), 1965, pp. 216-219

[Nicollian 1982]: E. H. Nicollian, J. R. Brews, **MOS Physics and Technology**, Willey Interscience Publication, USA, 1982

[Nishi 1971]: Y. Nishi, **Study of Silicon-Silicon dioxide structure by electron spin resonance**, Jpn. J. Appl. Phys., Vol (10), 1971, pp.52-62

[Ouisse 1993]: T.Ouisse, N.Bécourt, C.Jaussaud,F.Templier, **Low-frequency, high-temperature conductance and capacitance measurements on metal-oxide-silicon carbide capacitors**, J. Appl. Phys, Vol (75), 1993, pp.604-607

[Parkin 2004]: S.P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P. M. Rice, B. Hughes, M. Samant, S-H. Yang, **Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers**, Nature materials, Vol (3), December 2004, pp. 862-867

[Poindexter 1981]: E. H. Poindexter, P. Caplan, B. E. Deal et R. R. Razouk, **Interface states and electron spin resonance centers in thermally oxidized (111) and (100) silicon wafers** , J. Appl. Phys., Vol (52), 1981, p. 879-884

[Poindexter 1984]: E. H. Pointdexter, G. J. Gerardi, M. E. Rueckel, P. J. Caplan, N. M. Johnson, D. K. Biegelsen, **Electronic traps and Pb centers at the Si/SiO<sub>2</sub> interface: band-gap energy distribution**, J. Appl. Phys., Vol (56), 1984, pp.2844-2849

[Robertson 2000]: J. Robertson, **Band offsets of wide-band-gap oxides and implications for future electronic devices**, J. Vac. Sci. Technol. B, Vol (18), 2000, pp. 1785-1791

[Sakurai 1981]: T. Sakurai, T. Sugano, **Theory of continuously distributed trap states at Si-SiO<sub>2</sub> interfaces**, J. Appl. Phys., Vol (52), 1981, pp.2889-2896

[Schroder 1971]: D.K. Schroder, J. Guldburg, **Interpretation of surface and Bulk effects using the pulsed MIS capacitor**, Pergamon Press, Vol (14), 1971, pp.1285-1297

[Shockley 1952]: W. Shockley, W. T. Read, **Statistics of the Recombination of Holes and Electrons**, Phys. Rev., Vol (87), 1952, pp.835-842

[Stesmans 1993]: A. Stesmans, **Structural relaxation of Pb defects at the (111) Si/SiO<sub>2</sub> interface as a function of oxidation temperature: the Pb –generation-stress relationship**, Phys. Rev. B., Vol (48), 1993, pp. 2418-2435

[Stathis 2002]: J.H. Stathis, **Reliability limits for the gate insulator in CMOS technology**, IBM J. RES. & DEV., Vol (46), 2002, pp. 265-286

[Tan 2000]: S-E. Tan, D. K. Schroder, M. Kohno, M. Miyazaki, **Iron Contamination in Silicon Wafers Measured with the Pulsed MOS Capacitor Generation Lifetime Technique**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol (47),2000, pp. 2392-2398

[Uren 1996]: M. J. Uren, J. H. Stathis, E. Cartier, **Conductance measurements on Pb centers at the (111) Si:SiO<sub>2</sub> interface**, J. Appl. Phys., Vol (80),1996, pp.3915-3922

[Van Gorp 1992]: G. Van Gorp, A. Stesmans, **Dipolar interaction between [111] Pb defects at the (111) Si/SiO<sub>2</sub> interface revealed by electron-spin resonance**, Phys. Rev. B., Vol (45), 1992, pp. 4344-4371

[Vogel 2000]: E. M. Vogel, W. K. Henson, C. A. Richter, et J. S. Suehle, **Limitations of conductance to the measurement of the interface state density of MOS capacitors with tunnelling gate dielectrics** , IEEE Trans. Elec. Dev., vol (47), March 2000, pp.601-608.

[White 1972]: M. H. White, J. R. Cricchi, **Characterization of Thin-Oxide MNOS Memory Transistors**, IEEE Trans. Elec. Dev., vol (19), 1972, pp.1280-1288

[Werner 1986]: J.Werner, K.Ploog, H.J.Queisser, **Interface-State Measurement at Schottky Contacts: a new Admittance Technique**, Phys. Rev. Lett, Vol (57), August 1986, pp.1080-1083

[Wilk 2001]: G.D. Wilk, R.M. Wallace, J.M. Anthony, **High-k gate dielectrics: Current status and materials properties considerations**, J. Appl. Phys., Vol (89), 2001, pp. 5243-5275

# Chapitre 3 : Etude des mécanismes du transport dans la structure Métal ferromagnétique/isolant/silicium

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié les propriétés électriques de l'interface diélectrique tunnel-silicium dans les structures MIS avec grille ferromagnétique. En particulier, nous avons mesuré la densité de défauts d'interface et dans le silicium pour deux types de diélectrique, l'oxyde de silicium et l'oxyde d'aluminium. Les résultats expérimentaux ont montré que seul dans le cas de l'oxyde d'aluminium la qualité de l'interface n'est pas affectée par la présence de grille ferromagnétique.

Dans ce chapitre, nous allons étudier les mécanismes de transport dans ces structures. La démarche consiste à relier ces mécanismes aux propriétés électriques des interfaces étudiées précédemment, dans l'objectif de déterminer les conditions de transport balistique d'électrons entre le ferromagnétique et le silicium.



## I. Les différents mécanismes de conduction à travers les oxydes :

Dans cette première partie, nous allons décrire les différents mécanismes de conduction à travers une couche d'oxyde. Les mécanismes de conduction peuvent être classés en deux groupes :

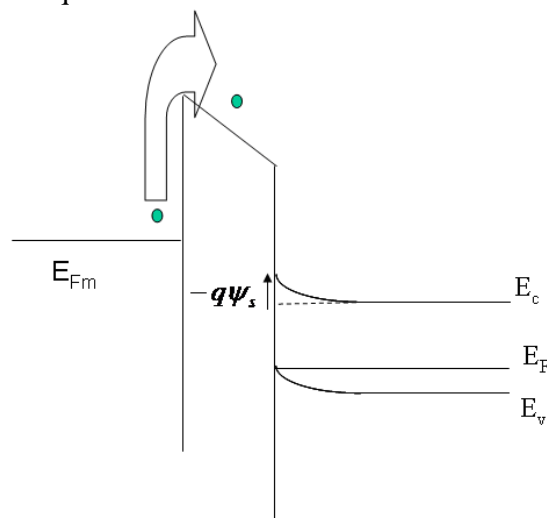
- Les mécanismes de conduction limitée par les électrodes : le tunnel direct, le Fowler-Nordheim, l'émission thermoïonique
- Les mécanismes de conduction limitée par le volume de l'oxyde : le Poole Frenkel, le Hopping, le tunnel assisté par les pièges...

### 1. La conduction limitée par les électrodes :

La conduction est limitée par les électrodes lorsque celles-ci ne constituent pas une source illimitée de porteurs. La densité de courant dépend de la densité des porteurs disponibles à l'injection. Parmi ces mécanismes de conduction, nous citons :

#### 1.1. L'émission thermoïonique :

Grâce à l'activation thermique, l'électron passe au dessus de la barrière d'énergie à l'interface avec la couche isolante. En effet, l'électron passe de la bande de conduction de l'électrode injectrice, à la bande de conduction de l'isolant (figure 1). Ce mécanisme n'est possible que si les porteurs ont une énergie cinétique très élevée.

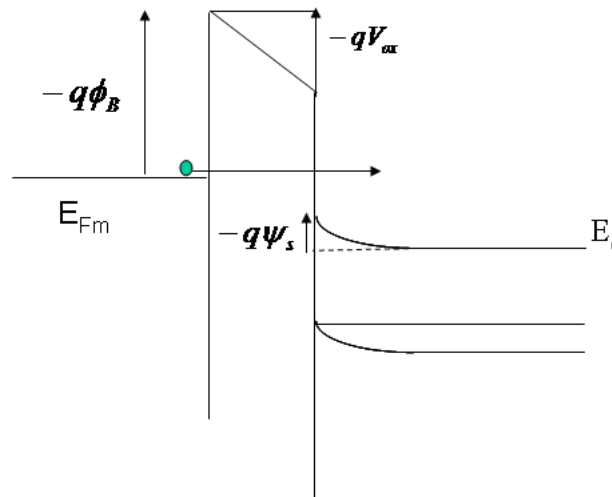


*Figure 1 : Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique vers la bande de conduction de l'isolant par émission thermoïonique*

#### 1.2. Le mécanisme tunnel direct:

L'effet tunnel est un concept quantique, impossible à modéliser en mécanique classique. En effet, si on considère deux électrodes séparées par une barrière isolante, les électrons ont une probabilité non nulle de passer d'une électrode à une autre. Du point de vue classique, il ne

devrait passer aucun courant lors de l'application d'une différence de potentiel mais du point de vue quantique, les électrons parviennent à passer par effet tunnel, ce qui donne un courant non nul. Toutefois, ce type de transport n'est possible que pour des épaisseurs d'oxyde très faibles (typiquement  $\leq 4nm$ ). Lorsque la chute de tension dans l'oxyde,  $V_{ox}$  est plus faible que la hauteur de barrière,  $\phi_B$ , les électrons voient une barrière trapézoïdale (dans un diagramme de bande d'énergie) et pénètrent directement dans la deuxième électrode : le transport est de type tunnel direct (DT) (figure 2):

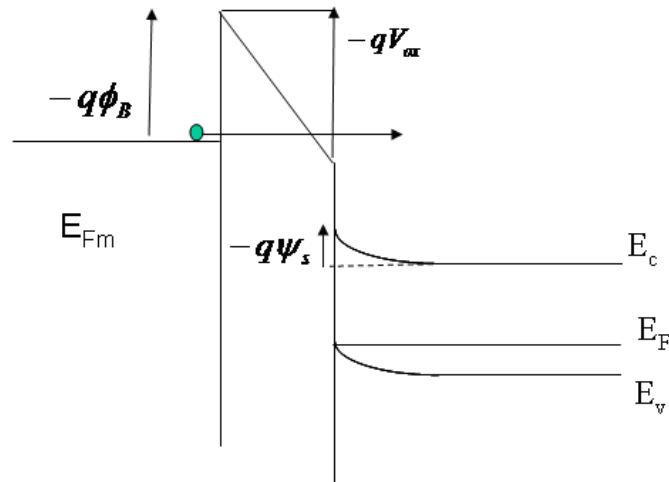


*Figure 2: Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique par effet tunnel direct à travers une barrière isolante*

Le courant tunnel est peu sensible à la température mais dépend fortement de l'épaisseur d'oxyde  $T_{ox}$  et du champ électrique appliqué [Leroux 2004].

### 1.3. Le mécanisme Fowler-Nordheim :

Il existe un autre mécanisme de transport par effet tunnel obtenu lorsque les bandes de conduction et de valence de l'oxyde sont suffisamment inclinées par l'action d'une polarisation appliquée à la structure. La largeur effective de la barrière est alors diminuée et un transport par effet tunnel peut avoir lieu. En effet, lorsque  $V_{ox}$  est supérieur à la hauteur de barrière  $\Phi_B$ , les électrons au niveau de Fermi de l'électrode injectrice voient une barrière d'énergie de forme triangulaire : ils débouchent alors dans la bande de conduction de l'oxyde avant de se thermaliser vers la bande de conduction de l'autre électrode. Il s'agit dans ce cas d'un mécanisme tunnel de type Fowler-Nordheim (FN) (Figure 3).



**Figure 3: Injection d'un électron à partir d'une électrode métallique par le mécanisme de conduction Fowler-Nordheim**

Le mécanisme de transport Fowler-Nordheim(FN) donne une expression de la densité de courant en fonction du champ électrique dans l'oxyde  $F_{ox}$  qui s'écrit selon la relation (1)[Lenzlinger 1969]:

$$J_{FN}(F_{ox}) \propto A \cdot F_{ox}^2 \cdot \exp\left(\frac{B}{F_{ox}}\right) \quad (1)$$

Les expressions des paramètres A et B sont fonctions de la hauteur de la barrière  $\phi_B$  et de la masse effective des électrons ou des trous dans l'oxyde  $m_{ox}$ . Il est d'usage de représenter le tracé de  $\ln\left(\frac{J_{FN}}{F_{ox}^2}\right)$  en fonction de  $\frac{1}{F_{ox}}$  afin de vérifier si le mécanisme de transport correspond à un mécanisme de type FN. En effet, La dépendance linéaire en  $\frac{1}{F_{ox}}$  de  $\ln\left(\frac{J_{FN}}{F_{ox}^2}\right)$  est évidente d'après la relation (1). Par ailleurs, ce tracé permet de remonter à  $\phi_B$  et  $m_{ox}$ .

## 2. La conduction limitée par le volume de l'isolant :

Le courant de conduction est dit limité par le volume de l'isolant s'il est assisté par deux phénomènes :

- Le processus de remplissage d'un piège par un porteur injecté de l'électrode.
- Le processus de vidage par transport assisté par ce piège.

En effet, les porteurs peuvent passer d'un piège à un autre grâce aux mécanismes de piégeage et dépiégeage par les défauts qui génèrent des niveaux d'énergie permis dans la bande interdite de l'oxyde. Dans ce type de conduction, les électrodes se comportent comme une source illimitée de porteurs. Parmi ces mécanismes, nous trouvons le mécanisme Poole-Frenkel et le mécanisme de transport par saut, le « Hopping ». Ces mécanismes sont présentés dans les paragraphes suivants.

## 2.1. Le mécanisme Poole-Frenkel(PF) :

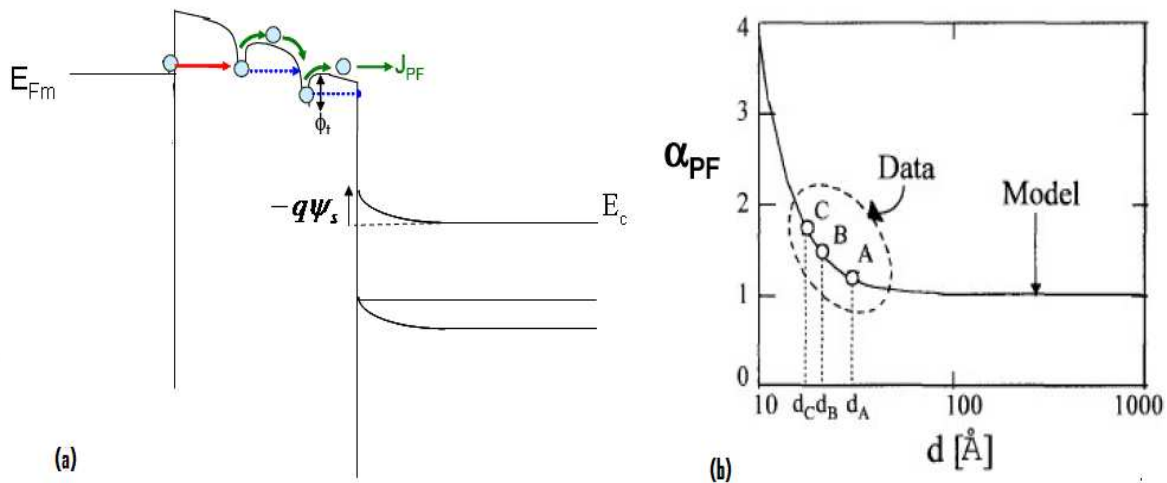
L'électron se sert des défauts dans l'oxyde comme étape de relais pour le traverser en passant d'un piège à un autre par activation thermique comme l'illustre la figure 4. Ce processus, nécessitant moins d'énergie que l'émission thermoionique, est donc plus probable. La densité du courant PF est donnée, après simplification, par l'expression (2) [Kanoun thèse\_2004] :

$$J_{PF}(F_{ox}) = A_{PF} \cdot F_{ox} \cdot \exp\left(-\frac{B_{PF} \cdot \sqrt{F_{ox}}}{k.T}\right) \quad (2)$$

$$\text{Avec } B_{PF} = \sqrt{\frac{q}{\alpha_{PF} \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_r \cdot \pi}} \quad (3)$$

$A_{PF}$  est une constante qui dépend de la densité des pièges par unité de surface et elle est proportionnelle à  $\exp(-\frac{\phi_t}{k.T})$  avec  $\phi_t$  le profondeur du piège [Houssa 1999].  $\alpha_{PF}$  est un paramètre

qui peut être extrait de la partie linéaire de la courbe  $\ln(\frac{J_{PF}}{F_{ox}})$  en fonction de  $\sqrt{F_{ox}}$ . Ce paramètre donne une estimation de la distance moyenne entre les pièges ( $d$ ) à partir de l'abaque présenté sur la figure 4-b [DeSalvo 1999]. Ce mécanisme, assisté par phonons, est activé thermiquement et donc très sensible à la température.

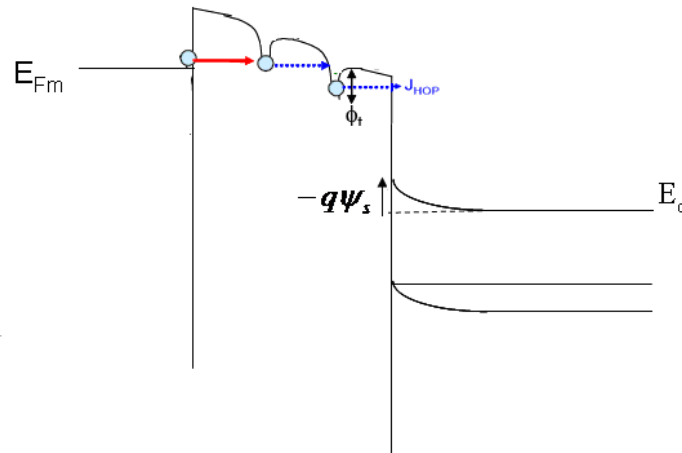


**Figure 4 : (a) Injection par mécanisme de conduction Poole-Frenkel (b) le paramètre Poole-Frenkel  $\alpha_{PF}$  en fonction de la distance moyenne entre les pièges**

## 2.2. Le mécanisme de transport par Saut ou « Hopping » :

Le mécanisme « Hopping » est similaire au mécanisme Poole-Frenkel, mais le passage d'un site (défaut dans l'isolant) à un autre s'effectue par effet tunnel et non pas par émission thermoionique (figure 5). L'épaisseur de la barrière d'énergie à franchir à chaque saut étant

moins importante que dans le mécanisme de tunnel direct, ce mécanisme de transport est prédominant.



**Figure 5: Injection par mécanisme de conduction de type « Hopping »**

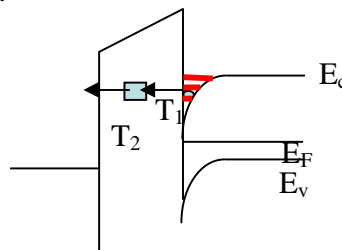
L'expression de la densité de courant dans ce cas est donnée par la relation (4) [Kanoun thèse\_2004] :

$$J_H(F_{ox}) = A_H \cdot F_{ox} \cdot \exp\left(\frac{d}{2} \cdot \frac{F_{ox}}{k.T}\right) \quad (4)$$

où  $A_H$  est une constante et  $d$  la distance moyenne séparant deux pièges. La partie linéaire de la courbe  $\ln(J_H/F_{ox})$  en fonction de  $F_{ox}$  permet d'estimer la distance  $d$  entre les pièges.

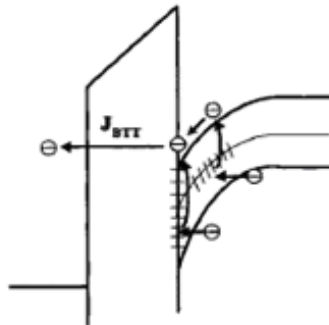
### 2.3. Le mécanisme tunnel assisté par les pièges :

La présence des défauts dans l'oxyde peut conduire à un mécanisme de conduction de type tunnel assisté par pièges que nous appelons TAT pour Trap Assisted Tunneling. Un exemple de ce mécanisme est schématisé sur la figure 6. Il s'agit de deux processus tunnel, le premier de la bande de conduction vers un piège dans le volume de l'oxyde, le deuxième du piège vers la bande de conduction du métal. Ce mécanisme peut impliquer un ou plusieurs pièges comme dans le cas du mécanisme « Hopping ».



**Figure 6 : Conduction dans une couche d'isolant par mécanisme tunnel assisté par un piège (TAT)**

L'étude de transport dans les couches d'oxydes ultra-minces fait apparaître d'autres mécanismes de conduction tunnel assisté par des défauts. Ces défauts peuvent être à l'interface entre le semi-conducteur et l'oxyde et permettre ainsi l'émission des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction comme dans l'exemple de la figure (7) [Ghetti 2000].



*Figure 7: Mécanisme de Transport via les états d'interface*

Dans la suite, nous allons nous concentrer sur les trois mécanismes tunnel direct, Fowler-Nordheim et tunnel assisté par pièges, étant donné que ces derniers se sont révélés très importants pour notre étude.

## **II. Etude des mécanismes de conduction dans un oxyde mince avec une grille ferromagnétique:**

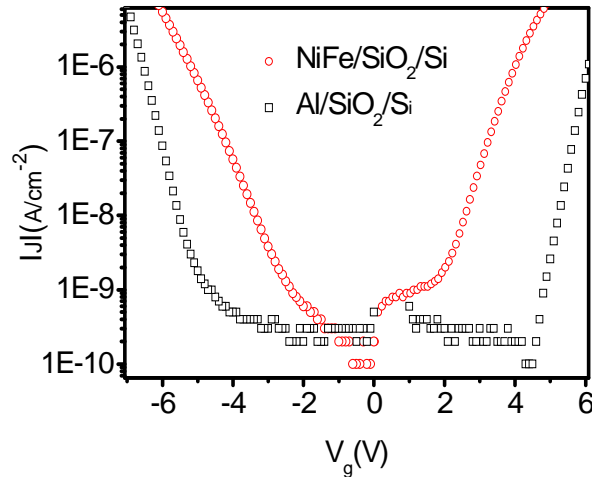
L'étude des mécanismes de transport dans les oxydes ultra-minces (1 à 2 nm), dits oxydes tunnels, avec grille ferromagnétique est l'objectif principal de notre étude. Toutefois, la combinaison grille ferromagnétique et oxyde ultra-mince risque d'augmenter les difficultés d'analyse des mécanismes de transport. C'est pourquoi, nous avons choisi de procéder en deux étapes et d'étudier d'abord les mécanismes du transport à travers un oxyde mince avec grille ferromagnétique. Il s'agit des structures de diodes MIS pleine plaque avec une grille en permalloy (NiFe). Dans un souci de comparaison avec des structures plus classiques, nous avons également réalisé des diodes avec grille en aluminium.

### **1. Les caractéristiques courant-tension :**

La figure 8 présente la variation de la densité du courant de grille en fonction de la tension  $V_g$  appliquée sur la grille (NiFe ou Al) pour les deux structures à grille en aluminium ou en NiFe réalisée à température ambiante. A partir de ce graphe, on constate que :

- Dans le cas de la grille de NiFe, le courant reste faible pour les tensions  $|V_g| \leq 2Volts$ . Au-delà de  $|V_g| \approx 2Volts$ , nous observons une augmentation du courant.
- Dans le cas de la grille d'aluminium, pour des tensions  $|V_g| \leq 4Volts$ , la densité de courant ne varie que peu et demeure à la limite de la résolution de notre banc de tests électriques. Pour des tensions  $V_g < -4Volts$  ou  $V_g > 4Volts$ , on observe une augmentation brutale de la densité de courant.
- La densité de courant est plus forte dans le cas de NiFe et ceci sur toute la gamme de tension appliquée.

- La caractéristique du courant dans le cas de NiFe est différente de celle de l'Al, ce qui montre que le mécanisme d'injection n'est pas le même pour les deux structures.



