



HAL
open science

MODELISATION ET SIMULATION TRIDIMENSIONNELLE DES COMPOSANTS A SEMICONDUCTEUR DE TAILLE SUBMICRONIQUE

Djamel Hadji

► **To cite this version:**

Djamel Hadji. MODELISATION ET SIMULATION TRIDIMENSIONNELLE DES COMPOSANTS A SEMICONDUCTEUR DE TAILLE SUBMICRONIQUE. Energie électrique. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 1999. Français. NNT: . tel-00764581

HAL Id: tel-00764581

<https://theses.hal.science/tel-00764581>

Submitted on 13 Dec 2012

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.



THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

(Arrêté ministériel du 30 Mars 1992)

Discipline : Génie électrique

Présentée et soutenue publiquement

par

HADJI Djamel

Le : 08 juillet 1999

Titre

**MODELISATION ET SIMULATION TRIDIMENSIONNELLE
DES COMPOSANTS A SEMICONDUCTEUR DE TAILLE
SUBMICRONIQUE**

Directeurs de thèse

Yves Maréchal et Jacques Zimmermann

JURY

M. Philippe MASSE

Président

M. Frédéric BOUILLAULT

Rapporteur

M. Renaud FAUQUEMBERGUE

Rapporteur

M. Yves MARECHAL

Examineur

M. Jacques ZIMMERMANN

Examineur

Remerciements

Le travail présenté ici a été effectué au sein du Laboratoire d'Electrotechnique de Grenoble (LEG) de l'Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs Electriciens de Grenoble (ENSIEG-INPG), et a été le fruit d'une collaboration dans le cadre de la fédération ELESA avec le Laboratoire de Physique des Composants à Semiconducteurs (LPCS) de l'Ecole Nationale Supérieure d'Electronique et de Radioélectricité de Grenoble (ENSERG-INPG).

*Je remercie Messieurs Robert **Perret** et Jean-Claude **Sabonnadière** ainsi que Gérard **Meunier** et Jean-Pierre **Rognon**, qui se sont succédé à la direction du LEG, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire.*

*Je remercie Messieurs Gérard **Meunier** (une deuxième fois) et Jean Louis **Coulomb**, qui ont dirigé l'équipe modélisation, à laquelle je fut rattaché pendant les trois ans de thèse, pour leur attention et leur sympathie.*

*J'adresse mes plus sincères remerciements à ceux qui ont contribué au bon déroulement de cette thèse : Monsieur Yves **Maréchal**, Maître de Conférence à l'ENSIEG, qui m'a guidé tout au long de ce travail et a su me consacrer le temps qu'il fallait pour bénéficier de son soutien et de ses précieux conseils notamment en ce qui concerne l'aspect simulation numérique du sujet, et Monsieur Jacques **Zimmermann**, Directeur de Recherches au CNRS, qui a co-encadré ce travail de thèse, pour ses nombreux conseils et explications éclairées concernant l'aspect physique de ce travail.*

*Monsieur Philippe **Massé**, Professeur à l'ENSPG-INPG, a accepté de présider mon jury. Je le remercie du grand honneur qu'il me fait ainsi.*

*J'exprime ma gratitude à Messieurs Renaud **Fauquemberg**, Professeur à l'USTL de Lille, et Frédéric **Bouillault**, Professeur à l'université Paris Sud, qui me font le grand honneur de participer à mon jury et de juger mon travail.*

*Mes remerciements s'adressent également à l'ensemble du personnel technique et administratif du LEG, je cite en particulier Mme. **Callegher** et MM. **Labie**, **Eustache**, et **Guillot**, ainsi que les collègues chercheurs, pour l'ambiance et la convivialité du travail.*

TABLE DE MATIERES

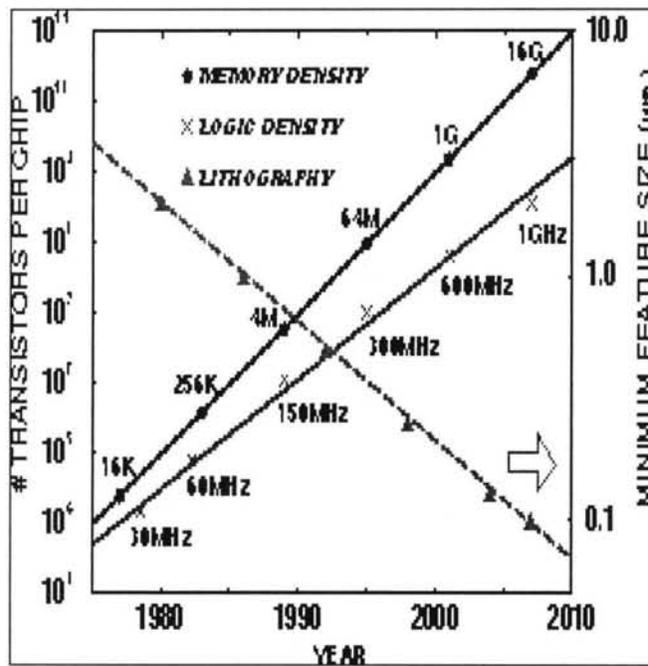
INTRODUCTION GENERALE.....	7
CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES MODELES DE TRANSPORT.....	13
I.1 Introduction.....	14
I.2 Equation de Boltzmann.....	14
I.3 Le terme de collision.....	17
I.3.a Interactions porteurs-imperfections	17
I.3.b Interactions entre particules.....	18
I.4 Modèles de résolution de l'équation de Boltzmann.....	18
I.4.a Modèle hydrodynamique.....	19
I.4.b Modèle Monte-Carlo.....	20
I.5 Résumé.....	20
CHAPITRE II : MODELE DE DERIVE-DIFFUSION.....	21
II.1 Introduction.....	22
II.2 Statistiques des porteurs.....	24
II.2.a Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann.....	24
II.2.b Densité effective d'états.....	25
II.2.c Densité intrinsèque.....	25
II.2.d Quasi-potentiels de Fermi.....	26
II.3 Modèle hydrodynamique.....	27
II.3.a Équation de Poisson.....	27
II.3.b Équation de conservation du courant.....	27
II.3.c Équation de conservation du moment.....	28
II.3.d Équation de conservation de l'énergie.....	28

II.3.e Équation du bilan énergétique.....	29
II.4 Modèle de dérive-diffusion.....	29
II.4.a Équation de Poisson.....	30
II.4.b Équation de conservation du courant.....	30
II.4.c Équation constitutive du courant.....	30
II.5 Formulation du modèle de dérive-diffusion à résoudre.....	30
II.5.a Changement de variable.....	31
II.5.b Conditions aux limites.....	33
II.5.c Modèles de mobilité.....	34
II.6 Méthode des éléments finis.....	35
II.6.a Formulations intégrales et discrétisation.....	36
II.6.b Assemblage des matrices.....	39
II.6.c Résolution du système matriciel.....	40
II.7 Procédure de simulation.....	41
II.8 Applications numériques.....	44
II.8.a Diode n^+nn^+	44
II.8.b Composant MOS.....	49
II.9 Conclusion.....	56
CHAPITRE III : MODELE MONTE-CARLO.....	57
III.1 Introduction.....	58
III.2 Principe de la méthode de Monte-Carlo.....	59
III.2.a Algorithme mono-particule.....	60
III.2.b Bande d'énergie.....	61
III.2.c Probabilités de collisions.....	64

III.2.d Mécanismes de collisions.....	65
III.2.e État de la particule après collision.....	69
III.3 Procédure de simulation.....	72
III.3.a Nombre de particules.....	72
III.3.b Densité de charge moyenne.....	73
III.3.c Hybridation des méthodes.....	75
III.4 Applications numériques.....	77
III.4.a Tube uniforme.....	77
III.4.b Diode n^+nn^+	81
III.4.c Composant MOS.....	84
III.5 Conclusion.....	90
CONCLUSION GENERALE.....	92
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	97

INTRODUCTION GENERALE

La croissance de l'industrie des Circuits Intégrés à semiconducteurs, durant ces deux dernières décennies, a été suivie en parallèle par une miniaturisation continue des transistors à des dimensions de plus en plus petites pour obtenir une densité d'intégration plus élevée, une vitesse du circuit plus rapide, et une puissance de dissipation plus petite. Ces progrès ont conduit à des outils informatiques avec des performances beaucoup plus supérieures et des coûts réduits de façon spectaculaire. Il est prévu que cette tendance va encore continuer au-delà de l'an 2000, quand la production effective de la technologie CMOS à 0.1 micron va commencer. La figure suivante illustre bien cette tendance [<http://www.research.ibm.com>].



Pour réduire davantage les composants à des dimensions sub-0.1 micron, plusieurs effets physiques rentrent en jeu, incluant des effets quantiques, des effets de canal court, ...etc. Les simulateurs bidimensionnels classiques ne prennent pas en compte ces phénomènes. Pour comprendre le fonctionnement physique de ces composants électroniques avec le plus de fidélité possible, il faut donc affiner ces outils de simulation et les adapter pour prendre en compte ces nouveaux phénomènes. Les coûts des réalisations technologiques de ces composants étant très élevés, il est indispensable que la modélisation mathématique et la simulation numérique surmontent ces challenges technologiques. C'est dans cette optique que s'inscrit le cadre général de notre travail de thèse. On s'est fixé comme objectif de développer un simulateur tridimensionnel, convenable pour la simulation du flux de charges dans de tels petits composants.

Donc, la modélisation numérique des composants à semiconducteurs reste toujours un thème d'actualité et d'intérêt considérable. Le comportement intrinsèque de ces composants se traduit par la multiplicité des phénomènes physiques et les différents couplages existant entre ces phénomènes. A ce propos, l'étude du transport de charge dans un matériau semiconducteur est une étape importante pour la compréhension des phénomènes physiques régissant le fonctionnement des composants électroniques. La complexité du transport électronique dans ces dispositifs à semiconducteur se traduit *a priori* par la grande diversité des modèles physiques utilisés pour le décrire. Le point de départ de tous ces modèles est l'équation de transport de Boltzmann appliquée au phénomène de transport de charges dans un matériau semiconducteur. L'intérêt dans la modélisation des semiconducteurs est de remplacer, autant que possible, les études expérimentales par la simulation numérique afin de minimiser le coût. Pour cette fin, il est important que les calculs soient réalisés en un temps raisonnable. Ceci implique que les modèles mathématiques en question ne soient pas très compliqués, comme l'équation de transport de Boltzmann de dimension très élevée. Bien que plusieurs tentatives prometteuses pour une résolution directe de cette équation cinétique, ont été entreprises dans un passé assez récent, l'application de ces méthodes numériques reste encore une tâche redoutable en général. D'autres approches sont alors possibles pour la résolution des équations de transport. Principalement, il existe deux manières pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann.

Une première approche résout de façon indirecte l'équation de transport de Boltzmann en la transformant à des équations différentielles grâce à quelques hypothèses. Elle utilise des modèles dits déterministes pour décrire la dynamique des charges dans un semiconducteur. Ce sont des équations différentielles pour des paramètres dépendant du temps et de l'espace. Ils représentent un bon compromis entre les exigences contradictoires de précision physique et d'efficacité de calcul. Le modèle le plus général est le modèle hydrodynamique pour semiconducteurs, qui est d'habitude employé pour une description des phénomènes dus aux champs élevés. Des hypothèses supplémentaires de faible densité et de faible champ conduisent aux équations du modèle de dérive-diffusion.

Les équations de dérive-diffusion constituent le modèle déterministe le plus populaire de nos jours pour décrire les composants à semiconducteur. Une très grande partie de la littérature sur les modèles mathématiques pour la simulation de composants s'intéresse à ce système non-linéaire d'équations à dérivées partielles, et les logiciels pour sa résolution sont devenus monnaie courante dans le domaine des semiconducteurs. Les équations de dérive-

diffusion représentent un très bon compromis entre le calcul efficace et la description correcte de la physique fondamentale des composants. Cependant, avec la miniaturisation croissante des composants à semiconducteurs, on se rapproche de plus en plus des limites de validité des équations de dérive-diffusion. Pour cette raison, et grâce à l'augmentation spectaculaire de la puissance du calcul informatique, les équations cinétiques de transport seront employées de plus en plus dans le futur pour la simulation des composants modernes. Mais même alors, le modèle de dérive-diffusion va rester un important outil de simulation, puisque les effets microscopiques dus à la miniaturisation n'apparaissent que localement. Ainsi, l'approche la plus probable sera une approche hybride qui consiste en l'utilisation de modèles plus précis localement, dans le canal d'un transistor MOS par exemple, et d'utiliser les équations de dérive-diffusion dans les parties du composant où elles sont suffisantes pour décrire correctement la physique mise en jeu [Kosina94].

La deuxième approche est une approche stochastique par la méthode de Monte-Carlo. Elle résout directement l'équation de transport de Boltzmann en sept dimensions : trois dimensions dans l'espace réciproque des vecteur d'onde, plus trois dimensions dans l'espace réel des positions géométriques et une dimension pour le temps. Contrairement à l'approche déterministe, qui considère l'ensemble des porteurs de charges comme étant un fluide, la méthode de Monte-Carlo traite les porteurs de manière individuelle comme des particules ponctuelles, qui se déplacent à l'intérieur du semiconducteur sous l'action d'une force externe et des effets de collisions. La technique de Monte-Carlo figure parmi les outils les plus en vogue ces dernières années dans le domaine de la simulation des composants à semiconducteur de taille submicronique et nanométrique. Elle doit son succès à sa simplicité conceptuelle, à sa grande souplesse d'application et à sa capacité à étudier tous les phénomènes physiques inclus dans ce genre de composants. Le principal obstacle à sa popularisation a été le fait qu'elle exige des calculs très intenses. Néanmoins, le nombre de particules impliquées dans le transport de charges dans la nouvelle génération de composants s'élève à quelques dizaines ou centaines d'électrons. Nous pensons que dans ce contexte, la méthode de Monte-Carlo sera de plus en plus utilisée, parce que la quantité de calculs nécessaires est proportionnelle au nombre de particules simulées.

Au cours de notre travail de thèse, nous avons développé deux simulateurs distincts pour étudier les composants à silicium de taille submicronique. Ces deux outils de simulation sont développés dans un environnement éléments finis 3D, et combinent l'équation de transport de Boltzmann avec l'équation de Poisson pour une résolution autonome et

tridimensionnelle. Ils se basent sur les deux approches précédentes pour résoudre l'équation de transport électronique : une approche déterministe par le modèle de dérive-diffusion, et une approche stochastique par la technique de Monte-Carlo. Dans ce rapport, nous allons présenter notre travail de thèse en trois chapitres.

Le premier chapitre est un chapitre d'introduction qui permet de présenter les fondements physiques du transport de charges dans un matériau semiconducteur. La première partie de ce chapitre est dédiée à la présentation de l'équation de transport de Boltzmann, appliquée à la dynamique des charges dans un semiconducteur. En seconde partie, nous décrivons brièvement les différentes approches pour sa résolution, notamment l'approche déterministe par des modèles de type hydrodynamique, et l'approche stochastique par des modèles particuliers de type Monte-Carlo.

Le second chapitre est consacré à la présentation du simulateur de composants que nous avons élaboré en utilisant le modèle de dérive-diffusion. En première partie, nous allons introduire des modèles déterministes pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann. Nous décrivons tout d'abord le modèle le plus général : le modèle hydrodynamique. Ensuite, par le biais de quelques simplifications, nous aboutirons au modèle de dérive-diffusion. Par pragmatisme, nous avons choisi d'utiliser ce dernier pour simuler des composants à semiconducteurs. La formulation des équations du modèle choisi ainsi que tous les ingrédients de simulation seront discutés. L'objet principal de ce chapitre est de résoudre en trois dimensions les équations de dérive-diffusion à l'aide de la méthode des éléments finis. Après une description brève de quelques notions de base sur cette méthode, la procédure suivie pour la résolution des équations sera ensuite détaillée. Enfin, la dernière partie est consacrée aux quelques résultats numériques des divers simulations effectuées sur des composants submicroniques.

Le troisième chapitre concerne le simulateur Monte-Carlo. Dans la première partie, nous exposerons le principe de la méthode de Monte-Carlo appliquée à l'étude de la dynamique électronique dans n'importe quel type de matériau semiconducteur. Les éléments nécessaires à la simulation avec la technique de Monte-Carlo seront détaillés pour le Silicium de type N, ce sont la description des diagrammes de bandes d'énergie et les probabilités des divers mécanismes de collision. En seconde partie, nous présentons notre approche de simulation auto-consistante qui consiste à coupler la méthode des éléments finis pour résoudre l'équation de Poisson, avec la méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation de transport électronique. Ensuite, la structure générale du simulateur de composants en trois dimensions,

que nous avons développé, sera présentée. Dans la troisième et dernière partie, nous présenterons quelques résultats de simulation obtenus. L'originalité de notre travail est le fait que les nombreux travaux antérieurs qui utilisent la technique de Monte-Carlo se basent sur une étude bidimensionnelle par la méthode des différences finies. Jusqu'à présent, à notre connaissance, une étude en trois dimensions par la méthode des éléments finis n'a jamais été employée dans cette approche de simulation.

Finalement, la conclusion rappelle les principaux travaux réalisés au cours de notre thèse, et dresse quelques perspectives et les possibilités d'extension des deux simulateurs réalisés.

CHAPITRE I
GENERALITES SUR LES MODELES DE TRANSPORT

I.1 Introduction

La complexité du transport électronique dans les dispositifs à semiconducteurs se traduit, *a priori*, par la grande diversité des modèles physiques utilisés pour le décrire. Tous ces modèles se distinguent les uns des autres essentiellement par la surenchère des phénomènes physiques qu'ils cherchent à approcher. Le point de départ de tous ces modèles est l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semiconducteur. Celle-ci a été décrite par *L. Boltzmann* en 1872 pour modéliser la cinétique des gaz. Sa principale caractéristique est la présence d'un *opérateur de collision* non linéaire et non local, qui est responsable des grandes difficultés mathématiques dans le traitement analytique et numérique de cette équation [Markowich89].

Ce premier chapitre est une introduction qui permet de présenter le cadre physique de ce travail de thèse. Cette entrée en matière n'a pas la prétention de recouvrir l'ensemble des aspects de la physique des semiconducteurs. Des auteurs illustres ont déjà entrepris ce travail avec succès. La première partie de ce chapitre est dédiée à la présentation de l'équation de transport de Boltzmann. La seconde partie est consacrée à une description sommaire des diverses interactions que les porteurs de charges peuvent subir dans leur milieu. Enfin en dernière partie, nous exposerons les différentes approches de résolution de l'équation de Boltzmann, notamment l'approche déterministe par des modèles de type hydrodynamique, et l'approche aléatoire par des modèles particuliers de type Monte-Carlo.

I.2 Equation de Boltzmann

Dans l'hypothèse d'un gaz électronique dans un matériau semiconducteur, les porteurs de charge sont des particules indépendantes caractérisées chacune par sa position dans l'espace des phases. Cette position est identifiée à chaque instant t par les trois composantes du vecteur \mathbf{r} (la position dans l'espace réel) et les trois composantes du vecteur d'onde \mathbf{K} (la position dans l'espace réciproque). Dans le cadre de la théorie cinétique et la mécanique quantique, une population de M particules, indiscernables et sans interactions entre elles au lieu d'être décrite par une densité à M corps peut être caractérisée par une densité réduite à un seul corps $f(\mathbf{K}, \mathbf{r}, t)$ qui est une fonction de la position \mathbf{r} , du vecteur d'onde \mathbf{K} et du temps t . La densité à M corps, que l'on peut interpréter comme une probabilité de présence, vérifie l'équation de Liouville, qui nous permet d'écrire :

$$\frac{df}{dt} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^M \left[\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{K}_i} \frac{\partial \mathbf{K}_i}{\partial t} \right] = 0 \quad (1.1)$$

La réduction du problème à M corps en un problème à un seul corps implique quelques concessions sur la description des grandeurs caractéristiques des particules (vitesse, énergie, ...etc). Désormais, nous sommes restreints à parler de grandeurs moyennes. Ainsi, des particules de vitesse moyenne \mathbf{v} , soumises à des forces électrostatiques $\mathbf{F}=q\mathbf{E}$, et décrites par une densité à un corps, obéissent à l'équation de Vlasov :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \nabla_{\mathbf{K}} f = 0 \quad (1.2)$$

A l'intérieur de la population, l'existence d'interactions entre particules se traduit par une perte de conservation de la densité de probabilité de présence $f.d\mathbf{r}.d\mathbf{K}$ dans un volume $d\mathbf{r}.d\mathbf{K}$ au cours du temps. Pour prendre en compte les variations des impulsions des particules à chaque collision, on introduit au second membre de l'équation de Vlasov un opérateur de collision non linéaire et non local, dit terme de collision. On obtient ainsi l'équation de transport de Boltzmann qui s'écrit, sous une forme générale :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f + q \frac{\mathbf{E}}{\hbar} \nabla_{\mathbf{K}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{collisions}} \quad (1.3)$$

où \mathbf{v} est la vitesse du porteur que l'on peut calculer si l'on connaît la structure de bande d'énergie $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ par la relation :

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{K}} \quad (1.4)$$

La forme de l'évolution de la densité de probabilité $f(\mathbf{K}, \mathbf{r}, t)$ est la solution de l'équation de transport de Boltzmann. Sa résolution nous permettra donc de calculer toutes les grandeurs moyennes caractéristiques des phénomènes étudiés ; diffusion, mobilité, ...etc. La valeur moyenne de toute grandeur physique $\phi(\mathbf{K})$ caractéristique du système vaudra :

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \overline{\langle \phi(\mathbf{K}) \rangle} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{D(\mathbf{K})} \phi(\mathbf{K}) f(\mathbf{K}, \mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{K} \quad (1.5)$$

Dans le cas d'un système homogène sur lequel aucune force n'est appliquée (champ électrique nul), la vitesse moyenne des porteurs est nulle et ceux-ci ne sont soumis qu'à l'agitation thermique correspondant à la température du réseau T_L . La fonction de distribution dans ce cas est celle de Fermi-Dirac :

$$f_0(\mathbf{K}) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E}(\mathbf{K}) - \mathcal{E}_F}{k_B T_L}\right]} \quad (1.6)$$

Dès qu'un champ électrique est appliqué la fonction de distribution est modifiée, la vitesse moyenne des porteurs n'est plus nulle et un courant électrique s'établit. Les porteurs absorbent de l'énergie provenant du champ électrique au taux horaire :

$$\left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}\right)_{\text{champ}} = q \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \quad (1.7)$$

Les porteurs ne peuvent pas être chauffés à l'infini, ce sont les interactions avec leur milieu qui vont limiter leur énergie. L'équilibre thermique s'établit quand le taux de perte d'énergie due aux collisions $\left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}\right)_{\text{collisions}}$, et le taux de gain d'énergie dû au champ électrique $\left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}\right)_{\text{champ}}$ sont égaux. La population électronique peut alors avoir une température plus grande que celle du réseau, et la fonction de distribution sera déformée par rapport à l'équation I.6.

Les trois termes de gauche de l'équation de Boltzmann représentent, respectivement, la dépendance de la fonction de distribution dans le temps, dans l'espace réel, et dans l'espace réciproque. Le membre droit est appelé intégrale de collision, et représente la contribution des interactions des porteurs avec le milieu ambiant. Si $S(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ représente la densité de probabilité par unité de temps qu'un porteur dans l'état \mathbf{K} subisse une collision l'amenant à un autre état \mathbf{K}' à $d^3 \mathbf{K}'$ près, l'intégrale de collision s'écrit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collisions}} = -\int [S(\mathbf{K}, \mathbf{K}')f(\mathbf{K})(1 - f(\mathbf{K}')) - S(\mathbf{K}', \mathbf{K})f(\mathbf{K}')(1 - f(\mathbf{K}))] d^3 \mathbf{K}' \quad (1.8)$$

où les termes $1-f$, la probabilité de non-occupation d'un état, permettent de tenir compte du principe d'exclusion de Pauli. Dans les matériaux non-dégénérés, le nombre d'états occupés dans l'espace des phases est largement inférieur au nombre total d'états disponibles, et on trouvera l'état \mathbf{K}' pratiquement toujours libre. L'équation (I.7) peut alors prendre la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collisions}} = -\int [S(\mathbf{K}, \mathbf{K}')f(\mathbf{K}) - S(\mathbf{K}', \mathbf{K})f(\mathbf{K}')] d^3 \mathbf{K}' \quad (1.9)$$

ou encore :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collisions}} = -\lambda(\mathbf{K}) \cdot f(\mathbf{K}) + \int S(\mathbf{K}', \mathbf{K}) f(\mathbf{K}') d^3 \mathbf{K}' \quad (1.10)$$

$$\lambda(\mathbf{K}) = \int S(\mathbf{K}, \mathbf{K}') d^3 \mathbf{K}' \quad (1.11)$$

Ici, $\lambda(\mathbf{K})$ est le taux global de collisions (la probabilité par unité de temps qu'une particule subisse une interaction).

I.3 Le terme de collision

Le déplacement des porteurs dans un matériau semiconducteur est constamment perturbé par des interactions. On distingue deux types d'interactions possibles ; les unes sont dues aux collisions des porteurs avec les imperfections du réseau cristallin (impuretés, défauts cristallin ...) et les autres sont dues aux vibrations du cristal qui donnent naissance aux collisions électrons-phonons. L'énergie de vibration du réseau ou onde élastique est quantifiée. Le quantum d'énergie d'une onde élastique est appelé *phonon*, par analogie aux *photon* (quantum d'énergie électromagnétique) [Lepaul96].

I.3.a Interactions porteurs-imperfections du réseau cristallin

a1- Etats de surface

L'existence d'états localisés sur les surfaces de la structure ou aux interfaces (rugosité d'interface, inter-diffusion de puits quantiques ...) peuvent se comporter comme des centres diffuseurs, et surtout des pièges de particules, ou encore des centres de recombinaison électron-trou.

a2- Impuretés ionisées

Dans le volume des semiconducteurs, on trouve également des impuretés, dont certaines peuvent être dues à un dopage réalisé pour augmenter la densité des porteurs. Ces impuretés, neutres ou ionisées, diffusent les particules ou peuvent se comporter comme des pièges de particules, ou centres de recombinaison électrons-trous.

a3- Agrégats

Parmi les défauts localisés dans le matériau, citons également les agrégats (ou clusters) et les défauts cristallins (lacunes). Leur effet principal est de diffuser les particules.

a4- Dislocations

Elles apparaissent lors de la croissance epitaxiale d'une couche sur une autre.

I.3.b Interactions entre particules

Les interactions entre les particules de la physique des solides : les électrons (et les trous), les phonons, les photons...etc, rendent en général finie la durée de vie des porteurs.

b1- Interactions électrons-électrons

Elles sont dues essentiellement à des échanges de photons (le champ électromagnétique rayonné par les électrons eux-mêmes) ou de phonons. Ces interactions sont responsables de la valeur des fonctions diélectriques.

b2- Interactions électrons-photons

Les interactions entre les électrons et les photons créés par une source extérieure, produisent des transitions inter ou intra-vallées suivant la longueur d'onde des photons, et éventuellement de l'ionisation des impuretés.

b3- Interactions électrons-phonons

Dans un cristal, le potentiel est la somme d'un potentiel périodique dû à la configuration des atomes formant le réseau cristallin, et d'un potentiel de déformation traduisant les vibrations du réseau. Un porteur se déplaçant dans le réseau cristallin échange de l'énergie avec les atomes par l'intermédiaire de phonons acoustiques ou optiques. Les phonons acoustiques sont des phonons de faible énergie et représentent des vibrations d'atomes dites en phase. Les phonons optiques sont des phonons de plus haute énergie (50 meV) et représentent des vibrations d'atomes dites en opposition de phase. Les interactions entre les électrons et les phonons provoquent des transitions inter-vallées et intra-vallées dans la bande de conduction.

I.4 Modèles de résolution de l'équation de Boltzmann

Trouver la solution de l'équation 1.3 appliquée à l'étude du transport de charges dans les composants électroniques a été depuis toujours un domaine important dans les recherches portant sur la physique des semiconducteurs. Comme nous pouvons le constater l'équation de transport de Boltzmann a une forme intégral-différentielle, qui sous sa forme complète tridimensionnelle, exige sept variables indépendantes qui sont le temps, l'espace et le moment. Vu la complexité de l'équation, sa résolution analytique n'est possible que dans certains cas particuliers, et les hypothèses faites pour rendre le problème soluble restreignent considérablement le domaine de validité des solutions trouvées. Une étude plus complète nécessitant moins d'hypothèses restrictives peut être entreprise quand on dispose de moyens

de calculs suffisants pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann d'une manière directe. Les méthodes numériques directes sont essentiellement de deux types : les techniques itératives et les techniques stochastiques. Les méthodes stochastiques sont représentées par des modèles particuliers du type Monte-Carlo. Une autre catégorie de méthodes pour résoudre numériquement cette équation de transport sont les méthodes de moments, qui permettent de déduire à l'aide de quelques hypothèses simplificatrices des équations à dérivées partielles (comme le modèle hydrodynamique et ses deux variantes : modèle d'énergie-balance, et modèle de dérive-diffusion), qui sont couplées avec l'équation de Poisson pour auto-consistance dans les composants.

Au cours de notre travail de thèse, nous avons utilisé deux approches différentes pour la simulation tridimensionnelle de composants électroniques :

- Une approche déterministe par le modèle dérive-diffusion, qui sera décrite avec plus de détails dans le prochain chapitre.
- Une approche stochastique par le modèle Monte-Carlo. Cette technique de simulation sera détaillée au chapitre III.

Ici, nous allons décrire brièvement le principe de base des deux approches de résolution pour la modélisation des phénomènes de transport électrique dans les dispositifs semiconducteurs. La masse de littérature consacrée à la résolution de l'équation de Boltzmann, depuis quelques dizaines d'années, est considérable et ne pouvant citer celle-ci in extenso, nous référons le lecteur au livre [Conwell67] qui est un classique dans ce domaine, et à [Price77] et [Jacoboni89] qui représentent une complète mise à jour dans ce sujet.

1.4.a Modèle hydrodynamique

Ce modèle permet de résoudre une forme simplifiée de l'équation de Boltzmann, en supposant que la fonction de distribution ne dépend que de l'énergie moyenne des porteurs. Les collisions sont prises en compte par l'approximation des temps de relaxation. Les équations mises en jeu dans ce modèle sont les suivantes :

- équation de Poisson,
- équation de conservation du courant,
- équation de conservation du moment,
- équation de conservation de l'énergie.

Une des variantes du modèle hydrodynamique est le modèle de dérive-diffusion. Il se compose de l'équation de Poisson qui traduit les caractéristiques électromagnétiques du

dispositif, et de l'équation de conservation de charge qui suppose que le courant est la somme d'un terme de dérive et un terme de diffusion. Le terme de dérive du courant est établi par la loi d'Ohm assurant la proportionnalité de la vitesse des porteurs de charge au champ électrique, alors que le terme de diffusion du courant est proportionnel au gradient de la concentration de porteurs.

I.4.b Modèle Monte-Carlo

Pour résoudre directement l'équation de Boltzmann, il faut résoudre en fonction du temps et pour chaque particule une équation différentielle à six dimensions (trois dimensions dans l'espace réel pour la position, et trois dimensions dans l'espace réciproque pour le vecteur d'onde). L'approche adoptée par le modèle Monte-Carlo est de suivre l'évolution des positions des porteurs en tenant compte du caractère stochastique du mouvement que les divers types d'interactions peuvent faire subir aux porteurs. Ce mouvement aléatoire est étudié simultanément dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde \mathbf{K} et dans l'espace réel. Les collisions sont aléatoires, et elles sont tirées au sort suivant des lois de probabilités spécifiques à chaque type d'interaction à l'aide de nombres pseudo aléatoires. D'un point de vue historique, la méthode de Monte-Carlo a été appliquée pour la simulation des phénomènes de transport dans les semiconducteurs depuis les années soixante. Par construction, elle offre accès non seulement aux moments d'ordre un des variables de simulation (les valeurs moyennes), mais aussi aux moments d'ordre supérieur, notamment aux fluctuations dans un système physique.

I.5 Résumé

Nous avons exposé dans ce premier chapitre quelques aspects physiques concernant la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les semiconducteurs. Dans la section I.2, nous avons présenté l'équation de transport de Boltzmann, et avons mis l'accent sur l'opérateur de collision. Par la suite, nous avons décrit les divers phénomènes de collisions que les porteurs sont susceptibles de subir. Etant donné la nature intégral-différentielle de l'équation de Boltzmann, et la complexité du terme de collision, il est difficile voire impossible dans le cas général, de trouver une forme analytique exacte de la solution. C'est la raison pour laquelle on a recours soit à des hypothèses simplificatrices menant à un traitement déterministe par le modèle de dérive-diffusion, ou bien à une résolution directe par le modèle Monte-Carlo. Les détails de ces deux approches de résolution feront l'objet des deux prochains chapitres.

CHAPITRE II
MODELE DE DERIVE-DIFFUSION

II.1 Introduction

Comme nous l'avons déjà vu précédemment, différentes approches sont possibles pour la résolution des équations de transport, dites cinétiques, présentées dans le premier chapitre. Bien que plusieurs tentatives prometteuses pour une résolution directe de ces équations ont été entreprises dans un passé assez récent, l'application de ces méthodes numériques reste encore une tâche redoutable en général. Dans ce chapitre, nous allons introduire des modèles déterministes pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann, qui régit la dynamique des charges dans un semiconducteur. Ils représentent un compromis raisonnable entre les exigences contradictoires de précision physique et d'efficacité de calcul. Leur caractéristique commune est le fait que le nombre de variables indépendantes est réduit de sept variables (trois pour l'espace + trois pour le vecteur d'onde + le temps) à quatre variables (trois pour l'espace + le temps).

Il existe deux approches différentes pour dériver les modèles déterministes de la dynamique des charges à partir des équations cinétiques [Markowich89]. La première approche est basée sur un raisonnement de perturbation. Elle exploite la petitesse d'un paramètre adimensionné, à savoir le libre parcours moyen réduit, qui apparaît dans une version convenablement réduite (mise à l'échelle) de l'équation de transport de Boltzmann. Le développement de la solution de l'équation de Boltzmann pour la dynamique des gaz en puissances du libre parcours moyen réduit a été introduit par Hilbert [Hilbert12], et porte son nom par conséquent. Récemment, dans le cadre des semiconducteurs, le développement d'Hilbert a été effectué et complètement analysé par Poupaud [Poupaud88]. Dans le cas de faible densité et de faible champ électrique, les premiers termes du développement d'Hilbert sont régis par les équations standard de dérive-diffusion pour semiconducteurs, qui ont été dérivées pour la première fois par Van Roosbroeck [Roosbroeck50].

Une seconde approche pour obtenir les modèles déterministes de la dynamique des charges est la méthode des moments. Le principal ingrédient de cette méthode est une relation entre la fonction de distribution et la vitesse, qui contient plusieurs paramètres dépendant de la position et du temps. Après l'insertion de cette relation, souvent appelée "maxwellienne décalée", l'équation de Boltzmann est multipliée par des fonctions de vitesse linéairement indépendantes, puis elle est intégrée sur l'espace des vitesses. Il en résulte des équations différentielles pour des paramètres dépendant du temps et de l'espace. Généralement, les intégrales ne peuvent pas être évaluées toutes de manière explicite. Alors, les termes en

question sont habituellement remplacés par des modèles phénoménologiques en utilisant des approximations de temps de relaxation. Le système résultant est désigné sous le nom de modèle hydrodynamique pour semiconducteurs. Le modèle hydrodynamique est d'habitude employé pour donner une description convenable des phénomènes dus aux champs élevés. Des hypothèses supplémentaires de faible densité et de faible champ conduit aux équations de dérive-diffusion. Malheureusement, le coefficient de mobilité qui apparaît dans le terme de dérive, et qui dépend du champ électrique, ne peut pas être déterminé explicitement. Cependant, des données expérimentales très précises sont disponibles, et peuvent être utilisées pour ajuster les coefficients de la relation décrivant le comportement qualitatif de la mobilité.

Les équations de dérive-diffusion forment le modèle le plus couramment utilisé de nos jours pour décrire les composants à semiconducteurs. La majeure partie de la littérature sur les modèles mathématiques pour la simulation de composants s'intéresse à ce système non-linéaire d'équations à dérivées partielles, et les logiciels numériques pour sa résolution sont devenus pratiquement monnaie courante sur toute installation de recherche dans le domaine des semiconducteurs [Markowich89]. D'un point de vue d'ingénierie, l'intérêt dans le modèle de dérive-diffusion est de remplacer, autant que possible, les tests de laboratoire par la simulation numérique dans le but de minimiser le coût. Pour cette fin, il est important que les calculs soient réalisés en un temps raisonnable. Ceci implique que les modèles mathématiques en question ne soient pas très compliqués tels que, par exemple, les équations de transport de dimension élevée décrites au chapitre I. A l'état actuel de la technologie, les équations de dérive-diffusion semblent représenter un bon compromis entre le calcul efficace et la description précise de la physique fondamentale des composants. Par conséquent, les équations de transport sont utilisées essentiellement pour calculer des données servant à modéliser les paramètres des équations de dérive-diffusion. Il peut être signalé, cependant, qu'avec la miniaturisation croissante des dimensions de composants semiconducteurs, on se rapproche de plus en plus des limites de validité des équations de dérive-diffusion. La raison de ceci est, d'un côté, que dans les composants de petite taille l'hypothèse selon laquelle les porteurs libres peuvent être modélisés comme un milieu continu devient invalide. D'un autre côté, les équations de dérive-diffusion sont dérivées grâce à un processus de limite, où le libre parcours moyen d'une particule tend vers zéro. Par la miniaturisation, ce dernier devient de plus en plus grand en comparaison avec la taille du composant. En plus, des effets de mécanique quantique commencent à jouer un rôle de plus en plus important dans ces nouvelles structures de composants. Pour ces raisons, et à cause de l'augmentation rapide de la puissance de calcul, les équations de transport cinétiques vont être employées de plus en

plus dans le futur pour la simulation de composants. Mais même alors, les équations de dérive-diffusion vont rester un important outil de simulation, puisque les effets microscopiques n'apparaissent que localement. Ainsi, l'approche la plus probable sera une approche hybride qui consiste en l'utilisation de modèles plus sophistiqués localement, par exemple dans le canal d'un transistor MOS, et d'utiliser les équations de dérive-diffusion dans les parties du composant où elles suffisent pour décrire correctement la physique.

Nous débutons ce chapitre par la présentation des statistiques utilisées pour décrire les densités des porteurs de charges : la statistique de Fermi-Dirac et la statistique de Boltzmann. Les équations du modèle hydrodynamique seront présentées dans la sections **II.3**. Ensuite nous présenterons les simplifications menant aux modèles d'énergie-balance et de dérive-diffusion. Parmi ces différents modèles possibles pour décrire la dynamique des charges dans un semiconducteur, nous allons nous intéresser en particulier au modèle de dérive-diffusion qui sera développé en section **II.4**. L'objet principal de ce chapitre est, en effet, d'approcher une solution de ces équations à l'aide de la méthode des éléments finis, et ceci en trois dimensions. La formulation du modèle choisi ainsi que tous ses ingrédients seront discutés dans la section **II.5**. Quelques notions de base sur la méthode des éléments finis fera l'objet de la section **II.6**. La procédure de résolution suivie sera présentée dans la section **II.7**. Enfin, la section **II.8** est consacrée aux quelques résultats numériques des divers simulations effectuées sur des structures aux dimensions réduites (submicroniques).

II.2 Statistiques des porteurs

II.2.a Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann

Les électrons en équilibre thermique avec le réseau cristallin du semiconducteur à la température T_0 obéissent à la statistique de Fermi-Dirac, *i.e.* que la probabilité $f(\mathcal{E})$ qu'un état électronique disponible d'énergie \mathcal{E} soit occupé par un électron est donnée par :

$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T_0}\right)} \quad (2.1)$$

où \mathcal{E}_F est le niveau de fermi (une énergie de référence indépendante de l'espace), et k_B est la constante de Boltzmann.

Dans le cas non-dégénéré, où $\mathcal{E} - \mathcal{E}_F \gg k_B T_0$, la relation (2.1) pourrait être remplacée par la statistique de Boltzmann :

$$f(\mathcal{E}) = \exp\left(\frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}}{k_B T_0}\right) \quad (2.2)$$

L'utilisation de la statistique de Boltzmann au lieu de celle de Fermi-Dirac rend les calculs consécutifs beaucoup plus simples. L'emploi de la statistique de Boltzmann est normalement justifié dans la théorie des composants à semiconducteurs, mais la statistique de Fermi-Dirac est nécessaire pour tenir compte de certaines propriétés des matériaux fortement dopés (dégénérés). Dans les sections qui suivent, nous présenterons les équations et les résultats dans le cas simple de la statistique de Boltzmann.

II.2.b Densité effective d'états

En intégrant la relation (2.2) sur une densité d'états parabolique dans la bande de conduction, dont l'énergie minimum est \mathcal{E}_C , il résulte l'expression suivante pour la densité d'électrons :

$$n = N_c \exp\left(\frac{\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_C}{k_B T_0}\right) \quad (2.3)$$

N_c est la densité d'états effective pour les électrons, et elle est donnée par :

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T_0}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.4)$$

où m_e^* est la masse effective de l'électron, et h est la constante de Planck.

Pareillement pour les trous, nous avons :

$$p = N_v \exp\left(\frac{\mathcal{E}_V - \mathcal{E}_F}{k_B T_0}\right) \quad (2.5)$$

où \mathcal{E}_V est l'énergie maximale dans la bande de valence, et N_v est la densité d'états effective des trous dans la bande de valence. N_v est donné par :

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T_0}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.6)$$

où m_h^* est la masse effective des trous dans la bande de valence.

II.2.c Densité intrinsèque

En multipliant les deux densités d'électrons (2.3) et de trous (2.5), on obtient la loi d'action de masse :

$$np = n_i^2 \quad (2.7)$$

La densité intrinsèque n_i est donnée par :

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(\frac{-\mathcal{E}_g}{2k_B T_0}\right) \quad (2.8)$$

où $\mathcal{E}_g = \mathcal{E}_c - \mathcal{E}_v$ est le gap d'énergie entre les bandes de conduction et de valence (*bandgap* en anglais)

Pour un matériau intrinsèque (non-dopé) nous avons : $n = p = n_i$. En égalisant les deux expressions des densités d'électrons (2.3) et de trous (2.5), on détermine le niveau de Fermi :

$$\mathcal{E}_F = \mathcal{E}_i = -q\phi_i = \frac{\mathcal{E}_c + \mathcal{E}_v}{2} + \frac{k_B T_0}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) \quad (2.9)$$

où \mathcal{E}_i est le niveau de fermi dans un matériau intrinsèque, et ϕ_i est le potentiel intrinsèque (nous l'avons choisi comme référence du potentiel électrostatique $\phi = \phi_i$). Les densités d'électrons et de trous peuvent être exprimées en termes de densité intrinsèque comme suit :

$$n = n_i \exp\left(\frac{q(\phi - \phi_F)}{k_B T_0}\right) \quad (2.10)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{q(\phi_F - \phi)}{k_B T_0}\right) \quad (2.11)$$

où ϕ_F est le potentiel correspondant au niveau de Fermi, *i.e.*, $\mathcal{E}_F = -q\phi_F$.

II.2.d Quasi-potentiels de Fermi

Les relations (2.10) et (2.11) s'appliquent pour des conditions d'équilibre. Sous des conditions de non-équilibre les densités n et p vont s'écarter de leurs valeurs à l'équilibre et ne peuvent plus être représentées par la seule quantité \mathcal{E}_F . Des niveaux quasi-Fermi pour les électrons $\mathcal{E}_{Fn} = -q\phi_n$ et pour les trous $\mathcal{E}_{Fp} = -q\phi_p$, correspondant aux quasi-potentiels de Fermi ϕ_n et ϕ_p , sont alors introduits pour pouvoir utiliser des expressions similaires sous des conditions de non-équilibre :

$$n = n_i \exp\left(\frac{q(\phi - \phi_n)}{k_B T_0}\right) \quad (2.12)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{q(\phi_p - \phi)}{k_B T_0}\right) \quad (2.13)$$

Je consacre les deux sections suivantes à la description des modèles hydrodynamique et de dérive-diffusion. Par souci de clarté et de concision, afin de ne pas alourdir les systèmes d'équations, je ne présente qu'un seul type de porteurs de charges : les électrons.

II.3 Modèle hydrodynamique

Les équations constituant ce modèle déterministe de transport de charges dans les semiconducteurs découlent directement à l'aide d'hypothèses simplificatrices de natures physique et mathématique sur l'équation de transport de Boltzmann [Markowich89], [Poupaud88]. Au chapitre I, j'ai présenté le modèle hydrodynamique comme étant constitué de l'équation de Poisson (en toute rigueur, c'est une équation externe au modèle) et de trois équations de conservation. Je donne maintenant les expressions mathématiques de celles-ci, ainsi que leur interprétation physique [Lepaul96].

II.3.a Équation de Poisson

L'équation de Poisson établit un rapport entre les variations du potentiel électrostatique ϕ et la densité de charge locale. Cette dernière est la somme des contributions de toutes les charges mobiles et fixes, incluant les électrons, les trous, et les impuretés ionisées.

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \phi) = -q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \quad (2.14)$$

où ϵ_0 et ϵ_r sont respectivement la permittivité du vide et la permittivité relative du matériau, q est la valeur absolue de la charge élémentaire de l'électron, $N_D^+ - N_A^-$ est la densité des ions donneurs et accepteurs, n est la densité d'électrons libres, et p est la densité de trous libres. Le champ électrique est obtenu à partir du gradient du potentiel par la relation : $E = -\nabla\phi$

II.3.b Équation de conservation du courant

Elle décrit la manière dont évolue la densité électronique (ou bien des trous) suite aux processus de transport, de génération, et de recombinaison des porteurs. Pour les électrons, elle s'exprime par la relation suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J} = -(R - G) \quad (2.15)$$

avec $\mathbf{J} = -qn\mathbf{v}$

\mathbf{J} représente la densité de courant d'électrons, \mathbf{v} est la vitesse moyenne des électrons, et $R - G$ est le taux de recombinaison et de génération des porteurs. En pratique, divers mécanismes de recombinaison-génération sont possibles; la recombinaison directe bande-bande par des

transitions de phonons, la capture et l'émission bande-piège, la recombinaison d'Auger, et l'ionisation par impact [Markowich89], [Silvaco95].

II.3.c Équation de conservation du moment

$$\frac{\partial(nm^*v)}{\partial t} + \nabla(nm^*v^2) = -qnE - \nabla(nk_B T_e) - \frac{nm^*v}{\tau_m} \quad (2.16)$$

où m^* est la masse effective moyenne des électrons, et τ_m est le temps de relaxation de la quantité de mouvement moyenne des électrons.

Le terme de gauche de l'équation de conservation du moment représente la différentielle totale de la quantité de mouvement des électrons, et le terme de droite est la somme des forces exercées sur les électrons. Le premier terme de cette somme représente la force de Coulomb. Le deuxième terme, écrit sous la forme $\nabla(nk_B T_e)$, est la force due aux variations de la pression électronique. Ecrit sous une autre forme $k_B T_e \nabla n + n \nabla(k_B T_e)$, la somme de deux forces apparaît : une force de diffusion de porteurs, et une force de diffusion thermique. Enfin, le dernier terme de la somme est équivalent à une force de frottement due aux interactions des porteurs avec le réseau cristallin. L'équation (2.16) peut être réécrite sous la forme suivante [Chai92],[Fortin96],[Lepaul96] :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{qE}{m^*} - \frac{1}{nm^*} \nabla(nk_B T_e) - \frac{v}{\tau_m} \quad (2.17)$$

II.3.d Équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla_r \cdot S - E \cdot J = -n \frac{w - w_0}{\tau_w} - (R - G)w \quad (2.18)$$

$$\text{avec } S = Q - (w + k_B T_e) \frac{J}{q} \quad (2.19)$$

τ_w est le temps de relaxation de l'énergie moyenne des électrons. Le terme $w_0 = 3/2 k_B T_0$ est l'énergie moyenne à l'équilibre thermodynamique, avec T_0 la température du réseau cristallin. Le flux d'énergie thermique Q est donné par le produit d'un coefficient de conductibilité thermique κ , et du gradient de la température électronique : $Q = -\kappa \nabla T_e$.

En développant le gradient du flux d'énergie S , et en supposant le terme de génération-recombinaison nul, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} + \nabla(nvw) = -qnE \cdot v - \nabla(nk_B T_e v) - n \frac{w - w_0}{\tau_w} - \nabla \cdot Q \quad (2.20)$$

La partie gauche de cette égalité représente la différentielle totale de l'énergie des électrons. La partie droite correspond à la puissance reçue du champ électrique durant le déplacement des électrons, et à la puissance perdue d'une part sous l'effet des forces de pression électronique, et d'autre part dans les interactions avec le réseau cristallin, et dans les échanges thermiques entre porteurs.

II.3.e Équation du bilan énergétique

L'énergie moyenne des électrons w s'exprime comme la somme d'une énergie cinétique $1/2m^*v^2$ prenant en compte le mouvement de dérive des électrons sous l'influence du champ électrique E , et d'une énergie thermique $3/2k_B T_e$ traduisant le caractère aléatoire de ce mouvement.

$$w = \frac{1}{2} m^* v^2 + \frac{3}{2} k_B T_e \quad (2.21)$$

II.4 Modèle de dérive-diffusion

Quelques hypothèses simplificatrices, faites sur les équations précédentes, conduisent à deux variantes du modèle hydrodynamique : le modèle d'énergie-balance et le modèle de dérive-diffusion. Je me contente ici de présenter les équations de ce dernier modèle. En effet, si on néglige le terme non linéaire de convection $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}$ (terme du second ordre) dans l'équation de conservation du moment (2.17), on obtient le système d'équations d'énergie-balance. Les équations de dérive-diffusion sont déduites à partir de ce dernier modèle, en supposant en plus que la température électronique ne varie pas et qu'elle est égale à celle du réseau cristallin du semiconducteur $T_e = T_0$. Ainsi, le gradient de T_e est nul, et l'équation de conservation d'énergie disparaît. Dans ce modèle, le transport de charge est dû à la combinaison de deux phénomènes :

- la dérive due au champ électrique appliqué au dispositif,
- la diffusion due à la disposition spatiale des porteurs.

Le modèle de dérive-diffusion se compose principalement de deux équations qui sont propres au modèle : l'équation de continuité de charge et l'équation du courant. L'équation de Poisson, en principe, ne fait pas partie du modèle. Elle sert seulement à calculer la force de dérive externe. Donc, elle est intégrée au modèle pour l'auto-consistance du problème. Le système complet d'équations du modèle de dérive-diffusion est le suivant ;

II.4.a Équation de Poisson

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \phi) = -q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \quad (2.22)$$

II.4.b Équation de conservation du courant

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{I}{q} \nabla \cdot \mathbf{J} = -(R - G) \quad (2.23)$$

II.4.c Équation constitutive du courant

En utilisant l'approximation des temps de relaxation, les coefficients de mobilité et de diffusion, peuvent être reliés entre eux par la relation généralisée d'Einstein, et sont donnés par : $\mu = \frac{q\tau_m}{m^*}$ et $D = \frac{k_B T_e}{q} \mu$. A partir de l'équation de conservation du moment (2.17), on déduit la vitesse moyenne \mathbf{v} des électrons. En multipliant cette dernière par $(-qn)$, et en introduisant les coefficients de mobilité et de diffusion, nous aboutissons à l'expression suivante de la densité de courant électronique :

$$\mathbf{J} = q\mu n \mathbf{E} + qD \nabla n \quad (2.24)$$

La densité de courant \mathbf{J} est composée de deux termes ; un courant de dérive proportionnel au champ électrique et un courant de diffusion proportionnel au gradient de la densité électronique.

II.5 Formulation du modèle de dérive-diffusion à résoudre

La discrétisation des équations de dérive-diffusion, telles que présentées jusqu'à maintenant, conduit à des systèmes matriciels mal conditionnés, ce qui provoque des instabilités numériques dans les algorithmes de résolution. Ces difficultés sont similaires à celles que l'on peut rencontrer en mécanique des fluides lorsque l'on désire traiter numériquement des problèmes de convection-diffusion avec un terme de convection dominant [Lepaul96], [Maréchal91]. En fait, l'équation de dérive-diffusion n'est rien d'autre qu'un cas particulier des problèmes de convection-diffusion. Ce type de problèmes apparaît également dans la dynamique des gaz ou dans la propagation des ondes. En effet, les équations qui régissent ces domaines sont de type hyperbolique. Il est bien connu que ce n'est pas l'équation de Poisson qui est responsable de ces instabilités. Le Laplacien de cette équation étant un opérateur symétrique défini positif, elle est complètement traitable par la méthode des éléments finis, qui conserve ce genre de propriétés, et il est possible d'utiliser toutes les méthodes numériques de résolution des systèmes matriciels, aussi bien les méthodes directes qu'itératives. Par contre, les opérateurs définissant l'équation de conservation du courant

(2.23) ne possèdent pas des propriétés aussi agréables. En effet, l'équation (2.23) combinée avec l'équation (2.24) suggère de prendre la densité électronique comme variable inconnue. L'équation résultante, en considérant le cas statique et en négligeant le terme de génération-recombinaison, se résume comme la somme de deux opérateurs agissant sur la densité n :

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot (q\mu n \mathbf{E}) + \nabla \cdot (qD\nabla n) \quad (2.25)$$

L'opérateur $\nabla \cdot (qD\nabla n)$ est un opérateur elliptique qui conduit à une matrice symétrique. Par contre, l'opérateur $\nabla \cdot (q\mu n \mathbf{E})$ est un opérateur hyperbolique qui conduit à une matrice asymétrique. La matrice résultant de la somme du courant de dérive et de diffusion est donc non symétrique, et ceci quelle que soit la méthode de discrétisation utilisée (éléments finis, différences finies ou volumes finis).

II.5.a Changement de variable

A cause de ces difficultés numériques, nous allons reformuler le problème de dérive-diffusion en utilisant une nouvelle variable autre que la densité électronique n . Dans ce qui suit, nous allons voir comment il est possible de réécrire les équations de dérive-diffusion en utilisant le quasi-potentiel de Fermi, défini dans la section II.2, comme variable d'état. La densité d'électrons étant donnée par une exponentielle, donc il est facile d'isoler le quasi-potentiel de Fermi comme suit :

$$n = n_i \exp\left[\frac{q}{k_B T}(\phi - \phi_n)\right] \Leftrightarrow \phi_n = \phi - \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad (2.26)$$

Ensuite, on prend le gradient du quasi-potentiel, en tenant compte du fait que la température est constante. On obtient alors l'égalité suivante :

$$\nabla \phi_n = \nabla \phi - \frac{k_B T}{q} \frac{\nabla n}{n} \quad (2.27)$$

En multipliant les deux côtés de l'égalité par $-q\mu n$, on aboutit à l'expression standard du courant donnée par (2.24) :

$$-q\mu n \nabla \phi_n = -q\mu n \nabla \phi + \mu k_B T \nabla n = q\mu n \mathbf{E} + qD\nabla n = \mathbf{J} \quad (2.28)$$

En résumé, afin de passer d'une équation hyperbolique à une équation elliptique, les équations (2.23) et (2.24) seront remplacées par les deux équations suivantes, en utilisant comme nouvelle inconnue le quasi-potentiel de Fermi :

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \cdot (-q\mu n \nabla \phi_n) = -(R - G) \quad (2.29)$$

$$\mathbf{J} = -q\mu n \nabla \phi_n \quad (2.30)$$

Les avantages de cette nouvelle formulation des équations sont :

- le passage à une équation elliptique permettra d'utiliser une résolution par la méthode classique de Galerkin sur un maillage d'éléments finis quelconque. Nous exposerons cette technique dans la prochaine section.
- le passage à un problème dual permettra d'envisager une formulation par éléments mixtes [Lepaul96]. Par analogie à l'équation de Poisson, où la variable duale du potentiel électrostatique ϕ est la densité d'induction \mathbf{d} , la variable duale vectorielle du quasi-potentiel de Fermi ϕ_n sera la densité de courant \mathbf{J} pour l'équation de continuité de courant.

La formulation du modèle de dérive-diffusion que nous avons choisi de résoudre est basée sur les deux hypothèses suivantes :

- 1- En régime statique, les dérivées temporelles disparaissent des équations.
- 2- Absence du terme de génération-recombinaison.

Nous aboutissons alors au système d'équations complet (en tenant compte cette fois de la présence des trous) :

$$\begin{cases}
 \nabla(\varepsilon \nabla \phi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \\
 \nabla(q\mu_n n \nabla \phi_n) = 0, \nabla(q\mu_p p \nabla \phi_p) = 0 \\
 \mathbf{J}_n = -q\mu_n n \nabla \phi_n, \mathbf{J}_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p \\
 n = n_i \exp(q(\phi - \phi_n)/k_B T) \\
 p = n_i \exp(q(\phi_p - \phi)/k_B T) \\
 + \text{conditions aux limites}
 \end{cases} \quad (2.31)$$

Nous avons employé la méthode des éléments finis nodaux pour traiter ce système d'équations (2.31), en considérant les trois inconnues ϕ , ϕ_n , et ϕ_p comme des variables d'états principales, et les densités n et p comme des variables d'états dérivées (elles sont directement déduites à partir des trois variables d'états principales). L'équation de Poisson permet de calculer, en chaque nœud, le potentiel électrostatique ϕ . Tandis que les deux équations de conservation de courant fournissent, en chaque nœud, les quasi-potentiels de Fermi pour les électrons ϕ_n et les trous ϕ_p . En chaque nœud, les densités d'électrons et de trous sont estimées à partir de la statistique de Boltzmann en calculant l'exponentielle de la différence entre le potentiel électrostatique et le quasi-potentiel de Fermi. Les densités de courants d'électrons et de trous sont des variables physiques vectorielles. Elles sont calculées, en chaque nœud, par les deux expressions de \mathbf{J}_n et \mathbf{J}_p .

II.5.b Conditions aux limites

La frontière de la structure à simuler se compose de deux sous-domaines, les contacts métalliques d'une part, où l'on considère des conditions de Dirichlet simples et le reste de la frontière d'autre part, où l'on impose des conditions de Neumann homogènes.

Les contacts

Il existe deux types de contacts, les contacts ohmiques et les contacts Schottky. Dans un composant MOS, le drain et la source sont considérés comme des contacts ohmiques (le dopage est choisi élevé), alors que la grille est traitée comme un contact Schottky défini par la fonction de travail ϕ_m (*workfunction*) du métal.

Le drain

Nous imposons une tension constante notée V_d . Le dopage sur ce contact étant connu et égal à la densité d'ions donneurs N_D^+ , les conditions aux limites sur le drain sont alors :

$$\begin{aligned} n_d &= N_D^+ \\ p_d &= n_i^2 / N_D^+ \\ V_d &= c^{\text{ste}} \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} \phi = V_d \\ \phi_n = \phi_p = V_d - \frac{k_B T_0}{q} \ln\left(\frac{N_D^+}{n_i}\right) \end{cases} \quad (2.32)$$

La source

Nous appliquons les mêmes conditions que sur le drain sauf que le potentiel appliqué est nul :

$$\begin{aligned} n_s &= N_D^+ \\ p_s &= n_i^2 / N_D^+ \\ V_s &= 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} \phi = 0 \\ \phi_n = \phi_p = -\frac{k_B T_0}{q} \ln\left(\frac{N_D^+}{n_i}\right) \end{cases} \quad (2.33)$$

La grille

La grille est un contact métallique complètement entouré par un isolant et connecté à un potentiel fixe noté V_g . Donc, elle peut être considérée comme en contact Schottky pour tenir compte de la barrière de potentiel $V_b = \phi_m - \chi$, qui existe entre le métal et le semiconducteur. On obtient les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} n_g &= N_c \exp(-qV_b/k_B T_0) \\ p_g &= n_i^2 / n_g \\ V_g &= c^{\text{ste}} \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} \phi = V_g \\ \phi_n = \phi_p = V_g + \phi_m - \chi - \frac{\epsilon_g}{2q} - \frac{k_B T_0}{2q} \ln\left(\frac{N_c}{N_v}\right) \end{cases} \quad (2.34)$$

où χ est l'affinité électronique du matériau, \mathcal{E}_g est le "bandgap", N_c et N_v sont les densités effectives d'états dans la bande de conduction et de valence, respectivement.

Les densités d'électrons et de trous à l'intérieur de l'isolant sont nulles : $n_{ox} = p_{ox} = 0$.