**Figure 8 :** Caractéristiques  $J$ - $V_g$  pour les structures à grille Al (Substrat de silicium : type  $p$ ,  $N_a = 6.28 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) ou NiFe (Substrat de silicium : type  $p$ ,  $N_a = 1.28 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ )

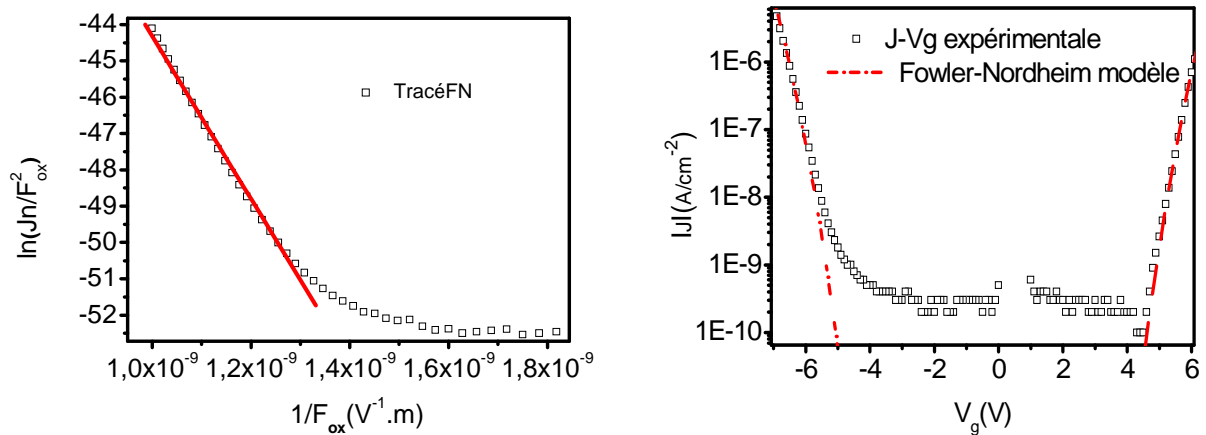
## 2. Détermination du type de mécanisme du transport :

### 2.1. Cas de la structure MIS à grille d'aluminium:

L'augmentation rapide de la densité de courant observée dans le cas de la structure à grille d'aluminium laisse entendre un mécanisme de conduction de type Fowler-Nordheim. Afin de vérifier cette hypothèse, un tracé Fowler-Nordheim, c'est-à-dire  $\ln(J/F_{ox}^2)$  en fonction de  $1/F_{ox}$ , a été fait.

La figure 9-a montre bien que le tracé donne une droite, ce qui indique un mécanisme FN. Par ailleurs, la caractéristique courant-tension a été modélisée par un modèle Fowler-Nordheim en régime d'accumulation (régime de polarisation directe) et d'inversion (régime de polarisation inverse) du silicium.

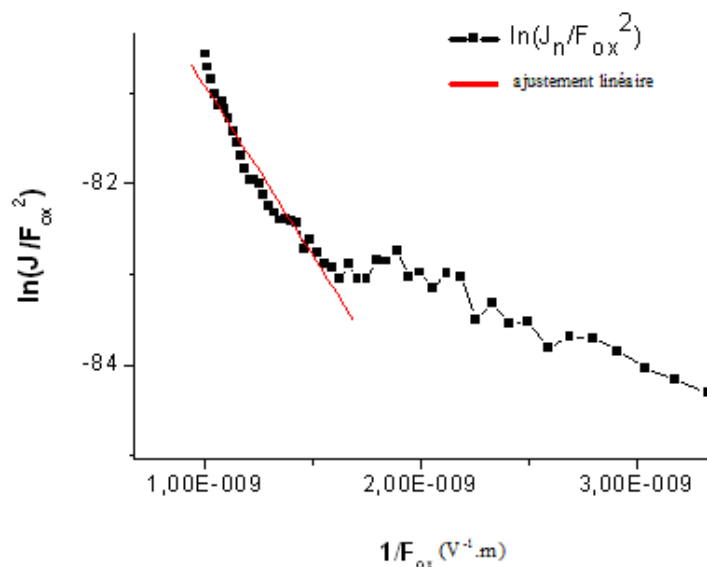
Les paramètres d'ajustement du modèle sont :  $\phi_B(Si) = 3.05 \text{ eV}$ ,  $\phi_B(Al) = 3.1 \text{ eV}$ ,  $m_{ox} = 0.4 m_e$  avec  $m_e$  la masse de l'électron,  $\phi_B(Si)$  la hauteur de la barrière d'énergie du côté du substrat,  $\phi_B(Al)$  la hauteur de la barrière d'énergie du côté de la grille. La figure 9-b montre un bon accord entre le modèle Fowler-Nordheim et le résultat expérimental que ce soit en régime d'accumulation ou d'inversion.



**Figure 9 : Analyse de la caractéristique courant-tension pour une structure MIS à grille d'aluminium (a) Tracé Fowler-Nordheim  $\ln (J/F_{ox}^2)$  en fonction de  $1/ F_{ox}$  (b) Modélisation des résultats expérimentaux en utilisant un modèle de Fowler-Nordheim**

## 2.2. Cas de la structure MIS à grille de NiFe :

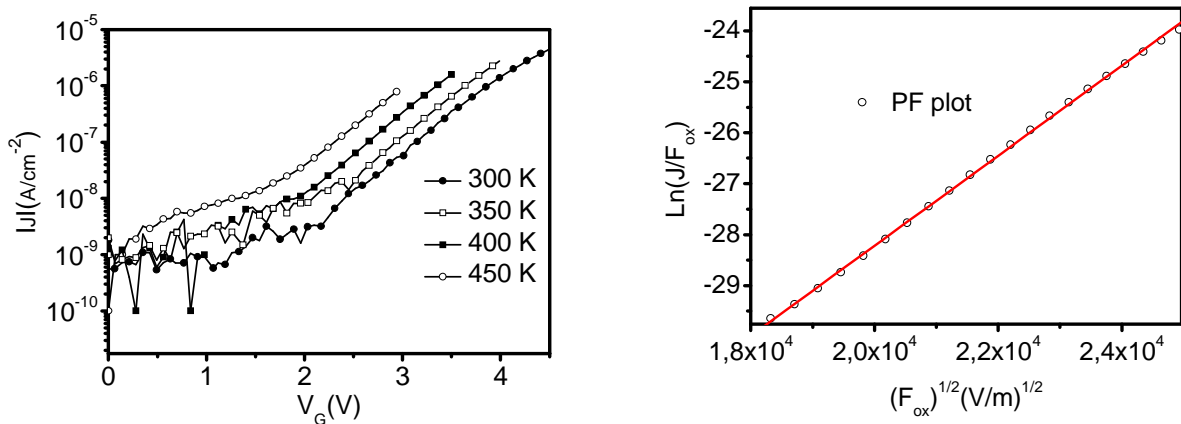
Comme déjà mentionné, les allures des caractéristiques courant-tension des deux structures sont différentes. On s'attend donc à des mécanismes de transport différents et plus précisément, à avoir un mécanisme différent du Fowler-Nordheim dans le cas de la structure à grille NiFe. En effet, et comme le montre la figure 10, le tracé FN ( $\ln (J/F_{ox}^2)$ ) en fonction de  $1/ F_{ox}$  ne donne pas une dépendance linéaire sur une longue gamme de tension ( $-2V \rightarrow -4V$ ), ce qui confirme qu'il ne s'agit pas d'un mécanisme de type FN.



**Figure 10: Le tracé Fowler-Nordheim  $\ln (J/F_{ox}^2)$  en fonction de  $1/ F_{ox}$  pour la structure MIS à grille NiFe**

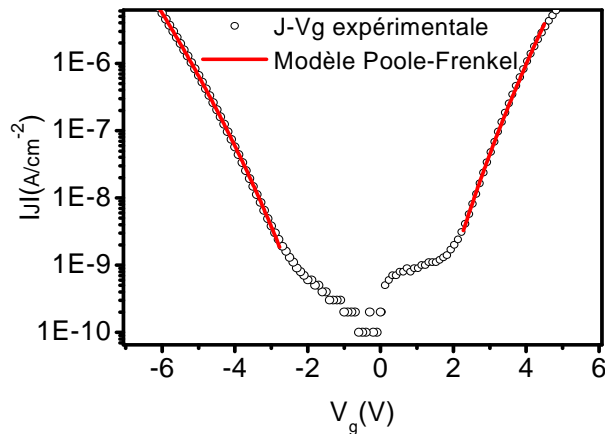


La présence de la couche ferromagnétique peut engendrer des pièges dans l'oxyde par la diffusion des atomes magnétiques [Duluard thèse\_2007]. Ces pièges peuvent jouer le rôle des relais dans le processus de conduction à travers l'oxyde. Il est donc raisonnable de penser qu'un mécanisme de transport via les défauts dans l'oxyde puisse exister tel que le Hopping et le poole-Frenkel. Or, une mesure à hautes températures que nous avons effectuée a mis en évidence une dépendance du courant en température. Ceci indique clairement l'existence d'un mécanisme activé thermiquement et probablement assisté par pièges (figure 11-a). Une possibilité est le mécanisme Poole-Frenkel (PF). Le tracé PF,  $(\ln(J_H/F_{ox}))$  en fonction de  $\sqrt{F_{ox}}$ , donne bel et bien une caractéristique linéaire indiquant un mécanisme PF à travers l'oxyde (figure 11-b) [Kanoun 2007].



**Figure 11 : (a) les caractéristiques I-V en fonction de la température pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (7nm)/p-Si (b) Tracé Poole-Frenkel pour la caractéristique à T ambiante (300 K)**

La figure 12 montre une comparaison entre résultats expérimentaux et modèle PF pour une structure MIS à grille ferromagnétique en régime d'accumulation et d'inversion. Nous remarquons un très bon accord avec le modèle Poole Frenkel aussi bien en accumulation qu'en inversion. D'après le modèle, la valeur extraite de  $\alpha_{PF}$  est de 2, ce qui correspond à une distance moyenne de 2 nm entre deux pièges successifs (cf. abaque de la figure 4-a). Etant donné que l'épaisseur d'oxyde est de 7 nm, ce résultat montre que les électrons rencontrent environ 3 pièges en traversant l'oxyde.



**Figure 12: Comparaison entre résultat expérimental et modèle Poole-Frenkel pour une structure MIS à grille de NiFe**

### 3. Conclusion :

A travers cette étude comparative, il a été montré que le mécanisme de conduction dans les structures à grille d'aluminium est de type Fowler-Nordheim, qui est un cas particulier du tunnel direct alors que pour les structures à grille NiFe, le mécanisme de transport implique des pièges dans l'oxyde. Les pièges présents dans l'oxyde qui sont probablement liés à la diffusion des atomes ferromagnétiques à partir de la grille, peuvent contribuer à la perte de la polarisation en spin des électrons injectés.

L'effort de recherche devra donc s'orienter vers la réduction de défauts dans l'oxyde d'où les améliorations proposées précédemment. L'utilisation des oxydes minces est très importante afin d'augmenter la probabilité du passage des électrons par effet tunnel direct : c'est l'objectif de la partie suivante de ce chapitre.

## III. Etude des mécanismes de transport à travers les oxydes ultra minces :

### 1. Introduction :

Depuis longtemps, la mécanique classique était une approche très utile pour décrire les systèmes. Elle permet de décrire la trajectoire d'un corps en mouvement dont les conditions initiales et les forces appliquées sont connues. Elle s'appuie sur la notion de corpuscule.

Depuis la découverte des capacités et des transistors MOS et l'évolution de la microélectronique, plusieurs problèmes sont apparus dus à la miniaturisation des composants électroniques [Yang 1999] [Momose 1996]. Ces problèmes sont dus à des phénomènes quantiques.

Parmi ces phénomènes qui nous intéressent directement dans notre travail nous trouvons :

- Les effets quantiques liés au confinement des porteurs dans un puits de potentiel à l'interface semi-conducteur/oxyde
- la conduction par effet tunnel à travers les oxydes de grille ultra-minces

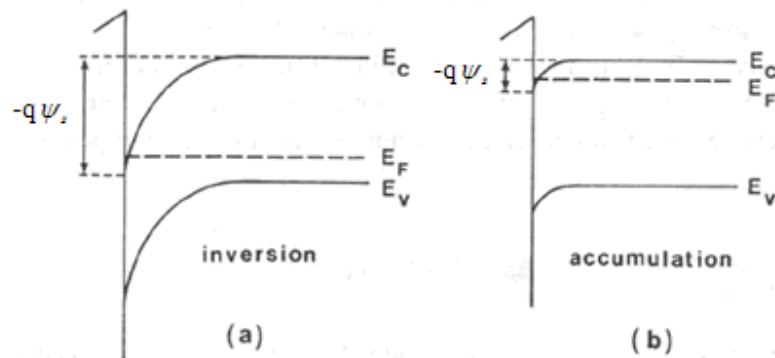
Ces deux effets vont être exposés par la suite dans le cadre de la modélisation de l'effet tunnel à travers l'oxyde dans une structure MOS (métal/oxyde/substrat).

## 2. Limitations du modèle classique de la structure MOS :

Lors de l'application d'une tension sur la grille, un champ électrique s'établit dans la structure MOS. Selon le signe et l'amplitude de la tension appliquée, un régime de polarisation de la surface du semi-conducteur s'établit. En effet, les porteurs sont soit attirés vers l'interface soit repoussés loin de celle-ci. Par exemple, dans le cas d'un substrat p, dans le régime d'accumulation, les porteurs majoritaires (les trous) sont accumulés à l'interface alors que dans le régime d'inversion, les trous sont repoussés et les électrons sont attirés à l'interface. Cet effet est connu sous le nom de l'effet de champ.

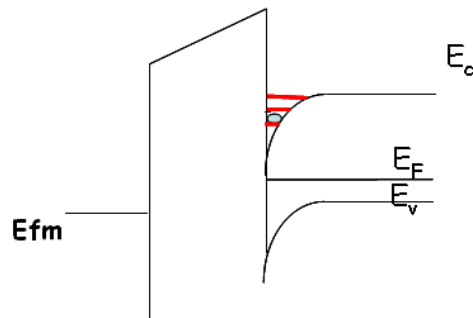
La région à l'interface oxyde/substrat peut contenir une grande densité de porteurs libres localisés dans un puits de potentiel très étroit. Cet effet est à l'origine du fonctionnement des composants semi-conducteurs. Afin de bien calculer les densités des porteurs à l'interface dans le puits de potentiel et déterminer les différents mécanismes de transport à travers l'oxyde, l'effet de champ doit être bien modélisé.

Les porteurs confinés dans une couche d'accumulation ou d'inversion se comportent comme un gaz à deux dimensions plutôt que comme un gaz à trois dimensions (approche classique). Ils sont libres dans le plan de la structure et leurs énergies sont quantifiées dans la direction perpendiculaire à la structure. La profondeur de puits de potentiel varie avec la polarisation appliquée mais n'évolue plus quand le semi-conducteur devient dégénéré. Par conséquent, l'énergie de confinement de porteurs est très différente dans une couche d'accumulation ou d'inversion comme le montre la figure 13.



**Figure 13 : Diagramme de bandes d'énergie faisant apparaître le puits de potentiel à l'interface oxyde/substrat dans le régime d'inversion (a) ou d'accumulation (b)**

Une conséquence de la quantification de l'énergie est la modification de la densité d'états d'énergie de porteurs dans le puits de potentiel et la dépendance de cette densité de la polarisation électrique appliquée. La figure 14 illustre cet effet où nous voyons apparaître des niveaux discrets d'énergie dans le puits de potentiel à l'interface semi-conducteur/isolant.

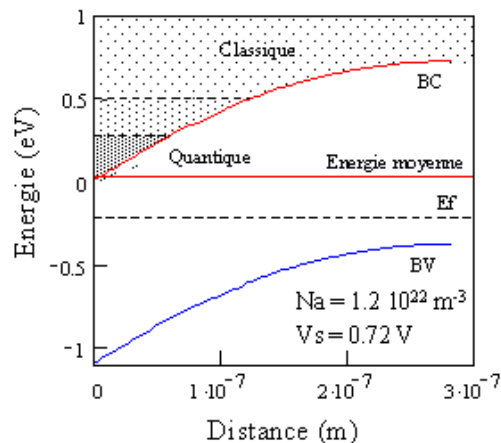


**Figure 14 : quantification de l'énergie à l'interface semi-conducteur/ oxyde dans une structure MOS**

La description classique de cette structure consiste à considérer que tous les donneurs et les accepteurs sont ionisés et que les porteurs libres obéissent à la statistique de Boltzmann. Cependant, en régime d'accumulation et à basse température, les impuretés majoritaires sont en partie neutralisées par les porteurs ce qui annule la première hypothèse. De plus, la deuxième hypothèse n'est pas valable en accumulation et en inversion car le semi-conducteur est dégénéré [Mathieu1998]. Cela veut dire que l'étude des charges dans le puits de potentiel doit passer par une étude quantique et donc par la résolution de l'équation de Schrödinger [Magnus 1988].

Clerc a testé la validité de l'approximation classique dans un puits de déplétion d'une structure NMOS [Clerc thèse 2001]. Il a choisi une structure en déplétion car un puits de potentiel, en déplétion, varie beaucoup plus lentement dans l'espace qu'un puits d'inversion forte ou d'accumulation ce qui est une condition favorable pour l'application d'une approche classique.

On remarque d'après la figure15 que dans l'approche classique les porteurs sont localisés loin du fonds de puits.



**Figure 15 : Distribution de la densité de porteurs dans le puits de potentiel. Comparaison entre approches classiques et quantiques [Clerc thèse 2001]**

Ces résultats importants ont bien montré que l'approche classique n'est pas valable dans des puits en régime de déplétion et à fortiori en régime d'accumulation ou d'inversion. Un traitement

quantique est donc nécessaire pour tenir compte du confinement des porteurs dans les puits de potentiel.

### 3. Equation de Schrödinger :

Un traitement quantique du problème de porteurs de charge dans un puits de potentiel nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger qui permet de déterminer la fonction d'onde de porteurs. Cette équation décrit l'évolution dans le temps d'un système quantique et remplit ainsi le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique.

La forme générale de l'équation de Schrödinger est donnée par la relation 5:

$$j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H[\psi] \quad (5)$$

Où H est l'opérateur hamiltonien,  $\psi$  : la fonction d'onde, j : le nombre complexe et  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  avec h la constante de Planck. H est décrit par l'équation suivante qui prend en compte l'opérateur vitesse (V) et l'énergie potentielle (U) du système :

$$H[\psi] = \frac{1}{2} m V^2[\psi] + U(\vec{r}, t) \psi \quad (6)$$

En posant  $\Delta$  l'opérateur Laplacien, l'opérateur Hamiltonien peut s'écrire sous la forme :

$$H[\psi] = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\vec{r}, t) \psi \quad (7)$$

#### 3.1. Résolution de l'équation de Schrödinger dans un potentiel indépendant du temps :

La majorité des systèmes physiques a une énergie potentielle indépendante du temps. Ils sont définis comme des systèmes stationnaires. Dans un système stationnaire, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H[\psi] = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\vec{r}) \psi \quad (8)$$

Soit E une valeur propre de H, l'équation (8) s'écrit :

$$H[\psi] = E \psi \quad (9)$$

Si on suppose que la fonction d'onde peut être composée de deux fonctions à variables séparés, elle aura la forme suivante :

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}) \cdot B(t) \quad (10)$$

Et donc l'équation aux valeurs propres de H sera :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta A + U(\vec{r}).A = E.A \quad (11)$$

Partant de l'équation de Schrödinger (5), la fonction B(t) s'écrit sous la forme:

$$B(t) \propto \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \quad (12)$$

Les états propres de l'Hamiltonien, indépendants du temps et appelés états stationnaires, sont de la forme suivante:

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}).\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \quad (13)$$

### 3.2. Résolution de l'équation de Schrödinger pour des systèmes à énergie potentielle constante :

Les systèmes à énergie potentielle constante ne sont soumis à aucune interaction. Parmi les exemples de ce type de systèmes, on trouve les particules libres. Les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sont de la forme suivante:

$$A(\vec{r}) = a.\exp(i\vec{k}.\vec{r}) + b.\exp(-i\vec{k}.\vec{r}) \quad (14)$$

Où  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde donné par l'équation suivante :

$$\|\vec{k}\| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{\hbar}.\sqrt{2m(E - V_0)} \quad (15)$$

Avec E l'énergie totale,  $V_0$  l'énergie potentielle et  $\lambda$  la longueur d'onde associée. Les systèmes à énergie potentielle constante ne peuvent pas évoluer dans un espace infini car les solutions présentées ci-dessus ne sont pas de carrés sommables, ce qui contredit le formalisme quantique [Clerc thèse 2001]. Donc, par exemple, une particule à énergie potentielle constante est confinée dans un volume restreint. En effet, c'est le cas d'un électron libre dans un métal : cet électron n'est soumis à aucune interaction et contraint à rester dans le volume du matériau. Les états d'une telle particule enfermée dans un volume sont appelés états liés entraînant une quantification de l'énergie.

### 3.3. Equation de Schrödinger à une dimension :

Pour la modélisation du courant que nous aurons à traiter par la suite, les approches quantiques utilisées sont limitées à des systèmes confinés à une dimension (1D). Nous utilisons donc l'équation de Schrödinger à 1D.

Soient x, y, z les trois dimensions. Lorsque la dimension x tend vers l'infini, l'équation de Schrödinger (11) devient :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)\psi = 0 \quad (16)$$

Avec  $V_0$  la valeur de l'énergie potentielle  $U(x)$  à l'infini telle que  $\lim_{x \rightarrow \infty} U(x) = V_0$

Les solutions de cette équation dépendent du signe de  $(E - V_0)$  :

- Si  $(E - V_0) < 0$

La résolution de l'équation aboutit à des ondes évanescentes de la forme :

$$\psi = A.\exp(-kx) + B.\exp(kx) \quad (17)$$

Le vecteur d'onde est donné par l'expression :  $\frac{1}{\hbar}.\sqrt{2m(V_0 - E)}$

- Si  $(E - V_0) > 0$

La solution est de type ondes planes de la forme :

$$\psi = A.\exp(ikx) + B.\exp(-ikx) \quad (18)$$

Le vecteur d'onde est donné par l'expression :  $\frac{1}{\hbar}.\sqrt{2m(E - V_0)}$

Dans le premier cas de figure, l'énergie cinétique  $E_c = E - U = E - V_0$  est négative et correspond donc à des vitesses complexes. Ce cas est impossible en mécanique classique. Il s'agit d'une propriété de la mécanique quantique.

### 3.4. Conclusion :

On distingue deux types de solutions de l'équation de Schrödinger :

- Les états libres : se trouvent dans un quasi-continuum d'énergie. Les fonctions sont des ondes planes à l'infini.
- Les états liés : leurs fonctions d'onde sont localisées dans l'espace, elles occupent un nombre fini de niveaux d'énergie et admettent des développements asymptotiques en exponentielles décroissantes.

### 4. Approximation WKB:

Le passage de la mécanique quantique à la mécanique classique se fait d'une façon analogue au passage de l'optique ondulatoire à l'optique géométrique [clerc2001thèse]. Cela veut dire qu'à partir de l'équation de Schrödinger, les équations de la mécanique classique peuvent être retrouvées.

Afin de remonter à ces équations, une approximation dite semi-classique ou WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) est utilisée. Cette approximation donne des solutions approchées aux équations de la mécanique quantique et donc des solutions pour les équations de la mécanique classique.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dans le cadre de l'approximation WKB, on se considère dans le cas 1D, dans un potentiel constant. L'équation de Schrödinger a pour solution des ondes planes d'expression :

$$\psi(x) = A \cdot \exp\left[\pm i \frac{p \cdot x}{\hbar}\right] \quad (19)$$

Avec p la quantité de mouvement donnée par :

$$p = \sqrt{2m(E - V)} \quad (20)$$

E étant l'énergie totale et V l'énergie potentielle.

Dans le cas où le potentiel varie lentement, on peut adopter des solutions approchées de la forme :

$$\psi(x) = \exp\left[i \frac{S(x)}{\hbar}\right] \quad (21)$$

Où S représente l'action qui est une grandeur caractéristique de la mécanique classique.