Le reste du contour

Sur le reste du contour, on impose une condition de Neumann homogène pour le potentiel et les quasi-potentiels de Fermi.

$$\begin{cases} \nabla\phi \cdot i_n = 0 \\ \nabla\phi_n \cdot i_n = 0 \\ \nabla\phi_p \cdot i_n = 0 \end{cases} \quad \text{avec } i_n : \text{composante normale} \quad (2.35)$$

II.5.c Modèles de mobilité

Les modèles de mobilité que nous avons utilisés sont ceux qu'on rencontre souvent dans la littérature [Markowich89], [Engl83], et ceux utilisés dans les logiciels de SILVACO [Silvaco95]. La mobilité des porteurs résulte des différents mécanismes d'interactions. Tout d'abord les porteurs interagissent avec les phonons et les défauts, aboutissant à une mobilité relativement élevée dans le volume d'un semiconducteur faiblement dopé. Cette mobilité est réduite par les interactions coulombiennes avec les atomes d'impuretés ionisées. Caughey et Thomas [Caughey67] ont donné l'expression suivante pour ajuster les données expérimentales sur la mobilité des porteurs majoritaires dans le silicium à 300°K :

$$\mu(N_T) = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + (N_T/N_{ref})^\alpha} \quad (2.36)$$

où $N_T = N_D^+ + N_A^-$ est la concentration totale du dopage. Un ajustement de l'expression (2.36) par des mesures plus récentes [Baccarani75] conduit aux coefficients donnés dans la table 1. Habituellement, la même expression est utilisée pour la mobilité des porteurs minoritaires.

	μ_{max} ($cm^2V^{-1}s^{-1}$)	μ_{min} ($cm^2V^{-1}s^{-1}$)	N_{ref} (cm^{-3})	α
Electrons	1360	92	1.3×10^{17}	0.91
Trous	520	65	2.4×10^{17}	0.61

Table 1 : Paramètres de mobilité.

La dépendance mobilité-champ électrique, mesurée dans du silicium faiblement dopé à 300°K, peut être prise en compte par l'expression suivante [Caughey67] :

$$\mu(E) = \mu(N_T) \left[1 + \left(\mu(N_T) \frac{|E|}{v_{sat}} \right)^\beta \right]^{-\frac{1}{\beta}} \quad (2.37)$$

avec β une constante, qui vaut 2 pour les électrons et 1 pour les trous. $|E|$ représente le module du champ électrique, et v_{sat} la vitesse de saturation des porteurs (1.1×10^7 cm/s pour les électrons et 9.5×10^6 cm/s pour les trous).

En ce qui concerne la simulation des composants MOS, la mobilité dans le canal est davantage réduite par des mécanismes de collision supplémentaires sur la couche d'oxyde dû à la rugosité de surface et à la charge d'interface. Pour prendre en compte cet effet, une loi empirique a été proposée par [Crawford67] pour la mobilité effective dans le canal, qui est de la forme :

$$\mu_{eff} = \mu_0 \left[1 + \theta (V_g - V_{th}) \right]^{-1} \quad (2.38)$$

où μ_0 est la mobilité à faible champ (nous prenons la valeur de $\mu(N_T)$ donnée par la relation (2.36)), V_{th} est la tension de seuil (threshold voltage), et $\theta = C_{ox}/Q_c$ est un facteur de réduction de mobilité. La charge critique vaut $Q_c = 10^{13}$ C/cm², et $C_{ox} = \epsilon_{ox}/t_{ox}$ est la capacité grille-oxyde (ϵ_{ox} est la permittivité de l'oxyde, et t_{ox} est son épaisseur).

II.6 Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est l'une des méthodes numériques les plus employées aujourd'hui pour résoudre des équations aux dérivées partielles, notamment les équations de Maxwell qui régissent les phénomènes électromagnétiques. C'est une méthode générale qui s'applique à la majorité des problèmes rencontrés dans la pratique : problèmes stationnaires ou non stationnaires, linéaires ou non linéaires, définis dans un domaine géométrique quelconque à une, deux ou trois dimensions. En plus, elle s'adapte bien aux milieux hétérogènes. Elle consiste à approcher les variables inconnues par un polynôme de degré fini aux nœuds du maillage. Les parties élémentaires sont des polygones. Les géométries conventionnelles sont mieux décrites par ce un maillage aux éléments finis qu'aux différences finies. En effet, la variété des formes d'éléments finis (tétraèdres, hexaèdres, prismes, par exemple en 3D) permet de mailler les régions avec une densité variable. Les conditions aux limites sont prises en compte aisément. Enfin, la méthode est décrite par une théorie mathématique très riche, qui permet de conserver les propriétés des opérateurs mathématiques. Néanmoins, cette méthode exige un traitement particulier des équations, qui sont transformées à l'aide d'une formulation

intégrale, puis discrétisées pour aboutir à un système d'équations algébriques. Cette section est dédiée à la présentation de quelques notions sur la méthode des éléments finis [Sabonnadière86]. Des explications plus détaillées sont fournies dans l'ouvrage [Touzot84].

II.6.a Formulations intégrales et discrétisation

Nous allons exposer les deux formulations intégrales qui sont le plus couramment utilisées dans la méthode des éléments finis : la méthode de Galerkin et la formulation variationnelle. Nous expliciterons ces deux méthodes sur l'exemple du problème électrostatique décrit par l'équation de Poisson :

$$\nabla(\epsilon \nabla \phi) = -\rho \quad (2.39)$$

Les conditions aux limites usuelles sont la condition de Dirichlet ($\phi = \phi_0$), donnée sur une partie Γ_1 de la frontière du domaine Ω , et la condition de Neumann homogène ($\partial\phi / \partial n = 0$), donnée sur le reste de la frontière Γ_2 .

Méthode de Galerkin

On recherche la solution $\phi(x,y,z)$ dans l'ensemble des solutions possibles, c'est-à-dire dans l'ensemble des fonctions continues, dérivables par morceau dans le domaine Ω , et qui vérifient, *a priori*, la condition de Dirichlet sur la partie Γ_1 de la frontière. On peut exprimer le fait que $\phi(x,y,z)$ est solution de l'équation (2.39) et des conditions aux limites associées, en écrivant que, quelle que soit la fonction scalaire $W(x,y,z)$, continue, dérivable par morceau et tel que $W=0$ sur Γ_1 , on doit avoir :

$$\iiint_{\Omega} [\nabla(\epsilon \nabla \phi) + \rho] W \, d\Omega = 0 \quad (2.40)$$

La méthode de Galerkin (méthode des résidus pondérés) consiste à choisir N fonctions de projection (W_1, W_2, \dots, W_N), appelées fonctions tests, indépendantes, et si possible orthogonales, pour lesquelles on écrit l'équation (2.40) comme suit :

$$-\iiint_{\Omega} [\nabla(\epsilon \nabla \phi)] W_i \, d\Omega = \iiint_{\Omega} \rho W_i \, d\Omega \quad (2.41)$$

Après une intégration par partie, et en tenant compte de la condition $\partial\phi / \partial n = 0$ sur Γ_2 , et du choix $W=0$ sur Γ_1 , on obtient le système :

$$\iiint_{\Omega} \epsilon (\nabla \phi \cdot \nabla W_i) \, d\Omega = \iiint_{\Omega} \rho W_i \, d\Omega \quad (2.42)$$

Considérons maintenant un ensemble de NN fonctions indépendantes, continues et dérivables par morceau ($\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{NN}$), appelées fonctions d'approximation (NN représente le nombre

de nœuds). On va approcher la fonction inconnue $\phi(x,y,z)$ par une combinaison linéaire de ces fonctions comme suit :

$$\phi^*(x, y, z) = \sum_{j=1}^{NN} \phi_j \omega_j(x, y, z) \quad (2.43)$$

Les coefficients ϕ_j sont déterminés de façon à satisfaire les équations (2.42) qui deviennent après développement :

$$\sum_{j=1}^{NN} \left[\phi_j \iiint_{\Omega} \varepsilon (\nabla \omega_j \cdot \nabla W_i) d\Omega \right] = \iiint_{\Omega} \rho W_i d\Omega \quad (2.44)$$

En choisissant un nombre de fonctions tests W_i égal au nombre de coefficients inconnus ϕ_j , on obtient un système de NN équations avec NN inconnues. Ce système est de la forme :

$$\sum_{j=1}^{NN} M_{ij} \phi_j = F_i \quad (2.45)$$

avec :

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \iiint_{\Omega} \varepsilon \nabla \omega_i \cdot \nabla W_j d\Omega \\ F_i &= \iiint_{\Omega} \rho W_i d\Omega \end{aligned} \quad (2.46)$$

Lorsque le problème ne comporte que des matériaux dont le comportement est linéaire, le coefficient ε ne dépend pas de la solution et le système matriciel (2.45) est alors linéaire. Dans le cas contraire, où les matériaux peuvent saturer, le terme général M_{ij} de la matrice M dépend à travers le coefficient ε de la solution. Dans ce cas, le système matriciel (2.45) est non linéaire, et l'on doit alors utiliser une méthode itérative (la méthode de Newton-Raphson par exemple) pour le résoudre. Dans le principe de la méthode de Galerkin, les fonctions de projection W_j et les fonctions d'approximation ω_i peuvent être choisies de manière indépendante. Cependant, le choix des fonctions ω_i identiques aux fonctions W_j , permet d'obtenir un système matriciel mieux conditionné. De manière générale, ces fonctions sont polynomiales sur chaque élément du découpage, continues à la frontière entre deux éléments.

Formulation variationnelle

Nous exposerons quelques notions sur cette méthode, dite aussi méthode de Ritz, sur un exemple unidimensionnel. Soit $f(u,v,w)$ une fonction à trois variables continue et dérivable par rapport à ces variables. Nous recherchons la fonction scalaire $\phi(x)$, définie par exemple sur l'intervalle $0 \leq x \leq I$, et vérifiant les conditions limites $\phi(0)=I$ et $\phi(I)=0$, qui rend extrémale la fonctionnelle I :

$$I = \int_0^I f(\phi, \phi', x) dx \quad (2.47)$$

avec ϕ' la dérivée de ϕ par rapport à x .

L'équation d'Euler du problème dont la résolution est équivalente à l'optimisation de la fonctionnelle (2.47) est donnée par :

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi'} \right) = 0 \quad (2.48)$$

en lui associant les conditions aux limites définies précédemment ($\phi(0)=I$, $\phi(1)=0$).

Le principe, développé ici sur un exemple unidimensionnel, peut être facilement étendu à des problèmes multidimensionnels. La fonction f que l'on cherche est appelée fonction de Lagrange associée au système physique décrit par l'équation étudiée. La plupart des modèles, issus des équations de Maxwell, comportent une intégrale de Lagrange I associée d'où l'équation dérive et qui comprend également un terme d'intégrale de frontière afin de tenir compte des conditions aux limites. En revanche, pour certains modèles dynamiques plus complexes, il est plus difficile, voire impossible, de trouver une fonctionnelle associée et c'est la méthode de Galerkin que l'on doit utiliser. En ce qui concerne le modèle électrostatique, l'optimisation de la fonctionnelle suivante :

$$I = \iiint_{\Omega} \left(\int_0^E \mathbf{D} \cdot d\mathbf{e} - \rho \phi \right) d\Omega + \int_{\Gamma_2} |\mathbf{D}_n| \phi d\Gamma \quad (2.49)$$

est équivalent à la résolution tridimensionnelle de son équation d'Euler, qui n'est rien d'autre que l'équation de Poisson (2.39). Le potentiel électrostatique ϕ étant connu sur Γ_1 , et la composante normale de l'induction électrique \mathbf{D}_n étant connu sur Γ_2 .

L'intégrale précédente (2.49) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$I = \iiint_{\Omega} \frac{1}{2} \varepsilon (\nabla \phi)^2 d\Omega - \iiint_{\Omega} \rho \phi d\Omega \quad (2.50)$$

Comme dans la méthode de Galerkin, lorsqu'on remplace la fonction inconnue ϕ par son approximation $\phi^* = \sum_{j=1}^{NN} \phi_j \omega_j$, l'intégrale I devient une fonction des coefficients $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{NN}$.

On écrit alors que cette intégrale est optimale si :

$$\partial I / \partial \phi_i = 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, NN \quad (2.51)$$

Ce qui constitue un système de NN équations aux NN inconnues ($\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{NN}$), dont la solution permet de connaître ϕ^* . Après développement, on obtient donc le système d'équations suivant :

$$\sum_{j=1}^{NN} \phi_j \iiint_{\Omega} \varepsilon (\nabla \omega_i \cdot \nabla \omega_j) d\Omega = \iiint_{\Omega} \rho \omega_i d\Omega \quad (2.52)$$

En fin de compte, comme dans la méthode de Galerkin, on est amené à résoudre le système matriciel qui est de la forme :

$$\sum_{j=1}^{NN} M_{ij} \phi_j = F_i \quad (2.53)$$

avec :

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \iiint_{\Omega} \varepsilon (\nabla \omega_i \cdot \nabla \omega_j) d\Omega \\ F_i &= \iiint_{\Omega} \rho \omega_i d\Omega \end{aligned} \quad (2.54)$$

II.6.b Assemblage des matrices

Pour la construction de la matrice globale du système nous procédons en deux étapes. Nous commençons par une première étape, où nous ramenons le calcul matriciel au niveau local sur chaque élément du maillage. Dans la seconde étape, nous assemblons les matrices dites élémentaires dans une matrice globale de la taille du nombre de nœuds du maillage. La méthode des éléments finis est basée sur le choix des fonctions d'approximation qui sont des fonctions polynomiales par intervalles, qui assurent la continuité et la dérivabilité par morceau de la variable inconnue (ici, le potentiel électrostatique). Le degré de ces polynômes caractérise l'ordre de la méthode. La méthode des éléments finis du premier ordre consiste à découper le domaine d'étude en éléments d'ordre un sur lesquels la variable inconnue est approchée par une fonction linéaire en x , y , et z :

$$\phi^{(e)} = a^{(e)} + b^{(e)}x + c^{(e)}y + d^{(e)}z \quad (2.55)$$

L'exposant (e) correspond à l'élément fini considéré, et les coefficients $a^{(e)}$, $b^{(e)}$, $c^{(e)}$, $d^{(e)}$ sont calculés en fonction des valeurs du potentiel aux sommets de l'élément $\phi_s(x_s, y_s, z_s)$ par la résolution du système linéaire :

$$\phi_s = a^{(e)} + b^{(e)}x_s + c^{(e)}y_s + d^{(e)}z_s \quad (2.56)$$

On trouve alors que la variable $\phi^{(e)}(x, y, z)$ s'exprime par une combinaison linéaire des valeurs du potentiel aux sommets de l'élément considéré :

$$\phi^{(e)}(x, y, z) = \sum_s \omega_s^{(e)}(x, y, z) \phi_s \quad (2.57)$$

où les fonctions de forme $\omega_s^{(e)}$ de l'élément (e) sont aussi des fonctions linéaires en x , y , z . Elles vérifient les relations suivantes sur les sommets i et j de l'élément (e) :

$$\omega_i^{(e)}(x_j, y_j, z_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (2.58)$$

et

$$\sum_i \omega_i^{(e)}(x, y, z) = 1$$

Les termes M_{ij} et F_i du système (2.53) interviennent sous la forme d'une somme d'intégrales appliquées à chacun des éléments de maillage. Ils sont nuls pour tous les éléments auxquels n'appartiennent pas les nœuds i et j . On peut donc écrire ce terme sous la forme d'une somme de tous les termes élémentaires :

$$M_{ij} = \sum_{(e)} M_{ij}^{(e)} \quad (2.59)$$

où les termes $M_{ij}^{(e)}$ et $F_i^{(e)}$ sont obtenus par le calcul des expressions (2.54) sur l'élément correspondant :

$$M_{ij}^{(e)} = \iiint_{(e)} \varepsilon \left(\nabla \omega_j^{(e)} \cdot \nabla \omega_j^{(e)} \right) d\Omega$$

$$F_i^{(e)} = \iiint_{(e)} \rho \omega_i^{(e)} d\Omega \quad (2.60)$$

Le calcul de ces intégrales triples est fait suivant la méthode numérique de Gauss, qui consiste à remplacer l'intégrale par une somme finie pondérée. L'algorithme de construction matriciel consiste donc à prendre tous les sommets libres un par un, et à calculer les termes M_{ij} correspondant à chacun des éléments finis qui contiennent les sommets i et j .

II.6.c Résolution du système matriciel

Quelle que soit la méthode utilisée, on doit résoudre un système d'équations algébriques linéaires de grande dimension dont la matrice est creuse, car les nœuds reliés entre eux par des éléments sont très nombreux au sein d'un découpage. Si la numérotation des nœuds a été bien conduite, cette matrice a une structure bande. Parmi les méthodes de résolution disponibles, on distingue les méthodes directes qui conduisent à une solution en un nombre d'opérations connu d'avance, et les méthodes indirectes qui donnent une solution par un processus itératif.

- Les méthodes directes les plus utilisées sont la méthode de Cholesky, pour une matrice symétrique définie positive, et la méthode de Gauss pour les autres systèmes.
- Une des méthodes indirectes les plus performantes, applicable sur les matrices symétriques définies positives, est connue sous le nom de ICCG (*Incomplete Cholesky Conjugate Gradient*). Dans cet algorithme, la méthode des gradients conjugués est appliquée sur le système pré-conditionné par une matrice triangulaire L . Cette matrice s'obtient par une décomposition incomplète de Cholesky de la matrice M . Lorsque la matrice n'est pas symétrique définie positive, on peut recourir à une méthode de type bigradient avec pré-conditionnement de Gauss.

Après ces quelques rappels sur la méthode des éléments finis, nous allons revenir à notre modèle de dérive-diffusion afin d'expliquer la procédure que nous avons employée pour la résolution de ses équations.

II.7 Procédure de simulation

Avant tout, pour discrétiser les équations du modèle de dérive-diffusion (afin de passer des équations différentielles continues à des équations algébriques discrètes), nous avons appliqué la méthode nodale de Galerkin, avec des éléments de Lagrange d'ordre un (c'est-à-dire que la solution est approchée par une interpolation linéaire sur chaque élément du maillage). Notons que des éléments de Lagrange d'ordre supérieur sont aussi utilisables. Les équations de Poisson et de continuité des courants sont des équations elliptiques dont les inconnues sont le potentiel électrostatique et les quasi-potentiels de Fermi des électrons et des trous. La dérivation sur chaque élément fini de ces trois quantités permet d'obtenir le champ électrique et les densités de courants. Pour le calcul des courants d'électrons et de trous, on doit multiplier le gradient des quasi-potentiels de fermi ϕ_n et ϕ_p par les quantités $q\mu_n n$ (pour les électrons) et $q\mu_p p$ (pour les trous) afin d'obtenir les densités de courants J_n et J_p , puis évaluer leurs flux à travers une surface choisie au préalable (les contacts de source ou de drain, par exemple).

En ce qui concerne la méthode de résolution des systèmes matriciels issus de la discrétisation nodale des équations, nous avons utilisé la méthode indirecte du gradient conjugué avec factorisation incomplète de Cholesky (ICCG), aussi bien pour l'équation de Poisson que pour les équations de continuité des courants d'électrons et de trous. Il est à remarquer que les équations de continuité de courant possèdent une non-linéarité qui ne se situe pas au second membre, comme c'est le cas pour l'équation de Poisson, mais plutôt au niveau de la matrice du système. En effet, la présence de la densité d'électrons (ou de trous) dans le premier membre des équations de continuité de courant provoque des non-linéarités liées à sa dépendance du quasi-potential de Fermi. En plus, les densités de porteurs libres ont la fâcheuse habitude de varier brusquement dans l'espace, ce qui provoque des comportements singuliers de la solution des équations de continuité des courants. Par conséquent, une meilleure approche de résolution serait de tenir compte de ces non-linéarités et des divers couplages qui existent entre les différentes équations en appliquant un algorithme simultané de Newton-Raphson [Rafferty85], [Fichtner83] qui regroupe les trois équations du modèle dans un seul système matriciel. Néanmoins, il faut signaler que le

système matriciel qui en résulte est très volumineux, surtout en trois dimensions, et sa résolution est très coûteuse en temps CPU, ce qui exige des moyens de calcul très puissants.

La procédure de résolution que nous avons suivie est basée sur la méthode décollée de Gummel avec un facteur de relaxation. La méthode de Gummel [Gummel64], [Rafferty85] consiste à résoudre l'équation de Poisson en fixant les quasi-potentiels de Fermi, ensuite les équations de continuité de courants sont résolues avec la nouvelle valeur du potentiel. A chaque cycle de l'algorithme de simulation, nous procédons alors par trois étapes suivantes :

- 1- Estimation des densités de porteurs libres (électrons + trous).
- 2- Calcul du potentiel électrostatique par résolution de l'équation de Poisson.
- 3- Calcul des quasi-potentiels de Fermi des électrons et des trous par résolution des deux équations de continuité de courant.

Au départ, nous initialisons les densités d'électrons n^0 et de trous p^0 (par exemple, des densités qui assurent la neutralité électrique sur tout le dispositif simulé), à partir desquelles nous résolvons l'équation de Poisson pour calculer une première valeur du potentiel électrostatique ϕ^0 . Après, nous résolvons les deux équations de continuité de courant pour calculer les valeurs des quasi-potentiels de Fermi ϕ_n^0 et ϕ_p^0 . Avec ces trois grandeurs, nous évaluons de nouveau les densités d'électrons n^1 et de trous p^1 par les statistiques de Boltzmann. Après cette première itération, nous relaxons les densités avec un paramètre ω_n pour les d'électrons et un paramètre ω_p pour les trous, selon les deux relations qui suivent :

$$n^1(\phi^0, \phi_n^0) = n^1(\phi^0, \phi_n^0)(1 - \omega_n) + \omega_n n^0 \quad (2.61)$$

$$p^1(\phi^0, \phi_p^0) = p^1(\phi^0, \phi_p^0)(1 - \omega_p) + \omega_p p^0 \quad (2.62)$$

A l'itération i , la résolution de l'équation de Poisson à partir des densités relaxées n^{i-1} et p^{i-1} nous donne le potentiel électrostatique ϕ^i , et par résolution des équations de continuité de courant, nous obtenons les nouvelles valeurs des quasi-potentiels de Fermi ϕ_n^i et ϕ_p^i . Ensuite nous effectuons une nouvelle évaluation et relaxation des densités $n^i(\phi^i, \phi_n^i)$ et $p^i(\phi^i, \phi_p^i)$ suivant les relations générales suivantes :

$$n^i(\phi^i, \phi_n^i) = n^i(\phi^i, \phi_n^i)(1 - \omega_n) + \omega_n n^{i-1}(\phi^{i-1}, \phi_n^{i-1}) \quad (2.63)$$

$$p^i(\phi^i, \phi_p^i) = p^i(\phi^i, \phi_p^i)(1 - \omega_p) + \omega_p p^{i-1}(\phi^{i-1}, \phi_p^{i-1}) \quad (2.64)$$

Un test d'erreur sur les densités n et p nous permet de contrôler la convergence de la solution calculée. Si les erreurs relatives entre deux valeurs successives dépassent une certaine tolérance fixée d'avance, on reprend le calcul en suivant les trois étapes précédentes.

Signalons qu'aux premières itérations, une faible relaxation est nécessaire pour éviter que les densités n et p n'atteignent des valeurs incontrôlables. En effet, il faut se rappeler que celles-ci sont exprimées par des exponentielles de la différence entre le potentiel électrostatique et le quasi-potentiel de Fermi. Par conséquent, une faible augmentation de cette différence se traduirait par une forte augmentation de l'exponentielle, ce qui peut provoquer l'explosion des densités de porteurs (problèmes d'*overflow*). Une approche commune pour échapper à ces problèmes de convergence est de débiter le calcul avec une solution assurant l'équilibre thermique du composant à polarité nulle, et d'essayer de monter vers le point de polarité demandé étape par étape, en utilisant la solution du point précédent comme une estimation initiale pour résoudre le point courant. Puisque, dans plusieurs cas, nous sommes intéressés par un ensemble de points de fonctionnement du composant, cette approche semble être tout à fait évidente, et nous l'avons appliquée pour simuler quelques composants à semiconducteurs.

II.8 Applications numériques

II.8.a Diode n^+nn^+

En premier lieu, nous considérons une diode n^+nn^+ à silicium de taille submicronique, illustrée dans la figure II.1. Pour comparaison, nous prenons les mêmes paramètres que ceux qui sont dans l'article [Fortin96]. La diode consiste en deux régions n^+ fortement dopées, séparées par une région n faiblement dopée. Chacune des deux régions n^+ est de longueur $0.1\mu\text{m}$, et dopée à $N_D^+ = 5.10^{+23} \text{ m}^{-3}$. La région n est de même longueur $0.1\mu\text{m}$, et dopée à $N_D = 2.10^{+21} \text{ m}^{-3}$. Nous présentons également sur la figure II.1 une vue globale du maillage hexaédrique de la structure. Celui-ci consiste en 1350 mailles au total, avec 90 éléments équidistants dans la direction OX entre les deux électrodes, et un nombre total de nœuds égal à 2184.

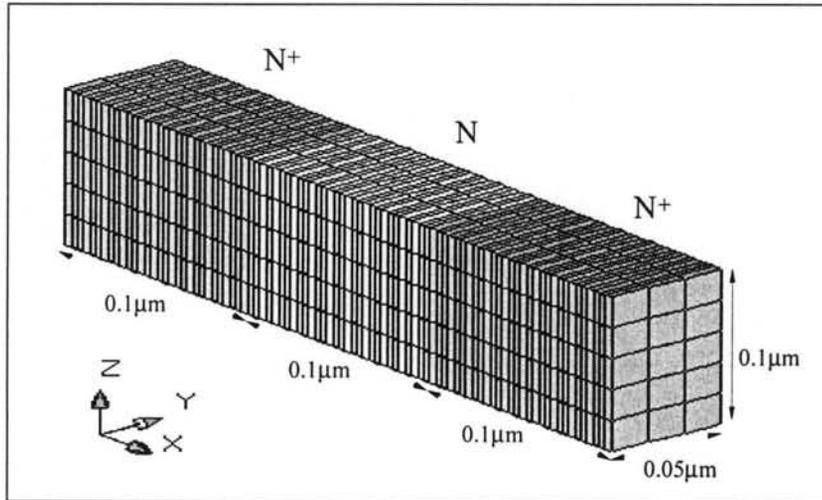


Figure II.1 : Structure 3D de la diode n^+nn^+ simulée.

Les résultats de simulations tridimensionnelles effectuées sur ce dispositif, à température ambiante $T_0 = 300^\circ \text{K}$, sont obtenus pour quatre valeurs de la tension appliquée aux bouts de la diode ; $V_{app} = 0.5, 1, 1.5$ et 2 volts. Sur la figure II.2, la densité de courant électronique J_n dans le dispositif est représentée sous forme de flèches et d'isovaleurs (dégradé de couleurs) de son module. Nous avons pu vérifier que le courant des trous est très négligeable devant celui des électrons. En effet, les trous sont minoritaires dans ce type de dispositif. Comme nous pouvons facilement le voir sur la figure II.2, le courant est unidirectionnel et uniforme entre les deux électrodes. Sa valeur est d'environ $0.175 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. Nous remarquons quelques petites perturbations au niveau des jonctions, qu'on pourrait éliminer par un maillage plus serré au niveau de ces dernières.

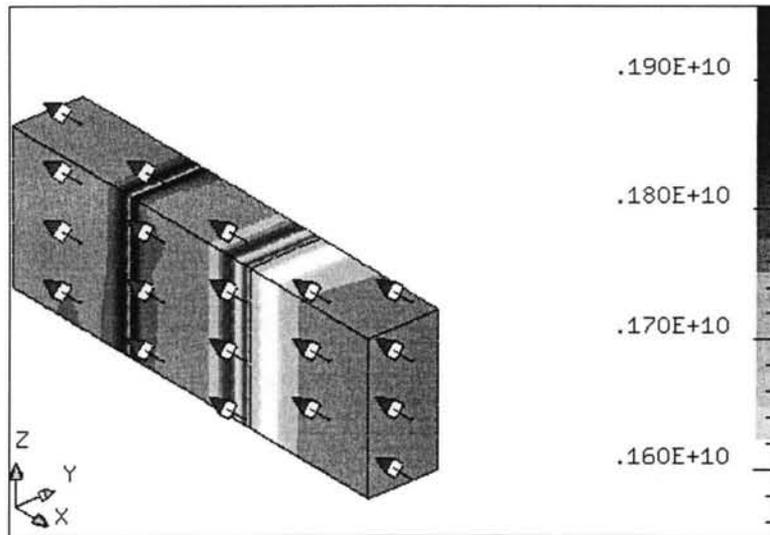


Figure II.2 : Vecteur densité de courant électronique, pour une tension appliquée de 1 volt.

Les trois figures qui suivent représentent des reliefs calculés sur le plan horizontal XOY. Notez que les deux axes x , y sur les trois reliefs sont normalisés par rapport à leurs longueurs respectives L et H . La figure II.3 illustre les variations spatiales du potentiel électrostatique entre les deux électrodes pour une tension appliquée de 1 volt.

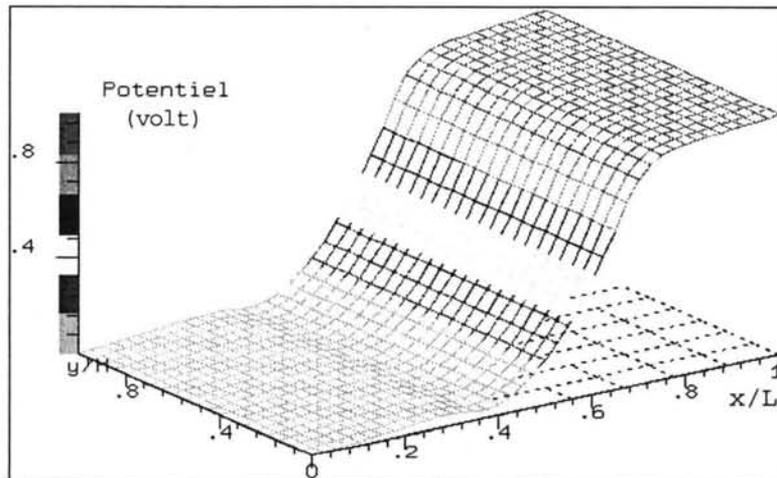


Figure II.3 : Potentiel électrostatique sur un plan de coupe horizontale, pour une tension appliquée de 1 volt.