En introduisant cette fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension, on obtient :

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V - E - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0 \quad (22)$$

Afin de faciliter la résolution de cette équation, S(x) sera développée en puissance de  $\hbar$  :

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \frac{\hbar^2}{2} S_2(x) + \dots \quad (23)$$

En négligeant les termes en  $\hbar^3$  et en résolvant l'équation de Schrödinger, trois séries d'équations sont obtenues :

$$\begin{aligned} \left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 - p(x)^2 &= 0 \\ 2\left(\frac{dS_0}{dx}\right)\left(\frac{dS_1}{dx}\right) - i\left(\frac{d^2 S_0}{dx^2}\right) &= 0 \\ \left(\frac{dS_1}{dx}\right)^2 + \left(\frac{dS_2}{dx}\right)\left(\frac{dS_0}{dx}\right) - i\left(\frac{d^2 S_1}{dx^2}\right) &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Dont les solutions sont :

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm \int_0^x p(u) du + cte \\ S_1 &= \frac{i}{2} \ln(p(x)) + cte \end{aligned} \quad (25)$$

$$S_2 = \frac{m}{2p(x)} \frac{dV}{dx} - \frac{m^2}{4} \int_0^x \frac{1}{(p(u))^5} \left(\frac{dV}{dx}(u)\right)^2 du + cte$$

La forme générale des fonctions d'onde dans l'approximation WKB (en retenant que les deux premiers termes du développement de S(x)) est donnée par :

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^x p(u) du\right) + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p(u) du\right) \quad (26)$$



Avec  $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$

On remarque que la fonction d'onde est la somme de deux ondes se propageant dans deux sens opposés.

L'approximation WKB peut conduire donc à des solutions approchées à condition qu'elle soit valide.

En effet, pour obtenir la solution, on n'a retenu que les deux premiers termes. Donc les autres termes sont considérés négligeables devant les deux premiers et en particulier le troisième terme est négligeable devant le deuxième :

$$\left| \frac{\hbar}{2} S_2 \right| \ll |S_1| \quad (27)$$

Et en remplaçant  $S_1$  et  $S_2$  par leurs expressions on obtient la condition suivante :

$$\frac{\hbar m \left| \frac{dV}{dx} \right|}{[2m(E - V)]^{\frac{3}{2}}} \ll 1 \quad (28)$$

Soit  $\lambda$  la longueur d'onde de l'onde WKB, définie par :

$$\lambda(x) = \frac{h}{p(x)} = \frac{h}{[2m(E - V)]^{\frac{1}{2}}} \quad (29)$$

L'équation (28) devient en termes de longueur d'onde :

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 1 \quad (30)$$

Cette condition signifie que les variations de la longueur d'onde doivent rester négligeables devant la longueur d'onde elle-même pour que l'approximation WKB soit applicable.

## 5. Approximation de la masse effective :

Dans un semi-conducteur, les porteurs sont soumis à l'action de plusieurs potentiels électriques. Parmi ces derniers, on trouve le potentiel cristallin associé aux ions du cristal. Afin de simplifier le traitement de l'évolution des porteurs au sein du semi-conducteur, une approximation dite l'approximation des masses effectives est souvent utilisée. En effet, selon cette approximation un porteur de masse  $m_0$  va se comporter dans le potentiel cristallin comme une particule quasi-libre de masse effective  $m_e$ .

La masse effective contient donc l'inertie additionnelle que donne le potentiel cristallin à l'électron et prend ainsi en compte l'effet de ce potentiel cristallin. Elle s'écrit sous la forme donnée par l'équation (31) dans le cas de bandes paraboliques dans l'espace de phase [Mathieu1998] :

$$m_e = \frac{\hbar^2}{d^2E / dk^2} \quad (31)$$

Dans ce cas, la masse effective est inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la relation  $E(k)$ , dite « relation de dispersion ».

Si on considère le cas de silicium, on s'aperçoit que les porteurs, trous et électrons, sont classés en différentes familles selon leurs masses effectives. En effet, pour un gaz d'électrons 2D

correspondant à un confinement selon la direction (Ox) (la direction [100]), les électrons de la bande de conduction sont classés en deux familles :

- La famille 1 : les électrons sont dits des électrons transverses avec une masse effective  $m_t$  selon (Ox) et par conséquent la masse de densité d'états est donnée par  $m_{dt}^* = 4\sqrt{m_t \cdot m_l}$ . Ces électrons occupent 4 vallées de la zone de Brillouin.

- La famille 2 : les électrons sont dits longitudinaux. Ils ont une masse effective  $m_l$  et une masse de densité d'états  $m_{dl}^* = 2m_l$ . Ils occupent 2 vallées de la zone de Brillouin.

Pour les trous aussi, on distingue deux familles :

- La famille 1 : correspond aux trous lourds ayant une masse effective  $m_{hh}$  et une masse de densité d'états égale à la masse effective.

- La famille 2 : correspond aux trous légers ayant une masse effective  $m_{lh}$  et une masse de densité d'états égale à la masse effective.

Dans la résolution de l'équation de Schrödinger, cette classification est prise en compte (figure 16).

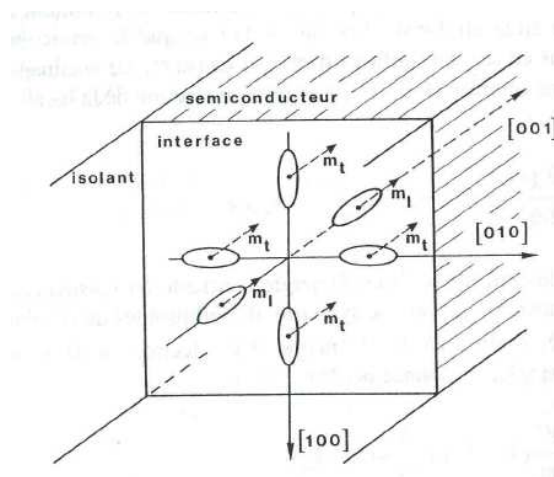


Figure 16 : Classification des électrons et des trous

## 6. Etude du confinement des porteurs à l'interface oxyde/silicium :

Comme nous l'avons déjà évoqué, l'approche classique et l'approximation WKB ne permettent pas de mettre en évidence l'effet de confinement sur la densité de porteurs par exemple dans le puits de potentiel qui se forme à l'interface entre le silicium et un oxyde. Pour cela une résolution de l'équation couplée Poisson-Schrödinger est nécessaire. Afin de modéliser cet effet de confinement des porteurs à la surface du semi-conducteur dans les structures MOS, nous considérons que l'énergie potentielle ne varie que dans la direction (Ox), perpendiculaire à l'interface.

### 6.1. Equation de Poisson :

Dans l'approche classique, la concentration des porteurs dans le semi-conducteur est reliée au potentiel par l'équation du Poisson :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (32)$$

Avec  $\varepsilon = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r$ , la constante diélectrique du milieu ( $\varepsilon_0$  la constante diélectrique du vide,  $\varepsilon_r$  la constante diélectrique relative du milieu) et  $\rho$  la densité volumique de charges dans le silicium donnée par l'expression :

$$\rho(x) = q(p(x) - n(x) + Nd^+(x) - Na^-(x)) \quad (33)$$

$Nd^+(x)$  et  $Na^-(x)$  sont respectivement les concentrations des dopants ionisés donneurs et accepteurs à l'abscisse  $x$ ,  $p(x)$  la concentration de trous à l'abscisse  $x$ ,  $n(x)$  la concentration des électrons à l'abscisse  $x$ .

Cette équation peut être simplifiée selon le type du substrat et la polarisation appliquée, et donc selon le régime de polarisation de la capacité. Ces régimes sont (cas d'un substrat p) :

- L'accumulation :

Puisque ce sont les trous (les porteurs majoritaires) qui s'accumulent à la surface, tous les termes sont négligés devant  $p(x)$  et la concentration de charge se réduit à :

$$\rho(x) \approx q \cdot p(x) \quad (33-a)$$

- La déplétion :

C'est la concentration des dopants de type accepteurs qui domine et l'équation se réduit à :

$$\rho(x) \approx -q \cdot Na^-(x) \quad (33-b)$$

- L'inversion :

La concentration des porteurs minoritaires augmente dans la zone d'inversion et la concentration de charge à la surface du semi-conducteur est :

$$\rho(x) \approx -q \cdot (n(x) + Na^-(x)) \quad (33-c)$$

L'expression de la concentration de charge définie à la surface du semi-conducteur est bien fonction du champ puisque c'est ce dernier qui définit le régime de la polarisation de la structure MOS. Afin de résoudre l'équation du Poisson, il faut bien définir les conditions aux limites. Généralement, on considère que :

$$V(x=0) - V(x \rightarrow +\infty) = \psi_s \quad (34)$$

Avec  $\psi_s$  le potentiel de surface et l'origine de l'axe étant à la surface du silicium.

Dans le modèle quantique, le potentiel de surface est obtenu en résolvant l'équation de Poisson comme dans le cas classique.

## 6.2. Résolution de l'équation couplée Poisson-Schrödinger :

Considérons un mouvement libre des électrons dans les directions (Oy) et (Oz) : dans le plan de l'interface oxyde-Semi-conducteur dans une structure MOS. Dans ce cas, la fonction d'onde peut être écrite comme suit :

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(x) \cdot \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i(k_y \cdot y + k_z \cdot z)) \quad (35)$$

Avec  $\frac{1}{\sqrt{\Omega}}$  un facteur de normalisation

L'équation de Schrödinger se réduit donc à :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x) \quad (36)$$

$\varepsilon$  étant la contribution du mouvement dans la direction (Ox) à l'énergie totale. En effet, l'énergie totale peut s'écrire sous la forme :

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right) + \varepsilon \quad (37)$$

Dans le puits de potentiel, les états sont liés et l'énergie  $\varepsilon$  est quantifiée en des énergies  $\varepsilon_n$ . Soient  $\varphi_n$  les fonctions d'onde dans la direction x, solutions de l'équation (36). La résolution de l'équation (36) nécessite la connaissance de potentiel V(x) qui est une solution de l'équation du Poisson (32). Quant au potentiel V(x), il est déterminé à partir de l'équation de Poisson qui nécessite aussi les expressions explicites des concentrations de charges déterminées à partir des fonctions d'onde, solutions de l'équation de Schrödinger. Ceci souligne la nécessité d'employer une approche auto-cohérente afin de résoudre le système couplé Poisson- Schrödinger.

La résolution de l'équation de Schrödinger dans les conditions définies précédemment permet de donner les expressions p(x) et n(x) [Clerc thèse 2001] :

$$n(x) = \sum_i \frac{m_{dl}^*}{\pi \hbar^2} kT \cdot \ln \left( 1 + \exp \left[ \frac{-\varepsilon_i^{(L)} + E_F}{kT} \right] \right) \left| \varphi_i^{(L)}(x) \right|^2 + \sum_j \frac{m_{dt}^*}{\pi \hbar^2} kT \cdot \ln \left( 1 + \exp \left[ \frac{-\varepsilon_j^{(T)} + E_F}{kT} \right] \right) \left| \varphi_j^{(T)}(x) \right|^2 \quad (38)$$

$$p(x) = \sum_i \frac{m_{lh}^*}{\pi \hbar^2} kT \cdot \ln \left( 1 + \exp \left[ \frac{-\varepsilon_i^{(LH)} + E_F}{kT} \right] \right) \left| \varphi_i^{(LH)}(x) \right|^2 + \sum_j \frac{m_{hh}^*}{\pi \hbar^2} kT \cdot \ln \left( 1 + \exp \left[ \frac{-\varepsilon_j^{(HH)} + E_F}{kT} \right] \right) \left| \varphi_j^{(HH)}(x) \right|^2 \quad (39)$$

Avec les expressions de n(x) et p(x), le potentiel V est déterminé à partir de l'équation de Poisson. Connaissant V, l'équation de Schrödinger est résolue de nouveau.

### 6.3. Les approximations pour la résolution des équations couplées Poisson-Schrödinger :

Pour résoudre les équations couplées Poisson-Schrödinger, différentes approximations sont utilisées ce qui permet d'envisager des modèles compacts pour la caractérisation ou la simulation des dispositifs (par exemple la modélisation des mécanismes de conduction à travers les oxydes...).

#### 6.3.1. La méthode variationnelle :

La méthode variationnelle est une méthode très précise [Ando1982] [Stern 1972] [Baccarani 1983] [Matthieu 1998]. Elle est utilisée surtout pour modéliser le régime d'inversion dans les structures MOS. En effet, dans cette méthode, un seul niveau d'énergie est pris en compte, ce qui est suffisant pour modéliser l'effet de champ et le confinement des porteurs en inversion forte. Pour résoudre l'équation de Schrödinger, cette méthode consiste à approcher la forme exacte d'une fonction d'onde d'un état lié donné par une expression analytique simple.

Une expression analytique simple de la fonction d'onde normalisée du niveau fondamental est donnée par [Clerc 2001] :

$$\Psi_b(x) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} x \exp\left(-\frac{b x}{2}\right) \quad (40)$$

Où  $b$  est homogène à l'inverse d'une longueur. Cette fonction d'onde satisfait l'équation suivante :

$$H \Psi_b \approx E(b) \Psi_b \quad (41)$$

Où  $H$  est l'Hamiltonien du système.

Cette méthode consiste à chercher la valeur de  $b$  qui rend la fonction  $\Psi_b$  correspondante proche d'un état propre de l'Hamiltonien  $H$ . Il est montré que ceci est vérifié par un extremum de la fonction  $E(b)$  définie par:

$$E(b) = \langle \Psi_b | H | \Psi_b \rangle = \int \Psi_b(x)^* H[\Psi_b](x) dx \quad (42)$$

La détermination de cet extremum permet de déterminer la fonction d'onde et l'énergie correspondante d'une manière approchée.

L'énergie potentielle est solution de l'équation de Poisson. Dans le cas des électrons, l'équation de Poisson est donnée par:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{q^2}{\epsilon} \left[ N_a + n_s(b) \frac{b^3}{2} x^2 e^{-bx} \right] \quad (43)$$

Où  $n_s(b)$  représente la charge stockée sur le niveau fondamental. Cette charge vérifie l'expression suivante :

$$n_s(b) = \frac{m_d^*}{\pi \hbar^2} kT \ln \left[ 1 + \exp \left[ \frac{-E(b) + E_F}{kT} \right] \right] \quad (44)$$

En intégrant l'équation (43), on trouve :

$$\langle \Psi_b | V(b) | \Psi_b \rangle = \frac{3e^2}{\epsilon} Na W \frac{1}{b} + \frac{e^2}{\epsilon} n_s(b) \frac{1}{b} \quad (45)$$

Où W représente la longueur de la zone de déplétion, supposée longue devant la longueur de la couche d'inversion forte. Soit T l'opérateur énergie cinétique. On a alors:

$$\langle \Psi_b | T | \Psi_b \rangle = \frac{\hbar^2 b^2}{8 m^*} \quad (46)$$

La valeur de b qui minimise la fonction E(b) est donnée par:

$$b = \left[ \frac{12 e^2 m^*}{\hbar^2 \epsilon} \left( Na W + \frac{n_s}{3} \right) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (47)$$

Cette valeur est déterminée en négligeant les variations de  $n_s$  avec b.

En introduisant cette expression de b dans l'équation (40), on détermine l'expression de la fonction d'onde qu'on injecte à son tour dans l'équation (42).

L'énergie s'écrit donc :

$$E(b) = \frac{3 \hbar^2 b^2}{8 m^*} \quad (48)$$

Pour un potentiel de surface donné, les relations (42), (47) et (48) constituent un système d'équations auto-consistantes, de solution  $n_s$ , E et b.

Plus de détails sont décrits par Mathieu [Mathieu1998].

### 6.3.2. Approximation du potentiel triangulaire :

La méthode du potentiel triangulaire est utilisée pour modéliser le régime d'accumulation. Cette méthode consiste à considérer une fonction linéaire de la forme  $V(x) = q F x$  pour décrire le puits de potentiel avec F le champ électrique [Mathieu 1998] [Stern 1972].

Si le puits est considéré infiniment profond, l'équation de Schrödinger admet des solutions analytiques sous forme de fonctions d'Airy [Mathieu1998], dont les énergies sont données par :

$$E_n = \left( \frac{\hbar^2}{2 m^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3 \pi e F}{2} \left( n + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3} \quad (49)$$

Dans l'approximation de la masse effective, on tient compte des électrons transverses et longitudinaux. Donc, il existe deux équations distinctes et par la suite deux séries distinctes de sous bandes d'énergie,  $E_0, E_1, E_3 \dots$  et  $E'_0, E'_2, E'_3 \dots$  :

$$E_n = \left( \frac{\hbar^2}{2 m_l^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3 \pi e F}{2} \left( n + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3} \quad (50)$$

$$E'_n = \left( \frac{\hbar^2}{2 m_t^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3 \pi e F}{2} \left( n + \frac{3}{4} \right) \right)^{2/3} \quad (51)$$

Cette méthode permet de prendre en compte plusieurs niveaux d'où son utilité pour la modélisation de la couche d'accumulation [Yang 1999]. Cette méthode se montre efficace pour décrire le comportement des électrons dans le substrat en comparaison avec les solutions directes des équations couplées Poisson-Schrödinger [Mueller1997] [Hareland1996].

## 7. Modélisation du courant tunnel direct:

Afin de modéliser le courant tunnel dans les structures MOS, plusieurs méthodes ont été développées dans la littérature:

- Une première méthode : dite la méthode de Bardeen [Bardeen 1961]. Cette méthode est une application de la théorie des perturbations au cas particulier des problèmes d'effet tunnel. Elle est basée sur la détermination de l'extension des fonctions d'onde dans l'isolant. Cette méthode est considérée comme la plus rigoureuse.

- Une deuxième méthode : basée sur le calcul des valeurs des résonances en énergie du coefficient de réflexion d'une onde plane incidente sur la barrière. C'est une méthode générale dont un exemple d'utilisation est la modélisation des diodes p-n à effet tunnel.

- Une troisième méthode : basée sur les concepts de transparence de la barrière tunnel et de fréquence d'impact des porteurs contre cette même barrière. C'est la méthode la plus simple à développer.

Clerc a montré que ces trois méthodes donnent des résultats sensiblement équivalents [Clerc thèse 2001]. Dans notre modélisation, c'est la troisième méthode qui a été adoptée comme expliqué dans la suite du manuscrit.

### 7.1. Méthode de la transparence :

Cette méthode se base sur la notion de la transparence de la barrière isolante. Elle permet le calcul du nombre des porteurs qui peuvent franchir la barrière en résolvant le système des équations couplé Poisson-Schrödinger. Ces porteurs franchissent la barrière par effet tunnel. Selon cette méthode, le courant tunnel peut être représenté par l'équation suivante :

$$J_{tunnel} = Q_n T_n f_n \quad (52)$$

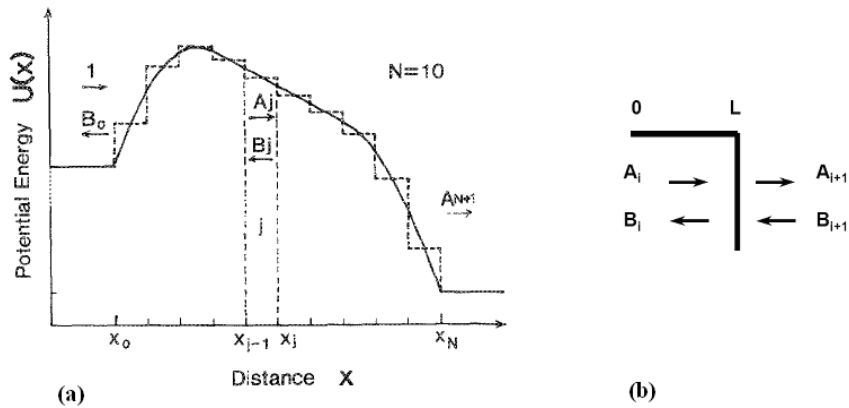
$T_n$  est la transparence au niveau d'énergie  $n$ ,  $f_n$  est la fréquence d'impact des électrons contre la barrière et  $Q_n$  la charge disponible pour passer par effet tunnel. En effet, la transparence présente la pénétration des fonctions d'onde des électrons dans l'oxyde. Elle peut être définie aussi comme la probabilité de transmission qui est la probabilité de passage d'un électron d'énergie  $E$  d'une électrode à une autre à travers l'isolant. La fréquence d'impact est une notion qui décrit le flux moyen d'électrons arrivant sur la barrière. Les différentes méthodes permettant d'explicitier ces deux paramètres sont détaillées dans les paragraphes suivants.

#### 7.1.1. Transparence tunnel :

Plus précisément, la transparence tunnel est définie comme le rapport du courant transmis sur le courant incident associé aux ondes transmises et incidentes [Clerc thèse 2001]. Elle dépend des caractéristiques de la barrière et peut être évaluée suivant différentes méthodes :

### 7.1.1.1. La méthode des matrices de transfert :

La méthode des matrices du transfert est une méthode numérique précise et simple décrite par Ando [Ando1987]. Cette méthode est basée sur la mesure de coefficients de transmission et de réflexion. La transparence est calculée pour un oxyde supposé discrétisé par morceau de potentiel constant  $V_i$  (voir figure 17-a).



**Figure 17 : (a) Schéma d'une barrière tunnel d'énergie potentielle constante par morceau [Ando 1987] (b) Schéma illustrant les réflexions des ondes sur une discontinuité de potentiel**

Pour chaque zone à énergie potentielle constante, la solution de l'équation de Schrödinger est la somme de deux ondes planes :

$$\psi_i = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \quad (53)$$

Où  $k_i$  est le vecteur d'onde d'expression :

$$k_i = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_i(E - V_i)} \quad (54)$$

$i$  désigne chaque zone à énergie potentielle constante.

Il est clair que cette fonction d'onde est la somme de deux ondes se propageant dans deux directions opposées. A chaque passage d'une zone  $i$  à une autre zone  $i+1$ , les fonctions d'onde peuvent être liées entre elles et donc leurs amplitudes sont reliées par des matrices qu'on appelle les matrices du transfert selon l'équation suivante :

$$\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} \text{ et donc on aura } \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (55)$$

$$\text{Avec } M = \prod_{i=0}^{n-1} M_i$$

La transparence est définie par le rapport courant transmis  $J_t$  sur courant incident  $J_i$  :



$$T = \frac{J_t}{J_i} \quad (56)$$

$$\text{Avec } J_t = \frac{\hbar \cdot k_n}{m_n} |A_n|^2 \text{ et } J_i = \frac{\hbar \cdot k_0}{m_0} |A_0|^2$$

La transparence est donc donnée par l'expression suivante :

$$T = \frac{m_0}{m_n} \cdot \frac{k_n}{k_0} \cdot \frac{|A_n|^2}{|A_0|^2} \quad (57)$$

Or,  $B_n=0$  (pas d'onde réfléchi dans le milieu 2), donc à partir de (55), on a :

$A_0 = M_{11} \cdot A_n$ . Avec  $M_{11}$  est le premier élément de la matrice  $M$ . Finalement, la transparence sera donnée par :

$$T = \frac{m_0}{m_n} \cdot \frac{k_n}{k_0} \cdot \frac{1}{|M_{11}|^2} \quad (58)$$

### 7.1.1.2. La méthode semi-classique WKB :

La méthode WKB permet d'avoir une solution approchée de l'équation de Schrödinger. Elle peut être utilisée pour calculer la transparence d'une barrière tunnel d'une forme quelconque afin d'obtenir des expressions analytiques simples dans le cas où elle est valable. Nous nous contentons ici de donner les résultats du traitement par cette méthode du problème de transport à travers une barrière isolante. Nous avons vu que l'approximation WKB suppose que le potentiel varie lentement. On suppose donc dans ce qui suit que cette condition est vérifiée. Dans le cas d'une barrière d'épaisseur  $T_{ox}$ , la transparence selon la méthode WKB s'écrit sous la forme suivante :

$$T(E) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{T_{ox}} p(x) \cdot dx\right) = \exp\left(-2 \int_0^{T_{ox}} k(x) \cdot dx\right) \quad (59)$$

Où  $p(x)$  est la quantité du mouvement de l'électron et  $k(x)$  le vecteur d'onde. La connaissance de la relation de dispersion  $k(E)$  permet de calculer la transparence. La relation de dispersion est de deux types :

- parabolique à une seule bande :

Dans ce cas, l'énergie  $E$  de l'électron est la somme de l'énergie potentielle et cinétique.

$$E = E_p(x) + E_c(x) = E_p(x) + \frac{1}{2} \cdot m_{ox} \cdot V_{ox}^2 = E_p(x) + \frac{1}{2} \cdot p(x) \cdot V_{ox} \quad (60)$$

L'électron ayant une vitesse  $V_{ox}$  et une masse effective  $m_{ox}$ .

$$\text{D'où } p(x) = \sqrt{2 \cdot m_{ox} \cdot (E - E_p(x))} \quad (61)$$

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar} = \frac{\sqrt{2 \cdot m_{ox} \cdot (E - E_p(x))}}{\hbar} \text{ ou } k(E) = \frac{\sqrt{2 \cdot m_{ox} \cdot (E - E_p)}}{\hbar} \quad (62)$$

- type Franz symétrique à deux bandes

Dans ce cas,  $k(E)$  est donné par l'expression :

$$k(E) = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m_{ox}(E - E_c) \cdot \left(1 - \frac{E - E_c}{Eg_{ox}}\right)} \quad (63)$$

Où  $Eg_{ox}$  est la largeur de la bande interdite de l'oxyde.

L'expression de la transparence dépend de la forme de la barrière (figure 18) :

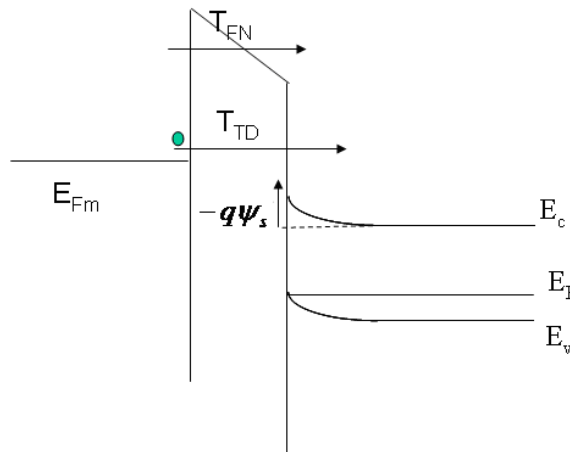
- Dans le cas où la barrière est trapézoïdale, le mécanisme tunnel est un tunnel direct (figure 18) alors l'expression de la transparence dans le cas où la relation de dispersion est parabolique à une seule bande devient :

$$T_{WKB}^{TD} = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2qm_{ox}}}{3\hbar} \cdot \frac{T_{ox}}{V} \left[(\phi_B - E)^{3/2} - (\phi_B - V - E)^{3/2}\right]\right) \quad (64)$$

$V$  étant le potentiel appliqué,  $\phi_B$  la hauteur de la barrière.

- Dans le cas d'une barrière triangulaire, l'effet tunnel est de type Fowler-Nordheim (figure 18) :

$$T_{WKB}^{FN} = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2qm_{ox}}}{3\hbar} \cdot \frac{T_{ox}}{V} (\phi_B - E)^{3/2}\right) \quad (65)$$



**Figure 18 : Injection d'un électron à travers une barrière trapézoïdale et triangulaire dans une structure MOS**

**- Correction Register:**

Comme nous l'avons déjà mentionné, la transparence obtenue par la méthode WKB n'est applicable que lorsque l'énergie potentielle varie lentement. Donc, dans une barrière discontinue, rencontrée dans la structure MOS, cette méthode n'est pas applicable. Mais vu la simplicité du résultat obtenu par la méthode WKB, cette approximation peut être appliquée dans des cas non valables à condition d'ajouter un préfacteur introduit par Register afin de corriger l'expression de la transparence.

Cette correction est attribuée aux discontinuités de l'énergie potentielles aux deux extrémités de la barrière tunnel ( $x=0$  et  $x=T_{ox}$ ) et aux réflexions sur les interfaces qu'elles génèrent [Register1999]. La transparence corrigée est :

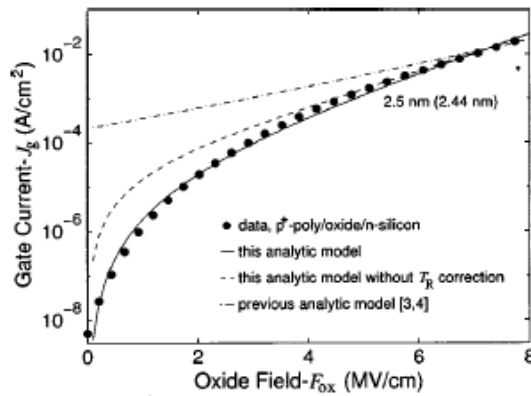
$$T(E) = C T_{WKB}(E) \quad (66)$$

$$\text{Avec } C = \frac{4v_{Si}(E).v_{ox}(E)}{(v_{Si}^2(E) + v_{ox}^2(E))} \cdot \frac{4v_{Si}(E + qF_{ox}T_{ox}).v_{ox}(E + qF_{ox}T_{ox})}{(v_{Si}^2(E + qF_{ox}T_{ox}) + v_{ox}^2(E + qF_{ox}T_{ox}))} \quad (67)$$

$v_{ox}, v_{Si}$  sont respectivement les vitesses des porteurs dans l'oxyde et dans le silicium.

$$v_{Si} = \sqrt{\frac{2E}{m_{Si}}}, v_{ox} = \sqrt{\frac{2(\phi - E)}{m_{ox}}}, \text{ avec } \phi \text{ la hauteur de la barrière, } E \text{ l'énergie de l'électron.}$$

La figure 19 montre une comparaison entre la caractéristique densité du courant en fonction du champ électrique expérimental et le modèle tunnel direct avec ou sans correction Register. On observe bien que le modèle avec correction est en bon accord avec la courbe expérimentale, ce qui montre bien la nécessité d'appliquer cette correction à la transparence WKB.



**Figure 19 : Comparaison entre la caractéristique densité du courant de grille en fonction du champ électrique mesurée (points pleins) pour une structure p+ poly silicium/SiO2/n-Si et le modèle tunnel direct avec la correction (ligne continue), et sans correction Register (pointillé) [Register 1999]**

### 7.1.2.. Fréquence d'impact :

La fréquence d'impact est une notion semi-classique qui décrit le flux moyen d'électrons arrivant sur la barrière. Elle dépend du milieu incident. Dans une structure à énergie potentielle quelconque, les fonctions d'onde réelles sont décomposées en deux ondes complexes dans les deux sens opposés afin d'extraire une expression générale de la fréquence d'impact [clerc thèse 2001] :

$$\psi_n = P_n(x) + \overline{P_n(x)} \quad (68)$$

Avec  $\psi_n$  fonction d'onde réelle,  $P_n(x)$  la fonction d'onde complexe dans le sens des  $x$  croissant et  $\overline{P_n(x)}$  la fonction d'onde complexe dans le sens contraire.

La fréquence d'impact s'exprime en fonction de  $P$  en  $x=0$  selon l'expression :

$$F_{imp} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(P_n(0) \frac{dP_n(0)}{dx}) \quad (69)$$

Les expressions  $P$  et  $\overline{P}$  peuvent être obtenues en utilisant la transformée de Fourier de  $\psi_n$ . En effet :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx \quad (70)$$

Ce qui veut dire :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx \quad (71)$$

Après changement de variables, on obtient :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx \quad (72)$$

Donc  $P$  est donnée par :

$$P = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} TF[\psi_n(k)] \exp(ikx) dx \quad (73)$$

Cette expression est très générale. Différentes visions ont été employées pour donner une expression facile à employer dans le calcul du courant :

- La méthode variationnelle [Mathieu 1998]:

D'après la méthode variationnelle, la fonction d'onde a pour expression :

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} x \exp\left(\frac{-bx}{2}\right) \quad (74)$$

En partant des équations (69) et (73), on extrait une expression de la fréquence d'impact de la forme:

$$f_0 = \frac{\hbar b^2}{4\pi m} \quad (75)$$

Ou encore en fonction de l'énergie du niveau fondamental :

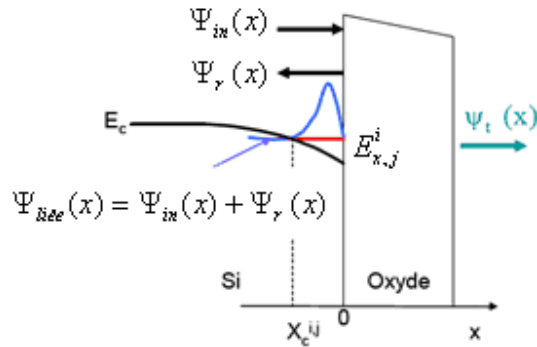
$$f_0 = \frac{2}{3} \left( \frac{2E}{\hbar} \right) \quad (76)$$

- La méthode des interférences des ondes à l'interface :

La fonction d'onde incidente arrivant sur la barrière donne naissance à une onde transmise et à une onde réfléchi. L'onde transmise met en évidence l'effet tunnel qu'on va étudier en détail par

la suite. Dans le puits de potentiel à l'interface, des interférences entre l'onde réfléchie et l'onde incidente donnent naissance à une onde stationnaire [Rana 1996] [Register 1999] comme le montre la figure 20. L'électron ayant la fonction d'onde  $\Psi_{liée}$  occupe un état lié d'énergie quantifiée  $E_{x,j}^i$  dans le substrat.

$$\Psi_{liée}(x) = \Psi_{in}(x) + \Psi_r(x) \quad (77)$$



**Figure 20 : Diagramme des bandes illustrant les interférences des ondes à l'interface oxyde/Si [Garros thèse 2004]**

D'après les conditions d'interférence, le vecteur d'onde  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  est quantifié selon l'équation suivante :

$$\int_{x_c^{i,j}}^0 k(x).dx = i\pi \quad \text{Ou} \quad \int_{x_c^{i,j}}^0 \sqrt{\frac{2m_x^* (E_{x,j}^i - E_c(x))}{\hbar^2}}.dx = i\pi \quad (78)$$

Avec  $i$  l'indice d'interférence,  $E_c(x)$  l'énergie potentielle, le point tournant  $x_c^{i,j}$  est tel que  $E_c(x_c^{i,j}) = E_{x,j}^i$ .

Le temps moyen nécessaire à un électron pour faire un aller retour entre les deux parois du puits en  $x=0$  et  $x_c^{i,j}$  est donné par l'expression :

$$\tau_{AR}^{i,j} = 2 \int_{x_c^{i,j}}^0 \frac{dx}{v(x)} \quad (79)$$

Avec  $v(x)$  la vitesse du groupe de l'électron donnée par :

$$v(x) = \sqrt{\frac{2(E_{x,j}^i - E_c(x))}{m_x^*}} \quad (80)$$

La fréquence d'impact est le flux des électrons sur la barrière. Elle s'écrit comme l'inverse de ce temps :

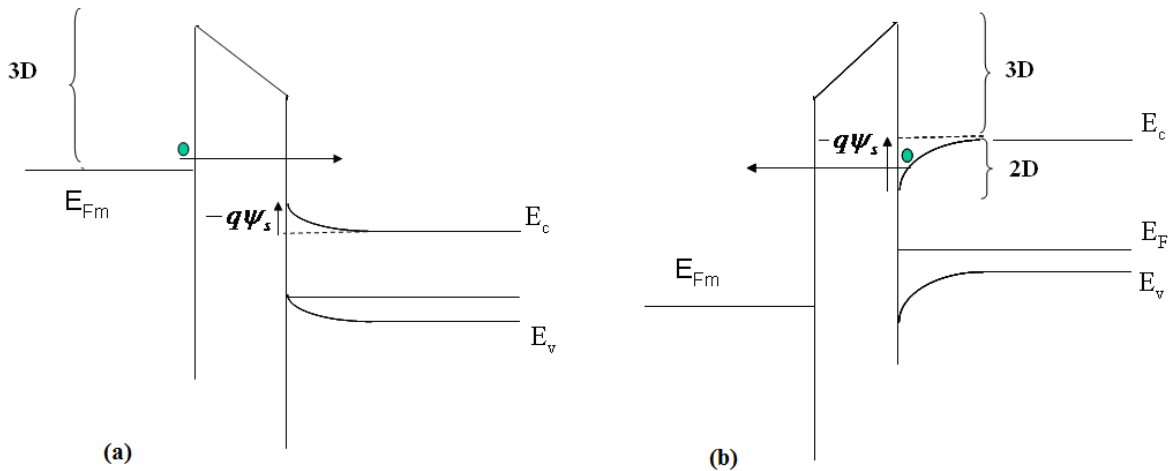
$$F_{imp}^{i,j} = \left[ 2 \int_{x_c^{i,j}}^0 \frac{dx}{v(x)} \right]^{-1} \quad (81)$$

### 7.1.3. Expression du courant tunnel :

Selon le type du semi-conducteur et selon la polarisation appliquée sur la grille d'une structure MOS, les électrons susceptibles de traverser la couche isolante par effet tunnel peuvent :

- Soit occuper des états d'énergie appartenant à un continuum d'états :  
le courant dans ce cas est assuré par un flux d'électrons dit 3D. C'est par exemple le cas des électrons dans la grille métallique de la structure MOS. On assiste dans ce cas à une injection d'électrons du métal vers le semi-conducteur (figure 21(a)).

- Soit occuper des états liés. Ce cas correspond aux électrons confinés dans un puits de potentiel (figure 21(b)). Dans ce cas, le courant résultant de ces électrons est appelé courant 2D. Cependant, les états électroniques non confinés dans le semi-conducteur peuvent également participer au courant tunnel. C'est pourquoi, le courant total est la somme d'un courant 2D (à deux dimensions) assuré par les électrons confinés et d'un courant 3D (à trois dimensions) assuré par les électrons dont les énergies sont supérieures à  $E_c$  appartenant à un continuum d'énergie [Bowen97], [Ghetti 2000]. Un exemple est donné par la figure 21(b) dans le cas de la capacité MOS à substrat p où l'injection implique des électrons dans la couche d'inversion de la surface du semi-conducteur.



**Figure 21 : (a) Injection depuis un continuum d'énergie (b) Injection depuis un puits de potentiel**

Nous allons par la suite détailler les expressions de ces deux courants.

#### 7.1.3.1. Courant 2D :

Le courant 2D correspond au flux des électrons confinés dans le puits de potentiel ayant une énergie quantifiée selon l'axe (Ox) perpendiculaire au plan de l'interface. Comme nous l'avons déjà indiqué, les électrons dans le silicium sont repartis en deux familles distinctes  $j$  suivant leurs masses effectives longitudinales ou transverses. Le courant 2D tient compte de la contribution de

tous les électrons appartenant à une bande d'énergie  $i$  et une famille de masse effective  $j$ . Il s'écrit sous la forme [Yang 1999], [Mudanai 2000] :

$$J_{2D} = q \sum_j \sum_i \frac{n_j^i}{\tau_j^i} \quad (82)$$

Où  $n_j^i$  est le nombre d'électrons qui occupent la sous bande  $i$  et la famille  $j$ ,  $\tau_j^i$  est leur durée de vie tunnel.

$\tau_j^i$  correspond au produit de flux d'électrons sur la barrière (ou fréquence d'impact  $F_{imp}$ ) par la probabilité de transition ou transparence  $T$  de cette barrière [Garros thèse2004] :

$$\frac{1}{\tau_j^i} = F_{imp}(E_x^{i,j}) \cdot T(E_x^{i,j}) \quad (83)$$

Donc le courant 2D s'écrit en fonction de la charge présente dans le puits du potentiel, la fréquence d'impact et la transparence de la barrière tunnel selon la relation (84) :

$$J_{2D} = q \sum_j \sum_i n_j^i \cdot F_{imp}(E_x^{i,j}) \cdot T(E_x^{i,j}) \quad (84)$$

### 7.1.3.2. Courant 3D :

Afin de déterminer le courant 3D, on doit calculer les flux des électrons de l'électrode 1 vers l'électrode 2 ( $J_{3D}^{1 \rightarrow 2}$ ) et les flux des électrons de l'électrode 2 vers l'électrode 1 ( $J_{3D}^{2 \rightarrow 1}$ ). Soit  $E$  l'énergie totale des électrons. Elle peut s'écrire sous la forme d'une somme d'une composante perpendiculaire à l'interface ( $E_x$ ) et une composante parallèle ( $E_{||}$ ):

$$E = E_x + E_{||} \text{ avec } E_{||} = \frac{\hbar^2 \cdot k_{||}^2}{2m_{||}} \quad (85)$$

En intégrant le flux des électrons qui passent par effet tunnel de l'électrode 1 vers l'électrode 2 sur tous les états d'énergie disponibles ( $E_x, E_{||}$ ), le courant  $J_{3D}^{1 \rightarrow 2}$  est donnée par l'équation suivante [chang84] :

$$J_{3D}^{1 \rightarrow 2} = \frac{4\pi m q}{h^3} \int \int (1 - f_2(E_x + E_{||})) T(E_x, E_{||}) f_1(E_x + E_{||}) dE_{||} dE_x \quad (86)$$

Où  $f_1$  et  $f_2$  sont les fonctions de répartition fermi-Dirac dans l'électrode 1 et 2 respectivement, et  $T$  la transparence de l'oxyde.

De même, on obtient le courant  $J_{3D}^{2 \rightarrow 1}$ :

$$J_{3D}^{2 \rightarrow 1} = \frac{4\pi m q}{h^3} \int \int (1 - f_1(E_x + E_{||})) T(E_x, E_{||}) f_2(E_x + E_{||}) dE_{||} dE_x \quad (87)$$

Donc le courant total sera donné par la différence entre les deux flux :

$$J = J_{3D}^{1 \rightarrow 2} - J_{3D}^{2 \rightarrow 1} = \frac{4\pi m q}{h^3} \int T(E_x) dE_x \int (f_1(E_x + E_{||}) - f_2(E_x + E_{||})) dE_{||} \quad (88)$$

En supposant que  $T$  ne dépend que de  $E_x$  [chang84] et en intégrant  $f_1$  et  $f_2$ , le courant total est donné par l'équation :

$$J = \frac{4\pi kTqm}{h^3} \int_{E_c}^{\infty} T(E_x) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{F1} - E_x}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{F2} - E_x}{kT}\right)} \right) dE_x \quad (89)$$

## 8. Mise en équation du modèle Tunnel direct :

L'application des modèles de transport tunnel que nous venons de décrire nécessite de connaître un certain nombre de grandeurs électriques de la structure MOS. Ainsi, nous devons disposer principalement du potentiel de surface du semi-conducteur, de l'épaisseur de l'oxyde, du champ électrique dans l'oxyde et la tension des bandes plates. C'est l'analyse de la caractéristique C(V) de la structure correspondante qui permet d'avoir accès à ces grandeurs. Nous commençons donc par appliquer cette analyse à une caractéristique C(V) d'une structure FM/I/S.

### 8.1. Simulation Poisson-Schrödinger des caractéristiques capacité-tension, C(V) :

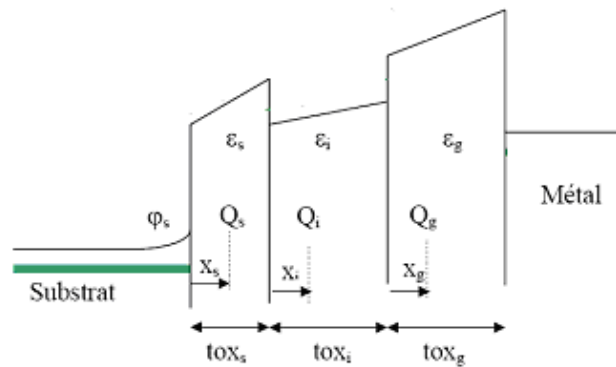
Le simulateur des caractéristiques C(V) utilisé consiste à reconstituer cette caractéristique à partir des équations de base de la capacité et à partir de la résolution des équations couplées Poisson-Schrödinger. L'élaboration de la courbe C(V) d'une structure MOS repose sur le calcul de la charge stockée dans le semi-conducteur en fonction de la polarisation appliquée à la grille. Cette charge est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger. En effet, la capacité peut s'écrire (en absence des états d'interface) :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_s} + \frac{1}{C_{ox}} = \frac{\partial \psi_s}{\partial Q} + \frac{1}{C_{ox}} = \frac{\partial \psi_s}{\partial Q} + \frac{T_{ox}}{\epsilon} \quad (90)$$

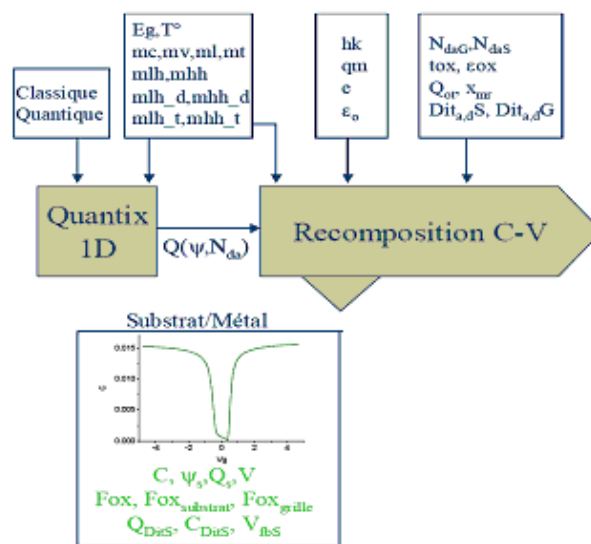
La connaissance de la charge Q dans le semi-conducteur en fonction du potentiel de surface et du dopage permet la détermination de la capacité. En présence des états d'interface, il suffit d'introduire la capacité des états d'interface  $C_{it}$  qui est fonction de la densité de ces états (voir chapitre II) dans l'équation (90). En modifiant la distribution en énergie des états d'interface (densité, position du maximum), on peut simuler une courbe C(V) à basse fréquence.

La figure 22(a) présente une structure MOS qu'on peut simuler avec trois couches diélectriques de différentes épaisseurs. Ces couches présentent des charges fixes Q représentées par leurs barycentres x.





(a)

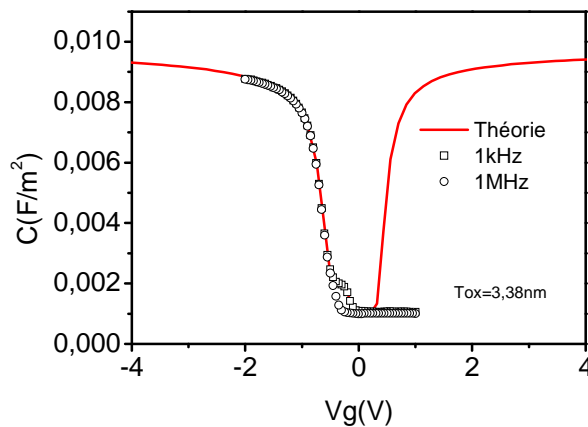


(b)

**Figure 22 :** (a) Diagramme de bandes d'une structure MOS utilisé dans le simulateur C(V)  
 (b) : Schéma de principe utilisé par le simulateur C(V)

La figure 22-b décrit les différentes étapes effectuées par le simulateur afin de simuler la courbe C(V) et d'extraire les différents paramètres. Dans le cas de la structure Métal/oxyde/Substrat, les paramètres de simulation pour la recombinaison de la courbe C(V) sont : le dopage du substrat, l'épaisseur d'oxyde, la constante diélectrique, la charge fixe dans l'oxyde et sa position, le profil des états d'interface donneurs et accepteurs dans le gap du substrat, le travail de sortie du métal et du substrat. A partir de cette simulation C(V), on peut extraire le potentiel de surface  $\psi_s$ , la

tension des bandes plates, l'épaisseur de l'oxyde, le champ électrique dans l'oxyde, la valeur de la capacité théorique  $C_{ms}$ , la capacité des états d'interface  $C_{it}$ , la charge des états d'interface. Ces différents paramètres servent à la modélisation du courant tunnel. La figure 23 donne un exemple d'une simulation  $C(V)$  pour une structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si. La courbe  $C(V)$  est simulée avec une épaisseur 3.38 nm et un dopage de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  en tenant compte des états d'interface. Si on calcule l'épaisseur avec une expression classique à partir de la valeur de la capacité  $C_{ox}$  en accumulation, on trouve une valeur de 3.94 nm, valeur différente de celle obtenue par la simulation ce qui montre l'importance de tenir compte des effets quantiques. Une valeur de la tension de bande plate de -0.4V est également extraite.