La figure II.4 illustre les variations spatiales de la densité entre les deux électrodes pour une tension appliquée de 1 volt. Nous remarquons que des électrons diffusent au niveau des jonctions nn^+ de la partie la plus dopée vers la partie la moins dopée. En particulier, le phénomène de diffusion d'électrons est plus prononcé du côté droit où le potentiel 1 volt est appliqué. En effet, dans cet endroit, le champ électrique est nettement plus fort, donc la force de dérivation est plus importante. Des résultats semblables ont été obtenus par une simulation du même dispositif faite en 2D sur le logiciel Atlas, particulièrement en ce qui concerne la

densité n et du potentiel électrostatique. En outre, nous avons constaté un bon accord entre nos résultats sur la densité électronique est ceux présentés dans [Fortin96], qui emploie un modèle hydrodynamique pour traiter cette structure en une dimension.

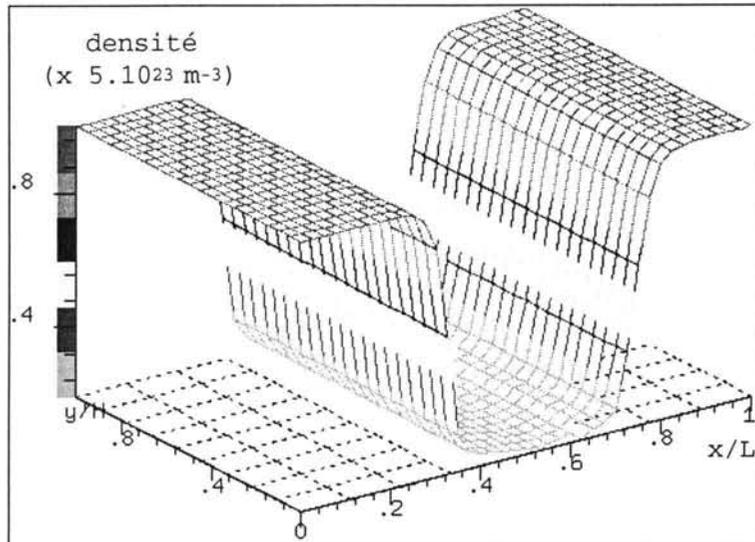


Figure II.4 : Densité électronique sur un plan de coupe longitudinale, pour une tension appliquée $V_{app}=1V$.

Enfin, la figure II.5 illustre les variations spatiales de la densité de charge totale (la somme des charges fixes et libres en C/m^3) entre les deux électrodes pour la même tension appliquée, 1 volt . Sur les trois reliefs présentés, et comme on pourrait s'y attendre, nous ne remarquons pas d'effets tridimensionnels (selon la troisième direction : axe OY). En effet, étant donnée la structure simple du dispositif, une étude unidimensionnelle serait suffisante. Néanmoins, cet exemple nous a servi avant tout pour tester les performances et la fiabilité du simulateur réalisé.

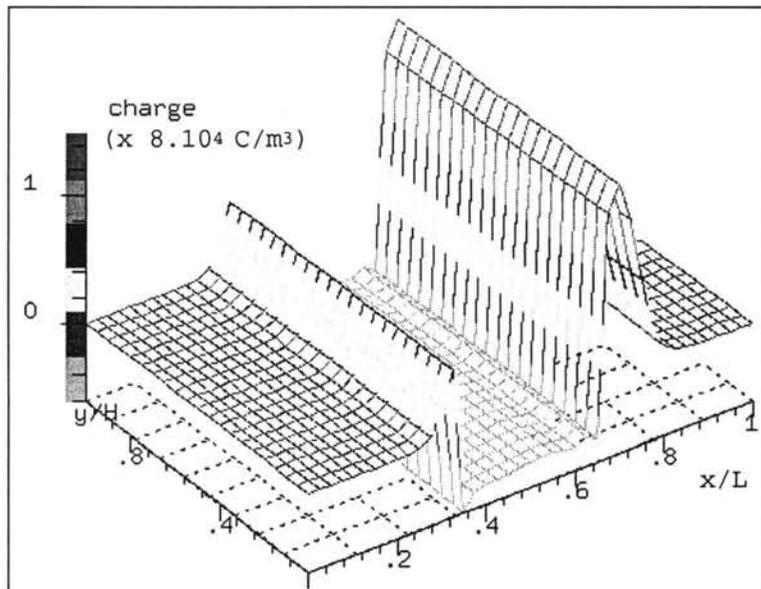


Figure II.5 : Densité de charge totale sur un plan de coupe longitudinale, pour $V_{app}=1V$.

Maintenant, je vais présenter l'évolution des trois grandeurs précédentes en fonction de la distance le long de l'axe entre les deux électrodes pour quatre valeurs de la tension appliquée : 0.5, 1, 1.5 et 2V. Pour ces quatre polarités, la figure II.6 représente les courbes de variations du potentiel électrostatique entre les deux électrodes en fonction de la tension appliquée. La figure II.7 représente en échelle réduite par la valeur N_D^+ les courbes de variations de la densité n entre les deux électrodes en fonction de la tension appliquée, et la figure II.8 illustre celles de la charge totale.

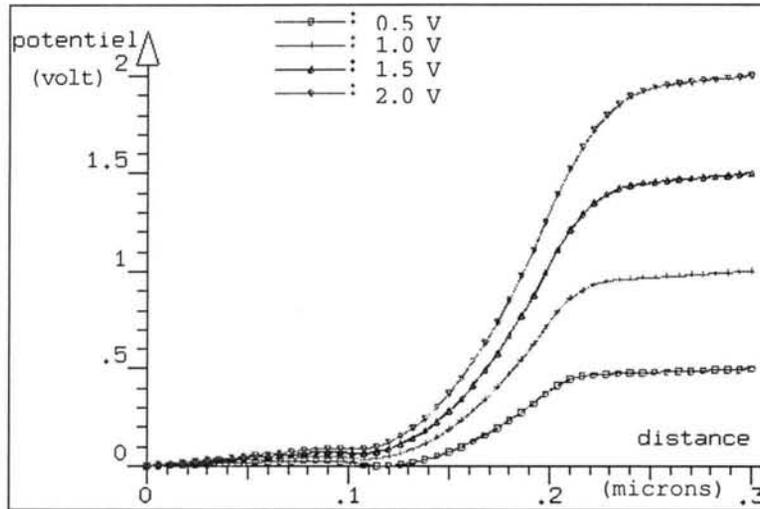


Figure II.6 : Variations du potentiel électrostatique le long de l'axe source-drain, pour quatre valeurs de tension appliquée.

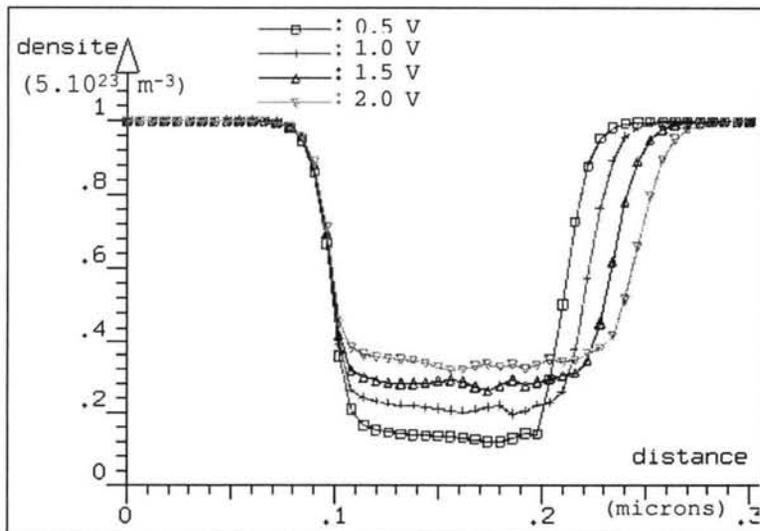


Figure II.7 : Variations de la densité d'électrons le long de l'axe source-drain, pour quatre valeurs de tension appliquée.

La figure II.9, qui suit, représente les variations spatiales du champ électrique en kV/cm en fonction de la tension appliquée. On remarque la forte force de dérive du côté de l'électrode droite. De même, on notera l'uniformité du module de la densité de courant (figure II.10) le long de l'axe source-drain. Des petites perturbations sont observables au niveau des jonctions.

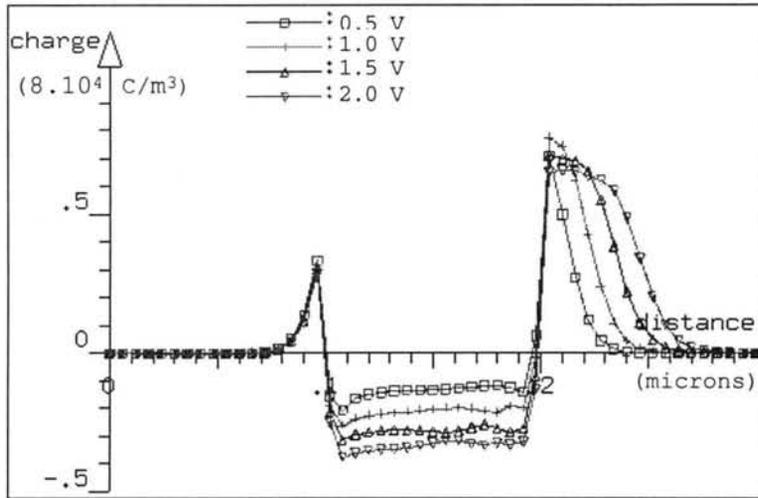


Figure II.8 : Variations de la charge totale le long de l'axe source-drain, pour quatre valeurs de tension appliquée.

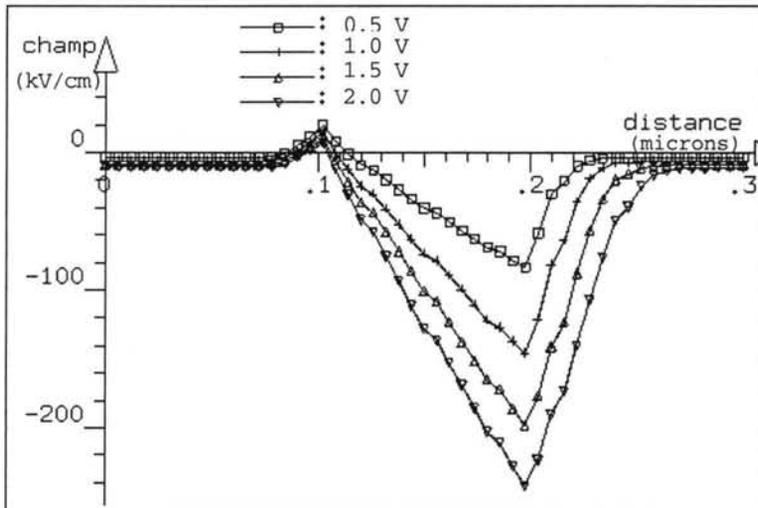


Figure II.9 : Variations du champ électrique le long de l'axe source-drain, pour quatre valeurs de tension appliquée.

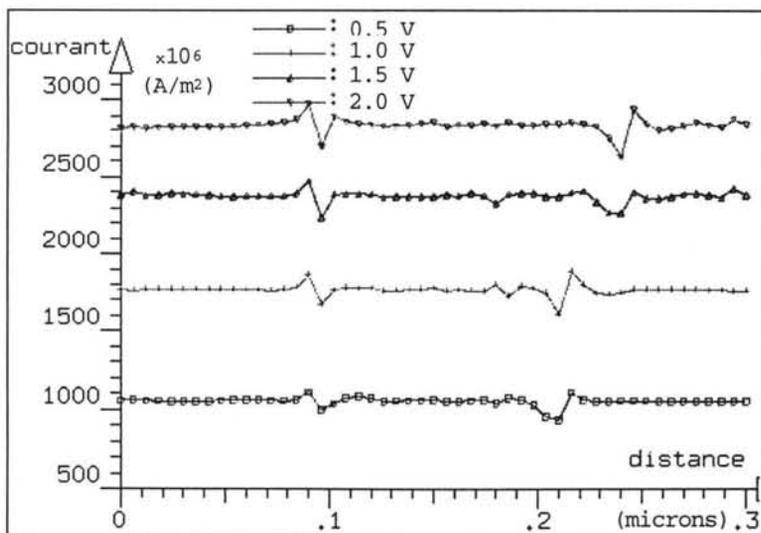


Figure II.10 : Variations de la densité de courant le long de l'axe source-drain, pour quatre valeurs de tension appliquée.

Pour terminer avec cette première application, nous présentons sur la figure II.11 l'évolution au cours des itérations de l'erreur relative commise sur la densité électronique pour deux valeurs de la tension appliquée 1 et 2 volts. Dans les deux cas, une erreur relative finale de moins de 5% est obtenue après 200 résolutions des équations, qui correspondent à un temps CPU de moins de trois heures sur une station HP série J224 pour chaque courbe.

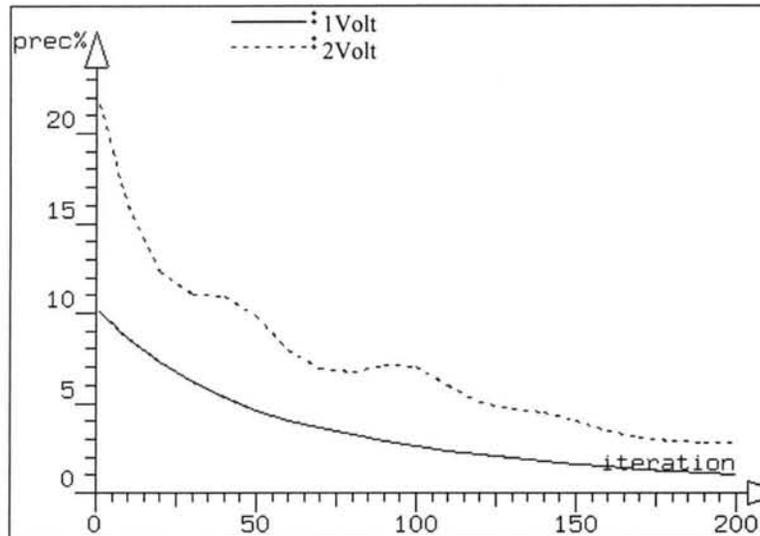


Figure II.11 : Variations de l'erreur relative sur la densité d'électrons en fonctions des itérations, pour : $V_{app} = 1$ et $2V$

Profitons de ce graphe pour mettre en évidence l'importance du coefficient de relaxation par rapport à la vitesse de convergence. Dans notre étude, nous l'avons choisi constant et égal à 1% afin d'éviter des problèmes d'overflow de la densité électronique, mais il semble clair que la vitesse de convergence est pénalisée par ce choix dès la 30^{ème} itération. Une relaxation adaptative constituerait un meilleur choix de ce point de vue.

II.8.b Composant MOS

La deuxième structure, que nous avons traitée en trois dimensions, est un petit transistor MOS à silicium et à canal n. La configuration du dispositif est décrite à la figure II.12. Ses principales caractéristiques sont : la largeur de la grille est de $0.2\mu m$. Les contacts de source et de drain s'élèvent sur une hauteur de $0.03\mu m$. Les caissons n⁺ sont d'une largeur de $0.1\mu m$, et sont fortement dopés à $N_D^+ = 4.10^{+17} cm^{-3}$. Le substrat, de largeur $0.4\mu m$ et de hauteur $0.1\mu m$, est dopé p avec $N_A^- = 1.10^{+14} cm^{-3}$. L'épaisseur de la couche isolante (oxyde de silicium SiO₂), séparant le contact métallique grille de la partie semi-conductrice du composant, est de 5 nanomètres. Nous voyons aussi sur la figure II.12 le maillage hexaédrique de la structure. Il comporte 1600 éléments volumiques, et un nombre total de nœuds égal à 2583. Le maillage est uniforme dans la direction longitudinale source-drain, et non uniforme dans la direction

verticale grille-substrat. La zone active du composant au niveau de l'interface oxyde/silicium est maillée plus fin.

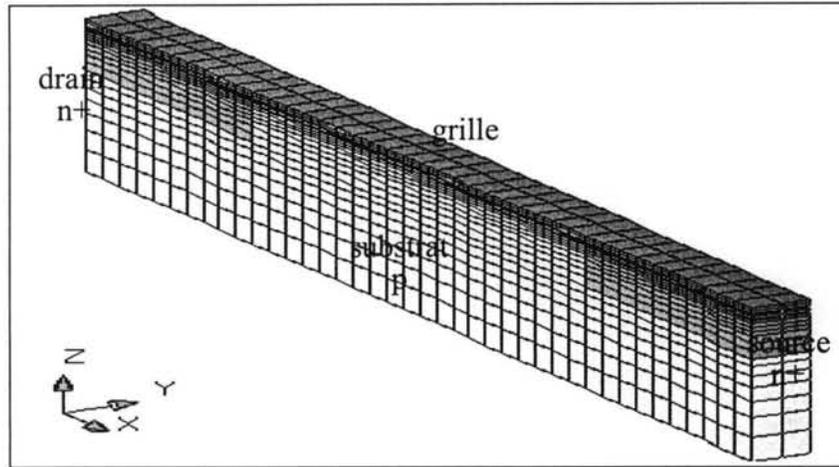


Figure II.12 : Structure 3D du composant MOS simulé.

Tous les résultats de simulations présentés ci-après, sont réalisés en trois dimensions à la température ambiante $T_0 = 300^\circ K$. Etant donné la structure simpliste du dispositif, et comme il était prévisible, nous n'avons pas remarqué des effets tridimensionnels dans la troisième direction (axe OY). Par conséquent, une étude bidimensionnelle serait suffisante dans ce cas de figure. D'ailleurs, c'est la raison pour laquelle le composant est choisi volontairement peu profond et le maillage est grossier dans cette direction, afin de gagner du temps de calcul. Néanmoins, les exemples que nous avons traités nous ont permis de tester la faisabilité de notre approche.

Nous commençons par présenter les variations spatiales de quelques grandeurs caractéristiques pour les polarités $V_g=2V$ et $V_d=0.5V$. Les illustrations qui suivent sont des reliefs calculés sur le plan vertical XOZ. La figure II.13, qui suit, illustre les variations spatiales de la densité électronique dans la partie silicium du MOS. Nous remarquons une forte accumulation des électrons (environ 10^{20} cm^{-3}) au niveau du canal, et une déplétion d'électrons dans le bas du substrat. Une simulation analogue faite en bidimensionnel sur le logiciel **Atlas** a fourni des résultats qui sont en forte corrélation avec les nôtres, notamment en ce qui concerne l'allure de la densité n et du potentiel électrostatique. Ce dernier est présenté à la figure II.14, où nous constatons une forte chute de tension dans la couche d'oxyde à cause d'une forte valeur négative de la charge d'espace à l'interface oxyde/silicium.

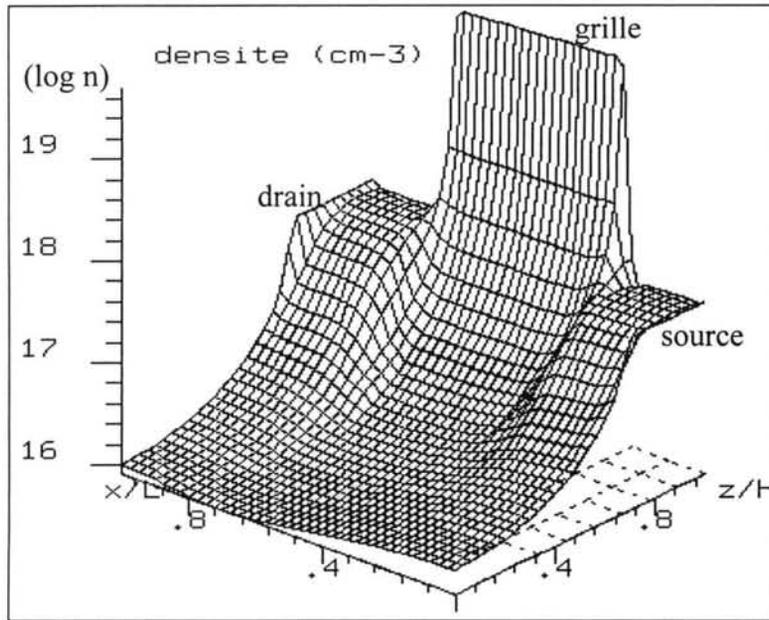


Figure II.13 : Densité électronique sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0.5V$.

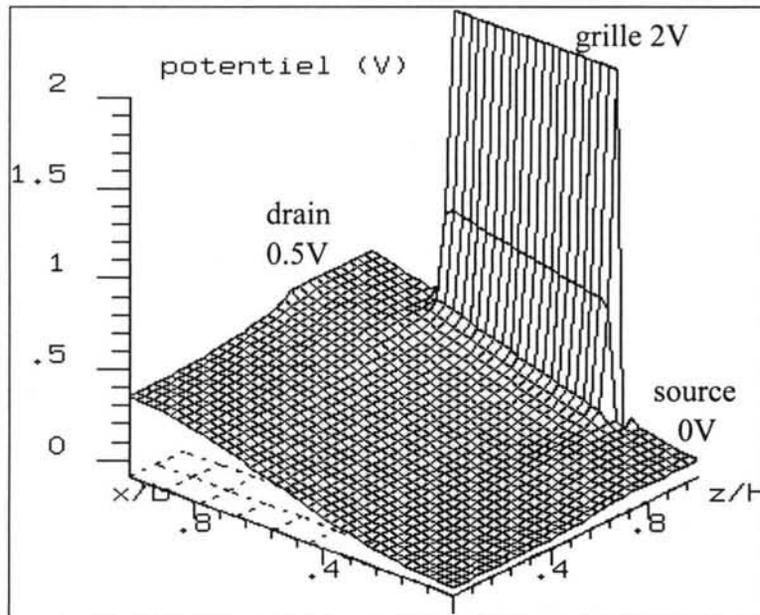


Figure II.14 : Potentiel électrostatique sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0.5V$.

Les deux figures qui suivent donnent les variations spatiales des quasi-potentiels de Fermi pour les électrons (figure II.15) et pour les trous (figure II.16) dans le plan XOZ du composant MOS, pour les mêmes polarités ($V_g=2V$, $V_d=0.5V$).

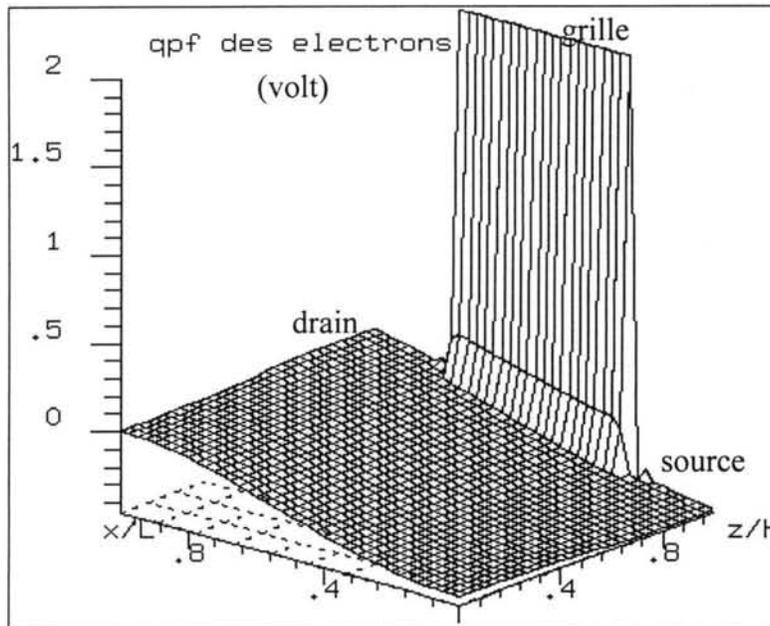


Figure II.15 : Quasi-potential des électrons sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0,5V$.

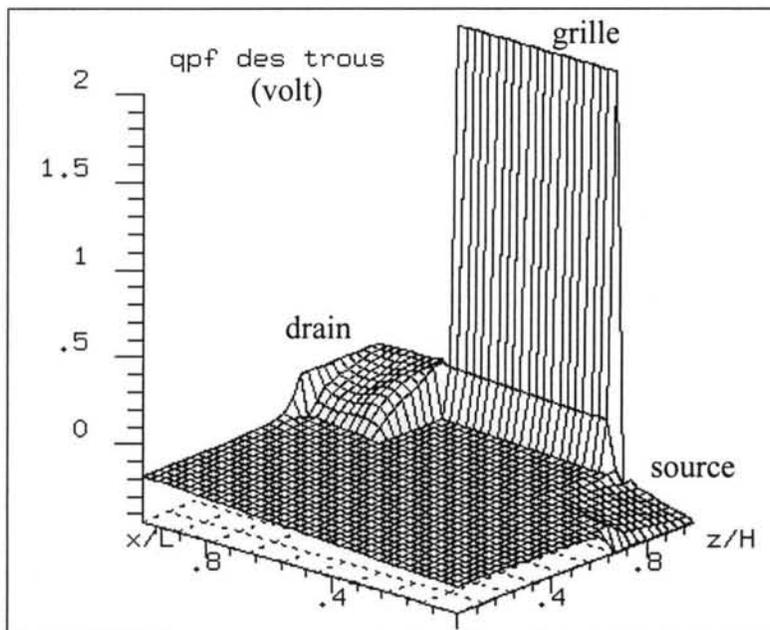


Figure II.16 : Quasi-potential des trous sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0,5V$.

Dans ce qui suit, nous allons présenter l'évolution le long du canal (de la source vers le drain, à l'interface entre l'oxyde et le silicium) de la densité électronique et du potentiel électrostatique pour une tension fixe sur la grille $V_g=2V$ et quatre valeurs de la tension appliquée sur le drain $V_d=0.5, 1, 1.5$ et $2V$. Pour ces conditions de polarité, la figure II.17 représente en échelle logarithmique les courbes de variations de la densité n dans le canal en fonction de la tension drain. Nous constatons que plus on augmente la tension drain moindre est la valeur de la densité électronique dans le canal, en particulier dans la jonction pn du côté

du drain. Ceci est connu sous le nom du phénomène de pincement du canal, dû au champ électrique fort dans cet endroit du canal.

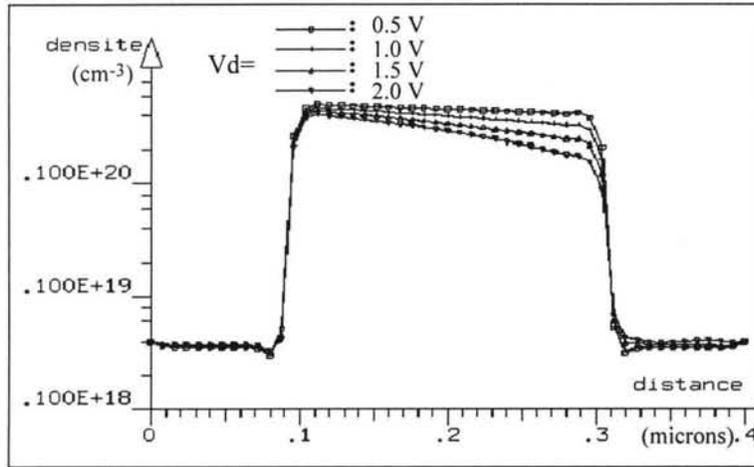


Figure II.17 : Variations de la densité électronique le long de l'axe source-drain, pour $V_g=2V$ et quatre valeurs de V_d .

Egalement pour les mêmes polarités précédentes, la figure II.18 représente les courbes de variations du potentiel électrostatique le long du canal en fonction de la tension drain appliquée.

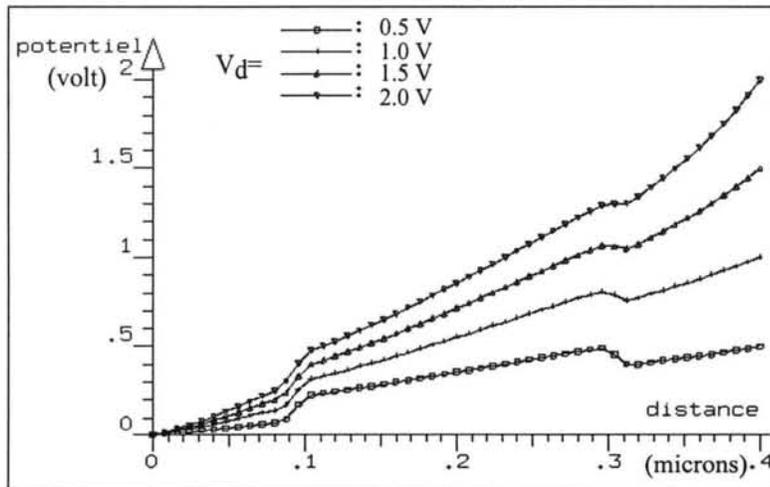


Figure II.18 : Variations du potentiel électrostatique le long de l'axe source-drain, pour $V_g=2V$ et quatre valeurs de V_d .

Le réseau de courbes $I_d(V_d)$, donnant la valeur du courant drain en fonction de la tension appliquée sur le drain, pour quatre valeurs du potentiel grille (0.5, 1, 1.5 et 2 volts) est représenté sur la figure II.19 suivante.

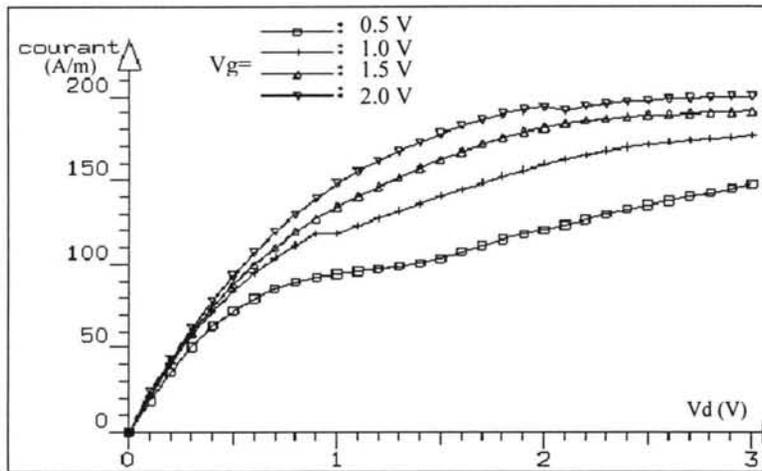


Figure II.19 : Variations du courant drain en fonction de la tension drain, pour quatre valeurs de la tension grille.

La procédure d'obtention de ces courbes se fait en trois étapes :

- Le potentiel sur les trois électrodes (source, drain, et grille) est fixé à zéro pour le calcul d'une solution initiale à l'équilibre. Puis, la tension grille V_g est incrémentée avec un pas uniforme de 0.1 volt jusqu'à la valeur souhaitée, en maintenant les tensions V_d et V_s nulles.
- Une valeur de la tension grille est choisie, et le potentiel au drain est ensuite incrémenté avec un pas uniforme de 0.1 volt jusqu'à la valeur finale désirée. La tension V_s est toujours maintenue à la valeur zéro.
- La dernière étape sert à évaluer le courant drain en intégrant la composante normale de la densité de courant J sur la surface de l'une des électrodes source ou drain.