**Figure 23 : simulation quantique des courbes CV NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si mesurées à 1 MHz et 1kHz**

En conclusion, c'est cette méthodologie d'analyse qui a été employée pour extraire les paramètres nécessaires à la modélisation tunnel.

## 8.2. Modèle tunnel direct :

Dans le modèle tunnel direct développé dans ce travail, il a été tenu compte de deux cas de la forme de la barrière de potentiel pour appliquer le modèle adapté. En effet, pour une barrière trapézoïdale, le modèle tunnel direct a été appliqué et pour une barrière triangulaire c'est le modèle Fowler-Nordheim qui a été appliqué.

### 8.2.1. Injection depuis le substrat :

Pour l'injection de porteurs depuis le substrat et étant donné que l'intérêt en spintronique se limite aux électrons, on va se limiter au régime d'accumulation et donc aux structures à substrat de type n. Vu que les électrons occupent de préférence les niveaux d'énergie plus bas, c'est l'expression du courant par le courant 2D qui doit être utilisée (voir figure 21-b). Cette expression est donnée par l'équation (84) obtenue par la méthode de transparence et qui est fonction de la fréquence d'impact, de la transparence de la barrière et de la charge disponible pour le transport tunnel. Ces trois composantes seront décrites dans les paragraphes suivants.

### 8.2.1.1. L'expression de la charge disponible pour le transport tunnel:

La concentration des électrons est obtenue par une relation générale en fonction de la densité d'états 2D,  $g_{2D}(E)$  et la fonction de fermi  $f(E)$  [Mathieu1998]. Elle s'exprime dans le cas général sous la forme :

$$n = \int_E^{\infty} f(E') \cdot g_{2D}(E') \cdot dE' \quad (91)$$

$$\text{Avec } g_{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \quad (92)$$

$$\text{et } f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (93)$$

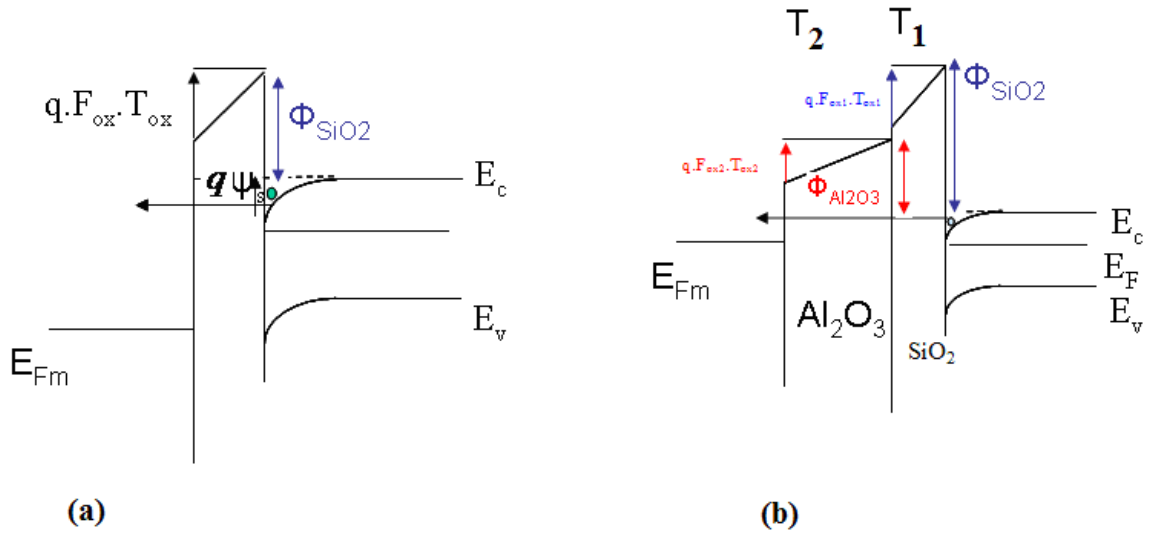
Ce qui donne une concentration en fonction de l'énergie des électrons :

$$n = \frac{kT}{\pi \hbar^2} \cdot m \cdot q \cdot \ln \left( 1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) \right) \quad (94)$$

Les énergies des électrons sont données par l'approximation du potentiel triangulaire puisque le puits de potentiel en accumulation peut être approximé par une droite. Les énergies sont données par les fonctions d'Airy (équation 49)

### 8.2.1.2. L'expression de la transparence de la barrière :

Pour déterminer l'expression de la transparence, nous avons adopté l'approximation WKB vu sa simplicité en tenant compte de deux cas de figures selon la forme de la barrière : la barrière trapézoïdale et la barrière triangulaire. L'expression de la transparence est donnée par l'équation 59. Pour notre étude, nous avons deux types de structures comme déjà mentionné : les structures à une seule couche de barrière le  $\text{SiO}_2$  (figure 24-a) et les structures à double couche de barrière  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$  (figure 24-b).



**Figure 24 : Diagramme des bandes (a) d'une structure MIS à une seule barrière (b) d'une structure MIS à double barrière dans le cas de transport d'électrons du substrat vers le métal**

Pour les structures à une seule couche de barrière, la transparence est fonction de l'épaisseur de l'oxyde  $T_{ox}$  et du champ dans l'oxyde  $F_{ox}$  déterminés par l'analyse de la caractéristique  $C(V)$  ainsi que de la masse effective et de la hauteur de la barrière de l'oxyde. Elle est donnée par les équations (95) pour une barrière trapézoïdale et l'équation (96) pour une barrière triangulaire :

$$T_{TD} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{T_{ox}} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot (\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot x - E)} dx\right) \quad \text{Si } (E \geq 0), (E < \phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot T_{ox}) \quad (95)$$

$$T_{FN} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{b_1} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot (\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot x - E)} dx\right) \quad \text{Si } (E \geq 0), (E > \phi_{SiO_2} - q \cdot F_{SiO_2} \cdot T_{ox}) \quad (96)$$

Avec  $b_1$  l'abscisse  $x$  pour lequel on a une barrière triangulaire :  $b_1 = \frac{\phi_{SiO_2} - E}{q \cdot F_{ox}}$  (97)

Pour les structures à double barrière, la transparence est fonction des épaisseurs de deux couches d'oxydes, de deux champs dans les deux oxydes (La couche  $Al_2O_3$  a une épaisseur  $T_{ox2}$  et un champ d'oxyde  $F_{ox2}$  alors que la couche  $SiO_2$  a une épaisseur  $T_{ox1}$  et un champ d'oxyde  $F_{ox1}$ ) déterminés aussi par les analyses des  $C(V)$  d'une structure à double barrière, des masses effectives dans les deux oxydes, des hauteurs des barrières. En effet, la transparence totale sera le produit de deux transparences de deux couches d'oxyde qui dépendent de la forme des barrières triangulaire ou trapézoïdale comme le montre la figure 25. L'algorithme utilisé dans ce cas est donné par l'expression suivante :

$$T_{\text{générale}}(E, V) := \begin{cases} TTD2(E, V) \cdot TTD1(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot [E < \{\phi_{Al_2O_3} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q\}] \\ TFN2(E, V) \cdot TTD1(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot \{\phi_{Al_2O_3} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q < E < \phi_{Al_2O_3} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q\} \\ TTD1(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot [E < \{\phi_{SiO_2} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q\}] \cdot [E > \phi_{Al_2O_3} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q] \\ TFN1(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot [E \geq \{\phi_{SiO_2} - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q\}] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

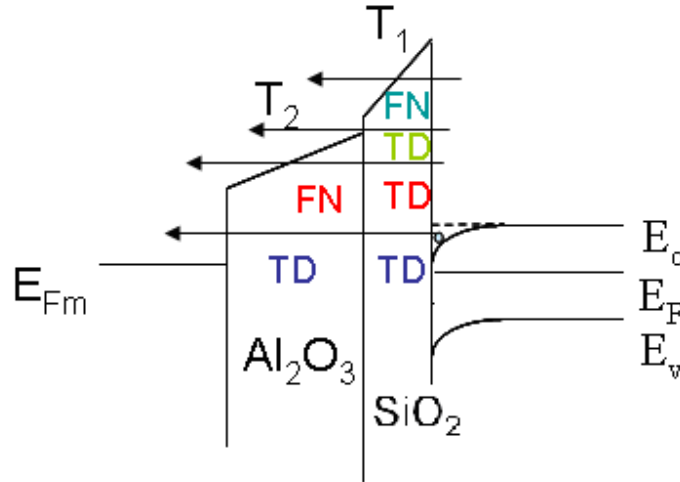
(98)

Les expressions de la transparence Tunnel direct TTD1 et la transparence Fowler-Nordheim TFN1 à travers la première couche SiO<sub>2</sub> sont les mêmes que dans la première structure (équations (95) et (96)). Quant à celles de la deuxième couche Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, elles sont données par les équations suivantes :

$$TTD2(E, V) = \exp \left[ \frac{-2}{\hbar} \cdot \int_{T_{ox1}}^{T_{ox1}+T_{ox2}} \sqrt{2 \cdot m_{Al_2O_3}} \cdot [\phi_{Al_2O_3} - q \cdot F_{ox1} \cdot T_{ox1} - q \cdot F_{ox2} \cdot (x - T_{ox1}) - E] dx \right] \quad (99)$$

$$TFN2(E, V) = \exp \left[ \frac{-2}{\hbar} \cdot \int_{T_{ox1}}^{b_2} \sqrt{2 \cdot m_{Al_2O_3}} \cdot [\phi_{Al_2O_3} - q \cdot F_{ox1} \cdot T_{ox1} - q \cdot F_{ox2} \cdot (x - T_{ox1}) - E] dx \right] \quad (100)$$

Le point b<sub>2</sub> est l'abscisse x pour lequel on a une barrière triangulaire dans la deuxième couche.



**Figure 25 : Diagramme des bandes d'une structure bicouche NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub>/n-Si illustrant les différents mécanismes de conduction**

Comme déjà expliqué, la transparence de la barrière est corrigée par un facteur C pour tenir compte des réflexions sur la barrière.

### 8.2.1.3. Expression de la fréquence d'impact:

En accumulation, on peut approximer le puits du potentiel par un puits triangulaire. L'énergie potentielle aura donc la forme : E<sub>p</sub>(x) = q · F<sub>Si</sub> · x où F<sub>Si</sub> est le champ électrique dans le silicium.

En introduisant cette expression dans les équations (80) et (81), la fréquence d'impact est donnée par l'expression [Zhao 2004] :

$$F_{i,j} = \frac{q \cdot |F_{Si,i}|}{4} \left( \frac{m^* \cdot |E_{i,j}|}{2} \right)$$

Avec  $E_{i,j}$  le niveau d'énergie dans le puits de potentiel,  $m^*$  la masse effective dans le silicium.

Une fois tous les éléments du modèle sont définis, on simule la courbe expérimentale en variant les différents paramètres suivants :

- les hauteurs des barrières :  $\phi_{SiO_2}$  et  $\phi_{Al_2O_3}$  (voir figure 24(b))
- les masses effectives de l'électron dans les oxydes :  $m_{SiO_2}$  et  $m_{Al_2O_3}$

### 8.2.2. Injection d'électrons depuis le métal :

Pour l'injection d'électrons depuis le métal, on considère une structure MOS avec un substrat p. Les électrons occupent un continuum d'énergie. Le courant tunnel est donc de type 3D, donné par l'équation (89). Dans ce cas,  $E_{F1}$  est le niveau de fermi dans le métal et  $E_{F2}$  est celui du semi-conducteur. Le courant est intégré sur la hauteur de la barrière  $\phi$  entre le métal et l'oxyde (figure 26).

Il s'écrit sous la forme :

$$J = \frac{4\pi k T q m}{h^3} \int_{E_{Fm}}^{\phi_B} T(E) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{Fm}(F) - E}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fsc}(|\psi|, |F|) - (E + q \cdot F_{ox} \cdot T_{ox})}{kT}\right)} \right) dE \quad (101)$$

Avec  $T$  la transparence calculée selon l'approximation WKB et tenant compte de la correction Register.

Dans le cas des structures à un seul oxyde  $SiO_2$  (figure 26-a), les transparences tunnel direct et Fowler-Nordheim sont données respectivement par :

$$T_{TD} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{t_{ox}} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot (\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot x - E)} dx\right) \text{Si}(E \geq 0) \cdot (E < \phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot T_{ox}) \quad (102)$$

$$T_{FN} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{b_1} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot (\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox} \cdot x - E)} dx\right) \text{Si}(E \geq 0) \cdot (E > \phi_{SiO_2} - q \cdot F_{SiO_2} \cdot T_{ox}) \quad (103)$$

Dans le cas des structures à double barrière  $Al_2O_3/SiO_2$  (figure 26-b), la transparence comme dans le cas de l'injection depuis le substrat est le produit des transparences de deux barrières. La couche  $Al_2O_3$  a une épaisseur  $T_{ox2}$  et un champ d'oxyde  $F_{ox2}$  alors que la couche  $SiO_2$  a une épaisseur  $T_{ox1}$  et un champ d'oxyde  $F_{ox1}$ . La transparence dépend de la forme des barrières. L'algorithme utilisé pour la calculer est le suivant :

$$T_{\text{générale}}(E, V) := \begin{cases} TTD2(E, V) \cdot TTD1(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot [E < (\phi_{SiO_2} - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q)] \\ TFN1(E, V) \cdot TTD2(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot ((\phi_{SiO_2} - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q > E > \phi_{SiO_2} - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q - F_{ox1} \cdot T_{ox1} \cdot q)) \\ TTD2(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot (\phi_{SiO_2} - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q < E) \\ TFN2(E, V) & \text{if } (E \geq 0) \cdot [E \geq (\Phi_{Al_2O_3} - F_{ox2} \cdot T_{ox2} \cdot q)] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (104)$$

Nous trouvons ici les mêmes définitions de différentes transparences.  
Les transparences de la barrière  $Al_2O_3$  sont données par :

$$TTD2 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{T_{ox2}} \sqrt{2 \cdot m_{Al_2O_3} \cdot (\phi_{Al_2O_3} - q \cdot F_{ox2} \cdot x - E)} dx\right) \quad (105)$$

$$TFN2 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \cdot \int_0^{b_2} \sqrt{2 \cdot m_{Al_2O_3} \cdot (\phi_{Al_2O_3} - q \cdot F_{ox2} \cdot x - E)} dx\right) \quad (106)$$

Le point  $b_2$  est l'abscisse  $x$  pour lequel la barrière  $Al_2O_3$  est triangulaire.

Les transparences de l'oxyde  $SiO_2$  sont données par :

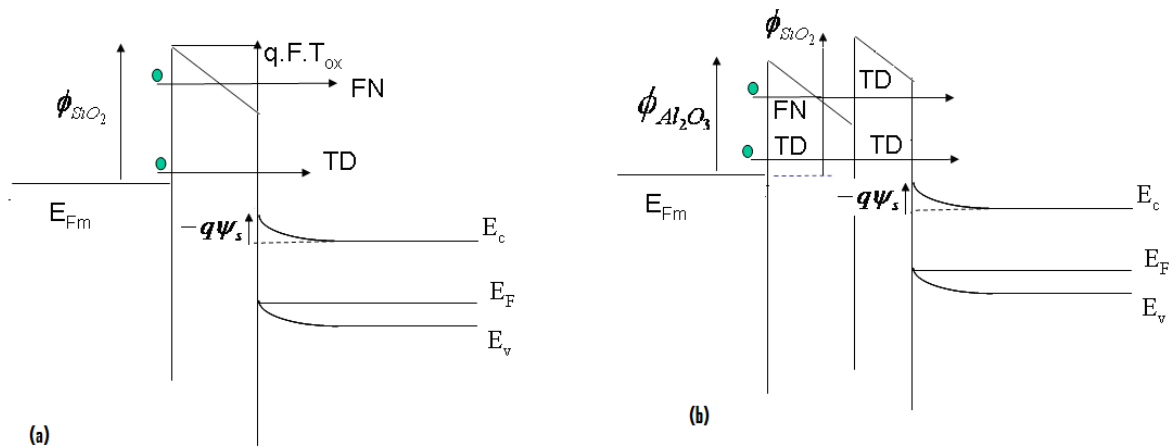
$$TTD1(E, V) = \exp\left[\frac{-2}{\hbar} \cdot \int_{T_{ox2}}^{T_{ox1} + T_{ox2}} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot [\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox2} \cdot T_{ox2} - q \cdot F_{ox1} \cdot (x - T_{ox2}) - E]} dx\right] \quad (107)$$

$$TFN1(E, V) = \exp\left[\frac{-2}{\hbar} \cdot \int_{T_{ox2}}^{b_1} \sqrt{2 \cdot m_{SiO_2} \cdot [\phi_{SiO_2} - q \cdot F_{ox2} \cdot T_{ox2} - q \cdot F_{ox1} \cdot (x - T_{ox2}) - E]} dx\right] \quad (108)$$

Avec  $b_1$  l'abscisse pour lequel la barrière  $SiO_2$  est triangulaire.

Là aussi, les différents paramètres d'ajustement du modèle sont :

- les hauteurs des barrières :  $\phi_{SiO_2}$  et  $\phi_{Al_2O_3}$
- les masses effectives de l'électron dans les oxydes :  $m_{SiO_2}$  et  $m_{Al_2O_3}$



**Figure 26 : Diagramme des bandes (a) d'une structure MIS à une seule barrière (b) d'une structure MIS à double barrière pour l'injection d'électrons du métal vers le semi-conducteur**

### 8.2.3. Résultats expérimentaux : transport à travers une barrière de SiO<sub>2</sub>:

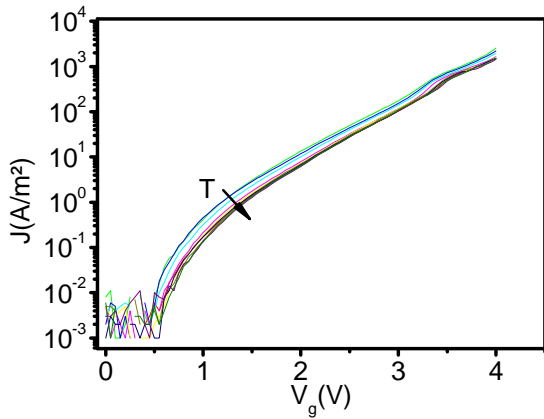
#### 8.2.3.1. Injection d'électrons depuis le substrat :

Afin d'étudier les mécanismes de transport à travers une barrière de SiO<sub>2</sub>, un échantillon NiFe/SiO<sub>2</sub>/n-Si avec une épaisseur physique de 4 nm recuit sous forming gas a été utilisé. Des caractéristiques I(V) à basses températures et à température ambiante (80K à 300K) ont été effectuées.

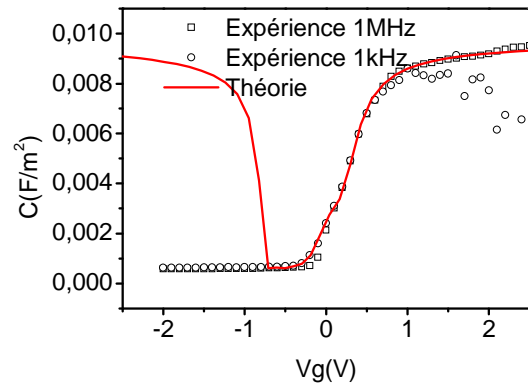
La figure (27) montre que la densité du courant ne dépend pas de la température, signe fréquent d'un mécanisme tunnel. Afin de vérifier s'il s'agit d'un tunnel direct, nous avons comparé ces résultats au modèle tunnel développé précédemment.

Une courbe C(V) a été simulée afin de déterminer les différents paramètres nécessaires pour la modélisation, à savoir le champ dans l'oxyde (figure 29), le potentiel de surface  $\psi_s$  etc... La figure 28 représente les deux courbes C(V) à 1kHz et à 1 MHz avec la courbe théorique à 1KHz. L'ajustement des résultats expérimentaux par la courbe théorique permet de donner une épaisseur de SiO<sub>2</sub> de 3.35 nm, un dopage de  $3.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et une valeur de la tension des bandes plates  $V_{fb}$  de 0.2V.



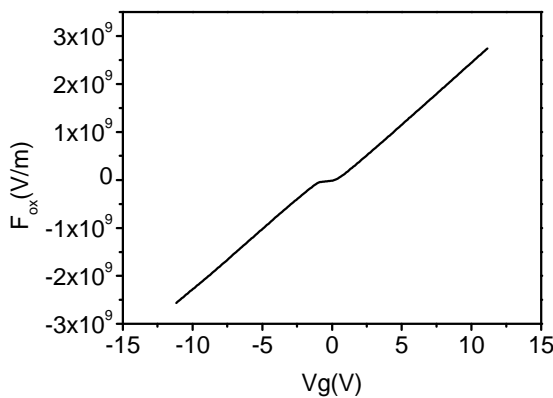


**Figure 27 :** Les caractéristiques  $I(V)$  en fonction de la température (80K-300K) pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/n-Si

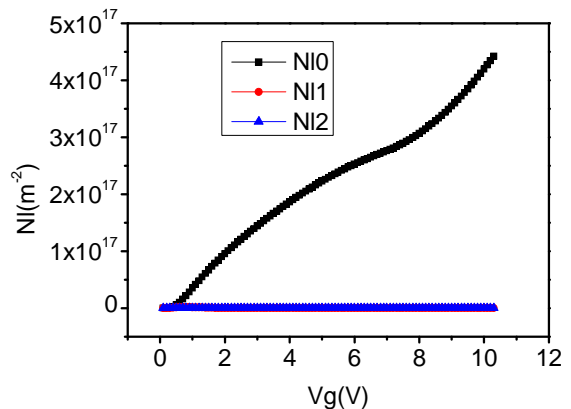


**Figure 28 :** Courbes  $C(V)$  à 1MHz et 1kHz comparées avec la théorie pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/n-Si

Les concentrations des électrons à la surface du semi-conducteur ont également été calculées. La figure 30 donne un exemple des concentrations sur les trois premiers niveaux d'énergie en fonction de la tension de grille,  $V_g$ . On constate que la concentration des porteurs sur le niveau fondamental est plus grande que sur les deux autres niveaux, ce qui confirme que les électrons occupent majoritairement les niveaux de plus basses énergies.



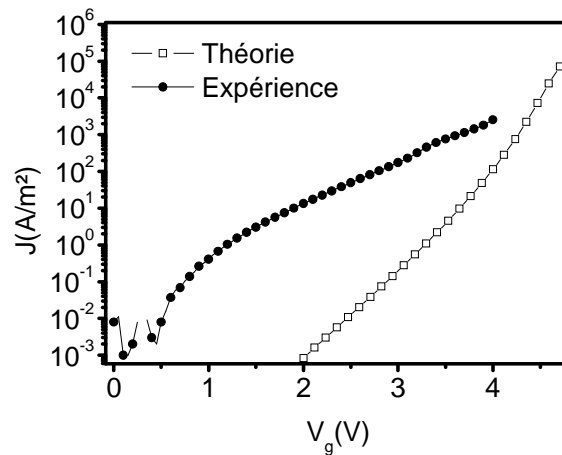
**Figure 29 :** Champ électrique dans l'oxyde SiO<sub>2</sub> en fonction de la polarisation de la grille



**Figure 30 :** les concentrations des électrons longitudinaux sur les trois premiers niveaux d'énergie dans le puits quantique. NI0 :fondamental, NI1 et NI2 : les deux niveaux excités.