Le pas d'incrémentation du potentiel a été ajusté à 0.1 volt pour éviter des difficultés de convergence ou des pertes de temps inutiles. En effet, après plusieurs tests, nous avons remarqué qu'un pas plus important peut provoquer l'explosion des densités de porteurs. Et un pas plus faible alourdirait d'avantage et sans raison valable le temps de calcul.

Pour terminer, nous présentons sur la figure II.20, qui suit, l'évolution au cours des itérations de l'erreur relative commise sur le calcul de la densité électronique en fonction de la tension drain pour les polarités $V_g=2V$ et V_d variant entre 0 à 2V par pas de 0.1V. Sur cette figure, où chaque pas de tension drain est résolu en 10 itérations, l'erreur relative minimale obtenue est inférieure à 10%. Le temps CPU total correspondant est moins de trois heures sur une station HP série J224.

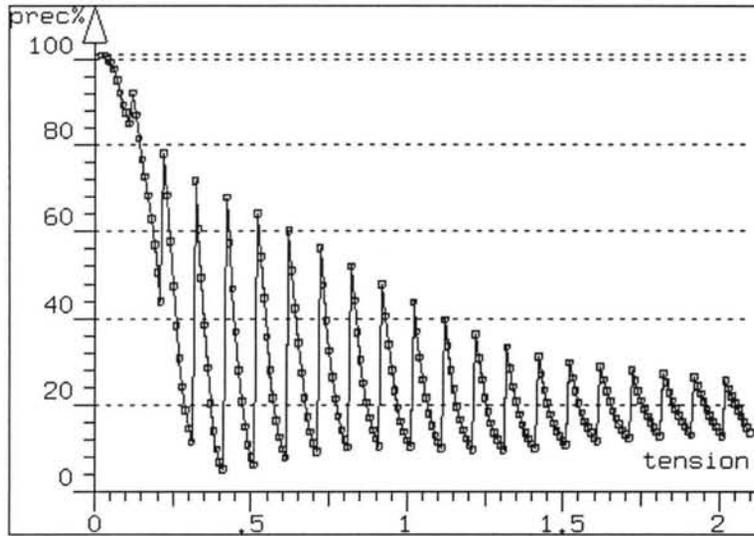


Figure II.20 : Variations de l'erreur relative sur la densité d'électrons en fonction de V_d avec $V_g=2V$ et $V_d=0$ à $2V$ par pas de $0.1V$ (chaque pas est résolu en 10 itérations).

Sur cette courbe, on peut remarquer que la précision aurait sans doute dû être poussée loin sur les premiers pas ($V_d=0$ et $0.1V$). Cependant, cette imprécision relative semble ne pas avoir pénalisé les pas suivants.

II.9 Conclusion

En résumé, j'ai présenté deux modèles déterministes pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann : le modèle hydrodynamique et le modèle de dérive-diffusion par le biais de quelques hypothèses simplificatrices. Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, les équations standard du modèle de dérive-diffusion peuvent être mises sous une forme elliptique en effectuant un changement de variable. Ce type d'équation peut être facilement résolu par une méthode nodale des éléments finis.

Dans ce chapitre, des simulations en trois dimensions par le modèle de dérive-diffusion ont été réalisées en utilisant la méthode des éléments finis. Quelques applications numériques sur une diode n^+nn^+ et un composant MOS sont présentés. Les résultats obtenus, sont très instructifs et encourageants. Ils s'accordent bien avec les résultats bidimensionnels que nous avons trouvés dans [Fortin96], et ils sont similaires avec ceux que nous avons réalisés en 2D sur le logiciel commercial **ATLAS** de Silvaco international. Une extension du simulateur élaboré vers le modèle d'énergie-balance, et par la suite au modèle hydrodynamique peut être envisagée. Les géométries des dispositifs simulés sont simples et par conséquent une étude bidimensionnelle est suffisante. Mais celles-ci nous ont permis de tester la fiabilité du simulateur. La perspective de ce travail est de réussir à bien traiter des composants avec des géométries plus complexes et plus proches de la réalité physique.

Le problème numérique majeur que nous avons rencontré au cours des simulations, est dû aux variations fortes et brutales du dopage dans les structures analysées. Ceci exige l'utilisation de méthodes de résolution plus sophistiquées et plus robustes. Une amélioration de l'algorithme de résolution serait de tenir compte des non-linéarités dans le système d'équations, et des couplages qui existent entre les différentes équations du modèle, en utilisant une méthode de Newton [Rafferty85], [Fichtner83].

CHAPITRE III
MODELE DE MONTE-CARLO

III.1 Introduction

La modélisation numérique des composants à semiconducteurs est couramment un thème d'un intérêt considérable. Le comportement intrinsèque de ces composants se traduit par la multiplicité des phénomènes physiques et les différents couplages existant entre ces phénomènes [Markowich89]. Contrairement au chapitre précédent, où nous avons employé une approche indirecte, dans celui-ci, nous allons présenter une technique numérique directe pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann couplée avec l'équation de Poisson pour auto-consistance. Il s'agit de la méthode de Monte-Carlo appliquée à la description du mouvement des porteurs de charge dans les semiconducteurs. La méthode elle-même, maintenant omniprésente dans le domaine des sciences informatiques, a été élaborée par *Nicolas Metropolis* et *Stanislaw Ulam* pour résoudre l'équation de transport des neutrons dans le matériau fissile de la bombe-A. Depuis ce temps pionnier au milieu des années quarante, la popularité de la méthode de Monte-Carlo a grandi avec la disponibilité croissante des moyens de calcul plus rapides et moins chers. Son application au problème spécifique du transport électronique dans les semiconducteurs est due en premier à [Kurosawa66]. Peu de temps après, le groupe de Malvern au Royaume-Uni (Fawcett, Boardman, et Swain entre autres) a fourni la première grande application de la méthode au problème d'effet Gunn dans le GaAs [Fawcett70]. Des applications sur le silicium et le germanium se sont intensifiées dans les années soixante-dix, grâce au travail réalisé à l'université de Modène en Italie [Canali71,75]. Les deux articles [Jacoboni83], [Price79] donnent un historique plus approfondi et les perspectives techniques. La popularité de cette méthode est affirmée par le fait qu'en 1995, une vingtaine de groupes internationaux travaillent activement sur la simulation Monte-Carlo du transport d'électrons dans le silicium [<http://www.research.ibm.com>].

L'élaboration de la technique de Monte-Carlo décrite dans ce chapitre est basée sur un certain nombre de travaux effectués antérieurement. On se limite ici à citer quelques apports que nous avons le plus utilisés :

1. Les travaux de [Kurosawa66], de [Fawcett70] et de [Price79] en ce qui concerne le développement de la méthode de Monte-Carlo depuis 1966 pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann.
2. Les travaux sur le silicium de type N par le groupe Modène sur le plan expérimental [Canali71] et théorique [Canali75].
3. les travaux sur le silicium de type N par [Zimmermann80].

Dans la première partie (section III.2), nous exposons le principe de la méthode de Monte-Carlo appliquée à l'étude de la dynamique microscopique des porteurs de charge dans les semiconducteurs. Nous décrivons notamment les éléments de base nécessaires à la simulation : ce sont la description des diagrammes de bandes d'énergie dans lesquelles se déplacent les électrons, d'une part, et les probabilités des différents mécanismes de collision ainsi que le comportement des porteurs durant ces collisions, d'autre part. Ensuite, dans la section III.3, nous présenterons notre approche de simulation. Elle consiste en le couplage de deux méthodes numériques pour une résolution auto-consistante : la méthode des Eléments Finis pour résoudre l'équation de Poisson, et la méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation de transport électronique. Dans la troisième et dernière partie (section III.4), nous présenterons quelques résultats de simulation obtenus.

III.2 Principe de la méthode de Monte-Carlo

Dans cette partie, nous allons présenter les bases théoriques de la méthode de Monte-Carlo appliquée à la simulation de la dynamique électronique microscopique dans les semiconducteurs. Contrairement aux modèles dits déterministes présentés au deuxième chapitre (hydrodynamique, dérive-diffusion, ...etc) qui traitent les électrons et les trous comme un fluide, la principale caractéristique de la méthode de Monte-Carlo est que les porteurs sont considérés comme des particules semi-ponctuelles se déplaçant à l'intérieur du composant sous l'action du champ électrique et des processus de collisions. L'algorithme consiste à recréer l'histoire des particules libres telles qu'elles évoluent dans le temps et dans l'espace. Leurs trajectoires individuelles sont calculées en suivant trois étapes simples:

1. En déplaçant chaque porteur en vol libre entre deux collisions sous l'action du champ électrique E , qui modifie continûment la vitesse de la particule au cours du temps. Ceci est fait par la résolution des équations de Newton du mouvement dans un cristal. La structure de bande du solide intervient fortement dans cette étape.
2. En laissant les porteurs interagir à la fin du vol libre avec les impuretés, les vibrations du réseau cristallin, d'autres porteurs...etc. L'interaction a pour effet de modifier brusquement la vitesse du porteur en module et en direction. La probabilité d'interaction est donnée par le taux de collision total (*i.e.*, le nombre de collisions par unité de temps).
3. Finalement, en sélectionnant un nouvel état après collision (*i.e.*, les nouvelles énergie, vitesse, et direction du mouvement).

La durée de l'accélération et la collision qui l'interrompt sont déterminées par des lois de distributions fournies par la physique du solide. Techniquement parlant, le premier point demande de connaître la configuration des bandes d'énergie dans lesquelles la particule se déplace, et les deuxième et troisième points utilisent la théorie des collisions de la mécanique quantique. Le nom "Monte-Carlo" dérive de l'algorithme utilisé pour déterminer si la particule va subir une collision à la fin du vol libre, et pour choisir son état final après collision. La probabilité de collision et la probabilité de distribution des états finaux sont calculées en utilisant la mécanique quantique. Un événement particulier (collision ou pas collision, quel type de collision, quel état final) est choisi aléatoirement, en comparant la probabilité de l'occurrence en question avec un nombre pseudo-aléatoire tiré au sort comme si on lance un dé ou on joue à la roulette. A mesure que les trajectoires sont calculées, des estimations de quantités physiques intéressantes (*e. g.*, vitesse, énergie, densité de courant des porteurs) sont obtenues. La technique agissant au niveau particulaire, les détails auxquels nous avons accès sont alors les plus fins possibles.

III.2.a Algorithme mono-particule

Les quantités qui représentent, à chaque instant, l'état d'une particule sont : les trois composantes de son vecteur d'onde $\mathbf{K}(k_x, k_y, k_z)$ dans l'espace réciproque, et les trois composantes de son vecteur position $\mathbf{r}(x, y, z)$ dans l'espace direct. Ces six quantités évoluent aux cours du temps de façon stochastique, la particule étant soumise à des phases de vol libre, sous l'effet du champ électrique, et à des collisions diverses. Nous décrivons maintenant comment ces deux phases se déroulent en utilisant la méthode de Monte-Carlo à discrétisation régulière. Pour cela, nous décomposons l'échelle des temps en pas temporels réguliers de durée Δt choisie de façon convenable. Les conditions de ce choix seront exposées plus loin. Entre deux instants successifs, la particule subit une accélération de durée Δt selon :

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} = q \frac{\mathbf{E}}{\hbar} \quad \text{Soit : } \mathbf{K}_{i+1} = \mathbf{K}_i + q \frac{\mathbf{E}}{\hbar} \Delta t \quad (3.1)$$

où q est la charge de la particule, et \hbar est la constante de Planck réduite. Les trois composantes du vecteur champ électrique \mathbf{E} sont facilement déterminables en connaissant la position géométrique de la particule dans l'espace direct. La connaissance de la structure de bande d'énergie $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ dans laquelle la particule se déplace permet de calculer à chaque instant l'énergie de la particule et d'en déduire sa vitesse par la relation :

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{K}} \quad (3.2)$$

Dans le schéma le plus simple de bande d'énergie parabolique à masse effective m^* isotrope $\mathcal{E}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{2m^*}$, le vecteur vitesse \mathbf{v} est donné par :

$$\mathbf{v}_i = \frac{\hbar}{m^*} \mathbf{K}_i \quad (3.3)$$

Le déplacement correspondant de la particule dans l'espace géométrique réel s'obtient par l'intégrale temporelle de la vitesse de la particule, soit :

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_i \cdot \Delta t \quad (3.4)$$

Outre l'effet du champ électrique, la particule subit aussi des collisions dues :

1. au fait qu'elle se déplace dans un cristal qui vibre et subit donc continûment l'interaction du potentiel périodique cristallin qui varie localement sans cesse (collisions électron-phonon),
2. aux imperfections volontaires ou non dans le cristal (impuretés ionisées du dopage et défauts de la structure cristalline),
3. aux interactions avec les limites physiques du cristal, due au fait qu'un composant à semiconducteur contient des contacts métalliques, des hétérojonctions, et des interfaces semiconducteur-air et semiconducteur-isolant.

Donc, la deuxième phase de l'algorithme consiste à savoir si la particule dans l'état $(\mathbf{K}, \mathbf{r}, t)_{i+1}$ est susceptible de subir une collision, et si oui laquelle ? et cette dernière ayant lieu, quel est le nouvel état de la particule après la collision ? La réponse à ces questions nécessite tout un ensemble de données constitué par :

1. le schéma de bande d'énergie,
2. les probabilités de collisions (elles peuvent être assez nombreuses selon le matériau où se déplace la particule, et leur origine physique est assez variée),
3. les probabilités de réorientation du vecteur d'onde après collision (chaque type de collision pour un matériau donné possède ses propres probabilités de réorientation).

III.2.b Bande d'énergie

L'énergie cinétique d'un corps, comme chacun le sait, est donnée par la moitié du produit de sa masse par le carré de sa vitesse. Ceci est également vrai pour un électron dans un cristal. Cependant, la présence des ions qui constituent le cristal complique énormément le mouvement des électrons, puisqu'ils sont sujets à l'attraction et la poussée de chaque ion. La physique du solide nous apprend qu'on peut "ignorer" la présence des ions (en négligeant pour l'instant leur agitation thermique) pourvu qu'on change la relation entre l'énergie cinétique et

la vitesse des électrons. En particulier, les électrons ayant une énergie cinétique faible du même ordre que leur agitation thermique, l'énergie est encore donnée par la moitié du produit de la masse par le carré de la vitesse, mais maintenant la "masse" est différente, afin de tenir compte de l'action des ions. Cette nouvelle masse est appelée "masse effective". Quand l'énergie de l'électron \mathcal{E} augmente, la jolie relation parabolique reliant l'énergie à la vitesse est perdue, et un calcul quantique complet de la relation énergie-vitesse (full band-structure) doit être effectué. Cette relation est appelée "structure de bande" du cristal. Au lieu de la vitesse, les physiciens utilisent le moment (produit de la vitesse par la masse, à condition que cette dernière soit définie), ou le vecteur d'onde \mathbf{K} (indique l'inverse de la longueur d'onde associée à une particule de moment donné). La relation énergie-vecteur d'onde $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ est donnée par la physique du solide pour chaque matériau. Dans la figure III.1 ci-dessous, on peut voir la relation $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ pour le silicium. Le vecteur d'onde varie selon des directions particulières symétriques dans les cellules unitaires du réseau cubique du Si. Ces directions sont désignées par des lettres capitales grecques et romaines. Le minimum de la bande de conduction, où résident les électrons "froids" ou "thermiques", est proche du point de symétrie noté X. L'énergie de référence -choisie arbitrairement- coïncide avec le maximum de la bande de valence au point de symétrie noté Γ . Cette structure de bande a été calculée en utilisant des pseudo-potentiels empiriques non locaux [<http://www.research.ibm.com>].

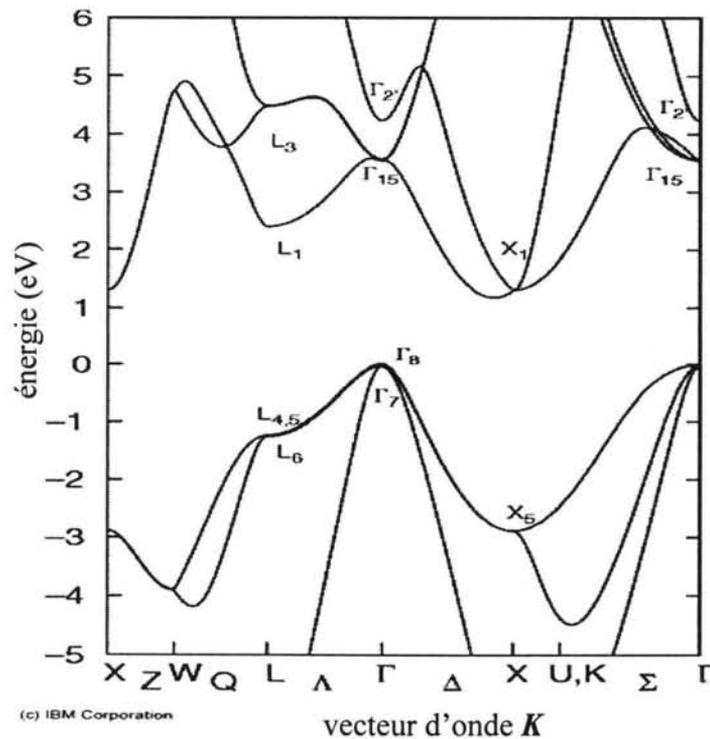


Figure III.1 : Structure des bandes d'énergie pour le silicium.

En résumé, une bande d'énergie a une structure complexe qui la rend non parabolique et à masse effective anisotrope. Par exemple la bande de conduction du silicium comporte six vallées ellipsoïdes (voir figure III.2) dont les minimums relatifs sont à 1.12 eV au-dessus de la bande de valence. Pour les électrons libres dans la bande de conduction, une bonne approximation est donnée par la relation suivante :

$$\mathcal{E}(\mathbf{K})[1 + \alpha \mathcal{E}(\mathbf{K})] = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{(k_x - k_M)^2}{m_l} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_t} \right] \quad (3.5)$$

où $m_0 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ est la masse de l'électron libre, $m_l=0.9163$ et $m_t=0.1905$ sont les masses effectives réduites longitudinale et transversale, et $\alpha = 0.5 \text{ eV}^{-1}$ est le coefficient de non-parabolicité. Cette relation ne concerne que les électrons localisés autour du point $(k_M, 0, 0)$ de l'espace réciproque, k_M étant la largeur de la première zone de Brillouin dans les directions de symétrie X en partant du centre. Il y a cinq autres expressions analogues pour les autres cinq points de bord de bande. Ainsi, d'après la relation (3.5), l'équation de vitesse (3.2) s'écrit comme suit :

$$\mathbf{v} = \frac{(\hbar \mathbf{K} / m_0^*)}{(1 + 2\alpha \mathcal{E}(\mathbf{K}))} \quad (3.6)$$

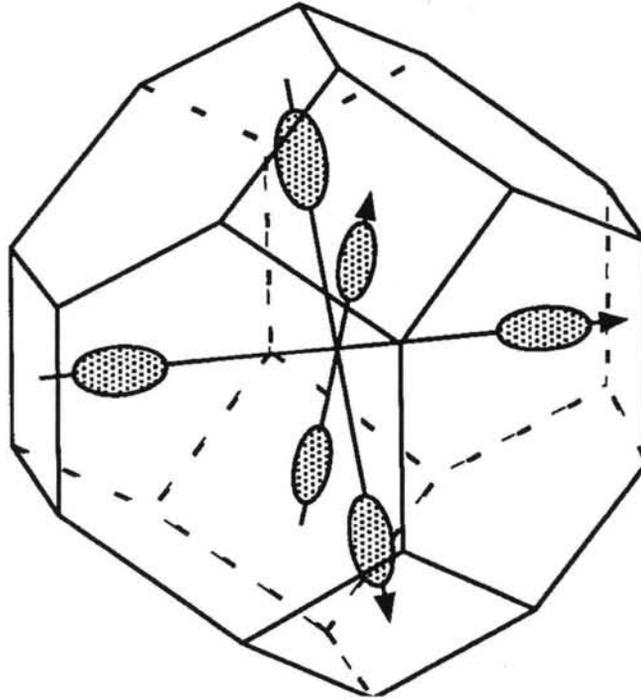


Figure III.2 : Première zone de Brillouin de la bande de conduction du silicium.

Donc, en connaissant les trois composantes du vecteur d'onde \mathbf{K} , la résolution de l'équation (3.5) donne l'énergie cinétique de la particule, et la relation (3.6) donne les trois composantes de son vecteur vitesse permettant de calculer sa position dans l'espace direct.

La structure de bande d'énergie n'intervient pas uniquement dans la cinématique (*i.e.*, comment les porteurs se déplacent librement sous l'action du champ électrique et sans collision), mais également dans la dynamique (*i.e.*, combien de fois les porteurs entrent en collision, quelles sont leurs nouvelles énergie et vitesse après collision).

III.2.c Probabilités de collisions

Le principe fondamental de la théorie des collisions stipule que les probabilités de collisions ne dépendent que de l'énergie cinétique de la particule. En outre, nous supposons que les collisions sont statistiquement indépendantes les unes des autres. Donc la probabilité totale de collisions est la somme des probabilités de collisions. Nous avons défini au premier chapitre par $S_n(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ la densité de probabilité par unité de temps qu'une particule subisse une collision de type n l'amenant de façon instantanée d'un état \mathbf{K} à un autre état \mathbf{K}' . Chaque type de collision a sa propre expression de densité de probabilité donnée par la physique du solide. Notre objectif est de déterminer la probabilité qu'un porteur, soumis à un champ électrique \mathbf{E} et à N types quelconques de mécanismes de collision, effectue un vol libre d'une durée Δt . Notons par $\lambda(\mathcal{E})$ la probabilité totale par unité de temps que la particule ayant le vecteur d'onde \mathbf{K} subisse une collision l'emmenant dans l'état du vecteur \mathbf{K}' à $d^3\mathbf{K}'$ près :

$$\lambda(\mathcal{E}) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(\mathcal{E}) = \sum_{i=1}^N \int S_i(\mathbf{K}, \mathbf{K}') d^3\mathbf{K}' \quad (3.7)$$

La quantité $P(\mathcal{E}) = \lambda(\mathcal{E}) \Delta t$ représente la probabilité normalisée que la particule subisse une accélération de durée Δt , éventuellement suivie par une collision donnée. Dans le cas où on a N types d'interactions différentes :

$$P(\mathcal{E}) = \sum_{i=1}^N P_i(\mathcal{E}) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(\mathcal{E}) \Delta t \quad (3.8)$$

La normalisation impose que : quelle que soit la valeur de l'énergie, la quantité $P(\mathcal{E})$ ne doit pas être supérieure à 1. Ceci implique une valeur maximale pour le pas de temps Δt :

$$\Delta t_{max} = \max \left[1 / \sum_{i=1}^N \lambda_i(\mathcal{E}) \right] \quad (3.9)$$

En pratique, il est bien connu que des valeurs du pas Δt de l'ordre de 10^{-15} à 10^{-14} secondes sont en général bien adaptées au problème [Zimmermann80].

A présent, il s'agit de savoir si une collision a lieu, et si oui laquelle ? Les probabilités $P_i(\mathcal{E})$ étant connues, nous choisissons au hasard un nombre pseudo-aléatoire rnd à distribution uniforme entre 0 et 1. Ensuite, nous effectuons le test suivant ;

Pour tout entier n compris entre 1 et N :

$$rnd < \sum_{i=1}^n P_i(\mathcal{E}) \quad ? \quad (3.10)$$

Dès que la réponse est oui, la collision de type n est choisie, comme illustrée sur la figure III.3. Si la réponse est non, même pour la valeur $n=N$, cela veut dire qu'il n'y a pas de collision à l'instant considéré (segment BC dans la figure III.3), et le processus d'accélération est répété pour le pas temporel suivant.

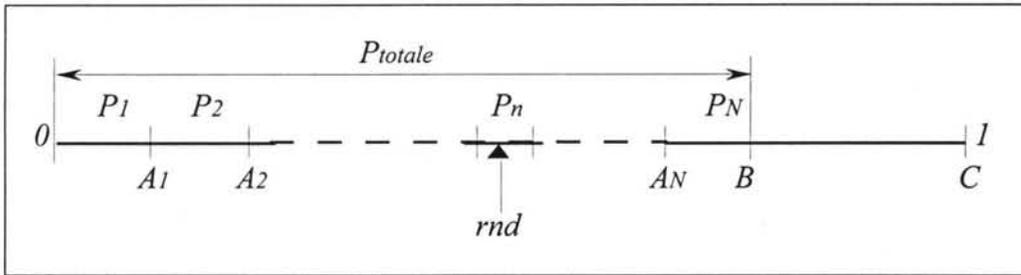


Figure III.3 : Schéma du choix de type de collision.

III.2.d Mécanismes de collisions

Les mécanismes de collisions que les particules peuvent subir se divisent en deux catégories : intra-vallées et inter-vallées. Les collisions intra-vallées sont engendrées par des phonons acoustiques de grande longueur d'onde, et la particule reste dans la même vallée après le choc. Ces collisions sont considérées comme quasiment élastiques pour des températures pas trop basses. Dans le silicium dopé, les collisions avec les impuretés ionisées sont également supposées intra-vallées et élastiques. Par contre, les collisions inter-vallées impliquant des phonons de grande énergie sont fortement inélastiques. Elles provoquent des transitions entre deux vallées différentes. Selon la vallée source et la vallée destination, ces collisions sont de deux types :

4. transitions de type f : les axes principaux des deux vallées sont perpendiculaires.
1. transitions de type g : les axes principaux des deux vallées sont colinéaires.

Le modèle de collisions inter-vallées que nous avons utilisé est celui présenté dans [Canali75]. Il a été établi pour des bandes d'énergie non paraboliques, et comporte trois collisions de type f et trois collisions de type g.

Collisions acoustiques intra-vallées

Les interactions de particules avec le potentiel de déformation dû aux vibrations acoustiques de grande longueur d'onde ont été modélisées par Bardeen et Shockley [Bardeen50]. Cette interaction est considérée élastique au-dessus de quelques Kelvins, et le nombre de phonons par modes n_q s'écrit :

$$n_q = \frac{k_B T_0}{\hbar \omega_q} \quad (3.11)$$

où $\hbar \omega_q$ est l'énergie du phonon impliqué. En incluant l'effet de non-parabolicité, la densité de probabilité s'écrit :

$$S_{ac}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \frac{q^2 k_B T_0 E_I^2}{4\pi^2 \hbar s^2 \rho} G(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \delta[\mathcal{E}(\mathbf{K}) - \mathcal{E}(\mathbf{K}')] \quad (3.12)$$

où $s=9040$ m/s est la vitesse du son isotrope, $\rho=2330$ kg/m³ est la densité du matériau, et $E_I=9$ eV est le module du potentiel de déformation élastique. La quantité $G(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ est une intégrale de chevauchement d'orbitales. Elle vaut 1 pour les bandes paraboliques ($\alpha = 0$), et elle est inférieure à 1 pour les bandes non-paraboliques (α non-nul). Pour le silicium, on peut la considérer égale à 1, vu que α n'est pas très élevé. En intégrant (3.12), on trouve la densité de probabilité par unité de temps suivante :

$$\lambda_{ac}(\mathcal{E}) = \frac{q^2 (2m_D^*)^{\frac{3}{2}} k_B T_0 E_I^2}{2\pi \rho s^2 \hbar^4} \sqrt{\mathcal{E}(1 + \alpha\mathcal{E})} (1 + 2\alpha\mathcal{E}) \quad (3.13)$$

où $m_D^* = \sqrt[3]{m_l m_t^2}$ est la masse de densité d'états. Quant à la probabilité de rotation de \mathbf{K} vers \mathbf{K}' d'un angle β , est donnée par $P(\beta) = \sin \beta$.

Collisions inter-vallées

Ces transitions sont associées aux phonons optiques non polaires. Leurs densités de probabilité sont décrites par des relations similaires à (3.10) :

$$S_{ij.em}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \frac{q^2 D_{ij}^2 z_j}{8\pi^2 \rho \omega_{ij}} G(\mathbf{K}, \mathbf{K}') (N_{ij} + 1) \delta[\mathcal{E}(\mathbf{K}) - \mathcal{E}(\mathbf{K}') - \hbar \omega_{ij}] \quad (3.14)$$

$$S_{ij.abs}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \frac{q^2 D_{ij}^2 z_j}{8\pi^2 \rho \omega_{ij}} G(\mathbf{K}, \mathbf{K}') N_{ij} \delta[\mathcal{E}(\mathbf{K}) - \mathcal{E}(\mathbf{K}') + \hbar \omega_{ij}] \quad (3.15)$$

La relation (3.14) concerne la collision avec émission de phonon, et (3.15) correspond à la collision avec absorption de phonon. Les indices i et j désignent les vallées source et destination, respectivement. D_{ij} est le module du potentiel de déformation inter-vallées, z_j est

le nombre de vallées accessibles (4 pour les transitions f et 1 pour les transitions g), et N_{ij} est le nombre de phonons par mode, donné par la statistique de Bose-Einstein :

$$N_{ij} = \left(\exp \frac{\hbar\omega_{ij}}{k_B T_0} - 1 \right)^{-1} \quad (3.16)$$

Comme pour les collisions intra-vallées, on peut approximer $G(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \approx 1$. Après intégration, nous obtenons les densités de probabilités par unité de temps suivantes :

$$\lambda_{ij,em}(\mathcal{E}) = \frac{q^2 (m_D^*)^{3/2} D_{ij}^2 z_j}{\sqrt{2\pi\rho\omega_{ij}} \hbar^3} (N_{ij} + 1) \sqrt{(\mathcal{E} - \hbar\omega_{ij})} \left[1 + \alpha(\mathcal{E} - \hbar\omega_{ij}) \right] \left[1 + 2\alpha(\mathcal{E} - \hbar\omega_{ij}) \right] \quad (3.17)$$

$$\lambda_{ij,abs}(\mathcal{E}) = \frac{q^2 (m_D^*)^{3/2} D_{ij}^2 z_j}{\sqrt{2\pi\rho\omega_{ij}} \hbar^3} N_{ij} \sqrt{(\mathcal{E} + \hbar\omega_{ij})} \left[1 + \alpha(\mathcal{E} + \hbar\omega_{ij}) \right] \left[1 + 2\alpha(\mathcal{E} + \hbar\omega_{ij}) \right] \quad (3.18)$$

Pour les valeurs des paramètres de collisions inter-vallées (constantes de couplage, nombre de phonons par mode et énergies des phonons), nous nous rapportons aux travaux de Canali [Canali75]. Ces valeurs sont résumées dans le tableau III.1 ci-dessous, pour le silicium à la température 293°K et pour $\alpha=0.5$.

collision	N_{ij}	$\hbar\omega_{ij}$ (meV)	D_{ij} (eV/cm)
f1	0.9554	18.1	$1.5 \cdot 10^7$
f2	0.222	43.1	$2.5 \cdot 10^8$
f3	0.132	54.3	$4.0 \cdot 10^8$
g1	1.6283	12.05	$5.0 \cdot 10^7$
g2	0.9554	18.1	$8.0 \cdot 10^7$
g3	0.1009	60.32	$3.0 \cdot 10^8$

Tableau III.1 : Paramètres des collisions inter-vallées.

Collisions avec les impuretés ionisées

Les impuretés ionisées sont caractérisées par un potentiel de perturbation dû à l'attraction coulombienne entre les particules chargées et les centres ionisés de charge opposée. Conwell et Weisskopf [Conwell50], ont utilisé un modèle où l'interaction est limitée à la moitié de distance entre deux centres ionisés voisins :

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \quad (3.19)$$

avec $|\mathbf{r} - \mathbf{R}| \leq 1/2\sqrt[3]{N_i}$, où N_i est la densité de charge fixe (impureté). D'où l'angle de déviation minimum correspondant:

$$\beta_m = 2 \operatorname{arctg} \left[\frac{q N_i^{1/3}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r \mathcal{E}(1 + \alpha\mathcal{E})} \right] \quad (3.20)$$

L'effet de la population de particules fait chuter ce potentiel plus vite que $1/r$. Un modèle plus évolué de Brooks-Herring [Brooks55] tient compte des effets d'écrantage du potentiel coulombien par les charges mobiles :

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\mathbf{R}} \frac{\exp(-B|\mathbf{r} - \mathbf{R}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \quad (3.21)$$

$B = \sqrt{\frac{q^2 N_p}{\epsilon_0\epsilon_r k_B T_0}}$ est le paramètre d'écran tenant compte de la densité de particules libres N_p .

Par ailleurs, le processus de collision peut être considéré comme élastique, vu l'inertie de l'ion d'impureté beaucoup plus lourd que l'électron incident. Il en résulte la densité de probabilité suivante :

$$S_{imp}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \frac{q^4 N_i}{4\pi^2 \hbar \epsilon_0 \epsilon_r} \frac{G(\mathbf{K}, \mathbf{K}')}{(|\mathbf{K} - \mathbf{K}'|^2 + B^2)^2} \delta[\mathcal{E}(\mathbf{K}) - \mathcal{E}(\mathbf{K}')] \quad (3.22)$$

Le modèle Conwell-Weisskopf donnerait la même expression de densité de probabilité avec $B=0$, et l'angle de déviation serait limité par β_m . En intégrant sur tous les \mathbf{K}' possibles, et en supposant que $N_i = N_p$, nous obtenons la densité de probabilité par unité de temps :

$$\lambda_{imp}(\mathcal{E}) = \frac{q^2 \sqrt{m_D^*} k_B T_0}{4\sqrt{2\pi\epsilon_0\epsilon_r} \hbar^2} \frac{(1 + 2\alpha\mathcal{E})}{\sqrt{\mathcal{E}(1 + \alpha\mathcal{E})}} \quad (3.23)$$

Le modèle de Brooks-Herring n'impose plus un minimum sur l'angle de déviation, l'intensité d'interaction s'affaiblit exponentiellement avec la distance. La distribution de l'angle de déviation β est donnée par l'expression suivante, avec r un nombre pseudo-aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1.

$$\cos \beta = 1 - \frac{2(1-r)}{1+r \frac{4\mathbf{K}^2}{B^2}} \quad (3.24)$$

En résumé, pour les électrons dans le silicium, on dénombre quatorze types de collisions :

- une élastique avec les phonons acoustiques de grandes longueurs d'onde,
- six inélastiques avec émission d'énergie (f1, f2, f3, g1, g2, g3),

- six inélastiques avec absorption d'énergie (f1, f2, f3, g1, g2, g3),
- une avec les impuretés ionisées.

III.2.e État de la particule après collision

Si le hasard a voulu que la collision de type n ait lieu, il reste à déterminer l'effet de celle-ci. Le résultat d'une collision est une réorientation du vecteur d'onde de la particule avec éventuellement perte d'énergie (émission d'un phonon) ou gain d'énergie (absorption d'un phonon) si la collision est inélastique, ou conservation d'énergie si elle est élastique (interaction avec impuretés ionisées). Le numéro n de collision nous renseigne sur l'échange d'énergie à prendre en compte. Notons par \mathbf{K}' le vecteur d'onde après collision, et supposons que la collision de type n se fait avec émission d'un phonon d'énergie $\hbar\omega_0$. La nouvelle énergie de la particule vaut :

$$\mathcal{E}(\mathbf{K}') = \mathcal{E}(\mathbf{K}) - \hbar\omega_0 \quad (3.25)$$

Le module de \mathbf{K}' se déduit facilement à partir du diagramme de bande d'énergie donné par l'équation (3.5). Il reste alors à déterminer l'orientation de \mathbf{K}' . Ceci s'effectue par le tirage au sort de deux nouveaux nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme entre 0 et 1. En effet, nous devons déterminer (dans un repère à coordonnées sphériques) l'écart angulaire β entre les directions de \mathbf{K} et de \mathbf{K}' , et la position azimutale θ du support du vecteur \mathbf{K}' après collision, autour du support du vecteur \mathbf{K} avant collision. La figure III.4 suivante illustre la procédure de réorientation.

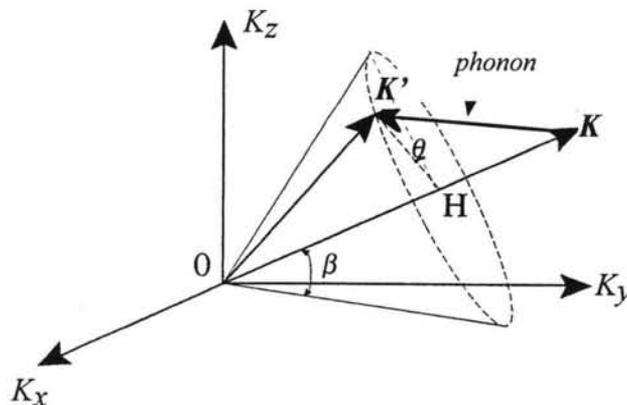


Figure III.4 : Procédure de réorientation du vecteur d'onde

Les deux angles β et θ sont des variables aléatoires indépendantes, dont la densité de probabilité est fournie par la physique du solide. L'angle β prend ses valeurs entre 0 et π , et

l'angle θ entre 0 et 2π . Les expressions de la densité de probabilité des deux angles sont plus ou moins compliquées selon le type de collision. Le module du vecteur d'onde après collision $|\mathbf{K}'|$ étant connu, et les deux angles déterminés, les trois composantes du vecteur \mathbf{K}' dans le repère lié au vecteur \mathbf{K} sont alors calculées par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} K'_x = |\mathbf{K}'|. \sin \beta. \cos \theta \\ K'_y = |\mathbf{K}'|. \sin \beta. \sin \theta \\ K'_z = |\mathbf{K}'|. \cos \beta \end{cases} \quad (3.26)$$

Il ne reste plus ensuite qu'à calculer les composantes du vecteur \mathbf{K}' dans le repère lié au champ électrique pour accélérer la particule durant le pas de temps suivant, et recommencer le processus depuis le début. La réorientation du vecteur d'onde est le deuxième facteur aléatoire présent dans la simulation Monte-Carlo. Le caractère aléatoire ici est représenté par les angles β et θ dans la figure III.4. Pour l'angle β , dont la distribution est $\sin \beta$ entre 0 et π , on résout :

$$r_1 = \frac{\int_0^\beta \sin x \, dx}{\int_0^\pi \sin x \, dx} = \frac{1 - \cos \beta}{2} \quad (3.27)$$

où r_1 est un nombre pseudo-aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 .

Pour calculer le nouveau vecteur \mathbf{K}' il nous faut le sinus et le cosinus des angles :

$$\begin{cases} \cos \beta = 1 - 2r_1 \\ \sin \beta = \sqrt{1 - \cos^2 \beta} \end{cases} \quad (3.28)$$

Pour l'angle θ , nous avons :

$$\theta = r_2 \quad 0 \leq r_2 \leq 2\pi \quad (3.29)$$

où r_2 est aussi un nombre pseudo-aléatoire, mais à distribution uniforme entre 0 et 2π .

En résumé, l'histoire de chaque particule sera constituée par une suite de vols libres sous l'influence de la force externe (champ électrique), séparée par des collisions sur les différents obstacles présentés par le milieu ou évolue les porteurs. Ces collisions sont considérées de durée nulle faisant passer instantanément le vecteur d'onde d'une valeur \mathbf{K} à une autre valeur \mathbf{K}' . En procédant ainsi, on obtient le parcours des particules dans le temps régulièrement échantillonné avec un pas temporel choisi suffisamment petit. Par conséquent, il serait possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes ; énergie moyenne, vitesse de dérive, coefficients de diffusion, ...etc. L'organigramme III.5 suivant illustre le processus élémentaire accélération-collision de l'algorithme monte-carlien pour une particule.

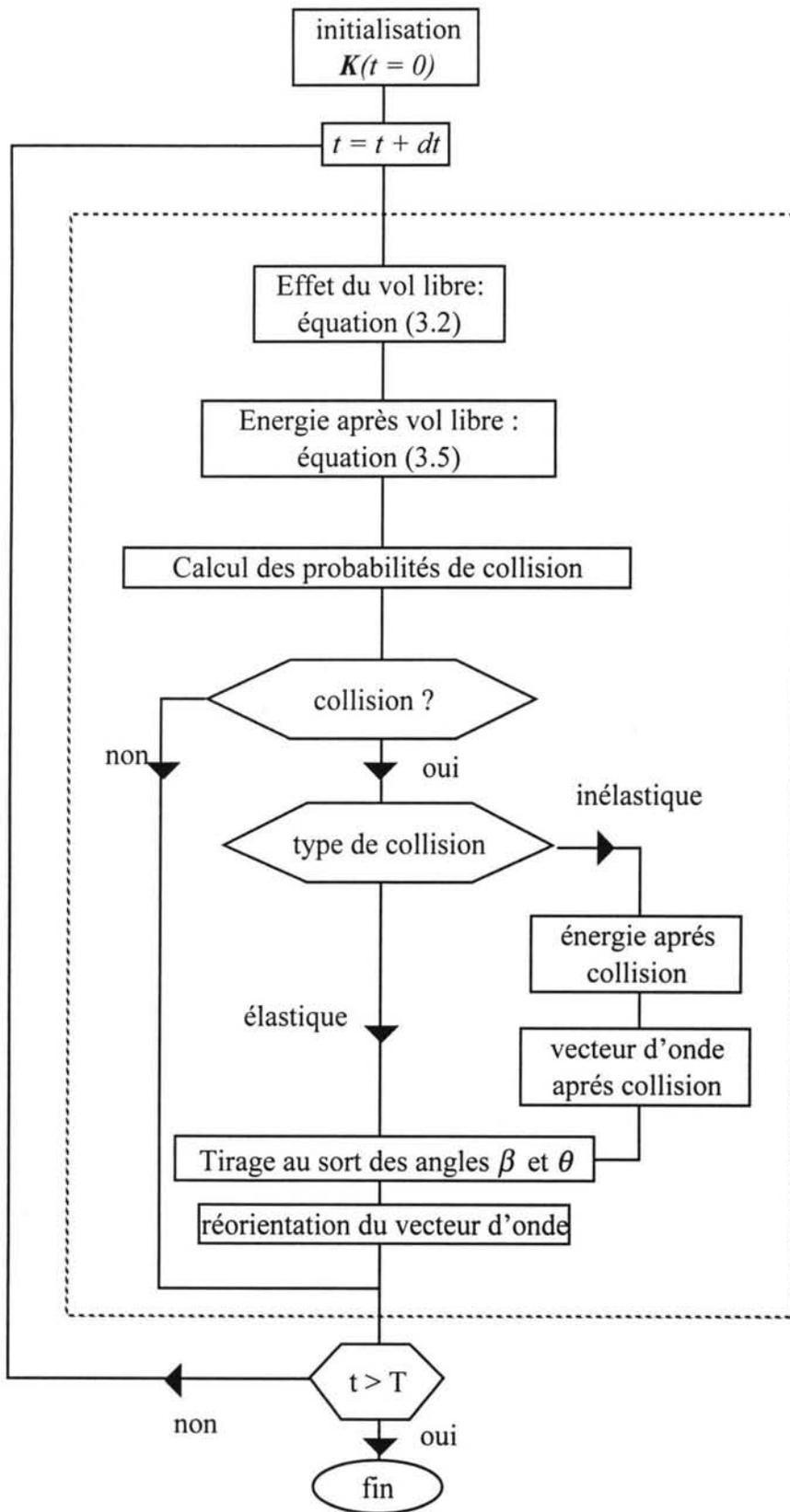


Figure III.5 : Algorithme mono-particule de Monte-Carlo.

III.3 Procédure de simulation

Dans la section précédente, nous avons décrit l'algorithme de Monte-Carlo pour simuler une seule particule. Dans la simulation de composants, on a affaire à plusieurs particules dont le nombre est plus ou moins grand selon la taille du composant, et le champ électrique interne dépend de l'espace, voire même du temps. Dans la présente section, nous allons présenter le procédé de simulation que nous avons mis au point pour un ensemble de particules. Il s'agit d'un programme simulant en trois dimensions le transport électronique dans des composants à semiconducteur (du silicium en particulier) et combinant une solution auto-consistante de l'équation de transport de Boltzmann et l'équation de Poisson. Nous avons négligé la présence des trous, principalement, pour deux raisons. D'une part, ils sont minoritaires dont les dispositifs que nous avons traités (essentiellement des composants MOS à canal n), donc nous commettons une très faible erreur en les négligeant. D'autre part, nous disposons de peu de données sur les caractéristiques des trous car ils sont moins étudiés que les électrons. Le transport des électrons libres est traité en trois dimensions en utilisant la technique de Monte-Carlo décrite précédemment. La cinématique (vols libres) et la dynamique (collisions) des électrons sont modélisés en utilisant une structure de bande non-parabolique et anisotrope pour le silicium. Nous avons utilisé un solveur tridimensionnel de l'équation de Poisson pour calculer le potentiel électrostatique en cohérence avec la distribution de charge fournie par Monte-Carlo. Le programme est intensif du point de vue calculs, mais il délivre une richesse d'informations détaillées sur le comportement interne de composants à géométrie arbitraire avec des profils de dopage variés.

III.3.a Nombre de particules

Le nombre de particules simulées doit faire l'objet d'une attention particulière. Facteur direct sur la consommation en mémoire, il doit être assez suffisant pour éviter d'introduire du bruit artificiellement. Dans les procédures classiques de simulation de composants par la méthode de Monte-Carlo, on utilise une grille de différences finies bidimensionnelle constitué de M sur N cases. Les dimensions d'une case élémentaire sont dx , dy et une troisième dimension fictive dz . Les deux premières dimensions sont définies par l'utilisateur et la troisième dimension dz correspond à la profondeur d'un composant fictif qui contiendrait un nombre d'électrons égal au nombre total de particules simulées N_{part} . Puisque cette troisième dimension n'est pas spécifiée dans l'approche par différences finies, le nombre de particules par case est laissée au libre choix de l'utilisateur. Par contre, dans notre approche tridimensionnelle, les trois dimensions du composant sont fixées d'avance. Le composant à

semiconducteur est subdivisé en régions volumiques, chacune ayant son propre dopage et son volume est défini. Le nombre de particules dans chaque région est donc calculé grâce au produit de son volume par son dopage.

III.3.b Densité de charge moyenne

Nous avons utilisé la méthode des éléments finis, présentée dans le chapitre précédent, pour calculer le potentiel électrostatique ϕ en chaque nœud du maillage de la structure, par la résolution en trois dimensions de l'équation de Poisson :

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \phi) = -\rho \quad (3.30)$$

où ϵ_0 et ϵ_r sont respectivement la permittivité du vide et la permittivité relative du matériau considéré, et ρ est la densité de charge totale. Cette dernière est la somme des contributions des charges mobiles et fixes, incluant la densité d'électrons libres n , et la densité des ions donneurs N_D^+ et accepteurs N_A^- selon la relation suivante, où q est la valeur absolue de la charge élémentaire de l'électron :

$$\rho = q(N_D^+ - N_A^- - n) \quad (3.31)$$

Le champ électrique, qui sert à accélérer les porteurs de charge (les électrons), est obtenu en n'importe quel point de la structure, à partir du gradient du potentiel électrostatique par la relation : $E = -\nabla \phi$.

La méthode de Monte-Carlo (MMC) est employée pour simuler la dynamique microscopique des électrons dans le semiconducteur. La répartition discrète des particules obtenue par la méthode de Monte-Carlo nous permet de calculer la densité de charge totale moyenne ρ_{moy} en chaque élément fini du maillage en tenant compte du dopage et de l'ensemble des particules présentes dans la cellule considérée. La densité de charge électronique Q_n est calculée pour chaque élément volumique du découpage et à chaque pas de temps. A l'itération K , elle est donnée par :

$$(Q_n)^K = qn = \frac{\sum_i (q_i dt_i)}{V_e \Delta t} \quad (3.32)$$

où V_e est le volume de l'élément fini, et dt_i est le laps de temps parcouru par la charge q_i à l'intérieur de l'élément en question. La somme est effectuée sur l'ensemble des électrons qui ont traversé l'élément considéré pendant le pas de temps en cours.

Au démarrage (les premières itérations) nous avons utilisé une moyenne glissante pour calculer la valeur moyenne de la densité de charge électronique. A l'itération numéro K de la boucle Monte-Carlo, elle est définie par la relation :

$$(\mathcal{Q}_n)_{moy}^k = \frac{K \cdot (\mathcal{Q}_n)^{k-1} + (\mathcal{Q}_n)^k}{K + 1} \quad (3.33)$$

A l'itération zéro, la charge moyenne est calculée sur l'ensemble des éléments de telle sorte à assurer la neutralité électrique dans tout le composant. Le compteur K du nombre d'itérations, qui joue un rôle de pondération dans cette formule, est initialisée à une valeur donnée (5000 dans notre étude). Cette manière de faire nous permet de ne pas perdre totalement la neutralité électrique dès les premières itérations Monte-Carlo.

Ensuite, après un nombre suffisant de pas de temps, la moyenne de la densité de charge électronique par élément, est calculée cette fois après chaque bloc de N itérations Monte-Carlo, par la relation :

$$(\mathcal{Q}_n)_{moy}^{new} = (1 - \alpha) \cdot (\mathcal{Q}_n)_{moy}^{old} + \alpha \cdot \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathcal{Q}_n)^k \right] \quad (3.34)$$

où $(\mathcal{Q}_n)_{moy}^{new}$ est la nouvelle valeur moyenne de la densité de charge électronique pour le bloc de N itérations, $(\mathcal{Q}_n)_{moy}^{old}$ est l'ancienne valeur moyenne de la densité de charge électronique avant le bloc de N itérations, et α est un coefficient de relaxation de la charge. Dans notre étude, nous avons utilisé un facteur de relaxation variable au cours du temps. Sa variation est définie par paliers entre 0 et 1, comme on le verra plus loin dans la prochaine section.

Pour stocker les valeurs de la densité de charge moyenne sur chaque élément volumique, nous avons introduit des éléments finis de volume, où la valeur de la densité de charge moyenne est portée par un nœud situé au milieu du volume de l'élément. La fonction de forme d'un tel élément est différente des fonctions de formes nodales présentées au chapitre précédent. Maintenant, elle est nulle sur n'importe quel point, excepté sur le nœud milieu du volume de l'élément considéré, où elle vaut une constante égale à 1 [Bossavit96]. L'ensemble des valeurs de ρ_{moy} sur chaque élément est utilisé pour résoudre une deuxième fois l'équation de Poisson afin de rafraîchir le champ électrique, et ainsi de suite dans une boucle autonome.

III.3.c Hybridation des méthodes

Le détail de la mise en œuvre du simulateur tridimensionnel et auto-consistant du transport électronique dans les semiconducteurs est récapitulé dans l'organigramme de la figure III.6. Le programme débute par la lecture des données et les diverses initialisations nécessaires au bon déroulement de la simulation. Elles concernent les paramètres des matériaux, et la préparation des particules à simuler. Lors de l'initialisation de la simulation, les particules sont placées aléatoirement dans le semiconducteur de façon à assurer la neutralité électrique dans tout le composant. Et au cours de la simulation, elles sont déplacées dans les différents éléments finis du maillage de la structure selon l'algorithme Monte-Carlo, explicité dans les sections précédentes. Le cœur du simulateur consiste en deux blocs principaux : celui de la résolution de l'équation de transport électronique par la Méthode de Monte-Carlo (MMC), et celui de la résolution de l'équation de Poisson par la Méthode des Eléments finis (MEF). Le bloc Monte-Carlo est constitué de deux boucles : une boucle d'itérations sur le temps, dans laquelle est imbriquée la boucle d'itérations sur l'ensemble des particules. Ces dernières, tour à tour, subissent l'effet du champ électrique et celui des différentes interactions. A chaque pas de temps, on anime tous les porteurs grâce à l'algorithme Monte-Carlo mono-particule, en respectant les conditions géométriques de la structure. En effet, les particules doivent toujours rester à l'intérieur du volume autorisé qui consiste en la partie semiconductrice du composant. Au contact d'une électrode, les électrons sont alors réinjectés par l'autre contact métallique (les électrodes de drain et de source par exemple) afin d'assurer la condition de continuité de charge, et elles sont réfléchies au contact des autres surfaces limites du semiconducteur (les interfaces semiconducteur-air et semiconducteur-isolant). A la fin du traitement de toutes les particules, on utilise leurs caractéristiques physiques pour réactualiser les cartes des grandeurs physiques.

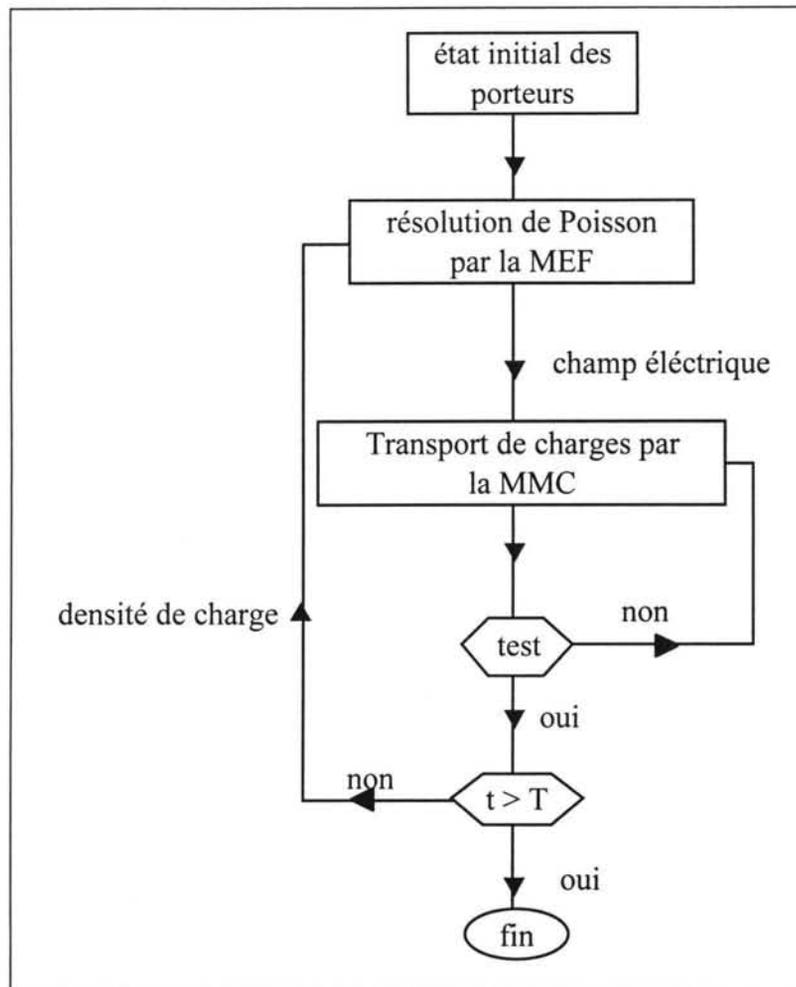


Figure III.6 : Procédure du couplage MEF-MMC.

Le test de convergence après le bloc Monte-Carlo consiste à calculer la plus grande erreur relative entre deux valeurs successives de toutes les valeurs de la charge électronique moyenne par élément. Si celle-ci est inférieure à une certaine tolérance : $(\Delta Q_n)_{\text{moy}} \leq \varepsilon$, nous relançons la résolution par éléments finis de l'équation de Poisson. Dans le cas contraire, nous poursuivons le calcul Monte-carlo jusqu'à la satisfaction de cette condition. Habituellement, l'équation de Poisson est résolue à des intervalles de temps fixes afin de mettre à jour la nouvelle distribution du champ électrique à l'intérieur du composant, qui reflète la redistribution interne de la charge due au mouvement des particules. Des intervalles de temps allant de 1 à 10 pico-secondes (correspondant à 1000 - 10000 itérations Monte-Carlo) pour le rafraîchissement du champ électrique sont généralement très convenables.

III.4 Applications numériques

Une simulation tridimensionnelle de composants à silicium de taille submicronique sera présentée. Elle est basée sur le couplage des deux techniques numériques décrites précédemment :

1. La méthode des éléments finis nodaux pour résoudre un problème de type électrostatique décrit par l'équation de Poisson.
2. La méthode de Monte-Carlo pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann qui régit la dynamique microscopique des charges dans un semiconducteur.

Pour illustrer notre approche, nous allons présenter quelques résultats de simulations tridimensionnelles réalisées sur diverses structures à silicium [Hadji98], [Hadji99]. Tous les calculs sont faits à température ambiante $T_0 = 293^\circ K$, et le pas de temps Monte-Carlo que nous avons utilisé est $\Delta t = 3.10^{-15} s$. Dans toutes les applications qui suivent, l'équation de Poisson est résolue après toutes les 1000 itérations Monte-Carlo.

III.4.a Tube uniforme

En premier lieu, nous considérons une structure 3D simple, qui consiste en un tube carré de silicium dopé uniformément avec $N_D = 10^{21} m^{-3}$ et de longueur $0.4 \mu m$. Pour une tension appliquée aux bouts de la structure $V_{app} = 1 volt$, nous représentons l'évolution au cours du temps de quelques grandeurs moyennes des électrons. Sur la figure III.7, est représentée la courbe de variations de l'énergie électronique moyenne en fonction du temps, et sur la figure III.8, celle des variations de la vitesse de dérive des électrons en fonction du temps.

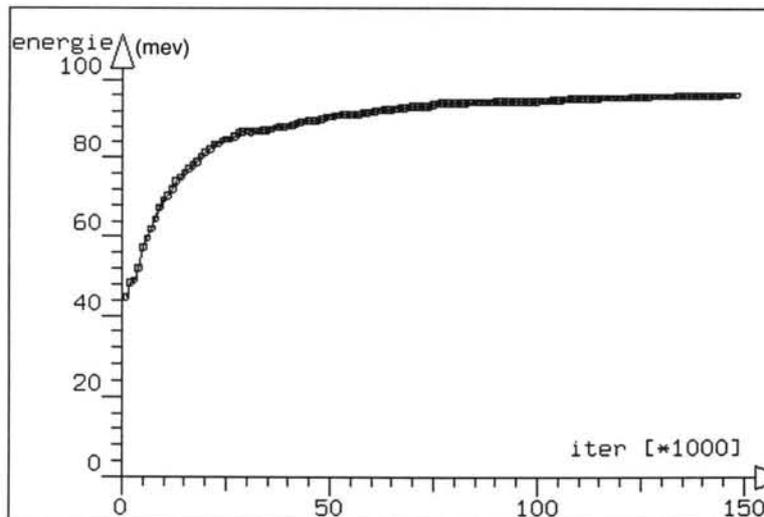


Figure III.7 : Energie moyenne des électrons en fonction du temps pour $V_{app} = 1V$.

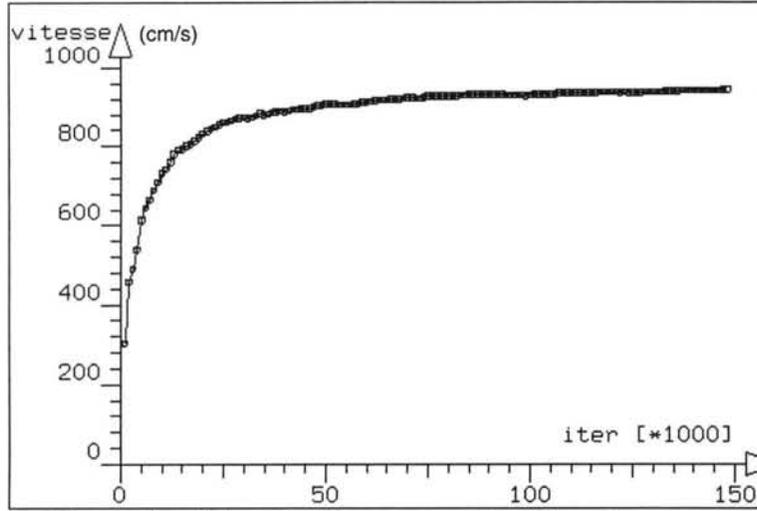


Figure III.8 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du temps pour $V_{app} = 1V$.

Le courant instantané circulant entre les deux électrodes est calculé par la formule de Ramo-Shockley suivante, en assimilant le tube à une capacité plane de longueur W .

$$I_d(t) = \frac{I}{W} \sum_i q_i V_i(t) \quad (3.35)$$

La somme est faite sur l'ensemble des particules q_i , et l'on considère leur vitesse instantanée V_i parallèle à l'axe entre les deux électrodes. Les deux figures qui suivent donnent les variations temporelles du courant électronique moyen pour la même polarité $V_{app} = 1V$. Le courant électronique moyen calculé par la formule (3.34) est illustré sur la figure III.9.