La figure 31 donne une comparaison entre la courbe J-V expérimentale et le modèle tunnel développé. Le modèle tunnel utilise une barrière d'oxyde  $\phi_{ox} = 3.15$  eV [Ghetti 2001] et une masse effective des électrons dans l'oxyde,  $m_{ox} = 0.5m_e$  [Ghetti 2001]. La comparaison entre

résultats expérimentaux et modèle montre que le mécanisme de conduction ne peut pas être du type tunnel direct. En effet, le modèle donne des densités de courant largement inférieures à celles observées en pratique.



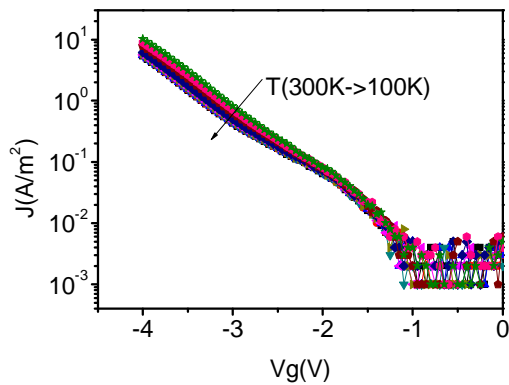
**Figure 31 : Caractéristique courant-tension pour une structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si et comparaison avec le modèle tunnel direct. Les paramètres utilisés dans le modèle sont :**

$$m_{\text{SiO}_2} = 0.5m_e, \phi_{\text{SiO}_2} = 3.15\text{eV}$$

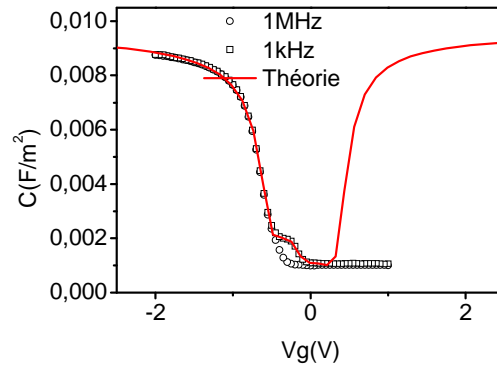
Par ailleurs, des mesures supplémentaires à hautes températures ont été effectuées et qui ont montré également que le courant ne dépend pas de la température, ce qui confirme le fait que la conduction n'est pas assistée par un mécanisme thermoionique mettant en jeu des pièges.

### 8.2.3.2. Injection depuis le métal :

L'analyse des caractéristiques de transport lors de l'injection des électrons du métal vers le semi-conducteur a donné des résultats similaires à ceux du paragraphe précédent. Des mesures du courant en fonction de la température (100K-300K) ont été réalisées sur un échantillon NiFe/SiO<sub>2</sub>/p-Si recuit sous forming gas. L'oxyde a une épaisseur physique de 4 nm. On remarque qu'il n'y a pas de dépendance en température (figure 32) : signe d'un mécanisme de conduction de type tunnel. L'ajustement des courbes C(V) par une caractéristique C(V) théorique (figure 33) a permis d'extraire les paramètres nécessaires tel que l'épaisseur d'oxyde (3.38 nm), le dopage ( $1.10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ), la tension des bandes plates (-0.46 V), le champ dans l'oxyde etc....

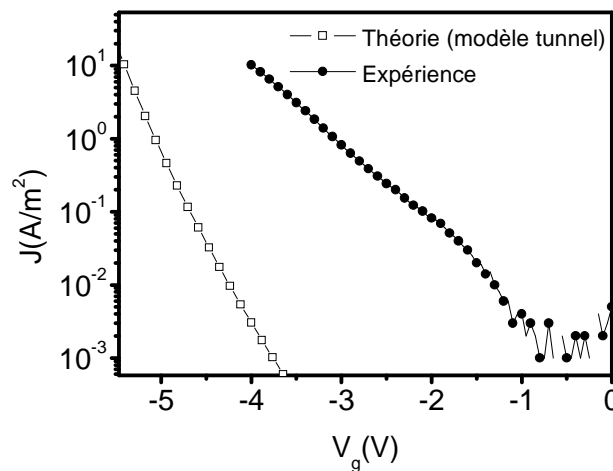


**Figure 32 :** Les caractéristiques courant-tension en fonction de la température (100K-300K) pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si



**Figure 33 :** Caractéristiques C(V) à 1MHz et 1kHz et comparaison avec une C(V) théorique pour la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si

La figure 34 donne une comparaison entre les caractéristiques courant-tension expérimentale et théorique (modèle tunnel direct). Tout comme les résultats du paragraphe précédent, on constate que le mécanisme du transport ne peut pas être expliqué par un modèle de type tunnel direct.



**Figure 34 :** Caractéristique courant-tension de la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si, comparaison avec le modèle tunnel direct. Paramètres du modèle :  $m_{SiO_2} = 0.5m_e$ ,  $\phi_{SiO_2} = 3.15eV$

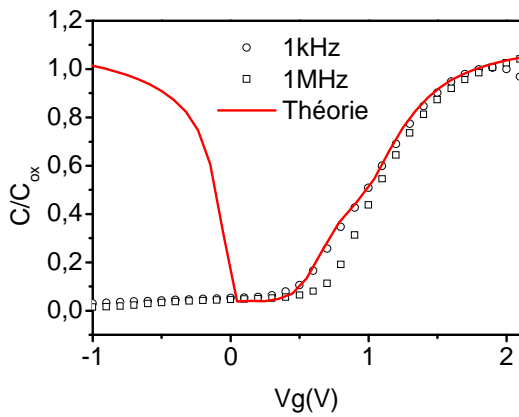
En conclusion, l'analyse du mécanisme de transport à travers l'oxyde fait apparaître un processus de type tunnel mais avec des amplitudes de courants nettement supérieures à celles prévues par un modèle tunnel prenant en compte la transparence de la barrière. Tout se passe comme s'il s'agissait d'une transparence augmentée. On pourrait alors penser à un processus de transport tunnel qui met en jeu des défauts dans le volume de l'oxyde sur lesquels les électrons transitent. Il est clair que dans ces conditions la transparence effective de la barrière sera nettement plus

importante. Ce mécanisme de transport tunnel assisté par pièges sera développé dans la suite du manuscrit.

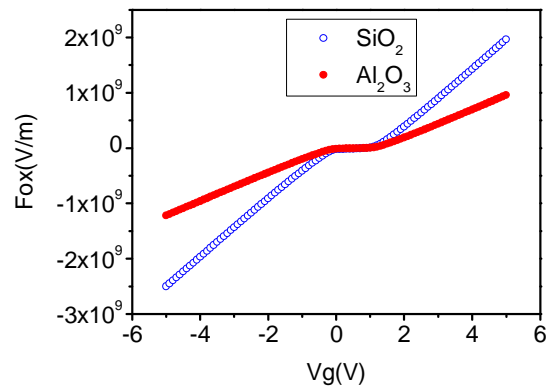
## 8.2.4. Résultats expérimentaux : transport à travers la structure à double barrière $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ :

### 8.2.4.1. Injection d'électrons depuis le substrat :

Une structure  $\text{NiFe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2/\text{n-Si}$  ayant subi un recuit de densification a été analysé. L'alumine a pour épaisseur physique de 2 nm. La figure 35 qui donne une comparaison entre caractéristique  $C(V)$  expérimentale et théorique, a permis d'extraire une épaisseur de 1.9 nm d' $\text{Al}_2\text{O}_3$  et 0.7 nm de  $\text{SiO}_2$ , tension des bandes plates de 1 V a également été extraite ainsi que les valeurs des champs électriques dans les deux oxydes donnés par la figure 36.



**Figure 35 :** Caractéristiques  $C(V)$  à 1MHz et 1kHz pour une structure  $\text{NiFe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2/\text{n-Si}$  comparées avec une  $C(V)$  théoriques



**Figure 36 :** le champ électrique en fonction de la polarisation de la grille à travers les deux barrières :  $\text{SiO}_2$  et  $\text{Al}_2\text{O}_3$

Des caractéristiques courant-tension ont été réalisées à basses températures et à température ambiante (80K à 300K). La figure 37-a ne montre pas de dépendance en température ce qui est le signe d'un mécanisme tunnel. De plus, on constate qu'à partir de  $|Vg|=2.5\text{V}$ , il y a un changement de régime de conduction. Il s'agit vraisemblablement d'un mécanisme de conduction de type Fowler-Nordheim : les électrons de la bande de conduction de silicium sont injectés dans la bande de conduction de l'oxyde. Afin de vérifier cette hypothèse, on a tracé  $\ln(J/F_{\text{ox}}^2)$  en fonction de  $1/F_{\text{ox}}$  avec  $F_{\text{ox}}$  le champ électrique dans l'oxyde et  $J$  la densité du courant. C'est le tracé Fowler-Nordheim. Comme le montre la figure 37-b, le tracé donne une droite, ce qui indique un mécanisme Fowler-Nordheim (FN). Ce mécanisme de conduction, qui est un cas particulier de mécanisme tunnel direct à hautes tensions, montre que le transport à travers l'oxyde d'aluminium ne met pas en jeu des défauts dans l'oxyde. Une modélisation complète mettant en

œuvre un modèle tunnel direct à basses tensions et un modèle Fowler-Nordheim a été réalisée. La figure 38 présente la caractéristique courant-tension expérimentale ainsi que la caractéristique théorique. Le modèle tunnel est obtenu avec une masse effective  $m_{Al_2O_3} = 0.23m_e$  [Groner2002] et une hauteur de barrière  $\phi_{Al_2O_3} = 2.4eV$ . Nous constatons que le modèle permet de rendre compte des résultats expérimentaux sur près de cinq ordres de grandeurs pour le courant. On observe toutefois qu'aux très basses tensions, le modèle s'écarte de l'expérience. Cet écart qui ne concerne que de très faibles densités de courant peut être dû à un mécanisme de transport mettant en jeu des états d'interface [Ghetti 2000] non pris en compte par notre modèle.

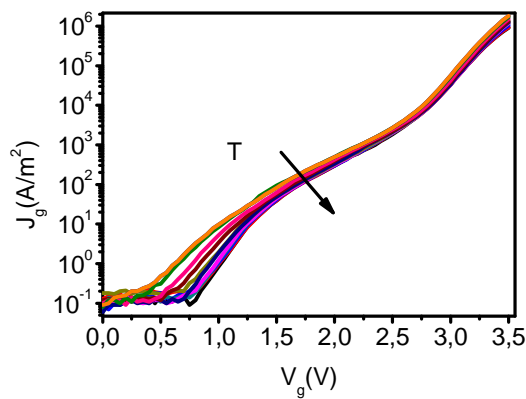


Figure 37-a : Les caractéristiques  $I(V)$  en fonction de la température (80K-300K) pour la structure  $NiFe/Al_2O_3/SiO_2/n-Si$

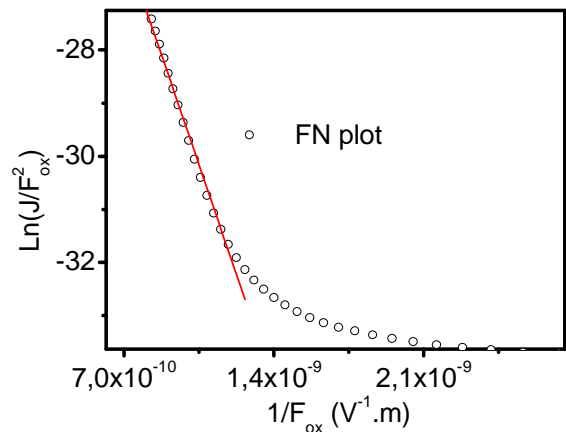


Figure 37-b : Tracé Fowler-Nordheim pour la structure  $NiFe/Al_2O_3/SiO_2/n-Si$

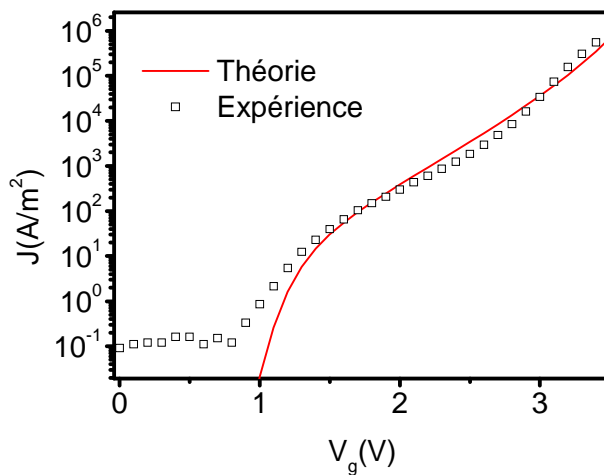


Figure 38 : Caractéristique courant-tension de la structure  $NiFe/Al_2O_3/SiO_2/n-Si$  à  $T=80K$ . Comparaison avec le modèle tunnel direct. Les paramètres du modèle sont :  $m_{Al_2O_3} = 0.23m_e$ ,

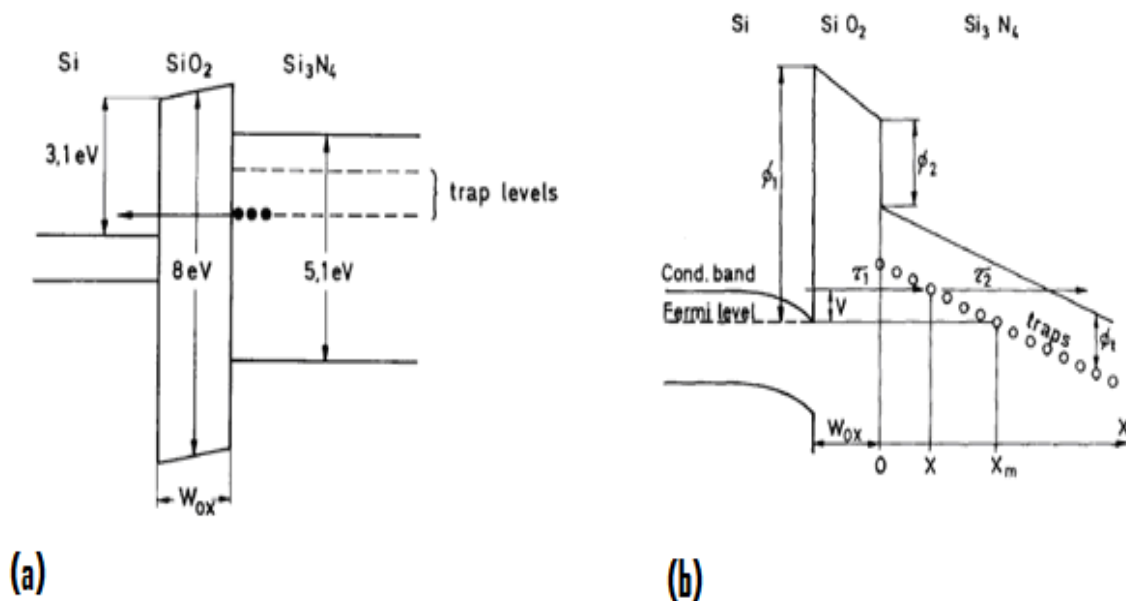
$$\phi_{Al_2O_3} = 2.4eV$$

En conclusion, l'étude des mécanismes de transport dans les structures MIS à grille ferromagnétique montre que la barrière d'alumine conduit à un transport de type tunnel direct alors que le transport à travers la barrière de silice fait intervenir des défauts dans le volume de cette barrière. Une modélisation du transport doit venir étayer le cas de la barrière d'oxyde. C'est l'objet du prochain paragraphe.

## 9. Le mécanisme de conduction tunnel assisté par pièges (TAT):

### 9.1. Etat de l'art :

Dans cette partie, on présente la modélisation du courant tunnel assisté par piège dans la barrière  $\text{SiO}_2$ . La conduction est assurée par des porteurs issus de la bande de conduction des électrodes et assistée par les pièges situés dans la bande interdite de l'oxyde. Ces défauts servent de relais à la conduction. Lundstrom [Lundstrom 1972] et Svensson [Svensson 1973] ont proposé en 1972 et en 1973 un modèle de conduction à partir d'électrodes métalliques assistée par des transitions tunnel via les pièges situés dans l'oxyde. Ils ont utilisé une structure MNOS (métal-nitruure-oxyde- semi-conducteur) dans laquelle les porteurs sont injectés et stockés dans les pièges dans le nitruure. Ces porteurs piégés quittent les pièges par effet tunnel comme le montre la figure (39).

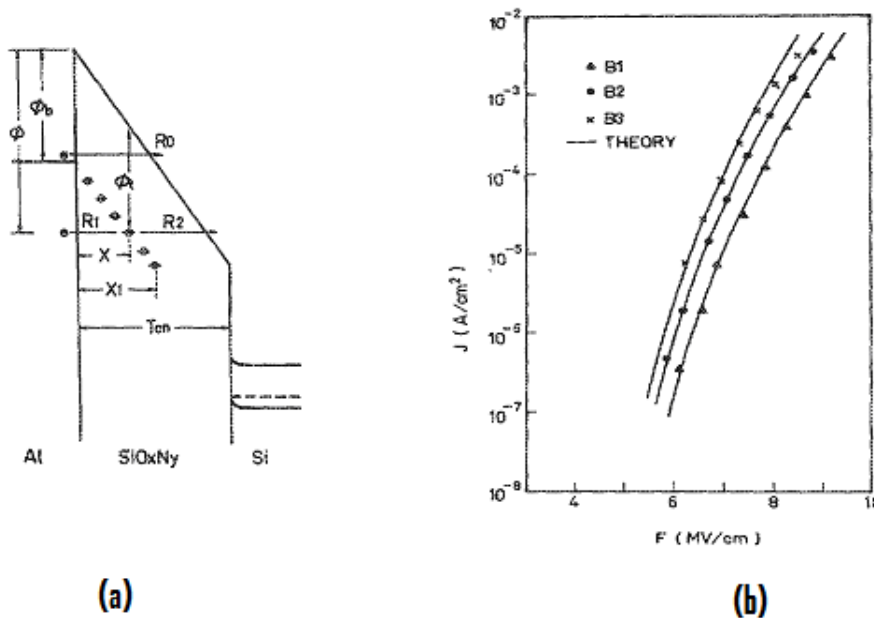


**Figure 39 :** (a) Diagramme de bandes d'une structure MNOS avec des électrons piégés en condition de bandes plates [Lundstrom1972](b) Diagramme de bandes d'une structure MNOS pour l'injection des électrons piégés ( les électrons quittent les pièges par effet tunnel)[Svensson1973]

En fait, les mécanismes d'injection proposés auparavant dans la littérature étaient l'injection Fowler-Nordheim à travers l'oxyde, la conduction par effet Poole Frenkel à travers le nitruure et la conduction tunnel direct vers les états d'interface. Mais Svensson et Lundstrom ont montré que

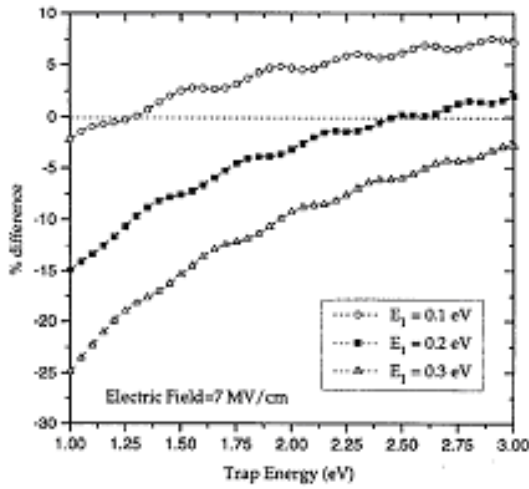
l'injection assistée par des pièges dans l'oxyde et dans le nitrure est très importante dans les systèmes MNOS. Elle est particulièrement importante pour les faibles épaisseurs d'oxyde ce qui conduit à un courant très important. Le modèle qu'ils ont développé concerne un mécanisme Tunnel Assisté par Pièges ou « Trap Assisted Tunneling (TAT) » [Svensson1973] [Lundstrom1972].

Suzuki et al. ont proposé aussi un modèle TAT pour expliquer l'augmentation du courant dans les oxydes nitrurés [Suzuki 1986]. Cheng et al. ont repris le modèle de Svensson en considérant une diode MIS Al/SiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>/Si. Ils ont constaté que le mécanisme Fowler Nordheim ne justifie pas les densités du courant mesurées sur leurs échantillons avec l'oxyde fortement nitruré. Suivant les travaux de Svensson et Lundstrom, ils ont justifié le courant constaté par le mécanisme tunnel assisté par les pièges dans l'oxyde. Ces pièges sont créés dans les oxydes les plus nitrurés et donc peuvent être liés à l'augmentation de nitrogène dans l'oxyde. Leur modèle et les courants expérimentaux sont en assez bon accord comme le montre la figure (40). A partir de cet accord, ils ont extrait une densité des pièges entre  $1.2 \cdot 10^{19}$  et  $7.2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  et un niveau d'énergie des défauts entre 2.46 et 2.56 eV [Cheng1988].

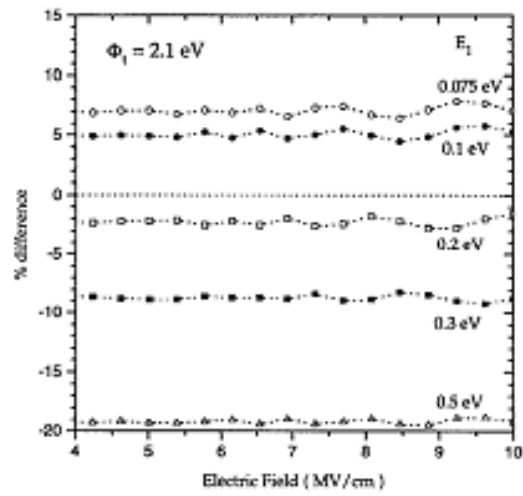


**Figure 40 :**(a) *Diagramme des bandes d'une structure Al/SiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>/Si (R0 est la probabilité Fowler-Nordheim, R1 et R2 les probabilités TAT)* (b) *Tracé densité du courant en fonction du champ électrique B1 :  $\phi_t = 2.55 \text{ eV}, N_t = 2.25 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , B2 :  $\phi_t = 2.53 \text{ eV}, N_t = 6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , B3 :  $\phi_t = 2.5 \text{ eV}, N_t = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$*

Fleischer et al [Fleischer1992] ont proposé un modèle simplifié dans lequel ils n'ont pas eu besoin de faire des calculs numériques des intégrales dans l'expression du courant tunnel assisté par pièges donnée par Cheng et al [Cheng1988]. Avec les approximations faites, ils ont obtenu une expression plus simple avec moins de 2% d'écart comparé au modèle de Cheng (figure 41).



(a)



(b)

**Figure 41 : Tracé de Pourcentage de différence entre le modèle simplifié de Fleischer et al et modèle non simplifié de Cheng et al (a) en fonction de l'énergie du piège (b) en fonction de champ électrique [Fleischer1992]**

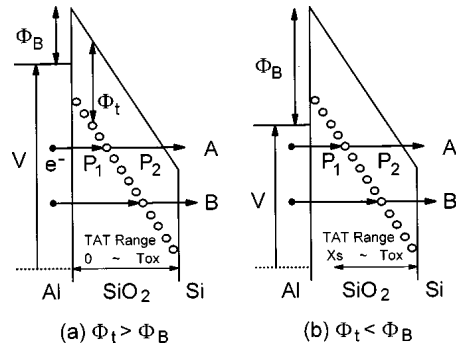
A travers leur modèle simplifié, ils ont pu déterminer directement les paramètres caractéristiques des pièges : la densité des pièges et leurs énergies [Fleischer 1993]. Les modèles TAT développés par Cheng et Fleischer sont basés sur le passage tunnel des électrons à travers une barrière triangulaire [Cheng1988] [Fleischer1992] [Fleischer 1993]. Ces modèles ne décrivent donc qu'une partie de la caractéristique I(V) c'est-à-dire pour les champs électriques d'environ 6-8 MV/cm. Alors Houng et al ont proposé en 1999 un modèle tunnel assisté par pièges généralisé (GTAT) [Houng 1999]. Dans ce modèle, une barrière trapézoïdale est considérée au lieu de la barrière triangulaire considérée par Cheng et Fleischer. En effet, ils ont suivi le modèle de Cheng mais en considérant aussi les contributions au courant à faibles champs électriques à travers la barrière trapézoïdale.