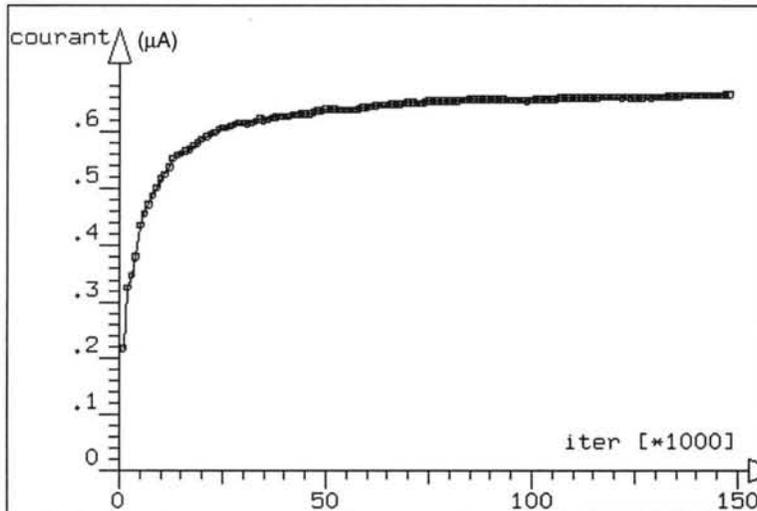


Figure III.9 : Courant électronique moyen en fonction du temps pour $V_{app} = 1V$.

Dans ce qui suit, nous allons présenter les variations de quelques grandeurs physiques en fonction du champ électrique appliqué entre les deux électrodes. L'évolution de l'énergie électronique moyenne (en meV) est représentée sur la figure III.10 suivante.

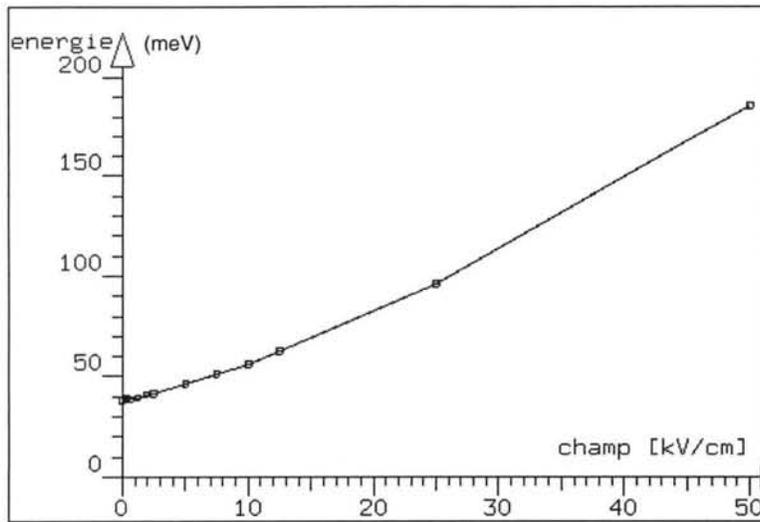


Figure III.10 : Evolution de l'énergie moyenne en fonction du champ électrique.

La courbe de variations de la vitesse de dérive des électrons (en cm/s) en fonction du champ électrique appliqué (en kV/cm) est représentée sur la figure III.11 suivante.

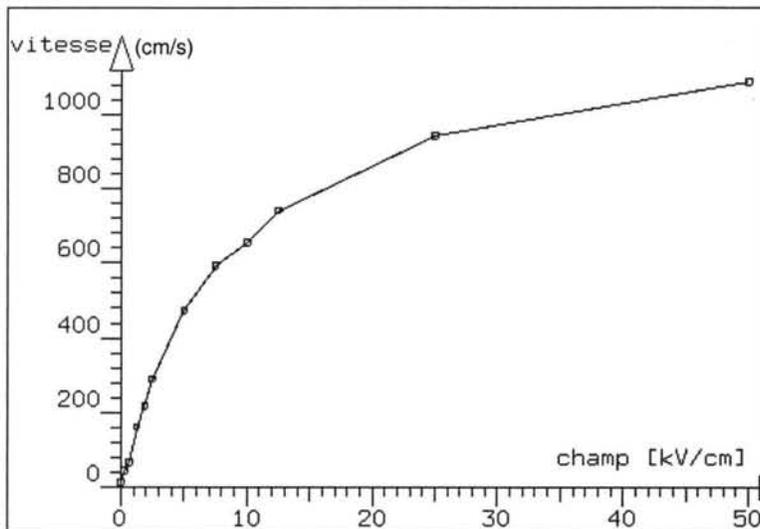


Figure III.11 : Evolution de la vitesse de dérive en fonction du champ appliqué.

La courbe $I(V)$, donnant la valeur du courant (exprimé en micro-Ampères) en fonction de la tension appliquée entre les deux électrodes, est représentée sur la figure III.12, qui suit.

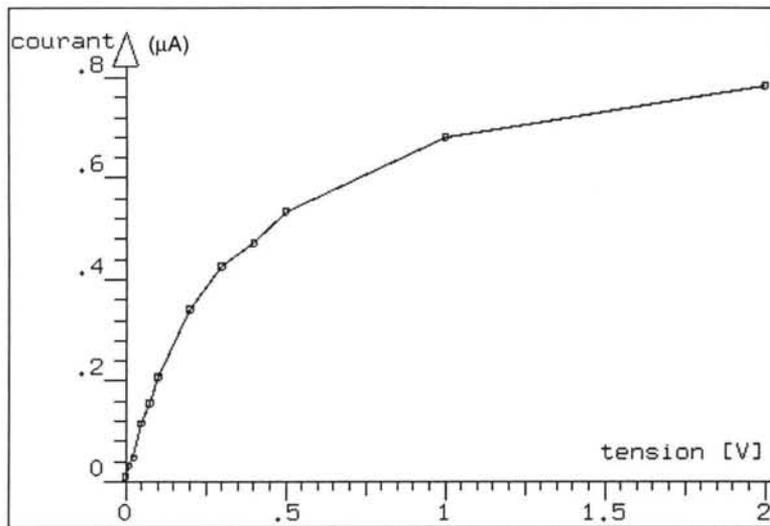


Figure III.12 : Evolution du courant moyen en fonction de la tension appliquée.

En dernier lieu, nous représentons sur la figure III.13 la courbe de dépendance entre la mobilité électronique et le champ électrique. Une comparaison est faite entre la mobilité calculée par notre approche Monte-Carlo avec celle qui est donnée par le modèle analytique utilisé dans la littérature [Markowich89], et que nous avons présenté au chapitre précédent concernant le modèle de dérive-diffusion. On remarque une bonne corrélation entre les deux calculs en particulier pour les champs forts. Au voisinage du champ nul, l'écart entre les deux mobilités est plus important, car la méthode de Monte-Carlo est moins précise dans ce cas-là. En effet, les électrons ne subissent plus l'effet du champ électrique et se déplacent uniquement sous l'action des collisions aléatoires.

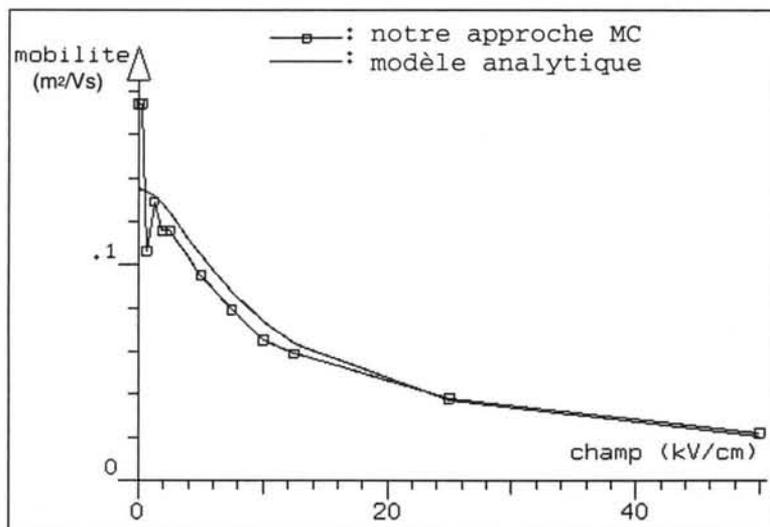


Figure III.13 : Mobilité électronique en fonction du champ électrique.

III.4.b Diode n^+nn^+

Comme deuxième application, nous considérons une diode n^+nn^+ à silicium illustrée dans la figure III.14. La diode consiste en deux régions n^+ fortement dopées, séparées par une région n faiblement dopée. Chacune des deux régions n^+ est de longueur $0.2\mu m$, et dopée à $N_D^+ = 10^{23} m^{-3}$. La région n est de longueur $0.4\mu m$, et dopée à $N_D = 10^{21} m^{-3}$. Nous présentons également sur la figure III.14 une vue globale du maillage hexaédrique de la structure 3D.

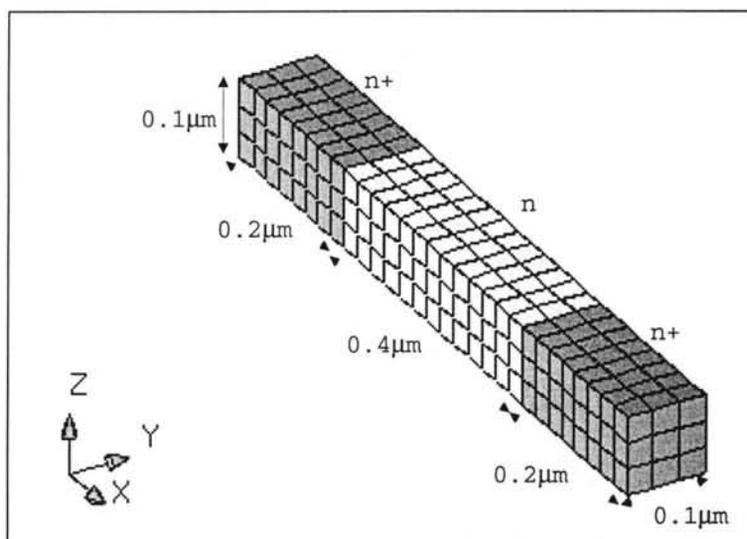


Figure III.14 : Structure 3D de la diode n^+nn^+ simulée.

Les deux figures suivantes représentent des reliefs calculés sur un plan de coupe horizontale XOY . Notez que les deux axes X , Y sur les deux reliefs sont normalisés par rapport à leurs longueurs respectives L et H . Le premier relief sur la figure III.15 illustre les variations spatiales du potentiel électrostatique entre les deux électrodes pour une tension appliquée de $1V$, et le deuxième relief sur la figure III.16 illustre les variations spatiales du module du champ électrique entre les deux électrodes pour la même tension appliquée. Nous remarquons que du côté droit où le potentiel $1 volt$ est appliqué, le champ électrique est nettement plus fort (environ $40 kV/cm$), donc la force de dérive est plus importante. Par conséquent, le phénomène de diffusion d'électrons sera plus prononcé au niveau de cette jonction, comme on le verra dans la figure III.17 d'après.

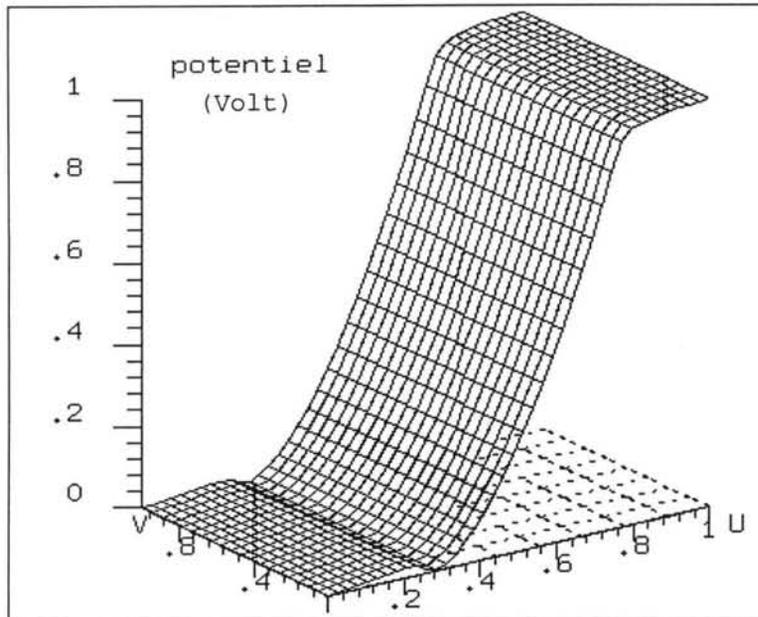


Figure III.15 : Potentiel électrostatique sur un plan de coupe XOY, pour $V_{app}=1V$.

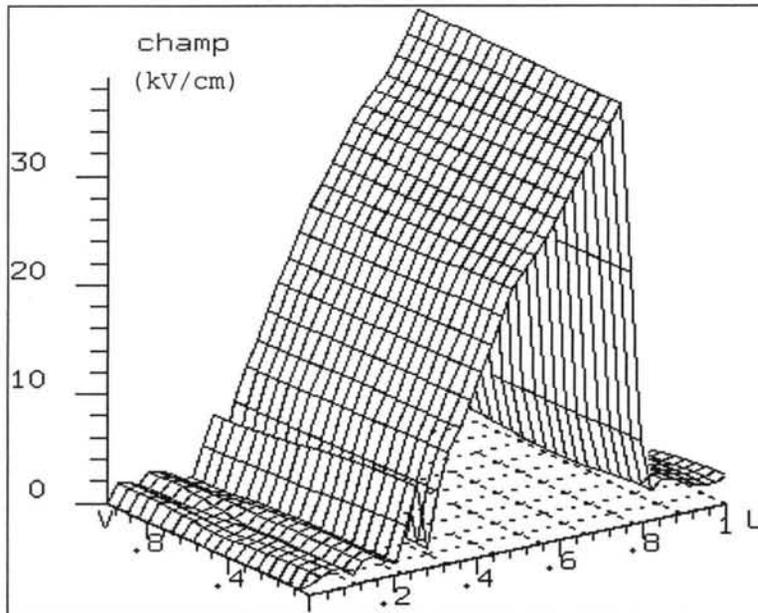


Figure III.16 : Module du champ électrique sur un plan de coupe XOY, pour $V_{app}=1V$.

La figure III.17, qui suit, illustre les courbes de variations spatiales de la charge (en C/m^3) totale et électronique ainsi que le dopage pour la même valeur de la tension appliquée (1 volt) en fonction de la distance entre les deux électrodes. Notez que toutes les valeurs sont normalisées par rapport à la charge maximale ($16021 C/m^3$) correspondant à la valeur du dopage le plus fort $N_D^+ = 10^{+23} m^{-3}$. Pour interpréter correctement ces courbes, il faut se rappeler que la charge est calculée avec des éléments de volume d'ordre 0, ce qui explique son caractère discontinu. Face à ces courbes brutes, il faut effectuer normalement une opération de lissage des résultats. Dans ces circonstances, on peut tout à fait rapprocher ces courbes de celles qui sont obtenues par le modèle de dérive-diffusion en section II.8.a.

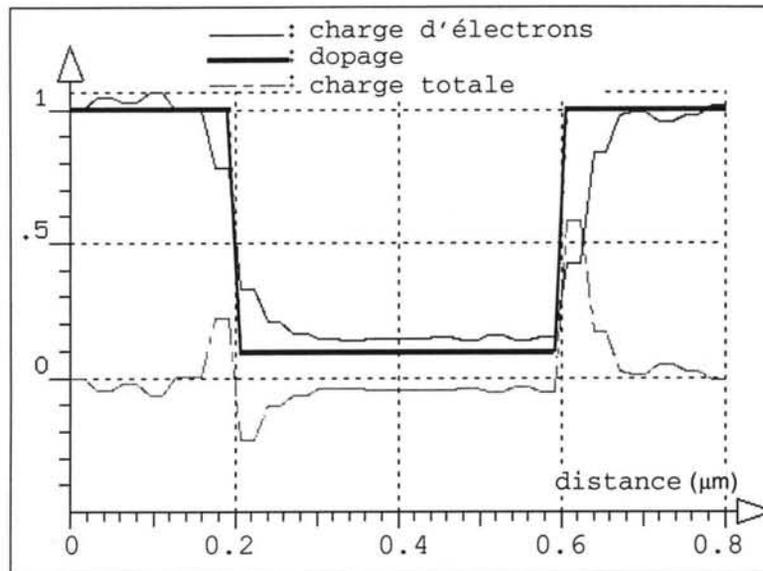


Figure III.17 : Variations des densités de charge normalisée le long de l'axe x , pour $V_{app}=1V$.

Maintenant, pour trois valeurs de la tension appliquée : 0.4 , 0.6 , et $1V$, je vais présenter l'évolution du potentiel et du champ électrique en fonction de la distance x le long de l'axe entre les deux électrodes. Pour ces trois polarités, la figure III.18 représente les courbes de variations du potentiel électrostatique entre les deux électrodes en fonction de la distance x entre électrodes.

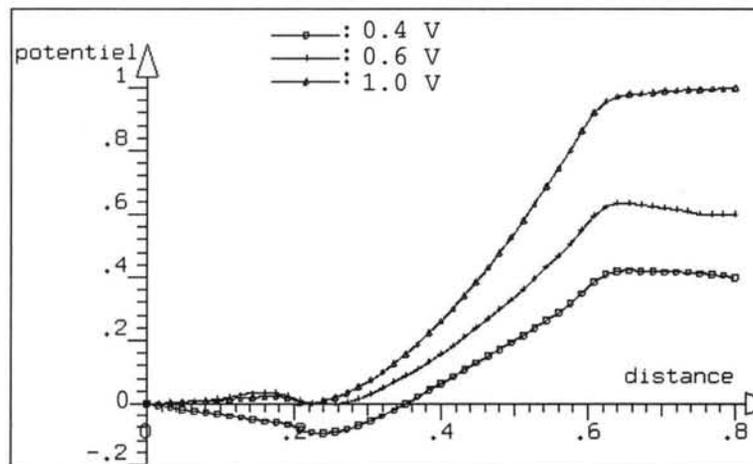


Figure III.18 : Variations du potentiel électrostatique le long de l'axe x , pour 3 valeurs de la tension appliquée.

La figure III.19, qui suit, représente les variations spatiales de la composante X du champ électrique (en kV/cm) en fonction de la distance x pour les trois valeurs précédentes de la tension appliquée. On remarque la forte force de dérive du côté de la jonction droite (là où on applique la tension non nulle). On constate aussi le caractère bruité de certains résultats obtenus. Cela souligne la difficulté réelle d'extraire le résultat du bruit dans ce type d'approche, en particulier pour les faibles champs. Les paramètres pour affiner la solution résident essentiellement dans le pas de temps, le nombre de pas et la finesse du maillage.

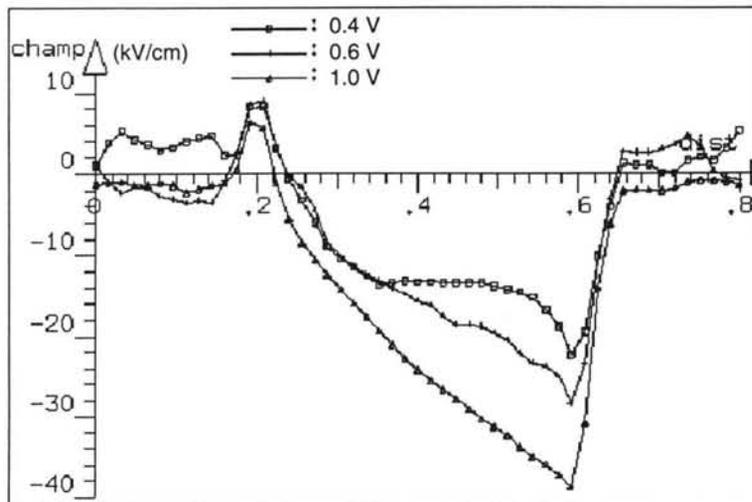


Figure III.19 : Variations du champ électrique le long de l'axe x, pour 3 valeurs de la tension appliquée.

III.4.c Composant MOS

La troisième structure, que nous avons traitée en trois dimensions, est un transistor MOS à canal n. La configuration et les dimensions du dispositif sont décrites sur la figure III.20. Ses principales caractéristiques sont : la largeur de la grille est de $0.2\mu\text{m}$. Les contacts métalliques de source et de drain s'élèvent sur une hauteur de $0.03\mu\text{m}$. Les caissons n^+ sont d'une largeur de $0.1\mu\text{m}$, et fortement dopés à $N_D^+ = 4.10^{+17} \text{ cm}^{-3}$. Le substrat p, de longueur $0.4\mu\text{m}$ et de hauteur $0.1\mu\text{m}$, est dopé avec $N_A^- = 10^{+14} \text{ cm}^{-3}$. L'épaisseur de la couche isolante (oxyde de silicium SiO_2), séparant le contact métallique grille du substrat, est de 5 nm .

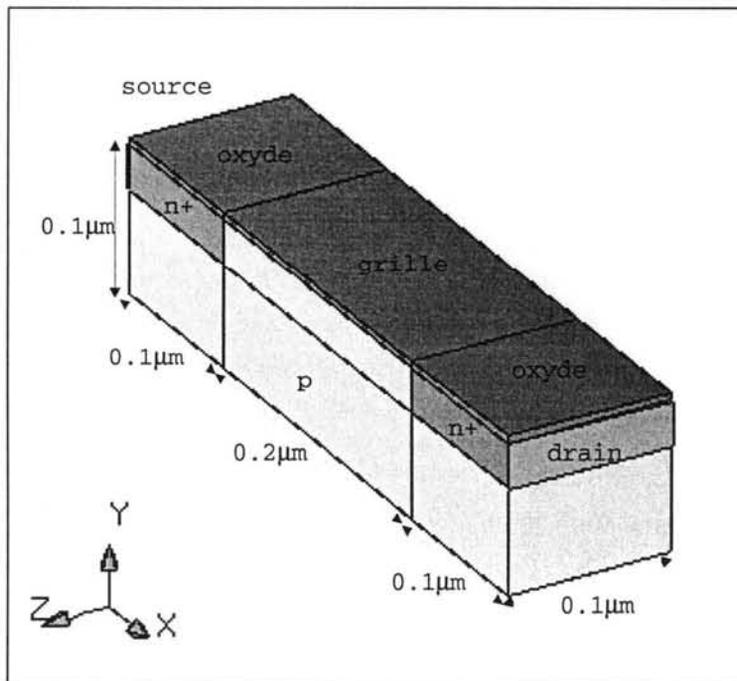


Figure III.20 : Structure 3D du composant MOS simulé.

Le maillage en éléments finis hexaédriques, illustré dans la figure III.21, est uniforme dans le sens horizontal, et non uniforme dans la direction verticale. La zone active du composant à l'interface oxyde/silicium est maillée plus fin comme illustré sur la figure III.22 suivante.

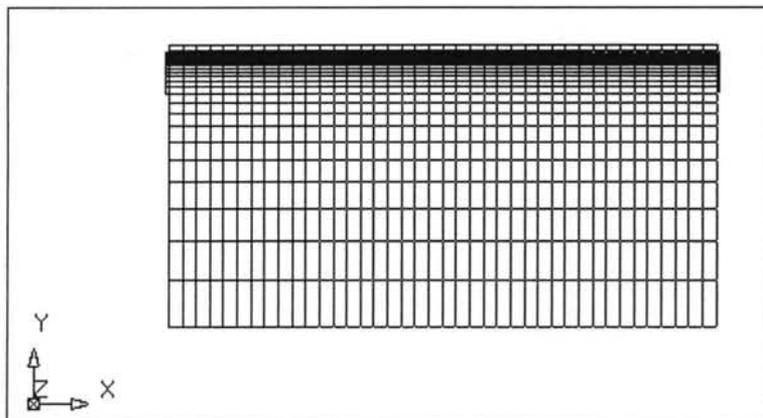


Figure III.21 : Vue 2D du maillage hexaédrique de la structure.

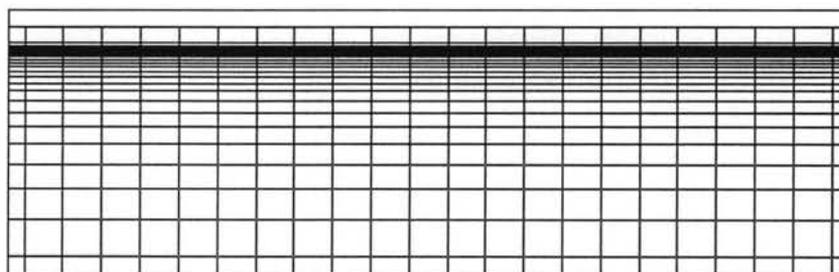


Figure III.22 : Zoom sur le maillage dans le canal.

Les deux illustrations qui suivent sont des reliefs calculés sur une coupe verticale XOY du composant MOS, avec les polarités $V_g=2V$ et $V_d=0.5V$. Le potentiel électrostatique est représenté sur la figure III.23, où nous constatons une forte chute de tension dans la couche d'oxyde à cause d'une forte inversion de charge.

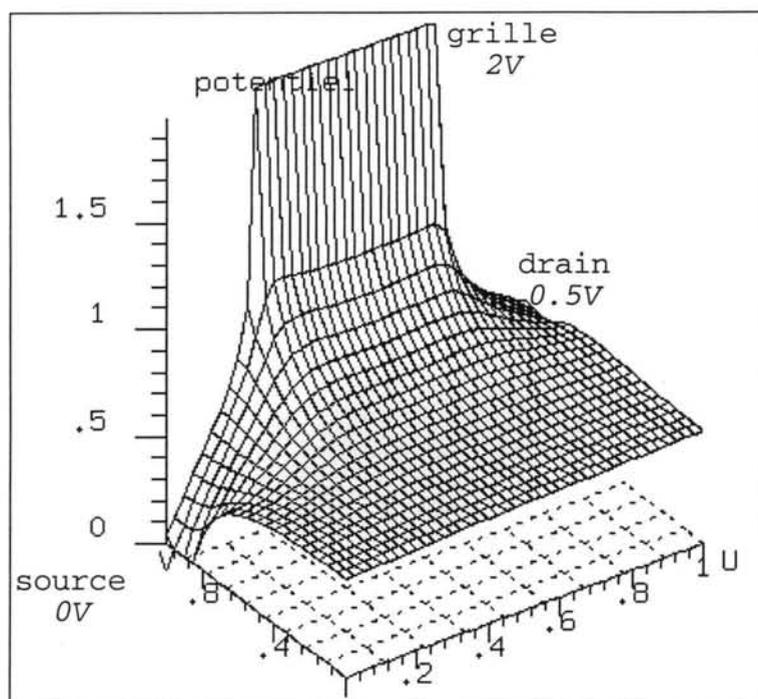


Figure III.23 : Potentiel électrostatique sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0.5V$.

La figure III.24, qui suit, illustre les variations spatiales de la densité électronique dans la partie silicium du MOS. Nous remarquons une accumulation d'électrons (environ 10^{19} cm^{-3}) au niveau du canal, et une déplétion d'électrons au bas du substrat.

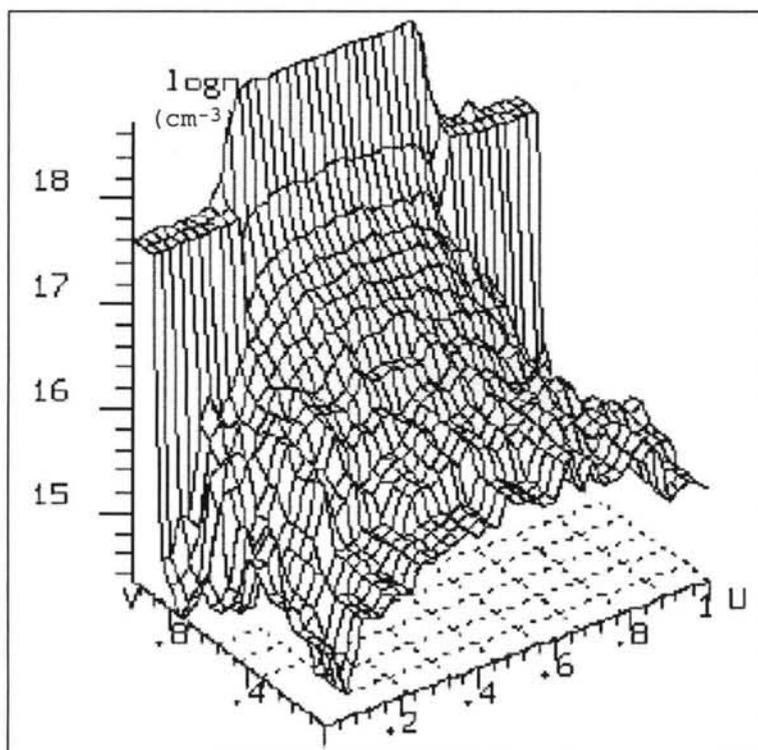


Figure III.24 : Densité électronique sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0.5V$.

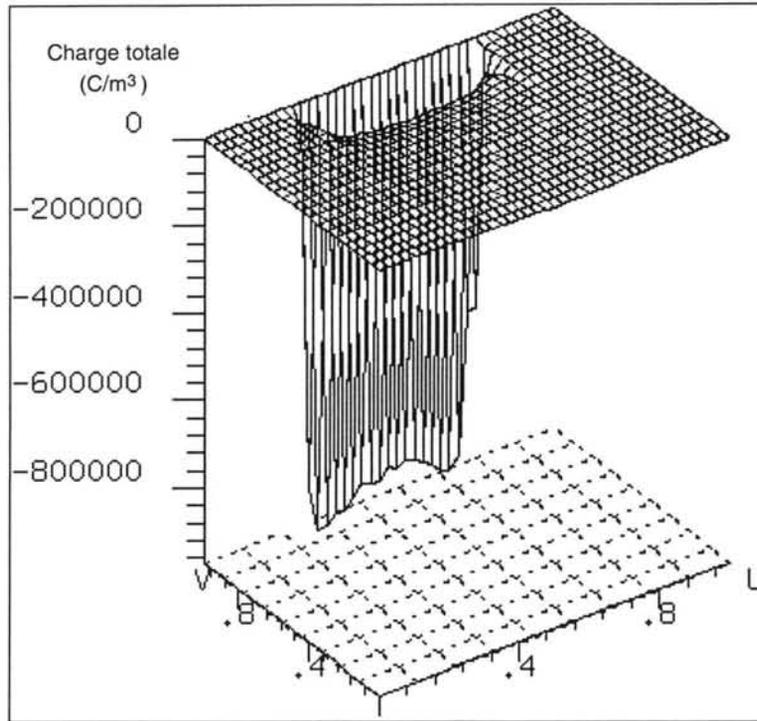


Figure III.25 : Charge totale sur une coupe verticale du MOS, pour les polarités $V_g=2V$, $V_d=0.5V$.