La figure (42) présente le diagramme d'énergie des bandes considéré dans le modèle GTAT. Deux cas se présentent :

- lorsque  $\phi_t > \phi_B$  (figure 42-a) : les pièges existent à des niveaux peu profonds. Quand le potentiel appliqué est suffisamment fort, les électrons passent soit par effet tunnel Fowler-Nordheim à travers une barrière triangulaire (processus A) soit par effet tunnel direct à travers une barrière trapézoïdale (processus B).
- lorsque  $\phi_t < \phi_B$  (figure 42-b) : les pièges existent à des niveaux profonds. Les électrons rencontrent aussi soit une barrière triangulaire (processus A) soit une barrière trapézoïdale (processus B).

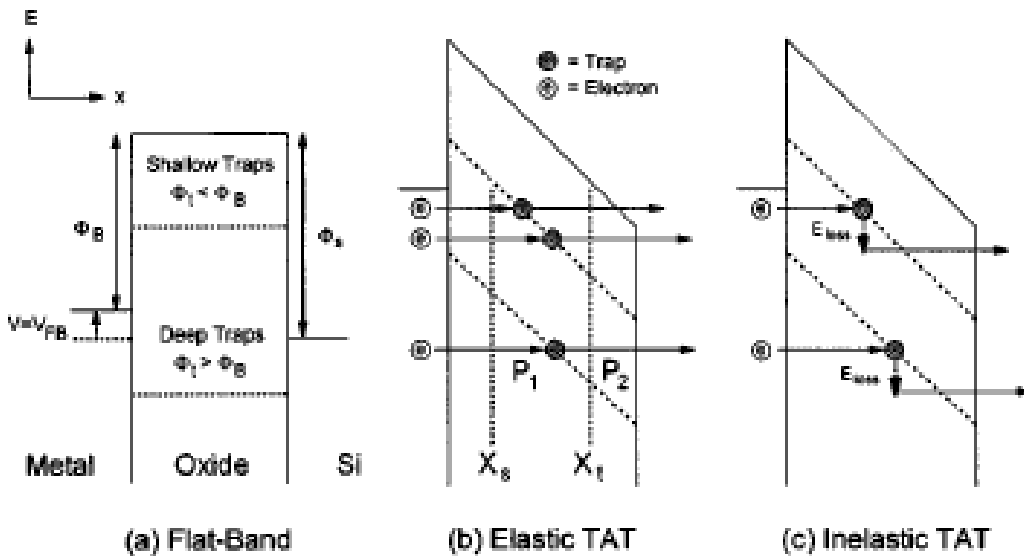
$\phi_t$  étant la profondeur énergétique du piège depuis la bande de conduction de l'oxyde et  $\phi_B$  la hauteur de la barrière de l'électrode injectrice.





**Figure 42 : Schéma de diagramme de bande pour une structure Al/SiO<sub>2</sub>/Si (a)  $\phi_t > \phi_B$  (b)  $\phi_t < \phi_B$**

Ce modèle généralisé prend donc en compte tous les cas possibles du mécanisme tunnel assisté par les pièges. Tous les modèles précédents sont des modèles élastiques donc ne prennent pas en considération les pertes d'énergie lors du passage tunnel à travers les pièges. En effet, lors d'une transition élastique, la charge piégée est instantanément réémise avec son énergie d'incidence (donc sans perte). Alors que, lors d'une transition inélastique, la charge est instantanément thermalisée dans le piège puis réémise avec l'énergie qui correspond à celle du fond du piège. La figure 43 illustre les diagrammes de bande proposés par Chang et al pour leur modèle TAT généralisé qui tient compte des pertes en énergie [Chang 2001]. Plusieurs auteurs se sont intéressés aussi au modèle TAT inélastique comme Takagi [Takagi1999], Rosebaum et Register [Rosenbaum1997], Sakakibara [Sakakibara1997], Endoh [Endoh1999].



**Figure 43 : Schéma de diagramme de bandes proposé pour le modèle TAT (a) régime de bandes plates (b) TAT élastique (la perte en énergie  $E_{loss}$  est nulle) (c) TAT inélastique (la perte en énergie  $E_{loss}$  est supposé constante)**

En effet la prise en compte de la perte d'énergie consiste à modifier quelques paramètres dans le modèle élastique comme la transparence afin de tenir compte de la perte d'énergie de la charge considérée lors de la thermalisation de celle-ci sur le piège. Dans notre travail, on a adopté le modèle élastique.

## 9.2. Mise en équation du modèle :

Afin de modéliser le mécanisme tunnel assisté par pièges, les différents paramètres utilisés dans le modèle tunnel direct doivent être réécrites en tenant compte de la présence de défauts dans l'oxyde. En effet, on peut assimiler le TAT comme un mécanisme tunnel direct en deux étapes qui passent par un piège. Ce modèle décrit les structures à une seule couche de barrière. Il est adapté au cas de la barrière de SiO<sub>2</sub>.

### 9.2.1. La transparence tunnel :

La présence du défaut dans l'oxyde va modifier la transparence de la barrière. Les charges qui passent à travers le défaut sont concernées par le mécanisme TAT. En effet, les charges peuvent passer soit par TAT à travers les pièges soit par autre mécanisme comme le tunnel direct (voir figure 44-a). Soit  $N_t$  le nombre des pièges dans l'oxyde. Soit  $\rho$  le paramètre correspondant à la proportion de surface influencée par les pièges donné par l'expression suivante :

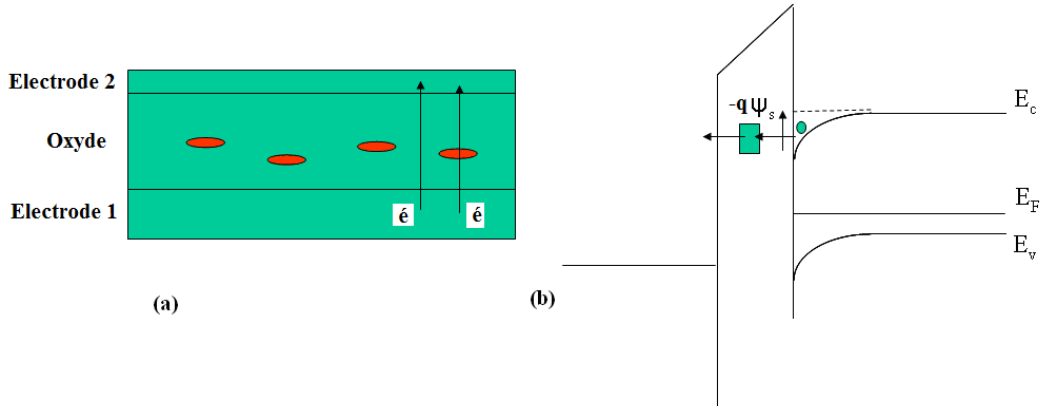
$$\rho = \frac{N_t \cdot \sigma}{S} \quad (109)$$

Avec  $\sigma$  la section du capture d'un piège et  $S$  la surface totale.

Le mécanisme TAT s'effectue en deux étapes (figure 44-b):

- étape 1 : injection des porteurs de l'électrode émettrice vers le piège
- étape 2 : injection des porteurs à partir du piège vers l'électrode réceptrice

Ces étapes s'effectuent soit par un mécanisme tunnel direct soit par un mécanisme Fowler-Nordheim suivant les valeurs des différents paramètres comme la section efficace de piège, la distribution énergétique des pièges, la position du piège dans l'oxyde, l'énergie de l'électron, la forme de la barrière etc...



**Figure 44 : (a) Schéma illustrant le passage des électrons par les mécanismes TD ou TAT (b) Schéma illustrant le mécanisme de transport à travers une structure MIS en présence d'un piège**

Afin de modéliser le mécanisme TAT, on définit les grandeurs nécessaires suivantes :

- $T_1, T_2$  : les transparences tunnel de la barrière pour l'injection depuis la 1<sup>ère</sup> électrode vers le piège et du piège vers la 2<sup>ème</sup> électrode.
- $f$  : la probabilité d'occupation d'un piège par un électron
- $N_t$  : le nombre des pièges
- $f_1$  : la probabilité d'occupation du niveau d'énergie  $E$  dans l'électrode émettrice
- $f_2$  : la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie  $E$  dans l'électrode réceptrice

Le nombre des pièges occupés est donné par  $f.N_t$  et les pièges non occupés est  $(1-f.N_t)$ . Soient  $\xi_1$  et  $\xi_2$  les probabilités de transition des charges entrantes et sortantes à travers les pièges respectivement. Elles sont définies par :

$$\xi_1 = f_1 T_1 (1 - f) \quad (110)$$

$$\xi_2 = f T_2 (1 - f_2) \quad (111)$$

En considérant que l'électrode émettrice est un réservoir de charges disponibles pour être injectées et que l'électrode réceptrice est un réservoir d'états non occupés, on aura :

$$f_1 \approx 1 \text{ Et } f_2 \approx 0 \quad (112)$$

Donc les probabilités de transition deviennent :

$$\xi_1 \approx T_1 (1 - f) \quad (113)$$

$$\xi_2 \approx f T_2 \quad (114)$$

La différence des probabilités des transitions définit la variation d'occupation d'un piège en fonction de temps :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \xi_1 - \xi_2 \approx T_1 (1 - f) - f T_2 \quad (115)$$

Si on suppose qu'il n'y a pas de génération de pièges durant les mesures et que le TAT est de type élastique, on peut écrire en régime stationnaire :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \Rightarrow T_1(1-f) - fT_2 = 0 \quad (116)$$

$$\Leftrightarrow f = \frac{T_1}{T_1 + T_2}$$

D'après ce résultat, on peut dire que les probabilités des transitions sont égales et donc la probabilité totale en régime stationnaire est donnée par :

$$\zeta = \zeta_1 = \zeta_2 = \frac{T_1 T_2}{T_1 + T_2} \quad (117)$$

### 9.2.2. Calcul du courant :

Dans l'oxyde, le piège est considéré comme un continuum de niveaux d'énergie sur toute la hauteur du puits de potentiel qu'induit ce piège et sur une surface correspondant à sa section de capture. Ce piège est défini par différents paramètres influençant directement le courant tunnel assisté par pièges. Ces paramètres sont: la section efficace de capture  $\sigma_t$ , la profondeur énergétique  $\phi_t$ , la localisation spatiale dans un plan de l'oxyde noté  $X_t$ . Les pièges existant dans la même couche d'oxyde peuvent être ou pas de même nature ou pas. En effet, les pièges qui ne sont pas de la même nature n'ont ni la même profondeur énergétique ni la même localisation spatiale dans l'oxyde.

#### 9.2.2.1. La transparence de la barrière :

Le calcul du courant total à travers la barrière en présence d'un défaut va tenir compte du mécanisme TAT et du mécanisme tunnel direct (cf. figure (44)). Pour cela, la transparence de la barrière sera généralisée pour tous les cas des figures en fonction de la forme de la barrière vue par les porteurs injectés, de l'énergie et de la localisation spatiale du piège, de l'énergie des porteurs (figure 45),... Plusieurs cas des figures doivent être envisagés (cf. figure (45)) :

1) Pour  $\phi_B - q.F_{ox}.x_t \leq E < \phi_B$

La barrière est triangulaire, l'injection est de type Fowler Nordheim, d'où  $T = T_{FN}$  (118)

2) Pour  $\phi_B - q.F_{ox}.T_{ox} \leq E < \phi_B - q.F_{ox}.x_t$

L'injection est assurée via un piège, les porteurs voient une barrière trapézoïdale durant l'étape 1 (tunnel direct) de l'injection suivie par une barrière triangulaire (Fowler Nordheim). Dans ce cas la transparence est donnée par :

$$T_{TAT} = \frac{T_{TD1}.T_{FN2}}{T_{TD1} + T_{FN2}} \quad (119)$$

3) Pour  $\phi_t \leq E < \phi_B - q.F_{ox}.T_{ox}$

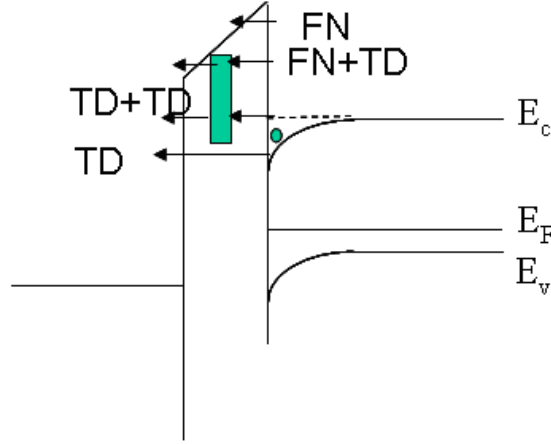
L'injection est assurée via un piège, les porteurs voient une barrière trapézoïdale durant l'étape 1 (tunnel direct) de l'injection suivie par une deuxième barrière trapézoïdale (tunnel direct). La transparence sera donnée par :

$$T_{TAT} = \frac{T_{TD1}.T_{TD2}}{T_{TD1} + T_{TD2}} \quad (120)$$

4) Pour  $0 \leq E < \phi_i$

La barrière est trapézoïdale, l'injection est assurée par un mécanisme tunnel direct et nous aurons donc :

$$T = T_{TD} \quad (121)$$



**Figure 45 : Schéma illustrant les différents mécanismes d'injection à travers la barrière en présence d'un défaut**

Les transparences sont calculées dans le cadre de l'approximation WKB (similaires à celles données dans le modèle tunnel direct) décrivant les deux étapes du passage à travers l'oxyde en passant par le piège qui se trouve à une distance  $X_i$  de l'interface. Dans le cas où l'électron ne passe pas par le défaut, on aura les mêmes expressions de transparence du modèle tunnel direct (les équations 125 et 126).

$$T_{TD1}(E, F, X_i) = \exp\left(\frac{-2}{\hbar} \int_0^{X_i} \sqrt{2m_{ox}((\phi_b - qFx) - E)} dx\right) \quad (122)$$

$$T_{TD2}(E, F, X_i) = \exp\left(\frac{-2}{\hbar} \int_{X_i}^{T_{ox}} \sqrt{2m_{ox}((\phi_b - qFx) - E)} dx\right) \quad (123)$$

$$T_{FN2}(E, F) = \exp\left(\frac{-2}{\hbar} \int_{X_i}^b \sqrt{2m_{ox}((\phi_b - qFx) - E)} dx\right) \quad (124)$$

$$T_{FN}(E, F) = \exp\left(\frac{-2}{\hbar} \int_0^b \sqrt{2m_{ox}((\phi_b - qFx) - E)} dx\right) \quad (125)$$

$$T_{TD}(E, F) = \exp\left(\frac{-2}{\hbar} \int_0^{T_{ox}} \sqrt{2m_{ox}((\phi_b - qFx) - E)} dx\right) \quad (126)$$

Avec  $b$  l'abscisse à partir duquel on a une injection Fowler-Nordheim. La grandeur  $b$  est donnée par l'expression :

$b = \frac{\phi_B - E}{q.F}$  avec  $F$  le champ électrique dans l'oxyde,  $E$  l'énergie de l'électron,  $\phi_B$  la hauteur de la barrière.

### 9.2.2.2. 1<sup>er</sup> cas : pièges de même nature :

Commençons par le cas le plus simple : tous les pièges ont la même section de capture, la même profondeur énergétique et sont localisés sur le même plan dans l'oxyde. Par analogie avec l'expression de la densité du courant tunnel donnée par l'équation (89), la densité du courant tunnel assisté par un seul piège s'écrit de la même façon mais en remplaçant la transparence tunnel par la transparence  $T_{gen}$  présentée précédemment.

$$J = \frac{4\pi k T q m}{h^3} \int_{E_c}^{\infty} T_{gen}(E_x) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{F1} - E_x}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{F2} - E_x}{kT}\right)} \right) dE_x \quad (127)$$

Soit  $N_t$  le nombre total des pièges qui existent dans l'oxyde de surface  $S$ . le facteur  $N_t \cdot \sigma_t$  représente donc la surface équivalente au mécanisme assisté par pièges. Le courant TAT sera donc donné par :

$$I_{TAT} = J \cdot N_t \cdot \sigma_t = \frac{4\pi k T q m}{h^3} \int_{E_c}^{\infty} N_t \cdot \sigma_t T_{gen}(E_x) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{F1} - E_x}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{F2} - E_x}{kT}\right)} \right) dE_x \quad (128)$$

Afin de calculer la densité totale du courant, on doit prendre compte le courant assisté par pièges et le courant tunnel direct. Cela revient à définir  $\rho = \frac{N_t \cdot \sigma_t}{S}$  comme la proportion de surface mettant en jeu les pièges. Le courant total  $J_{tot}$  aura donc l'expression suivante :

$$J_{tot} = \frac{I_{tot}}{S} = \rho \cdot J_{TAT} + (1 - \rho) \cdot J_{TD} \quad (129)$$

### 9.2.2.3. 2<sup>ème</sup> cas : pièges de nature différente :

Ce cas de figure peut correspondre aux pièges qui ne sont pas répartis uniformément dans l'oxyde et qui ont une distribution non uniforme des niveaux énergétiques dans les puits de potentiel associés. Il est donc nécessaire d'introduire un profil spatial de pièges dans l'oxyde et une répartition énergétique de niveaux d'énergie dans le puits de potentiel. Le calcul du courant suit le même raisonnement que le premier cas mais en introduisant de nouveaux paramètres.

#### 9.2.2.3.1. Profil spatial des pièges :

Soit  $fct_{t0}(x)$  la fonction donnant le profil de défauts en fonction de la profondeur dans l'oxyde,  $x$ . Elle s'exprime en  $m^{-1}$ . Cette densité correspond au nombre de défauts présents entre les deux plans d'abscisses  $x$  et  $x+dx$  de sorte que :

$$N_t = \int_0^{T_{ox}} fct_{t0}(x) dx \quad (130)$$

En tenant compte de ce profil et donc en remplaçant  $N_t$  par son expression dans l'équation (128), le courant TAT sera :

$$I_{TAT} = \frac{4\pi k T q m}{h^3} \int_0^{T_{ox}} \sigma_t \cdot fct_{t_0}(x) \cdot \int_{E_c}^{\infty} T_{gen}(E_x, x) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{F1} - E_x}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{F2} - E_x}{kT}\right)} \right) dE dx \quad (131)$$

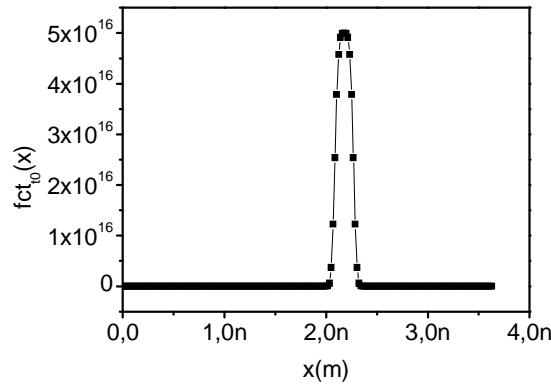
La densité du courant total est toujours donnée par la même expression (129) mais dans ce cas le paramètre  $\rho$  devient :

$$\rho = \frac{\sigma_t \cdot N_t}{S} = \frac{\sigma_t}{S} \cdot \int_0^{T_{ox}} fct_{t_0}(x) dx \quad (132)$$

Dans notre modèle, nous considérons une distribution spatiale des pièges de type gaussien :

$$fct_{t_0}(x) = N_{t_{max}} \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_0)^4}{\Delta x_0^4}\right) \quad (133)$$

Où  $N_{t_{max}}$  est la valeur maximale en  $m^{-1}$ ,  $x_0$  est l'abscisse du maximum et  $\Delta x_0$  est la largeur de la distribution à  $\frac{N_{t_{max}}}{e}$ .  $x_0$  représente la position spatiale du piège, notée d'habitude  $X_t$ . La figure (46) présente un exemple d'une distribution avec  $x_0 = 0.6.T_{ox} = 2.178nm$ ,  $\Delta x_0 = 0.1nm$ ,  $N_{t_{max}} = 5.10^{16} m^{-1}$  :



**Figure 46 : Un exemple d'une distribution gaussienne présentant le profil spatial des pièges dans l'oxyde. Les paramètres de cette gaussienne sont :**

$$x_0 = 0.6.T_{ox} = 2.178nm, \Delta x_0 = 0.1nm, N_{t_{max}} = 5.10^{16} m^{-1}$$

### 9.2.2.3.2. Profil énergétique dans les pièges :

On considère que les pièges ont une distribution énergétique non uniforme. Soit  $fct_E(E)$  la fonction de densité de probabilité de transmission des charges en fonction de l'énergie. Elle exprime la probabilité qu'un porteur d'énergie  $E$  passe par un piège qui forme un puits de potentiel. L'expression du courant est donc modifiée et s'écrit sous la forme :

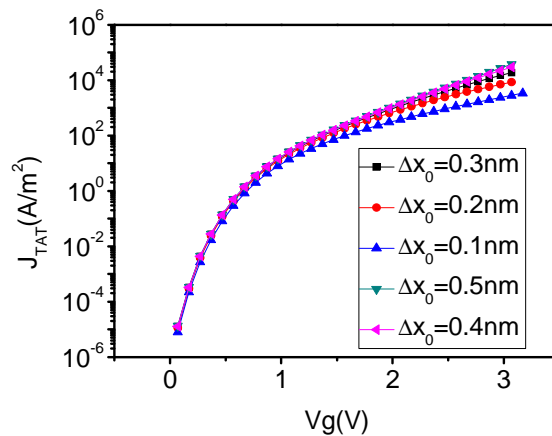
$$I_{TAT} = \frac{4\pi k T q m}{h^3} \int_0^{T_{ox}} \sigma_t \cdot fct_{t0}(x) \cdot \int_{E_c}^{\infty} fct_E(E) \cdot T_{gen}(E_x, x) \ln \left( \frac{1 + \exp\left(\frac{E_{F1} - E_x}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{F2} - E_x}{kT}\right)} \right) dE dx \quad (134)$$

### 9.3. Expression théorique du courant tunnel assisté par pièges:

Ce paragraphe a pour objectif de montrer l'influence des différents paramètres du mécanisme TAT sur l'expression finale du courant. Ces paramètres sont la position de pièges dans l'oxyde,  $X_t$ , leur distribution spatiale,  $\Delta x_0$ , leur densité maximale  $N_{tmax}$  ainsi que leur position énergétique.

- Effet de  $\Delta x_0$ :

La figure (47) présente la densité du courant en fonction de la tension  $V_g$  appliquée à la grille pour différentes valeurs de  $\Delta x_0$ . Le profil spatial des pièges est centré dans l'oxyde autour de la valeur  $X_t=0.5T_{ox}$ . Comme on peut le constater, l'augmentation de  $\Delta x_0$  conduit à une augmentation du courant. Ce résultat peut être expliqué par le fait que l'augmentation du paramètre  $\Delta x_0$  de la gaussienne correspond à l'augmentation du nombre total des pièges ce qui augmente le courant assisté par ces mêmes pièges.

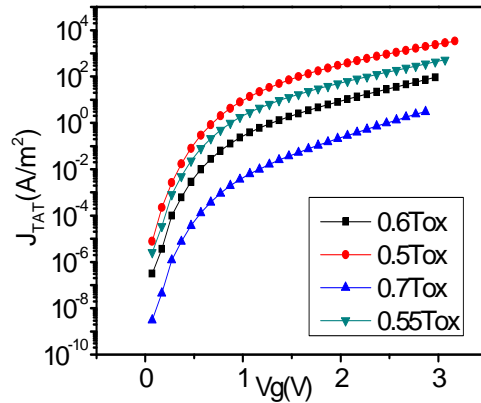


**Figure 47: Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation  $V_g$ . Etude de l'effet de la distribution spatiale des pièges  $\Delta x_0$  sur le courant.**

- Effet de  $X_t$ :

La figure (48) présente l'effet de la position du piège  $X_t$  sur le courant. Soit le point de départ de comparaison la position initiale  $X_t=0.5T_{ox}$ . On remarque qu'en augmentant  $X_t$ , le courant diminue. En effet, en augmentant  $X_t$ , on éloigne progressivement les pièges de l'électrode émettrice, et la transparence de l'étape 1 du processus (injection des porteurs de l'électrode émettrice  $\rightarrow$  piège) devient limitante d'où une diminution du courant.