Pour les mêmes polarités précédentes, la figure III.26 représente la courbe de variations de l'énergie électronique moyenne en fonction du temps.

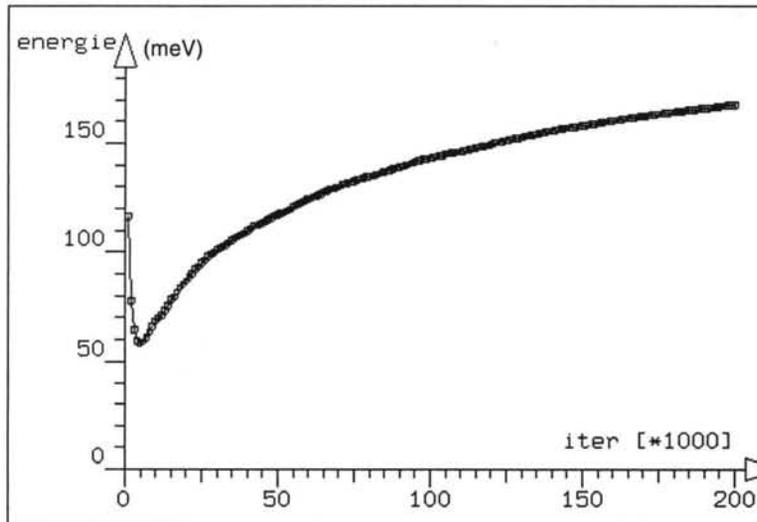


Figure III.26 : Variations de l'énergie électronique moyenne en fonction du temps, pour $V_g=2V$ et $V_d=0.5V$.

La figure III.27 qui suit donne les variations temporelles du courant électronique moyen dans le canal n du composant MOS, toujours pour les mêmes polarités ($V_g=2V$, $V_d=0,5V$).

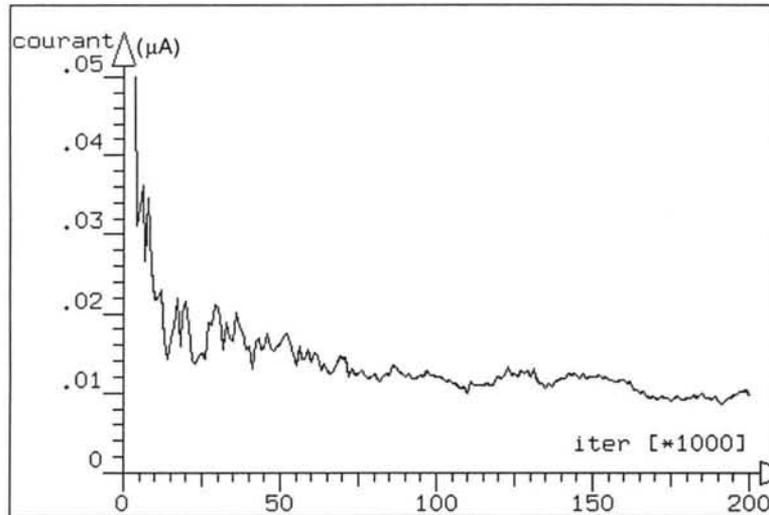


Figure III.27 : Evolution du courant électronique moyen dans le canal en fonction du temps, pour $V_g=2V$ et $V_d=0.5V$.

Au cours des simulation sur le composant MOS nous avons appliqué une méthode de relaxation variable de la charge électronique. La figure III.28 illustre une variation en escalier au cours de la simulation du facteur de relaxation appliquée sur la charge Q_n .

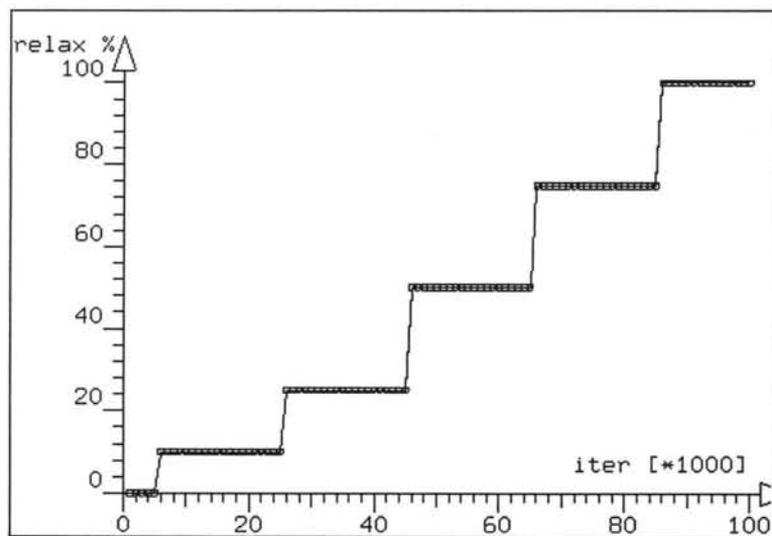


Figure III.28 : Evolution du facteur de relaxation de la charge électronique au cours du temps.

L'évolution en fonction des itérations Monte-Carlo de la précision sur la charge électronique moyenne obtenue avec une telle forme de relaxation est illustrée sur la figure III.29. Nous constatons que l'erreur relative sur Q_n est aux alentours de 20% pour un facteur de relaxation égal à 1. Les pics de précision qu'on remarque sur cette courbe sont dus au passage à une valeur plus grande du facteur de relaxation.

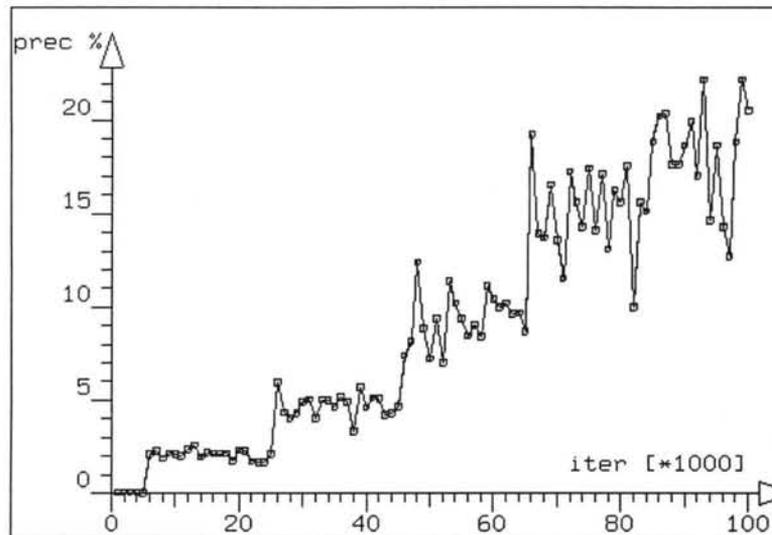


Figure III.29 : Evolution de la précision sur la charge électronique au cours du temps.

III.5 Conclusion

Nous avons développé un outil de simulation tridimensionnel dans un environnement "éléments finis", qui nous a permis de simuler la dynamique électronique dans les composants à semiconducteurs (du silicium de type N, en particulier). Le simulateur utilise l'algorithme de Monte-Carlo qui consiste à calculer les trajectoires de plusieurs particules en simultanément (quelques dizaines à quelques centaines). Leurs positions sont enregistrées sur les éléments volumiques du maillage à la fin de chaque vol libre, dans le but de rassembler l'information sur la densité de charge à l'intérieur du composant. Celle-ci est utilisée pour résoudre en trois dimensions l'équation de Poisson par la méthode des éléments finis, donnant le champ électrique utilisé pour déplacer les particules en vols libres, et ainsi de suite dans une boucle auto-consistante. L'avantage majeur de la méthode de Monte-Carlo est son aptitude à fournir une solution de l'équation de transport de Boltzmann sans faire d'approximations supplémentaires sur la physique de base (la structure de bande et les processus de collision). Ainsi, elle constitue un laboratoire parfait pour l'expérimentation numérique sur les propriétés fondamentales du transport électronique. C'est la raison pour laquelle elle est souvent employée pour déterminer les paramètres physiques (mobilité, coefficient de diffusion) qui interviennent dans les modèles déterministes [Chai92]. Il faut noter que la précision et la simplicité conceptuelle dans la description physique des phénomènes viennent au prix de temps de calculs importants et de perte de précision numérique dans la solution. En effet, comme pour tout phénomène aléatoire, la méthode de Monte-Carlo est entachée d'erreur statistique qui se présente sous forme de bruit stochastique. Une autre propriété caractéristique jouant en défaveur de la méthode de Monte-Carlo, et le fait qu'elle fonctionne moins bien en champ faible qu'en champ fort.

Pour terminer, un ensemble de données doit être manipulé durant les calculs. En particulier, deux blocs de données jouent un rôle fondamental : la description aussi précise que possible des diagrammes de bandes d'énergie dans lesquelles les particules évoluent, d'une part, et une description des différentes probabilités de collisions que ces particules peuvent subir, d'autre part. Le choix du silicium dans notre travail n'est pas limitatif ; en changeant la structure des bandes d'énergie et en introduisant de nouveaux types de collision, nous pouvons traiter d'autres matériaux (le germanium, ou des matériaux III-V : le GaAs par exemple) sans toucher au schéma global de l'algorithme de simulation. Rappelons que le processus élémentaire de simulation, accélération-collision durant un pas de temps, nécessite en général le tirage au sort de trois nombres pseudo-aléatoires. Parmi ces trois nombres, un au

moins est toujours utilisé pour tester la probabilité de collision, et déterminer son type si elle a lieu. En résumé la simulation des particules par la méthode de Monte-Carlo permet d'obtenir une histoire régulièrement échantillonnée avec un pas temporel Δt choisi petit (de l'ordre de 10^{-15} à 10^{-14} secondes). La particule subit successivement des phases de vol libre de durée Δt , au bout desquelles une collision est tirée au sort à l'aide d'un nombre pseudo-aléatoire. Cette méthode convient particulièrement bien pour la conception et l'étude des composants à très petites tailles (submicroniques ou nanométriques) qui ne contiennent qu'un nombre réduit de porteurs libres (quelques centaines en général).

CONCLUSION GENERALE

Cette thèse s'est donnée pour objectif d'élaborer un simulateur tridimensionnel des composants à semiconducteur de tailles submicroniques. Nous avons utilisé deux approches différentes pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semiconducteur. Il s'agit de l'approche déterministe par le modèle de dérive-diffusion, et de l'approche stochastique par le modèle de Monte-Carlo. L'originalité de notre travail de thèse ne consiste pas en apports théoriques sur la modélisation des phénomènes de transport de charge dans les semiconducteurs. Mais notre apport personnel se situe plutôt au niveau de l'implémentation en trois dimensions de ces deux modèles dans un logiciel d'éléments finis (FLUX3D®). Ce logiciel, développé par le Laboratoire d'Electrotechnique de Grenoble (LEG), était destiné uniquement à la simulation des phénomènes électromagnétiques par la résolution tridimensionnelle des équations de Maxwell. L'expérience physique du Laboratoire de Physique des Composants à Semiconducteurs (LPCS) nous a été très précieuse durant l'élaboration de la partie Monte-carlo.

Nous avons présenté notre travail en trois chapitres. Dans le premier chapitre, nous avons exposé quelques aspects physiques concernant la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les semi-conducteurs, en présentant l'équation de transport de Boltzmann. Etant donné la nature intégral-différentielle de l'équation de Boltzmann et la complexité du terme de collision, il est difficile voire impossible dans le cas général, de trouver une forme analytique exacte de la solution. C'est la raison pour laquelle on a eu recours soit à des hypothèses simplificatrices menant à un traitement déterministe par le modèle de dérive-diffusion, soit à une résolution directe par le modèle Monte-Carlo.

Le second chapitre est consacré à la présentation d'un premier simulateur 3D qui emploie l'approche déterministe. J'ai présenté deux modèles déterministes pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann : le modèle hydrodynamique général et le modèle de dérive-diffusion. Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, les équations standard du modèle de dérive-diffusion peuvent être simplifiées et mises sous une forme elliptique en effectuant un changement de variable. Ce type d'équation peut être facilement résolu par la méthode des éléments finis. Dans ce chapitre, des simulations en trois dimensions par le modèle de dérive-diffusion ont été réalisées en utilisant la méthode des éléments finis nodaux. Quelques applications numériques sur une diode n^+nn^+ et un composant MOS sont présentés. Les temps de calcul nous semblent raisonnables, et les résultats obtenus sont très instructifs et encourageants. Les géométries des dispositifs simulés sont simples et par conséquent une

étude bidimensionnelle serait suffisante. Mais celles-ci nous ont servies d'exemples pour tester la fiabilité du simulateur tridimensionnel réalisé. La perspective de ce travail est de réussir à bien traiter des composants de taille réduite avec des géométries plus complexes et plus proches de la réalité physique. Le problème numérique majeur que nous avons rencontré au cours des calculs avec ce premier simulateur, est dû aux variations fortes et brutales du dopage dans les structures analysées. Une amélioration de l'algorithme de résolution consisterait à tenir compte des non-linéarités des couplages qui existent entre les différentes équations du modèle, en utilisant une résolution globale et couplée des équations par l'algorithme de Newton. Notre modèle de dérive-diffusion n'inclut pas de termes de génération et recombinaison de porteurs, mais ils peuvent facilement être mis en œuvre plus tard.

Au troisième chapitre, nous avons présenté le second simulateur 3D que nous avons élaboré dans un environnement "éléments finis", et qui nous a permis de simuler la dynamique électronique dans les petits composants à semiconducteur. Ce simulateur utilise la technique de Monte-Carlo pour décrire la dynamique électronique dans le silicium de type N. Cette technique est combinée, dans une boucle auto-consistante, avec la méthode des éléments finis qui résout en trois dimensions l'équation de Poisson. Un ensemble important de données doit être manipulé durant les calculs Monte-Carlo. En particulier, deux blocs de données jouent un rôle fondamental : la description aussi précise que possible des diagrammes de bandes d'énergie dans lesquelles les particules évoluent, et des différentes probabilités de collisions que ces particules peuvent subir. Le choix du silicium dans notre travail n'est pas limitatif ; en changeant la structure des bandes d'énergie et en introduisant de nouveaux processus de collision, nous pouvons traiter d'autres matériaux semiconducteurs (Ge ou GaAs par exemple) sans modifier le schéma global de l'algorithme de simulation. Les calculs par la méthode de Monte-Carlo sont intenses, mais ils fournissent des informations riches et détaillées sur le comportement interne microscopique des composants à semiconducteur. Cette approche de simulation convient particulièrement bien pour l'étude des composants modernes de tailles nanométriques, qui ne contiennent qu'un nombre réduit de porteurs libres (quelques dizaines ou centaines en général).

L'une des parties les plus laborieuses de notre thèse a été la combinaison en trois dimensions de la techniques de Monte-Carlo avec la méthode des éléments finis. En effet, les particules traitées par la méthode de Monte-Carlo de façon individuelle, doivent être traquées pas par pas dans le temps à l'intérieur du découpage éléments finis, *a priori* non structuré, du

composant simulé. Par conséquent, nous devons déterminer à chaque instant l'élément fini où se trouve l'électron, ce qui est loin d'être simple. Pour cette raison, les temps de calculs sont beaucoup plus importants que ceux qui sont effectués à l'aide du premier simulateur par le modèle de dérive diffusion. Une amélioration à faire sur le simulateur Monte-carlo, à court terme, serait donc de se pencher sur ce problème du temps de calcul pour le rendre plus court.

La popularité de la méthode de Monte-Carlo a grandi avec le temps grâce à la disponibilité croissante des moyens informatiques plus rapides et moins chers. La popularité de cette méthode est affirmée par le fait qu'en 1995, une vingtaine de groupes internationaux travaillent activement sur la simulation Monte-Carlo du transport électronique dans le Silicium. L'avantage majeur de la méthode de Monte-Carlo est sa capacité à résoudre directement en sept dimensions l'équation de transport de Boltzmann sans faire d'approximations supplémentaires sur la physique de base. Par ce fait, elle peut être considérée comme un outil complet pour l'expérimentation numérique sur les propriétés fondamentales du transport de charges dans les semiconducteurs. C'est la raison pour laquelle elle est souvent employée pour déterminer les paramètres physiques qui interviennent dans les modèles déterministes. Un autre atout de la méthode de Monte-carlo est le fait qu'elle permet non seulement de déterminer les moments d'ordre un des grandeurs physiques (les valeurs moyennes), mais aussi d'accéder aux moments d'ordre supérieurs (fluctuations et phénomènes de bruit) à des échelles de temps aussi fines que l'on veut. Néanmoins, il faut noter que la richesse et la simplicité conceptuelle dans la description physique des phénomènes sont obtenues au détriment de l'importance de temps de calcul exigé et du manque de précision numérique sur la solution. En effet, comme pour tout phénomène aléatoire, la méthode de Monte-Carlo est entachée d'erreur statistique qui se présente sous forme de bruit stochastique.

En perspective, d'un point de vue physique, il sera nécessaire d'introduire les effets liés à la dégénérescence des matériaux semiconducteurs, par l'utilisation de la statistique de Fermi-Dirac au lieu de celle de Maxwell-Boltzmann dans le simulateur par le modèle de dérive diffusion. En ce qui concerne le simulateur par la technique de Monte-Carlo, l'utilisation de diagramme d'énergie plus précis (full-band structure), pourra accroître l'exactitude de nos calculs pour les régimes en champs forts.

Comme nous l'avons déjà écrit dans l'introduction générale, une perspective de notre travail serait de faire une hybridation des deux approches de dérive-diffusion et de Monte-Carlo par le couplage des deux simulateurs réalisés pour pouvoir traiter correctement et en un

temps réduit la nouvelle génération de composant électroniques. Dans cette approche hybride, on utilisera la méthode Monte-Carlo, à cause de sa précision physique, dans des endroits où apparaissent des phénomènes quantiques dus à la miniaturisation, tel que le canal court d'un MOSFET. Le modèle de dérive diffusion, plus rapide et plus simplifié donc moins précis du point de vue physique, sera employé dans les autres parties du composant. En effet, la technique de Monte-Carlo, bien que précise physiquement, a quelques limitations quand elle est appliquée à la simulation globale d'un composant. Elle peut devenir inefficace, en particulier dans les régions où le champ électrique est faible, alors que des modèles de composants basés sur la dérive-diffusion fonctionnent bien. Des avantages significatifs peuvent donc être prévisibles en combinant les deux méthodes, de telle sorte qu'on retient l'efficacité de calcul de la méthode de dérive-diffusion aussi bien que la précision physique de la technique de Monte-Carlo. Dans cette approche, Monte-Carlo est appliquée seulement dans les régions où elle est nécessaire, et les régions restantes sont décrites par les équations de dérive-diffusion avec des coefficients de transport locaux. A partir des données Monte-Carlo, une mobilité dépendant de la position est extraite des régions simulées puis utilisée dans l'équation de dérive-diffusion qui est appliquée globalement pour modéliser le composant en entier.

En dernier lieu, la confrontation avec des résultats expérimentaux, nous permettra d'ajuster nos modèles de simulation et de valider les simulateurs élaborés.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Baccarani75] G. Baccarani and P. Ostoja : "*Electron mobility empirically related to the phosphorus concentration in silicon*", Solid-State Electron. vol. 18, pp. 579-580, 1975.
- [Bank83] R. E. Bank, D. J. Rose, and W. Fichtner : "*Numerical methods for semiconductor device simulation*". IEEE. Trans. Electron Devices. vol. ED-30, N°. 9, September 1983.
- [Barnes77] J. J. Barnes, and R. J. Lomax : "*Finite-Element methods in semiconductor device simulation*", IEEE. Trans. Electron Devices. vol. ED-24, N°. 8, August 1977.
- [Bossavit96] A. Bossavit : "*Edge elements for magnetostatics*", International Journal of Numerical Modeling : Electronic Networks, Devices and Fields.. vol. 9, pp. 19-34, 1996.
- [Brooks55] E. M. Brooks, Advances in Electronics and Electron Physics, vol. 7, pp. 85, 1955.
- [Canali71] C. Canali, G. Ottaviani, and A. Alberigi Quaranta, Journal of the Physics and Chemistry of Solids, vol. 32, pp. 1707, 1971.
- [Canali75] C. Canali, and C. et al. Jacoboni : "*Electron drift velocity in silicon*", Physical review B, vol. 12, N°. 4, pp. 2265-2284, 1975.
- [Caughey67] D. M. Caughey, and R. E. Thomas : "*Carrier mobilities in silicon empirically related to the doping and field*", Proc. IEEE. vol. 55, pp. 2192-2193, 1967.
- [Chai92] K-M. Chai, P. A. Mawby and A. McCowen : "*Hydrodynamic simulation of electron heating in conventional and lightly-doped-drain MOSFETS with application to substrate current calculation*", International Journal of Numerical Modeling : Electronic Networks, Devices and Fields.. vol. 5, pp. 53-66, 1992.
- [Conwell50] E. M. Conwell, and V. F. Weisskopf, Physical review, vol. 77, pp. 388, 1950.
- [Conwell67] E. M. Conwell : "*High field transport in semiconductors*", dans Solid-State Physics, Supplément 9, Academic Press, 1967.

- [Crawford67] R. H. Crawford : "*Mosfet In Circuit Design*", Mc-Graw-Hill: New York, pp. 51-69, 1967
- [Engl83] W. L. Engl, H. K. Dirks, and B. Meinerzhagen : "*Device modeling*", Proc. IEEE. vol. 71, N°. 1, January 1983.
- [Fawcett70] W. Fawcett, A. D. Boardmann, and S. Swain : "*Monte-Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide*", Journal of the Physics and Chemistry of Solids, vol.31, pp. 1963-1990, 1970.
- [Fichtner83] W. Fichtner, D. J. Rose, and R. E. Bank : "*Semiconductor device simulation*", IEEE. Trans. Electron Devices. vol. ED-30, N°. 9, September 1983.
- [Fortin96] M. Fortin, G. Yang, and Y. Perréal : "*Simulation of the hydrodynamic model of semiconductor devices by a finite element method*", Compel. vol. 15, N°. 3, 1996.
- [Gummel64] H. K. Gummel, IEEE. Trans. Electron Devices. vol. ED-11, p. 455, 1964.
- [Hadji98] D. Hadji, Y. Maréchal, and J. Zimmermann : "*Three Dimensional Semiconductor Device Simulation by Finite Élement Method Coupled to Monte Carlo method*", Conf. COMPUMAG, Rio de Janeiro, Brazil, November 3-6, 1997. Paru dans IEEE. Trans. Magnetics, vol. 34. N°. 5, pp. 2525-2528, September 1998.
- [Hadji99] D. Hadji, Y. Maréchal, and J. Zimmermann : "*Finite Élement and Monte Carlo Simulation of Submicrometer Silicon n-MOSFET's*", Conf. IEEE CEFC'98, Tucson, Arizona, June 1-5, 1998. à paraître dans The special Issue of IEEE. Trans. Magn. May 1999.
- [Hilbert12] D. Hilbert, Math. Ann. 72, 562, 1912.
- [Jacoboni83] C. Jacoboni, and L. Regianni : "*The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*", Review of Modern Physics , vol. 55, N°. 3, pp. 646-698, july 1983.
- [Jacoboni89] C. Jacoboni, and P. Lugli : "*The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*", Springer-Verlag, Wien-New York, 1989.

- [Kosina94] H. Josina, and S. Selbeherr : "*A Hybrid Device simulator that Combines Monte Carlo and Drift-Diffusion Analysis*", IEEE. Trans. Computer-Aided Design, vol. 13, pp. 201-210, February 1994.
- [Kurosawa66] T. Kurosawa, Journal of the Physical Society of Japan, Supplément 21, pp. 424, 1966.
- [Lepaul96] S. Lepaul : "*Contribution à la modélisation numérique des composants électroniques aux dimensions nanométriques*", Thèse de Doctorat, Université Paris 6, Novembre 1996.
- [Maréchal91] Y. Maréchal : "*Modélisation des phénomènes magnétostatiques avec terme de transport. Application aux ralentisseurs électromagnétiques*", Thèse de Doctorat, INPG, Février 1991.
- [Markowich89] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer and C. Schmeiser : "*Semiconductor equations*", Springer-Verlag, Wien-New York, 1989.
- [Negoi98] A. C. Negoï : "*Composant virtuel et ses processeurs de simulation*", Thèse de Doctorat en Microélectronique, ENSERG-INPG, Octobre 1998.
- [Poupaud88] F. Poupaud : "*Etude mathématique et simulations numériques de quelques équations de Boltzmann*", Thèse de Doctorat, Université Paris 6, 1988.
- [Price77] P. J. Price, Solid-State Electronics, Academic Press, vol. 21, pp. 9, 1977.
- [Price79] P. J. Price: "*Semiconductors and semimetals*", Academic Press, vol. 14, pp. 249-308, 1979.
- [Rafferty85] C. S. Rafferty, M. R. Pinto, and R. W. Dutton : "*Iterative methods in semiconductor device*", IEEE. Trans. Electron Devices. vol. ED-32, N°. 10, October 1985.
- [Roosbroeck50] W. V. van Roosbroeck : "*Theory of flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors*", Bell Syst. Techn. J. 29, pp. 560-607, 1950.
- [Shockley50] J. Bardeen, and W. Shockley, Physical review, vol. 23, pp. 72-80, 1950.
- [Silvaco95] SILVACO International : "*Device Simulation Software*", Atlas User's Manual. Version 4.0, June 1995.
- [Sabonnadière86] J. C. Sabonnadière, J. L. Coulomb : "*Eléments finis et CAO* ", Traité des nouvelles technologies, Hermes Ed., 1986.

- [Touzot84] G. Touzot, G. Dhatt : "*Une présentation de la méthode des éléments finis*", Deuxième édition, Collection Université de Compiègne, 1984.
- [Zimmermann80] J. Zimmermann : "*Etude des phénomènes de transport électronique dans le silicium de type N en régimes stationnaires et non stationnaires par la méthode de Monte-Carlo, application à la simulation des composants submicroniques*", Thèse de Doctorat ès Sciences Physiques, Université des Sciences et Techniques de Lille, Juin 1980.
- [Zimmermann94] J. Zimmermann : "*Notice sur un projet de développement d'un circuit intégré réalisant la simulation de composants de la micro-électronique par la méthode de Monte-Carlo en vue d'applications au calcul ultra-rapide à parallélisme élevé*", Laboratoire de Physique des Composants à Semiconducteurs (LPCS-ENSERG), 1994.

**THREE-DIMENSIONAL MODELLING AND SIMULATION OF
SUBMICRONIC SEMICONDUCTOR DEVICES**

ABSTRACT

The growth of the semiconductor integrated circuit industry over the last years has been fueled by continued miniaturization of transistors to ever-smaller dimensions. With the reduction of devices to 0.1 micron and less, new physical effects come into play which the standards two-dimensional (2D) simulators do not take in account. In order to describe the physical behavior of modern devices in a reliable way, one must improve these simulation tools and adapt them to take into account these phenomena. As a matter of fact, the typical distance in the third distance is of the same order of magnitude as the one along the gate in a MOSFET, for instance, and lateral effect ought to be considered carefully. The general context of this thesis is inscribed here. The aim is to develop a three-dimensional (3D) simulator, suitable for simulating carrier transport in such small devices. During this work, we have developed two separate simulators for studying submicronic devices. Both simulators have been elaborated in a finite element environment, by coupling the Boltzmann transport equation with the Poisson equation in a 3D self-consistent way. All of this work was carried out on FLUX3D® (software developed at LEG for the numerical simulation of 3D electromagnetic devices by finite element method).

- The first simulator is based on a determinist approach using a drift-diffusion model.
- The second simulator is based on a stochastic approach consisting in particular dynamical simulation by the Monte-Carlo method.

These tools represent an important contribution to device modeling, and they could even be used out of small devices context. Eventually, they can be coupled into a hybrid simulator in which Monte-Carlo and drift-diffusion models are combined. The innovating aspect of our project is the fact that many previous works using the Monte-Carlo technique are carried out in a 2D by a finite-difference method. Until now, a 3D study using a finite element method has never been employed, as far as we know, in such a simulation approach.

TITRE

MODELISATION ET SIMULATION TRIDIMENSIONNELLE DES COMPOSANTS A SEMICONDUCTEUR DE TAILLE SUBMICRONIQUE

RESUME

Le progrès de l'industrie des circuits intégrés, durant ces dernières années, a été poussé par une miniaturisation continue des transistors. Avec la réduction des composants à des dimensions de 0.1 micron et moins, de nouveaux effets physiques entrent en jeu que les simulateurs standard en deux dimensions (2D) ne considèrent pas. En fait la troisième dimension entre en jeu car les dimensions transversales et longitudinales des composants sont du même ordre de grandeur. Pour décrire le fonctionnement de tels composants avec plus de fidélité, il faut donc affiner les outils de simulation et les adapter afin de prendre en compte ces phénomènes. Le cadre général de ce travail s'inscrit dans cette optique. Au cours de cette thèse, on a élaboré deux simulateurs distincts pour étudier les composants submicroniques. Ces deux outils ont été développés dans un environnement à éléments finis, en combinant l'équation de transport de Boltzmann avec l'équation de Poisson dans une résolution tridimensionnelle (3D) et autonome. Nos travaux ont été réalisés sur FLUX3D® (logiciel développé au LEG pour la simulation 3D des dispositifs électromagnétiques par éléments finis).

- Le 1^{er} simulateur est basé sur une approche déterministe par le modèle de dérive diffusion.
- Le 2^e simulateur est basé sur une approche stochastique consistant en la simulation dynamique des particules par la méthode de Monte-Carlo.

Ces deux outils constituent une contribution importante à la modélisation des composants, et peuvent être utiles même hors du contexte des petits composants. Éventuellement, ils peuvent être unis dans un simulateur hybride combinant les modèles de Monte-Carlo et de dérive diffusion. L'aspect novateur de ce projet réside dans le fait que les nombreux travaux antérieurs qui utilisent la technique de Monte-Carlo se basent sur la méthode des différences finies le plus souvent en 2D seulement. Jusqu'à présent, une approche 3D par éléments finis de ces questions n'a jamais été employée, à notre connaissance.

DISCIPLINE

Modélisation en génie électrique

MOTS-CLES

Dérive diffusion, Éléments finis, Equation de Poisson, Equation de transport de Boltzmann, Monte-Carlo, Petits composants, Semi-Conducteur, Simulation 3D