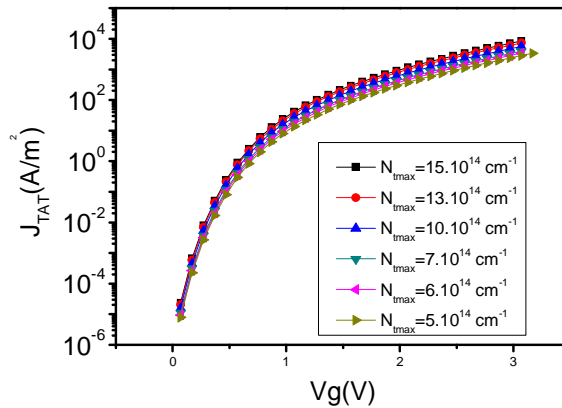




**Figure 48 : Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation  $V_g$ . Etude de l'effet de  $X_t$  sur le courant pour  $X_t > 0.5T_{ox}$**

**- Effet de  $N_{tmax}$  :**

La figure (49) montre l'effet de la densité maximum des pièges  $N_{tmax}$  sur le courant TAT. En augmentant  $N_{tmax}$ , le courant augmente. En effet, l'augmentation de  $N_{tmax}$  signifie l'augmentation du nombre total des pièges ce qui conduit à l'augmentation du courant assisté par ces pièges.



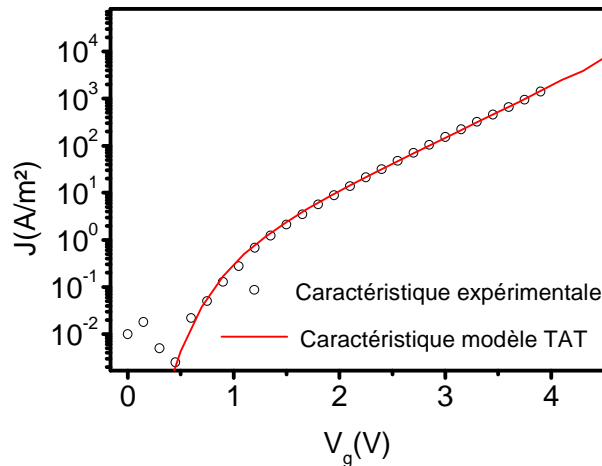
**Figure 49 : Caractéristiques théoriques de la densité du courant TAT en fonction de la polarisation  $V_g$ . Etude de l'effet de  $N_{tmax}$ .**

**9.4. Comparaison modèle TAT- résultats expérimentaux de la structure FM/SiO2/Silicium :**

Comme nous l'avons déjà mentionné, les courant-tension (I-V) des structures à barrières tunnel en SiO<sub>2</sub> ne peuvent pas être modélisées par un mécanisme tunnel direct. En effet, les caractéristiques expérimentales donnent des densités de courant nettement plus grandes que celles prévues par le modèle tunnel direct (cf. figure (31)). C'est la raison pour laquelle un modèle de type TAT a été envisagé. En effet, la transparence dans le modèle TAT est plus grande que celle

du mécanisme tunnel direct, ce qui peut expliquer les densités de courant élevées observées expérimentalement.

La figure (50) présente une comparaison entre une caractéristique courant-tension expérimentale d'une structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/Si et une caractéristique théorique tirée du modèle TAT. Cette dernière a été calculée avec les paramètres suivants :  $x_t=0.46T_{ox}$  (position spatiale du piège) et  $E_c$  (oxide)- $E_t = 3eV$  (la position énergétique du piège par rapport à la bande de conduction de l'oxyde). Nous constatons un très bon accord entre caractéristiques théorique et expérimentale.



**Figure 50 : Caractéristique courant-tension de la structure NiFe/SiO<sub>2</sub> (4nm)/p-Si. Comparaison avec caractéristique théorique tirée du modèle TAT et calculée avec les paramètres :  $x_t=0.46T_{ox}$ ,  $E_c$  (oxide)- $E_t = 3eV$**

En conclusion, ce résultat montre que le transport à travers la barrière tunnel SiO<sub>2</sub> est de type tunnel assisté par pièges dans l'oxyde. Ce résultat concerne l'injection d'électrons du silicium vers le métal ferromagnétique. Nous avons montré que dans le cas du transport métal ferromagnétique vers le silicium, le modèle permet également de rendre compte des résultats expérimentaux.

## VI. Conclusion :

L'objet de ce chapitre était l'étude des mécanismes de transport à travers les oxydes minces (~7nm) et ultra minces (~4nm) dans les structures ferromagnétique/isolant/semi-conducteur. A travers ce chapitre, nous avons comparé les résultats obtenus pour deux oxydes : le SiO<sub>2</sub> et l'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. A travers l'étude de la conduction à travers l'oxyde de silicium mince, on a pu montrer que la grille joue un rôle important. En effet, avec la grille en aluminium le mécanisme de transport est le Fowler-Nordheim alors qu'avec la grille ferromagnétique un mécanisme via les défauts dans l'oxyde (le Poole Frenkel) a été obtenu. Cela montre que les métaux ferromagnétiques entraînent des défauts dans l'oxyde qui servent comme des relais pour la conduction. L'existence de défauts dans le volume de l'oxyde de silicium dans les structures à grilles ferromagnétiques et le rôle de ces défauts dans les mécanismes de transport à travers l'oxyde se sont également manifestés dans le cas des oxydes de silicium ultra minces. Nous

avons montré que le transport dans ces structures passe par un mécanisme tunnel assisté par pièges dans l'oxyde. En revanche, dans le cas des barrières tunnels en alumine, l'analyse des propriétés de transport a mis en évidence un mécanisme de type tunnel direct. Ce résultat suggère l'absence des défauts au sein de l'oxyde d'aluminium. Ce dernier semble se comporter comme barrière à la diffusion d'atomes ferromagnétiques provenant de la grille.

Référence:

[Ando1982]: T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, **Electronic properties of two-dimensional systems**, Rev. Modern Phys, Vol (54), 1982, pp. 437-621

[Ando 1987]: Y. Ando, I. Tomohiro, **Calculation of transmission tunnelling current across arbitrary potential barriers**, J. Appl. Phys, Vol (61), 1987, pp.1497-1502

[Baccarani 1983]: G. Baccarani, M. R. Wordeman, **Transconductance degradation in Thin-Oxide MOSFET's**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol (10), 1983, pp.1295-1304

[Bardeen 1961]: J. Bardeen, **Tunnelling from a many-particle point of view**, Phys. Rev. Lett, Vol (6), 1961, pp. 57-59

[Benabderrahmane 2007] : R. Benabderrahmane, M.Kanoun N. Bruyant , C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, **Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Tunnel Barrier as a Good Candidate for Coherent Spin Injection into Silicon** , MRS Fall Meeting, Boston 2007

[Bowen 1997] : C. Bowen, C. L. Fernando, G. Klimeck, A. Chatterjee, D. Blanks, R. Lake, J. Hu, J. Davis, S. Hattangady, et I-C. Chen, **Physical oxide thickness extraction and verification using Quantum Mechanical simulation**, IEDM'97, 1997, pp. 869-872.

[Cheng 1988] : X. R. Cheng, Y. C. Cheng, B. Y. Liu, **Nitridation- enhanced conductivity behaviour and current transport mechanism in thermally nitrided SiO<sub>2</sub>**, J. Appl. Phys, Vol (63), 1988, pp.797-802

[Chang 2001]: W.J. Chang, M.P. Houn, Y.H. Wang, **Simulation of stress-induced leakage current in silicon dioxides: A modified trap assisted tunnelling model considering Gaussian-distributed traps and electron energy loss**, J. Appl. Phys, Vol (89), 2001, pp.6285-6293

[Clerc thèse 2001] : R. Clerc, **Etude des effets quantiques dans les composants CMOS a oxydes de grille ultra minces - modélisation et caractérisation**, Thèse de doctorat, INP Grenoble, 14 novembre 2001

[Clerc 2001] : R. Clerc, P. O'Sullivan, K.G.McCarthy, G.Ghibardo, G.Pananakakis, A.Mathewson, **A physical compact model for direct tunneling from NMOS inversion layers** , Solid-State Electronics, Vol (45), 2001, pp.1705-1716

[DeSalvo 1999]: B. DeSalvo, G. Ghibardo, G. Pananakakis, B. Guillaumot, G. Reibold, **Study of Stress Induced Leakage Current by using high resolution measurements**, **Microelectronics Reliability**, Vol (39),1999, pp.797-802

[Duluard thèse\_2007] : C. Duluard, **Etude de la faisabilité des mémoires magnétiques intégrées sur silicium**, Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, 2007

[Endoh 1999]: T. Endoh, T. Chiba, H. Sakuraba, M. Lenski, F. Masuoka, **A quantitative analysis of stress-induced leakage currents and extraction of traps properties in 6.8nm ultra thin silicon dioxide films**, J. Appl. Phys, Vol (86) , 1999, pp.2095-2099

[Fleisher 1992]: S. Fleisher, P. T. Lai, Y. C. Cheng, **Simplified closed-form trap-assisted tunnelling model applied to nitrided oxide dielectric capacitors**, J. Appl. Phys, Vol (72), 1992, pp.5711-5715

[Fleischer 1993] : S. Fleisher, P. T. Lai, Y. C. Cheng, **A new method for extracting the trap energy in insulators**, J. Appl. Phys, Vol (73), 1993, pp.3348-3351

[Fleischer 93] : S. Fleisher, P. T. Lai, Y. C. Cheng, **Trap-assisted conduction in nitrided-oxide and re-oxidized nitrided-oxide n-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors**, J. Appl. Phys, Vol (73), 1993, pp.8353-8357

[Garros 2004] : X. Garros, **Caractérisation et modélisation de l'oxyde d'Hafnium comme alternative à la silice pour les futures technologies CMOS submicroniques**, Thèse de doctorat, Université de Provence, 24 Février 2004

[Ghetti 2000]: A. Ghetti, Tunneling into Interface States as Reliability Monitor for Ultrathin Oxides, IEEE Trans. Elec. Dev., Vol (447), 2000, pp.2358-2365

[Ghetti 2001]: A. Ghetti, **Characterization and modelling of the tunnelling current in Si-SiO<sub>2</sub>-Si structures with ultra thin oxide layer**, Microelectronic Engineering, Vol (59), 2001, pp. 127-136

[Groner 2002]: M.D. Groner, J.W. Elam, F.H. Fabreguette, S.M. George, **Electrical characterisation of thin Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films grown by atomic layer deposition on silicon and various metal substrates**, Thin Solid Films, Vol (413), 2002, pp. 186-197

[Houssa 1999]: M. Houssa, R. Degraeve, P. W. Mertens, M. M. Heyns, J. S. Jeon, A. Halliyal, B. Ogle, **Electrical properties of thin SiON/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> gate dielectric stacks**, J. Appl. Phys., Vol (86), 1999, pp.6462-6467

[Hareland 1996]: S. A. Hareland, S. Krishnamurthy, S. Jallepalli, C.-F. Yeap, K. Hasnat, A. F. Tasch Jr., C. M. Maziar, **A computationally efficient model for inversion layer quantization effects in deep submicron N-channel MOSFET's**, IEEE Trans. Elec. Dev., Vol (43),1996, pp.90-96

[Houng 1999]: M.P. Houng, Y.H. Wang, W.J. Chang, **Current transport mechanism in trapped oxides: a generalized trap-assisted tunnelling model**, J. Appl. Phys, Vol (86), 1999, pp.1488-1491

[Kanoun thèse\_2004] : M. Kanoun, **Caractérisation électrique des structures MOS à nano cristaux de Ge pour des applications mémoires non volatiles**, Thèse de doctorat, Institut National de Sciences Appliquées de Lyon, 9 novembre 2004

- [Kanoun 2007]: M. Kanoun, R. Benabderrahmane, C.Duluard, C.Baraduc, N.Bruyant, H.Achard, A.Bsiesy, **Electrical study of ferromagnet-oxide-semiconductor diode for a magnetic memory device integrated on silicon**, Appl. Phys. Lett, Vol (90), 2007, pp.192508-1-192508-3
- [Leroux 2004] : C. Leroux, P. Mur, N. Rochat, D. Rouchon, R. Truche, G. Reibold, G. Ghibaudo, **Characterization and modeling of nanometric SiO<sub>2</sub> dielectrics**, Microelectronic Engineering, Vol (72),2004, pp. 121-124
- [Lenzlinger 1969]: M. Lenzlinger, E. H. Snow, **Fowler-Nordheim Tunneling into thermally Grown SiO<sub>2</sub>**, J. Appl. Phys., Vol (40), 1969, pp.278-283
- [Lundstrom1972]: I. Lundstrom, C. Svensson, **Tunnelling to traps in insulators**, J. Appl. Phys, Vol (43), 1972, pp. 5045-5047
- [Magnus 1988]: W. Magnus, C. Sala, K. De Meyer, **Quantized energy levels in Si inversion layers: A simplified self-consistent approach**, J. Appl. Phys, Vol (63), 1988, pp.2704-2710
- [Mathieu 1998] :H. Mathieu, **Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques**, MASSON, Paris, 4<sup>ème</sup> édition, 1998
- [Momose 1996]: H. S. Momose, M. Ono, T. Yoshitomi, T. Ohguro, S.-I. Nakamura, M. Saito, H. Iwai, **“1.5 nm direct-tunneling gate oxide Si MOSFET’s”** , IEEE Trans. Elec. Dev., Vol (43), 1996, pp. 1233-1242.
- [Mudanai 2000] : S. Mudanai, Y-Y. Fan, Q. Ouyang, Al. F. Tasch, et S. K. Banerjee, **“Modeling of direct tunneling current through gate dielectric stacks”**, IEEE Trans. Elec. Dev., Vol (47), 2000, pp. 1851-1857.
- [Mueller 1997]: H. H. Mueller, M. J. Schulz, **“Simplified method to calculate the band bending and the sub band energies in MOS capacitors”**, IEEE Trans.Elec. Dev., Vol (44), 1997, pp. 1539-1543
- [Rana 1996]: F. Rana, S. Tiwari, D. A. Buchanan, **Self-consistent modelling of accumulation layers and tunneling currents through very thin oxides**, Appl. Phys. Lett, Vol (69), 2007, pp.1104-1106
- [Register 1999]: LF. Register, E.Rosenbaum, K.Yang, **Analytic model for direct tunneling current in polycrystalline silicon-gate metal-oxide-semiconductor devices**, Appl. Phys. Lett, Vol (74), 1999, pp.457-459
- [Rosenbaum1997]: E. Rosenbaum, L. Register, **Mechanism of Stress-Induced Leakage Current in MOS Capacitors**, IEEE Trans. Elec. Dev, Vol (44), 1997, pp.317- 323
- [Sakakibara1997]: K. Sakakibara, N. Ajika, K. Eikyu, K. Ishikawa, H. Miyoshi, **A Quantitative Analysis of Time-Decay Reproducible Stress-Induced Leakage Current in SiO<sub>2</sub> Films**, IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 44 n°6, 1997, pp 1002-1008

[Suzuki 1986]: E. Suzuki, D. K. Schroder, Y. Hayashi, **Carrier conduction in nitrated oxide films**, Journal of Applied Physics, Vol. 60 n°10, 1986, pp.3616-3621

[Svensson1973]: C. Svensson, I. Lundstrom, **Trap-assisted charge injection in MNOS structure**, Journal of Applied Physics, Vol. 44 n°10, 1973, pp.4657-4663

[Stern 1972]: F. Stern, **“Self-Consistent Results for n-Type Si Inversion Layers”**, Phys Rev B, Vol.5, N°12, 1972, pp.4891-4899

[Takagi1999]: S. Takagi, N. Yasuda, A. Toriumi, **A new I-V Model for Stress-Induced Leakage Current Including Inelastic Tunnelling**, IEEE Trans. Electron Devices, Vol.46 n°2, 1999, pp.348-354

[Yang 1999]: N. Yang, W. K. Henson, J. Hauser et J. J. Wortman, **“Modelling study of ultrathin gate oxides using direct tunneling current and capacitance-voltage measurements in MOS devices”**, IEEE Trans. Elec. Dev., Vol. 46, no. 7, 1999, pp. 1464-1471.

# Conclusion générale

Le cadre général de ce travail de thèse était l'étude de l'injection de spins dans les semi-conducteurs et en particulier dans le silicium, à partir d'une source d'électrons polarisés (une électrode ferromagnétique). Les mécanismes de transport de porteurs (de charges et de spins) dans les structures ferromagnétiques/ semi-conducteurs jouent un rôle déterminant pour la conservation de spin au passage des interfaces. Ce travail a été concentré sur l'étude des mécanismes de transport à travers les structures ferromagnétique/isolant/silicium. Ces structures étudiées peuvent être utilisées comme injecteurs et collecteurs d'électrons polarisés en spin.

La première partie de notre étude a été consacrée à une caractérisation approfondie des structures ferromagnétique/isolant/silicium, notamment de l'interface isolant/silicium vu son rôle fondamental dans le transport d'électrons entre le ferromagnétique et le silicium.

La caractérisation des structures avec des oxydes de silicium très minces (7 nm d'épaisseur) a permis de constater que la présence de la grille ferromagnétique entraîne la génération des défauts à l'interface, dans l'oxyde et dans le substrat. Ces défauts risquent d'entraver l'injection de spin dans le silicium, en provoquant la capture des électrons polarisés en spin et en influençant les mécanismes de transport (conduction via les défauts). De plus, les défauts générés dans le substrat influencent aussi le transport en se comportant comme des centres de recombinaison, ce qui diminue la durée de vie des porteurs. De même, des études sur des structures à barrières SiO<sub>2</sub> ultra minces (2-4 nm) et des structures à double barrière Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> ont été réalisées. Ces études ont montré la présence de concentrations importantes d'états d'interface. Dans le cas des barrières SiO<sub>2</sub>, un traitement thermique a certes permis de réduire la concentration des défauts, mais sans toutefois retrouver les niveaux de performances des structures à l'état de l'art de la technologie MOS. En effet, malgré ce traitement ces structures présentent des densités d'états d'interface d'environ deux ordres de grandeur plus élevées que ce que permet la technologie CMOS avec grilles non-magnétiques. En revanche, les structures à double barrière Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> présentent des densités proches de celles rapportées dans la littérature pour les grilles non-magnétiques. Ces résultats laissent supposer que, contrairement à la couche de silice, la couche d'alumine se comporte en barrière efficace contre la diffusion des métaux ferromagnétiques en provenance de la grille.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons étudié les mécanismes de transport à dans les structures ferromagnétique/isolant/silicium avec les deux types de barrières, la silice et l'alumine. Les résultats expérimentaux ont été confrontés aux modèles physiques dont certains ont été développés au cours de ce travail. L'étude de la conduction à travers l'oxyde de silicium mince a mis en évidence l'impact de la grille magnétique. En effet, avec une grille en aluminium le mécanisme de transport est de type Fowler-Nordheim alors qu'avec une grille ferromagnétique, un mécanisme faisant intervenir des défauts dans l'oxyde (le Poole Frenkel) a été mis en évidence. Cela montre que la grille ferromagnétique entraîne la génération de défauts dans l'oxyde qui servent de relais au processus de transport. De même, des mesures de transport à travers des oxydes de silicium ultra-minces ont montré que le mécanisme de transport n'est pas



de type tunnel direct mais plutôt de type tunnel assisté par pièges. Dans le cas de l'alumine, la modélisation du mécanisme de transport a montré que la conduction est de tunnel direct. Cela confirme les résultats obtenus dans la première partie de ce travail sur l'effet barrière de diffusion de la couche d'alumine.

En résumé, ces résultats sur les propriétés électriques comparées entre structures ferromagnétique/isolant/silicium avec barrière de silice et d'alumine montrent que seule l'utilisation de l'alumine peut être envisagée dans des dispositifs spintroniques à base de silicium.

La prochaine étape consiste à utiliser ces structures comportant des barrières en alumine pour des mesures de transport dépendant de spin dans le silicium. De telles structures ont d'ores et déjà été testées à température ambiante dans notre laboratoire. Les analyses en termes de magnétorésistance n'ont pour l'instant pas donné de résultats concluants. Des mesures à basse température se révèlent nécessaires. En effet, Le problème de collection de spin et le rôle qu'y jouent les défauts d'interface semble encore déterminant malgré la qualité des interfaces des structures avec barrière d'alumine.

## Publications

### Journaux:

- R.Benabderrahmane, M. Kanoun, N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tunnel barrier as a good candidate for coherent spin injection into silicon", submitted to Journal Semiconductor Science and Technology
- M.Kanoun, R.Benabderrahmane, C. Duluard, A. Bsiesy, C. Baraduc, N. Bruyant, H. Achard, "Electrical Study of Ferromagnet Metal Gate MOS Diode: Towards a Magnetic Memory Cell Integrated on Silicon", Appl. Phys. Lett., 90, 192508 (2007)

### Conférences internationales:

- R.Benabderrahmane, M. Kanoun, N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Electrical study of NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si Tunnel diodes for magnetic memories", ICM 08, Sharjah-Emirats, 14-17 December 2008 (Oral presentation)
- R.Benabderrahmane, M. Kanoun, N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Electrical study of NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si Tunnel diodes for spintronic devices on silicon", Transalpano 2008, Lyon-France, 27-29 October 2008 (Oral presentation)
- N. Bruyant, R.Benabderrahmane, M.Kanoun, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Physical and electrical study of Permalloy/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si diodes for spin injection into silicon", Intermag 2008, Madrid Spain, 04-08 May 2008 (poster session)
- R.Benabderrahmane, M.Kanoun N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Tunnel Barrier as a Good Candidate for Coherent Spin Injection into Silicon", MRS Full Meeting, Boston 2007(Oral presentation)
- N. Bruyant, M.Kanoun, R.Benabderrahmane, B. Pang, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Characterization of SiO<sub>2</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Tunnel Barriers for Spin Injection from Ferromagnet Electrode into Silicon", MRS Full Meeting, Boston 2007(Oral presentation)
- M.Kanoun, R.Benabderrahmane, C. Duluard, A. Bsiesy, C. Baraduc, N. Bruyant, H. Achard, "Electrical study of ferromagnet-oxide-semiconductor diode for a magnetic memory device integrated on silicon", MRS Spring Meeting, San Francisco 2007 (Oral presentation)

### Conférences nationales:

- R.Benabderrahmane, M. Kanoun, N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Spin injection into silicon: Towards silicon-based spintronic devices", Colloque Louis Néel, La Grande Motte-France, 30 september-03 October 2008 (Poster session)

- R.Benabderrahmane, M. Kanoun, N. Bruyant, C. Baraduc, H. Achard, A. Bsiesy, "Caractérisation électrique des diodes NiFe/SiO<sub>2</sub>/Si et NiFe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si pour l'injection de spin dans le silicium", JNRDM 2008, Bordeaux France, 14-16 May 2008 (Oral presentation)
- B.Pang, R.Benabderrahmane, N. Bruyant, M.Kanoun, H. Achard, C. Baraduc, A. Bsiesy, "Injecting spin into Silicon", Colloque Louis Néel 2007, Lyon France, (Poster session)
- M.Kanoun, R.Benabderrahmane, C. Duluard, A. Bsiesy, C. Baraduc, N. Bruyant, H. Achard, A. Filipe," Etude électrique des structures MOS à grille ferromagnétiques : vers un nouveau dispositif MRAM intégré sur silicium", GDR SESAM 2006, Palaiseau France, (oral presentation)

**Ecoles d'été :**

- European School on Magnetism ESM : « New magnetic materials and their functions » 9-18 september 2007 , Cluj-Napoca Romania

